Лабораторная работа № 7.

Модель химической кинетики «Брюсселятор».

Цель работы. Провести исследование автоколебаний в системе химических реакций на примере модели «Брюсселятор».

Краткая теория.

В настоящее время известно достаточно много периодических химических реакций, т.е. реакций, в процессе протекания которых наблюдаются автоколебания количеств (или концентраций) различных веществ. Для лучшего понимания таких реакций разработаны некоторые простые математические модели. Одна из таких моделей была предложена и исследована в 1968 г. в Брюсселе коллективом ученых во главе с И.Пригожиным, в связи с чем эта модель получила название «брюсселятор». Реакция, описываемая моделью брюсселятора, протекает в открытой системе (исходные реагенты могут подводиться в систему извне, а конечные продукты реакции выводятся из системы).

Как уже отмечалось в п. 1.3.3, химические уравнения брюсселятора имеют вид:

$$A \rightarrow X$$
,
 $B+X \rightarrow Y+D$,
 $2X+Y \rightarrow 3X$,
 $X \rightarrow E$.

Здесь A и B – исходные реагенты, D и E – конечные продукты реакции, X и Y – промежуточные продукты реакции.

Обозначая концентрации реагирующих веществ в реакциях теми же буквами и считая A и B заданными константами, получим дифференциальные уравнения брюсселятора:

$$\begin{cases} X' = A - (B+1)X + X^{2}Y \\ Y' = BX - X^{2}Y \end{cases}$$

Порядок выполнения работы

- 1. Ознакомиться с теоретическим материалом.
- 2. Разработать программу, реализующую точечную модель «Брюсселятор».

- 3. Провести исследование модели: исследовать точечную модель при различных соотношениях между параметрами. Построить фазовый портрет и графики зависимости концентраций веществ от времени для двух случаев:
- · автоколебания;
- затухающие колебания.
- 4. Оформить отчёт по результатам исследований.

Литература:

Пригожин И. Р. От существующего к возникающему. М.: Едиториал УРСС, 2002.

Тарасевич Ю.Ю. Математическое и компьютерное моделирование. Вводный курс. Учебное пособие. 4-е изд., испр. М.: Едиториал УРСС, 2004.

Информационная система «Динамические модели в биологии». Реестр моделей [Электронный ресурс]: Руководитель проекта Ризниченко Г.Ю. http://www.dmb.biophys.msu.ru/registry?article=53.