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

奥薗　透

コロイド・高分子物性学

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

$$x_{n+1} = x_n + \xi_n$$
$$y_{n+1} = y_n + \zeta_n \qquad (n = 0, 1, 2, \ldots)$$

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

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

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

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

データの作成

- ブラウン粒子の位置 (x_n, y_n) ($n = 0, 1, \ldots, N$)を生成し、いくつかの軌跡のサンプルを作る
- 各サンプルごとに2乗変位 $r_n^2 = x_n^2 + y_n^2$ を計算する

	Sample 1			Sample 2		
n	x1	y1	r1^2	x2	y2	r2^2
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			

N は1000程度、サンプル数は10程度

データの解析

- 軌跡のサンプルに対して平均して平均2乗変位を計算する

$$\langle r_n^2 \rangle = \frac{1}{M}[(x_n^2 + y_n^2)_1 + (x_n^2 + y_n^2)_2 + \cdots + (x_n^2 + y_n^2)_M]$$

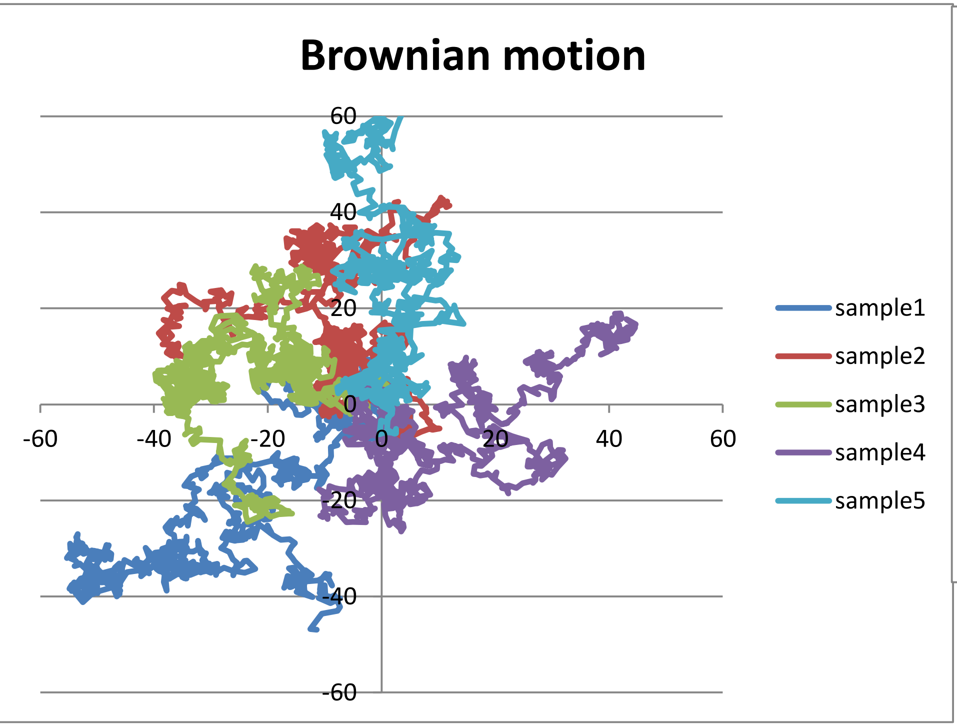
- 平均2乗変位を時刻 $t_n = n\Delta t$ に対してプロットし、それに対する近似直線の傾きから拡散係数を求める
  - $\Delta t = 1$ とすれば、

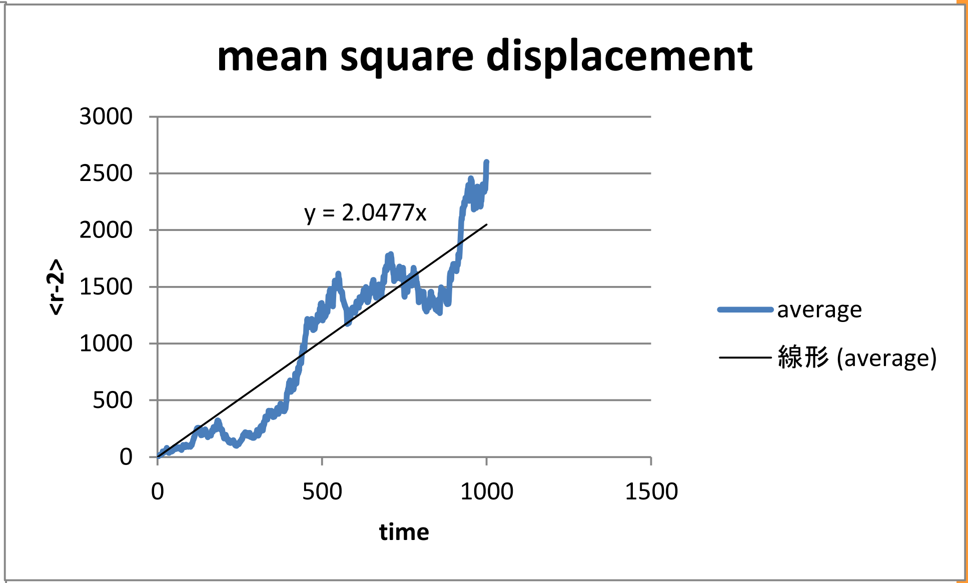
$$D = \frac{\langle r_n^2 \rangle}{4n} = \frac{\text{(slope of the fitting line)}}{4}$$

グラフの作成

- ブラウン粒子の軌跡を描く
- 平均2乗変位と近似直線のグラフを描き拡散係数を求める

グラフツール/レイアウト/近似曲線 から近似直線が描ける





$$D = \frac{2.0477}{4} = 0.51193$$

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
  - データの長さ（N）、サンプル数（M）、使用した乱数の生成方法を明記