薬学情報処理演習　第2回

Excelによる力学モデルのシミュレーション

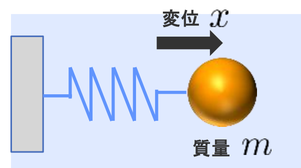
奥薗　透
コロイド・高分子物性学

減衰振動

- 粘性液体中のばねに取り付けられた球の運動

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -F\frac{dx}{dt} - Kx$$

加速度　　摩擦力　　ばねによる力



F :摩擦係数
K :ばね定数

変位と速度の式にして解く

- $f \equiv F/m, \quad k \equiv K/m$　とすると

$$\frac{dx}{dt} = v$$
$$\frac{dv}{dt} = -fv - kx \qquad (f > 0,\ k > 0)$$

- 上の式をある初期条件の下で解く:

時刻 $t = 0$ で $x = x_0,\ v = v_0$ であったとき、
その後 x と v はどのように時間変化するか、
つまり、x と v を時間の関数として求める。

$$x = x(t),\ v = v(t)$$

微分方程式を数値的に解くには

- 微分を差分で近似する:

$$\frac{dx}{dt} = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{x(t+\Delta t) - x(t)}{\Delta t} \simeq \frac{x(t+\Delta t) - x(t)}{\Delta t}$$

- したがって、微分方程式

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

は、次の式で近似できる(オイラー法):

$$x(t+\Delta t) = x(t) + v(t)\Delta t$$

数値計算の前に。。。

- 時間と長さのスケールを決めよう。
  - 時間スケールを τ 長さスケールを ξ として

$$\hat{t} \equiv t/\tau,\ \hat{x} \equiv x/\xi,\ \hat{v} \equiv v/(\xi/\tau)$$

を導入すると、微分方程式は

$$\frac{d\hat{x}}{d\hat{t}} = \hat{v},\ \frac{d\hat{v}}{d\hat{t}} = -f\tau\hat{v} - k\tau^2\hat{x}$$

  - 時間スケールを $\tau = 1/\sqrt{k}$ と選べば、第2式は

$$\frac{d\hat{v}}{d\hat{t}} = -\frac{f}{\sqrt{k}}\hat{v} - \hat{x}$$

  - 系の挙動は1つのパラメータ $\hat{f} \equiv f/\sqrt{k}$ によって決まる
  - $\hat{f}$ が同じであれば $x = x(t)$ のグラフは $t\sqrt{k}$ を時間軸にとればすべて重なる

パラメータの見積もり

- モデル系
  - 水の密度　$\rho \simeq 10^3\ \mathrm{kg/m^3}$
    粘度　$\eta \simeq 10^{-3}\ \mathrm{Pa \cdot s}$
  - 球の半径　$a \simeq 10^{-3}\ \mathrm{m}$
    質量　$m = \frac{4\pi}{3}a^3\rho \simeq 4 \times 10^{-6}\ \mathrm{kg}$　(比重1)
  - ばね定数　$K \simeq 10^{-3}\ \mathrm{N/m}$
  - 摩擦係数　$F = 6\pi\eta a \simeq 2 \times 10^{-5}\ \mathrm{kg/s}$(Stokes抵抗)

$$\hat{f} = \frac{F}{\sqrt{Km}} \simeq 0.3 \qquad \tau = \sqrt{\frac{m}{K}} \simeq 6 \times 10^{-2}\ \mathrm{s}$$

Excel で解いてみよう

- パラメータの設定

	A	B	C
1	【減衰振動の微分方程式を解く】		
2	パラメータ	f/√k	Δt
3		0.5	0.02

- 差分式の入力　**相対参照と絶対参照**（$のついた番号）に注意

	A	B	C
5	t	x	v
6	0	1	0
7	=A6+C3	=B6+C6*C3	=C6-(B3*C6+B6)*C3

初期値

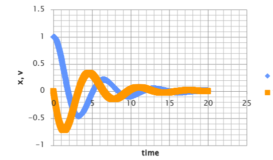
$t_{n+1} = t_n + \Delta t$

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

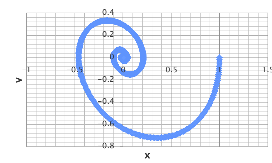
$v_{n+1} = v_n - (\hat{f} v_n + x_n)\Delta t$

計算結果をグラフにする

- x, v の時間変化



- x, v の軌道



考察

- パラメータ $\hat{f}$ の値によって系の振る舞いはどう変化するか？
  - 微分方程式 $\dfrac{d^2x}{dt^2} + f\dfrac{dx}{dt} + 1 = 0$

    の一般解は

    $$x = A_1 \exp(\lambda_1 t) + A_2 \exp(\lambda_2 t)$$

    である。ただし $\lambda = \lambda_1,\ \lambda_2$ は2次方程式

    $$\lambda^2 + f\lambda + 1 = 0$$

    の解である。したがって、この方程式が虚数解をもつとき $x(t)$ は振動的で、その振幅は減衰していく。

演習課題

- $x(t)$ が振動的な場合とそうでない場合について、$x(t),\ v(t)$ の時間変化のグラフと軌道図を描く。
- 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。