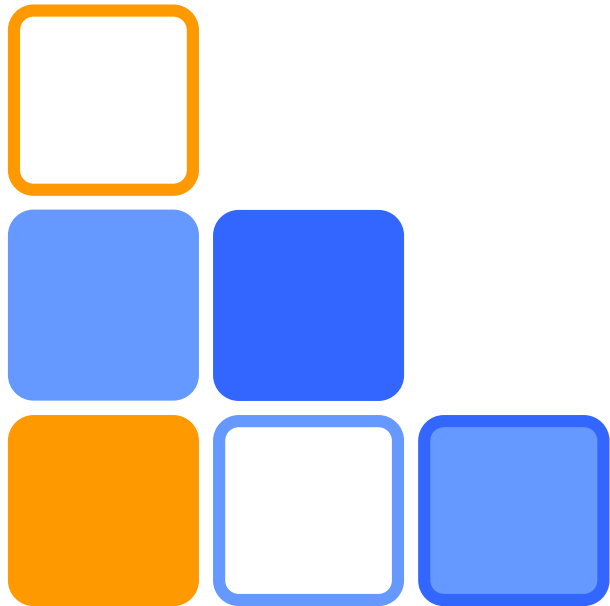


薬学情報処理演習 第3回

ブラウン運動の シミュレーション



奥園 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

□ 1次元のモデル

$$x_{n+1} = x_n + \xi_n \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

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

時刻 $t_n = n\Delta t$ での

粒子の位置: x_n

粒子のランダムな変位: ξ_n

$\langle \cdot \rangle$: 平均を表す

□ 位置の平均値 $\langle x_n \rangle = 0$

□ 平均2乗変位と拡散係数

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

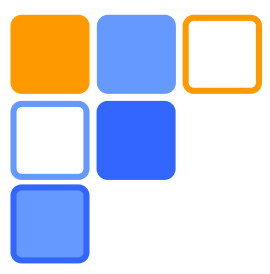
拡散係数:

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



$$x_{n+1} = x_n + \sqrt{2D\Delta t} \mathcal{N}(0, 1)$$

$\mathcal{N}(0, 1)$: 平均0, 分散1の正規乱数



ポテンシャル中のブラウン粒子

- ポテンシャル $U(x)$ による力を受けながらブラウン運動する質量 m の粒子の運動方程式

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

$$m \frac{dv}{dt} = -\gamma v - \frac{dU}{dx} + \xi \quad \gamma: \text{摩擦係数}$$

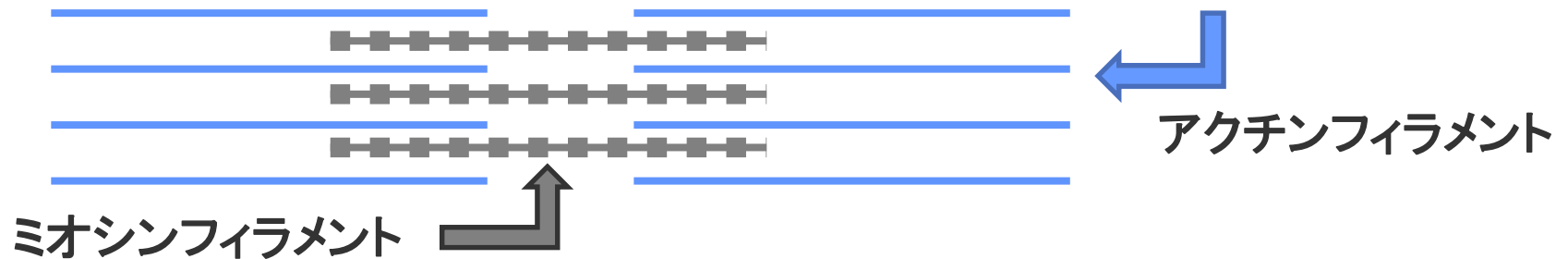
(質量×加速度) = (摩擦力) + (ポテンシャル力) + (熱揺動力)

- 加速度が無視できるとき

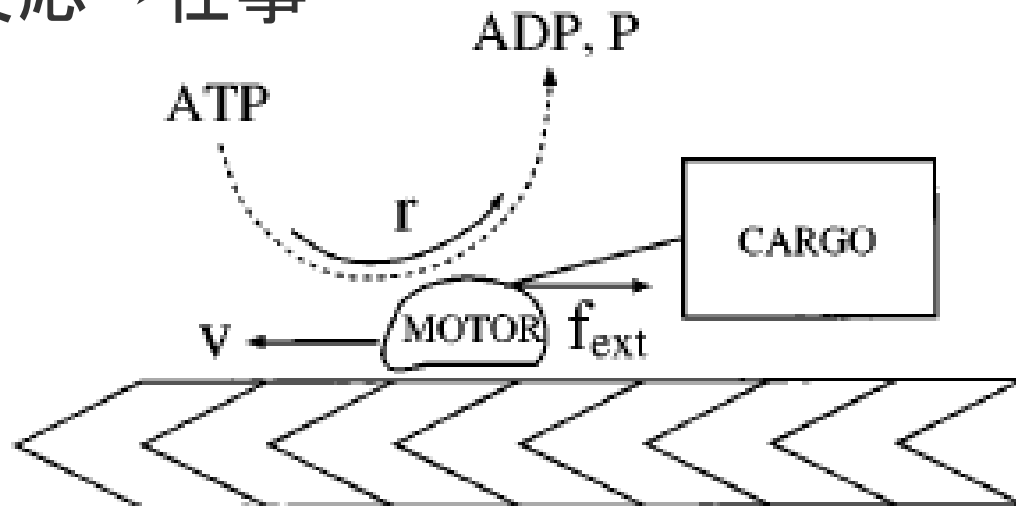
$$\gamma \frac{dx}{dt} = -\frac{dU}{dx} + \xi$$

分子モーター

□ 筋肉の収縮・弛緩



□ 化学反応→仕事

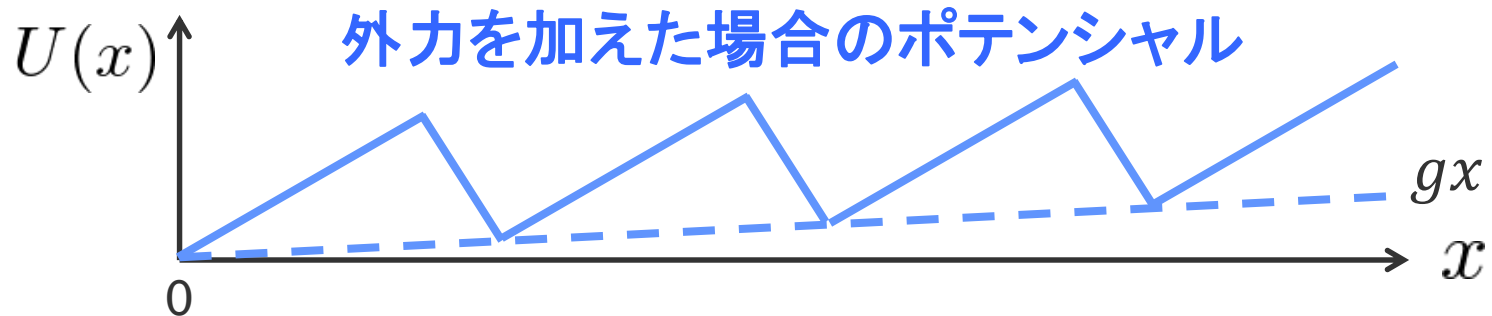
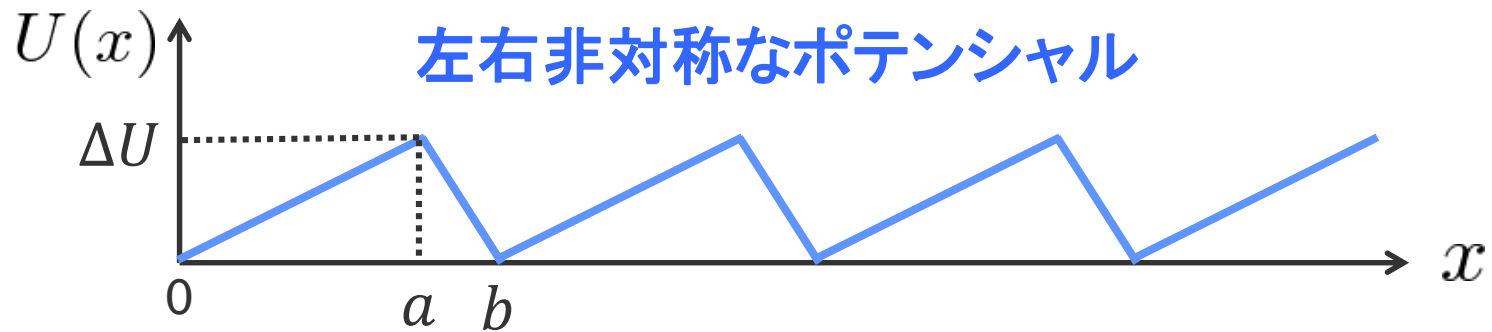


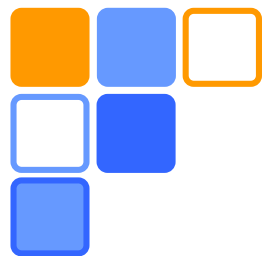
確率的爪車 (ratchet) モデル

□ ポテンシャル中のブラウン運動

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= -\frac{d}{dx}U(x) + z \\ \tau \frac{dz}{dt} &= -z + \xi\end{aligned}$$

$$\longrightarrow \langle z(t)z(0) \rangle = \frac{D}{\tau} e^{-|t|/\tau}$$





Ratchet モデルを数値的に解く

□ 数値スキーム

$$x_{n+1} = x_n + \Delta t [f(x_n) + z_n]$$

$$z_{n+1} = z_n - (\Delta t z_n - \sqrt{2D\Delta t} \mathcal{N}(0, 1)) / \tau$$

$$f(x) = \begin{cases} -\Delta U / a - g & (\text{mod}(x, b) < a) \\ \Delta U / (b - a) - g & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

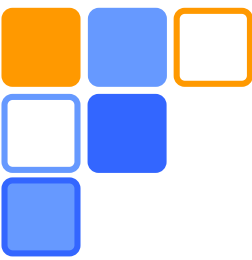
入力例

Brownian ratchet			
Parameters			
D =	1		
tau =	10		
dU =	1		
a =	9		
b =	10		
g =	0.05		
f0 =	-0.16111		
f1 =	0.95		
dt =	1		
ddt =	1.414214		
t	ξ	z	x
0	0	0	0
1	1.7009	0.17009	-0.16111
2	0.498987	0.20298	0.958979
3	3.444318	0.527114	1.000847

$$(\xi) = \$B\$12 * (RAND() + RAND() + \dots - 6)$$

$$(z) = C14 - (\$B\$11 * C14 - B15) / \$B\$4$$

$$(x) = D14 + \$B\$11 * (\\ \text{IF}(\text{MOD}(D14, \$B\$7) \\ < \$B\$6, \$B\$9, \$B\$10) \\ + C14)$$

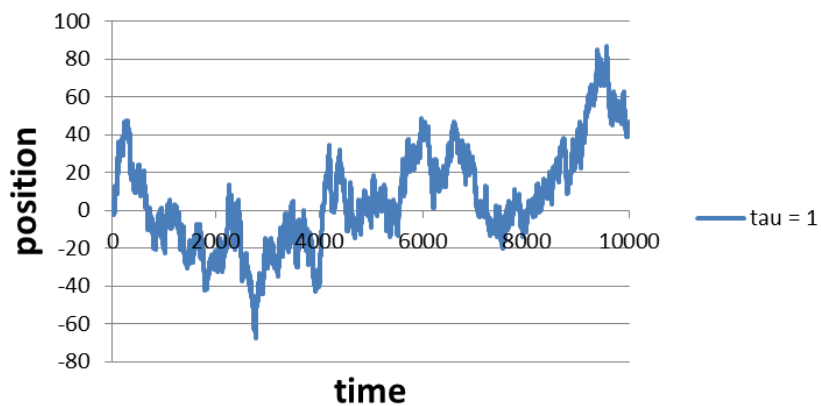


演習課題

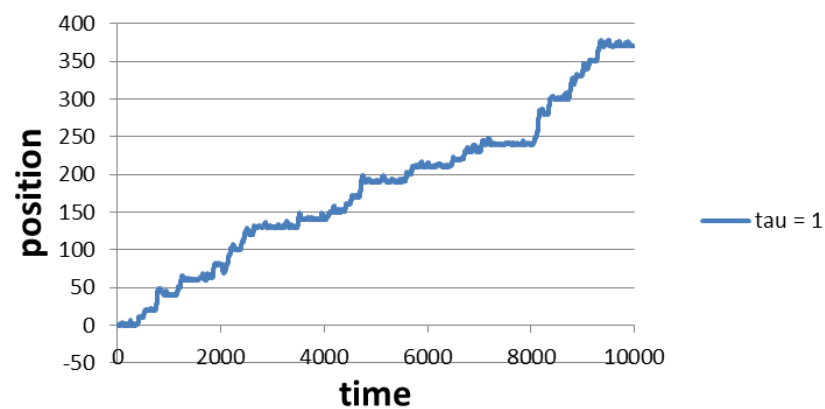
- Ratchet モデルの数値シミュレーションを行う。
 - 外力のない系 ($g = 0$) で (平均的に) 一方向に進む / 進まないパラメータを見つける。
 - 外力のある系 ($g \neq 0$) で同様のことを行う。

結果(例)

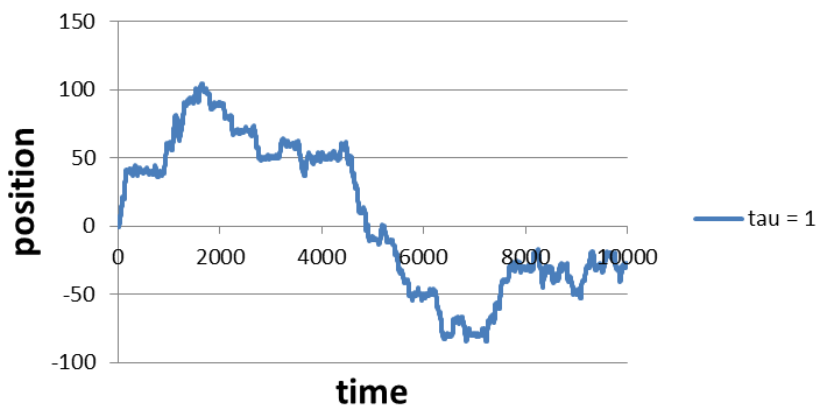
$\tau = 1, a = 9$



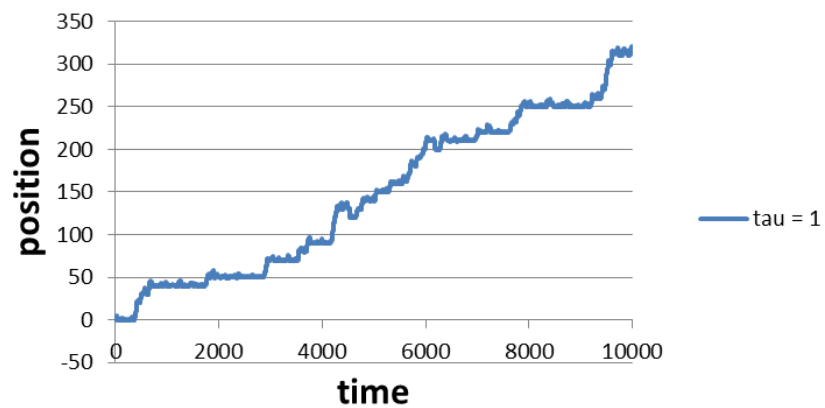
$\tau = 10, a = 9$

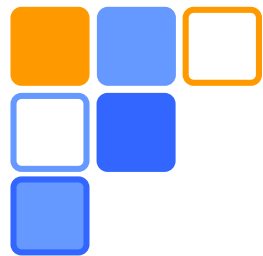


$\tau = 10, a = 5$



$\tau = 10, a = 9, g=0.05$





参考文献

- 太田隆夫「非平衡系の物理学」(裳華房、2000)
- 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)