

ランダム・ウォークによる拡散シミュレーション

岩間理沙 (指導教員：吉田裕亮)

1 はじめに

拡散とは、粒子、熱、運動量などが自発的に散らばり広がる物理現象のことを言う。これは着色した水を無色の水に滴下したときや煙が空気中に広がる時など、日常でもよく見られる現象である。これは化学反応や外力ではなく、流体の乱雑な運動の結果として起こるものである。そして、この拡散は輸送現象の一種であり、拡散方程式という偏微分方程式で表現される。

本研究では、確率微分方程式を利用し、ランダム・ウォークによる粒子の拡散シミュレーションを目的とする。粒子自身の運動による拡散に加え、ドリフトや障害物の有無をモデル化し、その拡散の変化を検証を行う。

コンピュータ・シミュレーションを行うには、現実をモデル化してから計算を行う。そのモデル化の方法として、主にマクロモデルとミクロモデルに分けられる。

2 拡散方程式

拡散方程式とは、拡散が生じている物質の密度のゆらぎを記述する偏微分方程式である。熱伝導と同様の振る舞いをする現象を記述するのにも用いられ、一般に以下のように表される。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla \cdot (D(\phi, \vec{r}) \nabla \phi(\vec{r}, t))$$

ただし、 ∇ は空間微分作用素、 $D(\phi, \vec{r})$ は位置 \vec{r} における密度 ϕ の集団的な拡散係数、 $\phi(\vec{r}, t)$ は位置 \vec{r} と時刻 t における拡散物質の密度である。拡散係数が密度に依存する場合方程式は非線形となり、そうでなければ線形となる。これは、先ほど述べた拡散方程式を代表とする偏微分方程式によって巨視的に記述するモデルである。

3 確率微分方程式

確率微分方程式とは連続時間でランダムな擾乱を受ける系を記述する微分方程式である。

拡散を記述する確率微分方程式は

$$dX_t = \sigma(X_t, t)dB_t + \mu(X_t, t)dt$$

で表すことができる。ただし、 B_t はブラウン運動、 $\sigma(x, t)$ は拡散係数、 $\mu(x, t)$ はドリフト関数を表す。これは、拡散現象を確率的に不規則に起こる現象として確率微分方程式によって微視的に記述するモデルである。

4 ランダム・ウォーク

ランダム・ウォークとは、確率的に無作為に決定される運動のことを言う。コンピュータ上で疑似正規乱数を発生させ、ランダムに粒子を動かす。本研究では確率微分方程式の離散化モデルを、ランダム・ウォークとしてブラウン運動を表現することにする。また、拡散係数の値を大きくすればするほど、粒子は遠くに飛びやすく、拡散が早いことになる。

なお、本研究では2次元上の拡散を考え、平面は正方格子点として離散化する。

5 ドリフト関数による流れ場の作成

平面上に適当なサイズ(一般に計算格子のサイズより大きい)の正方格子を考え、その各点にベクトルを対応させる。このとき、そのベクトルが大きいほど粒子はその方向に移動しやすくなる。すなわち、流れ場ベクトルである。

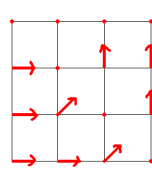


図 1:

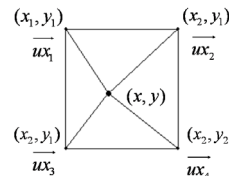


図 2:

例えば、図1のような流れ場を作りたい場合、 x 座標と y 座標はこのように書ける。粒子の位置から最も近い四隅のベクトルの内分を計算し、その粒子に対する流れのベクトルを決定する。(図2)

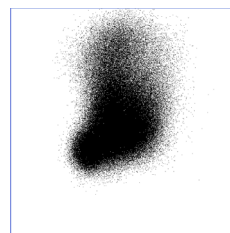
$$x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 1 & 1 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix}, y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -1 & -1 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix}$$

内分の計算式は、以下を用いた。

x 軸方向のベクトルを求める場合

$$\begin{aligned} \vec{u}_x &= (\vec{u}_{x1} * |x_2 - x| * |y_2 - y|) \\ &+ (\vec{u}_{x2} * |x_1 - x| * |y_2 - y|) \\ &+ (\vec{u}_{x3} * |x_2 - x| * |y_1 - y|) \\ &+ (\vec{u}_{x4} * |x_1 - x| * |y_1 - y|) \end{aligned}$$

以下は図1の流れ場を使って中心から粒子を拡散させた結果である。



6 数値実験例

以上のことを利用して、実際に粒子の拡散シミュレーションを行う。

手順

- (1) 正方格子の中心に n 個の粒子を用意する
各粒子は発生させた乱数に従ってランダム・ウォークをし、同時に流れ場のドリフトを受けながら拡散する
- (2) (1) を設定したステップ数まで繰り返す

- (3) 粒子の最終座標を記録する
- (4) 新たに正方格子を用意し、適当な大きさに区切る
- (5) (4) の各格子に存在する粒子の数を数え、密度として可視化する

6.1 障害物がない場合

以下のように、中心から左側を通過して、右上に向かっていくような流れ場を設定する。実験結果を以下に示す。

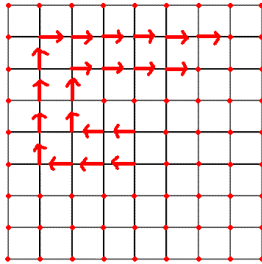


図 3: 設定した流れ場

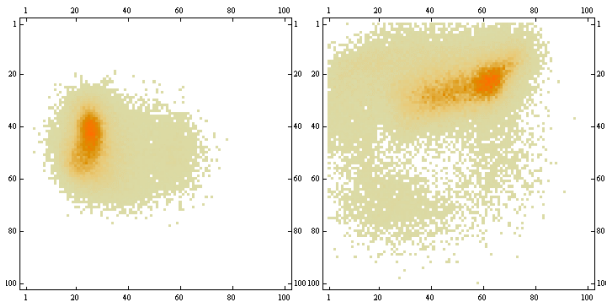


図 4: 左:250 ステップ後, 右:800 ステップ後

設定した流れ場のドリフトを受けながら、粒子が拡散していく様子をシミュレーションすることができている。

6.2 障害物がある場合

次に、正方格子の上に柱などの障害物がある場合をシミュレーションする。ここでは、障害物は反射壁と考える。例えば図 5 では、ランダム・ウォークによって左上から右上に粒子が移動する計算になるが、移動後に障害物の中に入ってしまうことになるので、境界面に対しちょうど対極にある右下の位置に移動させるようにする。

設定した流れ場は、障害物を設置した以外図 3 と全く同じものである。(図 6) 実験結果を以下に示す。

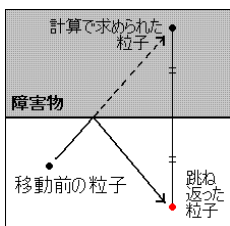


図 5: 障害物にぶつかった場合

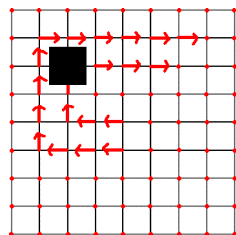


図 6: 設定した流れ場

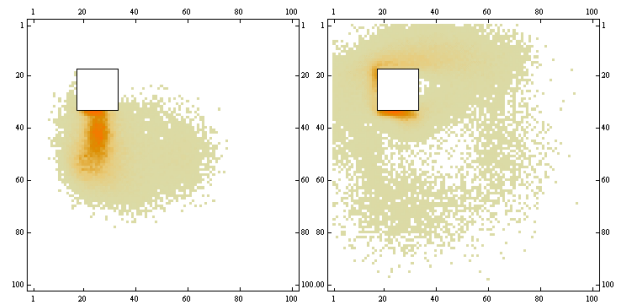


図 7: 左:250 ステップ後, 右:800 ステップ後

障害物から回り込むようにして粒子が拡散する様子をシミュレーションすることができたと考えられる。

6.3 拡散係数を変えた場合

次に、確率微分方程式の拡散係数を変えてシミュレーションを行う。図 6 と同じ流れ場を使用し、拡散係数 2.5 と拡散係数 4.0 でシミュレーションした結果を示す。

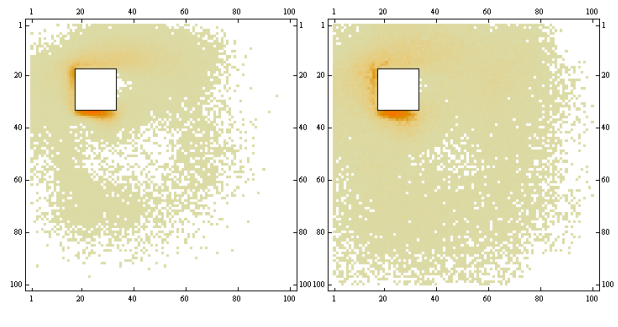


図 8: 左:拡散係数 2.5, 右:拡散係数 4.0

拡散係数が大きい方が正方格子全体に粒子が広がっていて、拡散係数が小さい方は障害物周りに粒子が固まっていることが分かる。

7 まとめと今後の課題

多数の粒子の拡散現象を、疑似正規乱数を発生させてランダム・ウォークを行うことによってシミュレーションすることができた。また、拡散係数や流れ場を変化させたり、障害物を設置することによって、様々な状況におけるシミュレーションができるということが分かった。

今後の課題としては、時間の経過とともに流れ場が変化するようにしたい。また、実際の地形データや気象データを用いて、より現実世界に近いシミュレーションをしたい。

参考文献

[1] モンテカルロ・シミュレーションのオンライン教科書, http://www.ishikawa-lab.com/montecarlo_index.html