

拡散現象のランダムウォークによる記述と再現

香取研究室 物理学科 4年 白木俊平

拡散現象とは

拡散現象とは、粒子や熱が広がっていく現象のことで「静かな水面の上にインクを垂らした際の広がり方」もその一つで、身近なところで目にすることができます。

拡散方程式とランダムウォーク

2次元の拡散方程式について考える。2次元の拡散方程式は以下の式で表される。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right)$$

ϕ : 拡散物質の密度

D : 拡散係数

この式を時刻 t 、位置 (x, y) についてそれぞれ差分化すると次ようになる。

$$\phi_{x,y}^{t+1} = (1 - 4D)\phi_{x,y}^t + D(\phi_{(x+1),y}^t + \phi_{(x-1),y}^t + \phi_{x,(y+1)}^t + \phi_{x,(y-1)}^t)$$

$\phi_{x,y}^t$: 位置 (x, y) 、時刻 t における密度

この式の D を“確率”と見ると、ランダムウォークと同じ形と見ることができる。

以下 D を「拡散方程式の“拡散係数”」と見る場合と「ランダムウォークの“確率”」の二通りでシミュレーションを行って比較し、拡散現象をランダムウォークで記述できるかの検証を行う。

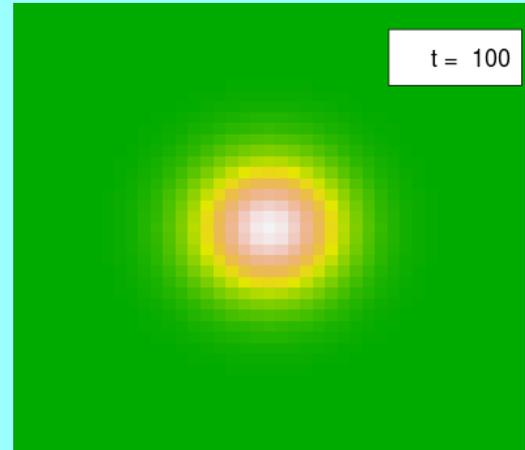
シミュレーション

【設定】

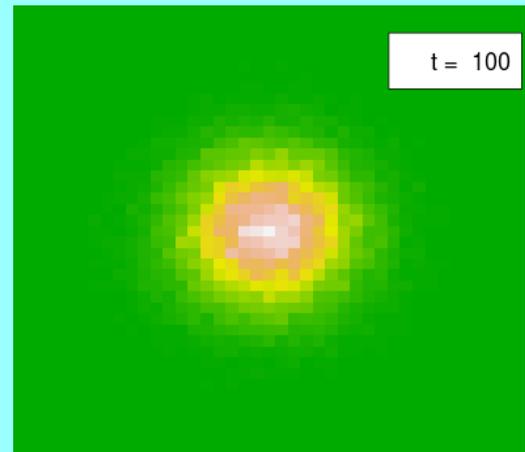
- ・ 試行回数 : $T = 100$
- ・ 拡散係数及び確率 : $D = 0.1$
- ・ 粒子数 : $n = 30000$

シミュレーション結果

【拡散方程式 ver.】



【ランダムウォーク ver.】



考察

上記の二つの結果を比較するため、中心からの距離 r における密度の平均を表すグラフをそれぞれ作りその標準偏差を比較した。

【拡散方程式 ver.】 : 14.98

【ランダムウォーク ver.】 : 14.96

上記のように、誤差 0.13% となった。したがって、拡散現象をランダムウォークによって記述、数値計算することは妥当であると分かった。