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

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

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

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

両辺に $\frac{t_0}{\zeta a}$ をかけると

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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)

(5)

問題 2

(1)

※添付ファイル
・buffon.py
・ploblem2.py
・ploblem1.ipynb
・ploblem2.ipynb