Узагальнене оптимальне керування

Гуляницький А. Л.*

15 жовтня – 5 листопада 2019 р.

Зміст

2 Моделі аномальної дифузії

2.0.1 Основні поняття

Нагадаємо, що класичні рівняння дифузії та теплопровідності зумовлені наступними чинниками:

1. закон збереження кількості речовини/тепла;
2. джерела і стоки;
3. "закон" Фіка/Фур'є — емпірично встановлене для широкого класу процесів твердження про те, що інтенсивність потоку речовини/тепла пропорційна мінус градієнту концентрації речовини/кількості тепла на границі.

Розглянемо тепер інший підхід, який грунтується на випадкових блуканнях з неперервним часом (*eng.* CTRW, continuous time random walk). А саме, нехай $x(t)$ — випадкова величина (координата частинки в момент часу t), а $u(x,t)$ (при фіксованому t — щільність координати частинки).

Параметри моделі:

1. $u_0(x)$ — щільність початкового (при $t = 0$) розподілу;
2. $\psi(t)$ — щільність часу очікування наступного стрибка;
3. $\lambda(x)$ — щільність зміщення.

*Гуляницький Андрій Леонідович, andriy.hul@gmail.com

Означення 2.0.1. Нехай $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, тоді її *перетворенням Фур'є* називається

$$\mathscr{F}\left[f\right](\omega) = \tilde{f}(\omega) = \int_{\mathbb{R}} e^{i\omega t} f(x)\,\mathrm{d}x. \tag{2.0.1}$$

Твердження 2.0.2

Для перетворення Фур'є справедлива теорема згортки:

$$\mathscr{F}\left[f \star g\right](\omega) = \mathscr{F}\left[f\right](\omega) \cdot \mathscr{F}\left[f\right](\omega), \tag{2.0.2}$$

де

$$(f \star g)(x) = \int_{\mathbb{R}} f(y) g(x-y)\,\mathrm{d}y. \tag{2.0.3}$$

Означення 2.0.3. Нехай $u(x,t) : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, тоді її *перетворенням Фур'є-Лапласа* називається

$$\mathscr{F}\text{-}\mathscr{L}\left[u\right](\omega,\eta) = \tilde{\tilde{u}}(\omega,\eta) = \int_0^{+\infty} \int_{\mathbb{R}} e^{-\eta t + i\omega x} u(x,t)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}t. \tag{2.0.4}$$

2.0.2 Формула Монтрола-Вайса

Формула 2.0.4 (Монтрола-Вайса)

$$\mathscr{F}\text{-}\mathscr{L}\left[u\right](\omega,\eta) = \frac{\mathscr{F}\left[u_0\right](\omega)}{\eta} \frac{1 - \mathscr{L}\left[\psi\right](\eta)}{1 - \mathscr{L}\left[\psi\right](\eta) \cdot \mathscr{F}\left[\lambda\right](\omega)}, \tag{2.0.5}$$

як тільки

$$\left|\mathscr{L}\left[\psi\right](\eta) \cdot \mathscr{F}\left[\lambda\right](\omega)\right| < 1. \tag{2.0.6}$$

Доведення. Введемо додаткове позначення: $n(t)$ — кількість стрибків до моменту t. $\psi_k(t)$ — щільність часу k-го стрибка. І нарешті, $\lambda_k(x)$ — щільність координати після k-го стрибка.

Запишемо формулу повної ймовірності:

$$\begin{aligned} u(x,t) &= \sum_{k=0}^{\infty} \mathsf{P}\{n(t) = k\} \lambda_k(x) = \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} (\mathsf{P}\{n(t) \geqslant k\} - \mathsf{P}\{n(t) \geqslant k+1\}) \lambda_k(x) = \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \left(\int_0^t \psi_k(s)\,\mathrm{d}s - \int_0^t \psi_{k+1}(s)\,\mathrm{d}s \right) \lambda_k(x) = \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \left(\int_0^t \psi^{\star k}(s)\,\mathrm{d}s - \int_0^t \psi^{\star(k+1)}(s)\,\mathrm{d}s \right) \cdot (u_0 \star \lambda^{\star k})(x). \end{aligned} \tag{2.0.7}$$

Зауваження 2.0.5 — Тут ми скористалися тим, що

$$\psi_k \equiv \psi^{\star k} \equiv \underbrace{\psi \star \psi \star \ldots \star \psi}_{k} \tag{2.0.8}$$

і

$$\lambda_k \equiv u_0 \star \lambda^{\star k} \equiv u_0 \star \underbrace{\lambda \star \lambda \star \ldots \star \lambda}_{k}. \tag{2.0.9}$$

Доведення. Справді, аби здійснити k-ий стрибок у момент часу T необхідно зробити $k-1$ стрибок до моменту часу t, після чого зачекати час $T-t$. Вже видно, звідки береться згортка у першій формулі, лишається просто формально застосувати математичну індукцію по k.

Справді, потрапити у точку y після k стрибків можна з довільної точки x у якій ми опинилися після $(k-1)$-го стрибка, причому ймовірність цього $\lambda(y-x)$. Вже видно, звідки береться згортка у другій формулі, лишається просто формально застосувати математичну індукцію по k. □

Враховуючи, що

- $\mathscr{L}\left[I_0^1 f\right](\eta) = \frac{1}{\eta}\mathscr{L}\left[f\right](\eta)$;
- $\mathscr{L}\left[\psi^{\star k}\right](\eta) = (\mathscr{L}\left[\psi\right](\eta))^k$;
- $\mathscr{F}\left[\lambda^{\star k}\right](\omega) = (\mathscr{F}\left[\lambda\right](\omega))^k$;

маємо

$$\begin{aligned}\mathscr{F}\text{-}\mathscr{L}\left[u\right](\omega,\eta) &= \sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{\eta}((\mathscr{L}\left[\psi\right](\eta))^k - (\mathscr{L}\left[\psi\right](\eta))^{k+1})\cdot\mathscr{F}\left[u_0\right](\omega)\cdot(\mathscr{F}\left[\lambda\right](\omega))^k = \\ &= \frac{\mathscr{F}\left[u_0\right](\omega)\cdot(1-\mathscr{L}\left[\psi\right](\eta))}{\eta}\sum_{k=0}^{\infty}(\mathscr{L}\left[\psi\right](\eta))^k\cdot(\mathscr{F}\left[\lambda\right](\omega))^k = \\ &= \frac{\mathscr{F}\left[u_0\right](\omega)\cdot(1-\mathscr{L}\left[\psi\right](\eta))}{\eta(1-\mathscr{L}\left[\psi\right](\eta)\cdot\mathscr{F}\left[\lambda\right](\omega)},\end{aligned} \tag{2.0.10}$$

де останній перехід — формула для суми нескінченної геометричної прогресії.

Зауваження 2.0.6 — Рівності

$$\mathscr{L}\left[\psi^{\star k}\right](\eta) = (\mathscr{L}\left[\psi\right](\eta))^k \tag{2.0.11}$$

і

$$\mathscr{F}\left[\lambda^{\star k}\right](\omega) = (\mathscr{F}\left[\lambda\right](\omega))^k \tag{2.0.12}$$

— безпосередній наслідок теореми згортки для перетворень Лапласа та Фур'є відповідно, а також застосування методу математичної індукції по k.

□

2.1 Рівняння субдифузії

2.1.1 Виведення рівняння

Розглянемо випадкове блукання із щільностями

$$\psi(t) \sim \frac{\alpha}{\Gamma(1-\alpha)}\frac{\tau^\alpha}{t^{1+\alpha}}, \tag{2.1.1}$$

при $t \to +\infty$, де $\alpha \in (0,1)$, $\tau > 0$, та

$$\lambda(x) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}\sigma} \exp\left\{-\frac{x^2}{4\sigma^2}\right\}. \tag{2.1.2}$$

Згадуємо наслідок з теореми Таубера для $A = \frac{\tau^\alpha}{\Gamma(1-\alpha)}$:

$$\mathscr{L}\left[\psi\right](\eta) \sim 1 - \tau^\alpha \eta^\alpha + o(\eta^\alpha) \tag{2.1.3}$$

Крім того

$$\mathscr{F}\left[\lambda\right](\omega) \sim 1 - \sigma^2\omega^2 + O(\omega^4). \tag{2.1.4}$$

Застосовуємо формулу Монтрола-Вайса

$$\mathscr{F}\text{-}\mathscr{L}\left[u\right](\omega,\eta) = \frac{\mathscr{F}\left[u_0\right](\omega)}{\eta} \frac{\tau^\alpha\eta^\alpha + o(\eta^\alpha)}{1 - (1 - \tau^\alpha\eta^\alpha + o(\eta^\alpha))(1 - \sigma^2\omega^2 + O(\omega^4))} \sim \tag{2.1.5}$$

якщо $\eta \to 0$ і $\omega \to 0$ у певному розумінні "синхронно", то $\eta^\alpha\omega^2 = o(\eta^\alpha + \omega^2)$, а тому

$$\sim \frac{\mathscr{F}\left[u_0\right](\omega)}{\eta} \frac{\tau^\alpha\eta^\alpha}{\tau^\alpha\eta^\alpha + \sigma^2\omega^2} = \frac{\mathscr{F}\left[u_0\right](\omega)}{\eta} \frac{1}{1 + \frac{\sigma^2}{\tau^\alpha}\eta^{-\alpha}\omega^2 = \frac{\mathscr{F}[u_0](\omega)}{\eta}\frac{1}{1+K_\alpha\eta^{-\alpha}\omega^2}}. \tag{2.1.6}$$

Отже, з точністю до малих доданків,

$$\mathscr{F}\text{-}\mathscr{L}\left[u\right](\omega,\eta) \cdot (1 + K_\alpha\eta^{-\alpha}\omega^2) = \frac{\mathscr{F}\left[u_0\right](\omega)}{\eta}, \tag{2.1.7}$$

або ж,

$$\mathscr{F}\text{-}\mathscr{L}\left[u\right](\omega,\eta) - \frac{\mathscr{F}\left[u_0\right](\omega)}{\eta} = -K_\alpha\eta^{-\alpha}\omega^2\mathscr{F}\text{-}\mathscr{L}\left[u\right](\omega,\eta). \tag{2.1.8}$$

Оскільки

$$\mathscr{F}\left[g'\right](\omega) = (-i\omega)\mathscr{F}\left[g\right](\omega), \tag{2.1.9}$$

і, відповідно,

$$\mathscr{F}\left[g^{(k)}\right](\omega) = (-i\omega)^k\mathscr{F}\left[g\right](\omega), \tag{2.1.10}$$

то

$$-\omega^2\mathscr{F}\text{-}\mathscr{L}\left[u\right](\omega,\eta) = \mathscr{F}\left[\frac{\partial^2\mathscr{L}\left[u\right](x,\eta)}{\partial x^2}\right] \tag{2.1.11}$$

Тому маємо

$$\mathscr{L}\left[u\right](x,\eta) - \frac{u_0(x)}{\eta} = K_\alpha\eta^{-\alpha}\frac{\partial^2\mathscr{L}\left[u\right](x,\eta)}{\partial x^2}, \tag{2.1.12}$$

звідки

Рівняння 2.1.1 (субдифузії, інтегральне)

$$u(x,t) - u_0(x) = K_\alpha I_0^\alpha\left(\frac{\partial^2 u(xt)}{\partial x^2}\right), \tag{2.1.13}$$

або

Рівняння 2.1.2 (субдифузії, диференціальне, перша форма)

$$\frac{\partial u}{\partial t} = K_\alpha D_0^{1-\alpha}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right), \tag{2.1.14}$$

з початковою умовою $u(x,0) = u_0(x)$,

або ж

Рівняння 2.1.3 (субдифузії, диференціальне, друга форма)

$$^\star D_0^\alpha u = K_\alpha \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \tag{2.1.15}$$

з початковою умовою $u(x,0) = u_0(x)$.

Зауваження 2.1.4 — Випадкове блукання зз неперервним часом із

$$\psi(t) = \frac{1}{\tau} e^{-t/\tau} \tag{2.1.16}$$

(показниковий розподіл) і з

$$\lambda \sim N(0, 2\sigma^2) \tag{2.1.17}$$

призвело б до класичного параболічного рівняння.

2.1.2 Аналіз рівняння

Означення 2.1.5. $\mathsf{E}[(x(t)-x(0))^2] = \langle (x(t)-x(0))^2\rangle$ — *середньо-квадратичне зміщення* (якщо $x(0) = 0$, то $\langle x^2(t)\rangle$).

Лема 2.1.6

Якщо

$$\psi(t) \sim \frac{\alpha}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{\tau^\alpha}{t^{1+\alpha}}, \tag{2.1.18}$$

при $t \to +\infty$ то

$$\langle n(t)\rangle \sim \frac{t^\alpha}{\tau^\alpha \cdot \Gamma(1+\alpha)}. \tag{2.1.19}$$

Доведення.

$$\langle n(t)\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} k\mathsf{P}\{n(t) = k\} = \sum_{k=0}^{\infty} k\left(\int_0^t (\psi^{\star k}(s) - \psi^{\star(k+1)}(s))\, \mathrm{d}s\right). \tag{2.1.20}$$

$$
\begin{aligned}
\mathscr{L}\left[\langle n\rangle\right](\eta) &= \sum_{k=0}^{\infty}\frac{k}{\eta}((\mathscr{L}\left[\psi\right](\eta))^k - (\mathscr{L}\left[\psi\right](\eta))^{k+1}) = \\
&= \frac{1-\mathscr{L}\left[\psi\right](\eta)}{\eta}\sum_{k=0}^{\infty}k(\mathscr{L}\left[\psi\right](\eta))^k = \\
&= \frac{1-\mathscr{L}\left[\psi\right](\eta)}{\eta}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{\mathscr{L}\left[\psi\right](\eta)}{\mathscr{L}\left[\psi\right]'(\eta)}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\eta}(\mathscr{L}\left[\psi\right](\eta))^k = \\
&= \frac{1-\mathscr{L}\left[\psi\right](\eta)}{\eta}\frac{\mathscr{L}\left[\psi\right](\eta)}{\mathscr{L}\left[\psi\right]'(\eta)}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\eta}\sum_{k=0}^{\infty}(\mathscr{L}\left[\psi\right](\eta))^k = \\
&= \frac{\mathscr{L}\left[\psi\right](\eta)}{\eta\cdot(1-\mathscr{L}\left[\psi\right](\eta))}.
\end{aligned} \tag{2.1.21}
$$

Оскільки

$$
\mathscr{L}\left[\psi\right](\eta) = 1 - \tau^{\alpha}\eta^{\alpha} + o(\eta^{\alpha}), \tag{2.1.22}
$$

то

$$
\mathscr{L}\left[\langle n\rangle\right](\eta) = \frac{1-\tau^{\alpha}\eta^{\alpha}+o(\eta^{\alpha})}{\eta\cdot(\tau^{\alpha}\eta^{\alpha}+o(\eta^{\alpha}))} \underset{n\to 0}{\sim} \frac{1}{\tau^{\alpha}\eta^{\alpha+1}}. \tag{2.1.23}
$$

Застосовуємо “зворотню” теорему Таубера для $\beta = -\alpha$ отримуємо

$$
\langle n(t)\rangle \sim \frac{t^{\alpha}}{\tau^{\alpha}\cdot\Gamma(1+\alpha)}. \tag{2.1.24}
$$

□

Наслідок 2.1.7

Якщо $x(0) = 0$, то

$$
\langle x(t)^2\rangle = 2\sigma^2\langle n(t)\rangle \sim \frac{2\sigma^2 t^{\alpha}}{\tau^{\alpha}\Gamma(1+\alpha)} = \frac{2K_{\alpha}t^{\alpha}}{\Gamma(1+\alpha)}. \tag{2.1.25}
$$

Означення 2.1.8. Якщо у випадкового (дифузійного) процесу середньоквадратичне зміщення зростає повільніше ніж лінійна функція ($\langle x(t)^2\rangle = o(t)$), то процес називається *субдифузійним.*

Означення 2.1.9. Якщо у випадкового (дифузійного) процесу середньоквадратичне зміщення зростає швидше ніж лінійна функція ($t = o(\langle x(t)^2\rangle)$), то процес називається *супердифузійним.*

Означення 2.1.10. Якщо ж у випадкового (дифузійного) процесу середньоквадратичне зміщення зростає так само як лінійна функція, то процес називається *нормально-дифузійним.*

Зауваження 2.1.11 — $\langle x^2(t)\rangle$ — середньоквадратичне зміщення, усереднене за сукупністю частинок (eng. *ensemble-averaged*).

Інший підхід — усереднення за часом:

$$\overline{\delta^2(t,T)} = \frac{1}{T-t}\int_0^{T-t} (x(s+t)-x(s))^2 \,\mathrm{d}s, \tag{2.1.26}$$

де t — часове вікно, T — загальна тривалість спостереження.

$$\overline{\delta^2(t,T)} = \frac{1}{T-t}\int_0^{T-t} (x(t+s)-x(s))^2 \,\mathrm{d}s \tag{2.1.27}$$

— усереднене зміщення (за часом). Усереднимо за сукупністю частинок:

$$\begin{aligned}\overline{\langle \delta^2(t,T)\rangle} &= \frac{1}{T-t}\int_0^{T-t} \langle (x(t+s)-x(s))^2\rangle \,\mathrm{d}s = \\ &= \frac{1}{T-t}\int_0^{T-t} 2\sigma^2 \langle (n(t+s)-n(s))^2\rangle \,\mathrm{d}s.\end{aligned} \tag{2.1.28}$$

За умов, що $t \to \infty$, $T \to \infty$ і $T \gg t$ маємо

$$\langle n(t)\rangle \sim \frac{1}{\tau^\alpha \cdot \Gamma(1+\alpha)} t^\alpha, \tag{2.1.29}$$

а тому попередній вираз асимптотично рівний

$$\frac{2\sigma^2}{T-t}\int_0^{T-t} \frac{1}{\tau^\alpha \cdot \Gamma(1+\alpha)} \cdot ((s+t)^\alpha - s^\alpha) \,\mathrm{d}s. \tag{2.1.30}$$

У свою чергу, можемо переписати $(s+t)^\alpha - s^\alpha$ за рядом Тейлора:

$$(s+t)^\alpha - s^\alpha = s^\alpha \left(1+\frac{t}{s}\right)^\alpha - s^\alpha \sim s^\alpha \left(1+\frac{\alpha t}{s}\right) - s^\alpha = \frac{\alpha t}{s^{1-\alpha}}, \tag{2.1.31}$$

а тому попередній вираз асимптотично рівний

$$\begin{aligned}\frac{2\sigma^2}{T-t} \cdot \frac{\alpha t}{\Gamma(1+\alpha)\cdot \tau^\alpha}\int_0^{T-t} s^{\alpha-1} \,\mathrm{d}s &= \frac{2\sigma^2 \alpha t}{(T-t)\cdot \Gamma(1+\alpha)\cdot \tau^\alpha} \cdot \frac{1}{\alpha} \cdot (T-t)^\alpha = \\ &= \frac{2\sigma^2 t}{\Gamma(1+\alpha)\tau^\alpha} \cdot (T-t)^{\alpha-1} \sim \frac{2K_\alpha}{\Gamma(1+\alpha)\cdot T^{1-\alpha}} t,\end{aligned} \tag{2.1.32}$$

тобто отримали лінійну функцію від t.

Означення 2.1.12. Ситуація, у якій $\langle x^2(t)\rangle$ і $\overline{\langle \delta^2(t,T)\rangle}$ мають різний вигляд як функції змінної t називається *слабкою неергодичністю* (*eng.* weak ergodicity breaking).

Зауваження 2.1.13 — В обмеженій області

$$\langle x^2(t)\rangle = c_1, \quad t \to \infty, \tag{2.1.33}$$

$$\langle \delta^2(t,T)\rangle = c_2 t^{1-\alpha}, \quad t \to \infty, \tag{2.1.34}$$

де c_1, c_2 — певні (можливо різні) константи.

2.2 Рівняння розподіленого порядку

Розглянемо випадок коли α — випадкова величина, розподілена на $(0, 1)$ зі щільністю $p(\alpha)$. Припустимо, що час очікування стрибка задається умовною щільністю

$$\psi(t|\alpha) \sim A \cdot \alpha \cdot \frac{\tau^\alpha}{t^{1+\alpha}}, \tag{2.2.1}$$

де $A = \frac{\alpha}{\Gamma(1-\sigma)}$.

Тоді

$$\psi(t) = \int_0^1 \psi(t|\alpha) \cdot p(\alpha) \, \mathrm{d}\alpha. \tag{2.2.2}$$

Звідси

$$\mathscr{L}\left[\psi\right](\eta) = \int_0^\infty e^{-\eta t} \int_0^1 \psi(t|\alpha) \cdot p(\alpha) \, \mathrm{d}\alpha \, \mathrm{d}t. \tag{2.2.3}$$

Змінюючи порядок інтегрування, отримуємо

$$\int_0^1 p(\alpha) \int_0^\infty e^{-\eta t} \psi(t|\alpha) \, \mathrm{d}t \, \mathrm{d}\alpha. \tag{2.2.4}$$

Далі,

$$\psi(t) \sim \frac{\alpha}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{\tau^\alpha}{t^{1+\alpha}}, \tag{2.2.5}$$

а тому, за теоремою Таубера,

$$\mathscr{L}\left[\psi\right](\eta) \sim 1 - (\eta\tau)^\alpha + o(\eta^\alpha). \tag{2.2.6}$$

Замінюючи таким чином внутрішній інтеграл отримуємо

$$\int_0^1 (1 - (\eta\tau)^\alpha + o(\eta^\alpha)) \, \mathrm{d}\alpha \underset{\eta \downarrow 0}{\sim} 1 - \int_0^1 p(\alpha) \cdot (\eta\tau)^\alpha \, \mathrm{d}\alpha. \tag{2.2.7}$$

Позначимо

$$I(\eta, \tau) = \int_0^1 p(\alpha) \cdot (\eta\tau)^\alpha \, \mathrm{d}\alpha. \tag{2.2.8}$$

За формулою Монтрола-Вайса

$$\begin{aligned} \mathscr{F}\text{-}\mathscr{L}\left[u\right](\omega, \eta) &= \mathscr{F}\left[u_0\right](\omega) \cdot \frac{1}{\eta} \cdot \frac{1 - \mathscr{L}\left[\psi\right](\eta)}{1 - \mathscr{L}\left[\psi\right](\eta) \cdot \mathscr{F}\left[\lambda\right](\omega)} = \\ &= \frac{\mathscr{F}\left[u_0\right](\omega)}{\eta} \cdot \frac{I(\eta, \tau)}{1 - (1 - I(\eta, \tau))\mathscr{F}\left[\lambda\right](\omega)}. \end{aligned} \tag{2.2.9}$$

Також припустимо, що $\lambda \sim \mathcal{N}(0, 2\sigma^2) \implies \mathscr{F}\left[\lambda\right] \sim 1 - \sigma^2\omega^2$. Тоді

$$\mathscr{F}\text{-}\mathscr{L}\left[u\right](\omega, \eta) = \frac{\mathscr{F}\left[u_0\right](\omega)}{\eta} \cdot \frac{I(\eta, \tau)}{I(\eta, \tau) + \sigma^2\omega^2}. \tag{2.2.10}$$

Отже, з точністю до малих доданків,

$$\mathscr{F}\text{-}\mathscr{L}\left[u\right](\omega, \eta) \cdot (I(\eta, \tau) + \sigma^2\omega^2) = \frac{\mathscr{F}\left[u_0\right](\omega)}{\eta} \cdot I(\eta, \tau), \tag{2.2.11}$$

або ж

$$I(\eta, \tau) \cdot \left(\mathscr{F}\text{-}\mathscr{L}\left[u\right](\omega, \eta) - \frac{\mathscr{F}\left[u_0\right](\omega)}{\eta} \right) = \sigma^2\omega^2 \cdot \mathscr{F}\text{-}\mathscr{L}\left[u\right](\omega, \eta). \tag{2.2.12}$$

Діємо на це співвідношення оберненим перетворенням Фур'є, отримаємо

$$I(\eta,\tau)\cdot\left(\mathscr{L}\left[u\right](x,\eta)-\frac{u_0}{\eta}\right)=-\sigma^2\cdot\frac{\partial^2\mathscr{L}\left[u\right](x,\eta)}{\partial x^2}. \tag{2.2.13}$$

Розпишемо інтеграл у явному вигляді:

$$\begin{aligned}I(\eta,\tau)\cdot\left(\mathscr{L}\left[u\right](x,\eta)-\frac{u_0}{\eta}\right)&=\int_0^1 p(\alpha)\cdot(\eta\tau)^\alpha\cdot\left(\mathscr{L}\left[u\right](x,\eta)-\frac{u_0}{\eta}\right)\mathrm{d}\alpha=\\&=\int_0^1 p(\alpha)\cdot\tau^\alpha\cdot\left(\eta^\alpha\mathscr{L}\left[u\right](x,\eta)-\eta^{\alpha-1}u_0\right)\mathrm{d}\alpha.\end{aligned} \tag{2.2.14}$$

У виразі в дужках під інтегралом не складно впізнати $\mathscr{L}\left[{}^\star D_0^\alpha u\right](\eta)$. Підставляючи, отримуємо

$$\int_0^1 p(\alpha)\cdot\tau^\alpha\int_0^\infty e^{-\eta t}\cdot({}^\star D_0^\alpha u)(x,t)\,\mathrm{d}t\,\mathrm{d}\alpha. \tag{2.2.15}$$

Знову змінюємо порядок інтегрування:

$$\int_0^\infty e^{-\eta t}\int_0^1 p(\alpha)\cdot\tau^\alpha\cdot({}^\star D_0^\alpha u)(x,t)\,\mathrm{d}\alpha\,\mathrm{d}t. \tag{2.2.16}$$

А у цьому, у свою чергу, можна впізнати

$$\mathscr{L}\left[\int_0^1 p(\alpha)\cdot\tau^\alpha\cdot({}^\star D_0^\alpha u)(x,t)\,\mathrm{d}\alpha\right](\eta). \tag{2.2.17}$$

Тому, діючи оберненим перетворенням Лапласа на останнє рівняння, отримаємо

Рівняння 2.2.1 (розподіленого порядку)

$$\int_0^1 p(\alpha)\cdot\tau^\alpha\cdot({}^\star D_0^\alpha u)(x,t)\,\mathrm{d}\alpha=\sigma^2\cdot\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}. \tag{2.2.18}$$

Приклад 2.2.2

Якщо $\alpha=\alpha_0=\mathrm{const}$, то $p(\alpha)=\delta(\alpha-\alpha_0)$ — так звана *густина матеріальної точки*:

- $\delta(\alpha-\alpha_0)=0,\ \forall\alpha\neq\alpha_0$;
- $\delta(\alpha_0-\alpha_0)=\infty$;
- $\int_0^1\delta(\alpha-\alpha_0)\,\mathrm{d}\alpha=1$ $(\alpha_0\in(0,1)$.

Тоді отримаємо рівняння

$$\tau^{\alpha_0}\cdot({}^\star D_0^{\alpha_0}u)(x,t)=\sigma^2\cdot\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \tag{2.2.19}$$

тобто

$$({}^\star D_0^{\alpha_0}u)(x,t)=K_{\alpha_0}\cdot\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}. \tag{2.2.20}$$

Приклад 2.2.3

Якщо ж $p(\alpha)\sim\nu\alpha^{\nu-1}$ при $\alpha\to0$ і $x(0)=0$ (блукання починається з початку координат), то $\langle x^2(t)\rangle\sim\mathrm{const}\cdot\ln^\nu t$, так звана *ультраповільна дифузія*.

2.3 Рівняння реакції-субдифузії змінного порядку

Згадаємо класичне рівняння реакції-дифузії:

$$\frac{\partial u}{\partial t} \equiv k\Delta u - \theta u, \tag{2.3.1}$$

де θ — кооефіцієнт реакції (реакція це процес у якому частинки речовини зникають).

Наївне узагальнення:

$$^{\star}D_0^{\alpha} u \equiv k_{\alpha}\Delta u - \theta u. \tag{2.3.2}$$

Зауваження 2.3.1 — Основна проблема із цим рівнянням у тому, що його розв'язок $u(x,t)$, взагалі кажучи, не є невід'ємним, навіть якщо $u_0(x) \geqslant 0$.

Скористаємося напів-дискретним підходом: розглянемо сітку з рівновіддаленими вузлами (для наочності — у одновимірному випадку). Нехай $u_i(t)$ — кількість частинок речовини у i-ому вузлі у момент часу t. Будемо вважати, що стрибки відбуваються в один із сусідніх вузлів із ймовірностями $1/2$ (тобто блукання не зміщене). Нехай також, як і раніше, $\psi_i(t)$ — щільність часу очікування стрибка у вузлі i.

Також вважаємо, що час зникнення частинки має показниковий розподіл з параметром θ_i. Показниковий розподіл особливий тим, що у нього відсутній ефект післядії: ймовірність розпаду у проміжку часу $[t_0, t_0 + \Delta t]$ не залежить від t_0 і дорівнює $1 - e^{-\theta_i t}$, а ймовірність продовження існування дорівнює $e^{-\theta_i t}$.

Це рівносильно тому, що за відсутності стриків (тобто без дифузії) рівняння мало б такий вигляд:

$$\frac{\mathrm{d}u_i}{\mathrm{d}t} \equiv -\theta_i u_i, \tag{2.3.3}$$

адже розв'язок цього рівняння має вигляд

$$u_i(t) = u_i(0) \cdot e^{-\theta_i t}, \tag{2.3.4}$$

тобто отримали (з точністю до множника) ймовірність продовження існування для показникового розподілу.

Введемо ще дві величини:

Означення 2.3.2. *Вхідний та вихідний інтегральні потоки* $J_i^+(t)$, $J_i^-(t)$ такі, що

$$\int_{t_1}^{t_2} J_i^+(t)\,\mathrm{d}t \tag{2.3.5}$$

— кількість частинок, що прибули в i-ий вузол впродовж часу $[t_1, t_2]$, а

$$\int_{t_1}^{t_2} J_i^-(t)\,\mathrm{d}t \tag{2.3.6}$$

— кількість частинок, що вибули з i-ого вузла за час $[t_1, t_2]$.

Відносно них ми і запишемо рівняння: за наведених припущень, маємо такі рівняння:

$$\frac{\mathrm{d}u_i}{\mathrm{d}t} \equiv J_i^+ - J_i^- - \theta_i u_i \tag{2.3.7}$$

а також
$$J_i^+ \equiv \tfrac{1}{2}J_{i-1}^- + \tfrac{1}{2}J_{i+1}^-. \tag{2.3.8}$$

Безпосередньо з цих двох рівнянь випливає, що
$$\frac{\mathrm{d}u_i}{\mathrm{d}t} \equiv \tfrac{1}{2}J_{i-1}^- - J_i^- + \tfrac{1}{2}J_{i+1}^- - \theta_i u_i. \tag{2.3.9}$$

Крім того,
$$J_i^-(t) = u_i(0)\cdot e^{-\theta_i t}\psi_i(t) + \int_0^t J_i^+(s)\cdot e^{-\theta_i(t-s)}\cdot\psi_i(t-s)\,\mathrm{d}s. \tag{2.3.10}$$

Перший доданок відповідає за частинки, які з самого початку були в i-ому вузлі, не розпалися за час t (ймовірність цього $e^{-\theta_i t}$) і вистрибнули з нього у час t (ймовірність цього $\psi_i(t)$), а підінтегральний вираз у другому — за ті частинки, які прибули у момент часу s, не розпалися за час $t-s$ (ймовірність цього $e^{-\theta_i(t-s)}$), і вистрибнули з нього через час $t-s$ після прибуття (ймовірність цього $\psi_i(t-s)$).

Перетворимо останнє рівняння перетворенням Лапласа:
$$\begin{aligned}\mathscr{L}\left[J_i^-\right](\eta) &= u_i(0)\cdot\mathscr{L}\left[\psi_i\right](\eta+\theta_i) + \mathscr{L}\left[J_i^+\right](\eta)\cdot\mathscr{L}\left[\psi_i\right](\eta+\theta_i) = \\ &= u_i(0)\cdot\mathscr{L}\left[\psi_i\right](\eta+\theta_i) + (\eta\cdot\mathscr{L}\left[u_i\right](\eta) - u_i(0) + \\ &\quad + \mathscr{L}\left[J_i^-\right](\eta) + \theta_i\cdot\mathscr{L}\left[u_i\right](\eta))\cdot\mathscr{L}\left[\psi_i\right](\eta+\theta_i) = \\ &= (\eta\cdot\mathscr{L}\left[u_i\right](\eta) + \mathscr{L}\left[J_i^-\right](\eta) + \theta_i\cdot\mathscr{L}\left[u_i\right](\eta))\cdot\mathscr{L}\left[\psi_i\right](\eta+\theta_i).\end{aligned} \tag{2.3.11}$$

Звідси
$$\begin{aligned}\mathscr{L}\left[J_i^-\right](\eta) &= \frac{(\eta+\theta_i)\cdot\mathscr{L}\left[u_i\right](\eta)\cdot\mathscr{L}\left[\psi_i\right](\eta+\theta_i)}{1-\mathscr{L}\left[\psi_i\right](\eta+\theta_i)} = \\ &= \eta\cdot\mathscr{L}\left[u_i\right](\eta)\cdot\mathscr{L}\left[e^{-\theta_i t}\cdot\mathscr{L}^{-1}\left[\frac{\mathscr{L}\left[\psi_i\right](\eta)}{1-\mathscr{L}\left[\psi_i\right](\eta)}\right]\right] + \\ &\quad + \theta_i\cdot\mathscr{L}\left[u_i\right](\eta)\cdot\mathscr{L}\left[e^{-\theta_i t}\cdot\mathscr{L}^{-1}\left[\frac{\mathscr{L}\left[\psi_i\right](\eta)}{1-\mathscr{L}\left[\psi_i\right](\eta)}\right]\right].\end{aligned} \tag{2.3.12}$$

Нехай тепер $\psi_i(t) \sim r_i\cdot t^{-1-\alpha_i}$, де $0<\alpha_i<1$. Тоді $\mathscr{L}\left[\psi_i\right](\eta) \sim 1 - r_i\cdot\frac{\Gamma(1-\alpha_i)}{\alpha_i}\cdot\eta^{\alpha_i} + o(\eta^{\alpha_i})$ (за наслідком з теореми Таубера). Отже,
$$\frac{\mathscr{L}\left[\psi_i\right](\eta)}{1-\mathscr{L}\left[\psi_i\right](\eta)} = \frac{1-r_i\cdot\frac{\Gamma(1-\alpha_i)}{\alpha_i}\cdot\eta^{\alpha_i}+o(\eta^{\alpha_i})}{r_i\cdot\frac{\Gamma(1-\alpha_i)}{\alpha_i}\cdot\eta^{\alpha_i}+o(\eta^{\alpha_i})} \sim \frac{\alpha_i\cdot\eta^{-\alpha_i}}{r_i\cdot\Gamma(1-\alpha_i)} = M_i\cdot\eta^{-\alpha_i}. \tag{2.3.13}$$

За теоремою Таубера з $\beta = 1-\alpha_i$,
$$\mathscr{L}^{-1}\left[\frac{\mathscr{L}\left[\psi_i\right](\eta)}{1-\mathscr{L}\left[\psi_i\right](\eta)}\right] \sim \frac{M_i}{\Gamma(\alpha_i)}\cdot t^{\alpha_i-1}. \tag{2.3.14}$$

Тому можемо продовжити
$$J_i^-(t) \sim \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(u_i(t)\star e^{-\theta_i t}\cdot\frac{M_i}{\Gamma(\alpha_i)}\cdot t^{\alpha_i-1}\right) + \theta_i\cdot\left(u_i(t)\star e^{-\theta_i t}\cdot\frac{M_i}{\Gamma(\alpha_i)}\cdot t^{\alpha_i-1}\right). \tag{2.3.15}$$

Зауваження 2.3.3 — У цій формулі не фігурує початкове значення, адже воно рівне нулеві для достатньо гладкої u_i, наприклад для обмеженої в околі нуля і інтегровної. Справді, тоді

$u_i \star e^{-\theta_i t} t^{\alpha_i - 1}\big|_{t=0}$:

$$u_i \star e^{-\theta_i t} \cdot t^{\alpha_i - 1}\big|_{t=0} = \int_0^t u_i(s) e^{-\theta_i(t-s)} \cdot (t-s)^{\alpha_i - 1}\,\mathrm{d}s \leqslant \int_0^t \|u\| \cdot 1 \cdot (t-s)^{\alpha_i - 1}\,\mathrm{d}s \xrightarrow[t\to 0]{} 0. \quad (2.3.16)$$

Ми майже досягнули нашої мети:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{M_i} \cdot J_i^-(t) &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \frac{1}{\Gamma(\alpha_i)} \int_0^t u_i(s) \cdot e^{-\theta_i(t-s)} \cdot (t-s)^{\alpha_i - 1}\,\mathrm{d}s + \\
&\quad + \theta_i \cdot \frac{1}{\Gamma(\alpha_i)} \int_0^t u_i(s) \cdot e^{-\theta_i(t-s)} \cdot (t-s)^{\alpha_i - 1}\,\mathrm{d}s = \\
&= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} e^{-\theta_i t} \cdot \frac{1}{\Gamma(\alpha_i)} \int_0^t u_i(s) e^{\theta_i s} \cdot (t-s)^{\alpha_i - 1}\,\mathrm{d}s + \\
&\quad + \theta_i \cdot \frac{1}{\Gamma(\alpha_i)} \int_0^t u_i(s) \cdot e^{-\theta_i(t-s)} \cdot (t-s)^{\alpha_i - 1}\,\mathrm{d}s = \\
&= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} e^{-\theta_i t} \cdot \frac{1}{\Gamma(\alpha_i)} \int_0^t u_i(s) \cdot e^{\theta_i s} \cdot (t-s)^{\alpha_i - 1}\,\mathrm{d}s + \\
&\quad + \theta_i \cdot \frac{1}{\Gamma(\alpha_i)} \int_0^t u_i(s) \cdot e^{-\theta_i(t-s)} \cdot (t-s)^{\alpha_i - 1}\,\mathrm{d}s = \\
&= e^{-\theta_i t} \cdot \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \frac{1}{\Gamma(\alpha_i)} \int_0^t u_i(s) \cdot e^{\theta_i s} \cdot (t-s)^{\alpha_i - 1}\,\mathrm{d}s = \\
&= e^{-\theta_i t} \cdot D_0^{1-\alpha_i}(e^{\theta_i t} \cdot u_i(t)).
\end{aligned} \quad (2.3.17)$$

Підставляємо це назад:

$$\frac{\mathrm{d}u_i}{\mathrm{d}t} = \frac{M_{i-1}}{2}. \quad (2.3.18)$$

$$\frac{1}{M_i} \cdot J_i^- = e^{-\theta_i t} \cdot D_0^{1-\alpha_i}(e^{\theta_t t} u_i(t)), \quad (2.3.19)$$

де

$$M_i = \frac{\alpha_i}{r_i - \Gamma(1-\alpha_i)}, \quad (2.3.20)$$

а α_i береться з

$$\psi_i(t) \sim r_i \cdot t^{1-\alpha_i}. \quad (2.3.21)$$

Звідси маємо

Рівняння 2.3.4 (реакції-субдифузії, напівдискретне)

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}u_i(t)}{\mathrm{d}t} &= \tfrac{1}{2} M_{i-1} \cdot e^{-\theta_{i-1} t} \cdot D_0^{1-\alpha_{i-1}}(e^{\theta_{i-1} t} u_{i-1}) + \\
&\quad + \tfrac{1}{2} M_{i+1} \cdot e^{-\theta_{i+1} t} \cdot D_0^{1-\alpha_{i+1}}(e^{\theta_{i+1} t} u_{i+1}) + \\
&\quad - M_i \cdot e^{-\theta_i t} \cdot D_0^{1-\alpha_i}(e^{\theta_i t} u_i) - \theta_i u_i.
\end{aligned} \quad (2.3.22)$$

Граничний перехід до неперервної за простором моделі:

- $i \in \mathbb{Z} \mapsto x \in \mathbb{R}$;
- $u(t) \mapsto u(x,t)$;
- $\alpha_i \mapsto \alpha(x)$;

- $\theta_i \mapsto \theta(x)$;
- $r_i \mapsto r(x)$.

Якщо все це обережно проробити то отримаємо

Рівняння 2.3.5 (реакції субдифузії, змінного порядку)

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(k(x) \cdot e^{-\theta(x)t} \cdot D_0^{1-\alpha(x)}\left(e^{\theta(x)t} \cdot u\right)\right) - \theta(x) \cdot u. \tag{2.3.23}$$

Тут

$$k(x) = \frac{\alpha(x) \cdot \sigma^2}{2 \cdot r(x) \cdot \Gamma(1 - \alpha(x))} \tag{2.3.24}$$

— *як-би коефіцієнт дифузії.*

Зауваження 2.3.6 — Нагадаємо, що класичне рівняння реакції дифузії мало вигляд

$$\frac{\partial u}{\partial t} \equiv k\Delta u - \theta u. \tag{2.3.25}$$

Як бачимо, результат переходу до дробових похідних анітрохи не очевидний, тобто рівняння потрібно виводити, а не вгадувати.

Якщо $\theta = 0$ (реакції немає), то маємо рівняння субдифузії змінного порядку:

$$\frac{\partial u}{\partial u} = \frac{\partial^2}{\partial x^2}(k(x) D_0^{1-\alpha(x)}(u)). \tag{2.3.26}$$

Зауваження 2.3.7 — Причому $D_0^{1-\alpha(x)}$ не можна винести за $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$, тобто останнє рівняння не еквівалентне такому:

$$^{*}D_0^{\alpha(x)} u = k(x) \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}. \tag{2.3.27}$$

А от у рівняння субдифузії для достатньо гладких функцій можна було.

Зауваження 2.3.8 — Якщо у моделі реакції-субдифузії $\theta = \theta(x, t, u(x,t))$, то отримаємо рівняння аналогічне (2.3.23), але з

$$\exp\left\{\pm \int_0^t \theta(x, s, u(x,s))\, \mathrm{d}s\right\} \tag{2.3.28}$$

замість $e^{\pm\theta(x)t}$.

Зауваження 2.3.9 — Якщо α — стала, то отримуємо старе рівняння субдифузії: рівняння (2.3.26) з $\alpha(x) = \alpha = \mathrm{const}$ з $r(x) = \frac{\alpha}{\Gamma(1-\alpha)} \cdot \tau^\alpha$ зводиться до рівняння субдифузії

$$\frac{\partial u}{\partial t} = k_\alpha \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} D_0^{1-\alpha} u \tag{2.3.29}$$

з $k_\alpha = \frac{\sigma^2}{2\tau^\alpha}$.

2.4 Рівняння супердифузії

Розглянемо випадкове блукання з неперервним часом із $\psi(t) = \frac{1}{\tau} \cdot e^{-t/\tau}$ (тобто час очікування стрибка ψ має показниковий розподіл з параметром τ), а також

$$\lambda(x) \sim \frac{\sigma^\mu}{|x|^{1+\mu}}, \tag{2.4.1}$$

при $|x| \to \infty$, де μ — якась стала, $1 < \mu < 2$. Спробуємо знайти дисперсію очікуваної довжини стрибка. Як відомо з курсу теорії ймовірностей,

$$\mathsf{D}\lambda = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \lambda(x)\,\mathrm{d}x. \tag{2.4.2}$$

Але $x^2\lambda(x) \sim \sigma^\mu |x|^{1-\mu}$. При $1 < \mu < 2$ маємо $-1 < 1-\mu < 0$, тобто інтеграл для дисперсії розбіжний (за порівняльною ознакою збіжності, порівнюємо з $1/x$). Таким чином, сама дисперсія довжини стрибка — нескінченна.

Можна показати, що

$$\mathscr{L}\left[\psi\right](\eta) \sim 1 - \tau\eta + o(\eta), \quad \eta \to 0, \tag{2.4.3}$$

а також

$$\mathscr{F}\left[\lambda\right](\omega) = 1 - \sigma^\mu|\omega|^\mu + o(|\omega|^\mu), \quad \omega \to 0. \tag{2.4.4}$$

Як можна було здогадатися, ці рівності нам знадобляться для застосування формули Монтрола-Вайса:

$$\begin{aligned} \mathscr{F}\text{-}\mathscr{L}\left[u\right](\omega,\eta) &= \frac{\mathscr{F}\left[u_0\right]}{\eta} \cdot \frac{1 - \mathscr{L}\left[\psi\right](\eta)}{1 - \mathscr{L}\left[\psi\right](\eta) \cdot \mathscr{F}\left[\lambda\right](\omega)} \approx \\ &\approx \frac{\mathscr{F}\left[u_0\right]}{\eta} \cdot \frac{\tau\eta}{1 - (1-\tau\eta)\cdot(1-\sigma^\mu|\omega|^\mu)} \sim \\ &\sim \frac{\mathscr{F}\left[u_0\right]}{\eta} \cdot \frac{\tau\eta}{\tau\eta + \sigma^\mu|\omega|^\mu} = \\ &= \frac{\mathscr{F}\left[u_0\right]}{\eta + k_\mu|\omega|^\mu}. \end{aligned} \tag{2.4.5}$$

Означення 2.4.1.

$$k_\mu = \frac{\sigma^\mu}{\tau} \tag{2.4.6}$$

— *коефіцієнт дифузії.*

Звідси:

$$\eta \cdot \mathscr{F}\text{-}\mathscr{L}\left[u\right] - \mathscr{F}\left[u_0\right] = -k_\mu|\omega|^\mu \cdot \mathscr{F}\text{-}\mathscr{L}\left[u\right]. \tag{2.4.7}$$

Діємо на обидві сторони оберненим перетворенням Лапласа:

$$\frac{\partial \mathscr{F}\left[u\right](\omega,t)}{\partial t} = -k_\mu|\omega|^\mu \cdot \mathscr{F}\left[u\right](\omega,t), \tag{2.4.8}$$

і оберненим перетворенням Фур'є:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = k_\mu \cdot \frac{\partial^\mu u}{\partial |x|^\mu}, \tag{2.4.9}$$

де

Означення 2.4.2.

$$\frac{\partial^\mu u}{\partial |x|^\mu} \tag{2.4.10}$$

— *похідна Ріса-Бейля* порядку μ за змінною x, яка визначається рівністю

$$\frac{\partial^\mu u}{\partial |x|^\mu} = \mathscr{F}^{-1}\left[-|\omega|^\mu \cdot \mathscr{F}\left[u\right]\right]. \tag{2.4.11}$$

Зауваження 2.4.3 —

$$\frac{\partial^2 u}{\partial |x|^2} = \mathscr{F}^{-1}\left[-\omega^2 \cdot \mathscr{F}\left[u\right]\right] = \mathscr{F}^{-1}\left[(-i\omega)^2 \cdot \mathscr{F}\left[u\right]\right] = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}. \tag{2.4.12}$$

Зауваження 2.4.4 —

$$\frac{\partial^\mu f}{\partial |x|^\mu} = \begin{cases} \dfrac{D^\mu_{-\infty} f + D^\mu_{+\infty} f}{2\cos\dfrac{\pi\mu}{2}}, & \mu \neq 1, \\[2ex] \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\pi}\dfrac{1}{x}\displaystyle\int_{\mathbb{R}} \dfrac{f(\xi)}{\xi - x}\,\mathrm{d}\xi, & \mu = 1. \end{cases} \tag{2.4.13}$$