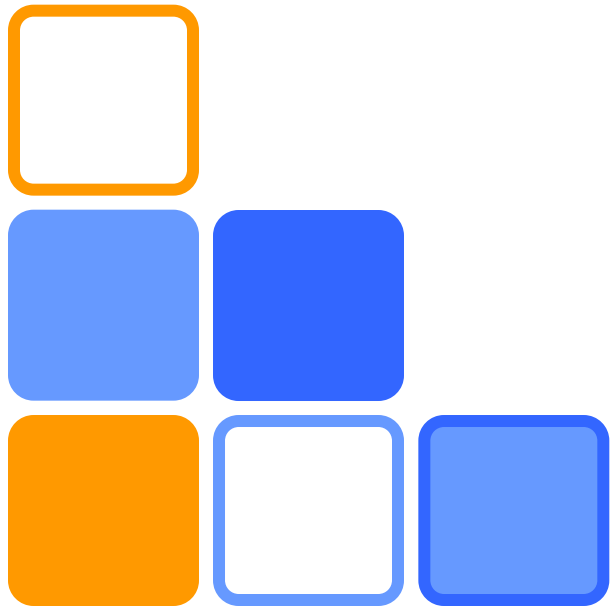


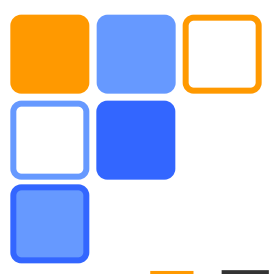
薬学情報処理演習 第3回

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



ブラウン運動



□ コロイド粒子(微粒子)の乱雑な運動

– 多数の水分子の衝突の結果

□ 2次元のモデル

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

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

$$\langle \xi_n \xi_m \rangle = \langle \zeta_n \zeta_m \rangle = \begin{cases} \sigma^2 & (n = m) \\ 0 & (n \neq m) \end{cases}$$

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

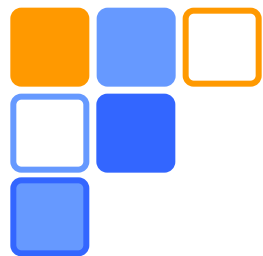


データの作成

- ブラウン粒子の位置 (x_n, y_n) ($n = 0, 1, \dots, N$) 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(サンプル数: M)に対して平均し、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、

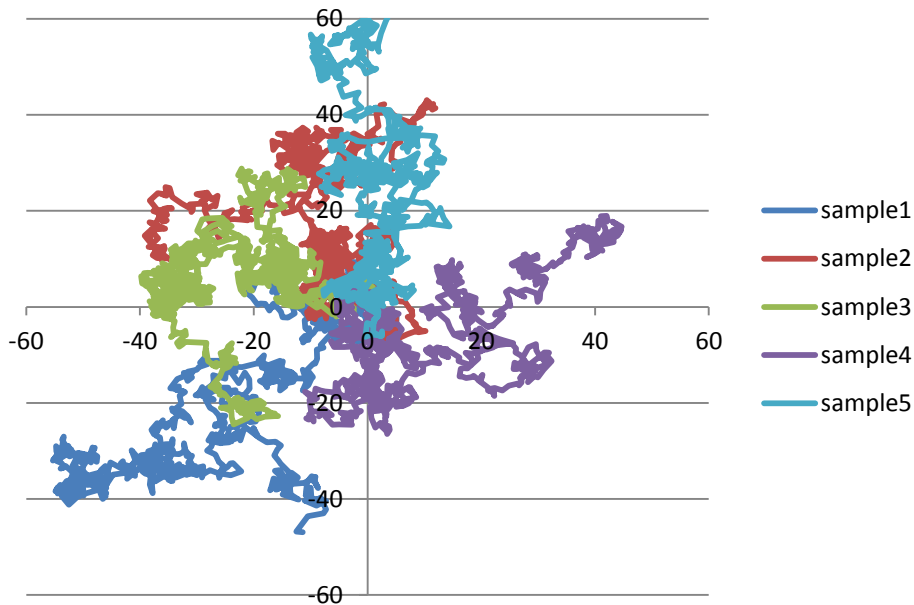
$$D = \frac{\langle r_n^2 \rangle}{4n} = \frac{(\text{slope of the fitting line})}{4}$$

グラフの作成

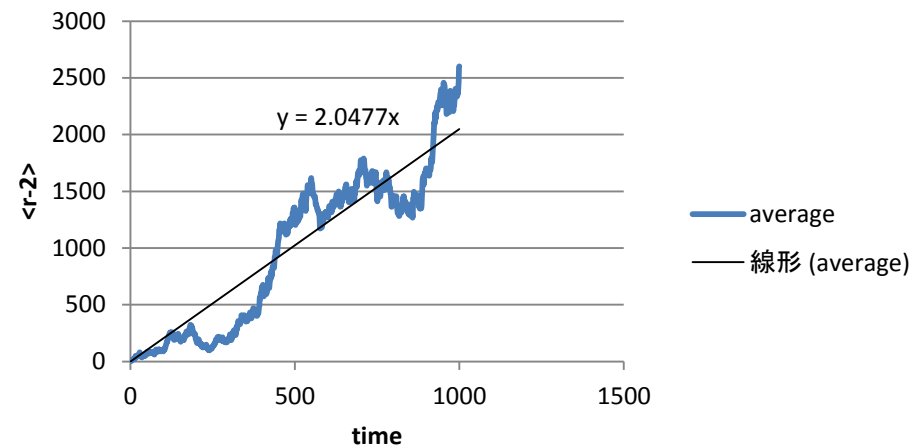
- ブラウン粒子の軌跡を描く
- 平均2乗変位と近似直線のグラフを描き拡散係数を求める

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

Brownian motion



mean square displacement



拡散係数: $D = \frac{2.0477}{4} = 0.51193$



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