2006年度非平衡物理学 授業ノート 7

2005.11.15 担当 吉森 明

§3. 線形応答理論

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

(3) 基本的な性質

補足: 遷移確率 $T(x,x',t,t')$ も時間相関関数 $\langle X(t)X(t')\rangle$ と同様、t と t' の 2 つの時間を含む。したがって、時間相関関数と同じ理由で、**定常過程ならば**、$T(x,x',t-t')$ となり、$t-t'$ にしかよらない。

(4) ランジュバン方程式との関係

① 線形ランジュバン方程式

$X(t)$ を不規則に変動する変数として、

$$\dot{X}(t) = -\gamma X(t) + R(t) \tag{1}$$

ただし、$\langle X(0)R(t)\rangle = 0, t \geq 0$ を仮定する。両辺に $X(0)$ をかけて平均する。$t \geq 0$ の時、

$$\langle \dot{X}(t)X(0)\rangle = -\gamma\langle X(t)X(0)\rangle \tag{2}$$

$\varphi(t) \equiv \langle X(t)X(0)\rangle$ とすると、

$$\dot{\varphi}(t) = -\gamma\varphi(t) \tag{3}$$

これは簡単に解けて、

$$\varphi(t) = \varphi(0)e^{-\gamma t} \tag{4}$$

$\varphi(0) = \langle X^2\rangle$ だから、

$$\boxed{\varphi(t) = \langle X^2\rangle e^{-\gamma t}} \qquad t \geq 0 \tag{5}$$

例 1. ブラウン運動

ブラウン粒子の速度を $V(t)$ とすると、ランジュバン方程式は、

$$\dot{V}(t) = -\gamma V(t) + R(t) \tag{6}$$

ここで、$\gamma = \lambda/m$(授業ノート 2(7) 式参照)。(5) 式から

$$\langle V(t)V(0)\rangle = \langle V^2\rangle e^{-\gamma t} \tag{7}$$

$\langle V^2\rangle = k_{\mathrm{B}}T/m$ だから、

$$\langle V(t)V(0)\rangle = \frac{k_{\mathrm{B}}T}{m}e^{-\gamma t} \tag{8}$$

例 2. 熱雑音の回路

コンデンサーにたまる電荷を $Q(t)$ とすると、

$$\dot{Q}(t) = -\frac{Q(t)}{CR} + R(t) \tag{9}$$

ここで、C はコンデンサーの容量、R は抵抗で、$R(t) = V(t)/R$ となっている。(5) 式から

$$\langle Q(t)Q(0)\rangle = \langle Q^2\rangle \exp[-\frac{t}{CR}] \tag{10}$$

平衡分布は、

$$P_{\mathrm{eq}}(q) \propto \exp[-\beta\frac{q^2}{2C}] \tag{11}$$

ここで、$\beta = 1/k_{\mathrm{B}}T$ とした。したがって、$\langle Q^2\rangle = Ck_{\mathrm{B}}T$ となる。これを代入すると、

$$\langle Q(t)Q(0)\rangle = Ck_{\mathrm{B}}T\exp[-\frac{t}{CR}] \tag{12}$$

② 非線形ランジュバン方程式

時間相関関数 $\varphi(t) \equiv \langle X(t)X(0)\rangle$ の平均も、§2-4 でやったように 2 つに分けれる。

1. $t=0$ で $X(0)=x'$ に確定しておいて (条件付き)、時刻 t で平均: $\langle X(t)\rangle_{x'}$ (**ランダム力による平均**)
2. x' で平均 (**初期値による平均**)

例えば、線形ランジュバン $\dot{X}(t) = -\gamma X(t) + R(t)$ を 1. で平均

$$\langle \dot{X}(t)\rangle_{x'} = -\gamma\langle X(t)\rangle_{x'} + \langle R(t)\rangle_{x'} \tag{13}$$

ランダム力は、$X(0)$ と独立に平均できるから $X(0)=x'$ という条件と関係なく

$$\langle R(t)\rangle_{x'} = \langle R(t)\rangle = 0 \tag{14}$$

ゆえに $\langle \dot{X}(t)\rangle_{x'} = -\gamma\langle X(t)\rangle_{x'}$ となる。これを解くと、$\langle X(t)\rangle_{x'} = \langle X(0)\rangle_{x'}\exp[-\gamma t]$ が得られ、$\langle\cdots\rangle_{x'}$ は、$X(0)=x'$ という条件付きだから、

$$\langle X(t)\rangle_{x'} = x'\exp[-\gamma t] \tag{15}$$

まだ、初期値による平均 2 が残っている。

$\varphi(t)$ は、x' をかけて x' で平均

$$\langle X(t)X(0)\rangle = \langle\langle X(t)\rangle_{x'}x'\rangle = \langle x'^2\rangle e^{-\gamma t} \tag{16}$$

このように平均を 2 つに分ければ、時間相関関数を遷移確率で表すことができる。まず、1. の平均は、$t=0$ で x' に確定していると言う条件の下での平均なので、遷移確率 $T(x,x',t)$ を使えば良い。

$$\langle X(t)\rangle_{x'} = \int_{-\infty}^{\infty} xT(x,x',t)dx \tag{17}$$

これは、遷移確率 $T(x,x',t)$ が $X(0)=x'$ の条件の下での確率分布になっていることから分かる。

2. の平均は、x' の平均だから、初期値が平衡分布の時、

$$\langle X(t)X(0)\rangle = \langle\langle X(t)\rangle_{x'}x'\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} xT(x,x',t)dxx'P_{\mathrm{eq}}(x')dx' \tag{18}$$

§3-2. Wiener-Khinchin の定理

目標 Wiener-Khinchin の定理を理解する。仮定と結論を覚える。具体的に以下のことを分かる。

- フーリエ変換は不規則な時間変化を特徴づける。
- 不規則に時間変化する変数のフーリエ変換は時間相関関数と関係がつく。ただし、フーリエ変換を有限時間で計算するか、無限時間でするかで、関係式が少し違う。
- 有限時間の場合は、時間相関関数は、時間平均で定義する。
- 相関関数が指数関数の時は、I_ω は**ローレンツ型**。

目次 (1) はじめに

(2) 無限時間の場合

(3) 有限時間の場合

(4) まとめと補足

仮定 1. 定常過程。

2. (3) については、時間相関関数を時間平均で定義。

$$\varphi(t) \equiv \langle X(t)X(t')\rangle \equiv \lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int_0^T X(t+\tau)X(t'+\tau)d\tau \tag{19}$$

結論　1.　無限時間の場合:

$$X_\omega \equiv \int_{-\infty}^{\infty} X(t) e^{i\omega t} dt \tag{20}$$

として、

$$\boxed{\langle X_\omega X_{\omega'} \rangle = 2\pi\delta(\omega + \omega')\tilde{\varphi}(\omega)} \tag{21}$$

ただし、

$$\tilde{\varphi}(\omega) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \varphi(t) dt \tag{22}$$

2.　有限時間の場合:

$$I_\omega \equiv \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} X_\omega(T)^* X_\omega(T) \tag{23}$$

ここで

$$X_\omega(T) \equiv \int_0^T X(t) e^{i\omega t} dt \tag{24}$$

とすると、

$$\boxed{I_\omega = \tilde{\varphi}(\omega)} \tag{25}$$

3-2 **で解けるようになる問題**　ブラウン粒子の速度について、I_ω を求めなさい。

(2) 無限時間の場合

(20) 式を使って

$$\langle X_\omega X_{\omega'} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dt\ e^{i\omega t} \int_{-\infty}^{\infty} dt' e^{i\omega' t'} \langle X(t) X(t') \rangle \tag{26}$$

定常 (仮定 1) から、$\langle X(t) X(t') \rangle = \varphi(t - t')$。だから、

$$\langle X_\omega X_{\omega'} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dt\ e^{i\omega t} \int_{-\infty}^{\infty} dt' e^{i\omega' t'} \varphi(t - t') \tag{27}$$

これは計算すると、

$$\langle X_\omega X_{\omega'} \rangle = 2\pi\delta(\omega + \omega') \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega s} \varphi(s) ds \tag{28}$$

となる (宿題 33 参照)。(22) 式を使うと、

$$\boxed{\langle X_\omega X_{\omega'} \rangle = 2\pi\delta(\omega + \omega')\tilde{\varphi}(\omega)} \tag{29}$$

これは、$\langle X_\omega X_{\omega'} \rangle$ は、$\omega' = -\omega$ の時だけ値があり、**時間相関関数のフーリエ変換に比例する**ことを表している。

(3) 有限時間の場合

実際は有限の時間しか測れないので、

$$X_\omega(T) = \int_0^T X(t) e^{i\omega t} dt \tag{30}$$

ここで、以下の様に**スペクトル密度 (パワースペクトル、スペクトル強度)** を定義する。

$$\boxed{I_\omega \equiv \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} X_\omega(T)^* X_\omega(T)} \tag{31}$$

ここで、$X_\omega(T)^*$ は、$X_\omega(T)$ の複素共役をあらわす。この極限は、以下でみるように、時間相関関数のフーリエ変換があれば、存在する。また、**1 つの軌道で計算できる**。

この定義式 (31) に (30) 式を代入する。

$$I_\omega = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt' e^{-i\omega t'} \int_0^T dt\, e^{i\omega t} X(t) X(t') \tag{32}$$

$$= \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt' \int_0^T dt\, e^{-i\omega(t'-t)} X(t) X(t') \tag{33}$$

2 つの積分変数 (t, t') を (s, t) に変数変換する。ただし、$s = t - t'$ とする。ヤコビアンは

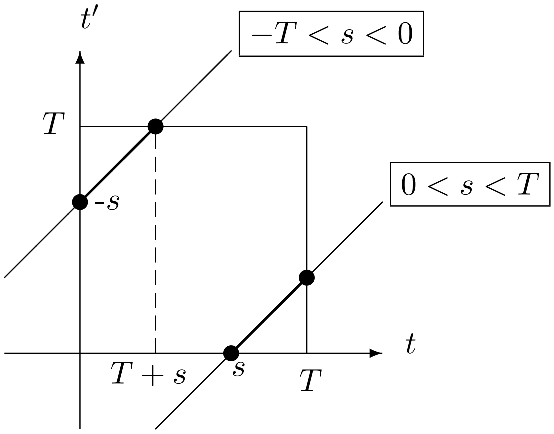
$$\left(\frac{\partial s}{\partial t}\right)_{t'} \left(\frac{\partial t}{\partial t'}\right)_t - \left(\frac{\partial t}{\partial t}\right)_{t'} \left(\frac{\partial s}{\partial t'}\right)_t = 1 \times 0 - 1 \times (-1) = 1 \tag{34}$$

したがって、

$$I_\omega = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \iint_{0<t'<T, 0<t<T} dt ds\, e^{i\omega s} X(t) X(t-s) \tag{35}$$

次に積分範囲考える。

[積分範囲:] **積分の順序**は、まず s を固定し t で積分し、その後で s を積分する。その時、積分範囲は、下の図のようになる。



- **t の積分範囲は、s によって変る。**

s を固定して t で積分

↓

左図で斜線を 1 本固定して斜線の上を積分

積分するのは 四角の中だけ	⟶	t の積分範囲 は黒丸の間

この範囲は s がどこにあるかによって変る。

つまり、

$$0 < s < T \text{ の時は} \qquad s < t < T \tag{36}$$

$$-T < s < 0 \text{ の時は} \qquad 0 < t < T + s \tag{37}$$

結局 t の積分範囲は、s の値によって変るので、**s の積分を 2 つに分けなければならない。**

$$I_\omega = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \left\{ \int_0^T ds \int_s^T dt\; e^{i\omega s} X(t)X(t-s) + \int_{-T}^0 ds \int_0^{T+s} dt\; e^{i\omega s} X(t)X(t-s) \right\} \tag{38}$$

1 項目は、t を $\tau = t - s$ に変数変換すると、

$$I_\omega = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \left\{ \int_0^T ds\; e^{i\omega s} \int_0^{T-s} X(\tau+s)X(\tau)d\tau + \int_{-T}^0 ds\; e^{i\omega s} \int_0^{T+s} X(t)X(t-s)dt \right\} \tag{39}$$

さらに書き換えて、

$$I_\omega = \int_0^\infty ds\; e^{i\omega s} \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int_0^{T-s} X(\tau+s)X(\tau)d\tau + \int_{-\infty}^0 ds\; e^{i\omega s} \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int_0^{T+s} X(t)X(t-s)dt \tag{40}$$

$\varphi(t)$ に**時間平均の定義 (仮定 2) を使うと**、(40) 式の 1 項目と 2 項目の s の被積分関数は、$T \to \infty$ で、それぞれ $\varphi(s)$ と $\varphi(-s)$ となる。従って、

$$I_\omega = \int_0^\infty ds\ e^{i\omega s}\varphi(s) + \int_{-\infty}^0 ds\ e^{i\omega s}\varphi(-s) = \int_{-\infty}^\infty ds\ e^{i\omega s}\varphi(s) = \tilde{\varphi}(\omega) \tag{41}$$

ここで、$\varphi(-s) = \varphi(s)$ を使った。

宿題:

30 (20 点) $X(t)$ が以下の線形ランジュバン方程式

$$\dot{X}(t) = -\gamma X(t) + R(t) \tag{42}$$

に従う時、授業で説明したように相関関数は、$\varphi(t) = \langle X(t)X(0)\rangle = \langle X^2\rangle e^{-\gamma t}$ となる。これは、相関関数の性質 $\dot{\varphi}(0) = 0$ を満たさないように見える。なぜか説明しなさい。ただし、$\langle R(t)R(t')\rangle = D\delta(t-t')$ として、$D = 2\gamma\langle X^2\rangle$ とすれば、$X(t)$ は定常過程であると示せる。

31 (10 点) 宿題21 で調べたブラウン運動の遷移確率および Maxwell 分布を使って、(18) 式を計算し、 (8) 式になることを確かめなさい。

32 (10 点) 実際に不規則に時間変化する変数のデータから I_ω を数値的に求めなさい。

33 (5 点) 並進対称性のある N 粒子系で

$$\langle\sum_{i,j}^N e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_i + i\mathbf{k}'\mathbf{r}_j}\rangle = \langle\sum_{i,j}^N e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}\rangle\delta(\mathbf{k}+\mathbf{k}') \tag{43}$$

となることを示しなさい。

34 (10 点) 線形ランジュバン方程式の場合、FP 方程式を経由しなくても、すなわち §2-2 の仮定がなりたっていなくても、Wiener-Khinchin の定理を使えば、第 2 種揺動散逸定理は証明できる。特にブラウン運動を考えて、アインシュタインの関係式を導きなさい。