

Modelagem matemática e simulação computacional da
presença de materiais impactantes tóxicos em casos de
dinâmica populacional com competição inter e
intra-específica

J. F. C. A. Meyer¹,

DMA, IMECC – UNICAMP, 13083-859, Campinas/SP.

M. M. Salvatierra²

DMA, IMECC – UNICAMP, 13083-859, Campinas/SP.

Resumo. Neste trabalho é proposto um modelo que descreve computacionalmente o convívio entre duas espécies competidoras com características de migração na presença de um material impactante tóxico. Um sistema não-linear clássico do tipo Lotka-Volterra combinado a Equações Diferenciais Parciais de Dispersão-Migração é usado e apresentado em suas formulações clássica e variacional discretizada, esta última visando o uso de Elementos Finitos combinados a um método de Crank-Nicolson. Saídas gráficas úteis dos pontos de vista quantitativo e qualitativo são obtidas, possibilitando assim análises e discussões das soluções discretas aproximadas relativas a cada população em cada ponto e ao longo do intervalo de tempo considerado nas simulações.

Palavras-chave: *Equações de Difusão-Advecção; Método dos elementos finitos; Ecologia Matemática.*

¹joni@ime.unicamp.br

²marcosms@ime.unicamp.br

1. Introdução

Este trabalho visa recorrer a sistemas não-lineares de Equações Diferenciais Parciais que modelem tanto a dispersão populacional com efeitos outros como a migração, por exemplo, em conjunto com dinâmicas populacionais de tipo logístico genérico incorporando, também, as ações interespecíficas de tipo clássico, ou seja, na linha de Lotka-Volterra (ver: Meyer et al., 1999).

As equações dos sistemas propostos permitem a inclusão de efeitos tóxicos letais variáveis de um poluente no meio, poluente este cuja presença evolui no tempo em função não apenas de difusão efetiva (no sentido de Marchuk (1986), ou de Okubo (1980)), mas também do transporte advectivo – no caso que se deseja estudar, este transporte é devido à correnteza em corpos aquáticos, e, além disso, as populações estudadas, em função de ambientes de competição intra-específica, podem sofrer efeitos permanentes, visto que os equilíbrios de convivência competitiva são, reconhecidamente, equilíbrios de frágil estabilidade – uma modelagem que reúne idéias já clássicas em termos de convívio entre espécies (Edelstein-Keshet (1988), Murray (1989)).

O cenário em que serão feitas as simulações deste trabalho é a lagoa Iberá, situada no nordeste da Argentina. O grupo de Ecologia Matemática do IMECC-UNICAMP, em conjunto com outros centros de pesquisa como os da Università degli Studi di Siena (Itália), da Universidad del Salvador (Argentina), da Universidad Nacional del Centro de la Provincia de Buenos Aires (Argentina), da Universidad de Cádiz (Espanha), da Universidade de Aveiro (Portugal), da University of York (Reino Unido) e da Universidade Federal do Rio Grande do Sul (Brasil), já vem desenvolvendo estudos sobre esta região, obtendo resultados significativos. Na definição da cadeia trófica deste meio (Gantes et al., 2005), duas espécies-chave – o “chajá” (*Chauna torquata*) e o jacaré (*Caiman yacare*) – estão no topo, competindo entre si por presas de pequeno porte (basicamente peixes e rãs). O material impactante tóxico que será considerado nas simulações é proveniente das culturas de arroz presentes nas regiões vizinhas da lagoa. Os agrotóxicos são as principais fontes de poluição naquele meio.

2. A dispersão de um poluente no meio

Nesta seção será apresentado um modelo matemático para a dispersão de um poluente no meio, seguido de resultados de simulações computacionais baseadas nele.

2.1 O modelo matemático

A equação que descreve esse tipo de modelagem é a já clássica Equação de Difusão-Advecção. Neste modelo, são considerados basicamente os fenômenos de difusão (ou seja, espalhamento natural do poluente em contato com o meio), de advecção (o movimento provocado pela movimentação do próprio meio), de decaimento (fenômeno que reúne alterações sofridas pelas moléculas das substâncias componentes do produto tóxico ao longo do tempo, ocasionando perda de massa e consequentemente sua exclusão do meio) e da presença de fontes poluentes, introduzindo o material impactante no meio.

Nestas situações, a equação que descreve tais fenômenos para a concentração do poluente, $C = C(x, y; t)$ com $(x, y) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2$ e $t \in (0, T]$, é dada por

$$\frac{\partial C}{\partial t} - \operatorname{div}(\alpha_c \nabla C) + \operatorname{div}(\mathbb{V}C) + \sigma_c C = f \quad (2.1)$$

onde

- $\alpha_c = \alpha_c(x, y; t)$ representa a difusibilidade do poluente no meio;
- $\mathbb{V} = (V_1(x, y; t), V_2(x, y; t))$ representa o campo de velocidades da circulação local, com $\operatorname{div}(\mathbb{V}) = 0$;
- $\sigma_c = \sigma_c(x, y; t)$ representa o decaimento do poluente no meio;
- $f = f(x, y; t)$ representa as fontes poluentes.

Convém observar que o gradiente e o divergente são considerados como operadores somente sobre as variáveis espaciais, e que as condições inicial e de contorno serão explicitadas mais adiante.

Devido à proposta de aplicação deste modelo, serão feitas algumas simplificações, com o intuito também de torná-lo mais tratável: serão considerados α_c

e σ_c constantes, $\mathbb{V} = \mathbb{V}(x, y)$ e $f = 0$. Dessa forma, completando a equação (2.1) com as condições de contorno* $C|_{\Gamma_0} = 0$ e $\frac{\partial C}{\partial \eta}|_{\Gamma_1} = 0$, o modelo torna-se

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial C}{\partial t} - \alpha_c \Delta C + \mathbb{V} \cdot \nabla C + \sigma_c C = 0, \quad (x, y) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2, \quad t \in (0, T] \\ C(x, y; 0) = C_0(x, y), \quad \forall (x, y) \in \Omega \\ C|_{\Gamma_0} = 0, \quad \forall t \in (0, T] \\ \frac{\partial C}{\partial \eta}|_{\Gamma_1} = 0, \quad \forall t \in (0, T]. \end{array} \right. \quad (2.2)$$

2.2 Formulação Variacional

Devido às dificuldades teóricas e práticas na busca de uma solução do problema (2.2), o modelo será descrito na sua formulação fraca, no sentido de distribuições, pois assim pode-se exigir menos regularidade da solução. Para isto, definem-se os produtos internos em $L^2(\Omega)$:

- $(f|g) = \int_{\Omega} f(x, y)g(x, y)ds;$
- $(\nabla f||\nabla g) = \int_{\Omega} \nabla f(x, y) \cdot \nabla g(x, y)ds.$

Assim, o problema torna-se encontrar

$$C \in \mathcal{S} = \{C \in L^2((0, T), H^1(\Omega)); C = 0 \text{ em } \Gamma_0 \text{ e } \frac{\partial C}{\partial t} \in L^2(\Omega) \forall t \in (0, T)\}$$

tal que

$$\left(\frac{\partial C}{\partial t} | \nu \right) - \alpha_c (\Delta C | \nu) + (\mathbb{V} \cdot \nabla C | \nu) + \sigma_c (C | \nu) = 0 \quad \forall \nu \in \mathcal{V} \quad (2.3)$$

onde $\mathcal{V} = \{\nu \in H^1(\Omega); \nu = 0 \text{ em } \Gamma_0\}$.

*As partes da fronteira Γ_1 e Γ_2 serão explicitadas mais adiante.

O operador laplaciano que figura no segundo termo desta última equação parece introduzir uma incoerência na escolha do espaço \mathcal{S} . Para contornar essa situação, aplica-se o Teorema de Green neste termo. Então, fazendo uma expansão do terceiro termo e usando as condições de contorno, tem-se

$$\left(\frac{\partial C}{\partial t}|\nu\right) + \alpha_c(\nabla C||\nabla\nu) + \left(V_1\frac{\partial C}{\partial x}|\nu\right) + \left(V_2\frac{\partial C}{\partial y}|\nu\right) + \sigma_c(C|\nu) = 0 \quad \forall \nu \in \mathcal{V}. \quad (2.4)$$

Resultados sobre existência e unicidade de solução para este tipo de problema podem ser encontrados nos trabalhos de Mistro (1992), Bernardes (1998) e Cantão (1998), entre outros.

2.3 Aproximação da solução

Na tarefa da construção de uma solução aproximada da equação (2.4), serão trabalhadas primeiramente as variáveis espaciais, pelo método de Galerkin. Para isto, seja $\mathcal{V}_h \subset \mathcal{V}$ um subespaço de dimensão N e seja $\mathcal{B} = \{\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_N\}$ uma base para esse subespaço. Visando construir uma aproximação da solução nesse espaço, separam-se as suas variáveis obtendo

$$C(x, y; t) \cong C_h(x, y; t) = \sum_{j=1}^N c_j(t)\varphi_j(x, y),$$

$$\frac{\partial C_h}{\partial t} = \sum_{j=1}^N \frac{dc_j}{dt} \varphi_j, \quad \frac{\partial C_h}{\partial x} = \sum_{j=1}^N c_j \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \text{ e } \frac{\partial C_h}{\partial y} = \sum_{j=1}^N c_j \frac{\partial \varphi_j}{\partial y}.$$

Usando estas aproximações na formulação variacional (2.4) tem-se

$$\left(\sum_{j=1}^N \frac{dc_j}{dt} \varphi_j|\nu_h\right) + \alpha_c\left(\nabla\sum_{j=1}^N c_j\varphi_j||\nabla\nu_h\right) + \left(V_1\sum_{j=1}^N c_j \frac{\partial \varphi_j}{\partial x}|\nu_h\right) + \left(V_2\sum_{j=1}^N c_j \frac{\partial \varphi_j}{\partial y}|\nu_h\right) + \sigma_c\left(\sum_{j=1}^N c_j\varphi_j|\nu_h\right) = 0 \quad \forall \nu_h \in \mathcal{V}_h.$$

Como esta expressão deve valer para todo $\nu_h \in \mathcal{V}_h$, basta escrevê-la para todo elemento de \mathcal{B} . Então, retirando os coeficientes c_j dos produtos internos, pois eles não dependem das variáveis espaciais, tem-se

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^N \frac{dc_j}{dt} (\varphi_j | \varphi_i) + \alpha_c \sum_{j=1}^N c_j (\nabla \varphi_j | | \nabla \varphi_i) + \sum_{j=1}^N c_j \left(V_1 \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} | \varphi_i \right) + \sum_{j=1}^N c_j \left(V_2 \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} | \varphi_i \right) + \\
& + \sigma_c \sum_{j=1}^N c_j (\varphi_j | \varphi_i) = 0 \quad \forall i = 1, \dots, N.
\end{aligned} \tag{2.5}$$

O campo de velocidades $\mathbb{V} = (V_1(x, y), V_2(x, y))$ do meio em questão foi objeto de estudo de Cantão e D'Afonseca (1998). Seus valores pontuais aproximados foram obtidos através da resolução numérica da Equação de Stokes (ver, também, Vásquez (2005))

$$-div(\nabla \mathbb{V}) + \nabla \mathcal{P} = g,$$

em que \mathcal{P} representa a pressão e g uma perturbação que pode ser nula. Interpolando esses valores através das funções da base \mathcal{B} tem-se

$$V_1(x, y) = \sum_{k=1}^N V_{1_k} \varphi_k(x, y) \text{ e } V_2(x, y) = \sum_{m=1}^N V_{2_m} \varphi_m(x, y).$$

Assim, o sistema (2.5) torna-se

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^N \frac{dc_j}{dt} (\varphi_j | \varphi_i) + \alpha_c \sum_{j=1}^N c_j (\nabla \varphi_j | | \nabla \varphi_i) + \sum_{j=1}^N c_j \left(\sum_{k=1}^N V_{1_k} \varphi_k \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} | \varphi_i \right) + \\
& + \sum_{j=1}^N c_j \left(\sum_{m=1}^N V_{2_m} \varphi_m \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} | \varphi_i \right) + \sigma_c \sum_{j=1}^N c_j (\varphi_j | \varphi_i) = 0 \quad \forall i = 1, \dots, N.
\end{aligned} \tag{2.6}$$

Agora o objetivo é encontrar uma aproximação temporal. Para este fim, será usado o método de Crank-Nicolson com aproximação de segunda ordem. Usando-se tal estratégia no sistema (2.6), e arranjando-se os termos convenientemente, tem-se o sistema $\mathbf{A}\mathbf{c}^{(n+1)} = \mathbf{B}\mathbf{c}^{(n)}$, em que

$$\begin{aligned}
a_{ij} &= \left[1 + \sigma_c \frac{\Delta t}{2}\right] (\varphi_i | \varphi_j) + \frac{\Delta t}{2} \left[\alpha_c (\nabla \varphi_i | | \nabla \varphi_j) + \sum_{k=1}^N V_{1_k} \left(\varphi_i \left| \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \varphi_k \right. \right) + \right. \\
&\quad \left. + \sum_{m=1}^N V_{2_m} \left(\varphi_i \left| \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \varphi_m \right. \right) \right], \\
b_{ij} &= \left[1 - \sigma_c \frac{\Delta t}{2}\right] (\varphi_i | \varphi_j) - \frac{\Delta t}{2} \left[\alpha_c (\nabla \varphi_i | | \nabla \varphi_j) + \sum_{k=1}^N V_{1_k} \left(\varphi_i \left| \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \varphi_k \right. \right) + \right. \\
&\quad \left. + \sum_{m=1}^N V_{2_m} \left(\varphi_i \left| \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \varphi_m \right. \right) \right],
\end{aligned} \tag{2.7}$$

com $i, j = 1, \dots, N$ para cada n . Este sistema será resolvido iterativamente no tempo, a partir da condição inicial $\mathbf{c}^{(0)}$ pontualmente fornecida ou dada implicitamente por

$$\sum_{j=1}^N c_j^{(0)} (\varphi_j | \varphi_i) = (C_0 | \varphi_i).$$

3. O convívio entre duas espécies competidoras sob efeito do poluente

Esta seção trata da parte principal do presente trabalho. O que se fará é uma combinação dos resultados obtidos da equação (2.1) com um sistema de Equações Diferenciais Parciais de Dispersão-Migração envolvendo termos do tipo Lotka-Volterra e dinâmicas vitais do tipo Verhulst. Esta idéia foi trabalhada primeiramente em Sossae (2003), num sistema que envolvia interações interespecíficas do tipo presa-predador e competição.

3.1 O modelo matemático

Dentro do contexto da presente proposta de modelagem, os fenômenos principalmente considerados serão:

- A dispersão populacional de cada espécie;
- Processos migratórios de cada espécie;
- O decaimento das espécies devido à presença de um material impactante tóxico;
- Dinâmicas vitais;
- Relações inter e intra-específicas.

Então, levando em conta duas populações P_1 e P_2 que interagem entre si, o sistema não-linear que descreve tais fenômenos para as densidades populacionais $P_1(x, y; t)$ e $P_2(x, y; t)$ com $(x, y) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2$ e $t \in (0, T]$ é dado por

$$\begin{cases} \frac{\partial P_1}{\partial t} - \operatorname{div}(\alpha_1 \nabla P_1) + \operatorname{div}(\mathbb{U}P_1) + \rho_1 \sigma P_1 = a_1 P_1 \left(1 - \frac{P_1 + P_2}{K}\right) - \delta_1 P_1 P_2 \\ \frac{\partial P_2}{\partial t} - \operatorname{div}(\alpha_2 \nabla P_2) + \operatorname{div}(\mathbb{W}P_2) + \rho_2 \sigma P_2 = a_2 P_2 \left(1 - \frac{P_1 + P_2}{K}\right) - \delta_2 P_1 P_2 \end{cases} \quad (3.8)$$

onde

- $\alpha_1 = \alpha_1(x, y; t)$ e $\alpha_2 = \alpha_2(x, y; t)$ representam as dispersões populacionais de cada espécie;
- $\mathbb{U} = (U_1(x, y; t), U_2(x, y; t))$ e $\mathbb{W} = (W_1(x, y; t), W_2(x, y; t))$ representam os campos de velocidades possíveis de migração de cada espécie, com $\operatorname{div}(\mathbb{U}) = \operatorname{div}(\mathbb{W}) = 0$;
- $\sigma = \sigma(x, y; t)$ representa a concentração de um poluente no meio, obtida pela resolução numérica da equação (2.1);
- ρ_1 e ρ_2 representam os decaimentos populacionais de cada espécie devido à mortalidade causada pela presença deste poluente;
- a_1 e a_2 representam as taxas de crescimento intrínsecas de cada espécie;
- K representa a capacidade de suporte do meio para as duas espécies;

- δ_1 e δ_2 representam as taxas de relação interespecífica.

Usando argumentos análogos aos da subseção 2.1, neste caso serão considerados \mathbb{U} , \mathbb{W} , α_1 e α_2 constantes. Dessa forma, completando o sistema (3.8) com as condições iniciais e com as condições de contorno Dirichlet homogênea em Γ_0 e von Neumann homogênea em Γ_1 , tem-se

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial P_1}{\partial t} - \alpha_1 \Delta P_1 + U_1 \frac{\partial P_1}{\partial x} + U_2 \frac{\partial P_1}{\partial y} + \rho_1 \sigma P_1 = a_1 P_1 - b_1 P_1^2 - d_1 P_1 P_2 \\ \frac{\partial P_2}{\partial t} - \alpha_2 \Delta P_2 + W_1 \frac{\partial P_2}{\partial x} + W_2 \frac{\partial P_2}{\partial y} + \rho_2 \sigma P_2 = a_2 P_2 - b_2 P_2^2 - d_2 P_1 P_2 \\ (x, y) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2, t \in (0, T] \\ P_1(x, y; 0) = P_{1_0}(x, y), P_2(x, y; 0) = P_{2_0}(x, y) \quad \forall (x, y) \in \Omega \\ P_1|_{\Gamma_0} = P_2|_{\Gamma_0} = 0 \quad \forall t \in (0, T] \\ \frac{\partial P_1}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_1} = \frac{\partial P_2}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_1} = 0 \quad \forall t \in (0, T] \end{array} \right. \quad (3.9)$$

em que $b_1 = \frac{a_1}{K}$, $b_2 = \frac{a_2}{K}$, $d_1 = b_1 + \delta_1$ e $d_2 = b_2 + \delta_2$.

3.2 Formulação variacional

Usando o mesmo argumento que na seção 2, também será tomada como opção a formulação fraca do sistema (3.9) em vez da clássica. Adotando as mesmas

notações da subseção 2.2, o problema aqui torna-se encontrar $P_1, P_2 \in \mathcal{S}$ tais que

$$\left\{ \begin{array}{l} \left(\frac{\partial P_1}{\partial t} | \nu \right) + \alpha_1 (\nabla P_1 | | \nabla \nu) + U_1 \left(\frac{\partial P_1}{\partial x} | \nu \right) + U_2 \left(\frac{\partial P_1}{\partial y} | \nu \right) + \rho_1 (\sigma P_1 | \nu) = \\ = a_1 (P_1 | \nu) - b_1 (P_1^2 | \nu) - d_1 (P_1 P_2 | \nu) \\ \\ \left(\frac{\partial P_2}{\partial t} | \nu \right) + \alpha_2 (\nabla P_2 | | \nabla \nu) + W_1 \left(\frac{\partial P_2}{\partial x} | \nu \right) + W_2 \left(\frac{\partial P_2}{\partial y} | \nu \right) + \rho_2 (\sigma P_2 | \nu) = \\ = a_2 (P_2 | \nu) - b_2 (P_2^2 | \nu) - d_2 (P_1 P_2 | \nu) \\ \\ \forall \nu \in \mathcal{V}. \end{array} \right. \quad (3.10)$$

3.3 Aproximação da solução

Aqui, como na seção anterior, as soluções do sistema (3.10) serão aproximadas nas suas variáveis espaciais através do método de Galerkin e na sua variável temporal através do método de Crank-Nicolson. Considerando o subespaço $\mathcal{V}_h \subset \mathcal{V}$ e a base \mathcal{B} como antes e separando-se as variáveis espaciais da temporal de P_1 e P_2 , têm-se:

$$\begin{aligned} P_1(x, y; t) &\cong P_{1_h}(x, y; t) = \sum_{j=1}^N p_{1_j}(t) \varphi_j(x, y), \\ \frac{\partial P_{1_h}}{\partial t} &= \sum_{j=1}^N \frac{dp_{1_j}}{dt} \varphi_j, \quad \frac{\partial P_{1_h}}{\partial x} = \sum_{j=1}^N p_{1_j} \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \text{ e } \frac{\partial P_{1_h}}{\partial y} = \sum_{j=1}^N p_{1_j} \frac{\partial \varphi_j}{\partial y}; \\ \\ P_2(x, y; t) &\cong P_{2_h}(x, y; t) = \sum_{j=1}^N p_{2_j}(t) \varphi_j(x, y), \\ \frac{\partial P_{2_h}}{\partial t} &= \sum_{j=1}^N \frac{dp_{2_j}}{dt} \varphi_j, \quad \frac{\partial P_{2_h}}{\partial x} = \sum_{j=1}^N p_{2_j} \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \text{ e } \frac{\partial P_{2_h}}{\partial y} = \sum_{j=1}^N p_{2_j} \frac{\partial \varphi_j}{\partial y}, \end{aligned}$$

e para a concentração σ do poluente,

$$\sigma(x, y; t) \cong \sigma_h(x, y; t) = \sum_{j=1}^N u_j(t) \varphi_k(x, y).$$

Agora, aplicando-se o método de Crank-Nicolson nas variáveis temporais de P_1, P_2 e σ , usando-se estas aproximações na formulação variacional (3.10) e arranjando-se os termos convenientemente, obtém-se o sistema

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{C}(\mathbf{p}_1^{(n)}, \mathbf{p}_1^{(n+1)}, \mathbf{p}_2^{(n)}, \mathbf{p}_2^{(n+1)}, \mathbf{u}^{(n)}, \mathbf{u}^{(n+1)}) \mathbf{p}_1^{(n+1)} = \\ = \mathbf{D}(\mathbf{p}_1^{(n)}, \mathbf{p}_1^{(n+1)}, \mathbf{p}_2^{(n)}, \mathbf{p}_2^{(n+1)}, \mathbf{u}^{(n)}, \mathbf{u}^{(n+1)}) \mathbf{p}_1^{(n)} \\ \mathbf{E}(\mathbf{p}_1^{(n)}, \mathbf{p}_1^{(n+1)}, \mathbf{p}_2^{(n)}, \mathbf{p}_2^{(n+1)}, \mathbf{u}^{(n)}, \mathbf{u}^{(n+1)}) \mathbf{p}_2^{(n+1)} = \\ = \mathbf{F}(\mathbf{p}_1^{(n)}, \mathbf{p}_1^{(n+1)}, \mathbf{p}_2^{(n)}, \mathbf{p}_2^{(n+1)}, \mathbf{u}^{(n)}, \mathbf{u}^{(n+1)}) \mathbf{p}_2^{(n)} \end{array} \right. \quad (3.11)$$

em que

$$\begin{aligned} c_{ij} &= \left(1 - a_1 \frac{\Delta t}{2}\right) (\varphi_i | \varphi_j) + \frac{\Delta t}{2} \left\{ \alpha_1 (\nabla \varphi_i | | \nabla \varphi_j) + U_1 \left(\varphi_i \left| \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \right. \right) + U_2 \left(\varphi_i \left| \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \right. \right) + \right. \\ &+ \left. \sum_{k=1}^N \left[b_1 \frac{p_{1_k}^{(n)} + p_{1_k}^{(n+1)}}{2} + d_1 \frac{p_{2_k}^{(n)} + p_{2_k}^{(n+1)}}{2} + \rho_1 \frac{u_k^{(n)} + u_k^{(n+1)}}{2} \right] (\varphi_i | \varphi_j \varphi_k) \right\}, \\ d_{ij} &= \left(1 + a_1 \frac{\Delta t}{2}\right) (\varphi_i | \varphi_j) - \frac{\Delta t}{2} \left\{ \alpha_1 (\nabla \varphi_i | | \nabla \varphi_j) + U_1 \left(\varphi_i \left| \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \right. \right) + U_2 \left(\varphi_i \left| \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \right. \right) + \right. \\ &+ \left. \sum_{k=1}^N \left[b_1 \frac{p_{1_k}^{(n)} + p_{1_k}^{(n+1)}}{2} + d_1 \frac{p_{2_k}^{(n)} + p_{2_k}^{(n+1)}}{2} + \rho_1 \frac{u_k^{(n)} + u_k^{(n+1)}}{2} \right] (\varphi_i | \varphi_j \varphi_k) \right\}, \\ e_{ij} &= \left(1 - a_2 \frac{\Delta t}{2}\right) (\varphi_i | \varphi_j) + \frac{\Delta t}{2} \left\{ \alpha_2 (\nabla \varphi_i | | \nabla \varphi_j) + W_1 \left(\varphi_i \left| \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \right. \right) + W_2 \left(\varphi_i \left| \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \right. \right) + \right. \\ &+ \left. \sum_{k=1}^N \left[b_2 \frac{p_{2_k}^{(n)} + p_{2_k}^{(n+1)}}{2} + d_2 \frac{p_{1_k}^{(n)} + p_{1_k}^{(n+1)}}{2} + \rho_2 \frac{u_k^{(n)} + u_k^{(n+1)}}{2} \right] (\varphi_i | \varphi_j \varphi_k) \right\}, \end{aligned}$$

$$f_{ij} = \left(1 + a_2 \frac{\Delta t}{2}\right) (\varphi_i | \varphi_j) - \frac{\Delta t}{2} \left\{ \alpha_2 (\nabla \varphi_i | \nabla \varphi_j) + W_1 \left(\varphi_i \left| \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} \right. \right) + W_2 \left(\varphi_i \left| \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \right. \right) + \sum_{k=1}^N \left[b_2 \frac{p_{2k}^{(n)} + p_{2k}^{(n+1)}}{2} + d_2 \frac{p_{1k}^{(n)} + p_{1k}^{(n+1)}}{2} + \rho_2 \frac{u_k^{(n)} + u_k^{(n+1)}}{2} \right] (\varphi_i | \varphi_j \varphi_k) \right\},$$

com $i, j = 1, \dots, N$ para cada n . Este sistema será resolvido iterativamente no tempo, a partir das condições iniciais $\mathbf{p}_1^{(0)}$ e $\mathbf{p}_2^{(0)}$ pontualmente fornecidas ou dadas implicitamente por

$$\sum_{j=1}^N p_{1j}^{(0)} (\varphi_j | \varphi_i) = (P_{1_0} | \varphi_i) \text{ e } \sum_{j=1}^N p_{2j}^{(0)} (\varphi_j | \varphi_i) = (P_{2_0} | \varphi_i).$$

4. Implementação computacional

Na implementação computacional dos sistemas referentes a (2.7) e (3.11), o domínio espacial foi discretizado através de elementos finitos triangulares de segunda ordem. Os esquemas algorítmicos montados para a resolução numérica desses dois sistemas[†] são análogos, salvo que no último sistema, em virtude do surgimento de termos variáveis nas matrizes do sistema (que são sobrescritos a cada iteração temporal), serão feitas duas iteração internas a cada passo no tempo, caracterizando-se assim um método preditor-corretor que tende a uma aproximação da ordem de $(\Delta t)^2$ conforme se aumentam as iterações (ver: Meyer, 1988). Este processo é feito da seguinte maneira:

- obtém-se $\mathbf{p}_1^{(*)}$ e $\mathbf{p}_2^{(*)}$ a partir de

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{C}(\mathbf{p}_1^{(n)}, \mathbf{p}_1^{(n)}, \mathbf{p}_2^{(n)}, \mathbf{p}_2^{(n)}, \mathbf{u}^{(n)}, \mathbf{u}^{(n+1)}) \mathbf{p}_1^{(*)} = \\ = \mathbf{D}(\mathbf{p}_1^{(n)}, \mathbf{p}_1^{(n)}, \mathbf{p}_2^{(n)}, \mathbf{p}_2^{(n)}, \mathbf{u}^{(n)}, \mathbf{u}^{(n+1)}) \mathbf{p}_1^{(n)} \\ \mathbf{E}(\mathbf{p}_1^{(n)}, \mathbf{p}_1^{(*)}, \mathbf{p}_2^{(n)}, \mathbf{p}_2^{(n)}, \mathbf{u}^{(n)}, \mathbf{u}^{(n+1)}) \mathbf{p}_2^{(*)} = \\ = \mathbf{F}(\mathbf{p}_1^{(n)}, \mathbf{p}_1^{(*)}, \mathbf{p}_2^{(n)}, \mathbf{p}_2^{(n)}, \mathbf{u}^{(n)}, \mathbf{u}^{(n+1)}) \mathbf{p}_2^{(n)}; \end{array} \right.$$

[†]Neste trabalho, os algoritmos foram programados em ambiente *Matlab*

- depois obtém-se $\mathbf{p}_1^{(n+1)}$ e $\mathbf{p}_2^{(n+1)}$ a partir de

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{C}(\mathbf{p}_1^{(n)}, \mathbf{p}_1^{(*)}, \mathbf{p}_2^{(n)}, \mathbf{p}_2^{(*)}, \mathbf{u}^{(n)}, \mathbf{u}^{(n+1)})\mathbf{p}_1^{(n+1)} = \\ = \mathbf{D}(\mathbf{p}_1^{(n)}, \mathbf{p}_1^{(*)}, \mathbf{p}_2^{(n)}, \mathbf{p}_2^{(*)}, \mathbf{u}^{(n)}, \mathbf{u}^{(n+1)})\mathbf{p}_1^{(*)} \\ \mathbf{E}(\mathbf{p}_1^{(n)}, \mathbf{p}_1^{(n+1)}, \mathbf{p}_2^{(n)}, \mathbf{p}_2^{(*)}, \mathbf{u}^{(n)}, \mathbf{u}^{(n+1)})\mathbf{p}_2^{(n+1)} = \\ = \mathbf{F}(\mathbf{p}_1^{(n)}, \mathbf{p}_1^{(n+1)}, \mathbf{p}_2^{(n)}, \mathbf{p}_2^{(*)}, \mathbf{u}^{(n)}, \mathbf{u}^{(n+1)})\mathbf{p}_2^{(*)}. \end{array} \right.$$

Outro detalhe a ser observado é o cálculo do parâmetro σ . No programa usado nas simulações, é considerado $\mathbf{u}^{(n)} = \frac{\mathbf{c}^{(n)}}{\|\mathbf{c}^{(n)}\|}$, numa tentativa de se ter um bom tratamento numérico em relação à concentração do poluente em cada instante de tempo.

Para o problema do poluente, deve-se pontuar que o domínio em estudo é de baixa circulação, produzindo efeitos residuais a médio e longo prazos.

5. Resultados da simulações

Tabela 1: Parâmetros usados nas simulações da dispersão de um poluente na lagoa e seu efeito sobre o convívio de duas espécies competidoras

Parâmetros	Valores	Parâmetros	Valores
α_c	0.75	σ_c	0.001
α_1	0.05	α_2	0.025
U_1	0.0	U_2	0.01
W_1	0.0	W_2	0.0
ρ_1	0.05	ρ_2	0.02
δ_1	1.5×10^{-6}	δ_2	10^{-6}
a_1	0.004	a_2	0.005
K	20	Δt	0.25

Os parâmetros utilizados nas simulações deste trabalho foram baseados em

SOSSAE (2003), porém fizeram-se algumas modificações com o intuito de serem sugeridas outras prováveis situações.

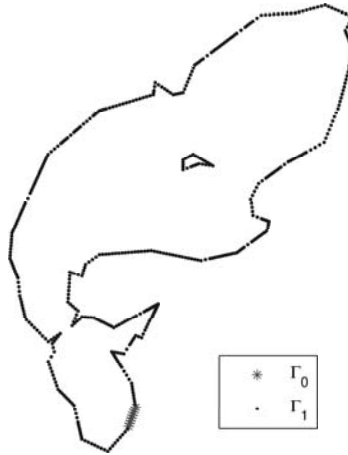


Figura 1: Determinação das fronteiras

Para simular uma distribuição inicial da concentração do polente na lagoa, foram escolhidos alguns nós próximos a uma porção da margem, sugerindo uma descarga do material impactante tóxico advinda das plantações de arroz nos seus arredores, como mostra a figura 2. As densidades populacionais iniciais P_{1_0} e P_{2_0} das duas espécies (*chajá* e jacaré, respectivamente) foram consideradas distribuídas de forma homogênea em todo o domínio, respeitando as condições de contorno e assumindo valores pontuais iguais a 1.

Na figura 3 pode-se perceber claramente o efeito difusivo-advectivo na evolução do material impactante. Nas primeiras 1000 iterações pode-se ver (figura 4) que a espécie 1 começa a sofrer mais com os danos causados pela presença do poluente que a espécie 2, resultado numérico influenciado pela diferença entre os parâmetros ρ_1 e ρ_2 , que indicam os decaimentos proporcionais das densidades populacionais das duas espécies.

Efetuada todas as 3000 iterações, o que corresponde a um tempo final de 750 unidades de tempo, pode-se perceber agora a influência de todos os parâmetros

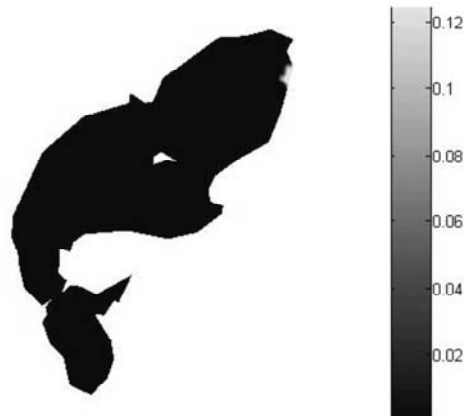


Figura 2: Distribuição inicial da concentração do poluente na lagoa

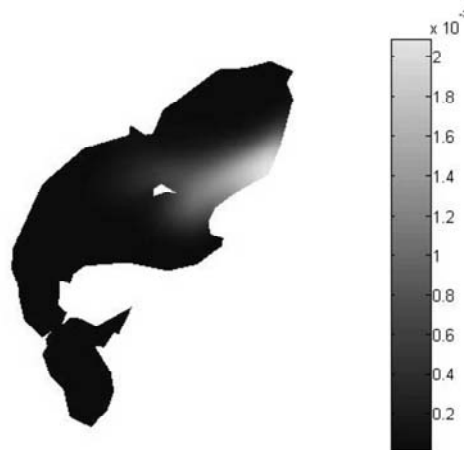


Figura 3: Distribuição da concentração do poluente na lagoa após 1000 iterações

do modelo no resultado final (figuras 5, 6, 7 e 8). As regiões onde se tem uma menor densidade populacional da espécie 1, são justamente aquelas onde se tem maior densidade populacional da espécie 2 – desse modo a competição interespecífica influenciando negativamente na dinâmica populacional – e por onde houve

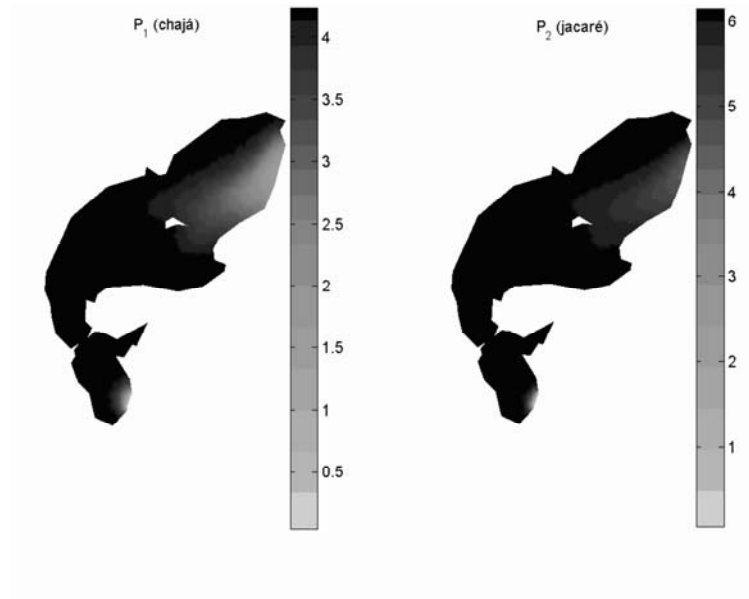


Figura 4: Distribuição das densidades populacionais das duas espécies na lagoa após 1000 iterações

a passagem do poluente. Por outro lado, as regiões onde se tem maior densidade populacional da espécie 1 se situam ao norte da lagoa – efeito da característica de migração, entre outros – e na “ponta” a sudeste, onde não se teve a presença expressiva do material impactante tóxico em nenhum instante.

Três nós da malha foram escolhidos a fim de serem observados os fenômenos do comportamento evolutivo do material impactante e seu efeito nas duas espécies-chave da lagoa nas regiões do domínio que compreendem esses nós (figuras 9 e 10).

6. Conclusões

É reconhecido o risco e o resultado muitas vezes fatal decorrente de um material impactante que afeta de modo irreversível o delicado e instável equilíbrio do convívio de duas espécies. No caso de espécies-chave, cuja presença e cuja permanência são essenciais na estabilidade do ecossistema, experimentos não podem

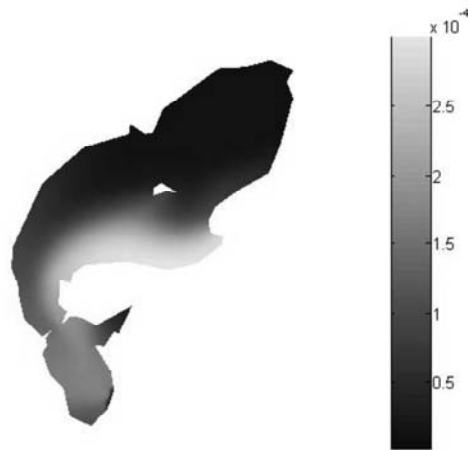


Figura 5: Distribuição final da concentração do poluente na lagoa (após 3000 iterações)

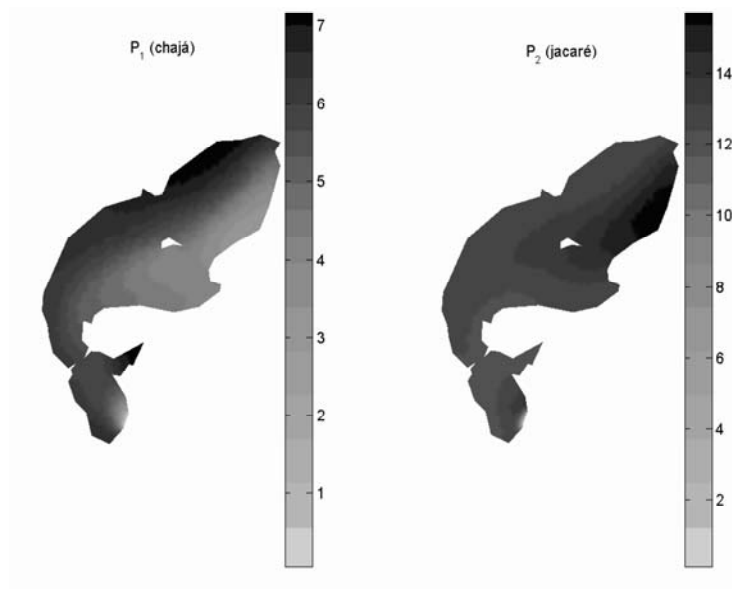


Figura 6: Distribuição final das densidades populacionais das duas espécies na lagoa (após 3000 iterações)

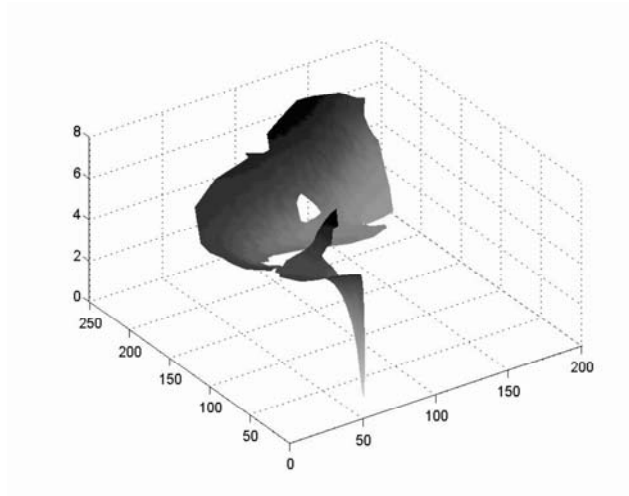


Figura 7: Visualização 3D da distribuição final da densidade populacional da espécie 1 (*chajá*) na lagoa (após 3000 iterações)

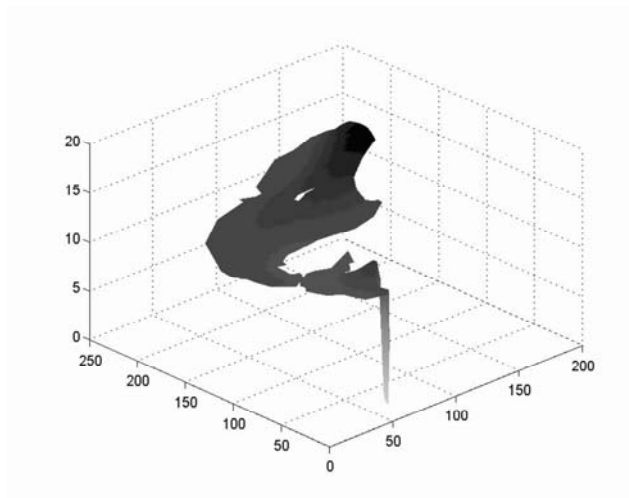


Figura 8: Visualização 3D da distribuição final da densidade populacional da espécie 2 (*jacaré*) na lagoa (após 3000 iterações)

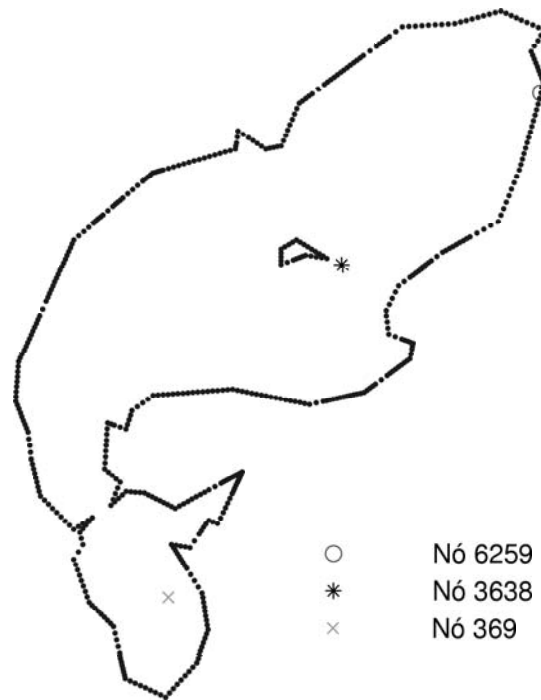


Figura 9: Localização dos nós 6259, 3638 e 369

ser feitos a não ser em condições muito restritas. No sentido de permitir reduzir o número de diferentes experimentos, e suas replicações, o que foi proposto neste trabalho é a elaboração de um programa que simule essa situação, permitindo reduzir a um mínimo as experiências de campo.

Este trabalho traz uma inovação, simples porém contundente, na proposta de modelagem matemática para os fenômenos que foram estudados. O uso de uma mesma capacidade de suporte para populações de espécies-chave de um ecossistema não visa simplesmente facilitar os cálculos, ou tornar o modelo útil apenas do ponto de vista qualitativo. O objetivo deste estudo foi mesmo descrever de modo mais

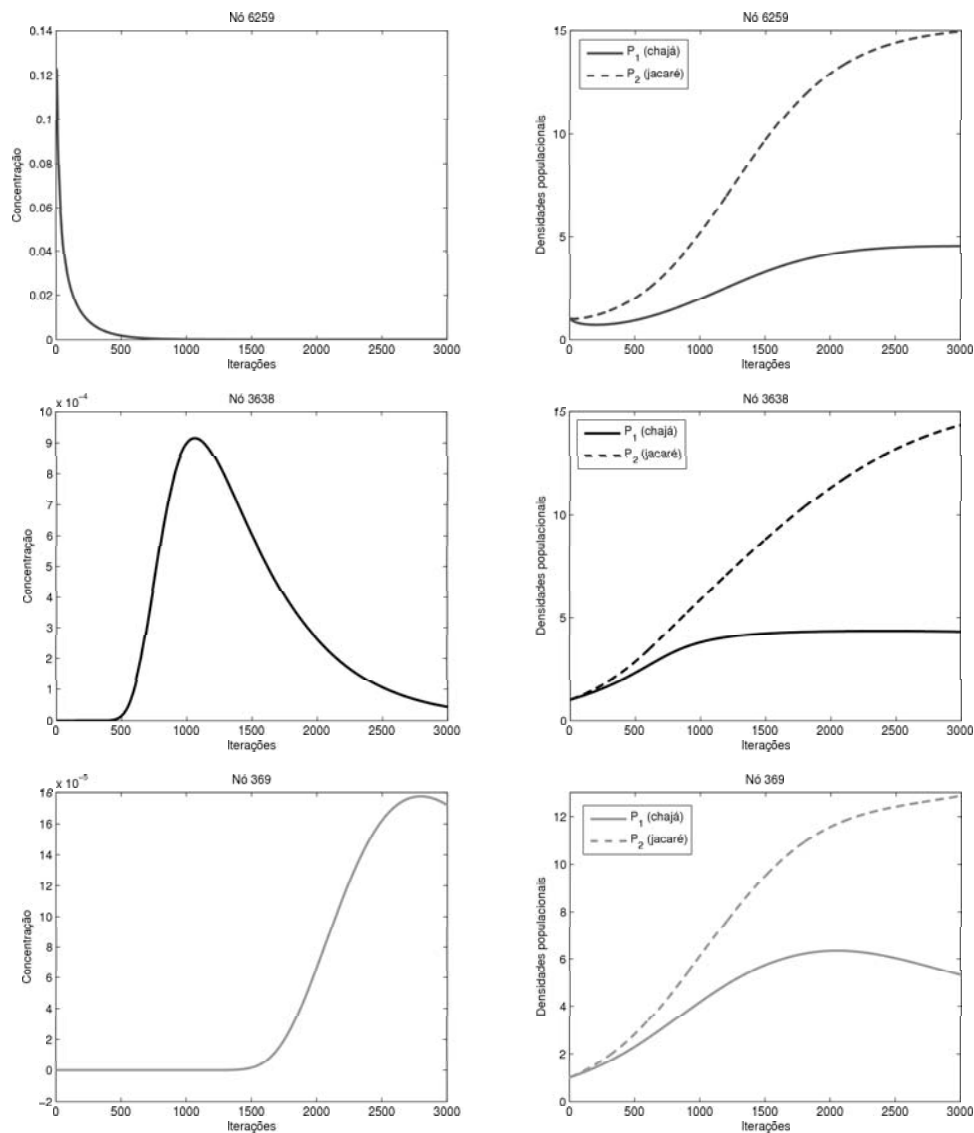


Figura 10: Acompanhamento pontual do comportamento evolutivo do material impactante tóxico e seu efeito nas duas espécies-chave da lagoa

preciso[‡] o convívio entre as espécies, considerando-se assim o máximo de hipóteses

[‡]Faz-se reconhecer aqui as limitações do uso deste termo e da ambição desse objetivo

que excluem o tratamento isolado de cada uma.

Referências

- Bernardes, M. (1998). *Poluição em corpos aquáticos de baixa circulação: Modelagem e simulação numérica*. Dissertação de Mestrado, IMECC–UNICAMP, Campinas/SP.
- Cantão, R. e D’Afonseca, L. A. (1998). Produção interna do grupo de biomatemática em matlab.
- 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.
- Edelstein-Keshet, L. (1988). *Mathematical Models in Biology*. SIAM/Random-House, New York.
- Gantes, P., Caro, A. S., Momo, F., Casset, M. A., e Torremorel, A. (2005). An approximation to the nitrogen and phosphorus budgets in floating soils of a subtropical peatland (Iberá, Argentina). *Ecological Modelling*, 186 (1):77–83.
- Marchuk, G. I. (1986). *Mathematical models in environmental problems*, volume 16 of *Studies in Mathematics and its Applications*. North-Holland, Amsterdam.
- Meyer, J. F. C. A. (1988). *Modelagem e simulação numérica do transiente térmico em meios compostos*. Tese de Doutorado, IMECC–UNICAMP, Campinas/SP.
- Meyer, J. F. C. A., Sossae, R. C., Loiselle, S., e Rossi, C. (1999). Mathematical modeling and numerical simulation of space-dependent multispecies interactions. *Annals of New York Academy of Sciences*, 879:440–443.
- Mistro, D. C. (1992). *O problema de poluição em rios por mercúrio metálico: modelagem e simulação*. Dissertação de Mestrado, IMECC–UNICAMP, Campinas/SP.
- Murray, J. D. (1989). *Mathematical Biology*. Springer, Heidelberg.

- Okubo, A. (1980). *Diffusion and Ecological Problems: Mathematical Models*. Springer, Berlin.
- Sossae, R. C. (2003). *A presença evolutiva de um material impactante e seu efeito no transiente populacional de espécies interativas: modelagem e aproximação*. Tese de Doutorado, IMECC-UNICAMP, Campinas/SP.
- Vásquez, J. C. S. (2005). *Comportamento evolutivo de descarga de água de produção decorrente de atividade off-shore: tratamento numérico e simulação computacional*. Tese de Doutorado, IMECC-UNICAMP, Campinas/SP.