



**MATEMATICKO-FYZIKÁLNÍ
FAKULTA**
Univerzita Karlova

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Mojmír Poprocký

Vztah Schrödingerovy a difuzní rovnice

Ústav částicové a jaderné fyziky

Vedoucí bakalářské práce: Mgr. Pavel Stránský, Ph.D.

Studijní program: Fyzika

Studijní obor: Obecná fyzika

Praha 2018

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracoval(a) samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle §60 odst. 1 autorského zákona.

V dne

Podpis autora

Poděkování. Tímto bych chtěl poděkovat Mgr. Pavlu Stránskému, Ph.D., prof. RNDr. Petru Chvostovi, CSc., své rodině, otci, přátelům a ostatním lidem za přímou či nepřímou podporu při psaní bakalářské práce. Děkuji.

Název práce: Vztah Schrödingerovy a difuzní rovnice

Autor: Mojmír Poprocký

Ústav: Ústav částicové a jaderné fyziky

Vedoucí bakalářské práce: Mgr. Pavel Stránský, Ph.D., Ústav částicové a jaderné fyziky

Abstrakt: Tvar Schrödingerovy rovnice a difuzní rovnice je formálně stejný. Zatímco Schrödingerova rovnice je komplexní, rovnice popisující difuzi je reálná. Práce ukazuje analogii řešení obou rovnic. Je předložen vztah umožňující převedení kvantově-mechanického problému na difuzní proces. Za jistých předpokladů je ukázána ekvivalence nerelativistické kvantové mechaniky a difuzní teorie. Výsledky jsou demonstrovány na jednoduchých příkladech.

Klíčová slova: Schrödingerova rovnice, Difuzní rovnice, Kolmogorova a Schrödingerova reprezentace difuzního procesu

Title: Relation between Schrödinger equation and diffusion equation

Author: Mojmír Poprocký

Department: Institute of Particle and Nuclear Physics

Supervisor: Mgr. Pavel Stránský, Ph.D., Institute of Particle and Nuclear Physics

Abstract: The Schrodinger's equation and the diffusion equation can be written in a similar form. While the Schrodinger's equation is complex, the diffusion equation is real. In this thesis we wish to outline similarities of both equations. We present a way to treat a problem in non-relativistic quantum mechanics as a diffusion process. This shows that under certain circumstances both theories are equivalent. We demonstrate this on a few simple examples.

Keywords: Schrödinger equation, Diffusion equation, Kolmogoroffs and Schrödinger's representations of a diffusion process

Obsah

Úvod	2
1 Schrödingerova rovnice	4
1.1 Vlnová funkce	4
1.2 Částice v elektromagnetickém poli	5
1.3 Parametrizace vlnové funkce	6
2 Difuzní rovnice	9
2.1 Teplo a difuze	9
2.2 Fokker-Planckova rovnice	10
2.3 Zjednodušená difuzní rovnice	12
3 Schrödingerovy rovnice versus difuzní rovnice	15
3.1 Vlnová funkce versus teplota	15
3.2 Samosdružený Fokker-Planckův operátor	16
3.3 Ekvivalence Schrödingerovy rovnice a difuze	19
4 Příklady	23
4.1 Harmonický oscilátor	23
4.2 Nekonečně hluboká potenciálová jáma	25
4.3 V-potenciál	27
Závěr	30
Seznam použité literatury	32
Seznam použité literatury	32
A Markovův proces	33
B Langevinova síla	36
C Odvození Fokker-Planckovy rovnice	37
D Transformace Fokker-Planckovy rovnice v jedné dimenzi	39

Úvod

Zakladatel vlnové mechaniky Erwin Schrödinger vznesl v roce 1931 v článku o časově obrácených Brownových pohybech [1] domněnku, zda studium difuzních procesů umožní lepší pochopení kvantové mechaniky. Jeho myšlenka nepadla na neúrodnou půdu a byla ostatními fyziky a matematiky rozvíjena [2, 3]. Musela být však vypracována moderní teorie difuzních procesů, než bylo možné o Schrödingerově rovnici z pohledu difuzní teorie hovořit.

Pro brownovskou částici je informace o okamžité hybnosti nesměrodatná. Stejně tak namísto o její poloze je užitečnější hovořit o pravděpodobnostním rozdělení. V případě kvantové částice má klasická hybnost i poloha z podstaty pravděpodobnostní charakter. Intuici upozorňující na podobnost chování brownové a kvantové částice lze hledat za Schrödingerovou domněnkou.

Úsilí nalézt vztah mezi Schrödingerovou a difuzní rovnicí je motivováno také podobností obou rovnic. Obě rovnice jsou lineární parciální diferenciální rovnice, v nichž vystupuje první časová derivace a nejvýše druhá derivace prostorové proměnné. Je dokonce možné je přepsat v obecnosti do zcela stejného tvaru [4]. Jejich srovnání pak vede k vzájemné identifikaci konceptů v jednotlivých teoriích.

Situaci činí složitější fakt, že číselným oborem kvantové mechaniky jsou komplexní čísla. Schrödingerova rovnice obsahuje před časovou derivací imaginární jednotku. Její řešení, vlnové funkce, jsou pak obecně nutně komplexní funkce. Kdežto klasická i moderní teorie difuze je vybudována v reálných číslech, tedy jak členy vystupující v difuzních rovnicích, tak jejich řešení jsou reálné funkce. To má za následek oscilující procesy v případě kvantové mechaniky a relaxační procesy v případě difuzní teorie. Hledaný vztah je díky tomu založen na formálním ztotožnění namísto explicitní rovnosti.

Jaké povahy je vztah obou rovnic? Je možné nahlížet na jednu z rovnic prostřednictvím teorie druhé rovnice? Jsou si navzájem rovnice ekvivalentní? Dokážeme kvantově mechanický problém převést na difuzní proces a naopak? Na tyto otázky se v práci pokusíme odpovědět. Odpověď je veskrze pozitivní.

První kapitola stručně představuje Schrödingerovu rovnici. Předkládá vlastnosti vlnové funkce a její charakter. Pracuje se v ní s tvary Schrödingerovy rovnice a diskutují se její řešení.

Druhá kapitola je věnována difuzní teorii. Je postupováno dle historického vývoje teorie. Od rovnic popisujících vedení tepla k Fokker-Planckově rovnici popisující evoluci pravděpodobnostního rozdělení. Na konci je představena reprezentace difuzního procesu, v němž je tvar difuzní rovnice formálně shodný s Schrödingerovou rovnicí.

Těžiště práce je třetí kapitola. Vyjeví se zde spojitost mezi koncepty budovanými v prvních dvou. Jsou zde uvedeny obecné úvahy týkající se vztahu komplexní

vlnové funkce a reálné funkce teploty. V jedné dimenzi je řešení Fokker-Planckovy rovnice převedeno na řešení stacionární Schrödingerovy rovnice a naopak. Vrcholem je předložení ekvivalence obecné Schrödingerovy rovnice a obecné difuzní rovnice.

V čtvrté kapitole se na konkrétních příkladech demonstrují výsledky třetí kapitoly. Je řešen kvantový harmonický oscilátor, nekonečně hluboká potenciálová jáma a jejich analogické difuzní procesy. K difuznímu procesu ve V -potenciálu je nalezen odpovídající kvantový děj.

1. Schrödingerova rovnice

Tato kapitola stručně zavede a shrne základní pojmy a veličiny kvantové mechaniky, které budeme potřebovat v dalších částech práce. Úplnější popis základů kvantové mechaniky lze nalézt v nespočetných monografiích, např. [5, 6].

Klíčovým pojmem, který prochází celou prací, je časová Schrödingerova rovnice odvozená E. Schrödingerem v roce 1926 [7]

$$i\frac{h}{2\pi}\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{x},t) = \hat{H}\psi(\mathbf{x},t), \quad (1.1)$$

kde h značí Planckovu konstantu. Vlnová funkce $\psi(\mathbf{x},t)$ popisuje stav systému reprezentovaný vektorem v komplexním Hilbertově prostoru. Hamiltonián \hat{H} je lineárním operátorem nad tímto Hilbertovým prostorem odpovídající klasické veličině energie. Schrödingerova rovnice popisuje evoluci vlnové funkce.

Konkrétní tvar Schrödingerovy rovnice (1.1) je dán konkrétním Hamiltoniánem \hat{H} . V této práci se budeme zabývat nejjednoduššími případy, omezíme se na popis vázaných stavů jedné částice bez spinu.

1.1 Vlnová funkce

Stav systému je v čase t plně popsán vlnovou funkcí $\psi(\mathbf{x},t)$. Vlnová funkce je komplexní funkce reálné proměnné a je prvkem komplexního Hilbertova prostoru. Lze ji dle Borna interpretovat jako amplitudu pravděpodobnosti, tedy hustota pravděpodobnosti výskytu $\mu(\mathbf{x},t)$ částice je poté dána jako

$$\mu(\mathbf{x},t) = |\psi(\mathbf{x},t)|^2 = \bar{\psi}(\mathbf{x},t)\psi(\mathbf{x},t), \quad (1.2)$$

kde $\bar{\psi}(\mathbf{x},t)$ značí funkci komplexně sdruženou. Z významu hustoty pravděpodobnosti plyne pro vlnovou funkci normalizační podmínka

$$\int \bar{\psi}(\mathbf{x},t)\psi(\mathbf{x},t) d^3\mathbf{x} = 1.$$

Hustota pravděpodobnosti splňuje rovnici kontinuity

$$\frac{\partial\mu(\mathbf{x},t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{x},t) = 0. \quad (1.3)$$

Tok pravděpodobnosti $\mathbf{j}(\mathbf{x},t)$ částice o hmotnosti m ve stavu popsaném $\psi(\mathbf{x},t)$ v lze zapsat jako

$$\mathbf{j}(\mathbf{x},t) = \frac{h}{4\pi im} \left[\bar{\psi}(\mathbf{x},t)\nabla\psi(\mathbf{x},t) - \psi(\mathbf{x},t)\nabla\bar{\psi}(\mathbf{x},t) \right], \quad (1.4)$$

kde neuvažujeme magnetické pole. Z tvaru (1.4) plyne $\bar{\mathbf{j}} = \mathbf{j}$, tok pravděpodobnosti je reálná vektorová funkce.

Amplitudu pravděpodobnosti, samotnou vlnovou funkci $\psi(\mathbf{x},t)$ nelze měřit, což nasvědčuje její komplexní charakter. Opakovaným měřením identicky připravených stavů lze určit pouze hustotu pravděpodobnosti $\mu(\mathbf{x},t)$. Ze vztahu (1.2) plyne, že reálná hustota pravděpodobnosti $\mu(\mathbf{x},t)$ neobsahuje informaci o fázi komplexní amplitudy pravděpodobnosti $\psi(\mathbf{x},t)$. Skutečnost, že Schrödingerova rovnice popisuje vývoj amplitudy pravděpodobnosti namísto měřitelné hustoty pravděpodobnosti, má za důsledek jevy ryze kvantové povahy, jako je interference v jednočásticových experimentech či provázanost částic [5, 6].

1.2 Částice v elektromagnetickém poli

Formulujme Schrödingerovu rovnici pro co možná nejobecnější situaci. Mějme částici o hmotnosti m a náboji q nacházející se v elektromagnetickém poli popsaném potenciály $\varphi(\mathbf{x},t)$ a $\mathbf{A}(\mathbf{x},t)$ a potenciálu $V(\mathbf{x},t)$. Schrödingerova rovnice má poté tvar

$$i\frac{h}{2\pi}\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{x},t) = -\frac{h^2}{8\pi^2m}\nabla^2\psi(\mathbf{x},t) + \frac{iqh}{2\pi m}\mathbf{A}(\mathbf{x},t) \cdot \nabla\psi(\mathbf{x},t) + \left(\frac{iqh}{2\pi m}\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x},t) + \frac{q^2}{2m}\mathbf{A}(\mathbf{x},t)^2 + q\varphi(\mathbf{x},t) + V(\mathbf{x},t)\right)\psi(\mathbf{x},t).$$

Povšimněme si, že na pravé straně se vyskytují tři typy operátorů různě působící na vlnovou funkci. Toto pozorování nás inspiruje k obecnému tvaru Schrödingerovy rovnice (1.5). Zvolíme-li Coulombovu kalibraci ($\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$), pak bude výsledný potenciál reálná funkce. Pro lepší manipulaci přejdeme do atomárních jednotek, dostáváme

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{x},t) + \frac{1}{2}\nabla^2\psi(\mathbf{x},t) + i\mathbf{b}(\mathbf{x},t) \cdot \nabla\psi(\mathbf{x},t) - V(\mathbf{x},t)\psi(\mathbf{x},t) = 0, \quad (1.5)$$

kde funkce $\mathbf{b}(\mathbf{x},t)$ má vektorovou povahu. Obě funkce $\mathbf{b}(\mathbf{x},t)$ a $V(\mathbf{x},t)$ jsou reálné funkce.

V případě časově nezávislého Hamiltoniánu \hat{H} uvažujeme stavy tvaru

$$\psi(\mathbf{x},t) = \chi(\mathbf{x})\zeta(t), \quad (1.6)$$

kde lze nenulovou vlnovou funkci separovat. Pak užitím Fourierovy metody, je možné díky nenulovosti přepsat Schrödingerovu rovnici (1.1) do tvaru

$$\begin{aligned} \hat{H}\chi(x) &= E\chi(x), \\ i\frac{h}{2\pi}\frac{\partial}{\partial t}\zeta(t) &= E\zeta(t), \end{aligned} \quad (1.7)$$

kde E je energie. První rovnice se nazývá *nečasová* Schrödingerova rovnice (1.7). Řešení Schrödingerovy rovnice je převedeno na hledání vlastních čísel Hamiltoniánu \hat{H} , vlastní funkce nesou označení *stacionární stavy*. Časový vývoj stacionárních stavů poté triviálně dává druhá rovnice. Vlnová funkce je tvaru

$$\psi_n(x,t) = \chi_n(x)e^{-\frac{i}{\hbar}2\pi E_n t},$$

kde n čísluje vlastní čísla Hamiltoniánu E_n .

V nepřítomnosti elektromagnetického pole ($\mathbf{A} = 0$, $\varphi = 0$) a časově nezávislého potenciálu $V(x)$ má Schrödingerova rovnice tvar

$$i\frac{h}{2\pi}\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{x},t) = \left(-\frac{h^2}{8\pi^2m}\nabla^2 + V(x)\right)\psi(\mathbf{x},t) \quad (1.8)$$

1.3 Parametrizace vlnové funkce

Vlnová funkce $\psi(\mathbf{x},t)$ je skalární komplexní funkcí reálných proměnných. Komplexní funkci budeme parametrizovat dvojicí reálných funkcí. Ihned se nabízí dvě možnosti: geometrická parametrizace inspirovaná zápisem komplexního čísla $z = x + iy$ a goniometrická parametrizace vycházející ze zápisu $z = re^{i\phi}$.

Parametrizujme vlnovou funkci $\psi(\mathbf{x},t)$ pomocí dvojice reálných funkcí $u(\mathbf{x},t)$ a $v(\mathbf{x},t)$ jako

$$\psi(\mathbf{x},t) = u(\mathbf{x},t) + iv(\mathbf{x},t). \quad (1.9)$$

Dosadíme-li tuto parametrizaci (1.9) do Schrödingerovy rovnice (1.8) pro volnou částici ($V(x) = 0$), dostaneme rovnici pro reálnou a imaginární část

$$\frac{h}{2\pi}\frac{\partial}{\partial t}u(\mathbf{x},t) = -\frac{h^2}{8\pi^2m}\nabla^2v(\mathbf{x},t), \quad \frac{h}{2\pi}\frac{\partial}{\partial t}v(\mathbf{x},t) = \frac{h^2}{8\pi^2m}\nabla^2u(\mathbf{x},t). \quad (1.10)$$

Dosazením rovnic do sebe získáme pro u i v identickou rovnici

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}u(\mathbf{x},t) + \frac{h^2}{16\pi^2m^2}\nabla^4u(\mathbf{x},t) = 0. \quad (1.11)$$

Nalezneme řešení této rovnice v jednodimenzionálním případě ($\mathbf{x} \rightarrow x$). Vlnou částici uvažujeme v celém prostoru, počáteční podmínky označme $u(x,0) = f(x)$ a $\partial u/\partial t(x,0) = g(x)$. Označme $\alpha = h/4\pi m$. Provedeme Laplaceovu transformaci ($u(x,t) \rightarrow \tilde{u}(x,s)$) jako

$$\tilde{u}(x,s) = \int_0^{+\infty} u(x,t)e^{-st} dt$$

a následně Fourierovu transformaci ($\tilde{u}(x,s)$, $f(x)$, $g(x) \rightarrow \hat{u}(k,s)$, $\hat{f}(k)$, $\hat{g}(k)$) dle vztahu

$$\hat{u}(k,s) = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{u}(x,s)e^{-ikx} dx.$$

Pak dostáváme

$$s^2\hat{u}(k,s) - s\hat{f}(k) - \hat{g}(k) + k^4\alpha^2\hat{u}(k,s) = 0.$$

Aplikací inverzní Laplaceovy transformace získáme

$$\hat{u}(k,t) = \hat{f}(k) \cos(\alpha k^2 t) + \hat{g}(k) \frac{\sin(\alpha k^2 t)}{\alpha k^2},$$

následně inverzní Fourierova transformace dává

$$u(x,t) = f(x) \star \frac{1}{\sqrt{\alpha t}} F\left(\frac{x}{\sqrt{\alpha t}}\right) + g(x) \star \sqrt{\frac{t}{\alpha}} G\left(\frac{x}{\sqrt{\alpha t}}\right), \quad (1.12)$$

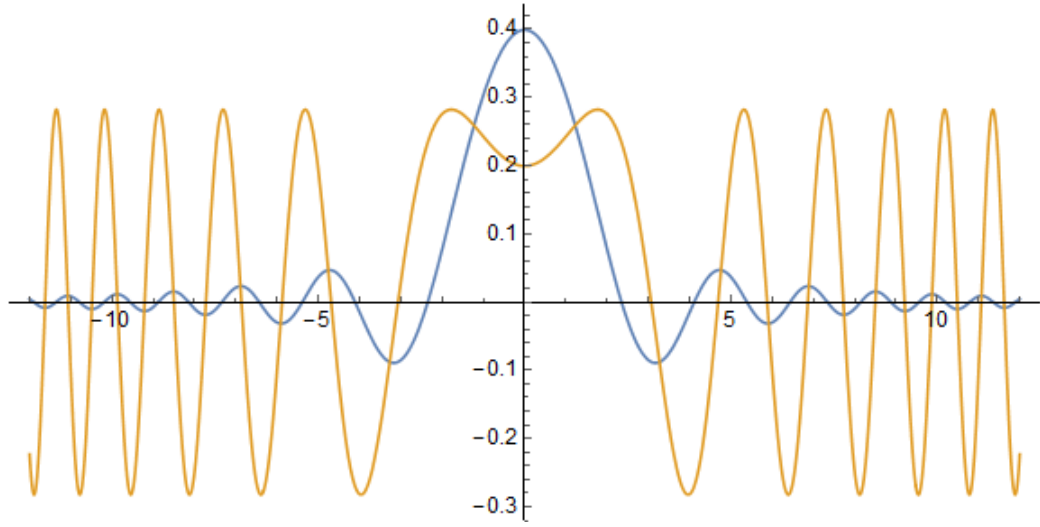
kde \star značí konvoluci. Funkce $F(x)$ a $G(x)$ (Obrázek 1.1) vystupující v (1.12) jsou tvaru

$$F(x) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \cos\left(\frac{\pi}{4} - \frac{x^2}{4}\right), \quad (1.13)$$

$$G(x) = \frac{x}{\sqrt{2\pi}} \left(S\left(\frac{x}{2}\right) - C\left(\frac{x}{2}\right) \right) + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos\left(\frac{\pi}{4} - \frac{x^2}{4}\right) \quad (1.14)$$

kde funkce $S(x)$ a $C(x)$ jsou Fresnelovy integrály definované vztahy

$$S(x) = \int_0^x \sin(w^2) dw, \quad C(x) = \int_0^x \cos(w^2) dw.$$



Obrázek 1.1: Grafy funkcí $F(x)$ (1.13) – oranžově a $G(x)$ (1.14) – modře.

Řešení (1.12) je vcelku neprůhledné, ukazuje však fakt, že souřadnice x a čas t vystupují v kombinaci $x/\sqrt{2\alpha t}$.

Za povšimnutí stojí, že ze znalosti počáteční vlnové funkce $\psi(x,t)$ získáme pro funkce $u(x,t)$ a $v(x,t)$ kromě počáteční podmínky pro ně samotné i počáteční podmínku pro jejich derivace, neboť rovnice (1.10) jsou splněné i pro $t = 0$ tedy $\partial u/\partial t(x,0) = -(h/4\pi m)\nabla^2 v_0(x)$, $\partial v/\partial t(x,0) = (h/4\pi m)\nabla^2 u_0(x)$. Ve vlnové funkci $\psi(x,t)$ obsahuje její imaginární část $v(x,t)$ informaci o časové derivaci její reálné části $u(x,t)$ a naopak.

Pozoruhodná skutečnost je, že ve stacionárním případě je rovnice (1.11) shodná s rovnicí popisující deformaci pružné desky[8]. Popis desky je však dvoudimenzionální a vhodnost popisu pomocí stacionární (1.11) je tímto faktem podmíněna.

Inspirojme se nyní goniometrickým tvarem komplexního čísla. Vlnovou funkci $\psi(\mathbf{x},t)$ budeme parametrizovat pomocí dvojice reálných funkcí $R(\mathbf{x},t)$ a $S(\mathbf{x},t)$ jako

$$\psi(\mathbf{x},t) = e^{R(\mathbf{x},t)+iS(\mathbf{x},t)}. \quad (1.15)$$

V této parametrizaci (1.15) přejde *obecná* Schrödingerova rovnice (1.5) do tvaru

$$\begin{aligned} V &= -\frac{\partial}{\partial t}S + \frac{1}{2}\nabla^2 R + \frac{1}{2}(\nabla R)^2 - \frac{1}{2}(\nabla S)^2 - \mathbf{b} \cdot \nabla S, \\ 0 &= \frac{\partial}{\partial t}R + \frac{1}{2}\nabla^2 S + \nabla R \cdot \nabla S + \mathbf{b} \cdot \nabla R. \end{aligned} \tag{1.16}$$

V goniometrické parametrizaci (1.15) je Schrödingerova rovnice silně nelineární. Tato parametrizace je použita v třetí kapitole jako vhodný nástroj k ukázání ekvivalence Schrödingerovy a difuzní rovnice.

2. Difuzní rovnice

Difuze je proces, při němž dochází k mísení dvou látek s různými fyzikálními a chemickými vlastnostmi (koncentrace, složení, atd.) v důsledku termálního pohybu částic. Fenomenologická teorie difuze se snaží popsat makroskopický vývoj vlastností směsi. Moderní přístup vychází ze studia náhodných procházek a Markovových procesů. Difuze lze pak popsat pomocí pravděpodobnostního rozdělení, jehož časový vývoj je dán Fokker-Planckovou rovnicí. Její tvar je za jistých podmínek podobný Schrödingerově rovnici.

2.1 Teplo a difuze

Na počátku 19. století vznikala fenomenologická teorie vedení tepla, o níž se z velké části zasloužil J. Fourier [9]. Experimentální poznatek, že teplo proudí z teplejšího na chladnější těleso a že tepelný tok $\mathbf{q}(\mathbf{x}, t)$ mezi dvěma tělesy s různou teplotou klesá se zmenšujícím se rozdílem jejich teplot $T(\mathbf{x}, t)$, shrnuje Fourierův zákon v diferenciálním tvaru

$$\mathbf{q}(\mathbf{x}, t) = -k\nabla T(\mathbf{x}, t), \quad (2.1)$$

kde k je součinitel tepelné vodivosti, jenž pro jednoduchost uvažujme konstantní. Neuvažujeme-li objemové zdroje tepla, pak zákon zachování energie implikuje rovnici kontinuity

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{q} = 0, \quad (2.2)$$

e značí hustotu energie. Hustota energie e je dána hustotou látky ρ , měrnou tepelnou vodivostí c_m a absolutní teplotou T :

$$e = \rho c_m T. \quad (2.3)$$

Kombinací posledních tří rovnic dostáváme *rovnici vedení tepla*

$$\frac{\partial}{\partial t} T(\mathbf{x}, t) - \alpha \nabla^2 T(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (2.4)$$

kde konstanta $\alpha = k(\rho c_m)^{-1}$ [10].

Na základě experimentů T. Grahama formuloval A. Fick v roce 1855 inspirován Fourierovým přístupem své dva zákony, jež popisují fenomenologicky difuzi [11]. První Fickův zákon praví, že difuzní tok \mathbf{J} (množství látky procházející plochou za čas) mezi dvěma oblastmi s rozdílnou koncentrací C je přímo úměrný rozdílu koncentrací v těchto oblastech. V diferenciálním tvaru

$$\mathbf{J} = -D\nabla C \quad (2.5)$$

s difuzním koeficientem (difuzivitou) D . Druhým Fickovým zákonem je samotná tzv. *difuzní rovnice*

$$\frac{\partial}{\partial t} C(\mathbf{x}, t) - D\nabla^2 C(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (2.6)$$

popisující časový vývoj koncentrace $C(\mathbf{x}, t)$.

Uvažujme dvojici experimentů. V prvním experimentu máme dva shodné kvádry o různých teplotách $T_1 < T_2$. Kvádry umístíme tak, že se jednou celou stranou dotýkají a vytvoří jeden kvádr. Na počátku máme nespojitě rozdělení teploty v tomto kvádru. Teplejší polovina začne předávat teplo polovině chladnější, dochází k evoluci počátečního rozdělení teploty dle rovnice vedení tepla (2.4). Nakonec se ustálí kvádr na jedné teplotě.

V druhém experimentu máme dutý kvádr rozdělený přepážkou na dvě poloviny, jež jsou naplněny roztokem soli s rozdílnými koncentracemi $c_1 < c_2$. Odstraníme překážku bez toho abychom roztoky promíchali. Roztoky se vlivem termálního pohybu začnou mísit, koncentrace se vyvíjí z počátečního stavu pomocí difuzní rovnice (2.6). Nakonec se roztoky dokonale promísí a kvádr bude obsahovat roztok soli o jedné koncentraci.

Oba experimenty vykazují stejný charakter. Rovnice vedení tepla (2.4) a difuzní rovnice (2.6) jsou formálně shodné. Na vedení tepla je možné nahlížet jako na difuzi koncentrace energie. Na základě této podobnosti je konstanta α označována jako termální difuzivita. Na difuzi je možné nahlížet jako proces ustanovující teplotní rovnováhu¹.

V obou případech se jedná o parciální diferenciální rovnici ve třech prostorových dimenzích a jedné časové dimenzi pro reálnou skalární funkci T resp. C . Pro počáteční podmínku

$$T(\mathbf{x}, 0) = \delta(\mathbf{x}) \quad \text{resp.} \quad C(\mathbf{x}, 0) = \delta(\mathbf{x})$$

dostáváme řešení rovnice (2.4) resp. (2.6) ve tvaru

$$T(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{(4\pi\alpha t)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{\mathbf{x}^2}{4\alpha t}\right) \quad \text{resp.} \quad C(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{(4\pi Dt)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{\mathbf{x}^2}{4Dt}\right) \quad (2.7)$$

Rovnice vedení tepla, resp. difuzní rovnice, mají stejný tvar jako Schrödingerova rovnice (1.1). Vztahu mezi těmito rovnicemi je věnována třetí kapitola.

2.2 Fokker-Planckova rovnice

Úvahy týkající se mísení kapalin o různé koncentraci lze aplikovat v případě mísení dvou různých kapalin či plynů. V obou případech přináší experimentálně ověřená atomární teorie a statistická fyzika nový pohled. Systém (kapalina, plyn) je tvořen obrovským počtem atomů či molekul ($\sim 10^{23}$). Na ty je možné nahlížet ideálně jako na volné částice s různou hybností. Dochází však k neustálým srážkám a hybnosti jednotlivých částic se rychle mění. Tento termální pohyb částic má za důsledek distribuci jednotlivých částic a hybnosti v systému. Difuze je důsledkem distribuce částic a vedení tepla je důsledek distribuce hybnosti.

¹Z hlediska statistické fyziky má počáteční nehomogenní rozdělení koncentrací nižší entropii, té můžeme přisoudit teplotu. Spontánní evoluce maximalizuje entropii, jedná se tedy dosažení tepelné rovnováhy.

Zkoumejme nyní na pohyb jedné částice v systému. Částice se pohybuje rychlostí \mathbf{v} . Avšak do částice neustále naráží jiné částice s různými hybnostmi. Tento vliv lze popsat jako působení tzv. Langevinovy síly $\mathbf{\Gamma}(t)$, která má charakter časově závislé náhodné proměnné korelované na δ -funkci s gaussovským rozdělením (viz dodatek B). Pohyb částice je popsán Langevinovou rovnicí

$$\dot{\mathbf{v}} = \mathbf{\Gamma}(t), \quad (2.8)$$

kde tečka značí časovou derivaci. Závislost na \mathbf{v} a t v (2.8) může být obecně složitější. V případě, že popisovaná částice je řádově větší než ostatní částice, avšak vliv srážek s ostatními částicemi shrnutý do Langevinovy síly je nezanedbatelný, pak rovnice

$$\dot{\mathbf{v}} = -\gamma\mathbf{v} + \mathbf{\Gamma}(t),$$

popisuje Brownův pohyb, člen úměrný \mathbf{v} odpovídá tření díky řádově větším rozměrům částice dle Stokesova zákona $\mathbf{F}_f = -\gamma\mathbf{v}$, kde \mathbf{F}_f označuje třecí sílu a konstanta γ udává velikost tohoto tření[2, 3].

Zvolme jiný přístup. Namísto popisu rychlosti částice zkoumejme hustotu pravděpodobnosti $W(\mathbf{x}, t)$ výskytu částice v čase t . Proces popsaný Langevinovou rovnicí (2.8) je tzv. Markovův proces (viz dodatek A). Pro hustotu pravděpodobnosti přechodu $P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}', t')$ lze pro proces s gaussovskou δ -korelovanou Langevinovou silou odvodit (viz dodatek C) obecnou Fokker-Planckovu rovnici

$$\frac{\partial P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}', t')}{\partial t} = L_{FP}(\mathbf{x}, t)P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}', t') \quad (2.9)$$

s počáteční podmínkou

$$P(\mathbf{x}, t' | \mathbf{x}', t') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'),$$

kde $L_{FP}(\mathbf{x}, t)$ značí Fokker-Planckův operátor

$$L_{FP}(\mathbf{x}, t) = -\sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} D_i(\mathbf{x}, t) + \sum_{i,j=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} D_{ij}(\mathbf{x}, t), \quad (2.10)$$

v němž $D_i(\mathbf{x}, t)$ je driftový vektor a $D_{ij}(\mathbf{x}, t)$ difuzní matice. Pak je hustota pravděpodobnosti $W(\mathbf{x}, t)$ výskytu částice v čase t při počáteční distribuci částic $W(\mathbf{x}, 0)$ dána jako

$$W(\mathbf{x}, t) = \int P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}', 0) W(\mathbf{x}', 0) d^3\mathbf{x}',$$

kde $P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}', 0)$ je řešením (2.9), integrace se provádí přes celý prostor, v němž probíhá difuzní proces.

Ve speciálním případě (tzv. Wienerův proces), kdy $D_i(\mathbf{x}, t) = 0$ a $D_{ij}(\mathbf{x}, t) = D\delta_{ij}$ dostáváme pro hustotu pravděpodobnosti difuzní rovnici

$$\frac{\partial}{\partial t} W(\mathbf{x}, t) = D\nabla^2 W(\mathbf{x}, t), \quad (2.11)$$

kterou v roce 1905 odvodil A. Einstein [2]. Pro počáteční podmínku $W(\mathbf{x}, 0) = \delta(\mathbf{x})$ dostáváme řešení identické s (2.7)[3].

Pohyb jediné částice v systému začínající v počátku je popsán Langevinovou rovnicí (2.8) s počáteční polohou v $\mathbf{x} = 0$. Ekvivalentně je vývoj hustoty pravděpodobnostního rozdělení $W(\mathbf{x}, t)$ výskytu částice nacházející se na začátku v počátku $W(\mathbf{x}, 0) = \delta(\mathbf{x})$ popsán Einsteinovou rovnicí (2.11). Systém je tvořen obrovským počtem částic, jež konají termální pohyb v důsledku Langevinovy síly. Pro dané počáteční rozdělení hustoty pravděpodobnosti $W(\mathbf{x}, 0)$ výskytu částice koná každá částice pohyb popsáný Langevinovou rovnicí (2.8) a rozdělení hustoty pravděpodobnosti $W(\mathbf{x}, t)$ jejího výskytu v čase t je dáno rovnicí (2.11). Vzhledem k obrovskému počtu částic se realizuje obrovské množství jednotlivých procesů. Počet částic se v daném místě vyskytujících je dán hustotou pravděpodobnosti $W(\mathbf{x}, t)$, jedná se tedy o koncentraci částic $C(\mathbf{x}, t)$ v daném místě. Odtud vidíme ekvivalenci difuzních rovnic (2.6) a (2.11).

Obecnou Fokker-Planckovu rovnici (2.9) lze zapsat ve tvaru rovnice kontinuity

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0, \quad (2.12)$$

kde \mathbf{J} je tok pravděpodobnosti daný vztahem (pro i -tou složku)

$$J_i = D_i W - \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} D_{ij} W. \quad (2.13)$$

2.3 Zjednodušená difuzní rovnice

Fokker-Planckova rovnice ve obecném tvaru (2.9) je pro jednodušší podobu srovnání se Schrödingerovou rovnicí příliš obecná. Difuzní rovnici proto přeformulujeme do tvaru, který je pro srovnání vhodnější. Omezíme se na difuzní procesy, kdy $D_{ij} = D\delta_{ij}$. Rovnici dále přeskálujeme tak, aby $D = 1/2$. Driftový vektor $D_i(\mathbf{x}, t)$ označíme $b_i(\mathbf{x}, t) + a_i(\mathbf{x}, t)$, kde \mathbf{b} je základní drift s zvolenou kalibrační podmínkou $\nabla \cdot \mathbf{b} = 0$ a \mathbf{a} je aditivní drift. Základní drift má význam například vektorového potenciálu \mathbf{A} , aditivní drift \mathbf{a} je přítomen proto, aby bylo možné jednoduše zavést proces časově obrácený. Uvažujme difuzní proces takového charakteru probíhající v časovém intervalu $t \in (a, b)$, označme jej \mathcal{D} . Hustotu pravděpodobnostního rozdělení $W(\mathbf{x}, t)$ označíme pro proces \mathcal{D} jako $\mu(\mathbf{x}, t)$. Její vývoj je popsán Fokker-Planckovými rovnicemi

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \mu &= \frac{1}{2} \nabla^2 \mu - \nabla \cdot [(\mathbf{b}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{a}(\mathbf{x}, t))\mu], \\ -\frac{\partial}{\partial t} \mu &= \frac{1}{2} \nabla^2 \mu - \nabla \cdot [(-\mathbf{b}(\mathbf{x}, t) + \hat{\mathbf{a}}(\mathbf{x}, t))\mu]. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Druhá rovnice popisuje proces časově obrácený, což se projeví mimo znamének v odlišném aditivním driftu $\hat{\mathbf{a}}$. Aditivní driftы splňují duální relaci

$$\mathbf{a} + \hat{\mathbf{a}} = \nabla(\log \mu). \quad (2.15)$$

Hustotu pravděpodobnosti lze vyjádřit pomocí nezáporných funkcí $\hat{\phi}(\mathbf{x},t)$ a $\phi(\mathbf{x},t)$ jako

$$\mu = \hat{\phi}\phi, \quad (2.16)$$

což se ukáže jako velmi výhodné pro studium podobnosti se Schrödingerovou rovnicí v třetí kapitole.

Hustotu pravděpodobnosti přechodu $P(\mathbf{x},t|\mathbf{x}',t')$ označíme v případě procesu \mathcal{D} jako $q(\mathbf{x},t|\mathbf{x}',t')$. Hustotu pravděpodobnosti při časovém obrácení procesu označíme $\hat{q}(\mathbf{x},t|\mathbf{x}',t')$. Rovnice

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}q + \frac{1}{2}\nabla^2q + \mathbf{b}(\mathbf{x},t) \cdot \nabla q + \mathbf{a}(\mathbf{x},t) \cdot \nabla q &= 0, \\ -\frac{\partial}{\partial t}\hat{q} + \frac{1}{2}\nabla^2\hat{q} - \mathbf{b}(\mathbf{x},t) \cdot \nabla\hat{q} + \hat{\mathbf{a}}(\mathbf{x},t) \cdot \nabla\hat{q} &= 0, \end{aligned} \quad (2.17)$$

popisují jejich vývoj v časovém intervalu $t \in (a,b)$ s počáteční rozdělením $\mu(\mathbf{x},a) = \hat{\phi}(\mathbf{x},a)\phi(\mathbf{x},a)$ v případě první rovnice a koncovým rozdělením $\mu(\mathbf{x},b) = \hat{\phi}(\mathbf{x},b)\phi(\mathbf{x},b)$ v případě druhé. První rovnice je vyjádřením procesu \mathcal{D} v Kolmogorově reprezentaci (q -reprezentaci) značené jako

$$[\hat{\phi}(\mathbf{x},a)\phi(\mathbf{x},a)q \gg \gg .$$

Druhá rovnice je vyjádřením procesu \mathcal{D} v časově obrácené \hat{q} -reprezentaci

$$\ll \ll \hat{g}\hat{\phi}(\mathbf{x},b)\phi(\mathbf{x},b)].$$

Proces \mathcal{D} vyjádříme ještě jiným způsobem. Označíme-li

$$q(\mathbf{x},t|\mathbf{x}',t') = \frac{1}{\phi(\mathbf{x},t)}p(\mathbf{x},t|\mathbf{x}',t')\phi(\mathbf{x}',t'), \quad (2.18)$$

kde $\phi(\mathbf{x},t)$ je funkce zavedená ve vztahu (2.16). Dále definujme funkci $c(\mathbf{x},t)$ na množině $\{\phi(\mathbf{x},t) \neq 0\}$ jako

$$c(\mathbf{x},t|\mathbf{x}',t') = \frac{\frac{\partial\phi(\mathbf{x},t)}{\partial t} + \frac{1}{2}\nabla^2\phi(\mathbf{x},t) + \mathbf{b}(\mathbf{x},t) \cdot \nabla\phi(\mathbf{x},t)}{\phi(\mathbf{x},t)}, \quad (2.19)$$

tzv. člen vzniku a zániku (*creation and killing*) zavedený pomocí $\phi(\mathbf{x},t)$. Difuzní proces \mathcal{D} je poté popsán funkcí $p(\mathbf{x},t|\mathbf{x}',t')$, jež je řešením rovnic

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}p + \frac{1}{2}\nabla^2p + \mathbf{b}(\mathbf{x},t) \cdot \nabla p + c(\mathbf{x},t)p &= 0, \\ -\frac{\partial}{\partial t}\hat{p} + \frac{1}{2}\nabla^2\hat{p} - \mathbf{b}(\mathbf{x},t) \cdot \nabla\hat{p} + c(\mathbf{x},t)\hat{p} &= 0 \end{aligned} \quad (2.20)$$

s počáteční a koncovou podmínkou popsanou funkcemi $\hat{\phi}(\mathbf{x},a)$ a $\phi(\mathbf{x},b)$. Druhá rovnice v (2.20) je adjungovaná rovnice k první. První rovnice je vyjádřením procesu \mathcal{D} v tzv. Schrödingerově reprezentaci (p -reprezentaci) značené

$$[\hat{\phi}(\mathbf{x},a)p \gg \gg \ll p\phi(\mathbf{x},b)].$$

Detaily týkající se duality a jednotlivých reprezentací lze nalézt v [4].

Ve složitějším případě je uvažován difuzní proces s difuzním koeficientem tenzorové povahy, jak je tomu v [4].

Porovnáme-li obecný tvar Schrödingerovy rovnice (1.5) a difuzní rovnice (2.20), vidíme, že až na imaginární jednotku jsou rovnice formálně shodné. Jejich podobnosti se věnuje následující kapitola.

3. Schrödingerovy rovnice versus difuzní rovnice

V této kapitole budeme studovat podobnost Schrödingerovy rovnice a rovnice difuze. Cílem je nalézt mezi rovnicemi vztah umožňující převést kvantově mechanický problém na difuzní proces a naopak. Nejprve se zabýváme rámcem, v němž je nalezení vztahu možné. Poté jsou předloženy dva přístupy, umožňující vztah mezi rovnicemi nalézt. V prvním přístupu se omezujeme na situaci časově nezávislého potenciálu za absence magnetického pole v jedné dimenzi. Pro tento přístup zavedeme samosdružený Fokker-Planckův operátor. Druhý přístup je formulován co nejobecněji a je pomocí něj ukázána ekvivalence Schrödingerovy a difuzní rovnice.

3.1 Vlnová funkce versus teplota

Rovnice vedení tepla (2.4) (či difuzní rovnice (2.6)) má stejný tvar jako Schrödingerova rovnice pro vlnou částici s rozdílem, že difuzní konstanta je imaginární. V obou případech je samozřejmě splněna rovnice kontinuity pro pravděpodobnost (1.3) a pro energii (2.2). Provedeme formální přiřazení. Identifikujeme hustotu pravděpodobnosti μ (1.2) s hustotou energie e (2.3) a tok pravděpodobnosti \mathbf{j} (1.4) s tepelným tokem \mathbf{q} (2.1). Vztah mezi identifikovanými veličinami zvolíme jako lineární transformaci. Ze definičních vztahů hustot (1.2),(2.3) a toků (1.4),(2.1) dostáváme úměrnost

$$\begin{aligned} T &\sim \bar{\psi}\psi, \\ \nabla T &\sim i(\bar{\psi}\nabla\psi - \psi\nabla\bar{\psi}), \end{aligned} \tag{3.1}$$

mezi teplotou T a vlnovou funkcí ψ . První rovnice odpovídá identifikaci hustot, druhá identifikaci toků. Použijeme-li geometrickou parametrizaci vlnové funkce (1.9) pomocí reálných funkcí u a v , přejde (3.1) na

$$\begin{aligned} T &\sim u^2 + v^2, \\ \nabla T &\sim u\nabla v - v\nabla u. \end{aligned}$$

Položíme-li do rovnosti druhou rovnici s gradientem první, dostáváme

$$u\nabla u + v\nabla v \sim \nabla T \sim u\nabla v - v\nabla u,$$

rovnici svazující u a v . Avšak obecná vlnová funkce ψ má nezávislou reálnou a imaginární část. Vztah založený na identifikaci (3.1) se omezuje pouze na vlnové funkce, jež lze parametrizovat jednou reálnou funkcí.

Neúspěch identifikace (3.1) byl předem jasný. Vlnová funkce je komplexní funkcí, nelze ji tedy identifikovat s reálnou funkcí, z prostého důvodu jiné dimenze \mathbb{R} a \mathbb{C} , neboť \mathbb{C} je izomorfní s \mathbb{R}^2 .

Difuzní proces je popsáný reálnou funkcí (koncentrací či hustotou pravděpodobnosti). Proto je nutné uvažovat v obecnosti dvojici procesů, aby bylo možné najít vztah s vlnovou funkcí.

3.2 Samosdružený Fokker-Palckův operátor

Tento sekce shrnuje přístup předložený v 5. kapitole [3].

Omezíme se na difuzní proces v jedné dimenzi ($\mathbf{x} \rightarrow x$) a uvažujme časově nezávislý drift $D^{(1)}(x)$ a konstantní difuzní koeficient D . Tohoto tvaru lze vhodnou transformací vždy dosáhnout (viz dodatek D). Fokker-Planckovu rovnici pro hustotu pravděpodobnosti $W(x,t)$ společně s rovnicí kontinuity (2.15) pro tok pravděpodobnosti $J(x,t)$ budeme uvažovat ve tvaru

$$\frac{\partial W(x,t)}{\partial t} = L_{FP}(x,t)W(x,t) = \left[\frac{\partial}{\partial x} f'(x) + D \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] W(x,t) = -\frac{\partial S(x,t)}{\partial x}, \quad (3.2)$$

kde $L_{FP}(x,t)$ je Fokker-Planckův operátor, f' znamená df/dx a $f(x)$ značí potenciál zavedený jako

$$f(x) = - \int^x D^{(1)}(x') dx', \quad (3.3)$$

v integrálu není nutné psát dolní mez, neboť je zde volnost ve volbě nulové hladiny potenciálu $f(x)$.

Ve stacionárním případě označme odpovídající hustotu pravděpodobnosti $W_{st}(x)$. Pravděpodobnostní tok S je nutně konstantní. V případě, že $S = 0$ z (3.2) plyne

$$f'(x)W_{st}(x) = -D \frac{\partial}{\partial x} W_{st}(x) \rightarrow W_{st}(x) = \frac{N}{D} e^{-\frac{f(x)}{D}}, \quad (3.4)$$

kde konstantu N určíme z normalizace hustoty pravděpodobnosti. Zavedeme druhý potenciál $\Phi(x)$ jako

$$\Phi(x) = \frac{f(x)}{D}. \quad (3.5)$$

Pro obecný konstantní pravděpodobnostní tok S je stacionární řešení rovnice (3.2) tvaru

$$W_{st}(x) = \frac{N}{D} e^{-\Phi(x)} - \frac{S}{D} e^{-\Phi(x)} \int^x e^{\Phi(x')} dx'. \quad (3.6)$$

Chování potenciálu $\Phi(x)$ (a tedy $f(x)$) může omezit prostor, v němž difuzní proces probíhá, tedy $x \in (x_{min}, x_{max})$. Zabýváme se omezením zprava (bodem x_{max}), stejné úvahy lze pak provést pro x_{min} . Nabývá-li potenciál $\Phi(x)$ pro $x = x_{max}$ nekonečně vysoké hodnoty, nemůže se pomocí difuze nic dostat do oblasti $x > x_{max}$. V tomto místě tedy vymizí tok pravděpodobnosti $S(x_{max}, t) = 0$, hovoříme o odrazivé stěně (reflecting wall). V případě záporné nekonečné hodnoty potenciálu $\Phi(x)$ v místě $x = x_{max}$ plyne z rovnice kontinuity pro tok podmínka $e^{\Phi(x_{max})} W(x_{max}, t) = 0$, hovoříme o absorbující stěně (absorbting wall). V případě, že nastává v žádném bodě ani jeden z případů, dostáváme pro běžný potenciál ($\Phi(x) \rightarrow +\infty$ pro $x \rightarrow \pm\infty$) v $x = \pm\infty$ podmínku $S = 0$, tedy odrazivou stěnu. Vzhledem k těmto úvahám budeme uvažovat difuzní proces na $x \in (x_{min}, x_{max})$ s uvedenými možnostmi okrajových podmínek.

Fokker-Planckův operátor v rovnici (3.2) lze poté pomocí potenciálu (3.5) napsat ve tvaru

$$L_{FP}(x,t) = D \frac{\partial}{\partial x} \left(e^{-\Phi(x)} \frac{\partial}{\partial x} e^{\Phi(x)} \right). \quad (3.7)$$

Povšimněme si, že Fokker-Plankův operátor není samosdružený (viz (C.9)), avšak operátor $e^{\Phi(x)}L_{FP}(x,t)$ je, tedy

$$[e^{\Phi(x)}L_{FP}(x,t)]^+ = L_{FP}^+(x,t)e^{\Phi(x)} = e^{\Phi(x)}L_{FP}(x,t), \quad (3.8)$$

kde první rovnost plyne z definice hermitovského sdružení. Druhá rovnost plyne z řetězové rovnosti

$$\begin{aligned} \int_{x_{min}}^{x_{max}} W_1 [e^{\Phi(x)}L_{FP}(x,t)] W_2 dx &= \int_{x_{min}}^{x_{max}} W_1 \left[e^{\Phi(x)} D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\Phi(x)} \frac{\partial}{\partial x} e^{\Phi(x)} \right] W_2 dx \\ &= \left[W_1 D \frac{\partial}{\partial x} e^{\Phi(x)} W_2 \right]_{x_{min}}^{x_{max}} - \int_{x_{min}}^{x_{max}} \left[\frac{\partial}{\partial x} W_1 e^{\Phi(x)} \right] D e^{-\Phi(x)} \left[\frac{\partial}{\partial x} e^{-\Phi(x)} W_2 \right] dx \\ &= \left[W_1 D \frac{\partial}{\partial x} e^{\Phi(x)} W_2 - W_2 D \frac{\partial}{\partial x} e^{\Phi(x)} W_1 \right]_{x_{min}}^{x_{max}} + \\ &\int_{x_{min}}^{x_{max}} W_2 \left[e^{\Phi(x)} D \frac{\partial}{\partial x} e^{-\Phi(x)} \frac{\partial}{\partial x} e^{\Phi(x)} \right] W_1 dx = \int_{x_{min}}^{x_{max}} W_2 [e^{\Phi(x)}L_{FP}(x,t)] W_1 dx \end{aligned}$$

pro funkce W_1 a W_2 splňující obě stejné okrajové podmínky. V hraničních bodech v případě odrazivé stěny

$$0 = S = -D e^{-\Phi(x)} \frac{\partial}{\partial x} e^{\Phi(x)} W$$

a v případě absorbuující stěny

$$0 = e^{\Phi(x)} W,$$

což vede k vymizení členů vzniklých při integraci per-partes v řetězové rovnosti. Zavedeme operátor L vztahem

$$L = e^{-\Phi(x)/2} [e^{\Phi(x)}L_{FP}(x,t)] e^{-\Phi(x)/2} = e^{\Phi(x)/2} L_{FP}(x,t) e^{-\Phi(x)/2}, \quad (3.9)$$

který je očividně samosdružený. Dosazením tvaru Fokker-Plankova operátoru (3.7), zpětným dosazením za potenciál $\Phi(x)$ z (3.5) a rozderivováním dostáváme

$$L = D e^{\frac{f(x)}{2D}} \frac{\partial}{\partial x} e^{-\frac{f(x)}{D}} \frac{\partial}{\partial x} e^{\frac{f(x)}{2D}} = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{(f'(x))^2}{4D} + \frac{f''(x)}{2}. \quad (3.10)$$

Označme jako potenciál $V(x)$ členy charakteru skalární funkce v (3.9), tedy

$$V(x) = \frac{(f'(x))^2}{4D} - \frac{f''(x)}{2}. \quad (3.11)$$

Uvažujme-li řešení Fokker-Planckovy rovnice v separovaném tvaru

$$W(x,t) = \phi(x) e^{-\lambda t}, \quad (3.12)$$

pak je řešení Fokker-Planckovy rovnice (3.2) převedeno na problém hledání vlastních čísel operátoru L_{FP} , tedy

$$L_{FP}(x)\phi(x) = -\lambda\phi(x), \quad (3.13)$$

kde λ značí vlastní číslo příslušející vlastní funkci $\phi(x)$. Označíme-li vlastní funkci operátoru L (3.10) příslušející vlastnímu číslu λ jako $\chi(x)$, pak díky zavedení L (3.9) dostáváme vztah

$$\chi(x) = e^{\frac{\Phi(x)}{2}} \phi(x) = e^{\frac{f(x)}{2D}} \phi(x). \quad (3.14)$$

Protože operátor L je samosdružený, tak množina jeho vlastních funkcí $\{\phi_n(x)\}$ tvoří v Hilbertově prostoru nad \mathbb{R} bázi ortogonálních funkcí. Stejně vlastnosti má díky (3.14) také množina vlastních funkcí $\{\chi_n(x)\}$ operátoru L_{FP} .

Předložený přístup vede k následujícímu vztahu mezi Schrödingerovou a difuzní rovnicí v jedné dimenzi. Pro Brownův pohyb částice v prostředí s konstantním difuzním koeficientem D a velkým součinitelem tření γ (vystupujícím v Stokesově třecí síle $F_f = -\gamma v$) nacházející se ve vnějším časově nezávislém silovém poli $F(x)$ s potenciálem $f(x)$ ($F(x) = -\partial f(x)/\partial x$), lze pravděpodobnostní rozdělení $W(x,t)$ výskytu částice zapsat v separovaném tvaru

$$W(x,t) = \chi(x) e^{-\frac{f(x)}{2D}} e^{-\lambda t}, \quad (3.15)$$

kde $\chi(x)$ je vlastní funkce s operátoru L

$$L = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{(f'(x))^2}{4D} + \frac{f''(x)}{2}$$

s vlastním číslem λ .

Na druhé straně, zavedeme-li hmotnost m , potenciál $V(x)$ a energii E dle následujících vztahů a provedeme formální přiřazení:

$$\begin{aligned} m &= \frac{h^2}{8\pi^2 D}, \\ V(x) &= \frac{(f'(x))^2}{4D} - \frac{f''(x)}{2}, \\ E &= \frac{h\lambda}{2\pi}, \\ e^{-t} &\leftrightarrow e^{-it}. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Pak částice o hmotnosti m nacházející se potenciálu $V(x)$ se nachází ve stacionárním stavu $\psi(x)$ daném energií E tvaru

$$\psi(x) = \chi(x) e^{-\frac{i}{h} 2\pi E t}, \quad (3.17)$$

kde $\chi(x)$ je vlastní funkce operátoru $\hat{H} = \hat{H}(x)$ tvaru

$$\hat{H} = -\frac{h^2}{8\pi^2 m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x).$$

Vzhledem k diskuzi možnosti nalezení vztahu mezi Schrödingerovou rovnicí a difuzní rovnicí v předcházející sekci 3.1 si zaslouží předložený vztah (3.16) komentář. Omezení se na případ časově nezávislého Hamiltoniánu dovoluje separaci Schrödingerovy rovnice (1.7). Protože v případě absence magnetického

pole popsaného vektorovým potenciálem je Hamiltonián reálný, je možné uvažovat v separovaném tvaru $\psi(x,t) = \chi(x)\zeta(t)$ prostorovou funkcí $\chi(x)$ reálnou. Komplexní charakter vlnové funkce se poté projevuje v časovém vývoji ve funkci $\zeta(x) = \exp(-2\pi iEt/h)$ popisující vlnění. Pomocí formálního přiřazení

$$e^{-it} \leftrightarrow e^{-t}$$

lze však vlnový charakter kvantové mechaniky převést na relaxační proces vlastní difuzi a naopak.

3.3 Ekvivalence Schrödingerovy rovnice a difuze

V této sekci jsou prezentovány výsledky z [4], převážně pak z 4. kapitoly. Uvažujeme dvojici Schrödingerových rovnic v obecném tvaru (1.5) pro vlnovou funkci $\psi(\mathbf{x}, t)$ ve třech dimenzích

$$\begin{aligned} i\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{x},t) + \frac{1}{2}\nabla^2\psi(\mathbf{x},t) + i\mathbf{b}(\mathbf{x},t) \cdot \nabla\psi(\mathbf{x},t) - V(\mathbf{x},t)\psi(\mathbf{x},t) &= 0, \\ -i\frac{\partial}{\partial t}\bar{\psi}(\mathbf{x},t) + \frac{1}{2}\nabla^2\bar{\psi}(\mathbf{x},t) - i\mathbf{b}(\mathbf{x},t) \cdot \nabla\bar{\psi}(\mathbf{x},t) - V(\mathbf{x},t)\bar{\psi}(\mathbf{x},t) &= 0. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Druhá rovnice je komplexní sdružení rovnice první.

Dále uvažujme difuzní proces D s odvoláním se na notaci zavedenou v 2.3. Proces \mathcal{D} je popsán rozdělením $\mu(\mathbf{x},t)$ daným dvojicí kladných funkcí $\phi(\mathbf{x},t), \hat{\phi}(\mathbf{x},t)$, jež jsou řešením rovnic

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\phi(\mathbf{x},t) + \frac{1}{2}\nabla^2\phi(\mathbf{x},t) + \mathbf{b}(\mathbf{x},t) \cdot \nabla\phi(\mathbf{x},t) + c(\mathbf{x},t)\phi(\mathbf{x},t) &= 0, \\ -\frac{\partial}{\partial t}\hat{\phi}(\mathbf{x},t) + \frac{1}{2}\nabla^2\hat{\phi}(\mathbf{x},t) - \mathbf{b}(\mathbf{x},t) \cdot \nabla\hat{\phi}(\mathbf{x},t) + c(\mathbf{x},t)\hat{\phi}(\mathbf{x},t) &= 0. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Rovnice (3.19) popisují proces \mathcal{D} v Schrödingerově p -reprezentaci ekvivalentně rovnicím (2.20).

Díky zápisu difuzního procesu \mathcal{D} v p -reprezentaci si oba páry rovnic navzájem formálně zcela odpovídají s jedinou odlišností – imaginární jednotkou u některých členů. Vztah párů rovnic (3.18) a (3.19) je založen na ztotožnění hustot pravděpodobnosti $\mu(\mathbf{x},t)$ pro oba procesy:

$$\bar{\psi}(\mathbf{x},t)\psi(\mathbf{x},t) = \mu(\mathbf{x},t) = \hat{\phi}(\mathbf{x},t)\phi(\mathbf{x},t). \quad (3.20)$$

Analogicky goniometrické parametrizaci (1.15) parametrizujeme nezáporné funkce $\phi(\mathbf{x},t)$ a $\hat{\phi}(\mathbf{x},t)$ pomocí reálných funkcí $R(\mathbf{x},t)$ a $S(\mathbf{x},t)$ jako

$$\phi(\mathbf{x},t) = e^{R(\mathbf{x},t)+S(\mathbf{x},t)}, \quad \hat{\phi}(\mathbf{x},t) = e^{R(\mathbf{x},t)-S(\mathbf{x},t)}. \quad (3.21)$$

V této parametrizaci přejdou rovnice (3.19) do tvaru (pro přehlednost nepíšeme

argumenty funkcí)

$$\begin{aligned}
-c &= \left[-\frac{\partial}{\partial t} S + \frac{1}{2} \nabla^2 R + \frac{1}{2} (\nabla R)^2 - \frac{1}{2} (\nabla S)^2 - \mathbf{b} \cdot \nabla S \right] \\
&+ \left[\frac{\partial}{\partial t} R + \frac{1}{2} \nabla^2 S + \nabla R \cdot \nabla S + \mathbf{b} \cdot \nabla R \right] \\
&+ \left[2 \frac{\partial}{\partial t} S + (\nabla S)^2 + 2\mathbf{b} \cdot \nabla S \right], \\
-c &= \left[-\frac{\partial}{\partial t} S + \frac{1}{2} \nabla^2 R + \frac{1}{2} (\nabla R)^2 - \frac{1}{2} (\nabla S)^2 - \mathbf{b} \cdot \nabla S \right] \\
&- \left[\frac{\partial}{\partial t} R + \frac{1}{2} \nabla^2 S + \nabla R \cdot \nabla S + \mathbf{b} \cdot \nabla R \right] \\
&+ \left[2 \frac{\partial}{\partial t} S + (\nabla S)^2 + 2\mathbf{b} \cdot \nabla S \right],
\end{aligned} \tag{3.22}$$

kde členy v obou rovnicích byly přeuspořádány do hranatých závorek na základě shodného tvaru s obecnou Schrödingerovou rovnicí v goniometrické parametrizaci (1.16).

Dalším krokem je ztotožnění funkcí $R(\mathbf{x}, t)$ a $S(\mathbf{x}, t)$, pomocí nichž je parametrizována vlnová funkce (1.15) a funkce $\phi(\mathbf{x}, t), \hat{\phi}(\mathbf{x}, t)$ (3.21). Díky tomuto ztotožnění můžeme dosadit Schrödingerovu rovnici v goniometrické parametrizaci (1.16) do difuzních rovnic (3.22), čímž dostaneme vztah

$$-c(\mathbf{x}, t) = V(\mathbf{x}, t) + 2 \frac{\partial}{\partial t} S(\mathbf{x}, t) + [\nabla S(\mathbf{x}, t)]^2 + 2\mathbf{b}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla S(\mathbf{x}, t) \tag{3.23}$$

spojující člen vzniku a zániku (creation and killing) $c(\mathbf{x}, t)$ vlastní difuznímu popisu a skalární potenciál $V(\mathbf{x}, t)$ vystupující v Schrödingerově rovnici.

Vztah obou rovnic je následovný:

Pro difuzní proces \mathcal{D} charakterizovaný v Schrödingerově p -reprezentaci pomocí dvojice kladných funkcí $\phi(\mathbf{x}, t), \hat{\phi}(\mathbf{x}, t)$, jež jsou řešením (3.19). Pomocí funkcí $R(\mathbf{x}, t)$ a $S(\mathbf{x}, t)$ je parametrizujících dle (3.21) definujeme komplexní funkci předpisem

$$\psi(\mathbf{x}, t) = e^{R(\mathbf{x}, t) + iS(\mathbf{x}, t)}.$$

Takto definovaná vlnová funkce $\psi(\mathbf{x}, t)$ je řešením obecné Schrödingerovy rovnice (3.18) s potenciálem

$$V(\mathbf{x}, t, \psi) = c(\mathbf{x}, t) - 2 \frac{\partial}{\partial t} S(\mathbf{x}, t) - [\nabla S(\mathbf{x}, t)]^2 - 2\mathbf{b}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla S(\mathbf{x}, t).$$

Ekvivalentně lze říct:

K vlnové funkci $\psi(\mathbf{x}, t)$, jež je řešením obecné Schrödingerovy rovnice (3.18), parametrizované pomocí dvojice reálných funkcí $R(\mathbf{x}, t)$ a $S(\mathbf{x}, t)$ jako (1.15) definujeme dvojici kladných funkcí předpisem

$$\phi(\mathbf{x}, t) = e^{R(\mathbf{x}, t) + S(\mathbf{x}, t)}, \quad \hat{\phi}(\mathbf{x}, t) = e^{R(\mathbf{x}, t) - S(\mathbf{x}, t)}.$$

Funkce $\phi(\mathbf{x},t), \hat{\phi}(\mathbf{x},t)$ jsou řešením difuzních rovnic (3.19) s členem vzniku a zániku (creation and killing)

$$c(\mathbf{x},t,\phi) = V(\mathbf{x},t) - 2\frac{\partial}{\partial t}S(\mathbf{x},t) - [\nabla S(\mathbf{x},t)]^2 - 2\mathbf{b}(\mathbf{x},t) \cdot \nabla S(\mathbf{x},t).$$

zavedeném pomocí $\phi(\mathbf{x},t)$, tedy Schrödingerovou p -reprezentaci difuzního procesu \mathcal{D} .

Tímto byla ukázána ekvivalence obecné Schrödingerovy rovnice a difuzních rovnic popisujících difuzní proces \mathcal{D} .

Povšimněme si u definovaného potenciálu $V(\mathbf{x},t,\psi)$ resp. členu vzniku a zániku $c(\mathbf{x},t,\phi)$, závislosti na konkrétní vlnové funkci $\psi(\mathbf{x},t)$ resp. funkci $\phi(\mathbf{x},t)$, jež zde vstupuje díky nelineární závislosti (3.23), která je důsledkem závislosti na jedné z parametrizujících funkcí $S(\mathbf{x},t)$. To má za následek, že v případě lineární Schrödingerovy rovnice je jí ekvivalentní rovnice difuzní nelineární a naopak. Nabízí se otázka, která z teorií je z podstaty lineární. Protože jsou obě teorie dle předchozího ekvivalentní, není zde z formálního hlediska nic, co by jednu upřednostňovalo. Jako argument však může sloužit fyzikální objasnění nelinearity v jednom z případů. Kvantově mechanický potenciál je fundamentální, nenabízí se moc možností k vysvětlení. Avšak v případě difuze je situace jednodušší. Vysvětlení nelinearity poskytují například větvcí se procesy. Příkladem větvcích se procesů jsou difuzní procesy, při nichž dochází k reakci a anihilaci částic. Ty jsou popsány difuzními rovnicemi, ve kterých vystupuje nelineární člen vzniku a zániku (*creation and killing*)

$$\sum_{n,m} c_{n,m} u^n \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^m$$

pro případ jednodimenzionálního procesu, kde $u(x,t)$ je hustota pravděpodobnosti či jiná veličina popisující difuzní proces. Další možností je závislost driftového koeficientu na interakci mezi difundujícími částicemi. Pak v jednodimenzionálním případě je driftový koeficient $b[x,u]$ vystupující v Fokker-Planckově rovnici pro hustotu pravděpodobnosti $u(x,t)$

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} - \frac{\partial}{\partial x} (b[x,u]u(x,t))$$

tvaru

$$b[x,u] = \int b(x,y)u(t,y) dy,$$

kde funkce $b(x,y)$ popisuje interakci mezi částicemi[12].

Jak Schrödingerova rovnice, tak difuzní teorie jsou nerelativistické, což je v souladu s dokazovanou ekvivalencí. Nerelativičnost difuze se projevuje kupříkladu v evoluci hustoty pravděpodobnosti $W(\mathbf{x},t)$ v případě Wienerova procesu. Byla-li v čase $t = 0$ částice lokalizována v počátku, tedy $W(\mathbf{x},0) = \delta(x)$, pak v následujícím libovolně malém čase se částice nachází s nenulovou pravděpodobností od počátku libovolně daleko. Relativistickou formulaci difuze poskytuje mimo jiné relaivistická teorie vedení tepla (*Relativistic heat conduction* – RHC) [13]. Dle jejích autorů je RHC kompatibilní se speciální teorií relativity (konečná rychlost šíření tepla), druhým termodynamickým zákonem i kvantovou mechanikou

(vlnově-korpuskulární povaha fononu).

Vraťme se k nyní k obecným úvahám na konci sekce 3.1. Jak již bylo řečeno, k nalezení vzájemně odpovídajícího si vztahu s komplexní vlnovou funkcí je nutné najít dva difuzní procesy. Skutečně, k Schrödingerově rovnici (3.18) (vystupující sice též v páru, avšak druhá rovnice je pouhé komplexní sdružení) byly uvažovány dvě difuzní rovnice (3.19) pro dvojici funkcí $\phi(\mathbf{x},t), \hat{\phi}(\mathbf{x},t)$, jež popisují difuzní proces \mathcal{D} pomocí p -reprezentace. Ta je ovšem ekvivalentní Kolmogorově q -reprezentaci i obrácené \hat{q} -reprezentaci, z nichž jedna popisuje difuzní proces probíhající chronologicky a druhá v časově převráceném sledu. Obě reprezentace jsou navzájem duální a představují právě ty dva hledané difuzní procesy. Schrödingerova p -reprezentace je jejich "křížencem". Popisuje zároveň oba procesy – difuzní proces probíhající zároveň oběma směry.

Ekvivalence byla dokázána pro difuzní proces \mathcal{D} s konstantním difuzním koeficientem D . V obecném případě, kdy má difuzní koeficient $D^{(2)}$ tenzorovou povahu, je tato povaha zahrnuta do chování souřadnic. Difuzní koeficient hraje roli netriviální časově závislé metriky. Když jsme se omezili na difuzní proces \mathcal{D} s konstantním difuzním koeficientem D , mohlo by se zdát, že byla ukázána ekvivalence Schrödingerovy rovnice pouze pro takto definovanou podtřídu difuzních procesů, a tedy je difuzní teorie obecnější než kvantová mechanika. Toto však není možné tvrdit díky možnosti popsat tenzorovou povahu difuzního koeficientu pomocí netriviálních souřadnic.

Za poznamenání stojí, že uvedenou problematikou se zabýval již sám A. Schrödinger, který vznesl domněnku, že kvantová mechanika je difuzní teorie [1] a pokoušel se ekvivalenci dokázat. Soudil, že díky nalezení tohoto vztahu, se kvantová teorie stane lépe pochopitelnou, avšak neuspěl. Musel přijít A. N. Kolmogorov a další, než byla vybudována moderní pravděpodobnostní teorie difuze, v jejímž rámci je možné vztah nalézt.

4. Příklady

V této kapitole na nejjednodušších kvantových systémech demonstrujeme výsledky třetí kapitoly. Konkrétně aplikujeme přístup předložený v sekci 3.2, tedy se omezíme na jednu dimenzi. Příklady jsou inspirované monografií [3].

V příkladech budeme uvažovat difuzní proces v prostředí s difuzní konstantou D probíhající v silovém poli s potenciálem $f(x)$. Proces je popsán hustotou pravděpodobnosti $W(x,t)$, kterou budeme hledat v separovaném tvaru (3.12)

$$W_n(x,t) = \phi_n(x)e^{-\lambda_n t},$$

kde index n označuje řešení odpovídající vlastnímu číslu λ_n .

Následně budeme uvažovat částici o hmotnosti m popsanou vlnovou funkcí $\psi(x,t)$, jež se nachází v potenciálu $V(x)$. Vlnovou funkci budeme hledat ve tvaru (1.6)

$$\psi_n(x,t) = \chi_n(x)e^{-\frac{i}{\hbar}2\pi E_n t}$$

odpovídajícímu energii E_n .

Za užití nalezeného vztahu (3.16) mezi Schrödingerovou rovnicí a difuzní rovnicí budeme zkoumat především chování vzájemně si odpovídajících potenciálů $f(x)$ a $V(x)$.

4.1 Harmonický oscilátor

Kvantový harmonický oscilátor je popsán Hamiltoniánem

$$H_{ho} = -\frac{\hbar^2}{4\pi m} \nabla^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \quad (4.1)$$

tedy odpovídající potenciál $V(x)$ (Obrázek 4.1) je tvaru

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2. \quad (4.2)$$

Vlastní funkce $\chi_n(x)$ (Obrázek 4.2) Hamiltoniánu H_{ho} jsou dobře známého tvaru [14]

$$\chi_n(x) = \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \mathcal{H}_n \left(\sqrt{\frac{2\pi m\omega}{\hbar}} x \right) e^{-\frac{m\pi\omega}{\hbar} x^2} \text{ pro } n = 0, 1, 2, \dots, \quad (4.3)$$

kde \mathcal{H} značí Hermiteův polynom, s energií (vlastním číslem)

$$E_n = \frac{\hbar\omega}{2\pi} \left(n + \frac{1}{2} \right) \text{ pro } n = 1, 2, 3, \dots$$

Pro difuzní popis označme konstantu

$$\gamma \equiv \frac{2\pi m\omega}{\hbar} = \frac{\hbar\omega}{4\pi D},$$

kde v druhé rovnosti bylo dosazeno za hmotnost z (3.16). Potenciálu $V(x)$ (4.2) odpovídá dle vztahu (3.16) potenciál $f(x)$ (Obrázek 4.1) vzhledem k označení tvaru

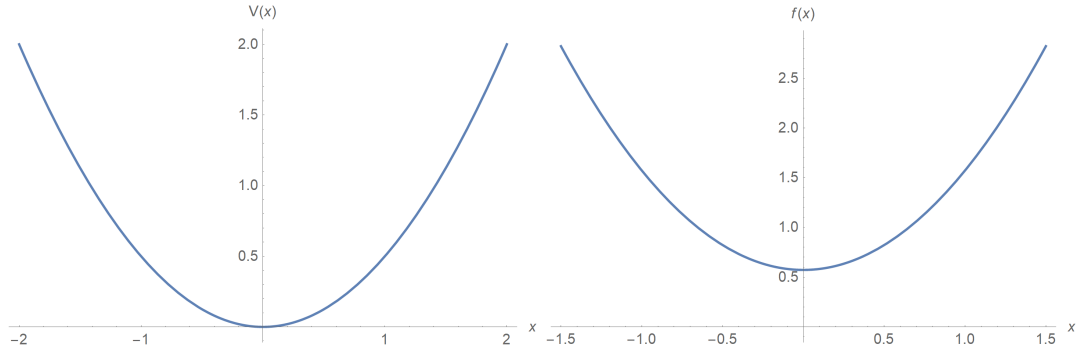
$$f(x) = \gamma D x^2 - 2D \log \sqrt[4]{\frac{\gamma}{\pi}}, \quad (4.4)$$

kde \log značí přirozený logaritmus. Stejně jako potenciál $V(x)$ (4.2) je i $f(x)$ kvadratický. Oba potenciály se formálně liší jen o konstantu, která však vzhledem k možnosti volby nulové hladiny potenciálu nehraje roli. Ze znalosti tohoto tvaru můžeme dle (3.14) nalézt vlastní funkci Fokker-Planckova operátoru (3.7) $\phi_n(x)$ (Obrázek 4.2) odpovídající vlastnímu číslu $\lambda_n = 2\pi E_n/h$ (kde n je nezáporné číslo)

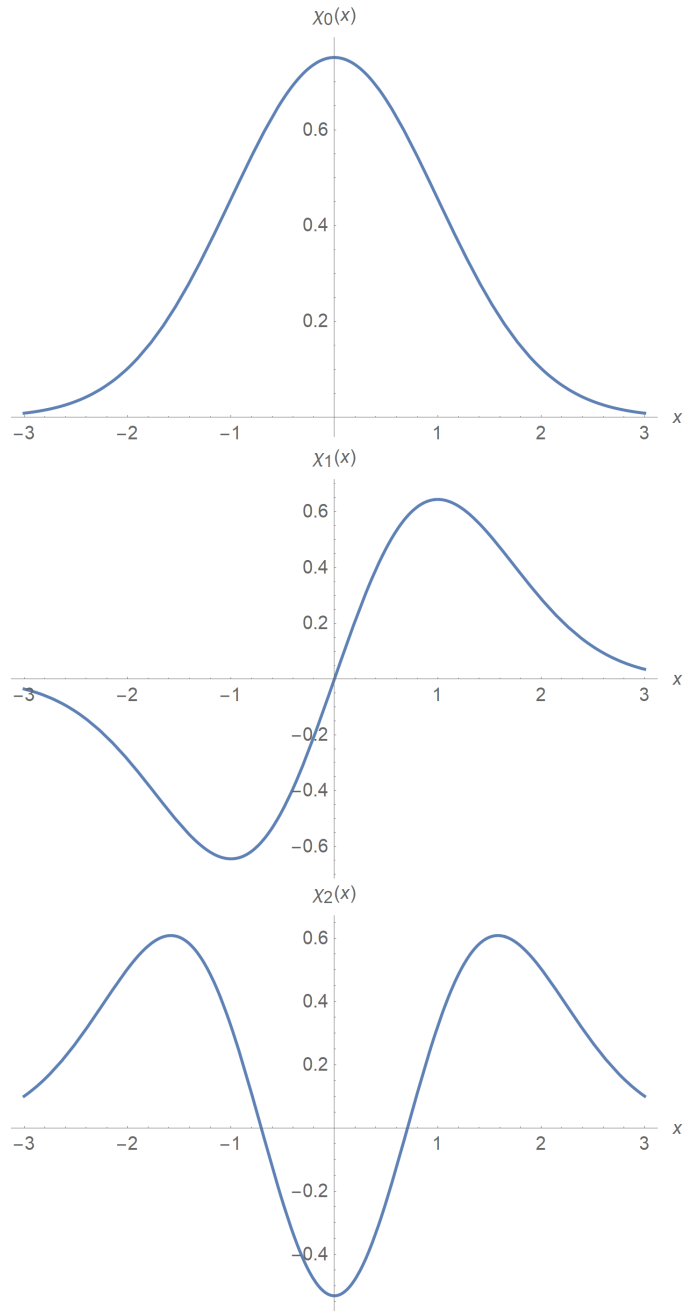
$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2\sqrt{\gamma}}{\pi}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \mathcal{H}_n(\sqrt{\gamma}x) e^{-\gamma x^2}. \quad (4.5)$$

Brownovská částice se pohybuje ve vnějším silovém poli

$$F(x) = -\nabla f(x) = -2\gamma D x.$$



Obrázek 4.1: Vlevo: Potenciálu kvantového harmonického oscilátoru $V(x)$ (4.2). Vpravo: Potenciál $f(x)$ (4.4), v němž probíhá difuze odpovídající harmonickému oscilátoru. Grafy jsou vykresleny pro volbu konstant $\frac{h}{2\pi} = m = \omega = D = \gamma = 1$.



Obrázek 4.2: První tři vlnové funkce $\chi_n(x)$ (4.3) ($n = 0,1,2$) kvantvého harmonického oscilátoru. Grafy jsou vykresleny pro volbu konstant $\frac{\hbar}{2\pi} = m = \omega = D = \gamma = 1$. Při této volbě konstant odpovídají grafy také vlastním funkcím $\phi_n(x)$ (4.5) Fokker-Planckova operátoru s potenciálem $f(x)$ (4.4).

4.2 Nekonečně hluboká potenciálová jáma

Částice se nachází v potenciálu $V(x)$ (Obrázek 4.3)

$$V(x) = \begin{cases} -V_0, & \text{pro } x \in (-a,a), \\ +\infty, & \text{jinde,} \end{cases} \quad (4.6)$$

kde $V_0 > 0$. Omezíme se pouze na vázané stavy, které mají spektrum [14]

$$E_n = \frac{\hbar^2}{32ma^2} n^2 + V_0 \quad \text{kde } n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.7)$$

Odpovídající vlnové funkce $\chi_n(x)$ (Obrázek 4.4) jsou dle (3.17) tvaru

$$\chi_n(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{\pi n}{2a}(x-a)\right) & \text{pro } x \in (-a, a), \\ 0 & \text{jinde.} \end{cases} \quad (4.8)$$

Zahrnutím časově závislé fáze do vlnové funkce $\chi_n(x)$ dostáváme

$$\psi_n(x, t) = \chi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar} 2\pi E_n t}. \quad (4.9)$$

K potenciálu $V(x)$ (4.6) je přidružený skrz vztah (3.16) potenciál $f(x)$ (Obrázek 4.3)

$$f(x) = -2D \log \left[\cos\left(\frac{\pi x}{2a}\right) \right], \quad (4.10)$$

kde D je difuzní konstanta definovaná vztahem

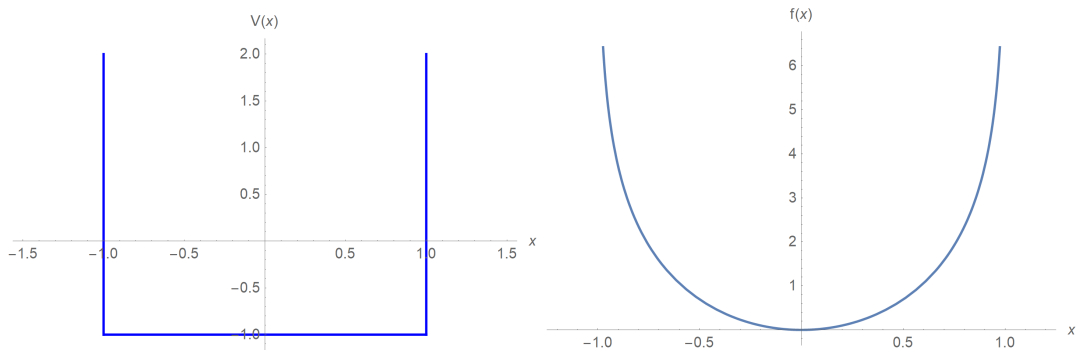
$$D = \frac{4aV_0}{\pi^2}.$$

Vlastní funkce Fokker-Planckova operátoru (3.7) $\phi_n(x)$ (Obrázek 4.5) odpovídající vlastnímu číslu $\lambda_n = 2\pi E_n/\hbar$ jsou dle vztahu (3.15) tvaru

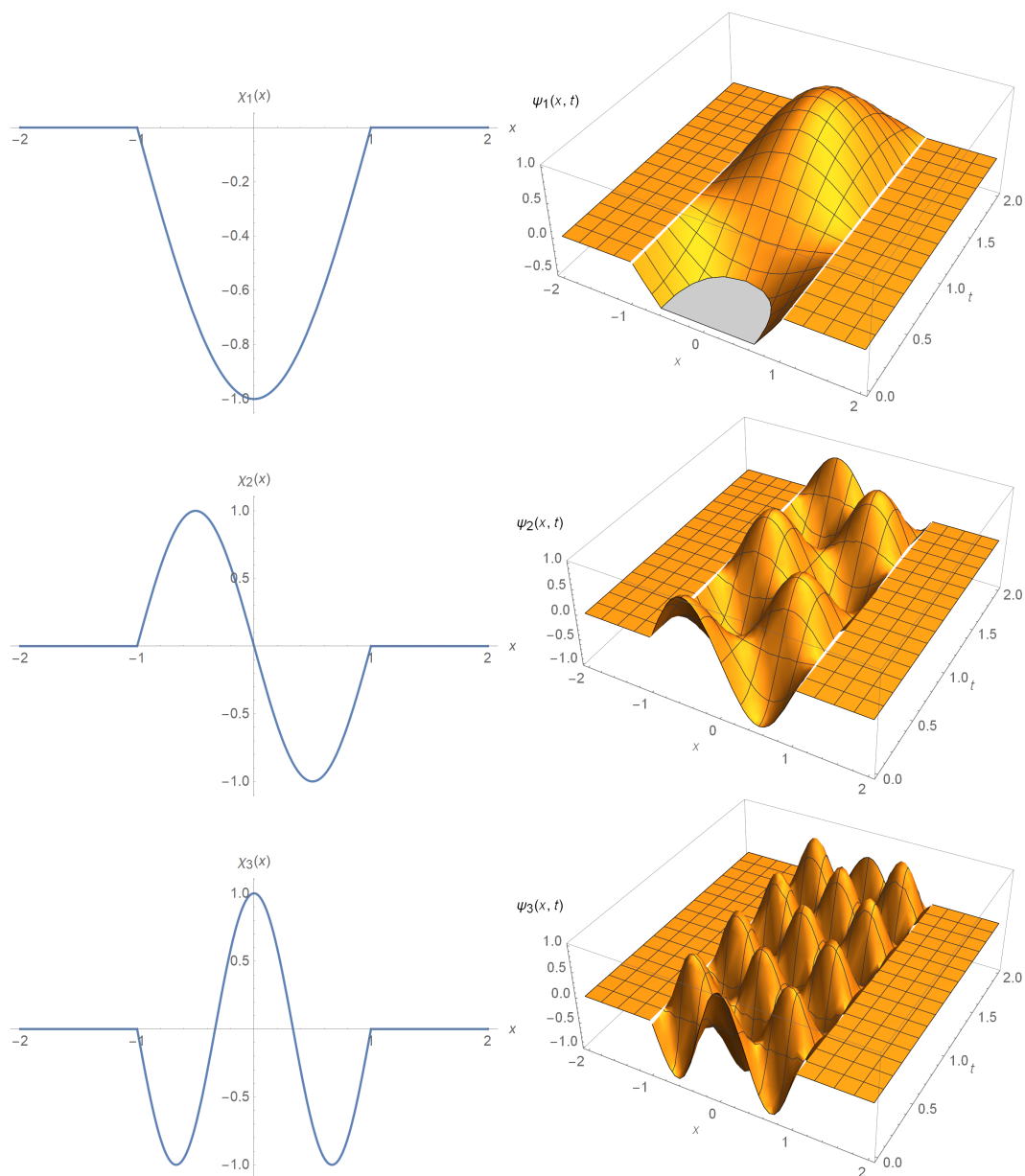
$$\phi_n(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{\pi n}{2a}(x-a)\right) \cos\left(\frac{\pi x}{2a}\right) & \text{pro } x \in (-a, a), \\ 0 & \text{jinde.} \end{cases} \quad (4.11)$$

Brownovská částice, jež se nachází v oblasti $x \in (-a, a)$, koná pohyb v prostředí s difuzním koeficientem D a silovém poli $F(x)$ daném vztahem

$$F(x) = -\nabla f(x) = \frac{\pi D}{a} \tan\left(\frac{\pi x}{2a}\right).$$



Obrázek 4.3: Vlevo: Nekonečně hluboká potenciálová jáma $V(x) = -V_0$ (4.6). Vpravo: Potenciál $f(x)$ (4.10), odpovídající dle vztahu (3.16) potenciálu (4.6). Grafy jsou vykresleny pro volbu konstant $\frac{\hbar}{2\pi} = m = V_0 = a = D = 1$.



Obrázek 4.4: Vlevo: První tři vlnové funkce $\chi_n(x)$ (4.8) ($n = 0, 1, 2$) v nekonečně hluboké potenciálové jámě. Vpravo: Reálná část odpovídajících vlnových funkcí $\psi_n(x, t)$ (4.9) pro časy $t \in (0, 2)$. Grafy jsou vykresleny pro volbu konstant $\frac{\hbar}{2\pi} = m = a = 1$.

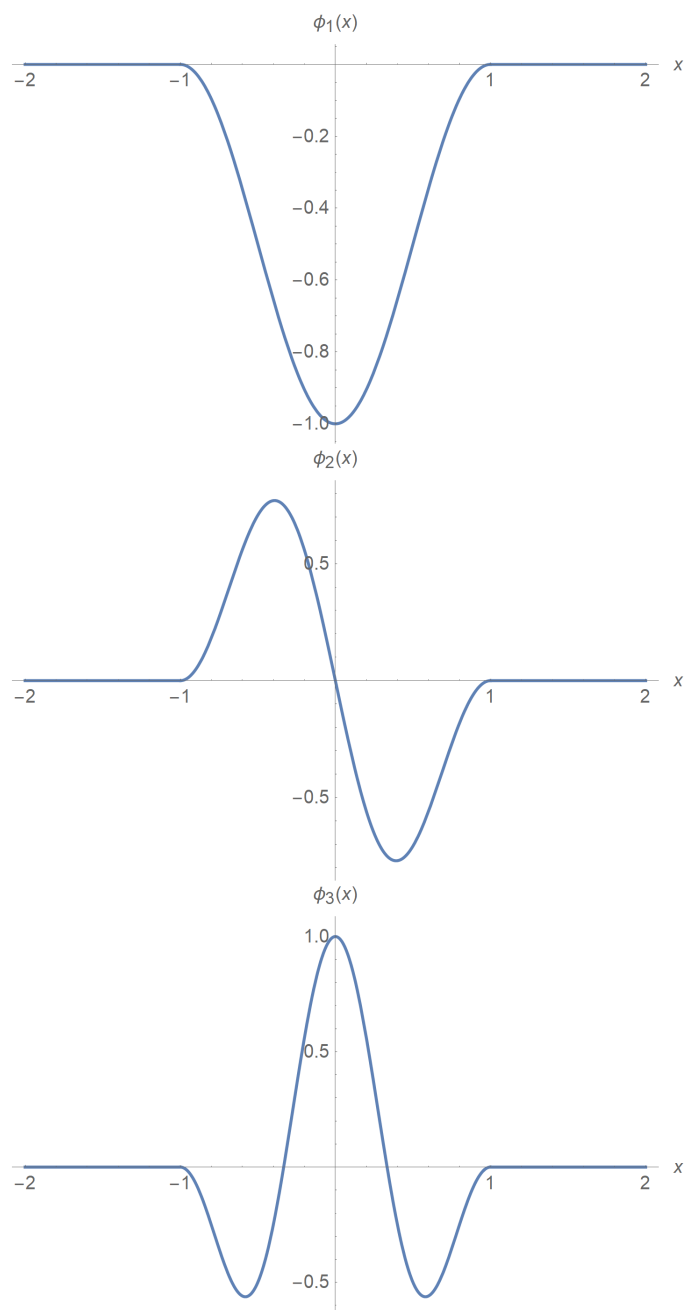
4.3 V-potenciál

Uvažujme nyní difuzní proces v prostředí popsaném difuzním koeficientem D probíhající v potenciálu $f(x)$ (Obrázek 4.6)

$$f(x) = Dk|x|, \quad (4.12)$$

kde $k > 0$ je konstanta určující sklon potenciálu. Potenciál $f(x)$ popisuje silové pole

$$F(x) = -\nabla f(x) = -Dk \operatorname{sgn} x$$



Obrázek 4.5: První tři vlastní funkce $\phi_n(x)$ (4.3) ($n = 1,2,3$) Fokker-Planckova operátoru s potenciálem $f(x)$ (4.10). Grafy jsou vykresleny pro volbu konstant $a = D = 1$.

směřující do počátku, kde má nespojitost.

Na základě vztahu (3.16) definujeme hmotnost

$$m = \frac{h^2}{8\pi^2 D}, \quad (4.13)$$

pak dle tohoto vztahu odpovídá $f(x)$ (4.12) potenciál $V(x)$ (Obrázek 4.6) pro tvaru

$$V(x) = \frac{k^2 h^2}{64\pi^2 m^2} - \frac{hk}{4\pi m} \delta(x), \quad (4.14)$$

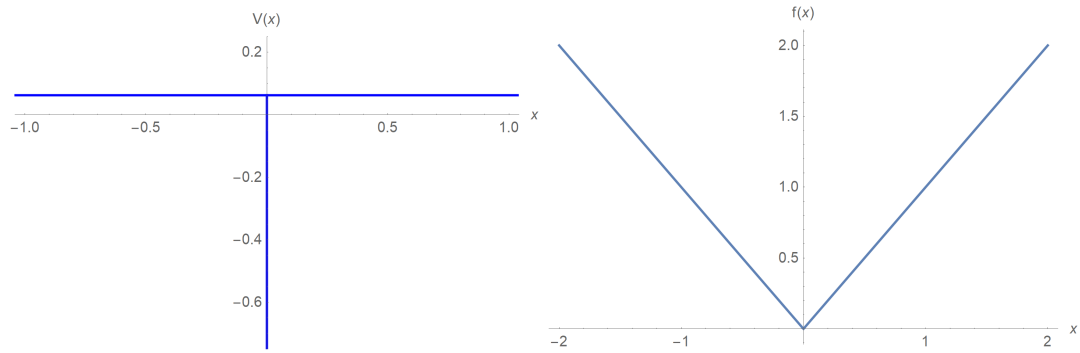
kde $\delta(x)$ značí Diracovu δ -funkci. Potenciál $V(x)$ (až na konstantu) popisuje nekonečně hlubokou a nekonečně úzkou potenciálovou jámu, jejíž objem je však konečný, jedná se o limitní případ konečně hluboké potenciálové jámy. Limitní přechod má za následek, že částice o hmotnosti m pohybující s v potenciálu $V(x)$ (4.14) nabývá pouze jediného vázaného stavu s energií [15]

$$E = -\frac{k^2}{8m} - \frac{k^2 h^2}{64\pi^2 m^2} \quad (4.15)$$

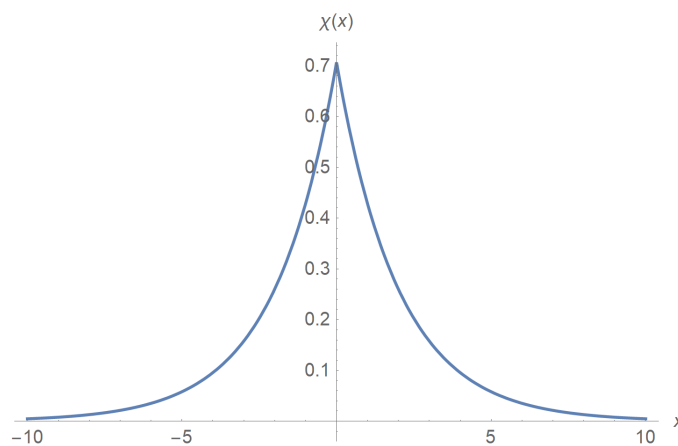
popsaného vlnovou funkcí (Obrázek 4.7)

$$\chi(x) = \sqrt{\frac{k}{2}} e^{-\frac{k|x|}{2}}, \quad (4.16)$$

kde E je energie daná vztahem (4.15).



Obrázek 4.6: Vlevo: Potenciál $V(x)$ (4.14) odpovídající dle vztahu (3.16) potenciálu $f(x)$ (4.12). Vpravo: Potenciál $f(x)$ (4.12), dle tvaru tzv. V-potenciálu. Grafy jsou vykresleny pro volbu konstant $\frac{h}{2\pi} = m = k = D = 1$.



Obrázek 4.7: Vlnová funkce $\chi(x)$ (4.16) odpovídající jedinému vázanému stavu potenciálu $V(x)$ (4.14). Graf je vykreslen pro volbu konstanty $k = 1$.

Závěr

V prvních dvou kapitolách byl vyložen nutný teoretický rámec pro formulaci vztahu mezi Schrödingerovou a difuzní rovnicí.

Na základě obecných úvah jsme vyvodili, že k nalezení vzájemně si odpovídajícího vztahu s obecnou komplexní vlnovou funkcí je nutné najít dva difuzní procesy.

Ve speciálním případě časově nezávislého Hamiltoniánu a absence magnetického pole postačuje jen jeden difuzní proces. To je důsledkem možnosti separace vlnové funkce na součin prostotově a časově závislé části a reálného Hamiltoniánu. V jedné dimezi byl nalezen vztah převádějící pohyb kvantové částice v potenciálu $V(x)$ na difuzní proces brownovské částice v potenciálu $f(x)$ [3]. Součástí přechodu je formální přiřazení

$$e^{-it} \leftrightarrow e^{-t}$$

převádějící vlnové chování vlnové funkce na relaxační proces odpovídající difuzi. Tento přístup byl demonstrován na trojici fundamentálních příkladů. Odpovídající si potenciály $V(x)$ a $f(x)$ byly graficky znázorněny.

Pro téměř obecný případ nestacionárního magnetického pole pouze s požadavkem konstantního difuzního koeficientu byla ukázána ekvivalence obou rovnic. Schrödingerově rovnici a jejímu komplexnímu sdružení (3.18) byly přiřazeny dvě difuzní rovnice (3.19) pro dvojici funkcí $\phi(\mathbf{x},t), \hat{\phi}(\mathbf{x},t)$, jež popisují difuzní proces pomocí p -reprezentace. Schrödingerova p -reprezentace, Kolmogorova q -reprezentace i obrácená \hat{q} -reprezentace jsou však vzájemně ekvivalentní. Druhé dvě jsou navzájem duální. Kolmogorova q -reprezentace popisuje běžný difuzní proces a \hat{q} -reprezentace stejný difuzní proces avšak v časově převráceném sledu. Jsou to právě ty dva hledané difuzní procesy. Schrödingerova p -reprezentace popisuje difuzní proces formálně probíhající zároveň oběma směry. V zcela obecném případě časově závislého difuzního koeficientu je ekvivalence dokázána v [4].

Ekvivalence byla demonstrována pro vlnové funkce $\psi(\mathbf{x},t), \bar{\psi}(\mathbf{x},t)$ a reálné funkce $\phi(\mathbf{x},t), \hat{\phi}(\mathbf{x},t)$, jež byly všechny parametrizovány reálnými funkcemi $R(\mathbf{x},t)$ a $S(\mathbf{x},t)$. Schrödingerova rovnice i pár difuzních rovnic v p -reprezentaci byly v této parametrizaci vyjádřeny. Z jejich porovnání byl nalezen vztah mezi potenciálem $V(\mathbf{x},t)$ v Schrödingerově rovnici a členem vzniku a zániku (*creation and killing*) $c(\mathbf{x},t)$ vystupujícím v difuzních rovnicích v p -reprezentaci. Tento vztah je však nelineární a závisí na parametrizující funkci $S(\mathbf{x},t)$. Ekvivalenci je možné formulovat symbolicky jako:

$$\left. \begin{array}{l} \psi(\mathbf{x},t) = e^{R(\mathbf{x},t)+iS(\mathbf{x},t)} \\ \bar{\psi}(\mathbf{x},t) = e^{R(\mathbf{x},t)-iS(\mathbf{x},t)} \end{array} \right\} \leftrightarrow [R(\mathbf{x},t), S(\mathbf{x},t)] \leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} \phi(\mathbf{x},t) = e^{R(\mathbf{x},t)+S(\mathbf{x},t)} \\ \hat{\phi}(\mathbf{x},t) = e^{R(\mathbf{x},t)-S(\mathbf{x},t)} \end{array} \right.$$

Vztah mezi vlnovými funkcemi $\psi(\mathbf{x},t), \bar{\psi}(\mathbf{x},t)$ a reálnými funkcemi $\phi(\mathbf{x},t), \hat{\phi}(\mathbf{x},t)$ popisujícími difuzi v p -reprezentaci je tedy založen na výše uvedeném formálním

přiřazení, neboli dosazení parametrizujících funkcí $R(\mathbf{x},t)$ a $S(\mathbf{x},t)$ do mustru odpovídajícího kvantové mechanice vlevo či difuzní teorii vpravo.

Nyní se můžeme pokusit odpovědět na Schrödingerovu doměňku [1]. Je na subjektivním posudku, zda předložená ekvivalence difuzních rovnic a Schrödingerovy rovnice umožňuje lepší pochopení kvantové mechaniky. Ekvivalence však znamená, že nerelativistická kvantová mechanika je difuzní teorie, jež obsahuje v jádru Schrödingerovu rovnici jako rovnici vzhledem k časovému obrácení [4]. Toto zjištění umožňuje novou interpretaci pohybu kvantové částice coby difuzního procesu.

Seznam použité literatury

- [1] E. Schrödinger. Über die umkehrung der naturgesetze. *Sitzungsberichte der Preussischen Akad. der Wissenschaften Berlin, Physicalisch Mathematische Klasse*, 81:144–153, 1931.
- [2] E. Nelson. *Dynamical Theories of Brownian Motion*. Druhé vydání. Princeton University Press, 2001. [online]. [cit. 2018-7-11]. Dostupné z: http://physics.mff.cuni.cz/vyuka/zfp/_media/zadani/texty/txt_305.pdf.
- [3] H. Risken. *The Fokker-Planck equation*. Druhé opravené vydání. Springer-Verlag, 1989. ISBN: 0-387-13098-5.
- [4] M. Nagsawa. *Schrödinger equations and diffusion theory*. Dotisk prvního vydání. Springer Basel AG, 1993. ISBN: 978-3-0348-9684-9.
- [5] P. Cejnar. *A Condensed Course of Quantum Mechanics*. Druhé vydání. Karolinum, Praha, 2018. ISBN: 9788024623214.
- [6] J. J. Sakurai. *Modern Quantum Mechanics*. Přepřacované vydání. Addison-Wasley Publishing Company, 1994. ISBN: 0-201-53929-2.
- [7] E. Schrödinger. Quantisierung als eigenwertproblem (4. mitteilung). *Ann. der Physik*, 81:109–139, 1926.
- [8] L. A. Galin. *Contact Problems*, chapter 2, pages 11–32. První vydání. Springer Netherlands, 2008. ISBN: 978-1-4020-9043-1.
- [9] J. B. Fourier. *Theorie analytique de la chaleur*. Didot Paris, 1822.
- [10] J. R. Cannon. *The One-Dimensional Heat Equation*. Druhé opravené vydání. Cambridge University Press, 1984. ISBN: 978-0-521-30243-2.
- [11] A. Fick. Ueber diffusion. *Pogg. Ann. Phys. Chem.* 170, 170(1):59–86, 1855.
- [12] H. P. McKean. A class of markov processes associated with non-linear parabolic equations. *Proc. Natl. Acad. Sci.*, 56:1907–1911, 1966.
- [13] Y. M. Ali and L. C. Zhang. Relativistic heat conduction. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 48(12):2397–2406, 2005.
- [14] J. Zamastil and J. Benda. *Kvantová mechanika a elektrodynamika*. První vydání. Karolinum, 2016. ISBN: 9788024632230.
- [15] J. Pišút, V. Černý, and V. Prešnajder. *Zbierka úloh z kvantovej mechaniky*. První vydání. Alfa, 1985.

A. Markovův proces

Pomocí náhodných veličin popisujeme procesy, kdy nemáme dostatek informací o systému pro jejich přesné stanovení, nebo se veličina mění tak rychle a deretministicky chaoticky, že její okamžitá hodnota není směrodatná. Lze hovořit o pravděpodobnosti, s jakou nabývá dané hodnoty, a její chování zkoumat. Mějme náhodnou proměnnou ξ . Zvolíme-li $x \in \mathbb{R}$, poté pravděpodobnost, že hodnota náhodné proměnné ξ bude menší, nebo rovna x , značíme $P(\xi \leq x)$. Z vlastností skokové funkce $\theta(x)$ plyne

$$P(\xi \leq x) = \langle \theta(x - \xi) \rangle,$$

kde $\langle \cdot \rangle$ značí střední hodnotu.

Hustotu pravděpodobnosti, tj. pravděpodobnost nalezení hodnoty ξ v intervalu $(x, x+dx)$ podělenou délkou intervalu označíme $W_\xi(x)$. Hustota pravděpodobnosti je derivací $P(\xi \leq x)$ podle x tedy

$$W_\xi(x) = \frac{d}{dx} P(\xi \leq x) = \frac{d}{dx} \langle \theta(x - \xi) \rangle = \langle \delta(x - \xi) \rangle,$$

kde δ značí Diracovu delta funkci. Pomocí hustoty pravděpodobnosti je možné spočítat n -tý moment M_n náhodné proměnné ξ jako

$$M_n = \langle \xi^n \rangle = \int x^n W_\xi(x) dx.$$

První moment je označován jako střední hodnota $\mu = M_1$. Dále tzv. n -tý centrální moment je definována jako $K_n = \langle (\xi - \mu)^n \rangle$. Druhý centrální moment je označován coby variance $\sigma^2 = K_2$.

Uvažujme d náhodných proměnných ξ_1, \dots, ξ_d . Zavedeme analogicky d -dimenzionální hustotu pravděpodobnosti

$$W_{\xi_1, \dots, \xi_d}(x_1, \dots, x_d) = W_d(x_1, \dots, x_d) = \langle \delta(x_1 - \xi_1) \dots \delta(x_d - \xi_d) \rangle,$$

dolní index s výčtem náhodných proměnných je dále nahrazen jejich počtem d . Smíšené momenty jsou dány jako

$$M_{n_1, \dots, n_r} = \langle \xi_1^{n_1} \dots \xi_r^{n_r} \rangle. \quad (\text{A.1})$$

Hustotu podmíněné pravděpodobnosti, tj. hustotu pravděpodobnosti nalezení hodnoty ξ_1 v intervalu (x_1, x_1+dx_1) podělenou délkou intervalu za předpokladu $\xi_2 = x_2$ až $\xi_d = x_d$ označíme $P(x_1|x_2, \dots, x_d)$. Zřejmě platí

$$W_d(x_1, \dots, x_d) = P(x_1|x_2, \dots, x_d)W_{d-1}(x_2, \dots, x_d),$$

odkud dostáváme

$$P(x_1|x_2, \dots, x_d) = \frac{W_d(x_1, \dots, x_d)}{W_{d-1}(x_2, \dots, x_d)} = \frac{W_d(x_1, \dots, x_d)}{\int W_d(x_1, \dots, x_d) dx_1}. \quad (\text{A.2})$$

Druhá rovnost plyne z postupné integrace normalizační podmínky

$$1 = \int \dots \int W_d(x_1, \dots, x_d) dx_1 \dots dx_d = \int \dots \int W_{d-1}(x_2, \dots, x_d) dx_2 \dots dx_d.$$

Uvažujme nyní časově závislou náhodnou proměnnou $\xi(t)$, která nabývá v čase $t = t_i$ náhodné hodnoty $\xi(t_i)$. Proces popsaný veličinou $\xi(t)$ nazýváme stochastický. Pravděpodobnost nalezení v čase t_1 hodnoty $\xi(t_1) \in (x_1, x_1 + dx_1)$, v čase t_2 hodnoty $\xi(t_2) \in (x_2, x_2 + dx_2)$ až v čase t_n hodnoty $\xi(t_n) \in (x_n, x_n + dx_n)$ označíme

$$W_n(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1) dx_1 \dots dx_n,$$

kde hustota pravděpodobnosti W_n je dána

$$W_n(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1) = \langle \delta(x_1 - \xi_1(t)) \dots \delta(x_n - \xi_n(t)) \rangle. \quad (\text{A.3})$$

Stochastický proces $\xi(t)$ na intervalu $t \in (t_0, t_0 + T)$ je zcela popsán hustotami pravděpodobnosti

$$W_1(x_1, t_1), W_2(x_2, t_2; x_1, t_1), \dots, W_i(x_i, t_i; \dots; x_1, t_1), \dots \quad (\text{A.4})$$

pro libovolné $t_i \in (t_0, t_0 + T)$.

Analogicky k (A.2) formulujeme hustotu podmíněné pravděpodobnosti

$$P(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_1, t_1)$$

jako hustotu pravděpodobnosti nalezení v čase t_n hodnoty $\xi(t_n) \in (x_n, x_n + dx_n)$ za předpokladu, že v časech t_1 až t_{n-1} se nabývá $\xi(t)$ hodnoty $\xi(t_1) = x_1$ až $\xi(t_{n-1}) = x_{n-1}$. Odtud pomocí (A.2) dostáváme

$$W_n(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1) = P(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_1, t_1) W_{n-1}(x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_1, t_1) \quad (\text{A.5})$$

a

$$P(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_1, t_1) = \frac{W_n(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1)}{\int W_n(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1) dx_n}. \quad (\text{A.6})$$

Na základě chování hustoty podmíněné pravděpodobnosti se stochastické procesy klasifikují následovně:

Zcela náhodný proces je stochastický proces, při němž hustota podmíněné pravděpodobnosti nezávisí na hodnotě náhodné proměnné v předešlých časech

$$P(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_1, t_1) = P(x_n, t_n).$$

Postupnou aplikací (A.5) dostáváme

$$W_n(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1) = P(x_n, t_n) \dots P(x_1, t_1),$$

z čehož lze vidět (připomeňme, že $P(x_1, t_1) = W_1(x_1, t_1)$), že veškerá dostupná informace o procesu je obsažena v $W_1(x_1, t_1)$.

Markovův proces je takový stochastický proces, při kterém hustota podmíněné pravděpodobnosti v čase t_n závisí pouze na hodnotě náhodné proměnné $\xi(t_{n-1}) = x_{n-1}$ v čase t_{n-1}

$$P(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_1, t_1) = P(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}).$$

Cyklickým dosazením do (A.5) získáme

$$W_n(x_n, t_n; \dots; x_1, t_1) = P(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}) \dots P(x_2, t_2 | x_1, t_1) W_1(x_1, t_1). \quad (\text{A.7})$$

Hustota podmíněné pravděpodobnosti pro Markovův proces $P(x_i, t_i | x_{i-1}, t_{i-1})$ se nazývá hustota pravděpodobnosti přechodu, což je inspirováno vztahem (A.7). Kompletní informace je v případě Markovových procesů uložena v $W_2(x_2, t_2 | x_1, t_1)$ namísto popisu nekonečnou řadou (A.4), což spolu s (A.8) dává

$$P(x_2, t_2 | x_1, t_1) = \frac{W_2(x_2, t_2; x_1, t_1)}{\int W_2(x_2, t_2; x_1, t_1) dx_2}. \quad (\text{A.8})$$

Pro Markovovy procesy dostáváme z rovnosti

$$\begin{aligned} P(x_3, t_3 | x_1, t_1) W_1(x_1, t_1) &= W_2(x_3, t_3; x_1, t_1) = \\ &= \int W_3(x_3, t_3; x_2, t_2; x_1, t_1) dx_2 = \int P(x_3, t_3 | x_2, t_2) P(x_2, t_2 | x_1, t_1) W_1(x_1, t_1) dx_2 \end{aligned}$$

tzv. Chapman-Kolmogorovu rovnici

$$P(x_3, t_3 | x_1, t_1) = \int P(x_3, t_3 | x_2, t_2) P(x_2, t_2 | x_1, t_1) dx_2. \quad (\text{A.9})$$

Obecný proces pokrývá zbývající případy. Hustota podmíněné pravděpodobnosti může záviset na libovolném počtu předchozích hodnot.

V případě zcela náhodného procesu je trajektorie $\xi(t)$ nespojitá. Takovýmto procesem je kupříkladu úhlová detekce vylétajících α částic ze vzorku, kde $\xi(t)$ značí úhel, pod nímž částice vylétá.

Markovův proces odpovídá spojitě trajektorii $\xi(t)$, neboť následující hodnota $\xi(t_2) = x_2$ v čase t_2 je blízko hodnoty předešlé $(t_1) = x_1$ v čase t_1 . Pro $t_2 - t_1 \rightarrow 0$ dostáváme $P(x_2, t_2 | x_1, t_1) \rightarrow \delta(x_2 - x_1)$. Pro odlehlejší časy, kdy $t_2 - t_1 \gg 1$, klesá závislost $P(x_2, t_2 | x_1, t_1)$ na x_1 . Markovův proces je dobrým modelem např. pro Brownův pohyb, kdy $\xi(t)$ hraje roli polohy částice. Brownovská částice si "pamatuje" svou polohu a její trajektorie je spojitá.

Zobecnění na d náhodných proměnných $\xi_1(t)$ až ξ_d je přímočaré. Ve vztazích (A.3) až (A.9) nahradíme náhodnou proměnnou $\xi(t)$ náhodným vektorem $\boldsymbol{\xi}(t) \equiv (\xi_1(t), \dots, \xi_d)$, jednodimenzionální integraci příslušnou d -dimenzionální a hodnotu x_1 , jíž se nabývá, vektorem $\boldsymbol{x}_1 \equiv (x_1^1, \dots, x_1^d)$. Kupříkladu Chapman-Kolmogorova rovnice lze pak napsat ve tvaru

$$P(\boldsymbol{x}_3, t_3 | \boldsymbol{x}_1, t_1) = \int \dots \int P(\boldsymbol{x}_3, t_3 | \boldsymbol{x}_2, t_2) P(\boldsymbol{x}_2, t_2 | \boldsymbol{x}_1, t_1) dx_2^1 \dots dx_2^d. \quad (\text{A.10})$$

B. Langevinova síla

Pravděpodobnostní charakter Langevinovy síly je následující [3]. Langevinova síla $\mathbf{\Gamma}(t)$ je časově závislá náhodná proměnná. V libovolném čase má nulovou střední hodnotu

$$\langle \Gamma_i(t) \rangle = 0,$$

kde $\Gamma_i(t)$ značí i -tou složku $\mathbf{\Gamma}(t)$.

Dále je δ -korelovaná, což znamená, že pro $\mathbf{\Gamma}$ ve dvou časech t a t' platí

$$\langle \Gamma_i(t) \Gamma_j(t') \rangle = 2\delta_{ij}\delta(t - t'),$$

kde δ_{ij} značí Kroneckerovo delta a $\delta(t - t')$ značí δ -funkci.

Langevinova síla je gaussovsky rozdělená, tedy pokud pro libovolný čas t označíme $\Gamma(t)_i = \xi$, pak náhodná veličina ξ má vzhledem k předchozím vlastnostem rozdělení $W_\xi(x)$ tvaru

$$W_\xi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}}$$

s nulovou střední hodnotou.

C. Odvození Fokker-Planckovy rovnice

V tomto dodatku je demonstrován způsob odvození Fokker-Planckovy rovnice způsobem uvedeným v [3].

Stochastický proces popíšeme pomocí časového vývoje jeho rozložení hustoty pravděpodobnosti. Markovův proces je plně určen ze znalosti počátečního rozložení hustoty pravděpodobnosti $W(\mathbf{x}',t)$ a hustoty pravděpodobnosti přechodu $P(\mathbf{x},t+\tau|\mathbf{x}',t)$. Pro rozložení hustoty pravděpodobnosti v libovolném čase $t+\tau$ dostáváme

$$W(\mathbf{x},t+\tau) = \int P(\mathbf{x},t+\tau|\mathbf{x}',t)W(\mathbf{x}',t) d^d\mathbf{x}'. \quad (\text{C.1})$$

Pro vyjádření časového vývoje, tedy $\partial W/\partial t$ je nutná znalost $W(\mathbf{x},t)$ a $W(\mathbf{x}',t+\tau)$. Ve výrazu

$$P(\mathbf{x},t+\tau|\mathbf{x}',t) = \int \delta(\mathbf{y} - \mathbf{x})P(\mathbf{y},t+\tau|\mathbf{x}',t) d^d\mathbf{y}$$

rozvineme do Taylorovy řady v $\mathbf{y} = \mathbf{x}'$ δ -funkci dle předpisu

$$\begin{aligned} \delta(\mathbf{y} - \mathbf{x}) &= \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x} + \mathbf{y} - \mathbf{x}') \\ &= \sum_{i=1}^d \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (y_{i_1} - x'_{i_1}) \dots (y_{i_n} - x'_{i_n}) \frac{\partial^n}{\partial x'_{i_1} \dots \partial x'_{i_n}} \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) \\ &= \sum_{i=1}^d \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{(-\partial)^n}{\partial x_{i_1} \dots \partial x_{i_n}} (y_{i_1} - x'_{i_1}) \dots (y_{i_n} - x'_{i_n}) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \end{aligned}$$

Ve smyslu (A.1) spočteme integrací $P(\mathbf{y},t+\tau|\mathbf{x}',t)$ přes \mathbf{y} pro $n \geq 1$ n -tý smíšený moment $M_{i_1 \dots i_n}^n(\mathbf{x}',t,\tau)$ jako

$$M_{i_1 \dots i_n}^n(\mathbf{x}',t,\tau) = \int (y_{i_1} - x'_{i_1}) \dots (y_{i_n} - x'_{i_n}) P(\mathbf{y},t+\tau|\mathbf{x}',t) d^d\mathbf{y}.$$

Provedeme rozvoj $M_{i_1 \dots i_n}^n(\mathbf{x}',t,\tau)/n!$ pro malé τ , kde D^n označuje funkci v prvním řádu rozvoje,

$$\frac{1}{n!} M_{i_1 \dots i_n}^n(\mathbf{x}',t,\tau) = D_{i_1 \dots i_n}^n(\mathbf{x}',t) \tau + \mathcal{O}(\tau^2).$$

Celkově dostáváme

$$P(\mathbf{x},t+\tau|\mathbf{x}',t) = \left[1 + \sum_{i=1}^d \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-\partial)^n}{\partial x_{i_1} \dots \partial x_{i_n}} \left(D_{i_1 \dots i_n}^n(\mathbf{x},t) \tau + \mathcal{O}(\tau^2) \right) \right] \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (\text{C.2})$$

Dosazením (C.2) do (C.1), integrací a uspořádáním dostáváme v limitě $\tau \rightarrow 0$ dostáváme dopředný Kramers-Moyalův rozvoj v dimenzi d

$$\frac{\partial W(\mathbf{x},t)}{\partial t} = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{W(\mathbf{x},t+\tau) - W(\mathbf{x},t)}{\tau} = \sum_{i=1}^d \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-\partial)^n}{\partial x_{i_1} \dots \partial x_{i_n}} \left(D_{i_1 \dots i_n}^n W(\mathbf{x},t) \right). \quad (\text{C.3})$$

s počáteční rozdělením hustoty pravděpodobnosti

$$W(\mathbf{x}',t') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = P(\mathbf{x},t'|\mathbf{x}',t'). \quad (\text{C.4})$$

Počáteční podmínka (C.4) nám dovoluje rovnici (C.5) zapsat jako

$$\frac{\partial P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}', t')}{\partial t} = \sum_{i=1}^d \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-\partial)^n}{\partial x_{i_1} \dots \partial x_{i_n}} \left(D_{i_1 \dots i_n}^n(\mathbf{x}, t) P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}', t') \right), \quad (\text{C.5})$$

tedy jako rovnici popisující časový vývoj hustoty pravděpodobnosti přechodu.

Analogicky však můžeme vyjít z Chapman-Kolmogorovy rovnice

$$P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}', t') = \int P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}'', t' + \tau) P(\mathbf{x}'', t' + \tau | \mathbf{x}', t') d^d \mathbf{x}'', \quad (\text{C.6})$$

zopakujeme-li postup výše pro

$$P(\mathbf{x}'', t' + \tau | \mathbf{x}', t') = \int \delta(\mathbf{y} - \mathbf{x}'') P(\mathbf{y}, t' + \tau | \mathbf{x}', t') d^d \mathbf{y},$$

dostáváme

$$P(\mathbf{x}'', t' + \tau | \mathbf{x}', t') = \left[1 + \sum_{i=1}^d \sum_{n=1}^{\infty} \left(D_{i_1 \dots i_n}^n(\mathbf{x}', t) \tau + \mathcal{O}(\tau^2) \right) \frac{\partial^n}{\partial x'_{i_1} \dots \partial x'_{i_n}} \right] \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}''). \quad (\text{C.7})$$

Dosazením (C.7) do (C.6) a provedením stejných úprav jako výše získáme rovnici pro hustotu pravděpodobnosti přechodu $P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}', t')$

$$\frac{\partial P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}', t')}{\partial t} = - \sum_{i=1}^d \sum_{n=1}^{\infty} D_{i_1 \dots i_n}^n(\mathbf{x}', t') \frac{\partial^n}{\partial x'_{i_1} \dots \partial x'_{i_n}} (P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}', t')) \quad (\text{C.8})$$

s počáteční hustotou přechodu pravděpodobnosti

$$P(\mathbf{x}, t' | \mathbf{x}', t') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'),$$

tzv. zpětný Kramers-Moyalův rozvoj.

Označíme-li jako L_{KM} a L_{KM}^+ lineární diferenciální operátory vystupující v dopředném (C.5) a zpětném (C.8) Kramers-Moyalově rozvoji na pravé straně

$$\begin{aligned} L_{KM}(\mathbf{x}, t) &= \sum_{i=1}^d \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-\partial)^n}{\partial x'_{i_1} \dots \partial x'_{i_n}} D_{i_1 \dots i_n}^n, \\ L_{KM}^+(\mathbf{x}, t) &= \sum_{i=1}^d \sum_{n=1}^{\infty} D_{i_1 \dots i_n}^n \frac{\partial^n}{\partial x'_{i_1} \dots \partial x'_{i_n}}, \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

pak kříž nad druhým operátorem značí, že se jedná o adjungované operátory, což je ukázáno v [3].

Lze ukázat [3], že v případě difuzního procesu s δ -korelovanou Gaussovsky rozdělenou Langevinovou silou $\Gamma(t)$ (viz dodatek B) všechny koeficienty $D_{i_1 \dots i_n}^n = 0$ pro $n \leq 3$ vymizí. Kramers-Moyalův rozvoj (C.5) pak skončí druhým členem a dostáváme

$$\frac{\partial P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}', t')}{\partial t} = \left[\sum_{i=1}^d -\frac{\partial}{\partial x_i} D_i^1(\mathbf{x}, t) + \sum_{i,j=1}^d \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} D_{ij}^2(\mathbf{x}, t) \right] P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}', t'),$$

tzv. Fokker-Planckovu rovnici. Koeficient vektorové povahy D_i^1 nazýváme driftový vektor a koeficient tenzorové povahy D_{ij}^2 nazýváme difuzní matice.

D. Transformace Fokker-Planckovy rovnice v jedné dimenzi

Omezme se na jednu dimenzi a uvažujme časově nezávislý drift $D^{(1)}(x)$ a difuzní koeficient $D^{(2)}(x)$. Obecná Fokker-Planckova rovnice (2.9) pro hustotu pravděpodobnosti $W(x,t)$ přejde do tvaru

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

Přejdeme k $y = y(x)$ tak, aby byl difuzní koeficient konstantní $D^{(2)}(y) = D = \text{konst.}$, což v jedné dimenzi můžeme vždy udělat. Koeficienty a hustota pravděpodobnosti se transformují dle vztahů

$$\begin{aligned} D^{(2)}(y) &= D = \left(\frac{dy}{dx} \right)^2 D^{(2)}(x), \\ D^{(1)}(y) &= \frac{dy}{dx} D^{(1)}(x) + \frac{d^2 y}{dx^2} D^{(2)}(x), \\ W' &= \left(\frac{dy}{dx} \right)^{-1} W. \end{aligned} \quad (\text{D.2})$$

První rovnice slouží jako předpis pro zvolenou transformaci

$$y(x) = \int_{x_0}^x \sqrt{\frac{D}{D^{(2)}(x')}} dx', \quad (\text{D.3})$$

jejímž dosazením spolu s (D.2) do (D.1) dostáváme transformovanou Fokker-Planckovu rovnici

$$\frac{\partial W'(y,t)}{\partial t} = \left[-\frac{\partial}{\partial y} D^{(1)}(y) + D \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right] W'(y,t) \quad (\text{D.4})$$

s konstantním difuzním koeficientem D .