Kapitel 2

Mathematische Methoden

■ 2.1. Motivation

Eigentlich ist zu den Lösungsmethoden linearer Gleichungen schon genug geschrieben worden (z. B. [Metz1996], Abschnitt 3.5, S. 23-26). In diesem Kapitel wird trotzdem die Verwendung von Fourier- und Laplace-Technik zur Erzeugung von Propagatoren und Greenschen Funktionen kurz angedeutet und erweitert.

Der Hauptgrund für dieses Kapitel ist die Verdeutlichung der Verwendbarkeit der Diracschen *Delta-Funktion* als funktionentheoretisch konsistente analytische Funktion. Außerdem soll gezeigt werden, wie mit ihrer Hilfe auch kompliziertere lineare Differentialgleichungen (auch fraktionale) eventuell gelöst werden können, besonders im Hinblick auf die Momentenberechnung.

Die hier vorgestellten Ergebnisse bilden eine wesentliche theoretische Erweiterung, ohne die ein konsistentes Zustandekommen des Programmpakets *FractionalCalculus* nicht möglich gewesen wäre. In der nun folgenden Abhandlung sind die Grundlagen so dargestellt, daß ein Verständnis des Programmpakets zwar hilfreich, aber nicht notwendig ist, um inhaltlich folgen zu können.

■ 2.2. Die Diracsche Delta-Funktion

■ 2.2.1. Singuläre Integrale

Wenn ein bestimmtes Integral bei einer gewissen Parameterwahl divergiert, so hat es durchaus Sinn, die Lösungsgesamtheit in einer möglichst geschlossenen Form darzustellen.

Zur Darstellung dieser eventuell singulären Integralergebnisse eignet sich unter anderem auch die Diracsche Delta-Funktion. Ihr wird trotzdem heute noch von manchen Mathematikern mit Mißtrauen begegnet, da der Übergang in die Singularität unstetig erfolgt.

■ 2.2.2. Die Fourier-Transformation der Eins

■ 2.2.2.1. Eigenschaften der Fourier-Transformation

Die Fourier-Transformation einer Konstante läßt sich auf diejenige der Eins zurückführen. Das Fourier-Integral selbst lautet im Zusammenhang dieser Arbeit und bei der *Mathematica*-Version 3.0 (Es gibt auch Abweichungen davon in anderen Arbeiten hinsichtlich des Vorfaktors und Vorzeichens, zum Beispiel bei *Mathematica* 4.0):

$$\mathcal{F}_x^k[f[x]] := \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{Exp}[+i\,k\,x]\; f[x]\, dx\,. \tag{2.1}$$

Für symmetrische Funktionen mit $\boldsymbol{f[-x] = f[x]}$ kann die Fourier-Transformation in die Cosinus-Transformation überführt werden:

$$\overset{c\,k}{\mathcal{F}}_x[f[x]] := \int_0^{\infty} \mathrm{Cos}[k\,x]\; f[x]\, dx\,. \tag{2.2}$$

Weitere Eigenschaften der Fourier-Transformationen sind im Anhang B dieser Arbeit aufgelistet.

■ 2.2.2.2. Verwendung des Mittelwertsatzes

Die Fourier-Transformation der Eins führt von Gleichung (2.1) auf das Doppelte von Gleichung (2.2), wobei nun ein parametrisiertes Integral zu lösen ist:

$$\mathcal{F}_x^k[1] = 2\,\overset{c\,k}{\mathcal{F}}_x[1] = 2\int_0^{\infty} \mathrm{Cos}[k\,x]\, dx = \begin{cases} \infty & k = 0\,, \\ 0 & k \neq 0\,. \end{cases} \tag{2.3}$$

Die errechneten Ergebnisse sind über den Mittelwertsatz ([Rot1954], II. §13.9, S. 86-87) gut zu verstehen, da bei $\boldsymbol{k \neq 0}$ eine Mittelung über unendlich viele Perioden der Cosinus-Funktion stattfindet. Das Integral über endlich viele Cosinus-Perioden ergibt ohnehin Null.

Andere Zugänge zum Integral (2.3) ergeben unbestimmte Terme. Die Formulierung eines eindeutigen Ergebnisses ist zwar möglich, aber nicht durchgehend akzeptiert.

■ 2.2.2.3. Definition der Delta-Funktion nach Dirac

P. A. M. Dirac gibt nun eine Funktion an, die die Eigenschaften von Gleichung (2.3) besitzt und bei inverser Fourier-Transformation die Eins zurückliefern kann. Diese Delta-Funktion ist über folgende drei Annahmen definiert ([Dir1927], S. 625-626):

$$\delta[x] = 0 \qquad x \neq 0\,, \tag{2.4}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} d x\, \delta[x] = 1\,, \tag{2.5}$$

$$\delta[x] = \delta[\,|\,x\,|]\,. \tag{2.6}$$

In der Originalarbeit von Dirac befindet sich ein Druckfehler bei der Formulierung von Definition (2.5), was die Kritisierbarkeit seiner Arbeit leider verstärkt.

Eine funktionentheoretisch konsistente Konsequenz aus den Definitionen (2.4) bis (2.6) ergibt eine komplexe Phase φ des Integrals in Abhängigkeit von der Richtung des Integrationswegs, die hier gleich in einer möglichst allgemein verwertbaren Darstellung erfolgt:

$$\int_{0}^{\mathrm{Exp}[i\,\varphi]} \delta[x]\, d x = \left(\frac{\mathrm{Exp}[i\,\varphi]}{2}\right). \tag{2.7}$$

Es sei darauf hingewiesen, daß bereits Dirac in seiner Arbeit die Delta-Funktion mit komplexen Argumenten diskutiert ([Dir1927], Gl. (1), S. 627); dieses Ergebnis ist immer noch fundamental:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f[x]\, \delta[a-x]\, d x = f[a]\,. \tag{2.8}$$

■ 2.2.2.4. Bestimmung des Vorfaktors der Fourier-Transformation

Da die Delta-Funktion in der Lösungstheorie linearer Gleichungen eine große Rolle spielt, besteht eine sinnvolle Konvention der Mathematik darin, die Fourier-Transformation der Delta-Funktion auf Eins zu setzen. Mit der oben angeführten Definition der Fourier-Transformation (2.1) ergibt sich zusammen mit Gleichung (2.8) folgendes Ergebnis:

$$\mathcal{F}_x^k[\delta[x]] = 2\,\overset{c}{\mathcal{F}}{}_x^{k}[\delta[x]] = 2\int_0^{\infty} \mathrm{Cos}[k\,x]\, \delta[x]\, d x = 1\,. \tag{2.9}$$

Die Fourier-Transformation der Eins ist also proportional zur Diracschen Delta-Funktion. Die Proportionalitätskonstante ergibt sich aus der inversen Fourier-Transformation unter Ausnutzung der Selbstinversität der Cosinus-Transformation mit Hilfe von Gleichung (2.7):

$$(\mathcal{F}^{-1})_k^x[2\,\pi\,\delta[k]] = \frac{1}{\pi}\,{}^{c}\mathcal{F}_k^{x}[2\,\pi\,\delta[k]] = \frac{2\,\pi}{\pi}\int_0^\infty \mathrm{Cos}[k\,x]\,\delta[k]\,dk = 1\,. \tag{2.10}$$

Die Delta-Funktion schafft also Klarheit, wenn es darum geht, die Vorfaktoren der Fourier-Transformationen gemäß der Definition (2.1) festzulegen. Diese Klarheit ist spätestens bei Einsatz von Computeralgebra notwendig.

■ 2.2.3. Die Mellin-Transformation der Eins

■ 2.2.3.1. Ergebnis aus der Fourier-Transformation

Bereits Mellin weist auf eine enge Verwandtschaft von Fourier- und Mellin-Transformation hin ([Mel1910], §8, S. 324). Eine explizite Durchführung der entsprechenden Transformationen ergibt sich mit Hilfe der Substitutionen $\boldsymbol{t \to -\mathrm{Log}[x]}$ und $\boldsymbol{\zeta \to i\,z}$:

$$\begin{aligned} f[x] = f[e^{-t}] &= \frac{1}{2\,\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\,\zeta\,t}\,d\zeta \int_{-\infty}^{\infty} f[e^{-t}]\,e^{i\,\zeta\,t}\,dt = \\ &= \frac{-i}{2\,\pi\,i}\int_{-\infty}^{\infty} x^{i\,\zeta}\,d\zeta \int_0^\infty f[x]\,x^{-i\,\zeta-1}\,dx = \\ &= \frac{1}{2\,\pi\,i}\int_{-i\,\infty}^{i\,\infty} x^{-z}\,dz \int_0^\infty f[x]\,x^{z-1}\,dx\,. \end{aligned} \tag{2.11}$$

Die Zwischenergebnisse dieser Transformationen (2.11) ergeben mit dem Residuum (2.10) und der Definition (2.6) die Mellin-Transformation der Eins, bei deren Berechnung der Verfasser durch Herrn Professor Dr. W. Wonneberger (Ulm) freundlicherweise unterstützt wurde:

$$\int_0^\infty x^{z-1}\,dx = 2\,\pi\,\delta[\zeta] = 2\,\pi\,\delta[i\,z] = 2\,\pi\,\delta[z]\,. \tag{2.12}$$

■ 2.2.3.2. Mellin-Residuum der Delta-Funktion

Die inverse Mellin-Transformation des Resultats (2.12) ergibt mit dem Integral (2.7) gemäß den Gleichungen (2.11):

$$\frac{1}{2\,\pi\,i}\int_{-i\,\infty}^{i\,\infty}\delta[z]\,x^{-z}\,dz=\left(\frac{1}{2\,\pi}\right). \tag{2.13}$$

Im Sinne der Mellin-Transformation ist somit sogar das Residuum der Delta-Funktion trotz Richtungsabhängigkeit des Integrals (2.7) eindeutig. Eine Berechnung dieses *Mellin-Residuums* über die sonst für stetig erreichbare Singularitäten geltenden Formeln kann mißlingen.

■ 2.2.3.3. Unabhängige Bestätigung

Um keine Inkonsistenzen zu etablieren, ist es sehr lohnend, ein neues Ergebnis auf verschiedene Arten herzuleiten. Deshalb soll die Mellin-Transformation der Eins (2.12) nun auf unabhängigem Wege bestätigt werden. Das Integral selbst gilt als divergent für alle reellen $\boldsymbol{z}$.

Für $\boldsymbol{z \neq 1}$ ergibt die Mellin-Transformation der Eins in den Integrationsintervallen $\boldsymbol{0 \leq x \leq 1}$ und $\boldsymbol{1 \leq x \leq \infty}$ folgende beiden Funktionen, die ihrerseits analytisch fortsetzbar sind:

$$\int_0^\infty x^{z-1}\,dx=\int_0^1 x^{z-1}\,dx+\int_1^\infty x^{z-1}\,dx=\frac{1}{z}-\frac{1}{z}\,, \tag{2.14}$$
$$\mathrm{Re}[z]>0\ \text{ und }\ \mathrm{Re}[z]<0\,.$$

Das Wort "**und**" im Ergebnis (2.14) verwirrt immer wieder, da es zwar den naheliegenden Trugschluß nährt, der Realteil von $\boldsymbol{z}$ müsse *gleichzeitig* positiv und negativ sein, aber trotzdem genügend deutlich macht, daß zunächst einmal zwei verschiedene Gültigkeitsbereiche *gleichzeitig* auseinandergehalten werden müssen, bevor die jeweilige analytische Fortsetzung der Teilergebnisse erfolgt. Das angegebene Integral bereitete dem Verfasser bereits im Rahmen seiner Diplomarbeit Schwierigkeiten ([Süd1997], Abschnitte 3.1.4.3 und 6.3.3, S. 42-44 und 93-94), die aber nun sogar für die Computeralgebra gelöst sind.

Für $\boldsymbol{z=0}$ ergibt die Mellin-Transformation der Eins logarithmische Singularitäten, die nicht über eine analytische Fortsetzung von konvergenten Teilintegralen zu beseitigen sind:

$$\int_0^\infty\frac{dx}{x}=\mathrm{Log}[x]\,|_0^\infty\;=\infty+\infty=\infty\,. \tag{2.15}$$

Da die Mellin-Transformation nach der etablierten Funktionen- und Integraltheorie stets Gültigkeitsbereiche für polfreie Resultate liefert, ist immer eine analytische Fortsetzung im Mellin-Raum in die Polstellen des Ergebnisses hinein erforderlich, damit die inverse Mellin-Transformation über den Residuensatz mit Hilfe dieser Polstellen erfolgen kann (vgl. [Mel1910], Gültigkeitsbereiche von Gl. (40), S. 316).

Bei der Implementation der Mellin-Transformation für die Computeralgebra fiel dem Verfasser diese Eigenschaft der Mellin-Transformation sehr schnell auf, da die Polstellen für die Residuenberechnung immer außerhalb des errechneten Gültigkeitsbereichs der Mellin-Transformierten lagen.

Als Merkregel ergibt sich generell, daß die *Gültigkeitsbereiche im Mellin-Raum* für die Integralkonvergenz des Mellin-Integrals zwar stimmen, aber ansonsten *ignoriert werden müssen*! Es mag sein, daß gerade diese Eigenschaft der Mellin-Transformation so manchen Mathematiker davon abhält, sich näher mit den Möglichkeiten dieser Transformation auseinanderzusetzen.

■ 2.2.3.4. Konsequenzen aus dem Satz von Mellin

Der Satz von Mellin benennt ein Paar aus Funktion und Mellin-Transformierter als reziproke Funktionen und besagt ([Mel1910], S. 323):

> *"Von zwei reziproken Funktionen kann die eine nur dann identisch verschwinden, wenn auch die andere identisch gleich Null ist."*

In der Anwendung auf die soeben erfolgreich unter Verwendung aller Rechenregeln erhaltenen Ergebnisse (2.12) und (2.13) ist der Satz von Mellin der *Existenzbeweis der Diracschen Delta-Funktion*.

Der Verfasser hält den Satz von Mellin für einen der schwerverständlichsten und unbekanntesten Sätze der analytischen Mathematik. Zu seinem Verständnis wäre eine Zusatzvorlesung *Funktionentheorie III* notwendig.

■ 2.2.4. Die Momente der Delta-Funktion

■ 2.2.4.1. Zusammenhang zwischen Mellin-Transformation und Momenten

Die Momentenintegrale der Ordnung m einer Verteilungsfunktion $f[x]$ sind folgendermaßen definiert ([BrS1987], Abschnitt 5.1.3, S. 667 oben):

$$\overline{x^m} = (<x)^m> \;=\; (<x)^m,\; f[x]> \;:= \int_{-\infty}^{\infty} x^m\; f[x]\, dx\,. \tag{2.16}$$

Die Mellin-Transformation ist über folgendes Integral ([Mel1910], §8, Gl. (51), S. 319) gegeben:

$$\mathcal{M}_x^z[f[x]] := \int_0^{\infty} x^{z-1}\; f[x]\, dx\,. \tag{2.17}$$

Symmetrische Momente werden mit den Beträgen $|x|^m$ statt mit x^m berechnet, wobei die Integrationsgrenzen eine symmetrische Verteilungsfunktion $f[x] = f[|x|]$ voraussetzen. Es ergibt sich folgender Zusammenhang zwischen den symmetrischen Momenten $<|x|^m>$ und der Mellin-Transformation einer Funktion:

$$\begin{aligned} &< |x|^m > \;=\; < |x|^m,\; f[|x|] > \;= \\ &= 2\, \mathcal{M}_x^{m+1}[f[x]] = 2 \int_0^{\infty} x^{m+1-1}\; f[x]\, dx\,. \end{aligned} \tag{2.18}$$

■ 2.2.4.2. Berechnung der Delta-Momente

Die symmetrischen Momente der Delta-Funktion ergeben mit den Gleichungen (2.18), (2.7) und (2.6):

$$< |x|^m,\, \delta[x] > \;= \begin{cases} 1 & m = 0\,, \\ 0 & m > 0\,. \end{cases} \tag{2.19}$$

Allgemeiner formuliert ergibt die Mellin-Transformation (2.17) der Delta-Funktion gemäß Beziehung (2.7) eine recht eigenartige Funktion:

$$\mathcal{M}_x^z[\delta[x]] = \left(\frac{0^{z-1}}{2}\right). \tag{2.20}$$

Die Funktion (2.20) ist deshalb sehr eigenartig, weil die inverse Mellin-Transformation von $\mathbf{0^z}$ wieder auf die singuläre Delta-Funktion zurückführt.

■ 2.2.4.3. Möglichkeiten zur Erweiterung der Funktionentheorie

Angesichts von Resultaten wie (2.20) kommt auch ein erfahrener Mathematiker an seine Grenzen. Das formale Weiterrechnen mit den formal erhaltenen Formeln ergibt stets sinnvolle Ergebnisse, wobei selbst ein Computer keine Inkonsistenzen dieser Möglichkeit findet.

Die Resultate (2.19) und (2.20) legen mit (2.18) den Schluß nahe, den Funktionswert von $\mathbf{0}^{z}$ für $z = 0$ unstetig auf Eins zu definieren. Ein direkter Zugang über Grenzwerte der Art $z \to 0$ ist dann freilich nicht möglich, wohl aber eine Motivation über eine Analogie zur Hausdorff-Dimension ([Non1996], Gl. (2.4), S. 37) parametrisierter Grenzwerte:

$$0^{z} := \lim_{\delta \to 0} \delta^{z} . \tag{2.21}$$

Das Eigenartige an der $\mathbf{0}^{z}$-Funktion ist, daß der Betrag der Funktion für alle z eindeutig ist, während die komplexe Phase vor allem für rein imaginäre $z \neq 0$ viele Überraschungen bereithält.

Bei der Abschätzung von Integralkonvergenz wird bei Ergebnistermen der Form x^{z} deshalb für $\mathrm{Re}[x] > 0$ und eventuell noch für $x = 0$ und $\mathrm{Re}[z] > 0$ eine Aussage gemacht. Bereits der Fall $x = 0$ und $z = 0$ erzeugt Auseinandersetzungen, die im jeweils diskutierten Kontext des Resultats noch beendet werden können.

Die Verwendung der Definition (2.21) als analytische Funktion in z scheint etwa so unüblich zu sein wie die Diskussion von $\sqrt{-1}$ vor fünfhundert Jahren. Es mag das Anliegen späterer Arbeiten sein, die ungeklärten Fragen dieser Art aufzuarbeiten. Die analytische Relevanz der $\mathbf{0}^{z}$-Funktion ist immerhin durch die Momente der Delta-Funktion (2.19) aufgezeigt.

■ 2.3. Laplace- und Fourier-Transformation

■ 2.3.1. Bekannte Zusammenhänge

■ 2.3.1.1. Vorgehensweise

Bei der Laplace-Transformation ([BrS1987], Abschnitt 4.4.3.1, S. 634) fraktionaler Diffusionsgleichungen sind der Differentiationssatz und der Faltungssatz ausreichend, um die integrierte Form der zeit-fraktionalen Differentialgleichung (1.26) in eine gewöhnliche Differentialgleichung in der Ortskoordinate $\boldsymbol{x}$ umzuwandeln.

Die Integrationskonstanten, die bei Oldham/Spanier ([OS1974], Abschnitt 8.1, S. 133-136) im Zusammenhang mit fraktionalen Ableitungen angegeben werden, besitzen keinerlei physikalische Relevanz, wie die Diskussion der fraktionalen Anfangswertprobleme (Quellen siehe Kapitel 1.3.2 dieser Arbeit) ergibt. Sie können beim Programmpaket *FractionalCalculus* wahlweise über die Option *OldhamSpanierConstants* → *True* zugeschaltet werden, wenn die Laplace-Transformation ausgeführt wird.

Die anschließende Fourier-Transformation dieser gewöhnlichen Differentialgleichung gelingt, wenn alle Anfangswertprobleme zunächst einmal auf die Diracsche Delta-Funktion gesetzt werden. Es ergibt sich im einfachsten Fall (auch bei fraktionalen Diffusionsgleichungen!) eine algebraische Gleichung, deren inverse Fourier- und inverse Laplace-Transformation auf ein eindeutiges Fundamentalsystem aus Propagatoren führt, das im Rahmen dieser Arbeit als das *optimierte Fundamentalsystem* bezeichnet wird.

Die Gesamtlösung ergibt sich, indem jeweils eine Fourier-Faltung mit den Anfangswertproblemen und den entsprechenden Fundamental-Propagatoren durchgeführt wird.

Andere Lösungstechniken linearer Differentialgleichungen führen zum Beispiel auf eine *Frobeniussche Normalform* ([HT1956], Gl. (11c), S. 188) eines Fundamentalsystems.

■ 2.3.1.2. Begriff Propagator

Ein Propagator ist Bestandteil des optimierten Fundamentalsystems einer partiellen linearen Differentialgleichung. Das zugehörige Anfangswertproblem ist stets die Diracsche Delta-Funktion zur Zeit $t \to 0$.

Bei der hier besprochenen Lösungsstrategie ist die Zeitkoordinate anders zu behandeln als die Raumkoordinaten, da das Anfangswertproblem die räumliche Verteilung $f[x, t \to 0]$ beschreibt und nicht — was auch mathematisch möglich wäre — die zeitliche Entwicklung der Dynamik an einem ganz bestimmten Ort $f[x \to 0, t]$.

Die Fourier-Transformation einer Differentialgleichung kann über die partielle Integration verstanden werden, wenn die sogenannten *natürlichen Randbedingungen*, nämlich das Verschwinden der Funktion und ihrer Ableitungen im Unendlichen, erfüllt sind. Bei Propagatoren ist diese Forderung wegen des Starts bei $t = 0$ als Delta-Funktion als erfüllt anzusehen.

■ 2.3.1.3. Begriff Greensche Funktion

Im Gegensatz zu einem Propagator beschreibt eine Greensche Funktion die standardisierte Lösung einer inhomogenen Differentialgleichung. Nach Hort/Thoma ([HT1956], §107-108, S. 178-182) ist hierbei stets eine Integration mehr auszuführen als bei homogenen Gleichungen.

Um die Grundfunktion zu ermitteln, die zu einer Integration mit der allgemeinen Inhomogenität oder Steuergröße $s[x, t]$ verwendet wird, wird wieder die Diracsche Delta-Funktion, diesmal zeitabhängig, verwendet.

Die ermittelte Greensche Funktion wird im einfachsten Fall einer zeitlichen Laplace-Faltung und einer räumlichen Fourier-Faltung unterzogen, um die allgemeine inhomogene Lösung der Ausgangsgleichung zu erhalten.

2.3.2. Erweiterungen

2.3.2.1. Laplace-Transformation der Delta-Funktion

Die Diracsche Delta-Funktion besitzt aufgrund von Gleichung (2.7) eine eindeutige Laplace-Transformierte:

$$\mathcal{L}_t^p[\delta[t]] = \int_0^\infty e^{-p\,t}\,\delta[t]\,dt = \left(\frac{1}{2}\right). \tag{2.22}$$

Von diesem Ergebnis weichen viele Veröffentlichungen ab. Exemplarisch seien lediglich die Quellen angegeben, die bei *Mathematica* 3.0 in einem Programmkommentar zum Paket *Calculus`DiracDelta* auftauchen: Bei Hoskins [Hos1979] oder Antosik, Mikusinski und Sikorski [AMS1973] ergibt sich das Ergebnis Eins.

2.3.2.2. Konsequenzen für die Computeralgebra

Ein Mathematiker, der mit Bleistift und Papier rechnet, ist in der Lage, einen situativen Kontext der Delta-Funktion konsistent durchzuhalten. Ein Computeralgebrasystem dagegen muß bei derartigen Spezialitäten zu Rechenfehlern führen. Aus diesem Grunde sind die Anforderungen an eine konsistent zu formulierende Mathematik bei Verwendung von Computeralgebra prinzipiell höher als beim traditionellen Rechnen mit Bleistift und Papier.

Aufgrund des situativen Kontextes zur Laplace-Transformation der Delta-Funktion existiert derzeit kein ausgereiftes Computeralgebrasystem, bei dem die Delta-Funktion konsistent oder widerspruchsfrei implementiert wäre. Bei *Mathematica* war es immerhin möglich, im Rahmen dieser Arbeit eine konsistente Implementation der Delta-Funktion zu erreichen. Das Resultat heißt nun aber nicht *DiracDelta*, was den historischen Sachverhalt besser beschreiben würde, sondern *SymmetricalDelta*, da dieser Funktionsname noch nicht vergeben war.

In diesem Zusammenhang erweist sich vor allem ein "offenes" Computeralgebrasystem als brauchbar, da der Nutzer des Programms notfalls die notwendigen Korrekturen am System selbst vornehmen muß. Das Programmpaket *Mathematica* ist "halboffen", was bedeutet, daß eventuelle Änderungen von Funktionen unter einem eigenen Namen zu implementieren sind.

■ 2.3.2.3. Laplace-Faltung mit Delta-Funktion

Die Laplace-Faltung mit einer Delta-Funktion ergibt nach Gleichung (2.7) die Hälfte der gefalteten Funktion:

$$\int_0^t \delta[\tau]\ f[t-\tau]\, d\tau = \int_0^t \delta[t-\tau]\ f[\tau]\, d\tau = \left(\frac{f[t]}{2}\right). \qquad (2.23)$$

Nun ist es freilich nicht sehr praktisch, diesen Faktor $\frac{1}{2}$ beim Vergleich mit der Literatur ständig im Auge zu behalten. Vielmehr ist es angemessen, bei Verwendung der Laplace-Transformation die Funktion $2\,\delta[t]$ anstelle von $\delta[t]$ mit der Inhomogenität der Gleichung zu vertauschen. Die Laplace-Transformierte davon ist dann Eins, und als Greensche Funktion resultiert diejenige Funktion, deren Laplace-Faltung mit der Steuerfunktion die allgemeine Lösung ergibt.

■ 2.3.2.4. Orts- und zeitabhängige Steuerfunktionen

Bei orts- und zeitabhängigen Steuerfunktionen $s[x,\ y,\ z,\ t]$ wird die Unabhängigkeit der Koordinaten ausgenutzt, was auf folgende allgemeinere Inhomogenität zur Ermittlung einer Greenschen Funktion führt:

$$s[x,\ y,\ z,\ t] \to 2\,\delta[x]\,\delta[y]\,\delta[z]\,\delta[t]\,. \qquad (2.24)$$

Bei Gleichungen mit ortsunabhängigen analytischen Koeffizienten, etwa der fraktionalisierten Diffusionsgleichung (1.26), ist die Greensche Funktion im Fundamentalsystem der Propagatoren enthalten. Dies folgt aus der Laplace-Transformation einer entsprechenden Beispielgleichung für $\beta \in \mathbb{N}$:

$$\begin{gathered}\mathcal{L}_t^p\left[\frac{\partial^\beta f[x,\ t]}{\partial t^\beta} - \frac{\partial^2 f[x,\ t]}{\partial x^2} = 2\,\delta[x]\,\delta[t]\right] \\ \Longleftrightarrow \quad p^\beta\,\mathcal{L}_t^p[f[x,\ t]] - \sum_{n=0}^{\beta-1}\delta[x]\,p^{\beta-1-n} - \frac{\partial^2\mathcal{L}_t^p[f[x,\ t]]}{\partial x^2} = \delta[x]\,.\end{gathered} \qquad (2.25)$$

Die völlige Identität des einen der Propagatoren mit der Greenschen Funktion ist damit für $n = \beta - 1$ gezeigt. Schwierigere inhomogene Gleichungen lassen sich also auch eventuell über die homogene Lösung (hier gibt es mehr Lösungsverfahren!) behandeln.

■ 2.3.2.5. Ortsabhängige analytische Koeffizienten

Sind die analytischen Koeffizienten einer Gleichung ortsabhängig, so ist ein besonderes Vorgehen notwendig, um die allgemeine Lösung zu errechnen. Hierzu betrachtet man zunächst einmal das Integral einer Fourier-Faltung:

$$f[x] * g[x] = \int_{-\infty}^{\infty} f[x-a]\, g[a]\, da = \int_{-\infty}^{\infty} f[a]\, g[x-a]\, da\,. \tag{2.26}$$

Wird nun der Propagator aufgebaut, so ist zur Anfangszeit $t \to 0$ eine normale Delta-Faltung gemäß Gleichung (2.8) gegeben. Zu späteren Zeiten ist allerdings nun keine Fourier-Faltung mehr zu rechnen, sondern ein Integral, das die ortsabhängigen Propagatoren mit der Anfangsverteilung als Gewichtung aufsummiert.

Ortsabhängige Propagatoren erhält man freilich nur, indem auch entsprechend $\frac{\delta[x-a]+\delta[x+a]}{2}$ anstelle von $\delta[x]$ als symmetrisches Anfangswertproblem angesetzt wird. Dasselbe Vorgehen ist auch bei der Bildung der Greenschen Funktion zu beachten. Sowohl die Propagatoren als auch die Greensche Funktion hängen nun vom Integrationsabstand a in der Fourier-Faltung (2.26) ab. Bei asymmetrischen Gleichungen ist auch ein asymmetrisches Anfangswertproblem der Form $\delta[x-a]$ zur Findung der Propagatoren anzusetzen.

Diese Zusammenhänge sind bei der Lösung entsprechender Fokker-Planck-Gleichungen (Kapitel 1.2.2.3 und 2.4.1.1 dieser Arbeit) von Bedeutung. Sie sollen hier nicht weiter erörtert werden, da sie den Rahmen dieser Arbeit sprengen würden.

■ 2.3.2.6. Fourier-Transformation des Riesz-Operators

Der Riesz-Operator ist bei Samko et al. ([SKM1993], Gln. (12.1)-(12.4), S. 214) so dargestellt, daß alle symmetrischen und asymmetrischen Varianten des Riesz-Operators damit zusammengebaut werden können.

Für die Diskussion von Diffusion ohne Schwerpunktverschiebung reicht folgende Definition aus, die auch als Fourier-Faltung mit der Potenz der Betragsfunktion zu verstehen ist und dadurch auf die Mellin-Transformation der Cosinus-Funktion führt ([Obe1974], Formeln I.1.2 und I.5.2, S. 11 und 42; [EMOT1953], Gln. 1.2(7) und 1.2(15), S. 3 und 5):

$$\begin{aligned}
&\mathcal{F}_x^k[-|x|^{-\mu-1}] = -\int_{-\infty}^{\infty} e^{i k x} (|x|)^{-\mu-1}\, dx = \\
&= -2\int_0^{\infty} \text{Cos}[|k|\; x]\, x^{-\mu-1}\, dx = -\mathcal{M}_x^{-\mu}[\text{Cos}[|k|\; x]] = \\
&= -(|k|)^{\mu}\, \Gamma[-\mu]\, \text{Cos}\left[-\frac{\mu\,\pi}{2}\right] = -\frac{2^{-\mu}\sqrt{\pi}\;\Gamma[-\frac{\mu}{2}]}{\Gamma\left[\frac{\mu+1}{2}\right]}\,(|k|)^{\mu}\,.
\end{aligned} \tag{2.27}$$

Der hier gesuchte Riesz-Operator ist so aufzubauen, daß für $\boldsymbol{\mu \to 2}$ die Fourier-Transformierte der zweiten Ortsableitung resultiert, also $\boldsymbol{-k^2}$ als Vorfaktor.

Dieses Ziel wird durch folgende Fourier-Faltung erreicht, wobei beim Riesz-Operator eine Integrationsordnung $\boldsymbol{-\mu}$ steht und $\boldsymbol{\mu}$ hier die fraktionale Differentiationsordnung angeben soll:

$$\begin{aligned}
&-\mathcal{R}_x^{-\mu}[f[x]] = -\frac{2^{\mu}\,\Gamma\left[\frac{\mu+1}{2}\right]}{\sqrt{\pi}\;\Gamma[-\frac{\mu}{2}]}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f[y]}{|x-y|^{\mu+1}}\, dy = \\
&= (\mathcal{F}^{-1})_k^x[-(|k|^{\mu})\,\mathcal{F}_x^k[f[|k|]]]\,.
\end{aligned} \tag{2.28}$$

Die Formulierung dieses Operators geht auf die Arbeit von V. Seshadri und B. J. West [SWe1982] zurück. Die Fourier-Transformation des für die driftfreie Diffusion möglichen Riesz-Operators ist mit Gleichung (2.28) gegeben.

■ 2.4. Mellin-Transformation

■ 2.4.1. Differenzengleichungen

■ 2.4.1.1. Erzeugung von linearen Differenzengleichungen

Die Laplace-Transformation einer zeit-fraktionalen Diffusionsgleichung führt auch für ortsabhängige Diffusionsparameter — etwa potenzabhängig in der Notation nach Risken ([Ris1984], Kap. 1.2.1, S. 4-5) — auf eine gewöhnliche Differentialgleichung in der Ortskoordinate, deren inhomogene Lösung gefragt ist — im Falle des genannten Beispiels auf Grundgleichungen der Besselfunktionen.

Die Mellin-Transformation einer gewöhnlichen homogenen Differentialgleichung führt auf eine entsprechende Differenzengleichung ([Mes1959], Kap. X.1, S. 133-134). Ist der Zusammenhang (2.25) zumindest für spezielle Anfangswertprobleme (etwa für $\delta[x-0]$) gesichert, so genügt die Lösung der homogenen Differenzengleichung des Mellin-Raums zur Lösung der ursprünglich inhomogenen Differentialgleichung.

■ 2.4.1.2. Lösung von linearen Differenzengleichungen

Es existieren Lösungsverfahren (siehe [Mes1959]) homogener und inhomogener linearer Differenzengleichungen. Manchmal läßt sich eine der homogenen Lösungen einer Differenzengleichung erraten, besonders wenn die Lösungsfunktion der zugrundeliegenden Gleichung als Foxsche H-Funktion gegeben ist. Dann besteht nämlich die Mellin-Transformierte der Lösung nur aus summenfreien Brüchen der Eulerschen Gamma-Funktion. Nähere Angaben hierzu finden sich in der Diplomarbeit des Verfassers ([Süd1997], Abschnitte 5.1.1 und 6.1, S. 65-66 und 75-79).

Im Mellin-Raum ist es recht einfach, durch Kombinatorik und geschicktes Kürzen mit Hilfe des Ergänzungssatzes ([EMOT1953], Gln. 1.2(6) und 1.2(7), S. 3) eine gewonnene Hauptlösung in weitere Hauptlösungen (vgl. [Mes1959], Anm. auf S. 41) im Sinne des Abtasttheorems ([Mar1986], Kap. 6, S. 127-131) umzurechnen. Diese Möglichkeit wird bei Mellin unter der Bezeichnung "passende Substitution" ([Mel1910], Ende von §5, S. 314) angesprochen.

Es war im Rahmen dieser Arbeit leider nicht möglich, die Leistungsfähigkeit der Differenzengleichungen auszuprobieren. In der Diplomarbeit von S. Hoffmann [Hoff2000] finden sich einige verwirklichte Lösungsverfahren und viele interessante Literaturangaben zu diesem Thema.

■ 2.4.1.3. Foxsche H-Funktionen

Die inverse Mellin-Transformation der summenfreien Brüche aus Eulerschen Gamma-Funktionen ergibt gemäß Dixon/Ferrar [DF1936] eine Funktionenklasse, die heute [MS1978] als Foxsche H-Funktion bezeichnet wird, weil C. Fox [Fox1961] von der Arbeit seiner Vorgänger nichts wußte.

Kommen summenbehaftete Brüche aus Eulerschen Gamma-Funktionen als Lösung zustande, so ergeben sich Baumannsche ℵ-Funktionen [SBN1998], eine Verallgemeinerung der Saxenaschen I-Funktionen [Sax1982].

Die Darstellung der Foxschen H-Funktion als inverse Mellin-Transformation ergibt ([SBN1998], Gl. (1), S. 401) für positive $\boldsymbol{A_j}$ und $\boldsymbol{B_j}$ mit $\boldsymbol{\{m,\, n,\, p,\, q\} \in \mathbb{N}_0}$:

$$\mathcal{H}^{m,n}_{p,q}\left[x \left| \begin{matrix} \{\{a_1, A_1\}, \ \ldots, \{a_n, A_n\}\} \mid \ \ \{\{a_{n+1}, A_{n+1}\}, \ \ldots, \{a_p, A_p\}\} \\ \{\{b_1, B_1\}, \ \ldots, \{b_m, B_m\}\} \mid \ \ \{\{b_{m+1}, B_{m+1}\}, \ \ldots, \{b_q, B_q\}\} \end{matrix} \right.\right] =$$

$$= \frac{1}{2\,\pi\,i} \int_{-i\,\infty}^{i\,\infty} \frac{\left(\prod_{j=1}^{m} \Gamma[b_j + B_j\, z]\right) \left(\prod_{j=1}^{n} \Gamma[1 - a_j - A_j\, z]\right)}{\left(\prod_{j=m+1}^{q} \Gamma[1 - b_j - B_j\, z]\right) \left(\prod_{j=n+1}^{p} \Gamma[a_j + A_j\, z]\right)}\, x^{-z}\, dz\,. \tag{2.29}$$

Noch kompliziertere Mellin-Barnes-Integrale ergeben sich, wenn die Riemannsche oder gar Hurwitzsche Zeta-Funktion oder gleich die noch allgemeinere Lerchsche Zeta- oder Phi-Funktion im Mellin-Raum als Lösung auftaucht (Beispiele hierfür: [Obe1974], Formeln I.3.24-I.3.26 und A.16, S. 28 und 272). Die numerische Reihe derartiger Funktionen wird normalerweise über den Residuensatz unter Ausnutzung der Vorarbeiten von Mellin [Mel1910] und Barnes [Bar1908] vorgenommen.

Der wesentliche Unterschied zwischen einer Potenzreihe und einer analytischen Funktion besteht nach Barnes [Bar1908] darin, daß eine Funktion möglichst auf der gesamten komplexen Zahlenebene eine analytische Fortsetzung und entsprechende analytische Eigenschaften besitzt, während die Potenzreihe für die Numerik interessant ist.

Im Falle der als Beispiel erwähnten Besselschen Differentialgleichung ergibt die Mellin-Transformation eine einfache Differenzengleichung, wobei die inverse Mellin-Transformation der insgesamt vier Hauptlösungen nicht nur ein optimiertes Fundamentalsystem aus zwei modifizierten Besselfunktionen erster Art ergibt, sondern auch die für die Propagatoren so wichtige modifizierte Besselfunktion zweiter Art. Die vierte Hauptlösung läßt sich nicht der inversen Mellin-Transformation unterziehen.

■ 2.4.2. Momentenberechnung aus der Laplace-Transformierten

■ 2.4.2.1. Motivation

Da es in dieser Arbeit eher um die Diskussion der theoretischen Varianz im Vergleich mit Meßwerten geht, ist es wichtig, die Momente einer Lösungsfunktion auch dann noch sicher zu berechnen, wenn die Lösungsfunktion selbst schon zu kompliziert ist, also den Rahmen der Foxschen H-Funktionen sprengt.

Da die Momente gemäß Gleichung (2.18) mit der Mellin-Transformation zusammenhängen, ist ihre Berechnung prinzipiell einfacher als die Berechnung einer fertigen Lösungsfunktion. Der tiefere Grund hierfür ist der Faltungssatz der Mellin-Transformation ([Obe1974], Formeln I.1.13-I.1.15, S. 12), der zum Beispiel die Mellin-Transformierte einer Fourier-Faltung noch in eine Foxsche H-Funktion überführt.

■ 2.4.2.2. Berechnung

Da die Laplace-Transformierte der Lösungsfunktion bereits die Ortskoordinaten besitzt, können die Momente der Laplace-Transformierten auch direkt berechnet werden. Von dem entsprechenden Resultat ist die inverse Laplace-Transformierte in die Zeitkoordinate zu bilden.

Nach Oberhettinger ([Obe1974], Gl. (c'), S. 3) ergibt sich als Mellin-Transformierte einer Laplace-Transformation

$$\mathcal{M}_p^y[\mathcal{L}_t^p[f[x, t]]] = \Gamma[y]\, \mathcal{M}_t^{1-y}[f[x, t]]\,, \tag{2.30}$$

was die Berechnung der inversen Laplace-Transformation ebenfalls über die Mellin-Transformation ermöglicht.

Ergibt etwa die Momentenberechnung einer Laplace-Transformierten eine Foxsche H-Funktion, so resultiert wegen des Ergebnisses (2.30) auch das Moment der Verteilung als Foxsche H-Funktion. Die Verteilungsfunktion selbst ist dann sehr viel komplizierter.

■ 2.4.3. Momentenberechnung aus der Fourier-Transformierten

■ 2.4.3.1. Direkte Berechnung

Ist nur die Fourier-Transformierte einer Verteilungsfunktion bekannt, so gestaltet sich die Momentenberechnung deutlich trickreicher als bei der Laplace-Transformierten, da jetzt die Ortskoordinate selbst gar nicht bekannt ist.

Trotzdem kann man allgemein für symmetrische Fourier-Transformierte (solche sind bei diffusiven Vorgängen ohne Drift vorrangig zu diskutieren) folgenden Zusammenhang herleiten, und zwar über die Mellin-Transformation einer inversen Fourier-Transformierten mit Hilfe des Fubini-Theorems ([SKM1993], Gl. (1.32), S. 9), das die Vertauschbarkeit von Integralen regelt, wobei wieder wie im Zusammenhang (2.27) die Mellin-Transformierte der Cosinus-Funktion auftaucht:

$$
\begin{aligned}
< (\,|\,x\,|^m),\, (\mathcal{F}^{-1})_k^x[f[\,|\,k\,|,\, t]] > &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{|\,x\,|^m}{2\,\pi} \left(\int_{-\infty}^{\infty} f[\,|\,k\,|,\, t]\, e^{-i\,k\,x}\, dk \right) dx = \\
&= \frac{4}{2\,\pi} \int_0^{\infty} \left(\int_0^{\infty} \mathrm{Cos}[\,|\,k\,|\;\; x]\, x^m\, dx \right) f[k,\, t]\, dk = \\
&= \frac{2^{1+m}\, \Gamma[\frac{1}{2} + \frac{m}{2}]\, \mathcal{M}_k^{-m}[f[k,\, t]]}{\sqrt{\pi}\; \Gamma[-\frac{m}{2}]}\,.
\end{aligned}
\tag{2.31}
$$

Die Mellin-Transformierte der Fourier-Transformierten muß recht günstig gebaut sein, damit das Ergebnis (2.31) mit $\boldsymbol{m \to 2}$ die Berechnung der Varianz zuläßt.

■ 2.4.3.2. Momente einer Fourier-Faltung

Die Momente einer Fourier-Faltung ergeben ein wesentlich einfacheres Theorem (Anhang A dieser Arbeit), das hier wenigstens Erwähnung finden soll:

$$
< (x^m),\; f[x] * g[x] > \; = \sum_{k=0}^{m} \binom{m}{k} < x^k,\; f[x] > \;\; < x^{m-k},\, g[x] > \;. \tag{2.32}
$$

Der Unterschied zwischen den Gleichungen (2.31) und (2.32) besteht vor allem darin, daß einmal die symmetrischen Momente und einmal die tatsächlichen Momente berechnet werden.

■ 2.5. Zusammenfassung

Die für das Varianztheorem (1.14) so bedeutsame Diracsche Delta-Funktion wurde als funktionentheoretisch konsistente analytische Funktion der komplexen Zahlenebene vorgestellt.

Die Verwendung der Delta-Funktion bei Anwendung von Laplace- und Fourier-Transformation auf eine fraktionale lineare Gleichung wurde besprochen. Es ergeben sich optimierte Fundamentalsysteme aus Propagatoren, die eventuell sogar die Greensche Funktion der Inhomogenität beinhalten.

Der für die Diskussion driftfreier Diffusion verwendbare Riesz-Operator nach B. J. West [SWe1982] wurde als elegant eingerichtete Fourier-Faltung vorgestellt.

Die direkte Mellin-Transformation einer linearen Differentialgleichung führt oft auf eine Differenzengleichung, deren Lösungsmannigfaltigkeit weit über die Mellin-Transformierten der Foxschen H-Funktionen hinausführen kann.

Die Berechnung von Momenten aus der Laplace- oder Fourier-Transformierten einer Verteilungsfunktion wurde vorgestellt. Dieses Vorgehen erleichtert die analytische Diskussion gewaltig, da die Varianz eines Lösungspropagators prinzipiell eine einfachere Funktionenklasse darstellt als der Lösungspropagator selbst.