

液体中の拡散運動

香取研究室 西村祐輝

目的

ランダムウォークと実際の拡散運動の挙動の違いを調べる。

方法

ランダムウォークと拡散運動のシミュレーションを行い、位置の平均と標準偏差を比較する。

シミュレーションの設定

1、ランダムウォーク

- 初期位置(2.2)(2.3)(3.2)(3.3)にそれぞれ4つずつ粒子を設置する。
- 上下左右4方向にそれぞれ0.25の確率で進む。
- 排除体積効果は考えない。

ステップ数 t はそれぞれ100とする。
試行回数は200回。

2、拡散運動

- 粒子数16個を(1.1)から(4.4)まで並べる。
- 上下左右4方向に進む、又はその場で停滞するそれぞれの確率を0.2で与える。
- 排除体積効果を考える。

シミュレーション結果

ランダムウォーク			
位置平均		標準偏差	
X	Y	X	Y
-0.6104	-0.3029	4.0041	4.107

拡散運動			
位置平均		標準偏差	
X	Y	X	Y
0.684	-0.232	3.73	3.97

これはランダムウォークと拡散運動のシミュレーションを試行回数200で位置平均と標準偏差の平均をとった値である。双方の値はさほど変わらないように思える。

シミュレーション結果

ランダムウォーク

位置平均		標準偏差	
X	Y	X	Y
-0.6104	-0.3029	4.0041	4.107

拡散運動1

位置平均		標準偏差	
X	Y	X	Y
0.684	-0.232	3.73	3.97

・拡散運動1

上下左右に進む確率=0.2ずつ
その場に停滞する確率0.2ずつ

・拡散運動2

上下左右に進む確率=0.15ずつ
その場に停滞する確率0.4

拡散運動2

位置平均		標準偏差	
X	Y	X	Y
0.678	0.381 ¹⁾	3.43	3.59

シミュレーション結果から、停滞の確率を変え標準偏差を見ることでランダムウォークと拡散運動の違いを見出すことができた。

次に粒子数やステップ数を変えた時にどのような結果が出てくるか確認してみる。

ランダムウォーク2

位置平均		標準偏差	
X	Y	X	Y
0.4201	-0.579	17.25	16.68

それぞれのシミュレーションについて、粒子数100、ステップ数1000にかえて行った結果である。

拡散運動5は停滞確率0.4、拡散運動6は停滞確率0.2としてある。

拡散運動5

位置平均		標準偏差	
X	Y	X	Y
3.88	0.711	12.99	12.84

拡散運動6

位置平均		標準偏差	
X	Y	X	Y
4.037	0.113	15.64	14.94

- 結果から, , ,

最初に、実際の粒子はランダムウォークと比べ広がりにくいと予想を立てシミュレーションを行った。

これまでのシミュレーションにおいて拡散の度合いを決めているのは粒子が停滞する確率であることがわかった。

実際の液体などでは熱エネルギーをあたえることで粒子の動きが活発になり拡散がしやすくなる。

子のシミュレーションにおいては停滞確率を粒子の活発度の度合いともみれるので、現実の拡散運動に近いものが再現できたのではないかと感じた。