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

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

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．各 m における粒子軌跡の時間発展をを図 1 に示す．

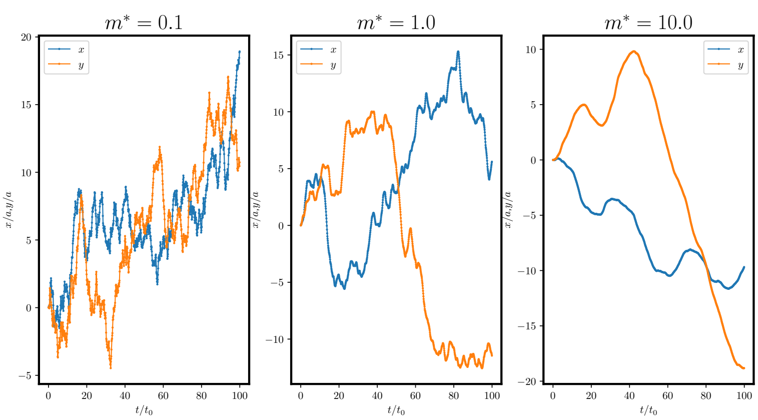

図 1: Langevin 熱浴中における 1 粒子のブラウン運動

この図より, 慣性質量が大きくなるほど, 時間あたりの粒子の変位は小さくなっていることが分かる.

(5)

10000 個の粒子について (4) と同じシミュレーションを行い, 時間変化による平均二乗変位を求めた. プログラムの実行手順としては, まず problem1-5 langevin.cpp ですべての粒子座標の時間発展を出力し, それを problem1-5 analyze.cpp で解析した. それらのデータをもとに problem1.ipynb を用いてプロットした. また (3) で求めた式 (1.10) を理論式として同じグラフにプロットした. これらの結果を図 2 に示す.

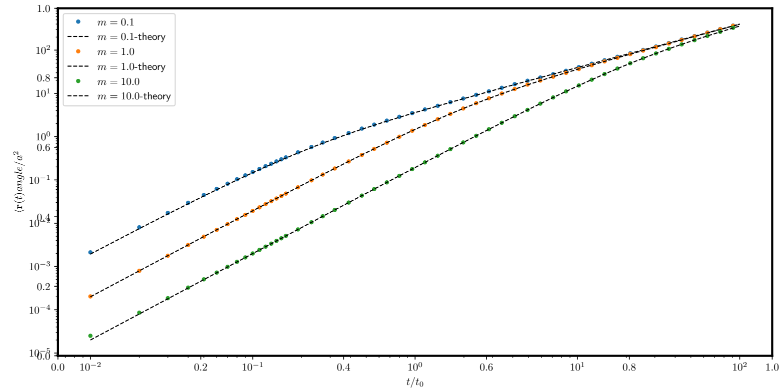

図 2: Langevin 熱浴中における粒子の平均二乗変位

これを見ると, シミュレーションで求めた数値と理論式はよく一致している. この図より, 慣性質量が増加すると (4) で考察したように時間当たりの粒子の変位が小さくなることから, 弾性領域においては平均二乗変位が減少する. 拡散領域においては時間あたりの変位が小さくなり, 時間経過とともに収束していく.

問題 2

(1)

与えられた $U(r)$ に $r = r_{cut}$ を代入すると

$$
\begin{aligned}
U(r_{cut}) &= U_0(r_{cut}) - u_0(r_{cut}) - U_0'(r_{cut})(r_{cut} - r_{cut}) \\
&= 0
\end{aligned} \tag{2.1}
$$

また

$$
U'(r) = U_0''(r - r_{cut}) \tag{2.2}
$$

より

$$
\begin{aligned}
U'(r_{cut}) &= U_0''(r_{cut} - r_{cut}) \\
&= 0
\end{aligned} \tag{2.3}
$$

(2)

与えられた $U_0(r)$ について

$$
\begin{aligned}
U_0'(r) &= 4\epsilon \left\{ -\frac{12a^{12}}{r^{13}} + \frac{6a^6}{r^7} \right\} \\
&= 24\epsilon \left\{ -\frac{2a^{12}}{r^{13}} + \frac{a^6}{r^7} \right\}
\end{aligned} \tag{2.4}
$$

より, 今回用いる平滑化ポテンシャルは

$$
U(r) = 4\epsilon \left\{ \left(\frac{a}{r}\right)^{12} - \left(\frac{a}{r}\right)^{6} \right\} - 24\epsilon \left\{ -\frac{2a^{12}}{r_{cut}^{13}} + \frac{a^6}{r_{cut}^7} \right\} r + C \tag{2.5}
$$

ここで C は r によらない定数. 式 (2.5) を r について微分すると

$$
U'(r) = 24\epsilon \left\{ -\frac{2a^{12}}{r^{13}} + \frac{a^6}{r^7} \right\} - 24\epsilon \left\{ -\frac{2a^{12}}{r_{cut}^{13}} + \frac{a^6}{r_{cut}^7} \right\} \tag{2.6}
$$

これを用いてシミュレーションを行う.
与えられた条件でシミュレーションを行った後の 1000 個の 2 次元円盤粒子の配置を図 3 に示す. なお, 粒子の初期位置は正方格子とした. シミュレーションの実行手順としては, まずデータを problem2-2.cpp で出力し, その後 problem2.ipynb を用いてプロットした.

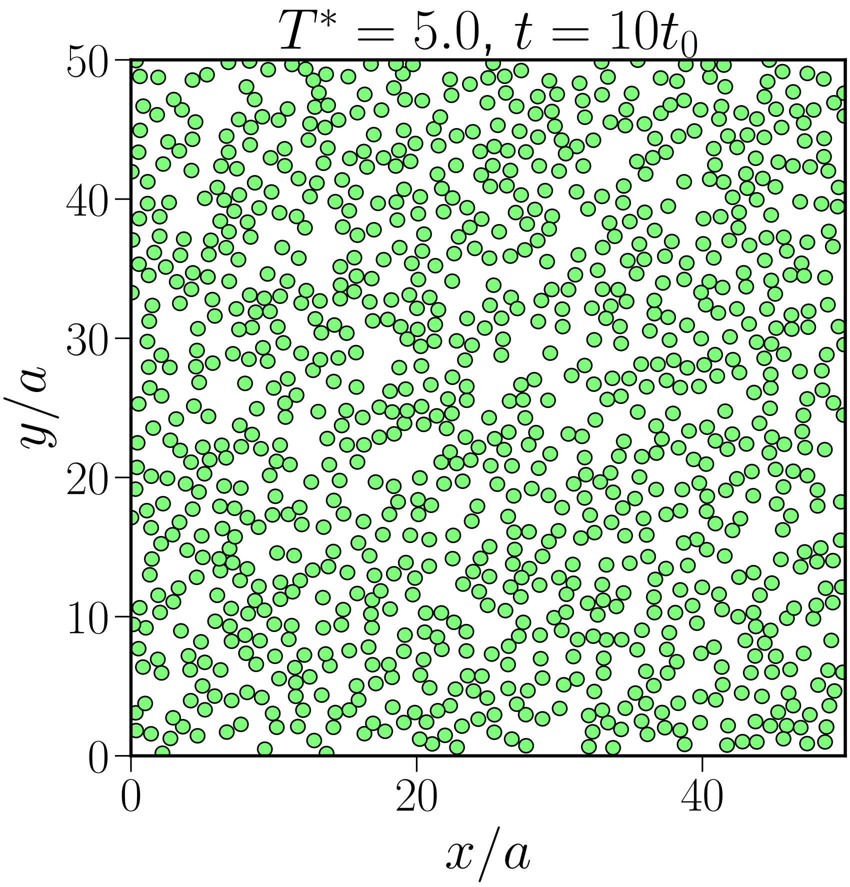

図 3: $T^* = 5.0$, 時間 $10t_0$ のシミュレーション後の 2 次元円盤粒子配置

(3)

与えられた条件でシミュレーションを行った後の 1000 個の 2 次元円盤粒子の配置を図 4 に示す. なお, 粒子の初期位置は (2) の配置とした. シミュレーションの実行手順としては, まずデータを problem2-3.cpp で出力し, その後 problem2.ipynb を用いてプロットした.

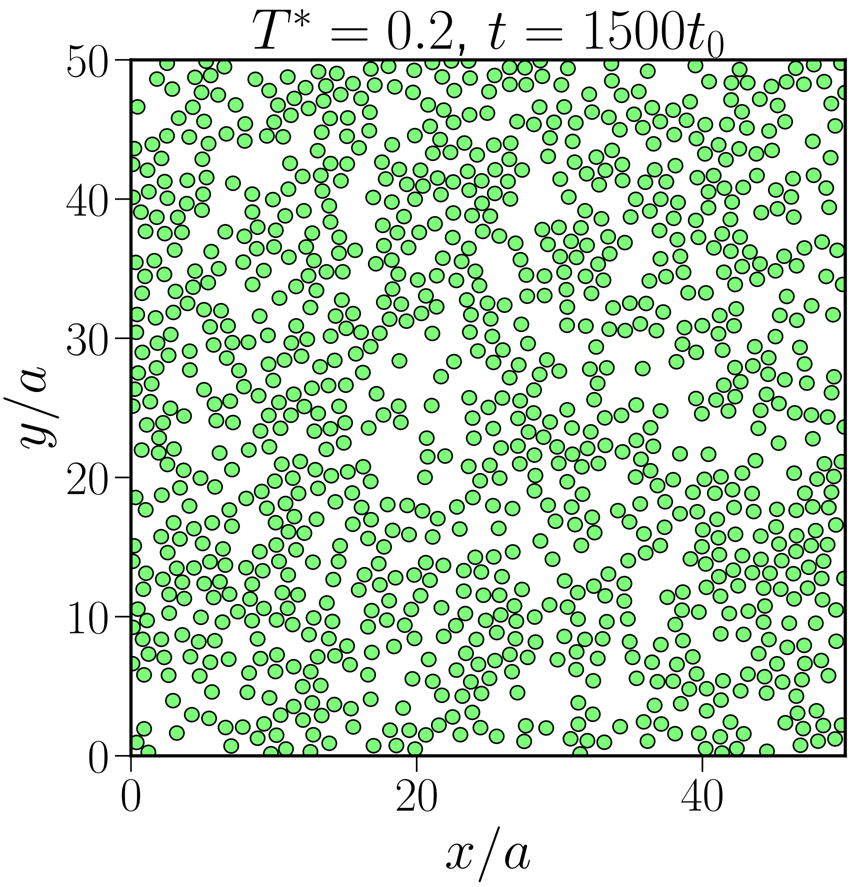

図 4: $T^* = 0.2$, 時間 $1500t_0$ のシミュレーション後の 2 次元円盤粒子配置

(4)

(5)

与えられた Maxwell-Boltzmann 分布に $T^* = \frac{k_B}{T}$ を代入すると

$$f(v_x) = \sqrt{\frac{m}{2\pi\epsilon T^*}} e^{-\frac{mv_x^2}{2\epsilon T^*}} \tag{2.7}$$

$f(v_x)$ は速さの逆数を持っていることと $v = \frac{a}{t_0}\tilde{v}$ より $f(v_x) = \frac{t_0}{a}\tilde{f}(\tilde{v_x})$. よって $t_0 = \sqrt{\frac{ma^2}{\epsilon}}$ より

$$
\begin{aligned}
\tilde{f}(\tilde{v_x}) &= \frac{a}{t_0}\sqrt{\frac{m}{2\pi\epsilon T^*}}e^{-\frac{ma^2\tilde{v_x}^2}{2t_0^2\epsilon T^*}} \\
&= \sqrt{\frac{1}{2\pi T^*}}e^{-\frac{\tilde{v_x}^2}{2T^*}} \qquad (2.8)
\end{aligned}
$$

となり, 題意に適する.

(6)

※添付ファイル

・buffon.py

・ploblem2.py

・ploblem1.ipynb

・ploblem2.ipynb