



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
INSTITUTO DE MATEMÁTICA, ESTATÍSTICA E COMPUTAÇÃO CIENTÍFICA
DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICA APLICADA



MARIA LUIZA BUSATO

O comportamento evolutivo das dinâmicas vitais interativas em um meio sujeito a impacto ambiental: revisitando a aproximação numérica da solução do sistema não linear de EDPs com o uso do Método de Elementos Finitos

Campinas
22/11/2024

MARIA LUIZA BUSATO

O comportamento evolutivo das dinâmicas vitais interativas em um meio sujeito a impacto ambiental: revisitando a aproximação numérica da solução do sistema não linear de EDPs com o uso do Método de Elementos Finitos

Monografia apresentada ao Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica da Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos para obtenção de créditos na disciplina Projeto de Extensão Supervisionado, sob a orientação do(a) Prof. João Frederico da Costa Azevedo Meyer.

Resumo

O desequilíbrio de ecossistemas naturais causado pela invasão de espécies externas ou pela contaminação por poluentes tóxicos representa uma ameaça à sobrevivência de sua biota local. Diante da frequência destes eventos de impacto ambiental, agravada por ações antrópicas e pelas mudanças climáticas, surge a necessidade do desenvolvimento de ferramentas cada vez mais acuradas e de ampla aplicação, que possibilitem o estudo das dinâmicas envolvidas nestas situações. Tendo isso em vista, este projeto pretende revisitar um modelo matemático construído para a simulação do comportamento de duas espécies competidoras, sob efeito de predação por uma espécie invasora e de contaminação por fontes de poluentes, baseado na resolução de sistemas não-lineares de equações diferenciais parciais. Seu objetivo é incluir na resolução numérica destes sistemas o método dos Elementos Finitos, visando possibilitar que o modelo seja aplicado em domínios irregulares e com discretizações mais refinadas e, portanto, que ele seja útil no estudo de um conjunto mais amplo de problemas ecológicos.

Abstract

The imbalance of natural ecosystems caused by the invasion of external species or contamination by toxic pollutants poses a threat to the survival of their local biota. Given the frequency of these environmental impact events, exacerbated by anthropogenic actions and climate change, there arises the need to develop increasingly accurate and widely applicable tools that enable the study of the dynamics involved in these situations. With this in mind, this project aims to revisit a mathematical model designed to simulate the behavior of two competing species, under the influence of predation by an invasive species and contamination from pollutant sources, based on the resolution of nonlinear systems of partial differential equations. Its goal is to incorporate the Finite Element Method into the numerical solution of these systems, aiming to allow the model to be applied to irregular domains with more refined discretizations, and thereby make it useful in studying a broader range of ecological problems.

Conteúdo

1	Introdução	6
2	Metodologia	7
2.1	Equações	8
2.2	Formulação Variacional	9
2.3	Resolução via Método dos Elementos Finitos	10
2.4	Discretização temporal por Método de Crank-Nicolson	13
3	Resultados	15
4	Conclusão	15

1 Introdução

A invasão de espécies exóticas pode causar consideráveis danos ambientais, econômicos e ainda provocar mudanças ecológicas irreversíveis, além de frequentemente representar uma ameaça à saúde pública (Andersen et al. [2004]). Muitas vezes, uma espécie invasora apresenta vantagens sobre as espécies nativas, o que favorece o aumento de sua população e, com isso, se agrava ainda mais seu impacto sobre o ecossistema local (Oliveira [2024]).

Devido aos amplos impactos deste fenômeno de desequilíbrio ecológico, cuja frequência é intensificada por ações antrópicas e pelas mudanças climáticas (Begon and Townsend [2021]), seu estudo através da Modelagem Matemática vem se tornando não apenas necessário mas, sobretudo, urgente, devendo ser efetuada como um trabalho academicamente transversal e integrado. Nessa perspectiva, o presente projeto visa possibilitar a modelagem matemática da dinâmica espaço-temporal de populações endêmicas, tanto em relação às suas dispersões populacionais quanto às interações entre elas e possíveis influências negativas sobre a biota local. A modelagem deverá incluir, portanto, as dispersões das populações, suas interações e suas competições intraespecíficas, bem como o emergente efeito competitivo ou predatório por uma espécie invasora. Considerando situações comuns ao litoral do nosso país, iremos incluir nessa modelagem a presença evolutiva de manchas de poluentes com efeitos negativos ou letais.

As representações de situações deste tipo são, em geral, feitas usando sistemas não-lineares de EDPs parabólicas que incluem de modo acoplado o transiente da difusão do poluente em questão, as três populações (uma invasora e duas endêmicas) bem como suas dinâmicas populacionais e o efeito de interações intra-específicas e da toxicidade do poluente ao longo do tempo considerado (Edelstein-Keshet [2006]).

Na versão inicial deste trabalho, apresentada na disciplina de MS777 sob o título "Modelagem Matemática e Simulação Numérica do problema de uma espécie invasora na presença de duas espécies endêmicas em competição com a chegada de algum impacto ambiental tóxico", as aproximações numéricas para a resolução destes sistemas incluíram a utilização do Método de Diferenças Finitas. Neste semestre, devido à possibilidade de uma discretização mais adequada e, portanto, de considerar a fonte poluente

com maior precisão, o mesmo modelo será proposto, mas com vistas ao uso do Método de Elementos Finitos.

O trabalho deste semestre, portanto, foi dedicado ao aprendizado dos conceitos necessários para a utilização deste método pela aluna, além do estudo das equações resultantes de sua aplicação. Isto culminou na construção de um sistema não-linear de equações a derivadas parciais, cuja resolução computacional é capaz de ilustrar a evolução temporal e a dispersão populacional da dinâmica proposta.

2 Metodologia

Devido à possível analogia entre o movimento aleatório de moléculas e de seres vivos, utilizamos, tanto para a modelagem dos movimentos de dispersão e migração populacionais quanto para a simulação do comportamento do poluente, equações do tipo Advecção-Difusão-Reação. Na modelagem da dinâmica populacional, para incluir a capacidade de suporte do meio e as relações interespecíficas entre as populações, fez-se necessário utilizar uma equação do tipo Advecção-Difusão-Reação em conjunto com uma do tipo Lotka-Volterra.

Assim, após definir condições iniciais e de contorno adequadas, obteve-se um sistema não-linear de equações diferenciais parciais capaz de modelar a dinâmica desejada. Como as populações estudadas são hipotéticas, torna-se possível, através de mudanças nos parâmetros destas equações, o estudo de diferentes cenários de alteração de uma dinâmica populacional local pela interação com a espécie invasora na presença de impacto ambiental.

Agora, para a resolução deste sistema, o próximo passo foi a modificação de cada equação de sua formulação dita forte, para a forma variacional, visando uma posterior resolução numérica através do Método de Elementos Finitos via Galerkin (Oliveira [2024]). Neste trabalho, devido à necessidade futura de discretizar o domínio por meio de triangulação para a correta aplicação dos métodos numéricos (o de Elementos Finitos espacialmente junto com Crank-Nicolson na discretização temporal), foi considerado um domínio retangular hipotético, evitando maiores graus de complexidade nesta etapa.

Com a aplicação destes métodos foi construído um sistema de equações cuja resolução numérico-computacional, que representa um possível desenvolvimento futuro,

é capaz de simular a dinâmica populacional desejada. As etapas deste construção serão descritas com maior detalhamento a seguir.

2.1 Equações

Para a modelagem da dispersão do poluente no meio aquático, a equação de Difusão-Advecção-Reação foi utilizada na forma (Edelstein-Keshet [2006]):

$$\frac{\partial c}{\partial t} - \alpha_c \nabla^2 c + \vec{V}_c \cdot \nabla c + \sigma_c c = f(x, y, t) \quad (1)$$

onde $c=c(x,y,t)$ é a concentração do contaminante, α é a sua difusibilidade, \vec{V}_c é a velocidade de transporte das partículas, σ_c é o decaimento do poluente e f denota a intensidade da sua fonte. Nesta definição, fica implícito que (x,y) varia em Ω , um domínio de \mathbb{R}^2 e t , representando o tempo, varia num intervalo de interesse, em geral, $[0, T]$.

Além disso, foi estabelecida a condição inicial $c(x, y, 0) = c_0(x, y)$ e a condição de contorno de von Neumann:

$$\left. \frac{\partial c(x, y, t)}{\partial \eta} \right|_{\Gamma} = 0$$

onde Γ é a fronteira do domínio.

Agora, para descrever a evolução das populações, foram considerados quatro pontos essenciais: dispersão populacional, processos migratórios, mortalidade induzida e uma dinâmica populacional Verhulstiana que inclui a capacidade de suporte total para as populações. Para descrever estes pontos, indicamos a espécie P, como a predadora de duas espécies Q e R que competem entre si. A dinâmica populacional destas espécies pode então ser descrita por meio das equações (Sossae [2003]):

$$\frac{\partial P}{\partial t} - \alpha_P \nabla^2 P + \vec{V}_P \nabla P + (\kappa_{PC})P = \lambda_P P \left(1 - \frac{P}{K}\right) + \beta_{PQ} PQ + \beta_{PR} PR \quad (2)$$

$$\frac{\partial Q}{\partial t} - \alpha_Q \nabla^2 Q + \vec{V}_Q \nabla Q + (\kappa_{QC})Q = \lambda_Q Q \left(1 - \frac{Q}{K}\right) - \beta_{QP} QP - \beta_{QR} QR \quad (3)$$

$$\frac{\partial R}{\partial t} - \alpha_R \nabla^2 R + \vec{V}_R \nabla R + (\kappa_{RC})R = \lambda_R R \left(1 - \frac{R}{K}\right) - \beta_{RP} RP - \beta_{RQ} RQ \quad (4)$$

onde α é o coeficiente das respectivas dispersões populacionais, \vec{V}_x é a velocidade de migração das espécies P, Q e R, κ_x é o efeito negativo do contaminante sobre cada uma

das três espécies, λ_x representa cada taxa de crescimento populacional, K é a capacidade de suporte do meio e β_{xy} descreve as relações interespecíficas.

Uma descrição mais aprofundada destas equações pode ser encontrada no trabalho "Modelagem Matemática e Simulação Numérica do problema de uma espécie invasora na presença de duas espécies endêmicas em competição com a chegada de algum impacto ambiental tóxico", apresentado na disciplina MS777.

Para as condições iniciais, foram adotadas:

$$P(x, y, 0) = P_0(x, y), Q(x, y, 0) = Q_0(x, y) \text{ e } R(x, y, 0) = R_0(x, y)$$

E para as condições de contorno, utilizou-se condições de von Neumann homogêneas, ou seja:

$$\left. \frac{\partial P(x,y,t)}{\partial \eta} \right|_{\Gamma} = 0, \left. \frac{\partial Q(x,y,t)}{\partial \eta} \right|_{\Gamma} = 0 \text{ e } \left. \frac{\partial R(x,y,t)}{\partial \eta} \right|_{\Gamma} = 0$$

onde Γ representa a fronteira do domínio.

2.2 Formulação Variacional

Para a resolução do problema através do Método de Elementos Finitos, faz-se necessário, primeiramente, transformar o sistema formado pelas equações diferenciais parciais descritas em um sistema de equações integrais, caracterizando a formulação fraca ou variacional do problema. Esta formulação garante a resolução do sistema através do uso do Teorema de Green e exige condições menos restritivas em termos analíticos para a sua aplicação, sendo esta a vantagem do Método dos Elementos Finitos sobre o de Diferenças Finitas, bem mais restritivo (Abreu [2009]).

Para isso, é preciso efetuar o produto interno dos termos das equações por uma função teste ϕ , pertencente a um subespaço \mathcal{V} de:

$$H^1(\Omega) = \left\{ u \in \mathcal{L}^2(x, y) \mid \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y} \in \mathcal{L}^2(\Omega) \right\}$$

onde \mathcal{L}^2 é o espaço de funções quadrado-integráveis, no sentido de Lebesgue, ou seja:

$$\mathcal{L}^2(\Omega) = \left\{ v : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \mid \int_{\Omega} |v|^2 d\mu < \infty \right\}$$

Vamos demonstrar como a forma variacional pode ser aplicada na equação 1.

Em estado estacionário, ela é da forma:

$$-\alpha_c \nabla^2 c + \vec{V}_c \cdot \nabla c + \sigma_c c = f(x, y) \quad (5)$$

Devemos obter $c_h \in \mathcal{V}_h$, sendo \mathcal{V}_h um subespaço de \mathcal{V} com base $\mathcal{B}(\mathcal{V}_h) = \{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_i, \dots, \phi_n\}$, de modo que:

$$c_h = \sum_{j=1}^n c_j \cdot \phi_j(x, y)$$

E a solução aproximada da equação 5 é obtida através do cálculo dos n c_j 's.

Na formulação variacional, o problema torna-se:

$$(-\alpha_c \nabla^2 c | \phi)_{0,\Omega} + (\vec{V}_c \cdot \nabla c | \phi)_{0,\Omega} + \sigma_c (c | \phi)_{0,\Omega} = (f(x, y) | \phi)_{0,\Omega} \quad \forall \phi \in \mathcal{V}_h \quad (6)$$

onde o produto interno pode ser expresso por:

$$(u | v)_{0,\Omega} = \iint_{\Omega} uv \, d\mu$$

Se, neste espaço, as funções e suas derivadas parciais forem \mathcal{L}^2 -integráveis, teremos:

$$\left(-\alpha_c \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right) \middle| \phi \right)_{0,\Omega} + \left(V_1 \frac{\partial c}{\partial x} + V_2 \frac{\partial c}{\partial y} \middle| \phi \right)_{0,\Omega} + \sigma_c (c | \phi)_{0,\Omega} = (f(x, y) | \phi)_{0,\Omega} \quad (7)$$

que define a formulação variacional do problema a ser resolvido.

2.3 Resolução via Método dos Elementos Finitos

Utilizando a forma integral do produto interno e o Teorema de Green (Oliveira [2024]), a equação 7 torna-se:

$$\alpha_c \iint_{\Omega} \nabla c \cdot \nabla \phi \, d\mu + \iint_{\Omega} (\vec{V}_c \cdot \nabla c) \phi \, d\mu + \sigma_c \iint_{\Omega} c \phi \, d\mu = \iint_{\Omega} f \phi \, d\mu \quad \forall \phi \in \mathcal{V}_h \quad (8)$$

Logo, enquanto no método de diferenças finitas é necessário encontrar uma

solução com derivada de segunda ordem limitada, agora basta procurar uma solução que tenha derivada de primeira ordem integrável, através da escolha de um subespaço \mathcal{V}_h conveniente.

Para formar a base deste subespaço, podemos escolher as funções definidas por:

$$\phi_i(x_j, y_j) = \begin{cases} 0, & \text{se } i \neq j \\ 1, & \text{se } i = j \end{cases} \quad (9)$$

E, em cada triângulo Ω_h que compõe o domínio discretizado, descrito a seguir, ϕ é de primeira ordem, ou seja, um plano que conecta 1, em (x_i, y_i) a 0, em (x_j, y_j) tal que $|i - j| \leq 1$.

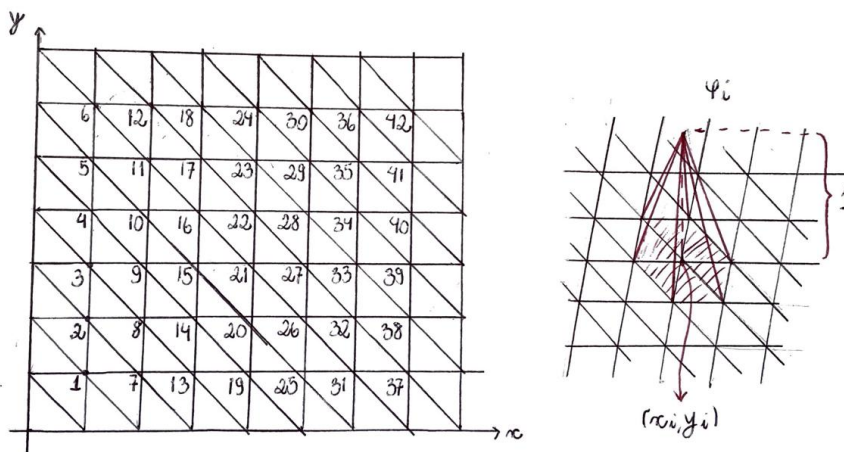


Figura 1: Domínio retangular discretizado através de triangulação e ilustração da função ϕ em um ponto (x_i, y_i) do domínio. Fonte: elaborado pela autora.

Agora, para a resolução da EDP, considera-se $c_h = \sum_{j=1}^n c_j \cdot \phi_j(x, y)$. Portanto, obtemos a equação:

$$\alpha_c \sum_{j=1}^n c_j \iint_{\Omega} \nabla \phi_j \cdot \nabla \phi_i \, d\mu + \sum_{j=1}^n c_j \iint_{\Omega} (\nabla \phi_j \cdot \vec{V}_c) \phi_i \, d\mu + \sigma_c \sum_{j=1}^n c_j \iint_{\Omega} \phi_j \phi_i \, d\mu = \sum_{j=1}^n \iint_{\Omega} f \phi_i \, d\mu \quad (10)$$

que pode ser agrupada na forma:

$$\sum_{j=1}^n c_j \left\{ \alpha_c \iint_{\Omega} \left(\frac{\partial \phi_j}{\partial x} \frac{\partial \phi_i}{\partial x} + \frac{\partial \phi_j}{\partial y} \frac{\partial \phi_i}{\partial y} \right) d\mu + V_1 \iint_{\Omega} \frac{\partial \phi_j}{\partial x} \phi_i d\mu + V_2 \iint_{\Omega} \frac{\partial \phi_j}{\partial y} \phi_i d\mu + \sigma_c \iint_{\Omega} \phi_j \phi_i d\mu \right\} = \sum_{j=1}^n \iint_{\Omega} f \phi_i d\mu \quad (11)$$

Considerando os termos dentro das chaves do lado esquerdo, como sendo elementos $m_{i,j}$ de uma matriz \mathbf{M} , os termos do lado direito como sendo os elementos b_i de um vetor \mathbf{b} e tomando o vetor de incógnitas c_1, c_2, \dots, c_n , que chamaremos de \mathbf{c}_h , nosso problema torna-se resolver o sistema dado por:

$$\mathbf{M}\mathbf{c}_h = \mathbf{b} \quad \text{com } \mathbf{M} = [m_{i,j}]_{1 \leq i,j \leq n} \text{ e } \mathbf{b} = [b_i]_{1 \leq i \leq n}$$

Para isso, primeiramente precisamos calcular os termos $m_{i,j}$ e b_i , através da resolução das integrais que os definem.

Devido ao formato da função ϕ , temos que $m_{i,j} = 0$ para $|i - j| > 1$.

Agora, para $i=j=1$ (e equivalentemente para $i=j=2,3,\dots,n$), por exemplo, segue que:

$$\begin{aligned} & \alpha_c \iint_{\Omega} \left(\frac{\partial \phi_j}{\partial x} \frac{\partial \phi_i}{\partial x} + \frac{\partial \phi_j}{\partial y} \frac{\partial \phi_i}{\partial y} \right) d\mu + V_1 \iint_{\Omega} \frac{\partial \phi_j}{\partial x} \phi_i d\mu + V_2 \iint_{\Omega} \frac{\partial \phi_j}{\partial y} \phi_i d\mu + \sigma_c \iint_{\Omega} \phi_j \phi_i d\mu \\ &= \alpha_c \int_0^{\Delta x} \int_0^{\Delta y(1-\frac{x}{\Delta x})} \frac{\partial \phi_j}{\partial x} \frac{\partial \phi_i}{\partial x} dydx + \alpha_c \int_0^{\Delta x} \int_0^{\Delta y(1-\frac{x}{\Delta x})} \frac{\partial \phi_j}{\partial y} \frac{\partial \phi_i}{\partial y} dydx + \\ & V_1 \int_0^{\Delta x} \int_0^{\Delta y(1-\frac{x}{\Delta x})} \frac{\partial \phi_j}{\partial x} \phi_i dydx + V_2 \int_0^{\Delta x} \int_0^{\Delta y(1-\frac{x}{\Delta x})} \frac{\partial \phi_j}{\partial y} \phi_i dydx + \sigma_c \int_0^{\Delta x} \int_0^{\Delta y(1-\frac{x}{\Delta x})} \phi_j \phi_i dydx \\ &= \alpha_c \int_0^{\Delta x} \int_0^{\Delta y(1-\frac{x}{\Delta x})} -\frac{1}{\Delta x} \left(-\frac{1}{\Delta x} \right) dydx + \alpha_c \int_0^{\Delta x} \int_0^{\Delta y(1-\frac{x}{\Delta x})} -\frac{1}{\Delta y} \left(-\frac{1}{\Delta y} \right) dydx + \\ & V_1 \int_0^{\Delta x} \int_0^{\Delta y(1-\frac{x}{\Delta x})} -\frac{1}{\Delta x} \left(1 - \frac{x}{\Delta x} - \frac{y}{\Delta y} \right) dydx + V_2 \int_0^{\Delta x} \int_0^{\Delta y(1-\frac{x}{\Delta x})} -\frac{1}{\Delta x} \left(1 - \frac{x}{\Delta x} - \frac{y}{\Delta y} \right) dydx + \\ & \quad + \sigma_c \int_0^{\Delta x} \int_0^{\Delta y(1-\frac{x}{\Delta x})} \left(1 - \frac{x}{\Delta x} - \frac{y}{\Delta y} \right)^2 dydx \\ &= \frac{\alpha}{2} \left(\frac{\Delta y}{\Delta x} + \frac{\Delta x}{\Delta y} \right) - V_1 \frac{\Delta y}{6} - V_2 \frac{\Delta x}{6} + \sigma_c \frac{\Delta y \Delta x}{12} \end{aligned}$$

Realizando os cálculos analogamente para os demais i,j, obtemos a submatriz de rigidez, dada por:

$$\begin{bmatrix} \frac{\alpha}{2} \left(\frac{\Delta y}{\Delta x} + \frac{\Delta x}{\Delta y} \right) - V_1 \frac{\Delta y}{6} - V_2 \frac{\Delta x}{6} + \sigma_c \frac{\Delta y \Delta x}{12} & -\frac{\alpha}{2} \frac{\Delta y}{\Delta x} + V_1 \frac{\Delta y}{6} \sigma_c \frac{\Delta y \Delta x}{24} & -\frac{\alpha}{2} \frac{\Delta x}{\Delta y} + V_2 \frac{\Delta x}{6} + \sigma_c \frac{\Delta y \Delta x}{24} \\ -\frac{\alpha}{2} \frac{\Delta y}{\Delta x} - V_1 \frac{\Delta y}{6} - V_2 \frac{\Delta x}{6} + \sigma_c \frac{\Delta y \Delta x}{24} & \frac{\alpha}{2} \frac{\Delta y}{\Delta x} + V_1 \frac{\Delta y}{6} + \sigma_c \frac{\Delta y \Delta x}{12} & V_2 \frac{\Delta x}{6} + \sigma_c \frac{\Delta y \Delta x}{24} \\ -\frac{\alpha}{2} \frac{\Delta x}{\Delta y} - V_1 \frac{\Delta y}{6} - V_2 \frac{\Delta x}{6} + \sigma_c \frac{\Delta y \Delta x}{24} & V_1 \frac{\Delta y}{6} + \sigma_c \frac{\Delta y \Delta x}{24} & \frac{\alpha}{2} \frac{\Delta x}{\Delta y} + V_2 \frac{\Delta x}{6} + \sigma_c \frac{\Delta y \Delta x}{12} \end{bmatrix}$$

Em termos da matriz de rigidez para o problema como um todo, será necessário ir somando os valores da submatriz de rigidez que correspondem aos vértices de cada um dos elementos todos, aqui apresentados numa malha regular. Em decorrência, alguns termos receberão 6 contribuições (provenientes da diagonal principal da submatriz de rigidez) enquanto outros termos receberão apenas 2 contribuições da submatriz de rigidez, referentes aos elementos fora da diagonal principal da submatriz de rigidez. Esse construção é feita elemento a elemento, respeitando o número global dos nós em cada triângulo. Assim composta, a matriz de rigidez global é formada e indicada no que segue como **M**.

Agora, considerando uma fonte poluidora pontual, podemos definir a função f como sendo zero em todos os pontos, menos aquele em que está localizada a fonte, que denotaremos por (x_f, y_f) e no qual ela vale F (intensidade da fonte). Podemos, então, considerar que, na vizinhança de (x_f, y_f) , esta função se comporta como $\delta \cdot F$, onde δ é a função delta de Dirac. Agora, como $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1$, segue que o vetor \mathbf{b} contém zero em todas as entradas, menos naquela que corresponde a (x_f, y_f) , onde ele vale F .

2.4 Discretização temporal por Método de Crank-Nicolson

Aqui, consideraremos $c = c(x,y,t)$ para poder analisar o comportamento transiente da função c . Isto remete à equação (1) e, conseqüentemente a uma aproximação com discretização também no intervalo de variação temporal. Utilizando o Método de Crank-Nicolson através de diferenças centradas no ponto médio de cada subintervalo no tempo, temos que as derivadas temporais podem ser expressas da seguinte forma:

$$\frac{\partial c_j}{\partial t}^{n+\frac{1}{2}} \cong \frac{c_j^{n+1} - c_j^n}{\Delta t} \quad (12)$$

sendo que podemos definir c_j através da aproximação:

$$c_j^{n+\frac{1}{2}} = \frac{c_j^{n+1} - c_j^n}{2} \quad (13)$$

Voltando agora à formulação matricial, temos:

$$\mathbf{M}\mathbf{c}_h^{k+\frac{\Delta t}{2}} = \mathbf{b} \quad \text{com } \mathbf{M} = [m_{i,j}]_{1 \leq i,j \leq n} \text{ e } \mathbf{b} = [b_i]_{1 \leq i \leq n}$$

Em consequência, a partir de $c^{(0)}$, a condição inicial dada, temos que

$$\mathbf{M}_d \mathbf{c}_h^{(k+1)} = \mathbf{M}_e \mathbf{c}_h^{(k)} + \mathbf{d}, \quad 1 \leq i \leq n,$$

sendo que o vetor \mathbf{d} correspondente à reação, isto é, à função f , calculada no ponto médio do intervalo em t_k ou seja, $t_k + \frac{\Delta t}{2}$.

Daí, considerando as aproximações dadas pelas equações 12 e 13, segue que:

$$\begin{aligned} \frac{c_h^{(k+1)} - c_h^{(k)}}{\Delta t} &= \mathbf{M}c_h^{(k+\frac{1}{2})} + \mathbf{d}^{(k+\frac{1}{2})} \implies c_h^{(k+1)} = c_h^{(k)} \Delta t \mathbf{M} \left(\frac{c_h^{(k+1)} - c_h^{(k)}}{2} \right) + \Delta t \mathbf{d}^{(k+\frac{1}{2})} \\ \implies \left(\mathbb{I} + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{M} \right) c_h^{(k+1)} &= \left(\mathbb{I} - \frac{\Delta t}{2} \mathbf{M} \right) c_h^{(k)} + \Delta t \mathbf{d}^{(k+\frac{1}{2})} \\ \implies \mathbf{A}c_h^{(k+1)} &= \mathbf{B}c_h^{(k)} + \mathbf{d} \end{aligned} \quad (14)$$

A resolução computacional do sistema dado pela equação 14 fornece uma aproximação do comportamento do poluente ao longo do tempo. Equações análogas fornecem a discretização temporal dos modelos de dinâmica populacional, possibilitando sua solução aproximada de maneira similar.

3 Resultados

Tendo em vista o objetivo proposto neste trabalho, seus resultados incluem a derivação da formulação variacional do sistema proposto e o cálculo de sua respectiva matriz de rigidez, além da construção de sua discretização temporal. Seu desenvolvimento culminou na construção teórica da formulação necessária para resolução do sistema de EDPs representativo da modelagem proposta, através dos métodos de Elementos Finitos e de Crank-Nicolson, possibilitando a resolução numérica do problema de estudo da dinâmica populacional de espécies endêmicas sob predação de uma espécie invasora, na presença de impacto ambiental.

Ou seja, por meio deste trabalho foi possível derivar, para cada uma das equações 1, 2, 3 e 4, aproximações na forma $\mathbf{M}\mathbf{c}_h = \mathbf{b}$, para sua resolução espacial, onde a matriz \mathbf{M} é construída através da matriz de rigidez apresentada na seção 2.3, além de aproximações temporais na forma $\mathbf{A}\mathbf{c}_h^{(k+1)} = \mathbf{B}\mathbf{c}_h^{(k)} + \mathbf{d}$, onde $\mathbf{A} = \mathbb{I} + \frac{\Delta t}{2}\mathbf{M}$ e $\mathbf{B} = \mathbb{I} - \frac{\Delta t}{2}\mathbf{M}$ e o vetor \mathbf{d} corresponde à reação.

Isto possibilita, através de possíveis desenvolvimentos futuros, a aplicação de ferramentas computacionais para resolução deste sistema e, conseqüentemente, para a ilustração do comportamento evolutivo da dinâmica estudada.

4 Conclusão

Este trabalho, de cunho propedêutico, visava usar um problema real e presente para o aprendizado, não apenas de uma discretização com vistas a uma resolução numérica por um método bastante mais adequado para domínios irregulares (como os de domínios de interesse ecológico, incluindo impactos devido a ações antrópicas e mudanças globais, por exemplo), mas também visando aprender a força de se usar uma formulação fraca ou variacional na busca de soluções aproximadas de sistemas de EDPs, lineares ou não, como uma forma de se poder trabalhar com um conjunto muito mais amplo de possíveis soluções de problemas discretizados no espaço e no tempo para se construir soluções aproximadas de excelentes ordens de aproximação.

Tendo isto sido feito, este trabalho se constituiu mais num ponto de partida do que num estudo fechado. Futuras possibilidades, além de incluírem as muitas possíveis

variações (algumas de necessidade urgente e exigentes de uma colaboração transdisciplinar) no problema originalmente proposto (espécies invasoras agindo sobre populações endêmicas na presença de material tóxico), apontam para a implementação de um algoritmo computacional que realize não só a discretização espacial mas que, também, apresente soluções numéricas de confiável precisão, além de saídas qualitativas que sejam, de fato, úteis para outras esferas de atuações profissionais.

Referências

- Luciana Carrara Abreu. Influência de poluentes sobre macroalgas na baía de sepetiba, rj: modelagem matematica, analise numerica e simulações computacionais. Master's thesis, Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Matematica, Estatística e Computação Científica, 2009.
- Mark C. Andersen, Heather Adams, Bruce Hope, and Mark Powell. Risk assessment for invasive species. *Risk Analysis*, 24(4):787–793, 2004. doi: <https://doi.org/10.1111/j.0272-4332.2004.00478.x>.
- Michael Begon and Colin R. Townsend. *Ecology: From Individuals to Ecosystems*. Wiley, 2021.
- L. Edelstein-Keshet. *Mathematical Models in Biology*. SIAM, 2006.
- Vitor Hugo Muniz Oliveira. Modelagem e simulações numéricas da interação de espécies na presença de um material impactante: o caso do peixe-leão ("pterois volitans") no litoral norte brasileiro. Master's thesis, Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Matemática Estatística e Computação Científica, 2024.
- R. C. Sossae. *A presença evolutiva de um material impactante e seu efeito no transiente populacional de espécies interativas: modelagem e aproximação*. PhD thesis, IMECC Unicamp, 2003.