2007 年度非平衡物理学 授業ノート 7

2007.11.14 担当 吉森 明

§3. 線形応答理論

§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。
- 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) ローレンツ型

(5) まとめ

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。

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

結論 1. 無限時間の場合:

$$X_\omega \equiv \int_{-\infty}^{\infty} X(t)e^{i\omega t}dt \tag{2}$$

として、

$$\boxed{\langle X_\omega X_{\omega'}\rangle = 2\pi\delta(\omega+\omega')\tilde{\varphi}(\omega)} \tag{3}$$

ただし、

$$\tilde{\varphi}(\omega) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t}\varphi(t)dt \tag{4}$$

2. 有限時間の場合:

$$I_\omega \equiv \lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}X_\omega(T)^* X_\omega(T) \tag{5}$$

ここで

$$X_\omega(T) \equiv \int_0^T X(t) e^{i\omega t} dt \tag{6}$$

および、$X_\omega(T)^*$ は $X_\omega(T)$ の複素共役。その時、

$$\boxed{I_\omega = \tilde{\varphi}(\omega)} \tag{7}$$

例題　ブラウン粒子の速度について、I_ω を求めなさい。

(1) はじめに

○ 時間相関間関数は、不規則に時間変化する変数 $X(t)$ を特徴づけるものだった。この時間相関間関数の他に特徴づけられるものは無いだろうか。

フーリエ変換

$$X_\omega = \int_{-\infty}^{\infty} X(t) e^{i\omega t} dt \tag{8}$$

は $X(t)$ に周期的な変動があればそれを取り出せる。X_ω **でも特徴づけられる。**

○ Wiener-Khinchin の定理

$$X_\omega \underset{\text{等価}}{\longleftrightarrow} \text{時間相関間関数}$$

ただし、X_ω の定義が 2 つある。

1. 普通の定義: 積分範囲が $-\infty$ から ∞
2. 有限時間の定義

実際のデータを処理するときは、2. が便利。

(2) 無限時間の場合

(2) 式を使って

$$\langle X_\omega X_{\omega'} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dt\ e^{i\omega t} \int_{-\infty}^{\infty} dt' e^{i\omega' t'} \langle X(t) X(t') \rangle \tag{9}$$

定常過程 (**仮定**1) から、$\langle X(t) X(t') \rangle = \varphi(t - t')$ が成り立つ。だから、

$$\langle X_\omega X_{\omega'} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dt\ e^{i\omega t} \int_{-\infty}^{\infty} dt' e^{i\omega' t'} \varphi(t - t') \tag{10}$$

これは計算すると、

$$\langle X_\omega X_{\omega'} \rangle = 2\pi\delta(\omega+\omega') \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega s}\varphi(s)ds \tag{11}$$

となる (宿題 41 参照)。(4) 式を使うと、

$$\boxed{\langle X_\omega X_{\omega'} \rangle = 2\pi\delta(\omega+\omega')\tilde{\varphi}(\omega)} \tag{12}$$

(12) 式は、$\langle X_\omega X_{\omega'} \rangle$ 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、

$$X_\omega(T) = \int_0^T X(t)e^{i\omega t}dt \tag{13}$$

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。

$$\boxed{I_\omega \equiv \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} X_\omega(T)^* X_\omega(T)} \tag{14}$$

$X_\omega(T)^*$ 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 (14) に (13) 式を代入する。

$$I_\omega = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt' e^{-i\omega t'} \int_0^T dt\, e^{i\omega t} X(t)X(t') \tag{15}$$

$$= \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \int_0^T dt'\, e^{-i\omega(t'-t)} X(t)X(t') \tag{16}$$

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

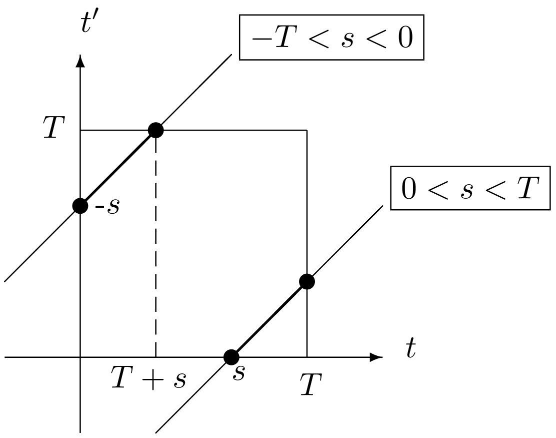
$$\left(\frac{\partial s}{\partial t}\right)_{t'} \left(\frac{\partial t}{\partial t'}\right)_t - \left(\frac{\partial t}{\partial t}\right)_{t'} \left(\frac{\partial s}{\partial t'}\right)_t = 1\times 0 - 1\times(-1) = 1 \tag{17}$$

したがって、

$$I_\omega = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \iint_{0<t'<T, 0<t<T} dtds\, e^{i\omega s} X(t)X(t-s) \tag{18}$$

ここではまだ積分範囲を s と t で書いていない。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 で積分するということは、左図でいうと、斜線を 1 本固定して斜線の上を積分することだ。積分するのは四角の中だけだから、t の積分範囲は黒丸の間をとれば良い。ところが、この範囲は s がどこにあるかによって変る。

つまり、

$$0 < s < T \text{ の時は} \qquad s < t < T \tag{19}$$

$$-T < s < 0 \text{ の時は} \qquad 0 < t < T + s \tag{20}$$

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。(18) 式は、

$$I_\omega = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \left\{ \int_0^T ds \int_s^T dt\ e^{i\omega s} X(t) X(t-s) \right. \\ \left. + \int_{-T}^0 ds \int_0^{T+s} dt\ e^{i\omega s} X(t) X(t-s) \right\} \tag{21}$$

1 項目は、t を $\tau = t - s$ に変数変換すると、

$$I_\omega = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \left\{ \int_0^T ds\ e^{i\omega s} \int_0^{T-s} X(\tau + s) X(\tau) d\tau \right. \\ \left. + \int_{-T}^0 ds\ e^{i\omega s} \int_0^{T+s} X(t) X(t-s) dt \right\} \tag{22}$$

さらに書き換えて、

$$I_\omega = \int_0^\infty ds\ e^{i\omega s} \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int_0^{T-s} X(\tau+s)X(\tau)d\tau + \int_{-\infty}^0 ds\ e^{i\omega s} \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int_0^{T+s} X(t)X(t-s)dt \tag{23}$$

$\varphi(t)$ に**時間平均の定義 (仮定 2)**(1) **式を使うと**、(23) 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、

$$I_\omega = \int_0^\infty ds\ e^{i\omega s}\varphi(s) + \int_{-\infty}^0 ds\ e^{i\omega s}\varphi(-s) = \int_{-\infty}^\infty ds\ e^{i\omega s}\varphi(s) = \tilde{\varphi}(\omega) \tag{24}$$

ここで、$\varphi(-s) = \varphi(s)$(**仮定**1) を使った。

(4) ローレンツ型

線形ランジュバン方程式の場合、時間相関間関数は、

$$\varphi(t) \equiv \langle X(t)X(0)\rangle = \langle X^2\rangle e^{-\gamma t} \tag{25}$$

(「授業ノート 6」の (30) 式参照)。ただし、$\boxed{t \geq 0}$

定常過程を仮定すると、$\varphi(t) = \varphi(-t)$ だから、すべての t で、

$$\varphi(t) = \langle X^2\rangle e^{-\gamma|t|} \tag{26}$$

これをフーリエ変換すると (宿題 44 参照)、

$$I_\omega = \tilde{\varphi}(\omega) = \frac{2\langle X^2\rangle\gamma}{\omega^2+\gamma^2} \qquad : \boxed{\text{ローレンツ型}} \tag{27}$$

■例題の答え　「授業ノート 6」(33) 式に $t < 0$ も含めると

$$\langle V(t)V(0)\rangle = \frac{k_{\mathrm{B}}T}{m}e^{-\gamma|t|} \tag{28}$$

フーリエ変換は、

$$I_\omega = \frac{2k_{\mathrm{B}}T\gamma}{m}\frac{1}{\omega^2+\gamma^2} \tag{29}$$

(5) まとめ

○ 不規則に時間変化する量 $X(t)$ を特徴づけるものとして次の 2 つがある。

1. 時間相関間関数 $\varphi(t) = \langle X(t)X(0)\rangle$
2. フーリエ変換 X_ω

この 2 つを結びつけるのが、Wiener-Khinchin の定理。この 2 つは完全に等価。同じ情報しか含まれていない。ただし、

- X_ω の定義で関係式が少し違う。
- X_ω を有限時間で定義するときは、$\langle X(t)X(0)\rangle$ は時間平均。

○ I_ω のメリット

$\varphi(t)$ と I_ω は全く等価なので、片方が分かればもう片方も計算できる。$\varphi(t)$ は、(1) 式、I_ω は (5) 式から計算できて、どちらを使うかはデータ処理をしやすい方にすれば良い。

ただし、I_ω を使うと $X(t)$ が持っている特徴的な時定数を見つけやすいことがある。今、時間相関関数が線形ランジュバン方程式のように指数関数で表される場合を考える。

$$\varphi(t) = \langle X^2\rangle e^{-|t|/\tau} \tag{30}$$

ここで、τ は $X(t)$ を特徴づける時定数と考えることが出来る。

しかし、横軸 t、縦軸 $\varphi(t)$ のグラフから τ は分りにくい。ところが、I_ω の場合は、横軸を ω、縦軸を ωI_ω とすると、$\omega = 1/\tau$ の所にピークがあらわれる (宿題 44 参照)。

宿題:

38 (20 点) $X(t)$ が以下の線形ランジュバン方程式

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

にしたがう時、授業で説明したように相関関数は、

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

となる。ところがこれは、相関関数の性質 $\dot{\varphi}(0) = 0$ を満たしていない。(32) 式が間違っているのか、$\dot{\varphi}(0) = 0$ が間違っているか、どちらが違うのか答えて、その理由を説明しなさい。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。

39 (20 点)「授業ノート 5」(5) 式で与えられるブラウン運動の遷移確率および Maxwell 分布を使って、「授業ノート 6」(1) 式を計算し、(33) 式になることを確かめなさい。

40 (20 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。

41 (10 点) (11) 式を導きなさい。また、並進対称性のある N 粒子系で $\mathbf{r}_i$ を i 番目の粒子の位置とすると、

$$\langle\sum_{i,j}^{N} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_i+i\mathbf{k}'\mathbf{r}_j}\rangle = \langle\sum_{i,j}^{N} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j)}\rangle\delta(\mathbf{k}+\mathbf{k}') \tag{33}$$

となることを示しなさい。

42 (10 点) 有限時間の場合でも相関関数の定義に時間平均を使わない場合を考える。(14) 式で与えられる I_ω の平均 $\langle I_\omega\rangle$ を計算しなさい。

43 (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。

44 (10 点) (27) 式を導きなさい。$\gamma = 1/\tau$ の時、(27) 式の ωI_ω が $\omega = 1/\tau$ で最大になることを示しなさい。また、(27) 式を使って熱雑音の回路 (「授業ノート 4」P5 参照) で、コンデンサーにたまる電荷の I_ω を求めなさい。

45 (10 点) レーザートラップのコロイド粒子 (1 次元) をコロイド粒子の質量 m を無視せずに考える。

$$m\ddot{X}(t) = -\lambda\dot{X}(t) - u'(X(t)) + R(t) \tag{34}$$

ここで、X はコロイド粒子の位置、$-\lambda\dot{X}(t)$ は水分子からの抵抗、$u(X)$ はレーザーのつくるポテンシャルで、$u'(X)$ はその微分を表し、$R(t)$ はランダム力を表す。今、$u(X) = -kX^2/2$ を仮定するとき、$X(t)$ から計算できる I_ω を求めなさい。ただし、$t \geq 0$ で $\langle X(0)R(t)\rangle = 0$ とする。