

Oregonator: Modelo Matemático da Reação de Belousov-Zhabotinsky

Ana Carolina Sayumi I. Alves ¹, João Roberto B. K. da Cruz ², Sarah Santos Silva ³
Ilum Escola de Ciência
Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais (CNPEM)
Campinas, Brasil

Resumo. Explorou-se o modelo matemático Oregonator, um sistema de equações diferenciais, para reações oscilatórias do tipo Belousov-Zhabotinsky (BZ) através de um método semi-analítico e métodos numéricos como Euler e Runge-Kutta. O método semi-analítico revelou através dos autovalores do Jacobiano a forte tendência do sistema à instabilidade, a partir de valores de concentração definidos conforme a literatura, indicando uma solução que comprovou o padrão oscilatório numéricamente e atuou como base para comparação com os comportamentos obtidos pelos métodos numéricos. Euler com uma aproximação justa aproximou muito bem o padrão oscilatório com estabilização em estado oscilante rápida e um diagrama de fases condizente com o esperado, enquanto a modelagem pelo método numérico de Range-Kutta de quarta ordem aplicado apresentou uma solução muito eficiente que representa os padrões periódicos de suscetivas reações com os ciclos de retroalimentação positiva e negativa entre as concentrações dos reagentes. Os resultados foram pouco conclusivos quanto ao erro do dos modelos, mas ainda assim se mostrou eficiente em modelar o sistema químico.

Palavras-chave. Oregonator, cinética química, modelagem, Euler, Runge-Kutta, Espaço de fase

1 Introdução

O Oregonator é um modelo matemático que descreve a dinâmica das reações químicas oscilantes do tipo Belousov-Zhabotinsky (BZ) [1]. O artigo original que apresenta o modelo base para o Oregonator foi publicado por Field, Körös e Noyes (FKN) entre 1972 e 1974, detalhando o mecanismo químico da reação e a formulação matemática que foi simplificada pelo Oregonator. Ele consiste em um sistema de equações diferenciais que captura os principais aspectos das oscilações químicas e padrões espaciais observados nessas reações [2].

O Oregonator é composto por um sistema de três equações diferenciais não-lineares, cada uma representando a evolução temporal das concentrações de intermediários químicos principais da reação BZ. As variáveis típicas do modelo são [3]:

- X: ácido bromoso ($HBrO_2$)
- Y: íon brometo (Br^-)
- Z: catalisador oxidado (por exemplo, $Ce(IV)$)
- A: bromato (BrO_3^-) (mantido constante)
- B: ácido malônico ($BrMA$) (mantido constante)

¹ana25003@ilum.cn pem.br

²joao25006@ilum.cn pem.br

³sarah25012@ilum.cn pem.br

O Oregonator reduz o mecanismo completo da reação BZ a cinco etapas principais, envolvendo três intermediários. As reações são tratadas como irreversíveis, e os efeitos da acidez são incorporados nas constantes de velocidade. O objetivo é representar as características fundamentais do sistema, como oscilações, ciclos-limite e bifurcações. O modelo é utilizado para explorar padrões de clusters, sincronização e comportamentos coletivos em sistemas globalmente acoplados, inclusive com feedback global, simulando fenômenos observados em sistemas biológicos e neurocientíficos

O Oregonator é aplicado para investigar como instabilidades geradas por difusão levam à formação de padrões espaciais complexos, como estruturas estacionárias e oscilações respiratórias, relevantes para química, biologia e ecologia [3]

Entre as abordagens computacionais, os métodos de Euler e Runge-Kutta destacam-se como ferramentas fundamentais [4]. Enquanto o método de Euler oferece uma implementação simples e direta, sua baixa precisão e tendência à instabilidade tornam inadequado para estudos de longo prazo ou da dinâmica assintótica do sistema. Em contrapartida, o método de Runge-Kutta de quarta ordem (RK4), devido à sua maior precisão e estabilidade numérica, permite capturar de forma mais fidedigna os complexos comportamentos oscilatórios, os padrões de ondas químicas e a evolução temporal das concentrações, sendo, portanto, amplamente preferido em investigações quantitativas e qualitativas robustas sobre a dinâmica não linear da reação BZ [5].

Portanto, o presente trabalho tem o objetivo de ao empregar ferramentas de matemática aplicada, para estudar aspectos fundamentais da dinâmica da reação BZ, mas também fornece um repertório teórico que pode ser aplicado a outros sistemas complexos parecidos. A seguir, serão detalhados os fundamentos da reação BZ, a metodologia de análise de simetrias e o significado do comportamento oscilatório da função dentro da proposta do artigo em questão.

2 Modelagem matemática

2.1 Reações

As reações descritas pelo modelo do Oregonator são apresentadas abaixo na forma irreversível. Vale notar que elas são originalmente escritas de forma reversível, entretanto, para uma melhor aproximação química e para funcionamento do modelo, elas são escritas conforme segue.

- $A + Y \longrightarrow X$
- $X + Y \longrightarrow P$
- $B + X \longrightarrow 2X + Z$
- $2X \longrightarrow Q$
- $Z \longrightarrow fY$

2.2 Equações diferenciais

O sistema de EDOs apresentado pelo modelo descreve as concentrações de cada reagente oscilatório (X , Y e Z) em função do tempo, a partir da reação global para cada um deles.

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d[X]}{dt} = k_I[A][Y] - k_{II}[X][Y] + k_{III}[B][Y] - 2k_{IV}[X]^2 \\ \frac{d[Y]}{dt} = -k_I[A][Y] - k_{II}[X][Y] + fk_V[B][Z] \\ \frac{d[Z]}{dt} = 2k_{III}[B][X] - k_V[Z] \end{array} \right. \quad (1)$$

Esse sistema é transformado em adimensional para simplificar a matemática e a parte computacional do problema, bem como permitir análises mais rigorosas da dinâmica do sistema (como bifurcações, manifolds e ciclo limite). A simplificação fica representada da seguinte forma: [5]

$$\left\{ \begin{array}{l} \epsilon \frac{d[x]}{d\tau} = qy - xy + x(1-x) \\ \delta \frac{d[y]}{d\tau} = -qy - xy + fz \\ \frac{d[z]}{d\tau} = x - z \end{array} \right. \quad (2)$$

Tendo as constantes definidas como:

$$\begin{aligned} X_0 &= \frac{k_3 A}{2k_4}, Y_0 = \frac{k_3 A}{k_2}, Z_0 = \frac{(k_3 A)^2}{k_4 k_5 B}, T = \frac{1}{k_5 B}, \epsilon = \frac{k_5 B}{k_3 A}, \delta = \frac{2k_4 k_5 B}{k_2 k_3 A}, q = \frac{2k_1 k_4}{k_2 k_3} \\ x &= \frac{X}{X_0}, y = \frac{Y}{Y_0}, z = \frac{Z}{Z_0} \end{aligned}$$

O sistema de equações (2) foi o utilizado para análise de acordo com a definição das constantes abaixo [5].

$$\epsilon = 0.036, \delta = 0.00012, f = 1, q = 0.00024,$$

3 Materiais e métodos

Os métodos escolhidos para estudo do comportamento das equações foram: semi-analítica, Euler e Runge-Kutta. Os métodos numéricos foram implementados em python e estão disponíveis no GitHub. GitHub Oregonator

O método de diferenças finitas não foi utilizado por tratar-se de um sistema de equações, levando à geração de matrizes de maior complexidade e custo computacional.

3.1 Semi-analítica

Para análises semi-analíticas foram encontrados os pontos de equilíbrio e Jacobiano, para estudo do comportamento do modelo

Os pontos de equilíbrio foram encontrados resolvendo o sistema (2). Primeiro tendemos ϵ e δ a 0 através das variáveis rápida (y) e lenta (x) [[6], [7]]. Dessa forma, obtemos a solução trivial do sistema para x , y e z em equilíbrio (x^* , y^* e z^*), sendo $x^* = y^* = z^* = 0$ e as soluções $x^* = z^* = 11,9781$, sendo essa não fisicamente possível, delimitando o limite de reatividade, sendo assim não utilizada para etapas seguintes, e $x^* = z^* = 0.0221$, fisicamente possível. Para essa última, calculou-se $y^* = 0.98927$. Essas foram utilizadas para cálculo dos autovalores do Jacobiano.

Uma vez montado o jacobiano com as derivadas parciais, bastou fazer a substituição dos valores encontrados pelo sistema de equações para encontrar os autovalores. Os autovalores encontrados para as soluções em equilíbrio foram -0.067 , 0.0109 e 0.999 . A partir desses, pode-se discutir o comportamento do modelo para as constantes fornecidas.

3.2 Euler

O método de Euler é amplamente usado para resolver analiticamente equações diferenciais (EDOs) de primeira ordem. o método inicia por:

$$x'(t) = f(t, y) \quad (3)$$

Se fizermos a expansão de Taylor de segunda ordem da função x em torno de um ponto t_p obteremos:

$$x(t) = x(t_p) + (t - t_p)x'(t_p) + \frac{(t - t_p)^2}{2} x''(t_p)$$

Remanejando os termos concluímos que podemos calcular o valor da derivada de uma função em um ponto pela expressão abaixo:

$$\frac{x(t) - x(t_p)}{t - t_p} = x'(t_p) + (t - t_p) \frac{x''(t_p)}{2}$$

Onde o termo que contém a segunda derivada da função é o erro a qual se está sujeito quando se aplica o método. Portanto, a equação que foi aplicada computacionalmente foi:

$$x(t) = x(t_p) + h x'(t_p) \quad (4)$$

Nessa expressão, $h = t - t_p$ é o passo que será dado pelo programa para encontrar a solução. A dedução acima foi baseada em [8] $x'(t_p)$ é o chamado campo de direções, que guia os passos da função. Para aplicar esse método no modelo do Oregonator, foi feito um programa em python que resolve as 3 EDOs acopladas simultaneamente (em uma iteração um passo é dado em cada uma delas).

3.3 Runge-Kutta

O Range Kutta é um método numérico para resolver equações diferenciais ordinárias (EDOs) do tipo $dy/dt = f(t, y)$. Em cada passo de tempo, calcula-se uma média ponderada de quatro estimativas de inclinação (k_1, k_2, k_3, k_4) para avançar a solução:

$$k_1 = f(t_n, y_n), \quad (5)$$

$$k_2 = f\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}k_1\right), \quad (6)$$

$$k_3 = f\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}k_2\right), \quad (7)$$

$$k_4 = f(t_n + h, y_n + hk_3), \quad (8)$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4). \quad (9)$$

Para resolver o sistema de equações diferenciais da reação de Belousov–Zhabotinsky, utilizou-se o método de Runge-Kutta de quarta ordem. O sistema foi discretizado espacialmente pelo método das linhas e, a cada passo temporal, as inclinações intermediárias foram calculadas conforme o esquema clássico do RK4 do modelo de scipy [5].

4 Discussão de Resultados

As soluções encontradas para x^* , y^* e z^* , sendo elas $x^* = z^* = 0.0221$ e $y^* = 0.98927$, são fisicamente possíveis. Sendo y^* muito maior que x^* e z^* , há indicações de que o estado estacionário

apresenta a inibição como dominante, uma vez que y é inibidor da reação. Ou seja, como o esperado, no equilíbrio, não há catalisador ou ativador para iniciar as oscilações.

Analizando os autovalores do jacobiano, -0.067 , 0.0109 e 0.999 , pode-se observar um autovalor que indica decaimento de perturbação ($\lambda < 0$) e dois outros que indicam o aumento da instabilidade. Dentre aqueles que indicam o aumento de instabilidade, o primeiro (0.0109) apresenta crescimento lento das perturbações, enquanto o segundo (0.999) apresenta crescimento mais rápido, em dominância dinâmica. Sendo assim é possível notar instabilidades impossibilitando a permanência em estado estável do sistema, apontando para a condição necessária para a existência do ciclo limite - ou seja, para a existência e tendência do sistema à oscilações.

Sendo assim, dada a alta tendência do sistema à instabilidade para as constantes estabelecidas, pode-se comentar as condições ótimas para o surgimento da bifurcação de Hopf que leva às oscilações constantes do sistema. Esse comportamento de rápida saída do equilíbrio pôde ser observado também nas plotagens pelos métodos numéricos.

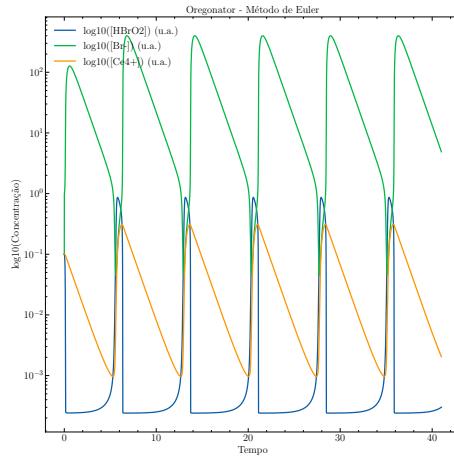


Figura 1: Evolução temporal das concentrações, em unidades arbitrárias de HBrO_2 , Be^- e Ce_4^+ . A escala é logarítmica.

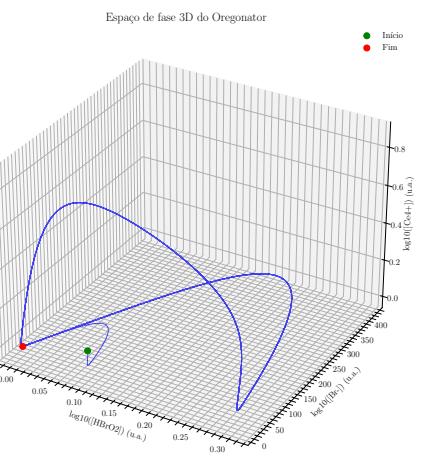


Figura 2: Gráfico em 3 dimensões da oscilação de concentrações (espaço de fase)

A Figura 1 torna visível o estado oscilatório da reação que, por volta do tempo 7 começa a repetir seus aumentos e quedas de concentração. Podemos identificar uma forte correlação negativa entre a concentração de Be^- e HBrO_2 pois é evidente que o rápido crescimento de um leva ao rápido consumo do outro. Também é perceptível que o primeiro pico de concentração de Br^- é menor que os outros, o que leva ao fato de que o sistema estava em busca da estabilidade que, como era esperado, foi rapidamente atingida.

A Figura 2 mostra um espaço de 3 dimensões em que os eixos representam as concentrações (em unidades arbitrárias) dos compostos que variam na reação. É possível verificar pelos pontos de início e fim que, logo após o sistema começar a reagir, ele entra em uma curva (em 3 dimensões) que forma um ciclo.

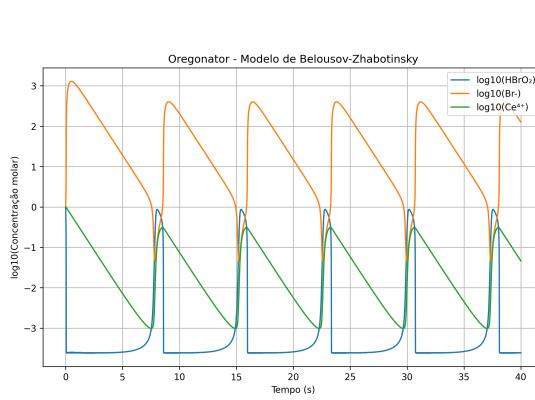


Figura 3: Evolução temporal das concentrações de HBrO_2 , Ce^{4+} e da variável z

Diagrama de Fases 3D - Oregonator

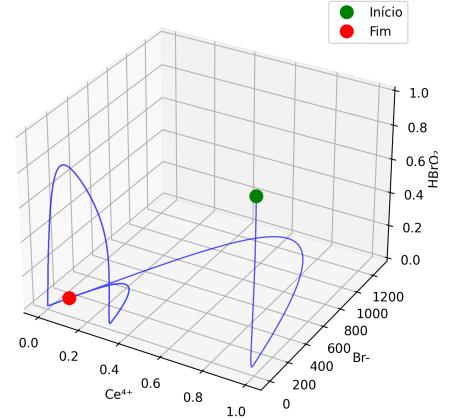


Figura 4: Gráfico 3D da oscilação de concentrações

A Figura 3 ilustra a dinâmica temporal das concentrações de HBrO_2 , Ce^{4+} e da variável z , calculadas numericamente pelo modelo Oregonator e plotadas em escala logarítmica. A simulação captura a natureza oscilatória e não-linear da reação de Belousov-Zhabotinsky. O padrão de oscilações observado resulta de um balanço dinâmico entre fases abruptas de autocatálise, onde a concentração de HBrO_2 cresce rapidamente, seguidas por etapas mais lentas de consumo e regeneração dos reagentes. Este ciclo de retroalimentação positiva e negativa, reproduzido fielmente pelo modelo, constitui o mecanismo central por trás dos padrões periódicos característicos observados experimentalmente na reação BZ.

O gráfico 3D da figura 4 é mais uma forma de observar a adequação do modelo matemático e do método numérico utilizado, pois reproduz o comportamento esperado para reações de Belousov-Zhabotinsky em condições arbitrárias que reproduz observações da literatura.

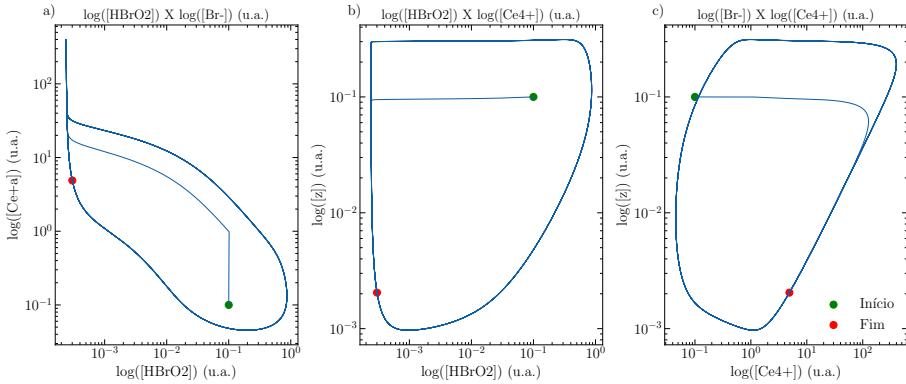


Figura 5: Plano de fases do modelo de Euler

Planos de fase são os gráficos que relacionam as variáveis provenientes da solução das EDOs. Os pontos verdes nos indicam as condições iniciais dos sistemas químicos no que tange às concentrações iniciais. Os planos elucidam, por estes pontos, a busca pela estabilidade do sistema, como foi previsto pela abordagem semi-analítica. Isto pois em todos os casos as concentrações se alteraram

até que o sistema atingisse um ciclo de estabilidade. Um ponto que chama atenção é o verde da c), pois este já estava próximo à linha de estabilidade, contudo, dado à natureza de existirem 3 EDOs acopladas modelando este problema, é necessário transitar até o estado ser atingido por todas as concentrações.

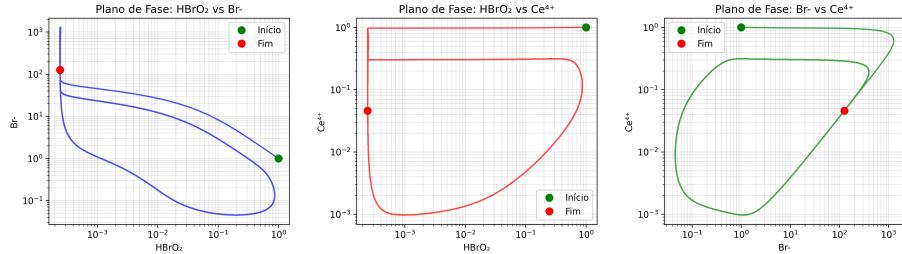


Figura 6: Plano de fases do modelo Range Kutta

Um plano de fases é uma representação gráfica que permite visualizar o comportamento dinâmico de sistemas descritos por equações diferenciais, mostrando como o estado do sistema evolui ao longo do tempo em função de duas variáveis fundamentais. Essa abordagem permite identificar padrões como pontos de equilíbrio, trajetórias periódicas e regiões de estabilidade e instabilidade, sendo frequentemente utilizada em sistemas químicos, físicos e biológicos para analisar processos dinâmicos complexos [9]. O gráfico dos planos de fase (figura 6) apresentado para o sistema químico, do modelo da reação de Belousov-Zhabotinsky, foi aplicado para mostrar as trajetórias que as concentrações das espécies químicas percorrem durante a evolução temporal. Cada gráfico relaciona dois reagentes principais, permitindo observar ciclos de oscilações, pontos de início e fim do processo, além de regiões de possível estabilidade ou transição entre estados químicos [10].

5 Considerações Finais

A simulação do modelo de Oregonator utilizando tanto o método de Euler quanto o de Runge-Kutta adaptativo (RK45) reproduziu com sucesso o comportamento oscilatório característico da reação de Belousov-Zhabotinsky. Isto foi evidenciado nos planos de fase pelas variações regulares e acopladas das concentrações de HBrO_2 , Br^- e Ce^{4+} em escala logarítmica. A apresentação do sistema saindo rapidamente do equilíbrio em análises semi-analíticas converge com o que foi observado pelos métodos numéricos. Os métodos numéricos retornaram resultados gráficos distintos, o que reflete a necessidade da escolha de um bom modelo para representar as variações das concentrações.

Por fim, a escolha do método numérico de Runge-Kutta mostrou-se adequada, com o passo adaptativo garantindo precisão nas regiões de variação rápida (como os picos de concentração) e eficiência computacional nos trechos mais suaves, validando o modelo matemático para descrever este icônico sistema químico afastado do equilíbrio.

Para desenvolvimentos futuros, pensa-se em melhores análises comparativas e aplicação de diferentes valores de concentração, analisando os impactos do balanço de reagentes nos resultados dos padrões oscilatórios. Também pode-se buscar novas formas de modelar numericamente e observar a possibilidade de aplicar os resultados obtidos às práticas desenvolvidas.

6 Contribuições dos autores

Seguem abaixo as contribuições de cada um dos membros.

Ana Carolina S. I. Alves: Investigaçāo, Análise formal e analítica e Redaçāo.

Joāo Roberta B. K. da Cruz: Implementaçāo por Euler, Investigaçāo e Redaçāo.

Sarah Santos Silva: Implementaçāo por Runge-Kutta, Investigaçāo e Redaçāo.

Agradecimentos

Agradecemos ao professor Vinícius Francisco Wasques e ao estagiário Estevāo Antoine Terzian Simonka pelo apoio e auxílio. Também agradecemos nossos colegas pela companhia durante este longo semestre.

Referências

- [1] Richard J. Field e Richard M. Noyes. “Oscillations in chemical systems. IV. Limit cycle behavior in a model of a real chemical reaction”. Em: **The Journal of Chemical Physics** 60.5 (1974), pp. 1877–1884. DOI: 10.1063/1.1681288. URL: <http://dx.doi.org/10.1063/1.1681288>.
- [2] Julián Roa González Saeed ur Rahman José Luis Díaz Palencia. “Analysis, Symmetry and Asymptotic Behaviour of Solutions for the Belousov-Zhabotinsky Model”. Em: **MATCH Commun. Math. Comput. Chem** 93.1 (2025), pp. 187–222. DOI: 10.46793/match.93-1.187r.
- [3] Jonathan R. Prado et al. “The Oregonator Model Revisited: Numerical and Dynamical Analysis”. Em: **Processes** 8.4 (2020), p. 393. DOI: 10.3390/pr8040393.
- [4] Raffaele D’Ambrosio et al. “Adapted numerical modelling of the Belousov–Zhabotinsky reaction”. Em: **Journal of Mathematical Chemistry** 56.2 (2018), pp. 2876–2897. DOI: 10.1007/s10910-018-0922-5.
- [5] Ishaan Misra e V. Ramanathan. “Belousov–Zhabotinsky reaction: an open-source approach”. Em: **Proceedings of the Indian National Science Academy** 88.7 (2022), pp. 243–249. DOI: 10.1007/s43538-022-00081-6.
- [6] A. J. Brizard e D. I. Berry. “Asymptotic Limit-cycle Analysis of Oscillating Chemical Reactions”. Em: **arXiv preprint arXiv:2105.01234** (2021). URL: <https://arxiv.org/abs/2105.01234>
- [7] K. Engel e A. Olicón-Méndez. “A singular perturbation analysis for the Brusselator”. Em: **arXiv preprint arXiv:2311.00575** (2023). URL: <https://arxiv.org/abs/2311.00575>.
- [8] Vinicius Francisco Wasques. **Equações Diferenciais – Notas de Aula**. Material de aula da disciplina de Equações Diferenciais. Apostila fornecida pelo professor. 2025.
- [9] Wikipédia. **Plano de fase — Wikipédia, a enciclopédia livre**. https://pt.wikipedia.org/wiki/Plano_de_fase. Acesso em: 25 nov. 2025. 2025.
- [10] LespritSorcier. **Reação oscilante de Belousov–Zhabotinsky**. <https://lespritsorcier.org/blogs-membres/reaction-oscillante-de-belousov-zhabotinsky/>. Acesso em: 26 nov. 2025. n.d.