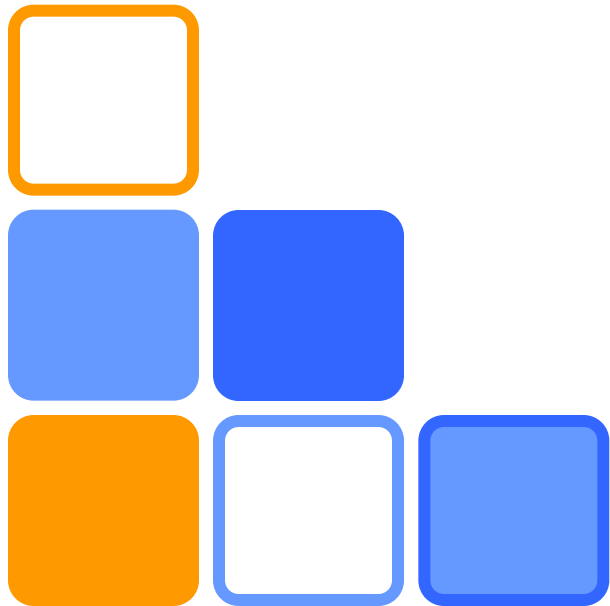


薬学情報処理演習 第3回

ブラウン運動の シミュレーション



奥菌 透

コロイド・高分子物性学



演習課題

- ブラウン運動のシミュレーション
 - ブラウン運動について理解する。
 - 乱数を使って数値シミュレーションを行う。
 - 結果をグラフ表示する。
 - 結果のデータから拡散係数を求める。



ブラウン運動 (Brownian motion)

□ 水中の花粉(微粒子)の運動: 乱雑な運動

– 多数の水分子の衝突の結果

□ 2次元のモデル

$$x_{n+1} = x_n + \xi_n$$

$$y_{n+1} = y_n + \zeta_n \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

$$\langle \xi_i \xi_j \rangle = \langle \zeta_i \zeta_j \rangle = \begin{cases} \sigma^2 & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases}$$

時刻 $t_n = n\Delta t$ での
粒子の位置: (x_n, y_n)

粒子のランダムな

変位: (ξ_n, ζ_n)

$\langle \cdot \rangle$: 平均を表す

□ 平均2乗変位と拡散係数

$$\begin{aligned} \langle x_n^2 + y_n^2 \rangle &= \langle (\xi_0 + \xi_1 + \dots + \xi_{n-1})^2 + (\zeta_0 + \zeta_1 + \dots + \zeta_{n-1})^2 \rangle \\ &= \langle \xi_0^2 \rangle + \langle \xi_1^2 \rangle + \dots + \langle \xi_{n-1}^2 \rangle + \langle \zeta_0^2 \rangle + \langle \zeta_1^2 \rangle + \dots + \langle \zeta_{n-1}^2 \rangle \\ &= 2n\sigma^2 \end{aligned}$$

拡散係数 $D \equiv \frac{\sigma^2}{2\Delta t} = \frac{\langle x_n^2 + y_n^2 \rangle}{4n\Delta t}$

グラフの作成と解析

□ ブラウン粒子の軌跡

t	x	y	x^2+y^2
0	0	0	0
1	0.289772	0.185654	0.118435
2	-0.95122	-1.5858	3.419576
3	-1.52172	-1.97328	6.209484

□ 平均2乗変位

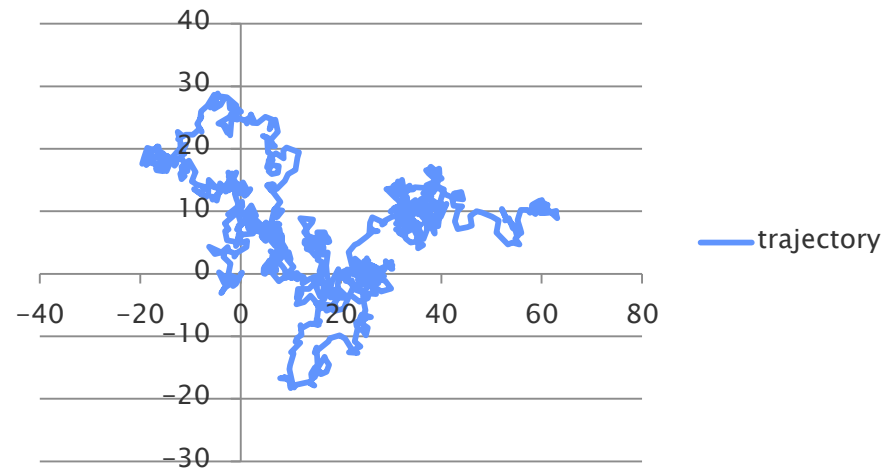
$x_n^2 + y_n^2$ を t_n に対してプロットし、
近似直線を求める。

□ 拡散係数

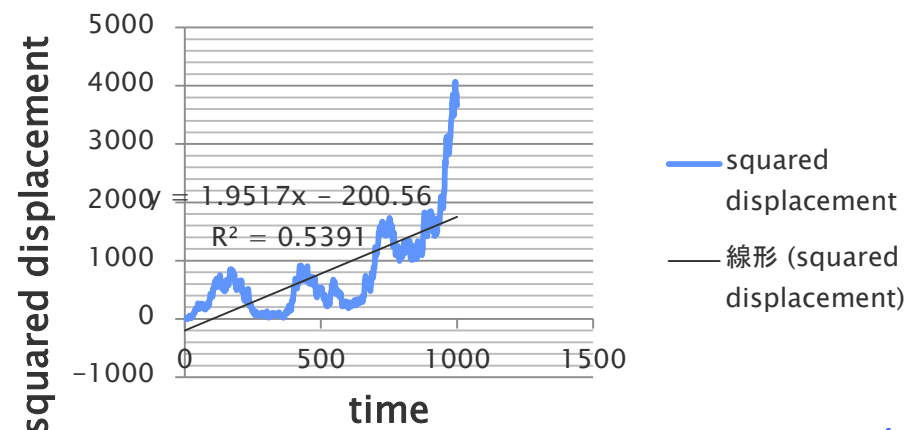
近似直線の傾きから D を求める。

$$D = \frac{1.9517}{4} = 0.4879$$

trajectory



squared displacement





レポート

- 演習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。
- ブラウン運動の数値シミュレーション
 - ブラウン粒子の軌跡の図
 - 平均2乗変位のグラフと拡散係数

(補足) 確率密度関数 $p(x)$

□ 変数が離散的な場合 (例: サイコロ)

$X = x_n$ である頻度

$$f_n \quad (n = 1, 2, \dots)$$

$X = x_n$ となる確率

$$p_n = \frac{f_n}{\sum_i f_i}$$

規格化条件

$$\sum_i p_i = 1$$

□ 変数が連続な場合 (例: ボール投げ)

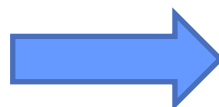
$$x_n \leq X < x_n + \Delta x$$

である頻度 f_n

$$\text{となる確率} \quad p_n = \frac{f_n}{\sum_i f_i}$$

規格化条件

$$\sum_i p_i = 1$$



サンプル数

$$N \rightarrow \infty$$

$$\Delta x \rightarrow 0$$

$$p_n / \Delta x \rightarrow p(x)$$

$$x \leq X < x + dx$$

となる確率: $p(x)dx$

規格化条件

$$\int p(x)dx = 1$$

$$\left(p(x)dx \simeq \frac{f_n \Delta x}{\sum_i f_i \Delta x} \quad p(x) \simeq \frac{f_n}{\sum_i f_i \Delta x} \right)$$