

# Julia 言語による Langevin 方程式の数値計算

横浜市立大学大学院

生命ナノシステム科学研究科 前期博士課程 物質システム科学専攻

大野周平

2021 年 10 月 23 日 (土) @ 第 8 回 ぶつりがく徒のつどい

## 概要

本講演では Langevin 方程式の歴史背景と数値解法について概説する。

## 第 1 部

Brown(1828), Einstein(1905), Perrin(1908), Langevin(1908) の一連の研究について簡単に紹介する。Einstein は拡散方程式, Langevin は Langevin 方程式を出発点として等価な結果を導いたが, 本来, これらの方程式の与える平均二乗変位は異なるものである。則ち両者を等価たらしめる何らかの仮定が置かれている。

## 第 2 部

確率過程の概念, Euler-Maruyama 法による種々の確率微分方程式の数値解法について, Julia 言語での実装例を交えて解説する。Julia 言語の疑似乱数には dSFMT が採用されており, 初めから良質な乱数を用いた計算が可能である。得られた数値解は Plots.jl を用いて可視化し, Fokker-Planck 方程式の解析解と比較する。

## 第 3 部

第 2 部の内容を元に, Langevin 方程式の数値計算を行う。Kitahara(1997) から平均二乗変位の式を援用し, 計算結果の評価を行う。最後に分子動力学法による拡散係数の決定に関する問題について簡単に紹介した後, 時間に余裕があれば拡散量子モンテカルロ法について紹介する。

## 主な参考文献

1. 米沢富美子『物理学 One Point - 27 ブラウン運動』(共立出版, 1986)
2. ジョン・スタチエル編, 青木薫訳『アインシュタイン論文選「奇跡の年」の 5 論文』(筑摩書房, 2011)
3. 池田信行『偶然の輝き ブラウン運動を巡る 2000 年』(岩波書店, 2018)
4. L. カラザス, S.E. シュレーブ著, 渡邊壽夫訳『ブラウン運動と確率積分』(丸善出版, 2012)
5. 堀淳一『ランジュバン方程式』(岩波書店, 2015)
6. 三井斌友, 小藤俊幸, 斉藤善弘『微分方程式による計算科学入門』(共立出版, 2004)
7. 北原和夫『岩波基礎物理シリーズ 8 非平衡系の統計力学』(岩波書店, 1997)