

1 BZ 反応のシミュレーション

1.1 概要

BZ 反応で見られるような、アクチベーターとインヒビターの濃度が拡散方程式に従って変化し、互いに影響し振動する様子のシミュレーションを試みた。

1.2 プログラム

周期境界条件を課した $100 * 100$ のマスについて、

$$\frac{du}{dt} = \nabla u + \gamma * (\alpha - \beta * u + \frac{u^2}{v})$$

$$\frac{dv}{dt} = d * \nabla v + \gamma * (u^2 - v)$$

に従って、 u, v が変化する時の v の値の変化を調べた。 α, β の不動点の周りの微小変化に対しては振動するはずだが、100 回程度の試行で発散してしまっている。

2 ゴム弾性の直感的シミュレーション

2.1 概要

ゴムの弾性はエントロピーによるものなので、通常の分子動力学的手法でシミュレートするのは難しい。そこで、物理的整合性を無視して、鎖の間の近接力によるシミュレーションを試みた。

2.2 プログラム

ゴムを長さの定まった輪のつながった鎖であると考え、鎖の一つの輪と、一つ前の輪との間の角度を θ とする。最も安定な状態は最もランダムな状態なので、二つの輪の間で考えると平均して逆向きの状態が実現されやすい。したがって、 $\cos(\theta)$ を最小化するような力が働いていると仮想すると、微小時間間に

$$\theta' = \text{Arccos}(-(1 + \cos(\theta)) * \gamma + (1 - \cos(\theta)) * f) + \cos(\theta))$$

という変化をすると考えられる。 $(f: \text{外力}, \gamma: \text{定数})$, これに従い、外力の変化に対する 1000 個の輪が連なった鎖の運動の様子を表現した。

3 微小粒子の衝突によるブラウン運動のシミュレーション

3.1 概要

ランダムな初期位置・初期速度を与えた、互いに相互作用をしない 1000 個の微小粒子の系に、1 つの大きな粒子を加えて、微小粒子との衝突による大きな粒子の運動の軌跡をシミュレートした。

3.2 プログラム

接触時の速度変化は、質量比を gamma 、粒子の速度をそれぞれ V, v として、近似的に

$$V = (1 - \frac{1}{\text{gamma}}) * V + \frac{1}{\text{gamma}} * v$$

$$v = -v,$$

とした。境界条件は、完全弾性衝突による反射とした。ブラウン運動の近似としてはかなり荒いが、衝突半径を大きく取るとランダムウォークのような挙動を示す。