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









□ ブラウン粒子の位置 (x_n, y_n)(n = 0,1,...,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



Nは1000程度、サンプル数は10程度



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

- □ 平均2乗変位を時刻 t_n = n∆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
 - $\Delta t = 1 \ \text{Etat}$

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



□ 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





□ 演習課題をレポートとして<u>A4用紙1枚</u>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



- エクセルで少し複雑な計算をしたい場合には、
 Visual Basic for Applications (VBA)が利用
 できる。
- □開発タブを表示して、マクロやVBAに関する機能 を利用可能にする。
 - Officeボタン/Excelのオプション/基本設定/[開発]タ ブをリボンに表示するにチェックを入れOKをクリック
- □ 開発タブ/Visual Basic をクリックすると Visual Basic Editor (VBE) が起動し、VBAプログラムの編集が可能になる。



Excel で使う 0 1 =B2+randnorm()



□ 2つの一様乱数(x₁, x₂)から次のような変数変換 により2つの正規乱数(y₁, y₂)が得られる。

$$y_1 = \sqrt{-2 \ln x_1} \cos 2\pi x_2$$

 $y_2 = \sqrt{-2 \ln x_1} \sin 2\pi x_2$

□ (v_1, v_2) を単位円の内部からランダムに選んだ点 とし、 $x_1 \rightarrow R^2 = v_1^2 + v_2^2$ 、 $\cos 2\pi x_2 \rightarrow v_1/\sqrt{R^2}$ 、 $\sin 2\pi x_2 \rightarrow v_2/\sqrt{R^2}$ とすることにより、次式を得る (Box-Muller 法)

$$y_1 = \sqrt{-2 \ln R^2 / R^2} v_1$$

$$y_2 = \sqrt{-2 \ln R^2 / R^2} v_2$$



参考図書:

W.H. Press, S.A. Teukolsky,
W.T. Vetterling, B.P. Flannery,
"Numerical Recipes in FORTRAN,"
2nd ed. (Cambridge University Press,
New York, 1992)

Function randnorm() As Double Dim v1 As Double Dim v2 As Double Dim R2 As Double Dim fac As Double Static sw As Integer Static vsave As Double If sw = 0 Then Do v1 = 2# * Rnd() - 1#v2 = 2# * Rnd() - 1#R2 = v1 * v1 + v2 * v2Loop Until R2 < 1# And R2 > 0fac = Sqr(-2# * Log(R2) / R2)vsave = v1 * facrandnorm = $v^2 * fac$ sw = 1Else randnorm = vsave sw = 0End If

End Function

ブラウン運動に関する入門書

 □ 江沢 洋「だれが原子をみたか」岩波現代文庫 (岩波書店、2013)

 □ 米沢富美子「ブラウン運動」物理学One Point 27(共立出版、1986)