BIOMATEMÁTICA ***14*** *(2004), 131-159* *ISSN 1679-365X*
Uma Publicação do Grupo de Biomatemática IMECC – UNICAMP

A presença evolutiva de um material impactante e seu efeito no transiente populacional de espécies interativas: modelagem e aproximação

R. C. Sossae[1],
UNISAL, 13087-290, Campinas, SP.

J. F. C. A. Meyer[2],
DMA, IMECC – UNICAMP, 13083-970, Campinas, SP.

Resumo. Neste trabalho, partindo de um efetivo problema de impacto ambiental numa região de pantanal e de um levantamento na literatura, justificamos a modelagem de uma interação entre quatro espécies-chave, incluindo as ações intra-específicas. Este quadro recebe a perturbação da presença de um produto impactante, nascido de ações antrópicas na região ou próximas, e o sistema evolutivo de equações diferenciais parciais não-linear usado para modelar aspectos transientes dos níveis populacionais é apresentado em suas formulações clássica e variacional. Um esquema algorítmico é apresentado, com o qual se obtêm aproximações locais de terceira ordem nas variáveis espaciais e de segunda ordem na aproximação temporal. A aproximação espacial feita com o Método dos Elementos Finitos, usando os de segunda ordem em triângulos com os quais se discretiza o domínio. No tempo, usa-se Crank-Nicolson e, para aproximar a solução do sistema não-linear resultante, recorre-se a uma sucessiva linearização em cada passo no tempo. Resultados numéricos são apresentados de modo a permitir discussão e análise dos gráficos obtidos para as soluções aproximadas.

Palavras-chave: *Equações diferenciais parciais não-lineares; Impacto ambiental; Método de elementos finitos.*

[1]sossae@unisal.com.br
[2]joni@ime.unicamp.br

1 Introdução

O objetivo deste trabalho é estudar a situação de impacto ambiental sobre espécies afetadas pela presença de poluentes numa região pantanosa da Argentina chamada Esteros de Iberá.

Os Esteros de Iberá[1] estão localizados na província de Corrientes e se compõem de uma vasta bacia hidrográfica com lagoas e ilhas flutuantes de vegetação agrupada. A área total desta bacia é de cerca de 10000 km^2 com uma profundidade média, no centro das lagoas, de menos de 5 metros. *Luna, Galarza, Fernádez* e *Iberá* são as maiores lagoas do sistema e a alimentação hídrica se dá basicamente por aportes pluviais[2]. São regiões de baixa circulação, totalmente rodeadas por pântanos (com exceção da Lagoa Iberá que tem um pequeno trecho numa região arenosa) e por retardarem o escoamenteo superficial, armazenando água e funcionando como evapotranspirante (Bernardes, 1998). Os principais canais de drenagem do sistema são o rio *Corrientes* a sudoeste, e o rio *Miriñay*, que nasce na lagoa de Iberá, a sudeste.

Há relativamente poucos estudos efetuados na região, dadas as dificuldades de acesso e da existência de uma infra-estrutura bastante limitada para visitantes. A pouca informação disponível revela uma rica biodiversidade e a presença de várias espécies da flora e fauna. No entanto, isto não tem sido utilizado no estabelecimento de políticas de gerenciamento deste rico recurso natural.

Ameaças à estabilidade e à biodiversidade da região do Iberá vêm principalmente de recentes expansões na agroindústria local e da demanda por áreas de pastagens, com a introdução do uso de agroquímicos e de práticas de fogo induzido. Além destas, recentes estratégias de desenvolvimento de vias de escoamento de produtos do Mercosul chegaram a projetar a passagem pelos Esteros da principal hidrovia Paraguay-Paraná, um projeto com fortes possibilidades de desestabilizar o ecossistema existente. A este quadro, acrescentem-se as fontes de poluentes atmosféricos de pólos industriais do Sul do Brasil. Em suma – e de modo genérico – os Esteros correm o risco de sofrer muitos tipos de impactos.

[1] O nome Iberá vem do guarani para "Água que brilha", nome que revela a natureza histórica da reverência da população local para com as águas do Iberá.

[2] Não obstante, estudos recentes indicam forte correlação entre o nível da represa de Yaciretá (a montante na bacia do Paraná) e nas lagoas e esteros (ver European Union INCO Project, 2003).

A importância internacional da proteção dessa região (como do Pantanal matogrossense, também ameaçado pela mesma hidrovia...) já foi estabelecido pelo Plano Intergovernamental de Mudanças Climáticas Globais. A enorme quantidade de água fresca não contaminada presente no sistema de lagos do Iberá continuará tendo uma grande importância internacional. A chave do desenvolvimento sustentável dessa região e de outras regiões é uma precisa avaliação de seus recursos naturais e o estabelecimento de estratégias adequadas e a longo prazo para seu gerenciamento.

No estabelecimento deste tipo de política, avaliações qualitativa e quantativamente precisas se fazem necessárias no estudo de impacto de atividades na região e nas proximidades. Também o estudo de populações e das interações entre espécies e os efeitos dos mencionados poluentes devem ser considerados, reunindo instrumental matemático de avaliação e de simulação para a ação conjunta com técnicas de outras áreas científicas.

Muitas são as necessidades do uso de instrumental matemático no estudo dos problemas de impacto nesta região com seus múltiplos aspectos. Bernardes (1998) fez um estudo introdutório preparando um *software* para a simulação do comportamento evolutivo de poluentes aquáticos de superfície, usando-o no caso da lagoa de Iberá, uma das diversas lagoas do ecossistema estudado.

Outro dos aspectos que exigiu a atenção dos técnicos da equipe do projeto citado é o efeito de poluentes cuja presença varia espacial e temporalmemte sobre espécies locais. Nestes casos o estudo de uma única espécie pode não responder a questões de efeitos sistêmicos, devendo os modelos incluir a ação não apenas intra-específica mas também inter-específica.

Diniz (2003) também abordou o estudo de poluentes em sistemas ar-água visando criar e justificar modelagem e instrumental algorítmico que se adequam a avaliação da presença evolutiva de contaminantes no meio. Seus estudos foram orientados levando em conta a mesma região: os Esteros de Iberá.

Pregnolatto (2002) estudou a modelagem e possibilidades de simulação computacional de uma determinada espécie carismática afligida por uma epizootia local. Nesse estudo surgem não linearidades em que se observam algumas semelhanças com aquelas aqui consideradas. A diferença básica, no entanto, refere-se à adoção de espécies identificadas pela sua etologia relativamente à sua cadeia trófica bem como os efeitos tóxicos induzidos pela presença evolutiva e advectiva de contaminantes.

Para essa situação, buscamos formular um modelo matemático que descreva genericamente a interação dos dois predadores $P_3(x, y, t)$ e $P_4(x, y, t)$ (jacarés e pássaros) competindo entre si por duas presas $P_1(x, y, t)$ e $P_2(x, y, t)$ (peixes e rãs) também competindo entre si ainda sob o efeito da presença evolutiva do efeito de um agente tóxico e, ao mesmo tempo adotando dinâmicas populacionais de tipo Verhulst.

Construiremos o modelo necessário incluindo as respectivas dispersões populacionais bem como as dinânicas de cada espécie. Para isto, os instrumentos tão clássicos quanto atuais são adotados: a equação de Dispersão-Migração e a dinâmica de Verhulst. Além disto, ocorrem, ainda de modo clássico (Lotka-Volterra) as interações e, por último, o efeito evolutivo e espacialmente não-homogêneo da hostilidade do meio expresso pelo parâmetro: $\sigma = \sigma(x, y, t)$.

Nesta modelagem a referida hostilidade é obtida em passos sucessivos:

1. Resolução numérica da equação de Stokes, identificando um mapa local de circulação de água (figura 1), obtido através do programa implementado por Cantão e D'Afonseca (1998).

2. Resolução numérica da equação de difusão-advecção, obtendo o parâmetro $\sigma(x, y, t)$ – usando o campo de velocidades obtidos no ítem 1. – criando um cenário evolutivo em que se mapeia no tempo e no espaço a passagem de contaminantes pelo meio.

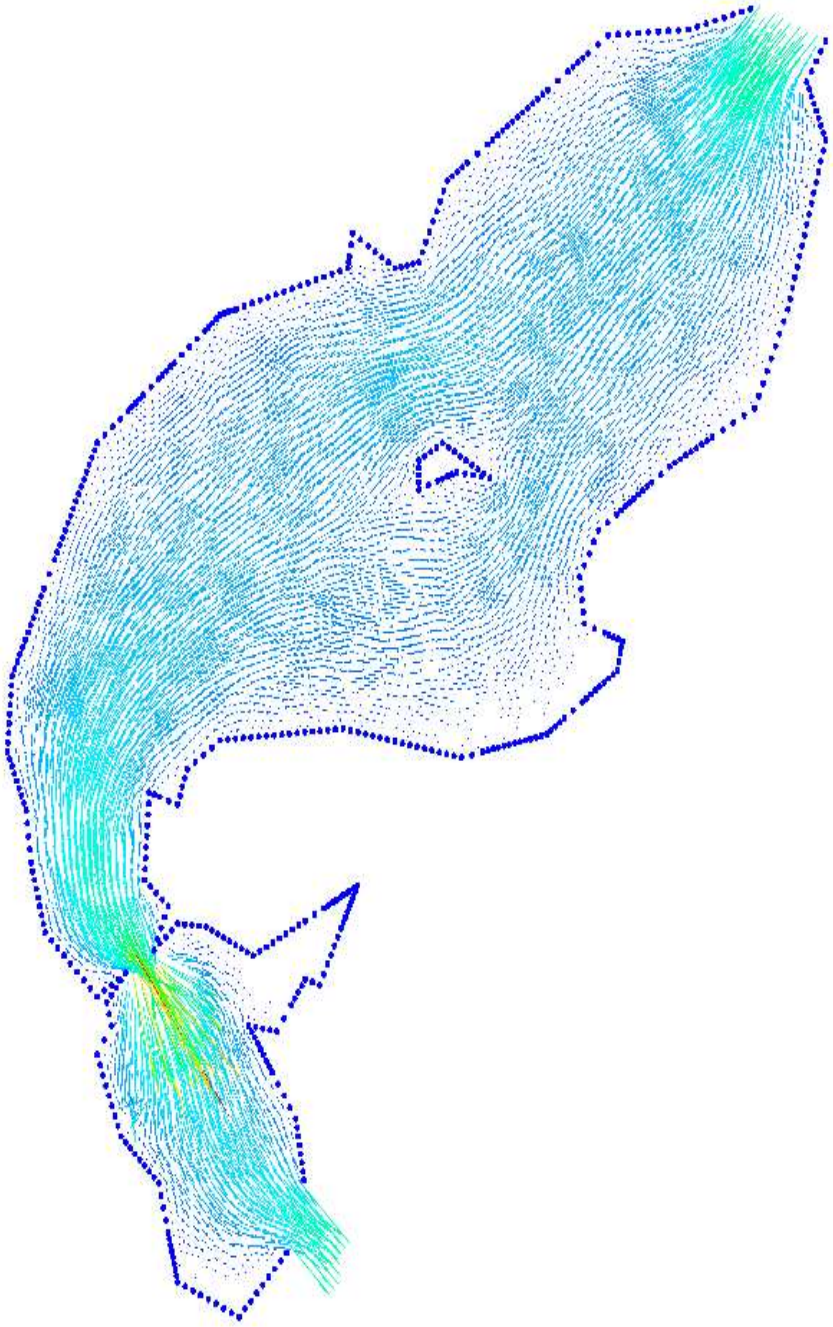

Figura 1: Mapa de circulação de água.

Em seguida, e usando os resultados explicitados acima, obtemos o sistema não linear dado por

•Equação de Stokes: $-div(\nabla\vartheta)+\nabla\,\mathcal{P}=g,$ supondo $div\vartheta=0$ e obtendo assim $\vartheta,$ o campo de velocidades para $\mathcal{P},$ a pressão e g uma perturbação que pode ser nula.
(ver Kardestuncer e Norrie, 1987; Peyret e Taylor, 1985)

•Equação de Difusão-Advecção: $\dfrac{\partial\sigma}{\partial t}-\alpha\Delta\sigma+\mathrm{div}(\vartheta\sigma)+s\sigma=0$ com $\sigma(x,y,0)=\sigma_0(x,y)$,

e com $\sigma\big|_{\Gamma_0}=0$ e $\left.\dfrac{\partial\sigma}{\partial\eta}\right|_{\Gamma_1}=0$, obtendo $\sigma_i^{(n)}\cong\sigma(x_i,y_i,t_n)$.

$$\bullet\frac{\partial P_1}{\partial t}-\mathrm{div}(\alpha_1\nabla P_1)+\mathrm{div}(\mathbb{V}P_1)+\rho_1\sigma_1P_1=\lambda_1\left(1-\frac{P_1}{K_1}\right)P_1-c_1P_1P_3-d_1P_1P_4-e_1P_1P_2$$

$$\frac{\partial P_2}{\partial t}-\mathrm{div}(\alpha_2\nabla P_2)+\mathrm{div}(\mathbb{W}P_2)+\rho_2\sigma_2P_2=\lambda_2\left(1-\frac{P_2}{K_2}\right)P_2-c_2P_2P_3-d_2P_2P_4-e_2P_1P_2$$

$$\frac{\partial P_3}{\partial t}-\mathrm{div}(\alpha_3\nabla P_3)+\mathrm{div}(\mathbb{U}P_3)+\rho_3\sigma_3P_3=\lambda_3\left(1-\frac{P_3}{K_3}\right)P_3+c_3P_1P_3+d_3P_2P_3-e_3P_3P_4$$

$$\frac{\partial P_4}{\partial t}-\mathrm{div}(\alpha_4\nabla P_4)+\mathrm{div}(\mathbb{T}P_4)+\rho_4\sigma_4P_4=\lambda_4\left(1-\frac{P_4}{K_4}\right)P_4+c_4P_1P_4+d_4P_2P_4-e_4P_3P_4$$

onde, para I = 1 a 4,
$P_I=P_I(x,y,t)$ são as populações ou as densidades populacionais,
$\alpha_I=\alpha_I(x,y,t)$ são os coeficientes de efetiva dispersão populacional,
$\mathbb{V}$, $\mathbb{W}$, $\mathbb{U}$ e $\mathbb{T}$ são os vetores velocidade de migração populacional ou advecção,
ρ_I são parâmetros indicativos do decaimento populacional de P_I devido à mortalidade causada pela quantidade σ do poluente,
$\sigma_I=\sigma_I(x,y,t)$ são as taxas de decaimento da espécie P_I no meio Ω durante o período [0,T],
λ_I são as taxas de crescimento intrínseco para as populações P_I,
K_I são as capacidades suporte das populações P_I, e
c_I, d_I e e_I são as taxas da relação intertespecífica.

Reescrevendo a parte final do sistema geral dado acima para $a_I = \lambda_I$ e $b_I = \dfrac{\lambda_I}{K_I}$ temos:

$$\frac{\partial P_1}{\partial t} - \operatorname{div}(\alpha_1 \nabla P_1) + \operatorname{div}(\mathbb{V} P_1) + \rho_1 \sigma_1 P_1 = a_1 P_1 - b_1 P_1^2 - c_1 P_1 P_3 - d_1 P_1 P_4 - e_1 P_1 P_2$$

$$\frac{\partial P_2}{\partial t} - \operatorname{div}(\alpha_2 \nabla P_2) + \operatorname{div}(\mathbb{W} P_2) + \rho_2 \sigma_2 P_2 = a_2 P_2 - b_2 P_2^2 - c_2 P_2 P_3 - d_2 P_2 P_4 - e_2 P_1 P_2$$

$$\frac{\partial P_3}{\partial t} - \operatorname{div}(\alpha_3 \nabla P_3) + \operatorname{div}(\mathbb{U} P_3) + \rho_3 \sigma_3 P_3 = a_3 P_3 - b_3 P_3^2 + c_3 P_1 P_3 + d_3 P_2 P_3 - e_3 P_3 P_4$$

$$\frac{\partial P_4}{\partial t} - \operatorname{div}(\alpha_4 \nabla P_4) + \operatorname{div}(\mathbb{T} P_4) + \rho_4 \sigma_4 P_4 = a_4 P_4 - b_4 P_4^2 + c_4 P_1 P_4 + d_4 P_2 P_4 - e_4 P_3 P_4 \tag{1}$$

Do ponto de vista genérico, a condição inicial é dada na forma

$$P_I(x, y, 0) = P_{I_0}(x, y), \qquad \text{e}$$

enquanto que as condições de contorno são de tipo misto, consideradas aqui homogêneas:

$$P_I\big|_{\Gamma_{0_I}} = 0 \qquad \text{e} \qquad -\alpha \frac{\partial P_I}{\partial \eta}\bigg|_{\Gamma_{1_I}} = 0,$$

com $\Gamma_{0_I} \cup \Gamma_{1_I} = \partial\Omega$ para $I = 1$ a 4, evidenciando partes da fronteira do domínio em que não há passagem (ver Pregnolatto, 2002).

2 Formulação Variacional das Dinâmicas Populacionais

O modelo identificado acima será reproduzido mencionando apenas o subsistema que inclui as quatro equações das ações intra e interespecíficas: as das quatro dinâmicas populacionais, enfim a equação de Stokes e a de Difusão-Advecção receberam tratamento em outros trabalhos.

Para se acompanhar a formulação variacional dessas equações, sua discretização, suas expressões algorítmicas e simulações numéricas, pode-se, entre outros, consultar trabalhos de outros membros do grupo de Ecologia Matemática do DMA/IMECC: Cantão

(1998); Bernardes (1998); Diniz (2003) além do software de Cantão e D'Afonseca (1998) e da tese de Oliveira (2003).

É conveniente se adotar a formulação fraca ou variacional em vez da clássica.

Aplicando então o Teorema de Green, considerando α_I, as dispersões e $\mathbb{V}, \mathbb{W}, \mathbb{U}$ e $\mathbb{T}$ os campos vetoriais de migração como independentes localmente do tempo, da variável espacial e das próprias populações, e usando as condições de contorno, o problema dado por $P_I = P_I(x, y, t),\ I = 1$ a 4 no espaço $\mathcal{V} = \{P \in H^1((0,T), H^1(\Omega)) : tr(P) = 0 \text{ em } \Gamma_0\}$ irá se tornar:

$$\int_\Omega \frac{\partial P_1}{\partial t}\, v\, ds + \alpha_1 \int_\Omega \nabla P_1 \cdot \nabla v\, ds + V_1 \int_\Omega \frac{\partial P_1}{\partial x}\, v\, ds + V_2 \int_\Omega \frac{\partial P_1}{\partial y}\, v\, ds +$$

$$+ \int_\Omega \rho_1 \sigma_1 P_1\, v\, ds - a_1 \int_\Omega P_1\, v\, ds + b1 \int_\Omega P_1^2\, v\, ds + c_1 \int_\Omega P_1 P_3\, v\, ds +$$

$$+ d_1 \int_\Omega P_1 P_4\, v\, ds + e_1 \int_\Omega P_1 P_2\, v\, ds = 0,$$

$$\int_\Omega \frac{\partial P_2}{\partial t}\, v\, ds + \alpha_2 \int_\Omega \nabla P_2 \cdot \nabla v\, ds + W_1 \int_\Omega \frac{\partial P_2}{\partial x}\, v\, ds + W_2 \int_\Omega \frac{\partial P_2}{\partial y}\, v\, ds +$$

$$+ \int_\Omega \rho_2 \sigma_2 P_2\, v\, ds - a_2 \int_\Omega P_2\, v\, ds + b_2 \int_\Omega P_2^2\, v\, ds + c_2 \int_\Omega P_2 P_3\, v\, ds +$$

$$+ d_2 \int_\Omega P_2 P_4\, v\, ds + e_2 \int_\Omega P_1 P_2\, v\, ds = 0,$$

$$
\begin{aligned}
&\int_\Omega \frac{\partial P_3}{\partial t}\, v\, ds + \alpha_3 \int_\Omega \nabla P_3 \cdot \nabla v\, ds + U_1 \int_\Omega \frac{\partial P_3}{\partial x}\, v\, ds + U_2 \int_\Omega \frac{\partial P_3}{\partial y}\, v\, ds + \\
&+ \int_\Omega \rho_3 \sigma_3 P_3\, v\, ds - a_3 \int_\Omega P_3\, v\, ds + b_3 \int_\Omega P_3^2\, v\, ds - c_3 \int_\Omega P_1 P_3\, v\, ds - \\
&- d_3 \int_\Omega P_2 P_3\, v\, ds + e_3 \int_\Omega P_3 P_4\, v\, ds = 0, \text{ e} \\
&\int_\Omega \frac{\partial P_4}{\partial t}\, v\, ds + \alpha_4 \int_\Omega \nabla P_4 \cdot \nabla v\, ds + T_1 \int_\Omega \frac{\partial P_4}{\partial x}\, v\, ds + T_2 \int_\Omega \frac{\partial P_4}{\partial y}\, v\, ds + \\
&+ \int_\Omega \rho_4 \sigma_4 P_4\, v\, ds - a_4 \int_\Omega P_4\, v\, ds + b_4 \int_\Omega P_3^2\, v\, ds - c_4 \int_\Omega P_1 P_4\, v\, ds - \\
&- d_4 \int_\Omega P_2 P_4\, v\, ds + e_4 \int_\Omega P_3 P_4\, v\, ds = 0 \qquad\qquad \forall v \in V.
\end{aligned}
\tag{2}
$$

A principal característica de originalidade da expressão (2) reside na combinação de modelos citada anteriormente, usando a aproximação de Stokes para obter um mapa de circulação aquático que é usado como dado de entrada na produção de mapas evolutivos da presença de contaminantes do meio, sendo esta presença, ainda, usada como dado de entrada no passo seguinte, representando a hostilidade tóxica do meio atingindo as populações que interagem dentro e fora das respectivas espécies. Esta combinação encadeada de modelos e aproximações não figura na bibliografia.

3 O Método de Galerkin

A opção para a construção de uma solução aproximada do ponto de vista do espaço é, então, a do Método de Galerkin visando o uso do Método de Elementos Finitos (ver Johnson, 1987). Portanto, usando o processo de separação de variáveis, iremos, em vez de procurar as soluções $P_1(x, y, t), P_2(x, y, t), P_3(x, y, t)$ e $P_4(x, y, t)$ do problema (2),

construir aproximações do tipo:

$$P_{I_h} = \sum_{j=1}^{N} P_{I_j}(t)\ \varphi_j(x,y) = \sum_{j=1}^{N} P_{I_j}(t)\ \varphi_j \qquad \text{para I = 1 a 4} \tag{3}$$

e para as quais temos

$$\frac{\partial P_{I_h}}{\partial t} = \sum_{j=1}^{N} \frac{\mathrm{d}P_{I_j}}{\mathrm{d}t}\ \varphi_j. \tag{4}$$

Esta aproximação irá refletir, entre outras características, na mudança dos espaços tanto das soluções procuradas, quanto das funções-teste inerentes ao Método de Elementos Finitos. Assim, em vez de termos

$$P_I \in \mathcal{V} = \{P \in H^1((0,T), H^1(\Omega)) : tr(P) = 0 \ \text{ em } \ \Gamma_0\}$$

iremos teoricamente construir soluções aproximadas neste nível em subespaços V_h de dimensão finita N gerados pela base $\beta = \{\varphi_1, \varphi_2, \ldots, \varphi_N\}$.

Reescrevendo portanto o sistema (2) para V_h o subespaço de base β e rearranjando convenientemente os termos não lineares, obtemos:

$$\begin{aligned}
&\sum_{j=1}^{N} \frac{dP_{1_j}(t)}{dt}\ (\varphi_j|\varphi_i) + \alpha_1 \sum_{j=1}^{N} P_{1_j}(t)\ (\nabla\varphi_j \| \nabla\varphi_i) + \sum_{j=1}^{N} P_{1_j}(t)\ \left(V_1 \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} | \varphi_i\right) + \\
//\quad & \\
&+ \sum_{j=1}^{N} P_{1_j}(t)\ \left(V_2 \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} | \varphi_i\right) + \sum_{j=1}^{N} P_{1_j}(t)\ (\rho_1 \sigma_1 \varphi_j | \varphi_i) - a_1 \sum_{j=1}^{N} P_{1_j}(t)\ (\varphi_j|\varphi_i) + \\
&+ b_1 \sum_{j=1}^{N} P_{1_j}(t) \left(\sum_{k=1}^{N} P_{1_k}(t)(\varphi_k\varphi_j|\varphi_i)\right) + c_1 \sum_{j=1}^{N} P_{1_j}(t) \left(\sum_{k=1}^{N} P_{3_k}(t)(\varphi_k\varphi_j|\varphi_i)\right) + \\
&+ d_1 \sum_{j=1}^{N} P_{1_j}(t) \left(\sum_{k=1}^{N} P_{4_k}(t)(\varphi_k\varphi_j|\varphi_i)\right) + e_1 \sum_{j=1}^{N} P_{1_j}(t) \left(\sum_{k=1}^{N} P_{2_k}(t)(\varphi_k\varphi_j|\varphi_i)\right) = 0,
\end{aligned} \tag{5}$$

para $\forall \varphi_i \in \beta$, com análoga formulação para P_1, P_2, P_3 e P_4, levando em consideração cada caso específico (P_3 e P_4 são predadores competindo por P_1 e P_2, presas também

competidoras).

As equações indicadas em (5) correspondem a um sistema não linear de Equações Diferenciais Ordinárias na variável t com a condição inicial (já discretizada) dada implicitamente por

$$\sum_{j=1}^{N} P_{I_j}(0)\,(\varphi_j|\varphi_i) = (P_{I_0}|\varphi_i)\,, \quad \forall \varphi_i \in \beta \text{ e } I = 1 \text{ a } 4. \tag{6}$$

A transformação do sistema não linear de Equações Diferenciais Parciais (2) para o sistema não linear de Equações Diferenciais Ordinárias dado em (5), embora produza sensível simplificação, continua a apresentar dificuldades analíticas de modo a convencer o analista a continuar a recorrer a discretizações apropriadas.

4 Discretização espacial: Método de Elementos Finitos

Diferentemente de situações clássicas em que a triangularização do domínio – através da construção de uma malha conveniente – é regular (um retângulo), e, portanto, domínio discretizado Ω_h e domínio original Ω coincidiam, o domínio a ser considerado é retirado, por assim dizer, do mapa. Trata-se da Lagoa de Iberá. A regularidade do retângulo agora inexiste e Ω_h não coincide com Ω. Vemos, de modo bastante intuitivo, porém, que sucessivos refinamentos da malha levam Ω_h a convergir (de algum modo) para o domínio original Ω. Nesse sentido, podemos ilustrativamente comparar as figuras 2 e 3.

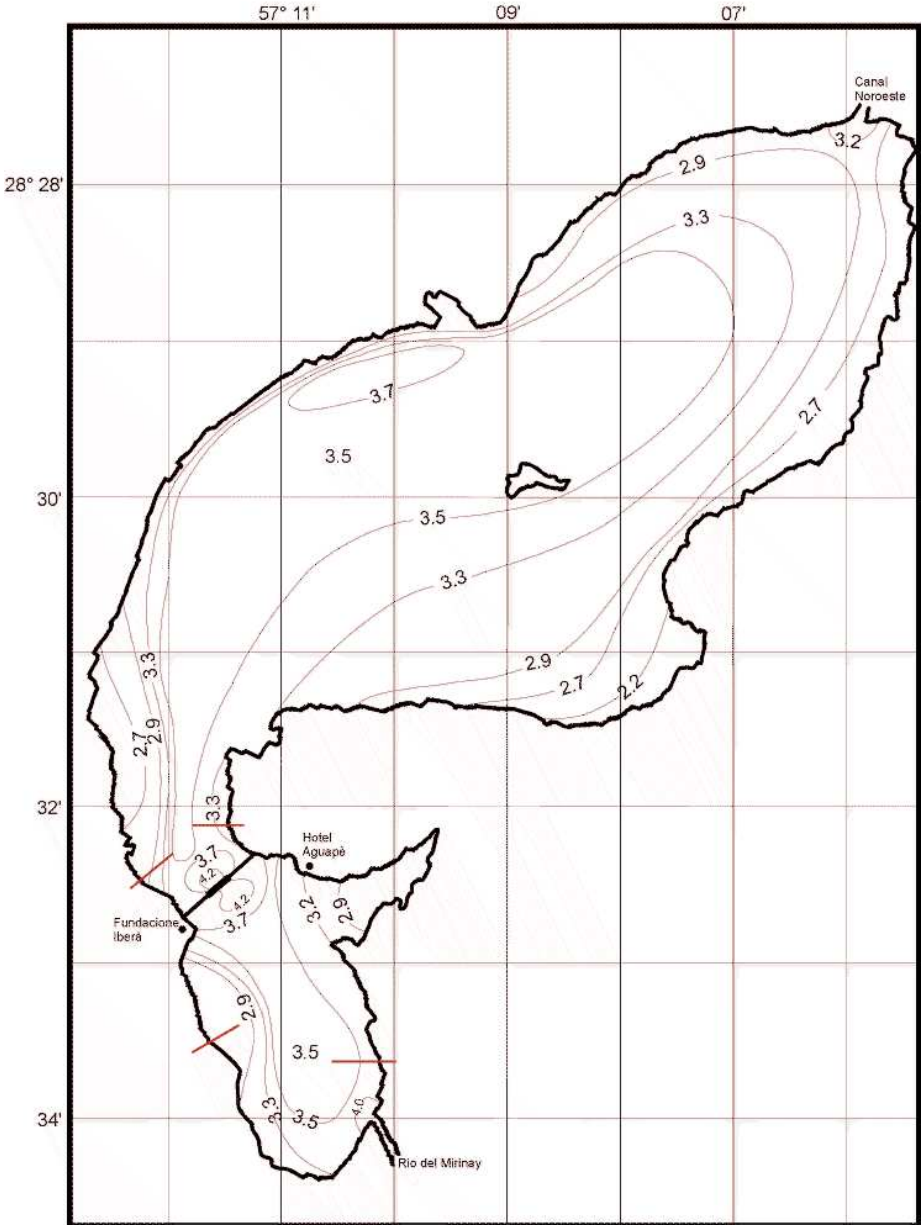

Figura 2: Batimetria da lagoa de *Iberá*.

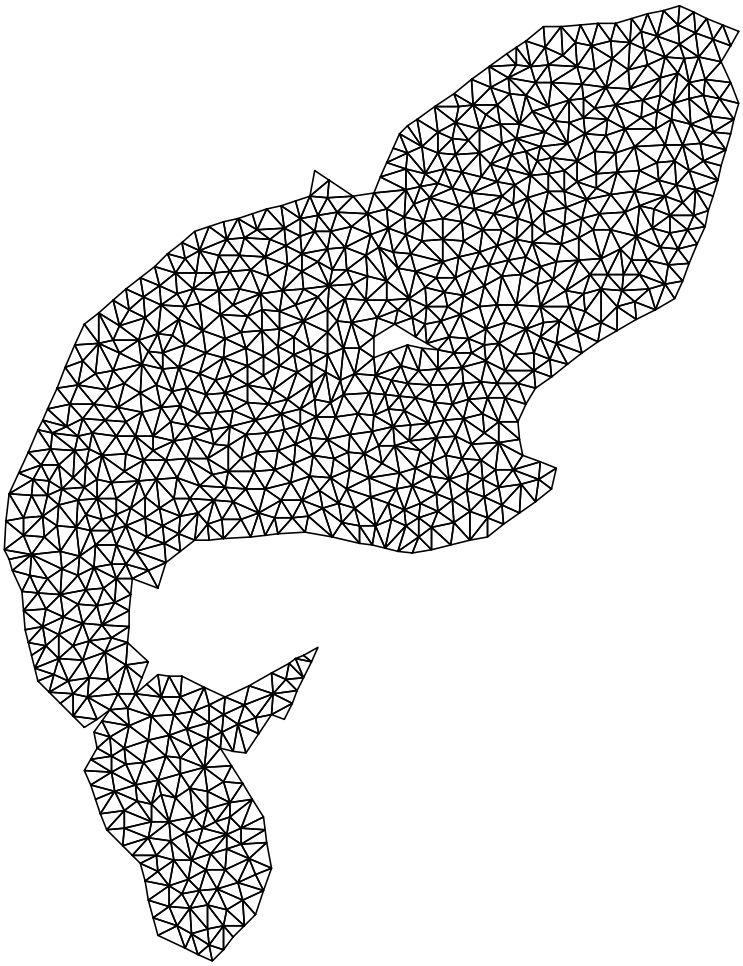

Figura 3: Discretização da lagoa de *Iberá* usando o *software Triangle* (ver Shewchuck, 2002).

5 Discretização temporal: Método de Crank-Nicolson

Adotaremos os operadores de aproximação de Crank-Nicolson[3] para discretizar a variável temporal. O método consiste em usar as aproximações:

$$P_I\left(t_n + \Delta t/2\right) \simeq \frac{P_I(t_n) + P_I(t_{n+1})}{2}, \quad \text{e}$$

$$\frac{dP_I}{dt}\left(t_n + \Delta t/2\right) \simeq \frac{P_I(t_{n+1}) - P_I(t_n)}{\Delta t}$$

para $I = 1, 2$, ambas da ordem de $(\Delta t)^2$ estimada em $t = t_n + \Delta t/2$ (ver Carnahan et al., 1969; Kardestuncer e Norrie, 1987).

Esta discretização resulta num sistema não linear em $P_{I_k}^{(n)} = (P_{I_1}^{(n)}, P_{I_2}^{(n)}, \cdots, P_{I_N}^{(n)})$ onde $P_{I_k}^{(n)}$ caracteriza-se pela relação:

$$P_{I_k}^{(n)} \cong P_I(x_k, y_k, t_n), \quad I = 1 \text{ a } 4$$

com a condição inicial dada implicitamente pelos sistemas

$$\sum_{j=1}^{N} P_{I_j}^{(0)}\left(\varphi_j|\varphi_i\right) = \left(P_{I_0}|\varphi_i\right), \quad \forall \varphi_i \in \beta \text{ e } I = 1 \text{ a } 4. \tag{7}$$

6 O Problema Discretizado Não Linear

Em vez de fazer uso do sistema não linear acima descrito usa-se a aproximação (ver Meyer, 1988) e já reagrupando os termos de modo a separar os termos relativos ao $(n+1)$-ésimo passo no tempo obtemos o sistema não linear dado sucessivamente por:

[3]Neste parágrafo iremos simplificar na realidade, o Método de Crank-Nicolson genérico – Meyer, 1988.

$$
\begin{aligned}
&\sum_{j=1}^{N} P_{1_j}^{(n+1)} \left\{ \left(1 - a_1 \frac{\Delta t}{2}\right) (\varphi_j|\varphi_i) + \alpha_1 \frac{\Delta t}{2} (\nabla\varphi_j \| \nabla\varphi_i) + V_{1_j} \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial x}|\varphi_i\right) + \right. \\
&+ V_{2_j} \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial y}|\varphi_i\right) + \frac{\Delta t}{2} (\rho_1 \sigma_1 \varphi_j|\varphi_i) + b_1 \frac{\Delta t}{2} \sum_{k=1}^{N} \left[\frac{P_{1_k}^{(n+1)} + P_{1_k}^{(n)}}{2} (\varphi_k \varphi_j|\varphi_i) \right] + \\
&+ c_1 \frac{\Delta t}{2} \sum_{k=1}^{N} \left[\frac{P_{3_k}^{(n+1)} + P_{3_k}^{(n)}}{2} (\varphi_k \varphi_j|\varphi_i) \right] + d_1 \frac{\Delta t}{2} \sum_{k=1}^{N} \left[\frac{P_{4_k}^{(n+1)} + P_{4_k}^{(n)}}{2} (\varphi_k \varphi_j|\varphi_i) \right] + \\
&\left. + e_1 \frac{\Delta t}{2} \sum_{k=1}^{N} \left[\frac{P_{2_k}^{(n+1)} + P_{2_k}^{(n)}}{2} (\varphi_k \varphi_j|\varphi_i) \right] \right\} = \\
&= \sum_{j=1}^{N} P_{1_j}^{(n)} \left\{ \left(1 + a_1 \frac{\Delta t}{2}\right) (\varphi_j|\varphi_i) - \alpha_1 \frac{\Delta t}{2} (\nabla\varphi_j \| \nabla\varphi_i) - V_{1_j} \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial x}|\varphi_i\right) - \right. \\
&- V_{2_j} \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\partial \varphi_j}{\partial y}|\varphi_i\right) - \frac{\Delta t}{2} (\rho_1 \sigma_1 \varphi_j|\varphi_i) - b_1 \frac{\Delta t}{2} \sum_{k=1}^{N} \left[\frac{P_{1_k}^{(n+1)} + P_{1_k}^{(n)}}{2} (\varphi_k \varphi_j|\varphi_i) \right] - \\
&- c_1 \frac{\Delta t}{2} \sum_{k=1}^{N} \left[\frac{P_{3_k}^{(n+1)} + P_{3_k}^{(n)}}{2} (\varphi_k \varphi_j|\varphi_i) \right] - d_1 \frac{\Delta t}{2} \sum_{k=1}^{N} \left[\frac{P_{4_k}^{(n+1)} + P_{4_k}^{(n)}}{2} (\varphi_k \varphi_j|\varphi_i) \right] - \\
&\left. - e_1 \frac{\Delta t}{2} \sum_{k=1}^{N} \left[\frac{P_{2_k}^{(n+1)} + P_{2_k}^{(n)}}{2} (\varphi_k \varphi_j|\varphi_i) \right] \right\},
\end{aligned}
\tag{8}
$$

para $\forall \varphi_i \in \beta$.

As equações análogas para as demais espécies diferem apenas quanto às características de cada uma, confome mencionada na equação (5).

De modo sucinto, têm-se

$$\mathbb{A}_I\left(P_1^{(n)},P_2^{(n)},P_3^{(n)},P_4^{(n)},P_1^{(n+1)},P_2^{(n+1)},P_3^{(n+1)},P_4^{(n+1)}\right)P_I^{(n+1)}=$$

$$=\mathbb{B}_I\left(P_1^{(n)},P_2^{(n)},P_3^{(n)},P_4^{(n)},P_1^{(n+1)},P_2^{(n+1)},P_3^{(n+1)},P_4^{(n+1)}\right)P_I^{(n)} \tag{9}$$

com a condição inicial $P_I^{(0)}=(P_{I_1}^{(0)},P_{I_2}^{(0)},\ldots,P_{I_N}^{(0)})$ e $I=1$ a 4.

Diversos modos de se obter a solução de (9) estão disponíveis. Iremos contornar a dificuldade de aproximar a solução de (9) linearizando o sistema segundo Rachford (1973); Douglas Jr. et al. (1979); Meyer (1988); Pregnolatto (2002).

Os processos iterativos são obtidos mediante o seguinte algoritmo:

1. resolve-se o sistema

$$\mathbb{A}_1\left(P_1^{(0)},P_2^{(0)},P_3^{(0)},P_4^{(0)},P_1^{(0)},P_2^{(0)},P_3^{(0)},P_4^{(0)}\right)P_1^{(*)}=$$

$$=\mathbb{B}_1\left(P_1^{(0)},P_2^{(0)},P_3^{(0)},P_4^{(0)},P_1^{(0)},P_2^{(0)},P_3^{(0)},P_4^{(0)}\right)P_1^{(0)}$$

   obtendo o vetor $P_1^{(*)}$;

2. resolve-se, agora, o sistema

$$\mathbb{A}_2\left(P_1^{(0)},P_2^{(0)},P_3^{(0)},P_4^{(0)},P_1^{(*)},P_2^{(0)},P_3^{(0)},P_4^{(0)}\right)P_2^{(*)}=$$

$$=\mathbb{B}_2\left(P_1^{(0)},P_2^{(0)},P_3^{(0)},P_4^{(0)},P_1^{(*)},P_2^{(0)},P_3^{(0)},P_4^{(0)}\right)P_2^{(0)}$$

   obtendo o vetor $P_2^{(*)}$;

3. resolve-se, em seguida o sistema

$$\mathbb{A}_3\left(P_1^{(0)},P_2^{(0)},P_3^{(0)},P_4^{(0)},P_1^{(*)},P_2^{(*)},P_3^{(0)},P_4^{(0)}\right)P_3^{(*)}=$$

$$=\mathbb{B}_3\left(P_1^{(0)},P_2^{(0)},P_3^{(0)},P_4^{(0)},P_1^{(*)},P_2^{(*)},P_3^{(0)},P_4^{(0)}\right)P_3^{(0)}$$

   obtendo o vetor $P_3^{(*)}$;

4. e finalmente, resolve-se o sistema

$$\mathbb{A}_4\left(P_1^{(0)}, P_2^{(0)}, P_3^{(0)}, P_4^{(0)}, P_1^{(*)}, P_2^{(*)}, P_3^{(*)}, P_4^{(0)}\right) P_4^{(*)} =$$

$$= \mathbb{B}_4\left(P_1^{(0)}, P_2^{(0)}, P_3^{(0)}, P_4^{(0)}, P_1^{(*)}, P_2^{(*)}, P_3^{(*)}, P_4^{(0)}\right) P_4^{(0)}$$

obtendo o vetor $P_4^{(*)}$;

5. resolve-se então, o sistema

$$\mathbb{A}_1\left(P_1^{(0)}, P_2^{(0)}, P_3^{(0)}, P_4^{(0)}, P_1^{(*)}, P_2^{(*)}, P_3^{(*)}, P_4^{(*)}\right) P_1^{(**)} =$$

$$= \mathbb{B}_1\left(P_1^{(0)}, P_2^{(0)}, P_3^{(0)}, P_4^{(0)}, P_1^{(*)}, P_2^{(*)}, P_3^{(*)}, P_4^{(*)}\right) P_1^{(0)}$$

obtendo o vetor $P_1^{(**)}$;

6. resolve-se agora o sistema

$$\mathbb{A}_2\left(P_1^{(0)}, P_2^{(0)}, P_3^{(0)}, P_4^{(0)}, P_1^{(**)}, P_2^{(*)}, P_3^{(*)}, P_4^{(*)}\right) P_2^{(**)} =$$

$$= \mathbb{B}_2\left(P_1^{(0)}, P_2^{(0)}, P_3^{(0)}, P_4^{(0)}, P_1^{(**)}, P_2^{(*)}, P_3^{(*)}, P_4^{(*)}\right) P_2^{(0)}$$

obtendo o vetor $P_2^{(**)}$;

7. resolve-se agora o sistema

$$\mathbb{A}_3\left(P_1^{(0)}, P_2^{(0)}, P_3^{(0)}, P_4^{(0)}, P_1^{(**)}, P_2^{(**)}, P_3^{(*)}, P_4^{(*)}\right) P_3^{(**)} =$$

$$= \mathbb{B}_3\left(P_1^{(0)}, P_2^{(0)}, P_3^{(0)}, P_4^{(0)}, P_1^{(**)}, P_2^{(**)}, P_3^{(*)}, P_4^{(*)}\right) P_3^{(0)}$$

obtendo o vetor $P_3^{(**)}$;

8. resolve-se, finalmente o sistema

$$\mathbb{A}_4\left(P_1^{(0)}, P_2^{(0)}, P_3^{(0)}, P_4^{(0)}, P_1^{(**)}, P_2^{(**)}, P_3^{(**)}, P_4^{(*)}\right) P_4^{(**)} =$$

$$= \mathbb{B}_4\left(P_1^{(0)}, P_2^{(0)}, P_3^{(0)}, P_4^{(0)}, P_1^{(**)}, P_2^{(**)}, P_3^{(**)}, P_4^{(*)}\right) P_4^{(0)}$$

obtendo o vetor $P_4^{(**)}$.

9. Procedendo analogamente, obtêm-se sucessivamente $P_1^{(***)}$, $P_2^{(***)}$, $P_3^{(***)}$ e $P_4^{(***)}$ até que se definam as aproximações dos vetores $P_1^{(1)}$, $P_2^{(1)}$, $P_3^{(1)}$ e $P_4^{(1)}$. Geralmente não há ganhos ao se repetir muitas vezes estas iterações internas a cada passo no tempo (ver Rachford, 1973; Douglas Jr. et al., 1979; Meyer, 1988).

10. O procedimento de 1. a 9. é repetido com $P_1^{(n)}$, $P_2^{(n)}$, $P_3^{(n)}$ e $P_4^{(n)}$ no lugar de $P_1^{(0)}$, $P_2^{(0)}$, $P_3^{(0)}$ e $P_4^{(0)}$, para se obter, após as iterações internas o (n+1)-ésimo passo na iteração temporal, $P_1^{(n+1)}$, $P_2^{(n+1)}$, $P_3^{(n+1)}$ e $P_4^{(n+1)}$.

Este método de tipo preditor-corretor, definido no âmbito de uma discretização Crank-Nicolson irá melhorar as aproximações mas não indefinidamente: ele tende à melhor aproximação da ordem de $(\Delta t)^2$ em cada iteração temporal[4].

Este esquema de aproximações, portanto, calcula aproximações da solução de ordem quadrática do ponto de vista espacial global, e de ordem também quadrática temporalmente, mas na visão local.

7 Resultados das Simulações Numéricas

Apresentaremos alguns ensaios numéricos para simular os efeitos de um impacto ambiental causado por um agente tóxico na região da lagoa de Iberá, nos níveis populacionais das quatro espécies interagentes consideradas.

Os parâmetros usados foram estimados na tentativa de testar o modelo. Assim, foram adotados parâmetros que indicassem:

(i) maior difusão/dispersão para uma das presas (P_2) e para uma das espécies predadoras (P_3), menores valores nas outras duas;

(ii) um efeito significativamente maior do tóxico sobre as presas, e inferior nos predadores;

(iii) para a reprodução, maiores taxas intrínsecas para as espécies predadas do que para os predadores, e

(iv) um parâmetro (verhulstiano) do efeito da competição intra específica maior em uma das espécies de predadores (P_3) e em uma das presas (P_1), com valores menores para as outras duas.

[4]Resultados de convergência podem ser encontrados nos trabalhos citados: Rachford (1973), Douglas Jr. et al. (1979) e Meyer (1988)).

O algorítmo (9) foi programado em ambiente MATLAB no equipamento do Laboratório de Matemática Aplicada no IMECC. Diversos outros recursos foram utilizados (Shewchuck, 2002), bem como recursos de *software* do grupo de pesquisa (Cantão e D'Afonseca, 1998).

Apresentamos conjuntos de gráficos no caso em que se tem a concentração inicial do material impactante na parte superior à direita. A figura 4 mostra como evolui a distribuição do material impactante, exibindo a superfície dos níveis de impacto sobre o domínio, após o período desejado de tempo (neste caso, para 400 iterações). A pequena distância coberta pelo poluente corresponde à nossa expectativa, em função da baixa circulação local determinada no programa via Equação de Stokes.

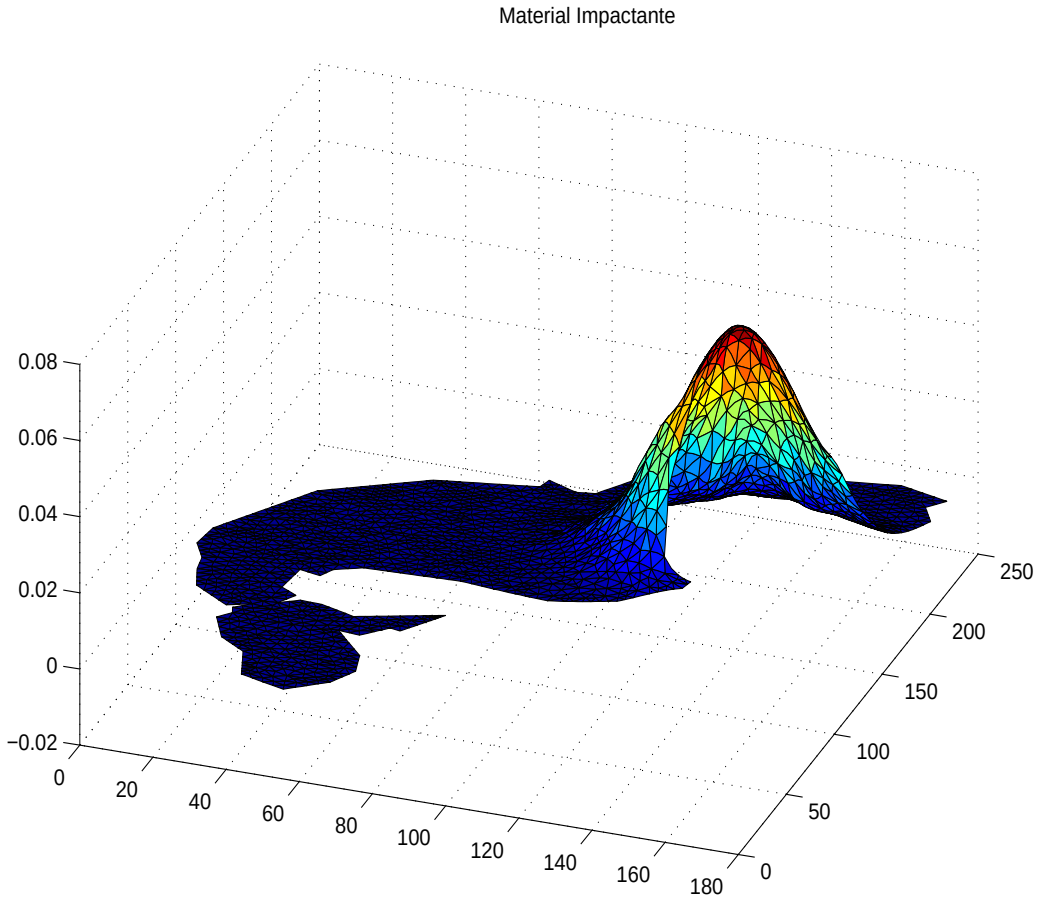

Figura 4: Evolução do material impactante – iteração 400.

As figuras 5, 6 e 7 mostram os níveis populacionais das presas e dos predadores na presença do agente tóxico, de diferentes pontos de vista.

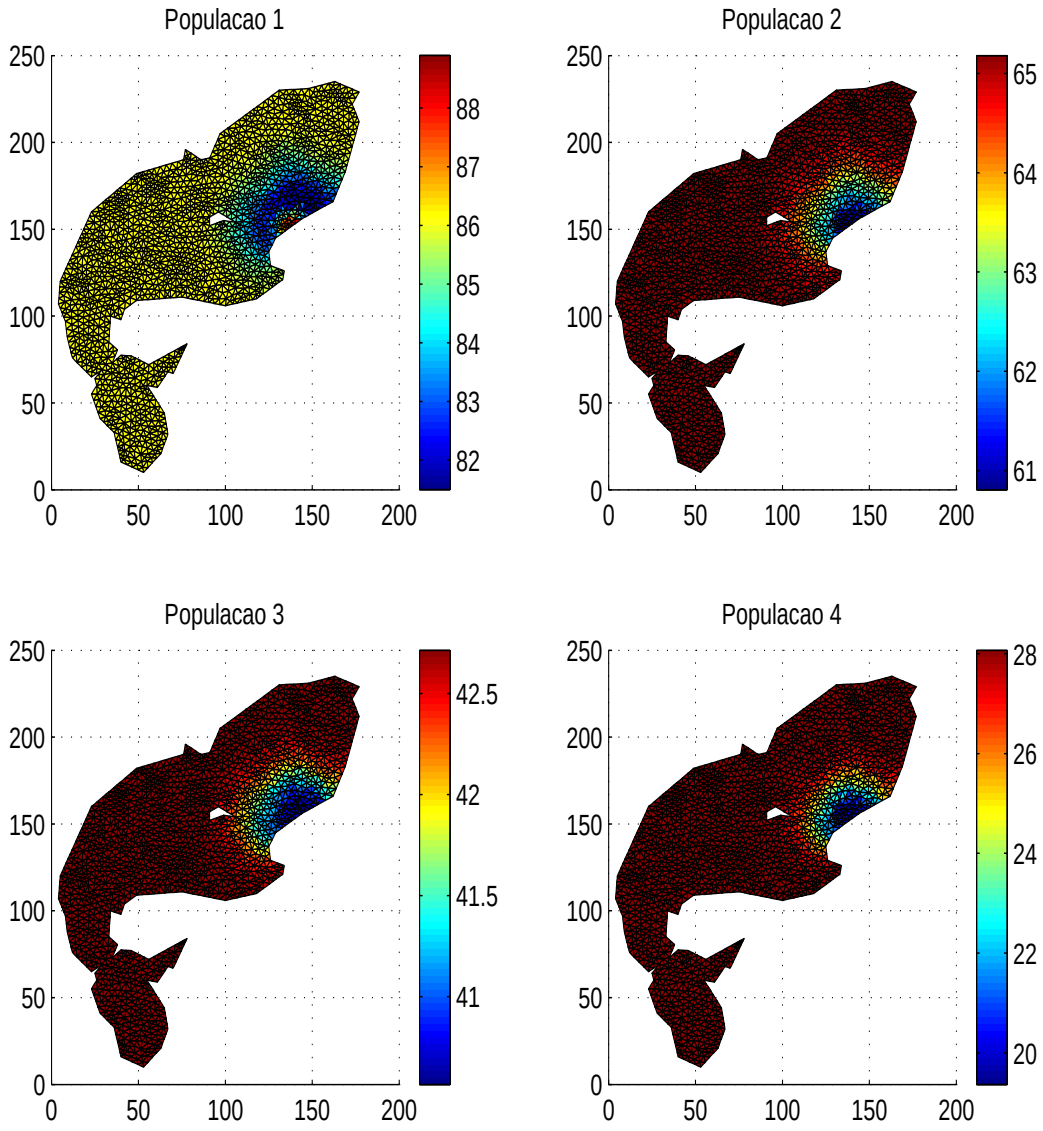

Figura 5: Níveis populacionais na presença do agente tóxico – iteração 400.

Para análise visual, a figura 6 mostra os níveis populacionais com escalas diferentes e, a título de comparação, a figura 7 mostra os mesmos níveis populacionais na mesma escala.

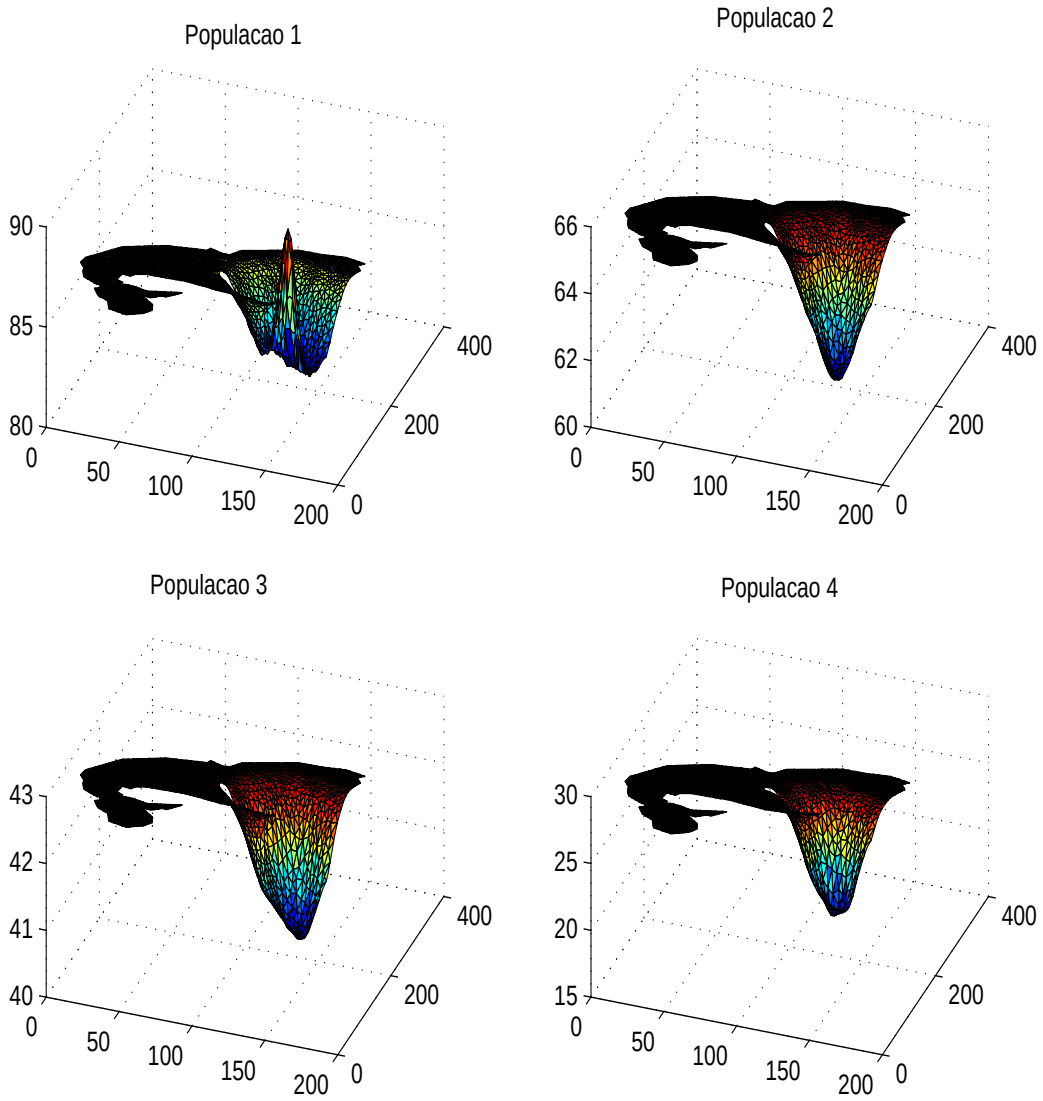

Figura 6: Outra visão dos níveis populacionais em escalas diferentes.

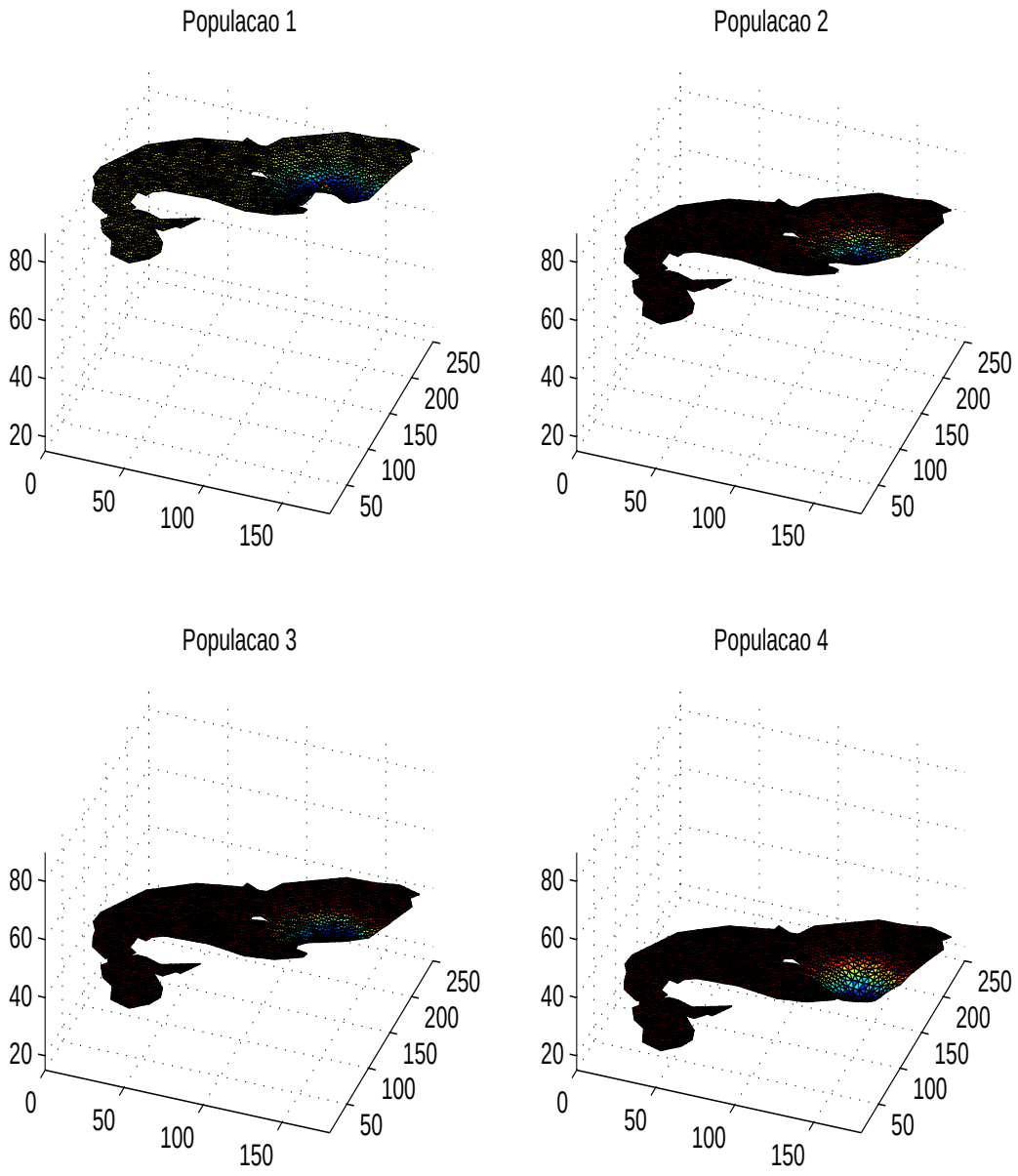

Figura 7: Níveis populacionais na mesma escala.

Na figura 8 podemos observar o efeito "viajante" do agente tóxico. Após as 400 iterações a população 1 (presa), inicialmente a mais afetada pelo poluente e pelo efeito da predação-competição, começa a se recuperar, atingindo um nível populacional significativamente maior do que aquele anterior ao poluente e seu efeito tóxico. Este comportamento, surpeendente do ponto de vista numérico não o é de uma perspectiva biológica: é como se a população de presas P_1 estivesse se aproveitando do fato de que seu competidor (P_2) ainda se recupera dos efeitos tóxicos, enquanto que as populações de predadores (P_3 e P_4) ainda estão debilitados não só pelo efeito tóxico do poluente, mas também pela redução de níveis populacionais das presas.

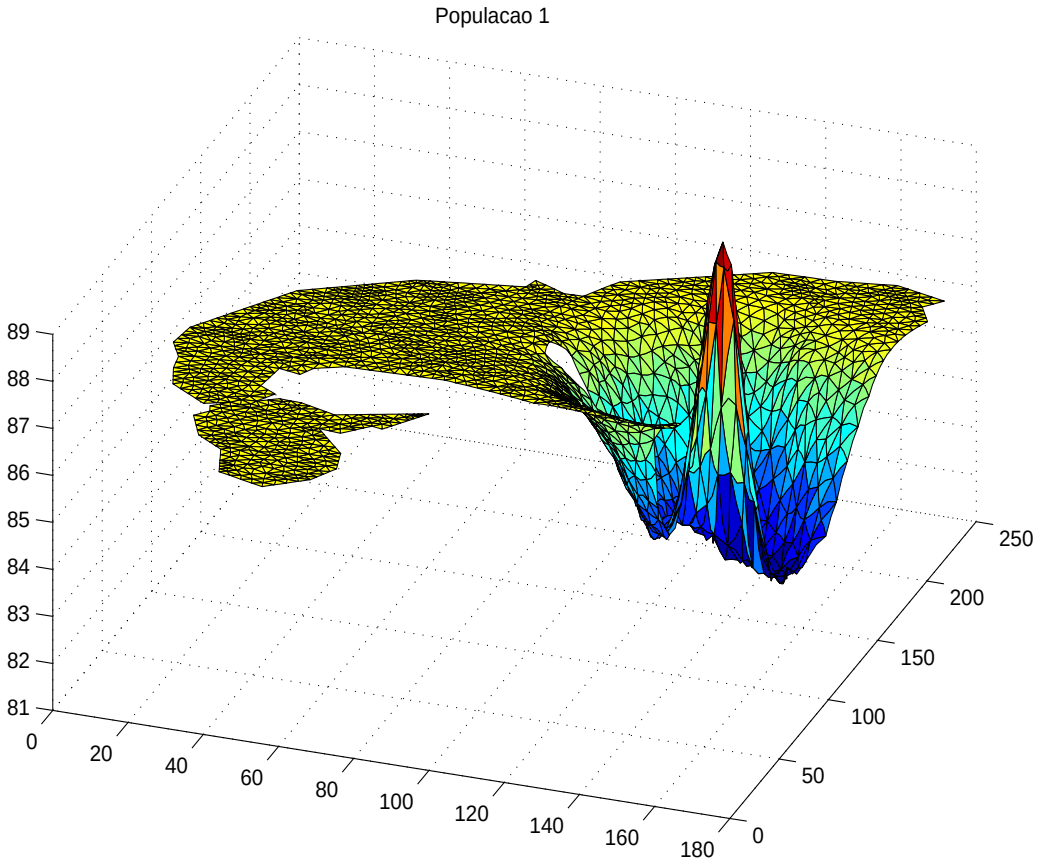

Figura 8: Comportamento da população 1 após 400 iterações.

Uma idéia de como as espécies chegaram aos níveis populacionais e às respectivas distribuições aí desenhadas é sugerida pelas figuras abaixo.

Acompanham-se os níveis populacionais para um único nó (#1302) escolhido justamente na região inicialmente afetada pelo contaminante: vemos os efeitos imediatos sentidos pelas duas presas (populações 1 e 2) e, com certo retardo, o efeito levado aos predadores (populações 3 e 4), além dos efeitos esperados em função de comportamentos clássicos de modelos do tipo presa-predador-competição.

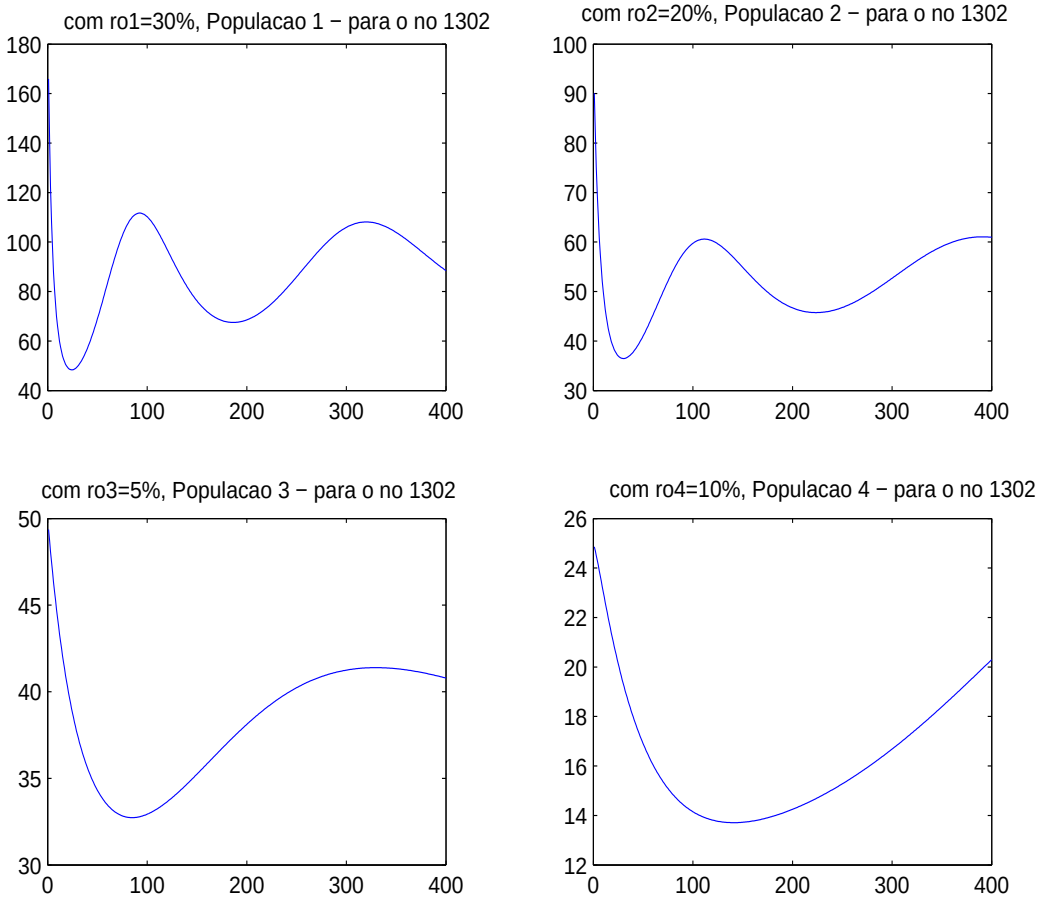

Figura 9: Comportamento evolutivo dos níveis populacionais para o nó #1302.

Em comparação, a figura 10 acompanha outro nó (#2424) fora da região de efeito imediato do material impactante. Podemos observar comportamentos significativamente diferenciados: não só os níveis populacionais das presas (populações 1 e 2) são mais baixos, obviamente, onde há impacto, mas o comportamento de um dos predadores (população 4) é invertido: na presença do impacto, mesmo com certa abundância de presas, seu nível populacional cai, enquanto que na ausência do produto tóxico, o nível populacional começa aumentando vindo a diminuir posteriormente muito mais em função dos efeitos das competições, visto que, nestes ensaios realizados, o material impactante não chegou a afetar significativamente (ainda!) as populações tanto de presas quanto de predadores.

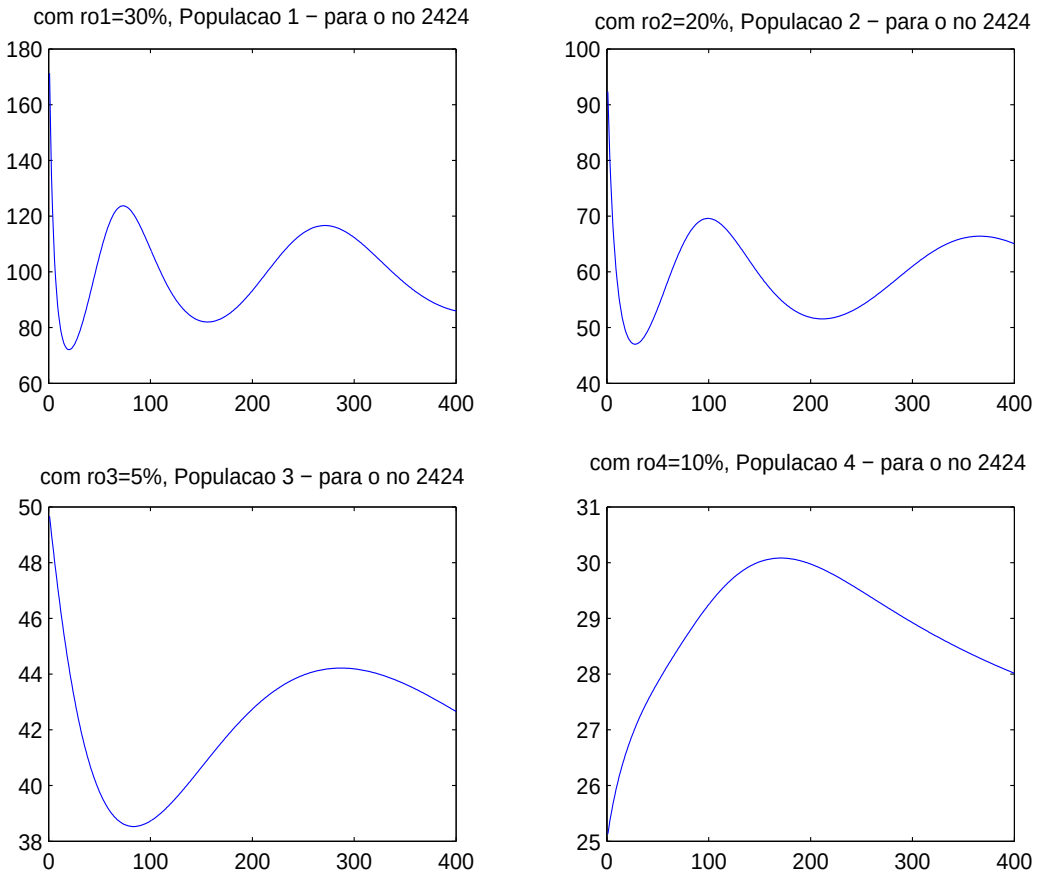

Figura 10: Comportamento evolutivo dos níveis populacionais para o nó #2424.

8 Conclusão

Este trabalho visou, em suma, um objetivo múltiplo: introduzir um instrumental a um tempo matemático, algorítmico e computacional que se preste a simulações que, na prática, pudessem contribuir para o estudo de efeitos de impacto ambiental em populações e comunidades que residem, ainda, em regiões menos afetadas de modo irreversível.

Uma primeira conseqüência pode ser a de fornecer a estudiosos de áreas correlatas um *software* que permita avaliar o efeito de decisões ou estratégias na região estudada ou de características afins, decisões ou estratégias essas que afetam sejam as regiões circunvizinhas agro-industriais, seja as próprias regiões analisadas. Cabe dizer que tanto a modelagem quanto as aproximções algorítmicas e esquemas numéricos transcendem as limitações daquela específica região onde se originou o presente estudo.

São características originais deste trabalho, em primeiro lugar, a combinação de diferentes recursos de modelagem, via sistemas de Equações Diferenciais Parciais. De fato, usamos na modelagem proposta:

- a Equação de Stokes,
- a Equação de Reação-Difusão com Transporte,
- conceitos de Migração-Dispersão em conjunto com
- a clássica Modelagem de tipo Lotka-Volterra.

Em segundo lugar não temos registro, na literatura disponível, de uma combinação que se revelou viável:

(i) determinação de aproximação confiável de um campo vetorial descritivo do **mapa circulatório**, seguida da

(ii) determinação de aproximação consistente do **transporte advectivo** de material impactante numa determinada região, obtendo, a cada ponto no domínio e a cada instante no tempo, os níveis de material impactante; e, finalmente,

(iii) determinação de aproximações qualitativamente relevantes das **populações resultantes**, e suas respectivas distribuições no espaço e ao longo do tempo, bem como os efeitos diretos e indiretos do movimento do contaminante (ii) sujeito ao transporte (i) sobre as populações-chave que, ainda, interagem entre si.

O algorítmo adotado é descrito em aplicações relativamente mais simples tanto no tocante às dimensões do sistema abordado, quanto às ordens de aproximação. O esquema definido em (8) trabalha com elementos finitos de segunda ordem, produzindo, junto com o Método de Crank-Nicolson, aproximações locais de terceira ordem no espaço e de segunda ordem nas aproximações temporais.

Por um lado é verdade que, dadas suas características bastante pesadas em termos de exigências computacionais (tanto em cálculos efetivos quanto em armazenamentos de informações), os programas vêm exigindo longo tempo de processamento. No entanto, oportunidades de melhoria de desempenho apontam uma primeira direção de trabalho futuro.

Outra oportunidade de trabalho relevante no futuro pode ser a do uso do programa em situações de fato que permitam a calibração de parâmetros do modelo (numa linha de trabalho semelhante à de Kareiva, 1983).

Ainda, aquilo que se convencionou chamar de modo desnecessariamente anglicista de "customização", ou seja, a adequação do *software* para outros domínios e outras ações interespecíficas, bem como outros efeitos de impacto, se constitui num desafio de certa forma imediato e bastante viável.

Finalmente cabe-nos enfatizar o resultado numérico obtido que levou a figura 8. Em esforços de cooperação com outros grupos de trabalho, situações como aquela que a figura descreve surgem de modo natural como conseqüência de impacto por produto tóxico.

De fato, pesquisadores da CETESB (Poffo (2000)) descrevem um salto populacional de certas algas, ultrapassando níveis prévios de densidade populacional após a presença de manchas de óleo, níveis prévios estes, em que tais algas conviviam com competidores: cracas marinhas.

Os resultados (e sua expressão gráfica na figura 8) são de grande alento para aqueles que se dedicam ao uso deste tipo de instrumental na modelagem de fenômenos ambientais visando o conhecimento, a preservação e estratégia de recuperação para regiões suscetíveis de impacto por ações antrópicas.

Referências

Bernardes, M. (1998). Poluição em corpos aquáticos de baixa circulação: Modelagem e simulação numérica. Dissertação de Mestrado, IMECC – UNICAMP, Campinas/SP.

Bozhkov, Y. D., 2003. Comunicação pessoal – a aparecer.

Cantão, R. F. (1998). Modelagem e simulação numérica de derrames de óleo no canal de São Sebastião, SP. Dissertação de Mestrado, IMECC – UNICAMP, Campinas/SP.

Cantão, R. F. e D'Afonseca, L. A. (1998). Produção interna do grupo de Biomatemática em Matlab. Software em Matlab, IMECC – UNICAMP.

Carnahan, B., Luther, H. A., e Wilkes, J. O. (1969). *Applied Numerical Methods*. John Wiley & Sons, New York.

Diniz, G. L. (2003). *Dispersão de poluentes num sistema ar-água: modelagem, aproximação e aplicações*. Tese de Doutorado, FEEC – UNICAMP, Campinas/SP.

Douglas Jr., J., Dupont, T., e Ewing, R. E. (1979). Incomplete iteration for time-stepping a galerkin method for a quasi-linear parabolic-problem. *SIAM J. Numerical Analysis*, 16:503–522.

European Union INCO Project ERB3514PL97297, 2003. The sustainable management of wetland resources in Mercosur, CD-ROM.

Johnson, C. (1987). *Numerical solution of partial differential equations by the finite element method*. Cambridge University Press, New York.

Kardestuncer, H. e Norrie, D. H. (1987). *Finite Element Handbook*. McGraw-Hill, New York.

Kareiva, P. M. (1983). Local movement in herbivorous insects: applying a passive diffusion model to mark-recapture field experiments. *Oecologia*, 57:332–327.

Meyer, J. F. C. A. (1988). *Modelagem e Simulação Numérica do Transiente Térmico em Meios Compostos*. Tese de Doutorado, IMECC – UNICAMP, Campinas/SP, Brasil.

Oliveira, R. F. D. (2003). *O comportamento evolutivo de uma mancha de óleo na Baía de Ilha Grande/RJ: modelagem, análise numérica e simulações*. Tese de Doutorado, IMECC – UNICAMP, Campinas/SP.

Peyret, R. e Taylor, T. D. (1985). *Computacional Methods for Fluid Flow*. Springer-Verlag New York Heidelberg Berlim.

Poffo, I. R. F., 2000. Vazamentos de óleo no litoral norte do estado de São Paulo: análise histórica. Tese de Doutorado, USP, São Paulo/SP, Brasil.

Pregnolatto, S. A. (2002). *Mal-das-cadeiras em Capivaras: Estudo, Modelagem e Simulação de um Caso.* Tese de Doutorado, FEEC - UNICAMP, Campinas/SP, Brasil.

Rachford, H. H. (1973). Two-level discrete-time galerkin approximations for second-order nonlinear parabolic partial differential equations. *SIAM J. Numerical Analysis*, 06:1010–1026.

Shewchuck, J. R. (2002). Software triangle, versão 1.4. url: *http://www-2.cs.cmu.edu/afs/cs.cmu.edu/project/quake/public/www/triangle.html*.