Zamiana zmiennych w równaniu Fokkera-Plancka

Dla uproszczenia rozważmy jednowymiarowe równanie Fokkera – Plancka.

$$\frac{\partial}{\partial t}p(x,t)=-\frac{\partial}{\partial x}\left[D^{(1)}(x,t)p(x,t)\right]+\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[D^{(2)}(x,t)p(x,t)\right] \qquad (♠)$$

Załóżmy, że dokonujemy zamiany zmiennych

$$y=y(x,t)$$

Równanie Fokkera – Plancka w nowych zmiennych będzie miało postać

$$\frac{\partial}{\partial t}p'(y,t)=-\frac{\partial}{\partial y}\left[D'^{(1)}(y,t)p'(y,t)\right]+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\left[D'^{(2)}(y,t)p'(y,t)\right] \qquad (♣)$$

gdzie (ze znanego wzoru na transformację gęstości prawdopodobieństwa)

$$p'(y,t)=p(x,t)\frac{\partial x}{\partial y}$$

Niech

$$J\equiv\frac{\partial x}{\partial y}=\frac{1}{J'}, \quad J'\equiv\frac{\partial y}{\partial x}\Rightarrow p'=Jp=\frac{p}{J'}$$

Poszukujemy współczynników

$$D'^{(1)}(y,t),\ D'^{(2)}(y,t)$$

Równanie Fokkera-Plancka (♠) jest równaniem na gęstość prawdopodobieństwa $p(x,t)$. Jeżeli dokonujemy zamiany zmiennych, np. $y=y(x,t)$, to gęstość prawdopodobieństwa w nowych zmiennych ma postać

$$p'(y,t)=p(x(y,t),t)x'(y,t)$$

gdzie $x=x(y,t)$ jest przekształceniem odwrotnym do zamiany zmiennych, a $x'=\frac{dx}{dy}$. Żeby napisać równanie Fokkera-Plancka w nowych zmiennych, **nie wystarczy** skorzystać z reguły „łańcuchowej" różniczkowania funkcji złożonych i przekształcić np.

$$\frac{\partial}{\partial x}\left[D^{(1)}(x,t)p(x,t)\right]=\frac{\partial y}{\partial x}\frac{\partial}{\partial y}\left[D^{(1)}(x(y,t),t)p(x(y,t),t)\right]$$

ponieważ $p(x(y,t),t)$ nie jest gęstością prawdopodobieństwa w nowych zmiennych. Poniżej pokażemy, jak w drodze bardzo formalnych przekształceń uzyskać równanie Fokkera-Plancka (♣) dla gęstości prawdopodobieństwa w nowych zmiennych $p'(y,t)$ i wyznaczyć współczynniki tego równania $D'^{(1)}(y,t)$, $D'^{(2)}(y,t)$, również w nowych zmiennych.

Obliczamy po kolei następujące wyrażenia

$$\boxed{-\frac{1}{J}\frac{\partial J}{\partial x}}=-\frac{\partial \ln J}{\partial x}=\frac{\partial \ln J'}{\partial x}=\frac{1}{J'}\frac{\partial J'}{\partial x}=\frac{\partial x}{\partial y}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)=\boxed{\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)} \qquad (1)$$

$$\boxed{-\frac{1}{J}\left(\frac{\partial J}{\partial t}\right)_x}=-J'\left(\frac{\partial (J')^{-1}}{\partial t}\right)_x=-J'\left(-\frac{1}{J'^2}\right)\left(\frac{\partial J'}{\partial t}\right)_x=\frac{1}{J'}\left(\frac{\partial J'}{\partial t}\right)_x=\frac{\partial x}{\partial y}\left(\frac{\partial}{\partial t}\right)_x\frac{\partial y}{\partial x}=$$

$$=\frac{\partial x}{\partial y}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial y}{\partial t}\right)_x=\boxed{\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial y}{\partial t}\right)_x} \qquad (2)$$

W następnym równaniu zmieniamy kolejność różniczkowania po *x*, *t*

Dla dowolnej funkcji *f(y,t)* zachodzi

$$\left(\frac{\partial f(y,t)}{\partial t}\right)_x=\left(\frac{\partial f(y(x,t),t)}{\partial t}\right)_x=\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_y+\left(\frac{\partial y}{\partial t}\right)_x\frac{\partial f}{\partial y}\Rightarrow\boxed{\left(\frac{\partial}{\partial t}\right)_x=\left(\frac{\partial}{\partial t}\right)_y+\left(\frac{\partial y}{\partial t}\right)_x\frac{\partial}{\partial y}} \qquad (3)$$

Ponieważ $y=y(x,t)$, to y może się zmieniać w czasie nawet przy ustalonym x

Obliczamy po kolei wynik działania każdego operatora różniczkowego w zmiennych x, t, występujacego w równaniu Fokkera-Plancka, na dowolną gęstość prawdopodobieństwa $p(x,t) = p(x(y,t),t) = p(y,t)$, starając się zapisać ten wynik tak, aby uzyskać operator różniczkowy w zmiennych y, t, działający na funkcję $Jp = J(y,t)p(x(y,t),t) = J(y,t)p(y,y) = p'(y,t)$.

- Obowiązuje konwencja, że operator bez nawiasu, np. $\frac{\partial}{\partial x}$, działa na wszystko, co stoi po jego prawej stronie, natomiast operator w nawiasie tylko na wyrażenia znajdujące się w nawiasie, np. $\left(\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial x}\right)$ oznacza, że jeśli jakieś wyrażenie znajduje się po prawej stronie tego operatora, to należy je pomnożyć przez $\left(\frac{\partial^2 y}{\partial x^2}\right)$, a nie różniczkować po y.

- Znak $\doteq$ oznacza, że następne wyrażenie uzyskano, korzystając z "reguły łańcuchowej" różniczkowania funkcji złożonej, np. $\frac{\partial}{\partial x} \doteq \frac{\partial y}{\partial x}\frac{\partial}{\partial y}$.

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial p}{\partial x} &\doteq \frac{\partial y}{\partial x}\frac{\partial p}{\partial y} = \frac{\partial y}{\partial x}\frac{\partial p}{\partial y} + \left(\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial x}\right)p - \underbrace{\left(\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial x}\right)}_{(1)}p = \frac{1}{J}\frac{\partial y}{\partial x}J\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{J}J\left(\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial x}\right)p + \underbrace{\frac{1}{J}\frac{\partial J}{\partial x}}_{(1,\clubsuit)}p \\
&\doteq \frac{1}{J}J\left(\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial x}\right)p + \frac{1}{J}\frac{\partial y}{\partial x}J\frac{\partial p}{\partial y} + \underbrace{\frac{1}{J}\frac{\partial y}{\partial x}\frac{\partial J}{\partial y}}_{(\clubsuit)}p = \frac{1}{J}J\left(\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial x}\right)p + \frac{1}{J}\frac{\partial y}{\partial x}\underbrace{\left(J\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial J}{\partial y}p\right)}_{(\spadesuit)} \\
&= \frac{1}{J}\left(\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial x}\right)Jp + \frac{1}{J}\frac{\partial y}{\partial x}\underbrace{\frac{\partial}{\partial y}}_{(\spadesuit)}Jp = \frac{1}{J}\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial x}Jp \Rightarrow \boxed{\frac{\partial}{\partial x} = \frac{1}{J}\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial x}J.}
\end{aligned}
\tag{4}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} &= \frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial p}{\partial x} \overset{(4)}{=} \frac{1}{J}\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial x} J \frac{1}{J}\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial x} Jp = \frac{1}{J}\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial x}\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial x} Jp = \frac{1}{J}\frac{\partial}{\partial y}\Bigg[\underbrace{\frac{\partial y}{\partial x}\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial x} Jp + \left(\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial x}\right)\frac{\partial y}{\partial x} Jp}_{(\spadesuit)} - \underbrace{\left(\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial x}\right)\frac{\partial y}{\partial x} Jp}_{(\clubsuit)}\Bigg] \\
&= \frac{1}{J}\frac{\partial}{\partial y}\Bigg[\underbrace{\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial x}\frac{\partial y}{\partial x} Jp}_{(\spadesuit)} - \underbrace{\frac{\partial y}{\partial x}\left(\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial x}\right) Jp}_{(\clubsuit)}\Bigg] \doteq \frac{1}{J}\frac{\partial}{\partial y}\Bigg[\underbrace{\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)^2 Jp}_{(\spadesuit)} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial y}{\partial x}\right) Jp}_{(\clubsuit)}\Bigg] \\
&= \frac{1}{J}\frac{\partial^2}{\partial y^2}\left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)^2 Jp - \frac{1}{J}\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} Jp \Rightarrow \boxed{\frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{1}{J}\frac{\partial^2}{\partial y^2}\left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)^2 J - \frac{1}{J}\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} J} \qquad (5)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\left(\frac{\partial p}{\partial t}\right)_x &= \frac{1}{J}\left(\frac{\partial}{\partial t}\right)_x Jp - \frac{1}{J}\left(\frac{\partial J}{\partial t}\right)_x p \overset{(3)}{=} \frac{1}{J}\left(\frac{\partial}{\partial t}\right)_y Jp + \underbrace{\frac{1}{J}\left(\frac{\partial y}{\partial t}\right)_x \frac{\partial}{\partial y} Jp}_{(\spadesuit)} - \frac{1}{J}\left(\frac{\partial J}{\partial t}\right)_x p \\
&= \frac{1}{J}\left(\frac{\partial}{\partial t}\right)_y Jp + \underbrace{\frac{1}{J}\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial y}{\partial t}\right)_x Jp - \frac{1}{J}\left(\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial y}{\partial t}\right)_x\right) Jp}_{(\spadesuit)} - \frac{1}{J}\left(\frac{\partial J}{\partial t}\right)_x p \\
&\overset{(2)}{=} \frac{1}{J}\left(\frac{\partial}{\partial t}\right)_y Jp + \frac{1}{J}\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial y}{\partial t}\right)_x Jp + \underbrace{\frac{1}{J}\frac{1}{J}\left(\frac{\partial J}{\partial t}\right)_x Jp - \frac{1}{J}\left(\frac{\partial J}{\partial t}\right)_x p}_{=0} = \frac{1}{J}\left(\frac{\partial}{\partial t}\right)_y Jp + \frac{1}{J}\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial y}{\partial t}\right)_x Jp \\
&\Rightarrow \boxed{\left(\frac{\partial}{\partial t}\right)_x = \frac{1}{J}\left(\frac{\partial}{\partial t}\right)_y J + \frac{1}{J}\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial y}{\partial t}\right)_x J.} \qquad (6)
\end{aligned}
$$

Uogólnienie na przypadek wielowymiarowy

$$x_i' = x_i'(x_1, x_2, \ldots, x_N), \quad i = 1,2,\ldots,N$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} = \frac{1}{J}\sum_k \frac{\partial}{\partial x_k'}\frac{\partial x_k'}{\partial x_i}J$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} = \frac{1}{J}\sum_{k,r}\frac{\partial^2}{\partial x_k' \partial x_r'}\frac{\partial x_k'}{\partial x_i}\frac{\partial x_r'}{\partial x_j}J - \frac{1}{J}\sum_k \frac{\partial}{\partial x_k'}\frac{\partial^2 x_k'}{\partial x_i \partial x_j}J$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}\right)_x = \frac{1}{J}\left(\frac{\partial}{\partial t}\right)_{x'} J + \frac{1}{J}\sum_k \frac{\partial}{\partial x_k'}\left(\frac{\partial x_k'}{\partial t}\right)_x J, \quad \text{gdzie } J = \left|\frac{\partial x_i}{\partial x_j'}\right| \Rightarrow p'(x', t) = Jp(x, t)$$

Wstawiamy powyższe wzory do równania Fokkera - Plancka

$$\frac{\partial}{\partial t}p(x,t) = -\sum_i \frac{\partial}{\partial x_i}[D_i(x,t)p(x,t)] + \sum_{i,j}\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j}[D_{ij}(x,t)p(x,t)]$$

i otrzymujemy

$$\frac{1}{J}\left(\frac{\partial p'}{\partial t}\right)_{x'} + \frac{1}{J}\sum_k \frac{\partial}{\partial x_k'}\left(\frac{\partial x_k'}{\partial t}\right)_x p' = -\frac{1}{J}\sum_{k,i}\frac{\partial}{\partial x_k'}\frac{\partial x_k'}{\partial x_i}D_i p' +$$

$$+\frac{1}{J}\sum_{k,r,i,j}\frac{\partial^2}{\partial x_k' \partial x_r'}\frac{\partial x_k'}{\partial x_i}\frac{\partial x_r'}{\partial x_j}D_{ij}p' - \frac{1}{J}\sum_{k,i,j}\frac{\partial}{\partial x_k'}\frac{\partial^2 x_k'}{\partial x_i \partial x_j}D_{ij}p'$$

Stąd równanie Fokkera – Plancka w nowych zmiennych

$$\frac{\partial}{\partial t} p'(x',t) = -\sum_k \frac{\partial}{\partial x'_k}\left[D'_k(x',t)p'(x',t)\right] + \sum_{k,r} \frac{\partial^2}{\partial x'_k \partial x'_r}\left[D'_{kr}(x',t)p'(x',t)\right]$$

$$D'_k = \left(\frac{\partial x'_k}{\partial t}\right)_x + \sum_i \frac{\partial x'_k}{\partial x_i} D_i + \sum_{i,j} \frac{\partial^2 x'_k}{\partial x_i \partial x_j} D_{ij}$$

$$D'_{kr} = \sum_{i,j} \frac{\partial x'_k}{\partial x_i}\frac{\partial x'_r}{\partial x_j} D_{ij}$$

Grupujemy wyrazy, zawierające (i) pochodną po czasie, (ii) pochodne cząstkowe pierwszego rzędu po *x'*, (iii) pochodne cząstkowe drugiego rzędu po *x'*.

gdzie współczynniki oryginalnego równania należy wyrazić w nowych zmiennych, tj.
$D_i = D_i(x',t) = D_i(x(x',t),t)$, $D_{ij} = D_{ij}(x',t) = D_{ij}(x(x',t),t)$

Dla przypadku 1-wymiarowego

$$\frac{\partial}{\partial t} p'(y,t) = -\frac{\partial}{\partial y}\left[D'^{(1)}(y,t)p'(y,t)\right] + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\left[D'^{(2)}(y,t)p'(y,t)\right]$$

$$D'^{(1)} = \left(\frac{\partial y}{\partial t}\right)_x + \frac{\partial y}{\partial x} D^{(1)} + \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} D^{(2)}$$

$$D'^{(2)} = \left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)^2 D^{(2)}$$

Przykład: **Dowolne jednowymiarowe równanie Fokkera - Plancka z niezależnymi od czasu współczynnikami możemy sprowadzić do równania ze stałym współczynnikiem dyfuzji**

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x,t) = -\frac{\partial}{\partial x}\left[D^{(1)}(x)p(x,t)\right] + \frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[D^{(2)}(x)p(x,t)\right]$$

Szukamy transformacji o następującej własności

$$y = y(x) \qquad D'^{(2)}(y) = D = const$$

$$\frac{dy}{dx} = \sqrt{\frac{D}{D^{(2)}(x)}}$$

$$D'^{(2)}(y) = \left(\frac{dy}{dx}\right)^2 D^{(2)} = D \Rightarrow y = \int_0^x \sqrt{\frac{D}{D^{(2)}(\xi)}} d\xi$$

$$\frac{d^2y}{dx^2} = -\frac{\sqrt{D}}{2}\left(D^{(2)}(x)\right)^{-3/2}\frac{dD^{(2)}}{dx}$$

Jest to szukana transformacja. Bez straty ogólności można więc przyjąć $D^{(2)} = D$ w dowolnym jednowymiarowym równaniu Fokkera-Plancka z niezależnymi od czasu współczynnikami

$$D'^{(1)}(y) = \frac{dy}{dx}D^{(1)} + \frac{d^2y}{dx^2}D^{(2)} = \sqrt{\frac{D}{D^{(2)}(x(y))}}\left[D^{(1)}(x(y)) - \frac{1}{2}\frac{d}{dx}D^{(2)}(x(y))\right]$$

$$p'(y,t) = \left(\frac{dy}{dx}\right)^{-1} p(x(y),t) = \sqrt{\frac{D^{(2)}(x(y))}{D}}\, p(x(y),t)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} p'(y,t) = \left[-\frac{\partial}{\partial y}D'^{(1)}(y) + D\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right] p'(y,t)$$

Jest to **bardzo ważny wynik**, ponieważ pozwala sprowadzić dowolne jednowymiarowe równanie Fokkera-Plancka z niezależnymi od czasu współczynnikami do „zwykłego” równania dyfuzji w obecności siły zewnętrznej.

Przykład: Bezwymiarowa postać równania Kramersa (w 1 wymiarze)

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(vp) + \frac{1}{m}\frac{\partial}{\partial v}\{[V'(x)+\beta v]p\} + \frac{\beta k_B T}{m^2}\frac{\partial^2 p}{\partial v^2}, \quad p = p(x,v,t)$$

W równaniu Fokkera-Plancka w oryginalnych zmiennych x, v mamy

$$D_x(x,v) = v,$$

$$D_v(x,v) = -\frac{1}{m}(V'(x)+\beta v),$$

$$D_{x,x} = D_{x,v} = D_{v,x} = 0,$$

$$D_{v,v} = \frac{\beta k_B T}{m^2}.$$

Transformacja liniowa

$$y = \sqrt{\frac{m}{k_B T}}x, \quad u = \sqrt{\frac{m}{k_B T}}v, \quad U(y) \equiv \frac{V(x)}{k_B T}, \quad \gamma \equiv \frac{\beta}{m}$$

prowadzi do równania Kramersa w postaci bezwymiarowej

$$\frac{\partial p'}{\partial t} = \left[-\frac{\partial}{\partial y}u + \frac{\partial}{\partial u}[U'(y)+\gamma u] + \gamma\frac{\partial^2}{\partial u^2}\right]p', \quad p' = p'(y,u,t) \quad (\spadesuit)$$

Transformujemy równanie Fokkera-Plancka do nowych zmiennych y, u.

$$D'_y = \underbrace{\left(\frac{\partial y}{\partial t}\right)\Big|_{x,v}}_{=0} + \frac{\partial y}{\partial x}D_x + \underbrace{\frac{\partial y}{\partial v}}_{=0}D_v + \frac{\partial^2 y}{\partial x^2}\underbrace{D_{x,x}}_{=0} + \frac{\partial^2 y}{\partial x \partial v}\underbrace{D_{x,v}}_{=0} + \frac{\partial^2 y}{\partial v \partial x}\underbrace{D_{v,x}}_{=0} + \underbrace{\frac{\partial^2 y}{\partial v^2}}_{=0}D_{v,v} = \sqrt{\frac{m}{k_B T}}v = u,$$

$$\begin{aligned}
D'_u &= \ldots + \frac{\partial u}{\partial v}D_v + \ldots = \sqrt{\frac{m}{k_B T}}D_v(x(y,u), v(y,u)) = -\frac{1}{m}\sqrt{\frac{m}{k_B T}}\left(\frac{dV(x)}{dx} + \beta v\right) \\
&= -\frac{1}{m}\sqrt{\frac{m}{k_B T}}\left[\frac{dV}{dy}\left(\sqrt{\frac{k_B T}{m}}y\right)\frac{dy}{dx} + \beta\sqrt{\frac{k_B T}{m}}u\right] = -\frac{1}{m}\sqrt{\frac{m}{k_B T}}\left[\frac{dV}{dy}\left(\sqrt{\frac{k_B T}{m}}y\right)\sqrt{\frac{m}{k_B T}} + \beta\sqrt{\frac{k_B T}{m}}u\right] \\
&= -\frac{1}{k_B T}\frac{dV}{dy}\left(\sqrt{\frac{k_B T}{m}}y\right) - \frac{\beta}{m}u = -\left(\frac{dU}{dy} + \gamma u\right)
\end{aligned}$$

$$D'_{y,y} = \left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)^2\underbrace{D_{x,x}}_{=0} + \frac{\partial y}{\partial x}\frac{\partial y}{\partial v}\underbrace{D_{x,v}}_{=0} + \frac{\partial y}{\partial v}\frac{\partial y}{\partial x}\underbrace{D_{v,x}}_{=0} + \underbrace{\left(\frac{\partial y}{\partial v}\right)^2}_{=0}D_{v,v} = 0 = D'_{y,u} = D'_{u,y}, \qquad \Rightarrow(\spadesuit)$$

$$D'_{u,u} = \ldots + \left(\frac{\partial u}{\partial v}\right)^2 D_{v,v} = \frac{m}{k_B T}\frac{\beta k_B T}{m^2} = \frac{\beta}{m} = \gamma.$$

Równanie Fokkera-Plancka można zapisać w formie **równania ciągłości**

$$\frac{\partial}{\partial t} p(\vec{z},t) = -\sum_i \frac{\partial}{\partial z_i} A_i(\vec{z},t) p(\vec{z},t) + \frac{1}{2}\sum_{i,j} \frac{\partial^2}{\partial z_i \partial z_j} B_{ij}(\vec{z},t) p(\vec{z},t)$$

Prąd prawdopodobieństwa

$$\boxed{J_i(\vec{z},t) \equiv A_i(\vec{z},t) p(\vec{z},t) - \frac{1}{2}\sum_j \frac{\partial}{\partial z_j} B_{ij}(\vec{z},t) p(\vec{z},t), \quad i = 1,2,3}$$

Równanie ciągłości

$$\frac{\partial}{\partial t} p(\vec{z},t) = -\sum_i \frac{\partial}{\partial z_i} J_i(\vec{z},t) = -div\vec{J}(\vec{z},t)$$

Z twierdzenia Gaussa

$$P(\Omega,t) \equiv \iiint_\Omega p(\vec{z},t) d^3\vec{z} \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} P(\Omega,t) = -\iiint_\Omega div\vec{J}(\vec{z},t) d^3\vec{z} = -\oint\!\!\oint_S \vec{J}(\vec{z},t)\cdot d\vec{s}$$

Warunki brzegowe dla równania Fokkera - Plancka

Bariera odbijająca

Cząstka nie może opuścić obszaru Ω, ograniczonego powierzchnią S, gdyż prąd prawdopodobieństwa przepływający przez S jest zerowy

$$\boxed{\vec{n}\cdot\vec{J}(\vec{z},t)\Big|_{z\in S}=0,\quad \vec{n}\equiv d\vec{s}\Big/\left|d\vec{s}\right|}$$

Bariera absorbująca

Po osiągnięciu powierzchni S cząstka jest usuwana z obszaru Ω

$$\boxed{p(\vec{z},t)\Big|_{z\in S}=0}$$

Periodyczne warunki brzegowe (przypadek 1-wymiarowy)

$$\boxed{\begin{aligned}&\lim_{x\to b^-} p(x,t)=\lim_{x\to a^+} p(x,t)\quad\vee\quad \lim_{x\to b^-} J(x,t)=\lim_{x\to a^+} J(x,t)\Rightarrow\\&\Rightarrow A(b,t)=A(a,t),\quad B(b,t)=B(a,t)\end{aligned}}$$

Naturalne warunki brzegowe (przypadek 1-wymiarowy)

$$\boxed{\lim_{a\to-\infty} J(a,t)=0,\quad \lim_{b\to\infty} J(b,t)=0\Rightarrow\frac{\partial}{\partial t}P(\Re,t)=0}$$

Warunki brzegowe dla wstecznego równania Fokkera - Plancka

Bariera odbijająca

$$\sum_{i,j} n_i B_{ij}(\vec{y}) \frac{\partial}{\partial y_j} p(\vec{x},t|\vec{y},t')\Big|_{\vec{y}\in S} = 0, \quad \vec{n} = d\vec{s}/|d\vec{s}|$$

Dla przypadku 1-wymiarowego warunek ten sprowadza się do warunku

$$\frac{\partial}{\partial y} p(x,t|a,t') = \frac{\partial}{\partial y} p(x,t|b,t') = 0$$

Bariera absorbująca

$$p(\vec{x},t|\vec{y},t')\Big|_{\vec{y}\in S} = 0$$

Wyprowadzenie jest dość skomplikowane

Potencjał dla równania Fokkera - Plancka

Wprowadźmy oznaczenia

$$D^{(1)}(x,t)=A(x,t),\ D^{(2)}(x,t)=\tfrac{1}{2}B(x,t)\Rightarrow$$

$$\frac{\partial}{\partial t}p(x,t)=-\frac{\partial}{\partial x}\left[D^{(1)}(x,t)p(x,t)\right]+\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[D^{(2)}(x,t)p(x,t)\right]$$

Jeżeli współczynniki D nie zależą od czasu, można zdefiniować **potencjał**

$$D^{(1)}=D^{(1)}(x),\ D^{(2)}=D^{(2)}(x)\Rightarrow \boxed{\Phi(x)\equiv\ln D^{(2)}(x)-\int_0^x\frac{D^{(1)}(x')}{D^{(2)}(x')}dx'}$$

Równ. Fokkera=Plancka można zapisać w następujących równoważnych postaciach

$$\frac{\partial}{\partial t}p(x,t)=L_{FP}\,p(x,t),\quad L_{FP}\equiv-\frac{\partial}{\partial x}D^{(1)}(x,t)+\frac{\partial^2}{\partial x^2}D^{(2)}(x,t)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}p(x,t)=-\frac{\partial}{\partial x}J(x,t),\quad J(x,t)\equiv D^{(1)}(x,t)p(x,t)-\frac{\partial}{\partial x}\left[D^{(2)}(x,t)p(x,t)\right]$$

Metoda potencjału jest bardzo ważną metodą uzyskiwania rozwiązań stacjonarnych jednowymiarowego równania Fokkera-Plancka. Można ją jeszcze uprościć (patrz dalej), ponieważ dla jednowymiarowego równania z niezależnymi od czasu współczynnikami można zawsze przyjąć $D^{(2)}(x)=D$

Używając potencjału, prąd prawdopodobieństwa można zapisać w postaci

$$D^{(1)} = D^{(1)}(x),\ D^{(2)} = D^{(2)}(x) \Rightarrow$$

$$\boxed{J(x,t) = -D^{(2)}(x)e^{-\Phi(x)}\frac{\partial}{\partial x}\left[e^{\Phi(x)}p(x,t)\right]}$$

Dowód:

$$J(x,t) = -D^{(2)}(x)e^{-\Phi(x)}\left[e^{\Phi(x)}\frac{d\Phi(x)}{dx}p(x,t) + e^{\Phi(x)}\frac{\partial p(x,t)}{\partial x}\right] =$$

$$= -D^{(2)}\frac{d\Phi}{dx}p - D^{(2)}\frac{\partial p}{\partial x} = -D^{(2)}\left[\frac{1}{D^{(2)}}\frac{dD^{(2)}}{dx} - \frac{D^{(1)}}{D^{(2)}}\right]p - D^{(2)}\frac{\partial p}{\partial x} =$$

$$= -\frac{dD^{(2)}}{dx}p + D^{(1)}p - D^{(2)}\frac{\partial p}{\partial x} = D^{(1)}p - \frac{\partial}{\partial x}\left(D^{(2)}p\right)$$

Rozwiązanie stacjonarne

W stanie stacjonarnym

$$J(x,t) = const$$

Dla warunków brzegowych typu bariery odbijającej

$$J(a,t) = J(b,t) = 0 \Rightarrow J(x,t) = 0,\ x \in (a,b)$$

$$J(x,t) = -D^{(2)}(x) e^{-\Phi(x)} \frac{\partial}{\partial x}\left[e^{\Phi(x)} p_s(x)\right] = 0 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow e^{\Phi(x)} p_s(x) = const \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \boxed{p_s(x) = N_0 \exp[-\Phi(x)], \quad N_0 = \left\{\int_a^b \exp[-\Phi(x)]\, dx\right\}^{-1}}$$

Uzyskujemy tzw. **rozwiązanie potencjalne**

$$\boxed{p_s(x) = \frac{N_0}{D^{(2)}(x)} \exp\left[\int_0^x \frac{D^{(1)}(x')}{D^{(2)}(x')} dx'\right]}$$

Ponieważ jest to rozwiązanie niezależne od czasu, jest to jednocześnie **rozwiązanie stacjonarne** przy zadanych warunkach brzegowych w postaci barier odbijających na krańcach przedziału

Przykład: Dyfuzja w polu grawitacyjnym

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}(gp) + \frac{1}{2} D \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}, \quad g = const,\ D = const$$

$$\Phi = \ln\left(\frac{1}{2} D\right) + \int_0^x \frac{2g}{D} dx' = \ln\left(\frac{1}{2} D\right) + \frac{2g}{D} x$$

zmodyfikowana stała normująca

stała normująca

$$p_s(x) = \frac{N_0}{\frac{1}{2} D} \exp\left(-\frac{2g}{D} x\right) = N \exp\left(-\frac{2g}{D} x\right), \quad N = \frac{2N_0}{D}$$

Widać, że dla D=const czynnik $\ln\left(\frac{1}{2}D\right)$ w potencjale można zaniedbać, ponieważ można go włączyć do stałej normującej N

Przykład: Proces Ornsteina - Uhlenbecka

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}(kxp) + \frac{1}{2} D \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}, \quad k = const,\ D = const$$

$$\Phi = \int_0^x \frac{kx'}{\frac{1}{2} D} dx' = \frac{k}{D} x^2$$

$$p_s(x) = \sqrt{\frac{k}{\pi D}} \exp\left(-\frac{k}{D} x^2\right)$$

Otrzymaliśmy rozkład Gaussa, zgodnie z wynikiem uzyskanym z bezpośredniego rozwiązania równania Fokkera-Plancka i przejściem z chwilą początkową do $-\infty$.
Uwaga: warunki brzegowe należy przyjąć w postaci bariery odbijającej w $\pm\infty$,

$$J(x \to \pm\infty, t) = 0$$


WC ○ △