
Caminhada aleatória simples em um espaço fractal Simple random walk in a fractal space

Henrique Santos Lima¹, Luizdarcy de Matos Castro², Marcio Antônio Bortoloti³.

Resumo

Para o estudo da trajetória de partículas menos massivas, faz-se necessário a utilização da Mecânica Estatística do Não-Equilíbrio. A caminhada aleatória em um espaço fractal decorre da necessidade de que a distribuição de probabilidade seja dependente de uma certa medida e seja não-diferenciável para ordens não inteiras nas coordenadas espaciais, mas preserva as exigências de diferenciabilidade em um certo instante $t \in I \subset \mathbb{R}^+$. Uma possível equação que governa este fenômeno é a equação de Fokker-Planck fracionária que depende das derivadas de ordem α e de ordem 2α em uma certa medida espacial tal que $\alpha \in (0, 1]$. O estudo será baseado na distribuição binomial e na relação de recorrência para a caminhada aleatória unidimensional, já que, apesar de as medidas não serem unidimensionais, o estudo será feito baseado na relação "medida versus tempo". Algumas hipóteses serão utilizadas para a demonstração da equação de Fokker-Planck fracionária e o tratamento com o Cálculo Fracionário através do operador derivação local é de suma importância para a conclusão da demonstração.

Palavras-chave Mecânica Estatística, Caminhada Aleatória, Espaço fractal, Fokker-Planck.

Abstract

For the study of the trajectory of less massive particles, it is necessary to use Statistical Mechanics of Non-Equilibrium. The random walk in a fractal space arises from the need for the probability distribution to be dependent on a certain measure and to be non-differentiable for non-integer orders in spatial coordinates, but preserves the differentiability requirements at a certain moment $t \in I \subset \mathbb{R}^+$. A possible equation governing this phenomenon is the fractional Fokker-Planck equation that depends on the derivatives of the α order and the order 2α on a certain spatial extent such that $\alpha \in (0, 1]$. The study will be based on the binomial distribution and the recurrence relation for the one-dimensional random walk, since, although the measures are not one-dimensional, the study will be based on the relation "measure versus time". Some hypotheses will be used for the demonstration of the fractional Fokker-Planck equation and the treatment with the Fractional Calculus through the local derivation operator is of paramount importance for the conclusion of the demonstration.

Keywords Statistical Mechanics, Random Walk, Fractal Space, Fokker-Planck.

¹Aluno do curso de Licenciatura em Física da Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia.

²Professor Adjunto A da Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia.

³Professor Titular da Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia.

1 Introdução

A caminhada aleatória, definida inicialmente por Karl Pearson em 1905 [14], consiste de um processo estocástico que descreve um conjunto de etapas sucessivas e aleatórias em um espaço, tal como o conjunto dos números inteiros. Como exemplo de caminhada aleatória, tem-se o movimento browniano, que é descrito como o movimento aleatório de partículas em suspensão em um meio fluido ([4]). Além do movimento browniano, a caminhada aleatória possui inúmeras aplicações nas ciências econômicas, ciências biológicas e ciências exatas ([16],[18],[17]). Para uma caminhada aleatória simples (1D), em $\mathbb{R}$, onde define-se a probabilidade $P(m, n)$ como a probabilidade de uma certa partícula estar na posição $x = m\Delta x$ no instante $t = n\Delta t$ e as probabilidades de o objeto estar à esquerda ou direito como q e p , respectivamente, tem-se a seguinte relação de recorrência:

$$P(m, n + 1) = pP(m - 1, n) + qP(m + 1, n) \quad (1)$$

Esta relação pode ser interpretada da seguinte forma: somente se a partícula estiver em $x = (m - 1)\Delta x$ ou em $x = (m + 1)\Delta x$ no instante $t = n\Delta t$, que será possível estar em $x = m\Delta x$ no instante $t = (n + 1)\Delta t$. A relação (1) é uma cadeia markoviana que, caso as chances de a partícula ir para a esquerda ou para a direita sejam iguais (equiprováveis), obtem-se a famosa equação da difusão, para Δx e Δt muito pequenos (Veja, por exemplo, [18]):

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

com $D = \frac{(\Delta x)^2}{2\Delta t}$.

A equação (2) pode ser resolvida com o formalismo da transformada de Fourier. Para mais informações, consulte [3]. Ao longo dos anos, a caminhada aleatória se tornou de grande importância para as ciências biológicas e o estudo de meios porosos, cujas dimensões não coincidem com as dimensões usuais (inteiras), passaram a ser intensivamente estudadas [19], já que na prática, as simetrias em movimentos brownianos (i.e), se tornaram extremamente difíceis de serem detectadas e os eventos caóticos se tornaram cada vez mais frequentes. A equação (2) é apenas um exemplo teórico de um estudo inicial de um evento aleatório, tanto que foram desprezadas influências viscosas, além de aceitar como hipótese a simetria do movimento, o que na prática, não costuma ser observado ([10],[12]). Alguns modelos difusivos podem ser encontrados em [1] e [10].

2 Conceitos básicos

O que é um espaço fractal?

Um espaço fractal é um espaço métrico com dimensão não inteira de Hausdorff, ou seja, são espaços de Hausdorff [11]. Existem vários exemplos de espaços fractais, mas o que nos interessa são justamente os espaços de $\dim_H(W) < 1$. Um exemplo clássico é o conjunto ternário de Cantor de $\dim_H(W) = \frac{\ln(2)}{\ln(3)}$. Para mais informações, consulte [20]. A letra grega μ será usada para definir uma certa medida de Hausdorff ao longo deste texto. Fractais ideais estão sendo considerados para a modelagem, já que fractais reais não obedecem às regras de escala infinitamente e sim, até certo ponto, microscopicamente. Alguns exemplos de fractais reais são os comportamentos de substâncias em transição de fase ([2], [13],[24])

2.1 Operador de derivação local

Conforme também define [8], [9], [22] e [23], suponha $f(\mu) \in C^\alpha(a, b)$ e $\alpha \in (0, 1]$. Para $\varepsilon > 0$, se existir um $\delta > 0$ tal que $0 < |\mu - \mu_0| < \delta$ e que o limite

$$D^{(\alpha)} f(\mu_0) = \lim_{\mu \rightarrow \mu_0} \frac{\Delta^\alpha f(\mu)}{(\mu - \mu_0)^\alpha} = \lim_{\mu \rightarrow \mu_0} \Gamma(\alpha + 1) \frac{f(\mu) - f(\mu_0)}{(\mu - \mu_0)^\alpha} \quad (3)$$

existe e é finito, onde $\Delta^\alpha[f(\mu) - f(\mu_0)] \approx \Gamma(\alpha + 1)[f(\mu) - f(\mu_0)]$. Neste caso, (3) é chamada de derivada fracionária local ou derivada fractal de ordem α . O espaço vetorial C^α é o espaço das funções α diferenciáveis e com $D^\alpha f(\mu) \in C^0(a, b)$, classe das funções contínuas em um determinado intervalo (a, b) . Para outras informações acerca de operadores de derivação fracionários, consulte [6] e [15].

2.2 Teorema de Taylor para funções não-diferenciáveis

Conforme também define [22] e [23], suponha que

$$D^{(k+1)\alpha} f(\mu) \in C^\alpha(a, b). \quad (4)$$

Então, para $k \in \mathbb{N}$

$$f(\mu) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{D^{k\alpha} f(\mu_0)}{\Gamma(k\alpha + 1)} (\mu - \mu_0)^{k\alpha} \quad (5)$$

com $a < \mu_0 < \mu < b, \forall \mu \in (a, b)$, onde $D^{k\alpha} f(\mu) = D^\alpha \dots D^\alpha f(\mu)$ k vezes. Para outras definições de expansão em série de Taylor generalizada com outros operadores de derivação, i.e, definição de Caputo, consulte [5], [7], ou [21].

3 Caminhada aleatória simples em um espaço fractal

Considere o espaço amostral X como um espaços de dimensão de Hausdorff $\alpha \in (0, 1]$. Neste espaço, a métrica $d : X \times X \mapsto \mathbb{R}$ é definida como:

$$d(\mu, \mu_0) = |\mu - \mu_0| \quad (6)$$

Considere X^+ e X^- , os espaços amostrais contendo os pontos à direita e à esquerda, respectivamente, de forma que $X = X^+ \cup X^-$. Define-se $P : X \times \mathbb{R}^+ \mapsto [0, 1]$ como a probabilidade de uma certa partícula em uma caminhada aleatória se mover para determinado local μ em um determinado instante t , com $P(\mu, t) \in C^{2\alpha}(X) \cup C^1(\mathbb{R}^+)$, onde $C^{2\alpha}$ é o espaço das funções 2α diferenciáveis e com as derivadas de ordem α e de ordem 2α contínuas. Para mais informações sobre este espaço, consulte [23].

A probabilidade de a partícula ir para a esquerda é dada por $P(X^-, t) = p$, enquanto que a probabilidade de ir para a direita é dada por $P(X^+, t) = q, \forall t \in \mathbb{R}^+, p, q \in (0, 1]^4$.

Após definir o espaço amostral, é preciso definir as hipóteses, para que, com elas, seja possível obter uma equação que modele a caminhada aleatória em um espaço fractal. As hipóteses são:

1. Dada uma partição $\mathcal{P} = \{\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n\}$, tem-se que $\mathcal{P}$ é homogênea e que, para t_0 fixado, deve existir um δ de forma que $|P(\mu_{n+k} + \delta, t_0) - P(\mu_{n+k}, t_0)| \approx |P(\mu_n + \delta, t_0) - P(\mu_n, t_0)|, \forall n, k \in \mathbb{N}$;
2. A relação de recorrência (1) continua sendo válida para espaços fractais, pois a interpretação física na qual ela foi concebida não impõe nenhuma relação de continuidade espacial, mas sim temporal e, mesmo que fosse imposta, a relação de recorrência é feita por diferenças finitas, o que fortalece o resultado;
3. As aproximações de Taylor podem ser truncadas até o termo de ordem 2α e, quando preciso, podem ser truncadas no termo de ordem α , sem que isto afete consideravelmente na aproximação;

⁴A probabilidade no conjunto será diferente da probabilidade em um único ponto do conjunto.

4. Os eventos da locomoção da partícula não são equiprováveis, o que torna p e q diferentes. Define-se $p = 1 - \frac{\alpha}{2}$ e $q = \frac{\alpha}{2}$.

A modelagem é feita mediante a relação de recorrência (1)(hipótese 2), de forma que:

$$P(m, n+1) - P(m, n) = (1 - \frac{\alpha}{2})P(m-1, n) + \frac{\alpha}{2}P(m+1, n) - P(m, n)$$

e

$$P(m, n+1) - P(m, n) \approx \Delta t \frac{\partial P}{\partial t}$$

onde a expressão à esquerda foi expandida em série de Taylor e truncada no primeiro termo, supondo Δt muito pequeno.

O termo à direita da relação (1) pode ser reescrito como:

$$(1 - \frac{\alpha}{2})P(m-1, n) + \frac{\alpha}{2}P(m+1, n) - P(m, n) = \frac{\alpha}{2}(P(m+1, n) - P(m-1, n)) - (P(m, n) - P(m-1, n))$$

e utilizando a expansão em série generalizada tendo como argumento as hipóteses 1 e 3, tem-se:

$$\approx \frac{\alpha}{2} \left(P(m, n) - P(m-1, n) + \frac{\Delta \mu^\alpha}{\Gamma(\alpha+1)} \frac{\partial^\alpha P}{\partial \mu^\alpha} + \frac{\Delta \mu^{2\alpha}}{\Gamma(2\alpha+1)} \frac{\partial^{2\alpha} P}{\partial \mu^{2\alpha}} \right) - (P(m, n) - P(m-1, n)) \approx$$

$$\alpha \left(\frac{\Delta \mu^\alpha}{\Gamma(\alpha+1)} \frac{\partial^\alpha P}{\partial \mu^\alpha} + \frac{\Delta \mu^{2\alpha}}{\Gamma(2\alpha+1)} \frac{\partial^{2\alpha} P}{\partial \mu^{2\alpha}} \right) - \frac{\Delta \mu^\alpha}{\Gamma(\alpha+1)} \frac{\partial^\alpha P}{\partial \mu^\alpha}$$

onde, nesta última aproximação, foi utilizada a hipótese 3, cujo termo $P(m, n) - P(m-1, n)$ foi aproximado para um termo de ordem α e não de ordem 2α , em relação às derivadas fracionárias. Nesta manipulação, tem-se os termos com derivadas de ordem 2α extremamente pequenos o que faz com que, apesar de o termo multiplicado por α ser menor que o termo multiplicado por um, seja escolhido o termo que melhor se adequa à possível generalização, já que, caso fosse desprezado o termo multiplicado por α , teríamos um coeficiente de difusão negativo, o que não condiz com os resultados físicos. O erro absoluto cometido ao fazer esta aproximação é dado por:

$$\left| \frac{\Delta \mu^\alpha}{\Gamma(2\alpha+1)} \frac{\partial^{2\alpha} P}{\partial \mu^{2\alpha}} \right| \quad (7)$$

Este erro é desprezível e desta forma:

$$\Delta t \frac{\partial P}{\partial t} = (\alpha - 1) \frac{\Delta \mu^\alpha}{\Gamma(\alpha+1)} \frac{\partial^\alpha P}{\partial \mu^\alpha} + \alpha \frac{\Delta \mu^{2\alpha}}{\Gamma(2\alpha+1)} \frac{\partial^{2\alpha} P}{\partial \mu^{2\alpha}} \quad (8)$$

onde, dividindo ambos os termos por Δt , tem-se que:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -K_\alpha \frac{\partial^\alpha P}{\partial \mu^\alpha} + D_\alpha \frac{\partial^{2\alpha} P}{\partial \mu^{2\alpha}} \quad (9)$$

com

$$K_\alpha = (1 - \alpha) \frac{\Delta \mu^\alpha}{\Gamma(\alpha+1)\Delta t} \text{ e } D_\alpha = \alpha \frac{\Delta \mu^{2\alpha}}{\Gamma(2\alpha+1)\Delta t}.$$

O termo K_α pode ser interpretado como um termo de arrasto ou um termo viscoso, enquanto o coeficiente D_α pode ser interpretado como um coeficiente difusivo, onde $\lim_{\alpha \rightarrow 1} D_\alpha = D$. Observe que, quando α tende a 1, o termo de arrasto tende a zero e a equação encontrada se torna a equação da difusão para uma caminhada aleatória em uma dimensão. Deve-se lembrar que μ pode ser qualquer medida de Hausdorff definida em um espaço fractal de $\dim_H(X) \in (0, 1]$.

Esta equação é conhecida como equação de Fokker-Planck fracionária e pode ser responsável pela evolução temporal de uma distribuição de probabilidade referente a uma caminhada aleatória simples em um espaço fractal. Para uma equação feita sem aproximações em torno dos termos de segunda ordem, ou seja, descartando a hipótese (3), encontra-se:

$$K_\alpha = (1 - \alpha) \frac{\Delta\mu^\alpha}{\Gamma(\alpha + 1)\Delta t} \text{ e } D_\alpha = (1 - \alpha) \frac{\Delta\mu^{2\alpha}}{\Gamma(2\alpha + 1)\Delta t}.$$

com a seguinte equação:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -K_\alpha \frac{\partial^\alpha P}{\partial \mu^\alpha} - D_\alpha \frac{\partial^{2\alpha} P}{\partial \mu^{2\alpha}} \quad (10)$$

que não deve ser interpretada como uma generalização da equação da difusão, já que, o coeficiente de difusão desta equação seria negativo e quando $\alpha \rightarrow 1$ obtêm-se:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = 0$$

indicando que a probabilidade independe do tempo.

Para uma aproximação descartando o termo

$$\alpha \frac{\Delta\mu^{2\alpha}}{\Gamma(2\alpha + 1)} \frac{\partial^{2\alpha} P}{\partial \mu^{2\alpha}}$$

encontra-se uma equação da mesma forma que a equação (11), porém com $D_\alpha = \frac{\Delta\mu^{2\alpha}}{\Gamma(2\alpha + 1)\Delta t}$.

Desta forma, a equação (9) é a única que tem um comportamento difusivo, já que está de acordo com a equação de Fokker-Planck.

4 Considerações finais

Observou-se que, para $\alpha = 1$ a equação (9), torna-se a equação da difusão para um espaço unidimensional, ao se utilizar uma medida contínua, i.e x . Esta generalização condiz com o comportamento irregular de partículas menos massivas e pode ser de grande importância para o estudo e aplicações de caminhadas aleatórias nas ciências biológicas e nas ciências físicas. Observa-se, também, que, para $\alpha = 1$ os valores de p e q tornam-se iguais a $\frac{1}{2}$, condizendo com uma possível generalização.

References

- [1]] ATANACKOVIĆ, T.M. et. al. Fractional Diffusion-Wave Equations In: Fractional Calculus with applications in Mechanics: vibration and diffusion processes . Wiley, 2014.
- [2] CALLEN, H.B. Critical Phenomena. In: Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics. John Wiley & Sons, 1985,p. 255-276.
- [3] DUCHATEAU, P.; ZACHMANN, David W. Partial differential equations. McGraw Hill, 2011, p.75.
- [4] EINSTEIN. A. Investigations on the Theory of the Brownian Movement . Dover, 1956.
- [5] EL-AJOU, Ahmad et al. New results on fractional power series: theories and applications. Entropy. Dez. 2013.
- [6] HERRMANN, Richard. Fractional Calculus: An Introduction for Physicists. 2.ed. World Scientific Publishing, 2014.

-
- [7] JUMARIE, G. Modified Riemann - Liouville derivative and fractional Taylor series of nondifferentiable functions further results. University of Quebec at Montreal: Department of Mathematics, fev. 2006.
 - [8] KOLWANKAR, K. M. Separable local fractional differential equations. Ramniranjan Jhunjhunwala College: Department of Physics, nov.2015.
 - [9] KOLWANKAR, K. M. ; GANGAL,A.D. Local fractional derivatives and fractal functions of several variables. India: University of Pune, Department of Physics, jan.1998.
 - [10] KLAFTER, J. et. al. Fractional dynamics : recent advances. World Scientific Publishing, 2012, p.8-27.
 - [11] LIMA, E.L. Espaços Métricos. RJ: LTC, 1993, p.72.
 - [12] MEERSCHAERT, M. M. et. al. Anomalous Diffusion and Fractional Transport Equations. In: Stochastic Models for Fractional Calculus. the Deutsche Nationalbibliothek, 2012, p. 4-26.
 - [13] OLIVEIRA, M.J. Criticalidade. In: Termodinâmica. SP: Livraria da Física, 2005, p.137-162.
 - [14] PEARSON, K. The Problem of the Random Walk. Nature, 72, 1865, p.294, 1905.
 - [15] PUDLUBNY, Igor. Fractional Differential Equations: An Introduction to Fractional Derivatives, Fractional Differential Equations, to Methods of their Solution and some of their Applications. Academic Press, 1999 p.296-298.
 - [16] REIF, F. Fundamentals of statistical and thermal physics. McGraw Hill, 1965, p. 577-582.
 - [17] Rudnick, J.; GASPARI, G. Elements of Random Walk: An Introduction for Advanced Students and Researchers. Cambridge University Press, 2004.
 - [18] SALINAS, Silvio R.A. Introdução à Física Estatística . São Paulo: EDUSP, 2007,p.22- 24.
 - [19] SCHROEDER, Manfred. Fractals, Chaos, Power Laws: Minutes from an Infinite Paradise. New York: W. H. Freeman and Company, 1991.
 - [20] TARASOV, Vasily E. Fractional Dynamics: applications of Fractional Calculus to Dynamics of Particles, fields and media, Springer, Berlin,2010.
 - [21] USERO, David. Fractional Taylor series for Caputo Fractional derivatives. Construction of numerical schemes. Researchgate,jan. 2007.
 - [22] YANG, X.J. Generalized local fractional Taylor's formula with local fractional derivative, Journal of Expert Systems, 2012,p. 26-30.
 - [23] YANG, X.J. Local Fractional Integral Transforms and Their Applications.Elsevier, 2016.
 - [24] ZEMANSKY, M.W. Critical Phenomena; High-Order Phase Transitions In: Heat and Thermodynamics. 7.ed.McGraw Hill, 1997, p. 359-385.