2007 年度非平衡物理学 授業ノート 6

2006.11.7 担当 吉森 明

§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 の定義はこれまでの平均の定義の他に時間平均によるものがある。
- 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

(5) まとめ

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、$\dot{\varphi}_{\mu\mu}(0) = 0$

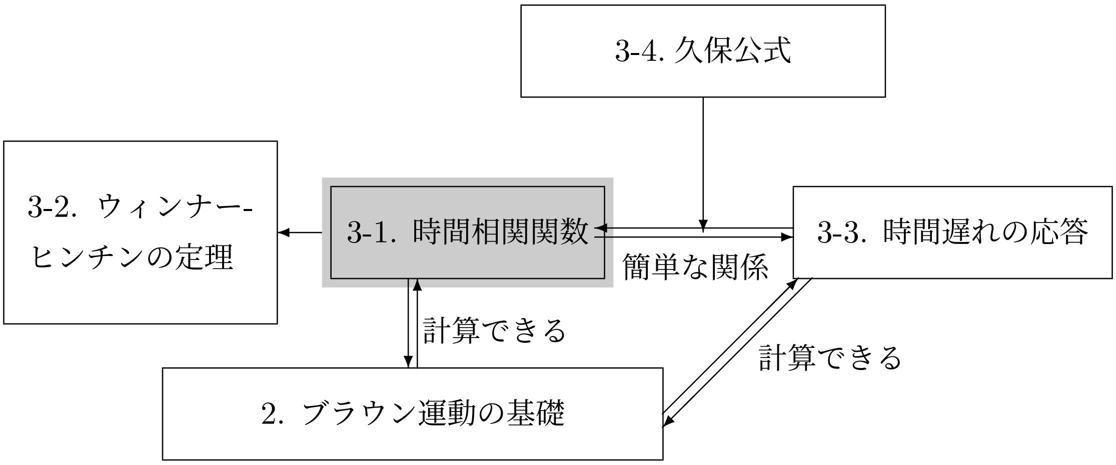
3. $n = 1$ のとき、

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

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

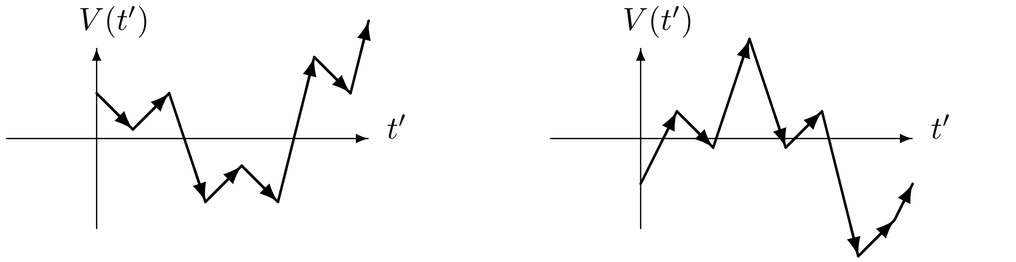
例題 ブラウン運動で、微粒子の速度を $V(t)$、加速度 $A(t) = \dot{V}(t)$ としたとき、$\langle A(t)A(0)\rangle$ を求めなさい。

(1) §3 の流れ



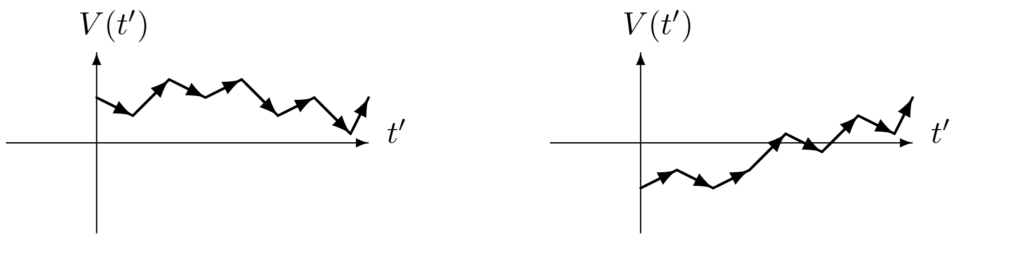
(2) 定義と物理的な意味

○ 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**:

平均の定義の仕方で 2 種類ある。

①これまでの平均による定義

不規則に変動する変数 $X(t)$ をそれぞれの時刻で確率変数と見なして平均を定義する。これは、ランダム力の平均の定義と同じ (「授業ノート 2」P3 参照)。概念的には、何回も測定して平均を取るのと同じだと考えて良い。つまり、i 番目の測定で得られた値を $X_i(t)$ とすると、

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

ここで、N は測定回数を表す。

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

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

この定義では、平均は 1 回の測定で得られる。

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。

○ 記憶

今、$\langle X(t)\rangle = 0$ とすると、$X(t)$ と $X(t')$ が独立ならば、

$$\langle X(t)X(t')\rangle = \langle X(t)\rangle\langle X(t')\rangle = 0 \tag{4}$$

となる。一方、相関があれば、$\langle X(t)X(t')\rangle \neq 0$ となる。

もし $t < t'$ の時、$\langle X(t)X(t')\rangle \neq 0$ で相関があれば、

$$\boxed{t\ \text{の}\ X\ \text{の値}} \xrightarrow{\text{影響}} \boxed{t'\ \text{の}\ X\ \text{の値}}$$

ということなので、t' の時刻に t の X の値を「覚えている」と考えられる。このことから、時間相関関数を「記憶」と結びつけて表現することがある。多くの場合、$t\to\infty$ で $\langle X(t)X(t')\rangle \to 0$ なので、「記憶がなくなる」と言う。

(3) 基本的な性質

○**定常過程**: 時刻の原点をずらしても $\boxed{\text{平均量}}$ (あるいは分布) が変わらない過程。平均する前の量 $X(t)$ は変わる。

*「時間の原点をずらす」: a を任意の定数として、t を $t+a$ に置き換える。

- 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、t を $t+a$ に置き換えても値が変わらないので、$\langle X(t)\rangle = \langle X(t+a)\rangle$ が成り立つ。したがって、$\langle X(t)\rangle =$ 定数となり、t によらない。
- 2 つの時刻による平均量 $\langle X(t)X(t')\rangle$: t と t' による。
  定常過程ならば、t と t' をそれぞれ $t+a$ と $t'+a$ に置き換えても値が変わらないので、

$$\langle X(t+a)X(t'+a)\rangle = \langle X(t)X(t')\rangle \tag{5}$$

  $a = -t'$ とすると、

$$\langle X(t-t')X(0)\rangle = \langle X(t)X(t')\rangle \tag{6}$$

  左辺は $t-t'$ にしかよらないので、

$$\varphi(t-t') \equiv \langle X(t-t')X(0)\rangle = \langle X(t)X(t')\rangle \tag{7}$$

これらの性質は時間変化する外場がある場合や初期値が決まっている場合は、定常過程ではないので成り立たない。たとえば、コロイドにレーザーをかけるとき、レーザーを動かすと時間の原点を変えられないので、定常過程ではない。

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

$$\boxed{\varphi_{\mu\nu}(t) \equiv \langle X_\mu(t)X_\nu(0)\rangle} \tag{8}$$

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

$$\varphi_{11}(t) = \langle V_x(t)V_x(0)\rangle \tag{9}$$

$$\varphi_{12}(t) = \langle V_x(t)V_y(0)\rangle \tag{10}$$

$$\varphi_{31}(t) = \langle V_z(t)V_x(0)\rangle \tag{11}$$

○ 基本的な性質

● **定常過程から(仮定)**

$$\langle X_\mu(t)X_\nu(t')\rangle = \langle X_\mu(t-t')X_\nu(0)\rangle = \langle X_\mu(0)X_\nu(t'-t)\rangle \tag{12}$$

$t' = 0$ にすると、

$$\langle X_\mu(t) X_\nu(0) \rangle = \langle X_\mu(0) X_\nu(-t) \rangle \tag{13}$$
$$= \langle X_\nu(-t) X_\mu(0) \rangle \tag{14}$$

したがって、

$$\boxed{\varphi_{\mu\nu}(t) = \varphi_{\nu\mu}(-t)} \tag{15}$$

● 特に $\mu = \nu$ の時

$$\boxed{\varphi_{\mu\mu}(t) = \varphi_{\mu\mu}(-t)} : \varphi_{\mu\mu}(t) \text{ は偶関数} \tag{16}$$

● (13) 式を t で微分

$$\langle \dot{X}_\mu(t) X_\nu(0) \rangle = -\langle X_\mu(0) \dot{X}_\nu(-t) \rangle \tag{17}$$

右辺の時間の原点を t だけずらす

$$\boxed{\langle \dot{X}_\mu(t) X_\nu(0) \rangle = -\langle X_\mu(t) \dot{X}_\nu(0) \rangle} \tag{18}$$

● 特に $\mu = \nu$ の時

$$\boxed{\dot{\varphi}_{\mu\mu}(0) = \langle \dot{X}_\mu(0) X_\mu(0) \rangle = 0} \tag{19}$$

○ 具体例

水等の液体中の液体粒子 1 つを考える (3 次元)。粒子の速度を $V_x(t)$、$V_y(t)$、$V_z(t)$ として、$X_1(t)$、$X_2(t)$、$X_3(t)$ と対応させる。この場合もまわりの粒子とぶつかるので、粒子の速度は不規則にゆらぐ。時間相関関数は、

$$\varphi_{11}(t) = \langle V_x(t) V_x(0) \rangle \tag{20}$$
$$\varphi_{12}(t) = \langle V_x(t) V_y(0) \rangle \tag{21}$$

等だ。(14) 式は、

$$\langle V_x(t) V_y(0) \rangle = \langle V_y(-t) V_x(0) \rangle \tag{22}$$

(16) 式は、

$$\langle V_x(t) V_x(0) \rangle = \langle V_x(-t) V_x(0) \rangle \tag{23}$$

また、(18) 式は、

$$\langle \dot{V}_x(t) V_y(0) \rangle = -\langle V_x(t) \dot{V}_y(0) \rangle \tag{24}$$

ここで、$\dot{V}_x(t)$ は加速度を表す。(19) 式は、

$$\langle \dot{V}_x(0)V_x(0)\rangle = 0 \tag{25}$$

つまり、加速度と速度の同時刻の相関は無い。

(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、

$$\dot{X}(t) = -\gamma X(t) + R(t) \tag{26}$$

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、

$$\langle \dot{X}(t)X(0)\rangle = -\gamma\langle X(t)X(0)\rangle \tag{27}$$

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

$$\dot{\varphi}(t) = -\gamma\varphi(t) \tag{28}$$

これは簡単に解けて、

$$\varphi(t) = \varphi(0)e^{-\gamma t} \tag{29}$$

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

$$\boxed{\varphi(t) = \langle X^2\rangle e^{-\gamma t}} \qquad t \geq 0 \tag{30}$$

つまり、$X(t)$ **が線形ランジュバン方程式にしたがう場合は、時間相関関数は指数関数**になる。

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、

$$\dot{V}(t) = -\gamma V(t) + R(t) \tag{31}$$

ここで、$\gamma = \lambda/m$(授業ノート 2(7) 式参照)。(30) 式から

$$\langle V(t)V(0)\rangle = \langle V^2\rangle e^{-\gamma t} \tag{32}$$

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

$$\langle V(t)V(0)\rangle = \frac{k_{\mathrm{B}}T}{m}e^{-\gamma t} \tag{33}$$

■例題の答え　$A(t)=\dot{V}(t)$ なので、

$$\langle A(t)A(0)\rangle = \langle \dot{V}(t)\dot{V}(0)\rangle \tag{34}$$

(18) 式より

$$= -\langle \ddot{V}(t)V(0)\rangle \tag{35}$$

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

$$= -\ddot{\varphi}(t) \tag{36}$$

(33) 式から、

$$= -\frac{k_{\mathrm{B}}T}{m}\gamma^2 e^{-\gamma t} \tag{37}$$

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、

$$\dot{Q}(t) = -\frac{Q(t)}{CR} + R(t) \tag{38}$$

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。(30) 式から

$$\langle Q(t)Q(0)\rangle = \langle Q^2\rangle \exp[-\frac{t}{CR}] \tag{39}$$

$\langle Q^2\rangle$ を計算するために平衡分布を考える。

$$P_{\mathrm{eq}}(q) = A\exp[-\beta\frac{q^2}{2C}] \tag{40}$$

ここで、A は規格化定数で、$\beta = 1/k_{\mathrm{B}}T$ とした。したがって、

$$\langle Q^2\rangle = \int q^2 A\exp[-\beta\frac{q^2}{2C}]dq = Ck_{\mathrm{B}}T \tag{41}$$

となる。これを代入すると、

$$\langle Q(t)Q(0)\rangle = Ck_{\mathrm{B}}T\exp[-\frac{t}{CR}] \tag{42}$$

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

$$\langle \dot{X}(t)\rangle_{x'}=-\gamma\langle X(t)\rangle_{x'}+\langle R(t)\rangle_{x'} \tag{43}$$

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

$$\langle R(t)\rangle_{x'}=\langle R(t)\rangle=0 \tag{44}$$

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、

$$\langle X(t)\rangle_{x'}=x'\exp[-\gamma t] \tag{45}$$

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

$$\langle X(t)X(0)\rangle=\langle\langle X(t)\rangle_{x'}x'\rangle_0=\langle x'^2\rangle_0 e^{-\gamma t} \tag{46}$$

ここで、$\langle\cdots\rangle_0$ は、初期値 x' に対する平均を表す。

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。

$$\langle X(t)\rangle_{x'}=\int_{-\infty}^{\infty}xT(x,x',t)dx \tag{47}$$

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 $P_{\mathrm{eq}}(x)$ の時、

$$\langle X(t)X(0)\rangle=\langle\langle X(t)\rangle_{x'}x'\rangle_0=\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}xT(x,x',t)dx\,x'P_{\mathrm{eq}}(x')dx' \tag{48}$$

宿題:

31 (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、

$$P_{\mathrm{eq}}(z) \propto \exp[-\beta m g z] \tag{49}$$

で与えられる。ここで、$\beta = 1/(k_{\mathrm{B}}T)$、$g$ 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。

32 (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。

33 (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。

34 (10 点) 3 つの時刻を含む平均 $\langle X(t_1)X(t_2)X(t_3)\rangle$ について、定常過程なら成り立つ性質を導きなさい。また、時間平均による定義を考えなさい。

35 (10 点) P.5 で挙げた液体粒子の例について、液体粒子に働くすべての力の合力 $\mathbf{F}$ と液体粒子の位置ベクトル $\mathbf{r}$ の同時刻の平均 $\langle \mathbf{F}\cdot\mathbf{r}\rangle$ を計算しなさい。ここで、$\mathbf{F}\cdot\mathbf{r}$ は、ベクトル $\mathbf{F}$ と $\mathbf{r}$ の内積を表し、液体粒子の速度はマクスウェル分布になっているとする。

36 (10 点) レーザートラップのコロイド粒子 (1 次元) を考える。コロイドの位置を X として、レーザーがつくるポテンシャルが $u(X) = -kX^2/2$ の時、時間相関関数 $\langle X(t)X(0)\rangle$ を計算しなさい。ただし、$X = X(t)$ は、ランジュバン方程式

$$\dot{X}(t) = -\frac{u'(X)}{\lambda} + R(t) \tag{50}$$

にしたがうとする。ここで、$u'(X)$ は、$u(X)$ の X 微分を表す。

37 (20 点) ランダム力が無い場合に時間相関関数がどうなるか考えよう。P.7 の② **非線形ランジュバン方程式**での説明から、ランダム力が無いと初期値による平均だけになる。今、1 次元の調和振動子系

$$\dot{X}(t) = P(t)/m \tag{51}$$

$$\dot{P}(t) = -m\omega^2 X(t) \tag{52}$$

で、初期値 $X(0) = X_0, P(0) = P_0$ を使って、$X(t)$ を計算し、カノニカル分布で初期値を平均することで $\langle X(t)X(0)\rangle$ を計算しなさい。この $\langle X(t)X(0)\rangle$ が**結論**1のとおり偶関数になっていることを確かめなさい。