



## ZASTOSOWANIE ENTROPII NIEADDYTYWNYCH W OPISIE SUBDYFUZJI

KATARZYNA D. LEWANDOWSKA I TADEUSZ KOSZTOŁOWICZ

**STRESZCZENIE.** Przedstawiamy zastosowanie entropii nieaddytywnych w modelowaniu subdyfuzyjnych procesów transportu. Dla nieaddytywnych entropii Sharma-Mittala, Tsallisa i Gaussa wyznaczamy funkcje Greena tak, aby spełniały relację przyjętą w tym artykule jako definicję subdyfuzji i porównujemy je z funkcją Greena otrzymaną dla modelu subdyfuzji opartym na formalizmie *continuous time random walk*. Wskazujemy na użyteczność modeli opartych na entropiach nieaddytywnych, pomimo iż modele te nie mają jasnej interpretacji stochastycznej. Krótko omawiamy podobieństwa i różnice pomiędzy modelami opartymi na entropiach nieaddytywnych i modelem wyprowadzonym z formalizmu *continuous time random walk* oraz wskazujemy na eksperymentalne możliwości wyznaczenia wartości parametrów charakteryzujących modele oparte o entropie nieaddytywne.

### 1. WPROWADZENIE

Subdyfuzja to proces transportu jakościowo inny niż dyfuzja normalna. W dyfuzji normalnej cząsteczki wykonują losowe przeskoki, których średni czas oczekiwania na przeskok jest skończony, a długości skoków są niewielkie – odchylenie standardowe długości przeskoków jest skończone. Jeżeli jednak ruch cząsteczek będzie w istotny sposób ograniczony przez czynniki zewnętrzne, to czas oczekiwania cząsteczki na przeskok może stać się bardzo długi, do tego stopnia, że wartość średnia tego czasu będzie nieskończona (przy skończonym średnim kwadracie długości przemieszczenia). Mamy wówczas do czynienia z subdyfuzją. Subdyfuzja może być zdefiniowana jako proces, w którym kwadrat średniej długości przeskoku spełnia relację [29, 30]

$$(1.1) \quad \langle (\Delta x)^2(t) \rangle = D_\alpha t^\alpha,$$

gdzie  $\alpha \in (0, 1)$  oznacza parametr subdyfuzji,  $D_\alpha$  to współczynnik subdyfuzji wyrażany w jednostkach  $m^2/t^\alpha$ . Gdy  $\alpha = 1$ , to mamy do czynienia z procesem dyfuzji normalnej. Subdyfuzja może występować w ośrodkach o skomplikowanej strukturze wewnętrznej, takich jak ośrodki porowate, żele membrany biologiczne [5, 22, 23, 29, 30], wnętrza komórek [18, 28, 38].

Relacja (1.1) nie jest jedyną, którą przyjmuje się jako definicję subdyfuzji (por. np. [1, 5, 6, 19]). Ponadto, wielu autorów uważa, iż relacja ta jedynie definiuje parametry  $\alpha$  i  $D_\alpha$ , a nie proces subdyfuzji lub dyfuzji normalnej. Jednym z powodów takiego stanowiska może być sytuacja przedstawiona w artykule [10]. Wykazano w nim, że istnieje niegaussowski i niemarkowski proces transportu, który spełnia relację (1.1) dla  $\alpha = 1$ , tak jak proces dyfuzji normalnej, o którym zakłada się, że jest gaussowski i markowski. Jednakże w niniejszym artykule rozważamy model, w którym subdyfuzję opisujemy przez równanie z czasową pochodną ułamkową wyprowadzone z formalizmu *continuous time random walk*, w którym rozkład długości przeskoku cząsteczki jest gaussowski. Drugi moment wyznaczony dla rozwiązania tego równania (funkcji Greena) wynosi (1.1) dla  $0 < \alpha \leq 1$ . Błądzenie losowe dla  $0 < \alpha < 1$  utożsamiamy z subdyfuzją, natomiast dla  $\alpha = 1$  z dyfuzją normalną.

W naszym artykule zakładamy, że *każdy model, który spełnia relację (1.1), może być traktowany jako model subdyfuzji*. Konsekwencją przyjętego założenia są modele, które formalnie prowadzą do relacji (1.1), lecz nie mają prostej interpretacji stochastycznej. Część modeli spełniających nasze założenie traktuje subdyfuzję jako proces stochastyczny, co umożliwia ich jasną i prostą interpretację. Inne, jak dotąd, nie mają interpretacji stochastycznej. Nie odrzucamy takich modeli; uważamy, że *modele, które nie mają jednoznacznej interpretacji stochastycznej lub interpretacja ta nie została dotychczas znaleziona, a które spełniają relację (1.1), mogą być – podobnie jak modele stochastyczne – użyte do opisu dyfuzji anomalnej*. Uważamy także, że eksperymentalna weryfikacja modelu jest najlepszym sposobem potwierdzenia poprawności samego modelu jak i jego użyteczności. Dodajmy, że zgodność funkcji wyprowadzonych w ramach danego modelu teoretycznego z wynikami eksperymentalnymi jest nieodzownym kryterium ich akceptacji bądź odrzucenia. Natomiast nie istnieje eksperymentalna możliwość sprawdzenia ścisłych matematycznych założeń, takich jak przestrzeń czy klasa funkcji, co sprawia, że w modelach fizycznych założenia te nie są uwzględniane.

Najczęściej używanym modelem subdyfuzji jest model oparty na formalizmie *continuous time random walk* [29, 30]. W ramach tego modelu otrzymuje się liniowe równanie subdyfuzji z pochodnymi rzędu ułamkowego [7, 29, 30]. Jest to także model, który nadaje subdyfuzji jasną i prostą interpretację stochastyczną. Ten model będzie dla nas modelem odniesienia. Innymi modelami, które także opisują subdyfuzję są modele oparte na entropiach nieaddytywnych. Najogólniejszą z entropii nieaddytywnych jest entropia Sharma-Mittala, inne bowiem entropie, takie jak np. entropia Tsallisa lub entropia Gaussa są szczególnymi przypadkami entropii Sharma-Mittala [2]. W ramach modeli opartych na entropiach nieaddytywnych otrzymuje się nieliniowe różniczkowe (lub różniczkowo-całkowe) równania z pochodnymi rzędu naturalnego [4, 8, 9, 12, 14, 16, 31, 33, 35, 36]. Modele oparte na entropiach nieaddytywnych nie mają – jak dotąd – jasnej interpretacji stochastycznej, chociaż próby znalezienia takiej interpretacji zostały podjęte (por. np. [26]).

Poniżej określimy i porównamy rozkłady gęstości prawdopodobieństwa położenia cząsteczki wyprowadzone z różnych formalizmów. Porównywać będziemy funkcje Greena  $G(x, t; x_0)$ , które są rozwiązaniami równań otrzymanymi dla warunku początkowego  $G(x, 0; x_0) = \delta(x - x_0)$ . Funkcje Greena dla modeli opartych na entropiach nieaddytywnych otrzymamy w oparciu o uogólnione funkcje Greena przedstawione w książce Franka [14]. Mianowicie, parametry występujące w funkcjach Greena zostaną dobrane tak, aby wszystkie te funkcje prowadziły dokładnie do relacji (1.1).

## 2. ENTROPIE NIEADDYTYWNE

Entropię  $S$  układu w danym stanie makroskopowym definiujemy za pomocą liczby dozwolonych stanów mikroskopowych  $W$  odpowiadających temu stanowi makroskopowemu [32]

$$(2.1) \quad S = k_B \ln W ,$$

gdzie  $k_B$  oznacza stałą Boltzmanna. Entropia stanowi zatem logarytmiczną miarę stopnia przypadkowości (nieuporządkowania) układu. Entropia Boltzmanna-Shannona (2.1) jest entropią addytywną, co oznacza, że entropia układu składającego się niezależnych z podukładów jest równa sumie entropii podukładów.

Dyfuzję normalną opisujemy przy pomocy entropii Boltzmanna-Shannona (2.1). W przypadku subdyfuzji możemy posłużyć się jedynie entropiami nieaddytywnymi, tj. entropią Sharma-Mittala, Tsallisa lub Gaussa, co zostało wykazane w [11–17]. Nieaddytywność entropii dla układów niezależnych  $A$  i  $B$ , wyraża następujący związek

$$S^i[A + B] = S^i[A] + S^i[B] + (1 - q)S^i[A]S^i[B] ,$$

gdzie  $q \neq 1$ , a za indeks górny  $i$  podstawimy symbol konkretnej entropii nieaddytywnej, tj. SM, T lub G. Dla addytywnej entropii Shannona-Boltzmanna  $q = 1$ .

**2.1. Entropia Sharma-Mittala.** Najbardziej ogólną entropią nieaddytywną jest entropia Sharma-Mittala, którą w przestrzeni fazowej  $\Omega$  definiuje relacja [14]

$$(2.2) \quad {}^{SM}S_{q,r}[P] = \frac{1 - [\int_{\Omega} P^r dx]^{\frac{q-1}{r-1}}}{q-1} , \quad \text{gdzie } q, r > 0 \quad \text{ i } \quad q, r \neq 1 ,$$

gdzie  $q$  i  $r$  to parametry, a  $P$  jest gęstością prawdopodobieństwa znalezienia cząsteczki w położeniu  $x$  w chwili  $t$ .

Z entropii Sharma-Mittala możemy otrzymać inne entropie nieaddytywne, jak i addytywne poprzez nałożenie dodatkowych warunków na parametry  $q$  i  $r$ . Dla  $r = q$  otrzymamy nieaddytywną entropię Tsallisa. Gdy wykonamy przejście graniczne  $r \rightarrow 1^-$  to otrzymamy nieaddytywną entropię Gaussa, a wykonując przejścia graniczne  $q \rightarrow 1^+$  i  $r \rightarrow 1^-$  – addytywną entropię Shannona-Boltzmanna [14].

**2.2. Entropia Tsallisa.** Entropia Tsallisa wydaje się być najczęściej wykorzystywaną z entropii nieaddytywnych w modelowaniu dyfuzji anomalnej. Entropię Tsallisa definiuje relacja [34, 35]

$$(2.3) \quad {}^T S_q [P] = \frac{1 - \int_{\Omega} P^q dx}{q-1} , \quad \text{gdzie } q > 0 \quad \text{ i } \quad q \neq 1 .$$

**2.3. Entropia Gaussa.** Entropię Gaussa definiujemy następująco

$$(2.4) \quad {}^G S_q [P] = \frac{1 - \exp [(q-1) \int_{\Omega} P \ln P dx]}{q-1} , \quad \text{gdzie } q > 0 \quad \text{ i } \quad q \neq 1 .$$

## 3. NIELINIOWE RÓWNANIE FOKKERA-PLANCKA

W przypadku entropii nieaddytywnych wyprowadzenie równania subdyfuzji jest niejednoznaczne i wymaga przyjęcia założeń. Założenia te nie zawsze mają przekonującą motywację fizyczną – najczęściej przyjmowane są *a priori*. W naszym przekonaniu nie dyskwalifikuje to jednak uzyskanych w ten sposób równań, ponieważ mogą być użyteczne w modelowaniu konkretnych procesów zachodzących w przyrodzie.

Wyprowadzenie nieliniowych równań Fokkera-Plancka może być wykonane na kilka sposobów; poniżej przedstawimy następujący. Zakładamy, że prawdziwa jest następująca relacja definiująca strumień subdyfuzyjny

$$(3.1) \quad J = QM(P) \frac{\partial \delta S}{\partial x \delta P},$$

gdzie parametr  $Q$  jest miarą fluktuacji (parametr ten w praktyce „zawiera” wszystkie parametry niezależne od  $P$ ),  $M(P)$  jest funkcją  $P$  (postać funkcji  $P$  zakładamy w zależności od rozpatrywanego przypadku), a  $\delta S/\delta P$  oznacza pochodną funkcjonalną<sup>1</sup> entropii względem prawdopodobieństwa  $P$ . Po podstawieniu strumienia (3.1) do równania ciągłości

$$(3.2) \quad \frac{\partial J(x, t)}{\partial x} = -\frac{\partial P(x, t)}{\partial t},$$

które wyraża prawo zachowania liczby cząstek, otrzymane zostaje nieliniowe równanie Fokkera-Plancka (przyjmujemy tutaj  $M(P) = P$ )

$$(3.3) \quad \frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -Q \frac{\partial}{\partial x} P \frac{\partial \delta S}{\partial x \delta P}.$$

Po wykonaniu obliczeń otrzymamy dla każdej z rozważanych entropii równanie o ogólnej postaci

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 P^q(x, t)}{\partial x^2},$$

dla rozwiązania którego posłużymy się następującym twierdzeniem.

**Twierdzenie 3.1.** *Rozwiązanie równania*

$$(3.4) \quad \frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 P^q(x, t)}{\partial x^2},$$

dla warunku początkowego  $P(x, 0) = \delta(x)$  ma następującą postać [40]

$$(3.5) \quad P_q(x, t) = \frac{1}{t^k} \left( \left\{ 1 - \frac{k(q-1)}{2qN} \frac{|x|^2}{t^{2k/N}} \right\}_+ \right)^{\frac{1}{q-1}},$$

gdzie  $k = (q-1 + 2/N)^{-1}$ ,  $N$  oznacza wymiar przestrzeni oraz

$$\{u\}_+ = \begin{cases} u, & u \geq 0, \\ 0, & u < 0. \end{cases}$$

Rozwiązanie postaci (3.5) nosi nazwę rozwiązania Barenblatta.

W pierwszej kolejności przedstawimy równanie otrzymane na bazie entropii Sharma-Mittala. Równania wyprowadzone dla entropii Tsallisa i Gaussa są szczególnymi przypadkami równania

<sup>1</sup>Pochodną funkcjonalną funkcjonału  $F[f(x)] = \int g(f(x), x) dx$  definiujemy  $\delta F/\delta f = \partial g(f(x), x)/\partial f$ .

otrzymanego dla entropii Sharma-Mittala. Przedstawimy także funkcje Greena dla tych równań, które mogą być również otrzymane z równania (3.5).

**3.1. Entropia Sharma-Mittala.** Dla entropii Sharma-Mittala (2.2) równanie (3.3) przyjmuje postać [13, 14, 16, 25, 26]

$$\frac{\partial P}{\partial t} = Q_{SM} \left[ \int_{\Omega} P^r dx \right]^{\frac{q-r}{r-1}} \frac{\partial^2 P^r}{\partial x^2} .$$

Funkcja Greena dla tego równania jest następująca

$$(3.6) \quad G_{SM}(x, t; x_0) = D_{SM}(t) \left[ \left\{ 1 - \frac{C_{SM}(t)}{2} (r-1)(x-x_0)^2 \right\}_+ \right]^{\frac{1}{r-1}},$$

gdzie  $r > 1/3$ ,  $r, q \neq 1$ ,  $q > 0$ ,

$$(3.7) \quad D_{SM}(t) = \left[ \frac{1}{2r(1+q)Q_{SM}K_{r,q}|z_r|^2 t} \right]^{\frac{1}{1+q}},$$

$$(3.8) \quad K_{r,q} = \begin{cases} \left( \frac{3r-1}{2r} \right)^{\frac{q-r}{1-r}}, & r \neq 1, \\ (\sqrt{e})^{1-q}, & r = 1, \end{cases}$$

$$(3.9) \quad z_r = \begin{cases} \sqrt{\frac{\pi}{r-1}} \frac{\Gamma(r/(r-1))}{\Gamma((3r-1)/(2(r-1)))}, & r > 1, \\ \sqrt{\pi}, & r = 1, \\ \sqrt{\frac{\pi}{1-r}} \frac{\Gamma((1+r)/2(1-r))}{\Gamma(1/(1-r))}, & 1/3 < r < 1. \end{cases}$$

gdzie  $\Gamma(x) = \int_0^\infty \tau^{x-1} e^{-\tau} d\tau$  to funkcja gamma Eulera oraz

$$(3.10) \quad C_{SM}(t) = 2 [z_r D_{SM}(t)]^2 .$$

Drugi moment funkcji Greena (3.6) wynosi

$$(3.11) \quad \langle (\Delta x)^2(t) \rangle_{SM} \sim t^{\frac{1}{1+q}} .$$

**3.2. Entropia Tsallisa.** Dla entropii Tsallisa (2.3) równanie (3.3) przyjmuje postać

$$(3.12) \quad \frac{\partial P}{\partial t} = Q_T \frac{\partial^2 P^q}{\partial x^2} .$$

Funkcja Greena dla tego równania ma następującą postać

$$(3.13) \quad G_T(x, t; x_0) = D_T(t) \left[ \left\{ 1 - \frac{C_T(t)}{2} (q-1)(x-x_0)^2 \right\}_+ \right]^{\frac{1}{q-1}},$$

gdzie  $q > 1/3$ ,  $q \neq 1$ ,

$$(3.14) \quad D_T(t) = \left[ \frac{1}{2q(1+q)Q_T|z_q|^2 t} \right]^{\frac{1}{1+q}},$$

$$(3.15) \quad C_T(t) = 2 [z_q D_T(t)]^2$$

oraz  $z_q$  jest dane przez (3.9). Drugi moment funkcji Greena (3.13) wynosi

$$(3.16) \quad \langle (\Delta x)^2(t) \rangle_T = \frac{2}{3q-1} \frac{1}{C_T(t)} .$$

**3.3. Entropia Gaussa.** Dla entropii Gaussa (2.4) równanie (3.3) przyjmuje postać

$$\frac{\partial P}{\partial t} = Q_G \exp \left[ x(q-1) \int_{\Omega} P \ln P dx \right] \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} .$$

Funkcja Greena dla tego równania ma następującą postać

$$(3.17) \quad G_G(x, t; x_0) = D_G(t) \exp \left( -\frac{C_G(t)}{2} (x - x_0)^2 \right) ,$$

gdzie

$$(3.18) \quad D_G(t) = \left[ \frac{(\sqrt{e})^{q-1}}{2\pi(1+q)Q_G t} \right]^{\frac{1}{1+q}}$$

oraz

$$(3.19) \quad C_G(t) = 2\pi [D_G(t)]^2 .$$

Drugi moment funkcji Greena (3.17) wynosi

$$(3.20) \quad \langle (\Delta x)^2(t) \rangle_G = \frac{1}{C_G(t)} ,$$

Funkcje Greena (3.6), (3.13) i (3.17) zależą od parametru  $q$ , który może być interpretowany jako miara nieaddytywności entropii i parametru  $Q_i$ , który jest miarą fluktuacji. Funkcja Greena dla entropii Sharma-Mittala (3.6) zależy także od parametru  $r$ . Funkcje Greena dla entropii Tsallisa (3.13) i Gaussa (3.17) są szczególnymi przypadkami funkcji Greena dla entropii Sharma-Mittala (3.6). Aby otrzymać funkcję Greena dla entropii Tsallisa należy przyjąć w (3.6)  $q = r$ , zaś aby otrzymać funkcję Greena dla entropii Gaussa należy policzyć w (3.6) granicę  $r \rightarrow 1^-$ . Jednakże, ponieważ te trzy entropie i odpowiadające im funkcje Greena są zazwyczaj rozpatrywane oddzielnie, my także tak postąpimy.

#### 4. MODELE SUBDYFUZJI

Wszystkie modele opisują ten sam proces, więc funkcje Greena otrzymane z wykorzystaniem poszczególnych entropii powinny spełniać relację (1.1), którą przyjęliśmy jako definicję subdyfuzji [25]. Ponadto, wszystkie funkcje Greena powinny zależeć od parametrów subdyfuzji  $\alpha$  i  $D_\alpha$ , ponieważ parametry subdyfuzji  $\alpha$  i  $D_\alpha$  mogą być mierzalne eksperymentalnie w ramach każdego z modeli przy pomocy, na przykład, czasowej ewolucji warstwy przymembranowej w ramach modelu ułamkowego [20, 22, 23].

Relacja (1.1) będzie spełniona przez funkcje Greena  $G_i(x, t; x_0)$  otrzymane w ramach powyższych modeli, gdy [25]

$$(4.1) \quad q = \frac{2}{\alpha} - 1$$

oraz

$$(4.2) \quad Q_{SM} = \frac{\alpha [D_\alpha(3r-1)]^{1/\alpha}}{4r K_{r,2/\alpha-1} |z_r|^{2(1-1/\alpha)}},$$

gdzie  $|\cdot|$  oznacza wartość bezwzględna,

$$(4.3) \quad Q_T = \frac{\alpha^2 [D_\alpha(6/\alpha-4)]^{1/\alpha}}{4(2-\alpha) |z_{2/\alpha-1}|^{2(1-1/\alpha)}},$$

$$(4.4) \quad Q_G = \frac{\alpha D_\alpha^{1/\alpha}}{2 (\sqrt{2\pi e})^{2(1-1/\alpha)}},$$

współczynniki  $K_{r,q}$  i  $z_r$  są zdefiniowane przez relacje (3.8) i (3.9). W funkcjach Greena (3.6), (3.13) i (3.17) parametry  $q$  i  $Q_i$  zostaną wyeliminowane z wykorzystaniem równań (4.1)–(4.4).

**4.1. Model Sharma-Mittala.** Funkcja Greena dla jednorodnego nieograniczonego układu wyprowadzona w ramach modelu Sharma-Mittala jest następująca [25]

$$(4.5) \quad G_{SM}(x, t; x_0) = \frac{1}{\sqrt{D_\alpha(3r-1)t^\alpha |z_r|}} \left[ \left\{ 1 - \frac{(r-1)(x-x_0)^2}{D_\alpha(3r-1)t^\alpha} \right\}_+^{\frac{1}{r-1}} \right],$$

gdzie  $r > 1/3$  i  $r \neq 1$ . Funkcja ta ma różne własności w zależności od wartości parametru  $r$ . Mianowicie, dla  $r > 1$  funkcja (4.5) ma ograniczony nośnik (patrz Rys. 1), co oznacza, że prawdopodobieństwo znalezienia cząsteczki przyjmuje wartości niezerowe jedynie w pewnym przedziale, którego granice rozszerzają się. Natomiast dla  $1/3 < r < 1$  funkcja Greena (4.5) ma nośnik nieograniczony, co oznacza, że prawdopodobieństwo znalezienia cząsteczki przyjmuje wartości niezerowe w  $(-\infty, \infty)$ . Wykresy funkcji Greena dla tego przypadku są przedstawione na Rys. 2.

**4.2. Model Tsallisa.** Funkcja Greena dla jednorodnego nieograniczonego układu wyprowadzona w ramach modelu Tsallisa przyjmuje postać [25]

$$(4.6) \quad G_T(x, t; x_0) = \frac{\alpha}{\sqrt{2D_\alpha(3-2\alpha)t^\alpha |z_{2/\alpha-1}|}} \left[ \left\{ 1 - \frac{(1-\alpha)(x-x_0)^2}{2(3-2\alpha)D_\alpha t^\alpha} \right\}_+^{\frac{\alpha}{2(\alpha-1)}} \right],$$

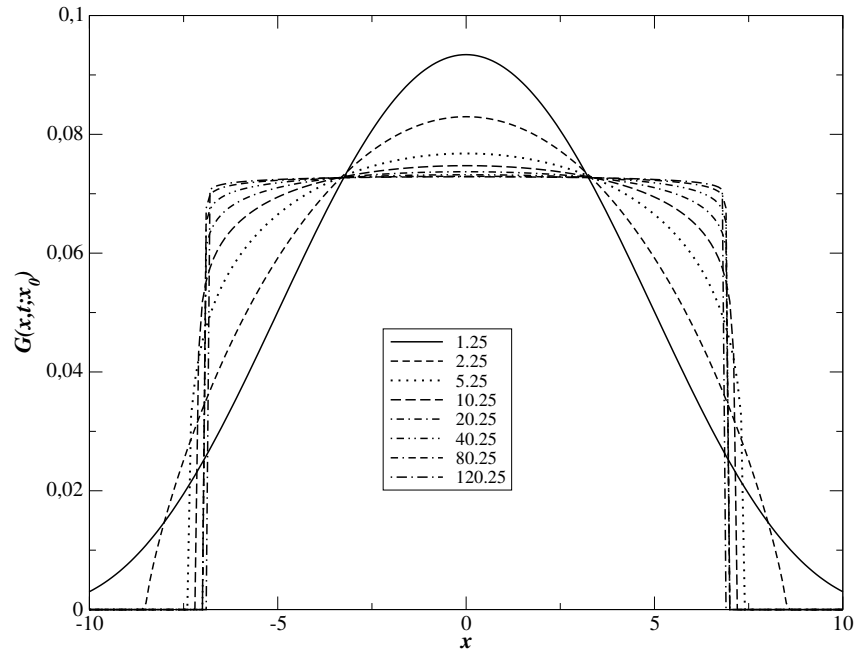
gdzie

$$z_{2/\alpha-1} = \frac{\alpha \Gamma[\alpha/2(1-\alpha)]}{\Gamma[1/2(1-\alpha)]} \sqrt{\frac{\pi\alpha}{2(1-\alpha)}}.$$

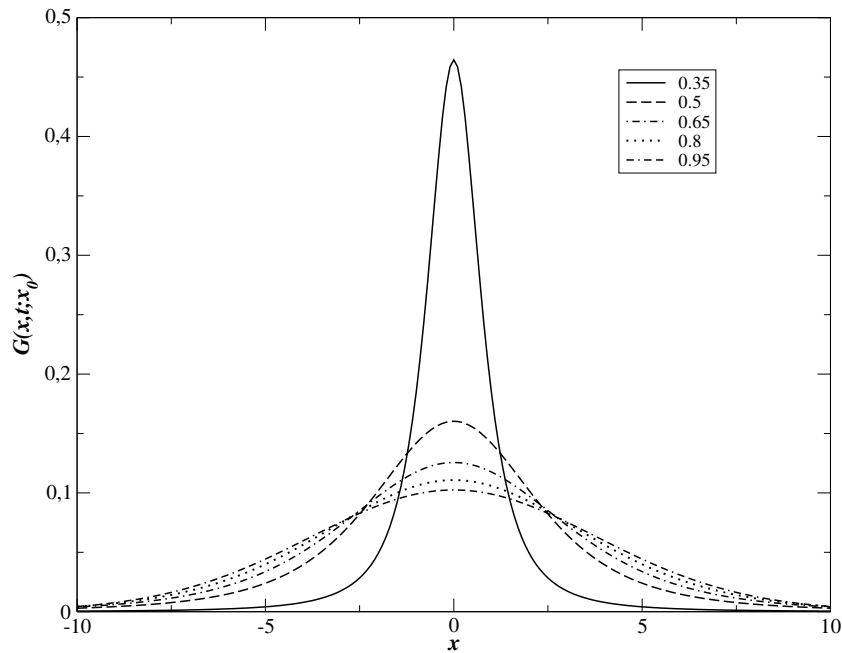
Rysunek 3 przedstawia przykładowe funkcje Greena (4.6) wyznaczone dla różnych wartości parametru subdyfuzji  $\alpha$ . Jak już wspominaliśmy, entropia Tsallisa jest szczególnym przypadkiem entropii Sharma-Mittala. Funkcję Greena dla modelu Tsallisa otrzymamy z funkcji (4.5) dla

$$(4.7) \quad r = \frac{2}{\alpha} - 1.$$

Zauważmy, że model Tsallisa dla subdyfuzji odpowiada przypadkowi  $r > 1$  w modelu Sharma-Mittala.

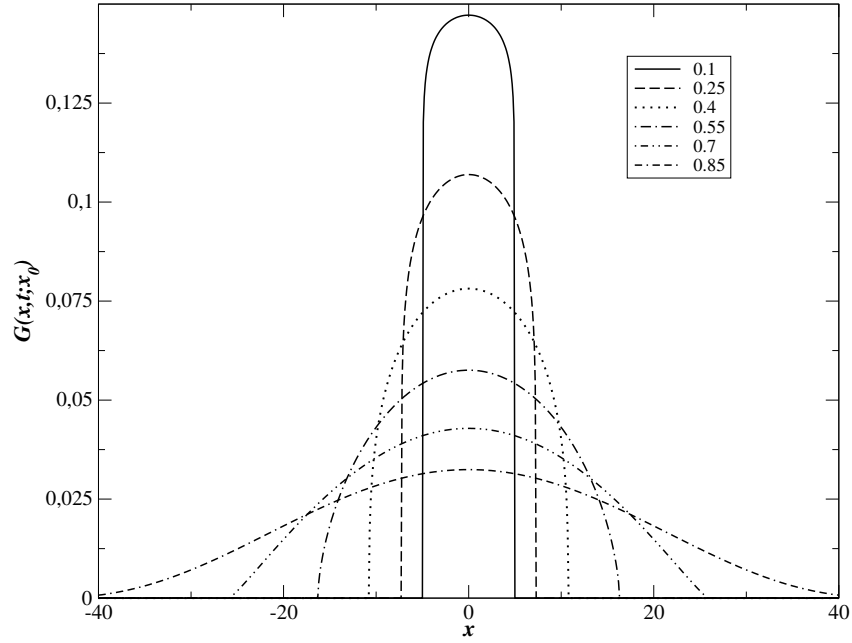


RYSUNEK 1. Funkcja Greena dla modelu Sharma-Mittala dla przypadku  $r > 1$  (ograniczony nośnik). Funkcje zostały wyznaczone dla  $\alpha = 0.4$ ,  $D_\alpha = 2.5$ ,  $t = 100$ ,  $x_0 = 0$  i różnych wartości parametru  $r$  wymienionych w legendzie rysunku.



RYSUNEK 2. Funkcja Greena dla modelu Sharma-Mittala dla przypadku  $1/3 < r < 1$ . Funkcje zostały wyznaczone dla  $\alpha = 0.4$ ,  $D_\alpha = 2.5$ ,  $t = 100$ ,  $x_0 = 0$  i różnych wartości parametru  $r$  wymienionych w legendzie rysunku.





RYSUNEK 3. Funkcja Greena dla modelu Tsallisa. Funkcje zostały wyznaczone dla  $D_\alpha = 2.5$ ,  $t = 100$ ,  $x_0 = 0$  i różnych wartości parametru subdyfuzji  $\alpha$  wymienionych w legendzie rysunku.

4.3. **Model Gaussa.** Funkcja Greena dla jednorodnego nieograniczonego układu dla modelu Gaussa może być otrzymana z równania (4.5) w granicy  $r \rightarrow 1^-$  [25]

$$(4.8) \quad G_G(x, t; x_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi D_\alpha t^\alpha}} \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{2D_\alpha t^\alpha}\right).$$

Przykładowe wykresy tej funkcji znajdują się na rysunku 4.

4.4. **Model ułamkowy.** Subdyfuzję w ramach modelu ułamkowego opisuje się przy pomocy równania różniczkowego z ułamkową pochodną czasową Riemanna-Liouville'a [7, 25, 29, 30]

$$(4.9) \quad \frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \tilde{D}_\alpha \frac{\partial^{1-\alpha}}{\partial t^{1-\alpha}} \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2},$$

gdzie

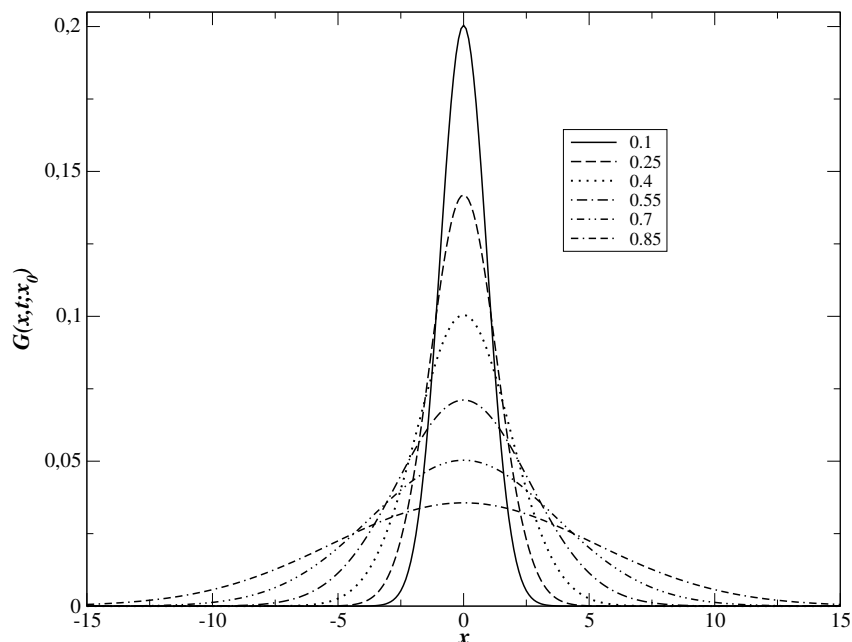
$$(4.10) \quad \tilde{D}_\alpha = \frac{\Gamma(1 + \alpha) D_\alpha}{2}.$$

Pochodna Riemanna-Liouville'a  $d^\alpha f(t)/dt^\alpha$  definiujemy dla  $\alpha > 0$

$$(4.11) \quad \frac{\partial^\alpha f(t)}{\partial t^\alpha} = \frac{1}{\Gamma(n - \alpha)} \frac{\partial^n}{\partial t^n} \int_0^t d\tau \frac{f(\tau)}{(t - \tau)^{1+\alpha-n}},$$

gdzie  $n - 1 \leq \alpha < n$ . Funkcja Greena dla równania (4.9) jest następująca (indeks dolny  $F$  oznacza model ułamkowy)

$$(4.12) \quad G_F(x, t; x_0) = \frac{1}{2\sqrt{\tilde{D}_\alpha}} f_{\alpha/2-1, \alpha/2} \left( t; \frac{|x - x_0|}{\sqrt{\tilde{D}_\alpha}} \right),$$



RYSUNEK 4. Funkcja Greena dla modelu Gaussa. Funkcje zostały wyznaczone dla  $D_\alpha = 2.5$ ,  $t = 100$ ,  $x_0 = 0$  i różnych wartości parametru subdyfuzji  $\alpha$  wymienionych w legendzie rysunku.

gdzie

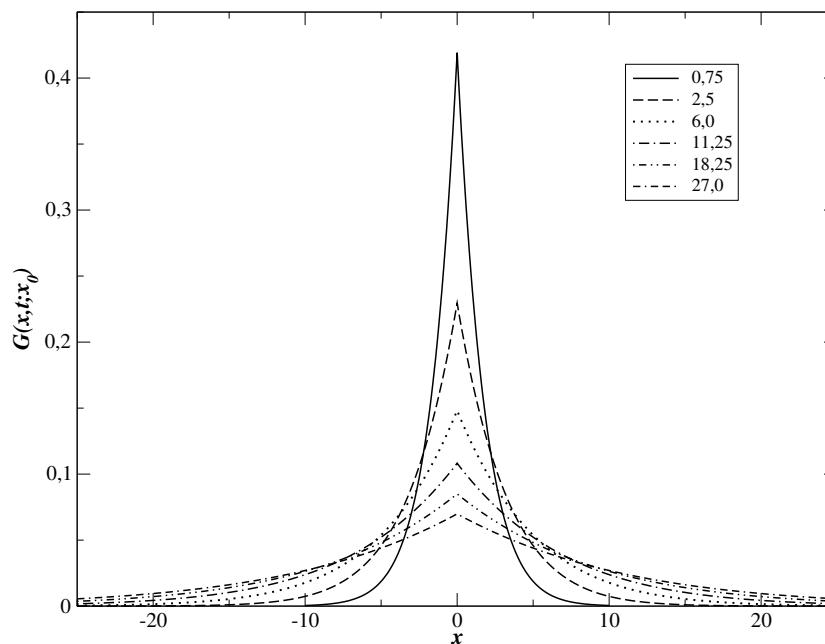
$$(4.13) \quad f_{\nu,\beta}(t; a) = \frac{1}{t^{1+\nu}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{\Gamma(-k\beta - \nu)k!} \left(-\frac{a}{t^\beta}\right)^k,$$

$\beta, a > 0$ , funkcja  $f$  może być także przedstawiona przy pomocy funkcji Foxa [21]. Przykładowe wykresy funkcji Greena dla modelu ułamkowego zaprezentowane są na Rys. 5.

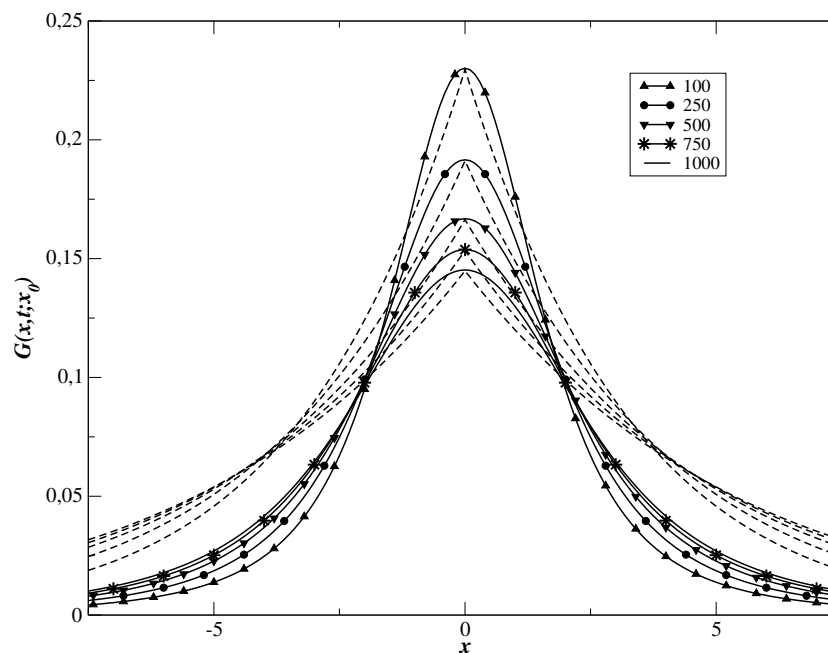
## 5. PORÓWNANIE FUNKCJI GREENA OTRZYMANYCH W RAMACH RÓŻNYCH MODELII

Wykresy na rysunku 6 przedstawiają funkcje Greena dla modeli Sharma-Mittala i ułamkowego. Pewne podobieństwo funkcji Greena dla obydwu modeli oraz fakt, że spełniają one równanie (1.1) nie oznacza, że są sobie równoważne, bowiem dla ustalonego  $t$  i  $x \rightarrow \pm\infty$ ,  $G_{SM}(x, t; x_0) \rightarrow (1/|x|)^{2/(1-r)}$  podczas gdy  $G_F(x, t; x_0) \sim |x| \exp(-a|x|^{1/(1-\alpha/2)})$  ( $a$  jest dodatnią stałą) ma charakter wykładniczy i zależy od  $\alpha$ .

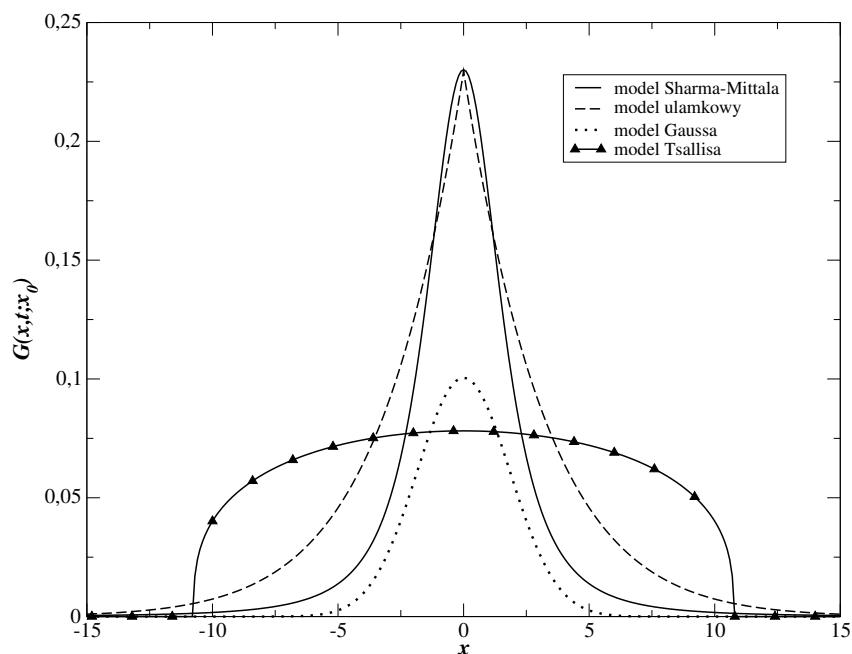
Rysunek 7 przedstawia porównanie funkcji Greena dla modeli rozważanych w tym artykule. Funkcje Greena dla modeli Sharma-Mittala i ułamkowego są podobne dla pewnych wartości parametru  $r$ , natomiast funkcje Greena dla modeli Tsallisa i Gaussa znacznie odbiegają od dwóch pierwszych, co możemy wytłumaczyć faktem, że model Tsallisa funkcjonuje dla  $r > 1$  [39], a model Gaussa – gdy  $r \rightarrow 1^-$ .



RYSUNEK 5. Funkcje Greena dla modelu ułamkowego. Funkcje zostały wyznaczone dla  $\alpha = 0.4$ ,  $t = 100$ ,  $x_0 = 0$  i różnych wartości współczynnika subdyfuzji  $D_\alpha$  wymienionych w legendzie rysunku.



RYSUNEK 6. Porównanie funkcji Greena dla modeli Sharma-Mittala (linia ciągła) i ułamkowego (linia przerywana). Funkcje zostały wyznaczone dla  $\alpha = 0.4$ ,  $D_\alpha = 2.5$ ,  $r = 0.406$ ,  $x_0 = 0$  i różnych wartości  $t$  wymienionych w legendzie rysunku.



RYSUNEK 7. Porównanie funkcji Greena dla modeli Sharma-Mittala (linia ciągła), ułamkowego (linia przerywana), Gaussa (linia kropkowana) i Tsallisa (linia ciągła z symbolami). Funkcje zostały wyznaczone dla  $\alpha = 0.4$ ,  $D_\alpha = 2.5$ ,  $r = 0.406$ ,  $t = 100$  i  $x_0 = 0$ .

## 6. UWAGI KOŃCOWE

W artykule porównane zostały rozkłady gęstości prawdopodobieństwa subdyfuzyjnej cząsteczki w funkcji położenia i czasu (czyli funkcje Greena), wyznaczone jako rozwiązania równań nieliniowych rzędu całkowitego i liniowych z pochodnymi rzędu ułamkowego. Równania te zostały otrzymane z różnych formalizmów: z formalizmu opartego na entropiach nieaddytywnych oraz z formalizmu *continuous time random walk* mającego stochastyczny charakter. Parametry występujące w poszczególnych równaniach nieliniowych zostały dobrane tak, aby wszystkie funkcje Greena, wyznaczone z tych równań, prowadziły do relacji (1.1). Pomimo tej wspólnej cechy nadal występują jakościowe różnice we własnościach tych równań i ich rozwiązań, przejawiające się np. w tym, że funkcje Greena nieliniowego równania wyprowadzonego w oparciu o entropię Sharma-Mittala w pewnych przypadkach są rozwiązaniami o ograniczonym nośniku, w przeciwieństwie do funkcji Greena wyprowadzonych z ułamkowego równania subdyfuzji.

Modele subdyfuzji uzyskane z formalizmu *continuous time random walk* i z wykorzystaniem entropii nieaddytywnych nie są sobie nierównoważne. Przyczyna tego wydaje się być następująca. Modelując subdyfuzję uogólniamy odpowiedni model dyfuzji normalnej, czyniąc pewne specjalne założenia. W przypadku formalizmu *continuous time random walk* założeniem tym jest, że zmieniamy rozkład czasu oczekiwania cząsteczki na przeskok tak, aby średni czas oczekiwania na przeskok był nieskończony (od strony technicznej odpowiednio zmieniamy transformatę Laplace'a tego rozkładu). Rezultatem tego założenia jest otrzymanie liniowego równania subdyfuzji z czasową pochodną rzędu ułamkowego. W ramach formalizmu wykorzystującego entropię, do

opisu subdyfuzji musi zostać użyta entropia nieaddytywna. Przez maksymalizację entropii nieaddytywnej, przy użyciu metody mnożników Lagrange’a z ograniczeniami nałożonymi na tzw.  $q$ -momenty (w przypadku dyfuzji normalnej ograniczenia dotyczą zwykłych momentów), można otrzymać funkcje Greena dla subdyfuzji (patrz np. [41]). Uzyskane w ten sposób funkcje są także rozwiązaniami nieliniowego równania cząstkowego z pochodnymi rzędu naturalnego. Równania nieliniowe otrzymywane są również przez wyrażenie strumienia jako pochodnej funkcjonalnej entropii nieaddytywnej względem prawdopodobieństwa oraz zastosowanie równania ciągłości [25]. Okazuje się, że założenia przyjęte w obu modelach nie są porównywalne. Zwróćmy uwagę na to, że w niektórych przypadkach funkcje Greena dla formalizmu opartego na entropiach nieaddytywnych mają nośnik ograniczony; nie są wówczas rozkładami nieskończenie podzielными. Nie można zatem transportu cząsteczki przedstawić wówczas jako sumy pojedynczych przeskoków. Uzasadnia to pogląd, że złożenia mają inny charakter i trudno je ze sobą porównywać.

Istnieją procesy dla których znalezienie odpowiedniego stochastycznego równania subdyfuzji sprawia pewne trudności, czego przykładem jest proces anomalnego błędzenia losowego w układzie, w którym jego granice zmieniają swe położenie. Proces taki opisuje np. losowe poszukiwanie pokarmu przez zwierzęta na ograniczonym terenie [3, 27]. W takiej sytuacji uzasadnione wydaje się być zastosowanie równań wyprowadzonych w oparciu o entropie nieaddytywne, które dają funkcje Greena o ograniczonym nośniku. Można powiedzieć, że w tym przypadku ograniczony nośnik jest „zaletą” rozkładu.

Parametry  $q$  i  $Q_i$  mogą być wyznaczone z równań (4.1), (4.2), (4.3) i (4.4). Parametry  $\alpha$  i  $D_\alpha$  są zdefiniowane przez relację (1.1), ale relacja ta nie daje możliwości wyznaczenia ich wartości na podstawie eksperymentów. W tej sytuacji potrzebne są inne funkcje, które mogą być mierzalne eksperymentalnie. Jedną z takich funkcji jest czasowa ewolucja ilości substancji  $M(t; x_M)$  uwolnionej z układu, w którym cienka membrana umieszczona w punkcie  $x_M$  oddziela jednorodny roztwór zajmujący obszar  $(-\infty, x_M)$  od rozpuszczalnika; membrana jest wówczas traktowana jak całkowicie absorbująca ściana lub czasowa ewolucja strumienia  $J(t; x_M)$  przepływającego przez tę membranę, z których można wyznaczyć parametry subdyfuzji. Innymi metodami wyznaczenia parametrów subdyfuzji i następnie wartości parametrów  $q$  i  $Q_i$  jest czasowa ewolucja warstwy przymembranowej [22, 23] lub czasowa ewolucja frontu reakcji w układzie w którym występują reakcje chemiczne [24].

#### LITERATURA

- [1] K.H. Andersen, P. Castiglione, A. Mazzino, A. Vulpiani, *Simple stochastic models showing strong anomalous diffusion*, Eur. Phys. J. B 18, 447–452, 2000. doi:10.1007/s100510070032
- [2] C. Beck, *Generalised information and entropy measures in physics*, Contemporary Phys. 50, 495–510, 2009. doi:10.1080/00107510902823517
- [3] O. Bénichou, M. Coppey, P.H. Suet, R. Voituriez, *Optimal search strategies for hidden targets*, Phys. Rev. Lett. 94, 198101, 2005. doi:10.1103/PhysRevLett.94.198101
- [4] L. Borland, F. Pennini, A. Plastino, A. Plastino, *The nonlinear Fokker–Planck equation with state-dependent diffusion — a nonextensive maximum entropy approach* Eur. Phys. J. B 12, 285–297, 1999. doi:10.1007/s100510051006
- [5] A. Bouchaud, J. Georges, *Anomalous diffusion in disordered media: Statistical mechanisms, models and physical applications*, Phys. Rep. 195, 127–293, 1990. doi:10.1016/0370-1573(90)90099-N
- [6] A.V. Chechkin, R. Gorenflo, I.M. Sokolov, *Retarding subdiffusion and accelerating superdiffusion governed by distributed-order fractional diffusion equation*, Phys. Rev. E 66, 046129, 2002. doi:10.1103/PhysRevE.66.046129

- [7] A. Compte, *Stochastic foundations of fractional dynamics*, Phys. Rev. E 53, 4191–4193, 1996. doi:10.1103/PhysRevE.53.4191
- [8] A. Compte, D. Jou, *Non-equilibrium thermodynamics and anomalous diffusion* J. Phys. A: Math. Gen. 29, 4321–4329, 1996. doi:0.1088/0305-4470/29/15/007
- [9] G. Drazer, H. Wio, C. Tsallis, *Exact time-dependent solutions for anomalous diffusion with absorption*, Granular Matter 3, 105–107, 2001. doi:10.1007/PL00010883
- [10] B. Dybiec, E. Gudowska-Nowak, *Subordinated diffusion and continuous time random walk asymptotics*, Chaos 20, 043129, 2010. doi:10.1063/1.3522761
- [11] T.D. Frank, *A Langevin approach for the microscopic dynamics of nonlinear Fokker-Planck equations*, Physica A 301, 52–62, 2001. doi:10.1016/S0378-4371(01)00345-4
- [12] T.D. Frank, *Generalized Fokker-Planck equations derived from generalized linear nonequilibrium thermodynamics*, Physica A 310, 397–412, 2002. doi:10.1016/S0378-4371(02)00821-X
- [13] T.D. Frank, *Stochastic feedback, nonlinear families of Markov processes, and nonlinear Fokker-Planck equations*, Physica A 331, 391–408, 2004. doi:10.1016/j.physa.2003.09.056
- [14] T.D. Frank, *Nonlinear Fokker-Planck Equations. Fundamental and Applications*, Springer 2005.
- [15] T.D. Frank, *Nonextensive cutoff distributions of postural sway for the old and the young*, Physica A 388, 2503–2510, 2009. doi:10.1016/j.physa.2009.03.003
- [16] T.D. Frank, A. Daffertshofer, *Exact time-dependent solutions of the Rényi Fokker-Planck equation and the Fokker-Planck equations related to the entropies proposed by Sharma and Mittal*, Physica A, 285, 351–366, 2000. doi:10.1016/S0378-4371(00)00178-3
- [17] T.D. Frank, R. Friedrich, *Estimating the nonextensivity of systems from experimental data: a nonlinear diffusion equation approach*, Physica A 347, 65–76, 2005. doi:10.1016/j.physa.2004.08.031
- [18] G. Guigas, M. Weiss, *Sampling the Cell with Anomalous Diffusion* *The Discovery of Slowness*, Biophys. J. 94, 90, 2008. doi:0.1529/biophysj.107.117044
- [19] A. Kamińska, T. Srokowski, *Stochastic equation for a jumping with long-time correlation time*, Phys. Rev. E 64, 051102, 2004. doi:10.1103/PhysRevE.64.051102
- [20] A. Klemm, R. Metzler, R. Kimmich, *Diffusion on random-site percolation clusters: theory and NMR microscopy experiments with model objects*, Phys. Rev. E 65, 021112, 2002. doi:10.1103/PhysRevE.65.021112
- [21] T. Kosztolowicz, *From the solutions of diffusion equation to the solutions of subdiffusive one*, J. Phys. A 37, 10779–10789, 2004. doi:10.1088/0305-4470/37/45/005
- [22] T. Kosztolowicz, K. Dworecki, S. Mrówczyński, *Measuring subdiffusion parameters*, Phys. Rev. E 71, 041105, 2005. doi:10.1103/PhysRevE.71.041105
- [23] T. Kosztolowicz, K. Dworecki, S. Mrówczyński, *How to measure subdiffusion parameters*, Phys. Rev. Lett. 94, 170602, 2006. doi:10.1103/PhysRevLett.94.170602
- [24] T. Kosztolowicz, K.D. Lewandowska, *Time evolution of the reaction front in a subdiffusive system*, Phys. Rev. E 78, 066103, 2008. doi:10.1103/PhysRevE.78.066103
- [25] T. Kosztolowicz, K.D. Lewandowska, *First passage time for subdiffusion: Nonextensive entropy approach versus fractional model*, Phys. Rev. E 86, 021108, 2012. doi:10.1103/PhysRevE.86.021108
- [26] T. Kosztolowicz, K.D. Lewandowska, *The nonextensive entropy approach versus the stochastic in describing subdiffusion*, Acta Phys. Pol. B 43, 1043–1051, 2012. doi:10.5506/APhysPolB.43.1043
- [27] L.D. Kramer, R.L. McLaughlin, *The Behavioral Ecology of Intermittent Locomotion No Access*, Amer. Zool. 42, 137, 2001. doi:10.1668/0003-1569(2001)041[0137:TBEOL]2.0.CO;2
- [28] K. Luby-Phelps *The physical chemistry of cytoplasm and its influence on cell function: an update*, Mol. Biol. Cell 24, 2593, 2013. doi:10.1091/mbc.E12-08-0617
- [29] R. Metzler, J. Klafter, *The random walk's guide to anomalous diffusion: A fractional dynamics approach*, Phys. Rep. 339, 1–77, 2000. doi:10.1016/S0370-1573(00)00070-3
- [30] R. Metzler, J. Klafter, *The restaurant at the end of the random walk: recent developments in the description of anomalous transport by fractional dynamics*, J. Phys. A 37, R161–R208, 2004. doi:10.1088/0305-4470/37/31/R01
- [31] A. Plastino, A. Plastino, *Non-extensive statistical mechanics and generalized Fokker-Planck equation* Physica A 222, 347–354, 1995. doi:10.1016/0378-4371(95)00211-1
- [32] F. Reif, *Fizyka statystyczna*, PWN, Warszawa 1973.

- [33] A. Scarfone, T. Wada, *Lie symmetries and related group-invariant solutions of a nonlinear Fokker-Planck equation based on the Sharma-Taneja-Mittal entropy*, Braz. J. Phys. 39, 475, 2009. doi:10.1590/S0103-97332009000400024
- [34] C. Tsallis, *Nonextensive statistics: theoretical. Experimental and computational evidences and connections*, Braz. J. Phys. 29, 1–35, 1999. doi:10.1590/S0103-97331999000100002
- [35] C. Tsallis, *Introduction to Nonextensive Statistical Mechanics*, Springer 2009.
- [36] C. Tsallis, D. Bukman, *Anomalous diffusion in the presence of external forces: exact time-dependent solutions and their rhermostatical basis* Phys. Rev. E 54, R2197–R2200, 1996. doi:10.1103/PhysRevE.54.R2197
- [37] A. Wehrl, *General properties of entropy*, Rev. Mod. Phys. 50, 221–260, 1978. doi:10.1103/RevModPhys.50.221
- [38] M. Weiss, T. Nilsson *In a mirror dimly: tracing the movements of molecules in living cells*, Trends Cell Biol. 14, 267, 2004. doi:10.1016/j.tcb.2004.03.012
- [39] G. Wilk, Z. Włodarczyk, *Interpretation of the Nonextensivity Parameter  $q$  in Some Applications of Tsallis Statistics and Lévy Distributions*, Phys. Rev. Lett. 84, 2770–2773, 2000. doi:10.1103/PhysRevLett.84.2770
- [40] Z. Wu, J. Zhao, J. Yim, H. Li, *Nonlinear diffusion equations*, World Scientific, 2001.
- [41] D.H. Zanette, *Statistical–thermodynamical foundations of anomalous diffusion*, Braz. J. Phys. 29, 108–124, 1999. doi:10.1590/S0103-97331999000100010

KATARZYNA D. LEWANDOWSKA

ZAKŁAD INFORMATYKI RADIOLOGICZNEJ I STATYSTYKI, GDAŃSKI UNIWERSYTET MEDYCZNY, UL. TUWIMA 15, 80-210 GDAŃSK

Adres e-mail: kale@gumed.edu.pl

TADEUSZ KOSZTOŁOWICZ

INSTYTUT FIZYKI, UNIWERSYTET JANA KOCHANOWSKIEGO W KIELCACH, UL. ŚWIĘTOKRZYSKA 15, 25-406 KIELCE

Adres e-mail: tadeusz.kosztolowicz@ujk.edu.pl