



UNIVERSIDADE
ESTADUAL DE LONDRINA

PEDRO HENRIQUE VALERIO DE GODOI

**MODELAGEM MATEMÁTICA DA INVASÃO
BIOLÓGICA BIDIMENSIONAL VIA EQUAÇÃO
TELEGRÁFICA**

Londrina

2021

PEDRO HENRIQUE VALERIO DE GODOI

**MODELAGEM MATEMÁTICA DA INVASÃO
BIOLÓGICA BIDIMENSIONAL VIA EQUAÇÃO
TELEGRÁFICA**

Dissertação de mestrado apresentada ao Departamento de Matemática da Universidade Estadual de Londrina, como requisito parcial para a obtenção do Título de MESTRE em Matemática Aplicada e Computacional.

Orientador: Prof. Dr. Eliandro Rodrigues Cirilo

Londrina

2021

**Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor, através do Programa de Geração Automática
do Sistema de Bibliotecas da UEL**

P372 Godoi, Pedro Henrique Valerio de.
Modelagem Matemática da Invasão Biológica Bidimensional Via Equação Telegráfica / Pedro Henrique Valerio de Godoi. – Londrina, 2021.
85 f. : il.

Orientador: Eliandro Rodrigues Cirilo.
Dissertação (Mestrado em Matemática Aplicada e Computacional) Universidade Estadual de Londrina, Centro de Ciências Exatas, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada e Computacional, 2021.

Inclui Bibliografia.

1. Equação Telegráfica - Tese. 2. Dinâmica Populacional - Tese. 3. Diferenças Finitas - Tese. 4. Método Quasi Não Linear -Tese. I. Cirilo, Eliandro Rodrigues. II. Universidade Estadual de Londrina. Centro de Ciências Exatas. Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada e Computacional. III. Título.

CDU 51

PEDRO HENRIQUE VALERIO DE GODOI

**MODELAGEM MATEMÁTICA DA INVASÃO
BIOLÓGICA BIDIMENSIONAL VIA EQUAÇÃO
TELEGRÁFICA**

Dissertação de mestrado apresentada ao Departamento de Matemática da Universidade Estadual de Londrina, como requisito parcial para a obtenção do Título de MESTRE em Matemática Aplicada e Computacional.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Eliandro Rodrigues Cirilo
Universidade Estadual de Londrina

Prof. Dr. Eduardo Cardoso de Abreu
Universidade Estadual de Campinas

Prof. Dr. Roberto Pettres
Universidade Federal do Paraná

Londrina, 27 de agosto de 2021.

À minha mãe.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus, pelo Dom da Vida e as oportunidades de apreciar tal Dom.

Aos meus colegas, em especial Luiz, Tainá, Gustavo e mestra Andina, que estiveram comigo no início dessa nova jornada.

Aos professores, pelo desafio de me educar. Ao meu orientador Eliandro. Aos que me ministraram disciplinas, professores Adeval, Paulo Liboni, Neyva, Paulo Natti e Márcio. Ao professor Manuel, pelo curso de verão. Aos demais, os quais compartilharam seus trabalhos em apresentações ou cursos, e que infelizmente pouco pude conhecer.

Aos membros da banca, que não se furtaram da possibilidade de enriquecer este trabalho.

Agradeço a minha família, amigos e amados, para os quais meu esforço em crescer se direciona.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001

É perigoso sair porta afora, Frodo. Você pisa na estrada, e, se não controlar seus pés, não há como saber até onde você pode ser levado.

Bilbo Bolseiro

GODOI, Pedro Henrique Valerio de. **Modelagem Matemática da Invasão Biológica Bidimensional via Equação Telegráfica**. 2021. 85p. Dissertação (Mestrado em Matemática Aplicada e Computacional) – Universidade Estadual de Londrina, Londrina, 2021.

RESUMO

Neste trabalho, consideramos a extensão da equação reativa-telegráfica para duas dimensões para modelagem de problemas de invasão biológica, que generaliza o modelo de Goldstein-Kac. Propomos uma modelagem inédita para o tempo de retardo (τ), baseada em hipóteses biológicas, de modo a evitar soluções negativas e garantir resultados mais realistas para o uso da equação telegráfica no contexto biológico. Detalhes da resolução numérica por meio do método de Diferenças Finitas e do método Quasi-Não-Linear são descritos. Realizamos um estudo numérico para garantir a aproximação do resultado numérico à solução do modelo. Apresentamos um estudo qualitativo/quantitativo preliminar do modelo de tempo de retardo em comparação ao caso constante, em situações teóricas, verificando que soluções negativas não foram encontradas com nosso modelo.

Palavras-chave: Equação Telegráfica. Dinâmica Populacional. Diferenças Finitas. Método Quasi-Não-Linear.

GODOI, Pedro Henrique Valerio de. **Mathematical Modeling of Biological Invasions Using the Two Dimensional Telegraph Equation**. 2021. 85p. Dissertação (Mestrado em Matemática Aplicada e Computacional) – Universidade Estadual de Londrina, Londrina, 2021.

ABSTRACT

In this work we consider the extension of the reactive-telegraphic equation to two dimensions to model biological invasion problems, generalizing the Goldstein-Kac model. We propose a novel model for the delay time (τ), based in biological hypothesis, to avoid negative solutions and ensure more realistical results for the use of the telegraphic equation in the biological context. Details of the numerical solution using Finite Difference Method and the Quasi-Non-Linear Method are described. A numerical study is done to ensure the aproximation of the numerical results to the models solution. A preliminary quantitative/qualitative study of the delay time model is presented, comparing to a fixed case model, in theoretical situations, showing that negatives results were not found using our model.

Keywords: Telegraphic Equation. Population Dynamics. Finite Differences. Quasi-Non-Linear Method.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	17
1.1	HISTÓRICO DOS ESTUDOS SOBRE MOVIMENTO E DINÂMICA POPULACIONAL	17
1.2	MIGRAÇÃO CELULAR COLETIVA	18
1.3	OBJETIVOS	18
2	MODELAGEM MATEMÁTICA	20
2.1	MODELAGEM MATEMÁTICA DA EQUAÇÃO GOVERNANTE	20
2.2	CONDIÇÃO DE CONTORNO	26
2.3	CONDIÇÕES INICIAIS	26
2.3.1	Condição Inicial Tipo Pulso	27
2.3.2	Condição Inicial Tipo Domínio Cheio	28
2.3.3	Condição Inicial da Derivada Primeira	28
3	MODELO PROPOSTO PARA O TEMPO DE RETARDO	30
3.1	DESCRIÇÃO DO MODELO PARA TEMPO DE RETARDO	30
3.2	MODELO REATIVO-TELEGRÁFICO 2D COM MODELO DE TEMPO DE RETARDO	33
4	MODELAGEM NUMÉRICA	37
4.1	DISCRETIZAÇÃO DO DOMÍNIO	37
4.2	DISCRETIZAÇÃO DA EQUAÇÃO REATIVA-TELEGRÁFICA 2D	39
4.3	DISCRETIZAÇÃO DO MODELO DE TEMPO DE RETARDO	42
5	MODELAGEM COMPUTACIONAL	43
5.1	RESOLUÇÃO NUMÉRICA POR MEIO DO MÉTODO QUASI NÃO LINEAR	43
5.2	CÁLCULO DE POPULAÇÃO E OCUPAÇÃO	45
6	ESTUDO NUMÉRICO	47
6.1	CONTRIBUIÇÃO DOS TERMOS DA EDP E RESÍDUO NUMÉRICO	47
6.2	ERRO RELATIVO E CONVERGÊNCIA	48
6.3	CONVERGÊNCIA DO ESQUEMA NUMÉRICO	50
7	RESULTADOS	56
7.1	INFLUÊNCIA DO TEMPO DE RETARDO E DIFUSIVIDADE NO MODELO REATIVO-TELEGRÁFICO 2D	56

7.2	VARIAÇÃO DE PARÂMETROS NO MODELO REATIVO-TELEGRÁFICO 2D COM MODELO PARA TEMPO DE RETARDO	63
7.2.1	Crescimento Exponencial	63
7.2.2	Crescimento Logístico	69
8	CONCLUSÃO	74
9	TRABALHOS FUTUROS	75
9.1	IN VITRO HEALING ASSAY	75
9.2	MODELAGEM PRELIMINAR DE “IN VITRO HEALING ASSAY”	75
9.2.1	Condição Inicial Tipo Spline	78
9.2.2	Discretização da Condição Inicial Tipo Spline	79
A	APÊNDICES	81
A.1	MODELOS DE CRESCIMENTO POPULACIONAL	81
A.1.1	Modelo Exponencial	81
A.1.2	Modelo Logístico	82
	REFERÊNCIAS	84

LISTA DE FIGURAS

2.1	Representação do movimento da partícula.	20
2.2	Representação das partículas que chegam a um dado ponto.	21
2.3	Condição Inicial tipo Pulso.	27
2.4	Condição Inicial tipo Domínio Cheio.	28
3.1	Exemplo de interpretação para V_S	31
3.2	Exemplo de interpretação para $V_S \gg 0$	31
3.3	Exemplo de S_∞ para $S \neq 0$	34
3.4	Exemplo de S_∞ para $S = 0$	34
3.5	Exemplo unidimensional de $\lambda = 0$	35
3.6	Exemplo unidimensional de $S_\infty = 0$	36
4.1	Discretização do domínio.	37
4.2	Posição do cálculo de S	38
4.3	Células computacionais e pontos cardeais.	38
4.4	Células computacionais nas bordas do domínio.	39
4.5	Grid finalizado.	39
5.1	Fluxograma simplificado do Método Quasi-Não-Linear.	43
5.2	Fluxograma da resolução via Método Quasi-Não-Linear.	45
6.1	Exemplo de refinamento de malha.	49
6.2	Resultados para $\tau \rightarrow 0$	52
6.3	Relação entre n , Δt e $\ E\ _2$, para $\tau = 0.0001$	54
7.1	Exemplo da influência de τ para $D_x = D_y = 1.00$	59
7.2	Exemplo da influência de D_x e D_y para $\tau = 0.01$	60
7.3	População e ocupação para $\tau = 0.01$	61
7.4	Contribuição dos termos para $D_x = D_y = 1$ e $\tau = 0.01$	62
7.5	Contribuição dos termos para $D_x = D_y = 0.25$ e $\tau = 0.01$	62
7.6	Resultados de S para $\gamma_x = \gamma_y = 1.00$ e $K_1 = 3.00$ (crescimento exponencial, condição inicial Pulso).	64
7.7	Resultados de S para $\gamma_x = \gamma_y = 2.00$ e $K_1 = 7.00$ (crescimento exponencial, condição inicial Pulso).	65
7.8	População e Ocupação para $K_1 = 7.00$ (crescimento exponencial, condição inicial Pulso).	66

7.9	Contribuição dos termos para $\gamma_x = \gamma_y = 1$ e $K_1 = 3.0$ (crescimento exponencial, condição inicial Pulso).	66
7.10	Resultados de S para $\gamma_x = \gamma_y = 1.00$ e $K_1 = 3.00$ (crescimento exponencial, condição inicial Domínio Cheio).	67
7.11	População e Ocupação para $K_1 = 3.00$ (crescimento exponencial, condição inicial Domínio Cheio).	68
7.12	Contribuição dos termos para $\gamma_x = \gamma_y = 1$ e $K_1 = 3.0$ (crescimento exponencial, condição inicial Domínio Cheio).	68
7.13	Resultados de S para $\gamma_x = \gamma_y = 1.00$ e $K_1 = 15.00$ (crescimento logístico, condição inicial Pulso).	69
7.14	Resultados de S para $\gamma_x = \gamma_y = 2.00$ e $K_1 = 15.00$ (crescimento logístico, condição inicial Pulso).	70
7.15	População e Ocupação para $K_1 = 15.00$ (crescimento logístico, condição inicial Pulso).	71
7.16	Contribuição dos termos para $\gamma_x = \gamma_y = 1$ e $K_1 = 15.0$ (crescimento logístico, condição inicial Pulso).	71
7.17	Resultados de S para $\gamma_x = \gamma_y = 1.00$ e $K_1 = 15.00$ (crescimento logístico, condição inicial Domínio Cheio).	72
7.18	População e Ocupação para $K_1 = 15.00$ (crescimento logístico, condição inicial Domínio Cheio).	73
7.19	Contribuição dos termos para $\gamma_x = \gamma_y = 1$ e $K_1 = 15.0$ (crescimento logístico, condição inicial Domínio Cheio).	73
9.1	Passos do experimento “In Vitro Healing Assay”.	76
9.2	Domínios considerados para o experimento “In Vitro Healing Assay”.	77
9.3	Exemplo de fotografia do experimento “In Vitro Healing Assay”.	77
9.4	Imagem do microscópio.	78
9.5	Spline sobre a imagem.	78
9.6	Área com células (pintada em vermelho).	79
9.7	Spline sobre a malha.	80
9.8	Distâncias até a spline.	80
9.9	Células selecionadas.	80
9.10	Condição Inicial.	80

LISTA DE TABELAS

6.1	Parâmetros gerais utilizados para verificar a relação 6.6.	51
6.2	Parâmetros utilizados em λ , γ_x e γ_y para verificar a convergência do esquema numérico.	51
6.3	Erro Relativo, no tempo final, obtidos na verificação $\tau \rightarrow 0$	51
6.4	Parâmetros para refinamento de malha.	53
6.5	Erro Relativo ($\ E\ _2$) de acordo com n e τ , obtidos no tempo final.	53
6.6	Taxa de convergência p^*	54
6.7	Tempo computacional, em minutos, para simulações utilizadas no Estudo Numérico.	55
7.1	Parâmetros gerais utilizados para verificar a influência de τ , D_x e D_y no modelo Telegráfico-Reativo 2D.	57
7.2	Parâmetros utilizados para verificar a influência de τ , D_x e D_y no modelo Telegráfico-Reativo 2D.	57
7.3	Momento em que foi registrado o primeiro resultado negativo. A marcação “s/r” indica “sem registro de resultados negativos”.	58
7.4	Valor mínimo encontrado.	58
7.5	Porcentagem do tempo da simulação com resultados negativos.	58
7.6	Tempo computacional, em minutos, para simulações utilizando τ constante. . .	62
7.7	Valores utilizados para variação de parâmetros (crescimento exponencial). . . .	63

LISTA DE SÍMBOLOS

\mathcal{A}	Área infinitesimal
A_x, A_y	Parâmetros para construção da condição inicial
A_S	Solução analítica da Equação do Calor
A_{mn}	Coefficiente para resolução analítica da Equação do Calor
α_κ	Densidade de partículas provenientes da posição $(\kappa - \delta_\kappa)$
B	Parâmetro para construção da condição inicial
β_κ	Densidade de partículas provenientes da posição $(\kappa + \delta_\kappa)$
C	Constante relacionada ao erro relativo da solução numérica
C_x, C_y	Parâmetros para construção da condição inicial
c^2	Condutividade térmica para Equação do Calor
D_κ	Difusividade das partículas no eixo κ
Δx	Comprimento da célula computacional no eixo x
Δy	Comprimento da célula computacional no eixo y
Δt	Intervalo de tempo para resolução computacional
δ	Comprimento do passo da partícula
δ_κ	Comprimento do passo da partícula no eixo κ
E_h	Erro relativo da solução numérica numa malha de células de área h
E_{rel}	Erro relativo do processo iterativo do Método Quasi-Não-Linear
$\ E\ _2$	Erro relativo da solução numérica
ϵ	Tempo necessário para partícula realizar um passo
F	Função de crescimento populacional ou reprodução de partículas
h	Área da célula computacional
γ	Velocidade da partícula
γ_κ	Velocidade da partícula no eixo κ
K_1	Taxa de crescimento da população
K_2	Capacidade máxima de ambiente
κ	Eixo cartesiano qualquer (x ou y)
L	Comprimento do domínio no eixo x
λ	Taxa de alteração da direção de movimento da partícula
M	Comprimento do domínio no eixo y
μ_m	Coefficiente para resolução analítica da Equação do Calor
m_j	Número de pontos tomados no eixo y para discretização
N_S	Solução numérica da Equação Telegráfica
n_i	Número de pontos tomados no eixo x para discretização
ν_n	Coefficiente para resolução analítica da Equação do Calor
Ω	Domínio espacial bidimensional

$\partial\Omega$	Fronteira do domínio espacial bidimensional
$int\Omega$	Interior do domínio espacial bidimensional
p	Probabilidade de persistência da direção de movimento da partícula
p^*	Taxa de convergência do esquema numérico
q	Probabilidade de inversão da direção de movimento da partícula
ρ_{mn}	Coefficiente para resolução analítica da Equação do Calor
S	Densidade de partículas total
S_κ	Densidade de partículas provenientes do movimento no eixo κ
S_I	Condição inicial de S
S_∞	Valor de referência de S
\bar{S}	Média dos valores vizinhos a S
t	Tempo
t_f	Tempo final
tol_{ocup}	Valor de S para considerar a célula computacional ocupada
τ	Tempo de retardo da partícula
V_S	Taxa de variação da densidade de partículas
x	Ponto no eixo cartesiano (horizontal)
x_i	Ponto no conjunto discreto tomado do eixo cartesiano (horizontal)
y	Ponto no eixo cartesiano (vertical)
y_j	Ponto no conjunto discreto tomado do eixo cartesiano (vertical)

1 INTRODUÇÃO

Os problemas de invasão biológica, ou seja, a capacidade de organismos se espalharem e se estabelecerem ou não numa determinada região, são de grande interesse matemático, cujas contribuições são cada vez mais relevantes para a biologia e a ecologia [22]. Enquanto grandes problemas epidemiológicos da atualidade, como a pandemia de COVID-19, a dengue e o câncer, evidenciam a importância do desenvolvimento de modelos matemáticos acurados para a descrição e previsão dos processos de invasão biológica, as fundações para esses modelos já haviam sido postas no século 19 [4]. Modelos como os que tratamos neste trabalho buscam descrever a dinâmica espaço-temporal da invasão utilizando duas bases matemáticas: Modelos de Movimento e Dinâmica Populacional [22].

1.1 HISTÓRICO DOS ESTUDOS SOBRE MOVIMENTO E DINÂMICA POPULACIONAL

Observações a respeito do movimento datam de 1828, com o trabalho de Robert Brown sobre partículas de pólen [4]. O tipo de movimento irregular descrito é conhecido hoje como Movimento Browniano e serviu de base para a posterior descrição matemática dos chamados Movimento Aleatórios. Na forma de equações diferenciais parciais, o trabalho de Sir Ronald Aylmer Fisher, de 1937 [7], traz a formulação do movimento browniano deduzido por meio de uma equação diferencial conhecida agora como Equação da Difusão, um caso particular da Equação do Calor desenvolvida por Joseph Fourier em 1822. Em contraponto ao modelo de Fisher, o modelo de movimento telegráfico que será desenvolvido neste trabalho abandona a ideia de movimento aleatório e assume a premissa de movimento correlacionado, no qual cada passo tem alguma relação com o anterior. Essa abordagem foi descrita em 1951 por Goldstein [10] e atualizada com os estudos de Mark Kac, publicados em 1974 [14]. Assim surgiu o modelo de Goldstein-Kac, também chamado de modelo telegráfico por tratar-se de um caso particular da Equação do Telégrafo, proposta por Oliver Heaviside em 1876.

Além disso, é conhecido que a formulação matemática da Dinâmica Populacional tem sua origem na obra de Thomas Robert Malthus, de 1798 [17], que discute as políticas sociais da época. As proposições assustadoras de Malthus levaram ao desenvolvimento dos estudos populacionais, formulando o Modelo de Crescimento Exponencial, que resultaram em modelos populacionais mais realistas. Dentre esses, destacamos o trabalho de Pierre-François Verhulst, apresentado no ano de 1838 [24], cuja solução foi mais tarde nomeada como “curva logística”. Esse modelo, chamado Crescimento Logístico, junto ao Crescimento Exponencial, são utilizados até hoje, observadas suas possibilidades e limitações. Ademais, novos modelos ainda são estudados e desenvolvidos, como a modelagem proposta por Warder Clyde Allee e Edith Bowen em 1938 [2], envolvendo o efeito da agregação da população em face a um predador comum, modelo que ficou conhecido como “Efeito Allee”.

1.2 MIGRAÇÃO CELULAR COLETIVA

Dentre os problemas de invasão, temos, na micro-biologia, a migração celular. Esse comportamento é essencial ao ciclo celular e à capacidade de sobrevivência e reprodução das células. A dinâmica de migração celular pode ser diferente quando analisamos células individuais ou conjuntos de células, e disso surge um tópico mais específico chamado "migração celular coletiva".

A migração celular coletiva, isto é, de conjuntos de células, é um grande passo em vários processos biológicos, como cicatrização, metástase e resposta imune, e, portanto, de grande interesse biológico [11]. Graças à emergência de um comportamento de grupo, o movimento de um coletivo de células pode ser bastante diferente do movimento que uma célula que compõe tal coletivo faria sozinha [23].

O surgimento de um comportamento de grupo influenciando o movimento de cada indivíduo do grupo é uma ocorrência comum e facilmente observável em coletivos animais: os padrões de movimento de cardumes de peixes ou bandos de pássaros são conhecidos há séculos. O entendimento desse tipo de fenômeno em seres de ordem muito menor, como bactérias e células, é muito mais recente. O Modelo Vicsek, por exemplo, que descreve uma dinâmica de comportamento de grupo por meio de uma única regra e obtém ótimos resultados, foi publicado apenas em 1995 [25].

O Modelo Vicsek propõe que a cada passo de tempo a partícula, por exemplo, uma célula, ajuste sua direção de movimento de acordo com a direção média das partículas num raio ao seu redor. Assim, obtém-se um método baseado em densidade de partículas. Além disso, os coletivos de partículas tendem a obter uma direção preferencial, de forma que apenas um cruzamento com outro coletivo muito grande seja capaz de alterar a tendência estabelecida. Esse tipo de comportamento é compatível com as hipóteses dos modelos matemáticos baseados em equações de difusão [16].

1.3 OBJETIVOS

Entre os modelos de invasão biológica, é comum utilizar-se da Equação Difusiva junto a um crescimento Exponencial ou Logístico para descrever o movimento de uma população de partículas. Cada partícula representa uma unidade da população estudada, podendo ser, por exemplo, uma molécula, célula, organismo etc. Contudo, apesar dos bons resultados obtidos, alguns trabalhos, como [13], questionam a simplicidade do modelo difusivo e sugerem o uso da Equação Telegráfica para melhores resultados. Dentre os pontos negativos do uso da Equação Difusiva, destacamos a possibilidade de que uma partícula assuma velocidade infinita, o que não é coerente num caso biológico. Além disso, o movimento é totalmente aleatório em cada passo, não levando em consideração o momento das partículas. A Equação Telegráfica, por sua vez, considera apenas a velocidade finita das partículas, num movimento em que cada passo está correlacionado ao anterior, gerando momento e um tempo de retardo para reação a mudan-

ças de situação. Entretanto, vemos em trabalhos mais atuais, como [6], que o uso da Equação Telegráfica pode gerar resultados negativos, mesmo com o uso de parâmetros coerentes, e tais não possuem sentido num contexto biológico, indicando a necessidade de mais estudos sobre esse modelo.

Portanto, diante do contexto apresentado, propomos, no presente trabalho, um inédito modelo para o tempo de retardo em conjunto com a Equação Telegráfica em duas dimensões, a fim de garantir o sentido biológico evitando soluções negativas.

A modelagem segue hipóteses biológicas, baseadas em movimento celular, visando, em parceria com o Laboratório de Genética Toxicológica da Universidade Estadual de Londrina, sua aplicação em um problema do tipo "In Vitro Healing Assay". Detalhes desse tipo de trabalho podem ser encontrados no capítulo 9.1.

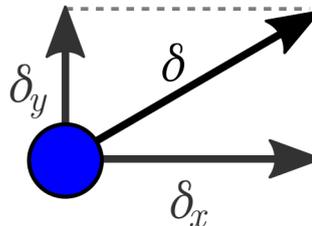
2 MODELAGEM MATEMÁTICA

Neste trabalho, utilizaremos a Equação Telegráfica em duas dimensões, estendida do modelo de Goldstein-Kac, para descrever uma população de partículas. As partículas modelam a densidade populacional local que é o ente físico de nosso interesse. Consideraremos também o Termo Reativo para descrever a produção das partículas. Além disso, utilizaremos técnicas numéricas para resolução do modelo obtido, incluindo métodos numéricos modernos. Sendo assim, objetivamos detalhar nesta seção toda a ferramenta matemática a ser utilizada com o propósito de descrever o processo de invasão biológica 2D.

2.1 MODELAGEM MATEMÁTICA DA EQUAÇÃO GOVERNANTE

Suponha que um certo número de partículas se mova sobre um plano bidimensional. Consideraremos esse plano formado por dois eixos cartesianos ortogonais, x e y . As partículas movem-se com passos de comprimento δ que levam ϵ tempo para serem executados. O movimento das partículas pelo plano será considerado pela soma de seus componentes vetoriais horizontal δ_x e vertical δ_y , conforme ilustrado na Figura 2.1.

Figura 2.1: Representação do movimento da partícula.



Fonte: o Autor.

Seja $\kappa = x$ ou y uma representação geral para a direção do movimento em um dos eixos. Em cada componente κ a partícula move-se com uma velocidade finita γ_κ e seu movimento segue o padrão de caminhada aleatória correlacionada; desta maneira, o movimento mantém a direção no eixo κ com probabilidade p , ou inverte a direção no mesmo eixo com probabilidade q . Além disso, para ϵ pequeno temos que $p = 1 - \lambda\epsilon$ e $q = \lambda\epsilon$, sendo λ a taxa de inversão do movimento no eixo κ [26]. O movimento em cada direção, x ou y , será avaliado de maneira independente; assim, o movimento na direção κ , suas características e sua probabilidade de inversão serão influenciados apenas pelo que ocorre no movimento da própria direção κ . Além disso, as partículas contarão com a capacidade de se reproduzirem, descrita por alguma função F . Por exemplo, F poderia ser o crescimento Logístico.

Definimos então uma função $\alpha_\kappa(\kappa, t)$ que descreve a quantidade de partículas que chegaram numa posição κ no tempo t provenientes da posição $(\kappa - \delta_\kappa)$. De forma análoga, definiremos $\beta_\kappa(\kappa, t)$ como as partículas que chegaram movendo-se da posição $(\kappa + \delta_\kappa)$. Temos então

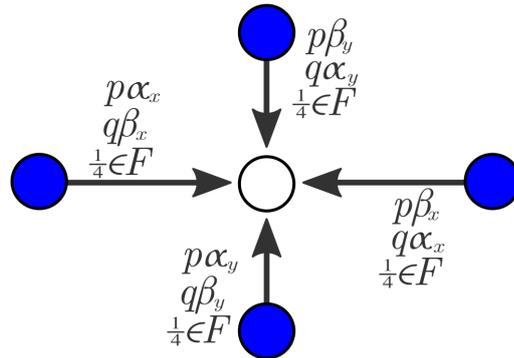
$$\alpha_\kappa(\kappa, t + \epsilon) = p\alpha_\kappa(\kappa - \delta_\kappa, t) + q\beta_\kappa(\kappa - \delta_\kappa, t) + \frac{1}{4}\epsilon F(S(\kappa - \delta_\kappa, t)) \quad (2.1)$$

e

$$\beta_\kappa(\kappa, t + \epsilon) = p\beta_\kappa(\kappa + \delta_\kappa, t) + q\alpha_\kappa(\kappa + \delta_\kappa, t) + \frac{1}{4}\epsilon F(S(\kappa + \delta_\kappa, t)), \quad (2.2)$$

sendo $S(x, y, t) = \alpha_x + \beta_x + \alpha_y + \beta_y$, $F(S(\kappa, t))$ é a função que descreve a dinâmica de crescimento natural (ou produção) do número de partículas. Neste caso, $\epsilon F(S)$ representa o número de partículas geradas no intervalo de tempo ϵ e consideramos que as partículas recém-geradas possuem igual probabilidade de se moverem para norte, sul, leste ou oeste - por isso a multiplicação por $\frac{1}{4}$ exibida nas equações (2.1) e (2.2). A dinâmica fica ilustrada conforme a Figura 2.2.

Figura 2.2: Representação das partículas que chegam a um dado ponto.



Fonte: o Autor.

Trabalharemos com cada componente κ , isto é, $\kappa = x$ e $\kappa = y$, separadamente. Desta forma iremos desenvolver as equações para uma componente κ qualquer. Sendo assim, expandindo as equações (2.1) e (2.2) em séries de Taylor, com respeito a t do lado esquerdo da equação e a κ do lado direito, obtemos

$$\alpha_\kappa + \epsilon \frac{\partial \alpha_\kappa}{\partial t} + O(\epsilon^2) = p \left[\alpha_\kappa - \delta_\kappa \frac{\partial \alpha_\kappa}{\partial \kappa} + O(\delta_\kappa^2) \right] + q \left[\beta_\kappa - \delta_\kappa \frac{\partial \beta_\kappa}{\partial \kappa} + O(\delta_\kappa^2) \right] + \frac{1}{4}\epsilon \left[F(S) - \delta_\kappa \frac{\partial F(S)}{\partial \kappa} + O(\delta_\kappa^2) \right] \quad (2.3)$$

e

$$\beta_\kappa + \epsilon \frac{\partial \beta_\kappa}{\partial t} + O(\epsilon^2) = p \left[\beta_\kappa + \delta_\kappa \frac{\partial \beta_\kappa}{\partial \kappa} + O(\delta_\kappa^2) \right] + q \left[\alpha_\kappa + \delta_\kappa \frac{\partial \alpha_\kappa}{\partial \kappa} + O(\delta_\kappa^2) \right] + \frac{1}{4} \epsilon \left[F(S) + \delta_\kappa \frac{\partial F(S)}{\partial \kappa} + O(\delta_\kappa^2) \right]. \quad (2.4)$$

A série de Taylor foi truncada de modo a obter uma equação de segunda ordem.

Substituindo $p = 1 - \lambda\epsilon$ e $q = \lambda\epsilon$ na equação (2.3)

$$\alpha_\kappa + \epsilon \frac{\partial \alpha_\kappa}{\partial t} + O(\epsilon^2) = (1 - \lambda\epsilon) \left[\alpha_\kappa - \delta_\kappa \frac{\partial \alpha_\kappa}{\partial \kappa} + O(\delta_\kappa^2) \right] + \lambda\epsilon \left[\beta_\kappa - \delta_\kappa \frac{\partial \beta_\kappa}{\partial \kappa} + O(\delta_\kappa^2) \right] + \frac{1}{4} \epsilon \left[F(S) - \delta_\kappa \frac{\partial F(S)}{\partial \kappa} + O(\delta_\kappa^2) \right],$$

distribuindo as multiplicações

$$\alpha_\kappa + \epsilon \frac{\partial \alpha_\kappa}{\partial t} + O(\epsilon^2) = \alpha_\kappa - \delta_\kappa \frac{\partial \alpha_\kappa}{\partial \kappa} + O(\delta_\kappa^2) - \lambda\epsilon\alpha_\kappa + \lambda\epsilon\delta_\kappa \frac{\partial \alpha_\kappa}{\partial \kappa} - \lambda\epsilon O(\delta_\kappa^2) + \lambda\epsilon\beta_\kappa - \lambda\epsilon\delta_\kappa \frac{\partial \beta_\kappa}{\partial \kappa} + \lambda\epsilon O(\delta_\kappa^2) + \frac{1}{4}\epsilon F(S) - \frac{1}{4}\epsilon\delta_\kappa \frac{\partial F(S)}{\partial \kappa} + \frac{1}{4}\epsilon O(\delta_\kappa^2),$$

dividindo por ϵ

$$\frac{\alpha_\kappa}{\epsilon} + \frac{\partial \alpha_\kappa}{\partial t} + O(\epsilon) = \frac{\alpha_\kappa}{\epsilon} - \frac{\delta_\kappa}{\epsilon} \frac{\partial \alpha_\kappa}{\partial \kappa} + \frac{O(\delta_\kappa^2)}{\epsilon} - \lambda\alpha_\kappa + \lambda\delta_\kappa \frac{\partial \alpha_\kappa}{\partial \kappa} - \lambda O(\delta_\kappa^2) + \lambda\beta_\kappa - \lambda\delta_\kappa \frac{\partial \beta_\kappa}{\partial \kappa} + \lambda O(\delta_\kappa^2) + \frac{1}{4}F(S) - \frac{1}{4}\delta_\kappa \frac{\partial F(S)}{\partial \kappa} + \frac{1}{4}O(\delta_\kappa^2)$$

e removendo termos idênticos dos dois lados da igualdade, obtemos

$$\frac{\partial \alpha_\kappa}{\partial t} + O(\epsilon) = -\frac{\delta_\kappa}{\epsilon} \frac{\partial \alpha_\kappa}{\partial \kappa} + \frac{O(\delta_\kappa^2)}{\epsilon} - \lambda\alpha_\kappa + \lambda\delta_\kappa \frac{\partial \alpha_\kappa}{\partial \kappa} - \lambda O(\delta_\kappa^2) + \lambda\beta_\kappa - \lambda\delta_\kappa \frac{\partial \beta_\kappa}{\partial \kappa} + \lambda O(\delta_\kappa^2) + \frac{1}{4}F(S) - \frac{1}{4}\delta_\kappa \frac{\partial F(S)}{\partial \kappa} + \frac{1}{4}O(\delta_\kappa^2).$$

Agora, tomando o limite com $\delta_\kappa, \epsilon \rightarrow 0$, temos

$$\frac{\partial \alpha_\kappa}{\partial t} + \underbrace{O(\epsilon)}_{\rightarrow 0} = \underbrace{-\frac{\delta_\kappa}{\epsilon} \frac{\partial \alpha_\kappa}{\partial \kappa}}_{\rightarrow -\gamma_\kappa} + \underbrace{\frac{O(\delta_\kappa^2)}{\epsilon}}_{\rightarrow 0} - \lambda\alpha_\kappa + \underbrace{\lambda\delta_\kappa \frac{\partial \alpha_\kappa}{\partial \kappa}}_{\rightarrow 0} - \underbrace{\lambda O(\delta_\kappa^2)}_{\rightarrow 0} + \lambda\beta_\kappa - \underbrace{\lambda\delta_\kappa \frac{\partial \beta_\kappa}{\partial \kappa}}_{\rightarrow 0} + \underbrace{\lambda O(\delta_\kappa^2)}_{\rightarrow 0} + \frac{1}{4}F(S) - \underbrace{\frac{1}{4}\delta_\kappa \frac{\partial F(S)}{\partial \kappa}}_{\rightarrow 0} + \underbrace{\frac{1}{4}O(\delta_\kappa^2)}_{\rightarrow 0},$$

obtendo

$$\frac{\partial \alpha_\kappa}{\partial t} + \gamma_\kappa \frac{\partial \alpha_\kappa}{\partial \kappa} = \lambda \beta_\kappa - \lambda \alpha_\kappa + \frac{1}{4} F(S), \quad (2.5)$$

e, de forma análoga, da equação (2.4) obtemos

$$\frac{\partial \beta_\kappa}{\partial t} - \gamma_\kappa \frac{\partial \beta_\kappa}{\partial \kappa} = \lambda \alpha_\kappa - \lambda \beta_\kappa + \frac{1}{4} F(S). \quad (2.6)$$

Note que na expressão acima consideramos que

$$\lim_{\substack{\delta_\kappa \rightarrow 0 \\ \epsilon \rightarrow 0}} -\frac{\delta_\kappa}{\epsilon} = -\gamma_\kappa,$$

o que é justificado pela definição de velocidade instantânea por meio do limite [12]. Uma vez que obviamente o limite existe, obtemos então a velocidade instantânea da partícula, a saber, γ_κ .

Dessa maneira, também consideramos que

$$\lim_{\substack{\delta_\kappa \rightarrow 0 \\ \epsilon \rightarrow 0}} \frac{O(\delta_\kappa^2)}{\epsilon} = \lim_{\substack{\delta_\kappa \rightarrow 0 \\ \epsilon \rightarrow 0}} \frac{\delta_\kappa O(\delta_\kappa)}{\epsilon} = \lim_{\substack{\delta_\kappa \rightarrow 0 \\ \epsilon \rightarrow 0}} \frac{\delta_\kappa}{\epsilon} \lim_{\delta_\kappa \rightarrow 0} O(\delta_\kappa) = \gamma_\kappa \lim_{\delta_\kappa \rightarrow 0} O(\delta_\kappa) = 0.$$

Tomaremos então a soma das equações (2.5) e (2.6)

$$\frac{\partial(\alpha_\kappa + \beta_\kappa)}{\partial t} + \gamma_\kappa \frac{\partial(\alpha_\kappa - \beta_\kappa)}{\partial \kappa} = \frac{1}{2} F(S) \quad (2.7)$$

e também a subtração das equações (2.5) por (2.6)

$$\frac{\partial(\alpha_\kappa - \beta_\kappa)}{\partial t} + \gamma_\kappa \frac{\partial(\alpha_\kappa + \beta_\kappa)}{\partial \kappa} = -2\lambda(\alpha_\kappa - \beta_\kappa). \quad (2.8)$$

Derivando a equação (2.7) com respeito a t , multiplicando γ_κ à equação (2.8) e a derivando por κ , chegamos em

$$\frac{\partial^2(\alpha_\kappa + \beta_\kappa)}{\partial t^2} + \gamma_\kappa \frac{\partial^2(\alpha_\kappa - \beta_\kappa)}{\partial \kappa \partial t} = \frac{1}{2} \frac{\partial F(S)}{\partial t} \quad (2.9)$$

e

$$\gamma_\kappa \frac{\partial^2(\alpha_\kappa - \beta_\kappa)}{\partial \kappa \partial t} + \gamma_\kappa^2 \frac{\partial^2(\alpha_\kappa + \beta_\kappa)}{\partial \kappa^2} = -2\gamma_\kappa \lambda \frac{\partial(\alpha_\kappa - \beta_\kappa)}{\partial \kappa}. \quad (2.10)$$

Note que a equação (2.7) nos fornece a relação

$$-\gamma_\kappa \frac{\partial(\alpha_\kappa - \beta_\kappa)}{\partial \kappa} = \frac{\partial(\alpha_\kappa + \beta_\kappa)}{\partial t} - \frac{1}{2} F(S),$$

que pode ser substituída do lado direito da equação (2.10), resultando em

$$\gamma_\kappa \frac{\partial^2(\alpha_\kappa - \beta_\kappa)}{\partial \kappa \partial t} + \gamma_\kappa^2 \frac{\partial^2(\alpha_\kappa + \beta_\kappa)}{\partial \kappa^2} = 2\lambda \frac{\partial(\alpha_\kappa + \beta_\kappa)}{\partial t} - \lambda F(S). \quad (2.11)$$

Subtraindo a equação (2.11) de (2.9), temos a seguinte relação para o movimento na direção κ :

$$\frac{\partial^2(\alpha_\kappa + \beta_\kappa)}{\partial t^2} + 2\lambda \frac{\partial(\alpha_\kappa + \beta_\kappa)}{\partial t} - \frac{1}{2} \frac{\partial F(S)}{\partial t} = \gamma_\kappa^2 \frac{\partial^2(\alpha_\kappa + \beta_\kappa)}{\partial \kappa^2} + \lambda F(S).$$

Substituindo $S_\kappa = \alpha_\kappa + \beta_\kappa$, temos então a equação

$$\frac{\partial^2 S_\kappa}{\partial t^2} + 2\lambda \frac{\partial S_\kappa}{\partial t} - \frac{1}{2} \frac{\partial F(S)}{\partial t} = \gamma_\kappa^2 \frac{\partial^2 S_\kappa}{\partial \kappa^2} + \lambda F(S). \quad (2.12)$$

Assim, para $\kappa = x$, temos

$$\frac{\partial^2 S_x}{\partial t^2} + 2\lambda \frac{\partial S_x}{\partial t} - \frac{1}{2} \frac{\partial F(S)}{\partial t} = \gamma_x^2 \frac{\partial^2 S_x}{\partial x^2} + \lambda F(S) \quad (2.13)$$

e, para $\kappa = y$,

$$\frac{\partial^2 S_y}{\partial t^2} + 2\lambda \frac{\partial S_y}{\partial t} - \frac{1}{2} \frac{\partial F(S)}{\partial t} = \gamma_y^2 \frac{\partial^2 S_y}{\partial y^2} + \lambda F(S). \quad (2.14)$$

Note que

$$S(x, y, t) = S_x(x, y, t) + S_y(x, y, t);$$

além disso, como cada direção de movimento depende apenas do que ocorre na própria direção, temos que S_x é constante em y e S_y é constante em x , portanto,

$$\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} = \frac{\partial^2(S_x + S_y)}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 S_x}{\partial x^2} + \underbrace{\frac{\partial^2 S_y}{\partial x^2}}_{=0} = \frac{\partial^2 S_x}{\partial x^2} \quad (2.15)$$

e

$$\frac{\partial^2 S}{\partial y^2} = \frac{\partial^2(S_x + S_y)}{\partial y^2} = \underbrace{\frac{\partial^2 S_x}{\partial y^2}}_{=0} + \frac{\partial^2 S_y}{\partial y^2} = \frac{\partial^2 S_y}{\partial y^2}. \quad (2.16)$$

Somando as equações (2.13) e (2.14), levando em conta os resultados apresentados pelas equações (2.15) e (2.16), obtemos

$$\frac{\partial^2 S}{\partial t^2} + 2\lambda \frac{\partial S}{\partial t} - \frac{\partial F(S)}{\partial t} = \gamma_x^2 \left(\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right) + \gamma_y^2 \left(\frac{\partial^2 S}{\partial y^2} \right) + 2\lambda F(S). \quad (2.17)$$

Notemos ainda que temos a derivada parcial de $F(S)$ em relação a t . Sendo

esta a função composta $F(S(x, y, t))$, obtemos pela regra da cadeia que

$$\frac{\partial F(S)}{\partial t} = \frac{dF}{dS} \frac{\partial S}{\partial t}.$$

Substituindo esse resultado na equação (2.17),

$$\frac{\partial^2 S}{\partial t^2} + 2\lambda \frac{\partial S}{\partial t} - \frac{dF}{dS} \frac{\partial S}{\partial t} = \gamma_x^2 \left(\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right) + \gamma_y^2 \left(\frac{\partial^2 S}{\partial y^2} \right) + 2\lambda F(S),$$

agrupando os termos semelhantes

$$\frac{\partial^2 S}{\partial t^2} + \left[2\lambda - \frac{dF}{dS} \right] \frac{\partial S}{\partial t} = \gamma_x^2 \left(\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right) + \gamma_y^2 \left(\frac{\partial^2 S}{\partial y^2} \right) + 2\lambda F(S)$$

e dividindo por 2λ , temos

$$\frac{1}{2\lambda} \frac{\partial^2 S}{\partial t^2} + \left[1 - \frac{1}{2\lambda} \frac{dF}{dS} \right] \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\gamma_x^2}{2\lambda} \left(\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right) + \frac{\gamma_y^2}{2\lambda} \left(\frac{\partial^2 S}{\partial y^2} \right) + F(S).$$

Por fim, nomeando $\tau = \frac{1}{2\lambda}$, o que representa o tempo de retardo do movimento, $D_x = \frac{\gamma_x^2}{2\lambda}$ e $D_y = \frac{\gamma_y^2}{2\lambda}$, os coeficientes de difusão das partículas nos eixos x e y respectivamente, obtemos a equação

$$\tau \frac{\partial^2 S}{\partial t^2} + \left[1 - \tau \frac{dF}{dS} \right] \frac{\partial S}{\partial t} = D_x \left(\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right) + D_y \left(\frac{\partial^2 S}{\partial y^2} \right) + F(S), \quad (2.18)$$

que é a equação governante de nosso modelo, nomeada como equação reativa-telegráfica 2D.

Uma vez que a função S representa a densidade de partículas em cada ponto do domínio, podemos calcular também a quantidade de partículas num determinado momento no tempo, ou população, tomando a integral da função S sobre todo o domínio espacial, isto é,

$$Pop(t) = \iint_{\Omega} S(x, y, t), \quad (2.19)$$

sendo Ω o domínio espacial da função. O domínio Ω pode ser simplesmente nomeado como a região 2D onde se desenvolve o processo de invasão.

A equação (2.18) descreve a dinâmica de movimento apresentada no início deste capítulo, porém não necessariamente apresenta apenas soluções positivas, isto é, em determinadas circunstâncias pode retornar resultados negativos. Uma solução negativa não faz sentido do ponto de vista de densidade populacional.

O surgimento desses resultados negativos é notável pela sua natureza contraditória: por um lado é inesperado que eles existam, pois nenhuma hipótese tomada na formulação da equação indica a possibilidade de números negativos. Por outro lado, a equação

resultante é uma equação de onda, na qual resultados negativos são esperados.

A ocorrência de resultados negativos é notada e discutida no modelo unidimensional em [6]. Disto, ao menos duas abordagens foram consideradas: a influência das condições de contorno em domínios finitos, como em [21], e a relação entre as soluções negativas e o coeficiente λ , como em [18], no qual o autor propõe um modelo para o caso unidimensional. Neste trabalho, seguindo essa segunda abordagem, iremos propor um inédito modelo para λ no contexto bidimensional e comparar seus resultados com o caso em que λ é constante.

2.2 CONDIÇÃO DE CONTORNO

Precisamos antes definir condições de contorno para o cálculo da equação diferencial parcial.

Vários tipos de condição de contorno podem ser definidas para problemas envolvendo equações diferenciais. Apesar de dependerem do problema modelado, algumas são recorrentes em problemas de dinâmica populacional. Portanto, utilizaremos uma dessas condições comuns nas análises deste trabalho: a condição de contorno de Dirichlet, dada por

$$S(x, y, t) = 0, \quad \forall (x, y) \in \partial\Omega. \quad (2.20)$$

Essa condição de contorno é, matematicamente, a mais simples. Além disso, a diferença entre o movimento descrito pela equação reativa-difusiva e pela equação reativa-tegráfica é atenuada com o uso da condição de contorno de Dirichlet [1], favorecendo o estudo realizado no capítulo 6.2.

Outras condições de contorno podem ser utilizadas para diferentes contextos. Um exemplo a ser discutido no capítulo 9.2 é a condição de derivada nula, chamada de condição de Von Neumann, que descreve um fluxo nulo de partículas para fora do domínio.

2.3 CONDIÇÕES INICIAIS

Uma vez que definimos a equação governante para nosso modelo, é necessário também definir condições iniciais para o cálculo da equação diferencial parcial. Conforme [8], para garantir que o problema dado pela equação (2.18) e uma condição de contorno (como a condição (2.20)) seja bem posto, é necessário um número de condições iniciais igual à ordem da maior derivada no tempo da equação. Neste caso, serão necessárias duas condições iniciais, que neste trabalho serão dadas para a função $S(x, y, t)$ e sua primeira derivada no tempo $\frac{\partial S(x, y, t)}{\partial t}$.

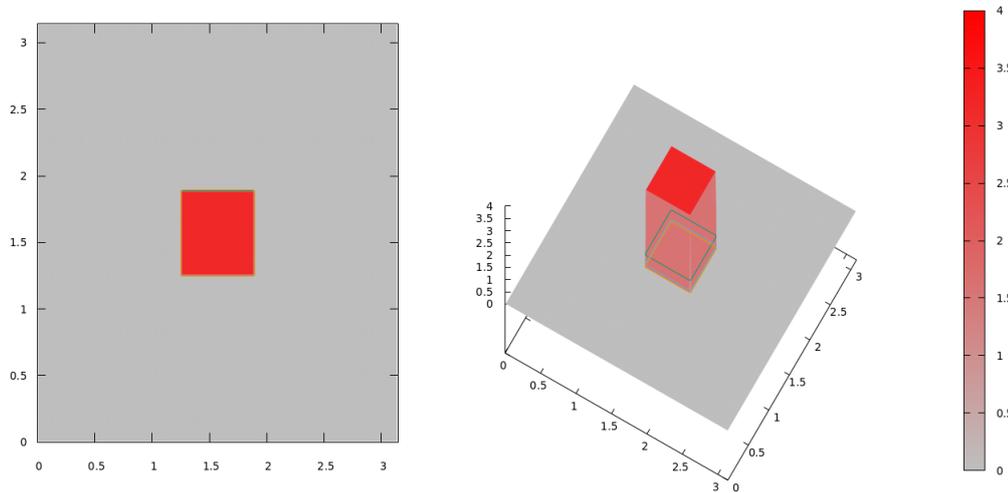
2.3.1 Condição Inicial Tipo Pulso

O primeiro tipo de condição inicial considerada será uma função do tipo pulso, dada por

$$S(x, y, 0) = \begin{cases} B & \text{se } A_x \leq x \leq C_x \text{ e } A_y \leq y \leq B_y; \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (2.21)$$

sendo $A_x, C_x, A_y, C_y, B \in \mathbb{R}$ e Ω a região 2D do domínio. A Figura 2.3 ilustra a condição inicial de Pulso, com $A_x = A_y = 1.2545$, $C_x = C_y = 1.8870$ e $B = \pi$.

Figura 2.3: Condição Inicial tipo Pulso.



Fonte: o Autor.

Esse tipo de condição inicial fornece uma densidade uniforme de partículas numa região retangular determinada no domínio da função. Assim, é possível analisarmos o comportamento da equação em locais de interesse do domínio da função. Neste trabalho, usaremos essa condição para avaliar a invasão partindo do centro para as bordas do domínio.

Além disso, neste tipo de condição inicial podemos calcular analiticamente a população inicial por meio de

$$Pop(0) = (C_x - A_x)(C_y - A_y)B. \quad (2.22)$$

2.3.2 Condição Inicial Tipo Domínio Cheio

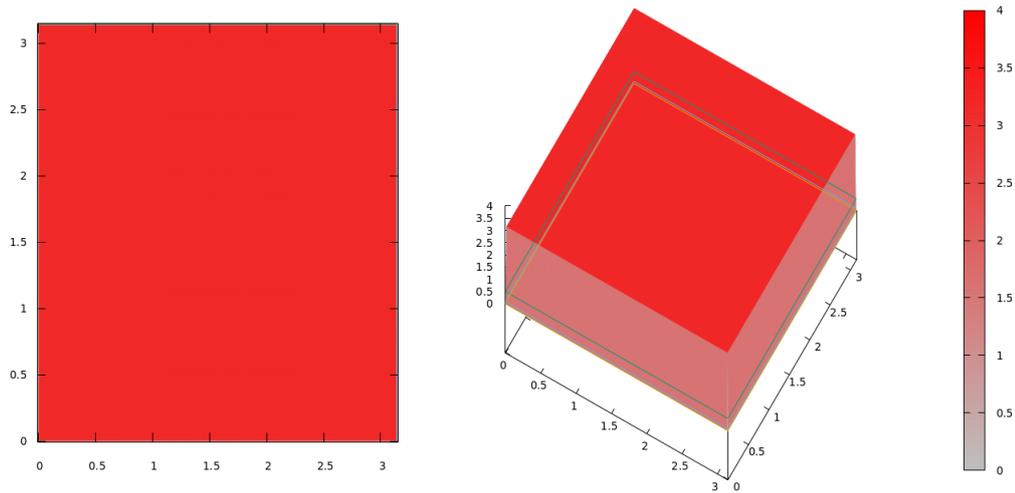
Outra condição inicial que será utilizada neste trabalho é o Domínio Cheio, dada pela função

$$S(x, y, 0) = \begin{cases} 0 & \text{se } (x, y) \in \partial\Omega; \\ B & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (2.23)$$

que representa, de certa maneira, um pulso ocupando todo o domínio, com a exceção das bordas.

Ilustramos esse tipo de condição inicial na Figura 2.4, com $B = \pi$ e $\Omega = (0, \pi) \times (0, \pi)$. A partir dela, avaliaremos duas situações na dinâmica de ação da equação diferencial: o comportamento da função num meio de grande densidade de partículas e a possível inversão de fase da função nas bordas do domínio, característica de equações da onda.

Figura 2.4: Condição Inicial tipo Domínio Cheio.



Fonte: o Autor.

Podemos calcular a população inicial neste caso por meio de

$$Pop(0) = \text{área}(\Omega)B, \quad (2.24)$$

em que $\text{área}(\Omega)$ é a área total do domínio bidimensional.

2.3.3 Condição Inicial da Derivada Primeira

Para a derivada primeira da função S no tempo, iremos considerar a seguinte condição inicial:

$$\frac{\partial S(x, y, 0)}{\partial t} = 0, \quad \forall (x, y) \in \Omega, \quad (2.25)$$

sendo Ω o domínio bidimensional da função.

Essa condição inicial assume que no instante inicial não há movimento das partículas consideradas. No contexto biológico, isso significa considerar a invasão a partir do repouso. Essa hipótese oferece uma boa aproximação da dinâmica inicial de problemas nos quais o organismo invasor é inserido no ambiente a ser invadido, ou quando os organismos já possuem domínio sobre o ambiente mas parte deles é removida de alguma área, abrindo espaço para uma re-invasão.

3 MODELO PROPOSTO PARA O TEMPO DE RETARDO

Conforme descrito ao final da modelagem da equação governante, existe a possibilidade do surgimento de soluções negativas para a equação reativa-telegráfica bidimensional.

Neste trabalho, definiremos um modelo para o tempo de retardo τ baseado em hipóteses biológicas, com o objetivo de melhor modelar um problema de invasão e evitar o surgimento de soluções negativas.

3.1 DESCRIÇÃO DO MODELO PARA TEMPO DE RETARDO

Conforme definido na equação (2.18), o tempo de retardo do movimento é dado por

$$\tau = \frac{1}{2\lambda}, \quad (3.1)$$

sendo que λ representa a taxa de inversão do movimento das partículas em cada componente.

Em problemas aplicados, existem fatores que podem levar à alteração dessa taxa de inversão, tanto de maneira global (em todo domínio), quanto local (em pontos do domínio). Neste trabalho, iremos considerar a possível mudança do comportamento da inversão do movimento em nível local. Dentre possíveis fatores que podem alterar a taxa de inversão do movimento, iremos considerar a taxa de variação da densidade de partículas.

Tomaremos a taxa de variação da densidade de partículas como

$$V_S = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{S(x, y, t + h) - S(x, y, t)}{h} = \frac{\partial S(x, y, t)}{\partial t}, \quad (3.2)$$

que assume a seguinte dimensão

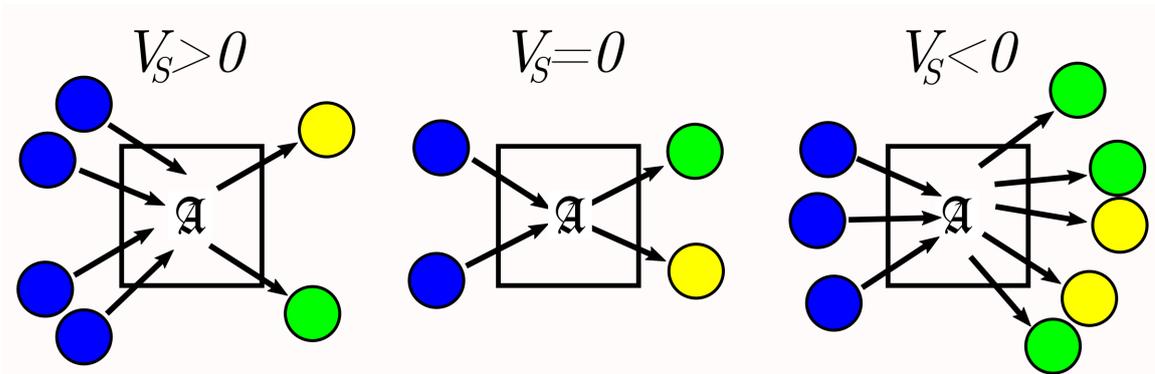
$$[V_S] = \frac{[\text{unidade de densidade}]}{[\text{unidade de tempo}]}. \quad (3.3)$$

Por meio de V_S , podemos verificar o comportamento do movimento de partículas numa área infinitesimal \mathfrak{A} desejada, sendo que:

$$\begin{aligned} V_S > 0 &\Rightarrow (\text{n}^\circ \text{ de partículas que entram em } \mathfrak{A}) > (\text{n}^\circ \text{ de partículas que saem de } \mathfrak{A}); \\ V_S = 0 &\Rightarrow (\text{n}^\circ \text{ de partículas que entram em } \mathfrak{A}) = (\text{n}^\circ \text{ de partículas que saem de } \mathfrak{A}); \\ V_S < 0 &\Rightarrow (\text{n}^\circ \text{ de partículas que entram em } \mathfrak{A}) < (\text{n}^\circ \text{ de partículas que saem de } \mathfrak{A}), \end{aligned} \quad (3.4)$$

de forma que podemos analisar, em qualquer área do domínio, se há um esvaziamento ou aglomeração de partículas na área infinitesimal. Essa dinâmica está ilustrada na Figura 3.1.

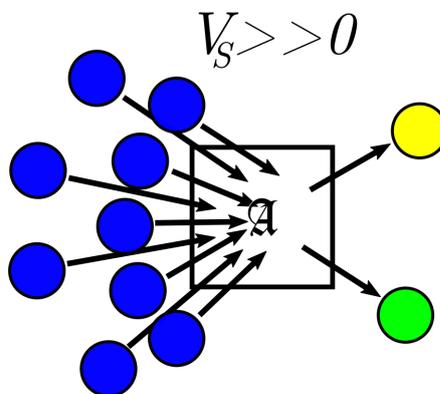
De qualquer forma, um grande valor de V_S indica um fluxo de entrada/saída

Figura 3.1: Exemplo de interpretação para V_S .

As partículas que entram na área estão indicadas em azul e as que saem estão pintadas de verde. As partículas recém-geradas estão em amarelo, e também saem.

Fonte: o Autor.

bastante assimétrico no local, representando assim um forte comportamento de imigração (entrada de partículas) ou emigração (saída de partículas). Um exemplo de V_S muito maior que zero ($V_S \gg 0$) está ilustrado na Figura 3.2.

Figura 3.2: Exemplo de interpretação para $V_S \gg 0$.

As partículas que entram na área estão indicadas em azul e as que saem estão pintadas de verde. As partículas recém-geradas estão em amarelo, e também saem. Note a grande diferença entre a quantidade de partículas que entram e saem.

Fonte: o Autor.

Iremos considerar que qualquer um desses dois comportamentos, em grande magnitude, reduzem o tempo de retardo das partículas, uma vez que o fluxo assimétrico induz o movimento da partícula em sua direção, evitando um atraso na resposta.

Entretanto, é necessário avaliar como a magnitude dessa variação compara-se à densidade de partículas em si, de forma que não seja necessário um parâmetro externo ao problema para julgar se aquela é grande ou pequena. Desta maneira, definiremos um termo S_∞ ,

que significa valor de referência, o qual será usado para relativizar a magnitude de V_S .

Assim, visando modelar o parâmetro de tempo de retardo τ , tomaremos λ como a magnitude de V_S em relação à função S por meio de

$$\lambda = \frac{|V_S|}{S_\infty}, \quad (3.5)$$

sendo que S_∞ é um valor da função S de referência. Além disso, tomamos o módulo de V_S para considerar apenas a magnitude da variação de S , e não sua direção.

A equação (3.5) assume, então, a seguinte dimensão

$$[\lambda] = \frac{\frac{[\text{unidade de densidade}]}{[\text{unidade de tempo}]}}{[\text{unidade de densidade}]} = [\text{unidade de tempo}^{-1}] \quad (3.6)$$

e o tempo de retardo τ assume

$$[\tau] = [\text{unidade de tempo}]. \quad (3.7)$$

Notamos que, de acordo com as probabilidades $p = 1 - \lambda\epsilon$ e $q = \lambda\epsilon$ usadas na dedução da equação reativa-telegráfica bidimensional (ver equações (2.1) e (2.2)), sendo ϵ uma medida de tempo, é necessário que a unidade de medida de λ seja do tipo $[\text{unidade de tempo}^{-1}]$.

Tomando λ por meio da equação (3.5) e sabendo que, conforme a equação (3.1), temos o tempo de retardo inversamente proporcional a λ , verificamos que a taxa de variação V_S impõe a seguinte dinâmica no processo mantendo o valor de S_∞ fixo:

$$\begin{aligned} V_S \approx 0 &\Rightarrow \tau \gg 0 \quad \text{i.e (entrada/saída em } \mathcal{A} \text{ quase iguais)} \Rightarrow \text{(retardo muito elevado) e} \\ V_S \gg 0 &\Rightarrow \tau \approx 0 \quad \text{i.e (entrada/saída em } \mathcal{A} \text{ muito desiguais)} \Rightarrow \text{(quase sem retardo).} \end{aligned} \quad (3.8)$$

Assim, como visto acima, o retardo no movimento deve ser observado em caso de um fluxo entrada/saída mais regular, no qual a entrada de partículas é acompanhada da saída de um número próximo de partículas. Em momentos de grande diferença entre entradas e saídas, casos de grande imigração ou emigração como o ilustrado na Figura 3.2, o retardo na movimentação deve desaparecer, indicando uma reação mais rápida no movimento das partículas.

Entretanto, devemos notar as seguintes limitações para o modelo (3.5) proposto para λ : S_∞ deve ser diferente de zero, pois a equação (3.5) não está definida para $S_\infty = 0$. Da mesma maneira, λ será utilizado como divisor na equação (3.1) e nos coeficientes de difusividade de (2.18), sendo que, dessa maneira, seu valor também não deverá ser zero. Sendo assim, condições adicionais são necessárias para prevenir que esses casos aconteçam.

Essas condições serão consideradas como parte da modelagem do problema a ser resolvido, isto é, como parte do fenômeno descrito pelas equações matemáticas. Assim, o modelo para tempo de retardo será o definido pela equação (3.5), passível de aplicação em

problemas que apresentem as características de movimento descritas acima. A definição prática de S_∞ e condições auxiliares que garantam a existência de soluções para o modelo serão derivadas de particularidades do problema aplicado, como a dinâmica de movimento da partícula ou informações sobre o meio que forma o domínio. Desta maneira, as condições auxiliares serão elencadas junto ao Modelo Reativo-Telegráfico 2D com Modelo de Tempo de Retardo.

3.2 MODELO REATIVO-TELEGRÁFICO 2D COM MODELO DE TEMPO DE RETARDO

Uma vez que obtemos a equação reativa-telegráfica 2D, definida em (2.18), e propomos um modelo para o tempo de retardo, utilizando a equação (3.5) para determinar λ , formulamos, em conjunto com as condições iniciais e de contorno descritas anteriormente, o Modelo Reativo-Telegráfico 2D com Modelo de Tempo de Retardo por meio do seguinte problema de valor inicial e contorno:

$$\begin{cases} \tau \frac{\partial^2 S}{\partial t^2} + \left[1 - \tau \frac{dF}{dS}\right] \frac{\partial S}{\partial t} = D_x \left(\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}\right) + D_y \left(\frac{\partial^2 S}{\partial y^2}\right) + F(S) & int\Omega \times (0, t_f] \\ S(x, y, 0) = S_I; \quad \frac{\partial S(x, y, 0)}{\partial t} = 0 & \Omega \\ S(x, y, t) = 0 & \partial\Omega, \end{cases} \quad (3.9)$$

com

$$\tau = \frac{1}{2\lambda}, \quad D_x = \frac{\gamma_x^2}{2\lambda} \quad \text{e} \quad D_y = \frac{\gamma_y^2}{2\lambda}, \quad (3.10)$$

sendo

$$\lambda(S, S_\infty, t) = \frac{|V_S|}{S_\infty} \quad \mathbb{R} \times \mathbb{R}_{\neq 0} \times (0, t_f], \quad (3.11)$$

com $\Omega = (0, L) \times (0, M)$, $\partial\Omega$ a fronteira do conjunto Ω , L o comprimento do eixo x , M o comprimento do eixo y e t_f o tempo final no qual avaliaremos a função, com $L, M, t_f \in \mathbb{R}$ e S_I sendo a condição inicial desejada, como as indicadas pelas equações (2.21) ou (2.23).

Além disso, neste trabalho tomaremos

$$S_\infty = \begin{cases} S(x, y, t) & \text{se } S(x, y, t) \neq 0; \\ \bar{S}(x, y, t) & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (3.12)$$

sendo

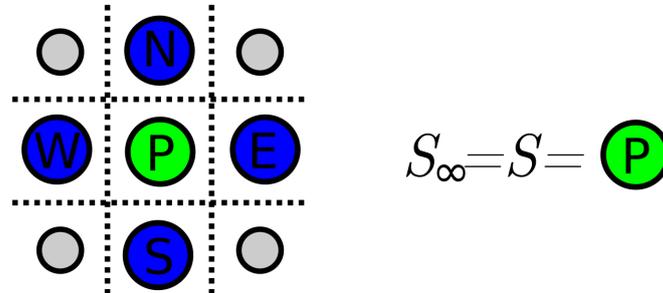
$$\bar{S}(x, y, t) = \frac{S(x + \delta_x, y, t) + S(x - \delta_x, y, t) + S(x, y + \delta_y, t) + S(x, y - \delta_y, t)}{4}, \quad (3.13)$$

com $\delta_x, \delta_y \in \mathbb{R}$, arbitrariamente pequenos.

A escolha de $S_\infty = S(x, y, t)$ para os casos onde $S(x, y, t) \neq 0$ é tomada de maneira que, para o cálculo de λ , o fluxo de partículas $|V_S|$ seja relativizado pela própria densidade de partículas no local. Dessa maneira, a densidade local de partículas será a medida

pela qual definimos a intensidade do fluxo. A Figura 3.3 ilustra esse caso.

Figura 3.3: Exemplo de S_∞ para $S \neq 0$.

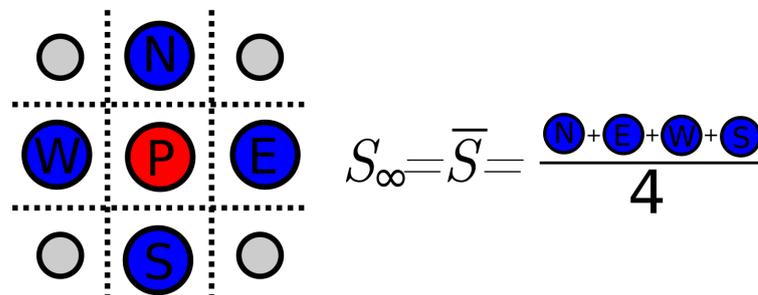


O ponto P em verde representa a posição onde $S(x, y, t) \neq 0$. Neste caso, o valor de $S_\infty = S$ naquele ponto.

Fonte: o Autor.

Essa decisão, entretanto, nos leva a necessitar de um valor $\bar{S}(x, y, t)$ para o caso $S(x, y, t) = 0$, uma vez que não podemos usar esse valor para calcular λ , tendo em vista que resultaria numa divisão por zero. Assim sendo, tomaremos $S_\infty = \bar{S}(x, y, t)$ caso $S(x, y, t) = 0$, com $\bar{S}(x, y, t)$ dado pela equação (3.13). Essa situação está ilustrada na Figura 3.4. Uma vez que esse valor será utilizado apenas se $S(x, y, t) = 0$, isto é, não existirem partículas no local avaliado, o objetivo dessa média é apenas verificar se existem partículas na vizinhança do ponto. Caso não existam, resultando em $\bar{S}(x, y, t) = 0$ sabemos que o processo de difusão ainda alcançou a vizinhança do ponto avaliado. Esse resultado, porém, também faz λ resultar numa divisão por zero.

Figura 3.4: Exemplo de S_∞ para $S = 0$.



O ponto P em vermelho representa a posição onde $S(x, y, t) = 0$. Neste caso, o valor de $S_\infty = \bar{S}$ será a média de seus vizinhos.

Fonte: o Autor.

No geral, nota-se que, definido λ pela equação (3.5) e S_∞ pela equação (3.12), deveremos fazer algumas considerações a fim de garantir a existência de solução para a equação reativa-telegráfica 2D proposta no modelo (3.9), tendo em vista que a equação (3.12) não está

bem definida para $\lambda = 0$. Além disso, a função $\lambda(S, S_\infty, t)$ não está definida para $S_\infty = 0$. Dessa forma, iremos tratar de maneira especial esses dois casos.

O primeiro caso, $\lambda = 0$, levaria à indeterminação da primeira equação em (3.9). Pelo próprio modelo de λ , descrito na equação (3.5), temos que

$$\lambda = 0 \Leftrightarrow |V_S| = 0 \Leftrightarrow \frac{\partial S}{\partial t} = 0. \quad (3.14)$$

Neste caso, para evitar a indeterminação pontual, utilizaremos λ arbitrariamente próximo a zero. A Figura 3.5 exemplifica essa situação.

No segundo caso, quando $S_\infty = 0$, vemos que

$$S_\infty = 0 \Rightarrow \text{divisão por zero em } \lambda, \quad (3.15)$$

isto é, λ não está bem definido. Notamos, entretanto, que, pelo modelo de S_∞ descrito na equação (3.12),

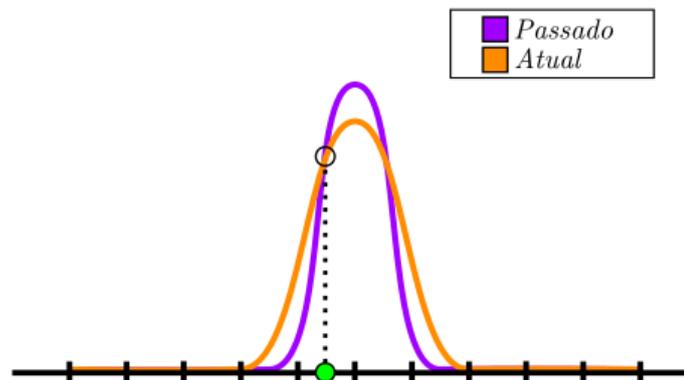
$$S_\infty = 0 \Leftrightarrow \bar{S} = 0 \Leftrightarrow S(x+\delta_x, y, t) + S(x-\delta_x, y, t) + S(x, y+\delta_y, t) + S(x, y-\delta_y, t) = 0. \quad (3.16)$$

Como a função S deverá assumir apenas resultados positivos para ser coerente no sentido biológico, concluímos que

$$S_\infty = 0 \Leftrightarrow S(x + \delta_x, y, t) = S(x - \delta_x, y, t) = S(x, y + \delta_y, t) = S(x, y - \delta_y, t) = 0; \quad (3.17)$$

deste modo, impomos o resultado $S = 0$ em vez de calcular a equação reativa-telegráfica 2D. Um caso assim está ilustrado na Figura 3.6.

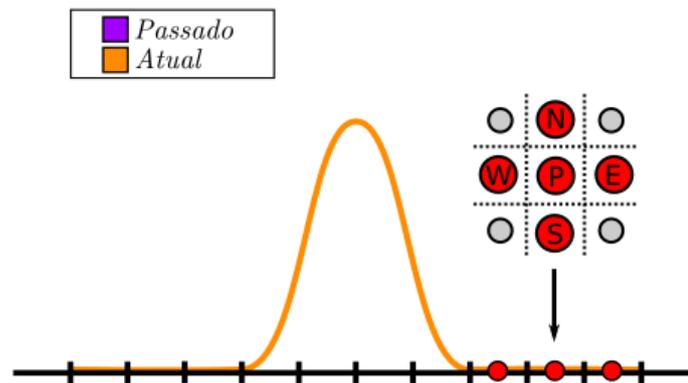
Figura 3.5: Exemplo unidimensional de $\lambda = 0$.



Mesmo que o processo dinâmico esteja ocorrendo, algum ponto pode ser invariável num curto espaço de tempo, resultando em $\lambda = 0$. Nesses casos, adotamos $\lambda \approx 0$.

Fonte: o Autor.

Figura 3.6: Exemplo unidimensional de $S_\infty = 0$.



Quando um ponto e todos os seus vizinhos são iguais a zero, temos $S_\infty = 0$ e, com isso, λ está indeterminado. Nesses casos, notamos que não se faz necessário calcular a EDP do modelo (3.9), pois o processo dinâmico ainda não alcançou os pontos em questão.

Fonte: o Autor.

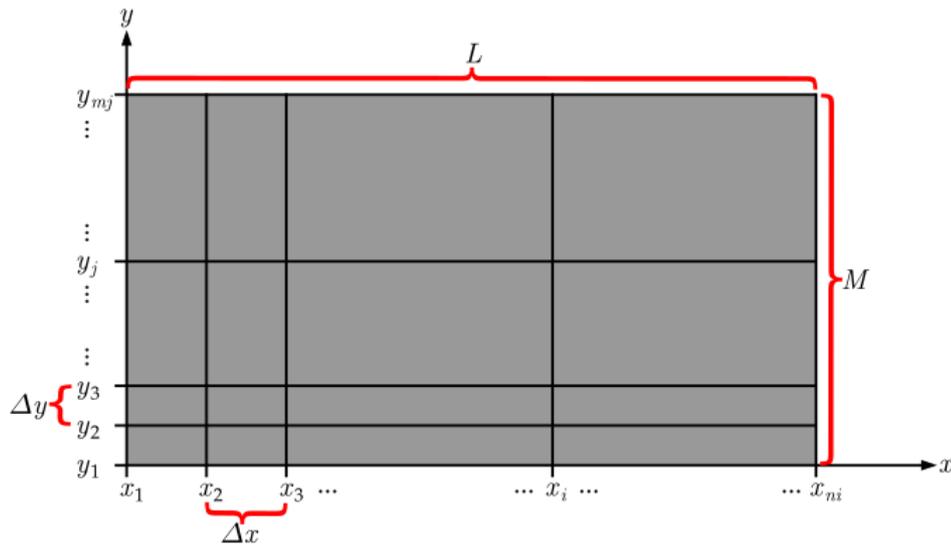
Com essas considerações para S_∞ e λ , temos a EDP do modelo (3.9) bem definida em todo o domínio. Dessa maneira, o Modelo Reativo-Telegráfico 2D com Modelo de Tempo de Retardo proposto deve modelar a dinâmica de invasão biológica sob as hipóteses tomadas em seu desenvolvimento. Para isso, porém, é necessária a resolução da EDP presente no mesmo. Tendo em vista que a Equação Telegráfica-Reativa ainda não possui solução analítica para determinadas condições auxiliares, optamos, neste trabalho, por utilizar uma abordagem numérica a fim de obter soluções aproximadas para o modelo (3.9).

4 MODELAGEM NUMÉRICA

Uma vez definidos o modelo (3.9) e suas condições auxiliares, utilizaremos do método das Diferenças Finitas para resolver numericamente a equação governante. Assim, a modelagem numérica desenvolvida nesta subseção será tomada com esse método em mente.

4.1 DISCRETIZAÇÃO DO DOMÍNIO

Figura 4.1: Discretização do domínio.



Fonte: o Autor.

Para resolução numérica do modelo proposto, faz-se necessária a discretização da função e do domínio em que esta é definida. A função S será definida num plano bidimensional $[0, L] \times [0, M]$, que representa um espaço físico, e é calculada em relação ao tempo, restrito a $(0, t_f]$.

Para o domínio $[0, L]$ consideramos as partições dadas pelo seguinte conjunto de ni pontos:

$$x_i = x_1 + (i - 1)\Delta x; \quad \text{com } x_1 = 0, \Delta x = \frac{L}{(ni - 1)} \text{ e } i = 1, 2, \dots, ni. \quad (4.1)$$

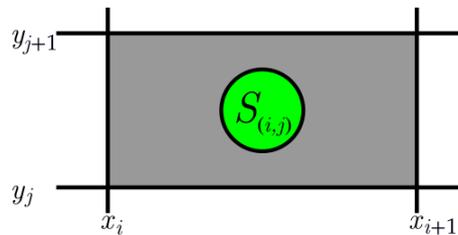
E, para $[0, M]$, o seguinte conjunto de mj pontos:

$$y_j = y_1 + (j - 1)\Delta y; \quad \text{com } y_1 = 0, \Delta y = \frac{M}{(mj - 1)} \text{ e } j = 1, 2, \dots, mj. \quad (4.2)$$

Obtemos, assim, uma malha com $(ni - 1)(mj - 1)$ células, conforme ilustrado na Figura 4.1.

Como o valor de S representa uma densidade populacional, optamos por calcular seu valor no centro das células para representar a ocupação daquela área elementar. Assim, o valor de S será calculado conforme a Figura 4.2.

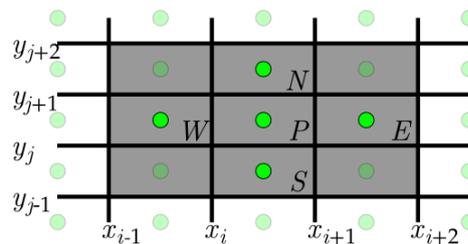
Figura 4.2: Posição do cálculo de S .



Fonte: o Autor.

Além disso, aproveitamos da representação cardeal para nomear uma posição e suas vizinhas. Assim, definindo $(i, j) = P$, podemos denominar também as posições vizinhas como $(i - 1, j) = W$, $(i + 1, j) = E$, $(i, j - 1) = S$ e $(i, j + 1) = N$, representadas na Figura 4.3.

Figura 4.3: Células computacionais e pontos cardeais.

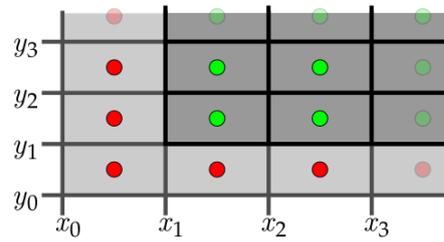


Fonte: o Autor.

Nas bordas do domínio, o valor de S será encontrado pela aplicação da condição de contorno. Nesse caso, adicionaremos uma camada de células fantasma no entorno de nosso domínio para assumir as condições de contorno. Na Figura 4.4, os pontos verdes indicam o ponto em que S será calculada numericamente e os vermelhos representam as condições de contorno.

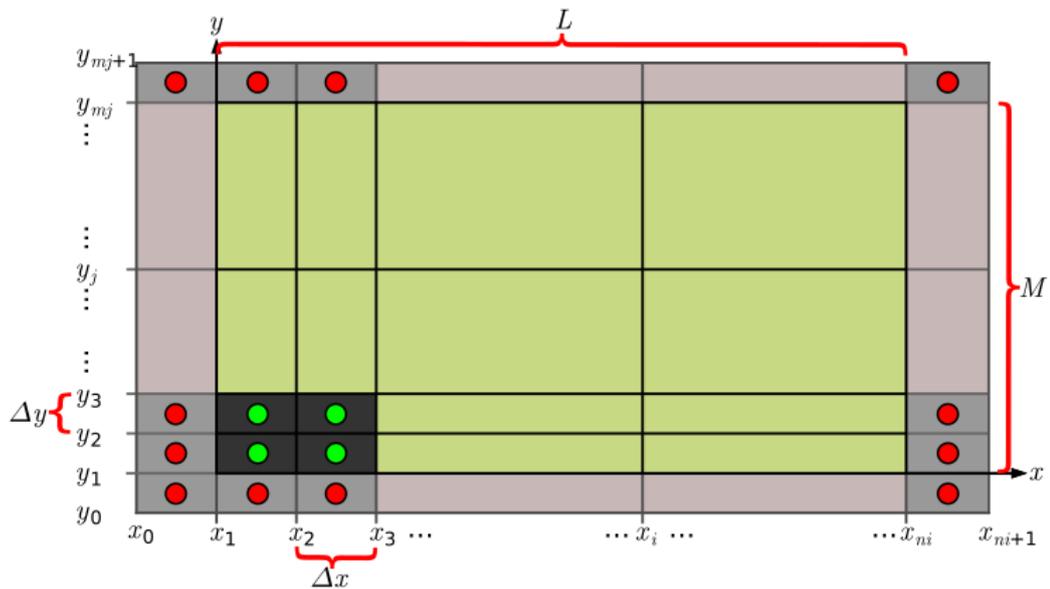
Assim, nosso domínio computacional será efetivamente estendido para $[-\Delta x, L + \Delta x] \times [-\Delta y, M + \Delta y]$, como mostra a Figura 4.5.

Figura 4.4: Células computacionais nas bordas do domínio.



Fonte: o Autor.

Figura 4.5: Grid finalizado.



Fonte: o Autor.

4.2 DISCRETIZAÇÃO DA EQUAÇÃO REATIVA-TELEGRÁFICA 2D

Tomando o ponto $(P, k + 1)$, a EDP do modelo (3.9) pode ser descrita da forma

$$\tau \frac{\partial^2 S}{\partial t^2} \Big|_P^{k+1} + \left[1 - \tau \frac{dF}{dS} \right] \Big|_P^{k+1} \frac{\partial S}{\partial t} \Big|_P^{k+1} = D_x \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \Big|_P^{k+1} + D_y \frac{\partial^2 S}{\partial y^2} \Big|_P^{k+1} + F(S) \Big|_P^{k+1}, \quad (4.3)$$

sendo P a posição no domínio espacial e $k + 1$ a representação de um incremento no tempo.

Aproximamos os termos temporais por meio de diferenças finitas atrasadas, utilizando

$$\frac{\partial^2 S}{\partial t^2} \Big|_P^{k+1} \approx \frac{S_P^{k+1} - 2S_P^k + S_P^{k-1}}{(\Delta t)^2}, \quad (4.4)$$

$$\left. \frac{\partial S}{\partial t} \right|_P^{k+1} \approx \frac{S_P^{k+1} - S_P^k}{\Delta t}. \quad (4.5)$$

Para os termos difusivos, utilizamos diferenças finitas centrais, aproximando o resultado por meio de

$$\left. \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right|_P^{k+1} \approx \frac{S_W^{k+1} - 2S_P^{k+1} + S_E^{k+1}}{(\Delta x)^2}, \quad (4.6)$$

$$\left. \frac{\partial^2 S}{\partial y^2} \right|_P^{k+1} \approx \frac{S_S^{k+1} - 2S_P^{k+1} + S_N^{k+1}}{(\Delta y)^2}. \quad (4.7)$$

Os termos reativos são compostos de funções conhecidas, facilmente deriváveis, e são calculados de maneira analítica, evitando o uso de aproximações adicionais.

Substituindo, então, as aproximações (4.4), (4.5), (4.6) e (4.7) na equação (4.3), obtemos a seguinte discretização:

$$\begin{aligned} & \frac{\tau}{(\Delta t)^2} (S_P^{k+1} - 2S_P^k + S_P^{k-1}) + \left[1 - \tau \frac{dF}{dS} \right] \Big|_P^{k+1} \left(\frac{S_P^{k+1} - S_P^k}{\Delta t} \right) = \\ & = \frac{D_x}{(\Delta x)^2} (S_W^{k+1} - 2S_P^{k+1} + S_E^{k+1}) + \frac{D_y}{(\Delta y)^2} (S_S^{k+1} - 2S_P^{k+1} + S_N^{k+1}) + F \Big|_P^{k+1} \end{aligned} \quad (4.8)$$

Agrupando os termos semelhantes, obtemos

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\tau}{(\Delta t)^2} + \frac{1}{\Delta t} - \tau \frac{dF}{dS} \Big|_P^{k+1} + \frac{2D_x}{(\Delta x)^2} + \frac{2D_y}{(\Delta y)^2} \right) S_P^{k+1} - \frac{2D_x}{(\Delta x)^2} S_W^{k+1} - \frac{2D_x}{(\Delta x)^2} S_E^{k+1} - \\ & - \frac{2D_y}{(\Delta y)^2} S_S^{k+1} - \frac{2D_y}{(\Delta y)^2} S_N^{k+1} = \left(\frac{2\tau}{(\Delta t)^2} + \frac{1}{\Delta t} - \tau \frac{dF}{dS} \Big|_P^{k+1} \right) S_P^k - \frac{\tau}{(\Delta t)^2} S_P^{k-1} + F \Big|_P^{k+1}. \end{aligned}$$

Por fim, renomeando os coeficientes, temos

$$\left(C_P + \tau \tilde{C}_P \right) S_P^{k+1} - C_W S_W^{k+1} - C_E S_E^{k+1} - C_S S_S^{k+1} - C_N S_N^{k+1} = \bar{b}_P + \tau \tilde{b}_P, \quad (4.9)$$

com

$$\begin{aligned} C_P &= \frac{1}{\Delta t} + \frac{2D_x}{(\Delta x)^2} + \frac{2D_y}{(\Delta y)^2}, \quad \tilde{C}_P = \frac{1}{(\Delta t)^2} - \frac{1}{\Delta t} \frac{dF}{dS} \Big|_P^{k+1}, \\ C_W &= C_E = \frac{D_x}{(\Delta x)^2}, \quad C_S = C_N = \frac{D_y}{(\Delta y)^2}, \\ \bar{b}_P &= \frac{1}{\Delta t} S_P^k + F \Big|_P^{k+1}, \quad \tilde{b}_P = \left(\frac{2}{(\Delta t)^2} - \frac{1}{\Delta t} \frac{dF}{dS} \Big|_P^{k+1} \right) S_P^k - \frac{1}{(\Delta t)^2} S_P^{k-1}. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Definida, então, a equação (4.9) como a discretização da equação governante de nosso modelo, consideramos as seguintes relações matemáticas discretas para as demais equações do modelo (3.9):

$$\begin{aligned}
 S(x, y, 0) &= S_I^0 && \implies S_I^0 = S_I, \\
 \left. \frac{\partial S(x, y, t)}{\partial t} \right|_P^0 &= \frac{S(x, y, 0) - S(x, y, -\delta t)}{\Delta t} = 0 && \implies S_I^{-1} = S_I^0, \\
 S(0, y, t)|^{k+1} &= S(L, y, t)|^{k+1} = S(x, 0, t)|^{k+1} = S(x, M, t)|^{k+1} = 0.
 \end{aligned} \tag{4.11}$$

Com as condições descritas acima, podemos descrever a equação (4.9) na forma matricial $A.S = B$, com

$$\underbrace{\begin{bmatrix}
 A_P C_E & C_N & & \\
 C_W A_P C_E & C_N & & \\
 & \ddots & & \\
 & & C_W A_P & C_N \\
 \hline
 C_S & A_P C_E & C_N & \\
 C_S & C_W A_P C_E & C_N & \\
 & \ddots & \ddots & \ddots \\
 & C_S & C_W A_P & C_N \\
 \hline
 & & \ddots & \ddots \\
 & & & \ddots \\
 \hline
 & & C_S & A_P C_E \\
 & & C_S & C_W A_P C_E \\
 & & \ddots & \ddots \\
 & & C_S & C_W A_P
 \end{bmatrix}}_A \cdot \underbrace{\begin{bmatrix}
 S_{(2,2)}^{k+1} \\
 S_{(3,2)}^{k+1} \\
 \vdots \\
 S_{(ni-1,2)}^{k+1} \\
 S_{(2,3)}^{k+1} \\
 S_{(3,3)}^{k+1} \\
 \vdots \\
 S_{(ni-1,3)}^{k+1} \\
 \vdots \\
 \vdots \\
 \vdots \\
 \vdots \\
 S_{(2,mj-1)}^{k+1} \\
 S_{(3,mj-1)}^{k+1} \\
 \vdots \\
 S_{(ni-1,mj-1)}^{k+1}
 \end{bmatrix}}_S = \underbrace{\begin{bmatrix}
 B_P \\
 B_P \\
 \vdots \\
 B_P \\
 B_P \\
 B_P \\
 \vdots \\
 B_P \\
 \vdots \\
 \vdots \\
 \vdots \\
 B_P \\
 B_P \\
 \vdots \\
 B_P
 \end{bmatrix}}_B \tag{4.12}$$

sendo

$$A_P = C_P + \tau \tilde{C}_P^{(i,j)} \text{ e } B_P = \bar{b}_{(i,j)} + \tau \tilde{b}_{(i,j)},$$

com o índice (i, j) correspondendo ao de $S_{(i,j)}^{k+1}$ na mesma linha.

Assim, obtemos um sistema que permite deduzir a solução aproximada da EDP do modelo (3.9). Devemos notar, entretanto, que o sistema acima não é linear. Para obter a solução, usaremos o esquema quasi-não-linear, conforme proposto em [6].

4.3 DISCRETIZAÇÃO DO MODELO DE TEMPO DE RETARDO

O modelo de λ , no ponto $(S, S_\infty, k + 1)$, pode ser escrito de maneira discreta como

$$\lambda \Big|_P^{k+1} = \frac{|V_S|}{S_\infty} \Big|_P^{k+1} = \left| \left(\frac{\partial S}{\partial t} \Big|_P^{k+1} \right) \frac{1}{S_\infty} \Big|_P^{k+1} \approx \frac{|S_P^{k+1} - S_P^k|}{\Delta t} \frac{1}{S_\infty}. \quad (4.13)$$

O valor S_∞ será aproximado por

$$S_\infty \Big|_P^{k+1} \approx \begin{cases} S_P^{k+1} & \text{se } S_P^{k+1} \neq 0; \\ \bar{S}_P^{k+1} & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (4.14)$$

com

$$\bar{S}_P^{k+1} = \frac{S_N^{k+1} + S_S^{k+1} + S_E^{k+1} + S_W^{k+1}}{4}. \quad (4.15)$$

Assim, conforme as equações (4.13), (4.14) e (4.15), aproximaremos, então, λ usando

$$\lambda \Big|_P^{k+1} \approx \begin{cases} \frac{|S_P^{k+1} - S_P^k|}{S_P^{k+1} \Delta t} & \text{se } S_P^{k+1} \neq 0; \\ \frac{|S_P^{k+1} - S_P^k|}{\bar{S}_P^{k+1} \Delta t} & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (4.16)$$

Em qualquer caso, os valores de S^{k+1} serão calculados ao mesmo tempo que o valor de λ . Assim, o incluiremos no esquema quasi-não-linear de solução numérica, de forma que possa ser calculado simultaneamente com a equação reativa-telegráfica 2D em tempo de execução.

5 MODELAGEM COMPUTACIONAL

Neste capítulo, descrevemos a abordagem computacional utilizada para realização dos procedimentos numéricos adotados. Toda implementação computacional deste trabalho foi realizada em Fortran, compilada utilizando GNU Fortran 9.3.0 num ambiente Linux Ubuntu 20.04.2 LTS.

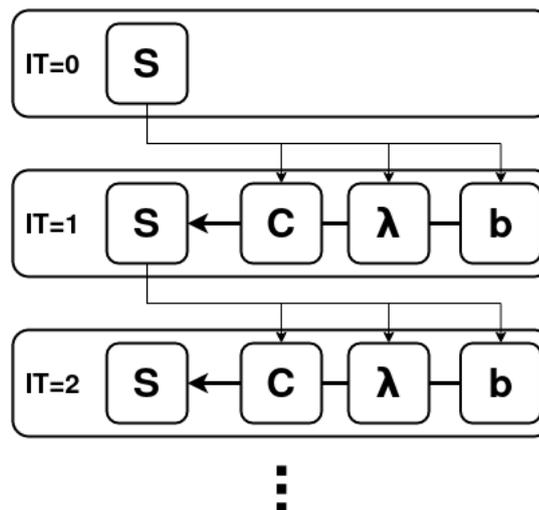
5.1 RESOLUÇÃO NUMÉRICA POR MEIO DO MÉTODO QUASI NÃO LINEAR

Uma vez que discretizamos a equação governante, levando em conta os valores iniciais e de contorno, obtendo o sistema (4.12) e considerando a elevada dimensão que este deve assumir, iremos resolvê-lo de maneira numérica.

O sistema obtido não é linear, com \tilde{C}_P , \bar{b} , \tilde{b} e λ dependendo diretamente do valor S a ser calculado; além disso, C_P , C_N , C_S , C_E , C_W e τ dependem de λ . Usaremos o método quasi-não-linear para resolver o sistema de maneira iterativa sem a necessidade de alterar as equações envolvidas.

Para o método quasi-não-linear, conforme [6], uma estimativa inicial $^{(0)}S$ é determinada e seguida de um processo iterativo no qual, para o cálculo de uma iteração qualquer $^{(IT)}S$, as não linearidades são primeiramente resolvidas utilizando $^{(IT-1)}S$, fazendo o sistema tornar-se linear na iteração atual. A Figura 5.1 ilustra de maneira simplificada esse processo.

Figura 5.1: Fluxograma simplificado do Método Quasi-Não-Linear.



Conforme nosso modelo, todos os termos C , b e λ dependem de S . Seus valores são calculados utilizando o valor de $^{(IT-1)}S$.

Fonte: o Autor.

Desta maneira, para calcular $^{(IT)}S_P^{k+1}$, isto é, o valor de S_P^{k+1} em cada itera-

ção, com $IT = 1, 2, \dots, IT_{max}$, tomaremos

$$\begin{aligned}
{}^{(IT)}\tilde{C}_P &= \frac{1}{(\Delta t)^2} - \frac{1}{\Delta t} \frac{{}^{(IT-1)}dF}{dS} \Big|_P^{k+1}, \\
{}^{(IT)}\bar{b} &= \frac{1}{\Delta t} S_P^k + {}^{(IT-1)}F \Big|_P^{k+1}, \\
{}^{(IT)}\tilde{b}_\kappa &= \left(\frac{2}{(\Delta t)^2} - \frac{1}{\Delta t} \frac{{}^{(IT-1)}dF}{dS} \Big|_P^{k+1} \right) S_P^k - \frac{1}{(\Delta t)^2} S_P^{k-1},
\end{aligned} \tag{5.1}$$

além de

$${}^{(IT)}\lambda_P^{k+1} = \begin{cases} \frac{{}^{(IT-1)}S_P^{k+1} - {}^{(IT-1)}S_P^k}{{}^{(IT-1)}S_P^{k+1} \Delta t} & \text{se } {}^{(IT-1)}S_P^{k+1} \neq 0; \\ \frac{{}^{(IT-1)}S_P^{k+1} - {}^{(IT-1)}S_P^k}{{}^{(IT-1)}\bar{S}_P^{k+1} \Delta t} & \text{caso contrário,} \end{cases} \tag{5.2}$$

e, por fim,

$$\begin{aligned}
{}^{(IT)}C_P^{k+1} &= \frac{1}{\Delta t} + \frac{2\gamma_x^2}{{}^{(IT-1)}\lambda_P^{k+1}(\Delta_x)^2} + \frac{2\gamma_y^2}{{}^{(IT-1)}\lambda_P^{k+1}(\Delta_y)^2}, \\
{}^{(IT)}C_N^{k+1} &= {}^{(IT)}C_S^{k+1} = \frac{\gamma_y^2}{2{}^{(IT-1)}\lambda_P^{k+1}(\Delta_y)^2}, \\
{}^{(IT)}C_W^{k+1} &= {}^{(IT)}C_E^{k+1} = \frac{\gamma_x^2}{2{}^{(IT-1)}\lambda_P^{k+1}(\Delta_x)^2}, \\
{}^{(IT-1)}\tau_P^{k+1} &= \frac{1}{2{}^{(IT-1)}\lambda_P^{k+1}},
\end{aligned} \tag{5.3}$$

de maneira que esses termos possam ser calculados usando os valores de ${}^{(IT-1)}S_P^{k+1}$ já conhecidos. Desta forma, o sistema torna-se linear na iteração atual, podendo ser resolvido, então, por algum método numérico para sistemas lineares. Após testes utilizando o Método de Relaxações Sucessivas e o Método de Gauss-Seidel, optamos por este, tendo em vista que o primeiro não ofereceu vantagem computacional significativa e, em alguns casos, ofereceu desvantagem.

Para incluir a abordagem Quasi-Não-Linear no fluxo natural do Método de Gauss-Seidel, são realizados os seguintes ajustes no processo iterativo:

Primeiramente, a fim de definir uma aproximação inicial para ${}^{(0)}S_P^{k+1}$ e ${}^{(0)}\lambda_P^{k+1}$ e começar o processo iterativo, tomamos

$$\begin{aligned}
{}^{(0)}S_P^{k+1} &= S_P^k + \Delta t F(S_P^k); \\
{}^{(0)}\lambda_P^{k+1} &= \lambda({}^{(0)}S_P^{k+1}).
\end{aligned} \tag{5.4}$$

Após esse passo inicial, o sistema é resolvido adotando a seguinte ordem de operação em cada iteração:

$$\begin{aligned}
^{(IT)}C_P^{k+1}, ^{(IT)}C_N^{k+1}, ^{(IT)}C_S^{k+1}, ^{(IT)}C_W^{k+1}, ^{(IT)}C_E^{k+1} \text{ e } ^{(IT)}\tau_P^{k+1} & \text{ utilizando } ^{(IT-1)}\lambda_P^{k+1}; \\
^{(IT)}\tilde{C}_P, ^{(IT)}\bar{b}, ^{(IT)}\tilde{b}_\kappa & \text{ utilizando } ^{(IT-1)}S_P^{k+1}; \\
^{(IT)}S_P^{k+1} & \text{ utilizando Gauss-Seidel}; \\
^{(IT)}\lambda_P^{k+1} & \text{ utilizando } ^{(IT)}S_P^{k+1}.
\end{aligned} \tag{5.5}$$

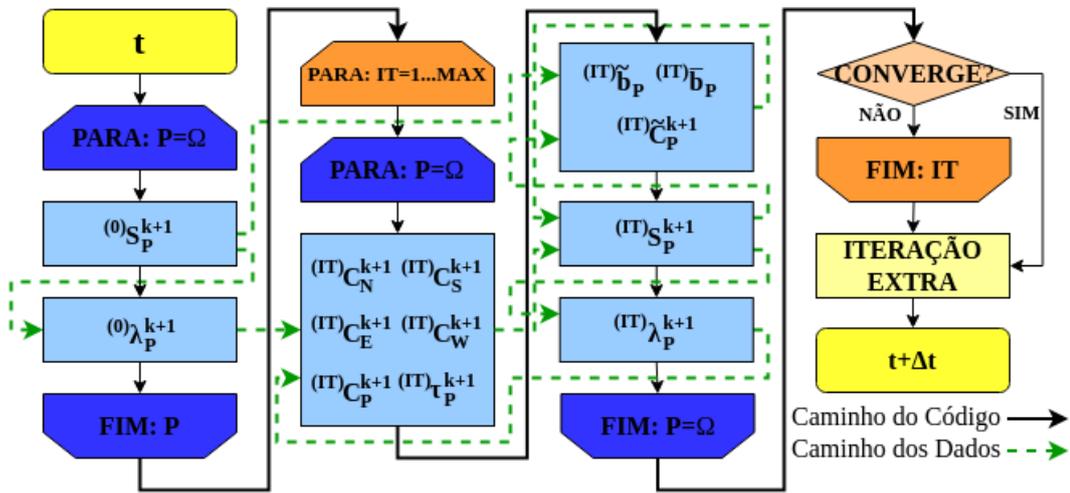
Após cada iteração, verificamos a convergência do processo iterativo por meio do cálculo do erro relativo, E_{rel} , dado por

$$E_{rel} = \frac{\|^{(IT)}S_P^{k+1} - ^{(IT-1)}S_P^{k+1}\|_2}{\|^{(IT)}S_P^{k+1}\|_2}. \tag{5.6}$$

Uma vez que o valor do erro relativo esteja abaixo de um valor de tolerância, realizamos uma iteração adicional, a fim de utilizar o valor iterado de S_P^{k+1} em todos os elementos não lineares.

A Figura 5.2 apresenta o fluxograma de resolução descrito nesta seção.

Figura 5.2: Fluxograma da resolução via Método Quasi-Não-Linear.



Fonte: o Autor.

5.2 CÁLCULO DE POPULAÇÃO E OCUPAÇÃO

Uma vez calculada a função de densidade de partículas S , podemos obter numericamente outros valores de interesse. Neste trabalho, calculamos a população total de partículas e a ocupação do domínio.

Conforme visto na equação (2.19), a população pode ser calculada por meio da integral da função S . Dentre os possíveis métodos numéricos disponíveis para estimar esse

valor, optamos pelo Método dos Trapézios Composto para casos gerais e o Método de Simpson Composto caso o número de células nos eixos x e y sejam ímpares, possibilitando uma melhor aproximação.

Assim, tomando o Método do Trapézio, conforme [5], e adaptando para a integral dupla, calculamos o Método do Trapézio Composto por

$$Pop(k) = \sum_{i=1}^{ni-1} \sum_{j=1}^{mj-1} \frac{\Delta x \Delta y}{4} (S_{i,j}^k + S_{i+1,j}^k + S_{i,j+1}^k + S_{i+1,j+1}^k). \quad (5.7)$$

O Método de Simpson Composto, também tomando [5] por base, é calculado por

$$\begin{aligned} Pop(k) = & \sum_{\substack{i=1 \\ (i \text{ ímpar})}}^{ni-1} \sum_{\substack{j=1 \\ (j \text{ ímpar})}}^{mj-1} \frac{\Delta x \Delta y}{9} (S_{i,j}^k + 4S_{i,j+1}^k + S_{i,j+2}^k) + \\ & + \frac{4\Delta x \Delta y}{9} (S_{i+1,j}^k + 4S_{i+1,j+1}^k + S_{i+1,j+2}^k) + \frac{\Delta x \Delta y}{9} (S_{i+2,j}^k + 4S_{i+2,j+1}^k + S_{i+2,j+2}^k). \end{aligned} \quad (5.8)$$

A Ocupação do Domínio é calculada considerando as células computacionais que contêm uma quantidade positiva de partículas, isto é, onde $S > 0$. Desta maneira, desconsideramos o cálculo de ocupação em casos nos quais resultados negativos aparecem. A ocupação é tomada em porcentagem, assumindo sempre valores entre 0 e 100. Desta forma, usamos

$$Ocup(k) = \frac{100}{(ni-1)(mj-1)} \sum_{i=1}^{ni-1} \sum_{j=1}^{mj-1} \begin{cases} 1, & \text{se } S_{i,j}^k > tol_{ocup} \text{ e} \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (5.9)$$

sendo tol_{ocup} , ou a “tolerância para considerar ocupação” é um valor arbitrariamente próximo a zero, definido pelo problema aplicado.

6 ESTUDO NUMÉRICO

Neste capítulo apresentamos as ferramentas numéricas e os resultados obtidos a partir delas para verificação do método numérico utilizado e sua implementação computacional.

6.1 CONTRIBUIÇÃO DOS TERMOS DA EDP E RESÍDUO NUMÉRICO

Nosso modelo é governado por uma Equação Diferencial Parcial com termos representando diferentes dinâmicas. Assim como em [6], temos o interesse de identificar como cada um dos termos contribui para o resultado final da equação.

Assim, após obter o valor convergido de $S_{i,j}^{k+1}$, iremos calcular valores médios em cada passo de tempo: o Termo Temporal $Termo_t(t)$, o Termo Difusivo no eixo x $Termo_x(t)$, o Termo Difusivo no eixo y $Termo_y(t)$ e o Termo Reativo $Termo_r(t)$ da seguinte maneira:

$$Termo_t(k+1) = \frac{1}{(ni-1)(mj-1)} \sum_{i=1}^{ni-1} \sum_{j=1}^{mj-1} \left\{ \tau \frac{\partial^2 S}{\partial t^2} \Big|_{i,j}^{k+1} + \left[1 - \tau \frac{dF}{dS} \right] \Big|_{i,j}^{k+1} \frac{\partial S}{\partial t} \Big|_{i,j}^{k+1} \right\}; \quad (6.1)$$

$$Termo_x(k+1) = \frac{1}{(ni-1)(mj-1)} \sum_{i=1}^{ni-1} \sum_{j=1}^{mj-1} D_x \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \Big|_{i,j}^{k+1}; \quad (6.2)$$

$$Termo_y(k+1) = \frac{1}{(ni-1)(mj-1)} \sum_{i=1}^{ni-1} \sum_{j=1}^{mj-1} D_y \frac{\partial^2 S}{\partial y^2} \Big|_{i,j}^{k+1}; \quad (6.3)$$

$$Termo_r(k+1) = \frac{1}{(ni-1)(mj-1)} \sum_{i=1}^{ni-1} \sum_{j=1}^{mj-1} F(S) \Big|_{i,j}^{k+1}. \quad (6.4)$$

Com as equações acima, calcularemos ainda o Resíduo Numérico do resultado, dado por

$$Residuo = |Termo_t - Termo_x - Termo_y - Termo_r|, \quad (6.5)$$

que deve ser próximo a zero desde que o método numérico produza resultados coerentes, reafirmando que o método quasi-não-linear está resolvendo o sistema corretamente.

6.2 ERRO RELATIVO E CONVERGÊNCIA

Como a equação reativa-telegráfica bidimensional presente em nosso modelo 3.9 não possui solução analítica, para verificação do código computacional e estimação da taxa de convergência tomaremos o limite da equação com τ , a função de crescimento $F(S) = 0$ e as difusividades $D_x = D_y = c^2$, tendo assim

$$\begin{aligned} \lim_{\tau \rightarrow 0} \left(\tau \frac{\partial^2 S}{\partial t^2} + \left[1 - \tau \underbrace{\frac{dF}{dS}}_{=0} \right] \frac{\partial S}{\partial t} \right) &= \lim_{\tau \rightarrow 0} \left(\underbrace{D_x}_{c^2} \left(\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right) + \underbrace{D_y}_{c^2} \left(\frac{\partial^2 S}{\partial y^2} \right) + \underbrace{F(S)}_{=0} \right) \\ &\Rightarrow \\ \frac{\partial S}{\partial t} &= c^2 \left(\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 S}{\partial y^2} \right), \end{aligned} \quad (6.6)$$

conhecida como a Equação do Calor Bidimensional, na qual c^2 é a condutividade térmica do material.

Além disso, tomando o limite com $\tau \rightarrow 0$, a discretização proposta em (4.8) decai para

$$\frac{S_P^{k+1} - S_P^k}{\Delta t} = \frac{D_x}{(\Delta x)^2} (S_W^{k+1} - 2S_P^{k+1} + S_E^{k+1}) + \frac{D_y}{(\Delta y)^2} (S_S^{k+1} - 2S_P^{k+1} + S_N^{k+1}), \quad (6.7)$$

uma versão implícita do método “Forward Time Centered Space”.

A Equação do Calor Bidimensional, em conjunto com as condições do modelo 3.9, isto é, um domínio $\Omega = (0, L) \times (0, M)$, uma condição inicial $S(x, y, 0) = S_I$ e condições de contorno do tipo Dirichlet, possui solução analítica, dada por

$$S(x, y, t) = \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} A_{mn} \sin(\mu_m x) \cos(\nu_n y) e^{-\rho_{mn}^2 t}, \quad (6.8)$$

sendo

$$\begin{aligned} \mu_m &= \frac{m\pi}{L}, \quad \nu_n = \frac{n\pi}{M}, \quad \rho_{mn} = c\sqrt{\mu_m^2 + \nu_n^2} \text{ e} \\ A_{mn} &= \frac{4}{LM} \int_0^L \int_0^M S_I \sin(\mu_m x) \cos(\nu_n y) dy dx. \end{aligned} \quad (6.9)$$

Desta maneira, nomeando a solução analítica da Equação do Calor Bidimensional de A_S e a solução numérica da equação de nosso modelo como N_S e usando as considerações utilizadas na construção da relação 6.6 e da solução 6.8, calculamos o erro relativo de nossa solução por meio de

$$\|E\|_2 = \frac{\|A_S - N_S\|_2}{\|A_S\|_2}, \quad (6.10)$$

sendo que

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} \|E\|_2 = 0, \quad (6.11)$$

desde que a relação 6.6 seja verdadeira.

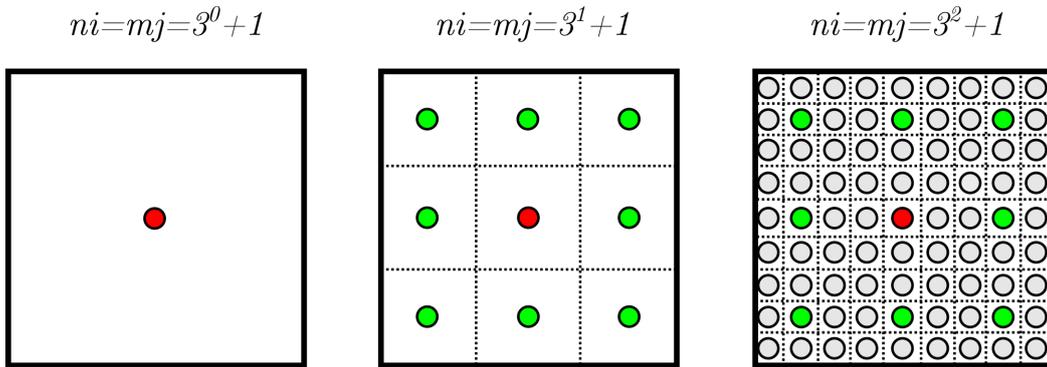
A fim de estimarmos a ordem de convergência do método numérico, utilizamos, conforme [20], a relação

$$E_h \approx Ch^{p^*}, \quad (6.12)$$

na qual E_h é o erro relativo calculado numa malha com células de área $h = \Delta x \times \Delta y$, C é uma constante e p^* é a ordem de convergência.

Tendo em vista que o valor da equação S é calculado no centro de cada célula computacional, e não em seus nós, decidimos por realizar o refinamento da malha espacial em potências de três, de maneira a sempre existirem pontos de comparação para os resultados. Assim, o número de pontos tomados no eixo x e no eixo y assume sempre a forma de $3^n + 1$ com $n \in \mathbb{N}$, conforme ilustrado na Figura 6.1.

Figura 6.1: Exemplo de refinamento de malha.



Os pontos representam os locais onde S será calculada.

Fonte: o Autor.

Tomando o erro em duas malhas distintas, utilizando n e $n + 1$, a partir de 6.12, podemos estimar a ordem de convergência por meio da razão

$$\frac{E_h}{E_{h/9}} \approx \frac{Ch^{p^*}}{C(h/9)^{p^*}} = \frac{h^{p^*}}{(h/9)^{p^*}} = \left(\frac{h}{(h/9)} \right)^{p^*} = 9^{p^*} \quad (6.13)$$

na qual, aplicando logaritmo, temos

$$\log \left(\frac{E_h}{E_{h/9}} \right) \approx \log(9^{p^*}) = p^* \log(9), \quad (6.14)$$

obtendo por fim

$$p^* \approx \frac{\log(E_h/E_{h/9})}{\log(9)}, \quad (6.15)$$

a estimativa desejada.

6.3 CONVERGÊNCIA DO ESQUEMA NUMÉRICO

Conforme descrito no capítulo 6.2, estimamos o erro relativo e a ordem de convergência do esquema numérico por meio da Equação do Calor Bidimensional, conforme a relação 6.6.

Para este estudo, calculamos a solução do modelo 3.9 com Tempo de Retardo constante e $F(S) = 0$. A solução foi tomada num domínio $\Omega = (0, \pi) \times (0, \pi)$, com a condição de contorno de Dirichlet e condição a inicial

$$S_I(x, y, 0) = \begin{cases} \pi, & \text{se } 1.2545 < x < 1.8870 \text{ e } 1.2545 < y < 1.8870; \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (6.16)$$

Para esse problema, quando $\tau \rightarrow 0$, obtemos de 6.8 a seguinte solução analítica:

$$S(x, y, t) = \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} A_{mn} \sin(\mu_m x) \cos(\nu_n y) e^{-\rho_{mn}^2 t}, \quad (6.17)$$

com

$$\mu_m = m, \quad \nu_n = n, \quad \rho_{mn} = c\sqrt{\mu_m^2 + \nu_n^2} \text{ e} \quad (6.18)$$

$$A_{mn} = \frac{4}{\pi} \left(\frac{\cos(1.2545m) - \cos(1.8870m)}{m} \right) \left(\frac{\cos(1.2545n) - \cos(1.8870n)}{n} \right).$$

Primeiramente, verificamos se a relação 6.6 é verdadeira. Para isso, realizamos as simulações numéricas utilizando os parâmetros descritos na Tabela 6.1.

Utilizamos $\tau = 100, 10, 1, 0.1, 0.01, 0.001, 0.0001$. Note que o caso particular $\tau = 0$ não foi considerado, pois significaria infinidade na taxa de inversão de movimento.

Note que variar τ implica variar λ . E, para manter as difusividades D_x e D_y fixas durante essa variação, uma vez que elas também dependem de λ , utilizamos os valores da Tabela 6.2 a fim de obter a difusividade desejada.

Por fim, resolver a equação do calor utilizando uma discretização explícita do tipo “Forward Time Centered Space” exige, de acordo com a condição CFL[15], que a seguinte

Parâmetro	Símbolo	Valor
Domínio Espacial	Ω	$(0, \pi) \times (0, \pi)$
Domínio Temporal		$(0, 5.0)$
Partições no Eixo x	ni	244
Partições no Eixo y	mj	244
Passo no Tempo	Δt	0.0005
Difusividade no Eixo x	D_x	0.1
Difusividade no Eixo y	D_y	0.1
Tempo de Retardo	τ	$(0.0001, 100)$
Tolerância de Erro do Processo Iterativo		1.0×10^{-8}
Condutividade	c^2	0.1
Quantidade de Termos dos Somatórios em 6.17		100

Tabela 6.1: Parâmetros gerais utilizados para verificar a relação 6.6.

τ	λ	γ_x	γ_y
100	0.005	0.031622	0.031622
10	0.05	0.100000	0.100000
1	0.5	0.316227	0.316227
0.1	5	1.000000	1.000000
0.01	50	3.162277	3.162277
0.001	500	10.00000	10.00000
0.0001	5000	31.62277	31.62277

Tabela 6.2: Parâmetros utilizados em λ , γ_x e γ_y para verificar a convergência do esquema numérico.

relação seja satisfeita:

$$\max \left[\frac{c^2 \Delta t}{(\Delta x)^2}, \frac{c^2 \Delta t}{(\Delta y)^2} \right] \leq \frac{1}{2}. \quad (6.19)$$

Uma vez que os dados da Tabela 6.2 nos fornecem, pela equação (6.19), o valor

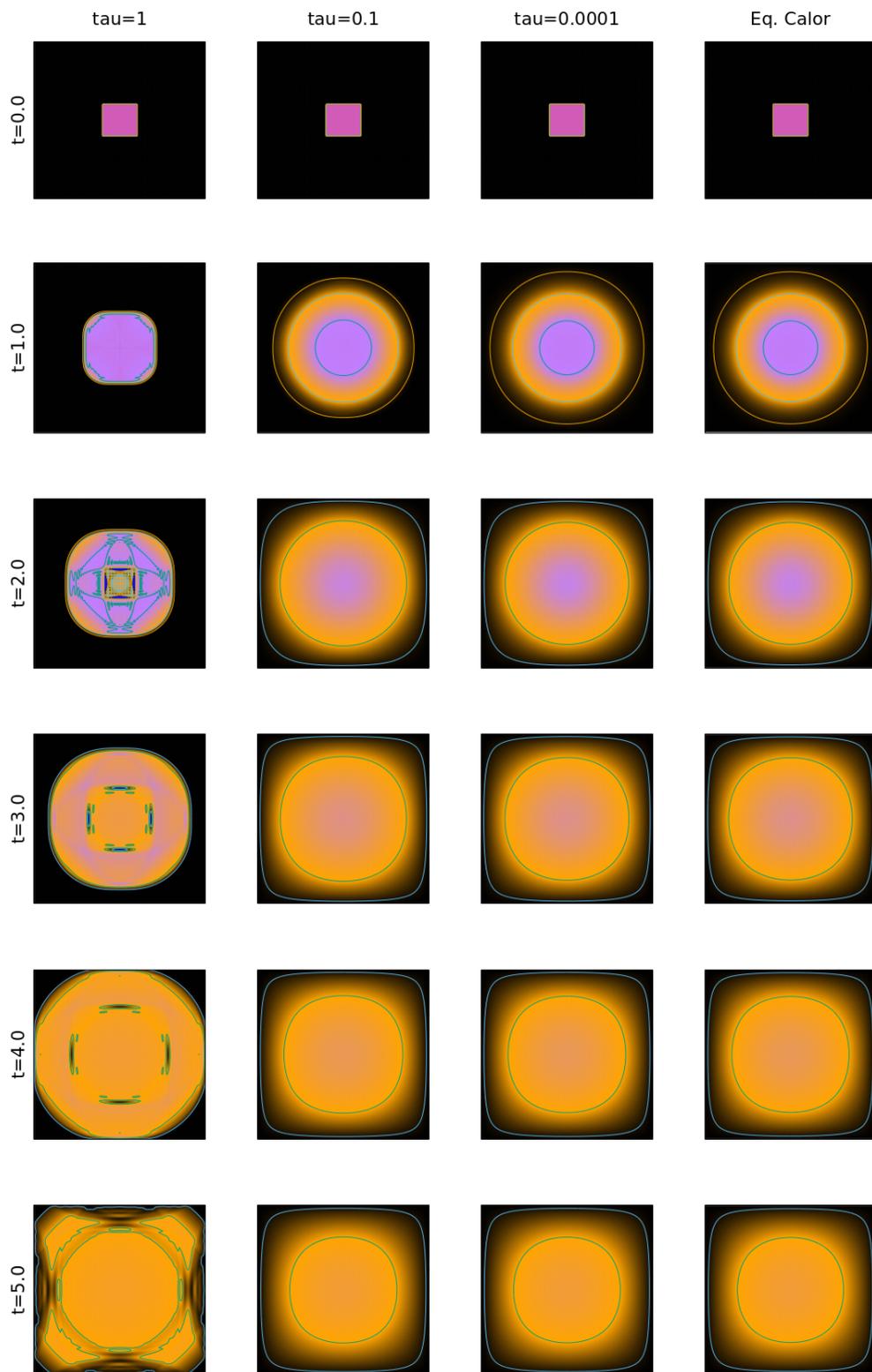
$$\frac{0.1 \times 0.0005}{(0.012875)^2} \approx 0.3, \quad (6.20)$$

utilizamos tais dados como referência, apesar de fazermos uso de um método implícito.

Verificando dessa maneira a relação (6.6), obtivemos os dados relacionados na Tabela 6.3.

τ	$\ E\ _2$
100	4.87577677
10	3.43367791
1	0.39886814
0.1	0.01527298
0.01	0.00949640
0.001	0.00913379
0.0001	0.00910762

Tabela 6.3: Erro Relativo, no tempo final, obtidos na verificação $\tau \rightarrow 0$.

Figura 6.2: Resultados para $\tau \rightarrow 0$.

Fonte: o Autor.

O comportamento verificado para o Erro Relativo é o esperado pela equação (6.11), isto é, à medida que τ se aproxima de zero, o valor do erro relativo $\|E\|_2$ diminui, confirmando a relação (6.6). A Figura 6.2 ilustra essa aproximação.

Uma vez observando que a aproximação proposta em (6.6) é válida ao menos para uma malha, prosseguimos em verificar seu comportamento realizando o processo de refinamento de malha, conforme descrito anteriormente e ilustrado na Figura 6.1.

Os parâmetros utilizados nesse processo são os mesmos do caso anterior, conforme a Tabela 6.1, apenas com a mudança do número de partições e do passo no tempo. Note que a alteração do passo no tempo se faz necessária para preservar a condição CFL, vista na equação (6.19), a qual estamos utilizando como referência em nosso estudo.

Assim, os parâmetros relativos às novas malhas são dados pela Tabela 6.4.

n	ni,mj	$\Delta x, \Delta y$	Δt	CFL
3	28	≈ 0.11219	0.005	≈ 0.04
4	82	≈ 0.03831	0.005	≈ 0.34
5	244	≈ 0.01287	0.0005	≈ 0.30
6	730	≈ 0.00430	0.00005	≈ 0.27

Tabela 6.4: Parâmetros para refinamento de malha.

Para o refinamento de malhas, temos interesse em verificar a influência da malha sobre os resultados e se o comportamento esperado da discretização “Forward Time Centered Space” se mantém, isto é, se o refinamento reduz o erro. Neste caso, nosso interesse se concentra em valores de τ muito pequenos e muito grandes. Desta forma, optamos por $\tau = 0.0001, 1$ e 100 para obtenção de valores de referência.

Os Erros Relativos obtidos nessas simulações, de acordo com cada malha e valor de τ , estão registrados na Tabela 6.5.

	n=3	n=4	n=5	n=6
$\tau = 100$	4.333522	5.109726	4.875776	4.879490
$\tau = 1$	0.440475	0.452542	0.398868	0.396438
$\tau = 0.0001$	0.122789	0.099696	0.009107	0.004933

Tabela 6.5: Erro Relativo ($\|E\|_2$) de acordo com n e τ , obtidos no tempo final.

Para todas as malhas, a diminuição do valor de τ resultou na redução do Erro Relativo, conforme o esperado de acordo com a equação (6.11). Para os valores mais altos de τ , houve oscilação no comportamento do erro, aumentando durante a transição de $n=3$ para $n=4$. Os valores voltaram a decair ou se estabilizaram em $n=5$.

A redução do Erro Relativo de acordo com o refinamento da malha nos fornece um indício de que, para os valores de τ avaliados, a malha espaço-temporal utilizada para resolução de uma Equação do Calor Bidimensional, numa discretização do tipo “Forward Time Centered Space” explícito, é também adequada para resolução de nossa Equação Telegráfica Bidimensional na mesma discretização, porém implícita.

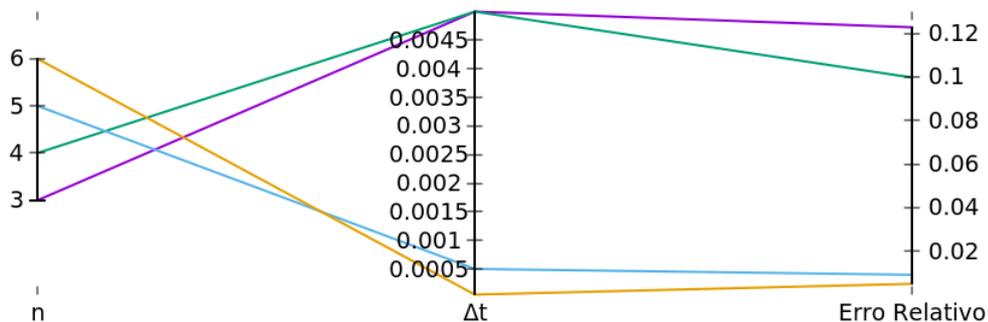
Com base nessas simulações, estimamos a velocidade de convergência p^* do método numérico por meio da equação (6.15). Para isso, utilizamos os valores obtidos para $\tau = 0.0001$, uma vez que eles apresentam a melhor aproximação entre o modelo numérico e a solução analítica utilizada como referência. O resultado está disposto na Tabela 6.6.

n	ni,mj	h	$\ E\ _2$	p^*
3	28	0.012588	0.122789	
4	82	0.001467	0.099696	0.09
5	244	0.000165	0.009107	1.08
6	730	0.000018	0.004933	0.27

Tabela 6.6: Taxa de convergência p^* .

A maior taxa foi obtida ao tomar $n=5$, obtendo $p^* = 1.08$. Note que, para essa malha, o erro relativo decresce em uma casa decimal. Para $n=6$, a taxa p^* diminui consideravelmente. Isto se dá por conta de um substancial refinamento da malha (com $n_i=m_j=730$). Além disso, a não linearidade da EDP em conjunto com o tipo de aproximação das derivadas também contribui para a diminuição de p^* . Esses resultados estão ilustrados na Figura 6.3.

Figura 6.3: Relação entre n , Δt e $\|E\|_2$, para $\tau = 0.0001$.



Fonte: o Autor.

O tempo necessário para realização de cada simulação mostrou variação, não apenas de acordo com a malha espaço-temporal, mas também com a escolha de τ , sendo que, para valores menores de τ , o tempo necessário para computação foi maior em todos os casos. Na Tabela 6.7, registramos os valores obtidos em minutos.

Os tempos computacionais foram obtidos pela rotina intrínseca CPU_TIME do compilador gFortran[9].

	$\tau = 100$	$\tau = 1$	$\tau = 0.0001$
n=3	<1	<1	<1
n=4	<1	<1	<1
n=5	7	10	28
n=6	635	642	1404

Tabela 6.7: Tempo computacional, em minutos, para simulações utilizadas no Estudo Numérico.

7 RESULTADOS

Devido à grande quantidade de dados gerados, para fins de comparação, optamos por apresentar os resultados deste trabalho por meio de subseções, organizadas de maneira a facilitar a avaliação do modelo de tempo de retardo proposto.

Primeiramente, verificamos o comportamento do Modelo Reativo-Telegráfico 2D sem o nosso modelo para o Tempo de Retardo a fim de estabelecer uma base para comparação. Em seguida, analisamos os resultados obtidos com o nosso modelo. Nessa análise, buscamos verificar principalmente:

1. o aparecimento de soluções negativas;
2. a preservação do comportamento dos parâmetros sobre os resultados.

Esses pontos nos permitem investigar se nosso modelo não altera as propriedades fundamentais dos modelos de dinâmica populacional e sua possível usabilidade em problemas reais.

7.1 INFLUÊNCIA DO TEMPO DE RETARDO E DIFUSIVIDADE NO MODELO REATIVO-TELEGRÁFICO 2D

Neste momento, faremos uma breve análise do Modelo Reativo-Telegráfico 2D com tempo de retardo constante. Para isso, tomaremos o modelo (3.9), porém com valores fixos para λ . Além disso, ajustaremos os valores de γ_x e γ_y de forma a determinar valores específicos para as difusividades.

O parâmetro λ exerce influência tanto no tempo de retardo quanto nas difusividades em cada componente. Dessa maneira, é de nosso interesse verificar como cada um desses termos influencia o comportamento do modelo.

Assim, realizamos simulações do modelo 3.9 utilizando os parâmetros descritos na Tabela 7.1. Note que o domínio espacial foi tomado estendendo o trabalho [6] para duas dimensões.

Nesta análise, utilizamos $\tau=1.00, 0.50, 0.25, 0.10$ e 0.01 de maneira a investigar o comportamento do modelo com cada vez menor influência do tempo de retardo. Tomamos também $D_x=D_y=1.00, 0.50$ e 0.25 para avaliar a influência da difusividade, principalmente sobre o aparecimento de resultados negativos. Para obter esses valores, os parâmetros λ, γ_x e γ_y foram tomados conforme demonstramos na Tabela 7.2.

Além desses parâmetros, conforme vemos no modelo (3.9), é necessário definir uma função $F(S)$ de crescimento para as partículas e uma condição inicial para a função S . A condição inicial utilizada é do tipo Pulso, conforme a equação (2.21) para a função S , sendo

Parâmetro	Símbolo	Valor
Domínio Espacial	Ω	$(0, \pi) \times (0, \pi)$
Domínio Temporal		$(0, 5.0)$
Partições no Eixo x	ni	244
Partições no Eixo y	mj	244
Passo no Tempo	Δt	0.0005
Taxa de Inversão de Movimento	λ	ver Tabela 7.2
Velocidade no Eixo x	γ_x	ver Tabela 7.2
Velocidade no Eixo y	γ_y	ver Tabela 7.2
Tolerância para Ocupação	tol_{ocup}	10^{-3}

Tabela 7.1: Parâmetros gerais utilizados para verificar a influência de τ , D_x e D_y no modelo Telegráfico-Reativo 2D.

	$\tau = 1.00$	$\tau = 0.50$	$\tau = 0.25$	$\tau = 0.10$	$\tau = 0.01$
$D_\kappa = 1.00$	$\lambda = 0.5$ $\gamma_x = 1.00000$ $\gamma_y = 1.00000$	$\lambda = 1.0$ $\gamma_x = 1.41421$ $\gamma_y = 1.41421$	$\lambda = 2.0$ $\gamma_x = 2.00000$ $\gamma_y = 2.00000$	$\lambda = 5.0$ $\gamma_x = 3.16227$ $\gamma_y = 3.16227$	$\lambda = 50.0$ $\gamma_x = 10.0000$ $\gamma_y = 10.0000$
$D_\kappa = 0.50$	$\lambda = 0.5$ $\gamma_x = 0.70710$ $\gamma_y = 0.70710$	$\lambda = 1.0$ $\gamma_x = 1.00000$ $\gamma_y = 1.00000$	$\lambda = 2.0$ $\gamma_x = 1.41421$ $\gamma_y = 1.41421$	$\lambda = 5.0$ $\gamma_x = 2.23606$ $\gamma_y = 2.23606$	$\lambda = 50.0$ $\gamma_x = 7.07106$ $\gamma_y = 7.07106$
$D_\kappa = 0.25$	$\lambda = 0.5$ $\gamma_x = 0.50000$ $\gamma_y = 0.50000$	$\lambda = 1.0$ $\gamma_x = 0.70710$ $\gamma_y = 0.70710$	$\lambda = 2.0$ $\gamma_x = 1.00000$ $\gamma_y = 1.00000$	$\lambda = 5.0$ $\gamma_x = 1.58113$ $\gamma_y = 1.58113$	$\lambda = 50.0$ $\gamma_x = 5.00000$ $\gamma_y = 5.00000$

Tabela 7.2: Parâmetros utilizados para verificar a influência de τ , D_x e D_y no modelo Telegráfico-Reativo 2D.

$A_x = A_y = 1.2545$, $C_x = C_y = 1.8870$ e $B = \pi$. A função de crescimento é dada pelo modelo de crescimento exponencial, calculado por meio de

$$F(S(x, y, t)) = K_1 S(x, y, t), \quad (7.1)$$

com $K_1 = 1.0$ sendo utilizado nesse trabalho. Detalhes sobre essa função de crescimento podem ser encontrados no apêndice A.1.1.

O primeiro ponto de análise foi o surgimento de resultados negativos para densidade populacional S , como é notado no modelo unidimensional.

Verificamos que resultados negativos ainda podem ocorrer no modelo bidimensional. Na Tabela 7.3, anotamos o primeiro momento em que um resultado negativo foi observado em cada simulação, não importando sua posição no domínio. Note que nem todas as simulações apresentaram soluções negativas, indicando que existem fatores que determinam ou não seu aparecimento.

Uma vez que nossas simulações fixaram todos os parâmetros, exceto τ , D_x e

	$\tau = 1.00$	$\tau = 0.50$	$\tau = 0.25$	$\tau = 0.10$	$\tau = 0.01$
$D_x = D_y = 1.00$	$t = 0.0195$	$t = 0.0145$	$t = 0.0180$	$t = 0.1080$	s/r
$D_x = D_y = 0.50$	$t = 0.0265$	$t = 0.0195$	$t = 0.0145$	$t = 0.1575$	s/r
$D_x = D_y = 0.25$	$t = 0.0370$	$t = 0.0270$	$t = 0.0200$	$t = 0.0240$	s/r

Tabela 7.3: Momento em que foi registrado o primeiro resultado negativo. A marcação “s/r” indica “sem registro de resultados negativos”.

D_y , podemos observar como estes influenciam o surgimento de soluções negativas. Utilizando a condição inicial do tipo Pulso, os resultados negativos surgiram primeiramente no centro do domínio, onde uma grande quantidade de partículas inicia sua movimentação.

O tempo de retardo τ apresenta grande relação com o aparecimento de soluções negativas. De fato, os resultados encontrados reafirmam que, caso $\tau \rightarrow 0$, a equação (2.18) se aproxima a uma equação Reativa-Difusiva 2D, ou Equação do Calor com termo Reativo, similar ao proposto em (6.6). Esse tipo de equação, quando utilizada no contexto da dinâmica populacional, não apresenta resultados negativos. Assim, para algum $\tau \approx 0$ os resultados negativos deixam de aparecer.

A intensidade dos resultados negativos também sofre influência de τ e das difusividades D_x e D_y . A Tabela 7.4 indica o menor valor encontrado para S no primeiro momento no qual um valor negativo foi registrado.

	$\tau = 1.00$	$\tau = 0.50$	$\tau = 0.25$	$\tau = 0.10$	$\tau = 0.01$
$D_x = D_y = 1.00$	$S = -0.034$	$S = -0.027$	$S = -0.032$	$S = -0.074$	$S \geq 0$
$D_x = D_y = 0.50$	$S = -0.010$	$S = -0.018$	$S = -0.005$	$S = -0.003$	$S \geq 0$
$D_x = D_y = 0.25$	$S = -0.012$	$S = -0.017$	$S = -0.016$	$S = -0.004$	$S \geq 0$

Tabela 7.4: Valor mínimo encontrado.

Esses resultados indicam que, quanto menor o valor de τ , menor a intensidade dos resultados negativos. Entretanto, pode-se notar alguma oscilação nesses resultados, em que reduzir τ parece aumentar a intensidade. Em todos os casos, porém, $\tau = 0.01$ não apresentou nenhum resultado negativo. Além disso, podemos inferir a intensidade dos valores negativos na solução observando se o comportamento negativo permanece por muito tempo nas soluções. Assim, verificamos por quanto tempo a onda negativa persiste, anotando o resultado na Tabela 7.5.

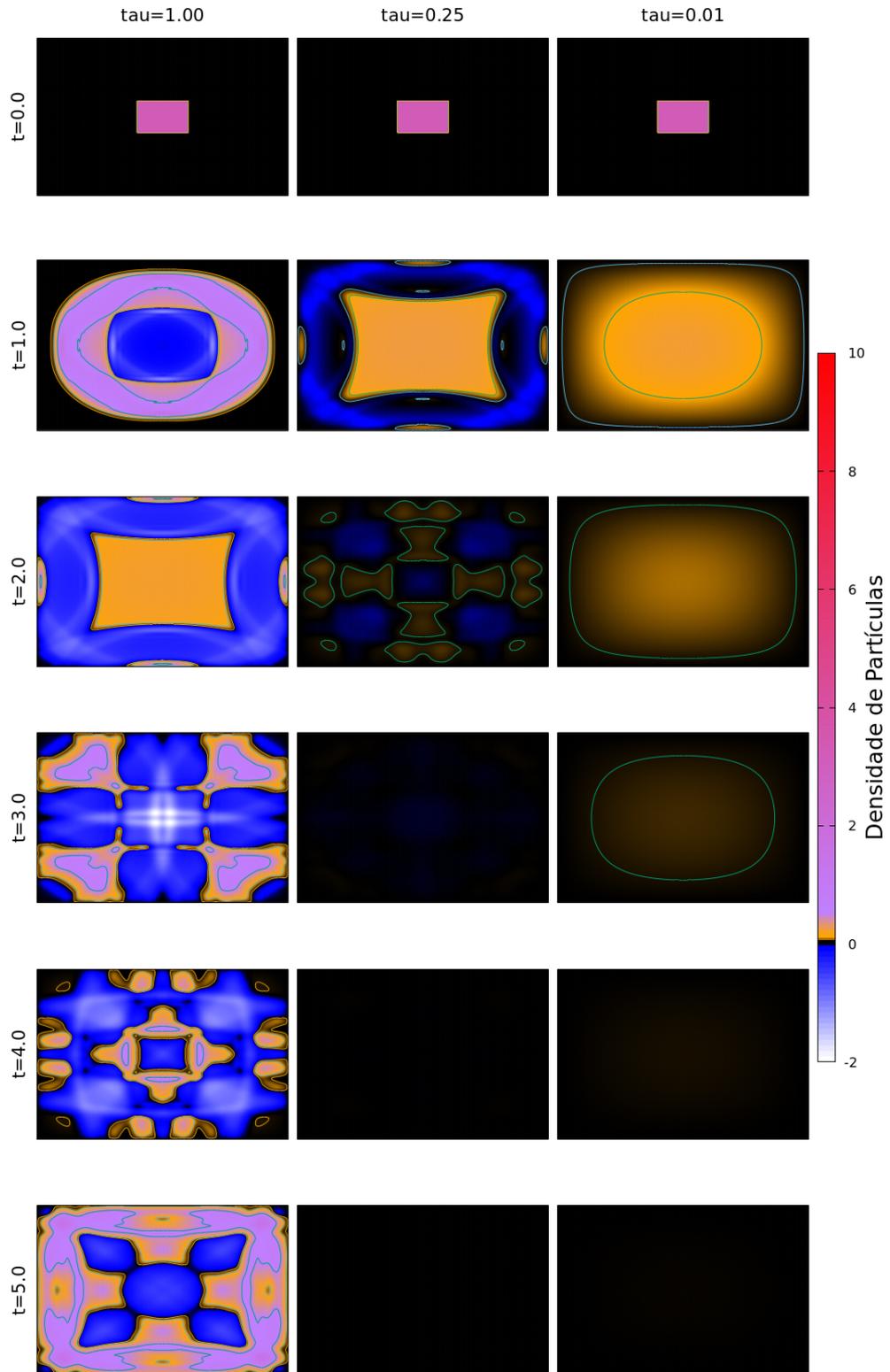
	$\tau = 1.00$	$\tau = 0.50$	$\tau = 0.25$	$\tau = 0.10$	$\tau = 0.01$
$D_x = D_y = 1.00$	99.42%	99.23%	97.78%	7.36%	0%
$D_x = D_y = 0.50$	99.30%	78.55%	26.73%	2.01%	0%
$D_x = D_y = 0.25$	98.09%	44.72%	9.42%	0.03%	0%

Tabela 7.5: Porcentagem do tempo da simulação com resultados negativos.

Os resultados negativos tendem a ser menores e durar menos tempo à medida que τ se aproxima de zero.

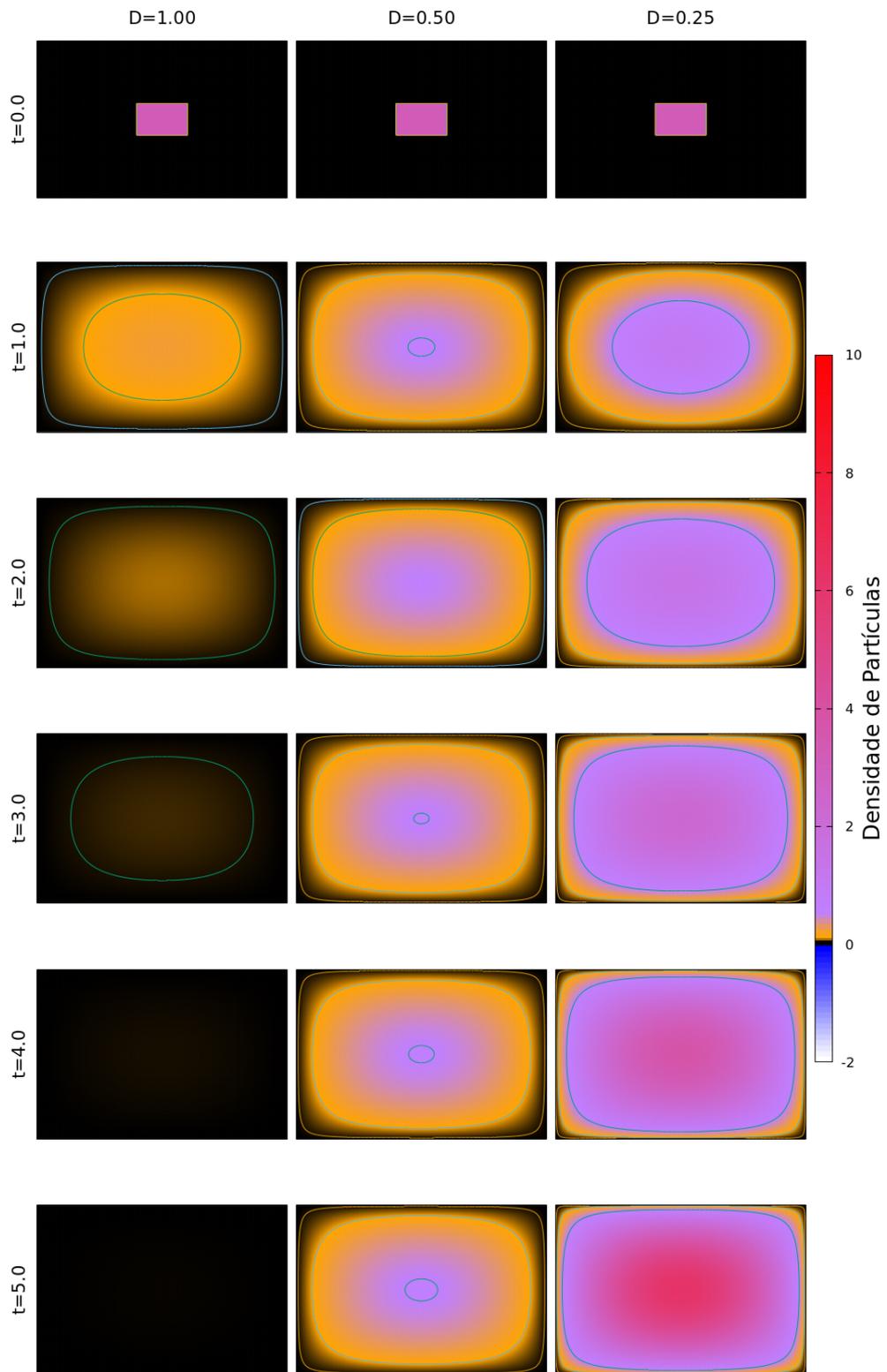
Esses resultados foram exemplificados na Figura 7.1.

Figura 7.1: Exemplo da influência de τ para $D_x = D_y = 1.00$.



Fonte: o Autor.

Figura 7.2: Exemplo da influência de D_x e D_y para $\tau = 0.01$.



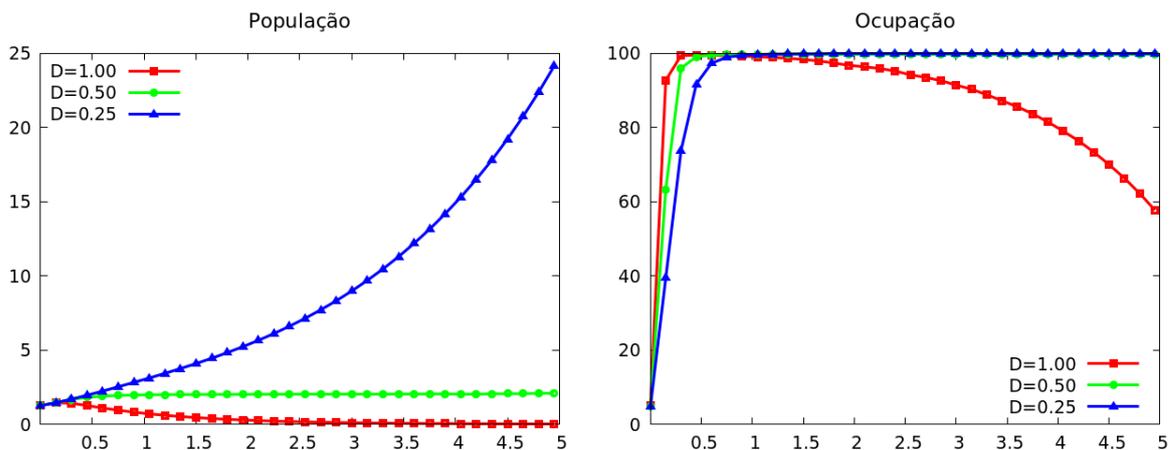
Fonte: o Autor.

Verificamos um comportamento similar em relação à influência das difusividades D_x e D_y sobre os resultados negativos. Obviamente, com difusividades iguais a zero não haveria movimento: nesse caso, cada ponto do domínio iria simplesmente crescer de acordo com a função de crescimento $F(S)$. Assim, podemos supor que diminuir a difusividade poderia evitar o aparecimento de soluções negativas. A Tabela 7.5 contribui para essa hipótese, mostrando que a diminuição da difusividade também diminui a intensidade dos resultados negativos encontrados.

Sobre as características do modelo quanto à sua aplicação em dinâmica populacional, podemos fazer uma análise utilizando os resultados obtidos para $\tau = 0.01$, uma vez que não retornaram soluções negativas, mantendo-se coerentes ao caso populacional.

A difusividade demonstrou grande influência na persistência ou extinção das populações de partículas. Verificamos que uma maior difusividade aumenta a velocidade de ocupação do domínio. Porém, sem um acompanhamento adequado de população, uma invasão muito rápida pode levar à extinção prematura da mesma, como visto nas Figuras 7.2 e 7.3.

Figura 7.3: População e ocupação para $\tau = 0.01$.



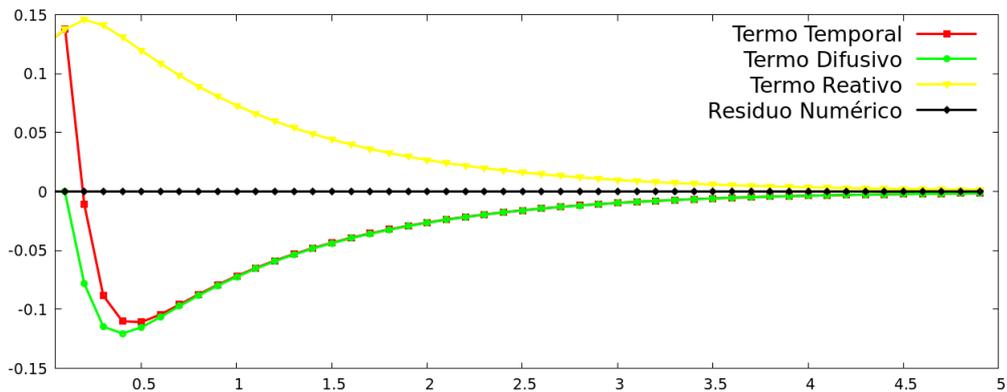
Fonte: o Autor.

Na Figura 7.4, vemos o comportamento dos termos da equação diferencial conforme observado nas equações (6.1), (6.2), (6.3) e (6.4). Note que os $Termo_x$ e $Termo_y$ atuam com a mesma intensidade, o que era esperado, uma vez que todas as difusividades nos eixos x e y são idênticas. Assim, representamos apenas um deles na figura.

Note que os valores apresentados diminuem à medida que o resultado se aproxima da extinção.

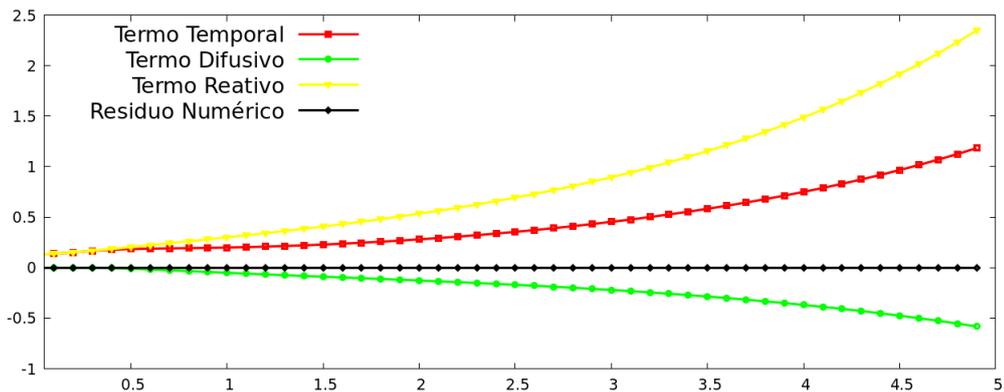
O desfecho da simulação representada na Figura 7.4 foi a extinção da população, o que explica a aproximação dos termos a zero à medida que o tempo avança. Para exemplificar a diferença na dinâmica dos termos em relação ao desfecho, apresentamos, para comparação, a Figura 7.5, que resultou no crescimento exponencial da população.

Figura 7.4: Contribuição dos termos para $D_x = D_y = 1$ e $\tau = 0.01$.



Fonte: o Autor.

Figura 7.5: Contribuição dos termos para $D_x = D_y = 0.25$ e $\tau = 0.01$.



Fonte: o Autor.

Desta forma, na ausência de soluções negativas, os resultados são coerentes com os modelos de dinâmica populacional e nos fornecem um comportamento a ser utilizado como base para a comparação com o modelo de tempo de retardo proposto neste trabalho.

O tempo computacional das simulações está registrado na Tabela 7.6. Como no estudo de convergência, valores mais baixos de τ apresentaram maior esforço computacional.

	$\tau = 1.00$	$\tau = 0.50$	$\tau = 0.25$	$\tau = 0.10$	$\tau = 0.01$
$D_x = D_y = 1.00$	10	10	11	13	21
$D_x = D_y = 0.50$	9	10	10	11	12
$D_x = D_y = 0.25$	8	9	9	11	13

Tabela 7.6: Tempo computacional, em minutos, para simulações utilizando τ constante.

7.2 VARIAÇÃO DE PARÂMETROS NO MODELO REATIVO-TELEGRÁFICO 2D COM MODELO PARA TEMPO DE RETARDO

Exploramos agora o comportamento do Modelo Reativo-Telegráfico 2D junto do modelo para o tempo de retardo proposto neste trabalho. Para isso, tomamos duas funções de crescimento e duas condições iniciais e realizamos uma variação nos parâmetros de crescimento e velocidade. Os valores utilizados nas simulações estão descritos na Tabela 7.7. Eles foram tomados de forma a englobar situações semelhantes às das simulações anteriores.

Parâmetro	Símbolo	Valor
Domínio Espacial	Ω	$(0, \pi) \times (0, \pi)$
Domínio Temporal		$(0, 5.0)$
Partições no Eixo x	ni	244
Partições no Eixo y	mj	244
Passo no Tempo	Δt	0.0005
Velocidade no Eixo x e y	γ_x e γ_y	(1,5)
Taxa de Crescimento	K_1	(1,17)
Tolerância para Ocupação	tol_{ocup}	10^{-3}

Tabela 7.7: Valores utilizados para variação de parâmetros (crescimento exponencial).

Além do crescimento exponencial, dado pela função (7.1) utilizada anteriormente, cuja aplicação é restrita a casos com abundância de recursos e espaços de tempo curtos, utilizamos também o crescimento logístico, dado pela função

$$F(S(x, y, t)) = K_1 S(x, y, t) \left(1 - \frac{S(x, y, t)}{K_2} \right), \quad (7.2)$$

na qual K_1 representa a taxa de reprodução natural da população e K_2 a capacidade máxima populacional do ambiente. Essa função nos permite levar em conta a limitação do ambiente na capacidade de sustentar a população e a relação entre esta e as taxas de crescimento, tendo usos mais amplos em casos reais. Detalhes dessa função podem ser vistos no apêndice A.1.2.

7.2.1 Crescimento Exponencial

Partindo primeiramente da mesma função de crescimento (7.1), utilizada nas simulações com τ fixo, realizamos uma variação dos parâmetros γ_x e γ_y da equação diferencial e do parâmetro K_1 da função de crescimento para observar o comportamento do modelo. O valor de τ é obtido por meio do modelo para Tempo de Retardo proposto em (3.5) com as considerações tomadas na seção 3.2.

- **Condição Inicial tipo Pulso**

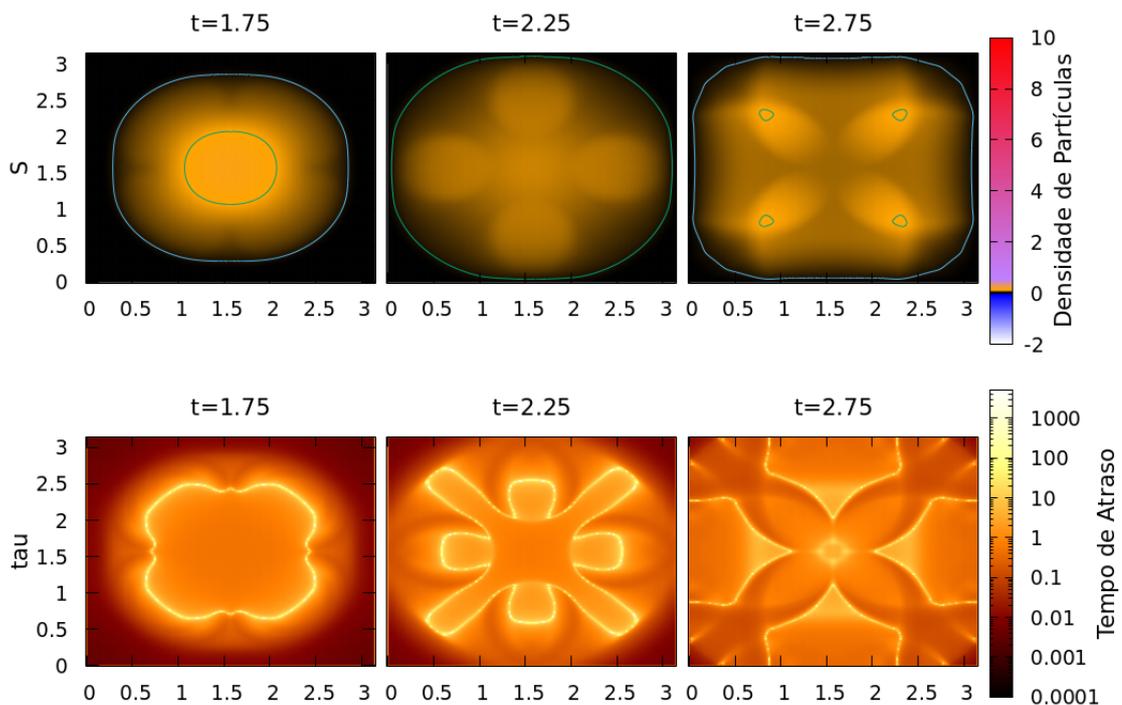
Inicialmente, avaliamos os resultados com a condição inicial de Pulso, dada pela equação (2.21), com $A_x = A_y = 1.2545$, $C_x = C_y = 1.8870$ e $B = \pi$.

Com o novo modelo de tempo de retardo utilizado, não houve resultados negativos em nenhum dos casos considerados. Esse comportamento é essencial para a consideração do modelo para teste em problemas aplicados.

A dinâmica de propagação de partículas é diferente da difusão simples, apresentando pequenas oscilações. Estas, porém, têm amplitude menor que o modelo Reativo-Telegráfico 2D comum, e sem o aspecto de onda da equação Telegráfica. Tais oscilações podem formar *clusters* localizados com maior densidade de partículas.

Na Figura 7.6, podemos observar a formação desses *clusters* antes do crescimento irrestrito do número de partículas causar uma homogeneização da densidade por toda a extensão do domínio.

Figura 7.6: Resultados de S para $\gamma_x = \gamma_y = 1.00$ e $K_1 = 3.00$ (crescimento exponencial, condição inicial Pulso).

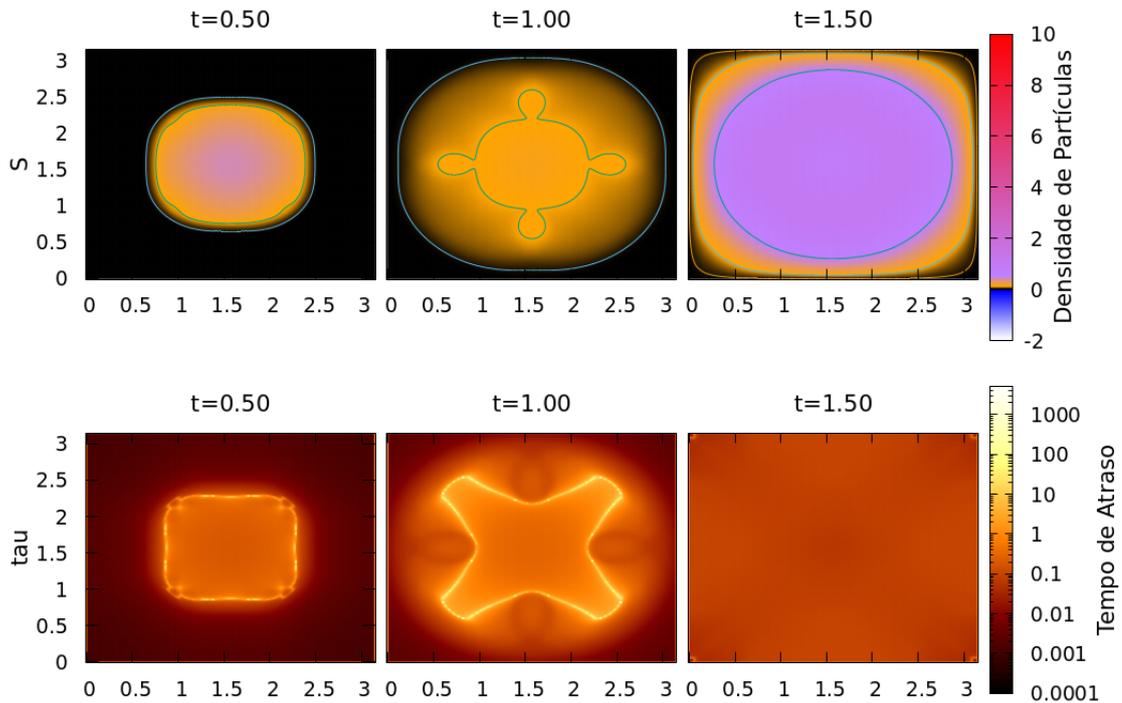


Fonte: o Autor.

Devemos notar, contudo, a grande influência que o modelo de tempo de retardo exerce sobre esse novo comportamento. Uma vez que verificamos os valores de τ , podemos visualizar um comportamento mais agudo de onda. O tempo de retardo inicia-se com pico similar ao da difusão de S , entretanto apresenta uma interação mais rápida com as bordas do domínio, gerando um efeito de ondulação que define áreas mais propícias ao crescimento.

As Figuras 7.6 e 7.7 exemplificam essas dinâmicas sobre S e τ em dois casos diferentes.

Figura 7.7: Resultados de S para $\gamma_x = \gamma_y = 2.00$ e $K_1 = 7.00$ (crescimento exponencial, condição inicial Pulso).



Fonte: o Autor.

Os parâmetros γ_x , γ_y e K_1 exibiram influência sobre o desfecho das simulações. Para a função de crescimento exponencial, observamos dois desfechos distintos: extinção, quando a taxa de ocupação se reduz a zero, e persistência sem ponto de equilíbrio, quando há crescimento irrestrito da população.

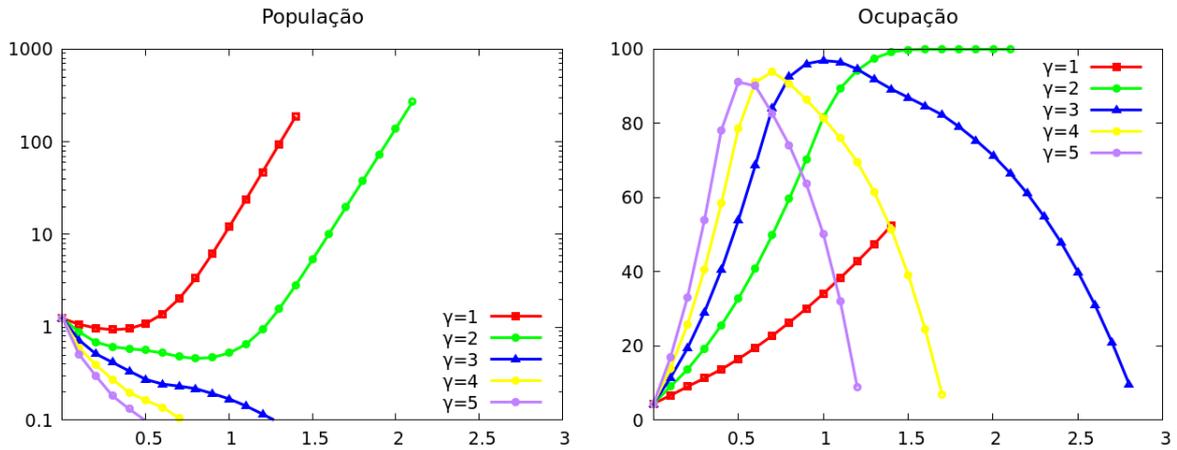
As velocidades γ_x e γ_y influenciam na difusividade do sistema. O aumento dessas velocidades leva a um aumento na difusividade do sistema, resultando numa ocupação mais rápida do domínio. Essa ocupação, entretanto, não implica em persistência. É necessário que a taxa de crescimento da população aumente de maneira correspondente para evitar que o espalhamento não impossibilite a reprodução necessária para continuidade da população.

A Figura 7.8 mostra, por exemplo, os resultados para simulações com $K_1 = 7.00$. Como é possível notar, o aumento de γ_x e γ_y resulta numa ocupação mais rápida, porém valores elevados demais acabam levando à extinção da população.

Esse comportamento é o mesmo visto no modelo Reativo-Telegráfico 2D e o esperado para modelos de dinâmica populacional. Nesse sentido, vemos que o modelo não desconfigura a ação esperada da velocidade e das funções de crescimento.

A dinâmica dos termos da equação diferencial parcial, por sua vez, é bastante diferente do observado utilizando-se coeficientes constantes, como indicado na Figura 7.9, para

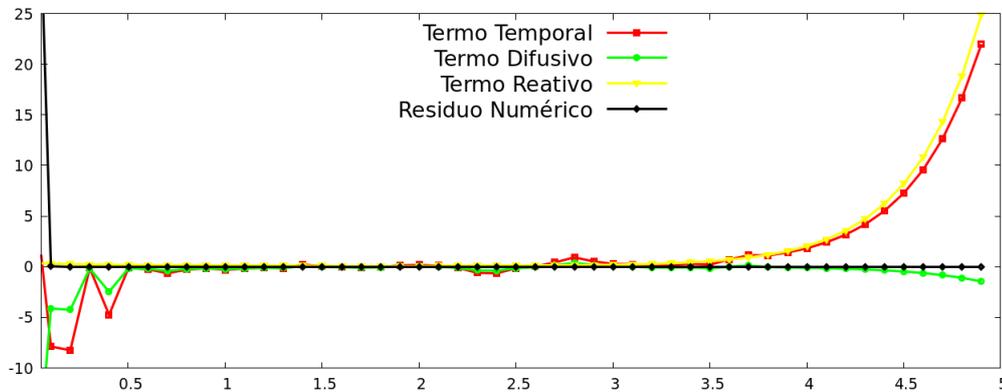
Figura 7.8: População e Ocupação para $K_1 = 7.00$ (crescimento exponencial, condição inicial Pulso).



Fonte: o Autor.

uma simulação que teve como desfecho o crescimento da população.

Figura 7.9: Contribuição dos termos para $\gamma_x = \gamma_y = 1$ e $K_1 = 3.0$ (crescimento exponencial, condição inicial Pulso).



Fonte: o Autor.

Enquanto o $Termo_r$ tem um comportamento contínuo, os outros apresentam uma série de oscilações até o momento em que os valores de λ se homogenizam pelo domínio e o crescimento da população prevalece. Esse comportamento é esperado, pois todos os termos, exceto o $Termo_r$, são dependentes de λ ; além disso, λ é uma propriedade pontual no domínio, enquanto os termos são calculados de maneira global.

- **Condição Inicial tipo Domínio Cheio**

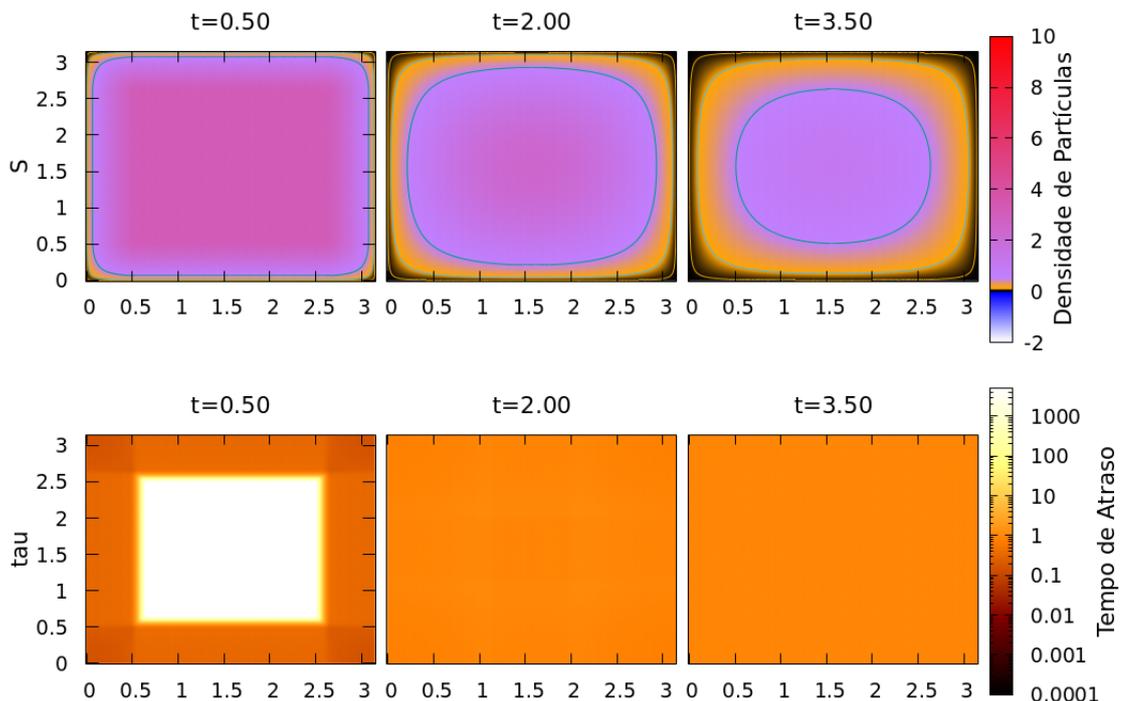
Simulações também foram realizadas para a condição inicial de Domínio Cheio, descrita pela equação (2.23), com $B = \pi$, para verificar se resultados negativos po-

deriam aparecer nas bordas do domínio quando fosse submetida a uma alta carga de partículas. Os parâmetros restantes são os mesmos das simulações anteriores, dados na Tabela 7.7.

Não foram registrados resultados negativos nessas simulações. Enquanto as bordas do domínio são localidades críticas para o surgimento de soluções negativas devido ao fenômeno de inversão de fase da onda, o modelo de λ evitou tal ocorrência.

O comportamento do modelo, neste caso, apresenta pequenas diferenças em relação ao caso anterior devido à interação de λ com as bordas do domínio e o estado mais uniforme da densidade inicial. A princípio, a função λ interage com as bordas, evitando um movimento brusco das partículas que se dirigem para fora do domínio. Porém, com o meio inteiramente ocupado de partículas e com a variação pequena de densidade em todos os pontos, incluindo as bordas, λ rapidamente assume um valor quase constante para todo o domínio, reduzindo o modelo ao caso com coeficientes constantes. A Figura 7.10 ilustra as dinâmicas de S e τ .

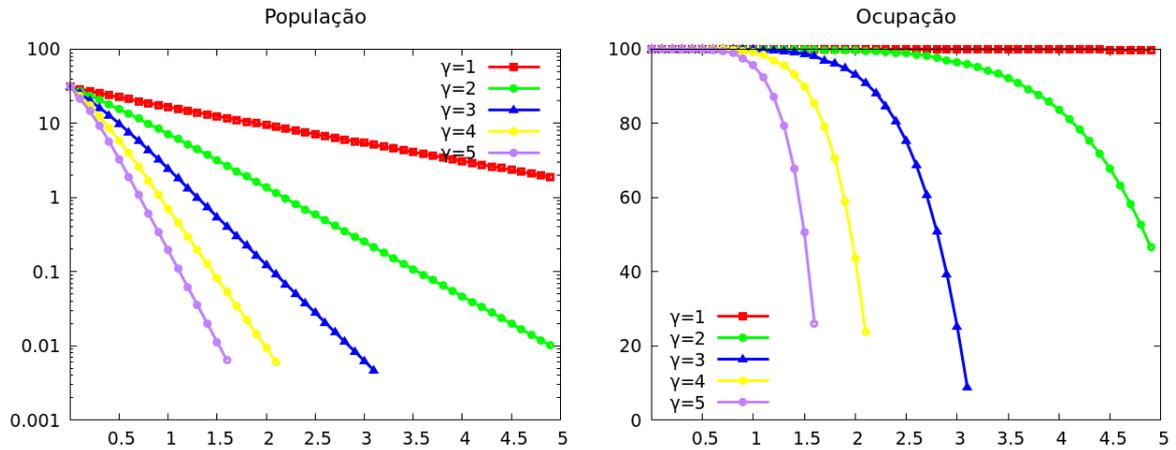
Figura 7.10: Resultados de S para $\gamma_x = \gamma_y = 1.00$ e $K_1 = 3.00$ (crescimento exponencial, condição inicial Domínio Cheio).



Fonte: o Autor.

O comportamento da População Total e Ocupação, como mostra a Figura 7.11, são os mesmos encontrados no caso com condição inicial Pulso, apenas com a mudança dos parâmetros que levam à persistência ou extinção devido à nova dinâmica de λ e à ocupação inicial de 100%.

Figura 7.11: População e Ocupação para $K_1 = 3.00$ (crescimento exponencial, condição inicial Domínio Cheio).



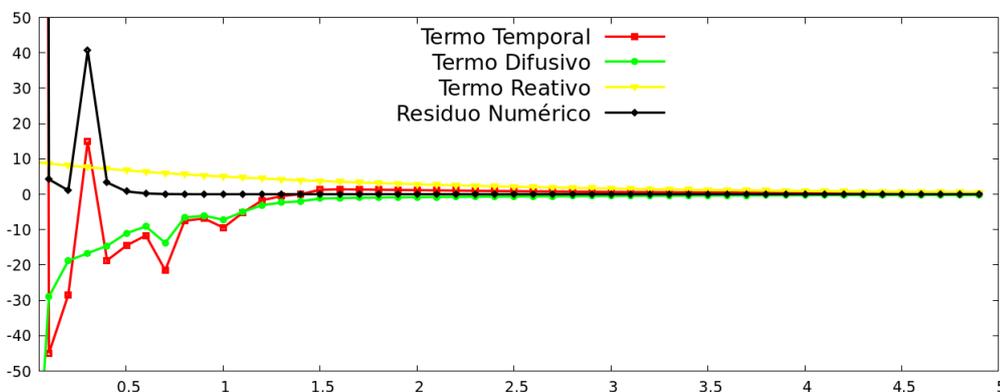
Fonte: o Autor.

Nessas simulações, verificamos o caso $\lambda = 0$ ocorrendo em grande parte do interior do domínio e lentamente suavizando-se e homogenizando-se por todo domínio. Em pouco tempo a equação se reduz a λ constante. A função S não mantém sua energia, decaindo em valor com o passar do tempo, de maneira mais acentuada na borda do domínio.

A causa desse declínio deve-se em parte à condição de contorno de Dirichlet, que impõe o valor $S = 0$ nas bordas, unida ao fato de S ser, pela hipótese da solução numérica por diferenças finitas, uma função suave.

A velocidade desse decaimento na população total está ligada tanto aos valores de γ_x e γ_y quanto à taxa de reprodução K_1 .

Figura 7.12: Contribuição dos termos para $\gamma_x = \gamma_y = 1$ e $K_1 = 3.0$ (crescimento exponencial, condição inicial Domínio Cheio).



Fonte: o Autor.

O comportamento dos termos da equação diferencial parcial também são os

mesmo obtidos no caso com condição inicial do tipo Pulso, mas com uma oscilação mais forte nos momentos iniciais, quando a grande quantidade de partículas no domínio é forçada contra as bordas.

A conservação desses comportamentos era esperada, uma vez que nenhuma dinâmica do sistema foi alterada, apenas a condição inicial.

7.2.2 Crescimento Logístico

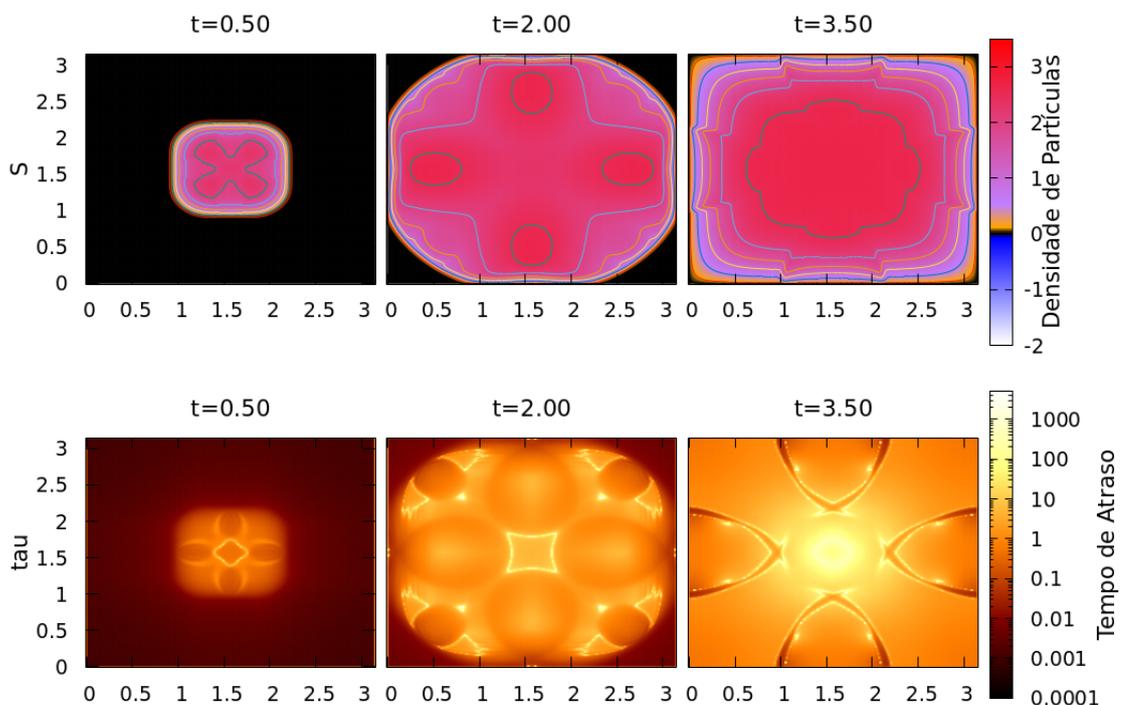
Realizamos também simulações utilizando o modelo logístico de crescimento, dado pela equação (7.2). Para esse caso, utilizamos $K_2 = 3.1516$, apenas um pouco superior ao valor das condições iniciais.

Os parâmetros restantes são os mesmos utilizados para as simulações anteriores, conforme a Tabela 7.7.

- **Condição Inicial tipo Pulso**

Utilizamos ainda a mesma condição inicial em forma de Pulso descrita em (2.21) com os valores utilizados anteriormente.

Figura 7.13: Resultados de S para $\gamma_x = \gamma_y = 1.00$ e $K_1 = 15.00$ (crescimento logístico, condição inicial Pulso).



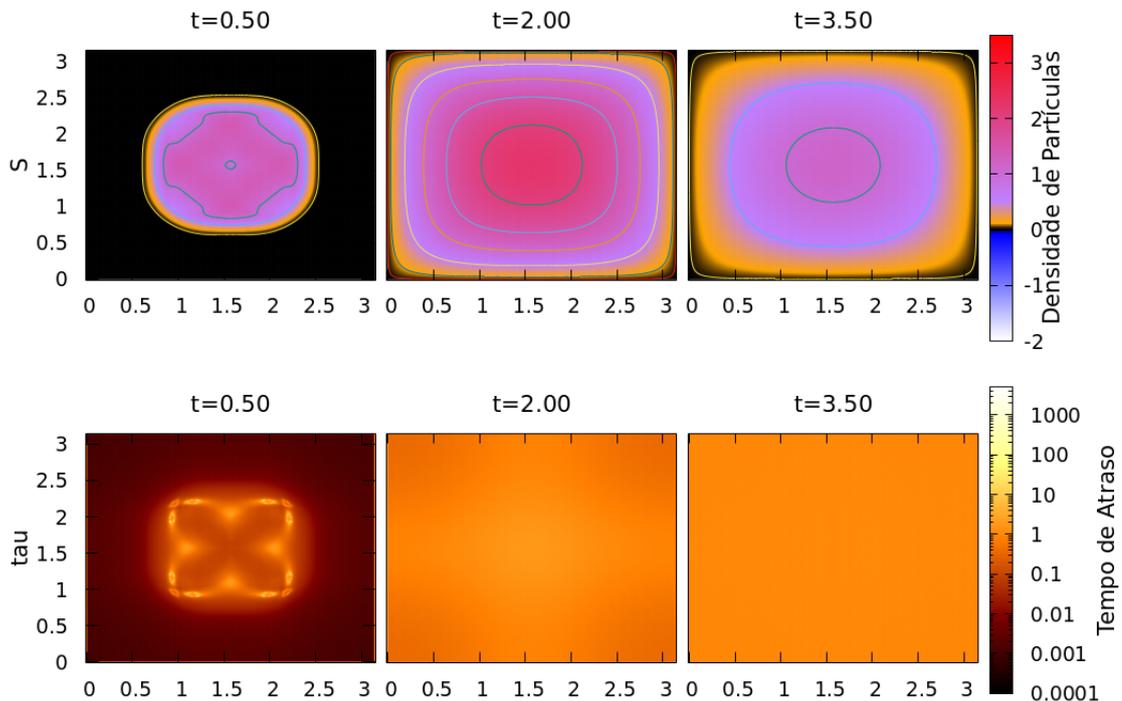
Fonte: o Autor.

Assim como nos casos anteriores, não foram registrados resultados negativos para S nessas simulações. Portanto, o uso do novo modelo de tempo de retardo também é considerado para uso em problemas aplicados em que se utiliza o crescimento logístico.

A dinâmica de propagação ocorreu de maneira um pouco diferente do caso com crescimento exponencial. A formação de pequenos *clusters* permanece, porém bastante atenuada. A interação com as bordas do domínio é bastante acentuada, gerando uma espécie de reflexão da frente de onda. Esse comportamento pode ser visto mais claramente por meio dos valores de τ . Mesmo quando a densidade populacional se aproxima do valor máximo suportado pelo ambiente, pequenas ondas de maior densidade continuam viajando pelo domínio, não formando a distribuição mais suave comum em modelos Reativo-Difusivos. Mantendo o valor máximo de população próximo ao valor inicial de parte do domínio, resultou-se na necessidade de taxas de reprodução muito altas para evitar a extinção da população. Assim, nessas simulações podemos perceber que a difusão foi acompanhada de um crescimento muito rápido das populações, gerando uma ocupação mais homogênea do domínio.

As Figuras 7.13 e 7.14 ilustram essas dinâmicas.

Figura 7.14: Resultados de S para $\gamma_x = \gamma_y = 2.00$ e $K_1 = 15.00$ (crescimento logístico, condição inicial Pulso).

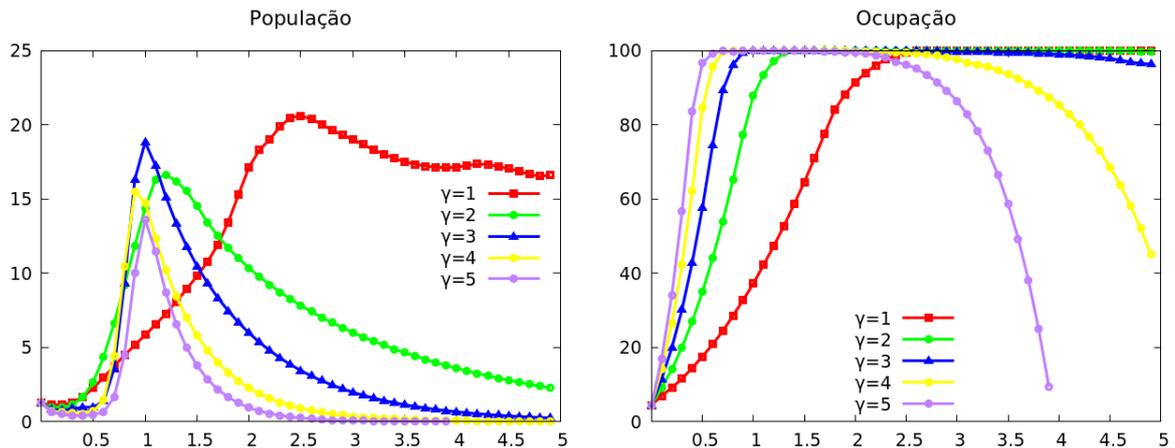


Fonte: o Autor.

As influências de γ_x e γ_y sobre a ocupação do domínio permanecem mesmo com a alteração da função de crescimento, como esperado. Assim, ainda verificamos que o

aumento de γ_x e γ_y gera uma ocupação mais acelerada do domínio. Entretanto, para o sucesso da invasão é necessário que a taxa de crescimento aumente em conformidade. Na Figura 7.15, exibimos os resultados para $K_1 = 15.00$ como exemplo.

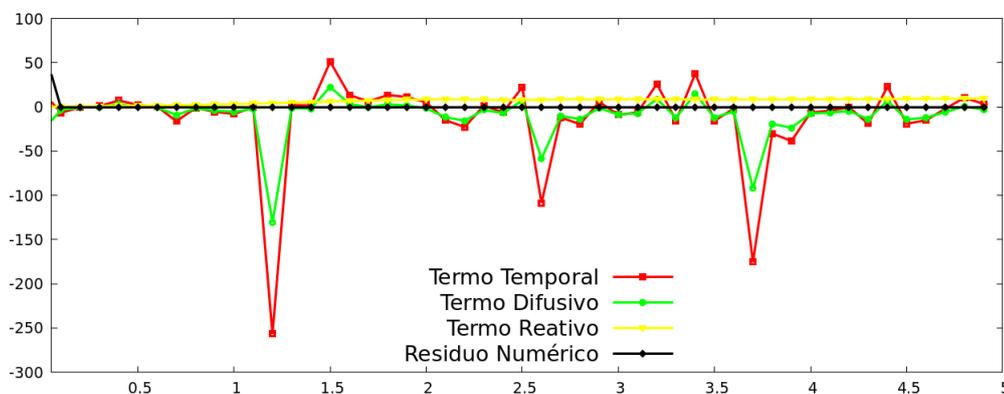
Figura 7.15: População e Ocupação para $K_1 = 15.00$ (crescimento logístico, condição inicial Pulso).



Fonte: o Autor.

A dinâmica dos termos da equação diferencial apresenta um comportamento semelhante ao do caso anterior, com os termos que dependem de λ mostrando grande oscilação até que os valores do mesmo se regularizem pelo domínio, quando todos os termos passam a demonstrar um comportamento mais suave. Além disso, ainda verificamos que $Termo_x = Termo_y$. A Figura 7.16 ilustra essa dinâmica.

Figura 7.16: Contribuição dos termos para $\gamma_x = \gamma_y = 1$ e $K_1 = 15.0$ (crescimento logístico, condição inicial Pulso).



Fonte: o Autor.

- **Condição Inicial tipo Domínio Cheio**

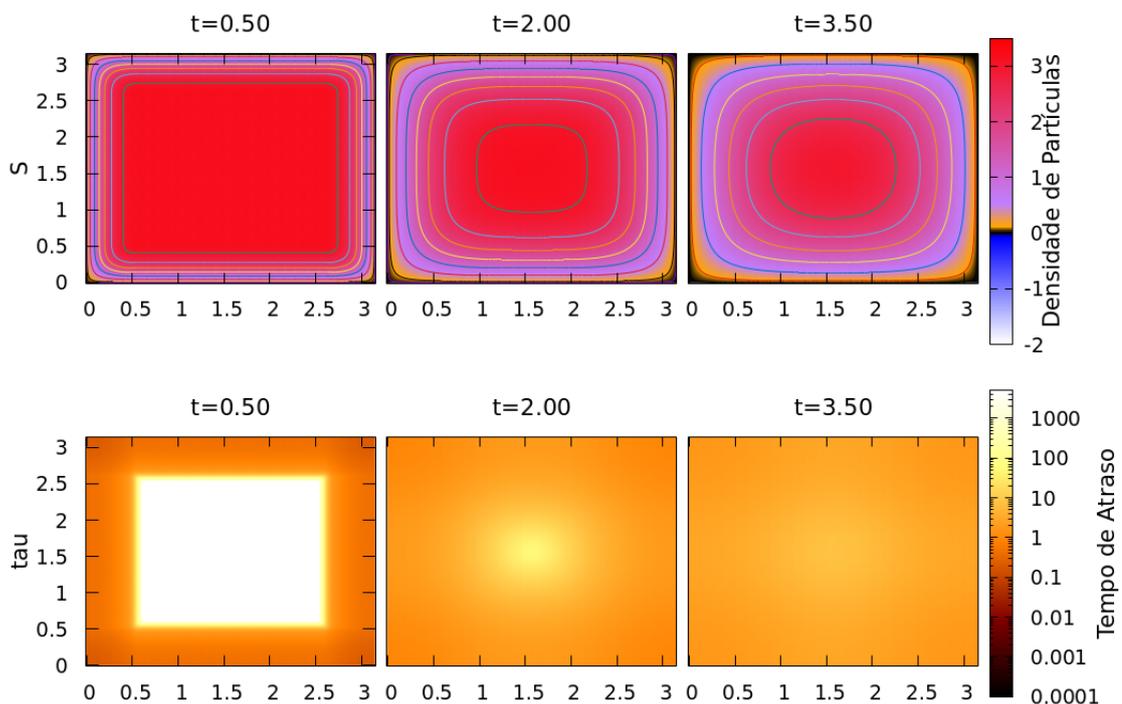
Assim como no caso exponencial, realizamos também simulações para a condição inicial do tipo Domínio Cheio, com $B = \pi$.

Novamente, não foram encontrados resultados negativos para S , indicando que o modelo para tempo de retardo evita a inversão de fase nas bordas do domínio.

Em todos os casos, a densidade de partículas não se manteve na capacidade máxima. Um decaimento na população total foi sempre registrado. Esse comportamento é similar ao que ocorre com a condição inicial do tipo Pulso após a saturação total do ambiente, na qual, uma vez que se registraram ocupação e população máximas, estas entram em declínio.

Esse comportamento, ilustrado na Figura 7.17, era esperado, sendo análogo ao que ocorre com o crescimento exponencial com a condição inicial do tipo Domínio Cheio. A dinâmica da População e Ocupação pode ser vista na Figura 7.18.

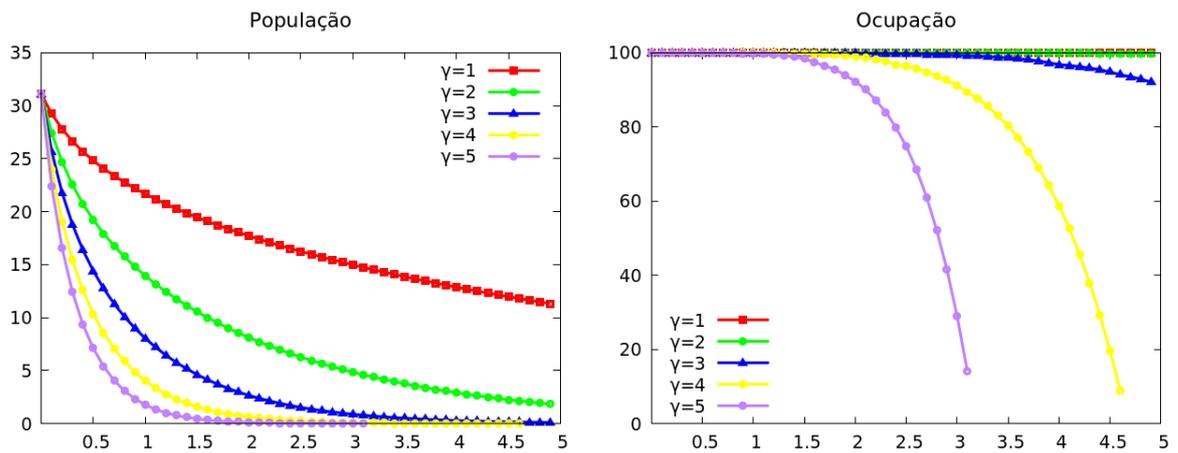
Figura 7.17: Resultados de S para $\gamma_x = \gamma_y = 1.00$ e $K_1 = 15.00$ (crescimento logístico, condição inicial Domínio Cheio).



Fonte: o Autor.

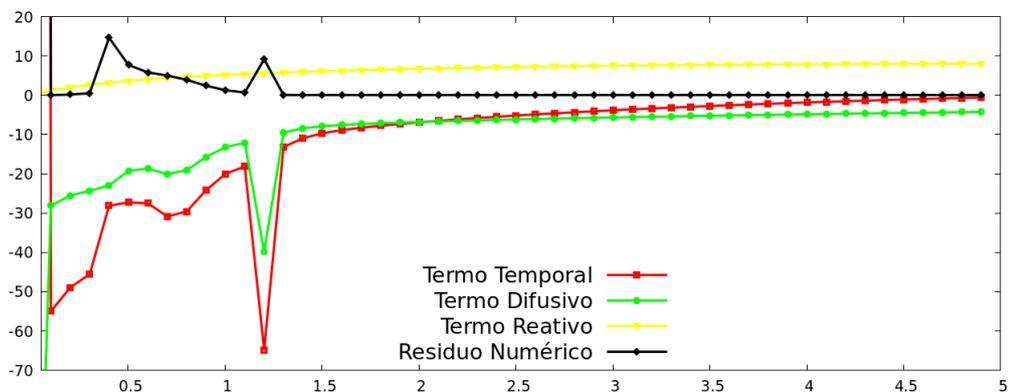
A contribuição dos termos da equação diferencial parcial segue o padrão anterior, apresentando oscilações no início da simulação e suavizando-se assim que λ torna-se mais regular no domínio. Esse comportamento está ilustrado na Figura 7.19.

Figura 7.18: População e Ocupação para $K_1 = 15.00$ (crescimento logístico, condição inicial Domínio Cheio).



Fonte: o Autor.

Figura 7.19: Contribuição dos termos para $\gamma_x = \gamma_y = 1$ e $K_1 = 15.0$ (crescimento logístico, condição inicial Domínio Cheio).



Fonte: o Autor.

8 CONCLUSÃO

Este trabalho apresenta uma modelagem inédita para o parâmetro de Tempo de Retardo utilizado no modelo Reativo-Telegráfico 2D, baseado em hipóteses biológicas, para aplicação em problemas de dinâmica populacional relacionados ao crescimento celular. Sob essa perspectiva, o interesse principal das análises foi verificar se esse novo modelo evitaria o surgimento de soluções negativas e preservaria o comportamento dos parâmetros comuns a tais modelos.

Um estudo numérico preliminar aponta, por meio de comparações com a Equação do Calor, que o método numérico utilizado está aproximando a solução do problema. Além disso, usando o conceito de Resíduo Numérico, verificamos que a solução dos sistemas lineares gerados tanto pelo método implícito, quanto pelas não linearidades naturais do modelo está sendo bem aproximada pelo Método Quasi-Não-Linear.

Os resultados obtidos indicam que o modelo de Tempo de Retardo proposto evita o surgimento de soluções negativas. O aparecimento de resultados negativos utilizando a equação telegráfica unidimensional tende a ocorrer nas bordas do domínio, como visto em [6], e também no centro do domínio no caso bidimensional, como vimos na seção 7.1. Esses dois casos críticos foram especialmente contemplados nos estudos, de forma a certificar a confiabilidade do modelo proposto. Além disso, esse estudo focou apenas no modelo submetido à condição de fronteira do tipo Dirichlet, cujo uso pode estar associado ao surgimento de resultados negativos. Em todos os casos analisados, nenhum resultado negativo foi verificado.

Na questão da manutenção do funcionamento dos parâmetros, como velocidade das partículas e taxa de crescimento, observamos que a aplicação do modelo proposto neste trabalho não altera as características que tais parâmetros imprimem na solução.

Assim, concluímos que o modelo para Tempo de Retardo proposto neste trabalho está apto para aplicação em problemas de dinâmica populacional, apresentando *a priori* resultados coerentes com o esperado para estudos dessa natureza.

9 TRABALHOS FUTUROS

Após estender a equação reativa-telegráfica para o caso bidimensional e propor um novo modelo para o tempo de retardo, obtivemos um primeiro resultado bastante promissor: o modelo para tempo de retardo até o presente momento impede a equação S de gerar resultados negativos, abrindo caminho para verificar sua aplicabilidade em casos reais. Essa era a motivação inicial deste trabalho.

Conforme exposto nos objetivos deste trabalho, na seção 1.3, uma aplicação de nosso modelo será preparada para um problema do tipo “In Vitro Healing Assay”. De acordo com uma modelagem preliminar, essa aplicação deverá estender os conceitos teóricos do presente trabalho no seguintes sentidos:

- Emprego de novas condições iniciais;
- Utilização de outras condições de contorno;
- Uso de coordenadas generalizadas.

Assim, a aplicação no experimento real apresenta uma oportunidade não apenas de uso do modelo, mas de seu enriquecimento teórico.

9.1 IN VITRO HEALING ASSAY

Dentre os experimentos biológicos relacionados à invasão, aplicaremos o modelo desenvolvido neste trabalho num tipo de estudo de migração em escala celular chamado “In Vitro Wound Healing Assay”¹, também conhecido como “Scratch Wound”² pelo seu método de preparo. Nesse tipo de ensaio laboratorial, uma cultura de células é preparada e, após seu crescimento, um ferimento é realizado por meio de uma raspagem feita em linha, criando um espaço vazio. O objetivo é verificar a capacidade das células de migrar e retomar esse espaço vazio.

9.2 MODELAGEM PRELIMINAR DE “IN VITRO HEALING ASSAY”

A seguir, apresentamos alguns aspectos da modelagem matemática relacionados ao experimento “In Vitro Healing Assay” já considerados durante a formulação do modelo para Tempo de Retardo proposto neste trabalho.

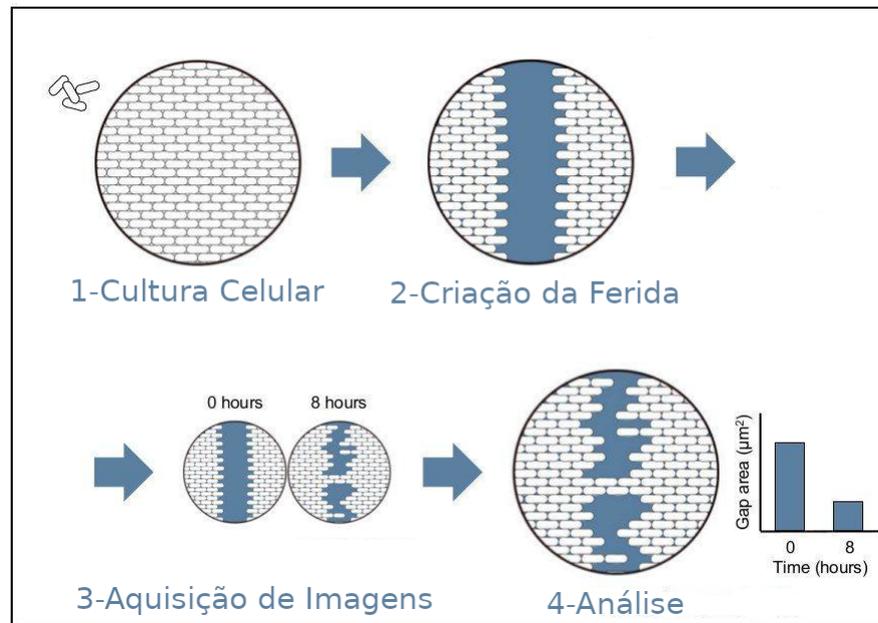
Esse tipo de experimento, de maneira simplificada, consiste em preparar uma cultura monocamada de células num ambiente propício, raspar uma faixa criando um corredor

¹Em tradução livre, Ensaio in Vitro de Cicatrização de Ferida.

²Em tradução livre, Ferida de Raspagem

livre de células (“ferida”), capturar imagens com o passar do tempo e analisar a invasão (“cicatrização”) da cultura sobre o espaço vago [11]. Uma representação desse processo está ilustrada na Figura 9.1.

Figura 9.1: Passos do experimento “In Vitro Healing Assay”.



Fonte: adaptado de [19].

Do ponto de vista matemático, o trabalho concentra-se sobre o último passo, isto é, a análise das imagens. Entretanto, nosso propósito é também simular a dinâmica ocorrida entre a aquisição de cada imagem.

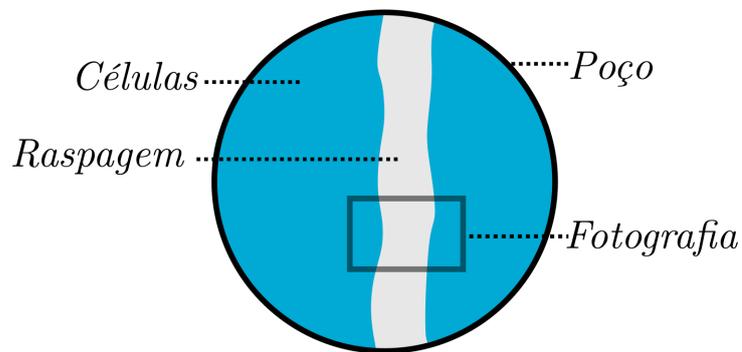
Esse tipo de experimento é usualmente conduzido num poço de formato circular, com apenas uma camada de células – isto é, não há células umas sobre as outras. Desta forma, é uma aproximação razoável assumir para o problema matemático um domínio circular bidimensional.

Entretanto, a análise feita por meio de imagens para fins biológicos pode não ser feita sobre todo o domínio, mas sim sobre uma parte delimitada pelo processo de fotografia. Uma vez definida uma área específica da imagem do poço, um programa de computador pode encontrar a mesma área nas fotos seguintes, auxiliando o pesquisador a manter sua análise num espaço confiavelmente delimitado.

Desta maneira, podemos trabalhar com dois domínios específicos: o próprio poço ou apenas a área da fotografia definida inicialmente pelo pesquisador. A Figura 9.2 ilustra esses domínios.

Note que, enquanto a borda do poço oferece uma barreira física para a passagem de células, a fotografia define uma fronteira imaginária num domínio muito maior. Desta maneira, uma condição de contorno do tipo Dirichlet não descreveria o comportamento dessa

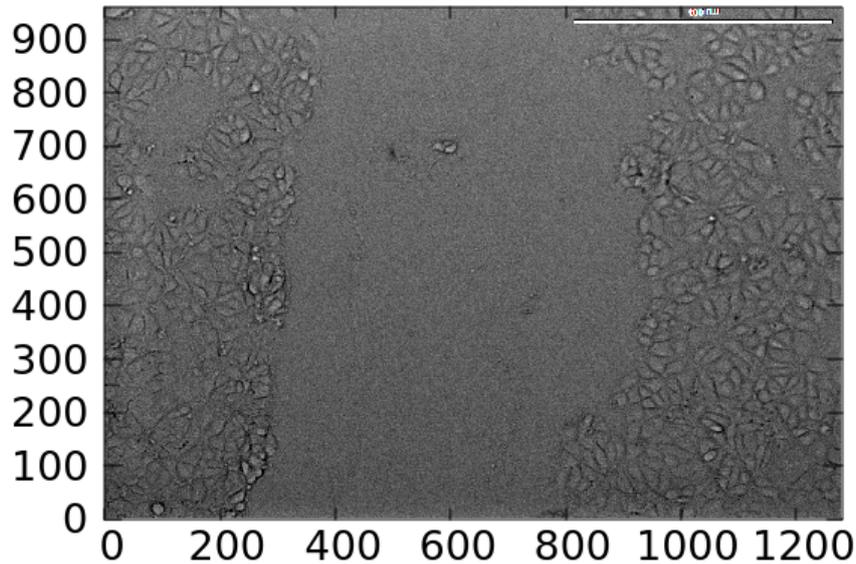
Figura 9.2: Domínios considerados para o experimento “In Vitro Healing Assay”.



Fonte: o Autor.

borda, tornando necessário o uso de outra condição de contorno para o modelo, que permitisse o fluxo celular pela fronteira, como condições de contorno do tipo Neumann ou Robin.

Figura 9.3: Exemplo de fotografia do experimento “In Vitro Healing Assay”.



Fonte: Luan Vitor Alves de Lima (2020).

Para a abordagem do problema envolvendo todo o poço, isso é, o domínio circular, o uso de coordenadas cartesianas, como feito neste trabalho, pode acarretar algumas dificuldades. Enquanto as coordenadas polares oferecem um sistema adequado para esse caso, o uso de coordenadas generalizadas nos permitiria obter uma modelagem comum para mais tipos de domínio, ao custo de um estudo matemático um pouco mais elaborado.

Por fim, uma vez que a raspagem das células para criação da ferida pode resultar num corte irregular, é necessária uma condição inicial para o problema que compreenda essa possibilidade. Neste trabalho, já modelamos uma condição inicial baseada em Splines Cúbicas Lineares sobre imagens, na seção 9.2.1, para as coordenadas euclidianas, e demonstramos sua discretização na seção 9.2.2.

Assim, dada essa aplicação, o modelo pode ser ampliado para novas condições matemáticas, mais próximas aos problemas reais.

9.2.1 Condição Inicial Tipo Spline

Para utilizar as informações provenientes de experimentos *in vitro*, os dados iniciais serão coletados pela análise de imagens obtidas por microscopia. A imagem é tratada como um conjunto de dados, sobre um domínio bidimensional de dimensões iguais às suas dimensões em pixels, como mostrado na Figura 9.4. Para obter as informações das posições nas quais seriam atribuídas densidades de partículas na condição inicial de nossa simulação, optamos por descrever o “contorno” das células por meio do uso de Spline Cúbica Parametrizada, conforme descrita em [5].

Figura 9.4: Imagem do microscópio.

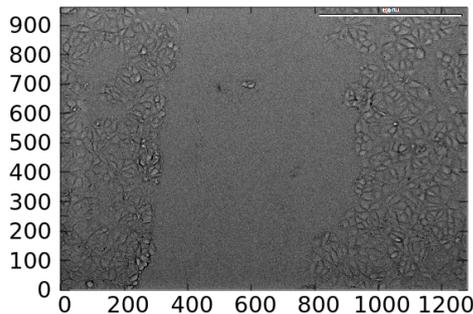
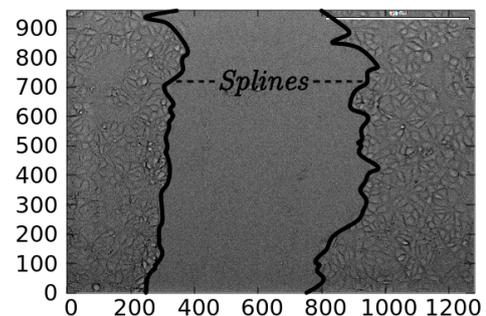


Figura 9.5: Spline sobre a imagem.



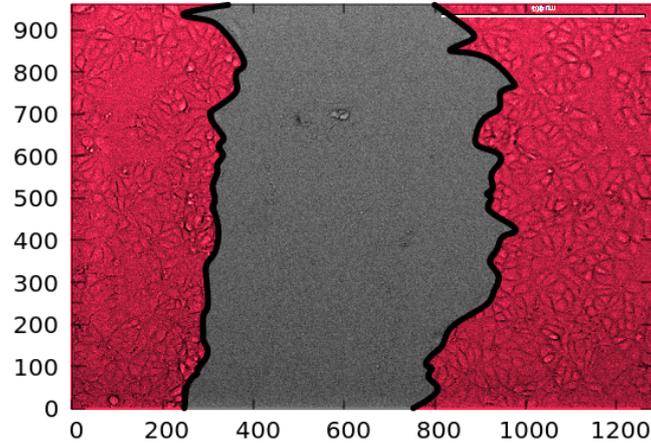
Fonte: Luan Vitor Alves de Lima (2020).

Fonte: o Autor.

A partir das splines, definimos a área do domínio que contém ou não células no momento inicial do experimento, como se observa marcado em vermelho na Imagem 9.6. Dessa maneira podemos alocar valores a cada ponto do domínio. Como o ponto de interesse do experimento é verificar a presença ou ausência de células em cada localidade, definimos a condição inicial como

$$S_I(x, y) = \begin{cases} 1 & \text{se } (x, y) \text{ estiver na área com células, ou} \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (9.1)$$

Figura 9.6: Área com células (pintada em vermelho).



Fonte: o Autor.

9.2.2 Discretização da Condição Inicial Tipo Spline

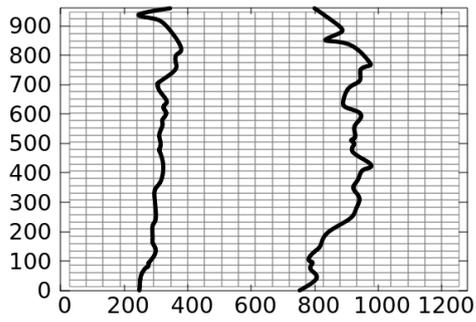
Uma vez discretizado o domínio e definido que os valores de S serão calculados no centro de cada célula computacional do domínio, podemos atribuir os valores iniciais conforme visto na seção 9.2.1.

As imagens captadas pelo microscópio, após tratadas, possuem 1280×960 pixels e são codificadas no formato rasterizado Tagged Image File Format (.tif). Para trabalhar com essas imagens, consideramos o domínio espacial de nossa simulação como $\Omega = [0, 1280] \times [0, 960]$, de forma a facilitar a obtenção de dados e a comparação dos resultados finais com outras imagens fornecidas. Além disso, consideramos que a imagem em si pode ser descrita numa malha computacional de dimensões Ω e espaçamento 1, de forma que cada pixel da imagem seja representado pelo interior de uma célula computacional.

Para definir o posicionamento das células computacionais em relação às splines, primeiramente sobrepomos as splines à nossa malha computacional, como na Figura 9.7, e calculamos a distância de cada célula até a spline mais próxima, processo representado na Figura 9.8.

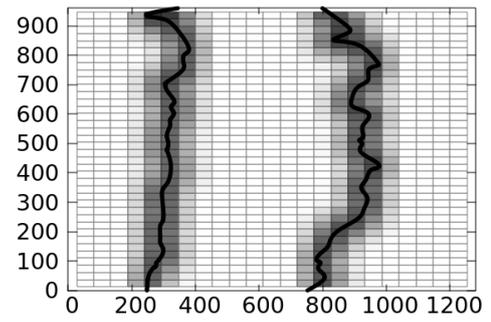
Essas distâncias são utilizadas para determinar o posicionamento da célula computacional em relação às splines. Assim, as células computacionais selecionadas nesse processo recebem o valor inicial $S = 1$, enquanto as outras recebem o valor $S = 0$, como ilustrado nas Figuras 9.9 e 9.10.

Figura 9.7: Spline sobre a malha.



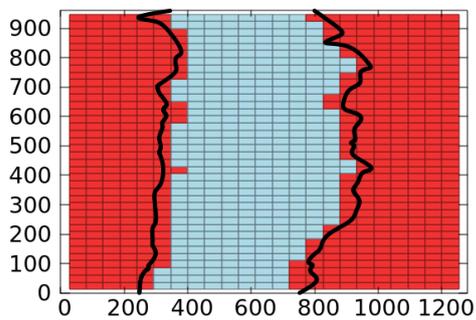
Fonte: o Autor.

Figura 9.8: Distâncias até a spline.



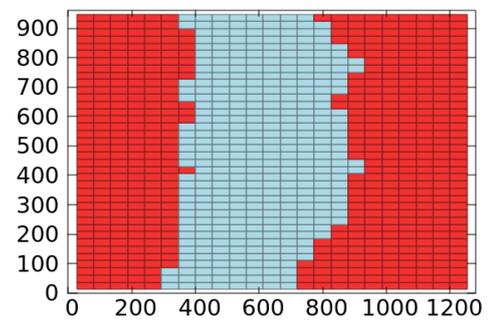
Fonte: o Autor.

Figura 9.9: Células selecionadas.



Fonte: o Autor.

Figura 9.10: Condição Inicial.



Fonte: o Autor.

A APÊNDICES

A.1 MODELOS DE CRESCIMENTO POPULACIONAL

Neste anexo, será apresentamos uma breve descrição da formulação das funções de crescimento utilizadas neste trabalho.

Esses modelos foram originalmente deduzidos para descrever o crescimento de populações humanas; entretanto, seu uso tornou-se comum em muitas áreas da biologia.

A.1.1 Modelo Exponencial

O modelo exponencial de crescimento populacional foi postulado por Thomas Robert Malthus, em seu artigo "An Essay on the Principle of Population"[17], em 1798. Nele, o autor nota, analisando dados históricos disponíveis, que a população, em situações em que não há ação de uma grande praga, guerra ou outro evento atípico, cresce como uma progressão geométrica, dobrando a cada 25 anos, enquanto a produção de alimentos cresce como uma progressão aritmética, indicando uma inevitável futura escassez de comida.

Em seu artigo, Malthus não apresenta seu modelo em formato matemático, porém descreve as ideias que levam à sua formulação, além de enumerar uma série de argumentos para provar sua validade. Entre suas análises, há um grande enfoque nas relações entre o número de nascimentos e mortes. Dessa maneira, o modelo baseia-se numa abordagem de reprodução *per capita* da população.

Colocando tais ideias de maneira matemática, conforme [3], assumiremos que uma população x pode ser descrita em relação ao tempo t por uma função $x(t)$, suave e derivável. Tomando um intervalo de tempo do momento t a $(t+h)$, o número de nascimentos na população deve ser bhx , sendo b uma constante representando a taxa *per capita* de nascimento. Além disso, no mesmo intervalo o número de mortes será μhx , com a constante μ representado a taxa *per capita* de mortalidade na população. Dessa maneira, se mantida a proporção entre as taxas *per capita* e a população $x(t)$, podemos dizer que a variação da população no período é dada por

$$x(t+h) - x(t) = (b - \mu)hx(t).$$

Dividindo por h , temos

$$\frac{x(t+h) - x(t)}{h} = (b - \mu)x(t).$$

Tomando, então, o limite quando $h \rightarrow 0$

$$\frac{dx}{dt} = (b - \mu)x(t),$$

lembrando que assumimos o caso em que $x(t)$ é diferenciável.

Denominando $r = (b - \mu)$ a taxa de crescimento, temos o modelo de Malthus em sua forma matemática:

$$\frac{dx}{dt} = rx(t).$$

Essa equação diferencial admite infinitas soluções da forma

$$x(t) = ke^{(rt)}.$$

Em problemas de valor inicial, dado um $x(0) = x_0$, obtemos uma solução única com $k = x_0$.

Vale notar que, observando a solução única $x(t) = x_0e^{(rt)}$, o parâmetro r determina se haverá crescimento ou decrescimento da população. Assim, $r > 0$, ou seja, $b > \mu$ implica crescimento, enquanto $r < 0$, isto é, $b < \mu$, implica decrescimento. Esse fato, de observação lógica no fenômeno biológico, ajuda a validar o modelo matemático.

Esse modelo de crescimento populacional é conhecido como "Modelo Exponencial" ou "Modelo Malthusiano". Devemos perceber, entretanto, que ele leva em consideração apenas a população estudada e suas taxas de reprodução e óbito, não levando em conta nenhum elemento externo, como, por exemplo, a disponibilidade de recursos que sustentem a vida. Assim, esse modelo é adequado apenas para situações em que os recursos são ilimitados (em relação ao total da população). Em casos biológicos, isso ocorre normalmente no início da disseminação da população num novo ambiente, em apenas um curto espaço de tempo [3].

A.1.2 Modelo Logístico

Proposto em 1838 pelo matemático belga Pierre François Verhulst, em seu artigo "Notice sur la loi que la population suit dans son accroissement"[24], o modelo logístico busca expandir o modelo exponencial proposto por Malthus para períodos de tempo maiores, nos quais os recursos passam a se tornar mais limitados e as populações mais aglomeradas. Nessa situação, Verhulst nota que a taxa de reprodução *per capita* da população tende a diminuir e a população tende a se estabilizar.

Tomando a mesma notação da seção anterior, a taxa de reprodução *per capita* da população é dada por $x'(t)/x(t)$. No caso do modelo exponencial, esse valor é constante, com $x'(t)/x(t) = r$. Pela proposta de Verhulst, essa taxa deveria diminuir a medida que a população crescesse. A solução mais simples para impor essa condição é assumir um decréscimo linear do tipo $ax(t)$, obtendo

$$\frac{x'(t)}{x(t)} = r - ax(t).$$

Assim, temos a seguinte equação diferencial para o modelo logístico:

$$x'(t) = x(t)(r - ax(t)).$$

Estudos posteriores convencionaram notar essa equação por

$$x'(t) = rx(t) \left(1 - \frac{x(t)}{K} \right),$$

com $K = r/a$. Para ter sentido biológico, é necessário que os parâmetros r e K sejam positivos. Nesse caso, temos que r é o crescimento intrínseco da população (a taxa de crescimento quando os recursos são abundantes o suficiente para serem desprezados da equação), enquanto K é a capacidade do ambiente (a população máxima que o este pode comportar) [3].

Para r , podemos notar que, enquanto $x(t) \approx 0$, temos $x'(t) \approx rx(t)$, mostrando que, quando a população é pequena o suficiente, ela cresce de maneira exponencial, com taxa de crescimento r .

Além disso, com $x(t) \approx K$, temos $x'(t) \approx 0$, ou seja, a população deixa de crescer à medida que se aproxima do valor K , justificando sua interpretação como capacidade do ambiente. Além disso, se $x > K$, temos $x'(t) < 0$, isto é, a população decresce até a capacidade do ambiente.

REFERÊNCIAS

- [1] ALHARBI, W., AND PETROVSKII, S. V. Critical domain problem for the reaction–telegraph equation model of population dynamics. *Mathematics* 6 (2018).
- [2] ALLEE, W. C., AND BOWEN, E. S. Studies in animal aggregations: Mass protection against colloidal silver among goldfishes. *Journal of Experimental Zoology* 61 (1938), 185–207.
- [3] BRAUER, F., AND CASTILLO-CHAVEZ, C. *Mathematical Models in Population Biology and Epidemiology*. Springer Science+Business Media, 2012, ch. 1, pp. 1–15.
- [4] BROWN, R. A brief account of microscopical observations made in the months of june, july and august 1827, on the particles contained in the pollen of plants; and on the general existence of active molecules in organic and inorganic bodies. *Philosophical Magazine Series 2* 4:21 (1828).
- [5] BURDEN, R. L., AND FAIRES, J. D. *Numerical Analysis*. Brooks/Coles, 2011, ch. 3, pp. 164–170.
- [6] CIRILO, E. R., PETROVSKII, S., ROMEIRO, N. M. L., AND NATTI, P. L. Investigation into the critical domain problem for the reaction-telegraph equation using advanced numerical algorithms. *International Journal of Applied and Computational Mathematics* 5 (2019).
- [7] FISHER, R. A. The wave of advance of advantageous genes. *Annals of Eugenics* 7 (1937).
- [8] GARABEDIAN, P. R. *Partial Differential Equations: Revised Edition*. Chelsea Pub Co, 1998.
- [9] GFORTTRAN TEAM. *Using GNU Fortran: For gcc version 5.1.0*. Free Software Foundation, 2015, ch. 9.72.
- [10] GOLDSTEIN, S. On diffusion by discontinuous movements, and on the telegraph equation. *Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics* 4 (1951).
- [11] GRADA, A., OTERO-VINAS, M., PRIETO-CASTRILLO, F., OBAGI, Z., AND FALANGA, V. Research techniques made simple: Analysis of collective cell migration using the wound healing assay. *Journal of Investigative Dermatology* 137 (2017).
- [12] HALLIDAY, D., AND RESNICK, R. *Fundamentals of physics, Volume 1*. John Wiley & Sons, 2014.

- [13] HOLMES, E. E. Are diffusion models too simple? a comparison with telegraph models of invasion. *The American Naturalist* 142 (1993), 779–795.
- [14] KAC, M. A stochastic model related to the telegraphers equation. *Rocky Mountain Journal of Mathematics* 4 (1974).
- [15] LEVEQUE, R. J. *Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations: Steady-State and Time-Dependent Problems*. Siam, 2007, ch. 9.
- [16] LEWIS, M. A., PETROVSKII, S., AND POTTS, J. R. *The Mathematics Behind Biological Invasions*. Springer, 2016, ch. 2.4.
- [17] MALTHUS, T. R. *The Mathematical Theory of Plasticity*. St. Paul’s Church-Yard, 1798.
- [18] OLIVEIRA, T. F. Modelagem matemática e análise numérica do tempo de retardo para equação telegráfica reativa difusiva. Ms thesis, State University of Londrina, 2020. In Portuguese.
- [19] REGNARD, G. Wound healing assay - what, why and how. CytoSMART Technologies B.V., 2020. <https://cytosmart.com/resources/wound-healing-assay-what-why-how>.
- [20] THOMAS, J. W. *Numerical Partial Differential Equations: Finite Difference Methods*. Springer, 1995, ch. 4.
- [21] TILLES, P. F. C., AND PETROVSKII, S. V. On the consistency of the reaction-telegraph process within finite domains. *Journal of Statistical Physics* volume 177 (2019), 569–587.
- [22] UPADHYAY, R. K., AND IYENGAR, S. R. K. *Spatial Dynamics and Pattern Formation in Biological Populations*. CRC Press, 2021, ch. 1.
- [23] VEDULA, S. R. K., RAVASIO, A., LIM, C. T., AND LADOUX, B. Collective cell migration: A mechanistic perspective. *Physiology* 28 (2013), 370–379.
- [24] VERHULST, P. F. Notice sur la loi que la population suit dans son accroissement. *Correspondance mathématique et physique* 10 (1838).
- [25] VICSEK, T., CZIRÓK, A., BEN-JACOB, E., COHEN, I., AND SHOCHET, O. Novel type of phase transition in a system of self-driven particles. *Physical Review Letters* 75 (1995), 1226–1229.
- [26] ZAUDERER, E. *Partial Differential Equations of Applied Mathematics. Second Edition*. Wiley Interscience, 1989, ch. 1.