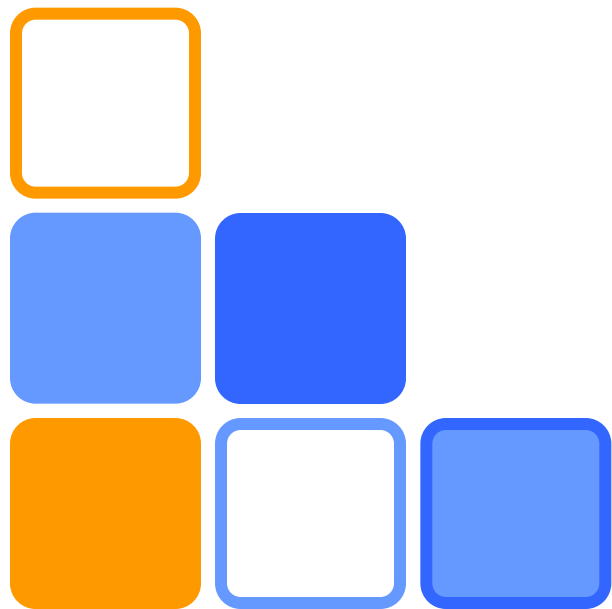


薬学情報処理演習 第4回

力学モデルのシミュレーション



奥菌 透

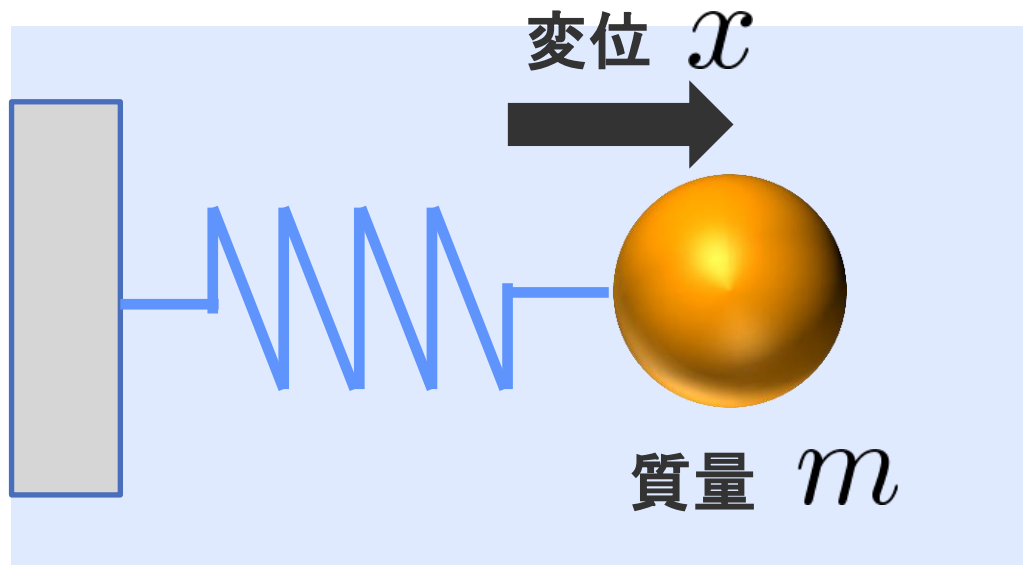
コロイド・高分子物性学

減衰振動

- 粘性液体中のばねに取り付けられた球の運動

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

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

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

$$\frac{dv}{dt} = -fv - kx$$

$$(f > 0, k > 0)$$

- 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。

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



微分方程式を数値的に解くには

- 微分を差分で近似する:

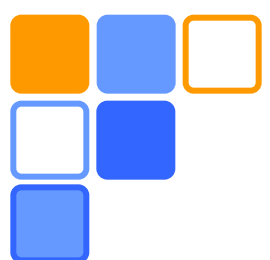
$$\frac{dx}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{x(t + \Delta t) - x(t)}{\Delta t} \simeq \frac{x(t + \Delta t) - x(t)}{\Delta t}$$

- 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

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

を導入すると、微分方程式は

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

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



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

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	$f/\sqrt{k}$	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+\$C\$3	=B6+C6*\$C\$3	=C6-(\$B\$3*C6+B6)*\$C\$3

初期値



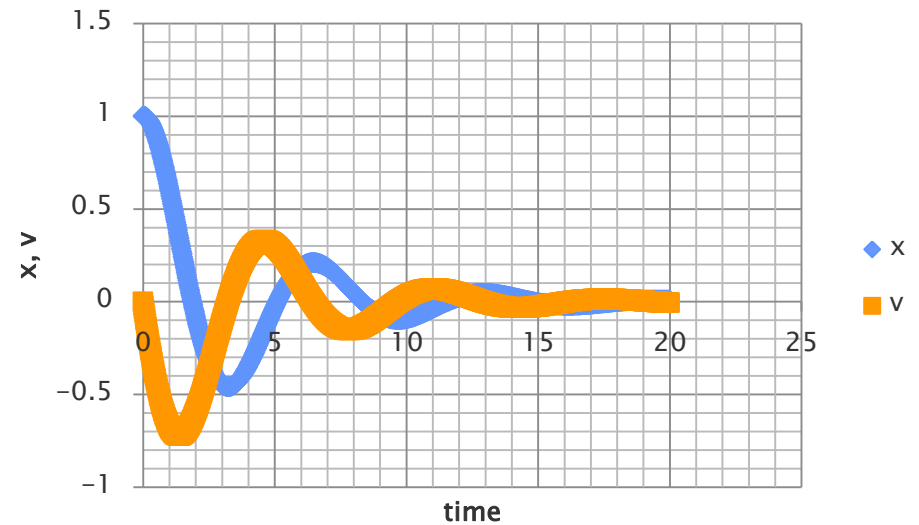
$$t_{n+1} = t_n + \Delta t$$

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

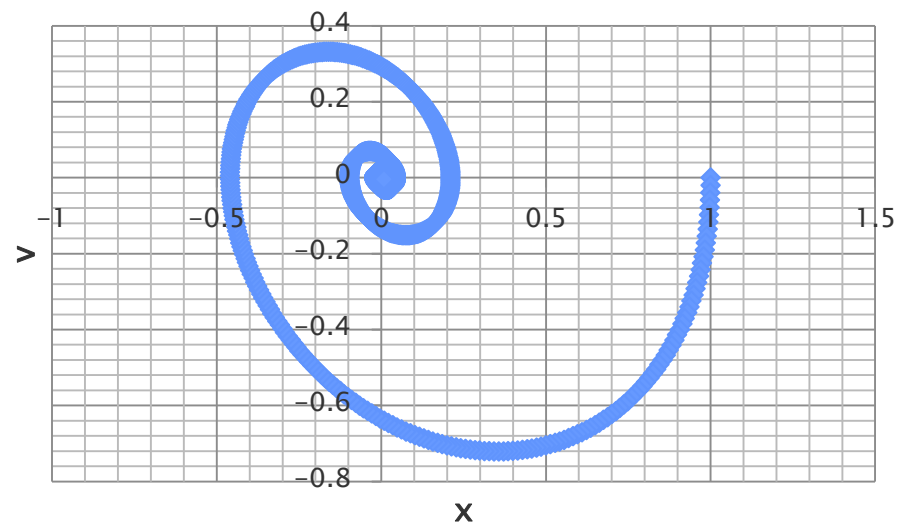
$$v_{n+1} = v_n - (\hat{f} v_n + x_n) \Delta t$$

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

$$\frac{d^2x}{dt^2} + f \frac{dx}{dt} + 1 = 0$$

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。