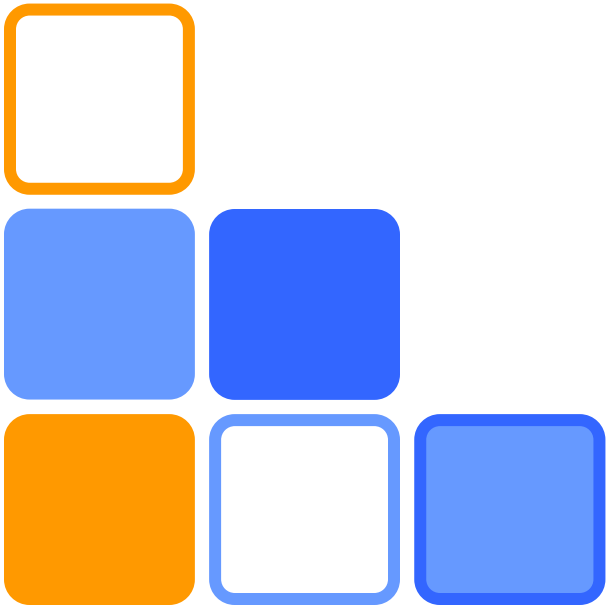


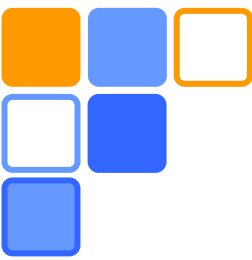
薬学情報処理演習 第2回

常微分方程式の簡単な 解き方

奥菌 透

コロイド・高分子物性学





微分方程式とは？

- 例えば、化学反応 $A \xrightarrow{k} P$ が速度定数 k で進行するとき、 A の濃度 $[A]$ は、

$$\frac{d[A]}{dt} = -k[A]$$

を満たすように変化する(t は時間)。この式は微分方程式の1つの例である。

- このように微分を含んだ関係式がいつでも成り立つとき、この関係式を微分方程式という。
 - 特に、微分する変数(上の例では t)が1個のものを常微分方程式という。
 - 式に現れる微分の階数によって、1階の微分方程式、2階の微分方程式、・・・などという。



「微分方程式を解く」とは？

□ 例えば、微分方程式

$$\frac{dx}{dt} = -kx \quad (k \text{ は定数})$$

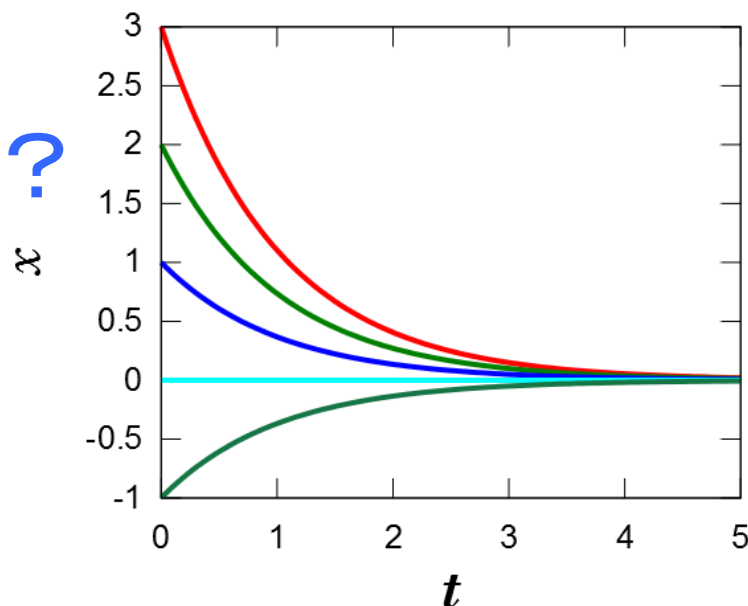
を解くことは、この式を満たす t の関数 $x(t)$ を見つけること ($x(t)$ のグラフを描くこととほぼ同じ) である。

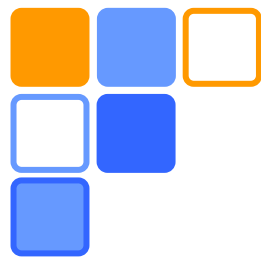
□ $x = Ce^{-kt}$ は上の式を満たす。ただし、 C は任意の定数。→ 解はたくさんある。

□ $t = 0$ での x の値を決めると解は1つに決まる。

– $t = 0$ で $x = x_0$ とすると $C = x_0$ なので、解は $x = x_0 e^{-kt}$ となる。

このように初期の値を決めて解く問題を初期値問題という。





微分方程式を数値的に解くには

□ 微分方程式: $\frac{dx}{dt} = f(x)$ ($f(x)$ は与えられた関数)

□ 時刻をとびとびの値にとる:

$$t_n = n\Delta t \quad (n = 0, 1, \dots, N)$$

□ とびとびの時刻における解の近似値: x_n

□ 微分を“差分”で置き換える:

$$\frac{dx}{dt} \rightarrow \frac{x_{n+1} - x_n}{\Delta t}$$

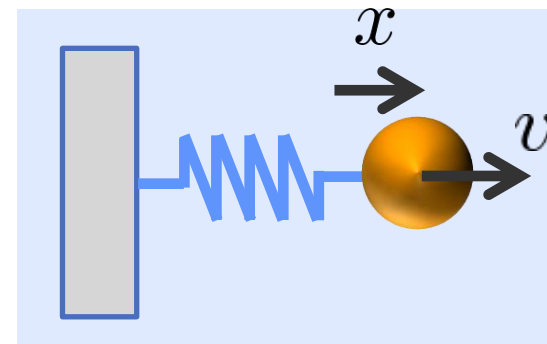
□ 初期値 x_0 を与えて、 x_n の値を次々に計算する

$$x_{n+1} = x_n + f(x_n)\Delta t \quad (\text{オイラー差分法})$$

減衰振動の微分方程式

- 変位 x に比例した力と速度 $v = \frac{dx}{dt}$ に比例した摩擦力(抵抗)を受けながら運動する物体の運動は以下のような微分方程式で記述される。

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -2K \frac{dx}{dt} - x \quad (K \text{ は正の定数})$$



- この微分方程式の解析解は

- $K < 1$ のとき

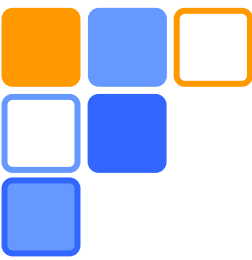
$$x = e^{-Kt} (C_1 \cos \omega t + C_2 \sin \omega t) \quad \text{ただし } \omega = \sqrt{1 - K^2}$$

- $K > 1$ のとき

$$x = e^{-Kt} (C_1 e^{\sqrt{K^2 - 1} t} + C_2 e^{-\sqrt{K^2 - 1} t})$$

- $K = 1$ のとき $x = e^{-t} (C_1 + C_2 t)$

- 定数 C_1, C_2 は初期の x と v の値から決められる。



数値解法

- 2階の微分方程式を、変位 x と速度 v に関する1階の微分方程式に書きかえる。

$$\frac{dx}{dt} = v$$

$$\frac{dv}{dt} = -2Kv - x$$

- 差分化してオイラー法で解く。

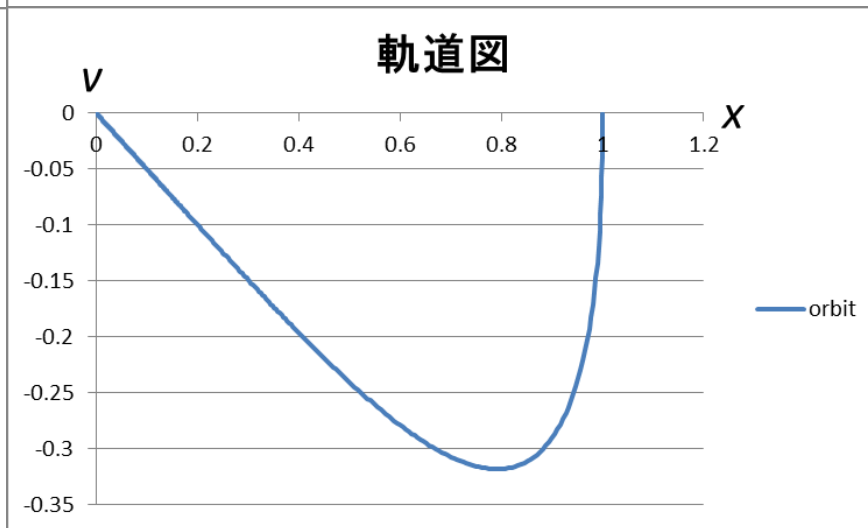
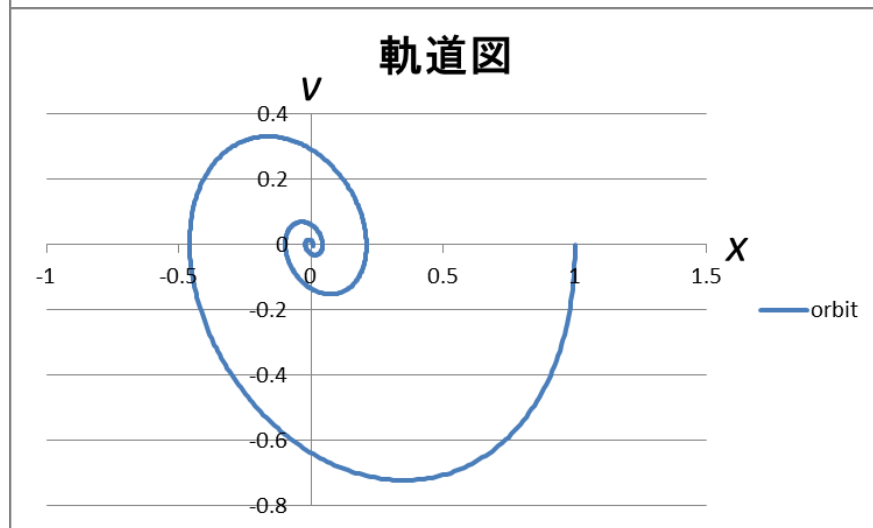
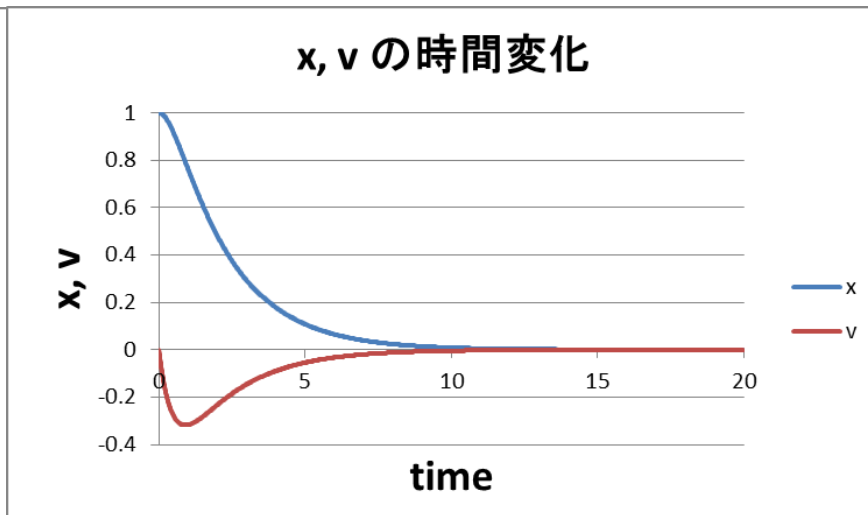
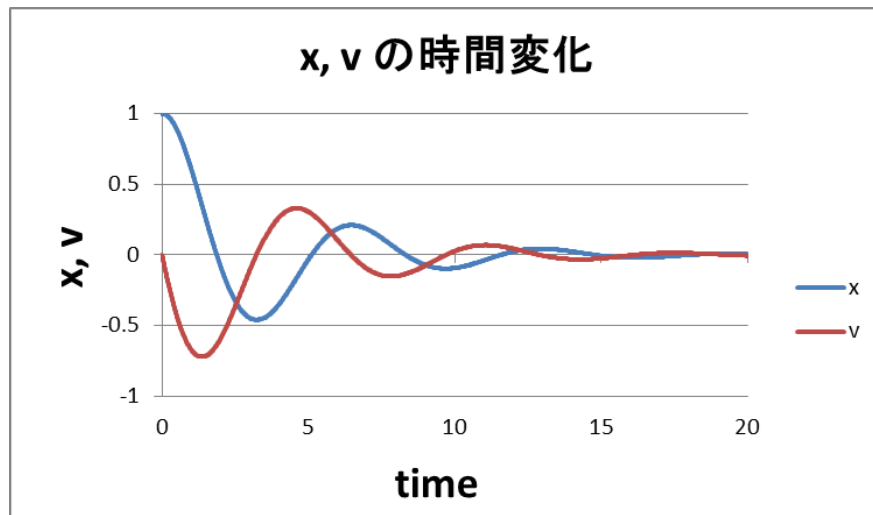
$$x_{n+1} = x_n + v_n \Delta t$$

$$v_{n+1} = v_n - (2Kv_n + x_n) \Delta t$$

($K = 0$ の場合にはオイラー法では解けないので別の数値解法を用いる必要がある)

計算結果をグラフにする

減衰振動 ($K = 0.25, \Delta t = 0.02$) 過減衰 ($K = 1.25, \Delta t = 0.02$)



平衡解の安定性

□ 微分方程式 $\frac{dx}{dt} = f(x)$ の平衡解:

– $f(x) = 0$ を満たす $x = x^*$ (平衡点)

□ 平衡点の安定性

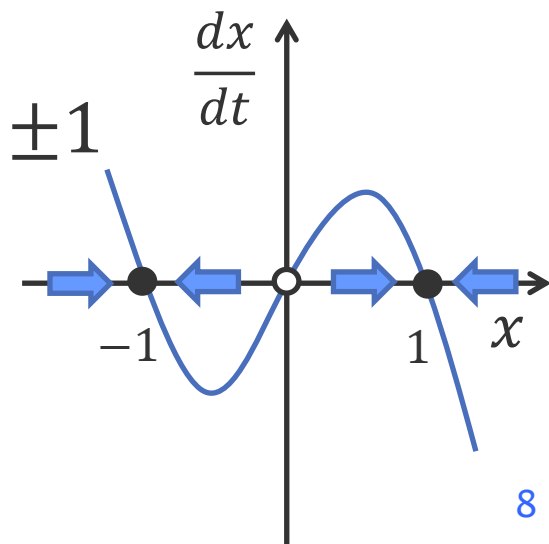
– $t \rightarrow \infty$ で $x \rightarrow x^*$: (漸近的に) 安定な平衡点

– $t = 0$ で $x = x^* + \epsilon$, $t > 0$ で x^* から遠ざかる: 不安定な平衡点

□ 例: $\frac{dx}{dt} = x - x^3$ の平衡解: $x = 0, \pm 1$

– $x = 0$: 不安定な平衡点

– $x = \pm 1$: 安定な平衡点





振動する解をもつ微分方程式

□ van der Pol の方程式

$$\frac{d^2x}{dt^2} - \mu(1 - x^2)\frac{dx}{dt} + x = 0 \quad \mu \text{ はパラメータ(正定数)}$$

- 減衰振動の方程式 $\frac{d^2x}{dt^2} + 2K\frac{dx}{dt} + x = 0$ と比べると、
第二項は $x^2 < 1$ のとき加速、 $x^2 > 1$ のとき減速項である。

□ 2元連立微分方程式として書くと

オイラー差分式

$$\frac{dx}{dt} = y$$

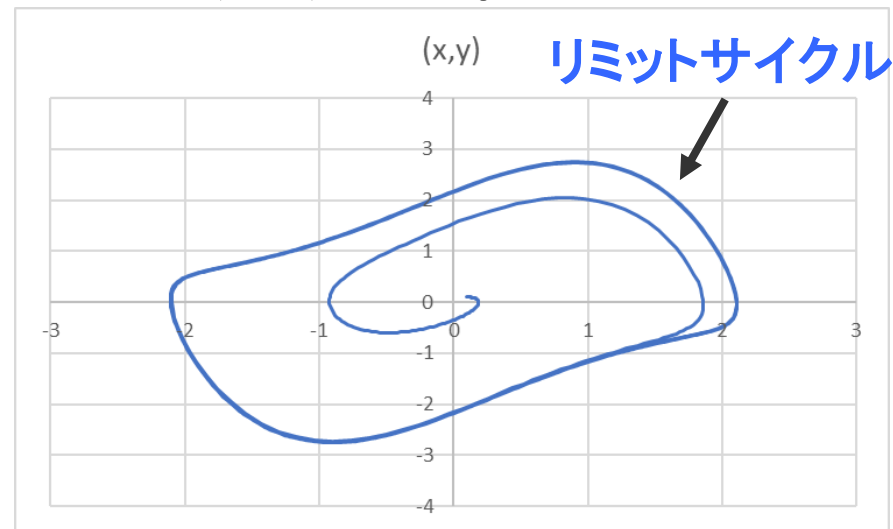
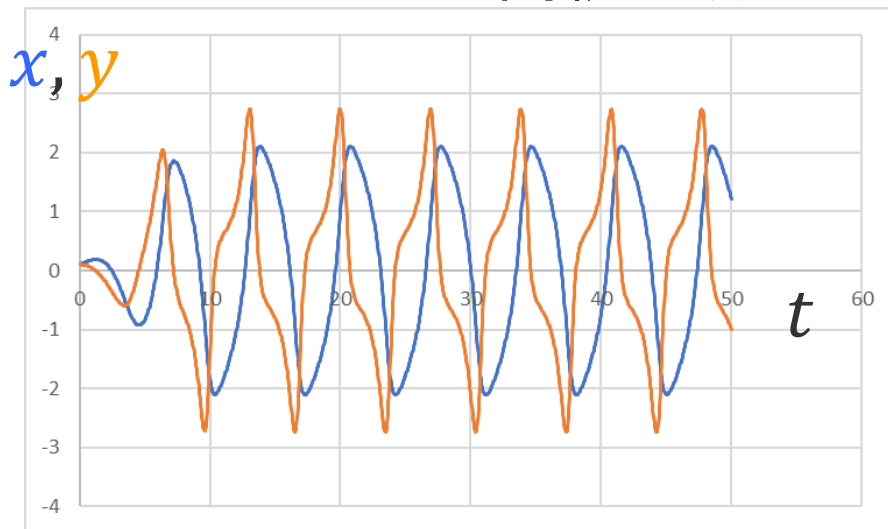
$$\frac{dy}{dt} = -x + \mu(1 - x^2)y$$

$$x_{n+1} = x_n + y_n \Delta t$$

$$y_{n+1} = y_n - [x_n - \mu(1 - x_n^2)y_n] \Delta t$$

解の性質

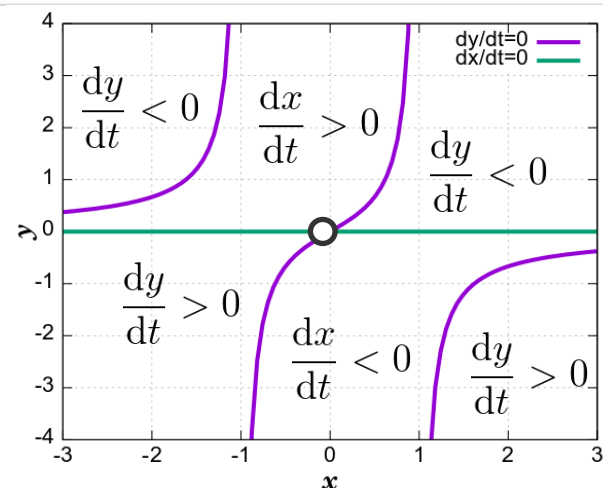
- x と y の時間変化および解軌道 $(x(t), y(t))$
 - $t \rightarrow \infty$ で閉軌道 (リミットサイクル) に近づく。



- ヌルクライン: $\frac{dx}{dt} = \frac{dy}{dt} = 0$

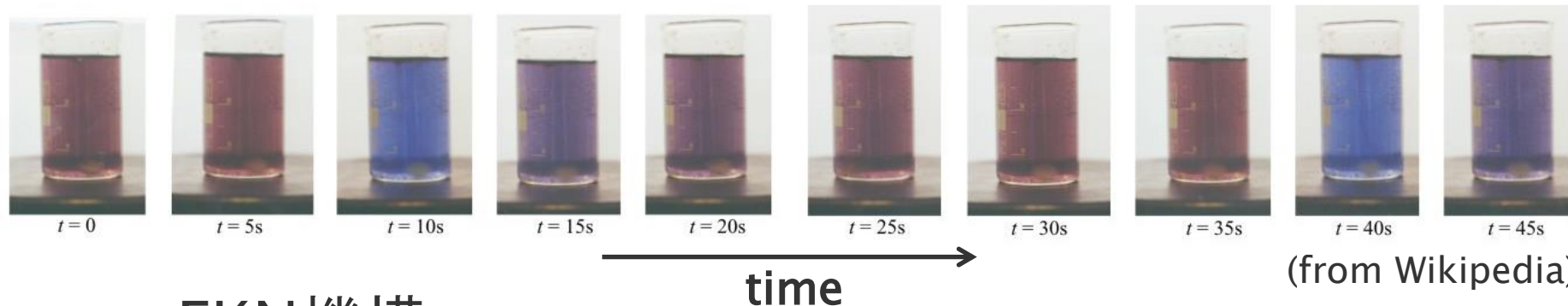
$$y = 0$$

$$y = \frac{x}{\mu(1 - x^2)}$$



化学振動反応

ベローゾフ・ジャボチンスキー反応 (BZ 反応)



FKN 機構

振動に関する反応



10個の反応式

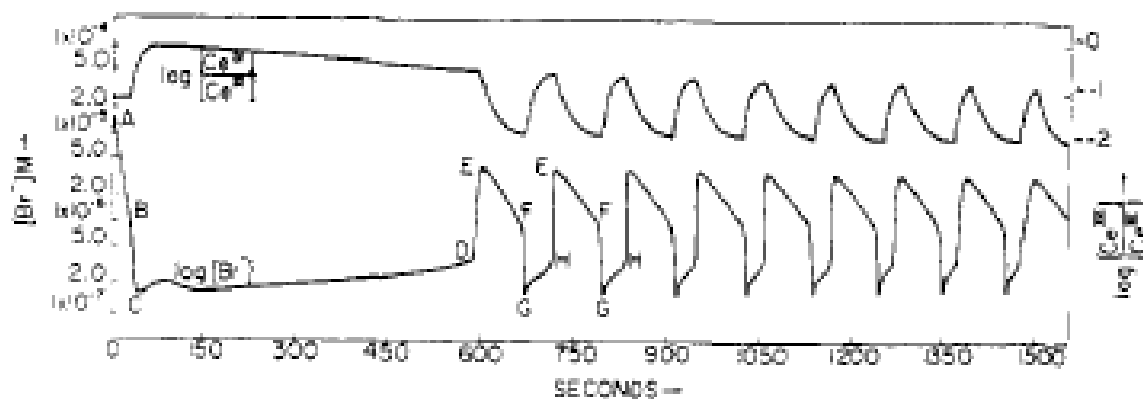
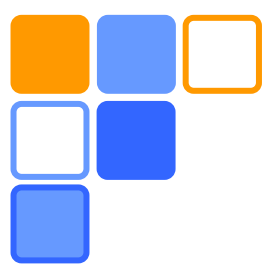


Figure 1. Potentiometric traces of $\log [\text{Br}^-]$ and $\log [\text{Ce(IV)}]/[\text{Ce(III)}]$ for a representative reaction exhibiting all six periods. Initial concentrations were $[\text{CH}_2(\text{COOH})_2]_0 = 0.032 \text{ M}$, $[\text{KBrO}_3]_0 = 0.063 \text{ M}$, $[\text{KBr}]_0 = 1.5 \times 10^{-3} \text{ M}$, $[\text{Ce}(\text{NH}_4)_2(\text{NO}_3)_6]_0 = 0.001 \text{ M}$, $[\text{H}_2\text{SO}_4]_0 = 0.8 \text{ M}$.

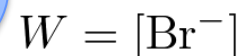
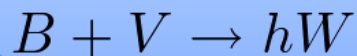
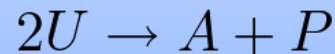
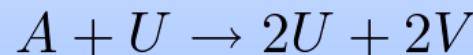
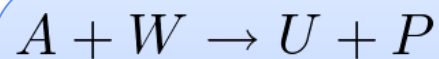


BZ反応のモデル

□ オレゴネーター

- 10以上の反応式
- ➡ 5つの反応式

□ 2変数モデル(タイソン)



$$\epsilon \frac{du}{dt} = u(1 - u) - \frac{bv(u - c)}{u + c}$$

$$\frac{dv}{dt} = u - v$$

$$\epsilon \simeq 10^{-2}$$

$$b \simeq 1$$

$$c \simeq 8 \times 10^{-4}$$

- u, v はそれぞれ $\text{HBrO}_2, \text{Ce}^{4+}$ の濃度に対応
- t は無次元化された時間、 ϵ, b, c は定数
(時間スケール ~ 50 sec)

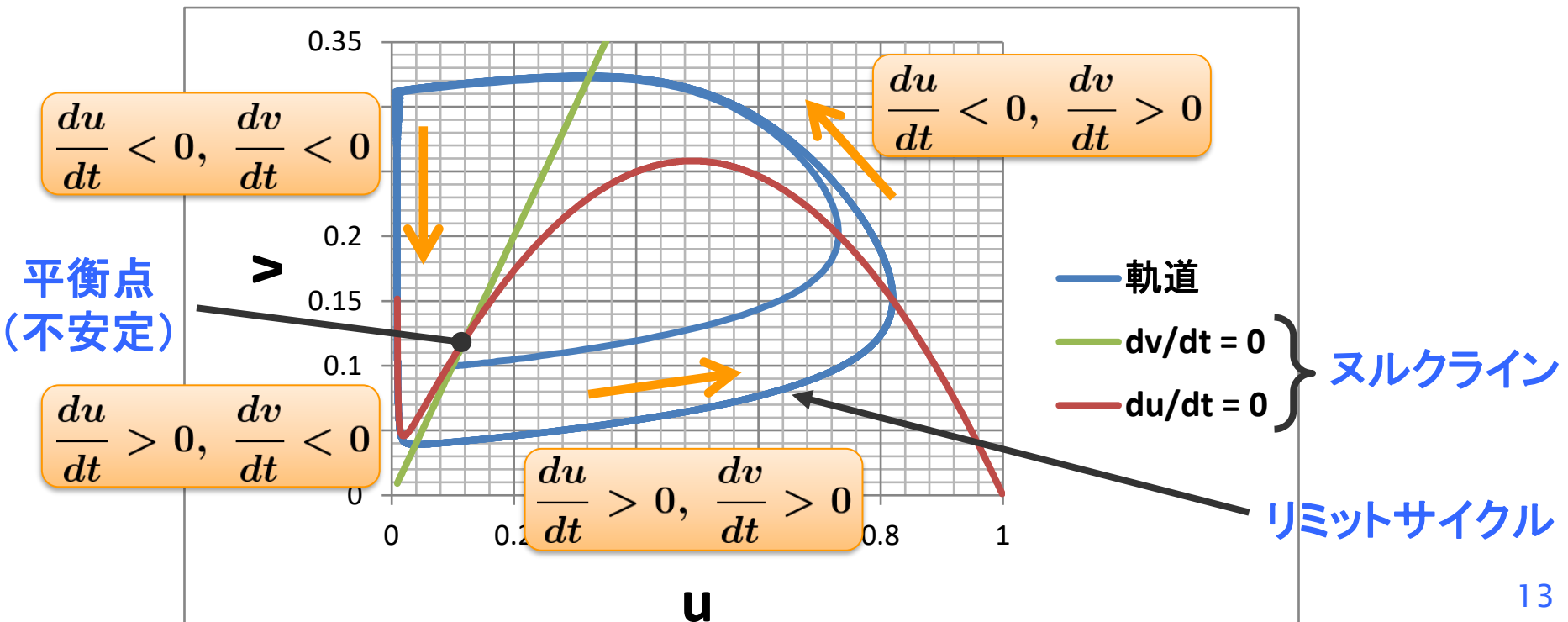
振動(力学系)の特徴

□ 平衡点の安定性

- 平衡点: $du/dt = dv/dt = 0$ となる (u, v)
- 時間とともに平衡点に近づく: **安定**、遠ざかる: **不安定**

□ リミットサイクル振動

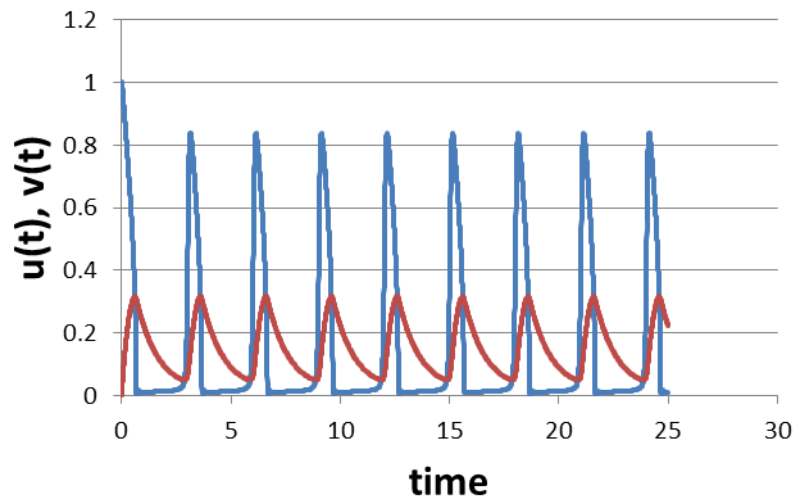
- 初期値によらず閉じた軌道(**リミットサイクル**)に近づく



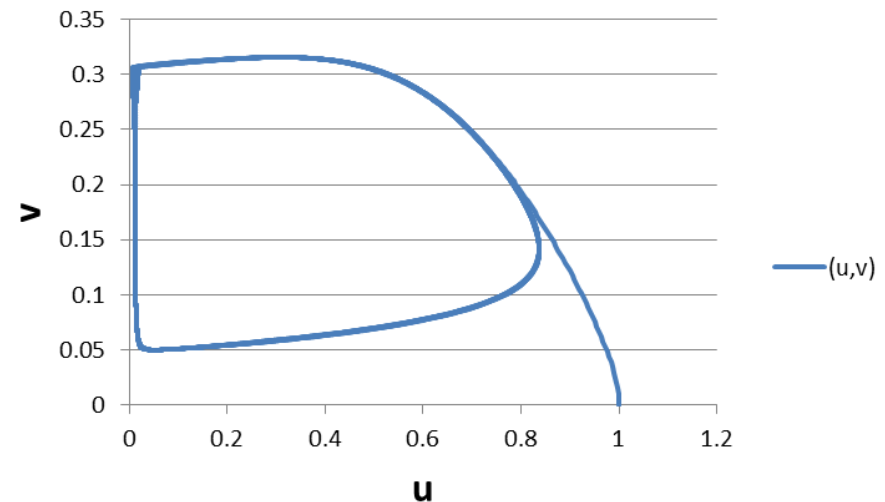
数値シミュレーション

- オイラー差分法を用いてシミュレーションを行う。
- いろいろなパラメータや初期値に対して計算する。

u, v の時間変化



軌道図



パラメータ: $\epsilon=0.03$, $b=1$, $c=0.01$, $\Delta t=0.005$
初期値: $u=1$, $v=0$



数値スキーム

□ モデル方程式

$$\frac{du}{dt} = f(u, v)$$

$$\frac{dv}{dt} = g(u, v)$$

$$f(u, v) = \frac{1}{\epsilon} \left[u(1 - u) - \frac{bv(u - c)}{u + c} \right]$$

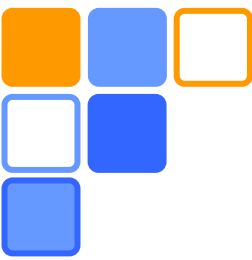
$$g(u, v) = u - v$$

□ オイラー差分法

$$(u_n, v_n) = (u(t_n), v(t_n)) \quad t_n = n\Delta t \quad (n = 0, 1, \dots, N)$$

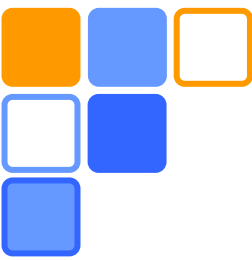
$$u_{n+1} = u_n + f(u_n, v_n)\Delta t$$

$$v_{n+1} = v_n + g(u_n, v_n)\Delta t$$



演習課題

- オレゴネーター(2変数モデル)によるシミュレーションを行い、リミットサイクル振動するばあいについて $u(t)$, $v(t)$ の時間変化のグラフと軌道図を描く。初期値を変えて行い、同じリミットサイクルに近づくことを確かめる。
- リミットサイクル振動でない場合の $u(t)$, $v(t)$ の時間変化のグラフおよび軌道図を描く。用いたパラメータの値も記す。
- 上記の課題をレポートとしてA4用紙1枚にまとめ、学籍番号、氏名(自筆)を明記してこの時間内に提出。



参考文献

- S.スメール, M.W.ハーシュ(田村一郎, 水谷忠良, 新井紀久子 訳)『力学系入門』岩波書店(1976)
- 笠原皓司『微分方程式の基礎』朝倉書店(1982)
- 三井斌友, 小藤俊幸『常微分方程式の解法』共立出版(2000)
- 太田隆夫『非平衡系の物理学』裳華房(2000)