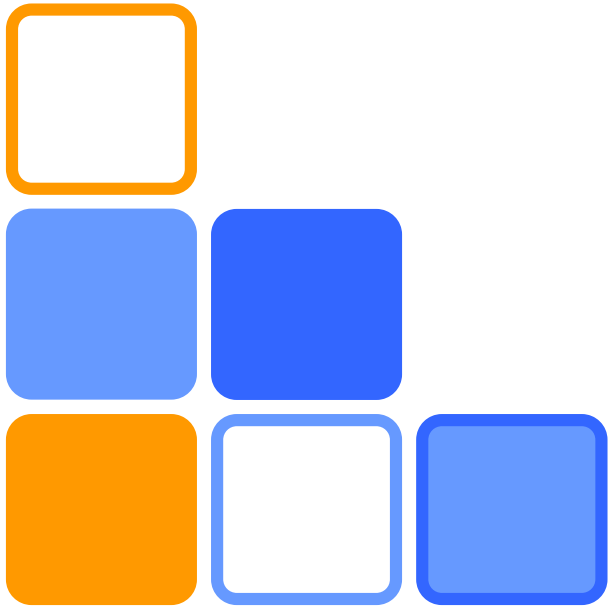


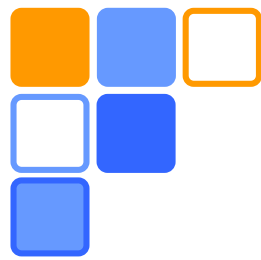
薬学情報処理演習 第7回

確率的シミュレーション 高分子のランダムウォークモデル



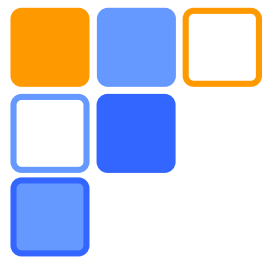
奥菌 透

コロイド・高分子物性学



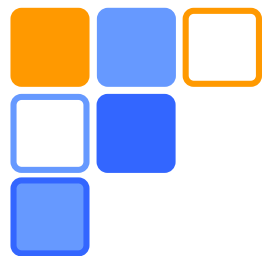
溶媒中の孤立した高分子

- 高分子: モノマーと呼ばれる構成単位 ($-\text{CH}_2-$ 等) が線状につながったもの
- 1つの高分子は $10^2 - 10^6$ 個のモノマーから成る
 - 1つの高分子を構成する全モノマー数を重合度という
- 長くてくねくね曲がりやすい
- 生体中にたくさんある。DNAも高分子である
- 高分子でできた物質は低分子の物質には見られない特異な性質を示す
- 溶媒中で高分子はどのような形態をとっているのだろうか？



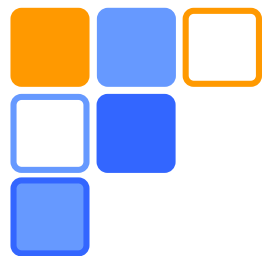
格子上的ランダムウォークモデル

- N個のモノマーを規則格子上に以下のような手順で配置する
- ある格子上のセルに最初のモノマーを置く
- 次のモノマーを、隣接するセルの中からランダムに選んだセルに置く
 - このとき選んだセルが既に他のモノマーに占有されていてもよい(モノマーの重なりを許す)
 - モノマーの重なりを許さない配置の方法は Self Avoiding Walk (SAW) と呼ばれる
- 上の操作を繰り返して1つの高分子鎖の配置を得る
- このようにして得られた高分子鎖は理想鎖と呼ばれる



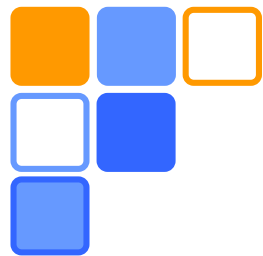
準備

- VBA(Visual Basic Applications) を利用する
- ファイル→オプション→リボンのユーザー設定で「開発」をチェック
- 開発タブからVBEを起動
- 「VBAProject(Book1)」を選択し、「挿入」→「標準モジュール」をクリック
- コードウィンドウで「Sub ○○○」(○○○はマクロ名)と入力しEnterキーを押し、コード入力を開始する



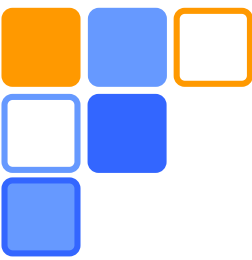
計算手順

- セルの値Cells(i,j).Value はモノマーの個数を表すことにする
- 最初にモノマーを置くセルを1とし、その他はすべて0にする
- 乱数を発生させ次のモノマーを置くセルを決める
 - 関数 Rnd を用いると $[0,1)$ の範囲の乱数(r とする)が返ってくる
 - $0 \leq r < 0.25$ のとき $i \leftarrow i+1$
 - $0.25 \leq r < 0.5$ のとき $j \leftarrow j+1$
 - $0.5 \leq r < 0.75$ のとき $i \leftarrow i-1$
 - $0.75 \leq r < 1$ のとき $j \leftarrow j-1$
- Cells(i,j) の値を1増やす
- 上の2つの操作を繰り返す



参考

```
Sub Polymer()  
    Dim i, j, n As Integer  
  
    Const num = 100 '重合度  
    Cells.Clear  
  
    i = 50 '最初のモノマーの位置(行)  
    j = 50 '最初のモノマーの位置(列)  
    Cells(i, j).Value = 1  
    Sheets("sheet2").Activate  
    Range("A1") = "x"  
    Range("B1") = "y"  
  
    For n = 1 To num  
        r = Rnd '乱数発生  
        If r < 0.25 Then  
            i = i + 1  
        ElseIf r < 0.5 Then  
            j = j + 1  
        ElseIf r < 0.75 Then  
            i = i - 1  
        Else  
            j = j - 1  
        End If  
        Sheets("sheet1").Activate  
        Cells(j, i).Select  
        Cells(j, i).Value = Cells(j, i).Value + 1  
        Sheets("sheet2").Activate  
        Cells(n + 1, 1).Value = i  
        Cells(n + 1, 2).Value = j  
    Next n  
  
End Sub
```



演習課題

- ランダムウォークのプログラムを完成させる
- 高分子の重心位置 R 、慣性半径 R_g を計算する

$$R = \frac{1}{N} \sum_n^N \mathbf{r}_n \quad R_g^2 = \frac{1}{N} \sum_n^N |\mathbf{r}_n - R|^2$$

- 上記の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