

計算機課題/Python プログラミング

Author: No.7 05253011 Fumiya Kashiwai / 柏井史哉

2025 年 12 月 11 日

第I部

ODE-3 : Belousov-Zhabotinsky Reaction

1 Purpose and Background

Python プログラミングを用いて、複雑な反応速度式を有する Belousov-Zhabotinsky (BZ) 反応における、各化学種の濃度変化を数値的に解く。

2 基本の条件

まず、テキストに記載された速度定数、初期濃度を用いて計算を行った。 $[\text{HBrO}_2]$, $[\text{Br}^-]$, $[\text{Ce}^{4+}]$ の初期濃度を $[0, 0.0015, 0.0015]$ (M) とした (条件 1)。

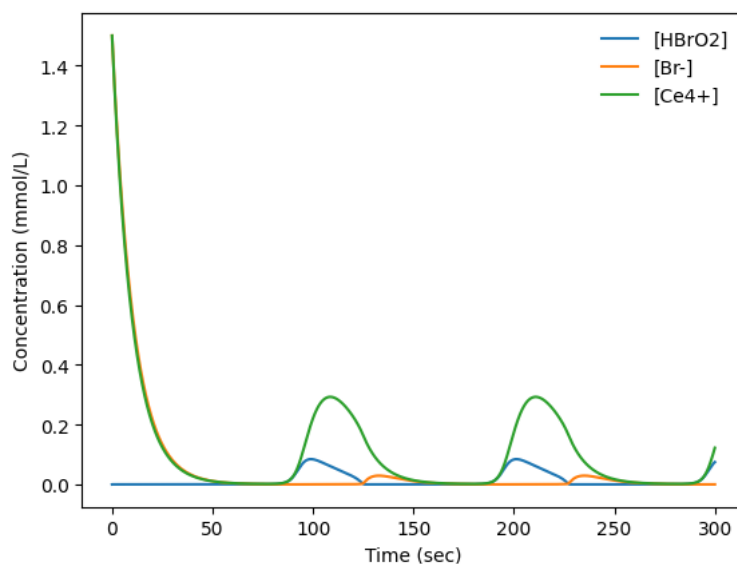


図 1: 初濃度 $[0, 0.0015, 0.0015]$ 、 $\Delta t = 0.001$ s

条件 1 では、100 s 程度の周期での振動が見られた。

3 初期濃度の変更

$[\text{HBrO}_2]$, $[\text{Br}^-]$ の初期濃度を变化させた時、初期の挙動には違いが見られものの、振動周期はほぼ変化しなかった。これは、Br 種のうち、 BrO_3^- の濃度が非常に大きいため、 $[\text{HBrO}_2]$, $[\text{Br}^-]$ の変化はほぼ影響しないためと考えられる。

対して、 Ce^{4+} の初期濃度を大きくすると、振動周期の増大が確認された。これは、(定性的には) Ce^{4+} を消費するのに時間をより要することから説明される。

このモデルでは、簡略化に伴い Ce_4^{+} の初期濃度が 0 の時にも、 $\frac{d[\text{Ce}_4^{+}]}{dt} \neq 0$ となってしまう。そのため、本来振動しないはずの状況でも、振動している計算結果が出力されることが確認された。

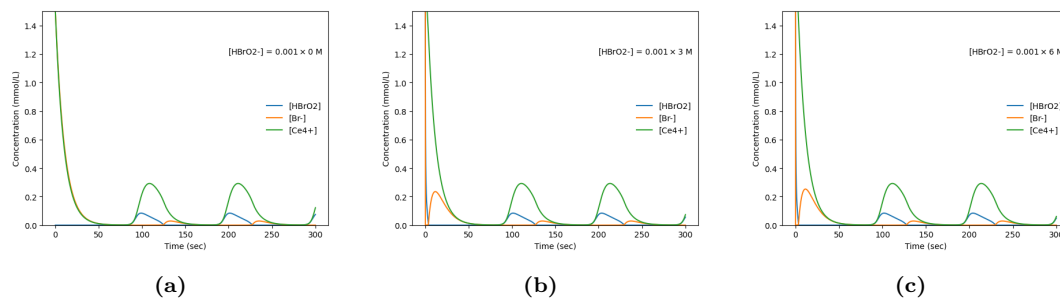


図 2: $[HBrO_2]$ を変化させた時の挙動

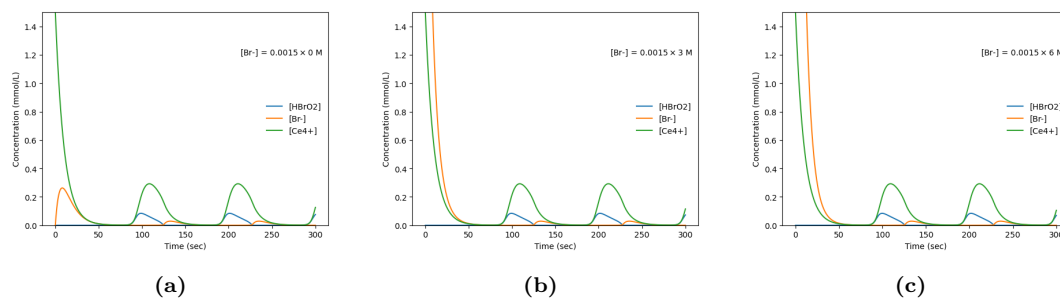


図 3: $[Br^-]$ を変化させた時の挙動

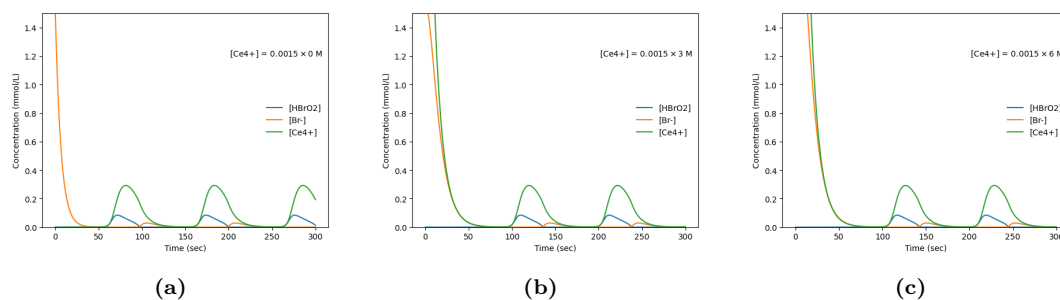


図 4: $[Ce^{4+}]$ を変化させた時の挙動

4 反応速度定数の変更

5 Runge-Kutta 法と Euler 法の比較

ともに $\Delta t = 0.0001 \text{ s}$ として、Runge-Kutta 法と Euler 法それぞれで計算をした。

6 Appendix

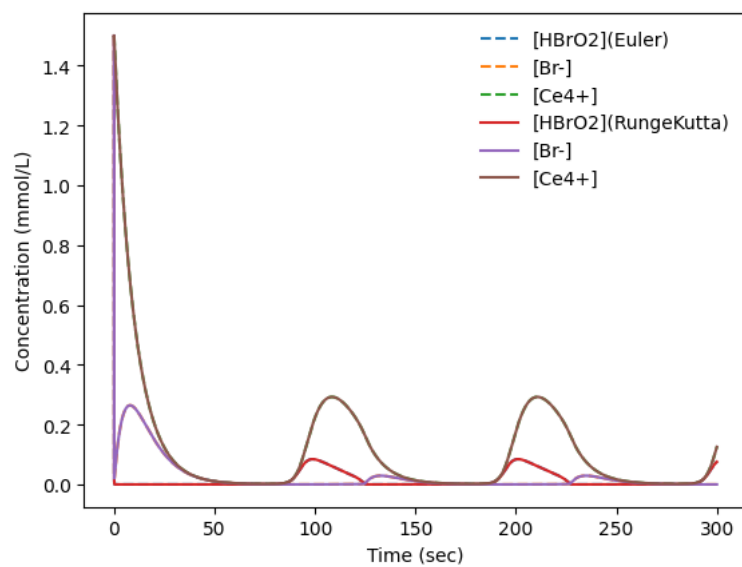


図 5: Runge-Kutta 法と Euler 法の計算値

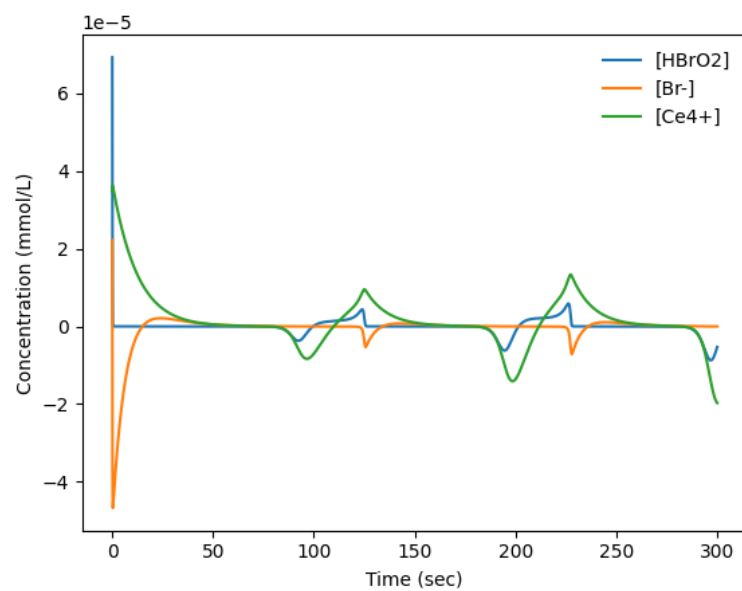


図 6: Runge-Kutta 法と Euler 法の計算値の差