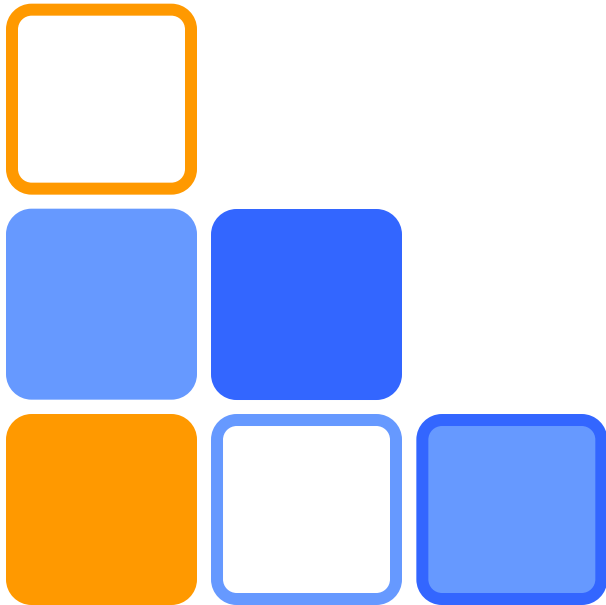


薬学情報処理演習 第7回

確率的シミュレーション 高分子のランダムウォーク モデル



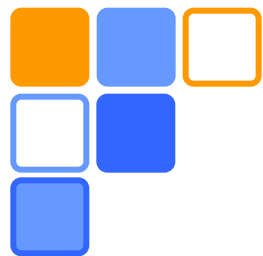
奥園 透

コロイド・高分子物性学



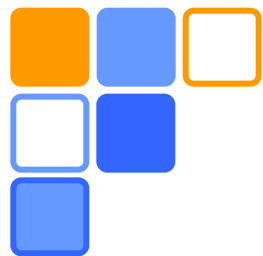
溶媒中の孤立した高分子

- 高分子: モノマーと呼ばれる構成単位 ($-\text{CH}_2-$ 等) が線状につながったもの
- 1つの高分子は $10^2 - 10^6$ 個のモノマーから成る
 - 1つの高分子を構成する全モノマー数を重合度という
- 長くてくねくね曲がりやすい
- 生体中にたくさんある。DNAも高分子である
- 高分子でできた物質は低分子の物質には見られない特異な性質を示す
- 溶媒中で高分子はどのような形態をとっているのだろうか？

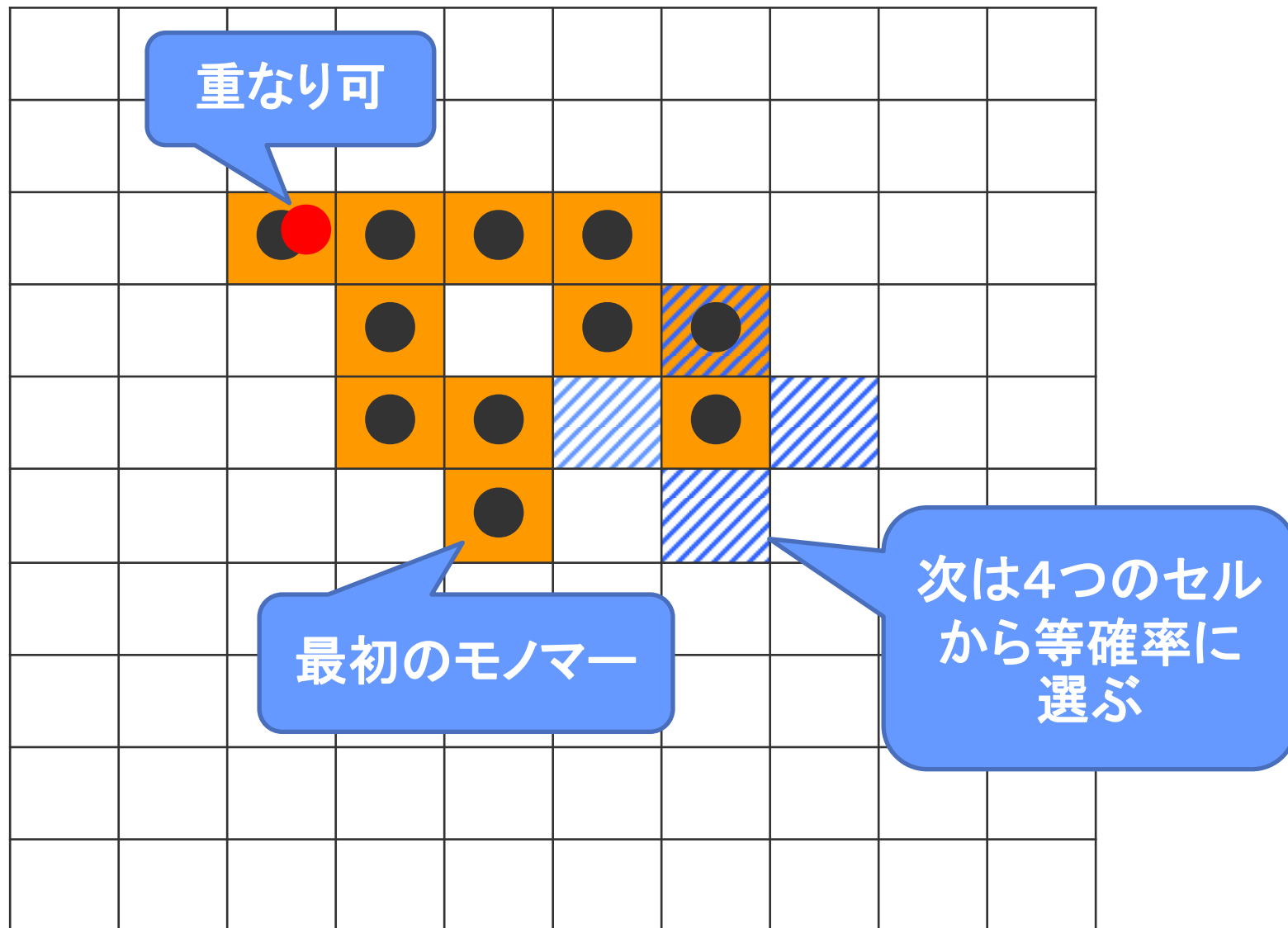


格子上的ランダムウォークモデル

- N個のモノマーを規則格子上に以下のような手順で配置する
- ある格子上的セルに最初のモノマーを置く
- 次のモノマーを、隣接するセルの中からランダムに選んだセルに置く
 - このとき選んだセルが既に他のモノマーに占有されていてもよい(モノマーの重なりを許す)
 - モノマーの重なりを許さない配置の方法は Self Avoiding Walk (SAW) と呼ばれる
- 上の操作を繰り返して1つの高分子鎖の配置を得る
- このようにして得られた高分子鎖は理想鎖と呼ばれる



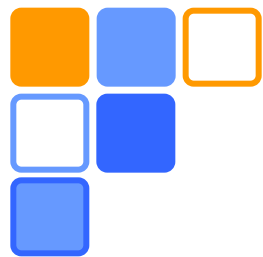
モノマーの配置(説明図)





ワークシート & VBEの準備

- ワークシート上に格子の範囲(100x100程度)を定める
- 格子範囲外でパラメータ(最初のモノマーの位置、重合度、格子の範囲など)を入力する
- 格子のセルに初期値(すべて0)を入力しカラースケール表示する
- 開発タブ「Visual Basic」をクリックしVBEを起動する
- 「VBAProject(Book1)」を選択し、「挿入」→「標準モジュール」をクリック
- コードウィンドウで「Sub ○○○」(○○○はマクロ名)と入力しEnterキーを押し、コード入力を開始する

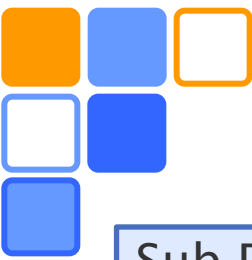


計算手順

- セルの値 $\text{Cells}(i, j) . \text{Value}$ はモノマーの個数を表すことにする
- 最初にモノマーを置くセルの値を1とし、その他はすべて0にする
- 乱数を発生させ次のモノマーを置くセルを決める
 - 関数 Rnd を用いると $[0, 1)$ の範囲の乱数(r とする)が返ってくる
 - $0 \leq r < 0.25$ のとき $i \leftarrow i + 1$
 - $0.25 \leq r < 0.5$ のとき $j \leftarrow j + 1$
 - $0.5 \leq r < 0.75$ のとき $i \leftarrow i - 1$
 - $0.75 \leq r < 1$ のとき $j \leftarrow j - 1$
- $\text{Cells}(i, j)$ の値を1増やす
- 上2つの操作を決めた回数だけ繰り返す

ワークシートの外観(例)

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q	R	S	T	U	V	
1	Polymer (random walk)																						
2																							
3	Initial position								Computing region														
4		i =		60						iMin =		11			iMax =		110						
5		j =		50						jMin =		1			jMax =		100						
6	Polymerization index									Center of gravity													
7		N =		1000						xg=		45.1469			yg=		46.7812						
8										Gyration radius													
9										Rg=		13.5776											
10																							
11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
13	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	



VBA コード例(抜粋)

```
Sub Polymer()  
    i = Range("D4").Value           '最初のモノマーの位置(行)  
    j = Range("D5").Value           '最初のモノマーの位置(列)  
    Cells(i, j).Value = 1           '最初のモノマー  
    ' ランダムウォーク  
    For n = 1 To Range("D7").Value  
        r = Rnd                     '関数Rndで(0,1)の乱数を発生させる  
        If r < 0.25 Then              '下へ進む  
            i = i + 1  
        ElseIf r < 0.5 Then           '右へ進む  
            j = j + 1  
        ElseIf r < 0.75 Then         '上へ進む  
            i = i - 1  
        Else                          '左へ進む  
            j = j - 1  
        End If  
        Cells(i, j).Select           'モノマーを置くセルを選択  
        Cells(i, j).Value = Cells(i, j).Value + 1 'このセルにあるモノマーの個数  
    Next n  
End Sub
```




演習課題

- ランダムウォークのプログラムを完成させる
- モノマーの位置 \mathbf{r}_n が設定したセルの範囲をこえたときの処理をする
- 高分子の重心位置 \mathbf{R} 、慣性半径 R_g を計算する

$$\mathbf{R} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \mathbf{r}_n \quad R_g^2 = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N |\mathbf{r}_n - \mathbf{R}|^2$$

- 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。