



Universidade Federal da Paraíba  
Centro de Informática  
Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional

MODELAGEM BIDIMENSIONAL DA DINÂMICA E ESPALHAMENTO DE  
MOSQUITOS SELVAGENS E TRANSGÊNICOS

Marlos Antônio Pinheiro Rolim

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional, UFPB, da Universidade Federal da Paraíba, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Modelagem Matemática e Computacional.

Orientadores: Antônio José Boness dos Santos  
Ana Paula Pintado Wyse

João Pessoa  
Fevereiro de 2019

**Catálogo na publicação**  
**Seção de Catalogação e Classificação**

R748m Rolim, Marlos Antônio Pinheiro.

Modelagem bidimensional da dinâmica e espalhamento de mosquitos selvagens e transgênicos / Marlos Antônio Pinheiro Rolim. - João Pessoa, 2019.

96 f. : il.

Orientação: Antônio José Boness dos Santos.

Coorientação: Ana Paula Pintado Wyse.

Dissertação (Mestrado) - UFPB/Informática.

1. Decomposição de Operadores. 2. Mosquitos Transgênicos. 3. Sistema de Reação-difusão. I. Santos, Antônio José Boness dos. II. Título.

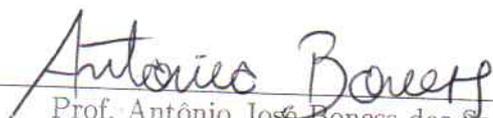
UFPB/BC

MODELAGEM BIDIMENSIONAL DA DINÂMICA E ESPALHAMENTO DE  
MOSQUITOS SELVAGENS E TRANSGÊNICOS

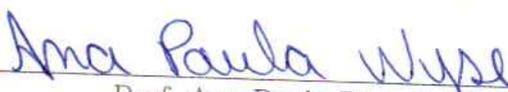
Marlos Antônio Pinheiro Rolim

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO PROGRAMA DE  
PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL  
(PPGMMC) DO CENTRO DE INFORMÁTICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL  
DA PARAÍBA COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A  
OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM MODELAGEM  
MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL.

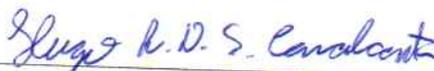
Examinada por:



Prof. Antônio José Boness dos Santos, D.Sc.



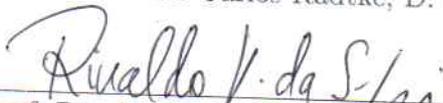
Prof. Ana Paula Pintado Wyse, D. Sc.



Prof. Hugo Leonardo Davi de Souza Cavalcante, D.Sc.



Prof. Luiz Carlos Radtke, D. Sc.



Prof. Rinaldo Vieira Da Silva Junior, D.Sc.

JOÃO PESSOA, PB - BRASIL  
FEVEREIRO DE 2019

*Dedico este trabalho a minha  
querida mãe, Eleide Pinheiro dos  
Santos Rolim.*

# Agradecimentos

Quero agradecer primeiramente a Deus pelo dom da vida, pelo dom da sabedoria, por me dar saúde, por estar sempre presente e por me fazer perseverar na fé.

Ao meu pai Manoel de Carvalho Rolim, que já não está mais presente neste mundo, mas que hoje tenho a convicção de que ele está descansando e feliz com essa grande conquista.

A minha mãe Eleide Pinheiro dos Santos Rolim que, junto ao meu pai, me deu uma educação familiar maravilhosa.

Aos meus irmãos, Cássio Murilo Pinheiro Rolim e Severino de Carvalho Rolim e às minhas irmãs Alba Pinheiro Rolim e Amanda Pinheiro Rolim, por me incentivar e dar todas as condições possíveis para que eu pudesse conseguir este nível acadêmico.

Gostaria de agradecer aos meus orientadores, Ana Paula Pintado Wyse e Antônio José Boness dos Santos, por terem me ajudado a elaborar este trabalho. Deixo aqui meu respeito, carinho e admiração. Sou muito grato por todo o aprendizado.

Ao CAPES pelo apoio financeiro.

Quero também dirigir meu agradecimento ao professor Hugo Leonardo Davi de Souza Cavalcante, ao professor Luiz Carlos Radtke e ao professor Rinaldo Vieira da Silva Júnior, que gentilmente aceitaram compor a banca examinadora. E a todos os professores do Programa de Pós-graduação em Modelagem Matemática e Computacional - PPGMMC.

Gostaria de agradecer aos meus grandes amigos Aline Costa de Meneses, José Aluísio da Silva, Evilasio Macedo Felix, Rita de Cássia Jerônimo da Silva e Wilson Salustiano Júnior pelas inúmeras sugestões que contribuíram de alguma forma no desenvolvimento deste trabalho. Além de agradecer pela convivência e amizade durante os dois anos de mestrado.

Por fim, mas não menos importante, gostaria de agradecer a todas as outras pessoas da minha família e a todas as pessoas que, de alguma forma, contribuíram para a minha formação acadêmica.

Resumo da Dissertação apresentada ao PPGMMC/CI/UFPB como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

## MODELAGEM BIDIMENSIONAL DA DINÂMICA E ESPALHAMENTO DE MOSQUITOS SELVAGENS E TRANSGÊNICOS

Marlos Antônio Pinheiro Rolim

Fevereiro/2019

Orientadores: Antônio José Boness dos Santos

Ana Paula Pintado Wyse

Programa: Modelagem Matemática e Computacional

Neste trabalho, apresentamos a modelagem da dinâmica da interação entre populações de mosquitos selvagens e transgênicos e seu espalhamento em um domínio espacial bidimensional. Para isso, as subpopulações são classificadas de acordo com a sua zigosidade: selvagens, transgênicos heterozigotos e transgênicos homozigotos, que interagem por meio de acasalamento e competição por recursos. As linhagens obtidas do acasalamento entre essas três variedades estão de acordo com a genética clássica Mendeliana. Este modelo está sendo representado por um sistema de equações diferenciais parciais do tipo reação-difusão, onde o termo de reação é fortemente não-linear. Para resolvê-lo numericamente, desacoplamos os operadores de difusão e reação do sistema, através de uma técnica de decomposição de operadores sequencial e aplicamos o método dos elementos finitos na resolução do sistema difusivo e o método de Runge-Kutta de quarta ordem ao sistema associado à reação. Simulações numéricas são apresentadas mostrando a potencialidade da aplicação do modelo.

**Palavras-chave:** Decomposição de Operadores. Mosquitos Transgênicos. Sistema de Reação-difusão.

Abstract of Dissertation presented to PPGMMC/CI/UFPB as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

TWO-DIMENSIONAL MODELING OF THE DYNAMICS AND SPREAD OF  
WILD AND TRANSGENIC MOSQUITOES

Marlos Antônio Pinheiro Rolim

February/2019

Advisors: Antônio José Boness dos Santos

Ana Paula Pintado Wyse

Program: Computational Mathematical Modelling

In this work, we present the modeling of the dynamics of the interaction between wild and transgenic mosquito populations and their spread in a two-dimensional spatial domain. For this, the subpopulations are classified according to their zygosity: wild, heterozygotes and homozygotes transgenic, which interact by mating and competition for resources. The lineages obtained from mating between these three varieties are in agreement with classical Mendelian genetics. This model is represented by a reaction-diffusion system, where reaction term is strongly non-linear. To solve this system, we decouple the diffusion and reaction operators, using the sequential operator decomposition technique and apply the finite elements method to solve the diffusive system, and fourth-order Runge-Kutta to solve the system associated with the reaction. Numerical simulations are presented showing the potential of the model application.

**keywords:** Operator Splitting. Reaction-diffusion system. Transgenic mosquitoes.

# Sumário

<b>Lista de Figuras</b>	<b>x</b>
<b>Lista de Tabelas</b>	<b>xiii</b>
<b>Lista de Símbolos</b>	<b>xiv</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2 Revisão Bibliográfica</b>	<b>4</b>
2.1 Modelos Clássicos da Dinâmica Populacional . . . . .	4
2.1.1 Modelo de Malthus . . . . .	5
2.1.2 Modelo de Verhulst . . . . .	8
2.2 Espalhamento Bidimensional de Populações . . . . .	13
2.3 Equação de Fisher . . . . .	15
<b>3 Modelagem da Interação entre Mosquitos Selvagens e Transgênicos</b>	<b>18</b>
3.1 Modelo Bidimensional da Dinâmica e Espalhamento de Mosquitos Selvagens e Transgênicos . . . . .	18
<b>4 Formulação Numérica</b>	<b>24</b>
4.1 Algoritmo de Resolução . . . . .	24
4.2 Procedimento para Resolução do Problema (I) . . . . .	26
<b>5 Resultados</b>	<b>32</b>
5.1 Experimentos Preliminares . . . . .	32
5.2 Experimentos da Região Real . . . . .	38
5.2.1 Região do Reservatório da Usina Hidrelétrica . . . . .	38
5.2.2 Procedimento Computacional . . . . .	41
5.2.3 Simulação Computacional: domínio regular . . . . .	42
5.2.4 Simulação Computacional: domínio irregular . . . . .	53
<b>6 Considerações Finais</b>	<b>67</b>

<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>69</b>
<b>A Mapeamento Isoparamétrico</b>	<b>74</b>
<b>B Método de Runge-Kutta</b>	<b>79</b>

# Lista de Figuras

2.1	Solução para o modelo de Malthus em um intervalo de tempo $I = [0, 10]$ para $\lambda > 0$ , $\lambda = 0$ e $\lambda < 0$ e condições iniciais $P(0) = 2$ , $P(0) = 100$ e $P(0) = 200$ , respectivamente. . . . .	7
2.2	Campo vetorial para o modelo de Verhulst. . . . .	11
2.3	Solução analítica para o modelo de Verhulst em um intervalo de tempo $I = [0, 10]$ , com $r = 0,5$ , $k = 500$ , populações iniciais $P(0)$ com valores de 100, 200, 300, 500, 550 e 800 indivíduos. . . . .	12
5.1	População de mosquitos selvagens do Experimento 1, com condições iniciais (5.1), após 13 semanas, representada por curvas de nível (a) e perspectiva espacial (b). . . . .	34
5.2	População de mosquitos transgênicos heterozigotos do Experimento 1, com condições iniciais (5.1), após 13 semanas, representada por curvas de nível (a) e perspectiva espacial (b). . . . .	35
5.3	População de mosquitos transgênicos homozigotos do Experimento 1, com condições iniciais (5.1), após 13 semanas, representada por curvas de nível (a) e perspectiva espacial (b). . . . .	35
5.4	População de mosquitos selvagens do Experimento 2, com condições iniciais (5.3), após 13 semanas, representada por curvas de nível (a) e perspectiva espacial (b). . . . .	37
5.5	População de mosquitos transgênicos heterozigotos do Experimento 2, com condições iniciais (5.4), após 13 semanas, representada por curvas de nível (a) e perspectiva espacial (b). . . . .	37
5.6	População de mosquitos transgênicos homozigotos do Experimento 2, com condições iniciais (5.5), após 13 semanas, representada por curvas de nível (a) e perspectiva espacial (b). . . . .	38
5.7	Área de estudo . . . . .	39
5.8	Imagem georreferenciada . . . . .	40
5.9	Mapa com a probabilidade de contato com o mosquito durante a fase de enchimento do reservatório. . . . .	41
5.10	Área de estudo de $\Omega = [0, 10] \times [0, 10]$ km <sup>2</sup> . . . . .	42

5.11	Desenho das subregiões da região regular 1. . . . .	43
5.12	Malha para a região regular. . . . .	44
5.13	População de mosquitos selvagens na região de interesse nos tempos $T = 1$ (a), $T = 2$ (b), $T = 4$ (c), $T = 6$ (d), $T = 8$ (e) e $T = 10$ (f). . .	48
5.14	População de mosquitos selvagens na região de interesse com o tempo $T = 10$ semanas, vista sob uma perspectiva espacial.. . . .	49
5.15	População de mosquitos transgênicos heterozigotos na região de in- teresse com os tempos $T = 1$ (a), $T = 2$ (b), $T = 4$ (c), $T = 6$ (d), $T = 8$ (e) e $T = 10$ (f). . . . .	50
5.16	População de mosquitos transgênicos heterozigotos na região de in- teresse com o tempo $T = 10$ semanas, vista sob uma perspectiva espacial. . . . .	51
5.17	População de mosquitos transgênicos homozigotos na região de inte- resse com os tempos $T = 1$ (a), $T = 2$ (b), $T = 4$ (c), $T = 6$ (d), $T = 8$ (e) e $T = 10$ (f). . . . .	52
5.18	População de mosquitos transgênicos homozigotos na região de inte- resse com o tempo $T = 10$ semanas, vista sob uma perspectiva espacial. 53	
5.19	Área de estudo de $\Omega$ . . . . .	54
5.20	Desenho das subregiões do domínio irregular, de acordo com a cober- tura vegetal. . . . .	55
5.21	Malha para o domínio irregular. . . . .	56
5.22	População de mosquitos selvagens na região de interesse com o tempo $T = 1$ semana. . . . .	58
5.23	População de mosquitos transgênicos heterozigotos na região de inte- resse com o tempo $T = 1$ semana. . . . .	58
5.24	População de mosquitos transgênicos homozigoto na região de inte- resse com o tempo $T = 1$ semana. . . . .	59
5.25	População de mosquitos selvagens na região de interesse com o tempo $T = 5$ semanas. . . . .	60
5.26	População de mosquitos transgênicos heterozigotos na região de inte- resse com o tempo $T = 5$ semanas. . . . .	60
5.27	População de mosquitos transgênicos homozigoto na região de inte- resse com o tempo $T = 5$ semanas. . . . .	61
5.28	População de mosquitos selvagens na região de interesse com o tempo $T = 10$ semanas. . . . .	62
5.29	População de mosquitos selvagens na região de interesse com o tempo $T = 10$ semanas, vista sob uma perspectiva espacial. . . . .	62
5.30	População de mosquitos transgênicos heterozigotos na região de inte- resse com o tempo $T = 10$ semanas. . . . .	63

5.31	População de mosquitos transgênicos heterozigotos na região de interesse com o tempo $T = 10$ semanas, vista sob uma perspectiva espacial. . . . .	64
5.32	População de mosquitos transgênicos homozigoto na região de interesse com o tempo $T = 10$ semanas. . . . .	65
5.33	População de mosquitos transgênicos homozigoto na região de interesse com o tempo $T = 10$ semanas, vista sob uma perspectiva espacial. . . . .	65
A.1	Parametrização de um elemento. . . . .	75
A.2	Parametrização de um elemento. . . . .	76
B.1	Soluções gráficas do experimento 1 para a população de mosquitos selvagens, transgênicos heterozigotos e transgênicos homozigotos, obtidas através do método de Runge-Kutta de quarta ordem. . . . .	82

# Lista de Tabelas

3.1	Quadro de Punnett. . . . .	20
3.2	Quadros de Punnett para os cruzamentos $u_i \times u_j$ , $i, j = 1, 2, 3$ . . . . .	21
5.1	Dados utilizados para a resolução do modelo proposto para os Experimentos 1 e 2. . . . .	33
5.2	Dados utilizados para a simulação do modelo proposto para a região regular localizada no entorno da APM-Manso. . . . .	46
5.3	Dados utilizados para a simulação do modelo proposto no entorno da APM-Manso. . . . .	57

# Lista de Símbolos

$\dot{()}$	Derivada temporal, p. 24
$\bar{u}_i$	Valor prescrito na condição de contorno, p. 19
$\hat{u}_i$	Condições iniciais do modelo proposto, p. 19
$\tilde{u}_i$	Solução aproximada do <b>Problema (I)</b> , para $i = 1, 2$ e $3$ , p. 22
$A$	Gene dominante, p. 16
$AA$	Homozigoto dominante, p. 16
$Aa$	Heterozigoto, p. 16
$C^j$	Classe de funções que possuem a $j$ -ésima derivada contínua, p. 23
$D$	Coefficiente de difusão, $D \in \mathbb{R}$ , p. 13
$\mathbf{F}$	Vetor fonte ou sumidouro, p. 27
$H$	Espaço de Hilbert, p. 23
$I$	Intervalo de discretização, p. 5
$I_n$	Partição do intervalo $I$ , p. 22
$\mathbf{J}$	Fluxo dos mosquitos em $\mathbb{R}^2$ , p. 12
$\mathbf{K}$	Matriz de rigidez global, p. 27
$L^p$	Espaço das funções $p$ -integráveis, p. 23
$\mathbf{M}$	Matriz de massa global, p. 27
$\mathcal{M}$	Taxa de mortalidade da população $P$ , p. 6
$\mathcal{N}$	Taxa de natalidade da população $P$ , p. 6
$P$	População total, p. 5

$P_0$	População inicial, p. 5
$P_q$	Funções lagrangeanas bidimensionais de grau $q$ em cada elemento, p. 26
$P^*$	Ponto crítico da população $P$ , p. 9
$\bar{P}_0$	Condição inicial da população $P$ , p. 14
$\bar{P}$	Valor prescrito na condição de contorno para população $P$ , p. 13
$T$	Tempo final, p. 5
$U$	Conjunto de funções admissíveis, p. 24
$U_h$	Conjunto das funções teste, p. 25
$V$	Espaço das variações, p. 24
$V_h$	Espaço das funções peso, p. 25
$\Omega$	Região aberta e limitada, p. 12
$\bar{\Omega}$	Feixo de $\Omega$ , p. 12
$\Omega_e$	Subregião de $\Omega$ , p. 25
$\Gamma$	Fronteira de $\Omega$ , p. 12
$\Gamma_e$	Fronteira de $\Omega_e$ , p. 68
$\Gamma_D$	Região de $\Gamma$ com condição de contorno de Dirichlet, p. 12
$\Gamma_N$	Região de $\Gamma$ com condição de contorno de Neumann, p. 12
$\delta_1$	Taxa de mortalidade ocasionada por razões naturais, p. 16
$\delta_2$	Taxa de mortalidade devido a ação de predadores, p. 16
$\delta$	Taxa de mortalidade total, p. 17
$\theta$	Constante, $\theta \in \mathbb{R}$ , p. 18
$\lambda$	Taxa de crescimento $\lambda \in \mathbb{R}$ da população $P$ , p. 6
$\xi$	Taxa de recrutamento de mosquitos para a fase adulta, p. 16
$\varphi$	Funções de forma, p. 26

$\psi$	Função incremento para o método de Runge-Kutta, p. 73
$\varphi^e$	Funções de forma locais, p. 27
$\omega$	Parâmetro que define o método de diferenças finitas, p. 27
$\mathbb{R}$	Conjunto dos números reais, p. 5
$\mathbb{R}_+$	Conjuntos dos número reais positivos, p. 5
$\nabla(\cdot)$	Gradiente da concentração, p. 13
$\Delta t$	Incremento de tempo, p. 6
$a_i$	Frequência genotípica para os mosquitos selvagens, com $i = 1, 2$ e $3$ , p. 18
$b_i$	Frequência genotípica para os mosquitos heterozigotos, com $i = 1, 2, 3$ e $4$ , p. 19
$c_i$	Frequência genotípica para os mosquitos homozigotos, com $i = 1, 2$ e $3$ , p. 19
$a$	Gene recessivo, p. 16
$aa$	Homozigoto recessivo, p. 16
$f$	Função que relaciona os indivíduos da população $P$ , p. 5
$g$	Função que representa a ação de fatores externos sobre a população $P$ , p. 11
$h$	Discretização espacial, p. 25
$k$	Capacidade de suporte, p. 9
$\mathbf{n}$	Vetor normal, p. 12
$n_e$	Número total de elementos, p. 67
$r$	Taxa intrínseca de crescimento, p. 9
$t$	Instante de tempo, p. 5
$t_0$	Instante de tempo inicial, p. 22
$u_1$	População de mosquitos selvagens, p. 17
$u_2$	População de mosquitos transgênicos heterozigotos, p. 17

$u_3$	População de mosquitos transgênicos homozigotos, p. 17
$x$	Coordenada do eixo das abscissas, p. 12
$y$	Coordenada do eixo das ordenadas, p. 12

# Capítulo 1

## Introdução

Doenças transmitidas por mosquitos, principalmente febre amarela, dengue, zika e malária, vêm se tornando cada vez mais motivo de preocupação para a sociedade devido às altas taxas de incidência. Regiões de clima tropical são as mais propensas ao acometimento destas doenças pois têm ao seu favor o fato de que temperaturas e pluviosidade elevadas geram o ambiente propício para a formação dos criadouros dos mosquitos. Ademais, as precárias condições de habitação e saneamento básico possibilitam condições ideais para a proliferação dos mosquitos e consequente ocorrência dessas doenças. Diante disso, a busca pelo desenvolvimento de tecnologias e ações que promovam soluções eficazes para a redução da população de mosquitos tem se intensificado nos centros de pesquisa.

A manipulação genética de mosquitos tem sido uma questão de interesse de muitos grupos de pesquisa, e vem tornando viável a obtenção de mosquitos geneticamente modificados refratários a doenças. A idéia é que estes mosquitos acasalem com os mosquitos selvagens, fixando na população o transgene que bloqueia o ciclo do protozoário no mosquito.

A modificação genética de mosquitos transmissores da malária, por exemplo, tem sido desenvolvida com sucesso. O primeiro mosquito do gênero *Anopheles* refratário a malária foi desenvolvido em 2002 usando uma técnica desenvolvida por Catteruccia et al. [15]. A partir dessa técnica, dois tipos de modificações genéticas foram testadas para os mosquitos *Anopheles stephensi* usando o promotor CP (carboxypeptidase) [27]. A primeira modificação usava um peptídeo sintético SM1 (salivary gland and midgut binding peptide 1), que impossibilita o desenvolvimento do parasita enquanto ele está presente no mosquito, deixando-o inofensivo. O outro expressando a enzima PLA2 (phospholipase A2), presente em veneno das abelhas [36], que impede o reconhecimento dos receptores do epitélio intestinal dos insetos pelos acinetos [35]. A modificação genética com SM1 mostrou ser estável e não altera o fitness do *Anopheles stephensi* [27]. Recentemente, Gantz e Bier [21] desenvolveram o método MCR (Mutagenic Chain Reaction) baseado na tecnologia

CRISPR-Cas9 (Clustered Regularly Interspaced Short Palindromic Repeats). Esta metodologia foi testada em *Drosophila melanogaster* [21] e *Anopheles stephensi* [22], implicando em uma edição do genoma, de forma que a deleção do gene selvagem em heterozigotos dê lugar a replicação do transgene, transformando assim indivíduos transgênicos heterozigotos em homozigotos ainda na fase larval.

Com as técnicas de manipulação genética cada vez mais avançadas, surge a necessidade de modelos matemáticos que descrevam de maneira minimamente precisa como se dá a interação entre populações de mosquitos selvagens e transgênicos e seu espalhamento em regiões propensas a doenças. Na literatura especializada, podemos encontrar desde modelos dinâmicos mais simples, como a interação entre os mosquitos selvagens e transgênicos descrita por um sistema discreto e sem distinção de zigosidade [31], até versões mais complexas, como o proposto por Diaz et al. [16] que diferencia as capacidades de sobrevivência e reprodução dos mosquitos selvagens e transgênicos além de levar em conta a zigosidade dos transgênicos, ou ainda o modelo proposto por Wyse et al. [53] que considera a zigosidade dos mosquitos transgênicos e as populações em valores absolutos, preservando todos os parâmetros envolvidos no processo e considerando uma dinâmica sazonal tomada em função da variação anual de pluviosidade.

Um passo importante foi dado nesta modelagem ao considerar a dinâmica e espalhamento unidimensional de mosquitos selvagens e transgênicos [32], considerando um modelo descrito por um sistema acoplado de equações do tipo reação-difusão, que foi resolvido utilizando uma combinação do método dos elementos finitos e método de Runge-Kutta de quarta ordem, acoplados através de uma técnica de decomposição de operadores sequencial. Com base nesta idéia, Wyse et al. [51] propuseram uma dinâmica baseada na técnica MCR e espalhamento com coeficiente de difusão randômico.

Neste trabalho, propomos uma extensão natural da modelagem apresentada em [32], descrevendo a dinâmica e espalhamento de mosquitos selvagens e transgênicos por um modelo do tipo reação-difusão bidimensional. Com isso, agrega-se ao modelo a capacidade de simular situações realísticas através de um domínio obtido, por exemplo, a partir de imagens de satélites. Os cenários obtidos fornecem diretrizes para a avaliação das condições mais favoráveis de utilização da variedade transgênica para reduzir a incidência de doenças transmitidas por mosquitos.

No Capítulo 2, trazemos uma abordagem dos modelos clássicos da literatura que regem a dinâmica e espalhamento de populações e que servirão de sustentação para este estudo. O Capítulo 3 é dedicado à formulação do modelo matemático descrito por um sistema de equações diferenciais parciais do tipo reação-difusão, com termos de reação não-lineares, que descrevem a interação e o espalhamento das populações em um domínio fechado bidimensional. No Capítulo 4, apresentamos a resolução

numérica do modelo proposto, por meio da técnica de decomposição de operadores sequencial, onde é apresentado o algoritmo para a obtenção da solução numérica, bem como o método dos elementos finitos para resolver o problema de difusão em um domínio fechado. Por fim, no Capítulo 5, apresentamos e discutimos as simulações numéricas.

# Capítulo 2

## Revisão Bibliográfica

Diversas situações presentes no mundo real podem ser representadas por meio de uma linguagem matemática. A malária, como um exemplo de doença infecto-contagiosa, tornou-se amplamente estudada a partir do modelo de Ross-MacDonald [1] que a descreve como um processo interativo entre humanos infectados e mosquitos suscetíveis e entre humanos suscetíveis e mosquitos infectados. A partir desse sistema básico, vários modelos foram formulados para descrever a dinâmica de transmissão da malária em humanos, considerando estágios intermediários de infecção como, por exemplo, os modelos apresentados em [38] e [39].

De modo geral, as formulações matemáticas para estudos de populações são cada vez mais sofisticadas, incorporando fatores anteriormente desconsiderados, como sazonalidade [52], efeito Allee [18] e outros. Independente do modelo a ser proposto, o estudo de modelos clássicos como o de Malthus e de Verhulst tornam-se indispensáveis, pois, além de serem amplamente utilizados, fornecem embasamento teórico para modelos mais abrangentes e sofisticados.

Nesta perspectiva, apresentaremos uma breve revisão bibliográfica dos modelos clássicos da dinâmica espaço-temporal populacional, focando apenas naqueles cujos conceitos são diretamente relacionados com a dinâmica proposta nesta dissertação e culminando na equação de Fisher, a qual é a que mais se aproxima do modelo a ser desenvolvido.

### 2.1 Modelos Clássicos da Dinâmica Populacional

A dinâmica populacional é um ramo da ecologia matemática que estuda o comportamento das populações ao longo do tempo. A investigação desse comportamento é importante para que se possa compreender o que ocorre com os fenômenos que nelas atuam. São vários os fatores que influenciam na dinâmica das populações como, por exemplo, a disponibilidade de alimentos, a ação dos predadores, os efeitos do aumento ou redução nas taxas de natalidade e mortalidade entre outros. Nessa pers-

pectiva, as equações diferenciais têm sido uma ferramenta de extrema importância nesse tipo de modelagem.

A modelagem para o crescimento de populações surge da suposição de que a taxa de crescimento populacional depende da relação entre os indivíduos desta população em um instante de tempo  $t$ . Seja  $P : I \rightarrow \mathbb{R}_+$  uma população em um instante  $t \in I$ , com  $I \in [0, T]$  e  $T$  o instante de tempo final. Se considerarmos o número de indivíduos da população no instante inicial  $t = 0$  como  $P(0) = P_0$ , onde  $P_0 \in \mathbb{R}_+$ , a formulação genérica para um modelo que descreve a dinâmica populacional pode ser representada pelo seguinte problema de valor inicial (PVI):

$$\begin{cases} \frac{dP(t)}{dt} = f(P, t), & t \in I, \\ P(0) = P_0, \end{cases} \quad (2.1)$$

onde  $f : \mathbb{R}_+ \times I \rightarrow \mathbb{R}$  é uma função que relaciona os indivíduos da população  $P$ , dependendo implícita ou explicitamente de  $t$ .

A partir do PVI (2.1), abordaremos os dois modelos populacionais mais clássicos, que são o modelo de Malthus e o modelo de Verhulst.

### 2.1.1 Modelo de Malthus

Thomas Robert Malthus (1766-1834) foi um economista e demógrafo inglês que ficou famoso por ser o primeiro a desenvolver uma teoria populacional. A teoria foi introduzida em 1798 através do seu artigo “An Essay on the Principle of Population as it Affects the Future Improvement of Society, with Remarks on the Speculation of Mr. Godwin, Mr. Condorcet, and Other Writers”[33].

O modelo assume que o crescimento de uma determinada população é proporcional à própria população em cada instante de tempo. Com isso, Malthus conjecturou que todos os indivíduos possuíam o mesmo comportamento e que os fatores limitantes de crescimento eram desprezados. Para Malthus, a população cresceria indefinidamente em termos de uma progressão geométrica, enquanto os meios de subsistência cresceriam em progressão aritmética.

Evidentemente, essa noção, tanto em relação a taxa de crescimento da população, quanto a produção de alimentos, não se confirmou. O fato é que surgiram diversos fatores que não foram equacionados como, por exemplo, um aumento significativo na produtividade agrícola da época, um aumento na competição por recursos, importantes avanços científicos na medicina e farmacologia, entre outros. Por outro lado, as taxas de natalidade eram altas, mas as de mortalidade também e no futuro muitos países passaram a adotar medidas de planejamento familiar. Dito isto, fica claro que o modelo de Malthus não projetaria um quadro realista a médio ou longo

prazo. Entretanto, este modelo ainda é satisfatoriamente bem utilizado nos dias de hoje para descrever, por exemplo, crescimento de bactérias [11], datar artefatos antigos [56], uma vez que em situações como essas, o período de simulação é relativamente curto.

A equação do Modelo de Malthus surge do PVI (2.1) tomando  $f(P, t)$  uma função linear em relação a  $P$  e sem dependência explícita do tempo, isto é,

$$\begin{cases} \frac{dP(t)}{dt} = \lambda P(t), & \lambda \in \mathbb{R}, t \in I, \\ P(0) = P_0, \end{cases} \quad (2.2)$$

onde a constante de proporcionalidade  $\lambda$  é a taxa de crescimento e representa a diferença entre a taxa de natalidade  $\mathcal{N} \in \mathbb{R}_+$  e de mortalidade  $\mathcal{M} \in \mathbb{R}_+$  da população  $P$ .

A formulação matemática para o modelo de Malthus pressupõe que os nascimentos e mortes naquele ambiente eram proporcionais à população presente e que a variação da população  $P(t + \Delta t) - P(t)$  era conhecida entre os instantes  $t$  e  $t + \Delta t$ , isto é,

$$P(t + \Delta t) - P(t) = \mathcal{N}P(t)\Delta t - \mathcal{M}P(t)\Delta t \quad (2.3)$$

onde  $\mathcal{N}P(t)\Delta t$  é o número de nascimentos e  $\mathcal{M}P(t)\Delta t$  é o número de mortes no período de tempo  $\Delta t$ .

Dessa forma, podemos reescrever a equação (2.3) como:

$$\frac{P(t + \Delta t) - P(t)}{\Delta t} = (\mathcal{N} - \mathcal{M})P(t). \quad (2.4)$$

Tomando em (2.4) o limite, quando  $\Delta t \rightarrow 0$  em ambos os lados, obtemos

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{P(t + \Delta t) - P(t)}{\Delta t} = (\mathcal{N} - \mathcal{M})P(t).$$

Por fim, tomando  $\lambda = (\mathcal{N} - \mathcal{M})$  e assumindo a condição inicial  $P(0) = P_0$ , obtemos (2.2).

A solução analítica do modelo de Malthus é:

$$P(t) = P_0 e^{\lambda t}. \quad (2.5)$$

A Figura 2.1, retrata a solução da equação (2.5) no intervalo de tempo para  $I = [0, 10]$  em 3 situações distintas:

- $\lambda > 0$  e  $P(0) = 2$  (curva azul);

- $\lambda = 0$  e  $P(0) = 100$  (curva vermelha);
- $\lambda < 0$  e  $P(0) = 200$  (curva verde).

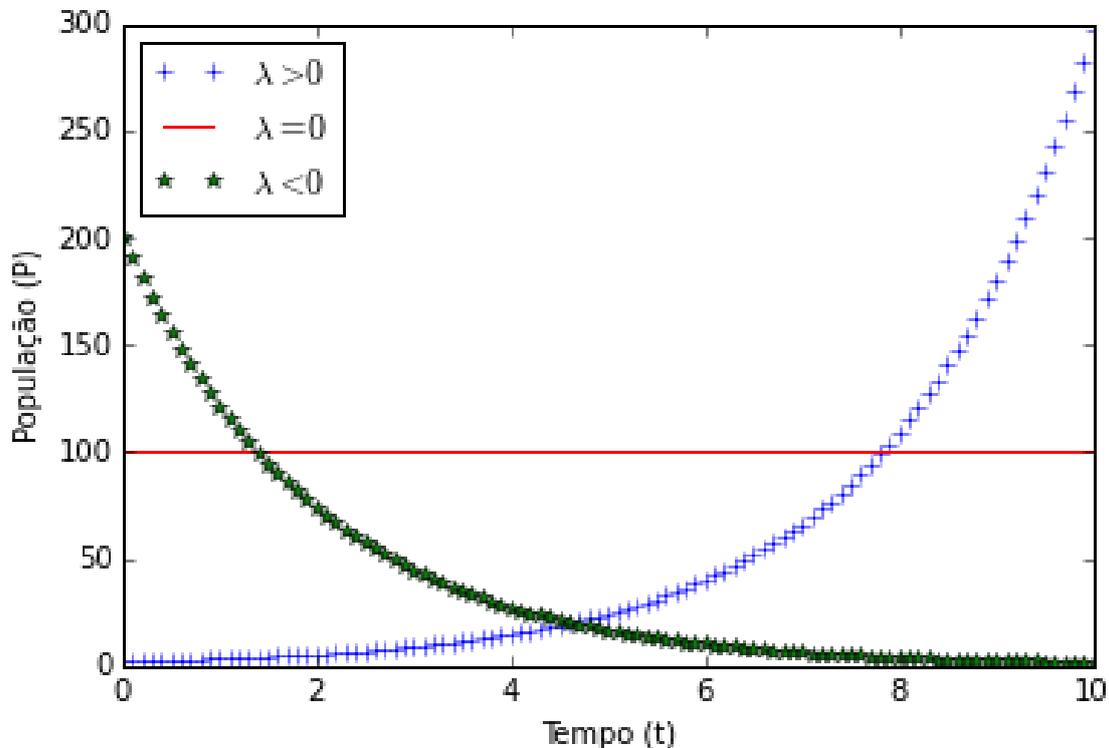


Figura 2.1: Solução para o modelo de Malthus em um intervalo de tempo  $I = [0, 10]$  para  $\lambda > 0$ ,  $\lambda = 0$  e  $\lambda < 0$  e condições iniciais  $P(0) = 2$ ,  $P(0) = 100$  e  $P(0) = 200$ , respectivamente.

Comparando o sinal da derivada de (2.2) com as soluções gráficas da Figura 2.1, identificamos três possibilidades para a evolução da população:

1. Se a taxa de natalidade for maior que a taxa de mortalidade então  $\lambda > 0$  e obtemos  $\frac{dP(t)}{dt} > 0$ , ou seja, a população cresce indefinidamente de forma exponencial;
2. Se a taxa de natalidade for igual a taxa de mortalidade então  $\lambda = 0$  e obtemos  $\frac{dP(t)}{dt} = 0$ , ou seja, a população permanece estável;
3. Se a taxa de natalidade for menor que a taxa de mortalidade então  $\lambda < 0$  e obtemos  $\frac{dP(t)}{dt} < 0$ , ou seja, a população decresce para zero.

As condições iniciais  $P(0)$  não influem no comportamento. Elas foram tomadas distintas apenas para manter o gráfico em uma escala capaz de representar as 3 situações, concomitantemente.

Apesar das limitações impostas pelo modelo de Malthus na descrição da evolução populacional, este foi um modelo de extrema relevância para a época, chamando a atenção das autoridades e da população sobre os riscos de um crescimento populacional descontrolado aliado a falta de insumos; além disso, contribuiu significativamente para o desenvolvimento da dinâmica de populações. Nessa perspectiva, muitos outros modelos foram formulados com a finalidade de obter resultados mais realísticos. O fato é que foram introduzidos outros fatores como por exemplo limitantes de crescimento, mudanças climáticas, ação de predadores, etc., tornando a modelagem cada vez mais rica em detalhes. O primeiro passo para esse aperfeiçoamento, surgiu da suposição de que a taxa de crescimento não seria mais constante e sim dependente da densidade, sendo  $\lambda(P)$ . Essa suposição que recai no clássico modelo de Verhulst que veremos a seguir.

### 2.1.2 Modelo de Verhulst

Como foi brevemente comentado na seção anterior, o crescimento exponencial do modelo de Malthus não se mostra representativo para caracterizar a dinâmica de populações a partir de um certo período de tempo. Modelagens como, por exemplo, competitividade por recursos ocasionada pela superpopulação, necessitam que consideremos efeitos inibidores de crescimento da população.

Em 1838, o matemático e biólogo Pierre François Verhulst (1804-1849) propôs um modelo matemático que é, basicamente, o modelo de Malthus modificado. Verhulst considerou a taxa de crescimento não mais uma constante e sim uma função linear dependente da densidade populacional, com um fator limitante de crescimento. Esse feito acarretou um enorme avanço no estudo de populações, produzindo uma modelagem com resultados mais realistas.

Para caracterizar esse modelo, consideramos em (2.2) que as taxas de natalidade  $\mathcal{N} : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$  e mortalidade  $\mathcal{M} : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$  são funções lineares em  $P$ , isto é,  $\mathcal{N}(P) = b_1 - d_1P$  e  $\mathcal{M}(P) = b_2 + d_2P$ , onde o parâmetro  $b_1 \in \mathbb{R}$  é a taxa de natalidade máxima,  $b_2 \in \mathbb{R}$  é a taxa de mortalidade mínima,  $d_1 \in \mathbb{R}$  mede a rapidez com que a natalidade diminui e  $d_2 \in \mathbb{R}$  mede a rapidez com que a mortalidade aumenta.

Sabemos que a taxa de crescimento  $\lambda$  é a diferença entre a taxa de natalidade e a taxa de mortalidade, tornando-se agora dependente da densidade populacional  $P$ . Sendo assim, a equação (2.2) pode ser escrita como  $\frac{dP}{dt} = \lambda(P)P$ , sendo

$$\begin{aligned} \lambda(P) &= (b_1 - d_1P) - (b_2 + d_2P) \\ &= (b_1 - b_2) - (d_1 + d_2)P, \end{aligned}$$

Conseqüentemente, temos

$$\frac{dP(t)}{dt} = (b_1 - b_2)P(t) \left[ 1 - \left( \frac{d_1 - d_2}{b_1 - b_2} \right) P(t) \right].$$

Definindo  $r = (b_1 - b_2)$  e  $k = \frac{(b_1 - b_2)}{(d_1 - d_2)}$ , obtemos o modelo de Verhulst ou modelo logístico de crescimento populacional como:

$$\frac{dP(t)}{dt} = rP(t) \left( 1 - \frac{P(t)}{k} \right), \quad (2.6)$$

onde  $r \in \mathbb{R}_+$  representa a taxa intrínseca de crescimento e  $k \in \mathbb{R}_+$  a capacidade de suporte do ambiente.

Para uma análise qualitativa do comportamento da equação (2.6), conforme discutido em [47], precisamos procurar por classes de soluções qualitativamente semelhantes entre si. Estas classes são separadas por soluções de equilíbrio  $\left. \frac{dP(t)}{dt} \right|_{P=P^*} = 0$  para todo  $t \geq 0$ , ou seja,

$$rP(t) \left( 1 - \frac{P(t)}{k} \right) = 0.$$

Assim,  $P(t) = 0$  e  $P(t) = k$  satisfazem a equação (2.6) e são chamadas de soluções de equilíbrio de (2.6), uma vez que, não há variação de  $P$  a medida que  $t$  cresce. Veja que, as soluções de equilíbrio são os zeros da função  $f(P)$  e, portanto, são chamados de pontos fixos, onde denotamos por  $P^*$ .

Uma análise de estabilidade para esses pontos fixos pode ser feita analisando a variação de  $f'(P^*)$ , sujeita a pequenas perturbações. Isso mostra que para  $P^* = 0$  a derivada  $f'(P^*) > 0$ , ou seja,  $P^* = 0$  é instável e para  $P^* = k$  a derivada  $f'(P^*) < 0$ , ou seja,  $P^* = k$  é estável.

Uma análise mais detalhada dessa perturbação pode ser feita considerando  $\Delta P > 0$  uma perturbação infinitesimal ao redor do ponto fixo  $P^*$  na equação (2.6), ou seja,

$$\frac{d(P^* + \Delta P)}{dt} = r(P^* + \Delta P) \left( 1 - \frac{(P^* + \Delta P)}{k} \right) \quad (2.7)$$

$$= rP^* + r\Delta P - \left( \frac{r(P^*)^2 + 2rP^*\Delta P + r(\Delta P)^2}{k} \right). \quad (2.8)$$

Tendo em vista que  $\Delta P$  é uma perturbação infinitesimal, o termo  $(\Delta P)^2$  é muito pequeno quando comparado com as outras grandezas da equação, podendo com isso, ser desprezado. Sendo assim, obtemos

$$\frac{d(P^* + \Delta P)}{dt} = rP^* + r\Delta P - \frac{(r(P^*)^2 + 2rP^*\Delta P)}{k}.$$

Note que se  $0 < P < k$ , para o ponto fixo  $P^* = 0$ , temos que  $r\Delta P > 0$ . Portanto,  $P$  é uma função crescente de  $t$ . Por outro lado, se  $P > k$ , para o ponto fixo  $P^* = k$ , tem-se  $-r\Delta P < 0$ . Portanto,  $P$  é uma função decrescente.

Para ver como o campo de vetores se comporta, esboçamos o gráfico de  $\frac{dP(t)}{dt}$  em função de  $P$ . A Figura 2.2 a seguir ilustra uma parábola com concavidade voltada para baixo, com o vértice da parábola em  $(\frac{k}{2}, \frac{rk}{4})$  e com os pontos fixos  $(0, 0)$  e  $(k, 0)$  como sendo os pontos de interseção com o eixo  $P$ . Como não faz sentido representar uma população negativa, tratamos apenas para valores de  $P \geq 0$ .

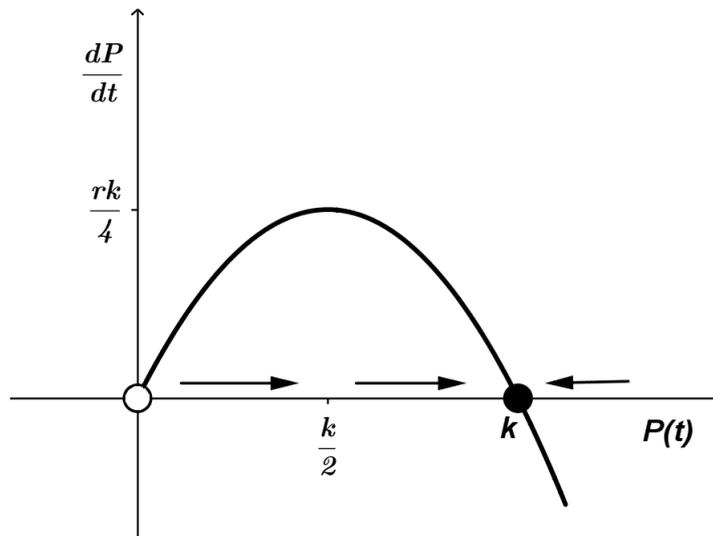


Figura 2.2: Campo vetorial para o modelo de Verhulst.

Fazendo uma análise do ponto de vista biológico, podemos observar que uma população pequena irá se afastar do ponto fixo  $P^* = 0$  e crescerá aceleradamente até a metade da capacidade de suporte, onde se localiza o ponto de inflexão  $\frac{k}{2}$ , em seguida, continuará a crescer, porém com uma velocidade cada vez menor até a capacidade de suporte  $k$ . Se a população é maior que a capacidade de suporte, a população irá decair para a capacidade de suporte à medida que o tempo tende ao infinito, ou seja, a população tenderá a se estabilizar em  $k$ . Observe também que se a população inicial for nula, então não existe população para se reproduzir e, portanto, a população continuará nula.

Ao introduzirmos a condição inicial  $P(0) = P_0$  na equação (2.6), obtemos problema de valor inicial

$$\begin{cases} \frac{dP(t)}{dt} = rP(t) \left(1 - \frac{P(t)}{k}\right), \\ P(0) = P_0, \end{cases} \quad (2.9)$$

com  $r, k \in \mathbb{R}$ ,  $t \in I$ , e cuja solução analítica pode ser facilmente obtida via separação

de variáveis, conforme encontrada em [56], dada por:

$$P(t) = \frac{kP_0}{(k - P_0)e^{-rt} + P_0}. \quad (2.10)$$

A Figura 2.3 a seguir, apresenta soluções no tempo contínuo, com uma taxa de crescimento  $r = 0,5$ , capacidade de suporte  $k = 500$ , populações iniciais  $P(0)$  com valores de 100, 200, 300, 500, 550 e 800 indivíduos e intervalo de tempo  $I = [0, 10]$ .

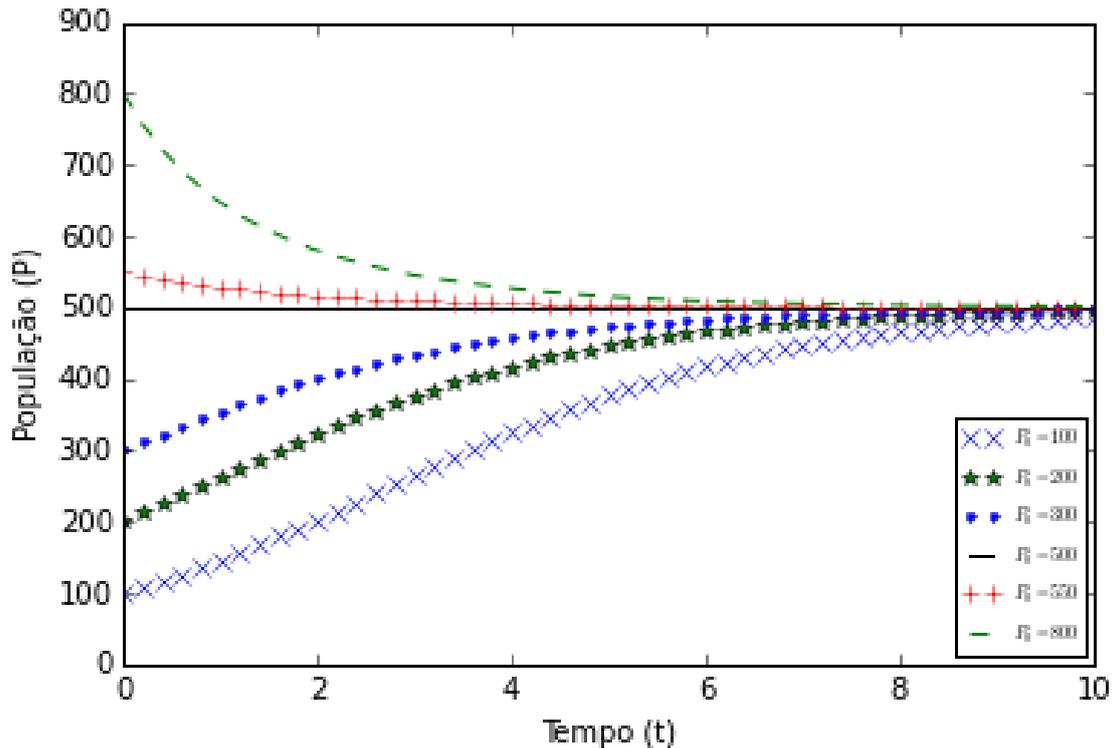


Figura 2.3: Solução analítica para o modelo de Verhulst em um intervalo de tempo  $I = [0, 10]$ , com  $r = 0,5$ ,  $k = 500$ , populações iniciais  $P(0)$  com valores de 100, 200, 300, 500, 550 e 800 indivíduos.

Podemos observar que, independente da condição inicial, as soluções convergem para a solução de equilíbrio  $P(t) = 500$ , ou seja, as populações possuem como objetivo final o alcance da capacidade de suporte conforme discutido no estudo qualitativo.

Por fim, destacamos que o modelo de Verhulst, assim como o de Malthus, serviu como base para derivação de outros modelos. Novos fatores foram introduzidos, como por exemplo, efeitos relacionados a captura. Neste caso, temos um modelo do

tipo logístico com captura

$$\frac{dP(t)}{dt} = rP(t) \left( 1 - \frac{P(t)}{k} \right) - g(P, t), \quad (2.11)$$

onde  $g : \mathbb{R}_+ \times I \rightarrow \mathbb{R}$  é uma função que representa a ação de fatores externos sobre a população  $P$  e que pode depender explicitamente do tempo.

Dentre os modelos com essa característica, podemos citar, por exemplo, o modelo que descreve a interação entre insetos em uma floresta canadense, proposto em 1978 por Ludwig et al. [47]. Também, o modelo epidemiológico que descreve a dinâmica de transmissão da gonorreia em uma população homossexualmente ativa, encontrado em [11]. No primeiro exemplo, o termo  $g(P, t)$  representa a taxa de mortalidade devido à predação e no segundo o termo de captura representa o número de indivíduos que deixam a classe de sexualmente ativos somado com os indivíduos que saem da classe infectada por recuperação.

## 2.2 Espalhamento Bidimensional de Populações

Nesta seção, passaremos a descrever o processo de difusão. Este conceito será de extrema importância para a construção do modelo proposto neste trabalho, uma vez que tal conceito descreverá o espalhamento da população de mosquitos desse estudo ao longo do tempo. Neste sentido, iniciaremos definindo tal conceito.

A difusão é um processo físico em que partículas são transportadas, de maneira aleatória e espontânea, de uma região com maior concentração para outra de menor concentração. Do ponto de vista matemático, a equação de difusão surge naturalmente da combinação da equação de conservação de massa, utilizando a Lei de Fick como hipótese sobre o fluxo.

Diante disso, seja  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$  uma região aberta e limitada, com fronteira  $\Gamma = \Gamma_N \cup \Gamma_D$ , com  $\Gamma_N \cap \Gamma_D = \emptyset$  e  $\bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma$  seu fecho, onde  $\Gamma_N$  é a região com condição de contorno de Neumann e  $\Gamma_D$  a região com condição de contorno de Dirichlet.

A lei de conservação de massa diz que *a taxa de variação da concentração de partículas em uma região  $\Omega$  é igual a taxa de fluxo das partículas através de sua fronteira  $\Gamma$  mais a criação ou destruição de partículas em  $\Omega$*  [37]. Adaptando esta lei ao nosso problema, o termo partícula pode ser considerado com um indivíduo da população de mosquitos. Esta lei pode ser escrita matematicamente da seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} P(x, y, t) d\Omega = - \int_{\Gamma} \mathbf{J} \cdot \mathbf{nd}\Gamma + \int_{\Omega} f d\Omega, \quad \forall (x, y) \in \Omega, \quad t \in I. \quad (2.12)$$

onde  $P : \Omega \times I \rightarrow \mathbb{R}$  denota a concentração da população de mosquitos e, agora,

possui dependência com  $\Omega$ ,  $\mathbf{J} \in \mathbb{R}^2$  o fluxo dos mosquitos,  $\mathbf{n} \in \mathbb{R}^2$  o vetor normal a fronteira  $\Gamma$  e  $f$  o termo fonte (ou sumidouro) assumindo característica da equação (2.1), ou seja, função de  $P$ .

Aplicando o teorema da divergência [25] ao primeiro termo do lado direito da equação (2.12) e assumindo que  $P(x, y, t)$  é contínuo, temos que

$$\int_{\Omega} \left[ \frac{\partial P}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{J}) - f \right] d\Omega = 0. \quad (2.13)$$

De acordo com o teorema da localização [25], obtemos a equação de conservação de massa na forma diferencial dada por

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{J}) = f, \quad \forall (x, y) \in \Omega, t \in I. \quad (2.14)$$

Por outro lado, a lei de Fick diz que *o fluxo devido ao movimento aleatório é aproximadamente proporcional à taxa de variação da concentração de partículas* [18], ou seja,

$$\mathbf{J} = -D\nabla P(x, y, t), \quad (x, y) \in \Omega, t \in I, \quad (2.15)$$

onde  $D \in \mathbb{R}$  é chamado de coeficiente de difusão. Embora o coeficiente de difusão seja considerado constante, ele pode assumir características mais gerais, podendo depender do espaço e/ou tempo, podendo ainda ser randômico, estocástico ou um tensor variando em diferentes direções. Além disso, o sinal negativo indica que as partículas estão sendo transportadas de uma região de alta concentração para uma de baixa concentração.

Substituindo (2.15) na equação (2.14) obtemos a equação de reação-difusão em duas dimensões espaciais, onde o primeiro termo do lado direito está associado a difusão e  $f(P)$  é o termo associado à reação.

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D\operatorname{div}(\nabla P) + f(P). \quad (2.16)$$

Na ausência do termo de reação ( $f(P) = 0$ ), obtemos a equação de difusão pura em duas dimensões espaciais

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D\operatorname{div}(\nabla P). \quad (2.17)$$

Como nossa intenção é estudar a solução de um fenômeno biológico, precisamos adicionar condições na equação (2.17) para que se possa obter uma solução única. Neste sentido, para a equação (2.17) se adequar à esta situação, introduzimos condições de contorno:

$$P(x, y, t) = \bar{P}_{\Gamma}, \quad \forall (x, y) \in \Gamma, \quad (2.18)$$

e condição inicial:

$$P(x, y, 0) = \bar{P}_0, \quad \forall(x, y) \in \Omega, \quad (2.19)$$

obtendo, assim, um problema de valor inicial e de contorno.

## 2.3 Equação de Fisher

Na dinâmica populacional, é natural indagar sobre o comportamento da população quando se considera a dimensão espacial. Foi justamente o que Ronald Ross começou a considerar em 1904. Ele estava se perguntando como a densidade de mosquitos diminuía à medida que a distância de um criadouro aumentava. Posteriormente este problema chegou a atenção de Karl Pearson e Lord Rayleigh. Em 1937, com o avanço significativo na literatura sobre o estudo da equação de difusão, Fisher propôs em seu artigo *The wave of advance of advantageous genes*, um modelo matemático unidimensional para a dinâmica e o espalhamento de indivíduos com um termo de reação logístico [19]. Desde então, a equação (2.20) têm sido bastante utilizada na dinâmica populacional. Em Shigesada [44] e Murray [37], por exemplo, são feitos estudos sobre as soluções desta equação para o caso unidimensional, já em Carvalho [14] é utilizada para estudos da dinâmica populacional com a capacidade de suporte espacialmente depende e em Soares [46] é utilizada para estudos sobre a dispersão de insetos.

A equação de Fisher é escrita matematicamente da seguinte forma:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D \operatorname{div}(\nabla P) + rP \left(1 - \frac{P}{k}\right), \quad (2.20)$$

O termo de difusão presente na equação (2.20) caracteriza o espalhamento da população, enquanto que a dinâmica é caracterizada pelo termo de reação não linear dado pela equação logística de Verhulst.

Até o presente momento, nenhuma solução exata foi obtida para a equação (2.20) no espaço e no tempo. O que existe são soluções conhecidas apenas para casos especiais, como por exemplo, as soluções do tipo onda viajante. Segundo [37], em soluções desta natureza, a propagação se dá através de uma onda que viaja com velocidade constante sem mudar a sua forma.

Considere a mudança de variável  $\alpha = \frac{r}{k}$ , podemos escrever a equação (2.20), sob uma perspectiva unidimensional, como

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + rP - \alpha P^2. \quad (2.21)$$

Se existe uma solução onda viajante, ela pode ser escrita na equação (2.21) como

$$P(x, t) = P(x - \omega t) = P(z), \quad z = x - \omega t \quad (\omega > 0), \quad (2.22)$$

onde  $\omega$  é a velocidade da onda.

Com isso, as derivadas parciais em  $x$  e  $t$  são convertidas em derivadas ordinárias em  $z$ , isto é,

$$\frac{\partial P}{\partial x} = \frac{dP}{dz} \frac{dz}{dx} \Rightarrow \frac{\partial P}{\partial x} = \frac{dP}{dz} \quad (2.23)$$

e

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{dP}{dz} \frac{dz}{dt} \Rightarrow \frac{\partial P}{\partial t} = -\omega \frac{dP}{dz}. \quad (2.24)$$

Substituindo as expressões (2.23) e (2.24) na equação (2.21), obtemos a equação diferencial ordinária não linear

$$D \frac{d^2 P}{dz^2} + \omega \frac{dP}{dz} + rP - \alpha P^2 = 0. \quad (2.25)$$

Segundo Murray (2002) [37], Shigesada e Kawasaki (1997) [44], esta equação admite solução do tipo onda viajante que liga os pontos fixos  $P^* = \frac{r}{\alpha}$  e  $P^* = 0$  para todo  $\omega \geq 2\sqrt{rD}$ . Para a velocidade mínima da onda  $\omega_{min} = 2\sqrt{rD}$  a solução é estável, tornando-se atratora.

Tanto a equação de Fisher (2.20) quanto as soluções do tipo onda viajante, foram amplamente estudadas em 1937 por Kolmogorov, Petrovsky e Piskunov. Kolmogorov et al. [30] provaram que se  $P(x, 0)$  for dada por:

$$P(x, 0) = P_0(x) \geq 0, \quad P_0(x) = \begin{cases} 1, & \text{se } x \leq x_1 \\ 0, & \text{se } x \geq x_2, \end{cases} \quad (2.26)$$

onde  $x_1 < x_2$ , então a solução  $P(x, t)$  de (2.21) evolui para uma solução do tipo onda viajante  $P(z)$ , com  $z = x - 2\sqrt{rD}t$  e velocidade mínima da onda  $\omega_{min} = 2\sqrt{rD}$ . Esta solução significa, biologicamente, que a população cresce até a capacidade de suporte e, após atingir a capacidade de suporte, começa a se espalhar como onda viajante tanto para a direita quanto para a esquerda.

Com base no modelo de Fisher com captura e considerando os cruzamentos genéticos descritos em [53], Lima em (2016) formulou um modelo matemático que rege a interação e o espalhamento entre mosquitos selvagens e transgênicos em um domínio espacial unidimensional [32]. Seguindo essa linha de raciocínio, o modelo proposto neste trabalho será formulado a partir da equação (2.20), tendo por base o trabalho desenvolvido em [32], mas assumindo um domínio espacial bidimensional. Este modelo será simulado sobre uma região real que compreende a Usina Hidrelétrica de

Manso, no Estado do Mato Grosso, Brasil.

## Capítulo 3

# Modelagem da Interação entre Mosquitos Selvagens e Transgênicos

O estudo crescente de modelos matemáticos representados por equações diferenciais vem ajudando a entender os processos dinâmicos entre as populações de mosquitos selvagens e transgênicos e fazendo previsões com o intuito de promover um planejamento de ações que visam a soltura de mosquitos transgênicos em ambientes propícios.

Recentemente, mais precisamente em 2016, foi apresentado em [53] um modelo matemático contínuo que considera a zigozidade dos mosquitos transgênicos e a dinâmica sazonal do mosquito devido a pluviosidade. A ideia é que o gene modificado se espalhe bloqueando o ciclo do protozoário da malária, à medida em que os cruzamentos entre os mosquitos selvagens e transgênicos ocorrem.

No mesmo ano, foi apresentado por Lima [32] um modelo matemático unidimensional que descreve a dinâmica e o espalhamento entre mosquitos selvagens e transgênicos, formado por um sistema acoplado de equações do tipo reação-difusão.

Baseado em [32], neste capítulo, vamos apresentar o modelo matemático bidimensional que descreve a dinâmica e espalhamento entre os mosquitos selvagens e transgênicos da espécie *Anopheles stephensi*. O espalhamento das três subpopulações de mosquitos é regido pela lei de Fick e a dinâmica populacional pelo modelo proposto em [53].

### 3.1 Modelo Bidimensional da Dinâmica e Espalhamento de Mosquitos Selvagens e Transgênicos

Para descrever a interação entre mosquitos selvagens e transgênicos, vamos partir da suposição de que a dinâmica da população total de mosquitos seja regida pela equação logística de Verhulst com captura

$$\frac{dP}{dt} = rP \left(1 - \frac{P}{k}\right) - \delta_2 P, \quad (3.1)$$

onde  $P$  é a população total de mosquitos. A taxa intrínseca de crescimento  $r$  é a diferença entre a taxa de recrutamento de mosquitos para a fase adulta  $\xi$  e a taxa de mortalidade  $\delta_1$  ocasionada por razões naturais, ou seja,  $r = \xi - \delta_1$ . A taxa de mortalidade  $\delta_2$  tem efeito de captura e leva em consideração a ação de predadores e ação humana sobre a população de mosquitos. O termo de captura torna o modelo mais próximo da realidade, já que embora se considerem fatores como abundância de alimentos, espaço físico ou até mesmo os períodos do ano em que surgem condições favoráveis à proliferação dos mosquitos, a incidência destes insetos é observada sempre em níveis inferiores àqueles que o ambiente é capaz de suportar. Portanto, a inclusão do termo de captura irá garantir que a população se estabilize em um ponto de equilíbrio abaixo da capacidade de suporte  $k$ . Note que o ponto fixo não nulo de (3.1) é  $P^* = \frac{(r - \delta_2)k}{r}$ .

A equação (3.1) pode ser escrita da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{dP}{dt} &= \xi P - \left(\frac{\xi + \delta_1}{k}\right) P^2 - (\delta_1 + \delta_2) P \\ &= \left(\frac{\xi}{P} - \frac{r}{k}\right) P^2 - \delta P, \end{aligned} \quad (3.2)$$

onde  $\delta = \delta_1 + \delta_2$ .

Particionando a população total  $P$  em três subpopulações: selvagens ( $u_1$ ), transgênicos heterozigotos ( $u_2$ ) e transgênicos homozigotos ( $u_3$ ), a equação (3.2) assume a forma:

$$\begin{aligned} \frac{d(u_1 + u_2 + u_3)}{dt} &= \left(\frac{\xi}{u_1 + u_2 + u_3} - \frac{r}{k}\right) (u_1^2 + u_2^2 + u_3^2 + 2u_1u_2 + 2u_1u_3 + 2u_2u_3) \\ &\quad - \delta (u_1 + u_2 + u_3). \end{aligned} \quad (3.3)$$

Neste trabalho será considerado que os cruzamentos entre os mosquitos selvagens, transgênicos heterozigotos e transgênicos homozigotos, seguem a genética clássica mendeliana. Nessa situação a geração dos mosquitos obedece a lei de Hardy-Weinberg. Esta lei afirma o seguinte: se nenhum fator evolutivo atua em uma população, a frequência dos alelos e dos genótipos permanece inalterada. Para que a população de mosquitos satisfaça a lei de Hardy-Weinberg, ela deve satisfazer as seguintes condições:

- A população é muito grande;

- Existe o mesmo número de machos e fêmeas;
- Os acasalamentos são aleatórios;
- Todos os seres devem ter a mesma idade ao acasalar;
- Os casais devem ser igualmente férteis;
- Os genes da população não sofrem mutação.

Com isso, a verificação para saber se a população de mosquitos sofre evolução é feita a partir da análise da frequência dos alelos. Se ocorrer mudança na frequência, fica evidente que fatores evolutivos estão agindo na população.

O cálculo da frequência dos possíveis genótipos da população de mosquitos segundo a lei de Hardy-Weinberg é intuitivamente simples. Considere o alelo  $A$ , cuja frequência é representado por  $p$ , e um alelo  $a$ , representado por  $q$ . A soma da frequência dos alelos deve ser  $p + q = 1$ .

Tabela 3.1: Quadro de Punnett.

		p	q
	Gametas	A	a
p	A	AA	Aa
q	a	aA	aa

Um indivíduo composto por um par de alelos idênticos é denominado homozigoto, e um indivíduo cujo par dos alelos são diferentes é denominado heterozigoto [24]. Ainda segundo [24] um indivíduo é classificado como homozigoto dominante ( $AA$ ), heterozigoto ( $Aa$ ) ou homozigoto recessivo ( $aa$ ). Neste sentido, a partir do Quadro de Punnett (Tabela 3.1) temos os possíveis genótipos dados por:  $AA$ ,  $Aa$ ,  $aA$ ,  $aa$ . Conforme discutido em [24], para que um indivíduo seja  $AA$  ele deve receber um alelo  $A$  do macho e um da fêmea, obtendo uma frequência genotípica  $p^2$ . De modo análogo, a frequência do genótipo  $aa$  é  $q^2$ . Para o indivíduo que recebe um alelo  $a$  do macho e um alelo  $A$  da fêmea, resulta em uma frequência genotípica  $pq$ . E por fim, para receber um alelo  $A$  do macho e um alelo  $a$  da fêmea, tem-se a frequência genotípica  $qp$ . Assim, a soma da probabilidade de  $AA$ , mais a probabilidade de  $aA$ , mais a probabilidade de  $Aa$ , mais a probabilidade de  $aa$  é 1, ou seja,

$$p^2 + 2pq + q^2 = 1. \quad (3.4)$$

Essa equação é um dos fundamentos clássicos no estudo da genética de populações.

Portanto, fica evidente que, para uma população de mosquitos estar em equilíbrio de Hardy-Weinberg, em cada geração a frequência dos diferentes genótipos precisa satisfazer a equação (3.4).

Os resultados dos cruzamentos entre os mosquitos selvagens, transgênicos heterozigotos e transgênicos homozigotos são obtidos via quadros de Punnett e estão dispostos na Tabela 3.2. Foram admitidos genótipo  $aa$  para os mosquitos selvagens  $u_1$ ,  $Aa$  ou  $aA$  para transgênicos heterozigotos  $u_2$  e  $AA$  para transgênicos homozigotos  $u_3$ .

Tabela 3.2: Quadros de Punnett para os cruzamentos  $u_i \times u_j$ ,  $i, j = 1, 2, 3$ .

$u_1 \times u_1$	a	a	$u_1 \times u_2$	A	a	$u_1 \times u_3$	A	A
a	aa	aa	a	aA	aa	a	aA	aA
a	aa	aa	a	aA	aa	a	aA	aA
$u_2 \times u_2$	A	a	$u_2 \times u_3$	A	A	$u_3 \times u_3$	A	A
A	AA	Aa	A	AA	AA	A	AA	AA
a	aA	aa	a	aA	aA	A	AA	AA

De acordo com a genética mendeliana, a geração dos mosquitos  $u_1$ ,  $u_2$  e  $u_3$  surge a partir dos seguintes cruzamentos:

- Selvagens:  $(u_1 \times u_1), (u_2 \times u_2), (u_1 \times u_2)$ ;
- Transgênicos heterozigotos:  $(u_2 \times u_2), (u_1 \times u_2), (u_2 \times u_3), (u_1 \times u_3)$ ;
- Transgênicos homozigotos:  $(u_2 \times u_2), (u_2 \times u_3), (u_3 \times u_3)$ .

Sejam  $a_{ij}$ ,  $b_{ij}$  e  $c_{ij}$  as frequências genotípicas para  $u_1$ ,  $u_2$  e  $u_3$  obtidas dos cruzamentos  $u_i \times u_j$ ,  $i, j = 1, 2, 3$ . Estes coeficientes devem satisfazer a relação  $a_{ij} + b_{ij} + c_{ij} = 1$ . Diante disso, temos que os mosquitos selvagens ( $u_1$ ) são concebidos do acasalamento  $(u_1 \times u_1)$  na proporção de  $a_{11} = 1$ ,  $(u_1 \times u_2)$  na proporção de  $a_{12} = 1/2$  e  $(u_2 \times u_2)$  na proporção de  $a_{22} = 1/4$ ; transgênicos heterozigotos ( $u_2$ ) são concebidos do acasalamento  $(u_1 \times u_2)$  na proporção de  $b_{12} = 1/2$ ,  $(u_2 \times u_2)$  na proporção de  $b_{22} = 1/2$ ,  $(u_2 \times u_3)$  na proporção de  $b_{23} = 1/2$  e  $(u_1 \times u_3)$  na proporção de  $b_{13} = 1$ ; transgênicos homozigotos ( $u_3$ ) são concebidos do acasalamento  $(u_2 \times u_2)$  na proporção de  $c_{22} = 1/4$ ,  $(u_2 \times u_3)$  na proporção de  $c_{23} = 1/2$  e  $(u_3 \times u_3)$  na proporção de  $c_{33} = 1$ .

Utilizando estes resultados na equação (3.3) temos que

$$\begin{aligned} \frac{d(u_1 + u_2 + u_3)}{dt} &= \left( \frac{\xi}{u_1 + u_2 + u_3} - \frac{r}{k} \right) [a_{11}u_1^2 + 2(a_{12} + b_{12})u_1u_2 \\ &\quad + (a_{22} + b_{22} + c_{22})u_2^2 + 2(b_{23} + c_{23})u_2u_3 + 2b_{13}u_1u_3 + c_{33}u_3^2] \\ &\quad - \delta(u_1 + u_2 + u_3), \end{aligned} \quad (3.5)$$

A fim de manter a dinâmica da espécie sem que haja superpopulação e mantendo para cada variedade de mosquito a mesma dinâmica que rege a população total, é possível escrever a equação (3.5) como um sistema de três equações acopladas

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{du_1}{dt} &= \left( \frac{\xi}{u_1 + u_2 + u_3} - \frac{r}{k} \right) (a_{11}u_1^2 + 2a_{12}u_1u_2 + a_{22}u_2^2) - \delta u_1, \\ \frac{du_2}{dt} &= \left( \frac{\xi}{u_1 + u_2 + u_3} - \frac{r}{k} \right) (2b_{12}u_1u_2 + b_{22}u_2^2 + 2b_{23}u_2u_3 + 2b_{13}u_1u_3) - \delta u_2, \\ \frac{du_3}{dt} &= \left( \frac{\xi}{u_1 + u_2 + u_3} - \frac{r}{k} \right) (c_{22}u_2^2 + 2c_{23}u_2u_3 + c_{33}u_3^2) - \delta u_3, \end{aligned} \right. \quad (3.6)$$

com condições iniciais para as três variedades  $u_1(0) = \bar{u}_1$ ,  $u_2(0) = \bar{u}_2$  e  $u_3(0) = \bar{u}_3$ . Este sistema leva em consideração a contribuição de cada cruzamento para a população que está sendo descrita pela respectiva equação.

O modelo proposto para reger a dinâmica e espalhamento de mosquitos selvagens e transgênicos é dada pelo sistema composto pelo termo de reação, equação (3.6), e a equação de difusão em duas dimensões (2.17):

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\partial u_1}{\partial t} &= D_1 \operatorname{div}(\nabla u_1) + \left( \frac{\xi}{u_1 + u_2 + u_3} - \frac{r}{k} \right) (a_{11}u_1^2 + 2a_{12}u_1u_2 + a_{22}u_2^2) - \delta u_1, \\ \frac{\partial u_2}{\partial t} &= D_2 \operatorname{div}(\nabla u_2) + \left( \frac{\xi}{u_1 + u_2 + u_3} - \frac{r}{k} \right) (2b_{12}u_1u_2 + b_{22}u_2^2 + 2b_{23}u_2u_3 + 2b_{13}u_1u_3) - \delta u_2, \\ \frac{\partial u_3}{\partial t} &= D_3 \operatorname{div}(\nabla u_3) + \left( \frac{\xi}{u_1 + u_2 + u_3} - \frac{r}{k} \right) (c_{22}u_2^2 + 2c_{23}u_2u_3 + c_{33}u_3^2) - \delta u_3, \end{aligned} \right. \quad (3.7)$$

sujeito às condições de contorno:

$$u_\iota(x, y, t) = \bar{u}_\iota, \quad \forall (x, y) \in \Gamma, \quad t \in I, \quad (3.8)$$

e às condições iniciais:

$$u_\iota(x, y, 0) = \hat{u}_\iota, \quad \forall (x, y) \in \Omega, \quad (3.9)$$

onde  $D_\iota$  é o coeficiente de difusão para cada uma das populações  $u_\iota$ . Vamos representar em nosso modelo  $D_\iota$  como  $D$  pois consideramos cada uma das populações

com o mesmo coeficiente de difusão constante.

# Capítulo 4

## Formulação Numérica

No capítulo anterior, apresentamos o modelo matemático bidimensional do tipo reação-difusão que descreve a dinâmica do espalhamento de mosquitos selvagens e transgênicos. Vimos que este modelo é descrito por um sistema de equações diferenciais parciais, cujo termo difusivo advém da Lei de Fick com a equação de conservação para as espécies de mosquito e o termo de reação resulta da dinâmica de cruzamento e competição entre as variedades de mosquitos consideradas, como apresentado em [53] e descrito em detalhes no Capítulo 3. Este sistema tem seu termo de reação fortemente não linear, que acopla toda a dinâmica entre as variedades de mosquitos, tornando inviável a obtenção de soluções analíticas gerais para o modelo e dificultando até mesmo a obtenção de soluções numéricas.

### 4.1 Algoritmo de Resolução

Para resolver numericamente o modelo (3.7), aplicaremos a técnica de decomposição de operadores. As ideias que impulsionaram esta técnica teve início em 1955 nos trabalhos desenvolvidos por Peaceman, Rachford [40] e Douglas [17]. Posteriormente, tais ideias foram aperfeiçoadas, incluindo nesta lista autores como Baker, Oliphant, Bagrinovskii, Godunov, D'yakonov, Marchuk, Samarskii, entre outros. No entanto, foi somente em 1971 por meio de Yanenko [54] que a abordagem da técnica de decomposição de operadores no passo de tempo foi desenvolvida. Desde então, está técnica tem sido largamente empregada em estudos de transporte de contaminantes em meios porosos para tratar problemas que envolvem reações não lineares (Barry et al. [4]; Kanney et al. [29] e Kacur et al [28]). Assim como os problemas de transporte, os problemas de reação-difusão possuem uma estrutura matemática que permite uma decomposição natural dos operadores em duas formas: uma puramente difusiva e outra reativa. De modo geral, cada um dos operadores envolvidos é resolvido de forma independente, buscando transformar o processo de resolução mais complexos em outro de menor complexidade. Além disso, a vantagem desta

técnica é que devido a separação dos operadores, temos à flexibilidade de se poder adotar procedimentos numéricos bem mais otimizados e de reconhecida eficiência para a resolução de cada uma dos subproblemas obtidos.

Assim, o sistema (3.7) será decomposto em dois subproblemas com as seguintes características:

(I) O primeiro é descrito por um sistema de três equações diferenciais parciais puramente difusivas e desacopladas. Para sua resolução, utilizamos o método de elementos finitos de Galerkin na aproximação espacial e o método de Crank-Nicolson na discretização temporal.

(II) No segundo, temos um sistema de equações diferenciais ordinárias não-lineares acopladas, associado ao termo de reação. Para a sua resolução, utilizamos o método de Runge-Kutta de quarta ordem.

Para descrever o algoritmo, consideramos  $I = [0, T]$  o intervalo de tempo, com  $\mathbb{R} \ni T > 0$  o tempo final, discretizado como  $I = \bigcup_{n=0}^m I_n$ , com  $I_n = [t_n, t_{n+1}]$  uma partição de  $I$ ,  $t_n$  os tempos discretos,  $m = \frac{T}{\Delta t}$  e  $\Delta t = t_{n+1} - t_n$  o passo no tempo. Com isso, procedemos com os seguintes passos:

**Passo 1:** No instante inicial  $t = t_0$ , inicializamos as variáveis  $\tilde{u}_\iota(x, y, t_0) = \hat{u}_\iota(x, y)$ , para  $\iota = 1, 2, 3$ .

**Passo 2:** Tomando um  $n \geq 0$  fixo, conhecidas as condições iniciais  $\tilde{u}_\iota(x, y, t_n)$ , tomamos  $\hat{u}_\iota(t_n) = \tilde{u}_\iota(x, y, t_n)$  e calculamos  $\tilde{u}_\iota(x, y, t)$  no instante  $t_{n+1}$  através do seguinte problema:

**Problema (I):** Encontrar  $\tilde{u}_\iota(x, y, t)$ , com  $(x, y) \in \bar{\Omega}$ ,  $t \in I_n$ , tal que

$$\frac{\partial \tilde{u}_\iota}{\partial t} = D \operatorname{div}(\nabla \tilde{u}_\iota), \quad (4.1)$$

com condições de contorno dadas por:

$$\tilde{u}_\iota(x, y, t) = \bar{u}_\iota, \quad \forall (x, y) \in \Gamma,$$

e condições iniciais dadas por:

$$\tilde{u}_\iota(x, y, t_n) = \hat{u}_\iota(t_n), \quad \forall (x, y) \in \Omega,$$

onde  $\iota = 1, 2$  e  $3$  representa cada uma das equações do sistema de equações diferenciais parciais.

**Passo 3:** No mesmo intervalo de tempo  $I_n$ , utilizamos a solução obtida do problema (I), como condição inicial para a resolução do sistema de equações diferenciais ordinárias não-lineares acopladas, dado pelo seguinte problema:

**Problema (II):** Dados os parâmetros  $\{a_{ij}, b_{ij}, c_{ij}, \delta, \xi, k, r\} \in \mathbb{R}$ , encontrar

$u_i(t)$ , com  $t \in I_n$ , que satisfaça

$$\begin{cases} \frac{du_1}{dt} = \left( \frac{\xi}{u_1 + u_2 + u_3} - \frac{r}{k} \right) (a_{11}u_1^2 + 2a_{12}u_1u_2 + a_{22}u_2^2) - \delta u_1 \\ \frac{du_2}{dt} = \left( \frac{\xi}{u_1 + u_2 + u_3} - \frac{r}{k} \right) (2b_{12}u_1u_2 + b_{22}u_2^2 + 2b_{23}u_2u_3 + 2b_{12}u_1u_3) - \delta u_2 \\ \frac{du_3}{dt} = \left( \frac{\xi}{u_1 + u_2 + u_3} - \frac{r}{k} \right) (c_{22}u_2^2 + 2c_{23}u_2u_3 + c_{33}u_3^2) - \delta u_3 \end{cases} \quad (4.2)$$

com condições iniciais  $u_i(t_n) = \tilde{u}_i(x, y, t_{n+1})$ .

Este sistema de equações está associado ao termo de reação do modelo geral proposto.

**Passo 4:** A solução do **Problema (II)** é a solução aproximada do modelo bidimensional (3.7) no instante de tempo  $t_{n+1} \in I_n \subset I$ ,  $\tilde{u}_i(t_{n+1}) = u_i(t_{n+1})$ . Caso  $t_{n+1} < T$ , incrementa-se  $n$ , faz  $\tilde{u}_i(x, y, t_{n+1}) = \hat{u}_i(t)$  e retorna-se ao passo 2. O processo é repetido até que ocorra a igualdade  $t_{n+1} = T$ .

## 4.2 Procedimento para Resolução do Problema (I)

Como discutido anteriormente, o **Problema (I)** é descrito por um sistema de equações diferenciais desacoplado, puramente difusivo. Para sua resolução podemos utilizar algumas técnicas numéricas bem estabelecidas como, por exemplo, o método das diferenças finitas. No entanto, optamos pelo uso do método dos elementos finitos no intuito de garantirmos mais liberdade e precisão na caracterização do domínio quando situações mais reais são consideradas. Além disso, formulações de elementos finitos são muito estáveis e precisas para esta natureza de problemas. Neste sentido, descreveremos a seguir, o processo de resolução deste problema.

Para resolver o resolver **Problema (I)** pelo Método dos Elementos Finitos, precisamos reescreve-lo na sua forma variacional (ou forma fraca). Para tanto, denotamos por

$$L^2(\Omega) = \left\{ v : \Omega \rightarrow \mathbb{R} / \int_{\Omega} v^2 < \infty \right\}$$

o espaço das funções quadrado quadrado integráveis no sentido de Lebesgue, com produto interno

$$(u, v) = \int_{\Omega} uv d\Omega, \quad \forall u, v \in L^2(\Omega),$$

e representamos por

$$H^m(\Omega) = \left\{ v \in L^2(\Omega) \mid \forall \alpha, \|\alpha\| \leq m, \partial^\alpha v \in L^2(\Omega) \right\}.$$

o espaço de Hilbert, onde  $\partial^\alpha v$  indica a derivada de  $v$  no sentido das distribuições.

Com isso, a forma variacional do **Problema (I)** pode ser escrita como:

**Problema PV:** Encontrar  $\tilde{u}_\iota(x, y, t) \in U$ , com  $(x, y) \in \Omega$  e  $t \in I_n$  tal que

$$\int_{\Omega} \dot{\tilde{u}}_\iota v d\Omega + \int_{\Omega} D \nabla \tilde{u}_\iota \nabla v d\Omega = 0, \quad \forall v \in V, \iota = 1, 2, 3, \quad (4.3)$$

onde

$$U = \{\tilde{u}(t) \in H^1(\Omega); \tilde{u}(t)|_{\Gamma_D} = \bar{u}, \tilde{u}(0) = \hat{u}(t_0)\}; \quad (4.4)$$

é o espaço das funções testes,

$$V = \{v \in H^1(\Omega) : v = 0 \text{ sobre } \Gamma_D\}, \quad (4.5)$$

é o espaço das funções peso e  $\dot{\tilde{u}}_\iota$  representa a derivada parcial de  $\tilde{u}_\iota$  em relação ao tempo  $t$ .

Para mostrar a equivalência dos problemas, multiplicamos a equação (4.1) por  $v$  e integramos sobre todo o domínio  $\Omega$ , obtendo:

$$\int_{\Omega} \dot{\tilde{u}}_\iota v d\Omega - \int_{\Omega} D \operatorname{div}(\nabla \tilde{u}_\iota) v d\Omega = 0. \quad (4.6)$$

Aplicando no segundo termo desta equação o seguinte resultado da Álgebra Tensorial  $\operatorname{div}(v \nabla u) = \nabla v \cdot \nabla u + v \operatorname{div}(\nabla u)$ , ver [25], obtemos:

$$\int_{\Omega} \dot{\tilde{u}}_\iota v d\Omega - \int_{\Omega} D \operatorname{div}(v \nabla \tilde{u}_\iota) d\Omega + \int_{\Omega} D \nabla \tilde{u}_\iota \cdot \nabla v d\Omega = 0.$$

Aplicando o Teorema da divergência no segundo termo, ver [25], obtemos:

$$\int_{\Omega} \dot{\tilde{u}}_\iota v d\Omega + \int_{\Omega} D \nabla \tilde{u}_\iota \cdot \nabla v d\Omega - \int_{\Gamma} (D \nabla \tilde{u}_\iota \cdot \mathbf{n}) v d\Gamma = 0.$$

onde  $\mathbf{n}$  é o vetor normal a fronteira  $\Gamma$ . Notem que as condições de contorno na fronteira  $\Gamma$  são do tipo Dirichlet e como  $v = 0$  em  $\Gamma$ , a integral sobre ela é identicamente nula. Com isso temos que:

$$\int_{\Omega} \dot{\tilde{u}}_\iota v d\Omega + \int_{\Omega} D \nabla \tilde{u}_\iota \cdot \nabla v d\Omega = 0,$$

isso é, se  $\tilde{u}_\iota$  é solução do **Problema I**, também será solução do (**Problema PV**). A recíproca é verdadeira e pode ser provado facilmente partindo de 4.3 e utilizando as mesmas relações de forma apropriada.

Para resolver o **Problema PV**, vamos aproxima-lo utilizando uma formulação semi-discreta conforme de Galerkin. Para isso, consideramos a região  $\Omega$  um domínio

poligonal, discretizado por uma malha uniforme de  $n_e$  elementos, tal que

$$\bar{\Omega} = \left( \bigcup_{e=1}^{n_e} \bar{\Omega}_e \right) \text{ e } \Omega_{e_i} \cap \Omega_{e_j} = \emptyset, \quad \forall e_i \neq e_j,$$

onde  $\bar{\Omega}$  é o fecho de  $\Omega$ ,  $\Omega_e$  representa o interior de cada elemento de uma partição uniforme de elementos finitos e  $\bar{\Omega}_e$  seu fecho. Notem que a união de todas as sub-regiões  $\Omega_e$  caracteriza todo o domínio, e que as interseções entre elas são nulas, isto é, não há superposição das regiões  $\Omega_e$ . Denotamos por  $h = \max\{h_e\}$  o parâmetro da malha, sendo  $h_e$  a dimensão do elemento  $\Omega_e$ .

Neste sentido, definindo o subespaço de dimensão finita

$$U_h = \{\tilde{u}_h(t) \in C^0(\Omega) : \tilde{u}_h(t)|_{\Gamma} = \bar{u}_{\Gamma}, \quad \forall \tilde{u}_h|_{\Omega_e} \in P_q(\Omega_e)\} \subset U,$$

como o espaço de elementos finitos lagrangianos de grau até  $q$  e de classe  $C^0(\Omega)$  (conjunto das funções contínuas), e por

$$V_h = \{v_h \in C^0(\Omega) : v_h|_{\Gamma} = 0, \quad \forall v_h|_{\Omega_e} \in P_q(\Omega_e)\},$$

o espaço das funções peso, a aproximação por elementos finitos do **Problema PV** consiste em:

**Problema PV<sub>h</sub>**: Encontrar  $\tilde{u}_\iota^h(x, y, t) \in U_h \subset U$ , com  $t \in I_n$ , tal que

$$\int_{\Omega} \dot{\tilde{u}}_\iota^h v_h d\Omega + \int_{\Omega} D \nabla \tilde{u}_\iota^h \nabla v_h d\Omega = 0, \quad \forall v_h \in V_h, \quad \iota = 1, 2, 3, \quad (4.7)$$

com condição inicial  $\tilde{u}_\iota^h(x, y, t) = \bar{u}_\iota(t)$ .

Para obter o sistema matricial que deriva do **Problema PV<sub>h</sub>**, vamos desenvolver os procedimentos para cada uma das equações  $\iota$  separadamente. Como utilizamos o método dos elementos finitos na construção dos nossos espaços, estamos buscando uma solução aproximada  $\tilde{u}_\iota^h \in U_h$  da forma

$$\tilde{u}_\iota^h(x, y, t) = \sum_{j=1}^{n_e} \tilde{u}_j(t) \varphi_j(x, y), \quad (4.8)$$

com

$$v_h(x, y, t) = \sum_{j=1}^{n_e} v_j \varphi_j(x, y), \quad (4.9)$$

onde  $\varphi_j(x, y)$  é a função de interpolação de suporte compacto associada ao nó  $j$  da

malha, e que possui a seguinte característica:

$$\varphi_j(x_i, y_i) = \begin{cases} 0, & \text{se } i \neq j \\ 1, & \text{se } i = j \end{cases},$$

com  $(x_i, y_i)$  representando as coordenadas do nó  $i$  da malha.

Substituindo  $\tilde{u}_i^h$  e  $v_h$  em (4.7), temos que

$$\int_{\Omega} \left[ \sum_{j=1}^{n_e} \dot{\tilde{u}}_j(t) \varphi_j(x, y) \right] \left[ \sum_{i=1}^{n_e} v_i \varphi_i(x, y) \right] d\Omega + \int_{\Omega} D \left[ \sum_{j=1}^{n_e} \tilde{u}_j(t) \nabla \varphi_j(x, y) \right] \left[ \sum_{i=1}^{n_e} v_i \nabla \varphi_i(x, y) \right] d\Omega = 0,$$

que pode ser rearranjada como

$$\sum_{i=1}^{n_e} v_i \left\{ \sum_{j=1}^{n_e} \int_{\Omega} [\varphi_i(x, y) \varphi_j(x, y)] d\Omega \dot{\tilde{u}}_j(t) + \sum_{j=1}^{n_e} \int_{\Omega} D [\nabla \varphi_i(x, y) \nabla \varphi_j(x, y)] d\Omega \tilde{u}_j(t) \right\} = 0. \quad (4.10)$$

Como (4.10) vale para todo  $v_i$ , ele conduz ao seguinte sistema de equações diferenciais ordinárias lineares:

$$\sum_{j=1}^{n_e} \int_{\Omega} [\varphi_i(x, y) \varphi_j(x, y)] d\Omega \dot{\tilde{u}}_j(t) + \sum_{j=1}^{n_e} \int_{\Omega} D [\nabla \varphi_i(x, y) \nabla \varphi_j(x, y)] d\Omega \tilde{u}_j(t) = 0. \quad (4.11)$$

para todo  $i = 1, 2, \dots, n_e$ . Este sistema pode ser representado matricialmente como:

$$\mathbf{M}\dot{\mathbf{u}}(t) + \mathbf{K}\mathbf{u}(t) = \mathbf{0}, \quad (4.12)$$

onde  $\mathbf{u}(t) = (\tilde{u}_1(t), \dots, \tilde{u}_{n_e}(t))$ ,  $\mathbf{M} = \sum_{e=1}^{n_e} M_{ij}^e$  e  $\mathbf{K} = \sum_{e=1}^{n_e} K_{ij}^e$  são denominadas matrizes de massa e rigidez, respectivamente, com

$$M_{ij}^e = \int_{\Omega_e} (\varphi_i^e(x, y) \varphi_j^e(x, y)) d\Omega_e, \\ K_{ij}^e = \int_{\Omega_e} D (\nabla \varphi_i^e(x, y) \nabla \varphi_j^e(x, y)) d\Omega_e,$$

e  $\varphi^e$  representa a função  $\varphi$  restrita a nível do elemento. No Apêndice A mostramos a representação da função  $\varphi^e$  para elementos triangulares e quadrangulares e o mecanismo de transformação isoparamétrica que utilizamos no processo de construção das matrizes  $M_{ij}^e$  e  $K_{ij}^e$ .

Para resolver o sistema de equações diferenciais ordinárias de valor inicial (4.12), vamos utilizar a família dos métodos trapezoidais generalizados [26] dada por:

$$\mathbf{M}z_{n+1} + \mathbf{K}u_{n+1} = \mathbf{F}, \quad (4.13)$$

$$u_{n+1} = u_n + \Delta t z_{n+\omega}, \quad (4.14)$$

$$z_{n+\omega} = (1 - \omega)z_n + \omega z_{n+1}, \quad (4.15)$$

onde  $\omega \in [0, 1]$  é o parâmetro que define o método,  $u_n$  e  $z_n$  são aproximações para  $\mathbf{u}(t)$  e  $\dot{\mathbf{u}}(t)$ , respectivamente, com  $n = 0, 1, \dots, (m - 1)$ .

Explicitando a equação (4.13) em termos apenas da função  $\mathbf{u}(t)$  temos que:

$$(\mathbf{M} + \omega \Delta t \mathbf{K})\mathbf{u}_{n+1} = (\mathbf{M} - (1 - \omega)\Delta t \mathbf{K})\mathbf{u}_n + \Delta t(\omega \mathbf{F}_{n+1} + (1 - \omega)\mathbf{F}_n). \quad (4.16)$$

Observe que,

- Se  $\omega = 1$ , obtemos o método de Euler regressivo (incondicionalmente estável):

$$(\mathbf{M} + \Delta t \mathbf{K})u_{n+1} = \mathbf{M}u_n + \Delta t \mathbf{F}_{n+1}; \quad (4.17)$$

- Se  $\omega = 0$ , obtemos o método de Euler progressivo:

$$\mathbf{M}u_{n+1} = (\mathbf{M} - \Delta t \mathbf{K})u_n + \Delta t \mathbf{F}_n; \quad (4.18)$$

- Se  $\omega = \frac{1}{2}$ , obtemos o método de Crank-Nicolson:

$$(2\mathbf{M} + \Delta t \mathbf{K})u_{n+1} = (2\mathbf{M} - \Delta t \mathbf{K})u_n + \Delta t(\mathbf{F}_{n+1} + \mathbf{F}_n). \quad (4.19)$$

Ambos os métodos de Euler possuem erro de aproximação de primeira ordem ( $O(\Delta t)$ ), sendo o progressivo condicionalmente estável e o regressivo incondicionalmente estável. Por outro lado, o método de Crank-Nicolson ( $\omega = \frac{1}{2}$ ) possui uma aproximação de segunda ordem ( $O(\Delta t)^2$ ) e incondicionalmente estável. Neste sentido, optamos pelo uso do método de Crank-Nicolson nas simulações deste trabalho.

Existem vários métodos diretos ou iterativos para resolver o sistema linear resultante da expressão (4.19). Como a matriz resultante do lado esquerdo do sistema linear é simétrica positiva definida, é plausível utilizar o método de Cholesky [20] para resolver o sistema linear.

A solução resultante do sistema linear é utilizada como condição inicial para o **Problema (II)**, caracterizado pelo segundo subproblema da decomposição de operadores e apresentado no algoritmo de resolução.

A resolução é feita por meio do método de Runge-Kutta de quarta ordem, uma vez que, o mesmo busca uma melhor estimativa da derivada com a avaliação da função em mais pontos no intervalo de discretização  $I_n$ , sem que seja preciso fazer o cálculo de derivadas (caso do método de Taylor de ordem superior), muitas vezes difíceis de se obter, além de possuir erro de truncamento global de quarta ordem.

Diferente do primeiro subproblema, uma abordagem sobre o método de Runge-Kutta é feita no Apêndice B, devido o método ser bastante conhecido na literatura. Para mostrar a aplicabilidade do modelo (3.7) proposto neste trabalho, a eficiência da formulação numérica, bem como a eficiência da rotina computacional desenvolvida na linguagem de programação *Python*, é apresentado no próximo capítulo resultados numéricos que simulam a dinâmica e espalhamento de mosquitos selvagens e transgênicos.

# Capítulo 5

## Resultados

Neste capítulo, apresentamos os resultados numéricos obtidos a partir da implementação do modelo de reação-difusão (3.7). Em um primeiro momento apresentamos simulações numéricas que ilustram o comportamento das populações de mosquitos selvagens e transgênicos com o objetivo de validação do modelo por comparação ao equilíbrio de Hardy-Weinberg. Em seguida, na seção 5.2, apresentamos simulações numéricas em uma região geográfica de interesse do ponto de vista entomológico. A malha gerada sobre a imagem de satélite desta região nos permite traçar um cenário mais realístico. Para isso submetemos estas populações a cenários e avaliamos a dinâmica e espalhamento ao longo do tempo.

### 5.1 Experimentos Preliminares

As simulações numéricas desta seção para o modelo (3.7) ilustram a dinâmica e espalhamento das populações de mosquitos selvagens e transgênicos, interagindo sobre uma região  $\Omega = [0, 30] \times [0, 30]$  km<sup>2</sup>. Esse domínio é suficientemente grande para que as populações se espalhem ao longo de uma estação do ano (treze semanas).

No caso dos valores dos parâmetros presentes no modelo que ainda não foram estabelecidos, utilizamos a estimativa para a taxa intrínseca de crescimento obtida segundo Suleman [48] em condições de laboratório resultando em uma taxa intrínseca de crescimento semanal  $r = 1,2$ , a taxa de recrutamento de mosquitos para a fase adulta  $\xi$  estimada usando a tabela de vida de Suleman [48] e expressões de Birch [8], resultando em uma taxa de 5,1 por semana, uma taxa de mortalidade ocasionada por razões naturais  $\delta_1$  de  $(5,1 - 1,2) = 3,9$  por semana e uma taxa mortalidade independente da densidade de  $\delta_2 = 0,5$  por semana. Através dos dados obtidos por Reisen e Aslamkhan [42] para estimar a dispersão de fêmeas *Anopheles stephensi*, consideramos o mesmo coeficiente de difusão  $D = 13 \times 10^{-2}$  km<sup>2</sup>/semana para as três variedades.

Por fim, destacamos que todas as condições iniciais para os experimentos desta

seção foram introduzidas no **Problema I** da subseção 4.4.1. para a resolução numérica do modelo proposto (3.7).

No Experimento 1 buscamos validar o modelo (3.7) proposto neste trabalho, comparando os resultados obtidos das simulações numéricas com o equilíbrio de Hardy-Weinberg e também com os resultados em teste de laboratório realizado por Moreira et al. [27]. Uma vez validado o modelo, buscamos no Experimento 2 ampliar a região de distribuição inicial dos mosquitos a fim de analisar o novo comportamento da dinâmica e espalhamento dos mosquitos.

Apresentamos na Tabela 5.1 os dados utilizados para as simulações numéricas desta seção.

Tabela 5.1: Dados utilizados para a resolução do modelo proposto para os Experimentos 1 e 2.

Domínio espacial	$\Omega = [0, 30] \times [0, 30] \text{ km}^2$
Domínio temporal	$I = [0, 13] \text{ semanas}$
Passo de tempo	$\Delta t = 0,05$
Método de Crank-Nicolson	$\omega = 0,5$
Coefficiente de difusão	$D = 13 \times 10^{-2} \text{ km}^2/\text{semana}$
Capacidade de suporte	$k = 2000$
Taxa intrínseca de crescimento	$r = 1,2 \text{ por semana}$
Taxa de recrutamento de mosquitos para a fase adulta	$\xi = 5,1 \text{ por semana}$
Taxa de mortalidade ocasionada por razões naturais	$\delta_1 = 3,9 \text{ por semana}$
Taxa de mortalidade independente da densidade	$\delta_2 = 0,5 \text{ por semana}$

**Experimento 1.** Para este experimento, simulamos o comportamento de uma população composta inicialmente por 1000 mosquitos selvagens e 1000 mosquitos transgênicos heterozigotos, distribuídos homogeneamente sobre uma região central do domínio  $[14; 16] \times [14; 16]$  ( $\text{km}^2$ ). Esta configuração inicial é representada por:

$$u_1(x, y, 0) = u_2(x, y, 0) = \begin{cases} 250, & \text{se } 14 \leq x \leq 16 \text{ e } 14 \leq y \leq 16, \\ 0, & \text{se } 0 \leq x < 14 \text{ e } 16 < x \leq 30; 0 \leq y < 14 \text{ e } 16 < y \leq 30, \end{cases} \quad (5.1)$$

$$u_3(x, y, 0) = 0. \quad (5.2)$$

Em termos de aplicabilidade, estas condições iniciais significam que, uma vez identificado um foco de mosquitos selvagens e estimada sua população, uma quantidade equivalente de mosquitos transgênicos heterozigotos é liberada de maneira homogênea nesta exata área. A população de transgênicos homozigotos é inicialmente nula, mas ela surge naturalmente durante os processos de acasalamento, (Figura 5.3) e seu espalhamento segue o mesmo padrão dos mosquitos selvagens

(Figura 5.1) e mosquitos transgênicos heterozigotos (Figura 5.2).

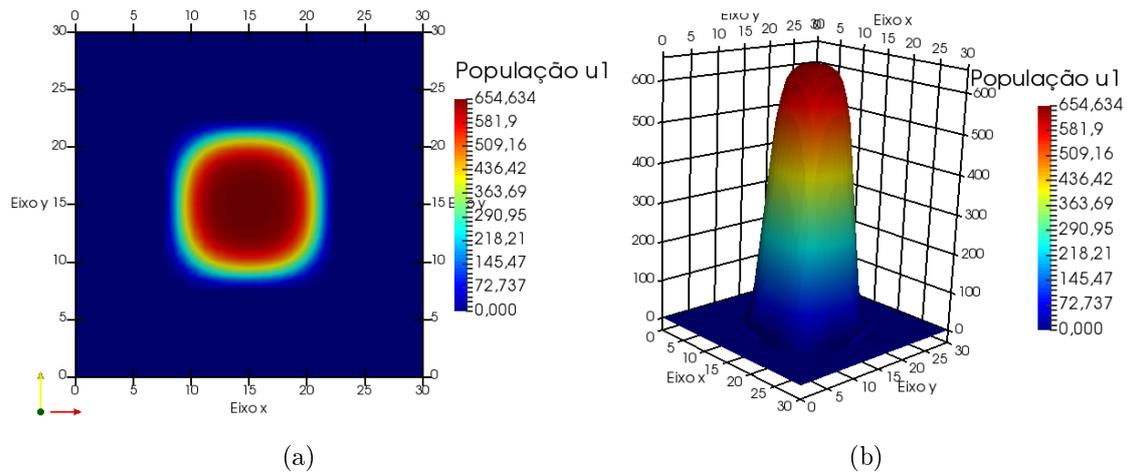


Figura 5.1: População de mosquitos selvagens do Experimento 1, com condições iniciais (5.1), após 13 semanas, representada por curvas de nível (a) e perspectiva espacial (b).

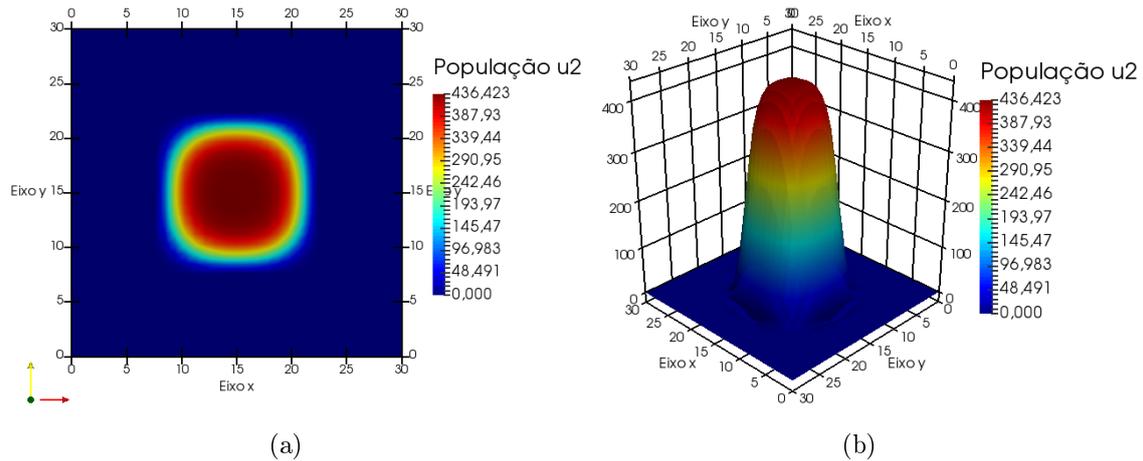


Figura 5.2: População de mosquitos transgênicos heterozigotos do Experimento 1, com condições iniciais (5.1), após 13 semanas, representada por curvas de nível (a) e perspectiva espacial (b).

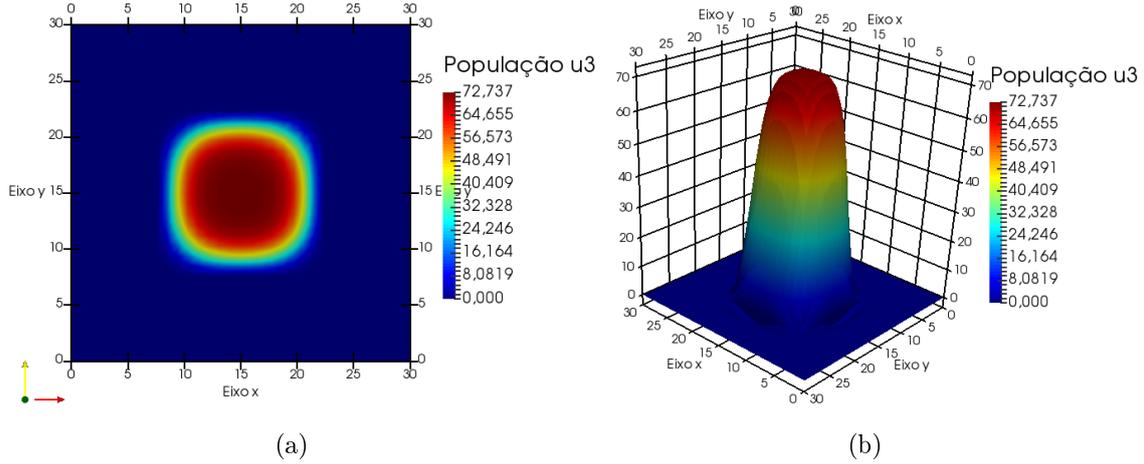


Figura 5.3: População de mosquitos transgênicos homocigotos do Experimento 1, com condições iniciais (5.1), após 13 semanas, representada por curvas de nível (a) e perspectiva espacial (b).

Neste experimento, temos as frequências genotípicas  $p = 0,75$  e  $q = 0,25$  para a população inicial. Com estas proporções é esperado um equilíbrio de Hardy-Weinberg de  $0,75^2$  para mosquitos selvagens,  $2 \times 0,75 \times 0,25$  para transgênicos heterocigotos e  $0,25^2$  para transgênicos homocigotos, isto é,  $(u_1, u_2, u_3) = (56,25, 37,5, 6,25)$ .

A quantidade de mosquitos, ao final das treze semanas, foi estimada através do método de integração de Newton-Cotes, resultando em  $u_1 = 24.452$  mosquitos selvagens,  $u_2 = 16.511$  mosquitos transgênicos heterocigotos e  $u_3 = 3.318$  mosquitos transgênicos homocigotos. Essas populações finais equivalem, respectivamente, a 55,22%, 37,29% e 7,49% que são valores próximos ao equilíbrio de Hardy-Weinberg. Estes resultados assemelham-se ainda àqueles do teste de laboratório descrito em [27], que resultou em uma estabilização da população de mosquitos selvagens em 56% e de mosquitos transgênicos em 44%.

Para intervalos de tempo maiores, mais especificamente  $T = 16$  e  $T = 20$ , a população atingiu  $(u_1, u_2, u_3) = (31.906, 21.448, 4.072)$  (equivalente as proporções 55,56%, 37,34% e 7,09%) e  $(u_1, u_2, u_3) = (40.649, 27.235, 4.957, 64)$  (equivalente as proporções 55,80%, 37,38% e 6,80%), respectivamente, o que mostra uma tendência de que os resultados estão sendo ratificados pelo equilíbrio de Hardy-Weinberg e pelos resultados de [27].

**Experimento 2.** Neste experimento, simulamos o comportamento dos mosquitos ainda admitindo a mesma quantidade inicial do Experimento 1, ou seja, 1000 mosquitos selvagens e 1000 mosquitos transgênicos heterocigotos, mantendo a mesma distribuição espacial inicial para os mosquitos selvagens e considerando a quantidade de mosquitos transgênicos heterocigotos distribuída homogeneamente em uma

região mais abrangente, compreendendo o domínio  $[12, 5; 17, 5] \times [12, 5; 17, 5]$  ( $\text{km}^2$ ). Esta nova distribuição é descrita pelas condições iniciais

$$u_1(x, y, 0) = \begin{cases} 250, & \text{em } 14 \leq x \leq 16 \text{ e } 14 \leq y \leq 16, \\ 0, & \text{em } 0 \leq x < 14 \text{ e } 16 < x \leq 30; 0 \leq y < 14 \text{ e } 16 < y \leq 30, \end{cases} \quad (5.3)$$

$$u_2(x, y, 0) = \begin{cases} 40, & \text{em } 12,5 \leq x \leq 17,5 \text{ e } 12,5 \leq y \leq 17,5, \\ 0, & \text{em } 0 \leq x < 12,5 \text{ e } 17,5 < x \leq 30; 0 \leq y < 12,5 \text{ e } 17,5 < y \leq 30, \end{cases} \quad (5.4)$$

$$u_3(x, y, 0) = 0. \quad (5.5)$$

Isto significa que, identificado um foco de mosquitos selvagens, uma quantidade equivalente de mosquitos transgênicos heterozigotos é liberada não apenas sobre o foco mas também no seu entorno, mais especificamente  $1,5 \text{ km}^2$  além dos limites do foco de mosquitos selvagens. Após 13 semanas, esta situação evolui para a dinâmica e espalhamento visualizados nas Figuras 5.4, 5.5 e 5.6 para populações de mosquitos selvagens, transgênicos heterozigotos e transgênicos homozigotos, respectivamente.

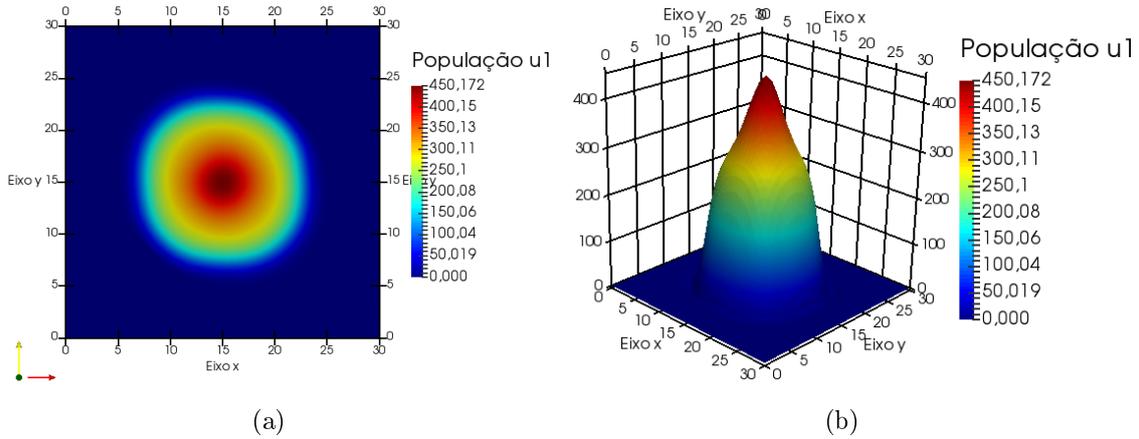


Figura 5.4: População de mosquitos selvagens do Experimento 2, com condições iniciais (5.3), após 13 semanas, representada por curvas de nível (a) e perspectiva espacial (b).

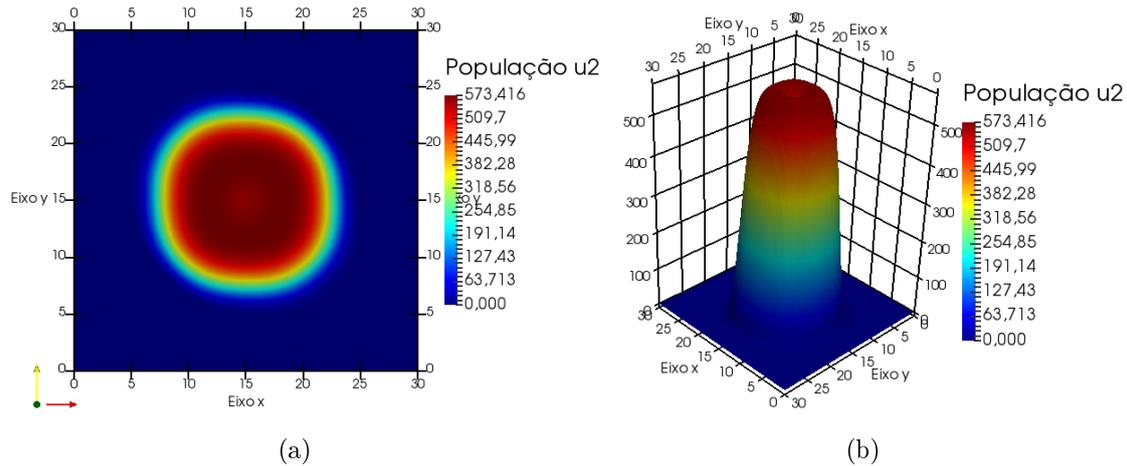


Figura 5.5: População de mosquitos transgênicos heterozigotos do Experimento 2, com condições iniciais (5.4), após 13 semanas, representada por curvas de nível (a) e perspectiva espacial (b).

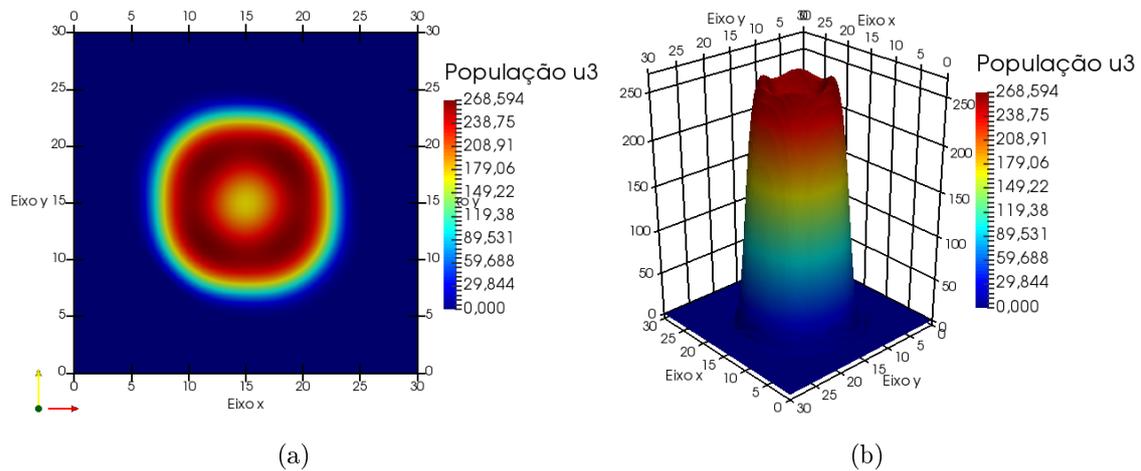


Figura 5.6: População de mosquitos transgênicos homozigotos do Experimento 2, com condições iniciais (5.5), após 13 semanas, representada por curvas de nível (a) e perspectiva espacial (b).

A população final de mosquitos nessa simulação atingiu os valores de  $u_1 = 17.166,5$ ,  $u_2 = 28.365$  e  $u_3 = 15.042,2$ , resultando em uma estabilização da população de mosquitos selvagens em 28,33% e de mosquitos transgênicos em 71,65%, compreendendo heterozigotos e homozigotos. Nesse caso, não é esperado um equilíbrio de Hardy-Weinberg, uma vez que os acasalamentos deixaram de ser aleatórios quando no entorno do foco de mosquitos selvagens passou a haver apenas mosquitos transgênicos heterozigotos.

Comparando os Experimentos 1 e 2, é visível que, apesar de ambas as simulações iniciarem com a mesma quantidade de mosquitos, a distribuição inicial utilizada na segunda apresenta resultados melhores, alcançando uma maior quantidade de mosquitos transgênicos ao longo das 13 semanas.

## 5.2 Experimentos da Região Real

Nesta seção, apresentamos simulações numéricas em um espaço bidimensional, com um pré-processamento geométrico e uma geração de malha que leva em conta todas as assimetrias e estruturas internas da região espacial.

### 5.2.1 Região do Reservatório da Usina Hidrelétrica

No Brasil cerca de 99% dos casos registrados de malária estão na Amazônia Legal [45]. Essa problemática levou Santos et al. [43] a realizar uma análise do habitat do mosquito *Anopheles darlingi* no entorno da Área de Aproveitamento Múltiplo de Manso APM-Manso (Figura 5.7), localizada no centro-sul do estado de Mato Grosso (região presente na Amazônia Legal). Nesse estudo foram feitas coletas de vetores, nos anos de 2000/2001 e 2004/2005/2006 e aplicadas técnicas de georreferenciamento e regressão logística para analisar o habitat do mosquito na região do reservatório.

Em [43], as imagens georreferenciadas, as informações sobre a vegetação/uso da terra e os resultados obtidos sobre os locais próximos do reservatório com maiores probabilidades de contaminação nos possibilitaram escolher esta região geográfica como região de estudo deste trabalho.

Diante disto, definimos a Área de Aproveitamento Múltiplo de Manso APM-Manso como região espacial para o estudo da dinâmica e espalhamento de mosquitos selvagens e transgênicos.

Segundo Santos et al. [43], o clima predominante na região é o Tropical Semi-úmido, com temperatura média anual de 26° Celsius e precipitação de 1750 mm por ano. Em relação a população humana, Santos et al. [43] verificaram que a mesma está presente nas comunidades rurais e também em condomínios imobiliários de alto padrão construídos após a implantação da usina, atraindo muitas pessoas para a prática de turismo.

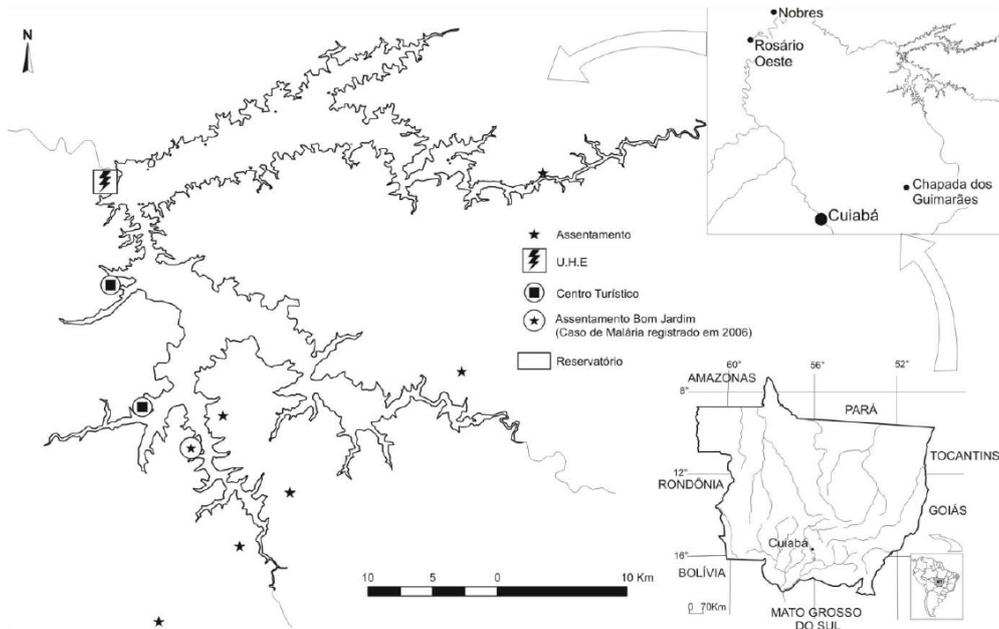


Figura 5.7: Área de estudo  
 Fonte: Santos et al. [43]

A imagem digital mostrada na Figura 5.8 foi obtida por Santos et al. [43] através do satélite Landsat-ETM (WRS 226/70) e georreferenciada no software SPRING 4.2 (INPE).

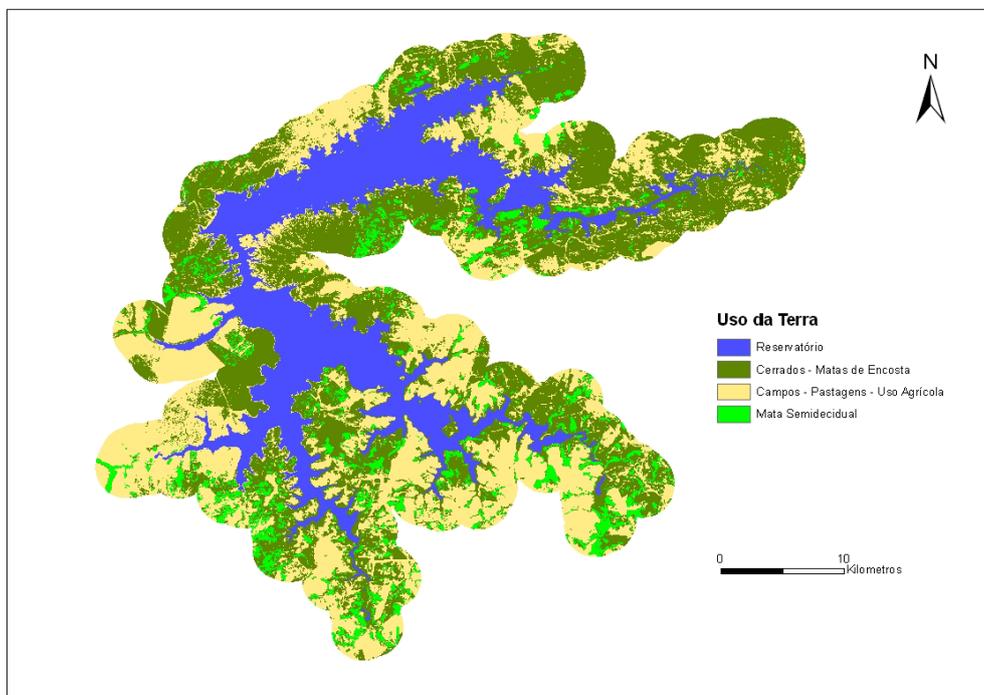


Figura 5.8: Imagem georreferenciada  
 Fonte: Santos et al. [43]

A imagem georreferenciada mostrada na Figura 5.7 mostra que no entorno do reservatório, preenchido pelas águas dos rios Manso e Casca, existem 03 (três) tipos de cobertura vegetal originária na região: cerrado, campo e mata semidecidual. De maneira sucinta, podemos caracterizar cada uma delas:

- O Cerrado é uma savana tropical com maior biodiversidade do mundo. Devido a sua excepcional riqueza biológica, ele vem se tornando palco de uma crescente ocupação humana [10].
- Os campos são resultados da forte ação antrópica [41];
- Mata semidecidual, ecossistema presente na Mata Atlântica e no cerrado e que tem por característica um clima com duas estações: uma seca e outra chuvosa [10].

A Figura 5.9 permite obter informação acerca dos locais mais suscetíveis à presença de mosquitos durante a fase de enchimento do reservatório. Nesta Figura é possível perceber que quanto mais próxima da encosta do reservatório, maior é a probabilidade de contato com os mosquitos. Essa informação nos auxiliará, nos experimentos a seguir, a introduzir os mosquitos transgênicos nas regiões de maior incidência das populações selvagens, pois este é um indicativo de que estas áreas sejam um habitat propício ao seu desenvolvimento.

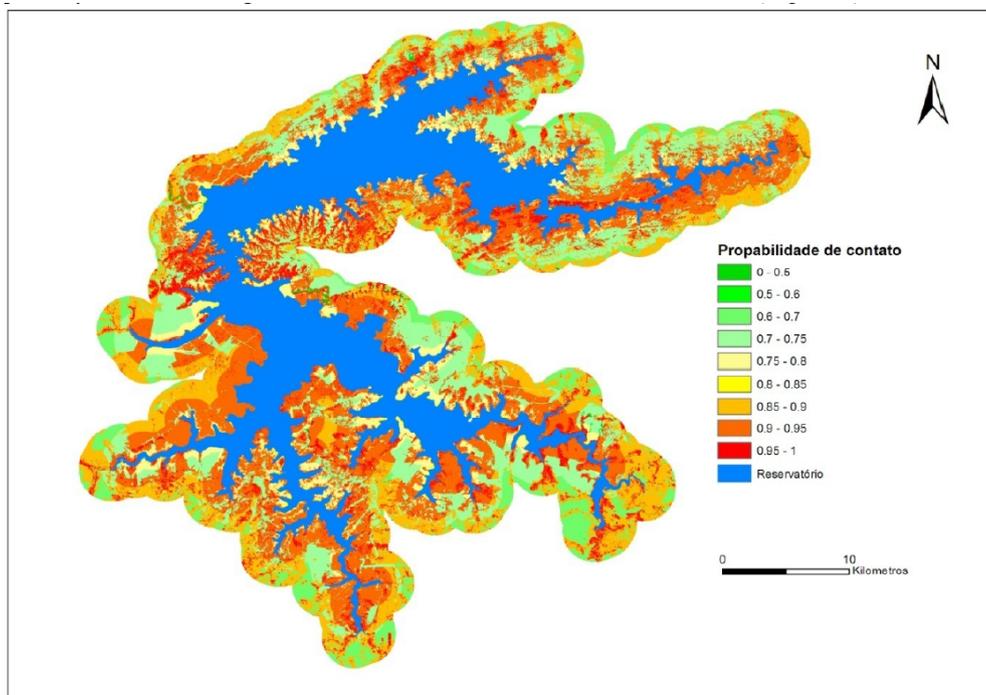


Figura 5.9: Mapa com a probabilidade de contato com o mosquito durante a fase de enchimento do reservatório.

Fonte: Santos et al. [43]

## 5.2.2 Procedimento Computacional

Para o procedimento computacional, quatro etapas permitiram utilizar o domínio geométrico a fim de obter uma malha capaz de caracterizar com maior precisão possível a região de escolha.

A priori, elegeu-se o software *Salome* como ferramenta computacional. A imagem obtida via geoprocessamento foi introduzida no software e na sequência foram desenhadas, no módulo *Geometry* as subregiões presentes na imagem, tais como: o reservatório (lago), campos e florestas. Desta forma, tornou-se possível a obtenção de uma malha de elementos finitos, cuja estrutura, aproxima-se da realidade mostrada na imagem.

A segunda etapa caracterizou-se por transferir a geometria presente no módulo *Geometry* para o módulo *Mesh*, quando então uma malha é gerada. A visualização dessa malha também se dá no módulo *Mesh*.

Na terceira etapa, um script em linguagem *Python* foi desenvolvido para produzir um arquivo *.txt*, que descreve as informações da malha gerada, tais como informações dos elementos, coordenadas de seus respectivos nós e suas conectividades. Por sua vez, esse arquivo é levado para a rotina computacional de elementos finitos implementada na linguagem de programação *Python* e é feita a leitura dos dados desse arquivo. Neste estágio, o modelo proposto (3.7) é resolvido numericamente.

Obtida a solução do modelo, chegamos a última etapa, isto é, a visualização das soluções. Neste estágio, a malha obtida anteriormente no módulo *Mesh* e as informações das soluções são introduzida no *Software*, obtendo assim as soluções gráficas.

## 5.2.3 Simulação Computacional: domínio regular

Nesta subseção apresentamos a dinâmica e o espalhamento das populações de mosquitos selvagens e transgênicos, interagindo sobre a região regular, apresentada na Figura 5.10. Esta região possui extensão territorial de  $\Omega = [0, 10] \times [0, 10]$  km<sup>2</sup>.

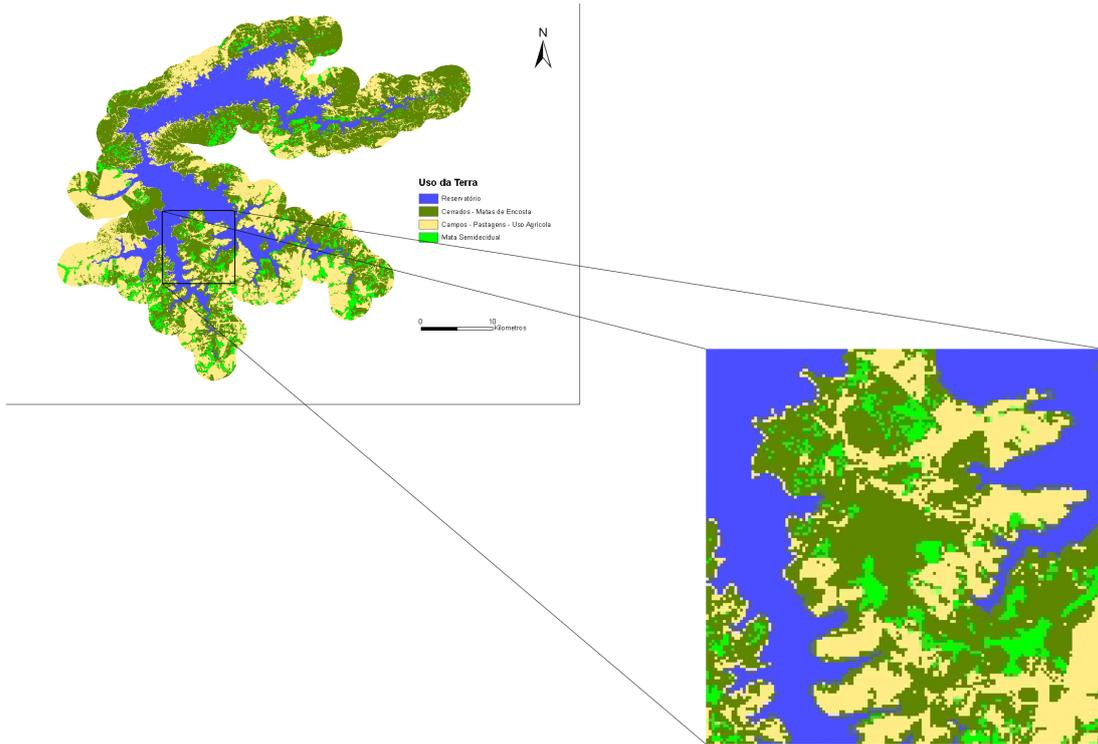


Figura 5.10: Área de estudo de  $\Omega = [0, 10] \times [0, 10]$  km<sup>2</sup>.

Vamos ampliar a região espacial para  $[0, 15] \times [0, 15]$  km<sup>2</sup> para garantir que as populações se espalhem ao longo de oito semanas sem que o comportamento na região de interesse seja influenciado pelas condições de contorno estabelecidas na fronteira da região maior.

Com as informações sobre a vegetação fornecidas na Figura 5.8, desenhamos geometrias para representar cada uma delas, conforme a Figura 5.11 a seguir.



Figura 5.11: Desenho das subregiões da região regular 1.

Em seguida, a região foi discretizada em elementos triangulares, e então foi possível obter a visualização da malha correspondente. Na Figura 5.12 a seguir, apresentamos o resultado gráfico desta discretização.

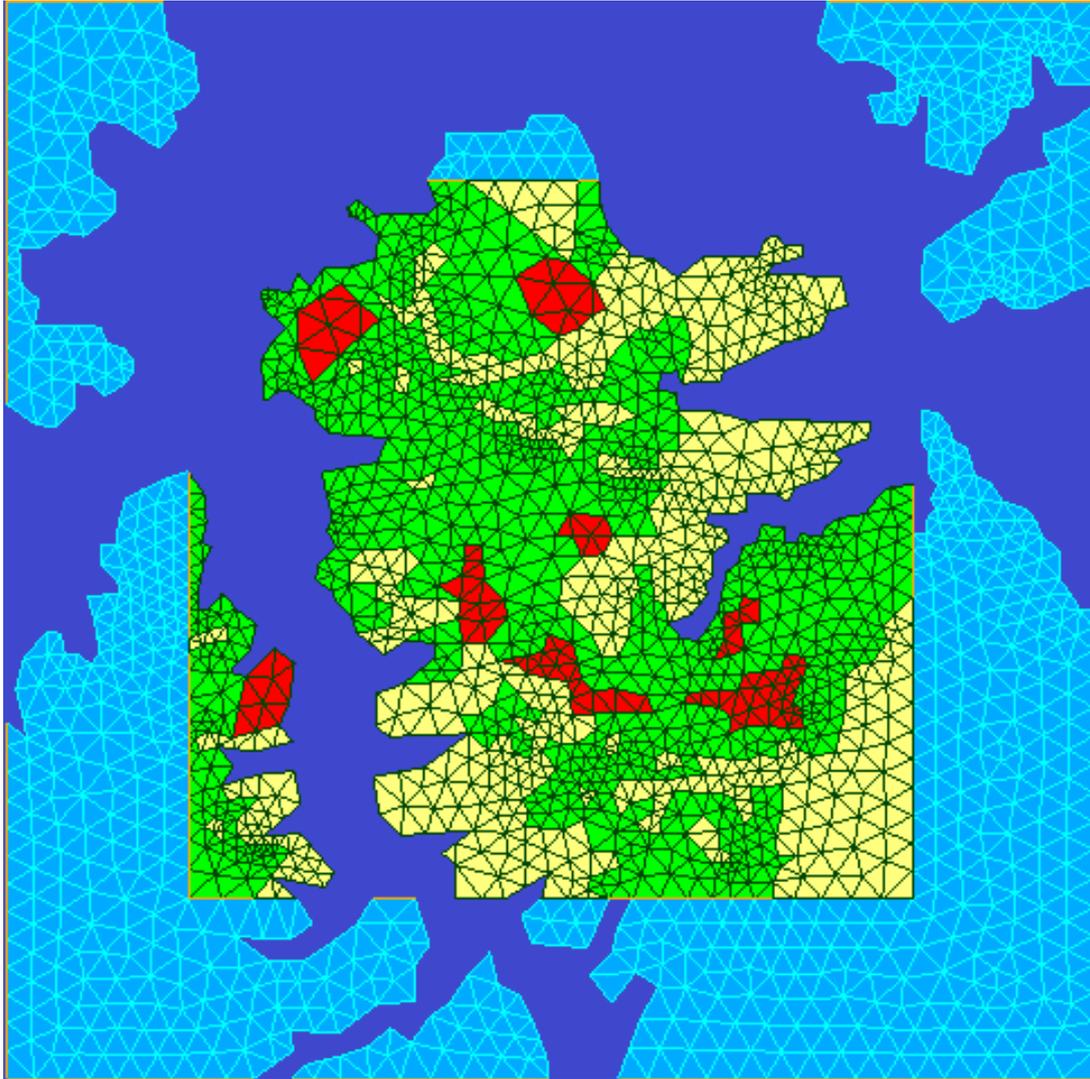


Figura 5.12: Malha para a região regular.

A classificação da cobertura da terra é estratificada em cerrado, mata semidecidual, campo, pastagem, terras de uso agrícola e água. As geometrias com coloração amarela representam as regiões de campo, pastagens e terras de uso agrícola, as geometrias em cor verde representam as regiões de cerrado e mata semidecidual. As geometrias com cores em vermelho são também regiões de cerrado e mata semidecidual, no entanto, são as regiões com maior probabilidade de contato com o mosquito, conforme a Figura 5.9. Baseado nessas informações de probabilidade de contato, selecionamos as regiões de cor vermelha da Figura 5.12 para a liberar os mosquitos transgênicos heterozigotos.

Diferentes valores para a dispersão de mosquitos podem ser encontrados na literatura, variando devido às condições meteorológicas, topografia, estado fisiológico dos mosquitos liberados, tamanho corporal, densidade populacional, disponibilidade de locais de oviposição. Estudos sobre a dispersão de mosquitos indicam que eles

apresentam um deslocamento menor em áreas urbanas e florestas [50] e maior dispersão ao longo do campo e áreas abertas [23], [7], o que implica que a topografia local é um dos vários fatores extrínsecos e intrínsecos que influenciam a dispersão dos mosquitos.

Estudos realizados por Bailey et al. [2] concluíram que a curta distância de dispersão de *Culex tarsalis* era independente da direção do vento, enquanto que a maior distância de dispersão ( $> 5$  km) era sempre a favor do vento. Essa conclusão nos dá diretrizes sobre a possibilidade desse fato ocorrer para outras espécies de mosquitos (Diptera: Culicidae). Sendo a premissa do modelo proposto baseada na dispersão de mosquitos de baixa dispersão (urbanos e com preferência a matas), nenhuma advecção será considerada.

O coeficiente de difusão é estimado por  $D = \frac{\langle x^2 \rangle}{q_i t}$ , onde  $\langle x^2 \rangle$  é o deslocamento médio quadrático e  $q_i$  a constante numérica relacionada a dimensão espacial do modelo ( $q_i=2, 4$  ou  $6$  para problemas 1D, 2D ou 3D, respectivamente). Diferente dos experimentos da seção anterior, nesta subseção adotamos dois valores distintos para o coeficiente de difusão, um menor para regiões de vegetação alta e outro maior para regiões de campo aberto. Em regiões abertas, vamos assumir que o mosquito se desloque  $0,87$  km durante sua vida que é de  $0,64$  semanas de acordo com a taxa de mortalidade assumida (vide Tabela 5.2). Com isso teremos um coeficiente de difusão  $D = \frac{0,87^2}{4 \times 0,64} = 0,29$  km<sup>2</sup>/semana. De maneira análoga, considerando que em regiões de mata e cerrado o deslocamento é de  $0,57$  km obtemos  $D = 0,13$  km<sup>2</sup>.

Além disso, consideramos que a região de campo atua como uma barreira para os mosquitos selvagens que já estão ambientados na região, conforme [49]. Nesse caso, apenas os mosquitos transgênicos atravessam as regiões de campo a fim de fixarem-se em ambiente adequado. A ideia é que eles atravessem rapidamente as regiões abertas, uma vez que a difusão é mais rápida nesse ambiente, e atinjam as zonas próximas ao lago para oviposição.

As condições iniciais adotadas foram estimadas a partir da taxa de picada em humanos (HBR, do inglês *human biting rate*), que contabiliza o número de mosquitos coletados por humano por período de coleta. Essa taxa foi obtida por Zeilhofer et al. [55] seguindo os protocolos da OMS e com um período de coleta de 4 horas, e foi mais alta em regiões de florestas semidecíduais, indicando que os mosquitos estão bem estabelecidos nessas áreas. De acordo com Cardé [13], o reconhecimento inicial de um hospedeiro humano por um mosquito ocorre a uma distância de 10 metros, a partir do  $CO_2$  emitido na sua respiração. Isso significa que um humano tem uma área de atração para mosquitos estimada em  $314$  m<sup>2</sup>. O reservatório cobre uma área de  $427$  km<sup>2</sup>. A quantidade de mosquitos pode então ser estimada multiplicando HBR diária pela expectativa de vida do mosquito em semanas e teremos  $HBR \times 4,0 \times 4,6$  para cada  $314$  m<sup>2</sup> do reservatório, considerando que o mosquito tenha uma atividade

diária de 16 horas. Em regiões de alta incidência a área obtida foi de 5,2607 km<sup>2</sup>, vamos considerar  $HBR = 56$  e então obtemos aproximadamente 17.496 mosquitos; usando o mesmo raciocínio, vamos considerar  $HBR = 26$  para regiões de baixa incidência de mosquitos, cuja respectiva área corresponde à 37,123 km<sup>2</sup> e obteremos aproximadamente 57.743 mosquitos.

Diante disso, consideramos uma quantidade de mosquitos selvagens  $u_1 = 57.743$  distribuídos homogeneamente nas regiões de cerrado mais uma quantidade de  $u_1 = 17.496$  nas regiões com cor vermelho, uma quantidade de transgênicos heterozigotos  $u_2 = 17.496$  distribuídos homogeneamente também nas regiões de coloração vermelha (Figura 5.12) e uma quantidade de transgênicos homozigotos  $u_3 = 0$ .

Consideramos condições de Dirichlet em todo o contorno da região maior e no contorno do reservatório consideramos fluxo nulo.

A Tabela 5.2 resume os valores dos dados utilizados nas simulações numéricas deste cenário. As taxas são referentes ao ciclo de vida do *Anopheles darlingi*, que é a espécie de mosquito encontrada com maior abundância na região, e foram obtidos de [52],[53]. Os valores dos coeficientes de difusão foram obtidos a partir das medidas de deslocamento da espécie, que podem atingir até 3 km [49].

Tabela 5.2: Dados utilizados para a simulação do modelo proposto para a região regular localizada no entorno da APM-Manso.

Domínio espacial	$\Omega = [0, 10] \times [0, 10] \text{ km}^2$
Domínio temporal	$I = [0, 10] \text{ semanas}$
Passo de tempo	$\Delta t = 0, 2$
Método de Crank-Nicolson	$\omega = 0, 5$
Coefficiente de difusão para as regiões de campo	$D = 29 \times 10^{-2} \text{ km}^2/\text{semana}$
Coefficiente de difusão para as regiões de cerrado	$D = 13 \times 10^{-2} \text{ km}^2/\text{semana}$
Capacidade de suporte	$k = 3 \times 10^6$
Taxa intrínseca de crescimento	$r = 4, 3484 \text{ por semana}$
Taxa de recrutamento de mosquitos para a fase adulta	$\xi = 8, 3484 \text{ por semana}$
Taxa de mortalidade ocasionada por razões naturais	$\delta_1 = 4, 0 \text{ por semana}$
Taxa de mortalidade independente da densidade	$\delta_2 = 2, 545 \text{ por semana}$

As soluções gráficas apresentadas nas Figuras a seguir representam, na região de interesse  $\Omega = [0, 10] \times [0, 10] \text{ km}^2$ , a dinâmica e o espalhamento dos mosquitos selvagens e transgênicos ao longo de dez semanas (mais especificamente nos tempos  $T = 1, T = 2, T = 4, T = 6, T = 8$  e  $T = 10$ ).

Para os mosquitos selvagens obtivemos as soluções apresentadas nas Figuras 5.13 a seguir. Observe que entre 4 e 6 semanas ocorre uma notável ocupação dos mosquitos selvagens nas regiões de mata semidecidual. Na oitava semana já é possível

observar uma ocupação dos mosquitos selvagens em regiões de mata. Isso ocorre devido ao fato de que os mosquitos selvagens são gerados dos cruzamentos entre as variedades transgênicas presentes naquela região.

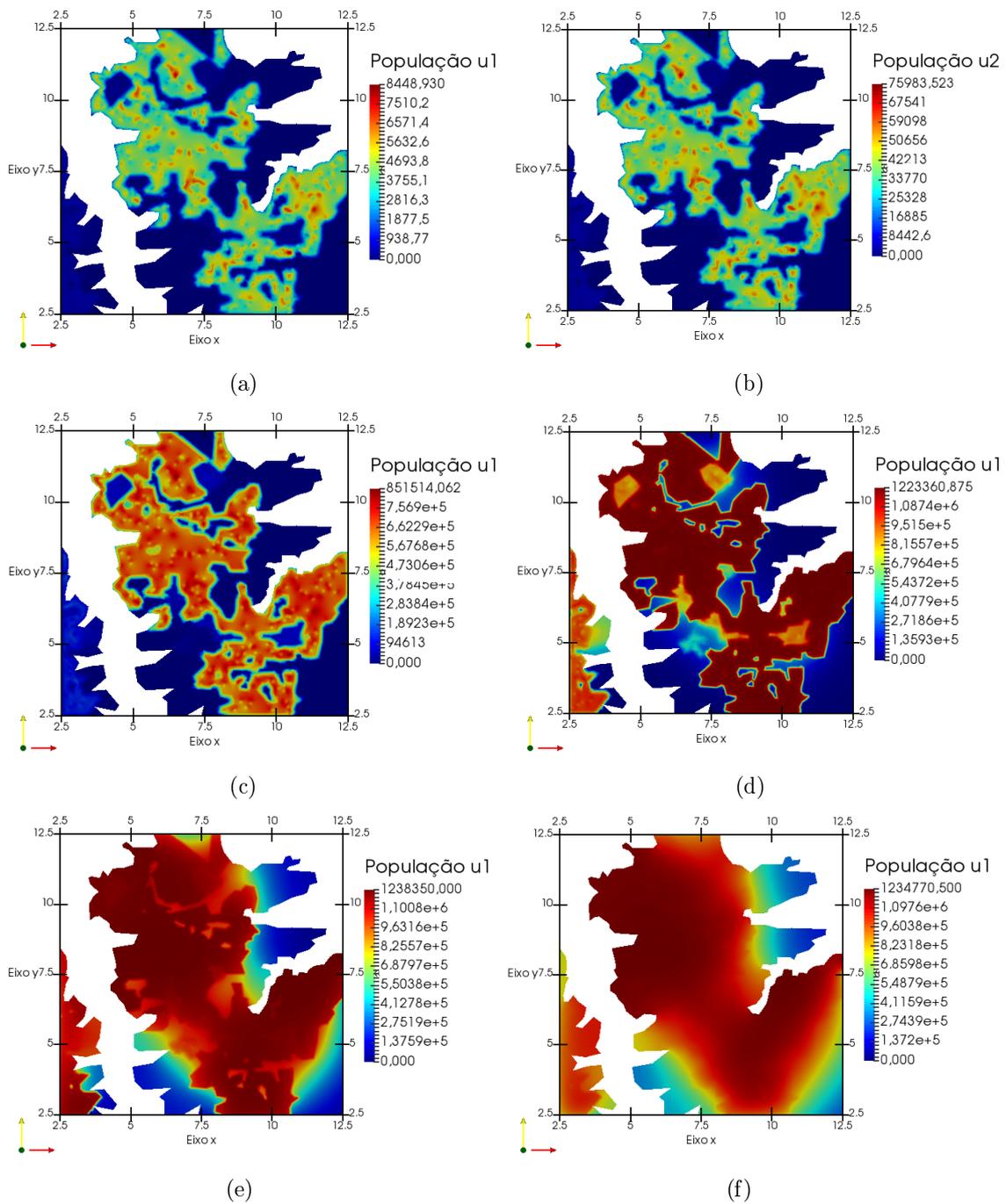


Figura 5.13: População de mosquitos selvagens na região de interesse nos tempos  $T = 1$  (a),  $T = 2$  (b),  $T = 4$  (c),  $T = 6$  (d),  $T = 8$  (e) e  $T = 10$  (f).

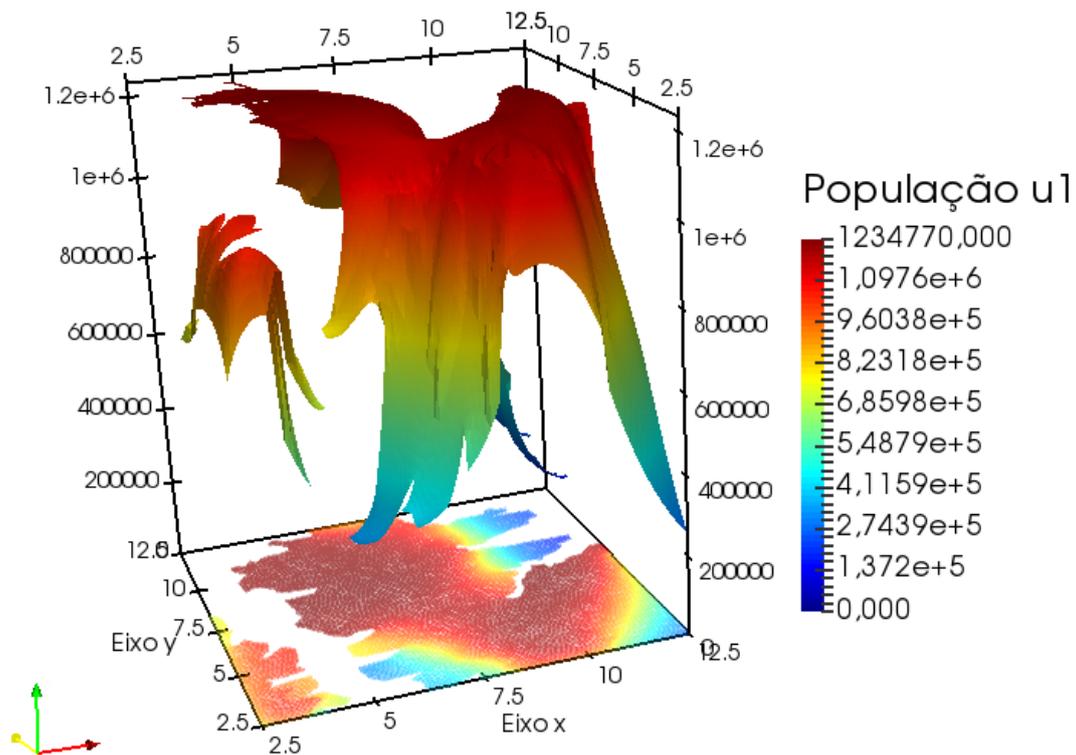


Figura 5.14: População de mosquitos selvagens na região de interesse com o tempo  $T = 10$  semanas, vista sob uma perspectiva espacial..

A Figura 5.15 a seguir mostra os cenários obtidos da simulação numérica para a população de mosquitos transgênicos heterozigotos. Podemos observar que essa variedade de mosquito, embora ocorra em todo o território, tende a ocupar as áreas de campo, seguindo em direção ao reservatório. Esse comportamento se justifica pelo fato de que nesta área não há mosquitos selvagens nativos, ocorrendo então cruzamentos cuja probabilidade de encontro é maior entre espécies transgênicas, o que implica em uma quantidade maior de mosquitos que carregam o gene refratário a doença. Devido a impossibilidade de atravessar o reservatório e levando em conta que estamos considerando o efeito de difusão, a tendência é de que eles atravessem o campo rapidamente, retornando para a zona de mata. Comportamento semelhante a esse é observado para a população de mosquitos transgênicos homozigotos, vide Figura 5.17.

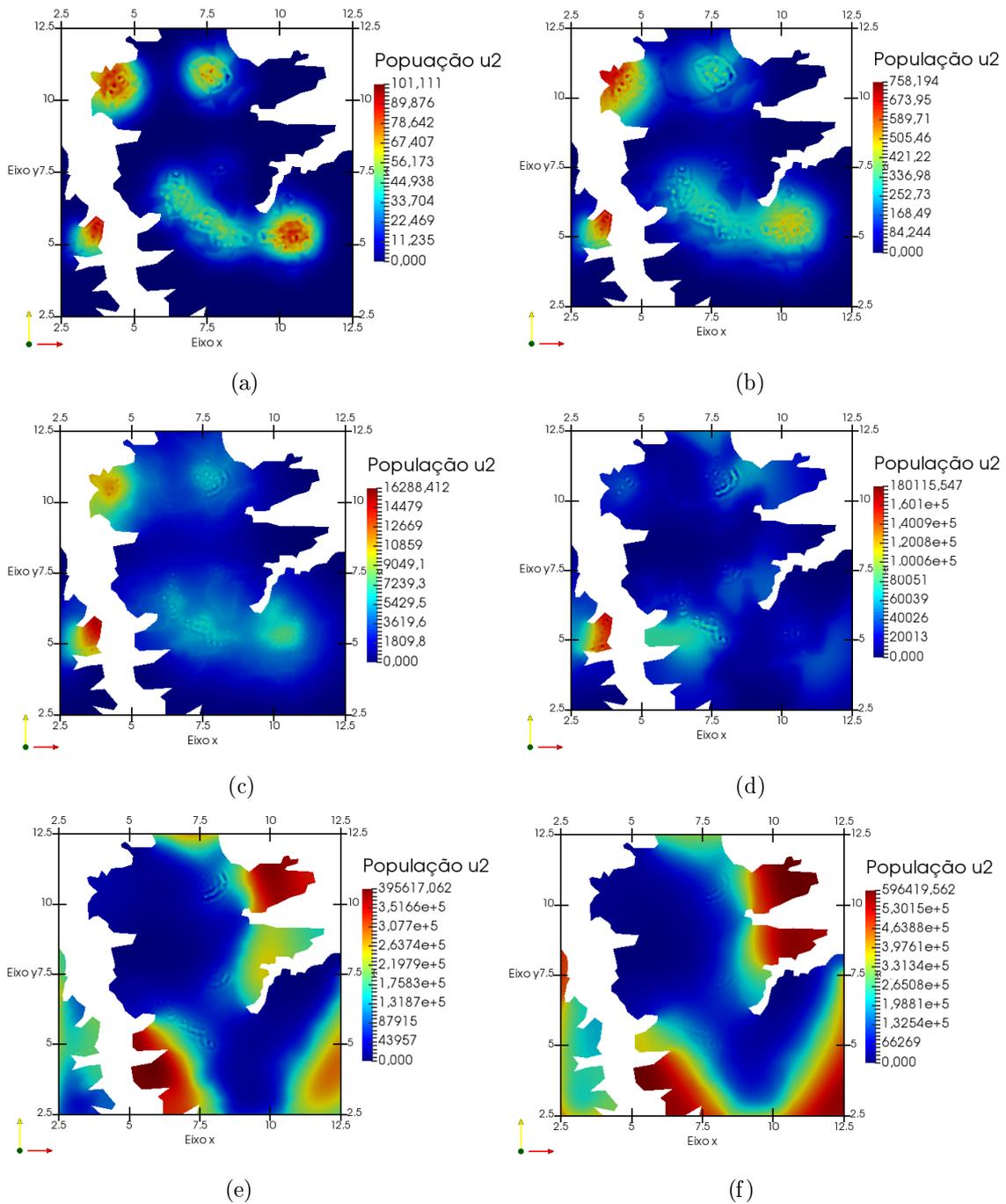


Figura 5.15: População de mosquitos transgênicos heterozigotos na região de interesse com os tempos  $T = 1$  (a),  $T = 2$  (b),  $T = 4$  (c),  $T = 6$  (d),  $T = 8$  (e) e  $T = 10$  (f).

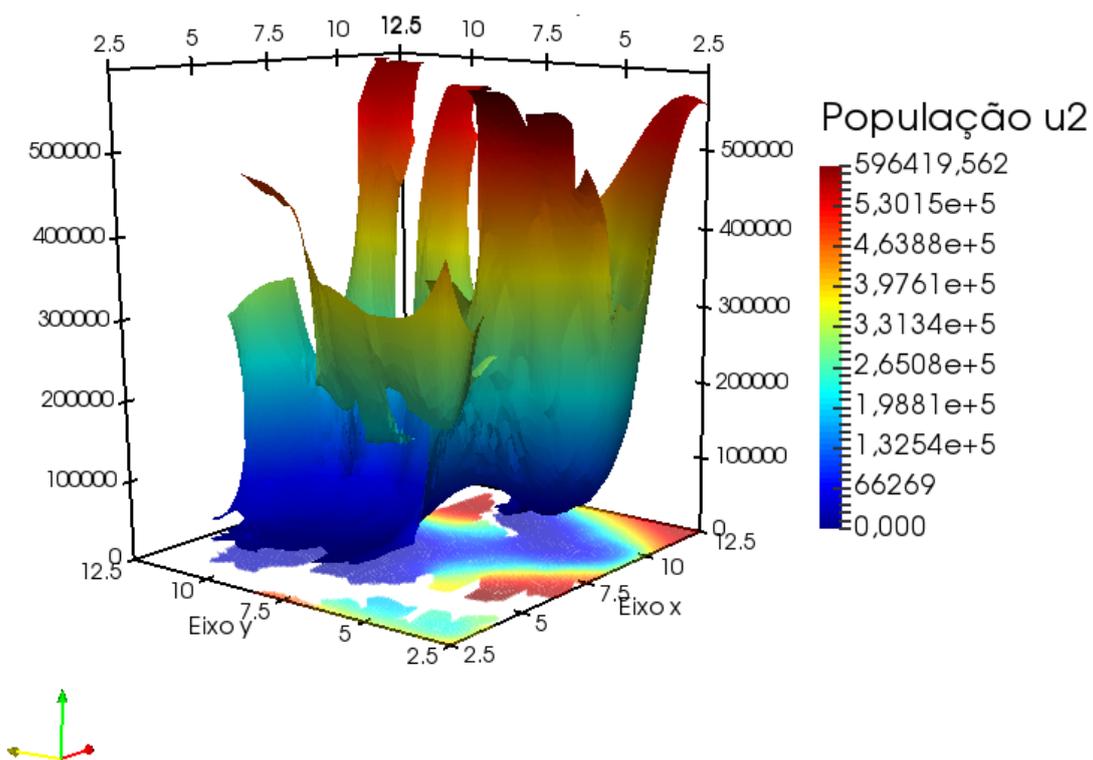


Figura 5.16: População de mosquitos transgênicos heterozigotos na região de interesse com o tempo  $T = 10$  semanas, vista sob uma perspectiva espacial.

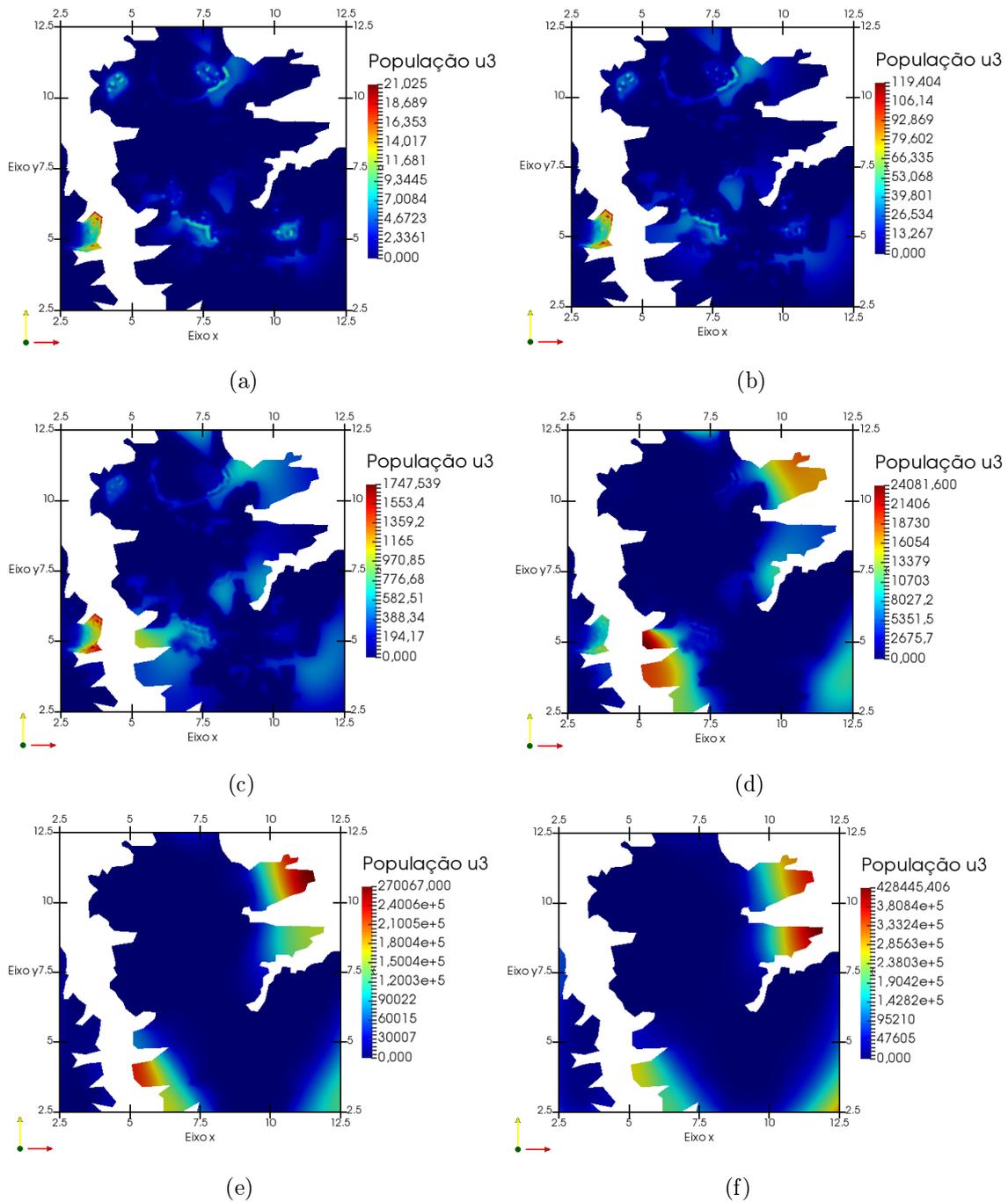


Figura 5.17: População de mosquitos transgênicos homozigotos na região de interesse com os tempos  $T = 1$  (a),  $T = 2$  (b),  $T = 4$  (c),  $T = 6$  (d),  $T = 8$  (e) e  $T = 10$  (f).

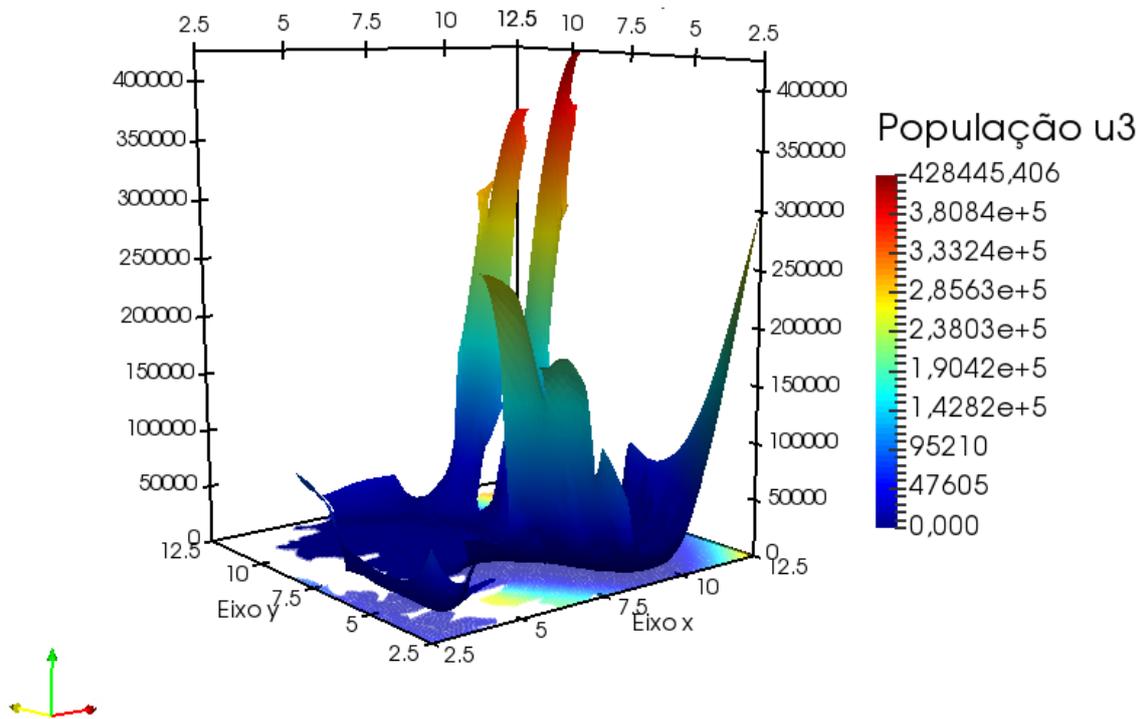


Figura 5.18: População de mosquitos transgênicos homozigotos na região de interesse com o tempo  $T = 10$  semanas, vista sob uma perspectiva espacial.

Ao final da evolução temporal obtivemos uma população de mosquitos selvagens  $u_1 = 12.728.402$ , mosquitos transgênicos heterozigotos  $u_2 = 8.741.213$  e mosquitos transgênicos homozigotos  $u_3 = 2.706.032$ , que resultou em uma estabilização da população de mosquitos selvagens em 52,65%, mosquitos transgênicos heterozigotos em 36,16% e mosquitos transgênicos homozigotos em 11,19%.

#### 5.2.4 Simulação Computacional: domínio irregular

Com base nos estudos realizados na subseção anterior, onde foi simulada a dinâmica e espalhamento de mosquitos em uma pequena região da APM-Manso, estamos agora aptos a realizar o estudo na região por inteiro, apresentada na Figura 5.19.

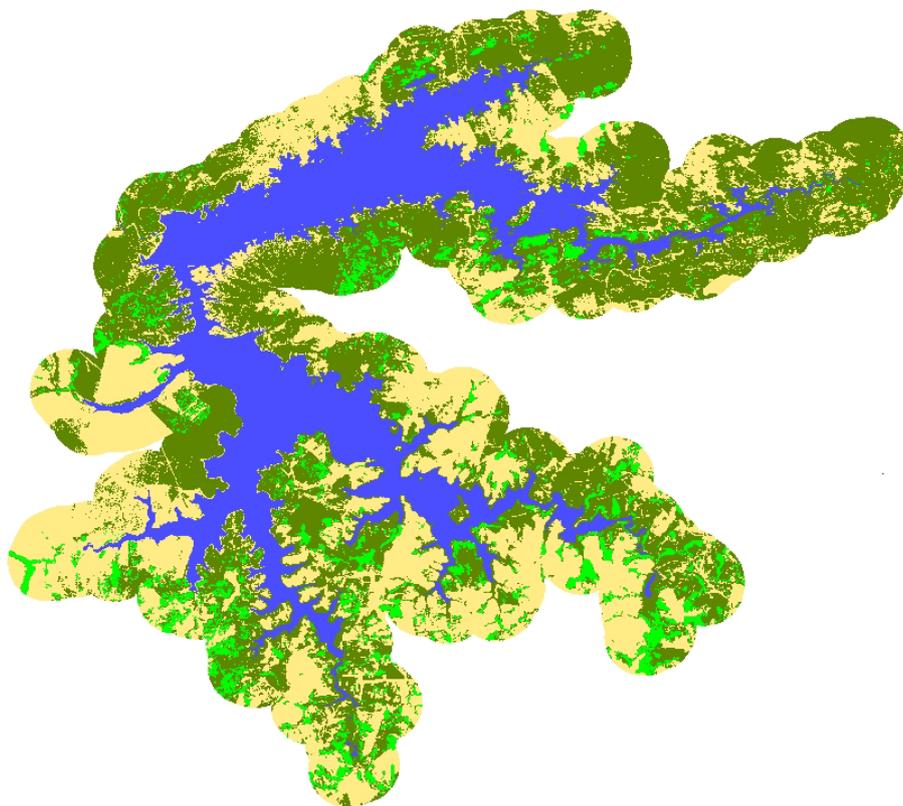


Figura 5.19: Área de estudo de  $\Omega$ .

Para cada tipo de vegetação foram desenhadas as geometrias, considerando as regiões em amarelo com cobertura vegetal de campos, as regiões em verde são os cerrados e as regiões em vermelho são cobertas de matas. Essa caracterização das regiões da APM-Manso segundo o tipo de cobertura vegetal é apresentado na Figura 5.20.

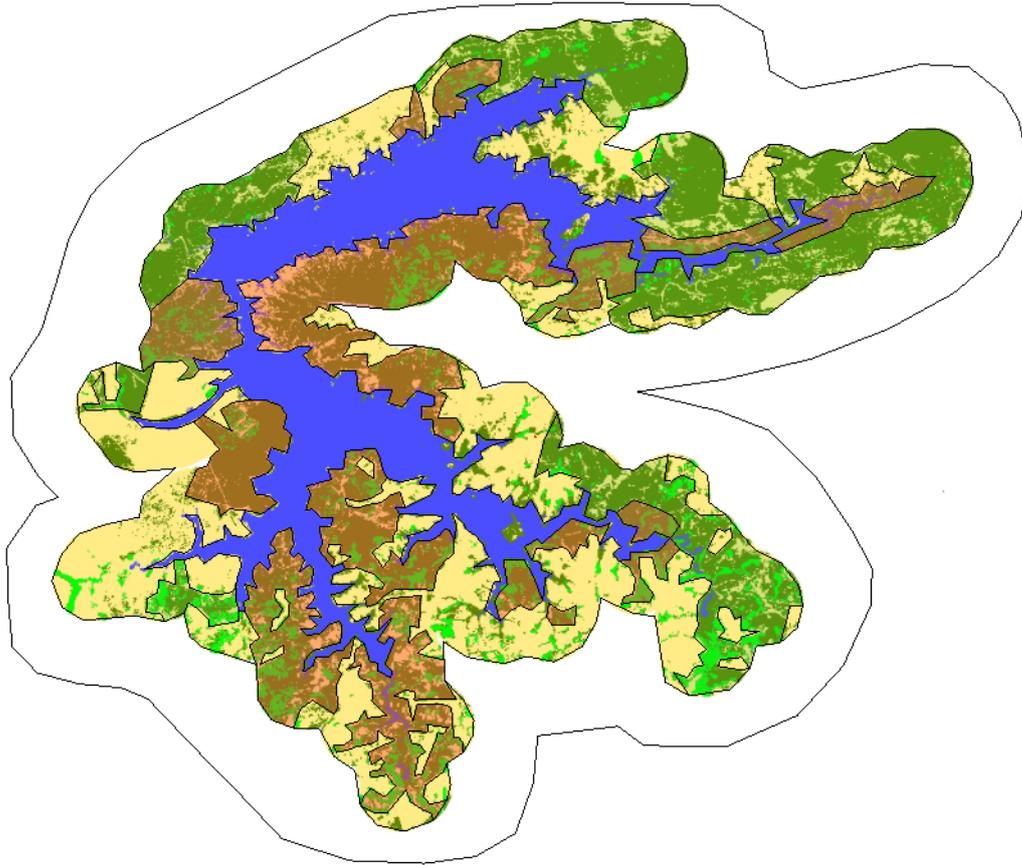


Figura 5.20: Desenho das subregiões do domínio irregular, de acordo com a cobertura vegetal.

A discretização desta região foi feita de modo utilizando elementos triangulares, conforme mostrado na Figura 5.21. Além disso, ampliamos também a região geométrica de modo a evitar que os mosquitos sofram a influência da condição imposta no contorno da região maior.

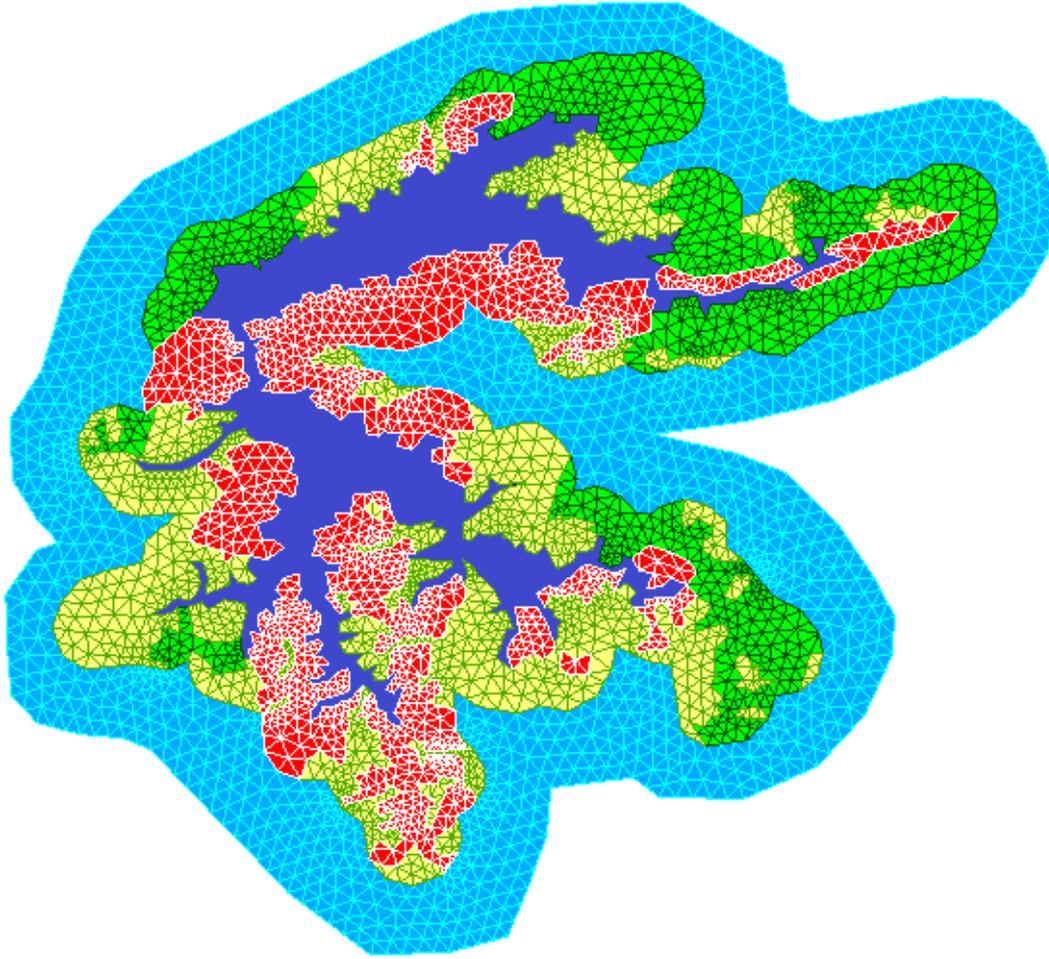


Figura 5.21: Malha para o domínio irregular.

Nesta subseção, adotamos dois valores distintos para o coeficiente de difusão, um menor para regiões de vegetação alta e outro maior para regiões de campo aberto. Em regiões abertas, vamos assumir que o mosquito se desloque 1,02 km durante sua vida que é de 0,64 semanas de acordo com a taxa de mortalidade assumida. Com isso teremos um coeficiente de difusão  $D = \frac{1,02^2}{4 \times 0,64} = 0,39 \text{ km}^2/\text{semana}$ . De maneira análoga, considerando que em regiões de mata e cerrado o deslocamento é de 0,87 km obtemos  $D = 0,29 \text{ km}^2$ .

As condições iniciais adotadas foram estimadas a partir da taxa de picada em humanos (HBR, do inglês *human biting rate*). Em regiões de alta incidência a área obtida foi de 423,6375 km<sup>2</sup>, vamos considerar  $HBR = 50$  e então obtemos aproximadamente 1.241.231 mosquitos; vamos considerar  $HBR = 7$  para regiões de baixa incidência de mosquitos, cuja respectiva área correspondente à 607,5863 km<sup>2</sup> e obteremos aproximadamente 270.975 mosquitos.

Diante disso, consideramos uma quantidade de mosquitos selvagens  $u_1 = 270.975$  distribuídos homogeneamente nas regiões de cerrado mais uma quantidade de  $u_1 = 1.241.231$  nas regiões com cor vermelha, uma quantidade de transgênicos he-

terozigotos  $u_2 = 1.241.231$  distribuídos homoganeamente também nas regiões com cor vermelha (Figura 5.12) e uma quantidade de transgênicos homozigotos  $u_3 = 0$ .

Consideramos condições nulas de Dirichlet em todo o contorno da região maior e fluxo nulo no contorno do reservatório.

A Tabela 5.3 resume os dados utilizados nestas simulações numéricas.

Tabela 5.3: Dados utilizados para a simulação do modelo proposto no entorno da APM-Manso.

Domínio temporal	$I = [0, 10]$ semanas
Passo de tempo	$\Delta t = 0, 25$
Método de Crank-Nicolson	$\omega = 0, 5$
Coefficiente de difusão para as regiões de campo	$D = 39 \times 10^{-2}$ km <sup>2</sup> /semana
Coefficiente de difusão para as regiões de cerrado	$D = 29 \times 10^{-2}$ km <sup>2</sup> /semana
Capacidade de suporte	$k = 3 \times 10^{10}$
Taxa intrínseca de crescimento	$r = 4, 3484$ por semana
Taxa de recrutamento de mosquitos para a fase adulta	$\xi = 8, 3484$ por semana
Taxa de mortalidade ocasionada por razões naturais	$\delta_1 = 4, 0$ por semana
Taxa de mortalidade independente da densidade	$\delta_2 = 2, 545$ por semana

As soluções gráficas apresentadas nas Figuras 5.22, 5.23 e 5.24 a seguir representam, na região de interesse, a dinâmica e o espalhamento dos mosquitos selvagens, transgênicos heterozigotos e transgênicos homozigotos para o tempo  $T = 1$  semana, respectivamente.

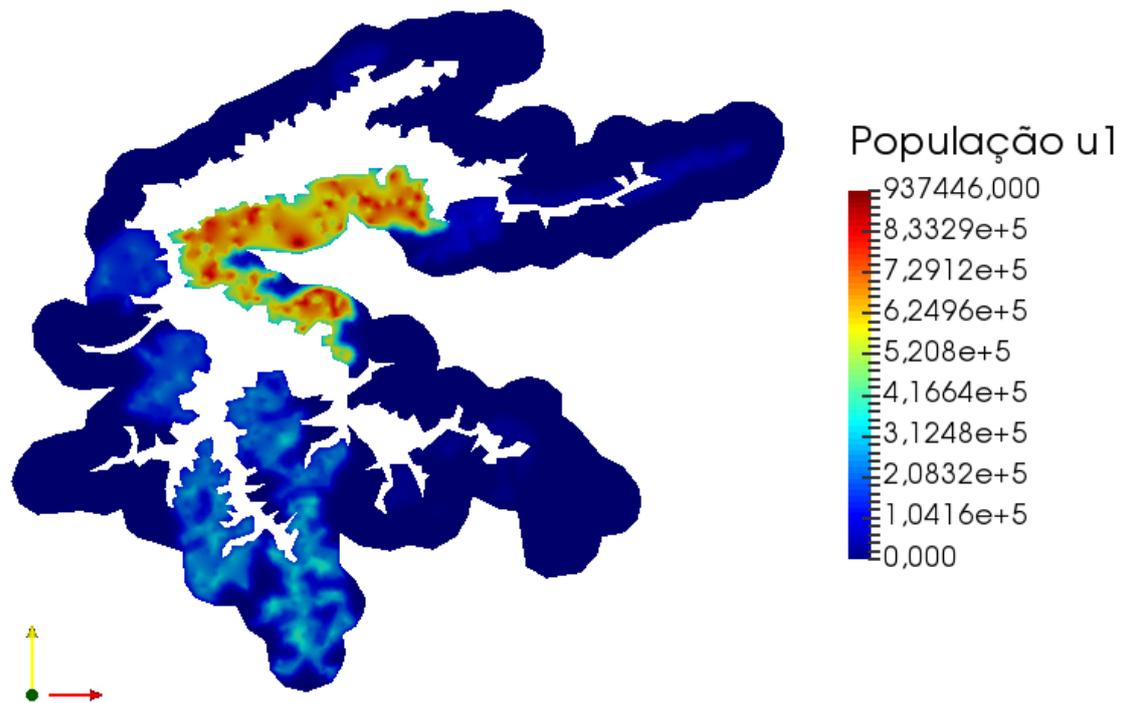


Figura 5.22: População de mosquitos selvagens na região de interesse com o tempo  $T = 1$  semana.

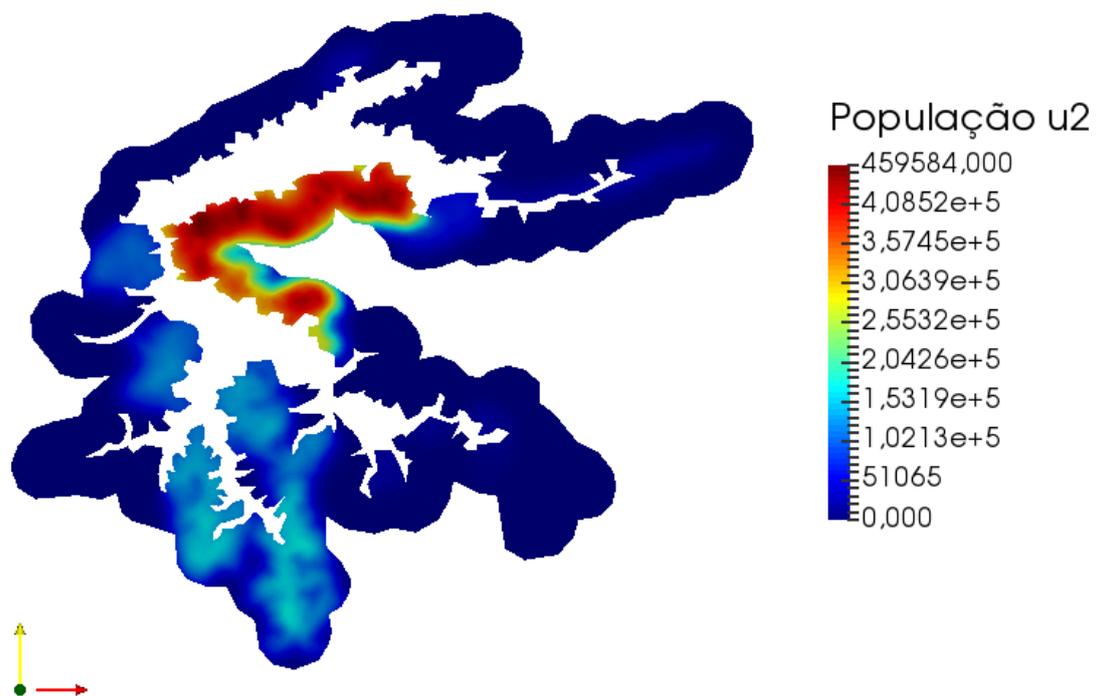


Figura 5.23: População de mosquitos transgênicos heterozigotos na região de interesse com o tempo  $T = 1$  semana.

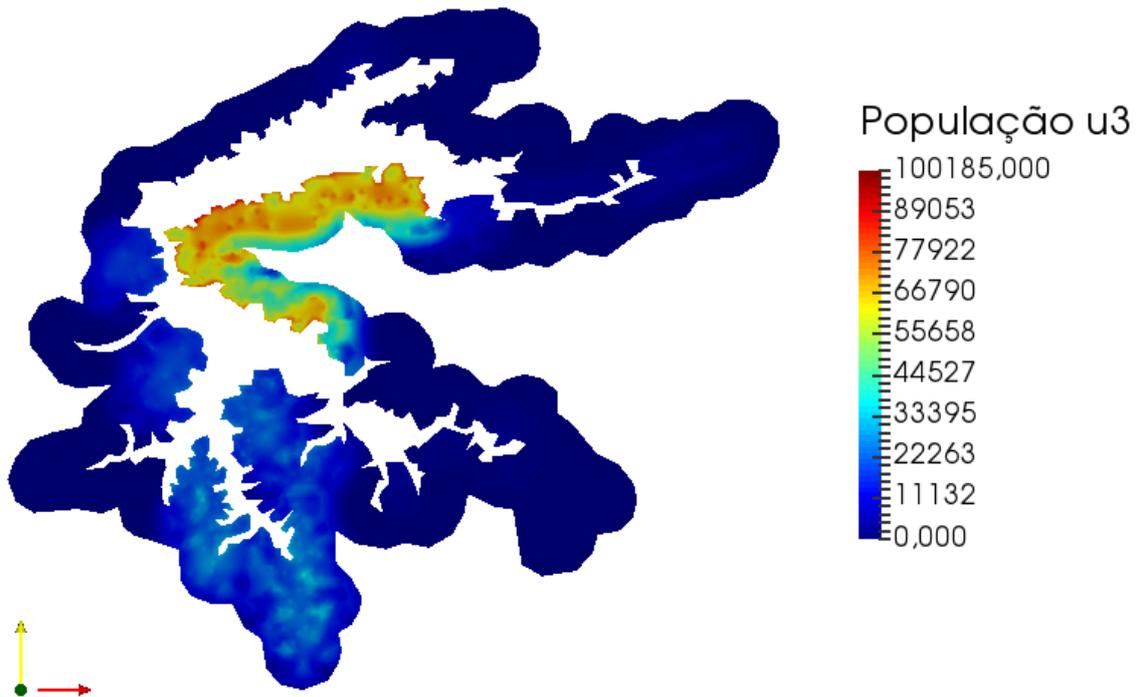


Figura 5.24: População de mosquitos transgênicos homozigoto na região de interesse com o tempo  $T = 1$  semana.

Passadas 5 semanas podemos perceber um aumento significativo na quantidade de mosquitos, tanto nos selvagens (Figura 5.25) quanto nos transgênicos (Figuras 5.26 e 5.27), mostrando a passagem dos mosquitos transgênicos pelas áreas de campo.

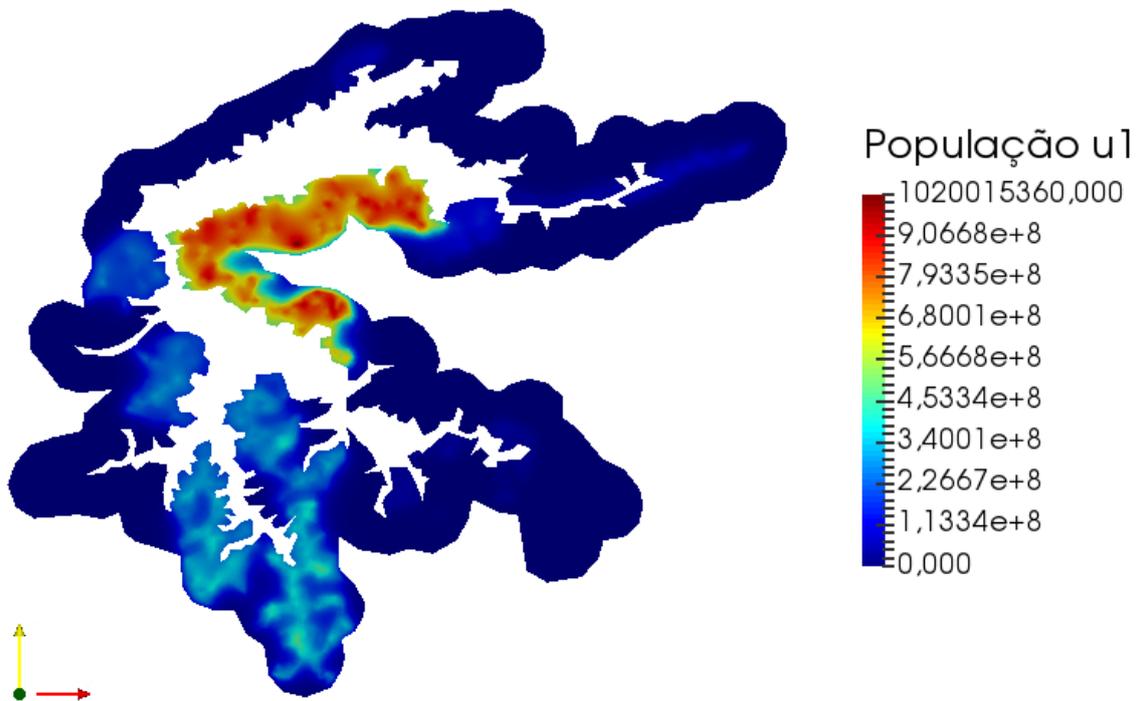


Figura 5.25: População de mosquitos selvagens na região de interesse com o tempo  $T = 5$  semanas.

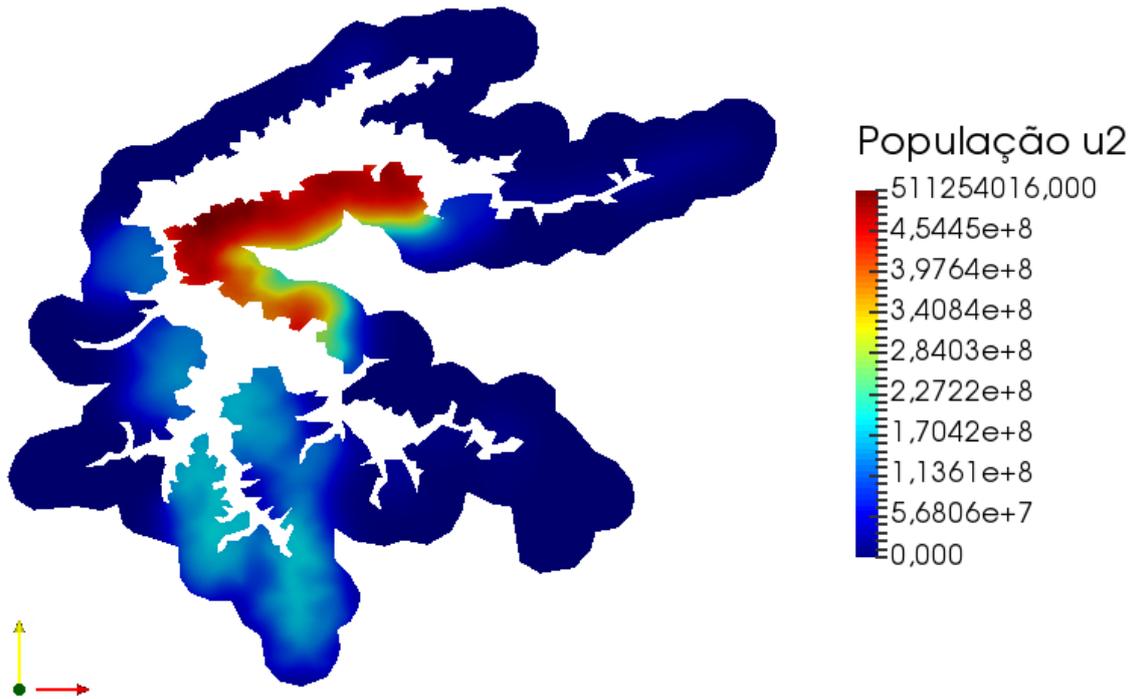


Figura 5.26: População de mosquitos transgênicos heterozigotos na região de interesse com o tempo  $T = 5$  semanas.

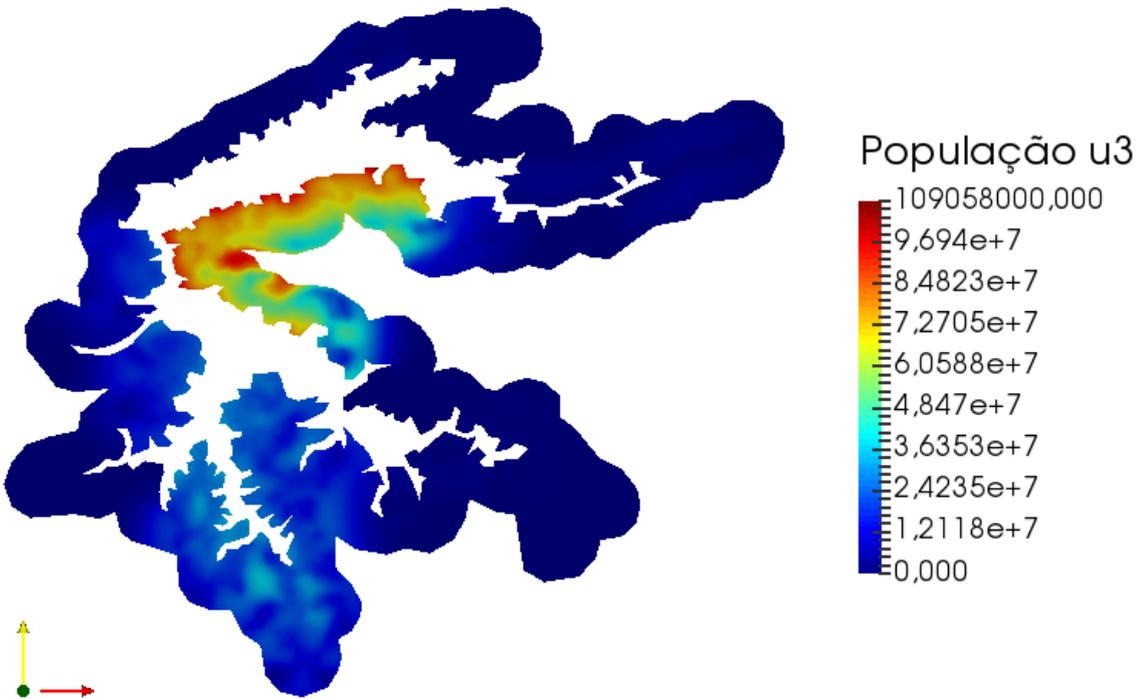


Figura 5.27: População de mosquitos transgênicos homozigoto na região de interesse com o tempo  $T = 5$  semanas.

Com 10 semanas de simulação temos uma ocupação ainda mais intensa. As soluções gráficas apresentadas nas Figuras 5.28, 5.30 e 5.32 a seguir representam, na

região de interesse, a dinâmica e o espalhamento dos mosquitos selvagens, transgênicos heterozigotos e transgênicos homozigotos para o tempo  $T = 10$  semanas, respectivamente.

Para os mosquitos selvagens, observe nas Figuras 5.28 e 5.29 que ocorre uma notável ocupação dos mosquitos selvagens nas regiões de alta incidência, que são as regiões de mata e cerrado. Também é possível observar uma ocupação dos mosquitos selvagens em regiões de campo, resultando dos cruzamentos entre as variedades transgênicas presentes nessas regiões.

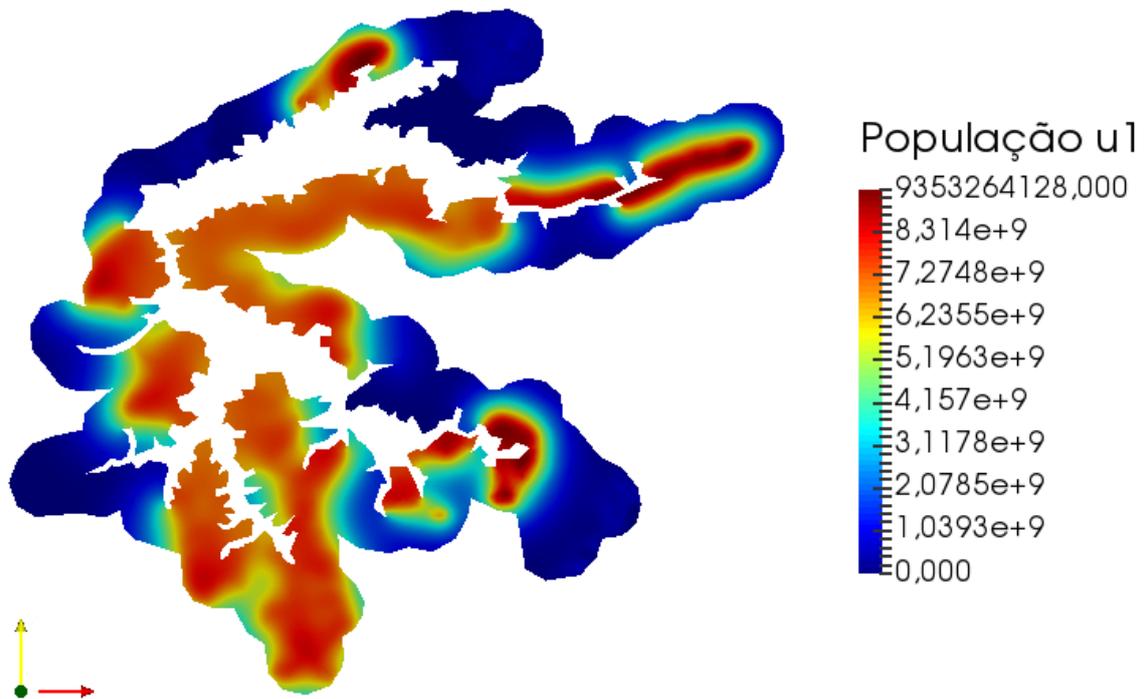


Figura 5.28: População de mosquitos selvagens na região de interesse com o tempo  $T = 10$  semanas.

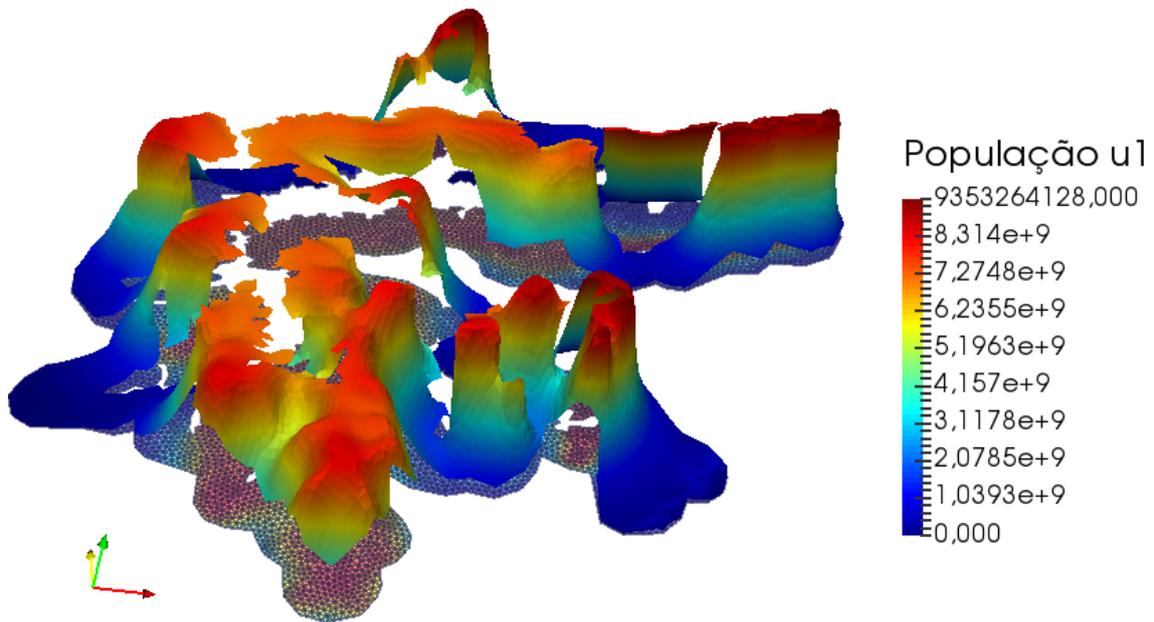


Figura 5.29: População de mosquitos selvagens na região de interesse com o tempo  $T = 10$  semanas, vista sob uma perspectiva espacial.

Para os mosquitos transgênicos heterozigotos, podemos observar nas Figuras 5.30 e 5.31 que essa variedade atua diretamente nas regiões de alta incidência. Este comportamento ratifica nossas expectativas em relação a esta variedade de mosquitos, uma vez que nossa intenção era obter uma maior concentração justamente nessas áreas de alta incidência. Além disso, tende a ocupar as áreas de campo, devido a ausência de mosquitos selvagens nativos nessa região.

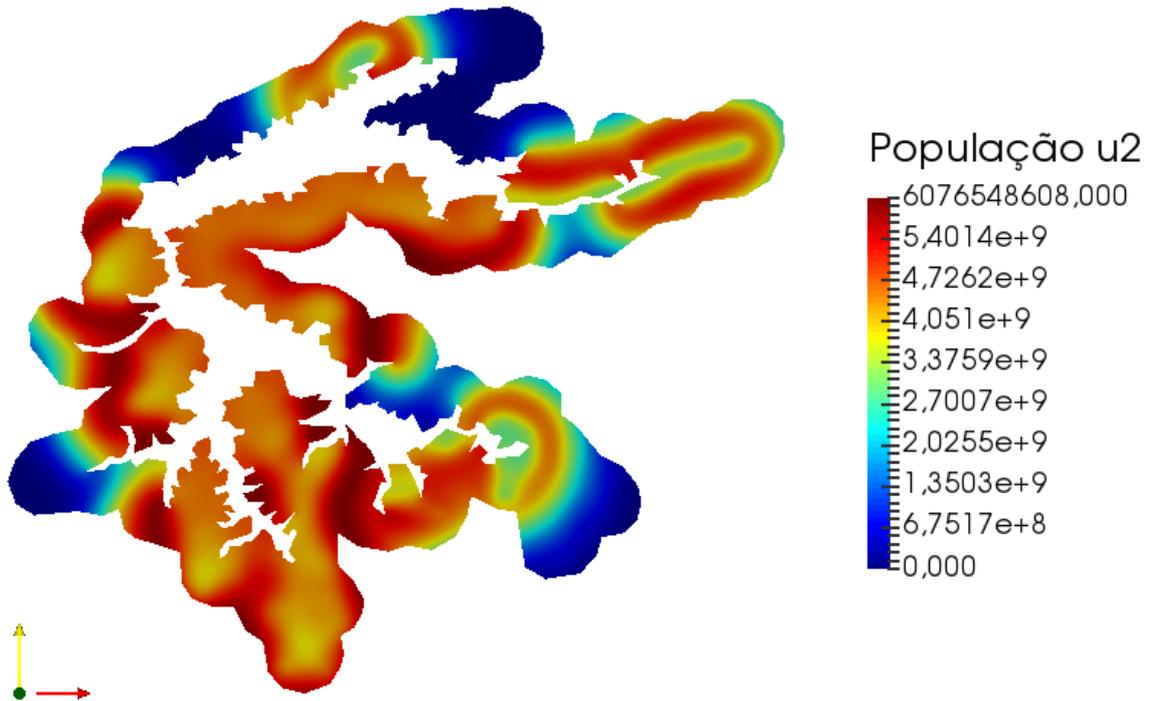


Figura 5.30: População de mosquitos transgênicos heterozigotos na região de interesse com o tempo  $T = 10$  semanas.

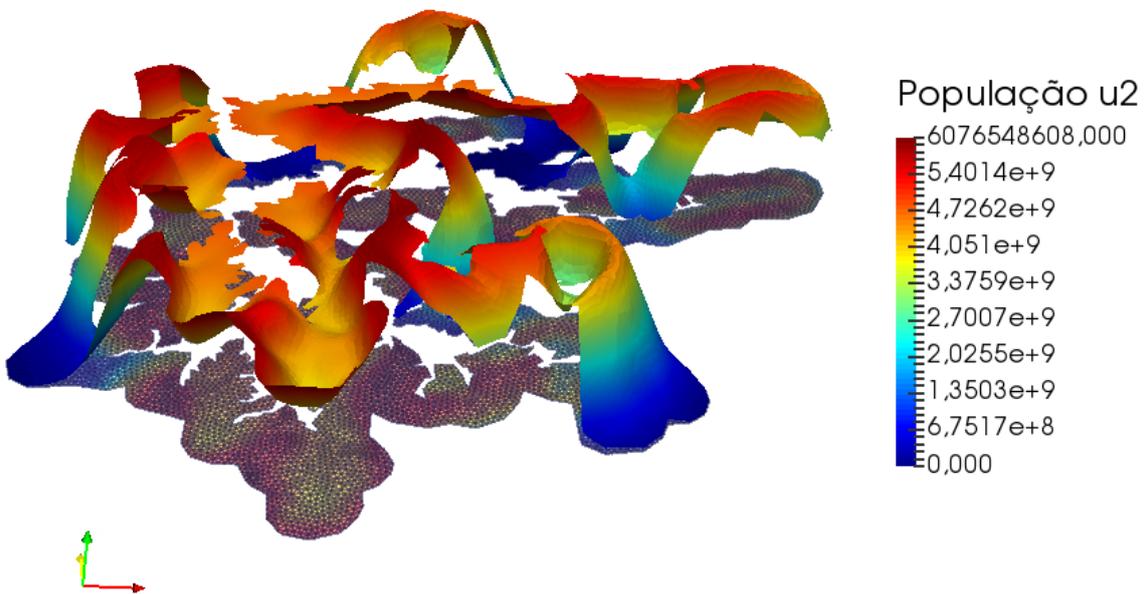


Figura 5.31: População de mosquitos transgênicos heterozigotos na região de interesse com o tempo  $T = 10$  semanas, vista sob uma perspectiva espacial.

Para a população de mosquitos transgênicos homozigotos, obtemos comportamento semelhante ao observado na população de mosquitos transgênicos heterozigotos, vide Figuras 5.32 e 5.33.

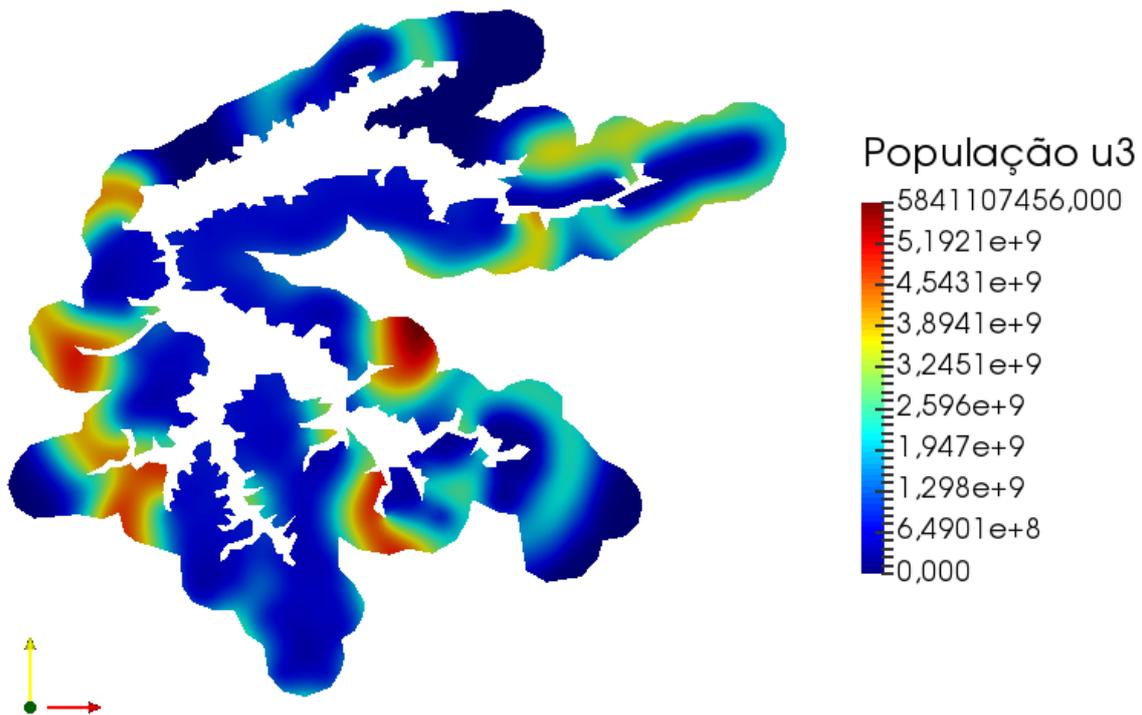


Figura 5.32: População de mosquitos transgênicos homozigoto na região de interesse com o tempo  $T = 10$  semanas.

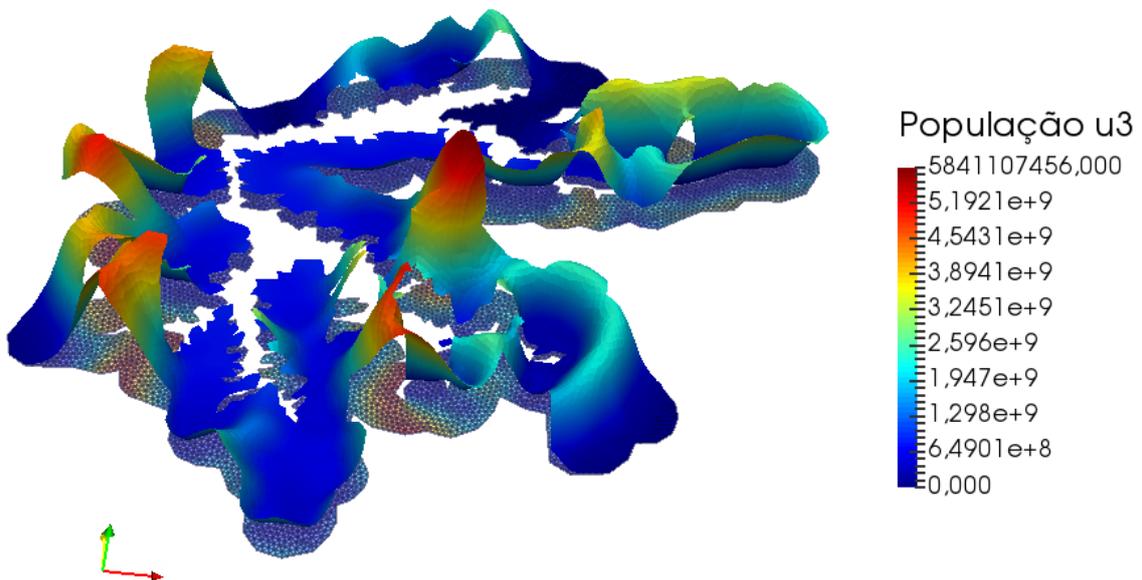


Figura 5.33: População de mosquitos transgênicos homozigoto na região de interesse com o tempo  $T = 10$  semanas, vista sob uma perspectiva espacial.

Ao final da evolução temporal, obtivemos uma população final de  $u_1 = 1.089.766.779.704$  mosquitos selvagens,  $u_2 = 609.395.881.361$  mosquitos transgênicos heterozigotos e  $u_3 = 564.788.706.219$  mosquitos transgênicos homozigotos, resultando nas seguintes proporções: 48,13% da população composta por mosquitos

selvagens, 26,92% da população composta por mosquitos transgênicos heterozigotos e 24,95% da população composta por mosquitos transgênicos homozigotos. Isso significa que a inserção de mosquitos transgênicos nas áreas de maior incidência de mosquitos, mais especificamente regiões de mata, reduziu em mais da metade a população de mosquitos selvagens prevista para ocupar a região do APM-Manso em 10 semanas.

# Capítulo 6

## Considerações Finais

Neste trabalho apresentamos um modelo bidimensional que rege a dinâmica e espalhamento dos mosquitos selvagens e transgênicos. Esse modelo foi constituído pelo termo de difusão, baseado na lei de Fick, e que caracterizou o espalhamento entre os mosquitos e pelo termo de reação que descreveu a dinâmica entre mosquitos selvagens e transgênicos.

Para obtenção da solução numérica, a técnica de decomposição de operadores foi utilizada com sucesso. Resolvemos o problema de difusão usando a forma semi-discreta do método de elementos finitos de Galerkin e o problema de reação usando o método de Runge-Kutta de quarta ordem. Sua característica de resolver de forma separada os operadores de difusão e de reação facilitou a implementação computacional. Por outro lado, em termos de exigência computacional, o armazenamento das informações resultante dos cálculos, exigiu um considerável tempo de processamento.

Após análise e validação do modelo com simulações em regiões e situações artificiais e controladas, exploramos seu potencial na modelagem e estudo mais gerais e realístico da dinâmica e espalhamento dos mosquitos. Para isso, aplicamos o modelo na região geográfica da área de Aproveitamento Múltiplo de Manso (APM-Manso), localizada no estado do Mato Grosso, Brasil. Neste estudo, caracterizamos a região geográfica através de uma malha de elementos finitos gerada pelo software Salome, a partir de imagens obtidas de satélite.

Adotamos coeficiente de difusão constante e idêntico para as três variedades genéticas de mosquitos consideradas, uma vez que até o presente momento não foram encontrados registros na literatura que classifiquem a dispersão de mosquitos de acordo com sua zigosidade. A variação do coeficiente de difusão se deu apenas em relação a vegetação mapeada, que é um tema já discutido no âmbito científico.

Podemos inferir que, as simulações numéricas indicam que a escolha da região de liberação de mosquitos transgênicos influencia no nível de sucesso obtido. Além disso, foi possível concluir que a eliminação total de mosquitos selvagens é inviável caso não haja superioridade dos transgênicos, tendo em vista, que de acordo com

a genética clássica Mendeliana que rege o resultado dos cruzamentos, os mosquitos selvagens surgem também do acasalamento dos mosquitos transgênicos heterozigotos.

Os resultados indicam que a introdução de mosquitos geneticamente modificados no ambiente é um caminho promissor para o controle da malária e de outras doenças transmitidas por mosquitos. Embora tenhamos considerado a genética clássica, sem nenhum efeito de mutação ou técnicas de "gene drive" que favoreceriam as variedades transgênicas, foi possível verificar uma substituição de mais de 50% dos mosquitos selvagens por mosquitos transgênicos, mesmo sobre uma área extensa e com variedade topográfica.

Para perspectivas futuras, destacamos a necessidade de obter estratégias de otimização a fim. Com os recentes avanços em técnicas de manipulação genética que buscam favorecer os mosquitos transgênicos, um passo importante é a compreensão de como essas novas técnicas influenciam na dinâmica de interação entre as variedades genéticas consideradas. Isso leva a uma futura atualização no termo de reação do modelo proposto. Testes indicam, por exemplo, que a técnica MCR favorece a geração de mosquitos transgênicos mas pode impor um custo de fitness para esse mosquito [22] enquanto que a genética clássica Mendeliana pode ser utilizada sem esse custo [51].

Efeitos sobre o espalhamento, tais como advecção, quimiotaxia ou retenção também podem ser avaliados, garantindo uma maior abrangência para aplicabilidade do modelo.

# Referências Bibliográficas

- [1] ANDERSON, R. M., MAY, R. M., 1992, *Infectious diseases of humans: dynamics and control*. Oxford University Press.
- [2] BAILEY, S., ELIASON, D., HOFFMANN, B., et al., 1965, “Flight and dispersal of the mosquito *Culex tarsalis* Coquillett in the Sacramento Valley of California”, *Hilgardia*, v. 37, n. 3, pp. 73–113.
- [3] BARATTO, G., 2007, “Solução de equações diferenciais ordinárias usando métodos numéricos.” *Universidade Federal de Santa Maria*.
- [4] BARREY, D. A., PROMMER, H., MILLER, C. T., et al., 2002, “Modelling the fate of oxidisable organic contaminantes in groundwater.” *Advances in Water Resources*, v. 25, n. 8-12, pp. 945–983.
- [5] BARROSO, L. C., BARROSO, M. A., CAMPOS, F. F., et al., 1987, *Cálculo numérico (com aplicações)*. 2 ed. São Paulo, Harbra Ltda.
- [6] BECKER, E. B., CAREY, G. F., ODEN, J. T., 1981, *Finite Elements, An Introduction.*, v. 1. Englewood Cliffs, New Jersey, Prentice-Hall.
- [7] BIDLINGMAYER, W., 1975, “Mosquito flight paths in relation to the environment. Effect of vertical and horizontal visual barriers”, *Annals of the Entomological Society of America*, v. 68, n. 1, pp. 51–57.
- [8] BIRCH, L. C., 1948, “The intrinsic rate of natural increase of an insect population”, *The Journal of Animal Ecology*, v. 17, n. 1, pp. 15–26.
- [9] BOYCE, W. E., DIPRIMA, R. C., MEADE, D. B., 1992, *Equações diferenciais elementares e problemas de valores de contorno*, v. 9. New York, Wiley.
- [10] BRASILEIRO, S. F., 2010, *Florestas do Brasil em resumo-2010: dados de 2005-2010*. Brasília: SFB.
- [11] BRAUER, F., CASTILLO-CHAVEZ, C., 2012, *Mathematical Models in Population Biology and Epidemiology.*, v. 1. 2 ed. , Springer.

- [12] BURDEN, R. L., FAIRES, J. D., 2010, *Numerical Analysis*. 9 ed. Boston, MA, Cengage Learning.
- [13] CARDÉ, R. T., 2015, “Multi-cue integration: how female mosquitoes locate a human host”, *Current Biology*, v. 25, n. 18, pp. 793–795.
- [14] CARVALHO, P. G. S., 2003, *Modelo de Fisher-Kolmogorov em dinâmica populacional com capacidade de suporte espacialmente dependente*. Tese de D.Sc., niversidade Estadual Paulista (UNESP), São Paulo, Brasil.
- [15] CATTERUCCIA, F., NOLAN, T., LOUKERIS, T. G., et al., 2000, “Stable germline transformation of the malaria mosquito *Anopheles stephensi*”, *Nature*, v. 405, n. 6789, pp. 959–962.
- [16] DIAZ, H., RAMIREZ, A., OLARTE, A., et al., 2011, “A model for the control of malaria using genetically modified vectors”, *Journal of theoretical biology*, v. 276, n. 1, pp. 57–66.
- [17] DOUGLAS, JR, J., 1955, “On the Numerical Integration of  $\partial^2 u \partial x^2 + \partial^2 u \partial y^2 = \partial u \partial t$  by Implicit Methods.” *Journal of the society for industrial and applied mathematics*, v. 3, n. 1, pp. 42–65.
- [18] EDELSTEIN-KESHET, L., 2005, *Mathematical Models in Biology*. University of British Columbia, Siam.
- [19] FISHER, R. A., 1937, “The wave of advance of advantageous genes”, *Annals of Human Genetics*, v. 7, n. 4, pp. 355–369.
- [20] FRANCO, N. B., 2006, *Cálculo numérico*. Pearson.
- [21] GANTZ, V. M., BIER, E., 2015, “The mutagenic chain reaction: a method for converting heterozygous to homozygous mutations”, *Science*, v. 348, n. 6233, pp. 442–444.
- [22] GANTZ, V. M., JASINSKIENE, N., TATARENKOVA, O., et al., 2015, “Highly efficient Cas9-mediated gene drive for population modification of the malaria vector mosquito *Anopheles stephensi*”, *Proceedings of the National Academy of Sciences*, v. 112, n. 49, pp. 6736–6743.
- [23] GILLIES, M., 1972, “Some aspects of mosquito behaviour in relation to the transmission of parasites”, *Zoo J Linn Soc-Lond*, v. 51, pp. 61–81.
- [24] GRIFFITHS, A. J. F., WESSLER, S. R., LEWONTIN, R. C., et al., 2008, *Introdução a Genética*. 9 ed. Rio de Janeiro, Guanabara Koogan.

- [25] GURTIN, M. E., 1982, *An introduction to continuum mechanics*, v. 158. Academic press.
- [26] HUGHES, T. J., 2000, *The finite element method: linear static and dynamic finite element analysis*. Courier Corporation.
- [27] ITO, J., GHOSH, A., MOREIRA, L. A., et al., 2002, “Transgenic anopheline mosquitoes impaired in transmission of a malaria parasite”, *Nature*, v. 417, n. 6887, pp. 452–455.
- [28] KACUR, J., MALENGIER, B., REMESÍKOVÁ, M., 2005, “Solution of contaminant transport with equilibrium and non-equilibrium adsorption.” *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*, v. 194, n. 2-5, pp. 479–489.
- [29] KANNEY, J. F., MILLER, C. T., KELLEY, C. T., 2003, “Convergence of iterative split-operator approaches for approximating nonlinear reactive transport problems.” *Advances in Water Resources*, v. 26, n. 3, pp. 247–261.
- [30] KOLMOGOROV, A. PETROVSKY, I., PISKUNOV, N., 1988, “Study of the diffusion equation with growth of the quantity of matter and its application to a biology problem”. In: *Dynamics of Curved Fronts*, Elsevier, pp. 105–130.
- [31] LI, J., 2004, “Simple mathematical models for interacting wild and transgenic mosquito populations”, *Mathematical biosciences*, v. 189, n. 1, pp. 39–59.
- [32] LIMA, J. S., 2016, *Modelagem da interação entre mosquitos selvagens e transgênicos*. Dissertação (mestrado), Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa.
- [33] MALTHUS, T. R., 1798, *An Essay on the Principle of Population as It*. London.
- [34] MATHEWS, J. H., FINK, K. D., 2004, *Numerical methods using MATLAB*, v. 4. Upper Saddle River, NJ, Pearson Prentice Hall.
- [35] MIRANDA, C. M., 2011, *Expressão de microplusina em Aedes aegypti: Avaliação do efeito sobre plasmodium gallinaceum*. Tese de D.Sc., Universidade de São Paulo, São Paulo, Brasil.
- [36] MOREIRA, L. A., ITO, J., GHOSH, A. M., et al., 2002, “Bee venom phospholipase inhibits malaria parasite development in transgenic mosquitoes.” *The Journal of Biological Chemistry*, v. 277, n. 43, pp. 40839–40843.

- [37] MURRAY, J. D., 2002, *Mathematical Biology I. An Introduction.*, v. 17. 3 ed. Nova York, Springer.
- [38] NGWA, G. A., 2004, “Modelling the dynamics of endemic malaria in growing populations”, *Nature*, v. 4, n. 4, pp. 1173–1202.
- [39] NGWA, G. A., SHU, W. S., 2000, “A mathematical model for endemic malaria with variable human and mosquito populations”, *Elsevier*, v. 4, n. 4, pp. 747–763.
- [40] PEACEMAN, D. W., RACHFORD, JR, H. H., 1955, *The numerical solution of parabolic and elliptic differential equations*, v. 3. pp. 28-41, Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics.
- [41] PRESTES, M. F. B., 2011, *Dispersão de material impactante em meio aquático: modelo matemático, aproximação numérica e simulação computacional-Lagoa do Taquaral, Campinas, SP*. Dissertação (mestrado), Universidade Federal de Campinas, Campinas, SP.
- [42] REISEN, W. K., ASLAMKHAN, M., 1979, “A release-recapture experiment with the malaria vector, *Anopheles stephensi* Liston, with observations on dispersal, survivorship, population size, gonotrophic rhythm and mating behaviour”, *Annals of Tropical Medicine and Parasitology*, v. 73, n. 3, pp. 251–269.
- [43] SANTOS, E. S., ZEILHOFER, P., RIBEIRO, A. L. M., et al., 2009, “Geoprocessamento e Regressão Logística para construção de modelos espaço-temporais de habitats de *Anopheles darlingi* na área de influência da APM-Manso-MT”, In: *XIV Simpósio Brasileiro de Sensoriamento Remoto*, pp. 7587–7594.
- [44] SHIGESADA, N., KAWASAKI, K., 1997, *Biological Invasions: Theory and Practice*. 1 ed. New York, Oxford University Press.
- [45] SILVEIRA, A. C., DE REZENDE, D. F., 2001, *Avaliação da estratégia global de controle integrado da malária no Brasil*. Brasília, Opas.
- [46] SOARES, M. D. S., 2002, *Solução de um problema não linear do tipo reação-difusão na modelagem de dispersão de insetos*. Dissertação (mestrado), Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS.
- [47] STROGATZ, S. H., 1994, *Nonlinear dynamics and chaos: with applications to physics, biology, chemistry, and engineering*. 1 ed. Cambridge, Massachusetts, Perseus Books.

- [48] SULEMAN, M., 1990, “Intraspecific variation in the reproductive capacity of *Anopheles stephensi* (Diptera: Culicidae)”, *Journal of medical entomology*, v. 27, n. 5, pp. 819–828.
- [49] VERDONSCHOT, P. F., BESSE-LOTOTSKAYA, A. A., 2014, “Flight distance of mosquitoes (Culicidae): a metadata analysis to support the management of barrier zones around rewetted and newly constructed wetlands”, *Limnologica-Ecology and Management of Inland Waters*, v. 45, pp. 69–79.
- [50] WATSON, T. M., SAUL, A., KAY, B. H., 2000, “*Aedes notoscriptus* (diptera: Culicidae) survival and dispersal estimated by mark-release-recapture in Brisbane, Queensland, Australia”, *Journal of medical entomology*, v. 37, n. 3, pp. 380–384.
- [51] WYSE, A. P., DOS SANTOS, A. J. B., DOS SANTOS AZEVEDO, J., et al., 2018, “Modeling the spreading and interaction between wild and transgenic mosquitoes with a random dispersal”, *PloS one*, v. 13, n. 10, pp. e0205879.
- [52] WYSE, A. P. P., BEVILACQUA, L., RAFIKOV, M., 2006, “Modelo Matemático Sazonal para Malária”, *Trends in Applied and Computational Mathematics*, v. 7, n. 2, pp. 391–400.
- [53] WYSE, A. P. P., BEVILACQUA, L., RAFIKOV, M., 2016, “Modelagem da Interação entre Mosquitos Selvagens e Transgênicos”, *Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics*, v. 4, n. 1.
- [54] YANENKO, N. N., 1971, “The method of fractional steps.” *Springer*.
- [55] ZEILHOFER, P., DOS SANTOS, E. S., RIBEIRO, A. L., et al., 2007, “Habitat suitability mapping of *Anopheles darlingi* in the surroundings of the Manso hydropower plant reservoir, Mato Grosso, Central Brazil”, *International Journal of Health Geographics*, v. 6, n. 1, pp. 7.
- [56] ZILL, D. G., CULLEN, M. R., 2001, *Equações Diferenciais, vol. 1*. São Paulo, Makron.

# Apêndice A

## Mapeamento Isoparamétrico

A ideia principal do mapeamento isoparamétrico é relacionar os sistemas de coordenadas globais de um polígono convexo com o sistema de coordenadas locais, onde as integrais das matrizes locais podem ser facilmente calculadas. Para isso, é preciso que a solução aproximada e suas derivadas sejam escritas em função dessas coordenadas locais.

Para construir o mapeamento, devemos respeitar alguns critérios:

1. A transformação deve provocar uma malha sem saltos entre os elementos e também sem sobreposição entre eles;
2. As transformações devem ser fáceis de construir;
3. As funções devem ser fáceis de se manipular;
4. E por fim, as funções devem ser contínuas e diferenciáveis em cada elemento  $\Omega_e$ .

Por exemplo, para um elemento quadrilátero definido no plano  $xy$ , a aproximação  $v_h^e(x, y)$  escrita em termos de coordenadas locais  $(\xi, \eta)$  é dada pelas expressões

$$x(\xi, \eta) = \sum_{j=1}^n x_j \varphi_j(\xi, \eta) \quad (\text{A.1})$$

e

$$y(\xi, \eta) = \sum_{j=1}^n y_j \varphi_j(\xi, \eta) \quad (\text{A.2})$$

onde  $\varphi_j(\xi, \eta)$  é a função de interpolação local (de elemento) e  $(x_j, y_j)$  são as coordenadas  $x$  e  $y$  no nó  $j$ .

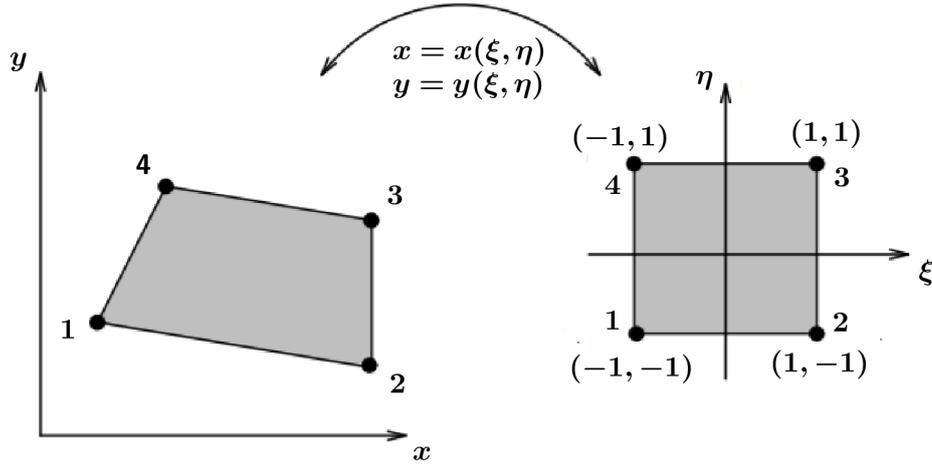


Figura A.1: Parametrização de um elemento.

As funções  $\varphi$  são conhecidas como **funções de forma** (*shape functions*). Nos elementos da família de Lagrange, as funções de interpolação são obtidas a partir dos produtos dos polinômios de Lagrange em cada direção, resultando em elementos com  $q + 1$  nós:

$$\varphi_j^q = l_j^q(\xi)l_j^q(\eta) \quad \Rightarrow \quad (q + 1)^2 \quad \text{nós.} \quad (\text{A.3})$$

Desta forma, as funções de interpolação do elemento quadrilátero bilinear de 4 nós do nosso exemplo, para polinômios lineares ( $q = 1$ ) são:

$$\varphi_1(\xi, \eta) = \frac{1}{4}(1 + \xi)(1 + \eta) \quad (\text{A.4})$$

$$\varphi_2(\xi, \eta) = \frac{1}{4}(1 - \xi)(1 + \eta) \quad (\text{A.5})$$

$$\varphi_3(\xi, \eta) = \frac{1}{4}(1 - \xi)(1 - \eta) \quad (\text{A.6})$$

$$\varphi_4(\xi, \eta) = \frac{1}{4}(1 + \xi)(1 - \eta) \quad (\text{A.7})$$

De modo análogo ao elemento quadrilátero, uma transformação simples mapeia um elemento triangular para um elemento em um sistema de coordenadas locais, (conforme a Figura A), dadas pelas expressões

$$x(\xi, \eta) = \sum_{j=1}^3 x_j \varphi_j(\xi, \eta) \quad (\text{A.8})$$

e

$$y(\xi, \eta) = \sum_{j=1}^3 y_j \varphi_j(\xi, \eta) \quad (\text{A.9})$$

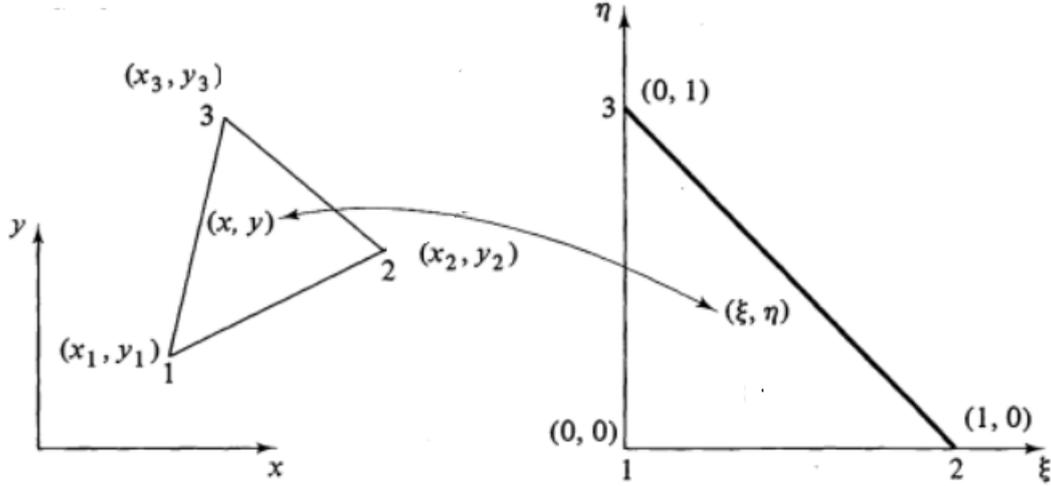


Figura A.2: Parametrização de um elemento.

Fonte: Becker, Carey and Oden [6].

A discussão sobre a obtenção das funções de forma é feita em [6]. Aqui apresentaremos as funções de forma linear para o elemento triangular linear. Tais funções assumem valor unitário em um vértice e zero nos vértices opostos e são expressas da seguinte forma:

$$\varphi_1(\xi, \eta) = 1 - \xi - \eta \quad (\text{A.10})$$

$$\varphi_2(\xi, \eta) = \xi \quad (\text{A.11})$$

$$\varphi_3(\xi, \eta) = \eta \quad (\text{A.12})$$

Uma vez tendo a aproximação escrita em termos de coordenadas locais, os integrandos passam a ser funções de  $(\xi, \eta)$ , desta forma, é necessário mudar o domínio e os limites de integração. Isto é feito através da matriz Jacobiana  $\mathbf{J}$  de transformação de coordenadas, que relaciona um elemento infinitesimal no domínio real a um elemento infinitesimal no domínio de coordenadas locais:

$$d\Omega_e = \det(\mathbf{J})d\xi d\eta. \quad (\text{A.13})$$

Assim, uma integral de elemento pode ser efetuada utilizando-se o domínio de coordenadas locais.

As funções  $x(\xi, \eta)$  e  $y(\xi, \eta)$ , como dito anteriormente, devem ser contínuas e diferenciáveis em relação a  $\xi, \eta$ . Diante disso, podemos obter suas diferenças, respectivamente, como:

$$dx = \frac{\partial x(\xi, \eta)}{\partial \xi}d\xi + \frac{\partial x(\xi, \eta)}{\partial \eta}d\eta \quad (\text{A.14})$$

e

$$dy = \frac{\partial y(\xi, \eta)}{\partial \xi} d\xi + \frac{\partial y(\xi, \eta)}{\partial \eta} d\eta \quad (\text{A.15})$$

e que podem ser escritos de forma matricial como:

$$\begin{bmatrix} dx \\ dy \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial x}{\partial \eta} \\ \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d\xi \\ d\eta \end{bmatrix}, \quad (\text{A.16})$$

onde

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial x}{\partial \eta} \\ \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{bmatrix}, \quad (\text{A.17})$$

é a matriz jacobiana da transformação.

Para inverter expressão (A.16) é necessário que

$$|\mathbf{J}| = \det(\mathbf{J}) = \left( \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} \right) \neq 0. \quad (\text{A.18})$$

Com isso, a forma inversa da transformação é:

$$\begin{bmatrix} d\xi \\ d\eta \end{bmatrix} = \frac{1}{\det(\mathbf{J})} \begin{bmatrix} \frac{\partial y}{\partial \eta} & -\frac{\partial y}{\partial \xi} \\ -\frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial x}{\partial \xi} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} dx \\ dy \end{bmatrix}. \quad (\text{A.19})$$

Para uma melhor compreensão, considere o seguinte elemento  $\Omega_e$  de quatro nós, com as respectivas coordenadas  $(0, 0)$ ,  $(2, 0)$ ,  $(2, 1)$  e  $(0, 1)$ . De acordo com as expressões (A.1) e (A.2), temos que

$$x(\xi, \eta) = \sum_{j=1}^4 x_j \varphi_j(\xi, \eta) \quad (\text{A.20})$$

e

$$y(\xi, \eta) = \sum_{j=1}^4 y_j \varphi_j(\xi, \eta). \quad (\text{A.21})$$

Sabendo que  $(x_j, y_j) = \{(0, 0), (2, 0), (2, 1), (0, 1)\}$  e que as funções de forma  $\varphi_j$ , para elementos quadrangulares, estão estabelecidas. A transformação é feita da seguinte maneira:

$$x(\xi, \eta) = 0\varphi_1(\xi, \eta) + 2\varphi_2(\xi, \eta) + 2\varphi_3(\xi, \eta) + 0\varphi_4(\xi, \eta) \quad (\text{A.22})$$

e

$$y(\xi, \eta) = 0\varphi_1(\xi, \eta) + 0\varphi_2(\xi, \eta) + 1\varphi_3(\xi, \eta) + 1\varphi_4(\xi, \eta). \quad (\text{A.23})$$

Substituindo as funções de forma  $\varphi_j$ , obtemos

$$x(\xi, \eta) = (1 - \xi) \quad (\text{A.24})$$

e

$$y(\xi, \eta) = \frac{1}{2}(1 - \eta). \quad (\text{A.25})$$

Com isso, obtemos a matriz jacobiana da transformação:

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial x}{\partial \eta} \\ \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{bmatrix} \quad (\text{A.26})$$

$$= \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \quad (\text{A.27})$$

e, por sua vez, o determinante do jacobiano  $\det(\mathbf{J}) = \frac{1}{2} \neq 0$ .

Uma vez obtida as transformações em relação as coordenadas  $x_j$  e  $y_j$  e o determinante do jacobiano, é possível calcular as integrais presentes na matriz local dada a nível de elemento. A integração numérica é obtida através do emprego da quadratura gaussiana em cada coordenada separadamente [12].

# Apêndice B

## Método de Runge-Kutta

As equações diferenciais são comumente usadas para modelagem matemática em ciência e engenharia. Em muitas situações, os problemas formulados através destas equações não possuem solução analítica conhecida, então os métodos numéricos apresentam-se como uma alternativa para encontrar soluções aproximadas. Dentre os diversos métodos numéricos para resolução de equações diferenciais, o método de Runge-Kutta é considerado um dos mais importantes por ser bastante preciso, estável e de fácil implementação.

Desenvolvido pelos matemáticos Carl David Runge (1856-1927) e M. Wilhelm Kutta (1867-1944) o método consiste em comparar um polinômio de Taylor adequado a fim de eliminar o cálculo das derivadas, muitas vezes difíceis de serem obtidas, fazendo-se várias avaliações da função a cada passo, ou seja, busca-se uma melhor estimativa da derivada com a avaliação da função em mais pontos no intervalo dado [3].

O método de Runge-Kutta é facilmente encontrado na literatura, alguns textos são mais teóricos como [5] e [9] e outros mais computacionais como [12], [20] e [34]. Neste sentido, nosso foco será o de apresentar o método de Runge-Kutta de quarta ordem, uma vez que, essa foi a técnica numérica escolhida para resolução do modelo proposto neste trabalho, em virtude da sua eficácia e facilidade de implementação.

Inicialmente, considere o intervalo  $I = [a, b]$  dividido em  $m$  subintervalos de igual comprimento  $h = \frac{b-a}{m}$ , de tal maneira a formar um conjunto de pontos  $t_n = a + nh$ , com  $n = 0, 1, \dots, m$ .

O método de **Runge-Kutta** é um método de passo simples dado por:

$$u_{n+1} = u_n + h\psi(t_n, u_n, h), \quad (\text{B.1})$$

onde  $\psi$  é conhecida como função incremento e que depende de  $t_n$ ,  $u_n$ , e  $h$ .

Dizemos que um método é de passo simples se a aproximação  $u_{n+1}$  depende apenas do resultado  $u_n$  da etapa anterior [5].

Fazendo  $\psi(t_n, u_n, h) = (p_1k_1 + p_2k_2 + p_3k_3 + p_4k_4)$  e substituindo na equação (B.1), obtemos o **método de Runge-Kutta de quarta ordem**,

$$u_{n+1} = u_n + h(p_1K_1 + p_2K_2 + p_3K_3 + p_4K_4), \quad (\text{B.2})$$

onde  $K_1, K_2, K_3$  e  $K_4$  tem as formas

$$\begin{aligned} K_1 &= f(t_n, u_n), \\ K_2 &= f(t_n + q_1h, u_n + r_1hK_1), \\ K_3 &= f(t_n + q_2h, u_n + r_2hK_1 + r_3hK_2), \\ K_4 &= f(t_n + q_3h, u_n + r_4hK_1 + r_5hK_2 + r_6hK_3), \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

com  $p, q$  e  $r \in \mathbb{R}$ .

Cada método de Runge-Kutta é derivado de um método apropriado de Taylor de tal maneira que o erro global de aproximação seja da ordem  $O(h^N)$ . Deste modo, para o método de Runge-Kutta de quarta ordem, a estratégia é encontrar os coeficientes  $p, q$ , e  $r$  para que a regra de atualização possua precisão equivalente ao método de Taylor de quarta ordem [34].

Sendo assim, expandindo  $K_2, K_3$  e  $K_4$  em torno de um ponto  $(t_n, u_n)$  em série de Taylor de duas variáveis, abandonando-se os termos de ordem  $h^2, h^3$  e  $h^4$ , respectivamente. Em seguida, substituindo essas expansões e o termo  $K_1$  em (B.2) e comparando os termos da potência  $h$  até  $h^4$  entre a função  $\psi$  com a função  $T_N$  ( $N = 4$ ) do método de Taylor,

$$u(t_n + h) = u(t_n) + hT_N(t_n, u(t_n)) + O(h^{N+1}), \quad (\text{B.4})$$

onde

$$T_N(t_n, u(t_n)) = \sum_{j=1}^N \frac{u^{(j)}(t_n)}{j} h^{j-1}, \quad (\text{B.5})$$

obtemos um sistema não linear de equações

$$\left\{ \begin{array}{l} r_1 \\ r_2 + r_3 \\ r_4 + r_5 + r_6 \\ p_1 + p_2 + p_3 + p_4 \\ p_2q_1 + p_3q_2 + p_4q_3 \\ p_2q_1^2 + p_3q_2^2 + p_4q_3^2 \\ p_2q_1^3 + p_3q_2^3 + p_4q_3^3 \\ p_3q_1r_3 + p_4(q_1r_5 + q_2r_6) \\ p_3q_1q_2r_3 + p_4q_3(q_1r_5 + q_2r_6) \\ p_3q_1^2r_3 + p_4(q_1^2r_5 + q_2^2r_6) \\ p_4q_1r_3r_6 \end{array} \right. = \begin{array}{l} q_1, \\ q_2, \\ q_3, \\ 1, \\ \frac{1}{2}, \\ \frac{1}{3}, \\ \frac{1}{4}, \\ \frac{1}{6}, \\ \frac{1}{8}, \\ \frac{1}{12}, \\ \frac{1}{24}. \end{array} \quad (\text{B.6})$$

Este sistema é constituído por 11 equações e 13 incógnitas, e possui portanto, infinitas soluções.

Fazendo  $q_1 = \frac{1}{2}$  e  $r_2 = 0$ , encontramos  $p_1 = \frac{1}{6}$ ,  $p_2 = \frac{1}{3}$ ,  $p_3 = \frac{1}{3}$ ,  $p_4 = \frac{1}{6}$ ,  $q_2 = \frac{1}{2}$ ,  $q_3 = 1$ ,  $r_1 = \frac{1}{2}$ ,  $r_2 = 0$ ,  $r_3 = \frac{1}{2}$ ,  $r_4 = 0$ ,  $r_5 = 0$  e  $r_6 = 1$ .

Substituindo os valores obtidos acima nas equações (B.2) e (B.3), obtemos uma regra de atualização clássica para o método de Runge-Kutta de quarta ordem

$$u_{n+1} = u_n + \frac{h}{6} (K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4), \quad (\text{B.7})$$

com,

$$\begin{aligned} K_1 &= f(t_n, u_n), \\ K_2 &= f\left(t_n + \frac{1}{2}h, u_n + \frac{1}{2}hK_1\right), \\ K_3 &= f\left(t_n + \frac{1}{2}h, u_n + \frac{1}{2}hK_2\right), \\ K_4 &= f(t_n + h, u_n + hK_3), \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

Para exemplificar, vamos considerar o sistema de equações diferenciais ordinárias

(3.6) do capítulo 3 que caracteriza o termo de reação do modelo proposto, para analisar o comportamento dinâmico das três populações.

Vamos considerar as mesmas informações utilizadas no **Experimento 1** do capítulo 5, uma vez que, o mesmo foi utilizados para validar o modelo.

A Figura B.1 a seguir, mostra os resultados das simulações para as três variedades de mosquitos, respectivamente.

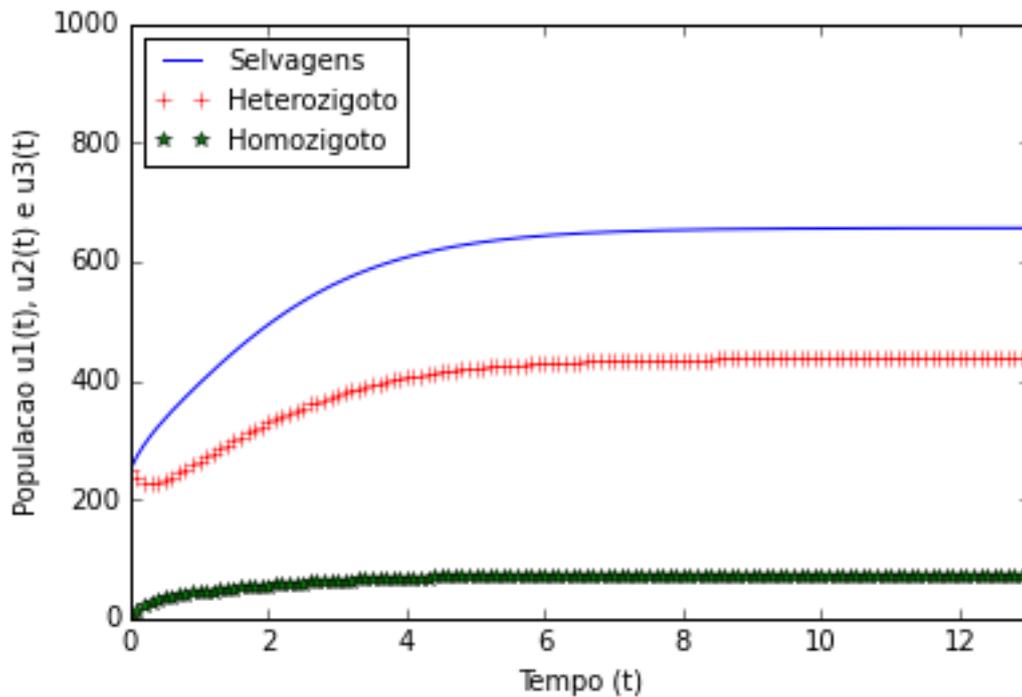


Figura B.1: Soluções gráficas do experimento 1 para a população de mosquitos selvagens, transgênicos heterozigotos e transgênicos homozigotos, obtidas através do método de Runge-Kutta de quarta ordem.

Observe que os mosquitos transgênicos homozigotos surgem naturalmente do acasalamento entre as outras duas variedades de mosquitos. Além disso, Após algumas gerações a população final de mosquitos selvagens foi de  $u_1 \approx 656$ , transgênicos heterozigotos de  $u_2 \approx 437$  e transgênicos homozigotos de  $u_3 \approx 72$ , ou seja, foi estabilizada em 56,30% de selvagens e 43,69% de transgênicos, resultados compatíveis com o equilíbrio de Hardy-Weinberg e de acordo com o experimento realizado em [27].