

クーロン相互作用をもつ粒子の拡散シミュレーション

野田百合子 (指導教員：吉田裕亮)

1 はじめに

粒子・熱などが自ら散らばり拡がっていく現象を拡散という。静止した水の中にインクを数滴落とすと、インクは次第に広がっていき、水全体が青くなるのはこの一例として知られている。拡散は質量の輸送であり、熱伝導などとともに輸送現象の1つとして考察される。また、拡散を誘発・抑制する要因の一つにクーロン力がある。クーロン力は静電気力とも呼ばれ、電荷の符号が等しければ斥力、反対ならば引力を生じる。さらに、電荷の2乗に反比例するという性質をもっている。

本研究では、Dysonのブラウン運動を発展させた確率微分方程式を利用して、クーロン相互作用のはたらく粒子の拡散シミュレーションを行い、拡散結果がどのようになるかを調べる。クーロン相互作用の他に粒子自体の拡散や、ドリフトなども考慮したモデルで計算する。拡散過程を数学的に表す方法には、主にマイクロモデルとマクロモデルの2つが挙げられる。

2 拡散過程を表すモデル

2-1 偏微分方程式

偏微分方程式の1つに、拡散物質の密度の変動を表す拡散方程式がある。拡散方程式は拡散する物質の密度のゆらぎを表し、拡散の様子をマクロに表すことができる。熱伝導現象を記述する場合も用いられることから熱伝導方程式とも呼ばれており、以下の式で記述する。

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

このとき、 \vec{r} は位置、 t は時刻、 $\phi(\vec{r}, t)$ は拡散物質の密度、 $D(\phi, \vec{r}, t)$ は拡散係数、 ∇ は空間微分差要素である。拡散係数が密度に依存するならば方程式は非線形となり、しないならば線形になる。

2-2 確率微分方程式

確率微分方程式とは、時間とともに変化する確率変数が解となる微分方程式である。こちらは拡散現象を確率的に起こる現象としてマイクロに記述するモデルとなる。拡散を記述する確率微分方程式は

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

のように表される。ただし、 B_t はブラウン運動、 $\sigma(X_t, t)$ は拡散係数、 $\mu(X_t, t)$ はドリフト係数とする。

3 Dysonの確率微分方程式

F.Dysonは、各要素が独立の N 次対称行列の N 個の固有値の運動を記述する N 連立の確率微分方程式を以下のように導いた。

$$d\lambda_N^i(t) = \frac{1}{\sqrt{N}} dB_t^i + \frac{1}{N} \sum_{j:j \neq i} \frac{1}{\lambda_N^i(t) - \lambda_N^j(t)} dt$$

N_t は行列要素が独立の N 次対称行列、 B_t はブラウン運動、 $\lambda_N(t)$ は行列 N_t の固有値を表す。Dysonは、この式はまさしくどんな粒子間の衝突も起こらないという条件下での N 個の粒子の1次元ブラウン運動であると結論付けている。

4 Dysonモデルの拡張

T.ChanやL.Rogersらは、F.Dysonのアイデアに基づいて、 N_t^n の固有値からなる N 次元の拡散過程が満たす確率微分方程式を研究し、

$$d\lambda_N^i(t) = \frac{1}{\sqrt{N}} dB_t^i + \frac{1}{N} \sum_{j:j \neq i} \frac{1}{\lambda_N^i(t) - \lambda_N^j(t)} dt - \frac{1}{2} \lambda_N^i(t) dt$$

が成り立つことを導くことに成功した。

5 提案モデル

以上のDysonモデルを元にした確率微分方程式をふまえて、本研究では各粒子の移動を示す確率微分方程式を次のように設定する。

$$\lambda_N(t+1) = \lambda_N(t) + \alpha \cdot nrnd - \beta \cdot \lambda_N(t) + \gamma \cdot \sum_{j:j \neq i} \frac{1}{\lambda_N^i(t) - \lambda_N^j(t)} \quad (*)$$

移動先の粒子の位置は、移動する前の粒子に拡散、ドリフト、他の粒子との間にはたらくクーロン力によるポテンシャルを与えたものとし、 $nrnd$ は $[0,1]$ の正規乱数、 α は拡散係数、 β はドリフト係数、 γ はクーロン相互作用係数とする。この α, β, γ に具体的に数値を変化させてシミュレーションを実行し、どのような拡散結果が得られるかを調べる。

6 数値実験

(*)を用いて、実際に粒子の拡散シミュレーションを以下の手順で行う。

手順

- [1] 5000 個の粒子を区間 $[-1,1]$ にランダムに配置する。
- [2] 任意の粒子をランダムに 1 つ選択し, (*) に従って移動させる。
- [3] [2] を 50 万回繰り返す。
- [4] 横軸を粒子の位置, 縦軸を粒子の個数として最終結果をヒストグラムにする。

ただし, 動かす粒子をランダムに選択する際の重複は許す。つまり, 1 つの粒子につき平均 100 回の移動操作がなされることになる。

7 結果

7-1 クーロン相互作用のみ与える場合

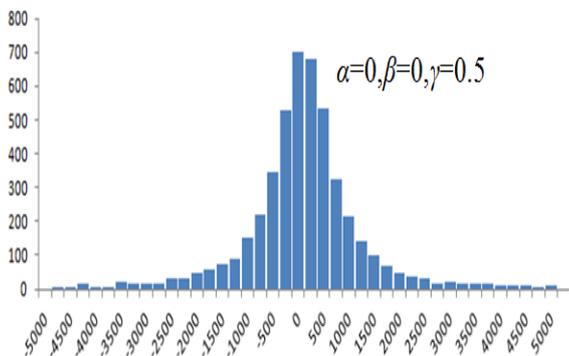


図 1

(-5000 未満と 5000 以上のデータは省略)

図 1 は拡散やドリフトがはたらかず, クーロン相互作用のみを与え, $\gamma = 0.5$ とした時の結果である。初期位置の中心付近に密度が集中している反面, とても広い範囲まで粒子の移動が及んでいる。各粒子がお互いに引き合う力と反発しあう力の両極端な面が強く表れている。

7-2 クーロン相互作用の強さによる比較

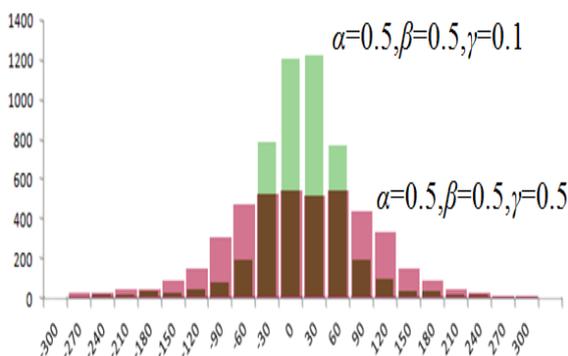


図 2

(-300 未満と 300 以上のデータは省略)

次に, 拡散係数 α とドリフト係数 β も有効にし, クーロン相互作用係数 γ の値の違いによる比較を行った。図 2 は, $\alpha = 0.5, \beta = 0.5, \gamma = 0.1$ の場合と $\alpha = 0.5, \beta = 0.5, \gamma = 0.5$ の場合のグラフを同じ座標に描いたものである。クーロン相互作用が強くはたらいっている方が, 粒子がお互いに反発しあい原点から遠く離れていく様子が確認できる。これは粒子間の距離の 2 乗に反比例するクーロン力の特徴をよく表した結果だといえる。

7-3 クーロン相互作用の有無による比較

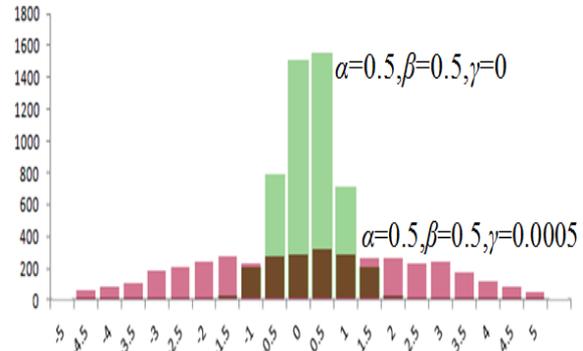


図 3

(-5 未満と 5 以上のデータは省略)

続いて, クーロン相互作用の有無による結果の違いを検証した。図 3 は $\alpha = 0.5, \beta = 0.5$ の下でクーロン相互作用が全くはたらかない場合 ($\gamma = 0$) と, とても小さい量がはたらく場合 ($\gamma = 0.0005$) を重ねて描いたグラフである。これより, 粒子はクーロン相互作用がはたらいしていない時はおおそ -2 から 2 の区間に集中しているのに対し, ほんの少し加わると広い範囲に分散している様子がわかる。したがって, クーロン相互作用が非常に微弱な量でも粒子の拡散に与える影響はとても大きいと推測される。

8 まとめ

クーロン相互作用のある粒子の拡散結果を, 行列の固有値を記述する確率微分方程式を用いて導くことができた。また, クーロン相互作用は与えられる強さが非常に小さくても, 拡散への影響は著しく大きいことを示すことができた。

参考文献

- [1] Songzi Li, Xiang-Dong L, Yong-Xiao Xie: Generalized Dyson Brownian motion, McKean-Vlasov equation and eigenvalues of random matrices, 2013
- [2] コンピュータで乱数を生成 (<http://www.cs.miyazaki-u.ac.jp/~date/lectures/random/>)