コンピュータシミュレーションによるブラウン運動の数理モデルについて

王 秋亮[†]，野原 美希[†]，渡邉 洋美[†*]
[†]茨城県立鉾田第二高等学校 生物部 〒311-1517 茨城県鉾田市鉾田 1158
* Corresponding author. *e-mail* address : watanabe-hiromi @※※※
(※※※ =mail.ibk.ed.jp)
Present address：茨城県立日立第一高等学校 〒317-0063 茨城県日立市若葉町 3-15-1
(2019 年 5 月 7 日 受付 2019 年 5 月 9 日 受理)

Abstract

ブラウン運動とは微粒子に働くランダムな力による揺らぎであり，ブラウン運動する粒子の平均 2 乗距離は運動する時間に比例する．本研究では，グラフ描画ソフト GRAPES を用いたコンピュータシミュレーションによって，ブラウン運動を 2 次元格子点上のランダムウォークでモデリングできるか評価した.

1 緒言

ブラウン運動の始まりは生物学者のブラウンが水中の花粉からでる微粒子の不規則な運動を観測したことである．アインシュタインはこの運動を微粒子に働くランダムな力による揺らぎとして考え，アインシュタインの方程式を見出した．2 次元の場合は，次のようになる.

$$< r^2 >= \frac{2RT}{3\pi a\eta N_A}\ t$$

$<r^2>$ は粒子の平均 2 乗距離，R は気体定数 [J・K^{-1}・mol^{-1}]，T は絶対温度 [K]，a は粒子の半径 [m]，η は液体粘性 [kg・m^{-1}・s^{-1}]，t は時間 [s]，N_A はアボガドロ定数 [mol^{-1}] である.

2 次元の格子点上のランダムウォークにいても，アインシュタインの方程式と同様の方程式

$$< r^2 >= d^2\ N$$

が成り立つ．ただし，d は 1 ステップ当たりの移動距離，N はステップの回数である．本研究では，フリーのグラフ作成ソフト GRAPES において，2 次元格子点上のランダムウォークによってアボガドロ定数の値を算出し，ブラウン運動が 2 次元格子点上のランダムウォークでモデリングできるか評価した.

2 シミュレーションの理論

2.1 シミュレーションの手順

1. GRAPES において，乱数を発生させ，座標平面の格子点上を xy 軸正負方向にそれぞれ 1/4 の確率で，5 つの点をステップさせた.
2. 1000 ステップごとに，点の移動距離の2乗を 30000 テップまで記録した.
3. t と $< r^2 >$ の関係をプロットしたグラフの回帰直線の傾き $t\ /< r^2 >$ を算出した.
4. 1〜3 の手順を 1000 回行なった.

2.2 座標平面の単位長

d の値は座標平面の単位長である．ここで，t 秒後の点の位置を$(X_t\ , Y_t)$とすると，

$$< r^2 >= d^2 < {X_t}^2 + {Y_t}^2 >$$

であるから，アインシュタインの関係式は,

$$d^2 = \frac{2RT}{3\pi a\eta N_A}\ \frac{t}{< {X_t}^2 + {Y_t}^2 >}$$

となり, References 1) にある実験パラメータを用いて，座標平面の単位長が算出できる.

3 シミュレーションの結果

3.1 $t\ /< r^2 >$ の値

アインシュタインの関係式によると，粒子の平均 2 乗距離は時間に比例する(ランダムウォークではステップ数に比例)． 1000 回のシミュレーションによって得られた回帰直線の傾き，$t\ /< r^2 >$の値は 0.0113 であるが，決定係数は R^2＝0.955 であり，非常に良い相関を示した．そこで References 1) にある実験パラメータを用い，1000 回のシミュレーションを行なった結果,

$$d = 1.581 \times 10^{-7}\ [m]$$

を用いて，

$$N_A = \frac{2RT}{3\pi a\eta}\ \frac{t}{d^2 < {X_t}^2 + {Y_t}^2 >}$$

から, 新たに 1000 回のシミュレーションを行なってアボガドロ定数を算出した結果,

$$N_A = 5.84 \times 10^{23}\ [\mathrm{mol}^{-1}]$$

となった.

Fig.1 にシミュレーション回数とアボガドロ定数の値を示した．シミュレーションの回数を重ねるに従って，アボガドロ定数の値が収束していることからも，アインシュタインの関係式は粒子の統計的な性質についての式であることが分かった.

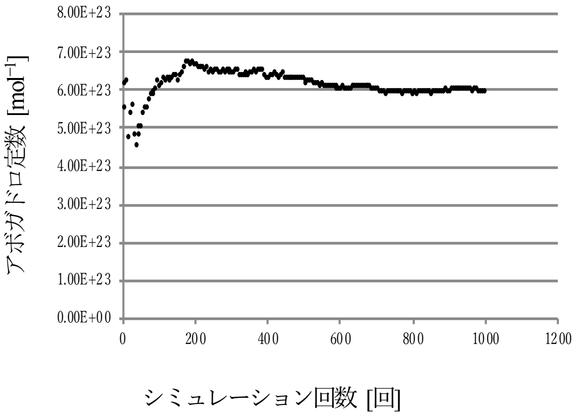

Fig.1：シミュレーション回数とアボガドロ定数

4　結果の考察

本研究のシミュレーションには GRAPES の擬似乱数を用いた．そこで，この擬似乱数について，一様性と無規則性の検定を行った.

4.1　乱数の一様性

4 種類の乱数 0,1,2,3 について，発生頻度が一様であるときの期待度数と実現度数との適合度についてχ^2値を計算した結果が **Table1** である.

Table1：　乱数の発生頻度の適合度のχ^2値

	実現度数	期待度数	(実現度数 - 期待度数)^2 / 期待度数
0	7379	7500	1.952133333
1	7492	7500	0.008533333
2	7612	7500	1.672533333
3	7517	7500	0.038533333
		χ^2	3.671733332

このχ^2値は，自由度 3 のχ^2―分布に従う.「乱数の発生頻度に傾向がない」とすると，

$$P(\chi^2 \geq 9.35) = 0.025,\quad P(\chi^2 \leq 0.22) = 0.025$$

であるから，有意水準 5%の両側検定において，乱数の発生頻度に傾向があるとはいえない.

4.2　乱数の無規則性

乱数列の無規則性についてポーカー検定を行なった. 30000 項からなる乱数列を 4 項ずつの 7500 グループに分け，それぞれのグループの乱数の並びをポーカーの役になぞらえて分類した．役の出現頻度について，理論値と実現値の適合度についてχ^2値を計算した結果を **Table2** に示した.

Table2：役の発生頻度の適合度のχ^2値

	実現度数	期待度数	(実現度数- 期待度数)^2 / 期待度数
ワンペア	4333	4218.75	3.094059259
ツーペア	1021	1054.688	1.076003704
スリーカード	1371	1406.25	0.8836
ストレート	672	703.125	1.3778
フォーカード	103	117.1875	1.717633333
		χ^2	8.149096296

自由度 4 のχ^2―分布で有意水準 5%の両側検定を行なった.

$$P(\chi^2 \geq 11.14) = 0.025,\quad P(\chi^2 \leq 0.48) = 0.025$$

であるから，乱数に規則性があるとはいえない.

4　結論

上下左右を 1/4 の確率で格子点上を 30000 ステップするランダムウォークが，ブラウン運動のモデルになることが 1000 回のシミュレーションによって示唆された.

References

1) 青木健一郎, 柴崎彬,“ブラウン運動観測の学生実験について” Hiyoshi Review of Natural Science Keio University (2006), **No.39**, 21-52.

2) 山口 悟, 渡邉 洋美, “コンピューターシミュレーションにより再現されたブラウン運動からのアボガドロ定数の算出実験” 化学と教育 (2014), **62**, 510-513.