シミュレーション実習 期末レポート

262201018 在田 陽一

2022/07/03

問題 1

(1)

与えられた Langevin 方程式を無次元化する. 条件より $\boldsymbol{F}_B(t) = \sqrt{\frac{2k_BT\zeta}{\Delta t}}\boldsymbol{R}_G$.
また $v = \frac{a}{t_0}\tilde{v}$, $t = t_0\tilde{t}$ より

$$\begin{aligned}\frac{d\boldsymbol{v}}{dt} &= \frac{a}{t_0}\frac{d\tilde{\boldsymbol{v}}}{d\tilde{t}}\frac{d\tilde{t}}{dt} \\ &= \frac{a}{t_0^2}\frac{d\tilde{\boldsymbol{v}}}{d\tilde{t}} \end{aligned} \tag{1.1}$$

であるので, それぞれ代入すると

$$m\frac{a}{t_0^2}\dot{\tilde{\boldsymbol{v}}} = -\zeta\frac{a}{t_0}\tilde{\boldsymbol{v}} + \sqrt{\frac{2k_BT\zeta}{t_0\Delta\tilde{t}}}\boldsymbol{R}_G \tag{1.2}$$

式 (1.2) に $t_D = \frac{m}{\zeta}$, $t_B = \frac{a^2\zeta}{k_BT}$ を代入すると

$$\frac{a\zeta t_D}{t_0^2}\dot{\tilde{\boldsymbol{v}}} = -\frac{a\zeta}{t_0}\tilde{\boldsymbol{v}} + \sqrt{\frac{2a^2\zeta^2}{t_Bt_0\Delta\tilde{t}}}\boldsymbol{R}_G \tag{1.3}$$

両辺に $\frac{t_0}{\zeta a}$ をかけると

$$\frac{t_D}{t_0}\dot{\tilde{\boldsymbol{v}}} = -\tilde{\boldsymbol{v}} + \sqrt{\frac{2t_0}{t_B\Delta\tilde{t}}}\boldsymbol{R}_G \tag{1.4}$$

となり, 題意に適する.

(2)

式 (1.4) について, $t_0 = t_B$ とすると

$$\frac{t_D}{t_0}\dot{\tilde{\boldsymbol{v}}} = -\tilde{\boldsymbol{v}} + \sqrt{\frac{2}{\Delta \tilde{t}}}\boldsymbol{R}_G \tag{1.5}$$

式 (1.5) の左辺の係数について, $t_B = t_0$, $t_D = \frac{m}{\zeta}$ を代入すると

$$\begin{aligned}\frac{t_D}{t_0} &= \frac{k_B T}{a^2\zeta}\frac{m}{\zeta} \\ &= \frac{m k_B T}{a^2\zeta^2}\end{aligned} \tag{1.6}$$

であるので, これを m^* とおくと式 (1.5) は

$$m^*\dot{\tilde{\boldsymbol{v}}} = -\tilde{\boldsymbol{v}} + \sqrt{\frac{2}{\Delta \tilde{t}}}\boldsymbol{R}_G \tag{1.7}$$

となり, 題意に適する.

(3)

与えられた平均二乗変位を無次元化する. 条件より $\boldsymbol{r} = a\tilde{\boldsymbol{r}}$. また

$$\begin{aligned}\langle \Delta \boldsymbol{r}^2 \rangle &= \frac{4k_B T}{\zeta}\left\{t + \frac{m}{\zeta}e^{-\frac{m}{\zeta}t} - \frac{m}{\zeta}\right\} \\ &= \frac{4mk_B T}{\zeta^2}\left\{\frac{\zeta}{m}t + e^{-\frac{m}{\zeta}t} - 1\right\}\end{aligned} \tag{1.8}$$

より, $t = t_0\tilde{t}$, $\frac{m}{\zeta} = t_D$ を用いて

$$\begin{aligned}\langle \Delta \tilde{\boldsymbol{r}}^2 \rangle &= \frac{1}{a^2}\langle \Delta \boldsymbol{r}^2 \rangle \\ &= \frac{4mk_B T}{a^2\zeta^2}\left\{\frac{t_0}{t_D}\tilde{t} + e^{-\frac{t_0}{t_D}\tilde{t}} - 1\right\}\end{aligned} \tag{1.9}$$

式 (1.9) は式 (1.6) より

$$\langle \Delta \tilde{\boldsymbol{r}}^2 \rangle = 4m^*\left\{\frac{1}{m^*}\tilde{t} + e^{-\frac{\tilde{t}}{m^*}} - 1\right\} \tag{1.10}$$

と書き表せ, これは題意に適する.

(4)

式 (1.7) をオイラー・丸山法を用いて離散化する．左辺に，オイラー法を用いて展開した式

$$\dot{\tilde{\boldsymbol{v}}}(\tilde{t}) = \frac{\tilde{\boldsymbol{v}}(\tilde{t}+\Delta\tilde{t}) - \tilde{\boldsymbol{v}}(\tilde{t})}{\Delta\tilde{t}} \tag{1.11}$$

を代入すると

$$m^* \frac{\tilde{\boldsymbol{v}}(\tilde{t}+\Delta\tilde{t}) - \tilde{\boldsymbol{v}}(\tilde{t})}{\Delta\tilde{t}} = \tilde{\boldsymbol{v}}(\tilde{t}) + \sqrt{\frac{2}{\Delta\tilde{t}}}\boldsymbol{R}_G \tag{1.12}$$

これを整理すると

$$\tilde{\boldsymbol{v}}(\tilde{t}+\Delta\tilde{t}) = \left(1 - \frac{\Delta\tilde{t}}{m^*}\right)\tilde{\boldsymbol{v}}(\tilde{t}) + \frac{1}{m^*}\sqrt{2\Delta\tilde{t}}\boldsymbol{R}_G \tag{1.13}$$

またこれより

$$\begin{aligned}\boldsymbol{r}(\tilde{t}+\Delta\tilde{t}) &= \boldsymbol{r}(\tilde{t}) + \tilde{\boldsymbol{v}}(\tilde{t}+\Delta\tilde{t})\Delta\tilde{t} \\ &= \boldsymbol{r}(\tilde{t}) + \left(1 - \frac{\Delta\tilde{t}}{m^*}\right)\tilde{\boldsymbol{v}}(\tilde{t})\Delta\tilde{t} + \frac{1}{m^*}\sqrt{2\Delta\tilde{t}}\Delta\tilde{t}\boldsymbol{R}_G\end{aligned} \tag{1.14}$$

となる．
これを用いて，初期条件 $\boldsymbol{r} = (0, 0)$，$\boldsymbol{v} = (0.0)$，時間区間 $[0, 100t_B]$，時間刻み $\Delta\tilde{t} = 0.01t_B$ における粒子軌跡を作図した．プログラムの実行手順としては，まずデータを langevin.py で出力し，それをもとに problem1.ipynb を用いてプロットした．作成した粒子軌跡を図 1.1 に示す．

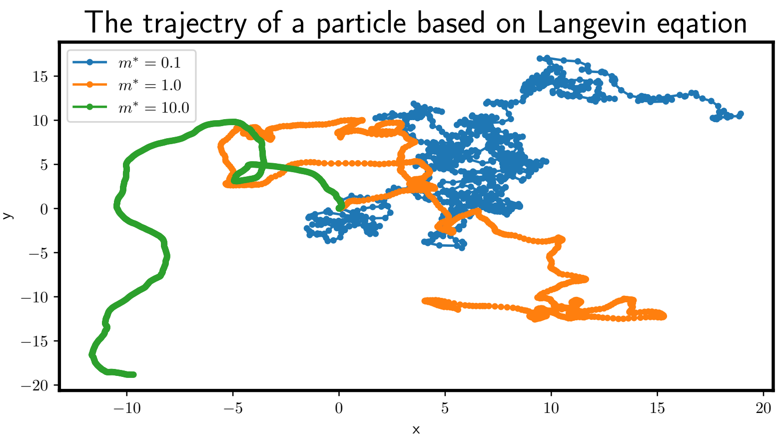

図 1: Langevin 熱浴中における 1 粒子のブラウン運動

この図より, 慣性質量が大きくなるほど, 粒子軌道の範囲が狭まっていくことが分かる.

(5)

(4) と同じ粒子について, 時間変化による平均二乗変位を

問題 2

(1)

※添付ファイル

・buffon.py

・ploblem2.py

・ploblem1.ipynb

・ploblem2.ipynb