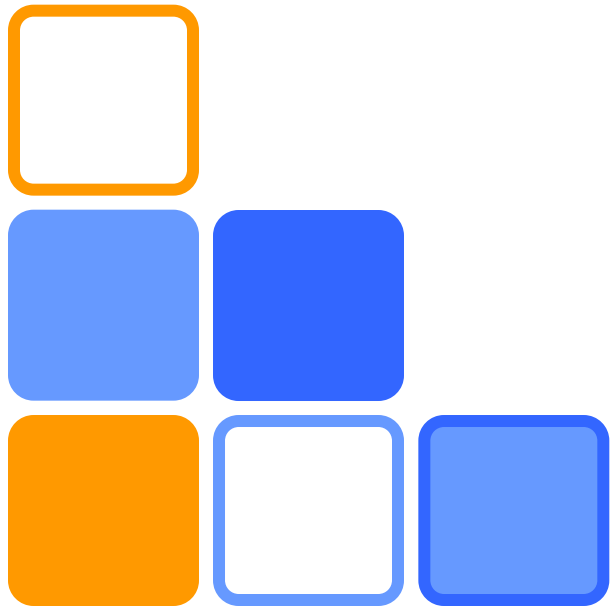


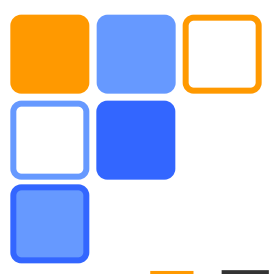
薬学情報処理演習 第3回

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

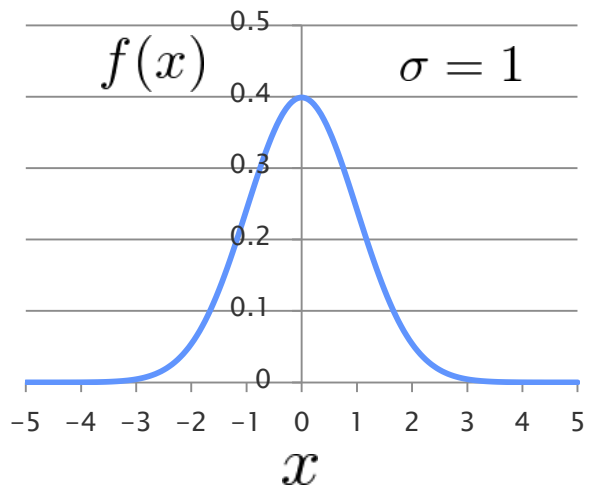
$$\begin{aligned} \langle x_n^2 + y_n^2 \rangle &= \langle (\xi_0 + \xi_1 + \dots + \xi_{n-1})^2 + (\zeta_0 + \zeta_1 + \dots + \zeta_{n-1})^2 \rangle \\ &= \langle \xi_0^2 \rangle + \langle \xi_1^2 \rangle + \dots + \langle \xi_{n-1}^2 \rangle + \langle \zeta_0^2 \rangle + \langle \zeta_1^2 \rangle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

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

“ランダムな変位”？

- 実験的に測定される量には“ばらつき”がある。
ばらつき＝平均値からのずれは以下のガウス分布に従うことが多い。なぜか？

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \quad (\sigma^2 : \text{分散})$$



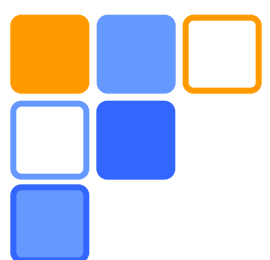
中心極限定理

n 個の独立な確率変数 u_i (分散 s_i^2 平均値 0) からなる確率変数

$$x_n = (u_1 + u_2 + \cdots + u_n) / \sqrt{\sigma_n^2} \quad \sigma_n^2 = s_1^2 + s_2^2 + \cdots + s_n^2$$

は、 $n \rightarrow \infty$ で分散 1, 平均値 0 の正規分布に従う。

- ばらつき＝多数の確率的事象の和
- (ξ_n, ζ_n) : 正規分布 (ガウス分布) に従う。



疑似乱数の生成

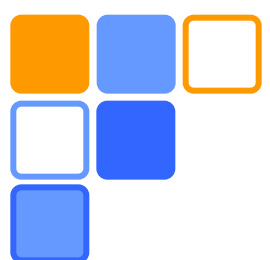
- コンピュータ上でランダムな数(乱数)を次々に生成し、ランダムなデータを作ることができる。エクセルでは RAND() という関数を用意されている。
- RAND()で生成される乱数は一様分布関数

$$f(x) = 1 \quad (0 \leq x < 1)$$

に従い、平均と分散は、

$$\bar{x} = \int_0^1 x f(x) dx = \frac{1}{2} \quad \sigma^2 = \int_0^1 (x - \bar{x})^2 f(x) dx = \frac{1}{12}$$

となるので、平均0の一様乱数(RAND()-0.5)を12個足し合わせたものは、近似的に、平均0分散1の正規分布に従う乱数(正規乱数)となっている。



モデル計算における乱数

- 平均0、分散1の分布をもつランダムな変位(ξ_n, ζ_n)を以下のいずれかの方法により生成。
- 正規乱数を用いる(一様乱数を正規乱数に変換)
 - RAND()を12回足して6を引く。
$$x_{n+1} = x_n + \text{RAND}() + \text{RAND}() + \dots + \text{RAND}() - 6.0$$
 - データ分析ツールを使って正規乱数を生成することもできる。
([ファイル/オプション/アドイン](#) から [分析ツール](#) をアクティブに)
[データ/データ分析/乱数発生](#) により正規乱数を生成する。
- 一様乱数を用いる
 - RAND()を用いて平均0、分散1の一様乱数を生成する。
$$x_{n+1} = x_n + \text{SQRT}(12) * (\text{RAND}() - 0.5)$$



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、

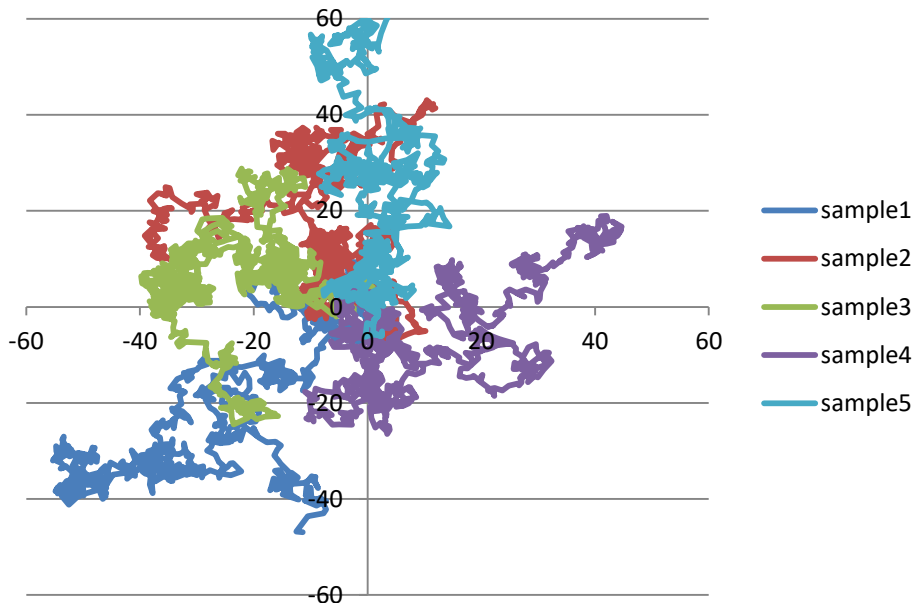
$$D = \frac{\langle r_n^2 \rangle}{4n} = \frac{(\text{slope of the fitting line})}{4}$$

グラフの作成

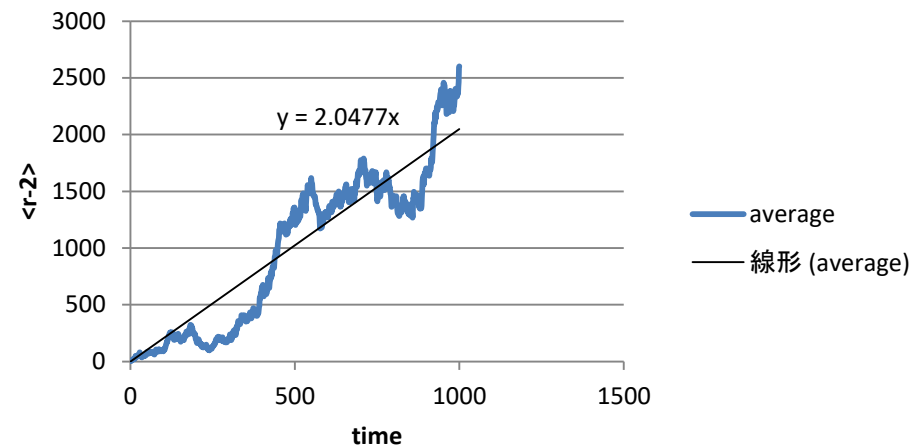
- ブラウン粒子の軌跡を描く
- 平均2乗変位と近似直線のグラフを描き拡散係数を求める

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

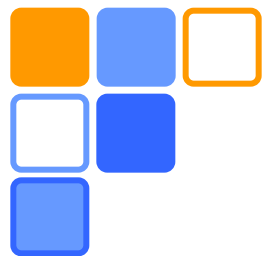
Brownian motion



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を描く
 - 平均2乗変位のグラフを描き、拡散係数を計算する。
 - 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(乱数は正規乱数。時間的に余裕のある人は一様乱数も試してみる)



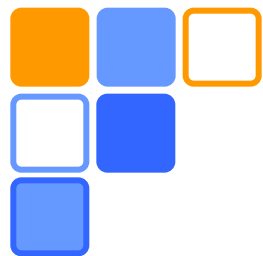
(参考) 正規乱数を生成する関数

- 2つの一様乱数(x_1, x_2)から次のような変数変換により2つの正規乱数(y_1, y_2)が得られる。

$$\begin{aligned}y_1 &= \sqrt{-2 \ln x_1} \cos 2\pi x_2 \\y_2 &= \sqrt{-2 \ln x_1} \sin 2\pi x_2\end{aligned}$$

- (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)

$$\begin{aligned}y_1 &= \sqrt{-2 \ln R^2 / R^2} v_1 \\y_2 &= \sqrt{-2 \ln R^2 / R^2} v_2\end{aligned}$$



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)