Fluktuációk és korrelációk

Az előadás célja.

Bevezetjük fluktuáló dinamikai folyamatok időkorrelációinak fogalmát és a túlcsillapított lineáris oszcillátor példáján megmutatjuk, hogy a sztochasztikus differenciál egyenletek hogyan használhatók számolásukra és megértésükre. Alkalmazásként, a kapott eredményeket felhasználjuk áram és feszültségfluktuációk leírására egyszerű áramkörökben.

Dinamikai jellemzők: Időkorrelációk

Fluktuáló fizikai mennyiségek mérése során gyakran találkozunk az 1. ábra baloldali képéhez hasonló idősorokkal. A kérdés az, hogy mit tudunk kideríteni az adott idősorból. Természetesen megmérhetjük $\langle x\rangle$ és $\langle x^2\rangle$ értékét, s ebből képet kaphatunk arról, hogy az x értéke mennyire megbízható, mennyire fluktuál az átlagérték körül. De tovább is mehetünk, s kimérhetjük az x eloszlásfüggvényét (lásd 1. ábra jobb oldali képe), amiből, feltételezve, hogy a rendszer egyensúlyban van, s ismerjük a hőmérsékletet, következtetni tudunk arra, hogy a részecske milyen potenciálban mozog:

$$P^e(x) = Ce^{-U(x)/k_BT} \quad \rightarrow \quad U(x) = -k_BT\ln P^e(x) + const \quad . \tag{1}$$

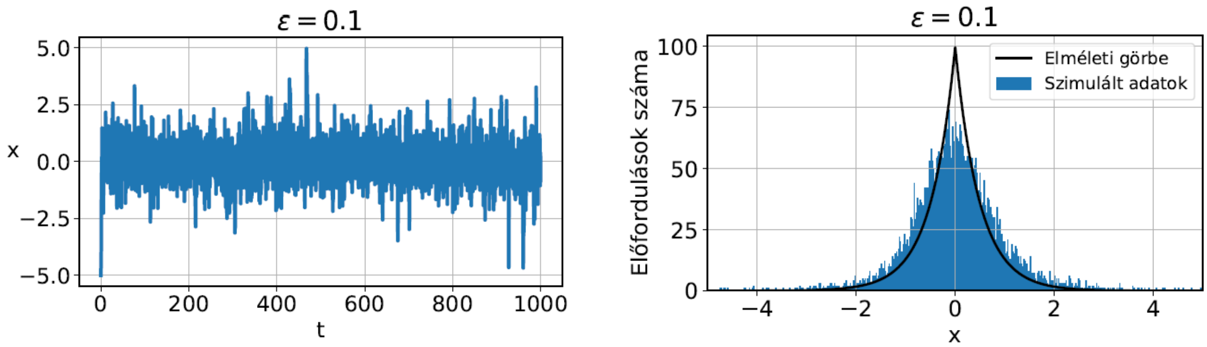

FIG. 1: Bal oldali kép: Részecske túlcsillapított mozgása $U(x) \sim |x|$ potenciálban adott T hőmérsékleten. Jobb oldali kép: A részecske helyzetének eloszlásfüggvénye. (HF10 egyik feladata, a képek Szokody Márk dolgozatából.)

A fent említett mennyiségek mind az egyensúllyal kapcsolatosak, s mint tudjuk az egyensúlyi tulajdonságok függetlenek a dinamikától. Kérdés, hogy milyen dinamikai jellemzőkre tudunk következtetni az 1.ábra idősorából.

Az egyszerű túlcsillapított oszcillátor esetén (de igen sok más rendszerben is) van egy erő (a rugó), ami húzza vissza a golyót az egyensúly felé (általános esetben az egyensúly felé egy u.n. "általánosított termodinamikai erő" viszi a rendszert). A visszahúzó erővel szemben állnak a véletlenszerű hőmérsékleti fluktuációkból eredő erők (zaj), valamint a súrlódás, amely a visszahúzó erő hatását befolyásolja, azaz a visszatérés gyorsaságában játszik szerepet (általános esetben ez a dinamikai folyamatok időskáláját meghatározó kinetikus együttható). Mindezen erők együttese azt adja, hogy a rendszer relaxál az egyensúlyhoz, s az egyensúly körül fluktuál. Az egyensúlyi fluktuációk relaxációja lényeges információt tartalmaz a rendszer dinamikai paramétereiről, s a továbbiakban azt vizsgáljuk, hogyan tudjuk meghatározni ezt a relaxációs időt.

Az első kérdés az, hogy hogyan mérjük a relaxációs időt. Erre szolgál a idő-korrelációk mérése. A 3. ábrán látható $x(t)$ értékek egyensúlytól való eltéréseiről azt várjuk, hogy a relaxációs időn túl az eltérések függetlenek egymástól, tehát a következő függvény

$$C(t,t') = \langle\, x(t)\, x(t')\,\rangle - \langle\, x(t)\,\rangle\,\langle\, x(t')\rangle\,\rangle = \langle\, [x(t) - \langle x(t)\rangle]\ [\, x(t') - \langle x(t')\,]\,\rangle \tag{2}$$

nullához tart, ha az időkülönbség $|t-t'|$ nagyobb, mint a relaxációs idő $|t-t'| > \tau_{rel}$. Kis időkülönbségek esetén ($|t-t'| \to 0$) pedig $C(t,t) = \langle [\, x(t) - \langle x(t)\rangle\,]^2\rangle$, mai nem más, mint az egyensúlyi fluktuációk nagysága. Tehát mérve, hogy milyen $|t-t'|$ különbségeknél csökken $C(t,t')$ az egyensúlyi fluktuációktól nullára, becslést kapunk a relaxációs időre.

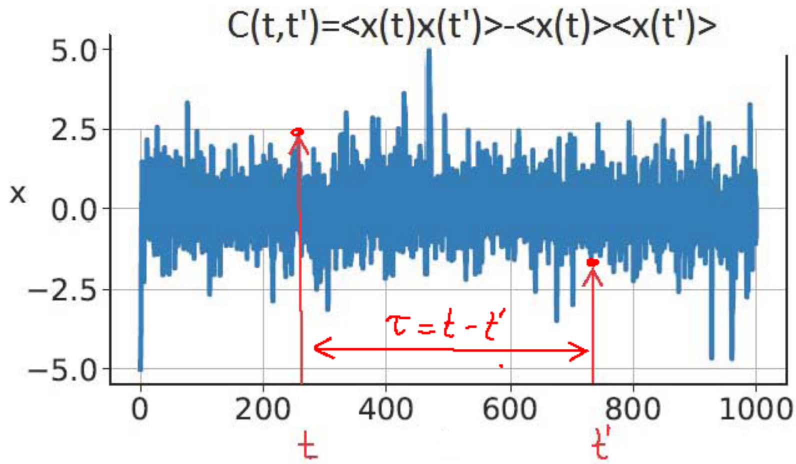

FIG. 2: Részecske túlcsillapított mozgása $U(x) \sim |x|$ potenciálban adott T hőmérsékleten (HF10 egyik feladata, kép Szokody Márk dolgozatából).

A $C(t, t')$ függvényt két-pont korrelációs függvénynek nevezzük (két időtől függ), s definíciójához szükséges megmondani azt is, hogy mit jelent az átlagolás $\langle ... \rangle$. Egyensúlyi rendszerek esetén ez az átlag jelentheti a sokaság átlagot, amikor is az egyensúlyi valószínűséggel P^e indítjuk a rendszert különböző $x(t = 0)$ értékekkel, s a időfejlődéseket a kezdeti feltételekre átlagoljuk. A másik, gyakoribb, s természetesen megjelenő változat az, amikor a rendszer feltételezett ergodicitását használjuk arra, hogy bármely kezdeti feltételből indulva, az elég hosszú időre vett átlagokból megkapjuk a sokaság-, tehát az egyensúlyi átlagokkal.

A $C(t, t')$ korrelációs függvénynek (a továbbiakban nem írjuk ki a "két-pont" jelzőt) van néhány egyszerű tulajdonsága, amelyek egyszerűsítik a számolásokat. A definícióból következik, hogy $C(t, t')$ csak $|t - t'|$-től függ (mindegy milyen sorrendben szorozzuk össze az $x(t)$ és $x(t')$ számokat). Egyensúlyban ez a tulajdonság egyébként az időtükrözési invarianciából is következik (mindegy milyen irányban megyünk időben). Egyensúlyban az $\langle x(t) \rangle$ átlag független az időtől $\langle x(t) \rangle = \langle x \rangle_{eq}$. Tehát az egyensúlyi korrelációs függvény a következőképpen írható

$$C(\tau = (|t - t'|) = \langle\, x(t)\, x(t + \tau)\, \rangle - \langle\, x \rangle_{eq}^2 \tag{3}$$

Egyensúlyi rendszerekben gyakori a változók olyan megválasztása, hogy $\langle x \rangle_{eq} = 0$, s ilyenkor tovább egyszerűsödik a korrelációs függvény kifejezése

$$C(\tau) = \langle\, x(t)\, x(t + \tau)\, \rangle \tag{4}$$

Amennyiben $C(\tau)$ a várakozásunknak megfelelően viselkedik, akkor

$$C(\tau) = \begin{cases} \langle x^2 \rangle_{eq} & \text{for} \quad \tau \to 0 \\ 0 & \text{for} \quad \tau \gg \tau_{rel} \end{cases} . \tag{5}$$

A következőkben megvizsgáljuk, hogy a túlcsillapított oszcillátorra mennyire igazolódnak várakozásaink.

Időkorrelációk a túlcsillapított lineáris oszcillátor esetén

A túlcsillapított lineáris oszcillátor egyenlete egyszerű (az előző órai jegyzetben már analizáltuk)

$$\dot{x} = -\mu k x + \eta(t) \quad , \tag{6}$$

és a megoldását is könnyű megtalálni

$$x(t) = x(0) e^{-\mu k t} + \int_0^t e^{-\mu k (t - \tau)} \eta(\tau) d\tau \quad , \tag{7}$$

ahol $x(0)$ az x $t=0$ értéke. Az előző órai jegyzetben azt is megmutattuk, hogy mivel $\langle\eta(t)\rangle = 0$, a részecske átlagos koordinátája relaxál a mechanikai egyensúlyhoz

$$\langle x(t\to\infty)\rangle_{eq} = x(0)e^{-\mu k t} \to 0 \quad . \tag{8}$$

Úgyszintén megmutattuk, hogy ha a rendszer relaxál az egyensúlyhoz, akkor ahhoz, hogy $\langle x^2(t)\rangle$ az egyensúlyi értéket vegye fel nagy időkre

$$\langle x^2(t\to\infty)\rangle = \langle x^2\rangle_{eq} = k_BT/k\,. \tag{9}$$

az kell, hogy a delta-korrelált zaj $[\langle\eta(t)\eta(t')\rangle = 2D\delta(t-t')]$ amlitúdója, a hőmérséklet, k_BT, valamint a kinetikus együttható μ kielégítse a következő összefüggést

$$D = \mu k_B T \quad . \tag{10}$$

Amint látni fogjuk, a zaj tulajdonságaiból az $\langle\eta(t)\rangle = 0$, és a $\langle\eta(t)\eta(t')\rangle = 2D\delta(t-t')$-nél többre nincs is szükség, tehát például nem szükséges az előző órai jegyzetben bevezetett Gauss-i tulajdonságokra.

A korrelációs függvény számolásához összeszorozzuk $x(t)$ és $x(t+\tau)$ megoldásokat (7) és átlagolunk a zajra

$$\langle x(t)x(t+\tau)\rangle = x^2(0)e^{-\mu k(2t+\tau)} + \int_0^t d\tau' \int_0^{t+\tau} d\tau'' e^{-\mu k[(t-\tau')+(t+\tau-\tau'')]}\langle\eta(\tau')\eta(\tau'')\rangle \quad , \tag{11}$$

ahol felhasználtuk, hogy a zajban lineáris kereszttagok eltünnek, mivel $\langle\eta(t)\rangle = 0$.

A következő lépésként észrevesszük, hogy $\tau > 0$ esetén a τ'' integrál csak t-ig megy, mivel az η-kból jövő $\delta(\tau'-\tau'')$ nem ad járulékot ha τ' és τ'' különböző tartományokból vannak. A zaj delta-korreláltsága miatt az egyik integrál eltűnik, s az alábbi eredményt kapjuk

$$\langle x(t)x(t+\tau)\rangle = x^2(0)e^{-\mu k(2t+\tau)} + 2D\int_0^t d\tau' e^{-\mu k(2t+\tau-2\tau')} = x^2(0)e^{-\mu k(2t+\tau)} + \frac{D}{\mu k}e^{-\mu k\tau}\left[1-e^{-2\mu k t}\right] \quad . \tag{12}$$

A kezdeti feltétellel $(x(0))$ kapcsolatos első tag eltűnik nagy időkre $(t\to\infty)$, s ennek így is kell lennie, hiszen egyensúlyi rendszer minden kezdeti feltételből ugyanoda fejlődik. Nagy időkre a második tagból is eltűnik a t-függő rész, s emlékezve a $D/\mu = k_BT$ összefüggésre, megkapjuk a keresett korrelációs függvényt

$$C(\tau) = \lim_{t\to\infty}\langle x(t)x(t+\tau)\rangle = \frac{k_BT}{k}e^{-\mu k\tau} \quad . \tag{13}$$

Első látásra, a függvény nem $|\tau|$-tól függ, ahogy az az általános meggondolásokból (3) következne. Emlékeznünk kell azonban, hogy a zajjal kapcsolatos kettős integrál (11) kiszámításakor feltételeztük, hogy $\tau > 0$. Újraszámolva a $\tau < 0$ esetet, az integrálok felső határai $t+\tau$ lesznek, s a végeredmény (13) lesz, de τ helyett $-\tau$ jelenik meg. Így a korrelációs függvény végső alakja

$$C(\tau) = \frac{k_BT}{k}e^{-\mu k|\tau|} \quad . \tag{14}$$

Tehát egy exponenciálisan lecsengő correlációs függvényt kaptunk, s a relaxációs idő könnyen leolvasható

$$\tau_{rel} = \frac{1}{\mu k} \quad . \tag{15}$$

Jól látható, hogy a relaxációs idő annál kisebb minél erősebb a visszahúzó rugó, s minél nagyobb a kinetikus együttható, ami az adott esetben arányos a súrlódási együtthatóval. Úgyszintén jól látható, hogy a $\tau\to 0$ határesetben visszakapjuk az egyensúlyi fluktuációk átlagát

$$C(\tau\to 0) = \frac{k_BT}{k} = \langle x^2\rangle_{eq} \quad , \tag{16}$$

tehát a korrelációs függvénnyel kapcsolatos elvárásaink ebben az egyszerű esetben helyesnek bizonyultak.

A túlcsillapított lineáris oszcillátor teljesítményspektruma

Idősorok analízisében gyakran vizsgált mennyiség a teljesítményspektrum $S(\omega)$, amelynek mérésével a rendszerben jelen levő rezonanciákat, illetve jellegzetes frekvenciákat (időskálákat) kutatják. Különbözőképpen definiálják, illetve számolják. A mi esetünkben ismerjük a időkorrelációkat, s a teljesítményspektrum számolható, mint a korrelációs függvény Fourier transformáltja [egy másik, ekvivalens definíció $S(\omega)$-t a jel, $x(t)$, Fourier transzformáltján, $X(\omega)$-án, keresztül adja: $S(\omega) = |X(\omega)|^2$].

A túlcsillapított lineáris oszcillátor korrelációs függvénye, (16), könnyen Fourier traszformálható (de természetesen táblázatból is kinézhető az eredmény), s a teljesítményspektrumot a következő alakban kapjuk

$$\begin{aligned} S(\omega) &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega\tau}C(\tau)d\tau = \frac{k_BT}{2\pi k}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega\tau}e^{-\mu k|\tau|}d\tau = \frac{k_BT}{2\pi k}\left[\int_{-\infty}^{0} e^{(i\omega+\mu k)\tau} + \int_{0}^{\infty} e^{(i\omega-\mu k)\tau}\right] \\ &= \frac{k_BT}{2\pi k}\left[\frac{1}{i\omega+\mu k} + \frac{1}{-i\omega+\mu k}\right] = \frac{\mu k_BT}{\pi}\frac{1}{\omega^2+(\mu k)^2} \quad . \end{aligned} \tag{17}$$

A kapott eredményt különböző módon lehet prezentálni, attól függően, hogy mit szeretnénk hangsúlyozni. Például, emlékezhetünk arra, hogy a zaj amplitúdója, D, nem más, mint $D = \mu k_BT$, tehát

$$S(\omega) = \frac{1}{\pi}\frac{D}{\omega^2+(\mu k)^2} \quad , \tag{18}$$

ami azt mutatja, hogy a teljesítményspektrum a zaj amplitúdójával arányos.

Ugyancsak hasznos, ha emlékszünk arra, hogy az időkorrelációk lecsengésének karakterisztikus ideje $\tau_{rel} = 1/\mu k$, s a nevezőben μk-t helyettesíthetjük $1/\tau_{rel}$-el:

$$S(\omega) = \frac{1}{\pi}\frac{D}{\omega^2+(1/\tau_{rel})^2} \quad . \tag{19}$$

A fenti alak világossá teszi, hogy a teljesítményspektrumból leolvasható a karakterisztikus idő. Az $S(\omega)$ a Lorentz görbe, amelynek félszélessége $1/\tau_{rel}$-t adja.

Egyszerű áramkörök teljesítményspektruma

Próbáljuk meg alkalmazni a stochasztikus differenciálegyenletekről tanultakat egy egyszerű áramkörre, s számítsuk ki a termális áramfluktuációk teljesítmányspektrumát. Az áramkör álljon egy tekercsből (L) és egy ellenállásból (R), ahogy az a 3. ábrán látható.

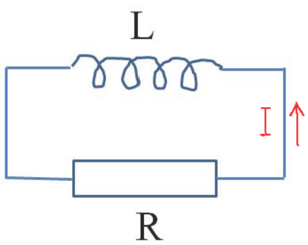

FIG. 3: Ellenállás-tekercs áramkör hőmérsékleti fluktuációk vizsgálatához.

Ha nem lennének hőmérsékleti fluktuációk (amelyek véletlenszerűen mozgatják az elektronokat és ionokat), akkor az áram változását leíró egyenletet Kirchoff II-ből kapjuk, amely szerint zárt hurokban feszültségesések összege nulla:

$$L\frac{dI}{dt} + RI = 0 \quad . \tag{20}$$

A hőmérsékleti fluktuációk hatására azonban véletlenszerű feszültségfluktuációk ($U_T(t)$) keletkeznek, s ezeket figyelembe kell venni a feszültségesések számolásában

$$L\frac{dI}{dt} + RI = U_T(t) \quad . \tag{21}$$

Átrendezve a fenti egyenletet, s bevezetve az $\eta = U_T(t)/L$ jelölést, láthatjuk, hogy az egyenlet hasonlít a túlcsillapított oszcillátor egyenletére (figyelem, I játsza az x, R/L pedig a μk szerepét)

$$\frac{dI}{dt} = -\frac{R}{L}I + \eta \quad . \tag{22}$$

A kérdés csak az, hogy mit mondhatunk a zajról. Továbbra is feltételezhetjük, hogy a feszültségingadozások átlaga nulla ($\langle\eta(t)\rangle = 0$), s azt is feltételezhetjük, hogy a zaj delta korrelált időben ($\langle\eta(t)\eta(t')\rangle = 2D\delta(t-t')$) (azaz különböző időpontokban a zaj nem korrelált), de kérdés marad, hogy honnan vesszük a zaj amplitúdóját, D-t. Emlékezzünk arra, hogy az oszcillátor esetén kiszámoltuk $\langle x^2\rangle$ egyensúlyi értékét, s használtuk az ekvipartíció tételét $k\langle x^2\rangle/2 = k_BT/2$, ami összekapcsolta D-t a rendszer többi paraméterével ($D = \mu k_BT$). Hasonló stratégiát most is követhetünk, hiszen ha I áram folyik az áramkörben, akkor a rendszer energiája $E = LI^2/2$ (a tekercs energiája). Tehát az szabadsági fok I kvadratikus alakban járul hozzá a rendszer energiájához, s alkalmazhatjuk az ekvipartíció tételét

$$\frac{1}{2}L\langle I^2\rangle = \frac{1}{2}k_BT \quad \rightarrow \quad \langle I^2\rangle = \frac{k_BT}{L} \quad . \tag{23}$$

Összehasonlítva a fenti kifejezést az $\langle x^2\rangle$-re ismert eredménnyel, látjuk, hogy az oszcillátor k-jának L felel meg. Mivel már láttuk, hogy a μk-nak R/L felel meg, következik, hogy a paraméterek megfeleltetése $\mu \leftrightarrow R/L^2$ és $k \leftrightarrow L$. Ennél a pontnál az analógiákból már meghatározhatjuk D-t is, mivel az oszcillátornál $D = \mu k_BT$, s a parméterek megfeleltetéséből következik, hogy

$$k \leftrightarrow L \quad , \quad \mu \leftrightarrow R/L^2 \quad \rightarrow \quad D = \mu k_BT = \frac{R}{L^2}k_BT \quad . \tag{24}$$

A fenti meggondolások egzaktak, de ha valakinek problémája van a követésével, akkor csak oldja meg a differenciálegyenletet, számolja ki $\langle I^2\rangle$ egyensúlyi átlagát, használja az equipartíciót, amiből megkapható D, a fenti kifejezésekkel összhangban.

Mivel ismerjük az oszcillátor $\leftrightarrow$ áramkör megfeleltetéseket, a teljesítményspektrumot azonnal felírhatjuk

$$S(\omega) = \frac{1}{\pi}\frac{\frac{R}{L^2}k_BT}{\omega^2 + (R/L)^2} \quad . \tag{25}$$

Ahogy azt várni lehetett, a teljesítményspektrumban megjelenik a $\tau_{rel} = L/R$ időskála, ami az LR áramkör relaxációs ideje.

Itt a vége, de a fluktuációk még sok érdekes dolgot rejtenek.