2006 年度非平衡物理学 授業ノート 6

2006.11.8 担当 吉森 明

授業ノート 5 の訂正

仮定 $X = X(t)$ は、ランジュバン方程式にしたがい、§2-2 の仮定をすべて満たしている。

定義: $X = X(t)$ が、不規則に時間変化する変数の時、

遷移確率 $T(x, x', t, t')$**:**	**時刻** t' **に** $X = x'$ **という条件のもとで、**
	時刻 t **に** X **が** x**〜**$x + dx$ **にある確率**
	$= T(x, x', t, t')dx$

§3. 線形応答理論

3-1. 時間相関関数(Time Correlation Function; TCF)

目標 時間相関関数を何となくイメージできるようにする。その性質を仮定とともに覚える。具体的には以下のことを分かる。

- 時間相関関数 (TCF) は不規則な運動を特徴付けるのに便利。
- TCF の定義はサンプルの平均と時間平均がある。
- 2 つの数学的な性質 (結論参照) は定常過程から導ける。
- 線形ランジュバン方程式が成り立つ時、時間相関関数 (TCF) は簡単に計算できる。
- TCF は遷移確率を使って書くことが出来る。

目次 (1) §3 の流れ

(2) 定義と物理的な意味

(3) 基本的な性質

(4) ランジュバン方程式との関係

仮定 $X_\mu = X_\mu(t) (\mu = 1, \ldots, n)$ は、不規則に時間変化する定常過程 (時間の原点をずらしても、**平均量**は変らない)。

結論 1. $\varphi_{\mu\nu}(t) \equiv \langle X_\mu(t) X_\nu(0) \rangle$ として、$\varphi_{\mu\nu}(t) = \varphi_{\nu\mu}(-t)$。特に $\mu = \nu$ の時、時間相関関数は、偶関数。

2. $\langle \dot{X}_\mu(t) X_\nu(0) \rangle = -\langle X_\mu(t) \dot{X}_\nu(0) \rangle$。特に $\mu = \nu$ の時、$\dot{\varphi}_{\mu\mu}(0) = 0$

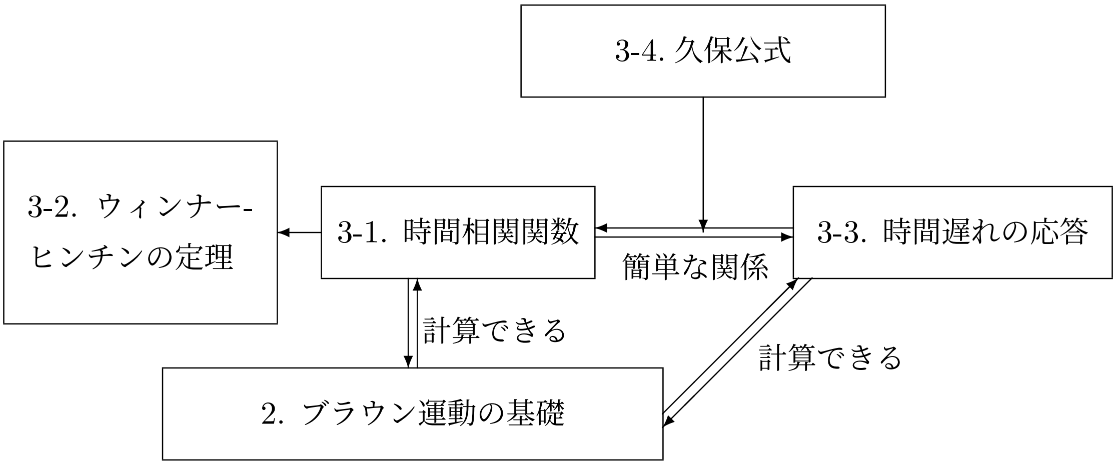
3. $n=1$ のとき、

$$\langle X(t)X(0)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} xT(x,x',t)dxx'P_{\mathrm{eq}}(x')dx' \tag{1}$$

ここで、$T(x,x',t)$ は遷移確率、$P_{\mathrm{eq}}(x)$ は平衡の分布関数。

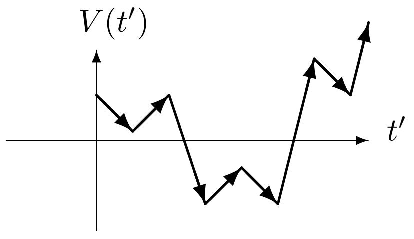
3-1 で解けるようになる問題　ブラウン運動で、微粒子の速度を $V(t)$、加速度 $A(t)=\dot{V}(t)$ としたとき、$\langle A(t)A(0)\rangle$ を求めなさい。

(1) §3 の流れ

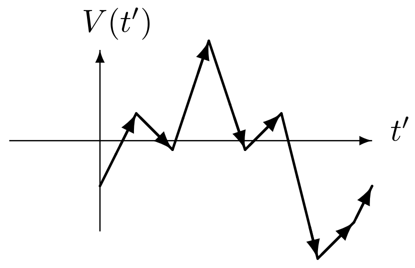


(2) 定義と物理的な意味

○ 液体 A に微粒子を溶かす。$V(t) =$ 微粒子の速度 (1 次元)

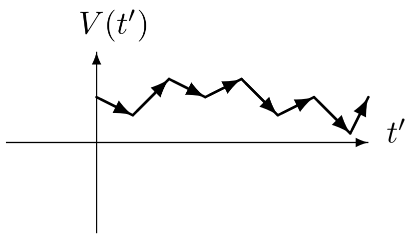


1 回目

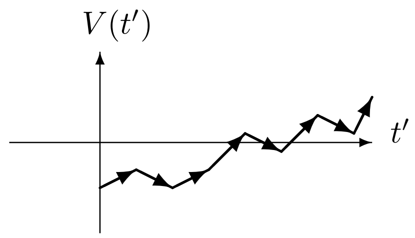


2 回目 (1 回目と似ている。)

ところが別の液体 B に微粒子を溶かして測ると、



1 回目



2 回目 (1 回目と似ている。)

A と B はかなり違う。液体によって違う感じがする。もちろん、**軌道そのものは測る度に違う**が、同じ液体ならば、似ていると感じる。しかし、違う液体は違うと感じる。2 つの液体は平均も分散も同じなので、他に**液体 A と B を定量化する方法はないのか?**

○ 時間相関関数の定義

①サンプル平均による定義

　不規則に変動する変数 $X(t)$ に対して、i 番目の測定で得られた値を $X_i(t)$ とすると、

$$\langle X(t)X(t')\rangle \equiv \lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\sum_{i}^{N} X_i(t)X_i(t') \tag{2}$$

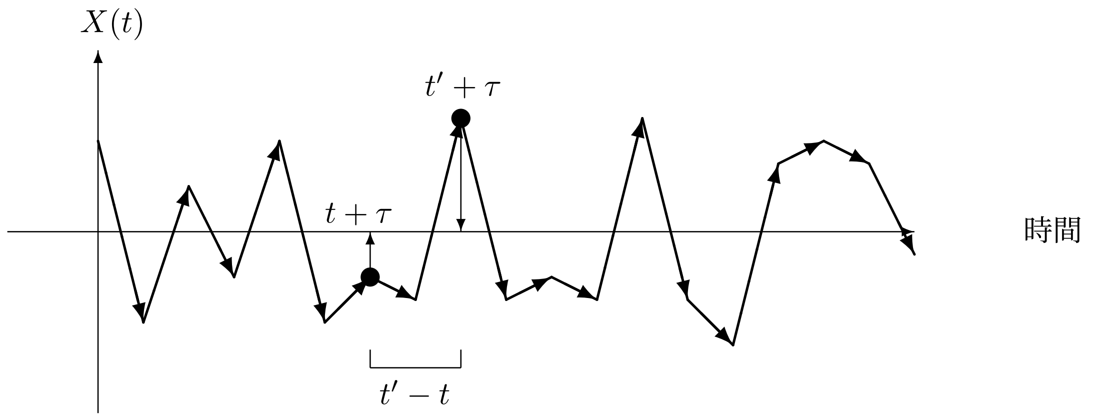
$\langle R(t)R(t')\rangle$ と同じ定義。

②時間平均による定義

定常過程 (後述) の時だけ使える定義

$$\langle X(t)X(t')\rangle \equiv \lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int_0^T X(t+\tau)X(t'+\tau)d\tau \tag{3}$$

1 つのサンプル $X(t)$ について、



時間軸にそってずらす

定常過程であっても、①と②が何時も同じになるとは限らない。等価な時をエルゴード性が成り立つという。

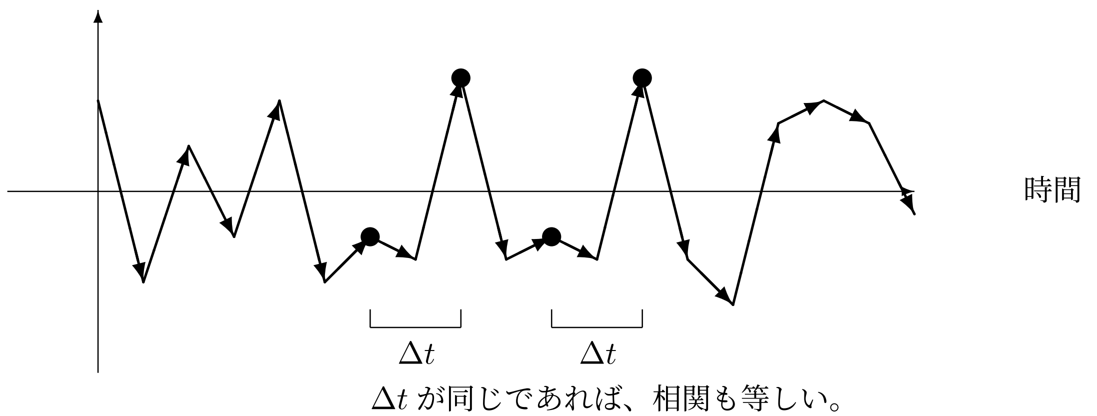
(3) 基本的な性質

○**定常過程**: 時間の原点をずらしても平均量が変わらない過程。

時間の原点をずらす: $t \to t+a$

例　1 つの時刻にしかよらない平均量 $\langle X(t)\rangle$

定常過程ならば、$\langle X(t)\rangle = \langle X(t+a)\rangle$。したがって、$\langle X(t)\rangle =$ 定数、t によらない。



Δt が同じであれば、相関も等しい。

○ $X(t)$ を複数考える。$\{X_1(t), X_2(t), \cdots\} = \{X_\mu(t)\}$ ここで、添え字は、サンプルを表すのではないことに注意。

$$\boxed{\varphi_{\mu\nu}(t) \equiv \langle X_\mu(t) X_\nu(0) \rangle} \tag{4}$$

例　3 次元のブラウン運動 $\boldsymbol{V}(t) = (V_x(t), V_y(t), V_z(t))$

$$\varphi_{11}(t) = \langle V_x(t) V_x(0) \rangle \tag{5}$$
$$\varphi_{12}(t) = \langle V_x(t) V_y(0) \rangle \tag{6}$$
$$\varphi_{31}(t) = \langle V_z(t) V_x(0) \rangle \tag{7}$$

○ 基本的な性質

● 定常過程から (**仮定**)

$$\langle X_\mu(t) X_\nu(t') \rangle = \langle X_\mu(t-t') X_\nu(0) \rangle = \langle X_\mu(0) X_\nu(t'-t) \rangle \tag{8}$$

$t' = 0$ にすると、

$$\langle X_\mu(t) X_\nu(0) \rangle = \langle X_\mu(0) X_\nu(-t) \rangle \tag{9}$$

したがって、

$$\boxed{\varphi_{\mu\nu}(t) = \varphi_{\nu\mu}(-t)} \tag{10}$$

● 特に $\mu = \nu$ の時

$$\boxed{\varphi_{\mu\mu}(t) = \varphi_{\mu\mu}(-t)} : \varphi_{\mu\mu}(t) \text{ は偶関数} \tag{11}$$

● (9) 式を t で微分

$$\langle \dot{X}_\mu(t) X_\nu(0) \rangle = -\langle X_\mu(0) \dot{X}_\nu(-t) \rangle \tag{12}$$

右辺の時間の原点を t だけずらす

$$\boxed{\langle \dot{X}_\mu(t) X_\nu(0) \rangle = -\langle X_\mu(t) \dot{X}_\nu(0) \rangle} \tag{13}$$

● 特に $\mu = \nu$ の時

$$\boxed{\dot{\varphi}_{\mu\mu}(0) = \langle \dot{X}_\mu(0) X_\mu(0) \rangle = 0} \tag{14}$$

宿題:

24 (10 点) スチルベンの異性化反応について調べなさい。文献は明記すること。それに基づいて、ランジュバン方程式をたてなさい。その場合、時間変化する変数 $X = X(t)$ や $F(X)$ およびランダム力は、何に対応するか答えなさい。また、第 2 種揺動散逸定理はどうなるか。第 2 種揺動散逸定理を使って、FP 方程式をたてなさい。

25 (10 点) 中性大気組成の組成分布について、ランジュバン方程式を考えよう。105 km 以上の高度では、粒子の高度分布は直線になり、軽いものほど上に上がる。例えば、105 km の高さでは、各成分あまり変わらないが、1000 km ほど上昇すると、N_2 が多くなる。式で書けば、平衡状態にあるとき、質量 m の粒子が z にある確率は、

$$P_{\rm eq}(z) \propto \exp[-\beta mgz] \tag{15}$$

で与えられる。ここで、$\beta = 1/(k_{\rm B}T)$、g は重力加速度を示す。第 2 種揺動散逸定理を使って、ランジュバン方程式をたてなさい。ただし、ランダム力の強さは D とする。FP 方程式をたて、下端がない時、遷移確率を計算しなさい。

26 (10 点) 授業や宿題で扱った例以外で、第 2 種揺動散逸定理の例を挙げなさい。

27 (10 点) 時間相関関数と次で扱うフーリエ変換以外に、不規則に時間変化する変数を特徴づける方法を考えなさい。

28 (10 点) 時間相関関数でエルゴード性 (サンプル平均と時間平均が一致する) が成り立たない具体的な例を挙げなさい。

29 (10 点) 1 次元の調和振動子系

$$\dot{X}(t) = P(t)/m \tag{16}$$

$$\dot{P}(t) = -m\omega^2 X(t) \tag{17}$$

で、初期分布をカノニカル分布としたとき、アンサンブル平均の定義を使って、時間相関関数を計算し、結論 1,2 を確かめなさい。ここで、$n = 2$ とし、$X_1(t) = X(t)$、$X_2(t) = P(t)$ としなさい。