

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Calibração de modelo para voo subdifusivo por equação de difusão parcial fracionária

Ana P. Pereira¹

Universidade Federal de Itajubá - UNIFEI, Itabira, MG

Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais - CEFET, Belo Horizonte, MG

J. P. Fernandes²

Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais - CEFET, Belo Horizonte, MG

A. P. F. Atman³

Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais - CEFET, Belo Horizonte, MG

J. L. Acebal⁴

Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais - CEFET, Belo Horizonte, MG

Resumo. Vários fenômenos físicos descritos por distribuições estatísticas com dependências no espaço e no tempo resistem à descrição por meio de equações diferenciais parciais com derivadas de ordem inteira *i.e.* não se reduzem a uma difusão nem à propagação de ondas. Assim, modelos alternativos podem ser elaborados usando equações de difusão generalizadas por meio de derivadas fracionárias ou não inteiras, no tempo e/ou no espaço. Uma larga classe de fenômenos biológicos, econofísicos, químicos etc vêm sendo descritos desta maneira. Por outro lado, simulações baseadas em passeios aleatórios também são utilizadas para modelar a dispersão de populações. Neste trabalho, calibramos os parâmetros da solução de um problema de valor de contorno de uma equação diferencial fracionária no tempo, a fim de que esta equação descreva a distribuição de vôos aleatórios previamente simulados. As simulações consistem de *random walks* com distribuições de passos de comprimentos aleatórios.

Palavras-chave. Derivação fracionária, subdifusão, calibração

1 Introdução

Equações de difusão com derivadas fracionárias no tempo ou no espaço podem descrever a disseminação de epidemias [1, 2], problemas de movimentos populacionais biológicos [3–5], dentre outros. Tem-se, ainda, que a formulação de fenômenos difusivos em termos de caminhos aleatórios é de fundamental importância para o estudo de processos difusivos [6].

O objetivo deste trabalho é verificar a aplicabilidade de modelos com equações diferenciais parciais fracionárias [7] em simulações de vôos com passos de comprimentos aleatórios,

¹anapereira@unifei.edu.br

²jjpp.of@hotmail.com

³atman@dppg.cefetmg.br

⁴acebal@dppg.cefetmg.br

calibrando os parâmetros do modelo através de dois métodos: análise de dispersão sobre os resultados da simulação e por ajuste da solução de uma equação diferencial parcial fracionária temporal (EDPFT) ao histograma de posições de vôos simulados. Os ajustes dos modelos às simulações é verificado via coeficientes de correlação.

2 Simulação de vôos

Vôos unidimensionais de uma população de $N = 10.000$ indivíduos em um tempo total $t = 16.000$ são simulados, com distribuição de passos aleatórios segundo as funções densidade de probabilidade normal $p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{x^2}{2}}$ ou com lei de potência $p(x; a) = ax^{a-1}$, com $a = 2; 2,5$ e 4 . Estas simulações geram 10.000 séries de comprimento igual a 16.000 e vôos que chamaremos, respectivamente, de NSF (*normal simulated flight*) e PSF (*power law simulated flight*).

A figura 1 mostra os gráficos $t \times \langle x^2 \rangle$, onde $\langle x^2 \rangle$ é o desvio médio quadrático dos deslocamentos das N séries. Observe a existência de uma relação linear entre as variáveis. Na figura 2 estão os histogramas de posições, em escala logarítmica, dos vôos aleatórios simulados NSF e PSF.

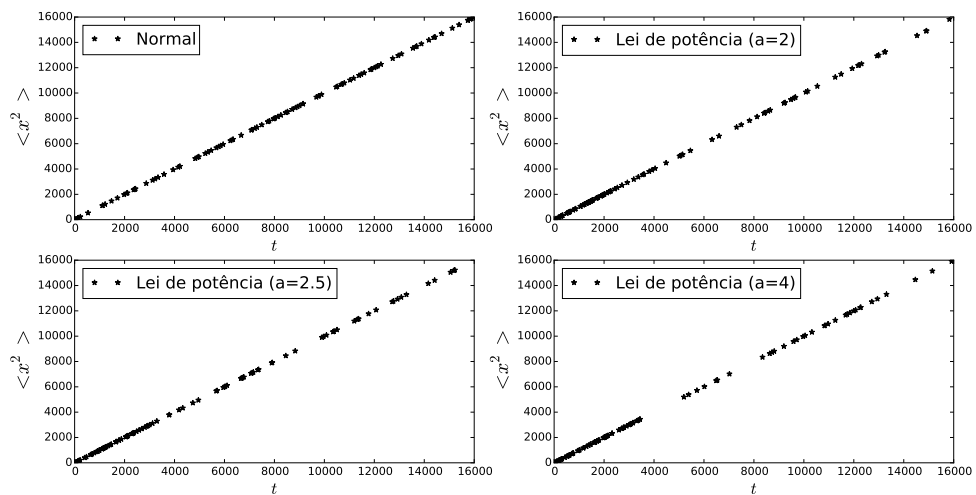


Figura 1: Evolução temporal do desvio quadrático médio, $\langle x^2 \rangle$, das posições de vôos simulados de $N = 10.000$ indivíduos com 16.000 passos de comprimentos aleatórios, segundo distribuições normal e segundo lei de potência com parâmetros variados.

3 Análise de dispersão e solução da EDPFT

Na teoria do movimento Browniano a relação de Einstein fornece o desvio quadrático médio dos deslocamentos como uma função do coeficiente de difusão, D , e do tempo,

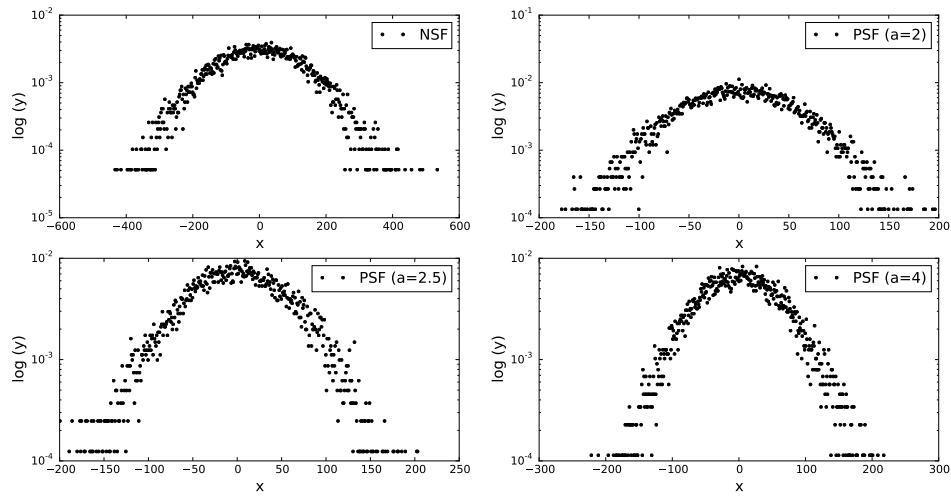


Figura 2: Histogramas de posições de vôos de $N = 10.000$ indivíduos com 16.000 passos de comprimentos aleatórios, segundo distribuições normal (NSF) e segundo lei de potência (PSF) com parâmetros variados.

t , $\langle x^2(t) \rangle = 2Dt$ [8, 9]. Generalizando esta relação, quando a dispersão apresenta um comportamento subdifusivo, mostra-se [9] que o desvio quadrático médio pode ser escrito como

$$\langle x^2(t) \rangle = \frac{2D_\alpha}{\Gamma(1 + \alpha)} t^\alpha, \quad 0 < \alpha < 1. \quad (1)$$

A equação 1 é uma lei de potência em t . Para futura determinação dos parâmetros α e D a partir das simulações, reescreve-se 1 como uma reta no plano $\log_2(t) \times \log_2(\langle x^2(t) \rangle)$, com coeficiente angular α e intercepto $\log_2\left(\frac{2D}{\Gamma(1 + \alpha)}\right)$,

$$\log_2(\langle x^2(t) \rangle) = \log_2(2D) + \alpha \log_2(t), \quad 0 < \alpha \leq 1. \quad (2)$$

Considere, agora a EDPFT, onde D é o coeficiente de difusão e α é a ordem da derivada fracionária,

$$\frac{\partial^\alpha}{\partial t^\alpha} u(x, t) = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x, t), \quad 0 < \alpha < 1, \quad -\infty < x < \infty, \quad t > 0, \quad (3)$$

que, sujeita às condições de contorno e inicial apropriadas

$$u(\pm\infty, t) = 0, \quad u(x, 0) = N\delta(x), \quad u_t(x, 0) = 0, \quad (4)$$

constituem juntas um problema de valor de contorno aberto unidimensional. Sabendo que a definição da derivada fracionária no tempo é dada no sentido Caputo [10], a solução

da EDPFT 3, sujeita às condições de contorno e inicial 4, é uma função densidade de probabilidade [6] dada por [10]

$$G_\alpha(x, t) = \frac{N}{2\sqrt{Dt}^{\frac{\alpha}{2}}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-z)^k}{k! \Gamma(-\frac{\alpha}{2}k + (1 - \frac{\alpha}{2}))}, \quad z = \frac{|x|}{\sqrt{Dt}^{\frac{\alpha}{2}}}. \quad (5)$$

O caso $\alpha = 1$ em 5 corresponde à densidade de probabilidade normal $G_1(x, t)$. Note que como $0 < \alpha < 1$ as funções $G_\alpha(x, t)$ apresentam características subdifusivas. Na figura 3 estão as soluções $G_\alpha(x, t)$ para t fixado, ora considerando variações de α com $D = 1$, ora considerando variações de D com $\alpha = \frac{1}{2}$.

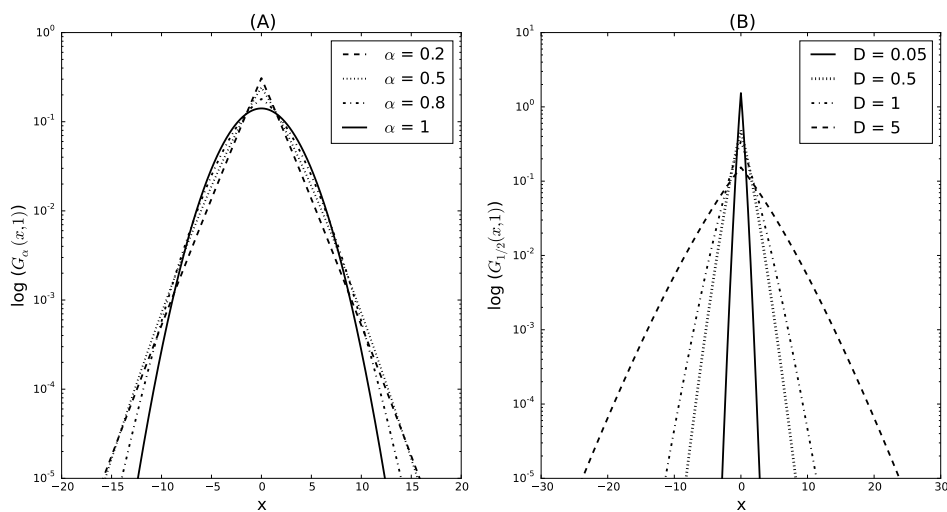


Figura 3: Soluções $G_\alpha(x, t)$ problema de valor de contorno 5 para $t = 1$. A figura (A) mostra as soluções para diferentes valores de α com $D = 1$. Na figura (B), tem-se $G_\alpha(x, t)$ para $\alpha = \frac{1}{2}$ e variações de D .

4 Análise de dispersão e ajustes teóricos

Para a análise da dispersão das posições dos vôos aleatórios simulados dos $N = 10.000$ indivíduos durante um tempo $t = 16.000$ foram utilizadas regressões lineares sobre as retas da figura 1. Os parâmetros α e D da equação 2 serão chamados, respectivamente, de α_S e D_S , referindo-se à simulação. Os resultados deste ajuste podem ser observados na tabela 1.

Uma abordagem alternativa para o estudo da aplicação do modelo às simulações pode ser feita através do ajuste da solução $G_\alpha(x, t)$ da EDPFT 3 aos histogramas da figura 2 dos vôos simulados NSF e PSF. O método de otimização Nelder Simplex foi adaptado para encontrar os parâmetros α e D deste ajuste [11]. Os parâmetros obtidos nesta abordagem

serão chamados, respectivamente, de α_T e D_T , referindo-se a ajustes da solução teórica e podem ser observados na tabela 1.

Tabela 1: Valores dos parâmetros, α_S e D_S , obtidos a partir da análise de dispersão das simulações de vôos com passos aleatórios segunda as distribuições normal e lei de potência com respectivos coeficientes de correlação (c.c.S.). Valores dos parâmetros α_T e D_T obtidos pelo ajuste da curva da solução $G_\alpha(x, t)$ do problema de valor de contorno fracionário sobre o histograma de posições dos vôos simulados normal (NSF) e lei de potência (PSF) com respectivos coeficientes de correlação (c.c.T.).

Distribuição	α_S	D_S	c.c.S.	α_T	D_T	c.c.T.
NSF	0.9989	0.5026	0.9939	1.0091	0.4600	0.9929
PSF (a=2)	0.9997	0.0839	0.9972	0.9997	0.0853	0.9901
PSF (a=2.5)	0.9985	0.0939	0.9390	0.9701	0.1232	0.9323
PSF (a=4)	0.9976	0.1082	0.9922	0.9954	0.1170	0.9874

Os parâmetros α_S , D_S , α_T e D_T obtidos pelos dois métodos distintos acima, geram as soluções teóricas $G_{\alpha_S}(x, t)$ e $G_{\alpha_T}(x, t)$, conforme a calibração destas soluções são feitas, respectivamente, com parâmetros simulados ou teóricos. O ajuste destes modelos aos histogramas simulados são mostrados nas figuras 4 e 5 para comparação. Na tabela 1 se encontram os coeficientes de correlação das soluções $G_{\alpha_S}(x, t)$ e $G_{\alpha_T}(x, t)$ calibradas com os histogramas dos vôos simulados para os casos NSF e PSF [12].

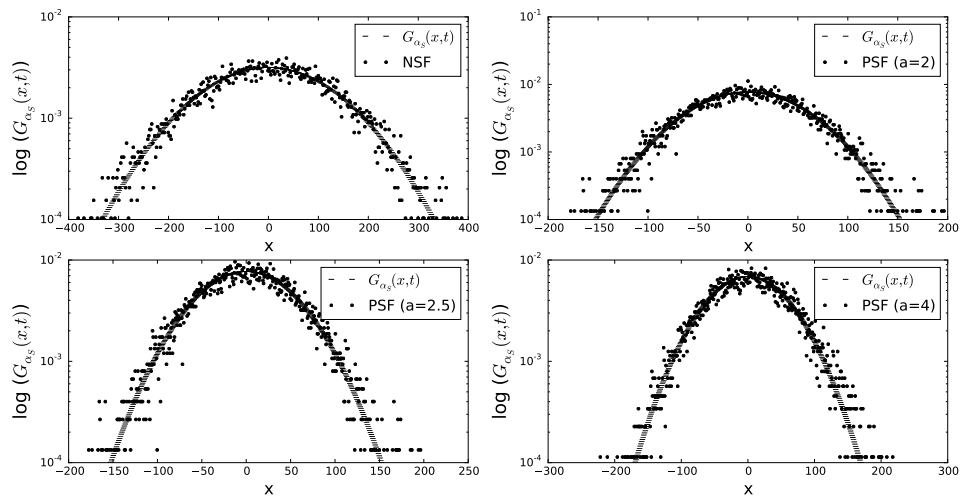


Figura 4: Modelo simulado $G_{\alpha_S}(x, t)$ para os histogramas de posições dos vôos aleatórios simulados de $N = 10.000$ indivíduos em um tempo $t = 16.000$ segundo distribuições normal (NSF) e lei de potência (PSF) com parâmetros variados.

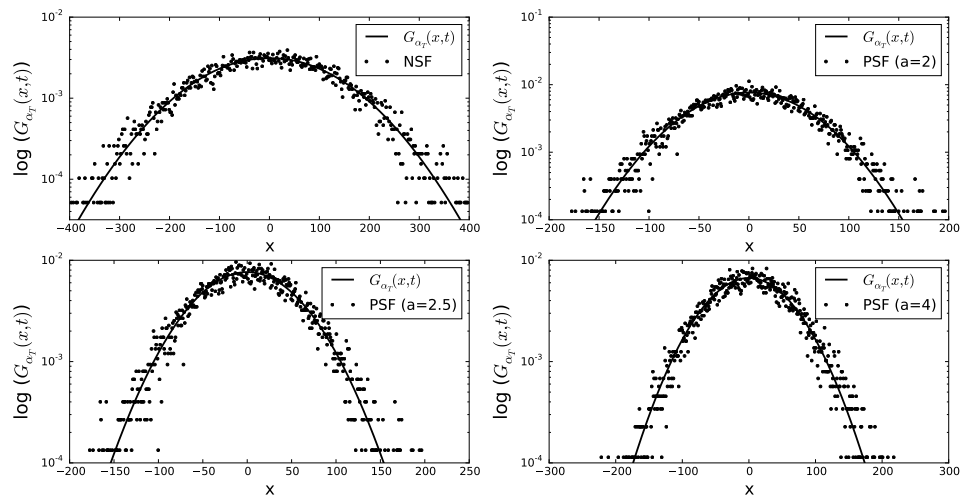


Figura 5: Modelo teórico $G_{\alpha_T}(x,t)$ para os histogramas de posições dos vôos aleatórios simulados de $N = 10.000$ indivíduos em um tempo $t = 16.000$ segundo distribuições normal (NSF) e lei de potência (PSF) com parâmetros variados..

5 Conclusões

Neste trabalho foram utilizados dois métodos para calibrar parâmetros de um modelo teórico sobre simulações de vôos com distribuições de passos de comprimentos aleatórios. O primeiro utilizou regressão linear para calcular os parâmetros α_S e D_S e, assim, obter o modelo simulado $G_{\alpha_S}(x,t)$. A duplicidade de métodos mostrou-se interessante para estudar a melhor metodologia de calibração. Houve pouca diferença, mas a análise de dispersão sobre os dados de calibração mostrou sempre um melhor coeficiente de correlação como pôde ser constatado na tabela 1. Os modelos teórico e simulado representaram bem o sistema sem grandes discrepâncias e com bons coeficientes de correlação em ambas as metodologias. Pode se dizer que as equações diferenciais parciais fracionárias se aplicam bem como modelos para descrever simulações de vôos com distribuição de passos de comprimentos aleatórios nas condições simuladas aqui para as funções densidade de probabilidade normal e lei de potência.

Agradecimentos

Os autores expressam seus agradecimentos ao apoio financeiro do Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais - CEFET, MG e ao Conselho Nacional de Pesquisa e Desenvolvimento - CNPq.

Referências

- [1] J. P. Boto and N. Stollenwerk. Fractional calculus and levy flights: model spatial epidemic spreading. In *Proceedings of the International Conference on Computational and Mathematical Methods in Science and Engineering*, 2005.
- [2] L. T. Takahashi and et. al. Mathematical models for the aedes aegypti dispersal dynamics: travelling waves by wing and wind. *Bulletin of Matemactical Biology*, 67:509–528, 2005.
- [3] Dehghan M. and F. Shakeri. *Numerical solution of a biological population model using Hes variational iteration method*. Computers & Mathematics with Applications, 2007.
- [4] A. A. M. Arafa and S. Z. Rida. Exact solutions of fractional-order biological. *Communications in Theoretical Physics*, 6:992–996, 2009.
- [5] S. Focardi. Do the albatross levy flights below the spandrels of st mark? *Physics of Life*, 14:99–101, 2015.
- [6] F. Mainardi. *Fractional Calculus and Waves in Linear Viscoelasticity: An Introduction to Mathematical Models*. Imperial College Press, 2^ª ed. edition, 2010.
- [7] F. Mainardi. The fundamental solutions for the fractional diffusion-wave equations. *Applied Mathematics Letters*, 9(6):23–28, 1996.
- [8] E. W. Montroll and G. H. Weiss. Random walks on lattices. *J. Math. Phys.*, II:6 – 167, 1965.
- [9] R. Metzler and J. Klafter. The random walk’s guide to anomalous diffusion: A fractional dynamics approach. *Physics Reports*, 339:1–77, 2000.
- [10] I. Podlubny. *Fractional Differential Equations*. Academic Press, 1999.
- [11] F. S. Hillier and G. J. Lieberman. *Introdução à pesquisa operacional*, volume 9. McGraw-Hill, 2013.
- [12] D. C. Montgomery. *Estatística aplicada e probabilidade para engenheiros*. Livros Tecnicos e Científicos, 2003.