

情報科学概論 レポート課題

問題 1. 数値シミュレーションによるブラウン運動の解析

目的

本課題では、ランジュバン方程式に基づくブラウン運動の数値シミュレーションを行い、確率過程の時間発展を計算機で扱い理解しよう。特に、解析的に解くことが難しい確率微分方程式について、数値計算とデータ解析を通してその物理的性質を調べよう。

物理モデル

質量 m の粒子が水の中を運動する様子を考える。粒子には周囲の水分子が衝突を繰り返し、それにより力を得る。一方で水中を運動する際には水からの抵抗を受け、粒子の速度 $\mathbf{v}(t)$ は次のランジュバン方程式に従うものとする：

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\gamma \mathbf{v} + \boldsymbol{\xi}(t), \quad (1)$$

ここで γ は摩擦係数であり、 $\boldsymbol{\xi}(t)$ はランダムな力（熱雑音）を表す。位置 $\mathbf{r}(t)$ から速度 $\mathbf{v}(t)$ は

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v} \quad (2)$$

によって定義される。ここで温度 T の熱平衡状態を仮定すると、 $\boldsymbol{\eta}$ を平均が 0 で分散 1 を持つ正規乱数として、 $\boldsymbol{\xi}(t)$ は

$$\int_t^{t+\Delta t} \boldsymbol{\xi}(t) dt = \sqrt{2\gamma k_B T \Delta t} \boldsymbol{\eta} \quad (3)$$

を満たす。本課題では粒子の運動を 2 次元空間で扱う。

数値計算法

時間刻みを Δt とし、オイラー法を用いて時間発展を計算する。時刻 $t_n = n\Delta t$ における速度と位置を $\mathbf{v}_n, \mathbf{r}_n$ とすると、

$$\mathbf{v}_{n+1} = \mathbf{v}_n - \frac{\gamma}{m} \mathbf{v}_n \Delta t + \frac{\sqrt{2\gamma k_B T}}{m} \sqrt{\Delta t} \boldsymbol{\eta}_n, \quad (4)$$

$$\mathbf{r}_{n+1} = \mathbf{r}_n + \mathbf{v}_n \Delta t, \quad (5)$$

と更新する。ここで

- $\boldsymbol{\eta}_n = (\eta_{n,x}, \eta_{n,y})$ は各成分が独立な平均 0 で分散 1 の正規乱数、 k_B はボルツマン定数である。
- 正規乱数の生成には以下の Box-Muller 法を用い、コードは与えられたものを使用してよい。

```
/* Generate a random number following a normal distribution by the Box-
Muller method */
double normal_rand() {
    double u1, u2;
    u1 = (rand() + 1.0) / (RAND_MAX + 2.0);
    u2 = (rand() + 1.0) / (RAND_MAX + 2.0);
    return sqrt(-2.0 * log(u1)) * cos(2.0 * M_PI * u2);
}
```

課題

(1) 正規分布乱数の準備

正規乱数を 50 回、100 回、1000 回発生させ、それぞれファイル (例では normal_rand.dat) に書き出して、Python でその分布を 3 つのヒストグラムで表示せよ。Python でのヒストグラムの描画は、matplotlib を用いて以下のように、20 個の階級に分けて表示せよ。

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
data = np.loadtxt("normal_rand.dat")
plt.hist(data, bins=20)
plt.show()
```

(2) シミュレーションの実装

上記のオイラー法の更新式に基づき、C 言語を用いて粒子の運動を計算し、時間 t と位置 (x, y) 、速度 (v_x, v_y) をファイルに出力するプログラムを作成せよ。以下の点に注意すること：

- 初期条件として $\mathbf{r}_0 = (0, 0)$ 、 $\mathbf{v}_0 = (0, 0)$ を用いる。
- 十分長い時間（1000 ステップ）まで、時間の刻みは 0.01 として計算を行い、粒子の軌跡を記録する。
- γ, k_B, T, m は後で変えられるように変数もしくは定数として実装し、まずはすべて 1 を代入して実行する。

(3) 軌跡の可視化

プログラムを 5 回実行し、出力ファイルの名前をその都度変更、それらの結果を Python を用いて可視化せよ。

- 粒子の 2 次元軌跡をプロットすること。
- 5 回の試行結果を色を変えて重ねて表示せよ。

(4) 平均二乗変位の解析

(3) の結果から、粒子の最終的な位置は毎回異なることがわかる。平均してどの程度の距離まで移動することができるだろうか？上記のプログラムで書き出した結果を元に、粒子の平均二乗変位

$$\langle r^2(t) \rangle = \langle |\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(0)|^2 \rangle \quad (6)$$

を Python コードの中で計算し、その時間依存性を調べよ。

- 5 回行った試行に対し、それらを重ねてプロットせよ。
- さらに各時間においてこれら 5 回の平均をとったものも重ねて表示せよ。
- 図には凡例も表示して各試行と平均の違いがわかるようにせよ。
- 十分長時間で $\langle r^2(t) \rangle$ は時間に対しどのように依存するか考察せよ。

(5) 温度・質量・摩擦係数依存性

温度 T 、質量 m および摩擦係数 γ を変化させてシミュレーションを行い、拡散の速さがどのように変化するかを調べよ。

- (4) での平均二乗変位の傾きから拡散係数 D を求めよ。
(注) この数値実験は乱数を使っているので、当然毎回結果が異なる。したがって 1 回の計算結果から傾きを厳密に求めても意味がないが、多数回の試行の平均は、ある値に近づくであろう。
- T 、 m および γ を何パターンか変えて実行し、係数 D がどう変化するか調べ、それぞれについて (4) と同様の図を示せ。
- これらの結果から、 D の T 、 m および γ への依存性を考察せよ。

(6) エネルギー分布関数

粒子の運動エネルギーは水分子からの衝突を受け、常に変化している。粒子のエネルギーの分布関数を調べよう。

- ファイルに出力された速度から Python スクリプト内で粒子の運動エネルギーを計算し、ヒストグラムとして示せ。階級数は 30 程度とする。
- 温度 T を 3 通りほど変化させ、エネルギー分布関数の変化を図示せよ。どのような関数で近似されるか考察せよ。

提出物

- 各問についての説明や考察を $T_{\text{E}}X$ で記述し、図を挿入して作成したレポート (PDF 形式)
- (2) で作成した C プログラムおよび (3) (4) で使用した Python スクリプト (テキスト形式で、それぞれ拡張子は `.c`, `.py`)
- Jupyter Notebook 上で作成した Python スクリプトは、`.pynb` という拡張子のファイルとして保存されているので、第 6 回講義資料 3.3 を参考に `.py` 形式に変換する。