

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 $F_B(t) = \sqrt{\frac{2k_B T \zeta}{\Delta t}} \mathbf{R}_G$.
また $v = \frac{a}{t_0} \tilde{v}$, $t = t_0 \tilde{t}$ より

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

であるので, それぞれ代入すると

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

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

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

両辺に $\frac{t_0}{\zeta a}$ をかけると

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

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

$$\frac{t_D}{t_0} \dot{\tilde{\mathbf{v}}} = -\tilde{\mathbf{v}} + \sqrt{\frac{2}{\Delta \tilde{t}}} \mathbf{R}_G \quad (1.5)$$

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

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

であるので, これを m^* とおくと式 (1.5) は

$$m^* \dot{\tilde{\mathbf{v}}} = -\tilde{\mathbf{v}} + \sqrt{\frac{2}{\Delta \tilde{t}}} \mathbf{R}_G \quad (1.7)$$

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 $r = a \tilde{r}$. また

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

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

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

式 (1.9) は式 (1.6) より

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

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

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

を代入すると

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

これを整理すると

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

またこれより

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

となる.

これを用いて, 初期条件 $\mathbf{r} = (0, 0)$, $\mathbf{v} = (0, 0)$, 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.

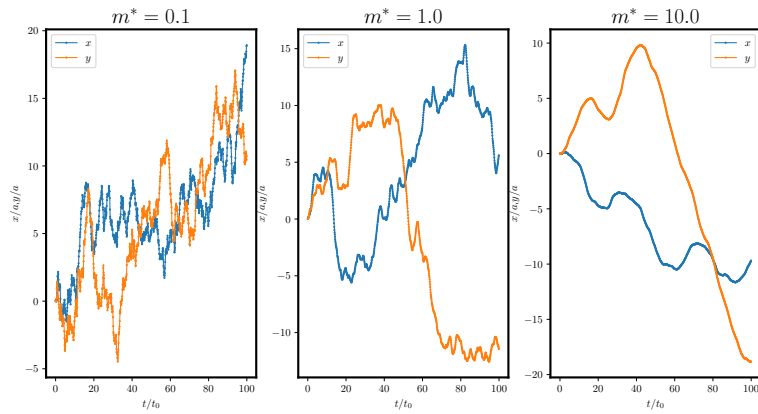


図 1: Langevin 熱浴中における 1 粒子のブラウン運動

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。

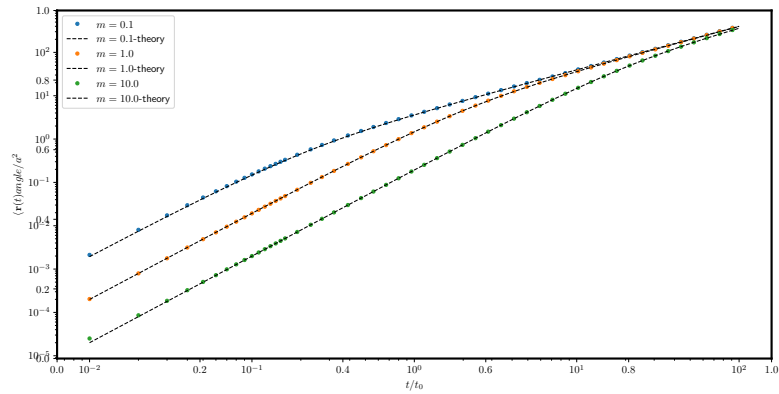


図 2: Langevin 熱浴中における粒子の平均二乗変位

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あ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

$$\begin{aligned} U(r_{cut}) &= U_0(r_{cut}) - u_0(r_{cut}) - U'_0(r_{cut})(r_{cut} - r_{cut}) \\ &= 0 \end{aligned} \quad (2.1)$$

また

$$U'(r) = U''_0(r - r_{cut}) \quad (2.2)$$

より

$$\begin{aligned} U'(r_{cut}) &= U''_0(r_{cut} - r_{cut}) \\ &= 0 \end{aligned} \quad (2.3)$$

(2)

与えられた $U_0(r)$ について

$$\begin{aligned} U'_0(r) &= 4\epsilon \left\{ -\frac{12a^{12}}{r^{13}} + \frac{6a^6}{r^7} \right\} \\ &= 24\epsilon \left\{ -\frac{2a^{12}}{r^{13}} + \frac{a^6}{r^7} \right\} \end{aligned} \quad (2.4)$$

より, 今回用いる平滑化ポテンシャルは

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

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

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

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.

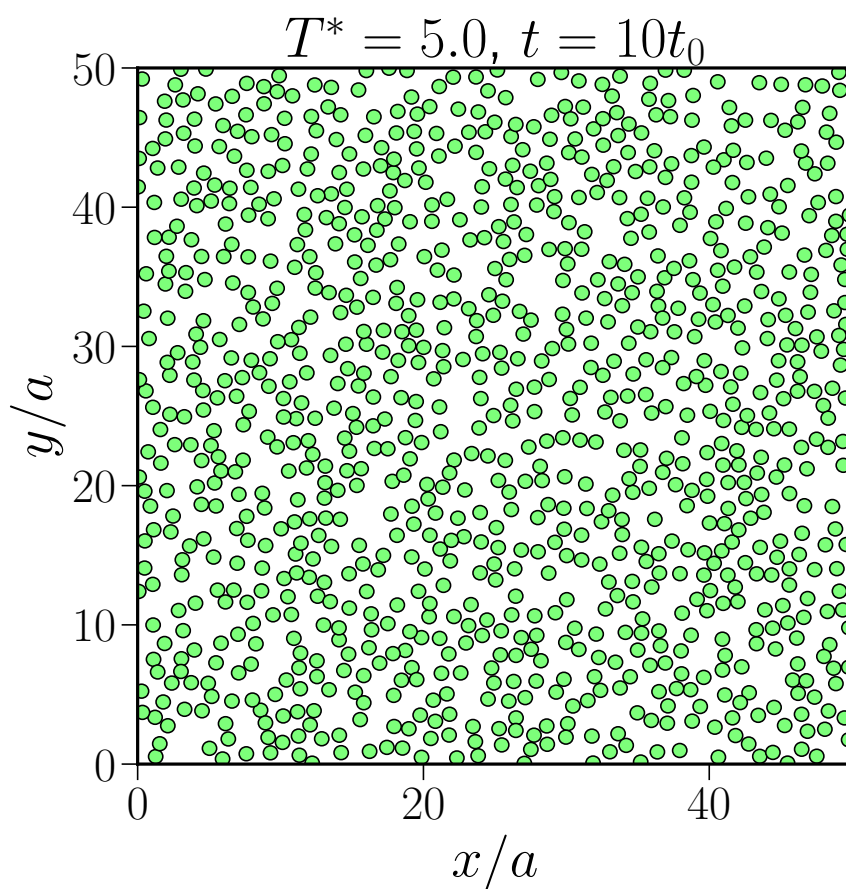


図 3: $T^* = 5.0$, 時間 $10t_0$ のシミュレーション後の 2 次元円盤粒子配置

(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, 速度は (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.

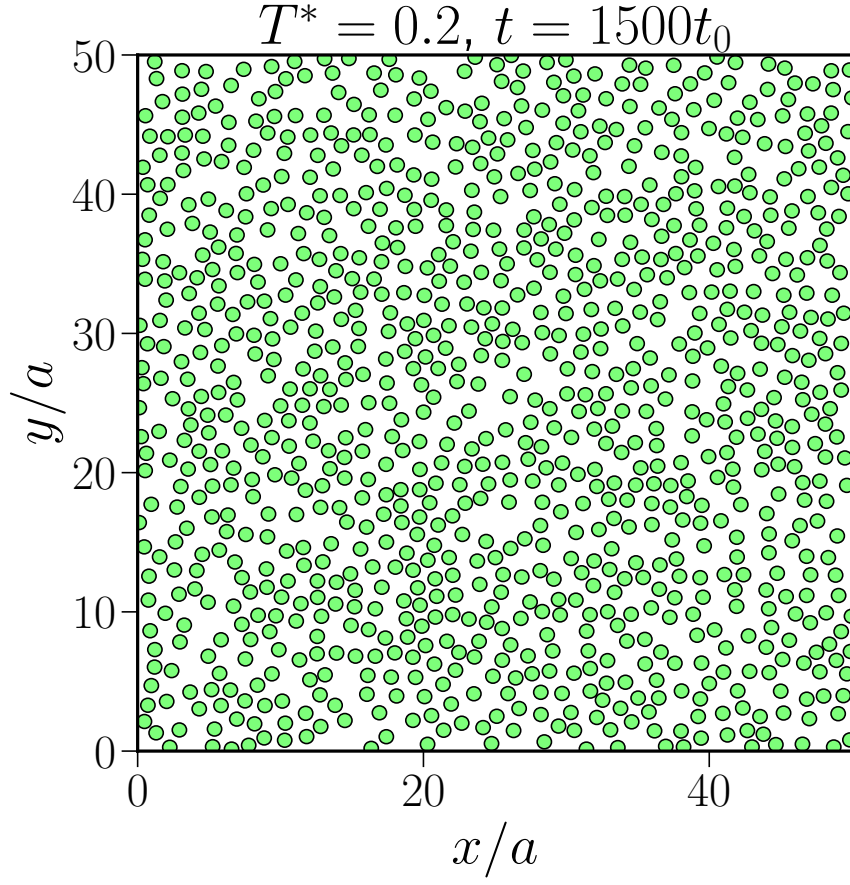


図 4: $T^* = 0.2$, 時間 $1500t_0$ のシミュレーション後の 2 次元円盤粒子配置

(4)

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

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

$f(v_x)$ 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

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

となり, 題意に適する.

添付ファイル

- langevin.py
- problem1-5 langevin.cpp
- problem1-5 analyze.cpp
- pproblem2-2.cpp
- problem2-3.cpp
- pproblem1.ipynb
- pproblem2.ipynb