

Universidade de Brasília  
Instituto de Física

Tese de Doutorado

**Não-Localidade e Formação de Padrão na  
Equação de Fisher-Kolmogorov**

por

**Jefferson Adriany R. da Cunha**

**Brasília-DF**

**Dezembro de 2008**

Tese de Doutorado

# Não-Localidade e Formação de Padrão na Equação de Fisher-Kolmogorov

JEFFERSON ADRIANY R. DA CUNHA

Orientador:

PROF. DR. FERNANDO ALBUQUERQUE DE OLIVEIRA

Co-Orientador:

PROF. DR. RAFAEL MORGADO SILVA

*Tese de Doutorado apresentada ao Instituto de Física da Universidade de Brasília,  
como parte dos requisitos para obtenção do título de Doutor em Física.*

**Brasília-DF**

**Dezembro de 2008**

# Não-Localidade e Formação de Padrão na Equação de Fisher-Kolmogorov

por

**Jefferson Adriany R. da Cunha**

Tese submetida ao Instituto de Física da Universidade de Brasília  
como parte dos requisitos para obtenção do grau de Doutor em Física.

Aprovada por:

Prof. Dr. Fernando Albuquerque de Oliveira  
(Orientador) - IF/UnB

Prof. Dr. Wagner Figueiredo  
UFSC

Prof. Dr. Ismael Victor de Lucena Costa  
UFG

Prof. Dr. Bernardo de Assunção Mello  
Embrapa

Prof. Dr. Anníbal Dias de Figueiredo Neto  
IF/UnB

Profa. Dra. Vanessa Carvalho de Andrade  
Coordenadora de Pós-Graduação  
Instituto de Física

*Dedico este trabalho à minha  
querida esposa Sabryna*

# Agradecimentos

- Ao Prof. Fernando de Oliveira, pela orientação e dedicação ao nosso trabalho e pelos preciosos momentos de discussões e ensinamentos.
- Ao André Luiz de Almeida Penna pela grande contribuição no trabalho e incentivo.
- Ao Rafael Morgado Silva pela co-orientação e amizade durante a realização deste projeto.
- Aos colegas de grupo, Cassia Donato, João Batista Diniz, Luciano C. Lapas, Ismael Costa, Guilherme Rocha de Rezende, Mendeli H. Vainstein, Evandro Alves Rodrigues, Marco Aurélio Barbosa, Mirian Mitsuko, Alison Barros, Felipe Luís Pereira Pinheiro pelos momentos agradáveis de aprendizado e descontração.
- Aos colegas da pós-graduação do IF-UnB, Thiago, Alexandre, Leandro, Pedro, Ednardo, Alessandra, Camila, Leonardo, Paulo, Fábio, Wiliam, Brunno, Priscila, Ricardo e Lucas. Amizades valiosas que nunca serão esquecidas.
- Aos amigos das viagens para Brasília, Leomar Alves de Souza, Heibbe Cristhian B. de Oliveira, Luciano Ribeiro, José Rildo de Oliveira Queiroz e Cristiano de Siqueira Esteves.
- Agradeço a todos os professores do IF-UnB e em especial aos professores Ricardo Gargano, Geraldo Magela e Silva, Anníbal Dias Figueiredo Neto e Sebastião William da Silva.
- Ao CNPq pela bolsa de doutorado.
- Aos professores do IF-UFG, Ladir Cândido da Silva, José Nicodemos Teixeira Rabelo, Tertius Lima Fonseca, Marcos Antônio de Castro, Antônio Newton Borges, Francisco Aparecido Pinto Osório, Ardiley Torres Avelar e Basílio Baseia.
- À minha esposa Sabryna, pela atenção, dedicação e compreensão durante estes anos de doutorado.

- Ao meu irmão Jalles e à minha cunhada Juliana, pela grande ajuda durante estes quatro anos de trabalho.
- Aos meus pais Luiza e Tobias e aos meus irmãos Alysson e Ana Cláudia, pelo amor e apoio em minha vida acadêmica.
- À minha sogra Daisy pela constante ajuda e incentivo durante este período.
- Aos meus cunhados Stanley, Laryssa e Mariana e ao meu concunhado Leonardo, pelos agradáveis momentos em família.
- A todos os amigos que acompanham minha carreira, da graduação no IF-UFG até os dias de hoje.
- A Deus, por proporcionar as batalhas do dia-a-dia, para que possam ser superadas nos preparando para maiores desafios.

*Este trabalho foi financiado pelo CNPq.*

# Sumário

<b>Lista de Figuras</b>	<b>viii</b>
<b>Lista de Símbolos e Abreviaturas</b>	<b>ix</b>
<b>Resumo</b>	<b>x</b>
<b>Abstract</b>	<b>xi</b>
<b>Introdução</b>	<b>1</b>
<b>1 Modelos de dinâmica de populações</b>	<b>6</b>
1.1 Introdução . . . . .	6
1.2 Modelo Malthusiano . . . . .	6
1.3 Modelo Logístico . . . . .	8
1.4 Modelo de Lotka-Volterra . . . . .	10
1.4.1 Lotka-Volterra para uma presa e um predador . . . . .	10
1.4.2 Lotka-Volterra aplicado a um sistema de duas espécies predadoras e uma presa . . . . .	12
1.5 Equação de Fisher-Kolmogorov . . . . .	13
1.5.1 Presa-predador no modelo de Fisher-Kolmogorov . . . . .	16
1.6 Conclusão . . . . .	18
<b>2 Formação de padrão na equação de Fisher-Kolmogorov com não-localidade e difusão</b>	<b>19</b>
2.1 Introdução . . . . .	19
2.2 Formação de padrão e auto-organização em sistemas físicos, químicos e biológicos . . . . .	20
2.2.1 Magnetização espontânea e cristalização de Wigner . . . . .	20

2.2.2	Convecção de Rayleigh-Bénard . . . . .	21
2.2.3	Instabilidade do Impressor . . . . .	22
2.2.4	O modelo de Turing . . . . .	22
2.3	Equação de Fisher-Kolmogorov . . . . .	23
2.3.1	Equação de Fisher-Kolmogorov normal . . . . .	23
2.3.2	Equação de Fisher-Kolmogorov generalizada . . . . .	25
2.3.3	Limites da função influência . . . . .	26
2.4	Tipos de funções influências . . . . .	27
2.4.1	Função influência gaussiana . . . . .	27
2.4.2	Função influência de Heaviside . . . . .	27
2.4.3	Função influência de Laplace . . . . .	28
2.4.4	Função influência gaussiana-Heaviside . . . . .	28
2.4.5	Função influência generalizada . . . . .	28
2.5	Estudo perturbativo na EFKG . . . . .	29
2.6	Solução numérica da equação de Fisher-Kolmogorov generalizada . . . . .	32
2.7	Conclusão . . . . .	35
<b>3</b>	<b>Formação de padrão na equação de Fisher-Kolmogorov generalizada com convecção</b>	<b>36</b>
3.1	Introdução . . . . .	36
3.2	Equação de Fisher-Kolmogorov convectiva . . . . .	37
3.3	Estudo analítico da EFKGC . . . . .	39
3.4	Resultados numéricos . . . . .	43
3.4.1	Convecção unidirecional constante . . . . .	45
3.4.2	Convecção dependente da posição . . . . .	48
3.5	Conclusão . . . . .	55
<b>4</b>	<b>Efeito da não-localidade no crescimento na formação de padrão</b>	<b>57</b>
4.1	Introdução . . . . .	57
4.2	Modelo matemático . . . . .	58
4.3	Estudo perturbativo . . . . .	62
4.3.1	Função de crescimento não-local e interação tipo Heaviside . . . . .	63
4.3.2	Função de crescimento não-local e de interação generalizadas . . . . .	67



4.4	Resultados numéricos . . . . .	69
4.5	Validação experimental do modelo . . . . .	72
4.6	Conclusão . . . . .	74
<b>5</b>	<b>Conclusões</b>	<b>76</b>
5.1	Perspectivas de Trabalhos Futuros . . . . .	77
	<b>Apêndices</b>	<b>79</b>
<b>A</b>	<b>Métodos numéricos utilizados na solução da equação de Fisher-Kolmogorov generalizada</b>	<b>79</b>
A.1	Termos convectivos . . . . .	79
A.1.1	Método de discretização FTCS . . . . .	80
A.1.2	Método de Lax . . . . .	81
A.1.3	Esquema de discretização Upwind . . . . .	81
A.2	Termo de crescimento . . . . .	82
A.3	Integração do termo de interação não-local . . . . .	83
A.4	Solução numérica da equação de difusão . . . . .	84
A.5	Método Operator Splitting . . . . .	85
<b>B</b>	<b>Análise de estabilidade de von Neumann</b>	<b>88</b>
B.1	Análise de Von Neumann para métodos aplicados à equação convectiva	89
B.1.1	O método Forward Time Central Space (FTCS) . . . . .	89
B.1.2	O método de Lax de discretização . . . . .	90
B.1.3	O método de discretização Upwind . . . . .	90
<b>C</b>	<b>Normalização da função influência</b>	<b>92</b>
<b>D</b>	<b>Trabalhos publicados e submetidos para publicação</b>	<b>94</b>
	<b>Bibliografia</b>	<b>95</b>

# Lista de Figuras

- 1.1 Solução geral da equação de Verhulst, para  $r = 0.8$ ,  $k = 8.0$  e vários valores do número inicial de indivíduos de uma determinada população. Nesta figura vemos como a capacidade de suporte  $k$ , limita o número de indivíduos de uma população. . . . . 9
- 1.2 Solução do sistema Lotka-Volterra para um predador e uma presa. No painel A temos o espaço de fase  $(v, u)$ . Painel B apresenta a variação dos números ou densidade de presas e predadores no tempo. Estas curvas são feitas para  $u_0 = 2.0$  e  $v_0 = 2.0$ . As taxas de crescimento, competição e mortes valem:  $a_u = 0.5$ ,  $a_v = 0.7$ ,  $b_u = 0.5$  e  $b_v = 0.5$ . . . 12
- 1.3 Solução numérica da equação de Lotka-Volterra para duas espécies predadoras e uma presa. Do lado direito mostramos as flutuações dos números ou densidades de presas e predadores no tempo. Na figura da esquerda apresentamos o espaço de fase das densidades  $(w, v, u)$ . Estes gráficos são feitos para  $u_0 = 1.0$ ,  $v_0 = 1.0$  e  $w_0 = 0.8$ . As constantes de crescimento e competição valem:  $a_u = 0.5$ ,  $b_u = 0.5$ ,  $a_v = 0.7$ ,  $b_v = 0.5$ ,  $c_u = 0.5$ ,  $a_w = 0.7$  e  $b_w = 0.5$ . . . . . 13
- 1.4 Solução do sistema presa-predador no modelo Fisher-Kolmogorov para dois predadores e uma presa, considerando a difusão de espécies iguais,  $D_u = D_v = D_w = 1 \times 10^{-4}$ . Do lado direito temos a evolução temporal das equações para os parâmetros  $a_u = 0.1$ ,  $b_u = 0.1$ ,  $c_u = 0.1$ ,  $a_v = 0.1$ ,  $b_v = 0.1$ ,  $a_w = 0.1$  e  $b_w = 0.1$ . No lado esquerdo evoluímos as equações usando as condições  $a_u = 0.1$ ,  $b_u = 0.1$ ,  $c_u = 0.1$ ,  $a_v = 0.1$ ,  $b_v = 0.1$ ,  $a_w = 0.07$  e  $b_w = 0.1$ . Os picos em cada gráfico superior indicam as condições iniciais das densidades  $u(x)$ ,  $v(x)$  e  $w(x)$ . A distribuição das presas está centrada em  $x_0 = 0.5$ , os predadores  $v(x)$  em  $x_0 = 0.25$  e os predadores  $w(x)$  centrada em  $x_0 = 0.75$ . . . . . 17

2.1	Convecção de Rayleigh-Bénard em óleo com pó de alumínio suspenso no líquido. . . . .	21
2.2	Franjas de formação de padrão no experimento da instabilidade do impressor. Painel A, foto das franjas de padrão e painel B aparato experimental utilizado. . . . .	22
2.3	Taxa de crescimento da formação de padrão $\gamma(k)$ , para uma função influência Heaviside. A constante de crescimento vale $a = 3.0$ e o comprimento de interação $\mu = 4.0$ . Neste gráfico a medida que a constante de difusão aumenta, a taxa $\gamma(k)$ deixa de ter valores positivos. . . . .	31
2.4	Solução numérica da EFKG para uma função influência gaussiana. No painel A o comprimento de interação vale $\mu = 0.01$ e no painel B, $\mu = 0.15$ . O coeficiente de difusão em ambos os casos vale $D = 1 \times 10^{-4}$ . . . . .	34
2.5	Vetor estacionário $u(x)$ , para $\mu = 0.15$ e $\mu = 0.25$ e alguns valores da constante de difusão de um meio. Para um comprimento de interação $\mu$ fixo, os picos dos estados estacionários são amortecidos elevando o valor da constante de difusão do sistema. . . . .	35
3.1	Taxa de crescimento real da formação de padrão, para uma função influência Heaviside para $a = 2.0$ e vários valores do comprimento de interação $\mu$ . Notamos que para $\mu$ pequeno, $\gamma(k)$ se torna negativa. . . . .	42
3.2	Parte real da taxa de crescimento da formação de padrão, para uma função influência Heaviside com comprimento $\mu = 4.0$ . As curvas A, B e C exibem a taxa real $\gamma(k)$ , para $a = 8$ , $a = 2$ e $a = 0.5$ . Para todos os valores da taxa de crescimento $a$ , teremos os mesmos pontos onde $\gamma(k) > 0$ . . . . .	42
3.3	Evolução temporal da solução $u(x, t)$ , para uma distribuição inicial gaussiana. As interações não-locais são pesadas utilizando uma função de Heaviside com $\mu = 0.10$ . A velocidade de fluxo vale $v = 0.010$ . . . . .	45
3.4	Gráfico A: evolução temporal da densidade populacional $u(x, t)$ em função do tempo e da posição espacial $x$ , para uma velocidade unidirecional de fluxo para a direita $v = 0.016$ e um comprimento de interação $\mu = 0.10$ . Gráfico B: estado estacionário $u(x)$ para uma velocidade de fluxo unidirecional $v = 0.016$ e $\mu = 0.10$ . As setas mostram a direção do fluxo. Nestes gráficos, consideramos a taxa de crescimento $a = 1.0$ e a taxa de competição $b = 1.0$ . . . . .	45

3.5	Solução estacionária $u(x)$ para vários valores do comprimento do alcance da função influência $\mu$ . Quando $\mu$ se aproxima de 0 ou de $L/2$ , os picos da formação de padrão são negligenciáveis. Neste cálculo utilizamos a função influência de Heaviside. A velocidade de fluxo é sempre constante, $v = 0.020$ . . . . .	46
3.6	Estado constante no tempo $u(x)$ para diferentes valores do comprimento do alcance da função influência $\mu$ . Nestes gráficos os estados estacionários são calculados com o uso da função influência gaussiana. A velocidade de fluxo unidirecional é mantida em $v = 0,020$ . . . . .	47
3.7	Solução $u(x, t)$ , para um campo de velocidade constante, Eq. (3.27). As interações não-locais são pesadas utilizando uma função de Heaviside com $\mu = 0.15$ . A magnitude do fluxo vale $v_0 = 0.010$ . . . . .	49
3.8	Estado estacionário $u(x)$ , para vários valores da velocidade convectiva $v_0$ e dois valores do comprimento do alcance da função influência, $\mu = 0.05$ e $\mu = 0.15$ . Aumentando o valor da velocidade de fluxo $v_0$ , para um comprimento de correlação $\mu$ os picos dos estados estacionários são amortecidos. As setas indicam o sentido das componentes do fluxo. . . . .	50
3.9	Diagrama de fases $\mu \times v_0$ . Os pontos indicam os pares de comprimento máximo de correlação e velocidade $v_0$ máxima, para que os picos de estrutura da solução $u(x)$ sejam amortecidos. A região interna, <i>Padrão</i> , indica os pares $(\mu, v_0)$ com picos acentuados para $u(x)$ e a região externa, <i>Sem Padrão</i> , indica os pares $(\mu, v_0)$ para qual $u(x)$ tem picos completamente amortecidos. . . . .	52
3.10	Figura ilustrativa do campo de velocidades, Eq. (3.29). As setas indicam a magnitude do campo de velocidades. . . . .	53
3.11	Evolução temporal da solução $u(x, t)$ , para um campo de velocidades variável, Eq. (3.29). As interações não-locais são pesadas utilizando uma função de Heaviside com $\mu = 0.10$ . A magnitude do fluxo vale $v_0 = 0.010$ . . . . .	53
3.12	Vetor estacionário $u(x)$ , para $\mu = 0.10$ e $\mu = 0.20$ e vários valores da intensidade convectiva $v_0$ . Para um comprimento de correlação $\mu$ fixo, os picos dos estados estacionários são amortecidos elevando o valor da intensidade $v_0$ . As setas indicam o sentido das componentes do fluxo $v(x)$ . . . . .	54

3.13	Diagrama de fase $v_0$ como função de $\mu$ , para um campo de velocidades variável. Os pontos indicam os pares de comprimento crítico de correlação $\mu_c$ e velocidade crítica $v_{0c}$ , para que os picos de estrutura da solução $u(x)$ sejam amortecidos. A região interna, <i>Padrão</i> , indica os pares $(\mu, v_0)$ com picos acentuados para $u(x)$ e a região externa, <i>Sem Padrão</i> , indica os pares $(\mu, v_0)$ para qual $u(x)$ tem picos amortecidos, região sem padrão. . . . .	55
4.1	Parte real da taxa de crescimento da formação de padrão, para uma função influência de Heaviside com comprimento de interação $\mu = 0.55$ . A taxa de crescimento $a = 3.0$ . Neste gráfico, notamos que quando $\alpha$ se aproxima de $\mu$ , a taxa de formação de padrão real se torna negativa. . . . .	65
4.2	Comportamento geral da função influência de crescimento $g_\alpha(z)$ em relação à função de interação $f_\mu(z)$ , para que a condição de formação de padrão seja estabelecida. . . . .	67
4.3	Função influência generalizada $\psi_{\mu,\nu}(z'') = f_{\mu,\nu}(z'')/f_{\mu,\nu}(0)$ , para vários valores do parâmetro $\nu$ com $\mu = 0.15$ . . . . .	68
4.4	Parte real da taxa de crescimento da formação de padrão para uma função de crescimento não-local e de interação generalizada. Gráfico A, comprimento de correlação e de interação, $\alpha = 0.2$ e $\mu = 4.0$ e Gráfico B $\alpha = 0.1$ e $\mu = 8.0$ . Para $\nu = 0.5$ temos uma função de Heaviside e $\nu = 40$ temos uma distribuição gaussiana bem estreita (veja figura 4.3). . . . .	69
4.5	Solução numérica $u(x, t)$ em função do tempo $t$ e posição $x$ em unidades arbitrárias. O termo de interação não-local e o termo de crescimento não-local são calculados utilizando uma distribuição de Heaviside de comprimentos $\mu = 0.15$ e $\alpha = 0.030$ . . . . .	70
4.6	Vetor estacionário $u(x)$ para os comprimentos de interações $\mu = 0.08$ e $\mu = 0.10$ . Quando elevamos o valor do comprimento de correlação $\alpha$ , para $\mu$ fixado, a estrutura de padrão deixa de existir. . . . .	71

4.7 Diagrama de separação entre as fases de padrão e sem formação de padrão, no espaço dos vetores  $(\mu, \alpha)$ . Os pontos indicam os pares críticos  $(\mu_c, \alpha_c)$  para os quais o sistema não exhibe picos de padrão. O regime *Padrão* indica a região dos pares  $(\mu, \alpha)$  onde temos padrão e a região *Sem Padrão* indica os pontos para o qual não existe padrão. 72

# Lista de Símbolos e Abreviaturas

$u(\vec{r}, t)$	Densidade de uma espécie na equação de Fisher-Kolmogorov
$a$	Taxa de crescimento de uma dada população
$b$	Taxa de competição de constituintes de uma espécie ou entre espécies
$K$	Capacidade de suporte: densidade máxima suportado por um meio
$\vec{J}(\vec{r}, t)$	Fluxo de partículas
$f_\mu(z)$	Função influência de alcance $\mu$
$\delta(x - x')$	Função Delta de Dirac
$\Omega$	Domínio de uma determinada colônia
$\text{erf}(x)$	Função erro na variável $x$
$\Theta(x - x')$	Função de Heaviside
$\mu$	Comprimento de interação entre constituintes de uma determinada colônia
$\alpha$	Comprimento de correlação
$k$	Vetor de onda da transformada de Fourier
$\varphi(k)$	Taxa de crescimento da formação de padrão.
$\gamma(k)$	Parte real da taxa de formação de padrão
$D$	Taxa de difusão
$v(x, t)$	Campo de velocidades
$\Gamma$	Função Gama
$F_c$	Transformada de Fourier cosseno
$F_s$	Transformada de Fourier seno
$J_\nu(x)$	Função de Bessel de ordem $\nu$
$\kappa$	Número de onda da formação de padrão
$g_\alpha(z)$	Função de crescimento não-local, de alcance $\alpha$
EFKG	Equação de Fisher-Kolmogorov generalizada
EFKGC	Equação de Fisher-Kolmogorov generalizada com convecção

# Resumo

Nesta tese, vamos estudar a contribuição de termos não-locais em fenômenos de formação de padrão a partir da equação de Fisher-Kolmogorov. Primeiramente, vamos analisar a equação de Fisher-Kolmogorov com dinâmica convectiva para campos de velocidades estáticos e espacialmente variáveis, onde o termo de competição é não-local. Neste caso, estudamos as estruturas de formação de padrão desta equação analiticamente (pelo método perturbativo) e numericamente (pelo método *Operator Splitting*). Para campos anisotrópicos, obtemos uma relação matemática entre as velocidades críticas  $v_{0c}$  e os correspondentes comprimentos de interação  $\mu$  que resultam na curva de transição de fase “Padrão-Sem Padrão” no sistema. Nós mostramos que esta curva tem um comportamento tipo campo médio  $v_{0c}(\mu) = P(\mu)(\mu - \mu_c)^\beta$ , onde  $\beta = 0.45$  e  $\mu_c = 0.49$ . Na segunda parte desta tese, realizamos uma extensão da equação de Fisher-Kolmogorov incluindo um termo de crescimento não-local que representa típicos processos de difusão de longo alcance. Nesta abordagem, a análise da formação de padrão é simplificada para apenas dois parâmetros: o comprimento de correlação  $\alpha$  e o comprimento de interação  $\mu$ . Nós mostramos que a existência de padrão é dada pela condição restrita  $\mu > \alpha$ . Analisando dados experimentais para a formação de padrão da bactéria *Escherichia Coli*, nós verificamos que a relação  $\mu > \alpha$  é de fato obedecida, indicando que este modelo é apropriado para a descrição do fenômeno formação de padrão.



# Abstract

In this thesis, we study the contribution of nonlocal terms in pattern formation phenomena by using the Fisher-Kolmogorov equation. Firstly, we analyse the Fisher equation with convective dynamics for both static and variable velocity field, where the term of competition becomes nonlocal. In this case, we will study the pattern structures of this equation analytically (by the perturbation method) and numerically (by the Operator Splitting method) for specific anisotropic velocity fields  $v(x)$ . For the anisotropic velocity field case, we obtain a mathematical relationship between the critical velocities  $v_{0c}$  and the length of interaction  $\mu$  which result in the curve of phase transition “Pattern-No Pattern” in this system. We show that this curve behaves as a mean-field model  $v_{0c}(\mu) = (\mu - \mu_c)^\beta$  in which  $\beta = 0.45$  and  $\mu_c = 0.49$ . In the second part of the thesis, we extend the Fisher-Kolmogorov equation to include a nonlocal growth term which represent typical processes of long range diffusion. In this approach, the analysis of pattern becomes simplified through two parameters: the correlation length  $\alpha$  and the domain of interaction  $\mu$ . We show that the existence of pattern is restricted by the condition  $\mu > \alpha$ . Analyzing experimental data for pattern formation of bacterial *Escherichia Coli* we verify that the relation  $\mu > \alpha$  is indeed obeyed, indicating that this model is suitable for description of pattern formation phenomena.

# Introdução

Dinâmica de populações é um assunto muito estudado em várias áreas científicas. Este assunto tem interesse tanto para as ciências exatas e biológicas, quanto para as ciências sociais. Do ponto de vista da Geografia, dinâmica de populações pode ser definida como o estudo demográfico e estatístico da população humana e suas mudanças. Em estudos ecológicos, o termo dinâmica de populações costuma estar relacionado ao estudo de populações microscópicas ou macroscópicas, animais ou vegetais, visando compreender suas interações, crescimento e evolução. A visão deste tema para o presente trabalho, se refere à dinâmica de populações no âmbito da modelagem matemática em sistemas biológicos, para o estudo da variação das populações de seres vivos de determinada espécie no tempo e no espaço e o estudo das interações entre espécies, visando a procura por um modelo matemático apropriado e eficiente para cada sistema e fenômeno estudado. Nessa perspectiva, dinâmica de populações torna-se uma ferramenta para o estudo de sistemas em vários níveis, desde processos físico-químicos, fisiológicos, epidemiológicos e em processos sociológicos em indivíduos superiores, como os seres humanos.

É usual definir uma população como sendo um grupo de indivíduos de uma determinada espécie. Estas populações podem ser compostas por bactérias, vírus, vegetais ou animais. Para os estudos que serão apresentados posteriormente, sempre trataremos matematicamente estas populações isoladas ou com interações bem definidas. Estas aproximações são razoáveis, pois na natureza determinadas populações se desenvolvem completamente isoladas e também podem ser isoladas por meio de barreiras artificiais impostas por um pesquisador, que pode, por exemplo, estudar apenas um grupo de pulgão de uma determinada folha de couve, ou sapos de um determinado vale.

Em Física, dinâmica representa o estudo da relação entre as forças que atuam

---

sobre corpos e a variação do estado de movimento destes corpos, produzido por estas forças. De forma análoga, dinâmica de populações é o estudo da variação do número ou densidade de uma determinada população, quando submetida a uma ação. Estas ações, podem ser no sentido de aumentar ou diminuir esta população, ou mesmo uma ação reguladora que tente manter o tamanho da população constante.

Historicamente, o estudo da dinâmica de populações foi fundamentado de forma esparsa e episódica em diversos trabalhos a partir do século XIII. O estudo de uma população, com foco na previsão do número de indivíduos com base em um grupo inicial, teve seu surgimento com Fibonacci (1170-1250). No ano de 1202 em sua obra mais célebre, “Liber Abaci”, Fibonacci propõe o famoso problema da reprodução dos coelhos. Neste problema, dado um casal de coelhos jovens, queremos encontrar o número final de casais de coelhos no decorrer de um ano, seguindo o seguinte algoritmo:

- nenhum coelho morre no decorrer do ano;
- cada casal fica fértil depois de dois meses;
- cada casal gera um segundo casal por mês.

Desprezando possíveis problemas consangüíneos, este algoritmo pode ser desenvolvido de forma simples e a seqüência do número de casais que encontramos é chamada seqüência de Fibonacci, uma seqüência muito bela, representada de diversas formas pela natureza.

Na seqüência cronológica, um trabalho fundamental no estudo de dinâmica de populações é o artigo de Leonhard Euler (1707-1783) *A general investigation into the mortality and multiplication of human species*. Neste trabalho, Euler estuda as taxas etárias de natalidade e mortalidade de populações humanas.

Uma contribuição importante para esta área surge em 1798 com o modelo de crescimento exponencial de Thomas Malthus (1766-1834) [1, 2, 3, 4]. Neste trabalho, Malthus realiza uma previsão pessimista, que a população humana deveria crescer de forma exponencial e os recursos alimentares seguiriam uma progressão aritmética, levando a humanidade a sua destruição eminente. Este panorama nebuloso foi melhor compreendido em 1838 pelo matemático Pierre François Verhulst. Em seu trabalho, Verhulst propôs que um processo auto-limitante existe restringindo

---

o crescimento de uma população, quando esta se torna demasiadamente grande, impedindo um crescimento ilimitado de uma determinada população.

O primeiro modelo, que descreve como populações de espécies diferentes podem interagir e coexistir em um determinado meio, foi proposto no início do século XX de forma independente pelos matemáticos Alfred James Lotka (1880-1949) e Vito Volterra (1860-1940). Este conjunto de equações, incorporam os processos de crescimento logísticos de Verhulst além de introduzir competições entre espécies diferentes e entre conespecíficos\*.

Os trabalhos de Fibonacci, Euler, Malthus, Verhulst, Lotka e Volterra, podem ser considerados como precursores no estudo de dinâmica de populações. No cenário atual, os modelos em dinâmica de populações, podem ser divididos em dois grandes grupos: os modelos contínuos e os modelos discretos. Estes modelos podem ser de campo médio, modelos de reação-difusão, de partículas interagentes em redes e modelos de sítios interagentes.

Os modelos de dinâmica de populações são muito utilizados também para estudar fenômenos de auto-organização e formação de padrão em sistemas biológicos, físicos e químicos. Estes modelos são muito importantes nestes estudos por apresentarem características não lineares, graus de complexidades e caos. É comum definir a formação de padrão como um arranjo ordenado no tempo e (ou) no espaço de elementos que compõem um sistema. Uma estrutura de formação de padrão, pode ser, por exemplo, uma seqüência de 0 e 1 distribuídos na tela de um computador, ou mesmo as listras pretas intercaladas por listras brancas, na pelagem de uma zebra. A colméia de uma população de abelhas e as dunas de areia do deserto, são bons exemplos de estruturas de formação de padrão observados na natureza. Este fenômeno está presente desde a formação da vida, no processo de divisão celular, até na estruturação das nuvens no céu, ou distribuição dos planetas ou galáxias no espaço. Devido a essa imensa abrangência, este fenômeno tem sido tão estudado, procurando uma descrição razoável de sua manifestação em diversos sistemas em áreas distintas [5, 6, 7, 8, 9, 10].

Os mecanismos responsáveis pelos fenômenos de formação de padrão, são intensamente estudados por várias áreas do conhecimento científico, devido a sua importância na compreensão de diversos processos observados na natureza. A reação

---

\*Em Ecologia conespecíficos são os indivíduos de uma mesma espécie.

---

química de Belousov-Zhabotinsky (BZ) [11, 6, 12] é um exemplo interessante e muito estudado sobre formação de padrão em reações químicas. Neste sistema de não equilíbrio, uma reação oscila entre dois estados, com período bem definido, apresentando diversos tipos de padrões espaciais e temporais. No grupo dos sistemas de reação-difusão, outro exemplo importante é o modelo de Turing [6, 13, 5]. Neste mecanismo o matemático Alan Turing propõe que o processo de morfogênese, ou seja, como os sistemas biológicos são modelados, pode ser considerado como um sistema de reação-difusão em que padrões estacionários podem ser encontrados à partir de condições iniciais uniformes. Estes dois exemplos são básicos nos estudos de formação de padrão e ilustram bem a importância dos termos de reação-difusão na descrição deste fenômeno.

Os modelos de reação-difusão, em geral são constituídos de um número grande de termos e coeficientes, que podem ser reagentes, espécies, ou outras substâncias. Neste contexto o sistema pode ser encontrado em regime de formação de padrão para determinadas condições numéricas. Na literatura, podemos encontrar vários trabalhos que mostram como os modelos de reação-difusão para uma espécie ou reagente, podem exibir o fenômeno padrão via introdução de não-localidades nas reações [14, 15, 16]. A não-localidade introduz interações de longo alcance, propiciando o surgimento dos padrões em sistemas conespecíficos, sistemas com indivíduos de mesma espécie. Estes estudos mostram a importância da não-localidade nos termos não lineares destes modelos e a relevância das interações de longo alcance na descrição do fenômeno de auto-organização e formação de padrão.

No presente trabalho, apresentamos um estudo com diversas generalizações para a equação de reação-difusão de Fisher-Kolmogorov. Estudamos basicamente os efeitos da introdução de outras dinâmicas no modelo matemático e a consideração de não-localidades e processos difusivos de longo alcance, na modificação do tipo de formação de padrão encontrada neste modelo.

**Capítulo 1:** realizamos uma revisão sobre equações de dinâmica de populações e equações de reação-difusão. Esta revisão é extremamente útil para os estudos desenvolvidos nos capítulos seguintes.

**Capítulo 2:** apresentamos os resultados já trabalhados na literatura sobre o modelo de Fisher-Kolmogorov generalizada para uma espécie com difusão. Estruturamos as propriedades das distribuições de interação e verificamos a importância dos processos difusivos e não-locais na estrutura de padrão oriundas das soluções

numéricas deste modelo. Este estudo é importante também para validar os métodos numéricos que estão sendo utilizados no trabalho.

**Capítulo 3:** a partir deste capítulo, começamos a apresentar nossa contribuição sobre o tema formação de padrão e auto-organização em sistemas biológicos, descritos pela equação de Fisher-Kolmogorov. Neste capítulo, expomos nosso estudo sobre a introdução de campos convectivos estáticos e espacialmente dependentes, no comportamento das soluções numéricas do modelo matemático de Fisher-Kolmogorov generalizada com convecção. Neste estudo é feita uma análise perturbativa e puramente numérica da relação entre a magnitude dos campos convectivos, estáticos e dinâmicos, nas estruturas de padrão que surgem da equação de Fisher-Kolmogorov generalizada.

**Capítulo 4:** sugerimos uma nova abordagem e metodologia para o estudo da formação de padrão em sistemas de uma espécie, introduzindo uma não-localidade no termo de crescimento para incorporar os processos lineares, difusivos e os níveis difusivos de mais elevada ordem. Neste estudo sugerimos a introdução de apenas dois parâmetros, o comprimento de correlação  $\alpha$  e o comprimento de interação  $\mu$ , para analisarmos os regimes de formação de padrão em sistemas biológicos.

**Capítulo 5:** finalizamos o trabalho com nossas conclusões e perspectivas a respeito do que foi exposto na tese.

# Capítulo 1

## Modelos de dinâmica de populações

### 1.1 Introdução

Os modelos de dinâmica populacional que consideram a evolução temporal de apenas um tipo de espécie, são em geral muito importantes para estudos em laboratórios. No mundo macroscópico, estes modelos são utilizados para realizar previsões de fenômenos que podem influenciar a dinâmica de certos grupos de populações, em níveis regionais ou mundiais.

Neste capítulo, apresentamos um histórico sobre alguns modelos de dinâmica de populações estudados na literatura. Estas formulações levam em conta basicamente processos de crescimento e competição, aplicados a dinâmica de uma, ou várias espécies. Esta revisão se mostra importante, pois as idéias oriundas destas modelagens são utilizadas em teorias mais sofisticadas que incorporam outras dinâmicas e generalizações.

### 1.2 Modelo Malthusiano

No estudo de dinâmica de populações, sempre queremos encontrar como um número ou densidade de indivíduos de uma determinada população evolui ao longo do tempo. Este estudo pode ser realizado considerando as variáveis do sistema,

contínuas ou discretas. Considere  $u(t)$  uma variável contínua, que representa a densidade populacional de uma dada espécie no tempo  $t$  e  $u_0$  sua quantidade para um dado tempo inicial de observação. Um modelo geral, que nos dá a taxa com que esta população evolui no tempo pode ser escrito da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{du(t)}{dt} = & \text{NASCIMENTOS} - \text{MORTES} + \\ & + \text{MIGRAÇÕES} - \text{EMIGRAÇÕES}. \end{aligned} \quad (1.1)$$

Para uma população em equilíbrio estas taxas se relacionam como

$$\text{NASCIMENTOS} + \text{MIGRAÇÕES} = \text{MORTES} + \text{EMIGRAÇÕES}. \quad (1.2)$$

Na equação (1.1), os termos a direita podem ser inseridos de acordo com a situação de interesse. O termo NASCIMENTOS, pode ser proporcional à população e as taxas de MORTES podem ser proporcionais ao negativo do produto do número de indivíduos da população. Podemos também não ter taxas de MIGRAÇÕES ou EMIGRAÇÕES, como ocorre com a grande maioria dos modelos.

A situação mais simples que podemos ter para este problema de taxa, foi proposto por Thomas Malthus em 1798 no seu primeiro ensaio [2]. Nesta proposta, não levamos em conta o termo de migração e consideramos que o número de nascimentos e mortes, são proporcionais a densidade ou número  $u(t)$  de indivíduos.

$$\frac{du(t)}{dt} = au(t) - bu(t). \quad (1.3)$$

Nesta equação  $a$  e  $b$  são constantes positivas, que representam as taxas de nascimentos e mortes. Solucionando esta equação, teremos

$$u(t) = u_0 e^{(a-b)t}. \quad (1.4)$$

com  $u_0$  sendo a quantidade inicial de indivíduos. Na equação Eq.(1.4), vemos que se  $a > b$  a população cresce indefinidamente e se  $a < b$  a população caminhará para a extinção. Como podemos notar, este modelo se mostra irreal para tempos muito longos, pois existem outros fatores além das taxas de crescimentos e mortes que determinam como será a variação do número de determinada espécie para um dado



grupo inicial. Para tempos curtos o modelo Malthusiano mostra um bom ajuste e uma boa predição futura, com valores estatísticos reais em diversos trabalhos da literatura especializada [17, 2, 3, 4]. Malthus sofreu várias críticas não apenas dos cientistas como dos políticos, mas particularmente dos socialistas. Entretanto, embora seu modelo seja limitado, ele foi o primeiro a apontar para um crescimento exponencial da população humana, que vem acontecendo desde a revolução industrial até o final do século XX.

### 1.3 Modelo Logístico

Em 1838, o matemático Pierre François Verhulst propôs que um processo auto-limitante deve operar restringindo o crescimento de uma população, quando esta se torna demasiadamente grande[2]. A equação de taxa de crescimento proposto por Verhulst é escrita como

$$\frac{du(t)}{dt} = ru(t) \left(1 - \frac{u(t)}{k}\right). \quad (1.5)$$

Nesta equação  $r$  e  $k$  são constantes positivas, relacionadas aos processos de crescimento e de suporte do meio. Este processo limitante foi batizado por Verhulst como “Crescimento Logístico” e é encontrado em vários outros modelos dinâmicos mais sofisticados. Nesta modelagem, se compararmos com o modelo de Malthus, podemos identificar a taxa de crescimento como

$$r \left(1 - \frac{u(t)}{k}\right) \quad (1.6)$$

ou seja, uma taxa de crescimento dependente de  $u(t)$ . A constante  $k$  é chamada de capacidade de desenvolvimento do sistema, que é relacionado ao tamanho do sistema e à quantidade de suprimento sustentável disponível. Os estados estacionários de equilíbrio são encontrados fazendo  $du(t)/dt = 0$  e são

$$u(t) = 0 \quad \text{ou} \quad u(t) = k. \quad (1.7)$$

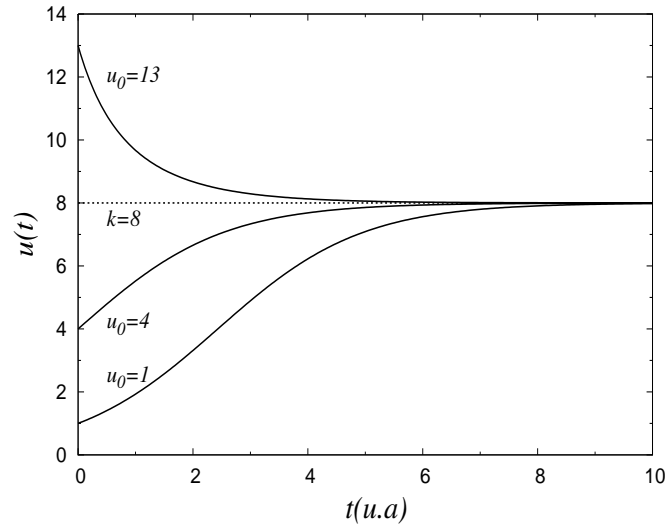


Figura 1.1: Solução geral da equação de Verhulst, para  $r = 0.8$ ,  $k = 8.0$  e vários valores do número inicial de indivíduos de uma determinada população. Nesta figura vemos como a capacidade de suporte  $k$ , limita o número de indivíduos de uma população.

A equação logística de Verhulst pode ser integrada exatamente utilizando o método da separação de variáveis e frações parciais como segue

$$\int r dt = \int \frac{du}{u \left(1 - \frac{u(t)}{k}\right)} = \int \frac{du}{u} + \int \frac{du}{k - u} = \ln \left( \frac{u}{k - u} \right) + cte. \quad (1.8)$$

Resolvendo para  $u(t)$  teremos

$$u(t) = \frac{u_0 k}{u_0 + (k - u_0) \exp(-rt)}. \quad (1.9)$$

No modelo logístico de Verhulst, como ilustrado na figura 1.1 notamos que a capacidade de desenvolvimento do sistema,  $k$ , é o valor limite para o crescimento da população, o que indica uma situação mais realista. Esse modelo se mostra mais apropriado pois uma determinada população não pode crescer mais do que as condições físicas e de suprimento lhes permite para um determinado meio.

## 1.4 Modelo de Lotka-Volterra

### 1.4.1 Lotka-Volterra para uma presa e um predador

O modelo de Lotka-Volterra tem um papel muito importante no estudo de sistemas ecológicos, pois foi o primeiro modelo proposto para tentar compreender como duas espécies estão relacionadas na dinâmica de presa e predador. Em 1925, Vito Volterra desenvolveu o modelo presa-predador, ao tomar conhecimento dos trabalhos do jovem zoologista Umberto d'Ancona. O estudo estatístico de d'Ancona, mostrou que houve um aumento da frequência de predadores como tubarões e a diminuição de outros peixes, durante a suspensão da pesca em determinada parte do mar Adriático na Itália, devido à Primeira Guerra Mundial (1914 a 1918). No mesmo ano em que Volterra tornou-se um estudioso dos problemas da ecologia, A. J. Lotka publica seu livro intitulado “Elements of Physical Biology”. Neste texto, Lotka discute a mesma modelagem para estudar a interação presa-predador. Como esta lei foi proposta de forma independente por Lotka e Volterra, este conjunto de equações ficou conhecido como equações de Lotka-Volterra. Definindo  $u(t)$  como o número (ou densidade) de presas de uma determinada espécie e  $v(t)$  como o número (ou densidade) de predadores de outra espécie, essas duas quantidades se relacionam nas equações de Lotka-Volterra como [2]:

$$\frac{du(t)}{dt} = a_u u(t) - b_u u(t)v(t) \quad (1.10)$$

$$\frac{dv(t)}{dt} = a_v u(t)v(t) - b_v v(t) \quad (1.11)$$

Neste conjunto de equações,  $a_u$ ,  $b_u$ ,  $a_v$  e  $b_v$  são constantes positivas. Segundo este modelo, se não existisse os predadores, a população de presas cresceria exponencialmente segundo o modelo Malthusiano, mas este crescimento é regulado pelo encontro dos predadores com suas presas dado pelo produto do número de ambos. O número de predadores por sua vez, deveria decrescer exponencialmente em uma região sem alimentos até atingir sua extinção, mas este decréscimo é regulado pelo produto do número de presas pelo número de predadores. Estes comportamentos são regulados pelas taxas  $a_u$ ,  $b_u$ ,  $a_v$  e  $b_v$ . A constante  $a_u$  indica a taxa de crescimento das presas,  $b_u$  a taxa de predação das presas, ou a eficiência dos predadores. O termo  $a_v$  se refere à taxa de crescimento dos predadores, ou encontros de predadores e presas e

$b_v$  é a taxa de mortes dos predadores.

Podemos encontrar uma equação que relacione  $u$  e  $v$  e verificar como é o comportamento de uma espécie em função da outra, para um dado tempo  $t$ . Dividindo a equação (1.11) pela equação (1.10) teremos

$$\frac{dv}{du} = \frac{v(-b_v + a_v u)}{u(a_u - b_u v)} \quad (1.12)$$

ou

$$\frac{(a_u - b_u v)}{v} dv = \frac{(-b_v + a_v u)}{u} du \quad (1.13)$$

Supondo que as densidades  $u$  e  $v$  tem valores iniciais  $u_0$  e  $v_0$ , podemos integrar a equação (1.13) nos intervalos  $[u_0, u]$  e  $[v_0, v]$

$$\int_{v_0}^v \frac{(a_u - b_u v')}{v'} dv' = \int_{u_0}^u \frac{(-b_v + a_v u')}{u'} du' \quad (1.14)$$

para encontrar a relação

$$a_u \ln\left(\frac{v}{v_0}\right) - b_u(v - v_0) = -b_v \ln\left(\frac{u}{u_0}\right) + a_v(u - u_0). \quad (1.15)$$

A Eq.(1.15) pode ser escrita da seguinte forma

$$v^{a_u} u^{b_v} e^{-b_u v - a_v u} = v_0^{a_u} u_0^{b_v} e^{-b_u v_0 - a_v u_0}, \quad (1.16)$$

ou utilizando a forma compacta

$$f(a_u, b_u, v) f(a_v, b_v, u) = f(a_u, b_u, v_0) f(a_v, b_v, u_0), \quad (1.17)$$

onde

$$f(a, b, x) = x^a e^{-bx}. \quad (1.18)$$

Observe, via Eq. (1.16), que para um dado valor de  $v$ , digamos  $v = v_1$  temos dois valores possíveis de  $u$ , o mesmo ocorre com os valores fixos de  $u$ . De modo que os pontos  $(v, u)$  tomados desta forma, geram o gráfico mostrado na figura 1.2 A. A eq. (1.16) pode ser solucionada para condições iniciais  $u_0$  e  $v_0$ , juntamente com os parâmetros de interações  $b_u$  e  $a_v$ , e as taxas de crescimento e mortes  $a_u$  e  $b_v$ , dadas.

Na figura 1.2, mostramos o comportamento da solução da Eq. (1.16), para

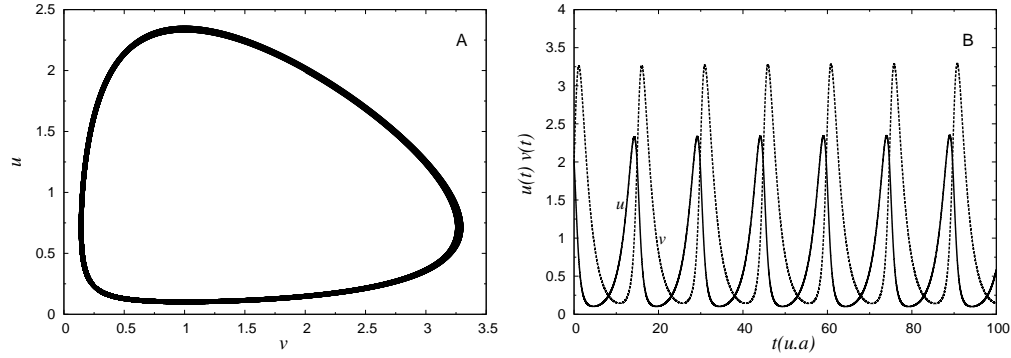


Figura 1.2: Solução do sistema Lotka-Volterra para um predador e uma presa. No painel A temos o espaço de fase  $(v, u)$ . Painel B apresenta a variação dos números ou densidade de presas e predadores no tempo. Estas curvas são feitas para  $u_0 = 2.0$  e  $v_0 = 2.0$ . As taxas de crescimento, competição e mortes valem:  $a_u = 0.5$ ,  $a_v = 0.7$ ,  $b_u = 0.5$  e  $b_v = 0.5$ .

alguns valores dos coeficientes e uma dada condição inicial, onde podemos observar a relação periódica entre as duas densidades de espécies.

### 1.4.2 Lotka-Volterra aplicado a um sistema de duas espécies predadoras e uma presa

Uma aplicação muito interessante do modelo de Lotka-Volterra, pode ser feito para um sistema constituído de três espécies, sendo que duas espécies são predadoras e uma é a presa. Matematicamente este sistema pode ser escrito como,

$$\frac{du(t)}{dt} = u(t) \{a_u - b_u v(t) - c_u w(t)\} \quad (1.19)$$

$$\frac{dv(t)}{dt} = v(t) \{a_v u(t) - b_v\} \quad (1.20)$$

$$\frac{dw(t)}{dt} = w(t) \{a_w u(t) - b_w\} \quad (1.21)$$

Nas equações acima, vemos que a espécie  $u$  é uma presa das espécies  $v$  e  $w$ . Da forma como as equações estão escritas, percebemos que não existe interação entre as espécies predadoras.

As equações (1.19), (1.20) e (1.21) podem ser resolvidas simultaneamente por um método numérico dado condições iniciais  $u_0$ ,  $v_0$  e  $w_0$  e os valores dos coeficientes

destas equações, que nos indicam as taxas de crescimento, mortes e eficiência destas espécies.

Na figura 1.3, apresentamos a solução numérica das equações (1.19), (1.20) e (1.21), para um determinado conjunto de valores dos coeficientes destas equações e para condições iniciais dadas. Neste gráfico podemos observar como as três espécies coexistem em uma dinâmica periódica infinita, lembrando que estamos considerando os processos de interações e crescimento no mesmo ponto do espaço. Observe que se  $w = 0$ , retornamos ao caso particular discutido na seção anterior. Isto é, o espaço de fase tridimensional  $(w, v, u)$  é projetado no plano  $(v, u)$ .

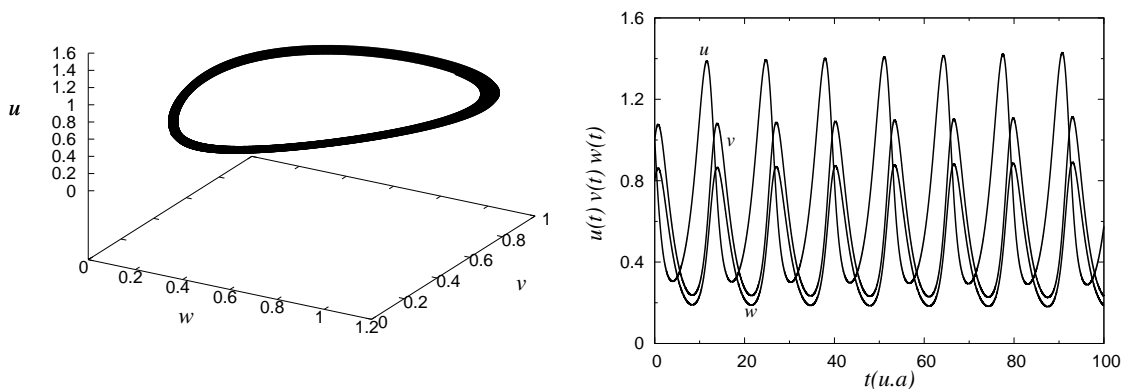


Figura 1.3: Solução numérica da equação de Lotka-Volterra para duas espécies predadoras e uma presa. Do lado direito mostramos as flutuações dos números ou densidades de presas e predadores no tempo. Na figura da esquerda apresentamos o espaço de fase das densidades  $(w, v, u)$ . Estes gráficos são feitos para  $u_0 = 1.0$ ,  $v_0 = 1.0$  e  $w_0 = 0.8$ . As constantes de crescimento e competição valem:  $a_u = 0.5$ ,  $b_u = 0.5$ ,  $a_v = 0.7$ ,  $b_v = 0.5$ ,  $c_u = 0.5$ ,  $a_w = 0.7$  e  $b_w = 0.5$ .

## 1.5 Equação de Fisher-Kolmogorov

Nos modelos descritos até aqui, não nos preocupamos como os indivíduos de uma dada espécie estão distribuídos no espaço. Sempre imaginamos que esta população está em um determinado ponto do espaço interagindo com constituintes desta, ou de outras espécies. Mas sabemos que as espécies se movem devido ao espaço ser heterogêneo. Vários fatores podem transformar uma região homogênea

nas direções, em heterogênea: o clima pode dar direções preferenciais para uma espécie, o solo pode não ser adequado para a vida em determinadas regiões, a vegetação pode não propiciar a existência de uma espécie específica, etc. Dessa forma um sistema biológico nunca se encontra em um determinado ponto do espaço, mas pode estar se movimentando em determinadas direções em busca de sobrevivência. Esse processo difusivo de indivíduos de uma espécie assemelha-se à difusão de partículas em um gás. Para um gás, esse processo difusivo obedece à Lei de Fick, que nos diz que o fluxo de matéria  $\vec{J}$  é proporcional ao gradiente da densidade de material. Guardadas as devidas diferenças, podemos considerar que um sistema biológico também deve obedecer à lei de *Difusão Fickiana*. Por analogia, podemos dizer que o fluxo material  $\vec{J}$ , de animais, bactérias, vírus, etc, é proporcional ao gradiente da densidade material em um determinado ponto

$$\vec{J}(\vec{r}, t) = -D\nabla u(\vec{r}, t). \quad (1.22)$$

Considere uma dada espécie de densidade  $u(\vec{r}, t)$  se difundindo em três dimensões. Vamos supor que estes indivíduos estão confinados em uma superfície  $S$  que encerra um volume  $V$ . A equação geral de conservação de matéria biológica, pode ser escrita como o fluxo de material que atravessa uma superfície  $S$  somado à matéria que é produzida neste volume.

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V u(\vec{r}, t) dv = - \int_S \vec{J}(\vec{r}, t) \cdot d\vec{s} + \int_V f(u, \vec{r}, t) dv. \quad (1.23)$$

A função  $f(u, \vec{r}, t)$  é chamada de suprimento de matéria, que é a quantidade de material biológico por unidade de volume, que pode ser produzido ou destruído no volume  $V$ , devido ao crescimento e mortes dos indivíduos. Utilizando o teorema da divergência, podemos escrever

$$\int_S \vec{J}(\vec{r}, t) \cdot d\vec{s} = \int_V \nabla \cdot \vec{J}(\vec{r}, t) dv. \quad (1.24)$$

Com o teorema da divergência a Eq.(1.23) pode ser escrita como

$$\int_V \left\{ \frac{\partial u(\vec{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J}(\vec{r}, t) - f(u, \vec{r}, t) \right\} dv = 0. \quad (1.25)$$

Como o volume  $V$  é arbitrário, teremos

$$\frac{\partial u(\vec{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J}(\vec{r}, t) - f(u, \vec{r}, t) = 0. \quad (1.26)$$

Utilizando a lei de Fick encontramos

$$\frac{\partial u(\vec{r}, t)}{\partial t} - \nabla \cdot \{ \nabla [Du(\vec{r}, t)] \} - f(u, \vec{r}, t) = 0. \quad (1.27)$$

Considerando que a constante de difusão não tenha uma dependência espacial, chegamos na equação

$$\frac{\partial u(\vec{r}, t)}{\partial t} = f(u, \vec{r}, t) + D\nabla^2 u(\vec{r}, t). \quad (1.28)$$

Os processos de mortes e nascimentos  $f(u, \vec{r}, t)$  podem ser dados por interações e crescimento em um contexto malthusiano

$$f(u, \vec{r}, t) = au(\vec{r}, t), \quad (1.29)$$

apenas interações destrutivas

$$f(u, \vec{r}, t) = -bu^2(\vec{r}, t), \quad (1.30)$$

ou em um contexto logístico

$$f(u, \vec{r}, t) = au(\vec{r}, t) \left\{ 1 - \frac{bu(\vec{r}, t)}{a} \right\} \quad (1.31)$$

Utilizando a forma logística para o suprimento de matéria  $f(u, \vec{r}, t)$ , encontramos a famosa equação de Fisher-Kolmogorov [18, 2, 19]

$$\frac{\partial u(\vec{r}, t)}{\partial t} = au(\vec{r}, t) - bu^2(\vec{r}, t) + D\nabla^2 u(\vec{r}, t). \quad (1.32)$$

Nesta formulação a constante  $a$  é chamada de taxa de crescimento e  $b$  a taxa de interação. Em comparação com o modelo logístico de Verhust a capacidade de suporte do sistema é dada por  $a/b$  e a taxa de crescimento logística é dada por

$$a \left\{ 1 - \frac{u(\vec{r}, t)}{a/b} \right\} \quad (1.33)$$



A equação de Fisher-Kolmogorov é a equação mais simples que descreve um processo de difusão, crescimento e auto-interação de uma espécie. Esta equação faz parte de um conjunto de equações muito conhecidas na química, chamadas equações de reação-difusão. Fisher sugeriu esta equação como um modelo determinístico para descrever como um gene favorecido se difunde em uma população [18]. De forma independente, em 1937 Kolmogorov estudou esta equação matematicamente com foco nos casos em que  $f(u, \vec{r}, t)$  tem raízes  $u = 0$  e  $u = 1$  [20, 21], lembrando que os estudos de Fisher são de 1936. Esta equação também é muito útil na descrição de vários outros fenômenos, como propagação de chamas [22], descrição de fluxos de nêutrons em reatores nucleares, dinâmica de defeitos em cristais líquidos [23], ou mesmo o estudo do efeito do transporte com memória em sistemas difusivos [24].

### 1.5.1 Presa-predador no modelo de Fisher-Kolmogorov

Uma sofisticação a mais pode ser introduzida ao modelo de Lotka-Volterra, quando consideramos que cada densidade de população pode se difundir no meio, durante o tempo de observação. Este termo é naturalmente justificado, devido à propriedade de difusividade de uma determinada espécie, seja em um nível macroscópico ou microscópico. Este fenômeno é responsável por distribuir indivíduos em determinadas regiões à medida em que estas ficam com pontos de saturação, o que é bem realista do ponto de vista da dinâmica de populações. Introduzindo esta dinâmica ao sistema de uma presa e dois predadores e considerando um sistema unidimensional, o sistema de equações de Lotka-Volterra pode ser escrito como:

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = D_u \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} + u(x, t) \{a_u - b_u v(x, t) - c_u w(x, t)\} \quad (1.34)$$

$$\frac{\partial v(x, t)}{\partial t} = D_v \frac{\partial^2 v(x, t)}{\partial x^2} + v(x, t) \{a_v u(x, t) - b_v\} \quad (1.35)$$

$$\frac{\partial w(x, t)}{\partial t} = D_w \frac{\partial^2 w(x, t)}{\partial x^2} + w(x, t) \{a_w u(x, t) - b_w\} \quad (1.36)$$

Neste conjunto de equações, as constantes  $D_u$ ,  $D_v$  e  $D_w$  representam a difusão das densidades populacionais  $u(x, t)$ ,  $v(x, t)$  e  $w(x, t)$  respectivamente. O significado das demais constantes já foram descritas na subseção anterior.

Podemos solucionar as equações de Lotka-Volterra com difusão, simultaneamente, utilizando o método Runge-Kutta de quarta ordem, descrito no apêndice

A deste trabalho.

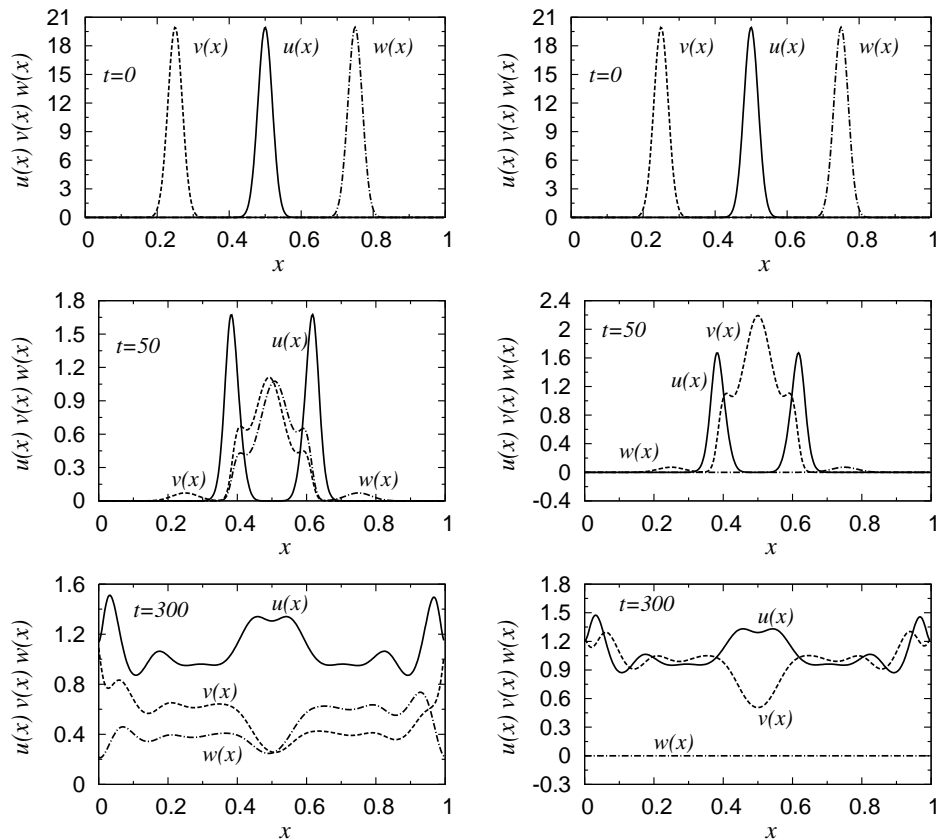


Figura 1.4: Solução do sistema presa-predador no modelo Fisher-Kolmogorov para dois predadores e uma presa, considerando a difusão de espécies iguais,  $D_u = D_v = D_w = 1 \times 10^{-4}$ . Do lado direito temos a evolução temporal das equações para os parâmetros  $a_u = 0.1$ ,  $b_u = 0.1$ ,  $c_u = 0.1$ ,  $a_v = 0.1$ ,  $b_v = 0.1$ ,  $a_w = 0.1$  e  $b_w = 0.1$ . No lado esquerdo evoluímos as equações usando as condições  $a_u = 0.1$ ,  $b_u = 0.1$ ,  $c_u = 0.1$ ,  $a_v = 0.1$ ,  $b_v = 0.1$ ,  $a_w = 0.07$  e  $b_w = 0.1$ . Os picos em cada gráfico superior indicam as condições iniciais das densidades  $u(x)$ ,  $v(x)$  e  $w(x)$ . A distribuição das presas está centrada em  $x_0 = 0.5$ , os predadores  $v(x)$  em  $x_0 = 0.25$  e os predadores  $w(x)$  centrada em  $x_0 = 0.75$ .

Na figura 1.4 temos a evolução do conjunto de equações de três espécies com termo de difusão. Nesta figura, notamos como três distribuições de espécies se difundem no espaço e interagem segundo taxas de competição e crescimentos bem definidas. Nos três painéis da esquerda, nesta figura, iniciamos com distribuições simetricamente localizadas no espaço, no tempo  $t = 0$ . Evoluímos estas equações, considerando todos os coeficientes iguais, ou seja, consideramos as eficiências dos predadores iguais e as taxas de crescimento e mortes iguais. Vemos, que nesta

estreita faixa de valores, conseguimos a coexistência das três espécies em um harmonioso equilíbrio. Nos painéis da direita, realizamos a mesma evolução, mas agora consideramos a eficiência do predador  $w(x)$  inferior à do predador  $v(x)$ ,  $a_w = 0.07$  e  $a_v = 0.1$ . Nesta condição, teremos a eliminação do predador  $w(x)$  tendo sua densidade final anulada. Este resultado ilustra um conhecido comportamento de espécies na Ecologia, onde dois predadores não podem ter o mesmo nicho ecológico. Ou seja, se duas espécies predadoras têm as mesmas necessidades, inevitavelmente uma dessas espécies tenderá à extinção. Resultados semelhantes podem ser encontrados também em trabalhos mais específicos, onde outras leis da Ecologia são discutidas [25, 26, 2].

## 1.6 Conclusão

Realizamos um estudo de revisão neste capítulo, buscando apresentar os principais modelos matemáticos de dinâmica de populações encontrados na literatura. Esta revisão se faz necessária, pois nossos estudos posteriores se baseiam nas dinâmicas e interações encontradas nestes modelos.

# Capítulo 2

## Formação de padrão na equação de Fisher-Kolmogorov com não-localidade e difusão

### 2.1 Introdução

O desenvolvimento científico e tecnológico vivido pela sociedade, sempre se deu por meio da tentativa de desvendar determinados mecanismos responsáveis por fenômenos encontrados na natureza. Um desses fenômenos que sempre atraiu grande atenção da comunidade científica, é o fenômeno de formação de padrão. Este fenômeno se caracteriza pelo processo no qual um estado espacial de um determinado sistema, inicialmente homogêneo e estável, evolui para um novo regime, agora sem esta homogeneidade espacial. Neste novo regime o sistema esboça um tipo estrutura espacial que chamamos de padrão [6].

Consideremos um sistema termodinâmico onde não existam trocas de matéria ou energia. Nestas condições este sistema pode obedecer as leis básicas da termodinâmica de equilíbrio, onde suas variáveis macroscópicas são invariantes no tempo e homogêneas no espaço. Neste sistema em equilíbrio, se houver troca de energia ou matéria com o meio, o sistema pode se organizar em estruturas segundo dinâmicas próprias que caracterizam o fenômeno de “formação de padrão”, caso em que as variáveis macroscópicas do sistema apresentam uma dependência espacial e (ou) temporal [6].

---

Neste capítulo, descreveremos alguns estudos importantes sobre formação de padrão em sistemas biológicos na modelagem das equações de Fisher-Kolmogorov com termo não-local. Este capítulo é importante para compreendermos a relevância da difusão nas estruturas de padrão que surgem das soluções da equação de Fisher-Kolmogorov generalizada.

## 2.2 Formação de padrão e auto-organização em sistemas físicos, químicos e biológicos

Na literatura científica, encontramos inúmeros trabalhos teóricos e experimentais sobre formação de padrão em sistemas físicos, químicos e biológicos [6, 7, 8, 9, 10, 12, 13, 14, 27, 28, 29, 30, 31]. É interessante observar a riqueza de sistemas encontrados na natureza, que exibem de formas diferentes o mesmo fenômeno, formação de padrão. Abaixo, apresentamos uma breve descrição de alguns destes sistemas já bem estabelecidos e estudados pela comunidade científica.

### 2.2.1 Magnetização espontânea e cristalização de Wigner

A magnetização espontânea e a cristalização de Wigner são, sem dúvida, os exemplos mais simples, encontrados na literatura, sobre o fenômeno de auto-organização. Num material magnético, como o ferro, os spins ordenam-se espontaneamente à uma temperatura característica. A magnetização espontânea é um exemplo de auto-organização de equilíbrio, onde a ordenação se dá ao atingir um estado de equilíbrio [32]. Na cristalização de Wigner, elétrons sobre uma fina camada de Hélio podem ser encontrados em um regime cristalino, distribuídos em uma rede triangular seguindo uma ordem periódica em um determinado valor da razão entre a energia cinética e a energia potencial deste sistema, obedecendo um critério chamado critério de Lindmann [33, 34]. Estes dois exemplos são intensamente estudados até os dias atuais, devido à sua importância no estudo de sistemas físicos mais complexos e gerais.

## 2.2.2 Convecção de Rayleigh-Bénard

A convecção de Rayleigh-Bénard é um problema físico muito famoso que exhibe formação de padrão. Consideremos uma camada plana e fina de óleo que é aquecida lentamente à partir de sua superfície inferior. Se a diferença de temperatura  $T_i - T_s$ , da parte inferior e superior da lâmina de óleo, for menor que um certo valor crítico  $T_c$ , então temos um fluxo de calor homogêneo da parte de baixo do óleo para sua superfície [7, 6]. Mas se a diferença de temperatura  $T_i - T_s$  exceder o valor crítico  $T_c$ ,

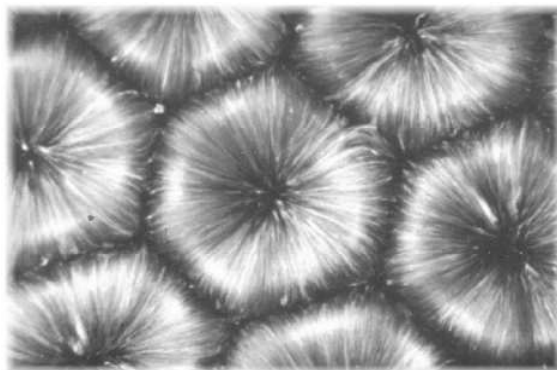


Figura 2.1: Convecção de Rayleigh-Bénard em óleo com pó de alumínio suspenso no líquido.

agora teremos uma convecção no óleo, que em algumas partes se dá da parte inferior do líquido para a superfície, e em outras regiões ocorre o contrário, a convecção se dá da parte superior da lâmina para baixo. Na região superficial da lâmina, veremos a formação de “telhas” em formato hexagonal por onde circula o óleo. Nestas “telhas” hexagonais, teremos o seguinte comportamento para o fluxo de óleo: na região central do hexágono temos um fluxo que sobe, e nas laterais destes hexágonos temos um fluxo em sentido contrário, que sai da superfície e vai para a região inferior da lâmina de óleo. Se em vez de óleo existisse um gás, teríamos agora a convecção no sentido contrário ao observado no líquido. Em laboratório a convecção de Rayleigh-Bénard é facilmente demonstrada utilizando camadas de óleo entre duas superfícies metálicas, uma quente e outra fria. A massa de óleo circula em trajetórias fechadas, com aspectos de rolos, onde seu formato superficial são hexágonos, como mostrado na figura 2.1. Neste fenômeno, o ponto chave é justamente a existência de um estado inicial estável no qual, alterando algum parâmetro deste sistema, que no caso da convecção de Rayleigh-Bénard é o valor de  $T_i - T_s$ , teremos a perda desta estabilidade espacial em favor de uma formação de padrão não uniforme.

### 2.2.3 Instabilidade do Impressor

Este fenômeno é uma instabilidade morfológica de origem hidrodinâmica conhecida como Instabilidade do Impressor [35, 36]. Neste sistema, consideramos um rolo molhado por um líquido que gira com certa velocidade angular  $\omega$ . Na interface da camada de líquido com o ar do ambiente, forma-se uma região cuja morfologia apresenta formação de padrão espontânea, como observado na figura 2.2, quando a velocidade angular do cilindro possui determinado valor crítico  $\omega_c$ , ou um valor acima deste.

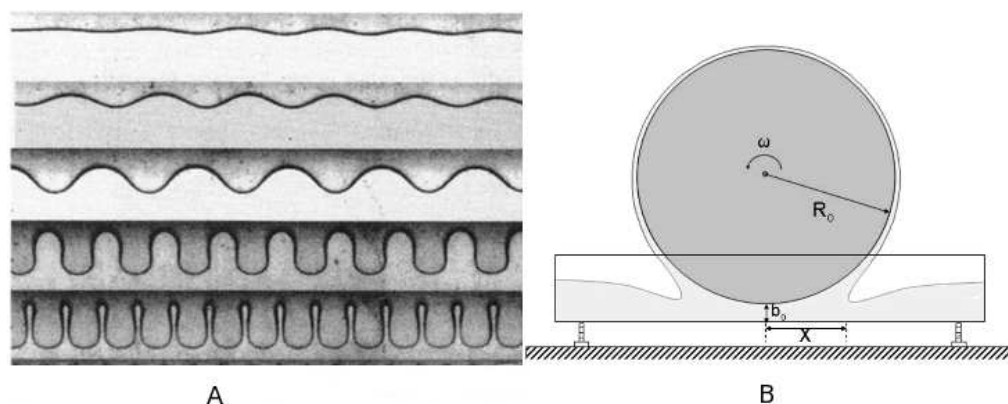


Figura 2.2: Franjas de formação de padrão no experimento da instabilidade do impressor. Painel A, foto das franjas de padrão e painel B aparato experimental utilizado.

### 2.2.4 O modelo de Turing

Em 1952, Alan Turing propõe um mecanismo que representa uma grande contribuição para os estudos sobre a morphogeneses [28, 13], o processo no qual um zigoto adquire forma e se torna um embrião. Turing sugere um modelo de reação-difusão, onde sob certas condições, populações podem interagir e se difundir de alguma maneira produzindo padrões heterogêneos estáveis. No modelo de Turing, os padrões são resultados das taxas de reação e difusão das substâncias químicas que estão envolvidas no processo, não levando em conta nenhum outro mecanismo externo. As

equações do modelo de Turing, são usualmente escritas como

$$\begin{aligned}\partial_t U(\vec{r}, t) &= D_U \nabla^2 U(\vec{r}, t) + f(U, V) \\ \partial_t V(\vec{r}, t) &= D_V \nabla^2 V(\vec{r}, t) + g(U, V).\end{aligned}\tag{2.1}$$

Neste conjunto de equações,  $U$  e  $V$  representam substâncias químicas que podem se difundir e reagir. As funções  $f$  e  $g$  são os termos de reação, não-lineares, que são escolhidos de acordo com o sistema.

## 2.3 Equação de Fisher-Kolmogorov

Dinâmica de população cobre um vasto campo de estudos em sistemas biológicos e ecológicos, um exemplo destes estudos, é a formação de padrão na evolução de colônias de bactérias [16, 37]. Tais estudos, como o crescimento de um núcleo de bactérias, é muito importante, pois vários tipos de infecções bacterianas podem ser melhor controladas se sua dinâmica de crescimento for compreendida em seu nível mais básico.

### 2.3.1 Equação de Fisher-Kolmogorov normal

Ao trabalharmos exclusivamente com a evolução de células de populações e seu comportamento espaço-temporal, é usual concentrarmos nossas atenções em alguns processos básicos, como a reprodução destes constituintes, sua competição por recursos e a difusão desta população no tempo e espaço, deixando de lado questões não mensuráveis fisicamente como as mutações destes indivíduos. Diante deste cenário, a equação de Fisher-Kolmogorov [37, 38] se torna um modelo muito importante na tentativa de estudar estes sistemas, pois incorpora em sua essência, todos esses processos.

Como introduzido no capítulo anterior, para uma densidade de população  $u(\vec{r}, t)$ , a forma como essa densidade evolui no tempo e no espaço pode ser descrita, pela equação de Fisher-Kolmogorov [2]

$$\frac{\partial u(\vec{r}, t)}{\partial t} = D \nabla^2 u(\vec{r}, t) + au(\vec{r}, t) - bu^2(\vec{r}, t).\tag{2.2}$$



Na equação (2.2), notamos a junção de dois processos básicos em dinâmica de populações: o transporte difusivo de uma determinada espécie com densidade  $u(\vec{r}, t)$ , que é dada pela equação de difusão

$$\frac{\partial u(\vec{r}, t)}{\partial t} = D\nabla^2 u(\vec{r}, t) \quad (2.3)$$

e os processos de crescimento e competição, que são descritos pela equação logística

$$\frac{\partial u(\vec{r}, t)}{\partial t} = au(\vec{r}, t) - bu^2(\vec{r}, t). \quad (2.4)$$

Se considerarmos  $a$  e  $b$  nulos na Eq. (2.2) e um sistema unidimensional, a equação de Fisher-Kolmogorov se torna simplesmente uma equação de difusão com uma taxa de transporte difusivo  $D$

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}. \quad (2.5)$$

Esta equação pode ser resolvida utilizando o método da transformada de Fourier e sua solução é escrita como

$$u(x, t) = u_0(x) \frac{e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4Dt}}}{\sqrt{4\pi Dt}}. \quad (2.6)$$

Nesta equação  $u_0(x)$  é a distribuição inicial de indivíduos.

Tomando  $D = 0$  na Eq. (2.2) e levando em conta novamente que o sistema é unidimensional, teremos a seguinte equação logística

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = au(x, t) \{1 - Ku(x, t)\}, \quad (2.7)$$

que indica um processo de crescimento da população controlada pelo termo de capacidade  $K = b/a$ , que é a razão entre o termo de competição ou luta dos indivíduos por recursos  $b$  e a taxa de nascimentos  $a$  dos mesmos. Esta equação tem solução analítica que é dada por

$$u(x, t) = \frac{u_0(x)K}{u_0(x) + (K - u_0(x))e^{-at}}. \quad (2.8)$$

Na Eq. (2.8)  $u_0(x)$  é a distribuição inicial para  $t = 0$ . Vemos que as equações de difusão e logística têm soluções gerais, mas para a equação de Fisher-Kolmogorov

não temos uma solução analítica geral [39].

### 2.3.2 Equação de Fisher-Kolmogorov generalizada

Como discutido em vários trabalhos, na forma como a equação de Fisher-Kolmogorov é usualmente escrita, Eq. (2.2), ela não é capaz de descrever a formação de padrão em sistemas biológicos ou outros sistemas [9, 16, 40]. Para que isso aconteça, para que possamos extrair este fenômeno da equação de Fisher-Kolmogorov, essa equação deve ser generalizada, incorporando efeitos não-locais no termo de competição dos indivíduos de uma determinada colônia. Assim como proposto por vários autores [16, 37, 40, 41], em uma dimensão a equação de Fisher-Kolmogorov generalizada (EFKG) pode ser escrita como

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} + au(x, t) - bu(x, t) \int_{\Omega} f_{\mu}(x - x') u(x', t) dx'. \quad (2.9)$$

Nesta generalização, os constituintes de uma determinada colônia têm suas interações pesadas pela função  $f_{\mu}(x - x')$  que é uma função de distribuição chamada “função influência”, caracterizada por um alcance  $\mu$  normalizada no domínio  $\Omega$

$$\int f_{\mu}(x) dx = 1. \quad (2.10)$$

Neste modelo cada indivíduo interage não mais com seus vizinhos no ponto  $x$  como na antiga formulação local, mas agora, com todos os vizinhos que estão dentro do limite  $x - x'$  e esta interação é pesada pela função influência  $f_{\mu}(x - x')$ . Dado um ponto  $x$ , o somatório das interações entre um indivíduo neste ponto com indivíduos a uma distância  $|x - x'|$  será maior, quanto maior for o tamanho do alcance  $\mu$  da função que pesa estas interações. A função influência, pode assumir diversas formas. Podemos tanto ter uma função bem localizada, como uma delta, ou uma distribuição gaussiana, ou mesmo uma distribuição sem derivada na origem, como uma distribuição de Laplace.

A origem física do termo de interação não-local pode ser entendida, no caso das bactérias, como a difusão de nutrientes e (ou) a liberação de toxinas na colônia, provocando uma luta por regiões mais favoráveis no sistema, com (sem) nutrientes (toxinas).

### 2.3.3 Limites da função influência

É relatado em alguns trabalhos [9, 16, 37, 40], e será verificado também neste capítulo, que a formação de padrão observada em uma densidade populacional estacionária  $u(x)$  para uma dada interação competitiva de alcance  $\mu$ , caracterizada pela função de distribuição  $f_\mu(x - x')$ , tem os seguintes comportamentos extremos:

- i)* Se o alcance da interação competitiva entre os indivíduos for muito curto  $\mu \rightarrow 0$ , isso corresponde a uma função de distribuição bem localizada, do tipo delta

$$f_\mu(x - x') = \delta(x - x'). \quad (2.11)$$

Para esse caso o termo de competição pode ser escrito como

$$bu(x, t) \int_{\Omega} \delta(x - x') u(x', t) dx' = bu^2(x, t). \quad (2.12)$$

Com este alcance para a função influência, notamos que o termo de interação da equação generalizada volta a ser o mesmo termo da equação de Fisher-Kolmogorov normal.

- ii)* Como veremos também, a não-localidade deixará de existir para o limite oposto, se o alcance da interação competitiva for muito grande,  $\mu \rightarrow \infty$ . Neste caso a densidade será uniforme em todos os pontos do domínio  $\Omega$ , e novamente não teremos formação de padrão. Este comportamento pode ser melhor compreendido numericamente, resolvendo a EFKG.
- iii)* Os processos difusivos também têm um papel muito importante na formação de padrão nos sistemas biológicos. Se tivermos uma constante de difusão muito grande, essa dinâmica dominará a competição entre os indivíduos do sistema, fazendo com que a distribuição inicial de bactérias  $u(x)$  se torne rapidamente homogênea ao longo do espaço, não dando tempo para que o sistema se organize em uma estrutura, não formando assim uma figura de padrão.

Como observado nos itens anteriores, a função de distribuição  $f_\mu(x - x')$  deve ter um alcance  $\mu$  não muito pequeno nem muito grande, para que possamos ter formação de padrão. Desta forma, funções adequadas com as características deseja-

das, serão, distribuições do tipo gaussianas, Heaviside ou mesmo Laplacianas, desde que obedecem os requisitos anteriores.

## 2.4 Tipos de funções influências

Para ilustrar as várias possibilidades de funções influências que podemos ter no processo de solução da EFKG, passamos a uma breve descrição destas distribuições, que são utilizadas neste, ou em outros capítulos.

### 2.4.1 Função influência gaussiana

A função influência gaussiana é escrita como

$$f_{\mu}(x - x') = \Lambda(x) \exp \left[ -\frac{(x - x')^2}{2\mu^2} \right]. \quad (2.13)$$

O fator de normalização  $\Lambda(x)$ , para um sistema de tamanho  $L$  vale

$$\frac{1}{\Lambda(x)} = \sqrt{\pi/2\mu} \left\{ \operatorname{erf} \left( \frac{x}{\sqrt{2\mu}} \right) - \operatorname{erf} \left( \frac{x - L}{\sqrt{2\mu}} \right) \right\}. \quad (2.14)$$

$\mu$  representa a dispersão da distribuição. Para condições de contorno sem fluxo  $\frac{\partial u(x,t)}{\partial x} = 0$ , a normalização de  $f_{\mu}(x - x')$  é dada pela Eq. (2.14). Considerando condições de contorno periódicas  $u(0, t) = u(L, t)$ , a normalização de  $f_{\mu}(x - x')$  é constante e é dada por

$$\frac{1}{\Lambda} = \sqrt{\pi/2\mu} \operatorname{erf} \left( \frac{L}{\sqrt{2\mu}} \right). \quad (2.15)$$

### 2.4.2 Função influência de Heaviside

A função influência pode ser do tipo Heaviside, pesando de forma igual todas as interações que estão dentro do alcance  $|x - x'| \leq \mu$  e considerando nulas todas as interações fora deste limite. Com esta característica, para um sistema com tamanho  $L$ , a função de Heaviside é escrita como

$$f_{\mu}(x - x') = \frac{1}{2\mu} \{ \Theta [\mu - (x - x')] \Theta [\mu + (x - x')] \}. \quad (2.16)$$

O comprimento  $\mu$  deve ser sempre menor ou igual ao tamanho  $L$  do sistema. Esta função também pode ser escrita na forma de uma sentença matemática

$$f_{\mu}(x - x') = \begin{cases} \frac{1}{2\mu}, & |x - x'| \leq \mu \\ 0 & |x - x'| \geq \mu \end{cases} \quad (2.17)$$

### 2.4.3 Função influência de Laplace

Utilizando uma distribuição de Laplace, a função influência  $f_{\mu}(x - x')$  tem a seguinte forma

$$f_{\mu}(x - x') = \frac{1}{2\mu} \begin{cases} \exp[-\mu(x - x')] & \text{se } x \geq x' \\ \exp[\mu(x - x')] & \text{se } x \leq x' \end{cases} \quad (2.18)$$

Nesta equação, devemos impor a normalização desta distribuição no domínio  $[0, L]$ .

### 2.4.4 Função influência gaussiana-Heaviside

A função de distribuição gaussiana-Heaviside combina duas propriedades importantes para uma função influência: uma suavidade na origem e cauda curta nas extremidades. Para compormos esta função influência, devemos basicamente multiplicar a distribuição gaussiana, pela função de distribuição de Heaviside. Esta nova distribuição é escrita como

$$f_{\mu,\sigma}(x - x') = \frac{\exp\left[-\frac{(x-x')^2}{\sigma^2}\right]}{\left[\operatorname{erf}\left(\frac{x'}{\sqrt{2}\sigma}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{x'-2\mu}{\sqrt{2}\sigma}\right)\right]} \{\Theta[\mu - (x - x')] \Theta[\mu + (x - x')]\}.$$

Nesta equação  $\sigma$  representa novamente a dispersão da função gaussiana e  $2\mu$  o intervalo onde a função está contida.

### 2.4.5 Função influência generalizada

Podemos compor matematicamente uma distribuição que seja, em um dado limite uma distribuição quadrática, uma distribuição gaussiana ou uma distribuição

Delta de Dirac. Esta distribuição pode ser escrita da seguinte forma [16]

$$f_{\mu,\nu}(x-x') = \frac{1}{\mu\sqrt{\pi}} \frac{\Gamma(\nu+1)}{\Gamma(\nu+1/2)} \left[ 1 - \frac{(x-x')^2}{\mu^2} \right]^{\nu-\frac{1}{2}} \Theta[\mu - (x-x')] \Theta[\mu + (x-x')]. \quad (2.19)$$

Nestas equação,  $\nu$  é um parâmetro que define o tipo de função,  $\Gamma$  e  $\Theta$  são as funções Gama e Heaviside. Para  $\nu \rightarrow 0.5$  esta função se comporta como uma distribuição tipo caixa, para  $\nu \rightarrow \infty$  observaremos uma distribuição Delta e para valores intermediários teremos uma distribuição gaussiana \*.

## 2.5 Estudo perturbativo na EFKG

Podemos fazer um estudo analítico da EFKG introduzindo uma pequena perturbação na solução constante  $u_0$ , que é obtida fazendo  $u(x, t)$  constante,  $u(x, t) = u_0$ . A solução constante é conhecida como estado estacionário homogêneo e para a EFKG é dada por  $u_0 = a/b$ . Nesta análise perturbativa, devemos imaginar que o estado estacionário homogêneo terá uma pequena perturbação temporal. Se esta pequena perturbação for amplificada no tempo, a solução final estacionária será deslocada da solução homogênea  $u_0$  dando origem à formação de padrão no sistema [9, 40]. Matematicamente este comportamento pode ser dado por

$$u(x, t) = u_0 + \varepsilon e^{ikx} e^{\varphi(k)t}. \quad (2.20)$$

Nesta equação,  $\varepsilon$  é a amplitude da perturbação oscilante considerada muito pequena,  $i$  é a unidade imaginária ( $i^2 = -1$ ),  $k$  é o número de onda no espaço de Fourier e  $\varphi(k)$  é a quantidade de maior interesse nesta análise, conhecida como taxa de crescimento da formação de padrão, que pode depender do número de onda  $k$ . Neste estudo perturbativo, notamos que se a taxa de crescimento da formação de padrão  $\varphi(k)$  for menor que zero, esta perturbação se extinguirá no tempo, não deslocando a solução homogênea para um estado de formação de padrão †. Mas se  $\varphi(k)$  for maior que zero, alguns modos de perturbação serão amplificados, propiciando assim, o surgimento do fenômeno formação de padrão. Desta forma, nossa análise perturbativa

---

\*No capítulo 4 podemos ver uma ilustração do comportamento desta distribuição para estes limites.

†O fenômeno formação de padrão nesta análise, é caracterizado pelo surgimento de ondas com comprimento e frequência bem definidos na solução  $u(x, t)$ .

se dará no sentido de verificar em quais condições os modos de perturbação serão ou não amplificados gerando formação de padrão, ou seja, estaremos interessados em verificar para quais condições dos parâmetros da EFKG a taxa  $\varphi(k)$  é positiva ou negativa.

Começamos nosso estudo substituindo a Eq. (2.20) na Eq. (2.9). Desprezando termos de segunda ordem na amplitude de perturbação  $\varepsilon$ , introduzindo a transformação de variáveis  $z = x - x'$  e considerando que a função influência obedece as seguintes propriedades

$$f_\mu(x - x') = f_\mu(x' - x) \quad (2.21)$$

e

$$\int_{\Omega} f_\mu(x') dx' = 1 \quad (2.22)$$

encontramos a seguinte relação de dispersão,

$$\varphi(k) = -Dk^2 - a\mathcal{F}_c \{f_\mu(z)\} - ia\mathcal{F}_s \{f_\mu(z)\}. \quad (2.23)$$

Nesta equação  $\mathcal{F}_c \{f_\mu(z)\}$  e  $\mathcal{F}_s \{f_\mu(z)\}$  são as transformadas de Fourier cosseno e seno da função influência  $f_\mu(z)$ ,

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_c \{f_\mu(z)\} &= \int_{\Omega} f_\mu(z) \cos(kz) dz \\ \mathcal{F}_s \{f_\mu(z)\} &= \int_{\Omega} f_\mu(z) \sin(kz) dz. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Observamos que a Eq. (2.23) é composta por uma parte real e uma parte imaginária

$$\gamma(k) = \mathcal{Re} \{\varphi(k)\} = -Dk^2 - a\mathcal{F}_c \{f_\mu(z)\} \quad (2.25)$$

e

$$\eta(k) = \mathcal{Im} \{\varphi(k)\} = -a\mathcal{F}_s \{f_\mu(z)\}. \quad (2.26)$$

A evolução temporal da densidade populacional  $u(x, t)$  é observada no espaço real. Podemos verificar como esta evolução temporal ocorre pela Eq. (2.20), tomando apenas sua parte real

$$u(x, t) = \frac{a}{b} + \varepsilon \cos(kx) e^{\gamma t}. \quad (2.27)$$

Com isso devemos impor que nossa taxa de formação de padrão seja real. Observado

esse detalhe, sempre restringiremos nossa análise à parte real da função  $\varphi(k)$  que denotamos por  $\gamma(k)$ ,

$$\gamma(k) = -Dk^2 - a \int_{\Omega} f_{\mu}(z) \cos(kz) dz. \quad (2.28)$$

Como estamos interessados em verificar em que conjunto de valores dos parâmetros da Eq. (2.9) a taxa de formação de padrão é positiva, devemos escolher uma função influência para realizar a transformada de Fourier e encontrar  $\gamma(k)$ . Podemos começar nosso estudo analítico escolhendo a distribuição mais simples, que é uma distribuição de Heaviside. A distribuição de Heaviside é escrita como

$$f_{\mu}(z) = \frac{1}{2\mu} [\Theta(\mu - z) \Theta(\mu + z)]. \quad (2.29)$$

Nesta equação,  $\mu$  é o alcance da função influência, que é normalizada no domínio  $L$  do sistema ( $0 < \mu < L$ ). Resolvendo a integral da Eq. (2.28), para a função influência de Heaviside, Eq. (2.29), encontramos a seguinte expressão para a taxa real  $\gamma(k)$

$$\gamma(k) = -Dk^2 - a \frac{\sin(k\mu)}{k\mu}. \quad (2.30)$$

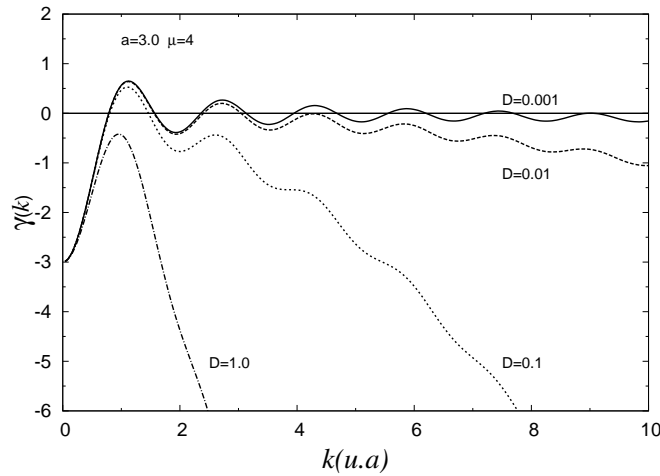


Figura 2.3: Taxa de crescimento da formação de padrão  $\gamma(k)$ , para uma função influência Heaviside. A constante de crescimento vale  $a = 3.0$  e o comprimento de interação  $\mu = 4.0$ . Neste gráfico a medida que a constante de difusão aumenta, a taxa  $\gamma(k)$  deixa de ter valores positivos.

Na figura 2.3 mostramos como é o comportamento da taxa de crescimento da



formação de padrão  $\gamma(k)$  para alguns valores da constante de difusão  $D$ . Notamos que para valores pequenos da difusão,  $D = 0.001$ ,  $\gamma(k)$  apresenta regiões positivas, mas para valores maiores,  $D = 1.0$ , este comportamento deixa de existir. Isso é fisicamente aceitável uma vez que os processos difusivos tendem a levar um determinado sistema a um regime espacialmente homogêneo e isotrópico, ou seja, impossibilitando que determinadas regiões sejam privilegiadas, o que poderia caracterizar o fenômeno formação de padrão.

Para uma função influência gaussiana-Heaviside Eq. (2.19), podemos resolver a integral de Fourier para encontrar a seguinte taxa  $\gamma(k)$ ,

$$\gamma(k) = -Dk^2 - \frac{a \exp(k\sigma)^2}{2\text{erf}(\mu/\sigma)} \left[ \text{erf}\left(\frac{\mu}{\sigma} - i\frac{k\sigma}{2}\right) + \text{erf}\left(\frac{\mu}{\sigma} + i\frac{k\sigma}{2}\right) \right], \quad (2.31)$$

que também tem partes positivas e negativas como na função influência anterior.

Impondo que a taxa  $\gamma(k)$  seja maior que zero na Eq.(2.28), podemos encontrar a seguinte equação:

$$\lambda > 2\pi \sqrt{\frac{D}{-a\mathcal{F}_c\{f_\mu(z)\}}}. \quad (2.32)$$

Nesta equação  $\lambda = 2\pi/k$  é o comprimento de onda da estrutura de formação de padrão na EFKG. Nesta análise, notamos que para garantir um comprimento de onda  $\lambda$  real, devemos introduzir uma função influência na transformada de Fourier, de forma que esta transformada seja negativa. Para uma função gaussiana em um domínio infinito, por exemplo, devemos observar que sua transformada será essencialmente positiva, o que implicará em modos totalmente amortecidos das estruturas de padrão.

## 2.6 Solução numérica da equação de Fisher-Kolmogorov generalizada

Considere a equação de Fisher-Kolmogorov generalizada com difusão em uma dimensão

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} + au(x, t) - bu(x, t) \int_{\Omega} f_\mu(x - x') u(x', t) dx'. \quad (2.33)$$

Esta equação pode ser resolvida utilizando um método numérico apropriado, para uma determinada função influência  $f_\mu(x - x')$ , uma distribuição inicial  $u(x, t = 0)$  e condições de contorno definidas.

Para um sistema de tamanho  $L$ , podemos ter diversos tipos de distribuições iniciais  $u(x)$  para nossa colônia de bactérias. Podemos considerar uma distribuição constante em todos os pontos,  $u(x) = cte$ , ou mesmo um único ponto da distribuição diferente de zero,  $u(x - x_0) = \delta(x - x_0)$ . Considerando uma distribuição de indivíduos tipo gaussiana, teremos

$$u(x) = \Gamma \exp \left[ -\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma^2} \right]. \quad (2.34)$$

Nesta equação  $\Gamma$  é um fator de normalização,  $x_0$  é o ponto onde a distribuição está centrada e  $\sigma$  é a dispersão da distribuição. Impondo que  $u(x)$  seja normalizada no intervalo  $[0, L]$ , o fator de normalização  $\Gamma$  será dado por

$$\frac{1}{\Gamma} = \sqrt{\pi/2\sigma} \left\{ \operatorname{erf} \left( \frac{x_0}{\sqrt{2}\sigma} \right) - \operatorname{erf} \left( \frac{x_0 - L}{\sqrt{2}\sigma} \right) \right\}. \quad (2.35)$$

Utilizando o método *Operator Splitting*, juntamente com a solução do termo de difusão por meio do esquema de discretização FTCS e a solução do termo de crescimento utilizando Runge-Kutta de quarta ordem, podemos encontrar a densidade  $u(x, t)$  e os vetores estacionários  $u(x)^\ddagger$ . Para resolver a EFKG numericamente, consideramos um sistema de tamanho  $L = 1.0$  e aplicamos condições de contorno periódicas  $u(x = 0, t) = u(x = L, t)$ . Em cada evolução temporal usamos uma distribuição de partículas gaussiana, centrada em  $x_0 = 0.5$ , com dispersão  $\sigma = 0.04$ . Em todos os cálculos usamos os incrementos espaciais e temporais  $\Delta x$  e  $\Delta t$  iguais a  $\Delta x = 3 \times 10^{-3}$  e  $\Delta t = 1 \times 10^{-3}$ . A evolução temporal do vetor  $u(x, t)$  é feita até o instante  $t = 180$  e os estados estacionários são encontrados utilizando a condição:

$$|u(x, t + \Delta t) - u(x, t)| < \delta, \quad (2.36)$$

com  $\delta = 1 \times 10^{-12}$ .

Na figura 2.4, apresentamos a solução  $u(x, t)$  com as interações pesadas por uma função gaussiana, com  $\mu = 0.01$  (A),  $\mu = 0.15$  (B) e uma taxa de difusão

---

<sup>‡</sup>Estes métodos estão descritos no apêndice A deste trabalho.

$D = 1 \times 10^{-4}$ , em unidades arbitrárias. Nesta figura podemos observar como ocorre a formação de padrão de uma distribuição gaussiana de partículas. No primeiro gráfico (A) as interações são pesadas igualmente e o efeito não-local não se manifesta. Quando  $\mu = 0.15$  os efeitos não-locais se fazem presentes na dinâmica do sistema, que se organiza em estruturas periódicas bem definidas. Na figura 2.4 (B), para  $t = 0$  as partículas estão mais concentradas no centro do sistema, mas para tempos maiores,  $t = 180$ , o sistema apresenta uma distribuição oscilante no espaço, caracterizando uma estrutura de formação de padrão.

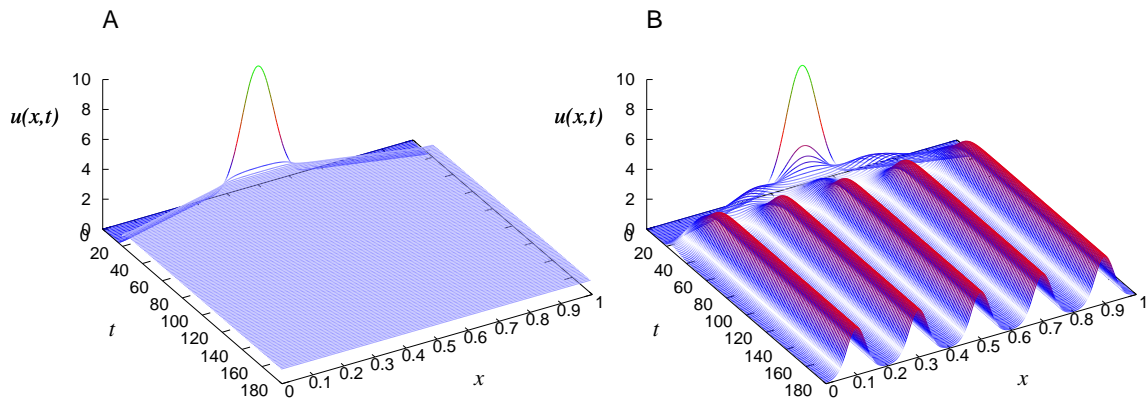


Figura 2.4: Solução numérica da EFKG para uma função influência gaussiana. No painel A o comprimento de interação vale  $\mu = 0.01$  e no painel B,  $\mu = 0.15$ . O coeficiente de difusão em ambos os casos vale  $D = 1 \times 10^{-4}$ .

Os estados estacionários  $u(x)$  são mostrados na figura 2.5, para  $\mu = 0.15$  e  $\mu = 0.25$  e vários valores do coeficiente de difusão  $D$ . Nestes gráficos, podemos verificar a influência da difusão nas estruturas de formação de padrão. Fixando  $\mu = 0.15$ , para valores pequenos da difusão os estados estacionários apresentam padrão. Mas quando elevamos o coeficiente de difusão, notamos que para  $D = 2.5 \times 10^{-4}$  os picos de padrão já se tornam negligenciáveis. O mesmo comportamento ocorre para  $\mu = 0.25$ , onde notamos que as estruturas bem definidas de formação de padrão são completamente amortecidas para  $D = 5.9 \times 10^{-4}$ . Este comportamento ilustra bem a relevância dos processos difusivos em sistemas biológicos, que vem sendo intensamente estudados nos últimos anos por vários autores [9, 14, 16, 37, 40].

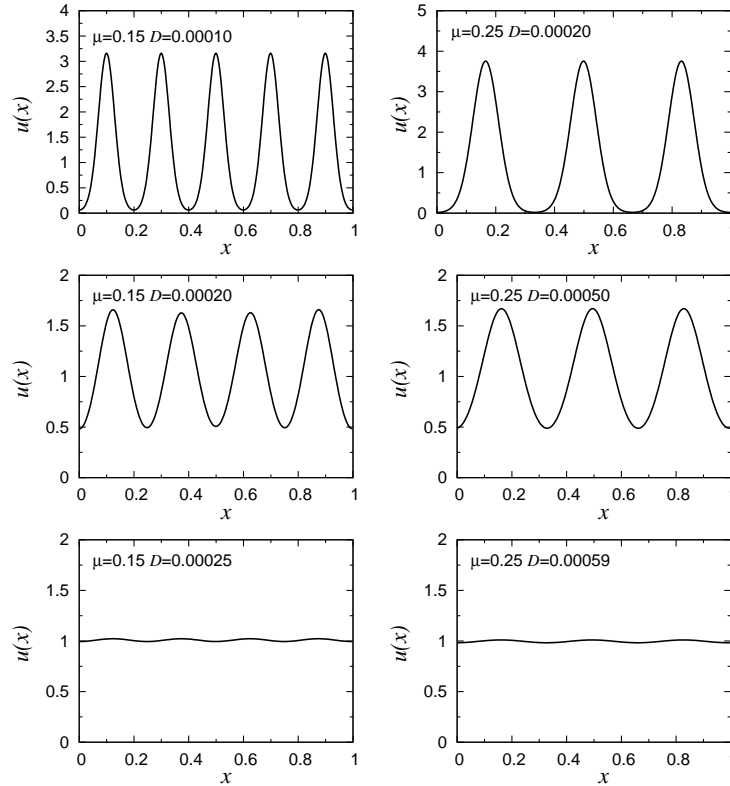


Figura 2.5: Vetor estacionário  $u(x)$ , para  $\mu = 0.15$  e  $\mu = 0.25$  e alguns valores da constante de difusão de um meio. Para um comprimento de interação  $\mu$  fixo, os picos dos estados estacionários são amortecidos elevando o valor da constante de difusão do sistema.

## 2.7 Conclusão

No presente capítulo, revisitamos o problema da equação de Fisher-Kolmogorov com não-localidade no termo de interação entre os constituintes de uma determinada população. Neste estudo, apresentamos os principais aspectos da EFKG e os comportamentos limites da função influência  $f_\mu(z)$  na determinação do fenômeno formação de padrão. Resolvemos a EFKG numericamente e validamos o método *Operator Splitting* e os outros métodos utilizados neste trabalho. Verificamos numericamente os limites do alcance da função influência de interação na formação de padrão, descritos em outros trabalhos [16, 37, 40] e comprovamos a importância dos processos difusivos na destruição das estruturas de padrão [16, 37].

# Capítulo 3

## Formação de padrão na equação de Fisher-Kolmogorov generalizada com convecção

### 3.1 Introdução

A formação de padrão e sua evolução espaço-temporal, tem sido objeto de intensos estudos devido à sua relevância em áreas como física, química e biologia [6]. Muitos trabalhos teóricos sobre formação de padrão utilizam modelos matemáticos de reação e difusão [12, 11, 10, 42, 43, 44], com vasta aplicação em sistemas biológicos e químicos. Estes modelos também são usados na descrição de propagação de genes em uma determinada população [45], difusão de substâncias químicas em meios intracelulares [46] e a evolução de concentrações de neutrons em reações nucleares [47].

Na literatura especializada, encontramos vários trabalhos teóricos e experimentais, que mostram o surgimento de formação de padrão em um regime dinâmico convectivo. A convecção de Rayleigh-Bénard [7], fluxo de elétrons em semicondutores [48] e formação de padrão em colônia de bactérias em regimes convectivos [49, 50], ilustram bem o surgimento de padrões em sistemas em regime de fluxo convectivo. Em todos estes casos, o sistema que está sob a influência de um campo, ou em regime de fluxo, tende a se auto-organizar a partir de determinados valores dos parâmetros que determinam os estados do sistema. Na convecção de Rayleigh-

Bénard [7], este parâmetro é a diferença de temperatura  $T_i - T_s$  entre placas que confinam um fluxo de óleo. A partir de um determinado valor  $T_i - T_s$  o fluxo de óleo confinado exibe uma estrutura hexagonal que se repete ao longo do sistema, que chamamos de formação de padrão. No caso de elétrons superficiais em semicondutores [48], o regime de auto-organização surge a partir de valores críticos de um campo elétrico  $E$  aplicado paralelamente ao sistema. Para certos valores críticos do campo elétrico  $E_c$  os elétrons inicialmente presos no material, agora terão mobilidade caminhando em canais bem definidos, formando estruturas bem definidas que se repetem sobre a superfície do material. No sistema biológico de uma colônia de bactérias [49], o sistema cresce submetido a uma radiação ultravioleta mortal. Sobre a colônia, consideramos uma pequena proteção de tamanho  $L$  que se move com velocidade  $v$ , obrigando toda a colônia a também se deslocar com essa velocidade. Para valores de  $v$  abaixo de um determinado valor crítico  $v_c$  a colônia conseguirá crescer no oásis que formou, exibindo uma estrutura de padrão e para valores superiores essa colônia tenderá à extinção.

Neste capítulo iniciamos nossa contribuição ao tema formação de padrão na equação de Fisher-Kolmogorov generalizada. Com os exemplos anteriores, notamos que o fenômeno formação de padrão está presente em sistemas com uma dinâmica convectiva. Baseado nestes exemplos experimentais e em outros trabalhos teóricos, proporemos uma modelagem abrangente de dinâmica de populações que contemple regimes de fluxos convectivos. Neste capítulo mostraremos como tal modelagem pode ser considerada, utilizando campos estáticos e dinâmicos de velocidade, e que em um modelo geral de dinâmica de populações do tipo Fisher-Kolmogorov com convecção, teremos também o fenômeno de formação de padrão.

## 3.2 Equação de Fisher-Kolmogorov convectiva

A equação de Fisher-Kolmogorov com termo de convecção e difusão [51] pode ser escrita como

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} + v \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} = D \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} + au(x, t) - bu^2(x, t) \quad (3.1)$$

Nesta equação,  $u(x, t)$  representa uma densidade populacional sujeita a um fluxo convectivo de velocidade  $v$ . Esta distribuição cresce a uma taxa  $a$  e pode ser des-

truída devido a encontros de conespecíficos com taxa  $b$ . Todo o sistema pode se difundir segundo uma constante de difusão  $D$ . Se consideramos que os processos difusivos são menos intensos que o fluxo convectivo, o termo de difusão pode ser negligenciado na Eq. (3.1). Com isso ficamos com a seguinte equação

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} + v \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} = au(x, t) - bu^2(x, t). \quad (3.2)$$

Esta equação pode ser melhor escrita em termos da derivada material

$$\frac{\mathcal{D}u(x, t)}{\mathcal{D}t} = au(x, t) - bu^2(x, t). \quad (3.3)$$

Na equação anterior  $\frac{\mathcal{D}u(x, t)}{\mathcal{D}t}$  é escrita como

$$\frac{\mathcal{D}u(x, t)}{\mathcal{D}t} = \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} + v \frac{\partial u(x, t)}{\partial x}. \quad (3.4)$$

Como no capítulo anterior, agora também queremos estudar um modelo de dinâmica que incorpore efeitos não-locais. Introduzindo não-localidade no termo de interação da equação de Fisher-Kolmogorov convectiva, teremos

$$\frac{\mathcal{D}u(x, t)}{\mathcal{D}t} = au(x, t) - bu(x, t) \int_{\Omega} f_{\mu}(x - x')u(x', t)dx'. \quad (3.5)$$

Na equação dinâmica, Eq. (3.5), definimos a equação de Fisher-Kolmogorov generalizada com convecção (EFKGC). Na nova formulação não-local, as interações entre constituintes da colônia de bactérias são pesadas pela função influência  $f_{\mu}(x - x')$ , caracterizada pelo alcance de interação  $\mu$  e normalizada no domínio  $\Omega$ . Nesta formulação a velocidade  $v$  é a velocidade de um fluxo de partículas interagentes que pode exibir auto-organização, dependendo dos parâmetros do sistema, como comprimento de interação  $\mu$ , velocidade  $v$ , taxa de crescimento  $a$ , taxa de competição  $b$  ou mesmo o tamanho do sistema  $L$ . Nesta nova modelagem de dinâmica de populações, estamos interessados em verificar se existe ou não formação de padrão. Queremos determinar se em um regime de fluxo, o processo de formação de padrão persistirá, ou seja, mudando o regime dinâmico na equação de Fisher-Kolmogorov o processo não-local no termo não-linear dominará a dinâmica do sistema, exibindo ainda o fenômeno de formação de padrão? Para responder este questionamento, estudaremos esse modelo matemático através de um método perturbativo e resolveremos a

Eq. (3.5) numericamente, para alguns tipos de funções influências.

Também podemos nos questionar a respeito da influência do tipo de fluxo no estudo do fenômeno auto-organização e formação de padrão. Neste capítulo, realizamos este estudo introduzindo campos de velocidades dependentes da posição,  $v(x)$ , na EFKGC e verificamos qual o comportamento das estruturas estacionárias de padrão com a magnitude deste campo anisotrópico.

### 3.3 Estudo analítico da EFKGC

Como discutido no capítulo anterior, podemos fazer um estudo analítico da EFKGC introduzindo uma pequena perturbação na solução constante  $u_0$ , que é obtida fazendo  $u(x, t)$  constante,  $u(x, t) = u_0$ . Para a EFKGC o estado estacionário constante é dado por  $u_0 = a/b$ . Nesta análise perturbativa, o estado estacionário homogêneo terá uma pequena perturbação temporal. Esta perturbação pode crescer no tempo amplificando as estruturas de padrão na EFKGC e a solução estacionária observada será composta por ondas viajantes com velocidade  $v^*$ . Esta proposta de estudo analítico pode ser escrita por meio da seguinte solução teste [9, 40]

$$u(x, t) = u_0 + \varepsilon e^{ikx} e^{\varphi(k)t}. \quad (3.6)$$

Nesta proposta de solução,  $\varepsilon$  é a amplitude da perturbação considerada muito pequena,  $i$  é a unidade imaginária,  $k$  é o número de onda no espaço de Fourier e  $\varphi(k)$  é chamada de taxa de crescimento da formação de padrão, que pode depender do número de onda  $k$ . Neste estudo perturbativo, notamos que se a taxa de crescimento da formação de padrão  $\varphi(k)$  for menor que zero, esta perturbação se extinguirá no tempo, não deslocando a solução homogênea para um estado de padrão. Mas se  $\varphi(k)$  for maior que zero, alguns modos de perturbação serão amplificados, propiciando assim, o surgimento de uma estrutura de padrão. Desta forma, nossa análise perturbativa se dará no sentido de verificar em quais condições os modos de perturbação serão ou não amplificados gerando formação de padrão.

Começamos nosso estudo substituindo a Eq. (3.6) na Eq. (3.5). Desprezando termos de segunda ordem na amplitude de perturbação  $\varepsilon$  e considerando que a

---

\* Ainda podemos caracterizar estas soluções como estacionárias, pois podemos fazer uma transformação de velocidades  $x \rightarrow x - vt$  e obter um referencial onde estas ondas estão paradas.



função influência obedece as seguintes propriedades,

$$f(x - x') = f(x' - x) \quad (3.7)$$

e

$$\int_{\Omega} f(x - x') dx' = 1, \quad (3.8)$$

poderemos encontrar a seguinte relação de dispersão

$$\varphi(k) = -ivk - a\mathcal{F}_c \{f_{\mu}(z)\}. \quad (3.9)$$

Nesta equação consideramos  $z = x - x'$ ,  $\mathcal{F}_c \{f_{\mu}(z)\}$  é a transformada de Fourier cosseno da função influência  $f_{\mu}(z)$ , que é dada por

$$\mathcal{F}_c \{f_{\mu}(z)\} = \int_{\Omega} f_{\mu}(z) \cos(kz) dz. \quad (3.10)$$

Observamos que a Eq. (3.9) é composta por uma parte real e uma parte imaginária

$$\gamma(k) = \mathcal{R}e \{\varphi(k)\} = -a\mathcal{F}_c \{f_{\mu}(z)\} \quad (3.11)$$

$$\eta(k) = \mathcal{I}m \{\varphi(k)\} = -vk. \quad (3.12)$$

A estrutura de padrão, bem como a evolução temporal da densidade populacional  $u(x, t)$ , são observadas no espaço real. Com isso devemos impor que nossa taxa de formação de padrão também seja real. Observado esse detalhe, sempre restringiremos nossa análise à parte real da função  $\varphi(k)$  que denotamos por  $\gamma(k)$ . Como estamos interessados em verificar em que conjunto de valores dos parâmetros da taxa de formação de padrão  $\varphi(k) > 0$ , devemos escolher uma função influência, ou *kernel*  $f_{\mu}(z)$  para realizar a transformada de Fourier e encontrar  $\varphi(k)$ . Como discutido no capítulo 2, a função  $\varphi(k)$  é muito suscetível à escolha da distribuição  $f_{\mu}(z)$ . Dependendo da escolha da função influência, se ela for por exemplo de cauda longa, a taxa  $\varphi(k)$  terá poucos valores positivos, ou sempre será negativa.

Podemos começar nosso estudo analítico escolhendo a distribuição mais simples, que é uma distribuição de Heaviside. A distribuição de Heaviside é escrita como

$$f_{\mu}(z) = \frac{1}{2\mu} \{\Theta[\mu - (z)] \Theta[\mu + (z)]\}. \quad (3.13)$$

Neste equação,  $\mu$  é o alcance da função influência, que é normalizada no domínio  $L$  do sistema ( $0 < \mu < L$ ). Resolvendo a integral Eq. (3.10), para a função influência Eq. (3.13) encontramos a seguinte expressão para a taxa real  $\gamma(k)$

$$\gamma(k) = -a \frac{\sin(k\mu)}{k\mu}. \quad (3.14)$$

Na Eq. (3.14), notamos que  $\gamma(k)$  sempre será positiva para o intervalo  $(2n+1)\pi/\mu < k < 2(n+1)\pi/\mu$  para  $n = 0, 1, 2, \dots$ , indicando que em um regime convectivo uma colônia de bactérias pode ser encontrada em uma estrutura de formação de padrão. Se  $\mu \rightarrow 0$   $\gamma(k) = -a$ , nesta situação todos os modos são amortecidos igualmente e não temos formação de padrão. É importante observar que o fenômeno formação de padrão surge da supressão dos pequenos vetores de onda  $0 < k < k_{min} = \pi/\mu$ , *i.e.*, a eliminação das ondas com baixas frequências  $0 < \omega < \omega_{min} = vk_{min}$ . Um fenômeno similar é demonstrado para o estudo da difusão usando a equação de Langevin generalizada [52, 53, 54]. Nestes trabalhos é provado que quando os modos de baixas frequências  $0 < \omega < \omega_{min}$  são eliminados em uma densidade espectral de ruído, temos a violação de ergodicidade [53] e a violação do balanceamento detalhado [54]. Isto mostra uma ligação direta entre a violação de ergodicidade e a formação de padrão em um sistema. Destes resultados concluímos que um sistema que exhibe formação de padrão é também não ergódico.

O comportamento da Eq.(3.14) pode ser observado nas figuras 3.1 e 3.2 para vários valores da taxa de crescimento  $a$  (com  $\mu$  fixado) e vários valores de  $\mu$  (com  $a$  fixado). Na figura 3.1 observamos que a taxa  $\gamma(k)$  tende para valores negativos quando  $\mu \rightarrow 0$ , que é um resultado simples de ser compreendido analiticamente. Via figura 3.2 notamos que a taxa real sempre exibirá valores positivos para um comprimento enorme do domínio  $k$ , o que indica que nosso modelo, na análise perturbativa, é uma boa modelagem matemática para descrever sistemas convectivos em regimes de formação de padrão.

Podemos introduzir uma função influência gaussiana sem cauda, para estudar a taxa real  $\gamma(k)$ . Para uma gaussiana dentro do espaço  $L$ , mas normalizada no domínio da função de Heaviside de comprimento  $\mu$ , teremos

$$f_{\mu}(z) = \frac{\exp\left(-\frac{z^2}{\sigma^2}\right)}{\mu\sqrt{\pi}\operatorname{erf}(\mu/\sigma)}\Theta[\mu - z]. \quad (3.15)$$

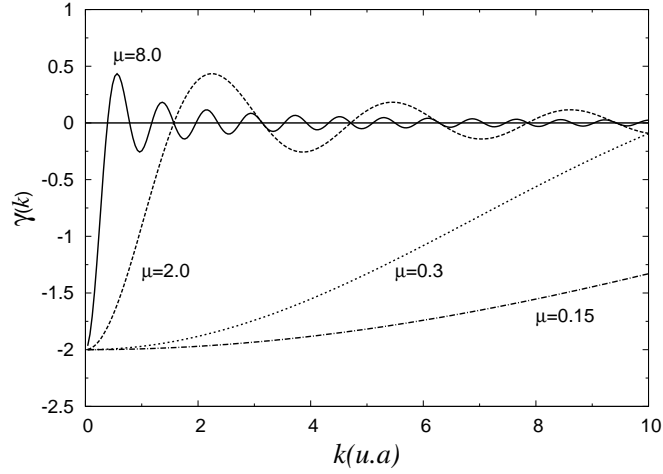


Figura 3.1: Taxa de crescimento real da formação de padrão, para uma função influência Heaviside para  $a = 2.0$  e vários valores do comprimento de interação  $\mu$ . Notamos que para  $\mu$  pequeno,  $\gamma(k)$  se torna negativa.

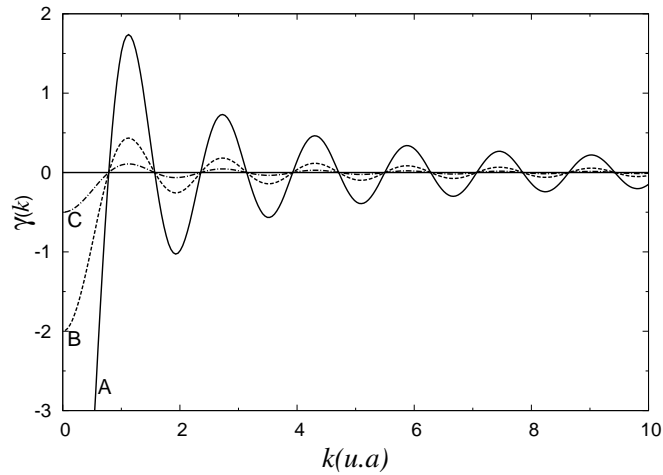


Figura 3.2: Parte real da taxa de crescimento da formação de padrão, para uma função influência Heaviside com comprimento  $\mu = 4.0$ . As curvas A, B e C exibem a taxa real  $\gamma(k)$ , para  $a = 8$ ,  $a = 2$  e  $a = 0.5$ . Para todos os valores da taxa de crescimento  $a$ , teremos os mesmos pontos onde  $\gamma(k) > 0$ .

Resolvendo a integral Eq. (3.10) para a função influência anterior, encontraremos a seguinte taxa real de formação de padrão

$$\gamma(k) = -\frac{a \exp(k\sigma)^2}{2\text{erf}(\mu/\sigma)} \left[ \text{erf}\left(\frac{\mu}{\sigma} - i\frac{k\sigma}{2}\right) + \text{erf}\left(\frac{\mu}{\sigma} + i\frac{k\sigma}{2}\right) \right] \quad (3.16)$$

Esta equação pode ser escrita em unidades adimensionais como

$$\gamma'(k) = -\frac{\exp(k')^2}{\operatorname{erf}(\lambda)} [\operatorname{erf}(\lambda - ik') + \operatorname{erf}(\lambda + ik')] \quad (3.17)$$

onde

$$\begin{aligned} \gamma' &= 2\gamma/a \\ k\sigma/2 &= k' \\ \lambda &= \mu/\sigma \end{aligned} \quad (3.18)$$

Com esta nova função influência, teremos novamente regiões onde  $\gamma(k) > 0$ , o que indica valores desta taxa para o qual teremos o fenômeno padrão sendo exibido.

### 3.4 Resultados numéricos

Nesta seção, apresentamos os resultados numéricos desenvolvidos no estudo da equação de Fisher-Kolmogorov generalizada com termo convectivo. Numericamente resolvemos a EFKGC para dois tipos de fluxos: fluxo unidirecional constante  $v \rightarrow \text{constante}$  e fluxo dependente da posição  $v \rightarrow v(x)$ . O comportamento da solução da EFKGC para estes dois tipos de campos de velocidades, estão detalhadamente descritos nas próximas subseções.

Neste estudo, utilizamos quatro métodos numéricos distintos para encontrar os vetores estacionários  $u(x)$  e a evolução temporal  $u(x, t)$ . Utilizamos o método *Operator Splitting* para quebrar a Eq. (3.5) e em cada termo desta equação, utilizamos um esquema de discretização apropriado, para solucioná-lo. Na parte convectiva aplicamos o esquema de discretização *Upwind*, que se mostrou mais eficiente por não dar grandes deformações às condições iniciais da solução. Para a parte de crescimento fizemos uso do método Runge-Kutta de quarta ordem, pois se mostrou muito eficiente para estes casos. O termo de interação não-local foi resolvido através da integração numérica pelo método do trapézio, sendo que as interações são contadas após cada integração. Os detalhes do procedimento e da utilização de cada método estão descritos no apêndice A.

Devido ao grande número de possibilidades para as condições iniciais, condições

de contorno, valores dos coeficientes da equação, formas para os fluxos, valores para os incrementos temporais e espaciais, precisamos padronizar estes parâmetros para termos uma apresentação organizada e correta dos resultados evitando comparações equivocadas de resultados em diferentes regimes de cálculos. Em todos os cálculos, consideramos sempre um sistema de tamanho  $L$  com centro em  $x_0 = L/2$  e condições de contorno periódicas,  $u(x = 0, t) = u(x = L, t)$ . As condições iniciais sempre são dadas por uma distribuição gaussiana de partículas, normalizada no domínio  $\Omega = [0, L]$

$$u(x, 0) = \frac{1}{\Gamma} \exp \left[ -\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma^2} \right], \quad (3.19)$$

com uma normalização  $\Gamma$  dada por

$$\Gamma = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sigma \left[ \operatorname{erf} \left( \frac{x_0}{\sqrt{2}\sigma} \right) + \operatorname{erf} \left( \frac{L - x_0}{\sqrt{2}\sigma} \right) \right]. \quad (3.20)$$

As condições iniciais são sempre gaussianas apenas como padronização da apresentação dos resultados. Veremos em uma breve análise, que as soluções estacionárias são independentes das condições iniciais, ou seja, sempre convergem para mesma estrutura. Numericamente a função influência de Heaviside é escrita como

$$f_\mu(x - x') = \frac{1}{2\mu} \{ \Theta [\mu - (x - x')] \Theta [\mu + (x - x')] \} = \quad (3.21)$$

$$= \frac{1}{2\mu} \begin{cases} 1, & \text{para } |x - x'| \leq \mu \\ 0, & \text{para } |x - x'| > \mu \end{cases} \quad (3.22)$$

Considerando condições de contorno periódicas, a função influência gaussiana se torna

$$f_\mu(x - x') = \frac{\exp \left[ -\frac{(x-x')^2}{2\mu^2} \right]}{\sqrt{\pi/2}\sigma \operatorname{erf} \left( \frac{L}{\sqrt{2}\sigma} \right)}. \quad (3.23)$$

Nos cálculos, consideramos também os seguintes valores para os incrementos espaciais e temporais,  $\Delta x = 1 \times 10^{-3}$  e  $\Delta t = 3 \times 10^{-3}$  e constantes de crescimento e competição, como  $a = b = 1.0$ .

### 3.4.1 Convecção unidirecional constante

Um fluxo unidirecional na equação de Fisher-Kolmogorov generalizada convectiva pode ser considerado por meio da Eq. (3.5), com uma velocidade convectiva  $v$  constante. Esta velocidade pode ser negativa ou positiva, levando o fluxo para a esquerda ou para a direita com velocidade constante no tempo e espaço.

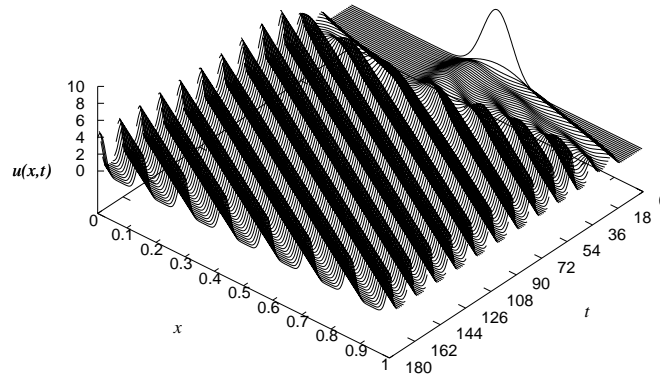


Figura 3.3: Evolução temporal da solução  $u(x,t)$ , para uma distribuição inicial gaussiana. As interações não-locais são pesadas utilizando uma função de Heaviside com  $\mu = 0.10$ . A velocidade de fluxo vale  $v = 0.010$ .

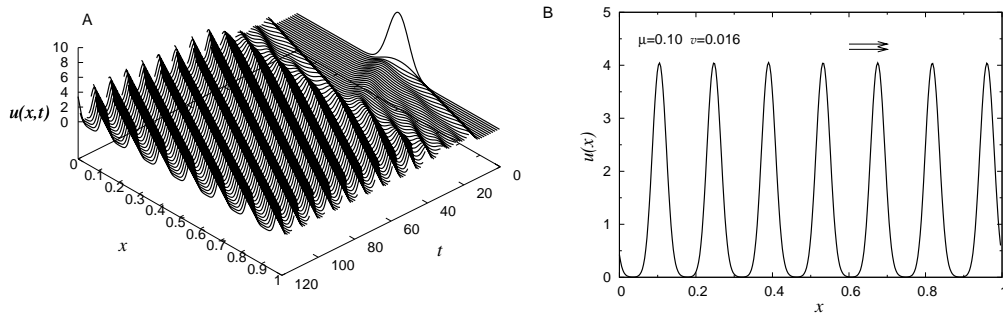


Figura 3.4: Gráfico A: evolução temporal da densidade populacional  $u(x,t)$  em função do tempo e da posição espacial  $x$ , para uma velocidade unidirecional de fluxo para a direita  $v = 0.016$  e um comprimento de interação  $\mu = 0.10$ . Gráfico B: estado estacionário  $u(x)$  para uma velocidade de fluxo unidirecional  $v = 0.016$  e  $\mu = 0.10$ . As setas mostram a direção do fluxo. Nestes gráficos, consideramos a taxa de crescimento  $a = 1.0$  e a taxa de competição  $b = 1.0$ .

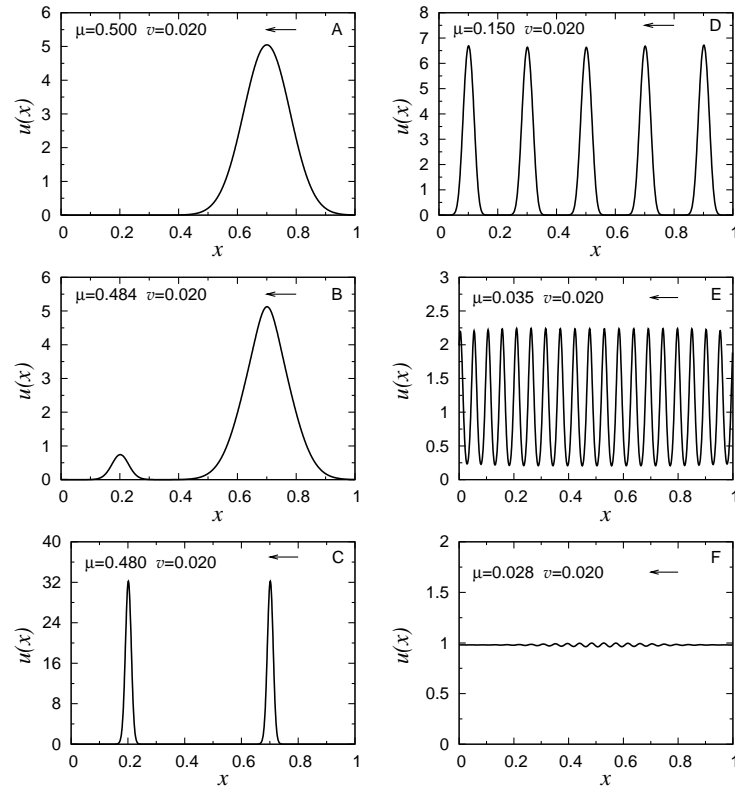


Figura 3.5: Solução estacionária  $u(x)$  para vários valores do comprimento do alcance da função influência  $\mu$ . Quando  $\mu$  se aproxima de 0 ou de  $L/2$ , os picos da formação de padrão são negligenciáveis. Neste cálculo utilizamos a função influência de Heaviside. A velocidade de fluxo é sempre constante,  $v = 0.020$ .

Nas figuras 3.3, 3.4, 3.5 e 3.6 temos os resultados para a equação de Fisher-Kolmogorov generalizada para fluxo unidirecional. Na Fig. 3.3 é apresentado um gráfico tridimensional com a evolução temporal da solução  $u(x, t)$  para uma distribuição inicial dada pela Eq. (3.19) e uma pesagem de interação tipo função de Heaviside, Eq. (3.22). Nestes gráficos, notamos que um fluxo unidirecional exibe formação de padrão, como foi previsto analiticamente. Para tempos longos a solução que se obtém é constante no tempo e dependente da posição. Apesar de termos uma velocidade convectiva, esta velocidade apenas desloca a estrutura de padrão incessantemente para a direita, lembrando que o deslocamento poderia ser para a esquerda apenas considerando uma velocidade negativa.

Na figura 3.4 temos uma visão tridimensional da estrutura de padrão, painel A, juntamente com a fotografia do estado estacionário  $u(x)$ , painel B. Neste caso consideramos uma velocidade negativa, deslocando os picos da formação de padrão

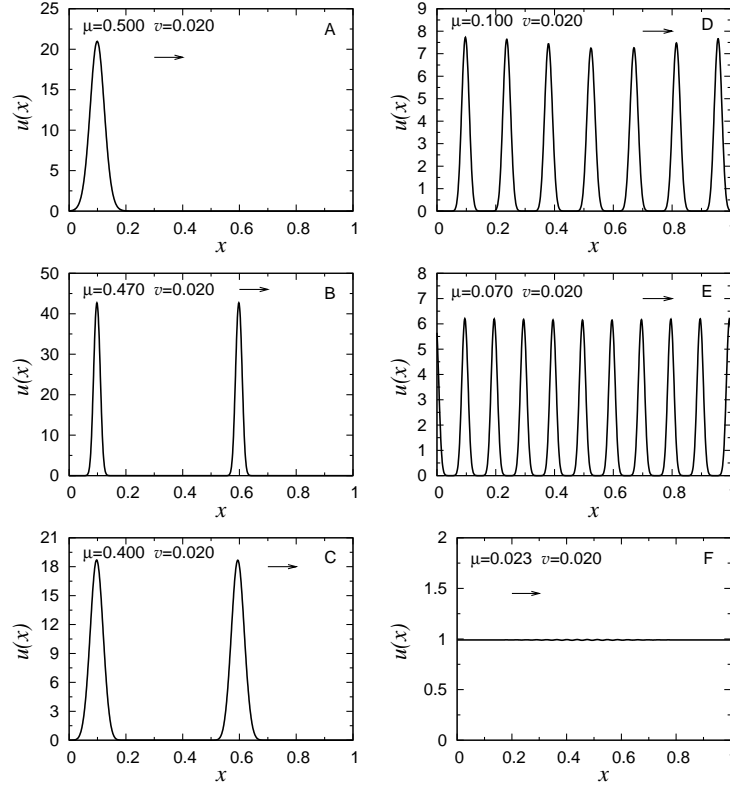


Figura 3.6: Estado constante no tempo  $u(x)$  para diferentes valores do comprimento do alcance da função influência  $\mu$ . Nestes gráficos os estados estacionários são calculados com o uso da função influência gaussiana. A velocidade de fluxo unidirecional é mantida em  $v = 0,020$

para a esquerda.

Nas figuras 3.5 e 3.6 é apresentado o estado estacionário  $u(x)$  para as funções influências de Heaviside e gaussiana. Nestes dois gráficos estudamos a estrutura de formação de padrão para os limites  $\mu \rightarrow 0$  e  $\mu \rightarrow L/2$ . Nestes dois limites, para as duas funções influências, vemos que as figuras de padrão desaparecem. Este resultado também é observado no modelo com difusão estudado por Fuentes *et al.* [16] e no presente trabalho, sendo um resultado independente do tipo de dinâmica. Como discutido no modelo para difusão, este comportamento é devido ao fato de perdermos o comportamento não-local para os dois limites. Para  $\mu \rightarrow 0$  a equação volta a ser tipo interação local (Fisher-Kolmogorov normal) e para  $\mu \rightarrow L/2$  as pesagens são iguais para todas as interações. Nas duas figuras, 3.5 e 3.6, numericamente notamos que estes limites críticos ocorrem para  $\mu_{min} = 0.028$  e  $\mu_{max} = 0.484$  para o caso da função influência de Heaviside e  $\mu_{min} = 0.023$  e  $\mu_{max} = 0.470$  para a influência



gaussiana.

### 3.4.2 Convecção dependente da posição

Um regime convectivo pode ser considerado com velocidade dependente do tempo e do espaço. Um modelo matemático simples que representa um sistema como este, pode ser escrito como

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = -v(x, t) \frac{\partial u(x, t)}{\partial x}. \quad (3.24)$$

Nesta equação, temos uma velocidade de fluxo variável  $v(x, t)$  que pode ser entendida como um processo de aceleração do fluxo com o tempo, ou mesmo componentes da velocidade de fluxo diferentes em determinadas regiões. Este tipo de dinâmica pode ser considerado na EFKGC, introduzindo um termo de velocidade dependente da posição e do tempo

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = -v(x, t) \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} + au(x, t) - bu(x, t) \int_{\Omega} f(x - x')u(x', t)dx'. \quad (3.25)$$

Como nossos estudos se focam em tentar encontrar os estados estacionários das soluções numéricas de  $u(x, t)$ , vamos considerar fluxos apenas dependentes da posição  $v(x)$ . Fluxos com velocidades do tipo  $v(t)$  não serão tratados aqui, pois implicam em regimes não estacionários, regimes que sempre estarão mudando com o tempo, o que se torna inviável para análises de estruturas estáveis de padrão para tempos longos, ou seja, estruturas de padrão que não mudam com o tempo. Com esta imposição a equação de Fisher-Kolmogorov generalizada torna-se:

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = -v(x) \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} + au(x, t) - bu(x, t) \int_{\Omega} f(x - x')u(x', t)dx'. \quad (3.26)$$

Uma proposta simples de um fluxo dependente da posição pode ser considerada como

$$v(x) = \begin{cases} -v_0 & \text{se } x > x_0 \\ 0 & \text{se } x = x_0 \\ v_0 & \text{se } x < x_0 \end{cases} \quad (3.27)$$

Na Eq. (3.27) temos um fluxo dependente da posição mas constante por partes. Com essa definição, com um sistema de tamanho  $L$  e centro em  $x_0 = L/2$ , notamos

que existe um fluxo da direita para a esquerda, que se encontra com um segundo fluxo em sentido contrário mas de mesma magnitude no centro. Com isso, temos dois fluxos em sentidos opostos das extremidades do sistema que se encontram no centro do sistema  $|_{x=0} \Rightarrow x_0 \Leftarrow |_{x=L}$ . Se considerarmos a Eq. (3.27) com dois fluxos em sentidos opostos em todo o sistema, o fluxo resultante será nulo, como pode ser facilmente observado. Para termos uma fonte de fluxo que se origina na metade do sistema,  $|_{x=0} \Leftarrow x_0 \Rightarrow |_{x=L}$ , basta considerarmos a seguinte equação

$$v(x) = \begin{cases} -v_0 & \text{se } x < x_0 \\ 0 & \text{se } x = x_0 \\ v_0 & \text{se } x > x_0 \end{cases} \quad (3.28)$$

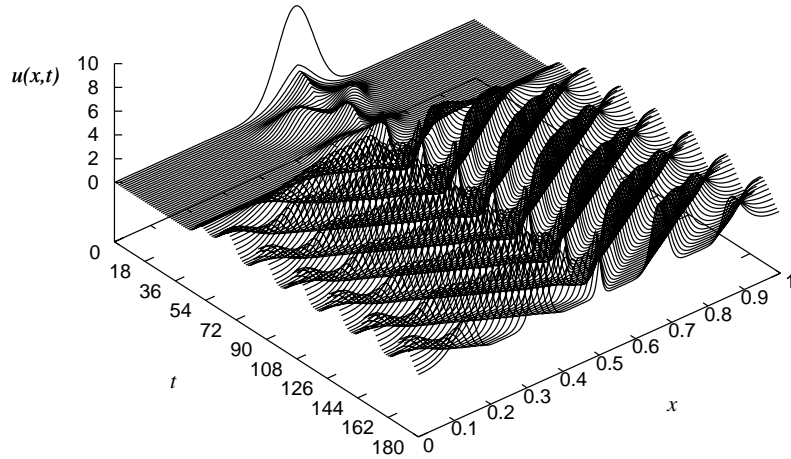


Figura 3.7: Solução  $u(x, t)$ , para um campo de velocidade constante, Eq. (3.27). As interações não-locais são pesadas utilizando uma função de Heaviside com  $\mu = 0.15$ . A magnitude do fluxo vale  $v_0 = 0.010$ .

Podemos resolver a Eq. (3.26) utilizando o método *Operator Splitting*, aliado à discretização *Upwind* para a parte convectiva com velocidade positiva e negativa, juntamente com uma discretização semi-implícita para a parte de interação e o método de Runge-Kutta de quarta ordem para a parte de crescimento. Todos estes métodos estão descritos no apêndice A.

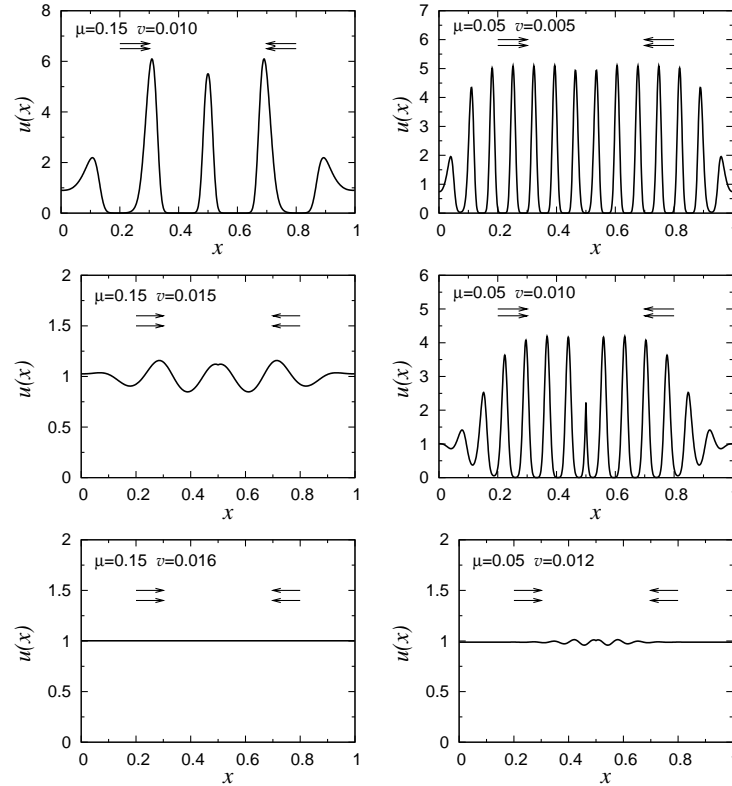


Figura 3.8: Estado estacionário  $u(x)$ , para vários valores da velocidade convectiva  $v_0$  e dois valores do comprimento do alcance da função influência,  $\mu = 0.05$  e  $\mu = 0.15$ . Aumentando o valor da velocidade de fluxo  $v_0$ , para um comprimento de correlação  $\mu$  os picos dos estados estacionários são amortecidos. As setas indicam o sentido das componentes do fluxo.

Uma vez solucionada a equação e encontrado o estado estacionário para a densidade de população  $u(x, t)$ , podemos organizar a exposição dos resultados em gráficos cruzando vários parâmetros de interesse do sistema.

Na figura 3.7 mostramos o comportamento da evolução temporal da solução  $u(x, t)$  para um campo de velocidades anisotrópico, Eq. (3.29). Neste gráfico notamos como o fluxo direciona a distribuição inicial de partículas para o centro do sistema se chocando neste ponto mas mantendo uma estrutura simétrica em relação aos pontos  $x = 0$ ,  $x = x_0$  e  $x = L$ , lembrando que estamos considerando condições de contorno periódicas. Vemos que à medida que o tempo passa as interações não-locais dominam a dinâmica do sistema levando a solução estacionária para um regime de auto-organização.

Na figura 3.8, mostramos vários estados estacionários  $u(x)$  para diferentes valo-

res do comprimento de correlação  $\mu$  e diferentes valores da velocidade de fluxo  $v_0$ . Nesta figura, podemos notar que para um dado valor de  $\mu$ , fixo, quando elevamos a intensidade da velocidade de fluxo, teremos um amortecimento gradativo dos picos da solução estacionária  $u(x)$ . Para  $\mu = 0.05$  e  $v_0 = 0.005$ , temos picos bem acentuados para  $u(x)$ , mas para  $v_0 = 0.012$  estes picos já estão bem amortecidos. Com  $\mu = 0.15$   $u(x)$  exhibe picos para  $v_0 = 0.010$ , mas elevando a velocidade para  $v_0 = 0.015$  os picos desaparecem completamente.

O resultado apresentado na figura 3.8 mostra que o sistema sempre exibirá auto-organização para valores baixos da intensidade de fluxo  $v(x)$ . Este comportamento não pode ser interpretado como consequência do tipo de método numérico utilizado, como é discutido no apêndice B, pois se compararmos a mesma intensidade de fluxo  $v(x) = v_0$  para um fluxo unidirecional, veremos que a solução estacionária terá uma estrutura de formação de padrão, como podemos observar na Fig. 3.4, para uma intensidade de fluxo  $v_0 = 0.016$ .

Comparando as figuras 3.8 e 3.4, notamos que o fenômeno formação de padrão está ligado à dependência espacial do campo de velocidades. Para o caso em que  $v(x)$  é unidirecional,  $v(x) = v_0$ , o sistema exhibe uma figura de formação de padrão, mas quando consideramos o fluxo como função de  $x$  a estrutura de padrão deixa de ser exibida, para determinadas magnitudes de fluxo  $v_0$ . Se considerarmos o caso de uma fonte para realizar o mesmo estudo, nossos resultados serão semelhantes, pois temos condições de contorno periódicas e neste caso o ponto  $x = 0$  terá o mesmo papel do ponto  $x = x_0$ , recebendo todo o fluxo originado do centro do sistema.

Observando a figura 3.8, notamos que para cada valor do comprimento  $\mu$ , existe um respectivo  $v_0$  em que os picos do estado  $u(x)$  podem ser negligenciados. Com isso, podemos construir um diagrama de fases dos pares críticos  $(\mu, v_0)$  que delimitam a região com padrão e a região onde não temos padrão. A figura 3.9, mostra a delimitação das duas fases para os estados estacionários  $u(x)$ , os estados com padrão (*Padrão*) e os estados onde o sistema não exhibe formação de padrão (*Sem Padrão*). Notamos um comportamento interessante que existe um valor máximo para  $v_0$ , aproximadamente 0.016, à medida em que aumentamos  $\mu$ , para a delimitação das duas fases do sistema.

Um campo de velocidades do tipo fonte no ponto  $x = x_0$ , mas dependente da posição, que aumenta sua intensidade quando nos aproximamos dos pontos  $x = 0$  e

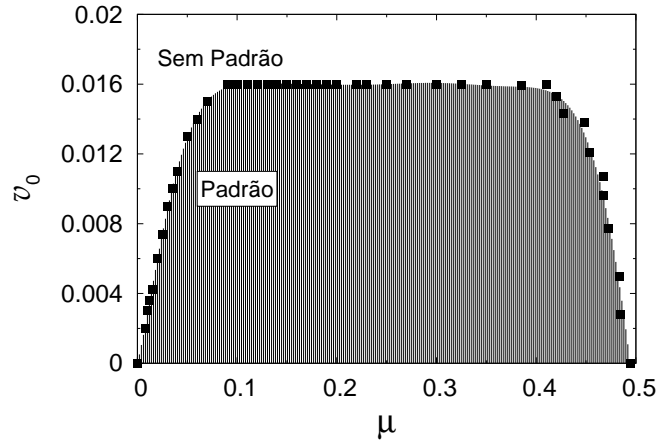


Figura 3.9: Diagrama de fases  $\mu \times v_0$ . Os pontos indicam os pares de comprimento máximo de correlação e velocidade  $v_0$  máxima, para que os picos de estrutura da solução  $u(x)$  sejam amortecidos. A região interna, *Padrão*, indica os pares  $(\mu, v_0)$  com picos acentuados para  $u(x)$  e a região externa, *Sem Padrão*, indica os pares  $(\mu, v_0)$  para qual  $u(x)$  tem picos completamente amortecidos.

$x = L$ , pode ser escrito matematicamente através da seguinte expressão [55]

$$v(x) = v_0 \left( \frac{2x - L}{L} \right). \quad (3.29)$$

Este fluxo pode ser realizado experimentalmente considerando um fluido viscoso confinado entre 4 cilindros rotatórios (cilindros de Taylor) [55, 56, 57, 58]. Na figura 3.10, mostramos um gráfico ilustrativo do comportamento deste campo em relação ao tamanho do sistema.

Para um fluxo semelhante, mas que aumenta sua intensidade com a posição  $x_0$ , teremos

$$v(x) = -v_0 \left( \frac{2x - L}{L} \right) \quad (3.30)$$

A situação representada pela Eq. (3.30) e Eq. (3.29) são simétricas e o valor limite da intensidade de fluxo  $v_0$  é o mesmo, para as duas equações. Isso se deve ao fato de termos condições de contorno periódicas,  $u(x = 0, t) = u(x = L, t)$ , o que impede soluções diferentes para fluxos simétricos em relação à posição  $x = x_0$ .

Na figura 3.11 apresentamos a solução  $u(x, t)$  para o campo de velocidades, Eq. (3.29). Nesta figura notamos que as estruturas de auto-organização são geradas para fluxos anisotrópicos realizáveis experimentalmente. A distribuição inicial de

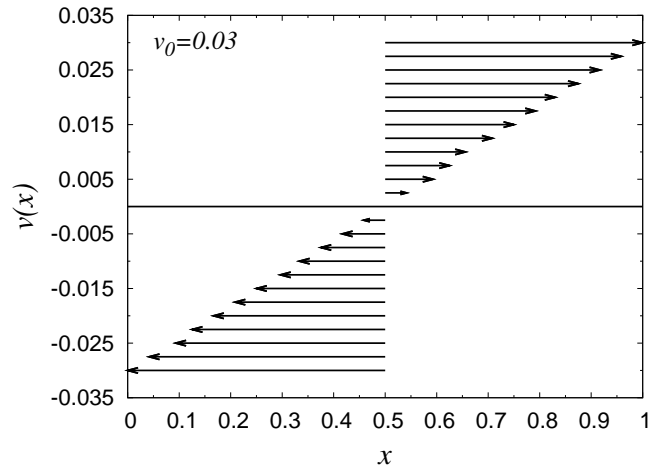


Figura 3.10: Figura ilustrativa do campo de velocidades, Eq. (3.29). As setas indicam a magnitude do campo de velocidades.

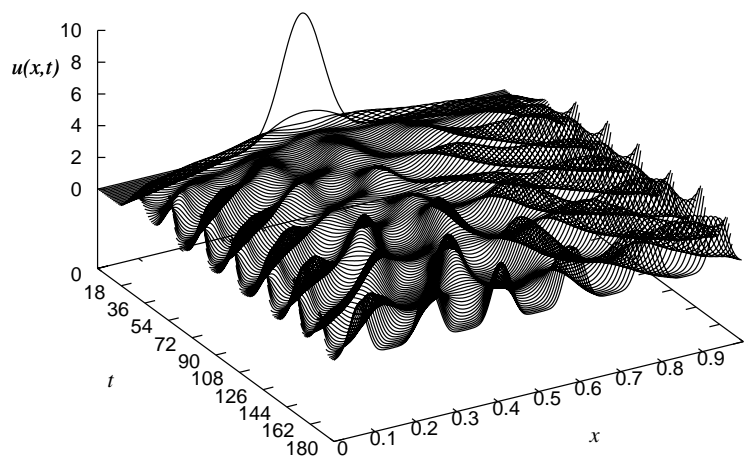


Figura 3.11: Evolução temporal da solução  $u(x, t)$ , para um campo de velocidades variável, Eq. (3.29). As interações não-locais são pesadas utilizando uma função de Heaviside com  $\mu = 0.10$ . A magnitude do fluxo vale  $v_0 = 0.010$ .

partículas gaussianas é amortecida e as interações não-locais se encarregam de organizar o sistema em uma estrutura que caracteriza o fenômeno de formação de padrão.

A figura 3.12, representa a solução  $u(x)$  para uma fonte com suas componentes variáveis, Eq. (3.29). Notamos que novamente existe um valor limite da intensidade

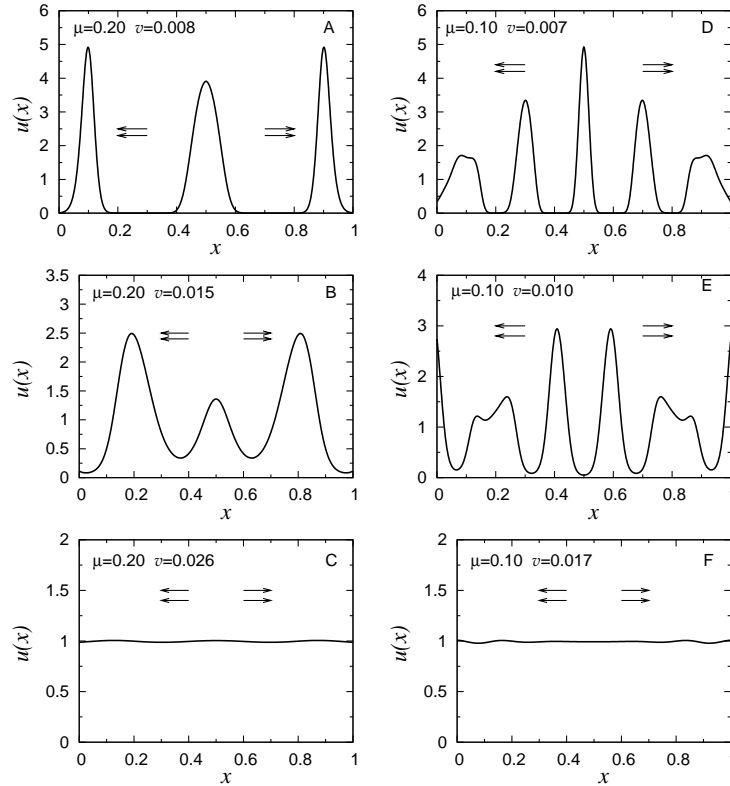


Figura 3.12: Vetor estacionário  $u(x)$ , para  $\mu = 0.10$  e  $\mu = 0.20$  e vários valores da intensidade convectiva  $v_0$ . Para um comprimento de correlação  $\mu$  fixo, os picos dos estados estacionários são amortecidos elevando o valor da intensidade  $v_0$ . As setas indicam o sentido das componentes do fluxo  $v(x)$ .

do fluxo para formação de estruturas estacionárias. Para este campo de velocidades, com o alcance  $\mu$  fixo, existe um limite para a magnitude de fluxo  $v_0$  para que seja observado estruturas de padrão na solução estacionária  $u(x)$ . Os valores destes limites são maiores, se comparado ao fluxo com componentes constantes, pois temos regiões próximas ao centro com baixas velocidades, o que leva à contribuição do amortecimento das estruturas apenas nas extremidades, com velocidade máxima  $v_0$ .

De forma semelhante ao estudo feito no campo de velocidades constantes, agora no campo de velocidades variáveis, podemos calcular o diagrama de fase dos pares críticos  $(\mu, v_0)$ , que delimitam a região de formação de padrão e a região sem padrão. Na figura 3.13 é mostrado um diagrama que separa estas duas fases do sistema convectivo. Para um sistema definido pelos pares  $(\mu, v_0)$ , na região *Padrão* temos estruturas bem definidas das soluções  $u(x)$ . Para estados na região *Sem Padrão*,

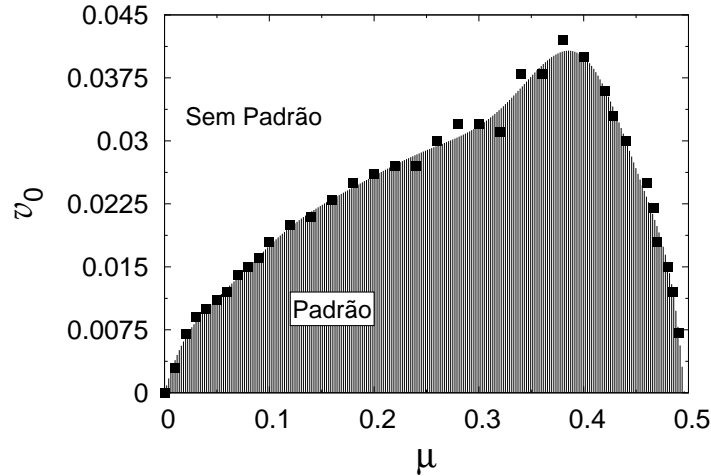


Figura 3.13: Diagrama de fase  $v_0$  como função de  $\mu$ , para um campo de velocidades variável. Os pontos indicam os pares de comprimento crítico de correlação  $\mu_c$  e velocidade crítica  $v_{0c}$ , para que os picos de estrutura da solução  $u(x)$  sejam amortecidos. A região interna, *Padrão*, indica os pares  $(\mu, v_0)$  com picos acentuados para  $u(x)$  e a região externa, *Sem Padrão*, indica os pares  $(\mu, v_0)$  para qual  $u(x)$  tem picos amortecidos, região sem padrão.

os vetores  $u(x)$  não apresentam estruturas de padrão, se comparado aos estados na região escura. Observe que a linha de transição satisfaz uma função do tipo

$$v_c = \mu P(\mu) (\mu - \mu_c)^\beta \quad (3.31)$$

onde  $P(\mu)$  é um polinômio da forma

$$P(\mu) = a + b\mu + c\mu^2 + d\mu^3 + e\mu^4 + f\mu^5. \quad (3.32)$$

O comportamento crítico é dado pelos valores  $\mu_c = 0.49$  e  $\beta = 0.45$ . Notamos então que caráter de campo médio fica deste modo bem evidente.

### 3.5 Conclusão

Neste capítulo, estudamos dois modelos convectivos que descrevem formação de padrão em sistemas biológicos. Nossos resultados mostram que, para um regime de fluxo homogêneo, a intensidade de fluxo não altera a estrutura de formação



de padrão. Mas quando introduzimos uma anisotropia no campo de velocidades de fluxo, considerando um campo constante por partes, Eq. (3.27), e um campo variável, Eq. (3.29), a auto-organização fica dependente da magnitude deste campo. Este comportamento se deve ao fato de que para um campo anisotrópico temos um referencial absoluto para a observação do fenômeno padrão. E neste caso não existe uma transformação de Galileu que absorva a velocidade de fluxo  $v$ , mostrando a auto-organização independente da velocidade de fluxo.

# Capítulo 4

## Efeito da não-localidade no crescimento na formação de padrão

### 4.1 Introdução

Neste capítulo apresentaremos um novo modelo matemático para estudar a equação de Fisher-Kolmogorov, que descreve a dinâmica populacional para uma dada espécie. Nossa motivação se baseia na possibilidade de introduzirmos termos de difusão de longo alcance em uma equação de dinâmica de populações, via uma generalização não-local no termo de crescimento de indivíduos de uma determinada população.

É bem conhecido [2] que regimes de difusão de longo alcance devem ser importantes no estudo de processos físicos onde as concentrações ou densidades dos constituintes de um determinado sistema se tornam elevadas. Nesses casos, modelagens matemáticas em sistemas biológicos mostram que processos difusivos de longo alcance podem ser descritos por fluxos do tipo

$$J = -D_1 \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left[ D_2 \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right], \quad (4.1)$$

onde  $D_1$  e  $D_2$  representam as difusões de curto e longo alcance. Neste modelo, o efeito da difusão de longo alcance,  $D_2$ , é menor que o efeito da difusão de curto

alcance ( $D_2 < D_1$ ). Em sistemas com alta concentração de indivíduos, o estudo de processos difusivos de longo alcance é relevante para a descrição de vários sistemas biológicos que exibem formação de padrão, bem como no estudo de propagação de epidemias [59].

Neste capítulo vamos formular um modelo matemático simples para incorporar regimes difusivos de longo alcance (*i.e.*, com altas ordens de derivadas) através de uma equação dinâmica não-local para os termos de crescimento e interação na equação de Fisher-Kolmogorov. O estudo de dinâmicas não locais no termo de interação tem sido amplamente estudado em sistemas de reação-difusão bem como no modelo presa-predador [16, 60, 61]. Nós generalizamos a equação de Fisher-Kolmogorov introduzindo não-localidade no termo de crescimento.

## 4.2 Modelo matemático

Nesta seção vamos propor uma nova generalização para a equação de Fisher-Kolmogorov, na seguinte forma

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = a \int_{\Omega} g_{\alpha}(x - x') u(x', t) dx' - bu(x, t) \int_{\Omega} f_{\mu}(x - x'') u(x'', t) dx''. \quad (4.2)$$

Nesta equação  $g_{\alpha}(x - x')$  é o núcleo da primeira integral que chamaremos de função influência de crescimento. Este termo representa um processo de crescimento não-local, que mede o efeito da vizinhança localizada na posição  $x'$  sobre os constituintes no ponto  $x$ . Com esse termo, o crescimento não se dá proporcional à densidade no ponto  $x$ , mas sim, levando em conta as densidades na posição  $x'$ , pesadas pela função  $g_{\alpha}(x - x')$ . A constante  $a$  tem a mesma dimensão da definição usual da equação de Fisher-Kolmogorov, representando uma taxa de crescimento. O segundo termo da Eq. (4.2) representa o já conhecido termo de interação não-local da Fisher generalizada. Na Eq. (4.2) o núcleo  $g_{\alpha}(x - x')$  deve ser normalizado no domínio  $\Omega$

$$\int_{\Omega} g_{\alpha}(y) dy = 1, \quad (4.3)$$

e deve depender apenas da distância entre os pontos  $x$  e  $x'$ . Esperamos que o valor de  $g_{\alpha}(x - x')$  decresça com a distância entre os pontos, de modo que para vizinhos

mais distantes

$$\lim_{y \rightarrow \infty} g_\alpha(y) = 0. \quad (4.4)$$

Considerando a seguinte transformação de variáveis  $y = x - x'$  e expandindo  $u(x', t)$  em uma série de Taylor em torno do ponto  $x$ , teremos a seguinte equação:

$$\begin{aligned} u(x - y, t) = & u(x, t) - y \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} + \frac{y^2}{2!} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} - \frac{y^3}{3!} \frac{\partial^3 u(x, t)}{\partial x^3} + \\ & + \frac{y^4}{4!} \frac{\partial^4 u(x, t)}{\partial x^4} - \frac{y^5}{5!} \frac{\partial^5 u(x, t)}{\partial x^5} + \dots \end{aligned} \quad (4.5)$$

Introduzindo a Eq. (4.5) na Eq. (4.2), encontraremos os seguintes termos integrais

$$\begin{aligned} a \int_{\Omega} g_\alpha(x - x') u(x', t) dx' = & a u(x, t) \int_{\Omega} g_\alpha(y) dy - a \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \int_{\Omega} y g_\alpha(y) dy + \\ & + \frac{a}{2!} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \int_{\Omega} y^2 g_\alpha(y) dy - \frac{a}{3!} \frac{\partial^3 u(x, t)}{\partial x^3} \int_{\Omega} y^3 g_\alpha(y) dy + \\ & + \frac{a}{4!} \frac{\partial^4 u(x, t)}{\partial x^4} \int_{\Omega} y^4 g_\alpha(y) dy - \frac{a}{5!} \frac{\partial^5 u(x, t)}{\partial x^5} \int_{\Omega} y^5 g_\alpha(y) dy + \\ & + \dots \end{aligned} \quad (4.6)$$

Nesta expansão podemos definir a seguinte quantidade

$$g_\alpha^{(n)} = \frac{a}{n!} \overline{y^n}, \quad (4.7)$$

com  $\overline{y^n}$  escrito como

$$\overline{y^n} = \int_{\Omega} y^n g_\alpha(y) dy. \quad (4.8)$$

Desta definição, a integral de crescimento não-local pode ser considerada como

$$a \int_{\Omega} g_\alpha(x - x') u(x', t) dx' = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n g_\alpha^{(n)} \frac{\partial^n u(x, t)}{\partial x^n} \quad (4.9)$$

Destes resultados podemos verificar como ficará a nossa proposta de equação de dinâmica de populações generalizada, escrevendo explicitamente os termos da ex-

pansão

$$\begin{aligned}
\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} &= g_{\alpha}^{(0)} u(x, t) - g_{\alpha}^{(1)} \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} + g_{\alpha}^{(2)} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} - g_{\alpha}^{(3)} \frac{\partial^3 u(x, t)}{\partial x^3} + \\
&+ g_{\alpha}^{(4)} \frac{\partial^4 u(x, t)}{\partial x^4} - g_{\alpha}^{(5)} \frac{\partial^5 u(x, t)}{\partial x^5} + g_{\alpha}^{(6)} \frac{\partial^6 u(x, t)}{\partial x^6} + \\
&- bu(x, t) \int_{\Omega} f_{\mu}(x - x'') u(x'', t) dx''.
\end{aligned} \tag{4.10}$$

Nesta equação, vemos então que os momentos associados à função  $g_{\alpha}$  aparecem como coeficientes de nossa equação dinâmica. O momento  $g_{\alpha}^{(0)}$  deve ter dimensão de taxa de crescimento,  $g_{\alpha}^{(1)}$  deve representar uma velocidade de fluxo, como discutido nos capítulos anteriores. O momento  $g_{\alpha}^{(2)}$ , por ser coeficiente de uma derivada de difusão será um coeficiente de difusão e todos os demais termos serão componentes dissipativos relacionados a derivadas de ordens elevadas. Com esta análise, podemos escrever os momentos  $g_{\alpha}^{(0)}$ ,  $g_{\alpha}^{(1)}$  e  $g_{\alpha}^{(2)}$ , como sendo

$$g_{\alpha}^{(0)} = a \tag{4.11}$$

$$g_{\alpha}^{(1)} = a \bar{y} = v \tag{4.12}$$

$$g_{\alpha}^{(2)} = \frac{a}{2} \bar{y}^2 = D \tag{4.13}$$

Para calcularmos os momentos associados, devemos explicitar a função influência de crescimento e calcular as integrais, para um sistema de tamanho dado. Observe que, ambos, o termo difusivo e convectivo estão associados ao caráter não-local do termo de crescimento. Deste modo, a velocidade convectiva é o deslocamento médio vezes a taxa de crescimento (inverso do tempo) e a constante de difusão está associada com o deslocamento médio quadrático vezes a taxa de crescimento. Esta é uma nova maneira de se olhar a difusão de espécies.

Se aplicarmos as mesmas imposições feitas sobre a função influência de interação, à função influência de crescimento, devemos impor também que  $g_{\alpha}(y)$  seja uma função par. Com esta exigência os momentos ímpares serão todos nulos, pois teremos uma integral em um intervalo simétrico de uma função ímpar. Uma função influência simples, mas eficiente, que podemos utilizar em mais estes cálculos pode ser a função

de Heaviside, que é escrita como

$$g_\alpha(y) = \frac{1}{2\alpha} \Theta(\alpha - y) \Theta(\alpha + y) \quad (4.14)$$

Considerando um sistema de tamanho  $2L$ , podemos efetuar as integrais acima e encontrar explicitamente os momentos associados. Os momentos  $g_\alpha^{(0)}$ ,  $g_\alpha^{(2)}$  e  $g_\alpha^{(4)}$  serão dados por

$$g_\alpha^{(0)} = a \int_{-L}^L g_\alpha(y) dy = a, \quad (4.15)$$

$$g_\alpha^{(2)} = \frac{a}{2} \int_{-L}^L y^2 g_\alpha(y) dy = \frac{\alpha^2 a}{6}. \quad (4.16)$$

$$g_\alpha^{(4)} = \frac{a}{24} \int_{-L}^L y^4 g_\alpha(y) dy = \frac{\alpha^4 a}{24}. \quad (4.17)$$

Considerando apenas estes termos na equação dinâmica, teremos

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = a u(x, t) + \frac{\alpha^2 a}{6} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} + \frac{\alpha^4 a}{24} \frac{\partial^4 u(x, t)}{\partial x^4} - u(x, t) \int_{\Omega} f_\mu(x - x'') u(x'', t) dx''. \quad (4.18)$$

Com a ajuda desta equação e da Eq. (4.13), podemos tirar uma importante relação entre o comprimento da função influência de crescimento,  $\alpha$ , e do coeficiente de difusão de um sistema:

$$\alpha = \sqrt{\frac{6 D}{a}}. \quad (4.19)$$

Em uma análise dimensional, vemos a importância desta relação, um parâmetro de comprimento definido para uma função influência de crescimento, extraída da taxa de difusão, uma grandeza característica de um sistema físico, químico ou biológico. Este resultado será melhor explorado utilizando dados experimentais obtidos na literatura especializada. A grande vantagem do nosso método torna-se agora evidente. Primeiro, suponha que queremos modelar um processo de difusão de uma determinada espécie usando a equação de Fisher-Kolmogorov generalizada com difusão (Eq. (2.9), neste caso precisamos dos parâmetros  $a$ ,  $D$ ,  $b$  e  $\mu$ . Em nosso modelo, de posse de  $D$  e  $a$  podemos propor uma função de crescimento e determinar o comprimento de correlação  $\alpha$  e verificar as vantagens do ponto de vista experimental. Uma segunda vantagem é que agora podemos comparar o parâmetro de correlação  $\alpha$  diretamente com o parâmetro  $\mu$ , ambos com a mesma dimensão. Nas relações

anteriores, comparávamos grandezas diferentes como  $\mu$  e  $D$  ou  $\mu$  e  $v$ , discutidas no capítulo 2 e 3. Finalmente, do ponto de vista computacional, a solução de uma integral é mais precisa se comparada a derivadas de segunda ordem, o que garante um resultado mais adequado para a generalização integral.

### 4.3 Estudo perturbativo

Podemos realizar um estudo perturbativo na equação de Fisher-Kolmogorov generalizada com difusão de longo alcance, utilizando a mesma proposta do capítulo 3.

Considerando a equação

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = a \int_{\Omega} g_{\alpha}(x - x') u(x', t) dx' - bu(x, t) \int_{\Omega} f_{\mu}(x - x'') u(x'', t) dx'', \quad (4.20)$$

notamos que uma solução estacionária constante  $u(x, t) \rightarrow u_0$  tem valor  $u_0 = a/b$ . Com isso podemos tentar, como solução teste, a seguinte função

$$u(x, t) = \frac{a}{b} + \varepsilon e^{ikx + \phi t}. \quad (4.21)$$

Introduzindo a Eq. (4.21) na Eq. (4.20), considerando a seguinte transformação de variáveis  $x' - x = z'$  e  $x'' - x = z''$ , as relações  $g_{\alpha}(x - x') = g_{\alpha}(x' - x)$  e  $f_{\mu}(x - x'') = f_{\mu}(x' - x)$  e retendo apenas termos de primeira ordem na perturbação  $\varepsilon$ , encontraremos

$$\begin{aligned} \phi(k) &= a \left\{ \int_{\Omega} g_{\alpha}(z') \cos(kz') dz' - \int_{\Omega} f_{\mu}(z'') \cos(kz'') dz'' - 1 \right\} + \\ &+ ia \left\{ \int_{\Omega} g_{\alpha}(z') \cos(kz') dz' - \int_{\Omega} f_{\mu}(z'') \cos(kz'') dz'' \right\}. \end{aligned} \quad (4.22)$$

Na equação anterior,  $i$  é a unidade imaginária ( $i^2 = -1$ ). A Eq. (4.22) pode ser escrita como

$$\phi(k) = \gamma(k) + i\eta(k). \quad (4.23)$$

As funções  $\gamma(k)$  e  $\eta(k)$ , são as partes real e imaginária da taxa de formação de padrão  $\phi(k)$ . A parte de interesse nesta equação é a parte real, pois exibe uma taxa

de crescimento que pode ser analisada no eixo real. A parte real é dada por

$$\gamma(k) = a \left\{ \int_{\Omega} g_{\alpha}(z') \cos(kz') dz' - \int_{\Omega} f_{\mu}(z'') \cos(kz'') dz'' - 1 \right\} \quad (4.24)$$

Podemos fazer uma análise para verificar a relevância dos coeficientes da Eq. (4.2) no processo de formação de padrão. Introduzindo a função

$$w(x, t) = \frac{u(x, t)}{u_0} = \frac{b}{a} u(x, t) \quad (4.25)$$

na Eq. (4.2) obtemos

$$\frac{\partial w(x, t)}{\partial t} = a \int_{\Omega} \{g_{\alpha}(x - x') - f_{\mu}(x - x')w(x', t)\} w(x', t) dx'. \quad (4.26)$$

Observe que as constantes  $a$  e  $b$  não interferem na formação de padrão, lembrando que o padrão é observado no regime estacionário

$$\frac{\partial w(x, t)}{\partial t} = 0. \quad (4.27)$$

Notamos que a taxa de crescimento  $a$ , apenas dá a velocidade com que a cinética converge, mas não interfere no resultado final que dependerá apenas dos parâmetros  $\alpha$  e  $\mu$ .

### 4.3.1 Função de crescimento não-local e interação tipo Heaviside

Para solucionar Eq. (4.24), podemos escolher um sistema de tamanho  $L$  e uma função influência de interação e de crescimento tipo Heaviside, escritas como:

$$f_{\mu}(z'') = \begin{cases} \frac{1}{2\mu} & , \quad |z''| \leq \mu \\ 0 & , \quad |z''| > \mu \end{cases} \quad (4.28)$$



$$g_\alpha(z') = \begin{cases} \frac{1}{2\alpha} & , \quad |z'| \leq \alpha \\ 0 & , \quad |z'| > \alpha \end{cases} \quad (4.29)$$

Para este conjunto de funções influências, as integrais podem ser solucionadas de forma simples e o resultado é dado por

$$\gamma(k) = a \left[ \frac{\sin(k\alpha)}{k\alpha} - \frac{\sin(k\mu)}{k\mu} - 1 \right]. \quad (4.30)$$

Observe que ao introduzirmos a correlação no crescimento, apenas diminuí os valores de  $\gamma(k)$ , tendo um máximo obviamente para  $\alpha = 0$ . Os valores de  $\gamma(k) > 0$  podem ser encontrados na região  $\pi < k\mu < 2\pi$  enquanto  $\alpha$  deve estar na região  $0 < k\alpha < \pi$ . Isto nos dá uma indicação de que  $\mu > \alpha$ , para termos  $\gamma(k) > 0$ , já que os demais picos contribuem, mas o primeiro é decisivo. Podemos também observar, via Eq. (4.30), que quando  $\alpha \rightarrow \mu$  teremos  $\gamma(k) \rightarrow -1$ .

Na figura 4.1, apresentamos o gráfico da Eq. (4.30), para vários valores do comprimento  $\alpha$ , com o alcance de interação  $\mu$  fixo e uma taxa de crescimento  $a$ , também fixa. Neste gráfico verificamos que existe um valor crítico para  $\alpha$ , com um dado  $\mu$ , para que a taxa de formação de padrão seja positiva. Como discutido anteriormente, os valores de  $\gamma(k)$  indicam os limites em que nosso sistema exhibe picos de formação de padrão. Para regimes em que  $\gamma(k) < 0$  o sistema não exhibe o fenômeno padrão, mas quando  $\gamma(k) > 0$ , teremos a formação de padrão sendo exibida na evolução da densidade de população  $u(x, t)$ . Expandindo a função seno na Eq. (4.30), considerando os termos mais importantes, teremos

$$\gamma(k) = \frac{k^2 a}{6} (\mu^2 - \alpha^2) - a. \quad (4.31)$$

Impondo que  $\gamma(k) > 0$ , encontraremos uma relação entre o comprimento de onda  $\lambda = 2\pi/k$  associado ao número de onda da integral de Fourier, o comprimento de correlação  $\alpha$  e o alcance de interação  $\mu$ .

$$\lambda < 2\pi \sqrt{\frac{\mu^2 - \alpha^2}{6}} \quad (4.32)$$

Com este resultado, para termos o fenômeno formação de padrão em um sistema, a relação entre o comprimento de correlação  $\alpha$  e o alcance de interação  $\mu$  devem

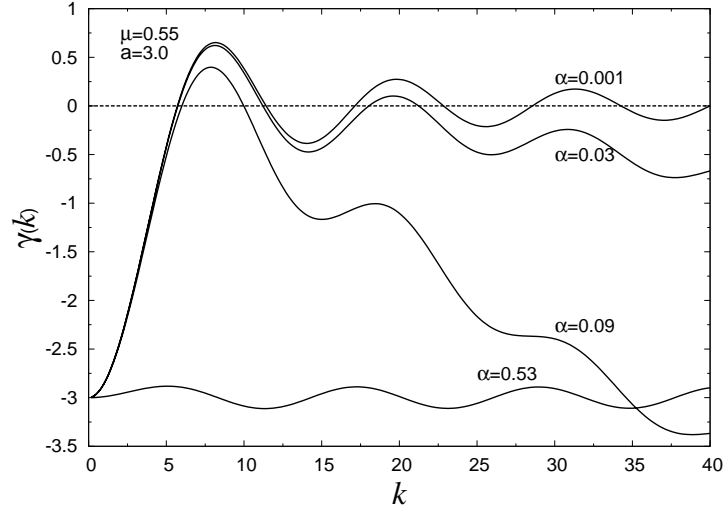


Figura 4.1: Parte real da taxa de crescimento da formação de padrão, para uma função influência de Heaviside com comprimento de interação  $\mu = 0.55$ . A taxa de crescimento  $a = 3.0$ . Neste gráfico, notamos que quando  $\alpha$  se aproxima de  $\mu$ , a taxa de formação de padrão real se torna negativa.

obedecer a Eq. (4.32), ou seja, o alcance de interação deverá ser sempre maior que o comprimento de correlação, no regime de padrão.

O resultado da Eq. (4.30) é um resultado mais completo, se comparado aos trabalhos já existentes na literatura [16, 51, 37, 40]. O resultado encontrado por Fuentes *et al.* [16, 51, 37, 40] pode ser obtido da Eq. (4.30) mediante a expansão da primeira função seno, no limite  $k \ll 1$

$$\gamma(k) = a - \frac{k^2 \alpha^2 a}{6} - a \frac{\sin(k\mu)}{k\mu} - a, \quad (4.33)$$

lembrando da Eq. (4.19),

$$\gamma(k) = -Dk^2 - a \frac{\sin(k\mu)}{k\mu}. \quad (4.34)$$

Ou, substituindo o segundo termo pela transformada de Fourier, ficamos com

$$\gamma(k) = -Dk^2 - a \int_{\Omega} f_{\mu}(z) \cos(kz) dz. \quad (4.35)$$

Impondo que  $\gamma(k) > 0$ , chegamos finalmente em

$$\lambda > 2\pi \sqrt{\frac{D}{-a\mathcal{F}_c\{f_\mu(z)\}}} \quad (4.36)$$

com  $\mathcal{F}_c\{f_\mu(z)\}$  sendo dado por

$$\mathcal{F}_c\{f_\mu(z)\} = \int_{\Omega} f_\mu(z) \cos(kz) dz. \quad (4.37)$$

Nesta última equação, nós retornamos à formulação para a taxa de formação de padrão  $\gamma(k)$  escrita em termos da transformada de Fourier cosseno da função influência  $f_\mu(z)$  [16, 51, 37, 40] e a função tem a forma

$$\gamma(k) = -Dk^2 - a\mathcal{F}_c\{f_\mu(z)\}. \quad (4.38)$$

Nesta análise, via Eq. (4.36) e Eq. (4.38), não explicitamos o tipo de função influência mas sim sua transformada de Fourier cosseno. E notamos que esta quantidade deve ser sempre negativa para que a condição de padrão seja estabelecida,  $\gamma(k) > 0$ . Nesses trabalhos, descobrimos que o peso  $f_\mu(z)$  deve ter cauda curta, e quando  $f_\mu(z) \rightarrow L$  ou  $f_\mu(z) \rightarrow 0$ , a condição  $\gamma(k) > 0$  deixa de ser obedecida. Verificamos então que a formulação com não-localidade no crescimento e nas interações é capaz de reproduzir os resultados conhecidos na literatura para a EFKG, se mostrando então uma proposta de generalização mais abrangente.

Podemos fazer uma análise da condição de formação de padrão, também sem explicitar o tipo de função influência de crescimento e de interação, apenas sugerindo como devem ser seus comportamentos. Impondo que  $\gamma(k)$  seja sempre positiva na Eq. (4.24), teremos a seguinte relação entre as funções influências

$$\mathcal{F}_c\{g_\alpha(z)\} - \mathcal{F}_c\{f_\mu(z)\} > 1. \quad (4.39)$$

Nesta equação vemos que a função de interação  $f_\mu(z)$  deve sempre conter a função peso de crescimento  $g_\alpha(z)$  na condição de formação de padrão, como ilustrado na figura 4.2. Notamos que a restrição encontrada para o caso particular com as duas funções definidas, novamente é estabelecida para um caso geral, para funções  $g_\alpha(z)$  e  $f_\mu(z)$  quaisquer.

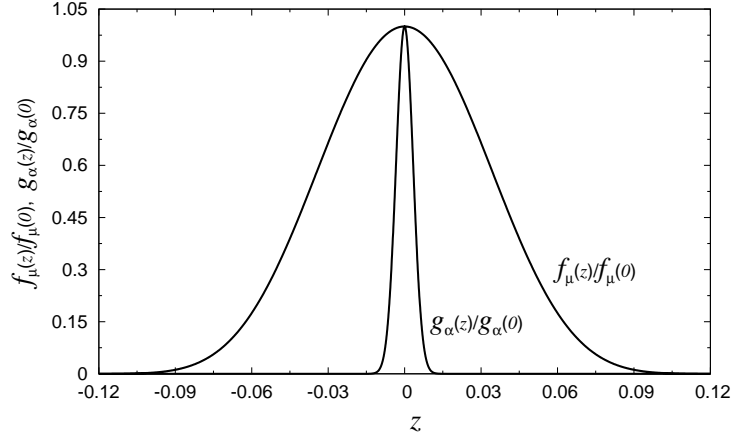


Figura 4.2: Comportamento geral da função influência de crescimento  $g_\alpha(z)$  em relação à função de interação  $f_\mu(z)$ , para que a condição de formação de padrão seja estabelecida.

### 4.3.2 Função de crescimento não-local e de interação generalizadas

Podemos estudar a modificação da formação de padrão, devido ao tipo de função influência, considerando uma função gaussiana generalizada [16]. Para o crescimento não-local e a interação, este tipo de função pode ser considerada como

$$g_{\alpha,\nu}(x') = \frac{1}{\alpha\sqrt{\pi}} \frac{\Gamma(\nu+1)}{\Gamma(\nu+1/2)} \left[ 1 - \frac{(x')^2}{\alpha^2} \right]^{\nu-\frac{1}{2}} \Theta[\alpha-x'] \Theta[\alpha+x']. \quad (4.40)$$

$$f_{\mu,\nu}(x'') = \frac{1}{\mu\sqrt{\pi}} \frac{\Gamma(\nu+1)}{\Gamma(\nu+1/2)} \left[ 1 - \frac{x''^2}{\mu^2} \right]^{\nu-\frac{1}{2}} \Theta[\mu-x''] \Theta[\mu+x'']. \quad (4.41)$$

Nestas duas equações,  $\nu$  é um parâmetro que define o tipo de função,  $\Gamma$  e  $\Theta$  são as funções Gama e Heaviside. Com estas equações, podemos ter vários comportamentos para os núcleos das integrais. Podemos gerar distribuições tipo Delta, tipo gaussiana ou mesmo uma função de Heaviside [16].

Na figura 4.3, mostramos uma ilustração do comportamento das funções generalizadas, para a função  $\psi_{\mu,\nu}(z'') = f_{\mu,\nu}(z'')/f_{\mu,\nu}(0)$ . Notamos como o comportamento da função pode ser modelado pelo parâmetro  $\nu$ . Para  $\nu \rightarrow \infty$  a função se comporta como uma Delta de Dirac,  $\nu \rightarrow 0.5$  seu comportamento é semelhante a uma

função de Heaviside e para  $\nu > 1$  teremos um comportamento de uma distribuição gaussiana.

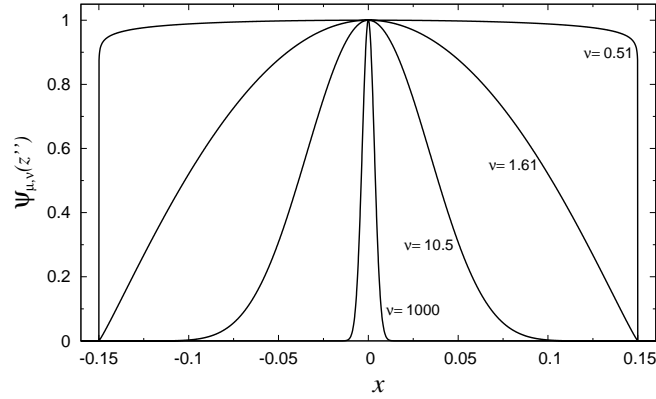


Figura 4.3: Função influência generalizada  $\psi_{\mu,\nu}(z'') = f_{\mu,\nu}(z'')/f_{\mu,\nu}(0)$ , para vários valores do parâmetro  $\nu$  com  $\mu = 0.15$ .

Solucionando a Eq. (4.24) [62] para as distribuições generalizadas, Eq. (4.40) e Eq. (4.41), encontramos a seguinte taxa real de formação de padrão

$$\gamma_{\nu,\alpha,\mu}(k) = a \left\{ \Gamma(\nu + 1) \left[ \left( \frac{2}{k\alpha} \right)^\nu J_\nu(k\alpha) - \left( \frac{2}{k\mu} \right)^\nu J_\nu(k\mu) \right] - 1 \right\} \quad (4.42)$$

Nesta equação  $J_\nu$  representa a função de Bessel de ordem fracionária  $\nu$ . Analisando a Eq. (4.42), podemos ver a dependência de  $\gamma(k)$  com o tipo de função de distribuição que escolhemos,  $\gamma(k) \rightarrow \gamma_{\nu,\alpha,\mu}(k)$ , para pesar as interações e para pesar o processo de crescimento não-local. Na figura 4.4, mostramos o comportamento da função  $\gamma(k)$ , Eq. (4.42), para  $\nu = 0.5$  (distribuição tipo caixa),  $\nu = 5.0$  (distribuição gaussiana) e  $\nu = 40$  (distribuição Delta de Dirac). Nesta figura podemos perceber a relevância do tipo de função na determinação do padrão. Para os valores de  $\alpha$  e  $\mu$  trabalhados, notamos que quando utilizamos uma distribuição de Heaviside a taxa de formação de padrão apresenta valores positivos. Mas quando consideramos os valores de  $\nu$  que representam distribuições bem estreitas, a função  $\gamma(k)$  deixa de ser positiva. Este resultado ilustra bem a dependência do padrão com o tipo de função e mostra a eficiência da distribuição de Heaviside na descrição deste fenômeno.

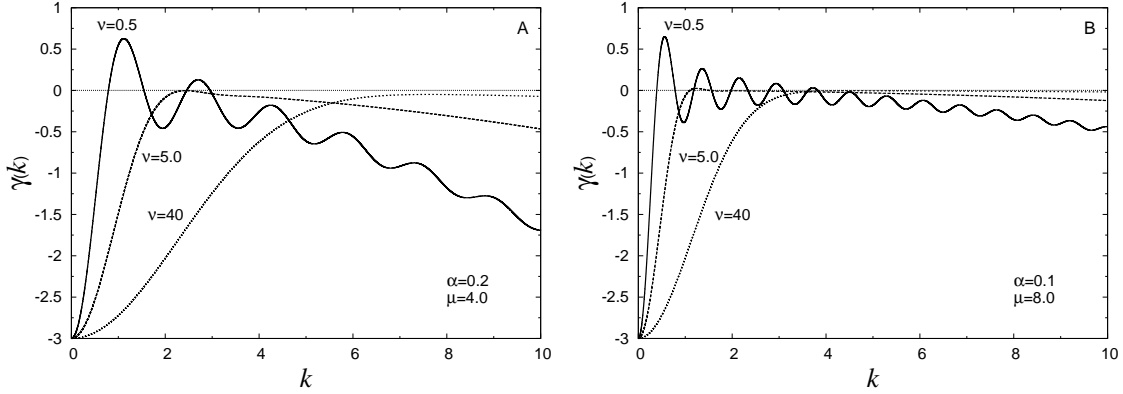


Figura 4.4: Parte real da taxa de crescimento da formação de padrão para uma função de crescimento não-local e de interação generalizada. Gráfico A, comprimento de correlação e de interação,  $\alpha = 0.2$  e  $\mu = 4.0$  e Gráfico B  $\alpha = 0.1$  e  $\mu = 8.0$ . Para  $\nu = 0.5$  temos uma função de Heaviside e  $\nu = 40$  temos uma distribuição gaussiana bem estreita (veja figura 4.3).

## 4.4 Resultados numéricos

Usando o método *Operator Splitting* (veja apêndice A), nós solucionamos numericamente a equação integral não-local Eq. (4.2). É importante mencionar que, nos resultados numéricos apresentados, utilizamos um sistema de tamanho  $L = 1.0$  com centro em  $x_0 = L/2$  e condições de contorno periódicas,  $u(x = 0, t) = u(x = L, t)$ . Os incrementos discretos da malha espacial e temporal valem  $\Delta x = 1 \times 10^{-3}$  e  $\Delta t = 1 \times 10^{-3}$ . Os parâmetros de crescimento e competição  $a$  e  $b$  são sempre considerados iguais a 1.0 para padronizarmos nossa análise numérica. Finalmente, consideramos condições iniciais gaussianas, normalizadas no intervalo  $L$ , dadas por

$$u(x, 0) = \frac{1}{\Gamma} \exp \left[ -\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma^2} \right], \quad (4.43)$$

com  $\Gamma$  dada por

$$\Gamma = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sigma \left[ \operatorname{erf} \left( \frac{x_0}{\sqrt{2}\sigma} \right) + \operatorname{erf} \left( \frac{L - x_0}{\sqrt{2}\sigma} \right) \right], \quad (4.44)$$

onde a dispersão da gaussiana como  $\sigma = 0.004$ .

Neste estudo numérico, evoluímos a distribuição inicial Eq. (4.43) segundo a lei matemática Eq. (4.2). Realizamos em geral 200 passos temporais e procuramos encontrar as soluções numéricas  $u(x, t)$  para o tempo programado e também os

estados estacionários  $u(x)$ , no regime em que a solução não muda seu comportamento com o tempo. Teoricamente estas soluções são dadas por  $u(x) = u(x, t \rightarrow \infty)$ , mas como nossa solução é computacional, estipulamos um critério numérico para encontrar os vetores estacionários. Por meio de testes, verificamos que os estados estacionários podem ser garantidos exigindo que estes vetores obedecem ao critério  $|u(x, t + \Delta t) - u(x, t)| < \delta$ , com  $\delta = 1 \times 10^{-16}$ . Com o intuito de simplificar nossa análise, vamos considerar as funções influência de interação e de crescimento, como distribuições de Heaviside, Eqs. (4.28) e (4.29). A idéia central é fixar uma única distribuição para as funções  $g_\alpha(x)$  e  $f_\mu(x)$  a fim de analisar numericamente como o fenômeno de formação de padrão se comporta em termos dos parâmetros  $\alpha$  e  $\mu$ .

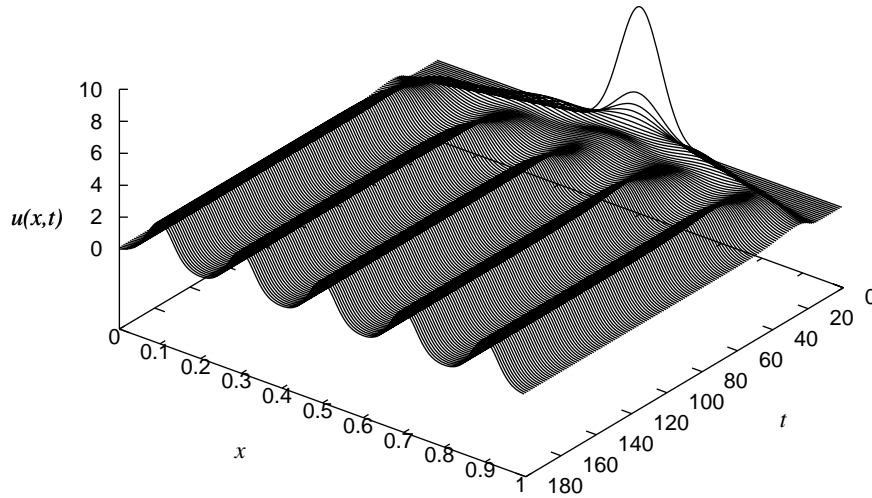


Figura 4.5: Solução numérica  $u(x, t)$  em função do tempo  $t$  e posição  $x$  em unidades arbitrárias. O termo de interação não-local e o termo de crescimento não-local são calculados utilizando uma distribuição de Heaviside de comprimentos  $\mu = 0.15$  e  $\alpha = 0.030$ .

Com os critérios de solução da Eq. (4.2) bem definidos, podemos trabalhar os parâmetros  $\mu$  e  $\alpha$  nas soluções numéricas, para descobrir como estes parâmetros estão relacionados na determinação da estrutura de padrão no modelo matemático de uma espécie de Fisher-Kolmogorov com difusão de longo alcance.

Na figura 4.5, apresentamos um gráfico da solução  $u(x, t)$  para um tempo de

observação arbitrário  $t = 180$ . Neste gráfico notamos como uma distribuição inicial de partículas gaussiana evolui segundo a Eq. (4.2) se transformando em uma função periódica bem definida, que caracteriza o surgimento do fenômeno chamado formação de padrão.

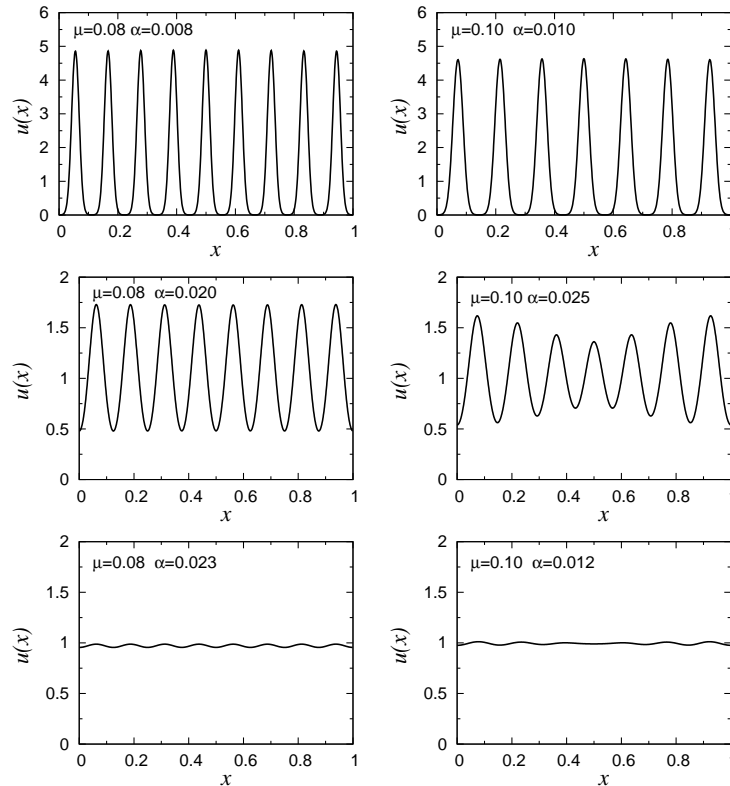


Figura 4.6: Vetor estacionário  $u(x)$  para os comprimentos de interações  $\mu = 0.08$  e  $\mu = 0.10$ . Quando elevamos o valor do comprimento de correlação  $\alpha$ , para  $\mu$  fixado, a estrutura de padrão deixa de existir.

Os estados estacionários  $u(x)$  são mostrados na figura 4.6, para  $\mu = 0.10$ ,  $\mu = 0.08$  e vários valores do alcance  $\alpha$ . Este resultado mostra um acordo preciso com a predição teórica, pois notamos que as estruturas de padrão sempre aparecem para  $\alpha < \mu$ . Para  $\mu = 0.08$  temos padrão para  $\alpha = 0.008$  e  $\alpha = 0.020$ , mas para  $\alpha = 0.023$  os picos de padrão podem ser negligenciados. O mesmo comportamento é observado para  $\mu = 0.10$  em que os picos se tornam bem atenuados para  $\alpha = 0.012$ .

Para compreendermos melhor a relação entre os parâmetros  $\mu$  e  $\alpha$ , na figura 4.7 construímos um gráfico com os pares críticos  $(\mu_c, \alpha_c)$ , no regime em que os picos de formação de padrão podem ser negligenciados. Neste gráfico fixamos um valor de  $\mu$



e aumentamos o parâmetro  $\alpha$  nas simulações até que o desvio quadrático médio,

$$\xi = \frac{1}{L} \int_0^L \left( u(x) - \overline{u(x)} \right)^2 dx, \quad (4.45)$$

seja menor que um dado  $\zeta$  estipulado. As regiões *Padrão* e *Sem Padrão* delimitam os regimes onde temos padrão e onde não temos formação de padrão. Nesta figura, é importante observar que o parâmetro  $\alpha$  é sempre menor que  $\mu$  na região de padrão, como foi demonstrado em nossa análise perturbativa. Por outro lado fora desta região de padrão,  $\alpha$  pode ser igual ou maior que  $\mu$ .

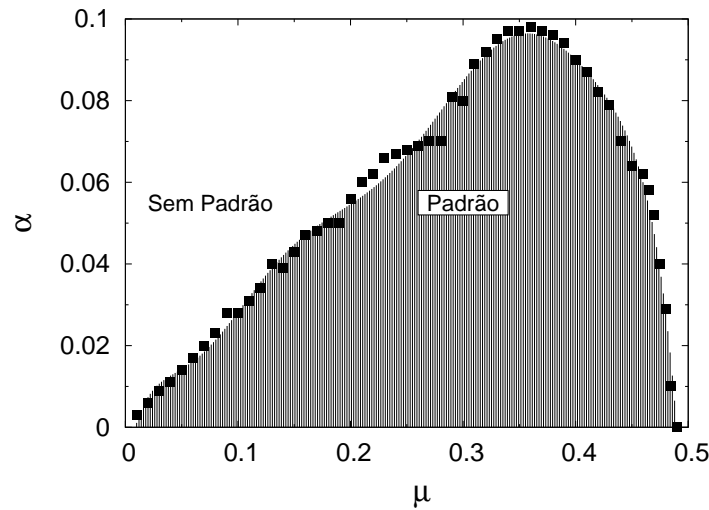


Figura 4.7: Diagrama de separação entre as fases de padrão e sem formação de padrão, no espaço dos vetores  $(\mu, \alpha)$ . Os pontos indicam os pares críticos  $(\mu_c, \alpha_c)$  para os quais o sistema não exibe picos de padrão. O regime *Padrão* indica a região dos pares  $(\mu, \alpha)$  onde temos padrão e a região *Sem Padrão* indica os pontos para o qual não existe padrão.

## 4.5 Validação experimental do modelo

Um sistema biológico real se desenvolve crescendo e se difundindo em um determinado meio. Em determinados regimes das interações entre os constituintes deste sistema, observando também os processos difusivos, de crescimento e o limite de suporte do meio, poderemos encontrar este sistema biológico em um regime de formação de padrão. Com o presente modelo, podemos encontrar uma relação entre

a constante de difusão  $D$  e a taxa de crescimento  $a$ , traduzido na quantidade  $\alpha$  pela expressão

$$\alpha = \sqrt{\frac{6D}{a}}. \quad (4.46)$$

Podemos interpretar esta grandeza como um comprimento de correlação que nos indica o regime difusivo e de crescimento do sistema, ou seja, uma quantidade que caracteriza um sistema biológico. Nesta filosofia, dado um comprimento de correlação  $\alpha$ , que é a característica do sistema, poderemos indicar os possíveis números de onda  $k$  das estruturas de formação de padrão sugerindo os possíveis valores das interações  $\mu$ , via Eq. (4.32) como

$$k > \sqrt{\frac{6}{\mu^2 - \alpha^2}}, \quad (4.47)$$

lembrando que esta relação foi obtida para pequenos valores de  $k$ .

Através do trabalho experimental de Nicolas Perry [63], podemos testar a relação  $\mu > \alpha$ , para a condição de formação de padrão requerida neste trabalho. No trabalho de Perry, encontramos a seguinte relação de valores experimentais:

$$\begin{aligned} D &= (2.2 \pm 0.15) \times 10^{-5} \text{cm}^{-2} \text{s}^{-1} \quad \longrightarrow \text{Coeficiente de difusão.} \\ K &= (5.5 \pm 0.4) \times 10^8 \text{cells ml}^{-1} \quad \longrightarrow \text{Capacidade de suporte do sistema.} \\ a &= (2.23 \pm 0.2) \times 10^{-4} \text{s}^{-1} \quad \longrightarrow \text{Taxa de crescimento.} \\ \kappa &\sim 2 \text{cm}^{-1} \quad \longrightarrow \text{Número de onda da formação de padrão.} \end{aligned}$$

Com estes dados experimentais, juntamente com a relação Eq. (4.46), podemos calcular as grandezas

$$\begin{aligned} \alpha &= (0.77 \pm 0.09) \text{cm} \quad \longrightarrow \text{Comprimento da influência de crescimento.} \\ b &= (1.19 \pm 0.03) \times 10^{-12} \text{cm s}^{-1} \quad \longrightarrow \text{Taxa de competição.} \end{aligned}$$

Uma vez encontrado o valor de  $\alpha$  e  $\kappa$  experimentalmente, devemos agora fazer uma estimativa da taxa de formação de padrão  $\gamma(k)$ , para que possamos encontrar o parâmetro  $\mu$ . É interessante lembrar que a solução aproximada Eq. (4.21) no espaço

real é escrita como

$$u(x, t) = 1 + \varepsilon \cos(kx)e^{\gamma(k)t}. \quad (4.48)$$

Nesta equação, devemos fornecer um valor de  $k$ , encontrar a taxa  $\gamma(k)$  e para um  $\varepsilon$  pequeno evoluir a equação e observar os picos que se formarão na representação de um padrão espacial. Para  $k$  pequeno, observamos na figura (4.1) que a taxa  $\gamma(k)$  positiva está situada entre os valores  $[0.0, 0.5]$ . Podemos fazer a seguinte sugestão de um valor para  $\gamma(k)$ ,  $\gamma(k) \sim 0.01$ , para que possamos calcular o parâmetro  $\mu$ , e verificar a relação  $\mu > \alpha$ . Com a aproximação  $\gamma(k) \sim 0.01$ , solucionando a Eq. (4.31) para  $\mu$  teremos,

$$\mu = \sqrt{\alpha^2 + \frac{3[a + \gamma(k)]}{2\pi^2\kappa^2a}}, \quad (4.49)$$

com  $k = 2\pi\kappa$ . Introduzindo os valores de  $\alpha$ ,  $a$ ,  $\kappa$  e  $\gamma(k)$  na Eq. (4.49), encontraremos  $\mu \sim 1.5 \text{ cm}$ . Notamos então, que para a estimativa mais pessimista da função  $\gamma(k)$ , o valor do parâmetro de interação  $\mu$  é aproximadamente duas vezes a correlação  $\alpha$ . Este resultado indica que para valores experimentais na condição de formação de padrão, os parâmetros  $\mu$  e  $\alpha$  devem obedecer a relação  $\mu > \alpha$ . É interessante notar, que esta imposição implica na não existência de padrão para sistemas biológicos onde o limite do sistema coincide com o valor do comprimento de correlação  $\alpha$ , pois não poderemos encontrar um correspondente  $\mu > \alpha$ .

## 4.6 Conclusão

Neste capítulo, realizamos uma extensão da equação de Fisher-Kolmogorov introduzindo uma não-localidade no termo de crescimento. Esta generalização incorpora processos de crescimento local e termos de difusão de longo alcance. Neste estudo, verificamos que nosso modelo é capaz de reproduzir os resultados conhecidos de outros autores, no estudo da equação de Fisher-Kolmogorov generalizada [16, 38, 40], para não-localidade apenas nas interações. Com esta nova metodologia, nossos resultados numéricos e analíticos mostram que o fenômeno formação de padrão fica completamente descrito apenas por dois parâmetros: o comprimento de correlação e o comprimento de interação que definem os alcances das funções de crescimento não-local  $g_\alpha(x)$  e de interação não-local  $f_\mu(x)$ . No regime de formação de padrão, nossas simulações e a análise perturbativa indicam que os parâmetros  $\mu$  e  $\alpha$  devem obedecer a seguinte relação  $\mu > \alpha$ . Por meio de resultados experimen-

tais sobre a formação de padrão nas bactérias *Escherechia Coli* [63], esta proposta teórica pode ser testada calculando os parâmetros  $\alpha$  e  $\mu$ . Utilizando estes dados experimentais encontramos:  $\alpha = 0.77cm$  e  $\mu \sim 1.5cm$ , ou seja,  $\mu > \alpha$ . Este resultado indica uma concordância com nossos resultados teóricos e numéricos, garantindo a aplicação do método no estudo de formação de padrão em sistemas biológicos.

# Capítulo 5

## Conclusões

Nesta tese, realizamos um estudo sobre a equação de Fisher-Kolmogorov generalizada aplicada à formação de padrão em sistemas biológicos.

No capítulo 1 fizemos uma revisão geral sobre os vários modelos de dinâmica de populações encontrados na literatura e que são de interesse neste trabalho. Deduzimos a equação de Fisher-Kolmogorov para uma espécie e aplicamos esta formulação ao sistema presa-predador em um sistema com três espécies, onde verificamos o surgimento de nichos ecológicos.

No capítulo 2, estudamos a equação de Fisher-Kolmogorov generalizada com difusão. Mostramos como obter a generalização nesta modelagem, introduzindo interações não locais pesadas por uma distribuição chamada função influência. Descrevemos quais as características necessárias da distribuição influência para que esta modelagem possa ser utilizada na descrição do fenômeno formação de padrão. Verificamos também como a intensidade da difusão em um sistema pode modificar as estruturas de padrão descritas neste modelo e sua relação com o alcance da função influência de interação.

No capítulo 3 desenvolvemos um estudo sobre a introdução de um fluxo convectivo na equação de Fisher-Kolmogorov generalizada. Sugerimos um modelo matemático com campos estáticos e campos dinâmicos de velocidade. Quando consideramos um campo de velocidade não dependente do tempo e espaço, notamos que as estruturas de padrão não são modificadas pela intensidade deste campo. Este resultado se deve ao fato de podermos considerar uma transformação de Galileu para encontrarmos um segundo referencial inercial, onde o fenômeno é visto sem a in-

terferência da velocidade de fluxo. Para campos dinâmicos, dependentes do espaço, é verificado uma dependência do fenômeno formação de padrão, com a intensidade deste campo. Para estes campos, existe sempre uma magnitude  $v_0$  inferior aos campos estáticos, para o qual a formação de padrão pode ser negligenciada. Este estudo mostra que a relação entre a intensidade do campo  $v_0$  e o comprimento de interação, máximos, para a formação de padrão, pode ser dado por uma lei de campo médio  $v_0(\mu) = P(\mu) (\mu_c - \mu)^\beta$ , onde  $\beta = 0.45$  e  $\mu_c = 0.49$ .

No capítulo 4, por meio de uma teoria não-local, propomos uma nova generalização da equação de Fisher-Kolmogorov, que incorpora termos de difusão de longo alcance. Nesta generalização as interações e o termo de crescimento são escritos como integrais com núcleos  $f_\mu$  e  $g_\alpha$  que pesam a competição e o crescimento de constituintes de uma determinada colônia de bactérias. Nesta teoria não-local, nos termos de crescimento e competição, conseguimos resgatar os resultados já conhecidos sobre formação de padrão com a equação FKG e mostramos como compreender este fenômeno utilizando um procedimento mais simples e abrangente. Em nosso modelo a análise do fenômeno de formação de padrão se dá por meio da comparação entre o alcance da função de crescimento não-local  $\alpha$ , com o alcance da função de interação  $\mu$ , que são parâmetros de mesma dimensão. Neste trabalho, a condição de formação de padrão  $\mu > \alpha$  é verificada utilizando um procedimento puramente analítico, por meio da solução numérica da equação dinâmica e através de resultados experimentais. Com estes resultados, mostramos a importância de uma generalização não-local em teorias já existentes, para a descrição do fenômeno formação de padrão em sistemas biológicos.

## 5.1 Perspectivas de Trabalhos Futuros

Novas perspectivas se abrem para aplicações dos resultados discutidos aqui. Entre elas destacam-se:

- 1 - O estudo em dimensão superior, em particular  $d = 2$  para o mapeamento de espécies na superfície da terra e  $d = 3$  para o meio aquático;
- 2 - O termo integral apresenta ainda facilidades computacionais com o desenvolvimento de algoritmos que possibilitam uma maior precisão e velocidade, o que permite a simulação de corredores ecológicos e problemas de meio ambiente;

3 - Estudar o efeito da introdução de termos de ruído na equação FKG e qual o efeito destes termos nas soluções desta nova equação;

4 - Estudar a formação de padrão na equação FKG com termo de difusão e convecção

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} - v(x, t) \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} + au(x, t) - bu(x, t) \int_{\Omega} f_{\mu}(x-x') u(x', t) dx',$$

verificando a dependência do padrão com o número de Peclet,  $P_e = v_0 L / D$ , onde  $P_e \rightarrow 0$  (regime difusivo) e  $P_e \rightarrow \infty$  (regime convectivo);

5 - Modelar as interações entre presas e predadores utilizando a metodologia de não-localidade nos termos de interações e crescimentos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} &= a_u \int_{\Omega} g_{\alpha}(x-x') u(x', t) dx' + \\ &\quad - b_u v(x, t) \int_{\Omega} f_{\mu}(x-x'') u(x'', t) dx'' \\ \frac{\partial v(x, t)}{\partial t} &= a_v u(x, t) \int_{\Omega} g_{\beta}(x-x') v(x', t) dx' + \\ &\quad - b_v v(x, t) \int_{\Omega} f_{\nu}(x-x'') v(x'', t) dx''. \end{aligned}$$

# Apêndice A

## Métodos numéricos utilizados na solução da equação de Fisher-Kolmogorov generalizada

Neste apêndice apresentamos os métodos numéricos utilizados na solução da equação de Fisher-Kolmogorov, com todas as generalizações propostas nos trabalhos apresentados.

### A.1 Termos convectivos

Em nossos estudos, propomos uma generalização integral da equação de Fisher-Kolmogorov com uma dinâmica convectiva. A forma geral de um termo convectivo, ou equação convectiva, pode ser considerada como

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = -v \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \quad (\text{A.1})$$

Nesta equação,  $u(x, t)$  é um campo escalar. A solução formal da equação convectiva pode ser dada por

$$u(x, t) = F(x - vt) \quad (\text{A.2})$$

que mostra como uma função, que pode ser uma distribuição, é levado por um fluxo de velocidade  $v$ . Se  $v > 0$  a distribuição se desloca para direita e se  $v < 0$  ela se



desloca para esquerda. Esta equação, apesar de simples, se mostra extremamente delicada do ponto de vista numérico, no que diz respeito às necessidades de estabilidade numérica. Este problema está intrinsicamente ligado ao termo derivada de ordem ímpar na equação. Até os dias atuais esta equação ainda é objeto de estudo de vários pesquisadores, na área de desenvolvimento de métodos numéricos [64], se mostrando assim um problema delicado e que deve ser tratado com cuidado.

### A.1.1 Método de discretização FTCS

Em um procedimento de discretização normal por diferenças finitas, poderíamos considerar a seguinte equação

$$\frac{u(x, t + dt) - u(x, t)}{dt} = -v \frac{u(x + dx, t) - u(x, t)}{dx}, \quad (\text{A.3})$$

onde  $dx$  e  $dt$  são os incrementos nas direções  $x$  e  $t$ , respectivamente. No método *Forward Time Central Space* (FTCS), consideramos um esquema de discretização temporal explícita e uma discretização centrada para o espaço  $x$ . A Eq. (A.1) pode ser discretizada utilizando a seguinte regra

$$\frac{u(x, t + dt) - u(x, t)}{dt} = -v \frac{u(x + dx, t) - u(x - dx, t)}{2dx}. \quad (\text{A.4})$$

A derivada temporal é calculada de forma tradicional e a derivada no ponto  $x$  é calculada considerando os pontos  $x + dx$  e  $x - dx$ , levando em conta a seguinte aproximação

$$u(x, t) = \frac{u(x + dx, t) + u(x - dx, t)}{2} \quad (\text{A.5})$$

$$\begin{aligned} v(x, t) &= v_i^n \\ u(x, t) &= u_i^n \\ u(x + dx, t) &= u_{i+1}^n \\ u(x - dx, t) &= u_{i-1}^n \\ u(x, t + dt) &= u_i^{n+1} \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Com estas regras de discretizações, a Eq. (A.4) pode ser dada como

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{v_i^n dt}{2dx}(u_{i+1}^n - u_{i-1}^n). \quad (\text{A.7})$$

Escrevendo  $\alpha = v_i^n dt/dx$ , veremos que para uma velocidade de fluxo constante na análise de estabilidade de von Neumann, este método apesar de simples e eficiente é instável para qualquer valor de  $\alpha$ .

### A.1.2 Método de Lax

Uma modificação introduzida por Lax no método FTCS o torna estável em uma análise de von Neumann [65]. Esta modificação consiste em considerar

$$u_i^n \rightarrow \frac{u_{i+1}^n + u_{i-1}^n}{2}. \quad (\text{A.8})$$

Com isso, a Eq. (A.7) se torna

$$u_i^{n+1} = \frac{u_{i+1}^n + u_{i-1}^n}{2} - \frac{\alpha}{2}(u_{i+1}^n - u_{i-1}^n). \quad (\text{A.9})$$

Com este método a solução numérica ganha estabilidade para  $0 \leq \alpha \leq 1$ . Apesar desta correção solucionar o problema da estabilidade numérica, este método não se mostra inteiramente satisfatório devido ao fato das soluções não manterem sua forma inicial para tempos longos, mesmo para baixas velocidades. Este é um problema verificado em grande parte dos métodos que propõem soluções da equação convectiva. Alguns não são estáveis apesar de serem facilmente implementáveis, outros são estáveis mas têm problemas com respeito à integridade das condições iniciais. Outra discretização que também se mostra estável a uma análise de von Neumann, é o método Crank-Nicholson. Este método é muito bom para a equação de difusão, mas para a equação convectiva apresenta problemas semelhantes ao método de Lax [66].

### A.1.3 Esquema de discretização Upwind

No método *Upwind*, as diferenças na parte espacial são escritas direcionando a derivada no sentido do fluxo convectivo. Se considerarmos o ponto  $i$  como ponto

central, se a convecção ocorre da esquerda para direita, os pontos que participam deste processo são os pontos  $(i - 1, i)$ , com o fluxo na direção  $i - 1 \implies i$ . Com velocidade menor que zero o fluxo se desloca para esquerda e os pontos envolvidos neste cálculo são  $(i + 1, i)$ , e neste caso o fluxo tem direção  $i \longleftarrow i + 1$ . Com esta análise a velocidade convectiva na aproximação *Upwind* é escrita como

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \alpha(u_i^n - u_{i-1}^n) \quad \text{para } v_i^n > 0. \quad (\text{A.10})$$

e

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \alpha(u_{i+1}^n - u_i^n) \quad \text{para } v_i^n < 0. \quad (\text{A.11})$$

Como discutido no apêndice B, a análise de von Neumann para a discretização *Upwind* é estável para  $0 \leq \alpha \leq 1$ . Nossos cálculos foram feitos com este método, pois apresentou boa performance para baixas velocidades, não mostrando os problemas dos métodos anteriores. Para velocidades elevadas o parâmetro  $\alpha$  se aproxima da unidade e começamos a ter problemas de conservação da forma da condição inicial de  $u(x, t)$ , mas para baixas velocidades estas perdas são muito pequenas, não comprometendo a análise desejada.

## A.2 Termo de crescimento

Em nossos estudos, trabalhamos também com uma equação tipo crescimento infinito, que é a proposta malthusiana. Segundo Thomas Malthus, se nenhum agente atuar sobre uma determinada população ela crescerá indefinidamente. Esta lei da ecologia pode ser formulada, de uma forma mais geral como

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = a(x, t)u(x, t). \quad (\text{A.12})$$

A taxa de crescimento na Eq. (A.12) pode ser considerada dependente da posição e do tempo, de uma forma mais geral, para englobar fenômenos de desertificação onde  $a(x, t)$  tenderia à zero, escassez de alimentos com o tempo, ou mesmo processos de crescimento aleatório, em que uma colônia em confinamento recebe alimentos distribuídos aleatoriamente na região de confinamento. O método Runge-Kutta de quarta ordem [65], pode ser usado para casos como este, pois tem bom desempenho e é extremamente simples de ser implementado. Discretizando a Eq. (A.12)

encontraremos

$$u_i^{n+1} = u_i^n + a_i^n dt u_i^n. \quad (\text{A.13})$$

No método Runge-Kutta de quarta ordem teremos

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \frac{a_i^n dt}{6} [F_1 + 2F_2 + 2F_3 + F_4]. \quad (\text{A.14})$$

Os termos desta equação, são escritos

$$\begin{aligned} F_1 &= a_i^n u_i^n \\ F_2 &= a_i^n u_i^n \left( 1 + \frac{a_i^n dt}{2} \right) \\ F_3 &= a_i^n u_i^n \left( 1 + \frac{a_i^n dt}{2} + \frac{(a_i^n)^2 dt^2}{4} \right) \\ F_4 &= a_i^n u_i^n \left( 1 + a_i^n dt + \frac{(a_i^n)^2 dt^2}{2} + \frac{(a_i^n)^3 dt^3}{4} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

Introduzindo Eq. (A.15) na Eq. (A.14) teremos:

$$u_i^{n+1} = u_i^n + a_i^n dt u_i^n \left[ 1 + \frac{a_i^n dt}{2} + \frac{(a_i^n)^2 dt^2}{6} + \frac{(a_i^n)^3 dt^3}{24} \right]. \quad (\text{A.16})$$

### A.3 Integração do termo de interação não-local

O termo de interação não-local na Fisher-kolmogorov generalizada, é integrado segundo a regra do trapézio. Considerando apenas a parte de interação não-local, a Fisher-Kolmogorov se torna

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = -b(x, t)u(x, t) \int_{\Omega} f(x - x')u(x', t)dx' \quad (\text{A.17})$$

Utilizando um esquema de discretização, encontraremos

$$u_i^{n+1} = u_i^n - b_i^n dt u_i^n \sum_{k=0}^N f_k^i u_k^n dk. \quad (\text{A.18})$$

A parte integral pode ser destacada como

$$I_0^N = \sum_{k=0}^N g_k^i dk \quad (\text{A.19})$$

com  $g_k^i = f_k^i u_k^n$ . Correndo a soma Eq. (A.19), considerando cada intervalo  $[k-1, k]$  como pontos das bases de um trapézio,  $[g_{k-1}^i, g_k^i]$  suas alturas e  $dk$  constante, a soma se torna

$$I_0^N = \left( \frac{g_0^i + g_1^i}{2} \right) dk + \left( \frac{g_1^i + g_2^i}{2} \right) dk + \left( \frac{g_2^i + g_3^i}{2} \right) dk + \dots + \left( \frac{g_{N-1}^i + g_N^i}{2} \right) dk \quad (\text{A.20})$$

que se torna

$$I_0^N = \sum_{k=0}^N g_k^i dk - \left( \frac{g_0^i + g_N^i}{2} \right) dk. \quad (\text{A.21})$$

Com esta aproximação a equação de interação não-local se torna

$$u_i^{n+1} = u_i^n - b_i^n dt u_i^n \left\{ \sum_{k=0}^N f_k^i u_k^n dk - \frac{f_0^i u_0^n + f_N^i u_N^n}{2} dk \right\}. \quad (\text{A.22})$$

## A.4 Solução numérica da equação de difusão

Para solucionarmos o termo de difusão da equação de Fisher-Kolmogorov generalizada,

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = D(x, t) \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}, \quad (\text{A.23})$$

podemos utilizar o método mais simples possível. Este método é tão somente a discretização segundo a regra FTCS (*Forward Time Central Space*). Como anteriormente, neste método devemos considerar a derivação no tempo  $t$  na forma não simetrizada e a derivada no espaço  $x$  de forma simetrizada. Discretizando a equação desta forma encontraremos

$$\frac{u(x, t + dt) - u(x, t)}{dt} = \frac{D(x, t)}{dx^2} [u(x + dx, t) + u(x - dx, t) - 2u(x, t)]. \quad (\text{A.24})$$

Utilizando uma notação compacta, ficamos com

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \frac{D(x, t) dt}{dx^2} (u_{i+1}^n + u_{i-1}^n - 2u_i^n). \quad (\text{A.25})$$

Definindo  $\alpha = \frac{D(x,t)dt}{dx^2}$  teremos

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \alpha (u_{i+1}^n + u_{i-1}^n - 2u_i^n). \quad (\text{A.26})$$

Segundo o critério de estabilidade de von Neumann, o método FTCS para a equação de difusão é estável para  $\alpha \leq 1/2$ . Vemos, que por esta imposição o método se torna extremamente lento se desejarmos precisões elevadas para nosso cálculo, pois no denominador de  $\alpha$  temos  $dx^2$  e à medida em que consideramos incrementos  $dx$  menores  $\alpha$  se torna maior, exigindo valores menores de  $dt$  para que a condição  $\alpha \leq 1/2$  seja obedecida.

## A.5 Método Operator Splitting

No *Operator Splitting Method* [66], supomos uma equação diferencial escrita como

$$\frac{\partial u(\vec{r}, t)}{\partial t} = \Pi u(\vec{r}, t), \quad (\text{A.27})$$

onde  $\Pi$  é um operador qualquer. O operador  $\Pi$  não precisa ser necessariamente linear, mas deve ser escrito em termos de  $m$  partes, que atuam de forma aditiva sobre o vetor  $u(\vec{r}, t)$

$$\Pi u(\vec{r}, t) = \Pi_1 u(\vec{r}, t) + \Pi_2 u(\vec{r}, t) + \dots + \Pi_m u(\vec{r}, t). \quad (\text{A.28})$$

Se conhecemos um esquema de discretização adequado para cada parte do operador  $\Pi$ , para evoluir o vetor  $u(\vec{r}, t)$  do tempo  $t$  para  $t + dt$ , podemos escrever cada termo desta evolução como

$$\begin{aligned} u(\vec{r}, t + dt) &= F_1(u(\vec{r}, t); dt) \\ u(\vec{r}, t + dt) &= F_2(u(\vec{r}, t); dt) \\ u(\vec{r}, t + dt) &= F_3(u(\vec{r}, t); dt) \\ &\vdots \\ u(\vec{r}, t + dt) &= F_m(u(\vec{r}, t); dt). \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

Neste conjunto de equações a função  $F_i$  indica a evolução temporal correspondente ao respectivo operador  $\Pi_i$ . Para cada operador  $\Pi_i$  temos um tipo de evolução temporal  $F_i$  que deve depender do vetor  $u(x, t)$  e do incremento  $dt$ . Como conhecemos a evolução por partes do vetor  $u(\vec{r}, t)$  para cada operador, o resultado da evolução temporal  $t \rightarrow t + dt$  considerando todos os operadores será dada por

$$\begin{aligned}
 u(\vec{r}, t + dt/m) &= F_1 [u(\vec{r}, t); dt] \\
 u(\vec{r}, t + 2dt/m) &= F_2 [u(\vec{r}, t + dt/m); dt] \\
 u(\vec{r}, t + 3dt/m) &= F_3 [u(\vec{r}, t + 2dt/m); dt] \\
 &\vdots \\
 u(\vec{r}, t + dt) &= F_m [u(\vec{r}, t + (m-1)dt/m); dt]
 \end{aligned}
 \tag{A.30}$$

No método tradicional de discretização de uma equação diferencial como a Eq. (A.27), primeiramente discretizamos seus termos e tentamos isolar os tempos futuros do lado esquerdo da equação e os tempos passados do lado direito. Em seguida, realizamos o teste de von Neumann para detectarmos se nosso esquema não é incondicionalmente instável. Uma vez que nosso método é estável nossos problemas ainda não acabaram, pois este esquema de discretização pode não funcionar bem devido à problemas de convergências para estados estacionários ou ser muito lento para que satisfaça a condição de estabilidade. Na filosofia do *Splitting Operator*, não precisamos encontrar uma forma discreta para uma equação diferencial considerando todos os seus termos. Precisamos apenas conhecer um método eficiente e estável para cada parte do operador  $\Pi$ . Uma vez feito isto, executamos a evolução temporal da equação nos tempos  $t \rightarrow t + dt$  considerando a parte  $m-2$  da solução fracionária do operador  $\Pi_{m-2}$  na fração temporal  $t + (m-3)dt/m \rightarrow t + (m-2)dt/m$ , como vetor que deve ser evoluído obedecendo ao operador  $\Pi_{m-1}$ , na fração temporal  $t + (m-2)dt/m \rightarrow t + (m-1)dt/m$ .

Este método se mostra extremamente poderoso para soluções de equações diferenciais não lineares, pois podemos encontrar o melhor método para cada parte do operador total e solucionar a equação por partes como se estivéssemos solucionando cada parte separadamente. Para a equação de Fisher-Kolmogorov generalizada, com

todos os termos estudados, teremos

$$\begin{aligned} \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = & D(x, t) \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} - v(x, t) \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} + \\ & + a(x, t)u(x, t) - b(x, t)u(x, t) \int_{\Omega} f(x - x')u(x', t)dx'. \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

O operador  $\Pi$  se torna

$$\Pi = D(x, t) \frac{\partial^2}{\partial x^2} - v(x, t) \frac{\partial}{\partial x} + a(x, t) - b(x, t) \int_{\Omega} f(x - x')u(x', t)dx'. \quad (\text{A.32})$$

Cada termo do operador  $\Pi$  é resolvido utilizando um esquema adequado de discretização. Para a parte difusiva usamos o FTCS, para a convecção o método *Upwind*, para o crescimento Runge-Kutta de quarta ordem e para a parte de interação não-local usamos o método de integração pela regra do trapézio. Com isso, podemos resolver uma equação íntegro-diferencial parcial que se mostra instável para vários métodos de discretizações, utilizando um procedimento de quebra do operador total envolvido, onde cada parte individualmente não é instável segundo uma análise de von Neumann.



# Apêndice B

## Análise de estabilidade de von Neumann

Neste apêndice, verificaremos a estabilidade de vários métodos numéricos pelo teste da estabilidade de Von Neumann, para a solução da equação de convecção. Na análise de Von Neumann, devemos imaginar que os coeficientes da equação diferencial parcial que estamos resolvendo numericamente, devem variar lentamente para serem considerados constantes no tempo e espaço. A solução independente ou os modos normais da equação diferencial são escritos na forma

$$u_j^n = \xi^n e^{ikjdx}. \quad (\text{B.1})$$

Nesta equação  $i$  é a unidade imaginária,  $j$  é o valor discreto de  $x$ ,  $k$  é o número de onda no espaço de Fourier e  $\xi$  é um número complexo que pode depender de  $k$ ,  $\xi = \xi(k)$ .

Na análise de von Neumann, os modos normais  $u_j^n$  não podem depender mais do que sucessivos valores inteiros do número complexo  $\xi$ . A formulação discretizada da equação será instável, terá um crescimento exponencial dos modos normais, se  $|u_j^n| > 1$  para qualquer  $k$ . O número  $\xi$  é também chamado de fator de amplificação para um dado número de onda  $k$ .

## B.1 Análise de Von Neumann para métodos aplicados à equação convectiva

A equação convectiva para um campo escalar  $u(x, t)$ , pode ser escrita como

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = -v \frac{\partial u(x, t)}{\partial x}. \quad (\text{B.2})$$

A solução desta equação, mostra como uma distribuição inicial  $u(x, t = 0)$  se propaga em um meio com velocidade  $v$ , mantendo sua forma. Esta questão apesar de muito simples de ser solucionada analiticamente, é de longe um problema numérico trivial, veja por exemplo a referência [64].

### B.1.1 O método Forward Time Central Space (FTCS)

No FTCS consideramos uma discretização temporal explícita e uma discretização espacial centrada

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{dt} = -v \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2dx} \quad (\text{B.3})$$

Esta equação pode ser escrita como

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{\alpha}{2} (u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) \quad (\text{B.4})$$

Nesta equação  $\alpha = \frac{vdt}{dx}$ . Substituindo a Eq. (B.1) na Eq. (B.4) teremos a seguinte expressão para o fator de amplificação  $\xi$

$$|\xi(k)|^2 = 1 + \alpha^2 \sin^2(kdx). \quad (\text{B.5})$$

Nesta equação  $|\xi(k)|^2$  é sempre maior que 1 e notamos que o método FTCS é sempre instável para a equação convectiva. Apesar de muito simples de ser implementado, este método se mostra ineficiente na solução do problema convectivo pois falha no teste de estabilidade de von Neumann.

### B.1.2 O método de Lax de discretização

No método de Lax, devemos considerar cada valor  $u_j^n$  como uma média das posições anterior e posterior  $u_j^n \rightarrow \frac{u_{j+1}^n + u_{j-1}^n}{2}$ . Com esse esquema de discretização a equação convectiva pode ser escrita como

$$u_j^{n+1} = \frac{u_{j+1}^n + u_{j-1}^n}{2} - \frac{\alpha}{2} (u_{j+1}^n - u_{j-1}^n). \quad (\text{B.6})$$

Aplicando o critério de estabilidade de Von Neumann na discretização de Lax teremos

$$|\xi(k)|^2 = 1 + (\alpha^2 - 1) \sin^2(kdx). \quad (\text{B.7})$$

Nesta expressão, notamos que  $|\xi(k)|^2 < 1$  para

$$\frac{vdt}{dx} < 1. \quad (\text{B.8})$$

A discretização no método de Lax somente será estável se a condição, Eq. (B.8), for obedecida. Mas esse método nos garante apenas a estabilidade do método. A rigor, as ondas que se propagam com altas velocidades perdem sua forma inicial [64]. Esse é o fantasma para todos os métodos que se propõem a solucionar o problema da convecção.

### B.1.3 O método de discretização Upwind

Neste esquema de discretização as diferenças na parte espacial são feitas, direcionando a derivada no sentido do fluxo. Neste caso as diferenças numéricas ficam como [66]

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{dt} = -v \begin{cases} \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{dx} & v > 0 \\ \frac{u_{j+1}^n - u_j^n}{dx} & v < 0. \end{cases} \quad (\text{B.9})$$

Considerando  $v > 0$  no método Upwind e substituindo a Eq. (B.1) na Eq. (B.9) encontraremos

$$|\xi(k)|^2 = 1 - 2\alpha(1 - \alpha)(1 - \cos(kdx)). \quad (\text{B.10})$$

---

Nesta equação, impondo que o módulo quadrado do fator de amplificação  $|\xi(k)|^2$  seja menor que 1 encontraremos a relação

$$\alpha = \frac{vdt}{dx} < 1. \quad (\text{B.11})$$

Esta condição impõe restrições ao método Upwind, para termos estabilidade. Na prática  $\alpha$  deve ser muito menor que a unidade para que também a forma inicial da onda  $u(x, t = 0)$  não tenha grandes deformações. Outros autores [65] recomendam o valor  $\alpha = 1$  para este método, para não termos perda de matéria ou deformações. Mas essa imposição implica em considerarmos a seguinte evolução temporal  $u_j^{n+1} = u_{j-1}^n$  para  $v > 0$ , que se torna uma grande trivialidade. Os autores [64], discutem este problema verificado nos métodos que tentam resolver uma equação convectiva e também sugerem um procedimento para ser trabalhado. Neste cenário vemos que o problema numérico de solução de equações convectivas, ou equações de ordem ímpar, são extremamente complexos e todos os métodos até então encontrados na literatura devem ser utilizados com muito cuidado, observando sua estabilidade e coerência com a realidade física.

# Apêndice C

## Normalização da função influência

A normalização da função influência  $f_\mu(x-x')$  no domínio  $L$  é feita considerando a condição de normalização desta função no domínio  $L$ .

Tomando

$$f_\mu(x-x') = \Lambda e^{\frac{(x-x')^2}{2\mu^2}}.$$

Impondo que  $f_\mu(x-x')$  seja normalizada no intervalo  $[0, L]$  teremos a seguinte integral

$$\Lambda \int_0^L e^{\frac{(x-x')^2}{2\mu^2}} dx' = 1. \quad (\text{C.1})$$

Introduzindo a mudança de variáveis  $z = \frac{x-x'}{\sqrt{2\mu}}$  encontramos

$$\frac{1}{\Lambda} = -\sqrt{2\mu} \int_{\frac{x-L}{\sqrt{2\mu}}}^{\frac{x-L}{\sqrt{2\mu}}} e^{-z^2} dz = \sqrt{2\mu} \left\{ \int_{\frac{x-L}{\sqrt{2\mu}}}^0 e^{-z^2} dz + \int_0^{\frac{x}{\sqrt{2\mu}}} e^{-z^2} dz \right\}. \quad (\text{C.2})$$

Utilizando a definição da função erro,

$$\text{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-z^2} dz, \quad (\text{C.3})$$

poderemos finalmente escrever a normalização da função influência como

$$\frac{1}{\Lambda} = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \mu \left\{ \text{erf} \left( \frac{x}{\sqrt{2\mu}} \right) - \text{erf} \left( \frac{x-L}{\sqrt{2\mu}} \right) \right\}. \quad (\text{C.4})$$

---

Para uma condição de contorno de fluxo zero devemos considerar  $x = 0$  e teremos

$$\frac{1}{\Lambda} = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \mu \operatorname{erf}\left(\frac{L}{\sqrt{2}\mu}\right). \quad (\text{C.5})$$

Com este procedimento, garantimos que a função influência de interação ou de crescimento é uma distribuição normalizada dentro do limite do sistema. Este mesmo método é adotado para gerar as distribuições iniciais de partículas  $u(x)$ , que por padronização, também consideramos normalizadas dentro do domínio  $L$ .

# Apêndice D

## Trabalhos publicados e submetidos para publicação

1. J. A. R. da Cunha, A. L. A. Penna, M. H. Vainstein, R. Morgado and F. A. Oliveira. Self-organization analysis for a nonlocal convective Fisher equation. Aceito para publicação no Physics Letters A.
2. J. A. R. da Cunha, A. L. A. Penna, R. Morgado and F. A. Oliveira. Pattern formation in a nonlocal convective Fisher equation. Aceito para publicação no Acta Physica Polonica B.
3. J. A. R. da Cunha, A. L. A. Penna, R. Morgado and F. A. Oliveira. Nonlocality and pattern formation for the Fisher-Kolmogorov equation. Aceito para publicação no Journal of Computational Interdisciplinary Sciences.
4. J. A. R. da Cunha, A. L. A. Penna and F. A. Oliveira. Generalized nonlocal Fisher-Kolmogorov equation. A ser submetido para publicação.
5. J. A. da Cunha and L. Cândido. Melting temperature of screened Wigner crystal on a helium films by molecular dynamics. *Phys. Rev. B*, **71**, 1-4, 2005.
6. J. A. R. da Cunha and L. Cândido. Two-Dimensional Wigner Crystal on Films: An indication of Quantum Melting. *Braz. J. Phys.*, **36**, 682-684, 2006.
7. João B. Diniz, André L.A. Penna, Jefferson A.R. da Cunha and Fernando A. Oliveira. Screening-hierarchy for quantum levels of the Thomas-Fermi atom.

Submetido para publicação no Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical.



# Referências Bibliográficas

- [1] M. Begon, C.R. Townsend, and J. L. Harper. *Ecology*. Blackwell Publishing, 2006.
- [2] J. D. Murray. *Mathematical Biology I: An Introduction*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2002.
- [3] N.F. Britton. *Essential Mathematical Biology*. Springer-Verlag, Berlin, 2002.
- [4] E. P. Odum. *Systems ecology. An introduction*. Jon Wiley and Sons, New York, 1983.
- [5] J. D. Murray. *Mathematical Biology II: Spatial Models and Biomedical Applications*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2003.
- [6] M. C. Cross and P. C. Hohenberg. Pattern formation outside of equilibrium. *Rev. Mod. Phys.*, **65**, 851 – 1562, 1993.
- [7] P. Berge and M. Dubois. Convective Velocity Field in the Rayleigh-Bénard Instability: Experimental Results. *Phys. Rev. Lett.*, **32**, 1041, 1974.
- [8] D. Binks and W. van de Water. Nonlinear Pattern Formation of Faraday Waves. *Phys. Rev. Lett.*, **78**, 4043, 1997.
- [9] M. G. Clerc, D. Escaff, and V. M. Kenkre. Patterns and localized structures in population dynamics. *Phys. Rev. E*, **72**, 056217, 2005.
- [10] B. Legawiec and A. L. Kawczynski. Influence of the Bénard Rolls on the Traveling Impulse in the Belousov-Zhabotinsky Reaction. *J. Phys. Chem. A*, **101**, 8063, 1997.
- [11] A. M. Zhabotinsky, M. Dolnik, and I. R. Epstein. Pattern formation arising from wave instability in a simple reaction-diffusion system. *J. Chem. Phys*, **103**, 10306, 1995.

- 
- [12] P. C. Fife. Pattern formation in reacting and diffusing systems. *J. Chem. Phys.*, **64**, 554, 1976.
- [13] T. Leppanen, M. Karttunen, R. A. Barrio, and K. Kaski. Turing Systems as Models of Complex Pattern Formation. *Braz. J. Phys.*, **34**, 368, 2004.
- [14] S. Genieys, V. Volpert, and P. Auger. Pattern and waves for a model in population dynamics with nonlocal consumption of resources. *Mathematical Modelling of Natural Phenomena.*, **1**, 65–82, 2006.
- [15] G. Edelman and J. Gally. Degeneracy and complexity in biological systems. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, **98**, 13763–13768, 2001.
- [16] M. A. Fuentes, M. N. Kuperman, and V. M. Kenkre. Nonlocal Interaction Effects on Pattern Formation in Population Dynamics. *Phys. Rev. Lett.*, **15**, 91, 2003.
- [17] B. D. Seti, M. de Fátima, B. Betencourt, N. T. Oro, R. M. L. Kripka, and V. J. L. Muhl. Estudo da dinâmica populacional usando os modelos de Malthus e Verhust: uma aplicação à população de Passo Fundo. *Teor. Evid. Econ.*, Passo Fundo, **7**, 137–143, 1999.
- [18] R. A. Fisher. The Wave of Advance of Advantageous Genes. *Ann. Eugen.*, **7**, 355, 1936.
- [19] M. E. Solomon. *Dinâmica de populações*. E.P.U Editora Pedagógica e Universitária Ltda., 1976.
- [20] C. Borzi, H. L. Frisch, R. Gianotti, and J. K. Percus. Inverse solution for some travelling-wave reaction-diffusion problems. *J. Phys. A*, **23**, 4823–4830, 1990.
- [21] A. Kolmogorov, I. Petrovskii, and N. Piskunov. *Moscow Unio. Bull. Math.*, **1**, 1–25, 1937.
- [22] W. van Saarloos. Front propagation into unstable states: Marginal stability as a dynamical mechanism for velocity selection. *Phys. Rev. A*, **37**, 211–229, 1988.
- [23] J. Canosa. Diffusion in Nonlinear Multiplicative Media. *J. Math. Phys.*, **10**, 1862, 1969.
- [24] G. Abramson, A. R. Bishop, and V. M. Kenkre. Effects of transport memory and nonlinear damping in a generalized Fisher’s equation. *Phys. Rev. E*, **64**, 066615, 2001.

- 
- [25] S. Petrovskii, A. Morozov, and Bai-Lian Li. Regimes of biological invasion in a predator-prey system with the Allee effect. *Math. Biol.*, **67**, 637–661, 2005.
- [26] A. Morozov, S. Petrovskii, and Bai-Lian Li. Spatiotemporal complexity of patchy invasion in a predator-prey system with the Allee effect. *J. Theor. Biol.*, **238**, 18–35, 2006.
- [27] K. A. Dahmen, D. R. Nelson, and N. M. Shnerb. Life and death near a windy oasis. *Journal of Mathematical Biology*, **41**, 1–23, 2000.
- [28] T. Leppanen, M. Kartunen, K. Kaski, R. Barrio, and L. Zhang. A new dimension to Turing patterns. *Phys. D*, **168**, 35 – 44, 2002.
- [29] R. Hoyle. *Pattern Formation an Introduction to Methods*. Cambridge University Press New York, 2006.
- [30] E. Ben-Jacob, G. Deutscher, P. Garik, N. D. Goldenfeld, and Y. Lareah. Formation of a Dense Branching Morphology in Interfacial Growth. *Phys. Rev. Lett.*, **57**, 1903–1906, 1986.
- [31] E. Ben-Jacob, O. Shochet, A. Tenebaum, I. Cohen, A. Czirok, and T. Vicsek. Generic modelling of cooperative growth patterns in bacterial colonies. *Nature*, **368**, 46–49, 1994.
- [32] K. Huang. *Statistical Mechanics*. John Wiley e Sons, 1963.
- [33] J. A. da Cunha and L. Cândido. Melting temperature of screened Wigner crystal on helium films by molecular dynamics. *Phys. Rev. B*, **71**, 1–4, 2005.
- [34] J. A. R. da Cunha and L. Cândido. Two-Dimensional Wigner Crystal on Films: An indication of Quatum Melting. *Braz. J. Phys.*, **36**, 682–684, 2006.
- [35] H. Z. Cummins, L. Fournune, and M. Rabaud. Successive bifurcations in directional viscous fingering. *Phys. Rev. E*, **47**, 1727, 1993.
- [36] R. L. Santos, U. Agero, and J. M. A. Figueiredo. Pattern dynamics in a perturbed printers instability experiment. *Phys. Rev. E*, **77**, 66310, 2008.
- [37] V. M. Kenkre. Results from variant of the Fisher equation in the study of epidemics and bacteria. *Phys. A*, **242**, 342, 2004.
- [38] V. M. Kenkre and M. N. Kuperman. Applicability of the Fisher equation to bacterial population dynamics. *Phys. Rev. E*, **67**, 051921, 2003.

- 
- [39] K. K. Manne, A. J. Hurd, and V. M. Kenkre. Nonlinear waves in reaction-diffusion systems: The effect of transport memory. *Phys. Rev. E*, **61**, 4177, 2000.
- [40] M. A. Fuentes M. N. Kuperman and V. M. Kenkre. Analytical Considerations in the Study of Spatial Patterns Arising from Nonlocal Interaction Effects. *J. Phys. Chem. B*, **108**, 10505, 2004.
- [41] S.A. Gourley. Travelling front solutions of a nonlocal Fisher equation. *J. Math. Biol.*, **41**, 272–284, 2000.
- [42] V. K. Vanag, A. M. Zhabotinsky, and Irving R. Epstein. Oscillatory Clusters in the Periodically Illuminated, Spatially Extended Belousov-Zhabotinsky Reaction. *Phys. Rev. Lett.*, **86**, 552–555, 2000.
- [43] A. L. Kawczynski and B. Legawiec. Two-dimensional model of a reaction-diffusion system as a typewriter. *Phys. Rev. E*, **64**, 056202, 2001.
- [44] A. M. Delprato, A. Samadani, A. Kudrolli, and L. S. Tsimring. Swarming Ring Patterns in Bacterial Colonies Exposed to Ultraviolet Radiation. *Phys. Rev. Lett.*, **87**, 158102, 2001.
- [45] K. Aoki. Gene-culture waves of advance. *J. Math. Biol.*, **25**, 453, 1987.
- [46] H. R. Petty, R. G. Worth, and A. L. Kindzelskii. Imaging Sustained Dissipative Patterns in the Metabolism of Individual Living Cells. *Phys. Rev. Lett.*, **84**, 2754, 2000.
- [47] J. Canosa. On a nonlinear diffusion equation describing population growth. *IBM J. Res. Develop.*, **17**, 307–313, 1973.
- [48] C. Reichhardt, C. J. Olson, N. Gronbeck-Jensen, and F. Nori. Moving Wigner glasses and smectics: dynamics of disordered Wigner crystals. *Phys. Rev. Lett.*, **86**, 4354–4357, 2001.
- [49] A. L. Lin, B. A. Mann, G. Torres-Oviedo, B. Lincoln and J. Käs, and H. L. Swinney. Localization and Extinction of Bacterial Populations under Inhomogeneous Growth Conditions. *Biophysical Journal*, **87**, 75–80, 2004.
- [50] N. M. Shnerb. Extinction of a bacterial colony under forced convection in pie geometry. *Phys. Rev. E*, **63**, 011906, 2000.

- 
- [51] L. Giuggioli and V.M. Kenkre. Analytic solutions of a nonlinear convective equation in population dynamics. *Phys. D*, **183**, 245, 2003.
- [52] R. Morgado, F. A. Oliveira, G. G. Batrouni, and A. Hansen. Relation between anomalous and normal diffusion in systems with memory. *Phys. Rev. Lett*, **89**, 100601, 2001.
- [53] M. H. Vainstein e F. A. Oliveira L. C. Lapas, I. V. L. Costa. Entropy, non-ergodicity and non-Gaussian behaviour in ballistic transport. *Europhys. Lett*, **77**, 37004, 2007.
- [54] I. V. L. Costa, R. Morgado, M. V. B. T. Lima, and F. A. Oliveira. The Fluctuation-Dissipation Theorem fails for fast superdiffusion. *Europhys. Lett*, **63**, 173, 2003.
- [55] M. A. Maroja, F. A. Oliveira, M. Ciesla, and L. Longa. Polymer fragmentation in extensional flow. *Phys. Rev. E*, **63**, 061801, 2001.
- [56] A. M. Maroja. Fragmentação de Polímeros em um Escoamento Extensional. Tese de Doutorado, Instituto de Física, Universidade de Brasília, 2001.
- [57] E. D. T. Atkins and M. A. Taylor. Elongational flow studies on DNA in aqueous solution and stress-induced scission of the double helix. *Biopolymers*, **32**, 911–923, 1992.
- [58] J. A. Odell and M. A. Taylor. Dynamics and thermomechanical stability of DNA in solution. *Biopolymers*, **34**, 1483, 1994.
- [59] M. S. Abual-Rub. Long range diffusion reaction model on population dynamics. *Doc. Math.*, **3**, 333–340, 1998.
- [60] S. A. Gourley and N. F. Britton. A predator-prey reaction-diffusion system with nonlocal effects. *J. Math. Biol.*, **34**, 297–333, 1996.
- [61] J. Furter and M. Grinfeld. Local vs. non-local interactions in population dynamics. *J. Math. Biol.*, **27**, 65–80, 1989.
- [62] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhuk. *Table of Integrals, Series and Products*. Academic Press New York, 1996.
- [63] N. Perry. Experimental validation of a critical domain size in reaction-diffusion systems with *Escherichia coli* populations. *J. R. Soc. Interface*, **2**, 379–387, 2005.

- [64] J. P. Boris and D. L. Book. Flux-Corrected Transport I. SHASTA, A Fluid Transport Algorithm That Works. *J. Comput. Phys.*, **135**, 172, 1997.
- [65] C. Scherer. *Métodos Computacionais da Física*. Editora Livraria da Física, 2005.
- [66] H.P. William, A.S. Teukolsky, T.V. Vetterling, and P.B. Flannery. *Numerical Recipes in C*. Cambridge University Press, New York, 1992.