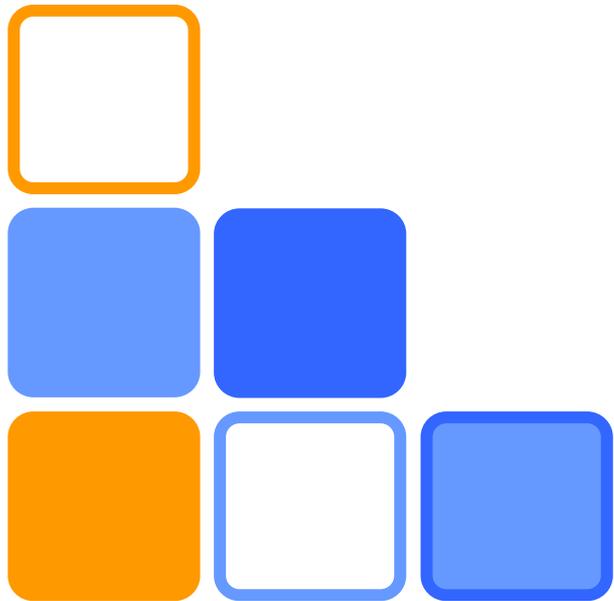


薬学情報処理演習 第3回

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

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

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

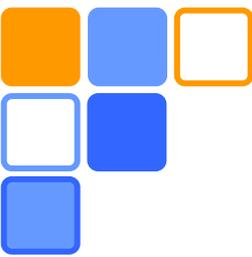
拡散係数:

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

➡ $x_{n+1} = x_n + \sqrt{2D\Delta t} \mathcal{N}(0, 1)$ $\langle (aX)^2 \rangle = a^2 \langle X^2 \rangle$ ($\langle X \rangle = 0, \langle X^2 \rangle = 1$)

$\mathcal{N}(0, 1)$: 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

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

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

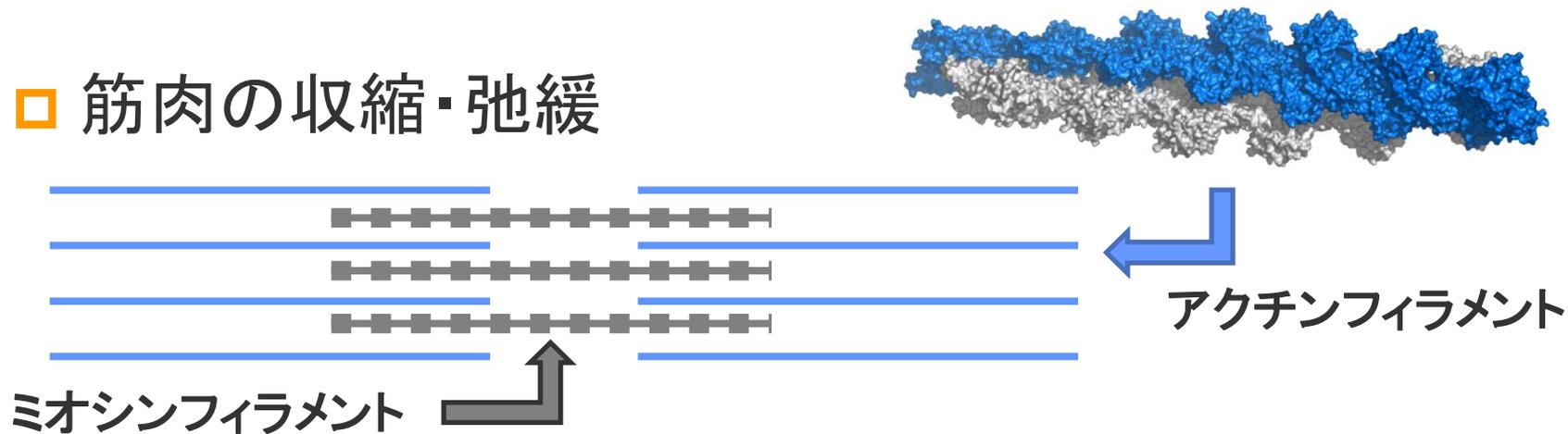
(質量×加速度) = (摩擦力) + (ポテンシャル力) + (熱揺動力)

- 加速度が無視できるとき

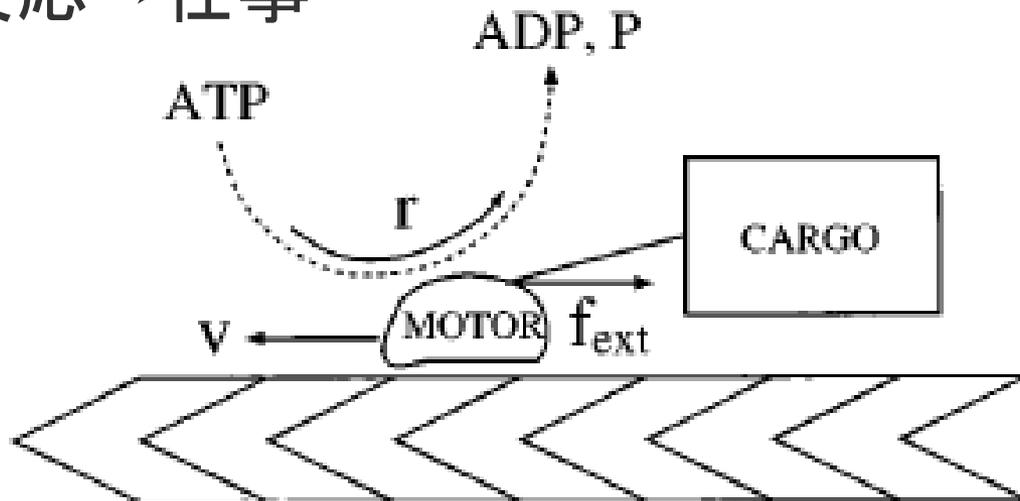
$$\gamma \frac{dx}{dt} = -\frac{dU}{dx} + \xi$$

分子モーター

□ 筋肉の収縮・弛緩



□ 化学反応→仕事

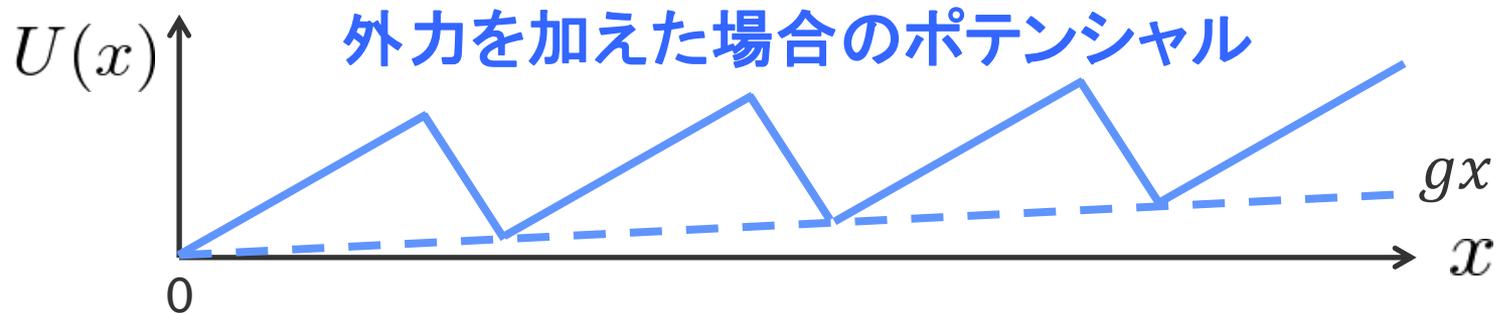
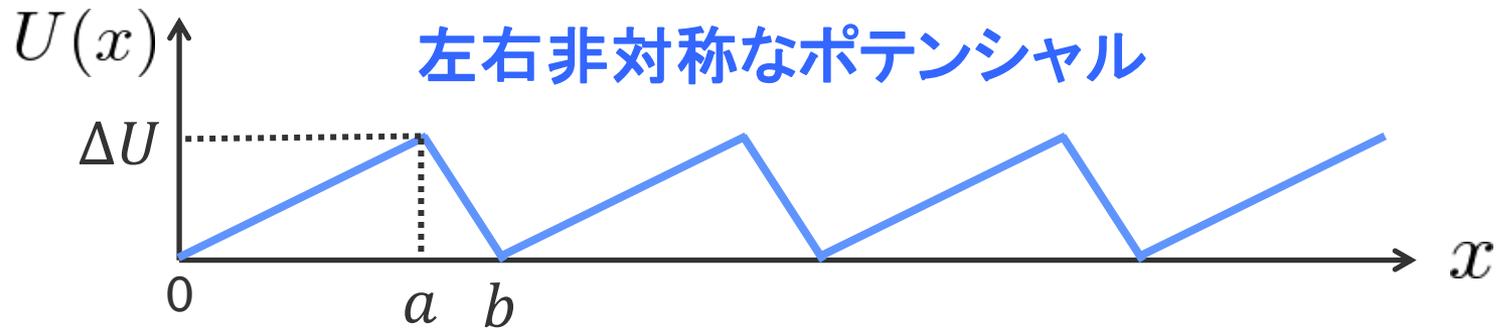


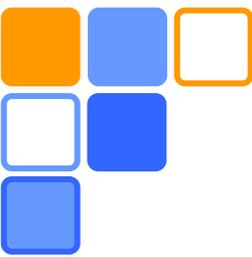
確率的爪車 (ratchet) モデル

□ ポテンシャル中のブラウン運動

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

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





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

A B C D

1	Brownian ratchet				
	Parameters				
	D =	1			
	tau =	10			
5	dU =	1			
	a =	9			
	b =	10			
	g =	0.05			
	f0 =	-0.16111			
10	f1 =	0.95			
	dt =	1			
	ddt =	1.414214			
	t	ξ	z	x	
		0	0	0	
15		1	1.7009	0.17009	-0.16111
		2	0.498987	0.20298	0.958979
		3	3.444318	0.527114	1.000847

$$(f_0) = -B5 / B6 - B8$$

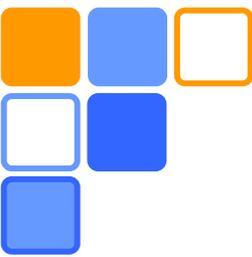
$$(f_1) = B5 / (B7 - B6) - B8$$

$$(ddt) = \text{SQRT}(2 * B3 * B11)$$

$$(\xi) = \$B\$12 * \text{NORM.S.INV}(\text{RAND}())$$

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

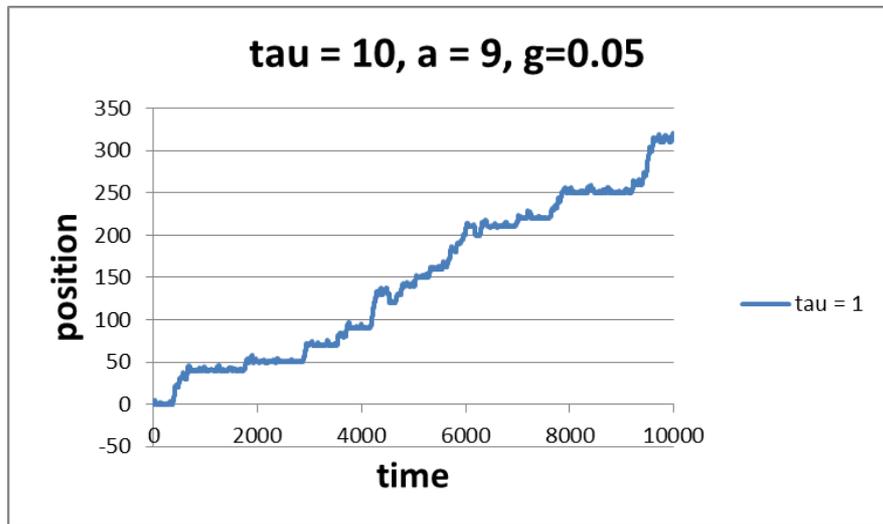
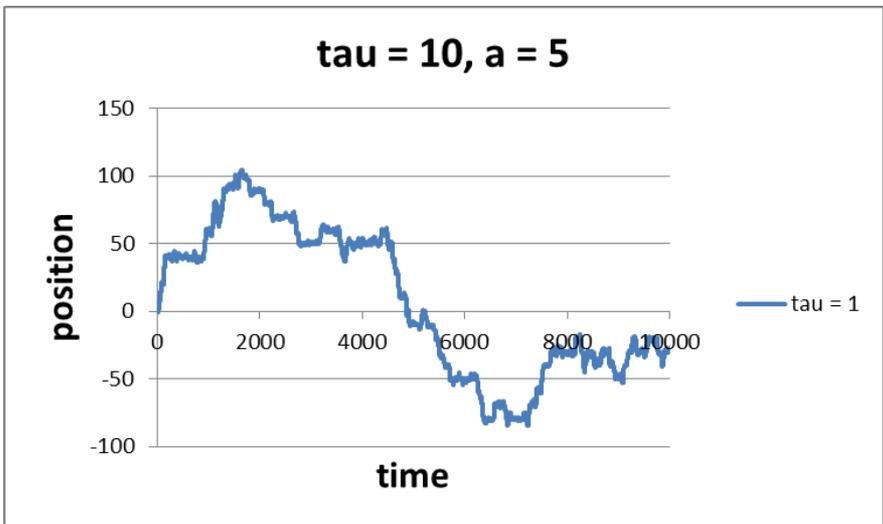
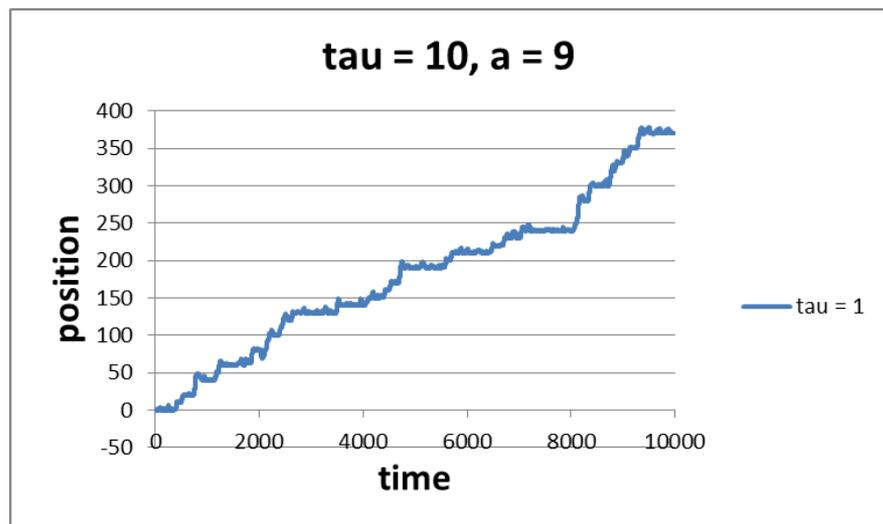
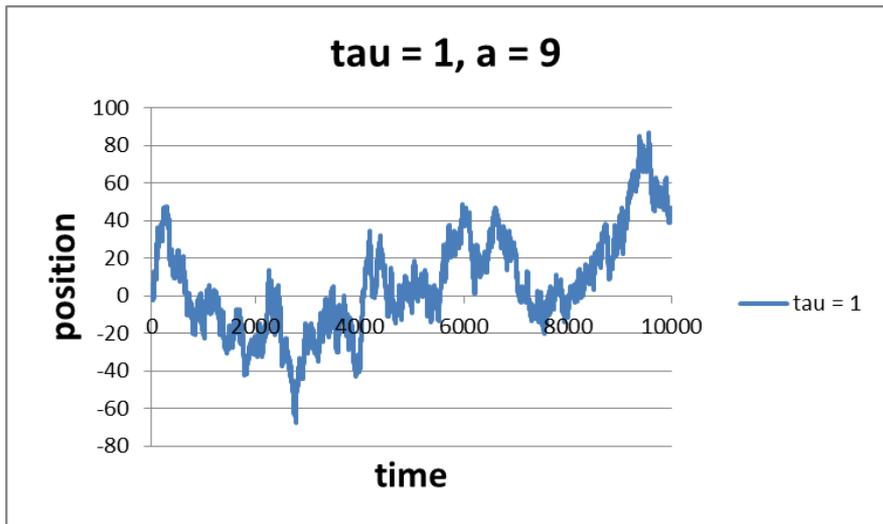
$$(x) = D14 + \$B\$11 * (\text{IF}(\text{MOD}(D14, \$B\$7) < \$B\$6, \$B\$9, \$B\$10) + C14)$$



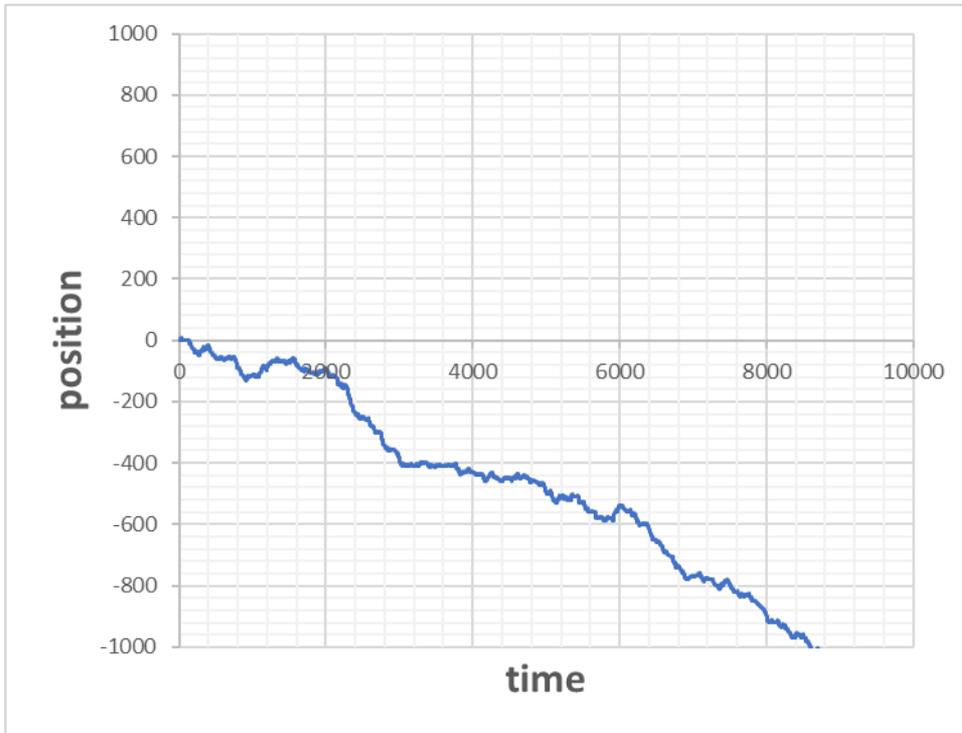
演習課題

- 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。
- (発展) パラメータ (例えば g, τ) を変えて、 (x, t) のグラフが右上がり (+1)、ほぼ平ら (0)、右下がり (-1) になるか調べ (それぞれのパラメータに対し F9 キーにより何度か再計算した結果から判断する)、 (g, τ) 平面上に記す。

結果(例)



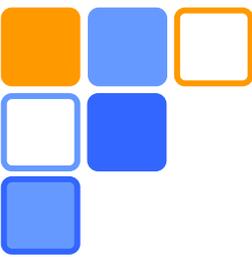
結果(発展)



(g, tau)

10	1	1	1	0
9	1	1	1	0
8	1	1	0	-1
7	1	1	0	-1
6	1	0	-1	-1
5	1	0	-1	-1
4	0	0	-1	-1
3	0	-1	-1	-1
2	0	-1	-1	-1
1	0	-1	-1	-1
	0	0.05	0.1	0.15

($D=1$, $dU=1$, $a=9$, $b=10$, $dt=1$)



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)