



UNIVERSIDADE
ESTADUAL de LONDRINA

TALITA CARVALHO PESSOA

**EQUAÇÕES TELEGRÁFICA E DE BURGERS
APLICADAS À MODELAGEM DE INVASÃO BIOLÓGICA**

Londrina
2025

TALITA CARVALHO PESSOA

**EQUAÇÕES TELEGRÁFICA E DE BURGERS
APLICADAS À MODELAGEM DE INVASÃO BIOLÓGICA**

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
2025

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

P439E Pessoa, Talita Carvalho.
Equações Telegráfica e de Burgers Aplicadas à Modelagem de Invasão Biológica
Talita Carvalho Pessoa. – Londrina, 2025.
71 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, 2025.

Inclui Bibliografia.

1. Invasão Biológica - Tese. 2. Equação de Burgers e Telegráfica - Tese. 3. Resolução Numérica - Tese. 4. Modelagem Matemática - 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

TALITA CARVALHO PESSOA

EQUAÇÕES TELEGRÁFICA E DE BURGERS APLICADAS À MODELAGEM DE INVASÃO BIOLÓGICA

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. Marcelo Franco de Oliveira
Universidade Federal do Paraná

Prof. Dr. Paulo Laerte Natti
Universidade Estadual de Londrina

Londrina, 13 de junho de 2025.

AGRADECIMENTOS

A realização deste trabalho só foi possível graças ao apoio e à contribuição de muitas pessoas queridas e inspiradoras, às quais sou imensamente grata. Agradeço ao meu orientador, Eliandro, pela paciência e dedicação ao longo de todo o processo. Seu conhecimento, incentivo e confiança foram fundamentais para o desenvolvimento desta dissertação. Aos professores do PGMAC e aos membros da banca que avaliaram esse trabalho, meu sincero agradecimento pela dedicação e por todo o conhecimento compartilhado. À minha família, que me apoiou em tudo e foi meu porto seguro nos momentos difíceis, por todo amor incondicional e incentivo constante. Ao meu namorado, Felipe, que está ao meu lado em todos os momentos, agradeço por toda ajuda, pelo cuidado, pelo amor e pelas orações. Seu apoio foi muito importante nessa jornada. Aos meus amigos, Juliana e Gustavo, pelos conselhos e momentos de descontração nos períodos mais difíceis. Agradeço também ao PICME e à CAPES, pelo apoio financeiro concedido por meio da bolsa de estudos, que viabilizou a dedicação integral a esta pesquisa. A todos que, de alguma forma, contribuíram para que esta dissertação se tornasse realidade, meu muito obrigada.

PESSOA, Talita Carvalho. **Equações Telegráfica e de Burgers Aplicadas à Modelagem de Invasão Biológica**. 2025. 71. Dissertação (Mestrado em Matemática Aplicada e Computacional) – Universidade Estadual de Londrina, Londrina, 2025.

RESUMO

A equação diferencial telegráfica difusiva-reativa pode ser utilizada para descrever o processo de invasão biológica, pois modela a variação da densidade em uma região. O objetivo do presente trabalho é estudar a variação da densidade celular em um experimento chamado *ensaio de ranhura*, uma simulação *in vitro* de uma invasão biológica. Especificamente, modelamos os termos difusivos que estão presentes na equação telegráfica, utilizando a equação de Burgers. O modelo obtido do acoplamento parcial das duas equações possibilita o direcionamento da movimentação. Para testar o modelo, foi criado um código computacional em FORTRAN que resolve numericamente as duas equações. Assim, realizamos uma simulação utilizando condições iniciais similares às que se observam em um ensaio de ranhura.

Palavras-chave: Invasão Biológica. Equações Telegráfica e de Burgers. Resolução Numérica. Modelagem Matemática.

PESSOA, Talita Carvalho. **Telegraph and Burgers Equations Applied to modeling a Biological Invasion**. 2025. 71. Dissertação (Mestrado em Matemática Aplicada e Computacional) – Universidade Estadual de Londrina, Londrina, 2025.

ABSTRACT

The reaction-telegraph equation can be used to describe a biological invasion phenomenon, by modelling the density variation in a region. The main objective of this paper is to study the variation of cellular density in the wound healing assay, a biology experiment that, essentially, is a simulation *in vitro* of a biological invasion. Specifically, is presented a model of the diffusion coefficient, part of the reaction-telegraph equation, using the Burgers equation. The model obtained from the partial coupling of the two equations allows for the directionality of movement. To validate the model, a computational code was implemented in FORTRAN to numerically solve both equations. A numerical simulation was then carried out using initial conditions similar to those observed in a wound healing assay.

Keywords: Biological Invasion. Telegraph and Burgers Equation. Numerical Methods. Mathematical Modeling.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	12
2	INVASÃO BIOLÓGICA	14
2.1	ENSAIO DE RANHURA	14
3	MODELAGEM MATEMÁTICA DE UMA INVASÃO BIOLÓGICA	16
3.1	EQUAÇÃO TELEGRÁFICA	18
3.1.1	Condições de contorno	22
3.1.2	Condições iniciais	22
3.1.3	Tempo de Retardo	24
3.1.4	Termo fonte	25
3.2	MODELAGEM NUMÉRICA	25
3.2.1	Construção da Malha	26
3.2.2	Solução Numérica	28
3.3	MODELAGEM COMPUTACIONAL	30
3.4	RESULTADOS	32
4	MODELAGEM DA VELOCIDADE DE MOVIMENTO DOS INVASORES	38
4.1	EQUAÇÃO DE BURGERS	38
4.2	MODELAGEM NUMÉRICA	39
4.3	MODELAGEM COMPUTACIONAL	43
4.4	VALIDAÇÃO	44
4.5	RESULTADOS	50
4.5.1	Acoplamento parcial das equações Telegráfica e de Burgers	50
4.5.2	Simulação de um ensaio de ranhura	64
5	CONSIDERAÇÕES FINAIS	69
	REFERÊNCIAS	70

LISTA DE FIGURAS

2.1	Ensaio de ranhura	14
3.1	Movimentação das partículas	16
3.2	Movimentação das partículas no tempo t	17
3.3	Movimentação das partículas no tempo $t + \epsilon$	17
3.4	Termo fonte	18
3.5	Condição inicial do tipo pulso	23
3.6	Condição inicial do tipo domínio cheio	23
3.7	Condições iniciais ajustadas por <i>spline</i>	24
3.8	Malha aplicada no domínio original	26
3.9	Malha deslocada com pontos centrais	27
3.10	Notação dos pontos da malha	27
3.11	Fluxograma da implementação da solução numérica da equação telegráfica . .	31
3.12	Soluções da equação telegráfica para $D_x = D_y = 1.00$	33
3.13	Soluções da equação telegráfica para $\tau = 0.01$	34
3.14	População e ocupação para $D = 1.00$, $D = 0.50$ e $D = 0.25$	35
3.15	Valor da densidade separado por termos para $D = 0.25$	36
3.16	Valor da densidade separado por termos para $D = 1.0$	36
3.17	Densidade para $t = 0$, $t = 1$, $t = 2$ e $t = 3$	37
4.1	Elementos de uma célula	38
4.2	Fluxograma da implementação da solução numérica da equação de Burgers . .	44
4.3	Soluções para γ_x no tempo $t = 1$	46
4.4	Mapa de erros relativos para γ_x (figura da esquerda) e γ_y (figura da direita) . .	47
4.5	Recorte da solução para γ_x (figura da esquerda) e γ_y (figura da direita).	47
4.6	Erro relativo entre a solução numérica e analítica	48
4.7	Erros em relação a malha	49
4.8	Fluxograma da implementação da equação telegráfica com γ_x e γ_y variável. . .	50
4.9	Solução numérica de γ_x e γ_y variáveis	52
4.10	Densidade com γ_x e γ_y variável	53
4.11	Densidade com γ_x e γ_y constante.	54
4.12	Solução para γ_x com $\gamma_y = 0$	55
4.13	Solução para densidade com $\gamma_y = 0$	56
4.14	Solução para γ_y com $\gamma_x = 0$	57
4.15	Solução para densidade com $\gamma_x = 0$	58

4.16	Solução para γ_x e γ_y com condição inicial fragmentada.	59
4.17	Densidade com γ_x e γ_y variável e condições iniciais fragmentadas.	60
4.18	Densidade com γ_x e γ_y variável e $\nu = 0.01$	61
4.19	Densidade com γ_x e γ_y variável e $\nu = 0.1$	62
4.20	Solução para a velocidade com condição iniciais variável	63
4.21	Densidade com condição inicial variável	64
4.22	Condição inicial γ_X com domínio do tipo <i>spline</i>	65
4.23	Densidade com domínio do tipo <i>spline</i> e $\nu = 0.001$	67
4.24	Densidade com domínio do tipo <i>spline</i> e $\nu = 4$	68

LISTA DE TABELAS

3.1	Parâmetros utilizados	32
4.1	Condições iniciais da simulação do ensaio de ranhura	65
4.2	Parâmetros da simulação do ensaio de ranhura	66

1 INTRODUÇÃO

A matemática fornece ferramentas para entender o mundo. Desta forma, modelos matemáticos são simplificações de situações complexas e podem ser entendidos como caricaturas da realidade. Tais modelos são obtidos ao reconhecer as interações entre os elementos que fazem parte do processo que queremos descrever. O resultado é uma simulação, que apesar de não ser idêntica à realidade, é suficiente para sustentar avanços tecnológicos utilizados diariamente. Para ampliar ainda mais as possibilidades, é fundamental que o modelo continue sendo aprimorado. Uma das formas de realizar essa tarefa é expandindo nosso conhecimento sobre esses elementos, denominados parâmetros, para representá-los de modo mais detalhado e preciso [20].

Este trabalho busca investigar uma forma de aprimorar um modelo matemático já existente, que utiliza a equação telegráfica para descrever um processo de invasão biológica [6]. O aprimoramento diz respeito aos termos γ_x e γ_y da equação telegráfica, que representam a velocidade de movimentação de invasores. Esses termos são constantes no modelo que utilizamos como ponto de partida, mas queremos representá-los de modo que variem com o passar do tempo. Para isto, utilizaremos a equação de Burgers, que já foi utilizada para esse propósito em outros trabalhos [4].

As equações diferenciais parciais telegráficas se referem a uma categoria de equações amplamente utilizadas para descrever ondas, logo, aparecem frequentemente ao se estudar eletricidade, mecânica dos fluidos, telecomunicações e diversas outras áreas [3]. Modelos similares também pode ser utilizados em outras situações em que ocorre algum transporte aparentemente aleatório, como é o caso das invasões biológicas [22].

O processo de invasão biológica se refere ao movimento de migração e de crescimento de organismos em uma região específica. São exemplos desse fenômeno a propagação de doenças, a invasão de habitats naturais por espécies exóticas, a migração celular, entre outros [13]. Para modelar esse processo, utilizamos derivadas que indicam a variação da densidade populacional em uma região específica.

A equação reativa-difusiva, também conhecida como modelo Turing, seria uma opção mais simples para esse caso, sendo amplamente utilizada em fenômenos biológicos como a difusão de doenças e a formação de padrões na pelagem de animais [12]. No entanto, esse modelo assume que a movimentação é completamente aleatória, o que não condiz com observações de invasões biológicas, onde há uma tendência maior do invasor seguir em uma direção específica. A equação reativa telegráfica é uma alternativa que trata deste problema, pois é acrescentado um termo de atraso ou retardo, que modela a persistência do movimento dos invasores [1]. Além do termo de atraso, também há um termo fonte, uma função que determina a dinâmica populacional, acrescentando taxas de nascimento e morte ao modelo.

A equação de Burgers expressa a variação da velocidade em relação ao espaço

e ao tempo. Ela possui as características principais de Navier-Stokes, mantendo o coeficiente de viscosidade ν e os termos convectivos não-lineares, mas excluindo os termos de pressão. A viscosidade influencia na difusão e dissipação da velocidade. Quando seu valor é suficientemente grande, as velocidades positivas tendem a ser difundidas para regiões onde a velocidade é menor, criando um efeito de suavização na solução. Já os termos convectivos são responsáveis pela transferência da energia, ou velocidade, no espaço. Isto é, para $\nu = 0$, a velocidade é transportada sem nenhuma perda [17]. Assim como a equação telegráfica, a equação de Burgers também consegue representar características de ondas [11]. Portanto, também podemos utilizá-la no estudo de invasões biológicas.

Como mencionado anteriormente, o objetivo principal deste trabalho é modelar os termos que representam a velocidade de movimento em uma invasão biológica, utilizando a equação de Burgers. A abordagem será voltada para a obtenção de uma solução numérica e a implementação computacional. Para isso, obteremos uma discretização da equação utilizando diferenças finitas, com o método *First Order Upwind* (FOU) para resolver os termos não lineares. Após, a solução numérica será implementada em FORTRAN e validaremos os resultados comparando com a solução analítica. Por fim, vamos integrar a solução numérica da equação de Burgers com a simulação, já existente, do modelo de invasão biológica com a equação telegráfica.

Esta dissertação se inicia com uma breve apresentação sobre invasões biológicas e do problema que serviu de motivação para o estudo: o ensaio de ranhura. O segundo capítulo se trata de uma apresentação da modelagem da invasão biológica utilizando a equação telegráfica, que é o ponto de partida para este estudo. Se inicia com a apresentação da dedução e caracterização da equação telegráfica, também contém a modelagem do tempo de retardo. Após, está a modelagem numérica, a implementação computacional e os resultados. O terceiro capítulo contém a modelagem da velocidade, como proposta nos objetivos. Contém uma breve apresentação da equação de Burgers, sua solução numérica, implementação computacional e validação as soluções. Por fim, na seção de resultados, a modelagem das velocidades é finalmente implementada junto à equação telegráfica. Por fim, serão realizados testes com diferentes parâmetros e condições iniciais.

2 INVASÃO BIOLÓGICA

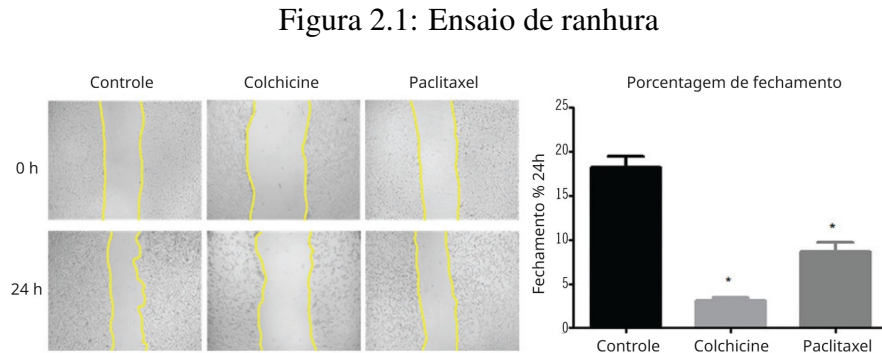
2.1 ENSAIO DE RANHURA

O ensaio de ranhura é um teste realizado quando se deseja mensurar o processo de migração de células, ou seja, como ocorre a ocupação de um espaço vazio por uma cultura de células. Uma de suas aplicações é comparar o efeito de alguma substância no crescimento das células, comparando com controles. Pode ser utilizado, por exemplo, para medir a eficácia de medicamentos ao aplicar as substâncias em ensaios que utilizam células cancerígenas [2]. A metodologia do ensaio consiste em desenvolver a cultura de células em placas de Petri que serão incubadas por 24 horas. A seguir, as culturas passam pelo processo de raspagem, onde uma parte das células é retirada utilizando uma micropipeta, gerando um espaço vazio denominado ferida. Imediatamente após a raspagem, a placa é fotografada com o auxílio de um microscópio e retorna para a incubação. Assim, as células continuam a migrar e, eventualmente, voltam a ocupar todo o espaço da ferida. Para acompanhar o desenvolvimento desse processo, são retiradas novas fotografias em intervalos de tempo pré-determinados [10]. A área ocupada por células em cada fotografia é obtida com auxílio de softwares, esta informação é utilizada para calcular a porcentagem de fechamento da ferida no momento t , dado por

$$O(t) = \left[1 - \frac{A(t)}{A(0)} \right] \times 100 \quad (2.1)$$

onde $A(t)$ é a área ocupada por células, tal que $t = 0$ representa o momento que foi realizada a fotografia, logo após a raspagem.

A figura 2.1 ilustra desse processo, as fotografias que estão na primeira linha são as que foram tiradas no tempo 0 e as que estão na segunda linha foram tiradas após 24 horas. Além disso, cada coluna representa uma substância diferente aplicada na cultura. O gráfico ao lado apresenta a porcentagem de fechamento para cada método, obtida por meio da equação (2.1).



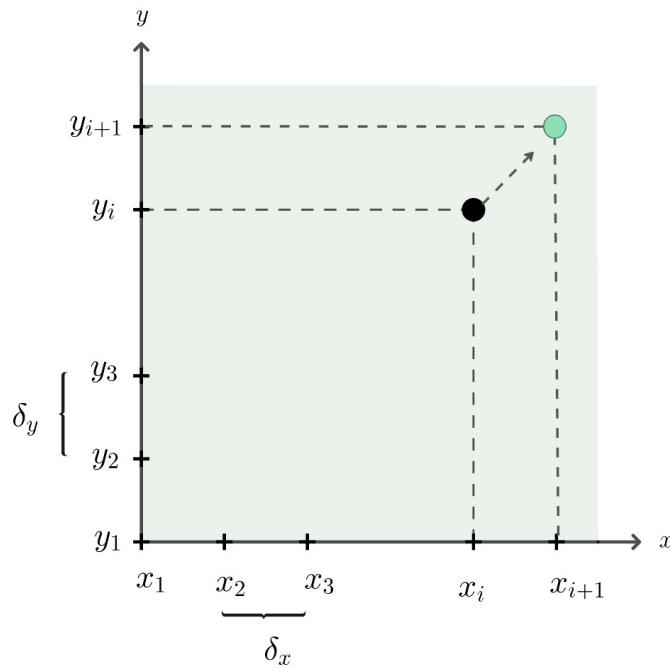
Fonte: Adaptado de Vitor Almeida [2].

Considere uma malha que seja equivalente aos pixels da imagem, a representação matemática do problema consiste em dizer quais pontos da malha contém uma célula e quais estão vazios. Para definir a condição inicial, traçamos a fronteira da ferida ao invés de observar cada pixel separadamente [6]. Assim, aqueles que estão entre as fronteiras são vazios e o restante contém células. Como as bordas da ferida são irregulares, um método como *Spline* Cúbica Parametrizada precisa ser aplicado para obter uma aproximação do formato da borda.

3 MODELAGEM MATEMÁTICA DE UMA INVASÃO BIOLÓGICA

Ao se mover pelo espaço, partículas colidem uma com as outras, alterando seu trajeto e gerando uma movimentação aleatória, chamada de movimento Browniano [23]. Para modelar esse processo, consideramos um plano de duas dimensões, onde uma partícula está se movimentando. Decompomos seu trajeto em dois componentes, onde δ_x indica a distância na direção do eixo x e δ_y a distância na direção do eixo y . Na figura 3.1, o ponto preto representa a posição de partícula no tempo t , enquanto o ponto mais claro representa a posição no tempo $t + \epsilon$, após uma movimentação.

Figura 3.1: Movimentação das partículas

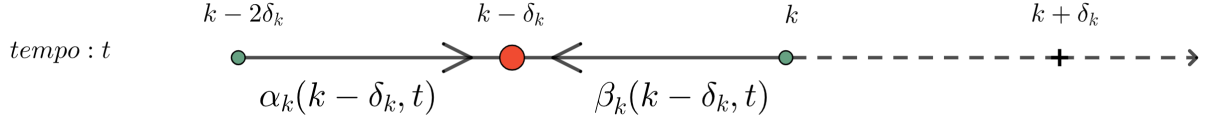


Fonte: o autor.

O movimento em cada um dos componentes é analisado separadamente, mas simplificamos a notação considerando apenas um eixo k tal que $k = x$ ou $k = y$. Assim, dizemos que para a partícula se deslocar uma distância δ_k na direção k , leva um tempo ϵ e representa um passo. A cada um desses passos, existe a probabilidade p de que a partícula não irá colidir com outra, logo o próximo movimento terá o mesmo sentido que o movimento anterior. Por outro lado, existe uma probabilidade q de que irá colidir, causando que no próximo passo o sentido do movimento seja inverso. Seja λ a taxa de inversão no eixo k , definimos $p = 1 - \lambda\epsilon$ e $q = \lambda\epsilon$. Com essas informações, podemos descrever a posição provável da partícula em um determinado tempo [23].

Seja $\alpha_k(k, t)$ uma função que descreve a quantidade de partículas que, partindo de uma posição $(k - \delta_k)$ chegam na posição k , levando um tempo t para realizar este movimento. De modo similar, $\beta_k(k, t)$ descreve a quantidade de partículas que partem da posição $k + \delta_k$ e chegam na posição k em um tempo t . Adaptando essa definição, descrevemos todas as partículas que no tempo t chegam no ponto $k - \delta_k$, indicado em vermelho na imagem 3.2. Em $t + \epsilon$, o próximo passo de tempo, parte das partículas colidem e invertem seu movimento e

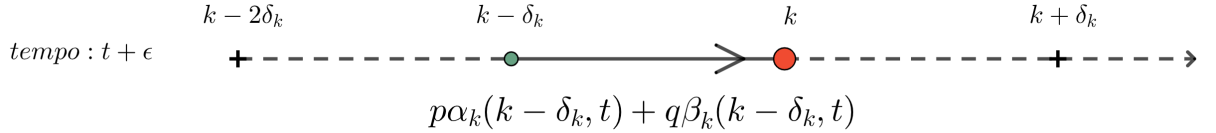
Figura 3.2: Movimentação das partículas no tempo t



Fonte: o autor.

outras seguem no mesmo sentido. Na imagem 3.3 indicamos apenas aquelas que chegam até o ponto k em vermelho. Assim, obtemos a equação (3.1)

Figura 3.3: Movimentação das partículas no tempo $t + \epsilon$



Fonte: o autor.

$$\alpha_k(k, t + \epsilon) = p\alpha_k(k - \delta_k, t) + q\beta_k(k - \delta_k, t) \quad (3.1)$$

que representa apenas a quantidade de partículas que chegam em k pelo lado esquerdo. Realizamos um processo equivalente para obter (3.2)

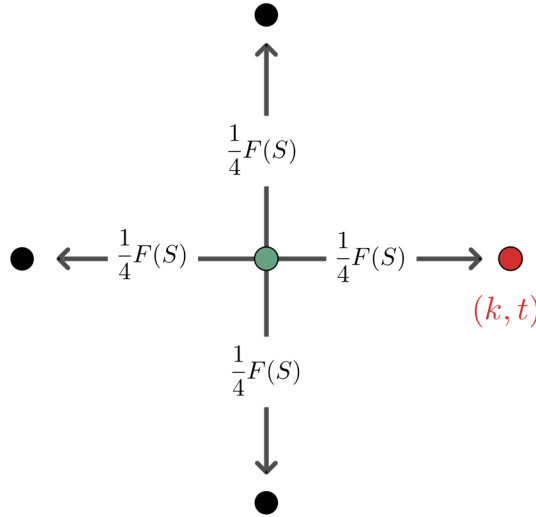
$$\beta_k(k, t + \epsilon) = p\alpha_k(k + \delta_k, t) + q\beta_k(k + \delta_k, t) \quad (3.2)$$

que é a quantidade de partículas que chegam em k pelo lado direito.

Além da movimentação, também há um aumento da quantidade de partículas pela reprodução natural, que indicamos por F . Como consideramos um modelo do plano de duas dimensões, as novas partículas produzidas são distribuídas entre os quatro pontos ao redor.

Assim, o ponto (k, t) recebe apenas um quarto da quantidade total, como é representado na imagem 3.4. No momento, não é necessário definir detalhes sobre F , apenas que é uma função que depende da densidade S . Futuramente, será definida utilizando algum modelo populacional.

Figura 3.4: Termo fonte



Fonte: o autor.

Portanto, as equações (3.3) e (3.4)

$$\alpha_k(k, t + \epsilon) = p\alpha_k(k - \delta_k, t) + q\beta_k(k - \delta_k, t) + \frac{1}{4}\epsilon F(S(k - \delta_k, t)) \quad (3.3)$$

$$\beta_k(k, t + \epsilon) = p\alpha_k(k + \delta_k, t) + q\beta_k(k + \delta_k, t) + \frac{1}{4}\epsilon F(S(k + \delta_k, t)) \quad (3.4)$$

são o modelo completo da quantidade de partículas que estão no ponto k no tempo $t + \epsilon$. Apesar de utilizarmos o termo "partícula" durante essa explicação, as mesmas equações também representam as movimentações de um invasor [23]. Assim, são utilizadas para obter um modelo de invasão biológica.

3.1 EQUAÇÃO TELEGRÁFICA

A equação telegráfica pode ser obtida a partir das equações α_k e β_k , realizando o processo que é apresentado a seguir. Expandimos as equações (3.3) e (3.4) utilizando a série de Taylor com relação a t no lado esquerdo da igualdade e em relação a k no lado direito. Assim, dada a equação

$$\alpha_k(k, t + \epsilon) = p\alpha_k(k - \delta_k, t) + q\beta_k(k - \delta_k, t) + \frac{1}{4}\epsilon(F(S(k - \delta_k, t))), \quad (3.5)$$

temos que

$$\begin{aligned}
 & \alpha_k(k, t) + \epsilon \frac{\partial \alpha_k(k, t)}{\partial t} + E_2^\alpha(0, \epsilon) \\
 = & p \left[\alpha_k(k, t) - \delta_k \frac{\partial \alpha_k(k, t)}{\partial k} + E_2^\alpha(\delta_k, 0) \right] + q \left[\beta_k(k, t) - \delta_k \frac{\partial \beta_k(k, t)}{\partial k} + E_2^\beta(\delta_k, 0) \right] \\
 & + \frac{1}{4} \epsilon \left[F(S(k, t)) - \delta_k \frac{\partial F(S(k, t))}{\partial k} + E_2^F(\delta_k, 0) \right] \quad (3.6)
 \end{aligned}$$

é a aproximação pela Série de Taylor. Substituímos $p = 1 - \lambda\epsilon$ e $q = \lambda\epsilon$, em seguida, subtraímos α_k da equação e dividimos por ϵ . Além disso, alteraremos a notação de algumas variáveis

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \frac{1}{\epsilon} E_2^\alpha(\epsilon) = & -\frac{\delta_k}{\epsilon} \frac{\partial \alpha_k}{\partial k} + \frac{1}{\epsilon} E_2^\alpha(\delta_k) - \lambda \alpha_k + \lambda \delta_k \frac{\partial \alpha_k}{\partial k} - \lambda E_2^\alpha(\delta_k) + \\
 & \lambda \beta_k - \delta_k \lambda \frac{\partial \beta_k}{\partial k} + \lambda E_2^\beta(\delta_k) + \frac{1}{4} \left[F(S) - \delta_k \frac{\partial F(s)}{\partial k} + E_2^F(\delta_k) \right] \quad (3.7)
 \end{aligned}$$

obtendo uma equação na forma dada. Para o modelo estar mais próximo do fenômeno que está simulando, precisamos considerar valores muito pequenos. Note que δ_k se refere a distância percorrida por uma partícula em cada intervalo de tempo ϵ . Assim, se $\epsilon \rightarrow 0$ e $\delta_k \rightarrow 0$ então a divisão

$$\gamma_k = \lim_{\delta_k, \epsilon \rightarrow 0} \frac{\delta_k}{\epsilon} \quad (3.8)$$

corresponde a velocidade instantânea. Logo aplicamos o limite $\delta_k, \epsilon \rightarrow 0$ na equação anterior

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \frac{1}{\epsilon} \underbrace{E_2^\alpha(\epsilon)}_{\rightarrow 0} = & \underbrace{-\frac{\delta_k}{\epsilon} \frac{\partial \alpha_k}{\partial k}}_{\rightarrow -\gamma_k} + \frac{1}{\epsilon} \underbrace{E_2^\alpha(\delta_k)}_{\rightarrow 0} - \lambda \alpha_k + \underbrace{\lambda \delta_k \frac{\partial \alpha_k}{\partial k}}_{\rightarrow 0} - \underbrace{\lambda E_2^\alpha(\delta_k)}_{\rightarrow 0} + \\
 & \underbrace{\lambda \beta_k - \lambda \delta_k \frac{\partial \beta_k}{\partial k}}_{\rightarrow 0} + \underbrace{\lambda E_2^\beta(\delta_k)}_{\rightarrow 0} + \frac{1}{4} \left[F(S) - \underbrace{\delta_k \frac{\partial F(s)}{\partial k}}_{\rightarrow 0} + \underbrace{E_2^F(\delta_k)}_{\rightarrow 0} \right], \quad (3.9)
 \end{aligned}$$

obtendo

$$\frac{\partial \alpha_k}{\partial t} = -\gamma_k \frac{\partial \alpha_k}{\partial k} - \lambda \alpha_k + \lambda \beta_k + \frac{1}{4} F(S) \quad (3.10)$$

como uma aproximação da equação (3.3). Realizamos o mesmo procedimento para a equação (3.4),

$$\begin{cases} \frac{\partial \alpha_k}{\partial t} = -\gamma_k \frac{\partial \alpha_k}{\partial k} - \lambda \alpha_k + \lambda \beta_k + \frac{1}{4} F(S) \\ \frac{\partial \beta_k}{\partial t} = \gamma_k \frac{\partial \beta_k}{\partial k} + \lambda \alpha_k - \lambda \beta_k + \frac{1}{4} F(S) \end{cases} \quad (3.11)$$

obtendo as duas equações (3.11).

Em seguida, queremos obter uma única equação a partir de (3.11). A nova equação será dependente da densidade que, para uma dimensão, é definida como $S_k = \alpha_k + \beta_k$. Efetivamente, a variável da equação telegráfica será a densidade total, que recebe os valores dos dois eixos $S = S_x + S_y$, assim, conforme a definição inicial das funções α e β , a densidade S é a quantidade de invasores que estão em um ponto (x, y) . Somando as equações (3.11)

$$\frac{\partial(\alpha_k + \beta_k)}{\partial t} + \gamma_k \frac{\partial(\alpha_k - \beta_k)}{\partial k} = \frac{1}{2} F(S) \quad (3.12)$$

e derivando em relação a t , obtemos

$$\frac{\partial^2(\alpha_k + \beta_k)}{\partial t^2} + \gamma_k \frac{\partial^2(\alpha_k - \beta_k)}{\partial k \partial t} = \frac{1}{2} \frac{\partial F(S)}{\partial t}. \quad (3.13)$$

Agora subtraindo as mesmas equações (3.11), obtemos

$$\frac{\partial(\alpha_k - \beta_k)}{\partial t} + \gamma_k \frac{\partial(\beta_k + \alpha_k)}{\partial k} = -2\lambda(\alpha_k - \beta_k), \quad (3.14)$$

que multiplicamos por γ_k e derivamos em relação a k

$$\gamma_k \frac{\partial^2(\alpha_k - \beta_k)}{\partial t \partial k} + \gamma_k^2 \frac{\partial^2(\beta_k + \alpha_k)}{\partial k^2} = -2\gamma_k \lambda \frac{\partial(\alpha_k - \beta_k)}{\partial k}. \quad (3.15)$$

Agora, desejamos transformar o termo $\alpha_k - \beta_k$ em uma expressão condizente com a definição de densidade, Para isto, alteramos a equação (3.12) para

$$\gamma_k \frac{\partial(\alpha_k - \beta_k)}{\partial k} = \frac{1}{2} F(S) - \frac{\partial(\alpha_k + \beta_k)}{\partial t}, \quad (3.16)$$

que substituímos no lado direito da equação (3.15)

$$\gamma_k \frac{\partial^2(\alpha_k - \beta_k)}{\partial t \partial k} + \gamma_k^2 \frac{\partial^2(\alpha_k + \beta_k)}{\partial k^2} = -\lambda F(S) + 2\lambda \frac{\partial(\alpha_k + \beta_k)}{\partial t}. \quad (3.17)$$

Subtraindo (3.13) da equação (3.17), obtemos

$$\gamma_k \frac{\partial^2(\alpha_k - \beta_k)}{\partial t \partial k} + \gamma_k^2 \frac{\partial^2(\alpha_k + \beta_k)}{\partial k^2} - \frac{\partial^2(\alpha_k + \beta_k)}{\partial t^2} - \gamma_k \frac{\partial^2(\alpha_k - \beta_k)}{\partial k \partial t} = \quad (3.18)$$

$$-\lambda F(S) + 2\lambda \frac{\partial(\alpha_k + \beta_k)}{\partial t} - \frac{1}{2} \frac{\partial F(S)}{\partial t}, \quad (3.19)$$

que reorganizamos, simplificando e separando as derivadas em relação a t e a k

$$\frac{\partial^2(\alpha_k + \beta_k)}{\partial t^2} + 2\lambda \frac{\partial(\alpha_k + \beta_k)}{\partial t} - \frac{1}{2} \frac{\partial F(S)}{\partial t} = \gamma_k^2 \frac{\partial^2(\alpha_k + \beta_k)}{\partial k^2} + \lambda F(S). \quad (3.20)$$

Enfim, substituímos $S_k = \alpha_k + \beta_k$

$$\frac{\partial^2 S_k}{\partial t^2} + 2\lambda \frac{\partial S_k}{\partial t} - \frac{1}{2} \frac{\partial F(S)}{\partial t} = \gamma_k^2 \frac{\partial^2 S_k}{\partial k^2} + \lambda F(S), \quad (3.21)$$

eliminando finalmente as variáveis α_k e β_k . Sabemos que a variável k é uma generalização de x e y , que são componentes de uma coordenada do espaço bidimensional, logo existe uma expressão para cada componente:

- para $k = x$

$$\frac{\partial^2 S_x}{\partial t^2} + 2\lambda \frac{\partial S_x}{\partial t} - \frac{1}{2} \frac{\partial F(S)}{\partial t} = \gamma_x^2 \frac{\partial^2 S_x}{\partial x^2} + \lambda F(S); \quad (3.22)$$

- para $k = y$

$$\frac{\partial^2 S_y}{\partial t^2} + 2\lambda \frac{\partial S_y}{\partial t} - \frac{1}{2} \frac{\partial F(S)}{\partial t} = \gamma_y^2 \frac{\partial^2 S_y}{\partial y^2} + \lambda F(S). \quad (3.23)$$

A densidade total depende das duas equações (3.22) e (3.23), que somadas formam

$$\frac{\partial^2 (S_x + S_y)}{\partial t^2} + 2\lambda \frac{\partial (S_x + S_y)}{\partial t} - \frac{\partial F(S)}{\partial t} = \gamma_x^2 \frac{\partial^2 S_x}{\partial x^2} + \gamma_y^2 \frac{\partial^2 S_y}{\partial y^2} + 2\lambda F(S). \quad (3.24)$$

Note que podemos reescrever as derivadas da densidade, considerando que

$$\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 (S_x + S_y)}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 S_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 S_y}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 S_x}{\partial x^2}. \quad (3.25)$$

De modo análogo,

$$\frac{\partial^2 S}{\partial y^2} = \frac{\partial^2 S_y}{\partial y^2}. \quad (3.26)$$

Consideramos ainda que $S = S_x + S_y$, assim

$$\frac{\partial^2 S}{\partial t^2} + 2\lambda \frac{\partial S}{\partial t} - \frac{\partial F(S)}{\partial t} = \gamma_x^2 \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + \gamma_y^2 \frac{\partial^2 S}{\partial y^2} + 2\lambda F(S) \quad (3.27)$$

é o resultado da equação (3.24) após essas mudanças de notação. Para as derivadas do termo fonte utilizamos a regra da cadeia,

$$\frac{\partial F(S)}{\partial t} = \frac{dF(S)}{dS} \frac{\partial S}{\partial t}. \quad (3.28)$$

Dividindo a equação (3.27) por 2λ , temos que

$$\frac{1}{2\lambda} \frac{\partial^2 S}{\partial t^2} + \frac{\partial S}{\partial t} \left(1 - \frac{1}{2\lambda} \frac{dF(S)}{dS} \right) = \frac{\gamma_x^2}{2\lambda} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + \frac{\gamma_y^2}{2\lambda} \frac{\partial^2 S}{\partial y^2} + F(S), \quad (3.29)$$

também renomeamos alguns termos que futuramente serão importantes para a compreensão da equação. Por fim, a equação telegráfica é

$$\tau \frac{\partial^2 S}{\partial t^2} + \frac{\partial S}{\partial t} \left[1 - \tau \frac{dF(S)}{dS} \right] = D_x \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 S}{\partial y^2} + F(S), \quad (3.30)$$

tal que $\tau = \frac{1}{2\lambda}$ é chamado tempo de retardo e $D_x = \frac{\gamma_x^2}{2\lambda}$ e $D_y = \frac{\gamma_y^2}{2\lambda}$ são os coeficientes difusivos, ambos serão apresentados com mais detalhes posteriormente.

3.1.1 Condições de contorno

Problemas que incluem equações diferenciais parciais de segunda ordem são acompanhados de condições de contorno (que define o comportamento da função na fronteira do domínio) e duas condições iniciais (que é o estado da função no tempo inicial). Para problemas como o ensaio de ranhura, consideraremos uma condição de contorno do tipo Dirichlet e condição inicial com *splines*. No entanto, outros exemplos serão utilizados para testar a solução numérica. A condição de contorno do tipo Dirichlet representa situações onde há uma barreira fixa entre o interior e exterior do domínio. No ensaio de ranhura, por exemplo, as células estão contidas em uma placa de Petri, há uma barreira que impede a movimentação para fora do compartimento. Ela é definida por

$$\begin{aligned} S(x_1, y, t) &= 0 & S(x_{ni}, y, t) &= 0 \\ S(x, y_1, t) &= 0 & S(x, y_{mj}, t) &= 0 \end{aligned}$$

para $x \in [x_1, x_{ni}]$ e $y \in [y_1, y_{mj}]$. Este tipo de contorno é matematicamente simples, facilitando a análise da equação e obtenção da solução numérica [1].

3.1.2 Condições iniciais

As condições iniciais se referem ao valor da função no tempo inicial $t = 0$. Para equações diferenciais com derivadas de segunda ordem no tempo, como a equação telegráfica, também é necessária uma condição inicial para a derivada primeira. Definimos como

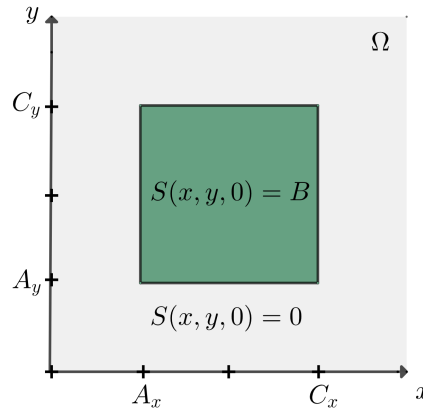
$$\frac{\partial S(x, y, 0)}{\partial t} = 0 \quad (3.31)$$

para $(x, y) \in \Omega$ tal que Ω é o domínio da função. No contexto de uma invasão biológica, interpretamos que, no estado inicial, os invasores estavam em repouso.

Neste trabalho, serão utilizadas três tipos de condições iniciais, que definem como o valor da função densidade está distribuído em diferentes regiões do domínio. São eles:

- **tipo Pulso:** são situações onde todos os elementos estão concentrados em uma região específica, como no exemplo da figura 3.5.

Figura 3.5: Condição inicial do tipo pulso



Fonte: o autor.

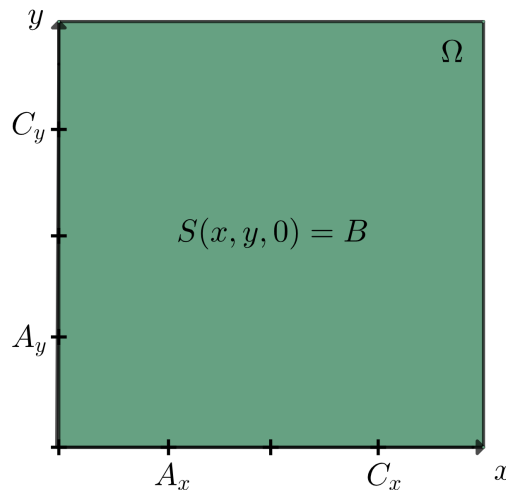
Nesse caso, a condição inicial é definida por uma função do tipo

$$S(x, y, 0) = B, \quad \text{se } A_x \leq x \leq C_x \quad \text{e} \quad A_y \leq y \leq C_y \quad (3.32)$$

tal que A_x, A_y, C_x, C_y pertencem a Ω . Nessa região, a função assume o valor B , que pode ser uma constante ou uma função.

- **Tipo domínio inteiro:** são situações onde todo o domínio é utilizado na condição inicial, ou seja, pode assumir valores diferentes de zero como na figura 3.6.

Figura 3.6: Condição inicial do tipo domínio cheio



Fonte: o autor.

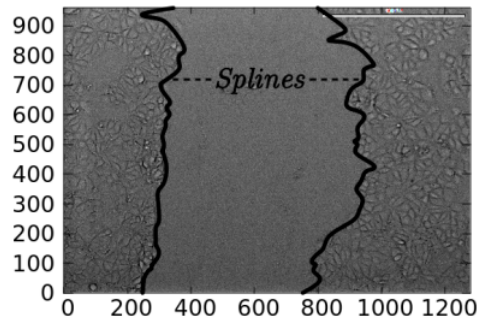
Logo, a condição inicial é definida por

$$S(x, y, 0) = B, \quad \forall (x, y) \in \Omega \quad (3.33)$$

tal que Ω é o domínio da função e B é uma função.

- **tipo *spline*:** assim como o tipo pulso, a densidade inicial está concentrada em alguma região, nesse caso, é utilizada em problemas onde a condição inicial possui um formato não regular, como na figura 3.7

Figura 3.7: Condições iniciais ajustadas por *spline*



Fonte: Pedro Godoi [6]

Esse contorno irregular é obtido por meio de *splines*, só então definimos as densidades das diferentes regiões.

3.1.3 Tempo de Retardo

O tempo de retardo se refere a constante τ , que aparece no termo reativo e dos coeficientes difusivos da equação telegráfica. Neste trabalho, utilizaremos a modelagem realizada em [6], que identifica que certos valores de τ levam ao surgimento de soluções negativas, isto é, $S < 0$. Esses valores não são condizentes com a interpretação da variável S como a densidade populacional. Foi verificado numericamente, que esse problema é corrigido ao considerarmos

$$\tau = \frac{1}{2\lambda} \quad \text{e} \quad \lambda = \frac{|V_s|}{S_*} \quad (3.34)$$

tal que V_s é a derivada da densidade em relação ao tempo, que é então dividido por um valor de referência arbitrário S_* . Anteriormente, λ foi definido como a taxa de inversão na movimentação de partículas. Em larga escala, esse fenômeno ainda ocorre, mas é observado indiretamente por meio de seus efeitos na movimentação. Assim, considerando a densidade como um dos fatores que podem alterar a taxa de inversão, λ é modelado como o fluxo de partículas relativo

à densidade local [6]. Para isso, definimos

$$S_* = \begin{cases} S(x, y, t) & \text{se } S(x, y, t) \neq 0 \\ \bar{S}(x, y, t) & \text{se } S(x, y, t) = 0 \end{cases} \quad (3.35)$$

tal que

$$\bar{S} = \frac{S(x + \delta_x, y, t) + S(x - \delta_x, y, t) + S(x, y + \delta_y, t) + S(x, y - \delta_y, t)}{4} \quad (3.36)$$

é um termo de correção para evitar divisões por zero.

3.1.4 Termo fonte

O termo fonte é uma expressão em função da densidade, que expressa a dinâmica populacional. Isto permite que seja adicionado na simulação uma variação populacional causada pela reprodução ou morte dos invasores. De acordo com o modelo populacional utilizado, a população final pode ter resultados diferentes, como crescer de modo exponencial ou ser extinta. Neste caso, utilizamos dois modelos diferentes, o primeiro é o Modelo Exponencial Malthusiano

$$\frac{dF}{dt} = k_1 S(x, y, t) \quad (3.37)$$

com solução

$$F(S) = S(t) = S_0 e^{k_1 t} \quad (3.38)$$

tal que k_1 é a diferença entre nascimentos e mortes e S_0 é a densidade inicial. Para uma representação mais realista, também utilizamos Modelo Logístico de Verhulst, que é dado por

$$\frac{dS}{dt} = k_1 S(x, y, t) \left(1 - \frac{S(x, y, t)}{k_2} \right) \quad (3.39)$$

com solução

$$F(S) = S(t) = \frac{S_0}{\frac{S_0}{k_2} + \left(1 - \frac{S_0}{k_2} \right) e^{-k_1 t}} \quad (3.40)$$

tal que $K_1 S$ é o fator de crescimento e k é a capacidade de suporte do ambiente [7]. Para manter continuidade, nos testes realizados para este trabalho, consideramos os mesmos k_1 e k_2 do trabalho anterior [6]. O modelo e parâmetros utilizados em cada testes serão indicados junto aos resultados.

3.2 MODELAGEM NUMÉRICA

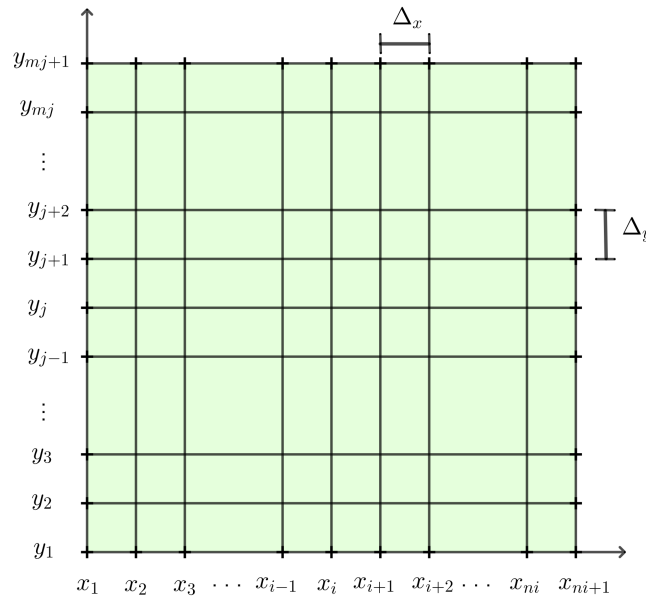
Utilizaremos o método explícito de diferenças finitas para obter uma aproximação da solução. Esta é uma abordagem que já foi testada e apresentou bons resultados [6],

alguns deles serão reproduzidos na seção de resultados.

3.2.1 Construção da Malha

O processo de modelagem numérica começa com a adaptação do domínio para uma malha discreta. Mantemos as condições de contorno originais e dividimos o domínio em segmentos de distância Δ_x no eixo x e Δ_y no eixo y , gerando o domínio discreto da figura 3.8.

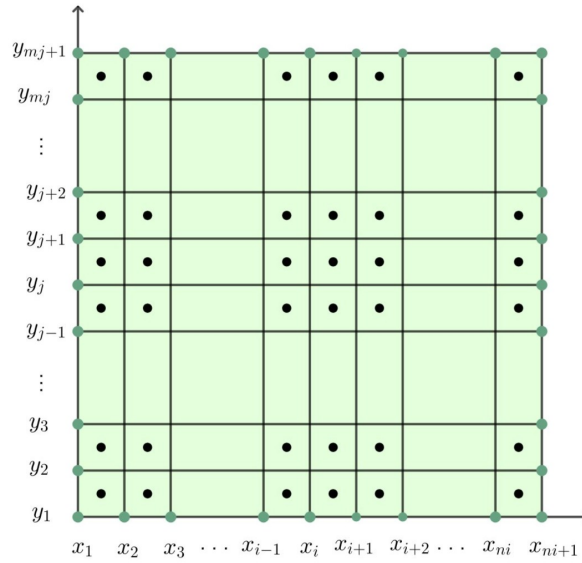
Figura 3.8: Malha aplicada no domínio original



Fonte: o autor.

No entanto, neste trabalho utilizaremos uma malha onde os pontos são deslocados e representados no centro da célula, ao invés de representá-los nas intersecções. Assim, a malha será composta de várias regiões denominadas células, cada uma é representada por um ponto central. Na solução numérica, os pontos centrais são interpretados como uma aproximação da situação das células que eles representam. A figura 3.9 contém os pontos centrais, mas note que também há pontos nas laterais do domínio, exatamente nos eixos x_1 , x_{ni+1} , y_1 e y_{mj+1} . Esses pontos são as condições de contorno, que não são centralizadas, permanecendo na posição em que foram declaradas no problema.

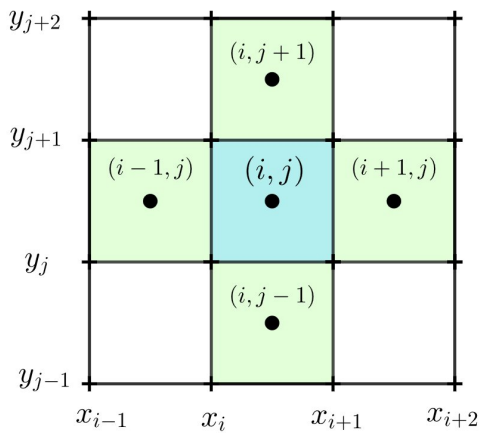
Figura 3.9: Malha deslocada com pontos centrais



Fonte: o autor.

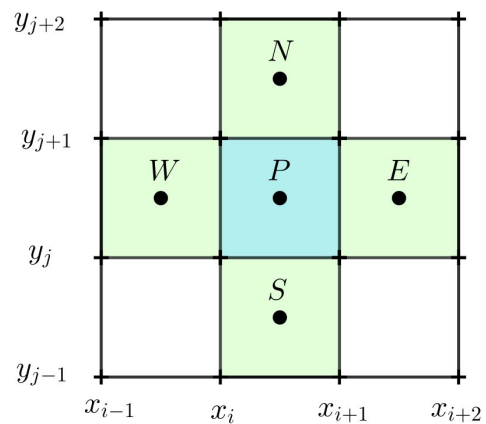
A posição de um ponto pode ser representada por um par ordenado (x_i, y_j) como na figura 3.10a. Porém, utilizaremos a notação cardeal, onde consideramos o ponto central como referência e os pontos ao redor recebem índices provenientes dos pontos cardeais da figura 3.10b. Essa notação é mais conveniente na apresentação da solução numérica, que pode se tornar poluída devido à quantidade de pontos que podem estar envolvidos.

Figura 3.10: Notação dos pontos da malha



(a) Notação por coordenadas

Fonte: o autor.



(b) Notação por pontos cardeais

Fonte: o autor.

Para a notação do tempo, consideramos $t = t_1, t_2, \dots, t_l, \dots, t_{lk}, t_{lk+1}$, sendo que o domínio é separado em intervalos iguais de medida Δ_t .

3.2.2 Solução Numérica

Para obter uma forma discreta da equação telegráfica, aproximamos os termos individualmente utilizando diferenças finitas:

- para as derivadas difusivas utilizamos diferença central

$$\left. \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right|_P^{k+1} \approx \frac{S_W^{k+1} - 2S_P^{k+1} + S_E^{k+1}}{(\Delta_x)^2} \quad \left. \frac{\partial^2 S}{\partial y^2} \right|_P^{k+1} \approx \frac{S_S^{k+1} - 2S_P^{k+1} + S_N^{k+1}}{(\Delta_y)^2}; \quad (3.41)$$

- para as derivadas temporais utilizamos, respectivamente, diferença central e atrasada

$$\left. \frac{\partial^2 S}{\partial t^2} \right|_P^{k+1} \approx \frac{S_P^{k+1} - 2S_P^k + S_P^{k-1}}{(\Delta_t)^2} \quad \left. \frac{\partial S}{\partial t} \right|_P^{k+1} \approx \frac{S_P^{k+1} - S_P^k}{\Delta_t}. \quad (3.42)$$

Também é necessária uma forma discreta para a velocidade de retardo τ , dada por

$$\tau|_P^{k+1} = \frac{1}{2\lambda}|_P^{k+1} \Rightarrow \lambda|_P^{k+1} = \frac{|V_s|}{S_*}|_P^{k+1} = \frac{S_P^{k+1} - S_P^k}{\Delta_t} \frac{1}{S_*} \quad (3.43)$$

tal que $S_* \neq 0$. Assim

$$\lambda|_P^{k+1} = \begin{cases} \frac{|V_s|}{S_*}|_P^{k+1} = \frac{S_P^{k+1} - S_P^k}{\Delta_t} \frac{1}{S_P^{k+1}} & \text{se } S_P^{k+1} \neq 0 \\ \frac{|V_s|}{S_*}|_P^{k+1} = \frac{S_P^{k+1} - S_P^k}{\Delta_t} \frac{1}{\bar{S}_P^{k+1}} & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (3.44)$$

para

$$\bar{S}_P^{k+1} = \frac{S_E^{k+1} + S_W^{k+1} + S_N^{k+1} + S_S^{k+1}}{4}. \quad (3.45)$$

As aproximações são então retornadas para a equação. Deste modo,

$$\begin{aligned} & \frac{\tau}{(\Delta_t)^2} (S_P^{k+1} - 2S_P^k + S_P^{k-1}) + \left(1 - \tau \left. \frac{dF}{dS} \right|_P^{k+1} \right) \frac{S_P^{k+1} - S_P^k}{\Delta_t} \\ &= \frac{D_x}{(\Delta_x)^2} (S_W^{k+1} - 2S_P^{k+1} + S_E^{k+1}) + \frac{D_y}{(\Delta_y)^2} (S_S^{k+1} - 2S_P^{k+1} + S_N^{k+1}) + F(S)|_P^{k+1}. \end{aligned} \quad (3.46)$$

reorganizamos a equação, colocando as variáveis em evidência e separando aquelas aplicadas no tempo $k + 1$ no lado esquerdo da igualdade, obtendo

$$\begin{aligned}
 & S_P^{k+1} \left[\frac{\tau}{(\Delta_t)^2} + \frac{1}{\Delta_t} - \frac{\tau}{\Delta_t} \frac{dF}{dS} \right]_P^{k+1} + \frac{2D_x}{(\Delta_x)^2} + \frac{2D_y}{(\Delta_y)^2} \\
 & - S_E^{k+1} \left[\frac{D_x}{(\Delta_x)^2} \right] - S_W^{k+1} \left[\frac{D_x}{(\Delta_x)^2} \right] - S_N^{k+1} \left[\frac{D_y}{(\Delta_y)^2} \right] - S_S^{k+1} \left[\frac{D_y}{(\Delta_y)^2} \right] \\
 & = S_P^k \left[\frac{2\tau}{(\Delta_t)^2} + \frac{1}{\Delta_t} - \frac{\tau}{\Delta_t} \frac{dF}{dS} \right]_P^{k+1} - S_P^{k-1} \left[\frac{\tau}{(\Delta_t)^2} \right] + F(S)|_P^{k+1}. \quad (3.47)
 \end{aligned}$$

Por fim, organizamos os coeficientes e outros termos de interesse, simplificando a notação

$$\begin{aligned}
 C_P &= \frac{1}{\Delta_t} + \frac{2D_x}{(\Delta_x)^2} + \frac{2D_y}{(\Delta_y)^2} & C_E &= C_W = \frac{D_x}{(\Delta_x)^2} \\
 \tilde{C}_P &= \frac{1}{(\Delta_t)^2} - \frac{1}{\Delta_t} \frac{dF}{dS} \Big|_P^{k+1} & C_N &= C_S = \frac{D_y}{(\Delta_y)^2} \\
 \tilde{b}_P &= \left(\frac{2}{(\Delta_t)^2} - \frac{1}{\Delta_t} \frac{dF}{dS} \Big|_P^{k+1} \right) S_P^k - \frac{1}{(\Delta_t)^2} S_P^{k-1} & \bar{b}_P &= \frac{1}{\Delta_t} S_P^k + F(S)|_P^{k+1}
 \end{aligned}$$

assim obtemos a equação telegráfica na sua forma discreta

$$(C_P + \tau \tilde{C}_P) S_P^{k+1} - C_E S_E^{k+1} - C_W S_W^{k+1} - C_N S_N^{k+1} - C_S S_S^{k+1} = \tau \tilde{b}_P + \bar{b}_P. \quad (3.48)$$

Ao aplicar a equação no domínio discreto, podemos representar a equação na forma matricial (3.49). Para isto, consideramos $A_P = C_P + \tau \tilde{C}_P$, $B_P = \tau \tilde{b}_P + \bar{b}_P$ e $S = S^{k+1}$.

$$\left[\begin{array}{ccc|cc|ccc}
 A_P & C_E & & C_N & & & & \\
 C_W & A_P & C_E & & C_N & & & \\
 & & \ddots & & & \ddots & & \\
 \hline
 C_S & & & A_P & C_E & & C_N & \\
 & C_S & & C_W & A_P & C_E & & C_N \\
 & & C_S & & C_W & A_P & & C_N \\
 \hline
 & & & \ddots & & \ddots & & \\
 & & & & C_S & & C_W & A_P & C_E \\
 & & & & & C_S & & C_W & A_P
 \end{array} \right] \cdot \left[\begin{array}{c}
 S(2,2) \\
 S(3,2) \\
 \vdots \\
 S(i-1,j) \\
 S(i,j) \\
 S(i+1,j) \\
 \vdots \\
 S(ni-1,mj) \\
 S(ni,mj)
 \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c}
 B_P \\
 B_P \\
 \vdots \\
 B_P \\
 B_P \\
 B_P \\
 \vdots \\
 B_P \\
 B_P
 \end{array} \right] \quad (3.49)$$

Assim, obtemos um sistema que será resolvido utilizando o método de Gauss Seidel [15]. Devido ao ordenamento em que a solução em cada ponto é calculada, ao calcular o termo S_P^{k+1} , o valor de S_E^{k+1} ainda não é conhecido. Logo, o sistema não é linear. Para resolvê-lo, utilizamos o método quasi-não linear [5].

3.3 MODELAGEM COMPUTACIONAL

A implementação da solução numérica foi realizada utilizando o *FORTRAN*, dentro do ambiente *LINUX*. Neste contexto, utilizaremos a notação de coordenadas, em que a posição dos pontos centrais da malha deslocada no domínio espacial são representados pelos pares ordenados (i, j) para $i = 1, 2, \dots, ni + 1$ no eixo x e $j = 1, 2, \dots, mj + 1$ no eixo y . Essa notação é conveniente, pois vetores são identificados assim no *FORTRAN*. Para a implementação de outros processos adjacentes, precisamos do valor de x e y referente a essas posições. Como os pontos estão localizados no centro das células, se para o primeiro ponto $x(1) = x_1$, o segundo estará em $x(2) = x_1 + \frac{\Delta_x}{2}$. Os próximos pontos estão a uma distância Δ_x do anterior, considerando

$$\Delta_x = \frac{x_{ni} - x_1}{ni - 1} \quad \Delta_y = \frac{y_{mj} - y_1}{mj - 1} \quad (3.50)$$

generalizando, obtemos

$$x(i) = x_1 + \Delta_x \left(i - \frac{3}{2} \right), \quad i = 1, \dots, ni + 1 \quad (3.51)$$

$$y(j) = y_1 + \Delta_y \left(j - \frac{3}{2} \right), \quad j = 1, \dots, mj + 1 \quad (3.52)$$

esses valores ficarão armazenados nos vetores $x : 1 \times ni + 1$ e $y : 1 \times mj + 1$. Já a dimensão do tempo será dividida em intervalos iguais Δ_t a partir do tempo inicial, tal que

$$\Delta_t = \frac{t_l k - t_1}{lk - 1}$$

assim, um ponto qualquer da linha temporal é dado por

$$t(k) = t_1 + \Delta_t(k - 1), \quad k = 1, \dots, lk + 1 \quad (3.53)$$

que gera o vetor $t : 1 \times lk + 1$. Para calcular a solução numérica, partimos da forma discreta da equação telegráfica (3.48), isolando a variável S_P^{k+1} para obter

$$S_P^{k+1} = \left(C_E S_E^{k+1} + C_W S_W^{k+1} + C_N S_N^{k+1} + C_S S_S^{k+1} + \tau \tilde{b}_P + \bar{b}_P \right) \frac{1}{C_P + \tau \tilde{C}_P}. \quad (3.54)$$

A densidade também recebe uma notação parecida com a malha, em que são equivalentes

$$S_P = S(x(i), y(j)) = S(i, j) \quad (3.55)$$

consequentemente,

$$S_E = S(x(i) + \Delta_x, y(j)) = S(i + 1, j) \quad (3.56)$$

$$S_N = S(x(i), y(j) + \Delta_y) = S(i, j + 1) \quad (3.57)$$

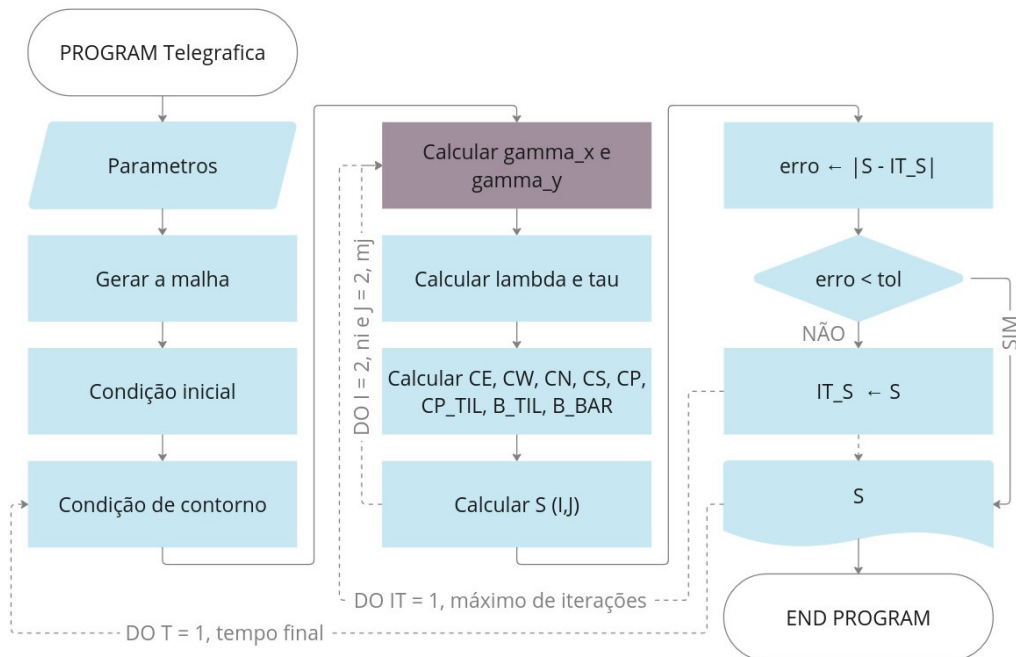
$$S_W = S(x(i) - \Delta_x, y(j)) = S(i - 1, j) \quad (3.58)$$

$$S_S = S(x(i), y(j) - \Delta_y) = S(i, j - 1) \quad (3.59)$$

são todas notações válidas. Em geral, utilizamos a primeira por ser mais simples e a terceira quando estamos nos referindo a implementação computacional, se for necessário. Esses valores são calculados dentro de laços para os índices i e j , logo, seguem uma ordem específica. Por exemplo, o primeiro valor a ser calculado é $S_P = S(2, 2)$, o segundo $S(3, 2)$ e assim por diante, até chegar em $S(ni, 2)$, quando o ciclo se inicia novamente em $S(2, 3)$. Note que, ao calcular S_P , ainda não foram calculados os valores de S_E e S_W naquele tempo. Para resolver esse impasse, é utilizado o método quasi-não-linear. Adicionamos um laço iterativo, que repete o cálculo da solução da equação até atingir um critério. Iniciamos este processo definindo um valor inicial qualquer para o vetor $S : 1 \times [(ni + 1)(mj + 1)]$ e a cada nova iteração, a solução é uma aproximação melhor que a anterior.

A visão geral de todos os passos necessários para chegar nessa solução é representada no fluxograma da figura 3.11. A cor em destaque refere-se a um conjunto de equações que serão desenvolvidas no próximo capítulo.

Figura 3.11: Fluxograma da implementação da solução numérica da equação telegráfica



Fonte: o autor.

3.4 RESULTADOS

Replicamos os resultados obtidos por Godoi [6], utilizando os mesmos parâmetros, indicados na tabela 3.1. Os gráficos foram gerados por meio da biblioteca Matplotlib do Python.

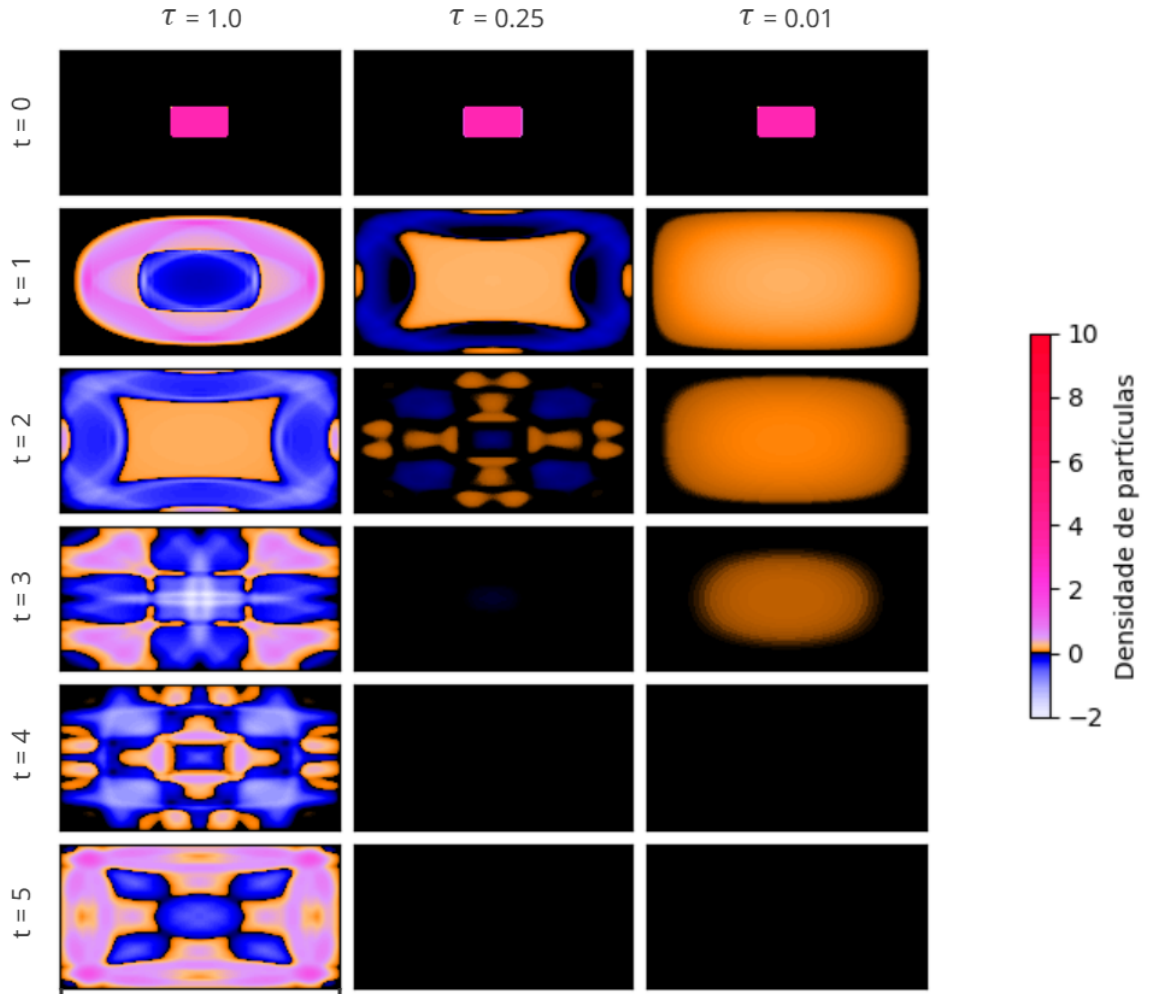
Tabela 3.1: Parâmetros utilizados

Parâmetro	Símbolo	Valor
Domínio Espacial	Ω	$(0, \pi) \times (0, \pi)$
Domínio Temporal		$(0, 5)$
Partições no Eixo x	ni	244
Partições no Eixo y	mj	244
Passo no Tempo	Δ_t	0.0005
Tolerância para ocupação	tol_{ocup}	10^{-3}

Fonte: o Autor

A figura 3.12 contém um conjunto de gráficos que mostram a distribuição da densidade de partículas, indicada pelas cores, no domínio espacial. Cada linha apresenta um tempo diferente e cada coluna um valor diferente de algum coeficiente, indicados na figura 3.12. Nesse caso, o valor dos coeficientes difusivos é fixo em $D_x = D_y = 1.00$, enquanto para τ são testados três valores diferentes. Para o termo fonte, utilizamos o modelo exponencial, com $k_1 = 1.0$. Nos primeiros testes, os coeficientes τ , γ_x e γ_y são constantes em todo o domínio espacial e temporal.

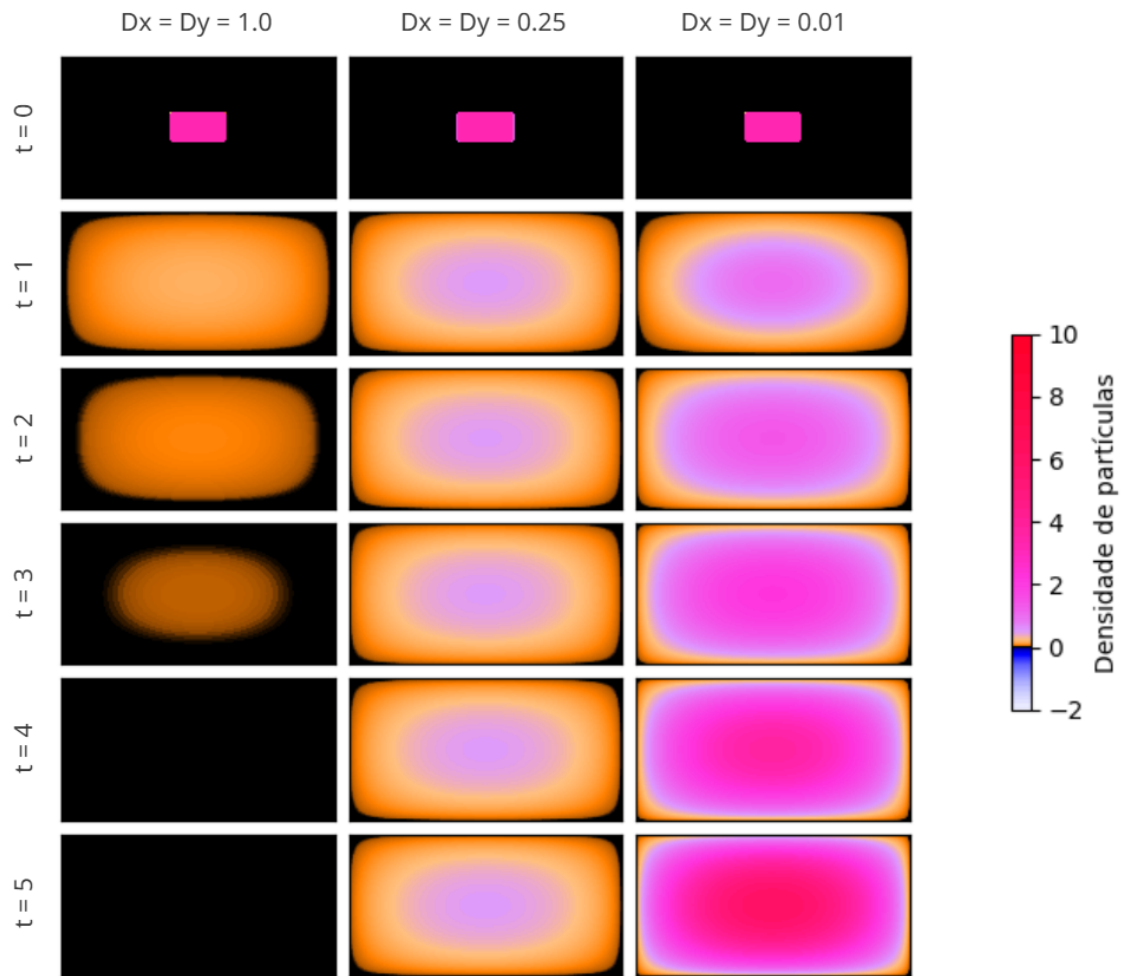
Figura 3.12: Soluções da equação telegráfica para $D_x = D_y = 1.00$



Fonte: o autor. Reprodução de [6].

No primeiro teste, a característica mais significativa é a existência de resultados negativos. No entanto, podem ser evitados utilizando os valores corretos para τ . Assim, para o segundo teste, fixamos $\tau = 0.01$ para analisar outros fatores. Isso resulta na figura 3.13.

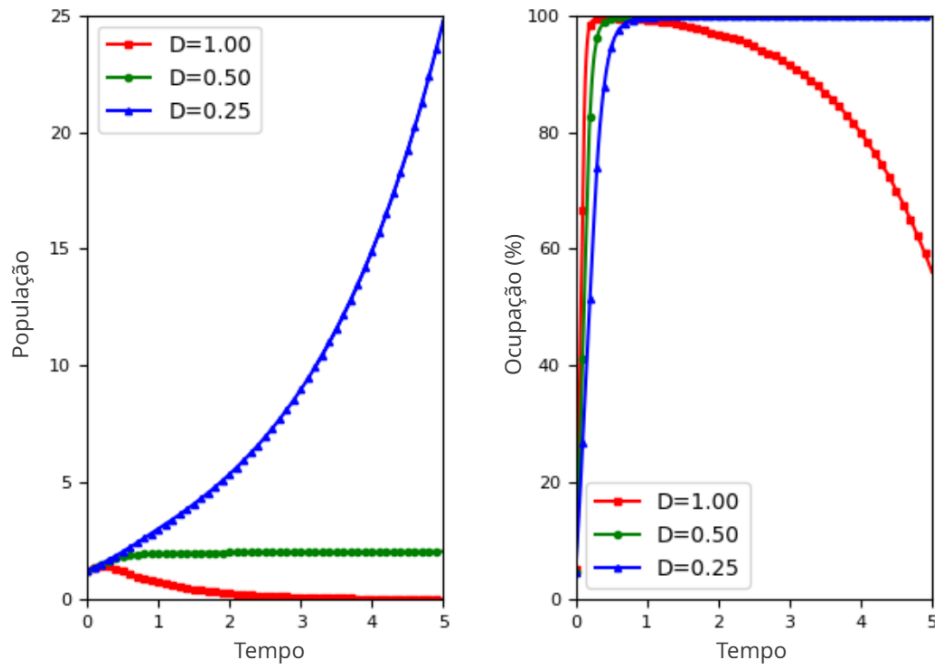
Figura 3.13: Soluções da equação telegráfica para $\tau = 0.01$



Fonte: o autor. Reprodução de [6].

Na figura 3.13, podemos verificar a influência da difusividade no estabelecimento do invasor. Uma difusividade muito alta faz com que a densidade se dissipe, diluindo o efeito do termo fonte. A figura 3.14 também confirma esse comportamento. Vemos que para $D = 1.00$ a população e a ocupação cresceram até o tempo $t = 5$. Enquanto para $D = 0.25$, a população alcança 100% de ocupação no primeiro intervalo de tempo, mas em seguida diminui consideravelmente, atingindo 60% da ocupação no tempo final.

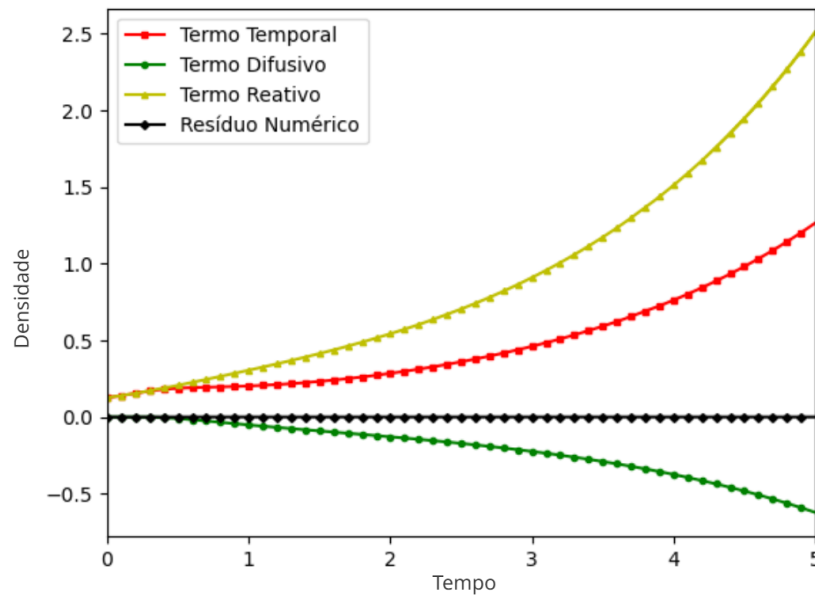
Figura 3.14: População e ocupação para $D = 1.00$, $D = 0.50$ e $D = 0.25$



Fonte: o autor. Reprodução de [6].

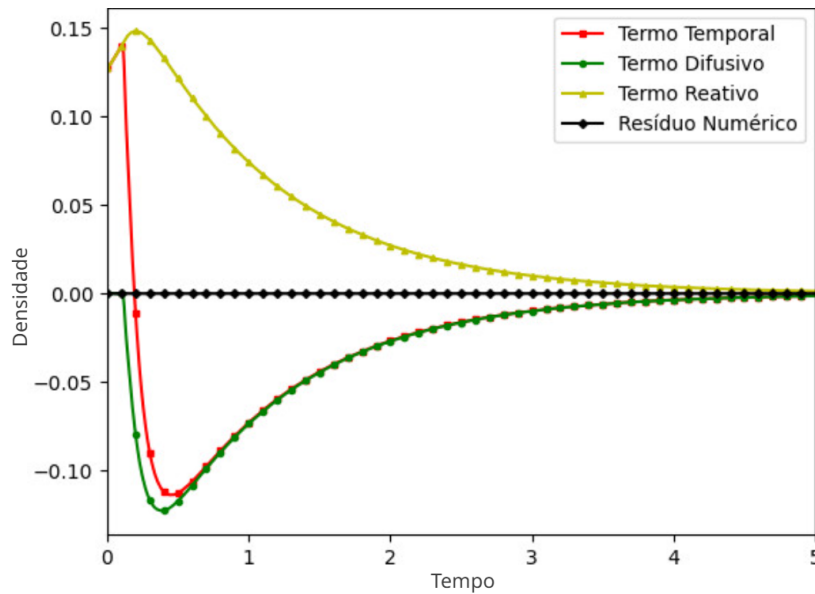
Já nas imagens 3.15 e 3.16, podemos ver a contribuição de cada termo na densidade total. O resíduo numérico é a diferença entre a densidade total e a soma dos termos, um valor próximo de zero garante que apenas esses termos fizeram parte do cálculo. Confirmando as observações da figura 3.13, o termo difusivo é negativo nos dois exemplos, diminuindo o valor total da densidade. Comparando as duas imagens, é possível notar que quando o impacto do coeficiente difusivo é maior, como na figura 3.16, a densidade pode resultar em valores negativos. Além disso, também afeta o termo temporal, o que pode aumentar ainda mais esse efeito. Para a figura 3.15, no entanto, o coeficiente difusivo é pequeno o suficiente para que o termo reativo seja mais dominante na solução, assim a densidade continua crescendo com o tempo.

Figura 3.15: Valor da densidade separado por termos para $D = 0.25$



Fonte: o autor. Reprodução de [6].

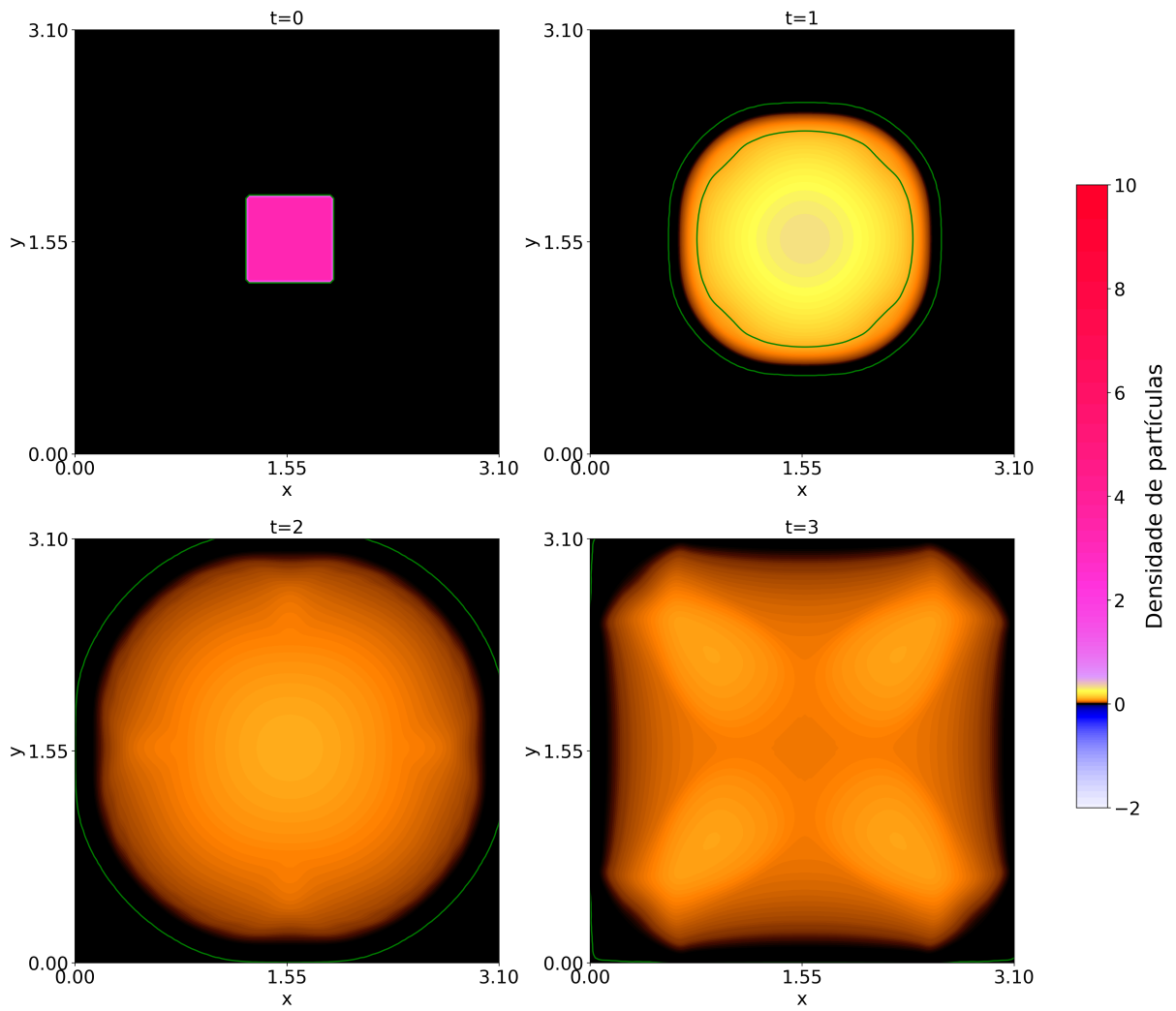
Figura 3.16: Valor da densidade separado por termos para $D = 1.0$



Fonte: o autor. Reprodução de [6].

As soluções negativas não são coerentes com o contexto da construção do problema, visto que a densidade não admite valores negativos. Este problema é solucionado utilizando a construção para λ apresentada anteriormente [6]. Além disso, utilizamos o modelo logístico para o termo fonte, com $k_1 = 3.0$ e $k_2 = 1.0$. Deste modo obtemos o gráfico 3.17, considerando um valor constante para $\gamma_x = \gamma_y = 1.00$

Figura 3.17: Densidade para $t = 0, t = 1, t = 2$ e $t = 3$



Fonte: o autor. Reprodução de [6].

Esses gráficos serão utilizados como base para comparar com os resultados da modelagem dos coeficientes da velocidade γ_x e γ_y no próximo capítulo.

4 MODELAGEM DA VELOCIDADE DE MOVIMENTO DOS INVASORES

Durante a dedução da equação telegráfica, definimos os termos γ_x e γ_y , que estão contidos nos coeficientes difusivos D_x e D_y , como

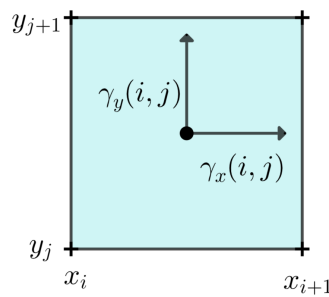
$$\gamma_x = \lim_{\delta_x, \epsilon \rightarrow 0} \frac{\delta_x}{\epsilon} \quad \text{e} \quad \gamma_y = \lim_{\delta_y, \epsilon \rightarrow 0} \frac{\delta_y}{\epsilon},$$

que podem ser interpretados como a velocidade instantânea [6]. Deste modo, a velocidade é constante e igual em todos os pontos, considerando que em uma malha regular os intervalos são constantes. No entanto, entendemos que pode existir a necessidade de representar situações mais complexas. Um modelo mais adequado para essas situações utiliza a equação de Burgers, um caso específico de Navier-Stokes que não possui o termo referente à pressão. Na dinâmica de fluidos, essa equação modela o escoamento, isto é, a movimentação de um fluido. É uma equação diferencial parcial que expressa a variação da velocidade de movimento do fluido entre dois pontos [9]. Essa combinação entre equação telegráfica e Navier-Stokes já é utilizada em modelos da biologia, em particular, em um estudo da proliferação de células tumorais em um dispositivo de microfluídica, uma nova tecnologia utilizada em experimentos *in vitro* [4]. Entretanto, no presente trabalho estamos usando a equação de Burgers para modelar o movimento das partículas. O que implica na variação de $S(x, y)$ por meio dos coeficientes difusivos. Assim, é razoável esperar que as velocidades de movimento possam ser aproximadas por métodos parecidos nos dois fenômenos, utilizando a equação de Burgers.

4.1 EQUAÇÃO DE BURGERS

Para cada célula da malha, ou ponto do domínio, a velocidade de um invasor é um vetor obtido pela soma de dois componentes γ_x e γ_y , que estão localizados como na figura 4.1.

Figura 4.1: Elementos de uma célula



Fonte: o autor.

As componentes são modeladas considerando o mesmo domínio que a equação telegráfica, por meio das equações de Burgers acopladas,

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t}\gamma_x + \frac{\partial}{\partial x}\gamma_x\gamma_x + \frac{\partial}{\partial y}\gamma_y\gamma_x = \nu \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\gamma_x + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\gamma_x \right) \\ \frac{\partial}{\partial t}\gamma_y + \frac{\partial}{\partial x}\gamma_x\gamma_y + \frac{\partial}{\partial y}\gamma_y\gamma_y = \nu \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\gamma_y + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\gamma_y \right) \end{cases} \quad (4.1)$$

com as condições iniciais

$$\gamma_x(x, y, 0) = f_0(x, y) \quad \gamma_y(x, y, 0) = g_0(x, y) \quad (4.2)$$

e as condições de contorno

$$\gamma_x(x_1, y, t) = f_1(y, t) \quad \gamma_y(x_1, y, t) = g_1(y, t) \quad (4.3)$$

$$\gamma_x(x_{ni+1}, y, t) = f_2(y, t) \quad \gamma_y(x_{ni+1}, y, t) = g_2(y, t) \quad (4.4)$$

$$\gamma_x(x, y_1, t) = f_3(x, t) \quad \gamma_y(x, y_1, t) = g_3(x, t) \quad (4.5)$$

$$\gamma_x(x, y_{mj+1}, t) = f_4(x, t) \quad \gamma_y(x, y_{mj+1}, t) = g_4(x, t) \quad (4.6)$$

para $x_1 \leq x \leq x_{ni+1}$, $y_1 \leq y \leq y_{mj+1}$ e $t_1 \leq t \leq t_{lk+1}$, tal que f e g são funções. O termo ν é definido em Navier-Stokes como a viscosidade do fluido, mas na invasão biológica é interpretado como constante de difusividade.

4.2 MODELAGEM NUMÉRICA

A partir das equações de Burgers acopladas 4.46, A velocidade γ_x no ponto P e no tempo $k + 1$ é modelada por

$$\frac{\partial}{\partial t}\gamma_x \Big|_P^{k+1} + \frac{\partial}{\partial x}(\gamma_x\gamma_x) \Big|_P^{k+1} + \frac{\partial}{\partial y}(\gamma_y\gamma_x) \Big|_P^{k+1} = \nu \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\gamma_x \Big|_P^{k+1} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\gamma_x \Big|_P^{k+1} \right). \quad (4.7)$$

Em cada um dos termos dessa equação, utilizaremos diferentes métodos de discretização [9]:

- **o termo temporal** é aproximado utilizando diferença finita regressiva

$$\frac{\partial}{\partial t}\gamma_x \Big|_P^{k+1} = \frac{(\gamma_x)_P^{k+1} - (\gamma_x)_P^k}{\Delta t}; \quad (4.8)$$

- **os termos difusivos** são aproximados utilizando diferenças finitas centrais

$$\left. \frac{\partial^2}{\partial x^2} \gamma_x \right|_P^{k+1} = \frac{(\gamma_x)_W^{k+1} - 2(\gamma_x)_P^{k+1} + (\gamma_x)_E^{k+1}}{(\Delta_x)^2} \quad (4.9)$$

$$\left. \frac{\partial^2}{\partial y^2} \gamma_x \right|_P^{k+1} = \frac{(\gamma_x)_S^{k+1} - 2(\gamma_x)_P^{k+1} + (\gamma_x)_N^{k+1}}{(\Delta_y)^2}; \quad (4.10)$$

- **os termos convectivos** são aproximados utilizando diferenças finitas centrais

$$\left. \frac{\partial}{\partial x} (\gamma_x \gamma_x) \right|_P^{k+1} = \frac{(\gamma_x \gamma_x)_e^{k+1} - (\gamma_x \gamma_x)_w^{k+1}}{\Delta_x} \quad (4.11)$$

$$\left. \frac{\partial}{\partial y} (\gamma_y \gamma_x) \right|_P^{k+1} = \frac{(\gamma_y \gamma_x)_n^{k+1} - (\gamma_y \gamma_x)_s^{k+1}}{\Delta_y}. \quad (4.12)$$

Note que os termos convectivos não são lineares. O método *First-Order Upwind* (FOU) é utilizado por tratar essa questão. O método FOU define que uma das variáveis γ_x em $\frac{\partial}{\partial x} \gamma_x \gamma_x$, é admitida como uma constante $\overline{\gamma_x}$, cujo valor é a média aritmética dos pontos ao redor, no mesmo eixo que a variável está representando. Também a partir dessa constante, é definida uma função sinal, que definirá o valor da outra parte da multiplicação. Essencialmente, dependendo da solução da função sinal, γ_x será igual ao valor do ponto que estão a sua direita ou a sua esquerda, multiplicada por $\overline{\gamma_x}$. Assim, cada uma das parcelas da discretização do termo convectivo serão reescritas:

- seja $(\gamma_x \gamma_x)_e^{k+1} = (\overline{\gamma_x})_e (\gamma_x)_e^{k+1}$, tal que a variável $(\gamma_x)_e^{k+1}$ é definida como

$$(\gamma_x)_e^{k+1} = \left(\frac{1 + \mathcal{S}_e}{2} \right) (\gamma_x)_P^{k+1} + \left(\frac{1 - \mathcal{S}_e}{2} \right) (\gamma_x)_E^{k+1}, \quad (4.13)$$

considerando a função sinal

$$\mathcal{S}_e = \begin{cases} 1, & (\overline{\gamma_x})_e \geq 0 \\ -1, & (\overline{\gamma_x})_e < 0 \end{cases} \quad \text{para} \quad (\overline{\gamma_x})_e = \frac{(\gamma_x)_P + (\gamma_x)_E}{2}. \quad (4.14)$$

- seja $(\gamma_x \gamma_x)_w^{k+1} = (\overline{\gamma_x})_w (\gamma_x)_w^{k+1}$, tal que a variável $(\gamma_x)_w^{k+1}$ é definida como

$$(\gamma_x)_w^{k+1} = \left(\frac{1 + \mathcal{S}_w}{2} \right) (\gamma_x)_W^{k+1} + \left(\frac{1 - \mathcal{S}_w}{2} \right) (\gamma_x)_P^{k+1}, \quad (4.15)$$

considerando a função sinal

$$\mathcal{S}_w = \begin{cases} 1, & (\overline{\gamma_x})_w \geq 0 \\ -1, & (\overline{\gamma_x})_w < 0 \end{cases} \quad \text{para} \quad (\overline{\gamma_x})_w = \frac{(\gamma_x)_W + (\gamma_x)_P}{2}. \quad (4.16)$$

- seja $(\gamma_y \gamma_x)_n^{k+1} = (\overline{\gamma_y})_n (\gamma_x)_n^{k+1}$, tal que a variável $(\gamma_x)_n^{k+1}$ é definido como

$$(\gamma_x)_n^{k+1} = \left(\frac{1 + \mathcal{S}_n}{2} \right) (\gamma_x)_P^{k+1} + \left(\frac{1 - \mathcal{S}_n}{2} \right) (\gamma_x)_N^{k+1}, \quad (4.17)$$

considerando a função sinal

$$S_n = \begin{cases} 1, & (\overline{\gamma_y})_n \geq 0 \\ -1, & (\overline{\gamma_y})_n < 0 \end{cases} \quad \text{para} \quad (\overline{\gamma_y})_n = \frac{(\gamma_y)_P + (\gamma_y)_N}{2}. \quad (4.18)$$

- $(\gamma_y \gamma_x)_s^{k+1} = (\overline{\gamma_y})_s (\gamma_x)_s^{k+1}$, tal que a variável $(\gamma_x)_s^{k+1}$ é definida como

$$(\gamma_x)_s^{k+1} = \left(\frac{1 + \mathcal{S}_s}{2} \right) (\gamma_x)_S^{k+1} + \left(\frac{1 - \mathcal{S}_s}{2} \right) (\gamma_x)_P^{k+1}, \quad (4.19)$$

considerando a função sinal

$$S_s = \begin{cases} 1, & (\overline{\gamma_y})_s \geq 0 \\ -1, & (\overline{\gamma_y})_s < 0 \end{cases} \quad \text{para} \quad (\overline{\gamma_y})_s = \frac{(\gamma_y)_S + (\gamma_y)_P}{2}. \quad (4.20)$$

Note que os $(\overline{\gamma_x})$ não estão definidos em um tempo específico, logo, utilizaremos o último valor calculado, independente do tempo. Retornando todos os termos para a equação (4.7), obtemos

$$\begin{aligned} & \frac{(\gamma_x)_P^{k+1} - (\gamma_x)_P^k}{\Delta_t} + \frac{(\overline{\gamma_x})_e (\gamma_x)_e^{k+1}}{\Delta_x} - \frac{(\overline{\gamma_x})_w (\gamma_x)_w^{k+1}}{\Delta_x} + \frac{(\overline{\gamma_y})_n (\gamma_x)_n^{k+1}}{\Delta_y} - \frac{(\overline{\gamma_x})_s (\gamma_x)_s^{k+1}}{\Delta_y} \\ &= \nu \left[\frac{(\gamma_x)_W^{k+1} - 2(\gamma_x)_P^{k+1} + (\gamma_x)_E^{k+1}}{(\Delta_x)^2} + \frac{(\gamma_x)_S^{k+1} - 2(\gamma_x)_P^{k+1} + (\gamma_x)_N^{k+1}}{(\Delta_y)^2} \right]. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Expandindo as variáveis conforme a construção apresentada no método FOU $(\overline{\gamma_y})_e^{k+1}$, $(\overline{\gamma_y})_w^{k+1}$, $(\overline{\gamma_y})_n^{k+1}$ e $(\overline{\gamma_y})_s^{k+1}$, assim

$$\begin{aligned} & \frac{(\gamma_x)_P^{k+1} - (\gamma_x)_P^k}{\Delta_t} + \frac{(\overline{\gamma_x})_e}{\Delta_x} \left[\frac{1 + S_e}{2} (\gamma_x)_P^{k+1} + \frac{1 - S_e}{2} (\gamma_x)_E^{k+1} \right] \\ & - \frac{(\overline{\gamma_x})_w}{\Delta_x} \left[\frac{1 + S_w}{2} (\gamma_x)_W^{k+1} + \frac{1 - S_w}{2} (\gamma_x)_P^{k+1} \right] \\ & + \frac{(\overline{\gamma_y})_n}{\Delta_y} \left[\frac{1 + S_n}{2} (\gamma_x)_P^{k+1} + \frac{1 - S_n}{2} (\gamma_x)_N^{k+1} \right] \\ & - \frac{(\overline{\gamma_y})_s}{\Delta_y} \left[\frac{1 + S_s}{2} (\gamma_x)_S^{k+1} + \frac{1 - S_s}{2} (\gamma_x)_P^{k+1} \right] \\ &= \frac{\nu}{(\Delta_x)^2} \left[(\gamma_x)_W^{k+1} - 2(\gamma_x)_P^{k+1} + (\gamma_x)_E^{k+1} \right] \\ & + \frac{\nu}{(\Delta_y)^2} \left[(\gamma_x)_S^{k+1} - 2(\gamma_x)_P^{k+1} + (\gamma_x)_N^{k+1} \right]. \end{aligned} \quad (4.22)$$

Em seguida, reorganizamos a equação, colocando as variáveis em evidência e separando as que são aplicadas no tempo k e $k + 1$

$$\begin{aligned}
 (\gamma_x)_P^{k+1} & \left[\frac{1}{\Delta_t} + \frac{(\overline{\gamma_x})_e}{\Delta_x} \frac{1 + S_e}{2} - \frac{(\overline{\gamma_x})_w}{\Delta_x} \frac{1 - S_w}{2} + \frac{(\overline{\gamma_y})_n}{\Delta_y} \frac{1 + S_n}{2} \right. \\
 & \left. - \frac{(\overline{\gamma_y})_s}{\Delta_y} \frac{1 - S_s}{2} + \frac{2\nu}{(\Delta_x)^2} + \frac{2\nu}{(\Delta_y)^2} \right] + (\gamma_x)_E^{k+1} \left[\frac{(\overline{\gamma_x})_e}{\Delta_x} \frac{1 - S_e}{2} - \frac{\nu}{(\Delta_x)^2} \right] \\
 & + (\gamma_x)_W^{k+1} \left[-\frac{(\overline{\gamma_x})_w}{\Delta_x} \frac{1 + S_w}{2} - \frac{\nu}{(\Delta_x)^2} \right] + (\gamma_x)_N^{k+1} \left[\frac{(\overline{\gamma_y})_n}{\Delta_y} \frac{1 - S_n}{2} - \frac{\nu}{(\Delta_y)^2} \right] \\
 & + (\gamma_x)_S^{k+1} \left[-\frac{(\overline{\gamma_y})_s}{\Delta_y} \frac{1 + S_s}{2} - \frac{\nu}{(\Delta_y)^2} \right] = (\gamma_x)_P^k \frac{1}{\Delta_t}.
 \end{aligned} \tag{4.23}$$

Realizamos o mesmo processo para a equação que descreve a velocidade γ_y , aplicada no tempo $k + 1$ e um ponto P , como descrito na equação (4.24),

$$\frac{\partial}{\partial t} \gamma_y \Big|_P^{k+1} + \frac{\partial}{\partial x} (\gamma_x \gamma_y) \Big|_P^{k+1} + \frac{\partial}{\partial y} (\gamma_y \gamma_y) \Big|_P^{k+1} = \nu \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \gamma_y \Big|_P^{k+1} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \gamma_y \Big|_P^{k+1} \right), \tag{4.24}$$

obtendo uma equação final similar. Assim, são otidas as formas discretas das equações de Burgers para γ_x e γ_y

$$\begin{cases} C_P(\gamma_x)_P^{k+1} + C_E(\gamma_x)_E^{k+1} + C_W(\gamma_x)_W^{k+1} + C_N(\gamma_x)_N^{k+1} + C_S(\gamma_x)_S^{k+1} = B_P^{k+1} \\ C_P(\gamma_y)_P^{k+1} + C_E(\gamma_y)_E^{k+1} + C_W(\gamma_y)_W^{k+1} + C_N(\gamma_y)_N^{k+1} + C_S(\gamma_y)_S^{k+1} = \tilde{B}_P^{k+1} \end{cases} \tag{4.25}$$

tal que os coeficientes são:

$$\begin{aligned}
 C_P &= \frac{1}{\Delta_t} + \frac{1}{\Delta_x} (\overline{\gamma_x})_e \left(\frac{1 + S_e}{2} \right) - \frac{1}{\Delta_x} (\overline{\gamma_x})_w \left(\frac{1 - S_w}{2} \right) + \frac{1}{\Delta_y} (\overline{\gamma_y})_n \left(\frac{1 + S_n}{2} \right) \\
 & \quad - \frac{1}{\Delta_y} (\overline{\gamma_y})_s \left(\frac{1 - S_s}{2} \right) + \frac{2\nu}{(\Delta_x)^2} + \frac{2\nu}{(\Delta_y)^2} \\
 C_E &= \frac{1}{\Delta_x} (\overline{\gamma_x})_e \left(\frac{1 - S_e}{2} \right) - \frac{\nu}{(\Delta_x)^2} & C_W &= -\frac{1}{\Delta_x} (\overline{\gamma_x})_w \left(\frac{1 + S_w}{2} \right) - \frac{\nu}{(\Delta_x)^2} \\
 C_N &= \frac{1}{\Delta_y} (\overline{\gamma_y})_n \left(\frac{1 - S_n}{2} \right) - \frac{\nu}{(\Delta_y)^2} & C_S &= -\frac{1}{\Delta_y} (\overline{\gamma_y})_s \left(\frac{1 + S_s}{2} \right) - \frac{\nu}{(\Delta_y)^2} \\
 B_P^{k+1} &= (\gamma_x)_P^k \frac{1}{\Delta_t} & \tilde{B}_P^{k+1} &= (\gamma_y)_P^k \frac{1}{\Delta_t}
 \end{aligned}$$

Ao aplicar a equação no domínio discreto, podemos representar a equação na forma matricial (3.49). Para isto, consideramos $A_P = C_P + \tau \tilde{C}_P$ e $B_P = \tau \tilde{b}_P + \bar{b}_P$.

$$\begin{bmatrix}
 C_P & C_E & & & \\
 C_W & C_P & C_E & & \\
 & & \ddots & & \\
 C_S & & & C_P & C_E & C_N \\
 & C_S & & C_W & C_P & C_E & C_N \\
 & & C_S & & C_W & C_P & \\
 & & & \ddots & & & \\
 & & & & C_S & & C_W & C_P & C_E & C_N \\
 & & & & & C_S & & C_W & C_P & \\
 & & & & & & C_S & & C_W & C_P
 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix}
 \gamma(2,2) \\
 \gamma(3,2) \\
 \vdots \\
 \gamma(i-1,j) \\
 \gamma(i,j) \\
 \gamma(i+1,j) \\
 \vdots \\
 \gamma(ni-1,mj) \\
 \gamma(ni,mj)
 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix}
 B_P \\
 B_P \\
 \vdots \\
 B_P \\
 B_P \\
 B_P \\
 \vdots \\
 B_P \\
 B_P
 \end{bmatrix} \quad (4.26)$$

Assim, obtemos dois sistemas lineares, para $\gamma = \gamma_x^{k+1}$ e $\gamma = \gamma_y^{k+1}$, que serão resolvidos utilizando o método de Gauss Seidel [15].

4.3 MODELAGEM COMPUTACIONAL

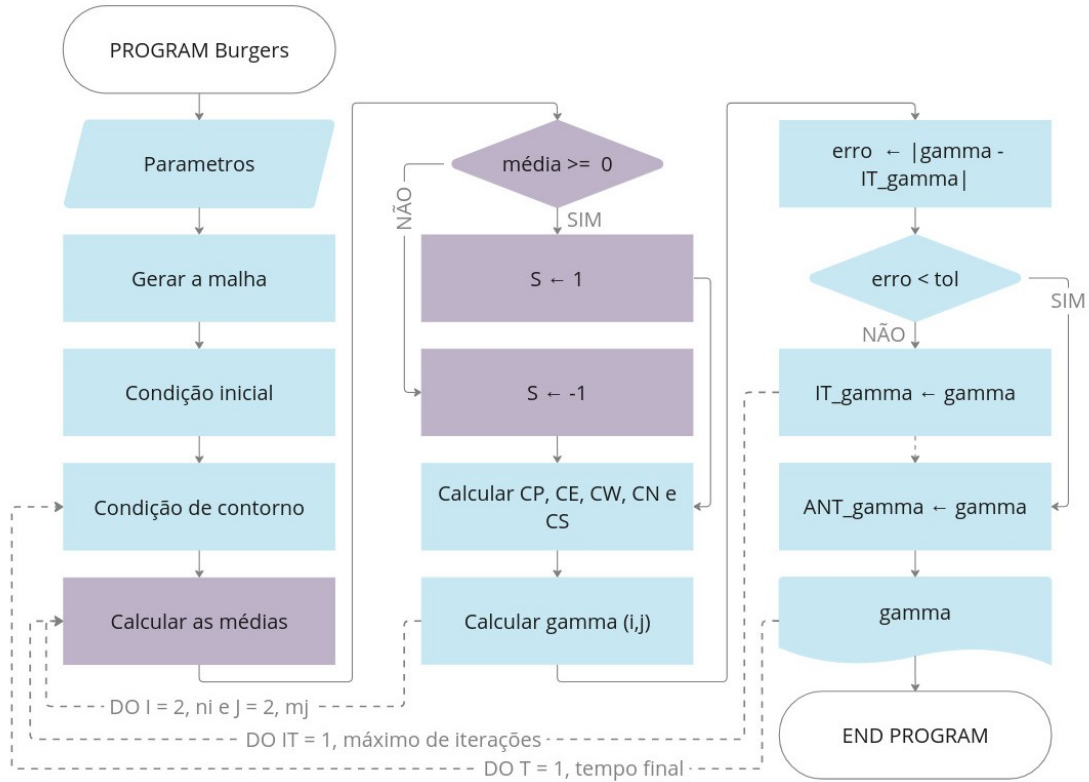
O conjunto das equações (4.25) aplicadas em todos os pontos do domínio, gera um sistema linear, resolvido pelo método Gauss-Seidel. Logo, é necessário verificar as condições de convergência [19]. Seja

$$\alpha(i) = |C_P(i)| - |C_E(i)| - |C_W(i)| - |C_N(i)| - |C_S(i)|. \quad (4.27)$$

Pelo critério das linhas, a solução irá convergir se $\alpha(i) > 0$. Isto é, o critério deve ser atendido para cada linha i da matriz dos coeficientes (4.26).

Assim como a equação telegráfica, a solução numérica da equação de Burgers foi implementada em *Fortran*, no ambiente *Linux*. Como o domínio das duas equações são iguais, a malha foi construída da mesma forma, como na figura 3.10b. Mas como as equações γ_x e γ_y estão acopladas, as duas soluções são calculadas simultaneamente, este processo está descrito no fluxograma da figura 4.2.

Figura 4.2: Fluxograma da implementação da solução numérica da equação de Burgers



Fonte: o autor.

Considerando que os processos que estão destacados devem repetidos para todos os pontos E, W, N e S .

4.4 VALIDAÇÃO

Uma etapa essencial da implementação computacional é verificar se o programa está retornando boas soluções por meio do cálculo dos erros. Para isso, o ideal é calcular a diferença entre a solução exata e a numérica. Em algumas situações específicas para a condição inicial e de contorno, a equação de Burgers possui solução analítica [16]. Considerando a condição inicial

$$\gamma_x(i, j) = \frac{-4\nu\pi\cos(2\pi x(i))\sin(\pi y(j))}{2 + \sin(2\pi x(i))\sin(\pi y(j))} \quad \gamma_y(i, j) = \frac{-2\nu\pi\sin(2\pi x(i))\cos(\pi y(j))}{2 + \sin(2\pi x(i))\sin(\pi y(j))} \quad (4.28)$$

e as condições de contorno

$$\gamma_x(1, j) = -2\nu\pi\exp(-5\pi^2\nu t(k))\sin(\pi y(j)) \quad \gamma_x(i, mj + 1) = 0 \quad (4.29)$$

$$\gamma_x(ni + 1, j) = -2\nu\pi\exp(-5\pi^2\nu t(k))\sin(\pi y(j)) \quad \gamma_x(i, 1) = 0 \quad (4.30)$$

$$\gamma_y(i, 1) = -\nu\pi\exp(-5\pi^2\nu t(k))\sin(2\pi x(i)) \quad \gamma_y(ni + 1, j) = 0 \quad (4.31)$$

$$\gamma_y(i, mj + 1) = \nu\pi\exp(-5\pi^2\nu t(k))\sin(2\pi x(i)) \quad \gamma_y(1, j) = 0 \quad (4.32)$$

a solução analítica das equações de Burgers é

$$\gamma_x(i, j) = -2\nu \frac{2\pi\exp(-5\pi^2\nu t(k))\cos(2\pi x(i))\sin(\pi y(j))}{2 + \exp(-5\pi^2\nu t(k))\sin(2\pi x(i))\sin(\pi y(j))} \quad (4.33)$$

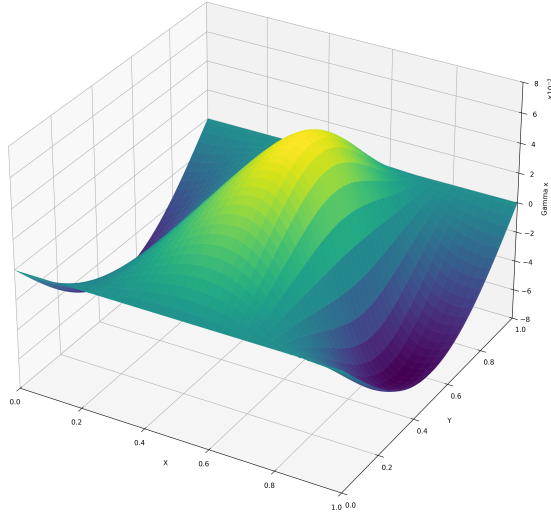
$$\gamma_y(i, j) = -2\nu \frac{\pi\exp(-5\pi^2\nu t(k))\sin(2\pi x(i))\cos(\pi y(j))}{2 + \exp(-5\pi^2\nu t(k))\sin(2\pi x(i))\sin(\pi y(j))} \quad (4.34)$$

tal que $\nu = 0.001$. Aplicamos as mesmas condições iniciais e de contorno no método numérico apresentado anteriormente. Deste modo, podemos verificar sua precisão ao compará-lo com a solução exata. Para isto, consideramos o domínio espacial $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$, tal que $\Delta_x = \Delta_y = 0.0125$. A simulação foi iniciada no tempo $t = 0$ e decorreu até o tempo final $t = 1$, tal que $\Delta_t = 0.001$. Além disso, para todos os testes a seguir, utilizamos modelo logístico para o termo fonte, com $k_1 = 3.0$ e $k_2 = 1.0$.

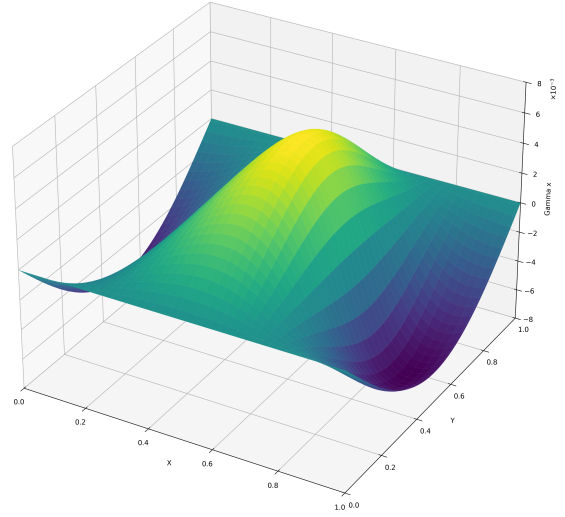
O modelo computacional retorna duas matrizes, que contém os valores de γ_x e γ_y para cada ponto da malha. Esses dados podem ser visualizados na figura 4.3, onde a altura representa o valor de γ_x ou γ_y no ponto (x, y) correspondente, formando uma superfície. Escolhemos representar dessa forma para evidenciar o formato da função que define a solução analítica. Em específico, na figura 4.3a temos a solução numérica para γ_x , enquanto a figura 4.3b contém a solução analítica. Pelas imagens é possível notar uma similaridade entre os resultados, que também são parecidos aqueles obtidos por [16]. O mesmo ocorre para os solução de γ_y , apresentadas nas figuras 4.3c e 4.3d.

Figura 4.3: Soluções para γ_x no tempo $t = 1$.

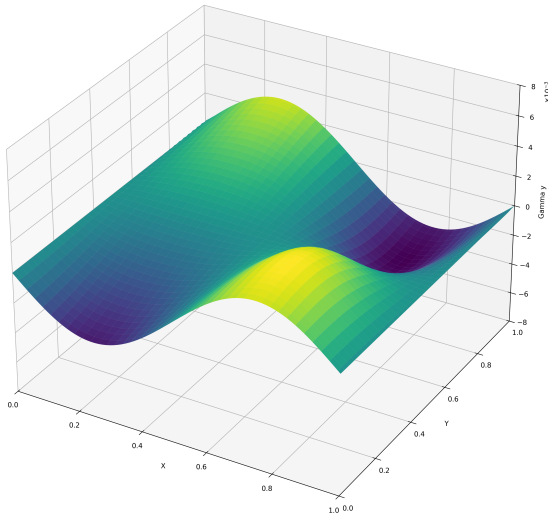
(a) Solução Numérica γ_x .



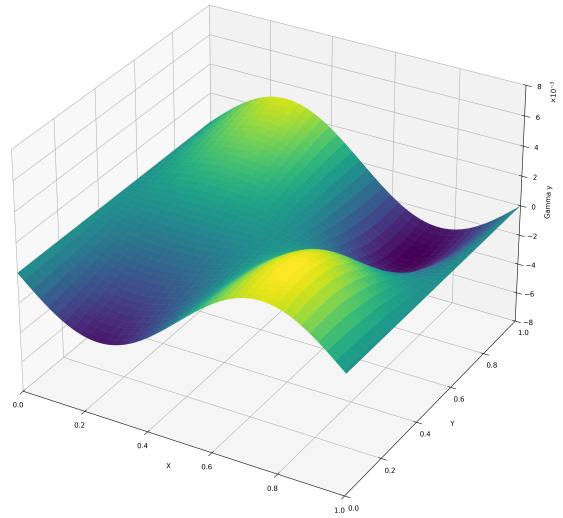
(b) Solução Analítica γ_x .



(c) Solução Numérica γ_y .



(d) Solução Analítica γ_y .



Fonte: o autor.

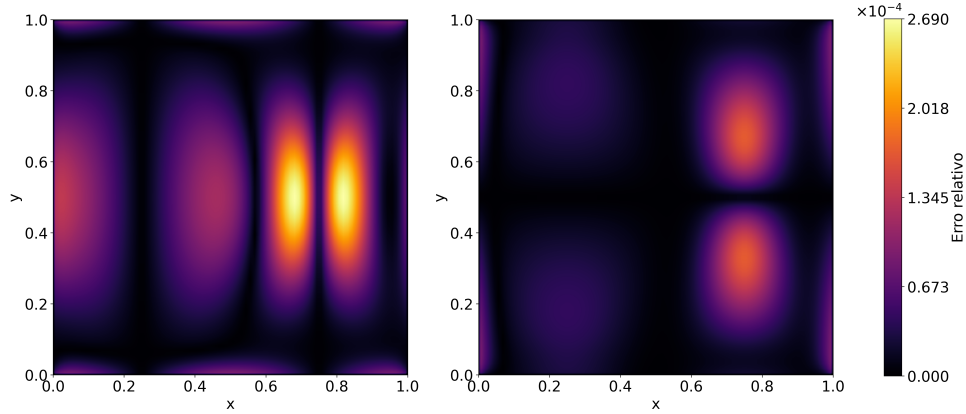
No entanto, não é suficiente apenas comparar as imagens, precisamos comparar os resultados em termos quantitativos. Logo, calculamos o erro relativo entre as soluções analítica γ_x e numérica $\overline{\gamma_x}$, na forma

$$E_x = \frac{\|\gamma_x - \overline{\gamma_x}\|}{\|\gamma_x\|} \quad \text{e} \quad E_y = \frac{\|\gamma_y - \overline{\gamma_y}\|}{\|\gamma_y\|} \quad (4.35)$$

para as soluções apresentadas nas figuras 4.3b e 4.3a. Essas comparações foram representados na figura 4.4, que identifica o erro calculado pela escala de cores. O maior valor está próximo de

2.7×10^{-4} e a maioria do domínio apresenta erros ainda menores. Assim, essa distribuição não é uniforme no domínio, mas ocorre de modo contínuo e consistente com o formato da função. Este comportamento já foi observado em outras soluções numéricas que utilizam o método FOU [18] e possui relação com o ângulo da função (ou coeficiente angular da reta tangente) em relação ao domínio.

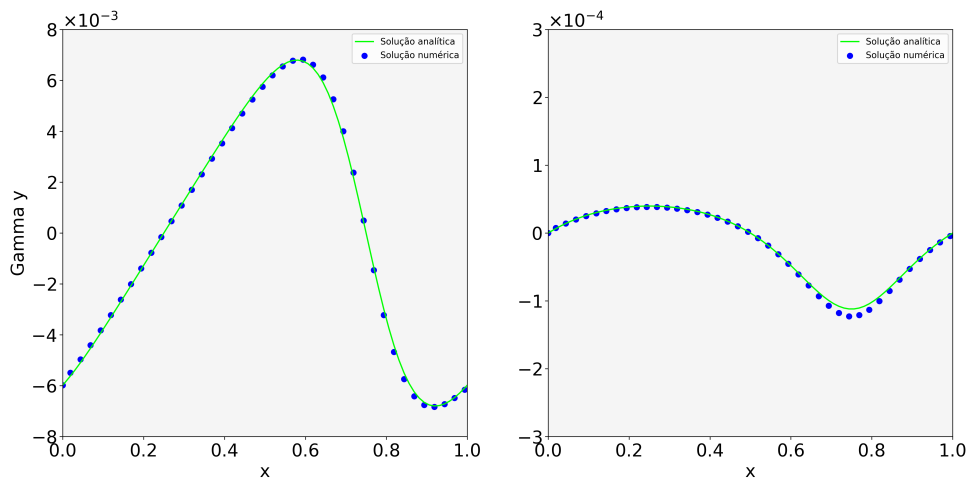
Figura 4.4: Mapa de erros relativos para γ_x (figura da esquerda) e γ_y (figura da direita)



Fonte: o autor.

Para analisar em detalhes, realizamos um recorte da solução, fixando um valor arbitrário para o ponto $y = 0.50625002$. Assim, obtemos um gráfico em duas dimensões, com os valores de x e γ_x , como na figura 4.5. Neste caso, a norma Euclidiana [14], também indicada por L2, do erro relativo entre as duas soluções presentes no gráfico é de $E_x = 0.0269$ para γ_x e de $E_y = 0.0665$ para γ_y .

Figura 4.5: Recorte da solução para γ_x (figura da esquerda) e γ_y (figura da direita).



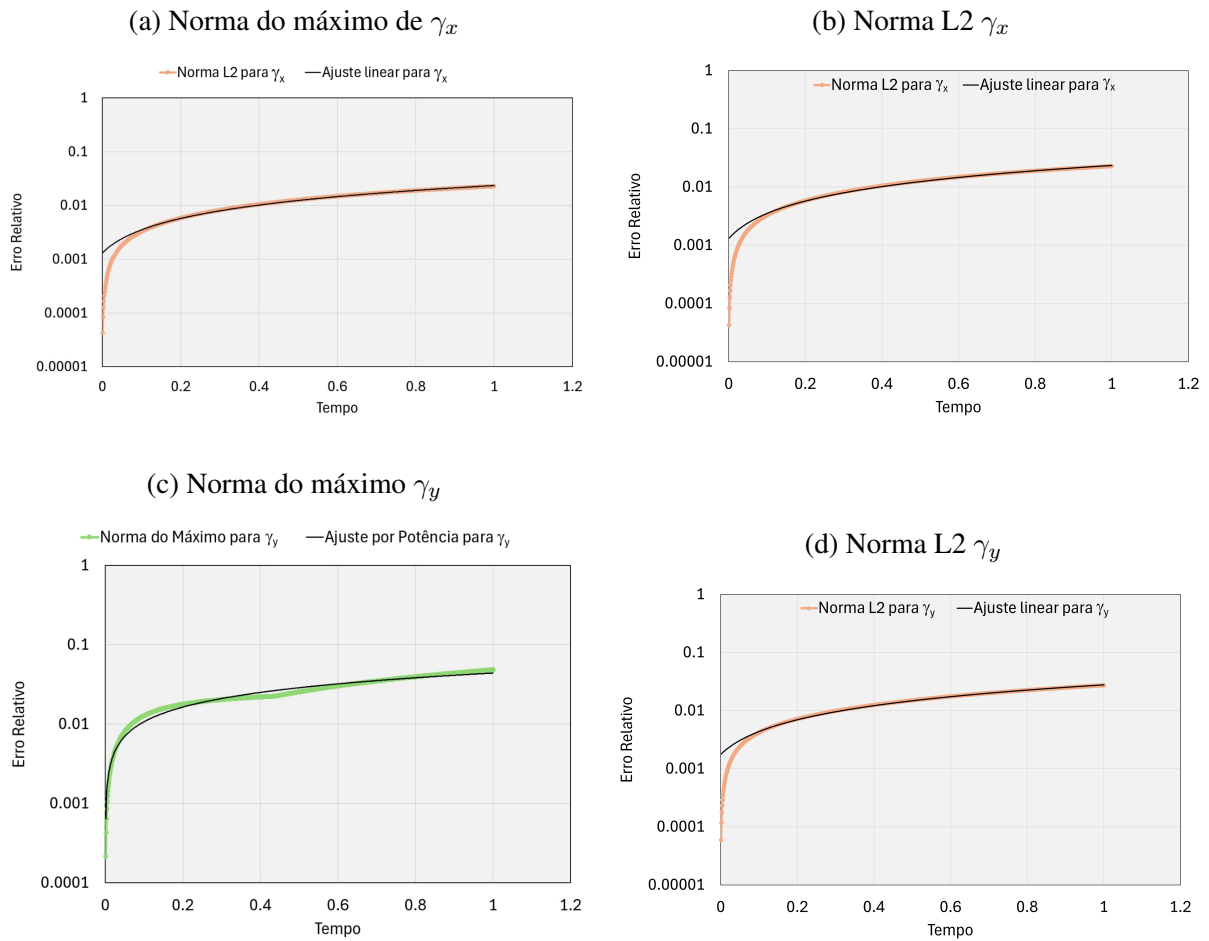
Fonte: o autor.

Pela forma como o modelo foi implementado, a cada passo de tempo um novo cálculo é realizado, que aproxima o valor de γ_x e γ_y até a convergência. Definimos que

a solução convergiu quando a diferença entre a solução atual e a solução obtida na iteração anterior é menor do que 10^{-8} , essa técnica vem do método Gauss Seidel, que foi utilizado na resolução do sistema linear. Para analisar como esses erros se desenvolvem em relação ao tempo, aplicamos duas métricas diferentes, a norma Euclidiana e a norma do máximo [14].

Em seguida, procuramos por uma função que mais se aproximasse dos dados obtidos, para analisar seu comportamento. O resultado é apresentado por meio dos gráficos da figura 4.6, onde aplicamos uma escala logarítmica para melhor representar a escala dos dados.

Figura 4.6: Erro relativo entre a solução numérica e analítica



Fonte: o autor.

Na figura 4.6b, o erro máximo obtido foi de 10^{-3} em γ_x , logo os erros de tempos anteriores são ainda menores. Esse é um bom resultado, considerando que o erro relativo retorna valores entre 0 e 1, independente da dimensão dos dados. Além disso, foi ajustada para uma função potência

$$E_x = 0.0372t^{0.7499} \quad \text{e} \quad E_y = 0.0441t^{0.6135} \quad (4.36)$$

com precisão do tipo $R_x^2 = 0.8702$ e $R_y^2 = 0.9645$. O coeficiente e expoente da equação (4.36)

indicam um crescimento lento do erro. De modo similar, ao analisar a figura 4.6a notamos que o erro esta aumentando com o tempo. No entanto, esse crescimento é aproximado por uma reta

$$E_x = 0.0222t + 0.0013 \quad \text{e} \quad E_y = 0.026t + 0.0018 \quad (4.37)$$

com $R_x^2 = 0.9978$ e $R_y^2 = 0.9973$. Além disso, a equação linear obtida possui um coeficiente angular de 0.0222, o que indica que o crescimento é pequeno. Já é conhecido que o método FOU causa dissipações na solução [18], o que causa o aumento no erro em relação ao tempo. Existem maneiras de minimizar essa dissipação, utilizando outros métodos de ordem maior [9]. Para um trabalho futuro caminharemos nessa direção.

Além do tempo, outros fatores podem influenciar a precisão do método, como o refinamento da malha, isto é, a quantidade de pontos utilizados para o cálculo. Assim, calculamos as normas para cinco malhas diferentes, indicadas na figura 4.7, e escolhemos o valor máximo de cada uma delas para representar no gráfico. Os resultados obtidos a partir da norma L2 se aproximam da reta

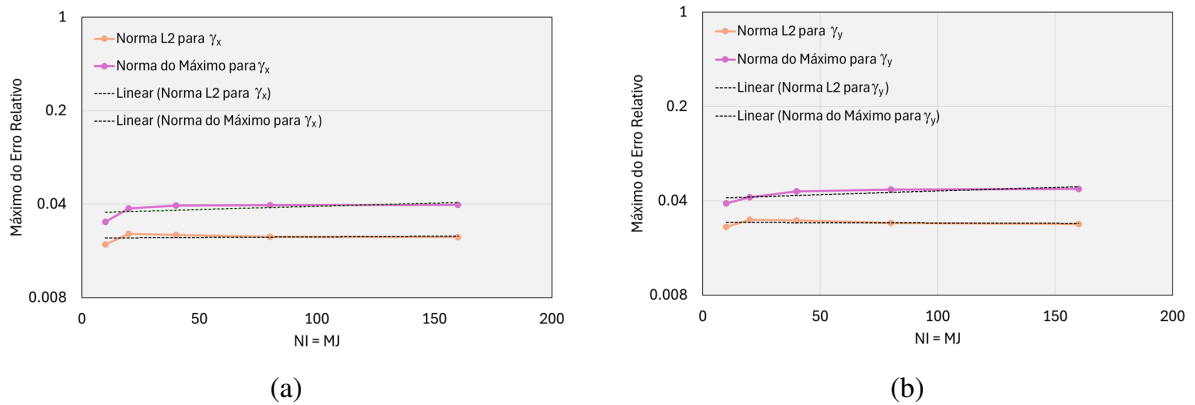
$$E_x = -8 \times 10^{-6}t + 0.0239 \quad (4.38)$$

com $R_x^2 = 0.8156$. O coeficiente angular negativo em (4.38), indica que o erro decai com o refinamento da malha. Para os erros em γ_y , o ajuste mais preciso é com a norma do máximo,

$$E_y = 6 \times 10^{-5}t + 0.0414 \quad (4.39)$$

com $R_y^2 = 0.6158$. Para os valores testados, o refinamento da malha não tem muito impacto no erro relativo obtido. Esse resultado é constatado em outros trabalho, que relacionam a proporção entre a velocidade média e o coeficiente ν , com o impacto do refinamento da malha na solução [18].

Figura 4.7: Erros em relação a malha



Fonte: o autor.

Um outra questão a ser ressaltada, é que a comparação com a solução analítica implica na convergência. Além disso, a convergência e estabilidade do método são garantidos

pelo critério das linhas do método de Gauss Seidel, que foi monitorado na resolução do sistema de equações obtidas na discretização. Durante a simulação, o coeficiente α é calculado como

$$\alpha = |CP| - |CE| - |CW| - |CN| - |CS|. \quad (4.40)$$

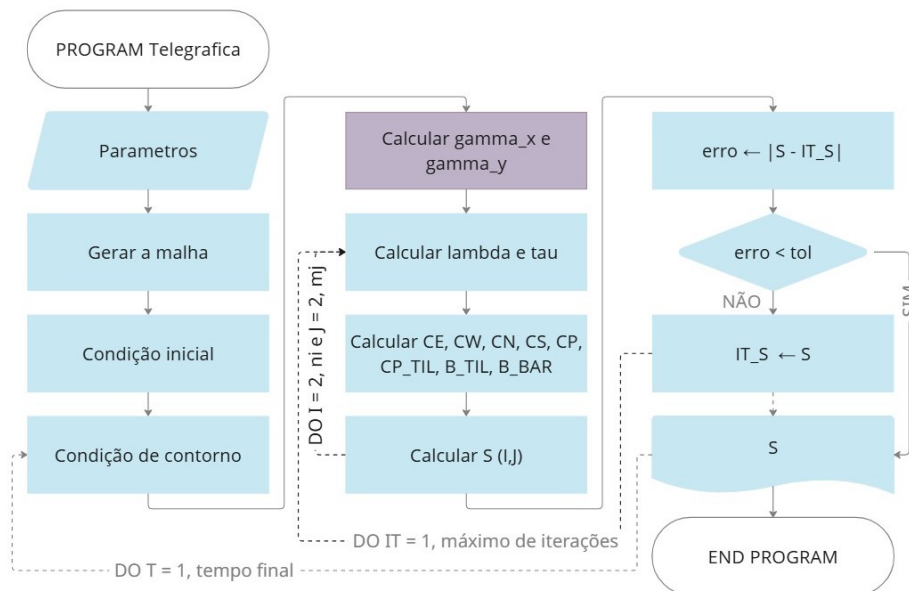
Se resultasse em $\alpha < 0$, o critério não seria atendido e o programa retornaria um aviso de não garantia da convergência. Em todas as simulações realizadas, isto não aconteceu, o que corrobora com todo o processo de validação descrito até aqui nessa seção.

4.5 RESULTADOS

4.5.1 Acoplamento parcial das equações Telegráfica e de Burgers

Para acoplar o modelo da velocidade na equação telegráfica, precisamos realizar uma pequena alteração na estrutura da implementação computacional do modelo. Em específico, a localização da sub-rotina que calcula γ_x e γ_y mudou no código. Anteriormente, ela estava localizada junto à sub-rotina que calcula a densidade, como no fluxograma da figura 3.11. Porém, isso fazia com que a solução da equação de Burgers estivesse dentro do laço iterativo da solução da equação telegráfica. Desde modo, o programa funcionaria, mas poderia realizar iterações desnecessárias, que o deixaria mais lento. Agora, calculamos todos os valores da velocidade antes de calcular a densidade, o que é repetido para cada tempo.

Figura 4.8: Fluxograma da implementação da equação telegráfica com γ_x e γ_y variável.



Fonte: o autor.

Com o novo código computacional, a velocidade de movimentação dos invasores no espaço é obtida por meio da equação de Burgers, que é aplicada junto à equação

telegráfica

$$\tau \frac{\partial^2 S}{\partial t^2} + \frac{\partial S}{\partial t} \left[1 - \tau \frac{dF(S)}{dS} \right] = D_x \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 S}{\partial y^2} + F(S). \quad (4.41)$$

Para o termo fonte, usamos o modelo logístico com $k_1 = 3$ e $k_2 = 1$. Consideramos as condições iniciais

$$\begin{aligned} S(x, y, 0) &= \pi, & \text{tal que } (x, y) &\in [1.2545, 1.8870] \times [1.2545, 1.8870] \\ \frac{\partial S}{\partial t}(x, y, 0) &= 0, & \text{tal que } (x, y) &\in [0, \pi] \times [0, \pi] \end{aligned} \quad (4.42)$$

e as condições de contorno

$$S(0, y, t) = 0 \quad S(\pi, y, t) = 0 \quad (4.43)$$

$$S(x, 0, t) = 0 \quad S(x, \pi, t) = 0 \quad (4.44)$$

para $(x, y) \in [0, \pi] \times [0, \pi]$ e $t \geq 0$. O termo de retardo τ é dado por

$$\tau = \frac{1}{2\lambda} \quad \text{e} \quad \lambda = \frac{|V_s|}{S_*} \quad (4.45)$$

e os coeficientes de difusão $D_x = \frac{\gamma_x^2}{\tau}$ e $D_y = \frac{\gamma_y^2}{\tau}$. As velocidades, nos coeficientes de difusão são calculados por meio das equações:

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} \gamma_x + \frac{\partial}{\partial x} \gamma_x \gamma_x + \frac{\partial}{\partial y} \gamma_y \gamma_x = \nu \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \gamma_x + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \gamma_x \right) \\ \frac{\partial}{\partial t} \gamma_y + \frac{\partial}{\partial x} \gamma_x \gamma_y + \frac{\partial}{\partial y} \gamma_y \gamma_y = \nu \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \gamma_y + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \gamma_y \right) \end{cases} \quad (4.46)$$

com $\nu = 0.01$. Consideramos a condição inicial do tipo pulso

$$\gamma_x(x, y, 0) = C, \quad \text{tal que } (x, y) \in [1.2545, 1.8870] \times [1.2545, 1.8870] \quad (4.47)$$

$$\gamma_y(x, y, 0) = C, \quad \text{tal que } (x, y) \in [1.2545, 1.8870] \times [1.2545, 1.8870]$$

tal que o valor de C varia a cada teste. As condições de contorno são

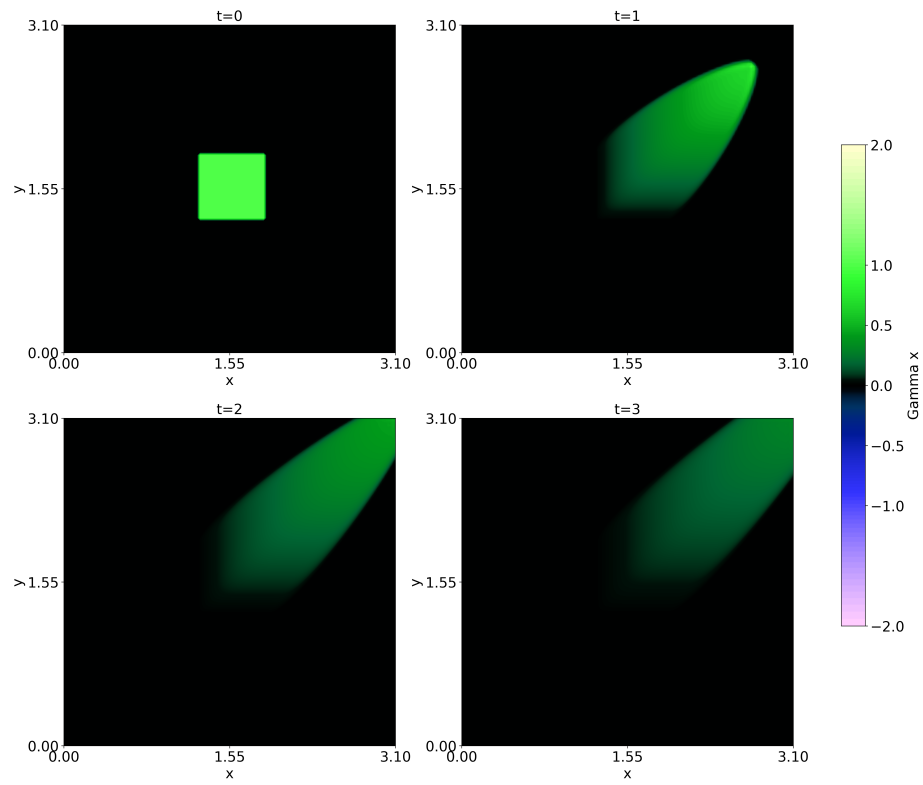
$$\gamma_x(0, y, t) = \gamma_y(0, y, t) = 0, \quad \gamma_x(\pi, y, t) = \gamma_y(\pi, y, t) = 0, \quad (4.48)$$

$$\gamma_x(x, 0, t) = \gamma_y(x, 0, t) = 0, \quad \gamma_x(x, \pi, t) = \gamma_y(x, \pi, t) = 0. \quad (4.49)$$

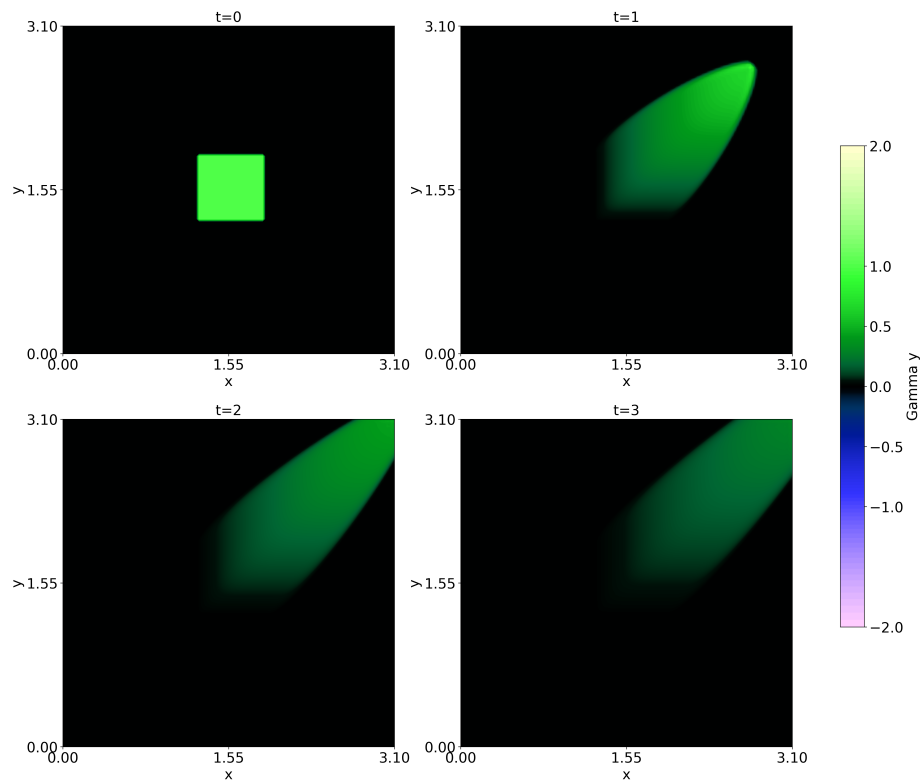
Na figura 4.9a temos a solução para γ_x utilizando a nova modelagem nos tempos $t = 0, 1, 2, 3$. Consideramos $\gamma_x = \gamma_y = 1$ como condição inicial do tipo pulso, a solução nos tempos posteri-

ores será determinada pela equação de Burgers.

Figura 4.9: Solução numérica de γ_x e γ_y variáveis



(a) Solução γ_x

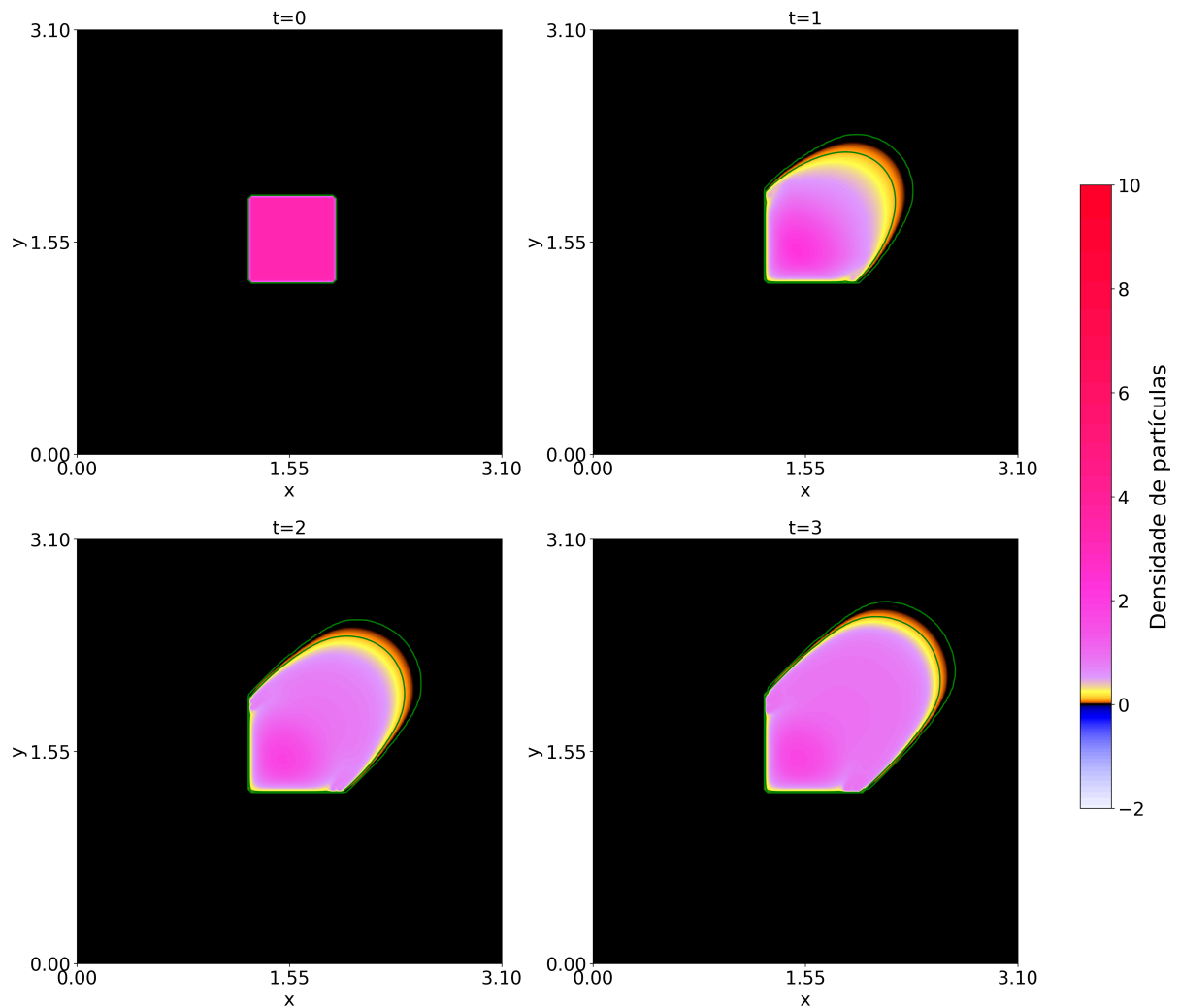


(b) Solução γ_y

Fonte: o autor.

Os resultados para γ_y na figura 4.9b são similares, o que é esperado, visto que os dois valores são calculados de modo análogo, utilizando condições iniciais que, neste caso, também são equivalentes. Assim, γ_x e γ_y estão se difundindo pelo domínio e há uma pequena dissipação. Esse efeito também é refletido na densidade, como observamos na figura 4.10.

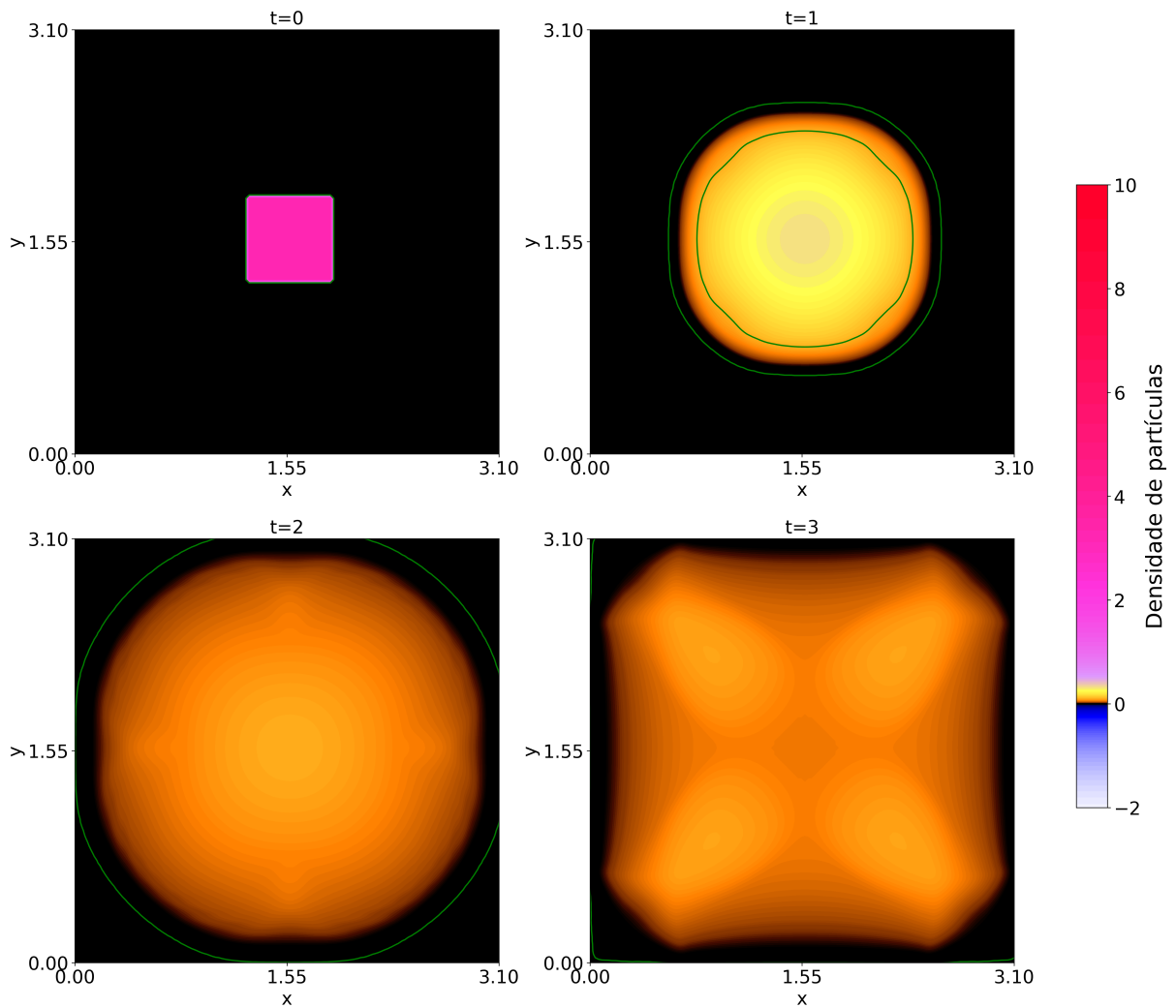
Figura 4.10: Densidade com γ_x e γ_y variável



Fonte: o autor.

Para comparação, utilizando os mesmos parâmetros e apenas consideramos $\gamma_x = 1$ e $\gamma_y = 1$ constantes em todo tempo, a evolução da densidade de invasores se comporta como na figura 4.11, que são como os resultados da equação telegráfica que apresentamos anteriormente na figura 3.17

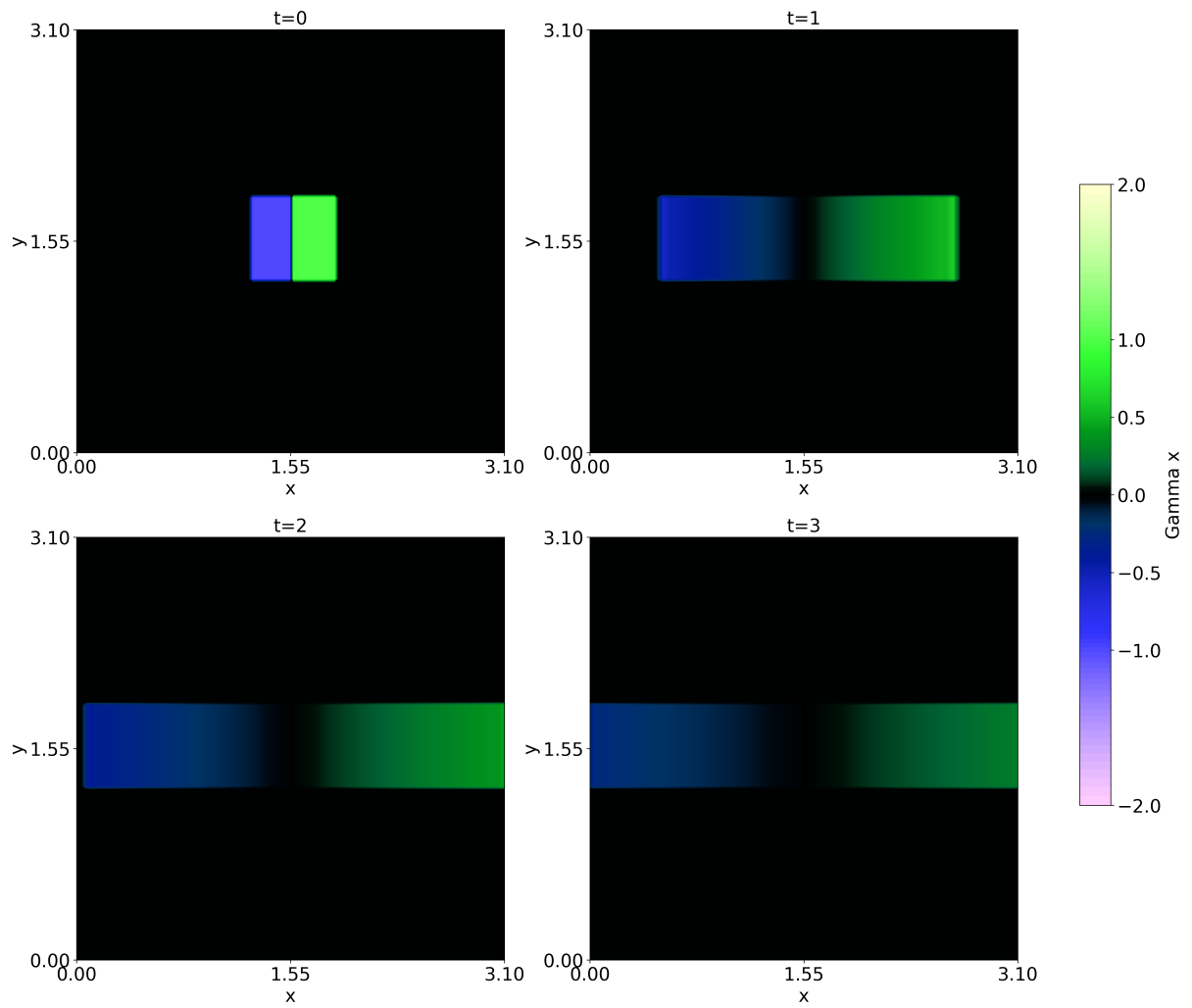
Figura 4.11: Densidade com γ_x e γ_y constante.



Fonte: o autor.

Por meio de diferentes testes, notamos que a condição inicial altera como γ_x e γ_y se movem pelo domínio. Na figura 4.9a, por exemplo, utilizamos $\gamma_x = \gamma_y = 1$ como condição inicial, o que resulta em um movimento para o canto superior direito do domínio. Se quisermos que ela se mova para o sentido oposto, chegando ao canto inferior esquerdo, teríamos que utilizar a condição inicial $\gamma_x = \gamma_y = -1$. Para entender melhor como isso ocorre, separamos a condição inicial de γ_x em duas partes iguais, sendo que a metade da direita recebe o valor inicial $\gamma_x = 1$ e a da esquerda $\gamma_x = -1$. Além disso, definimos $\gamma_y = 0$ para todo o domínio. A equação de Burgers foi então utilizada para calcular a solução de γ_x e γ_y nos próximos tempos. O resultado, na figura 4.12, é uma movimentação na horizontal, já que não há nenhuma influência de γ_y para causar alguma alteração na vertical.

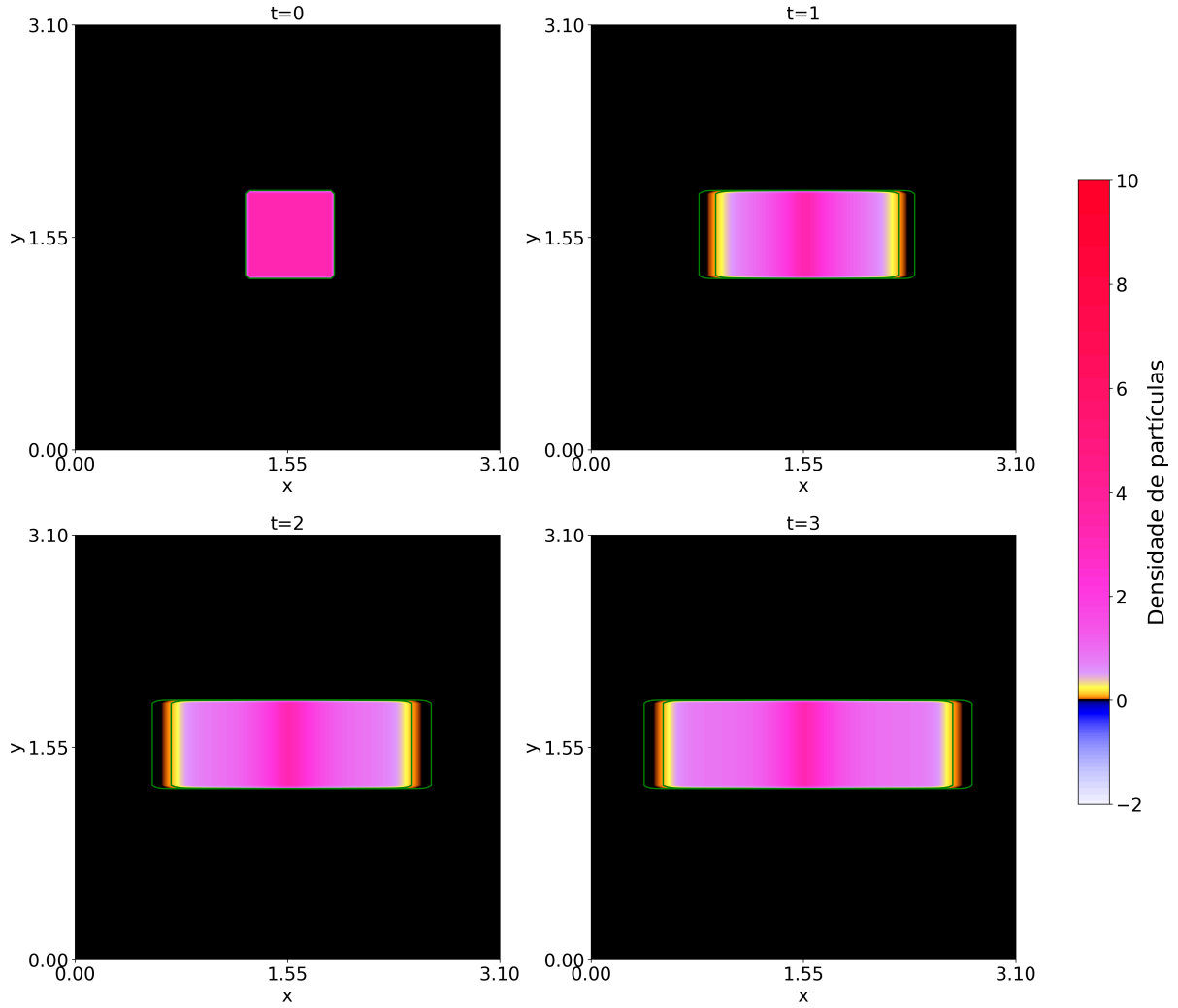
Figura 4.12: Solução para γ_x com $\gamma_y = 0$.



Fonte: o autor.

Aplicando essa solução da velocidade na equação telegráfica, obtemos uma invasão direcionada na horizontal e visivelmente com pouca dissipação, na figura 4.13.

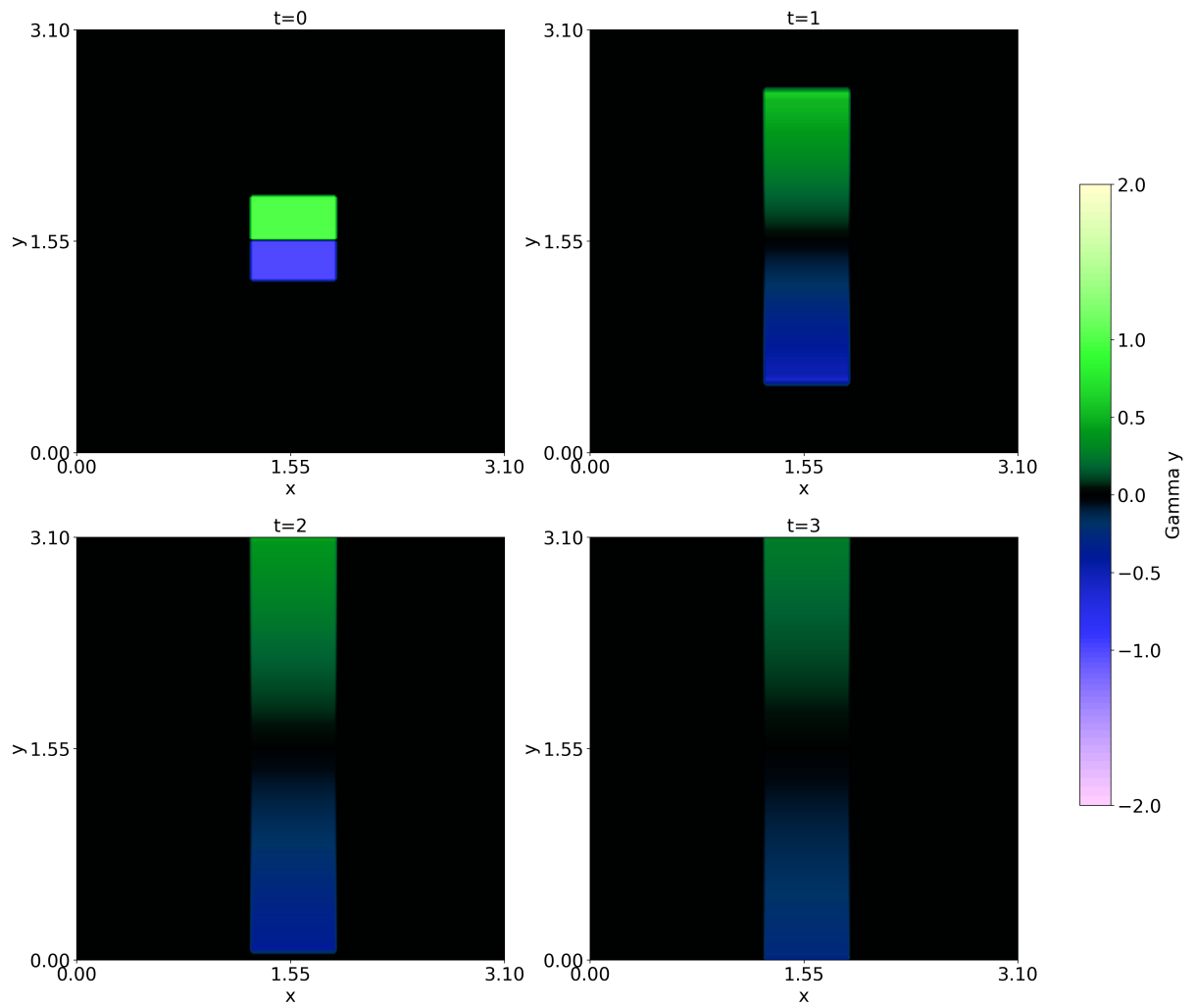
Figura 4.13: Solução para densidade com $\gamma_y = 0$.



Fonte: o autor.

De modo análogo, em outro teste, consideramos um domínio dividido em uma parte superior com $\gamma_y = 1$ e uma inferior com $\gamma_y = -1$, tal que $\gamma_x = 0$ em todo domínio. A equação de Burgers também foi utilizada para calcular a solução nos próximos tempos, obtendo os resultados da figura 4.14. Dessa vez, a movimentação é no sentido do eixo y , na vertical.

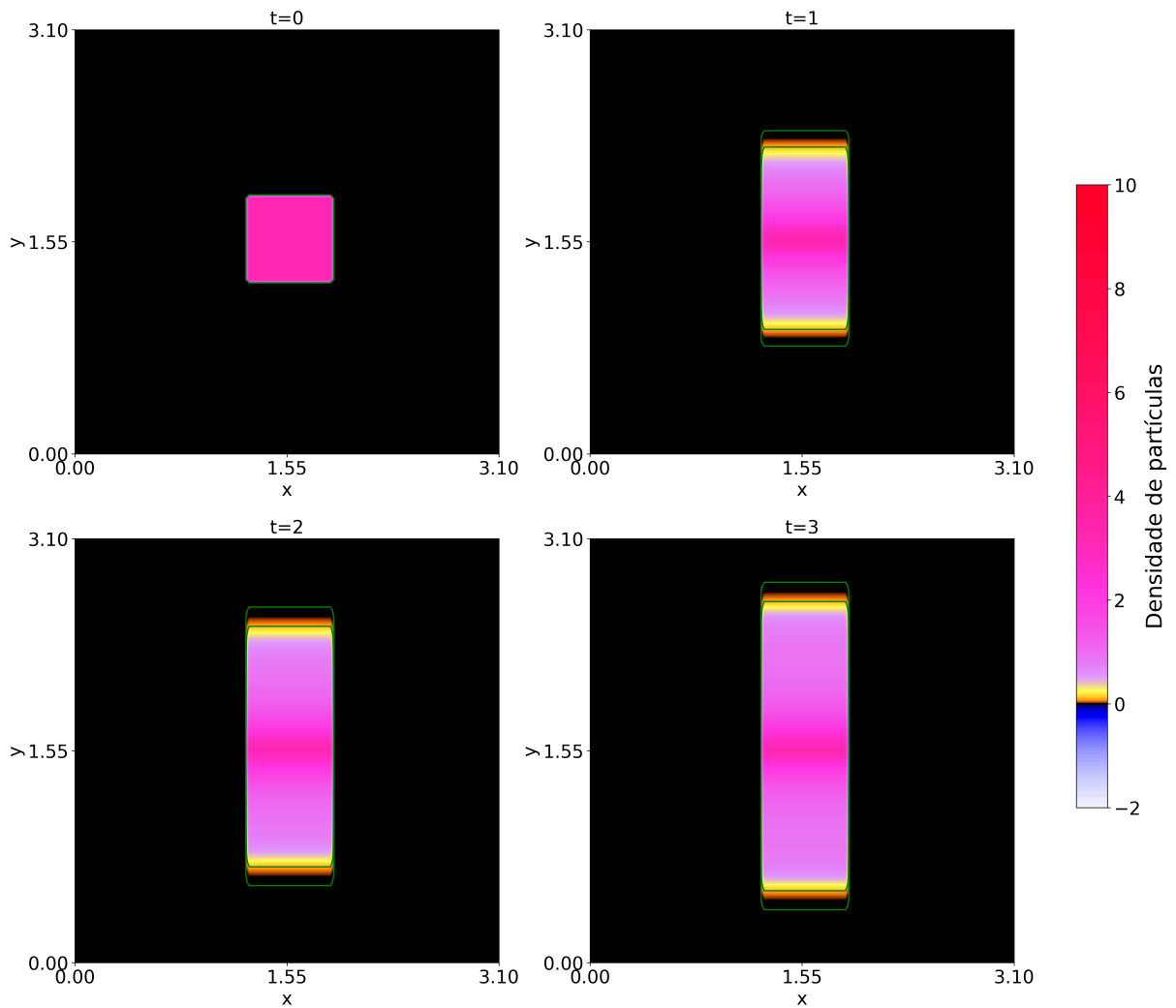
Figura 4.14: Solução para γ_y com $\gamma_x = 0$.



Fonte: o autor.

Novamente, a solução da equação telegráfica indica uma invasão direcionada e visivelmente com pouca dissipação na figura 4.15, com movimentação apenas no eixo vertical.

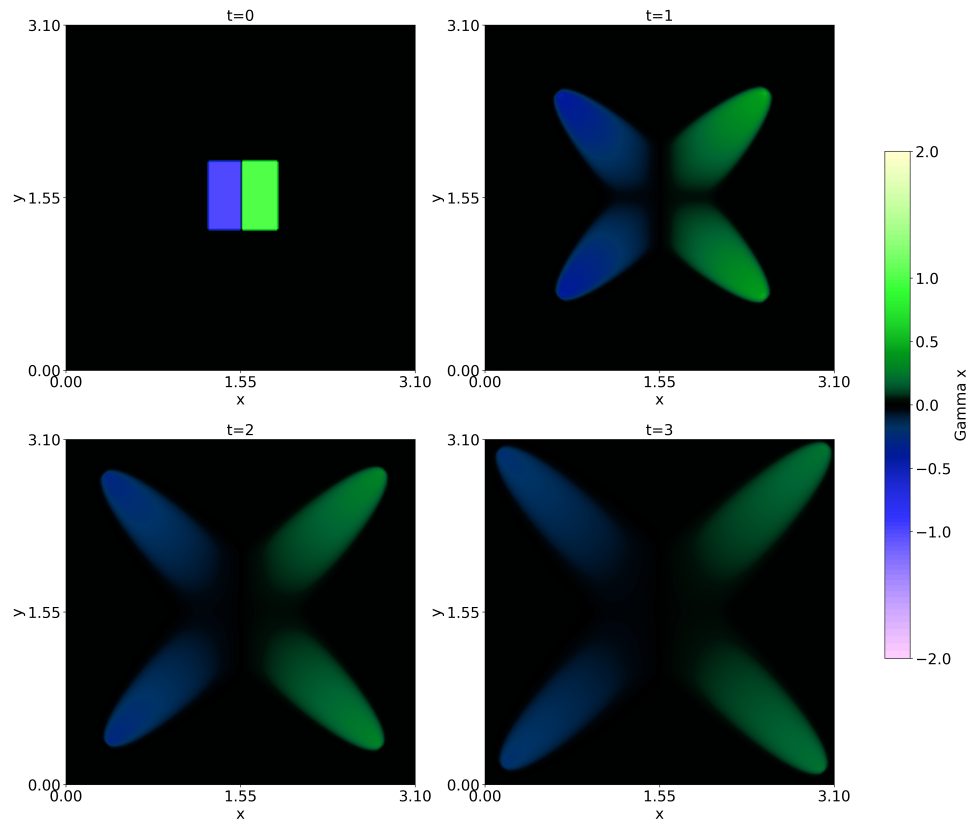
Figura 4.15: Solução para densidade com $\gamma_x = 0$.



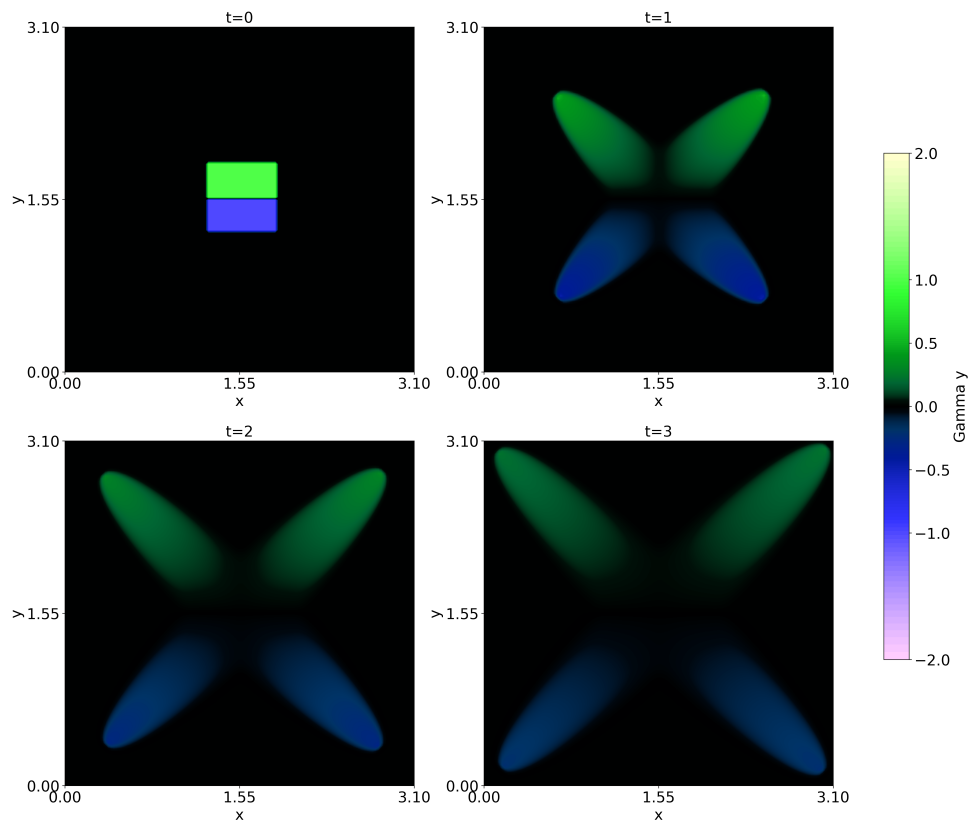
Fonte: o autor.

Por fim, temos a união os dois casos, simulando uma situação onde a γ_x e γ_y estão concentrados no centro do domínio, onde está a maior densidade de invasores, e se espalham para as região menos densas. Essa situação, representada na figura 4.16a, ainda é uma simplificação, visto que é necessário mais divisões do domínio para obter uma movimentação mais uniforme utilizando os mesmos parâmetros.

Figura 4.16: Solução para γ_x e γ_y com condição inicial fragmentada.



(a) Solução γ_x

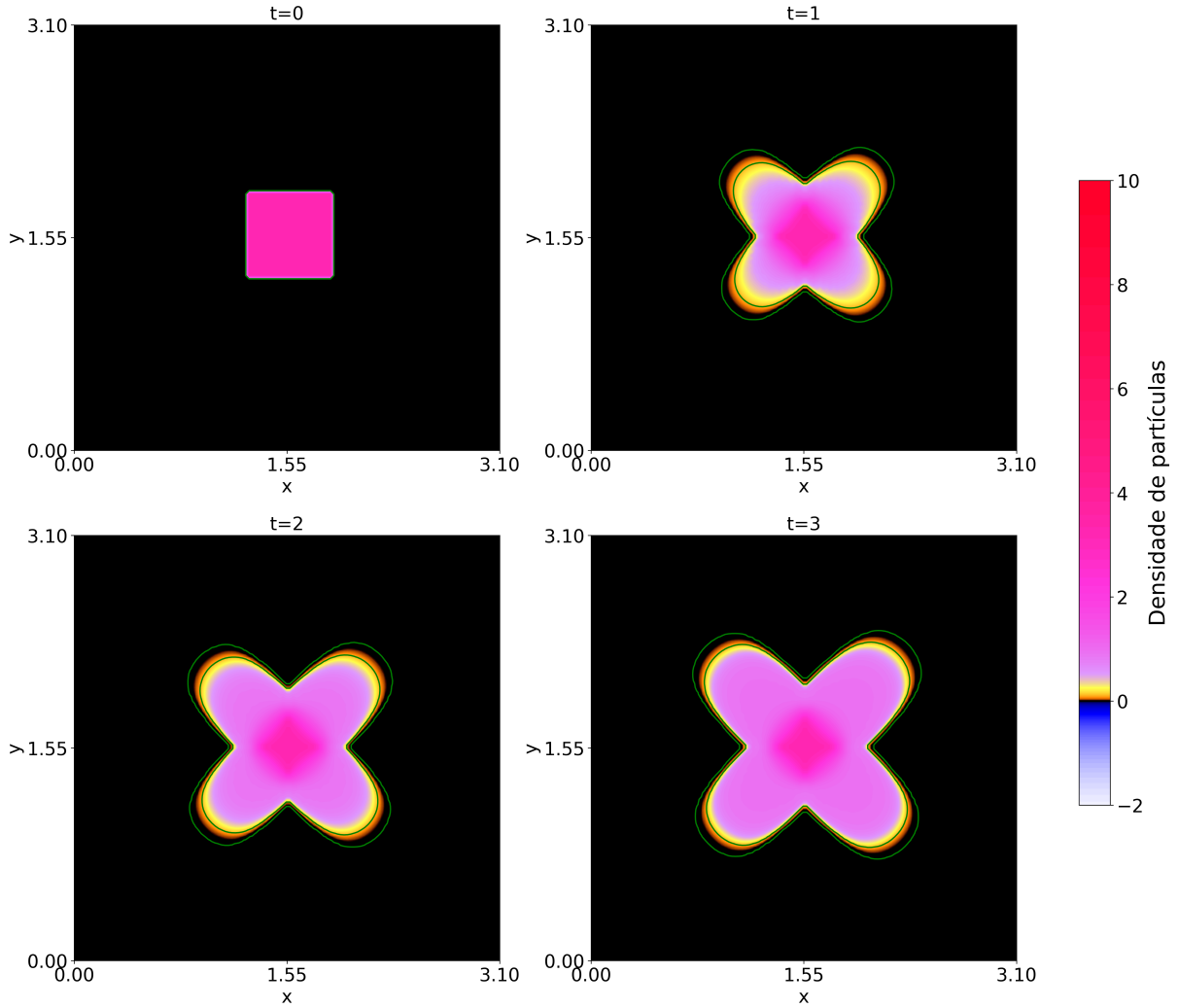


(b) Solução γ_y

Fonte: o autor.

Aplicando essas condições na equação telegráfica, o gráfico da densidade será como o da figura 4.17. Novamente, os invasores, representados pela sua densidade, seguiram um trajeto similar ao mapa da velocidade da figura 4.16.

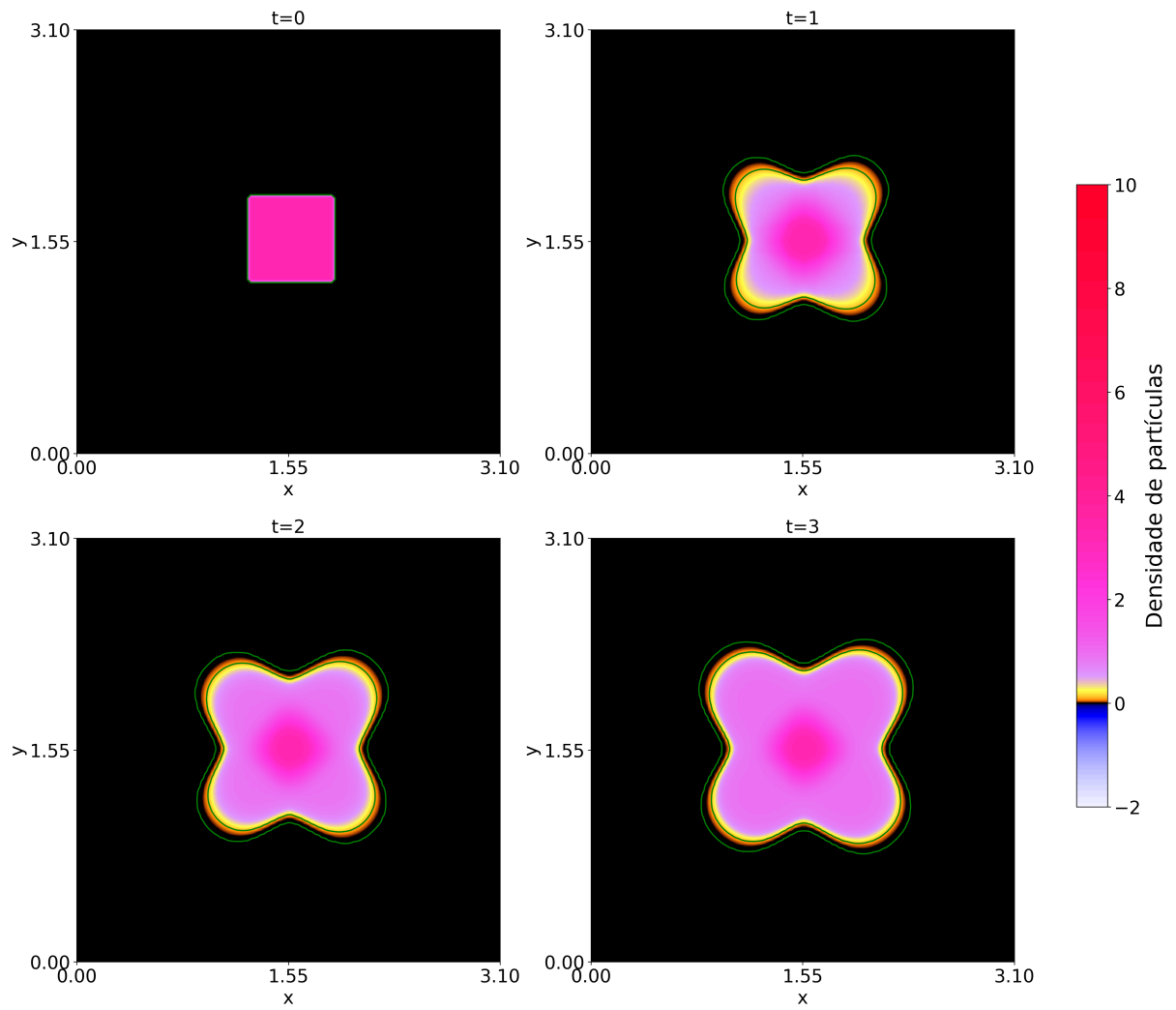
Figura 4.17: Densidade com γ_x e γ_y variável e condições iniciais fragmentadas.



Fonte: o autor.

Outro aspecto dessa solução que pode ser alterado por meio da modelagem de γ_x e γ_y é a dissipação, alterando o coeficiente ν . Na figura 4.17, utilizamos $\nu = 0.001$. Também realizamos testes utilizando $\nu = 0.01$ na figura 4.18,

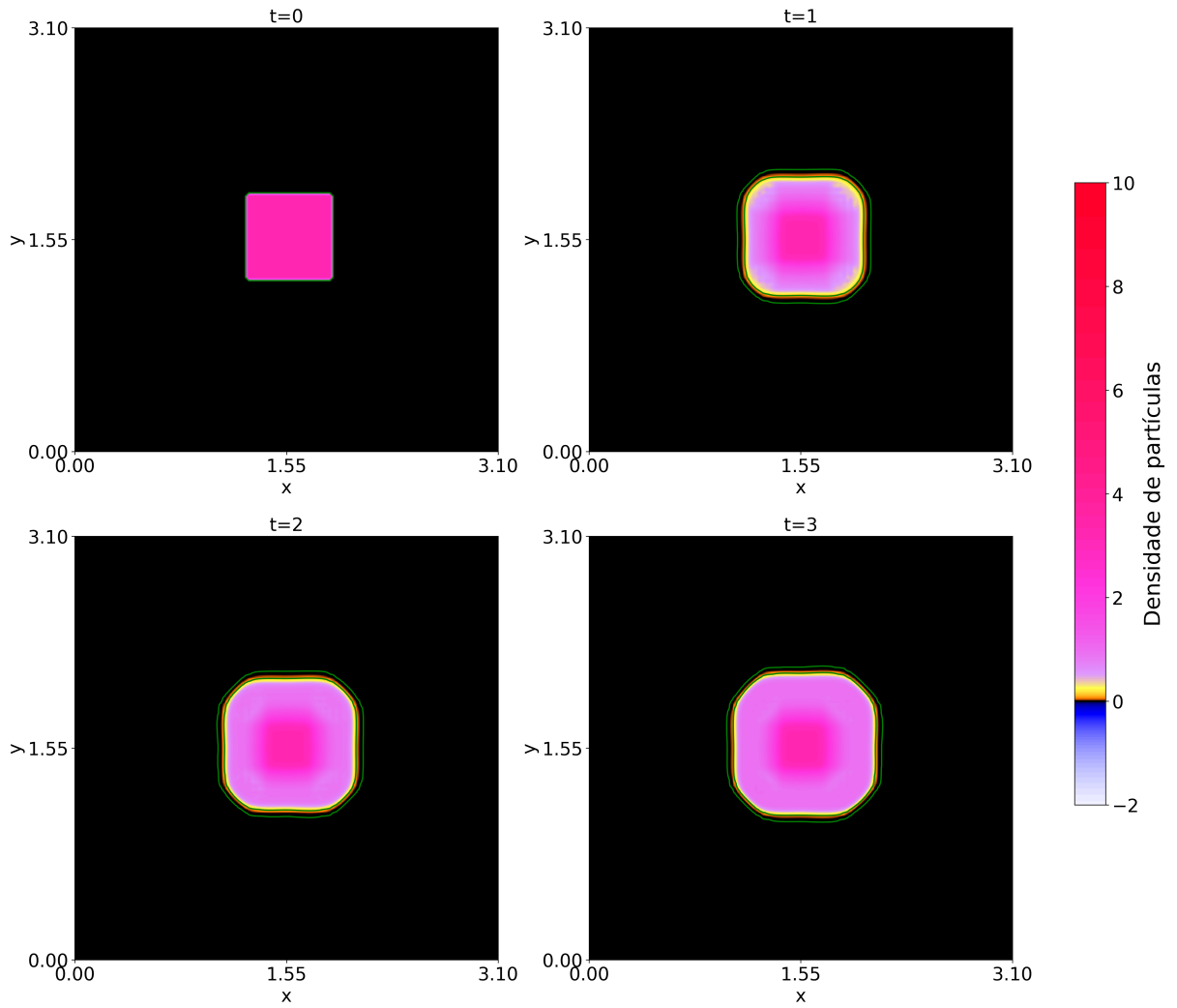
Figura 4.18: Densidade com γ_x e γ_y variável e $\nu = 0.01$.



Fonte: o autor.

e $\nu = 0.1$ na figura 4.19, onde parece haver mais influência da difusão do que da convecção na solução.

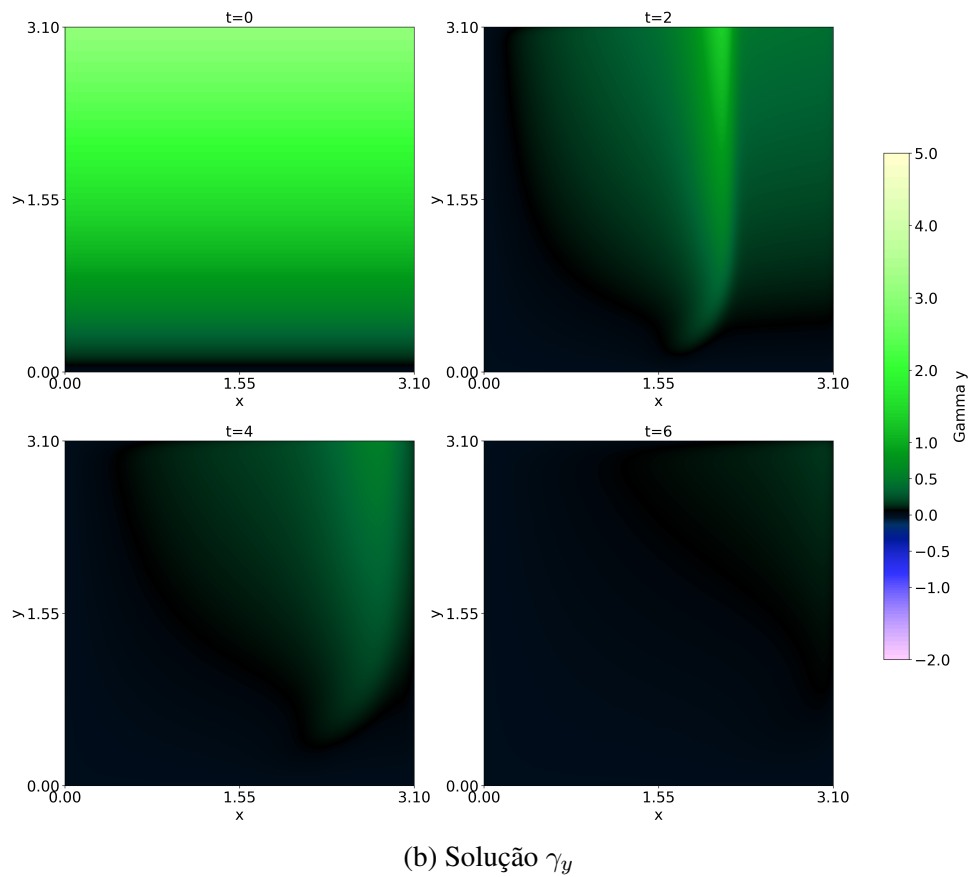
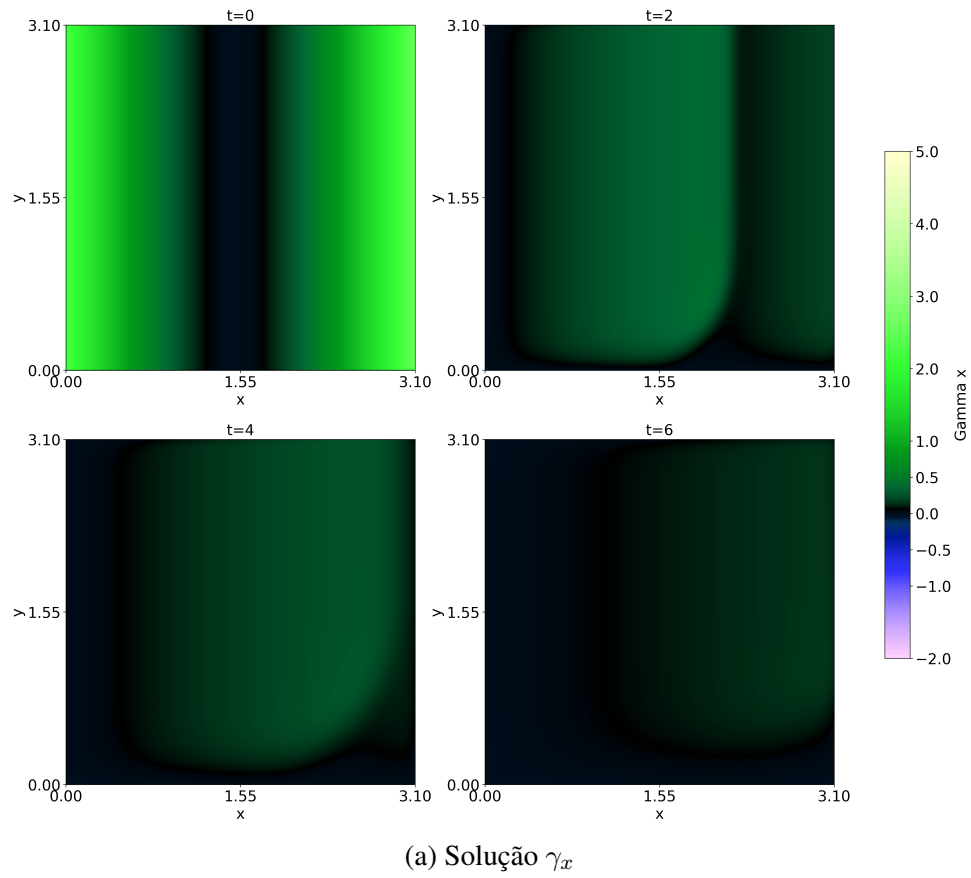
Figura 4.19: Densidade com γ_x e γ_y variável e $\nu = 0.1$



Fonte: o autor.

Até então, a condição inicial foi definida como uma constante. A modelagem da velocidade permite determinar uma função como condição inicial. Assim, consideramos que no tempo $t = 0$, $\gamma_x(x, y, 0) = (x - 1.5)^2$ e $\gamma_y(x, y, 0) = y$, a solução da equação de Burgers resulta no comportamento indicado nas figuras 4.20a e 4.20b.

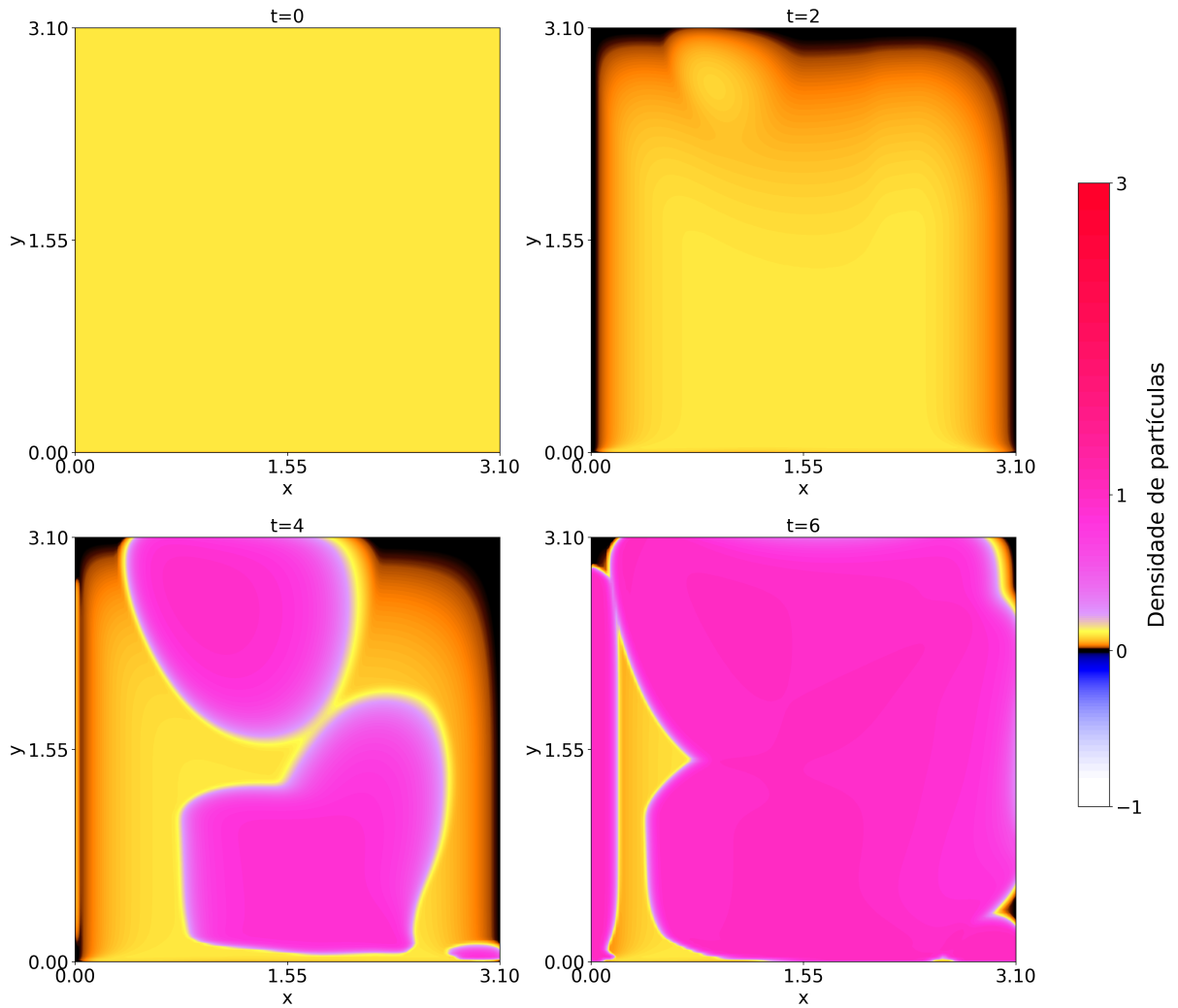
Figura 4.20: Solução para a velocidade com condição iniciais variável



Fonte: o autor.

Esse comportamento induz a variação da densidade como na figura 4.21. Nesse teste, a dinâmica de invasão é substancialmente mais complexa. Isso é devido a adicionarmos um termo não linear em γ_x

Figura 4.21: Densidade com condição inicial variável

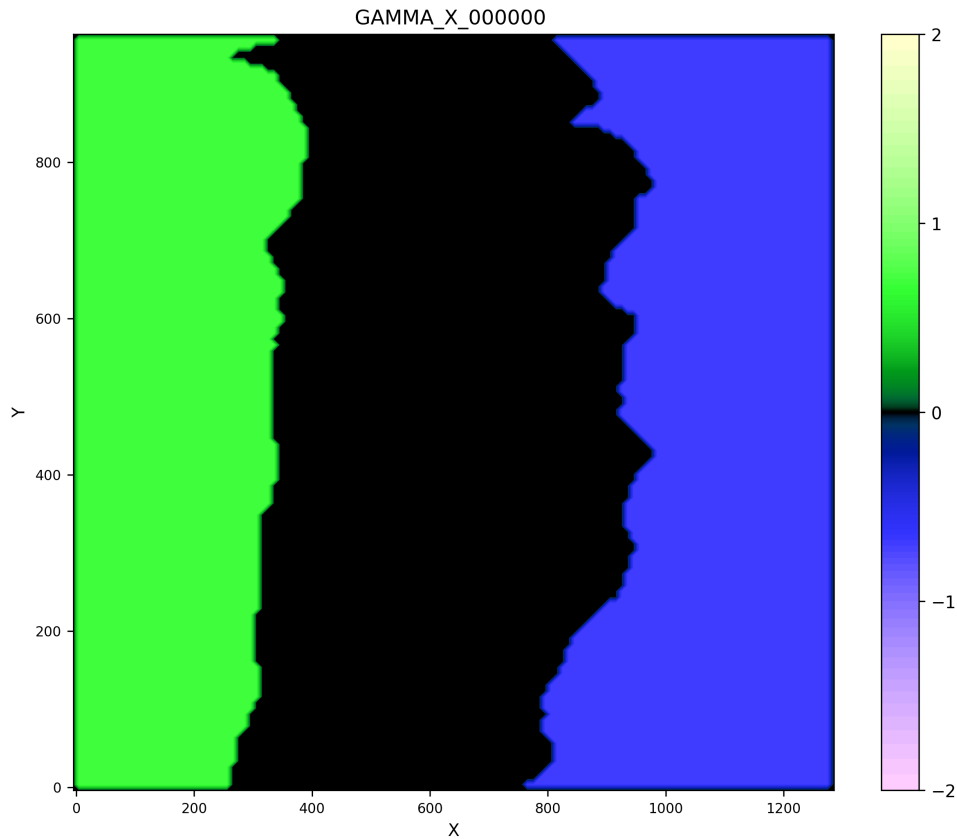


Fonte: o autor.

4.5.2 Simulação de um ensaio de ranhura

Para simular um ensaio de ranhura, realizamos um teste utilizando condição inicial modelada por curvas *Spline*, ver figura 4.22, similar ao que se observa no experimento apresentado anteriormente na figura 3.7. Como verificado em testes anteriores, nas figuras 4.12 e 4.14, o componente da velocidade γ_x induz a movimentação horizontal e γ_y induz a movimentação vertical. No caso do ensaio de ranhura, é esperado que as células se movam à cobertura da ferida.

Figura 4.22: Condição inicial γ_X com domínio do tipo *spline*.



Fonte: o autor.

Os valores utilizados na condição inicial estão na tabela 4.1, nos tempos seguintes, a densidade e a velocidades são calculados utilizando os modelos desenvolvidos a partir da Equação Telegráfica e de Burgers.

Tabela 4.1: Condições iniciais da simulação do ensaio de ranhura

Variável	Tipo	Valor
Velocidade γ_x	Spline	0.7 [$\mu m/min$]
Velocidade γ_y	Spline	0.0001 [$\mu m/min$]
Densidade S	Spline	0.1 [μm^{-2}]
Densidade S'	Cheio	0

Alguns dos parâmetros gerais na tabela 4.2 também condizem com as unidades de medida esperadas neste tipo de experimento [21]. Ainda é necessário determinar quais seriam os parâmetros do termo fonte, que depende do tipo de célula utilizada no experimento e a utilização de controles populacionais. Nesse caso, escolhemos utilizar o modelo logístico, com os parâmetros indicados na tabela 4.2. Assim, a população cresce rapidamente no início da simulação e se estabiliza após algum tempo. Ademais, como pode ser observada na tabela 4.2,

admitimos que γ_x é muitas ordens de grandeza maior do que γ_y . Optamos por esta abordagem para mostrar didaticamente a cobertura da ferida. No entanto, o código está preparado para realizar a simulação em termos mais realísticos. Isso faremos em um trabalho futuro.

Tabela 4.2: Parâmetros da simulação do ensaio de ranhura

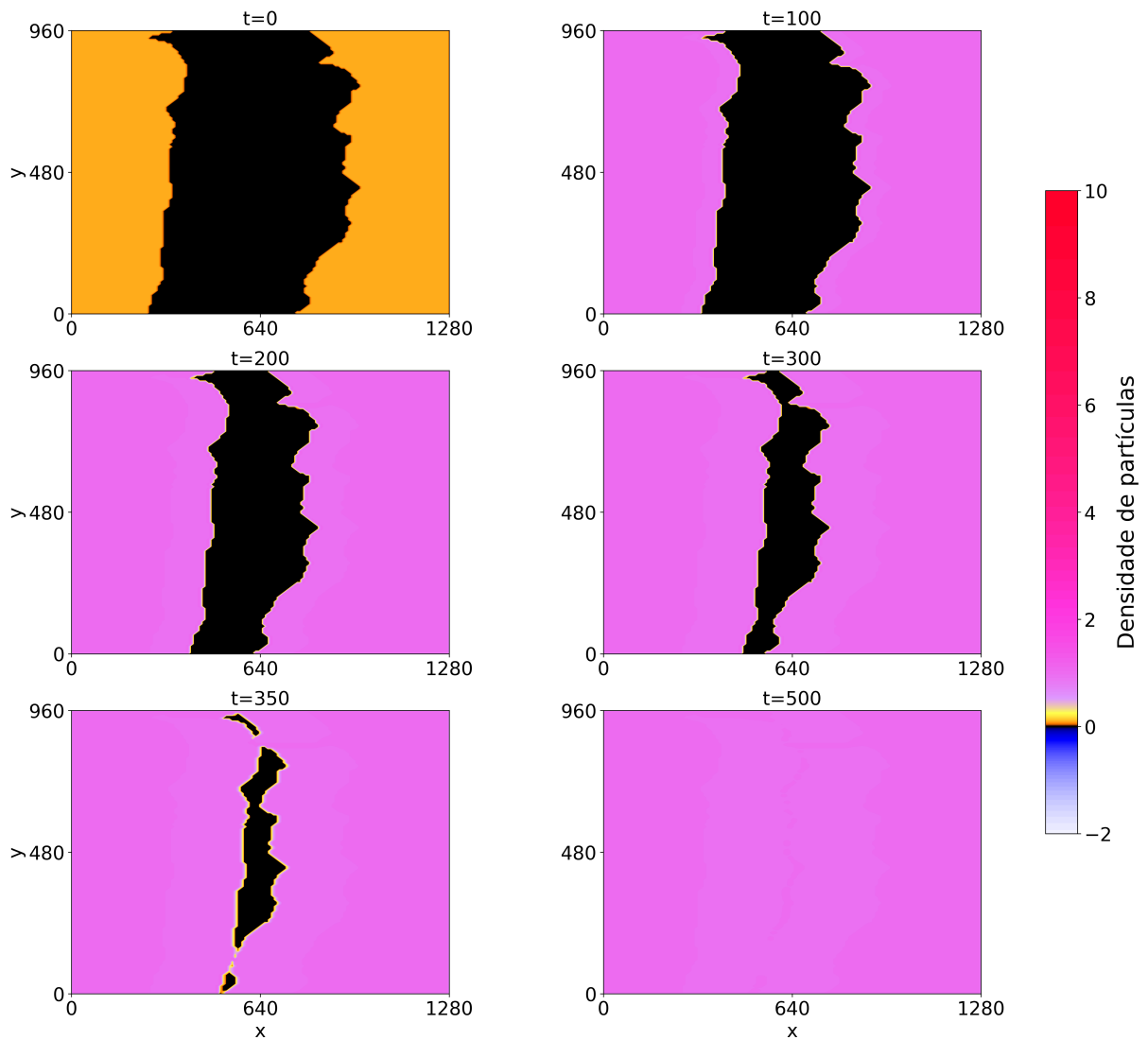
Parâmetro	Símbolo	Valor
Domínio Espacial	Ω	$(0, 1280) \times (0, 960) [\mu m]$
Domínio Temporal		$(0, 500) [min]$
Partições no Eixo x	ni	129
Partições no Eixo y	mj	129
Passo no Tempo	Δ_t	0.0005 [min]
Termo fonte	F(S)	$k_1 = 1.0$ e $k_2 = 1.0$

O modelo da velocidade com a equação de Burgers, introduz dois fenômenos diferentes que induzem à movimentação dos invasores, a convecção e a difusão. A difusão é diretamente proporcional ao coeficiente de difusão ν e está relacionada ao espalhamento da densidade. Já o termo convectivo é responsável pela movimentação mais direcionada. Para entender como cada um desses aspectos influencia na movimentação, realizamos testes para $\nu = 0.001$ e $\nu = 4$.

A modelagem das velocidades, por meio das equações de Burgers, tem essencialmente dois caracteres muito bem definidos, que são: o convectivo e o difusivo. O caráter difusivo está em termos das derivadas espaciais de segunda ordem e o convectivo provém das derivadas espaciais de primeira ordem. Quando a magnitude do termo difusivo prevalece sobre o termo convectivo, dizemos que a equação diferencial está dominante pelo caráter difusivo. Logo, a dinâmica de espalhamento é mais evidente ao longo do tempo. Caso contrário, a dinâmica se estabelece por um direcionamento preferencial, o que é uma ação comum do termo convectivo. Essa questão associada ao caráter da equação diferencial pode ser analisada por meio de um parâmetro ν . Para mostrarmos estas duas possíveis características, realizamos os próximos testes para $\nu = 0.001$ e $\nu = 4.0$, evidenciando os caracteres convectivo e difusivo, respectivamente.

No primeiro teste, com $\nu = 0.001$, a invasão evoluiu conforme a figura 4.23. Note que não há nenhuma alteração notável no contorno da ferida, isto é, os invasores não estão se espalhando para todas as direções. Por outro lado, a *spline* está sendo deslocada no domínio, conforme a condição inicial. Neste caso, observamos uma direção preferencial, a horizontal.

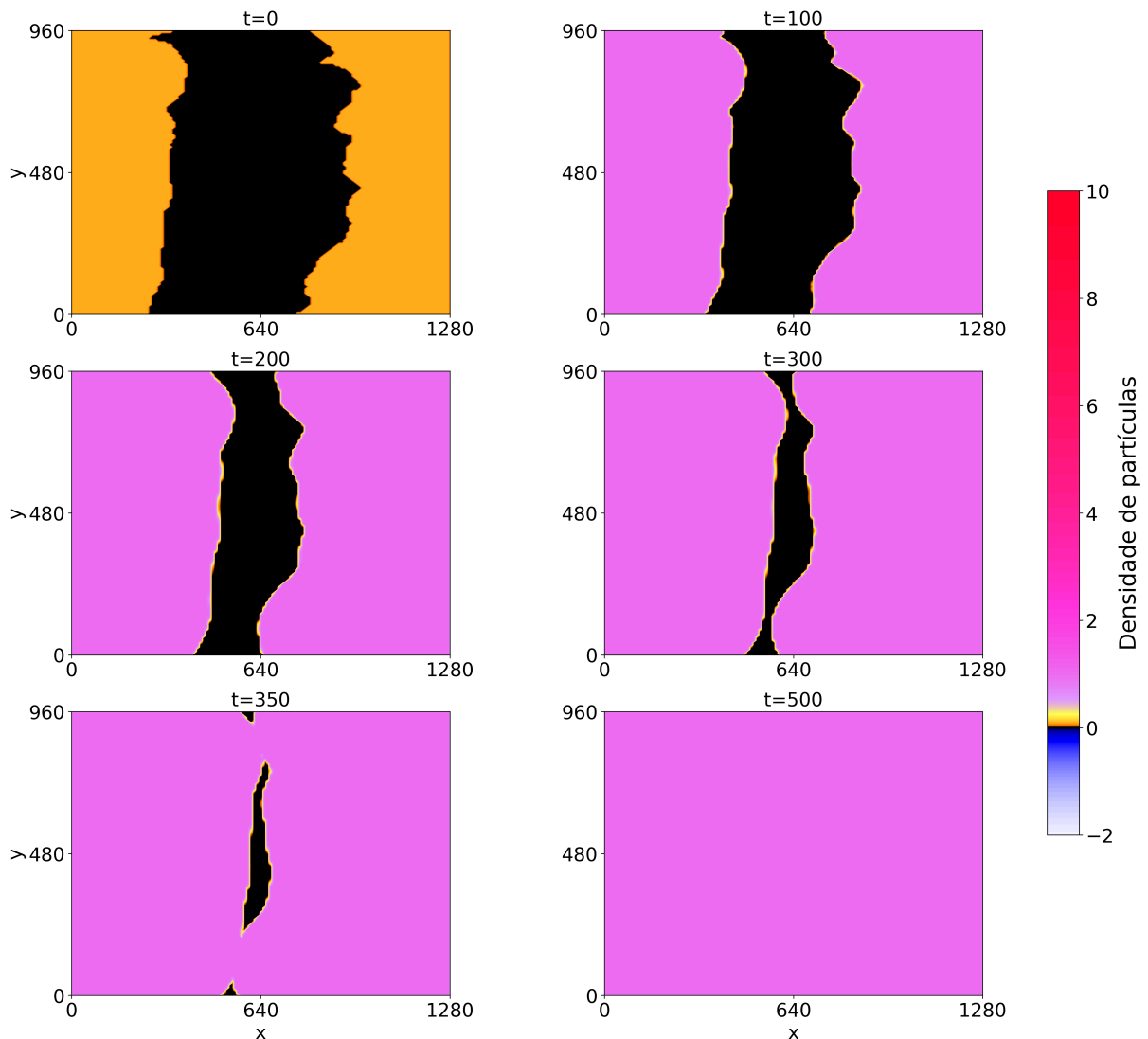
Figura 4.23: Densidade com domínio do tipo *spline* e $\nu = 0.001$.



Fonte: o autor.

No segundo teste, com $\nu = 4$, a invasão evoluiu conforme a figura 4.24. Assim como no primeiro teste, existe uma movimentação no sentido horizontal. No entanto, observe que o desenho da *Spline* se altera para diferentes tempos. Nessa simulação, as *Splines* são mais lisas. Esse fenômeno é decorrente do caráter difusivo, que é dominante.

Figura 4.24: Densidade com domínio do tipo *spline* e $\nu = 4$.



Fonte: o autor.

Assim, quando ν é pequeno, a movimentação é direcionada e com pouco espalhamento como na imagem 4.23. Por outro lado, quando ν é suficientemente grande, a movimentação é menos direcionada e o espalhamento é mais expressivo. Esses exemplos representam duas dinâmicas diferentes de como poderia ocorrer uma invasão biológica. O primeiro pode indicar uma movimentação com um objetivo específico, como a busca por algum recurso ou uma movimentação em longa distância. Já o segundo exemplo, representa um espalhamento em toda a região. Evidentemente, em situações realistas, os caracteres competem ao longo do tempo e a modelagem é muito mais complexa. O valor de ν não é uma simples constante, mas possivelmente uma função não linear, ou até mesmo modelado por outra equação diferencial parcial.

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Como afirmamos anteriormente, modelos matemáticos estão sempre sendo aprimorados. A implementação da equação de Burgers na velocidade traz um aprimoramento ao modelo, adicionando a possibilidade de direcionar a movimentação, que nos permite simular situações mais complexas.

Evidentemente, o método FOU, que é um esquema de primeira ordem, por ser dissipativo, suaviza a solução numérica em regiões próximas a descontinuidades. No entanto, como pode ser visualizado nos resultados apresentados na seção 4.4, a comparação entre as soluções numéricas e analítica resultou valores na norma L2 e Máximo não proibitivos no contexto de simulação. Porém, isto pode ser parcialmente remediado a partir da implementação de esquemas de ordem superior nos termos convectivos, tais como: WACEB, CUBISTA, ADBQUICKEST, entre outros [8].

Outro fato, é que com a implementação de equações para velocidade das partículas observamos que as simulações, decorrentes de condições auxiliares, apresentadas na seção 4.5, são consistentes com a Física. Ademais, é possível perceber que a velocidade interfere fortemente na dinâmica (ou seja, na variação da densidade) registrando claramente um caminho preferencial de invasão. Isso é mais realístico. Outra possibilidade é aprimorar o modelo para três dimensões, assim, podendo comparar com experimentos reais. Assim, a Modelagem Matemática, Numérica e Computacional apresentadas no presente trabalho podem ser estendidas. Para futuros trabalho, pretendemos caminhar nesta direção.

REFERÊNCIAS

- [1] ALHARBI, W., AND PETROVSKII, S. V. Critical domain problem for the reaction–telegraph equation model of population dynamics. *Mathematics* 6 (2018). [Acesso em: 08 julho 2025].
- [2] ALMEIDA, V. M., JR., M. A. B., NASCIMENTO, J. C., AND AMORIM, L. M. F. Anti-cancer drug screening: standardization of in vitro wound healing assay. *Jornal Brasileiro de Patologia e Medicina Laboratorial* 55, 6 (2019), 148–149. [Acesso em: 08 julho 2025].
- [3] AMIR, A. K. Analyzing numerical methods for solving telegraph partial differential equations: A comprehensive literature review on difference scheme approaches. *SSRN Electronic Journal* (01 2023). [Acesso em: 08 julho 2025].
- [4] BONIFÁCIO, E. D. Modelagem computacional de cultura de células tumorais em dispositivos de microfluídica, 2023. [Acesso em: 08 julho 2025].
- [5] CIRILO, E. R., PETROVSKII, S. V., 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), 1–25. [Acesso em: 08 julho 2025].
- [6] DE GODOI, P. H. V. Modelagem matemática da invasão biológica bidimensional via equação telegráfica, 2021. [Acesso em: 08 julho 2025].
- [7] DE OLIVEIRA JUNIOR, V., AND DE SOUZA CHAVES, J. Modelos básicos de dinâmica populacional na propagação de epidemias. *Multidebates* 7, 1 (2023), 91–98. [Acesso em: 08 julho 2025].
- [8] FERREIRA, V. G., DE LIMA, G. A. B., CORRÊA, L., CANDEZANO, M. A. C., CIRILO, E. R., NATTI, P. L., AND ROMEIRO, N. M. L. Avaliação computacional de esquemas convectivos em problemas de dinâmica dos fluidos. *Semina: Ciências Exatas e Tecnológicas* 33, 2 (2012), 107–116. [Acesso em: 08 julho 2025].
- [9] FORTUNA, A. O. *Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos*. EDUSP, 2020.
- [10] GRADA, A., OTERO-VINAS, M., PRIETO-CASTRILLO, F., AND OBAGI, Z. Research techniques made simple: Analysis of collective cell migration using the wound healing assay. *Journal of Investigative Dermatology* (2017). [Acesso em: 08 julho 2025].
- [11] HA, T., LIN, P., AND CHO, Y.-S. Generation of 3d regular and irregular waves using navier–stokes equations model with an internal wave maker. *Coastal Engineering* 76 (2013), 55–67. [Acesso em: 08 julho 2025].

- [12] KONDO, S., AND MIURA, T. Reaction-diffusion model as a framework for understanding biological pattern formation. *science* 329, 5999 (2010), 1616–1620. [Acesso em: 08 julho 2025].
- [13] LEWIS, M. A., PETROVSKII, S. V., AND POTTS, J. R. *The Mathematics Behind Biological Invasions*, vol. 44. 2016.
- [14] LIMA, E. L. *Análise real*, vol. 2. Impa Rio de Janeiro, 2004.
- [15] MAGALHÃES, R. C. Estudo das condições de convergência dos métodos iterativos de gauss-jacobi e gauss-seidel. Relatório técnico, Universidade Federal Rural do Semi-Árido, 2020. Acessado em: 8 jul. 2025.
- [16] MEDEIROS, C. B. Soluções das equações de burgers 1d e 2d via: upwind de alta ordem e hopf-cole, 2013. [Acesso em: 08 julho 2025].
- [17] ORLANDI, P. *Fluid flow phenomena: a numerical toolkit*, vol. 55. Springer Science & Business Media, 2000.
- [18] RODRIGUES, G. S. Desempenho de esquema de discretização em volumes finitos na equação de transporte advectiva-difusiva, 2019. [Acesso em: 08 julho 2025].
- [19] RUGGIERO, M. A. G., AND LOPES, V. L. R. *Cálculo Numérico: Aspectos Teóricos e Computacionais*. Pearson Universidades, 2000.
- [20] SEGEL, A. L., AND EDELSTEIN-KESHET, L. *A Primer on Mathematical Models in Biology*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2013.
- [21] TLILI, S., GAUQUELIN, E., LI, B., CARDOSO, O., LADOUX, B., DELANOË-AYARI, H., AND GRANER, F. Collective cell migration without proliferation: density determines cell velocity and wave velocity. *Royal Society open science* 5, 5 (2018), 172421. [Acesso em: 08 julho 2025].
- [22] VOLPERT, V., AND PETROVSKII, S. Reaction-diffusion waves in biology. *Physics of life reviews* 6, 4 (2009), 267–310. [Acesso em: 08 julho 2025].
- [23] ZAUDERER, E. *Partial differential equations of applied mathematics*. John Wiley & Sons, 2011.