

UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM  
MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL (PPGMMC)

VICTOR MATHEUS DA CUNHA SANTOS

**Dinâmica e espalhamento de mosquitos  
geneticamente modificados via reação em cadeia  
mutagênica**

JOÃO PESSOA

2022



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

DINÂMICA E ESPALHAMENTO DE MOSQUITOS GENETICAMENTE  
MODIFICADOS VIA REAÇÃO EM CADEIA MUTAGÊNICA

Victor Matheus da Cunha Santos

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: Ana Paula Pintado Wyse  
Antônio José Boness dos Santos

João Pessoa  
Julho de 2022

Ata da Sessão Pública de Defesa de Dissertação de Mestrado de **VICTOR MATHEUS DA CUNHA SANTOS**, candidato ao título de Mestre em Modelagem Matemática e Computacional, realizada no dia 30 de julho de 2022.

1 Aos trinta dias do mês de julho do ano de dois mil e vinte e dois, às 10h30min, via  
2 videoconferência, reuniram-se os membros da Banca Examinadora constituída para julgar o  
3 Trabalho Final do discente VICTOR MATHEUS DA CUNHA SANTOS, vinculado a  
4 Universidade Federal da Paraíba sob a matrícula nº 20201001369, candidato ao grau de Mestre  
5 em “*Modelagem Matemática e Computacional*”, na linha de pesquisa “*Modelagem e Simulação*  
6 *de Sistemas*”, do Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional. A  
7 comissão examinadora foi composta pelos seguintes membros: Ana Paula Pintado Wyse,  
8 Orientadora e Presidente da Banca; Antonio José Boness dos Santos, Examinador Interno ao  
9 Programa; Juarez dos Santos Azevedo, Examinador Externo ao Programa; e Renatha Batista dos  
10 Santos, Examinadora Externa ao Programa. Dando início aos trabalhos, a Presidente da Banca  
11 cumprimentou os presentes, comunicou a finalidade da reunião e passou a palavra ao candidato  
12 para que fizesse, oralmente, a exposição do trabalho de dissertação intitulado “*DINÂMICA E*  
13 *ESPALHAMENTO DE MOSQUITOS GENETICAMENTE MODIFICADOS VIA REAÇÃO EM*  
14 *CADEIA MUTAGÊNICA*”. Concluída a exposição, o candidato foi arguido pela Banca  
15 Examinadora, que emitiu o seguinte parecer: “**aprovado**”. Do ocorrido, eu, Gean Paulo P. M. de  
16 Barros, secretário do Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional  
17 (PPGMMC), lavrei a presente ata, que vai assinada por mim e pelos membros da Banca  
18 Examinadora.

João Pessoa, 30 de julho de 2022.

Gean Paulo Pereira Mauricio de Barros  
Secretário do PPGMMC  
SIAPE 2326476

Profa. Dra. Ana Paula Pintado Wyse  
Orientadora(PPGMMC)

Ana Paula Wyse

Prof. Dr. Antonio José Boness dos Santos  
Examinador Interno ao Programa (PPGMMC)

Antonio Boness

Prof. Dr. Juarez dos Santos Azevedo  
Examinador Externo ao Programa (UFBA)

Juarez dos Santos Azevedo

Profa. Dra. Renatha Batista dos Santos  
Examinadora Externa ao Programa (UFRN)

Renatha Batista dos Santos

M21m da Cunha Santos, Victor Matheus  
Dinâmica e espalhamento de mosquitos geneticamente modificados via reação em cadeia mutagênica / Victor Matheus da Cunha Santos. – João Pessoa, 2022.  
79, f.: il.;  
Orientadores: Ana Paula Pintado Wyse, Antônio José Boness dos Santos  
Dissertação (mestrado) – UFPB/CI/PPGMMC.  
Referências Bibliográficas: p. 56 – 60.  
1. Decomposição de Operadores. 2. Mosquitos Transgênicos. 3. Sistema de Reação-difusão.

UFPB/BC

CDU: 719.6(043)

*Com amor, dedico este trabalho  
a minha querida mãe, Angela.*

# Agradecimentos

Agradeço a minha orientadora, Prof. Dra. Ana Wyse, por conduzir o meu trabalho de pesquisa, e pelo empenho com que sempre me orientou nesta jornada. Ao meu coorientador, Prof. Dr. Antônio José Boness pelos conhecimentos transmitidos. Obrigado por todo apoio. Agradeço também a todos os meus colegas do Mestrado do PPGMMC. Por fim, quero agradecer à minha família e amigos pelo apoio que me deram, especialmente aos meus pais, Angela Cunha e Helder Santos, ao meu tio Anisberto Cunha e a minha noiva Cleidiane Macêdo.

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

DINÂMICA E ESPALHAMENTO DE MOSQUITOS GENETICAMENTE  
MODIFICADOS VIA REAÇÃO EM CADEIA MUTAGÊNICA

Victor Matheus da Cunha Santos

Julho/2022

Orientadores: Ana Paula Pintado Wyse  
Antônio José Boness dos Santos

Programa: Modelagem Matemática e Computacional

Neste trabalho, apresentamos o modelo bidimensional da interação e dinâmica entre populações de mosquitos selvagens e geneticamente modificados. O modelo classifica as subpopulações de acordo com a zigosidade: selvagem, transgênicos heterozigotos e transgênicos homozigotos. As linhagens resultantes estão de acordo com a técnica de Reação em Cadeia Mutagênica(MCR). Este modelo está representado por sistema de equações diferenciais parciais do tipo reação-difusão, onde o termo de reação é não-linear. Para a solução numérica do problema, aplicamos a técnica de Decomposição de Operadores, que nos permitiu resolver o problema de difusão separado do problema de reação. Para resolver o problema de difusão, utilizamos um método de diferenças finitas, o Método Implícito de Direções Alternadas (ADI), e para o termo de reação foi utilizado um método de Runge-Kutta de quarta ordem. Simulações numéricas são apresentadas mostrando a potencialidade da técnica MCR em combater doenças transmitidas por mosquitos.

**Palavras-chave:** Decomposição de Operadores; Mosquitos Transgênicos; Sistema de Reação-difusão; Método implícito de direção alternada.

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

DINÂMICA E ESPALHAMENTO DE MOSQUITOS GENETICAMENTE  
MODIFICADOS VIA REAÇÃO EM CADEIA MUTAGÊNICA

Victor Matheus da Cunha Santos

July/2022

Advisors: Ana Paula Pintado Wyse

Antônio José Boness dos Santos

Program: Computational Mathematical Modelling

In this work, we present the two-dimensional model of iteration and dynamics between wild and genetically modified mosquito populations. The model classifies subpopulations according to zygosity: wild, heterozygous transgenics and homozygous transgenics. The resulting strains are in accordance with the Mutagenic Chain Reaction (MCR) technique. This model is represented by a system of partial differential equations of the reaction-diffusion type, where the reaction term is non-linear. For the numerical solution of the problem, we applied the technique of Operator Decomposition, which allowed us to solve the diffusion problem separately from the reaction problem. To solve the diffusion problem, we used a finite difference method, the Alternate Directions Implicit Method (ADI), and for the reaction term, a fourth order Runge-Kutta method was used. Numerical simulations are presented showing the potential of the MCR technique to combat diseases transmitted by mosquitoes.

**Keywords:** splitting method; Transgenic Mosquitoes; Reaction-diffusion System; Alternating-direction implicit method.

# Sumário

<b>Lista de Figuras</b>	<b>x</b>
<b>Lista de Tabelas</b>	<b>xii</b>
<b>Lista de Símbolos</b>	<b>xiii</b>
<b>Lista de Abreviaturas</b>	<b>xv</b>
<b>1 Revisão Bibliográfica da Modelagem Matemática</b>	<b>1</b>
1.1 Modelos Clássicos da Dinâmica Populacional . . . . .	1
1.1.1 Modelo de Malthus . . . . .	1
1.1.2 Modelo de Verhulst . . . . .	3
1.2 Modelos da interação entre populações de mosquitos naturais e geneticamente modificados . . . . .	5
1.2.1 Modelo discreto de Jia Li . . . . .	6
1.2.2 O Modelo Contínuo de Jia Li . . . . .	8
1.2.3 Modelo da dinâmica entre mosquitos selvagens e transgênicos com sazonalidade . . . . .	9
1.2.4 Modelo da dinâmica de mosquitos selvagens e transgênicos com <i>fitness</i> . . . . .	10
1.2.5 Modelos com dinâmica espaço-temporal para a interação de mosquitos selvagens e transgênicos . . . . .	10
<b>2 Fundamentos do Método de Diferenças finitas</b>	<b>15</b>
2.0.1 Ferramenta matemática básica no cálculo de aproximações para as derivadas . . . . .	16
2.1 Fórmulas de Diferenças Finitas . . . . .	17
2.1.1 Fórmulas de diferenças finitas para segunda derivada . . . . .	20
2.1.2 Métodos gerais para fórmulas de diferenças finitas . . . . .	21
2.1.3 Generalização das fórmulas para a primeira derivada . . . . .	22
2.1.4 Diferença progressiva . . . . .	23
2.1.5 Diferença regressiva . . . . .	24

2.1.6	Diferença Central . . . . .	25
2.1.7	Derivadas de Ordem Superior . . . . .	27
2.1.8	Derivadas de segunda ordem . . . . .	29
2.2	Esquemas de Diferença Finita para o Operador de Laplace . . . . .	31
2.3	Esquemas Implícitos para Problemas Multidimensionais - Métodos Implícitos de Direção Alternada (ADI) . . . . .	32
2.3.1	Formulação Totalmente Implícita 2D( $\theta = n + 1$ ) . . . . .	32
2.3.2	Métodos de Direções Alternadas (ADI) . . . . .	34
<b>3</b>	<b>Modelo Bidimensional da Dinâmica e Espalhamento de Mosquitos Selvagens e Transgênicos</b>	<b>39</b>
3.1	Formulação Numérica . . . . .	42
3.1.1	Solução para o Problema A . . . . .	43
3.1.2	Solução para o Problema B . . . . .	44
<b>4</b>	<b>Simulações Numéricas</b>	<b>45</b>
<b>5</b>	<b>Considerações Finais</b>	<b>55</b>
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>56</b>
<b>A</b>	<b>Algumas Demonstrações</b>	<b>61</b>
A.1	Relações imediatas entre os operadores em (2.24) . . . . .	61

# Lista de Figuras

1.1	Solução para o problema de Malthus em um intervalo $I = [0, 10]$ , para $\lambda > 0$ , $\lambda = 0$ e $\lambda < 0$ cuja população inicial é respectivamente $P(0) = 2$ , $P(0) = 100$ , $P(0) = 200$ . . . . .	3
1.2	Curvas $P(t)$ obtidas pelo modelo de Verhulst, considerando populações iniciais acima e abaixo da capacidade suporte $k$ . . . . .	4
1.3	Simulação 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. . . . .	5
2.1	Pontos discretos da malha. . . . .	15
2.2	Interpretação geométrica das fórmulas de diferenças finitas para as derivadas de 1 <sup>a</sup> ordem. . . . .	18
2.3	Molécula computacional com 5 pontos para o operador de Laplace (Equação(2.79)). . . . .	32
2.4	Molécula computacional para o método totalmente implícito . . . . .	33
2.5	Molécula computacional para o método implícito de direção alternada . . . . .	35
2.6	Solução numérica via método ADI 2.6(a) e solução analítica 2.6(b) do Experimento 2.1, da equação de difusão bidimensional. . . . .	38
3.1	Comparação de padrão de herança mendeliana contra MCR. Mosquitos transgênicos (azul) são obtidos em maior proporção em relação aos mosquitos selvagens (laranja) quando a herança MCR é considerada. . . . .	41
4.1	Dinâmica temporal de $u_1$ , $u_2$ e $u_3$ . . . . .	45
4.2	Comparação entre a população de mosquitos selvagens (a-b), homozigotos (c-d) e heterozigotos (e-f), em 6 semanas utilizando a herança mendeliana e a herança MCR. . . . .	47
4.3	Comparação entre a população de mosquitos selvagens (a-b), homozigotos (c-d) e heterozigotos (e-f), em 13 semanas utilizando a herança mendeliana e a herança MCR. . . . .	48

4.4	Comparação entre a população de mosquitos selvagens (a-b), homozigotos (c-d) e heterozigotos (e-f), em 6 semanas utilizando a herança mendeliana e a herança MCR. . . . .	50
4.5	Comparação entre a população de mosquitos selvagens (a-b), homozigotos (c-d) e heterozigotos (e-f), em 13 semanas utilizando a herança mendeliana e a herança MCR. . . . .	51
4.6	Dinâmica temporal de $u_1$ , $u_2$ e $u_3$ . . . . .	52
4.7	Comparação entre a população de mosquitos selvagens (a-b), homozigotos (c-d) e heterozigotos (e-f), em 6 semanas utilizando a herança mendeliana e a herança MCR. . . . .	53
4.8	Comparação entre a população de mosquitos selvagens (a-b), homozigotos (c-d) e heterozigotos (e-f), em 6 semanas utilizando a herança mendeliana e a herança MCR. . . . .	54

# Lista de Tabelas

1.1	Frequências genotípicas considerando herança mendeliana . . . . .	12
3.1	Frequências de descendência genotípica obtidas a partir do acasalamento de mosquitos selvagens, transgênicos heterozigotos e transgênicos homozigotos. . . . .	40
3.2	Exemplo do Quadro de Punnett para o acasalamento $u_2 \times u_2$ , com frequência genotípica $p = q = 1/2$ , resultando em $a_{22} = 1/4$ , $b_{22} = 1/2$ e $c_{22} = 1/4$ . . . . .	40
3.3	Frequências genotípicas considerando herança mendeliana e MCR . . . . .	42
4.1	Dados utilizados para a resolução do modelo proposto para os Experimentos 1, 2 e 3. . . . .	45
4.2	Fitness Médio . . . . .	46
4.3	Frequências genotípicas utilizadas nos experimentos . . . . .	46

# Lista de Símbolos

$\bar{u}$	Condições de contorno, p. 13
$\hat{u}$	Condições de contorno, p. 13
$P(t)$	População em um instante $t$ , p. 1
$\alpha$	Taxa de natalidade, p. 2
$\lambda$	Diferença de taxa da taxa de natalidade e mortalidade, p. 2
$\beta$	Taxa de mortalidade, p. 2
$\emptyset$	Conjunto vazio, p. 1
$r$	Taxa intrínica de crescimento, p. 4
$P_\infty$	Limite populacional, p. 4
$P_0$	População inicial, p. 4
$k$	Capacidade de suporte, p. 4
$\xi$	Taxa de emergência dos mosquitos para fase adulta, p. 11
$D$	Coefficiente de difusão, p. 1
$\delta_1$	Taxa de mortalidade por causas naturais, p. 11
$\delta_2$	Taxa de mortalidade devido a ação de predadores, p. 11
$\Delta x$	Espaçamento na malha na direção $x$ , p. 15
$\Delta y$	Espaçamento na malha na direção $y$ , p. 15
$\theta$	Passo no tempo, p. 32
$t$	Instante de tempo, p. 1
$I$	Intervalo de tempo, p. 42

$t_0$	Instante de tempo, p. 1
$u_1$	População de mosquitos selvagens, p. 11
$u_2$	População de mosquitos transgênicos heterozigotos, p. 11
$u_3$	População de mosquitos transgênicos homozigotos, p. 11
$u_x$	Primeira derivada de $u$ em relação a $x$ , p. 11

# Lista de Abreviaturas

PPGMMC	Programa de Pós-graduação em Modelagem Matemática e Computacional, p. 1
RIDL	Release of insect carrying a dominant lethal gene, p. 3
SIT	Sterile insect technique, p. 3
MCR	<i>Mutagenic Chain Reaction</i> , p. 40
ADI	Método de Direções Alternadas, p. 44

# Capítulo 1

## Revisão Bibliográfica da Modelagem Matemática

### 1.1 Modelos Clássicos da Dinâmica Populacional

A dinâmica de populações é um tema relevante em diversas áreas de pesquisa. Impactos antrópicos devido a ocupação territorial em estudos de natureza demográfica, ou ainda estudos referentes a ecologia, como a estabilidade e interações intra e/ou interespecíficas são modelados a fim de melhorar a compreensão de tais interações.

Os modelos epidemiológicos são modelos que descrevem a interação de um hospedeiro com o seu patógeno, podendo ocorrer diretamente ou via um hospedeiro intermediário, por exemplo os artrópodes. No caso das doenças de transmissão indireta, cujo ciclo de transmissão inclui o hospedeiro intermediário, o controle se dá muitas vezes sobre tal hospedeiro e com isso o ciclo de transmissão da doença é interrompido. Mosquitos tem sua população reduzida comumente pelo uso de inseticidas, contaminação por bactéria, esterilização e manipulação genética. A influência dessas técnicas de redução da população de mosquitos é avaliada por meio de modelos matemáticos que descrevem a sua dinâmica sob efeito de fatores que buscam a redução ou eliminação local desses hospedeiros intermediários.

#### 1.1.1 Modelo de Malthus

O economista e demógrafo inglês Thomas Robert Malthus foi responsável pela primeira tentativa de estimar o crescimento populacional mundial. Seu trabalho, "An Essay on the Principle of Population", publicado pela primeira vez em anonimato no ano de 1798, usou um modelo que estabelecia que o crescimento populacional se daria segundo uma progressão geométrica, se não fosse controlado, enquanto os meios de sobrevivência cresceriam em progressão aritmética. [21] Em termos matemáticos, podemos traduzir a teoria de Malthus da seguinte forma: Seja  $P = P(t)$

a população total de um país em um instante  $t$ . Em um intervalo de tempo  $\Delta t$ , a Lei de Malthus pressupõe que os nascimentos e as mortes são proporcionais a quantidade da população e ao tamanho do intervalo, isto é,

$$\text{número de nascimentos} = \alpha P(t)\Delta t,$$

$$\text{número de mortes} = \beta P(t)\Delta t,$$

onde  $\alpha$  é a taxa de natalidade e  $\beta$  é a taxa de mortalidade. Assim,

$$\Delta P = P(t + \Delta t) - P(t) = \alpha P(t)\Delta t - \beta P(t)\Delta t = (\alpha - \beta) P(t)\Delta t$$

ou

$$\frac{\Delta P}{\Delta t} = (\alpha - \beta) P(t). \quad (1.1)$$

Tomando o limite quando  $\Delta t \rightarrow 0$  e fazendo  $\lambda = \alpha - \beta$ , em (1.1) obtemos a equação diferencial

$$\frac{dP}{dt} = \lambda P \quad (1.2)$$

com condição inicial

$$P(0) = P_0. \quad (1.3)$$

A equação (1.3) tem solução analítica dada por

$$P(t) = P_0 e^{\lambda t}, \quad (1.4)$$

e está ilustrada na Figura 1.1.

As populações iniciais  $P(0)$  não afetam o comportamento da solução e foram tomadas distintas na Figura 1.1 com a finalidade de se obter um melhor efeito visual.

A depender das taxas de natalidade e mortalidade temos 3 situações:

- Se  $\lambda > 0$ , a taxa de natalidade é maior que a de mortalidade e a população cresce exponencialmente com o tempo;
- Se  $\lambda = 0$ , as taxas de natalidade e mortalidade coincidem e a população não varia;
- Se  $\lambda < 0$ , a taxa de mortalidade supera a de natalidade, conseqüentemente a população tende à extinção a medida que  $t$  cresce.

O modelo de Malthus contribuiu para o desenvolvimento da dinâmica populacional e, apesar do tempo, a Lei de Malthus ainda é utilizada para estimativas popu-

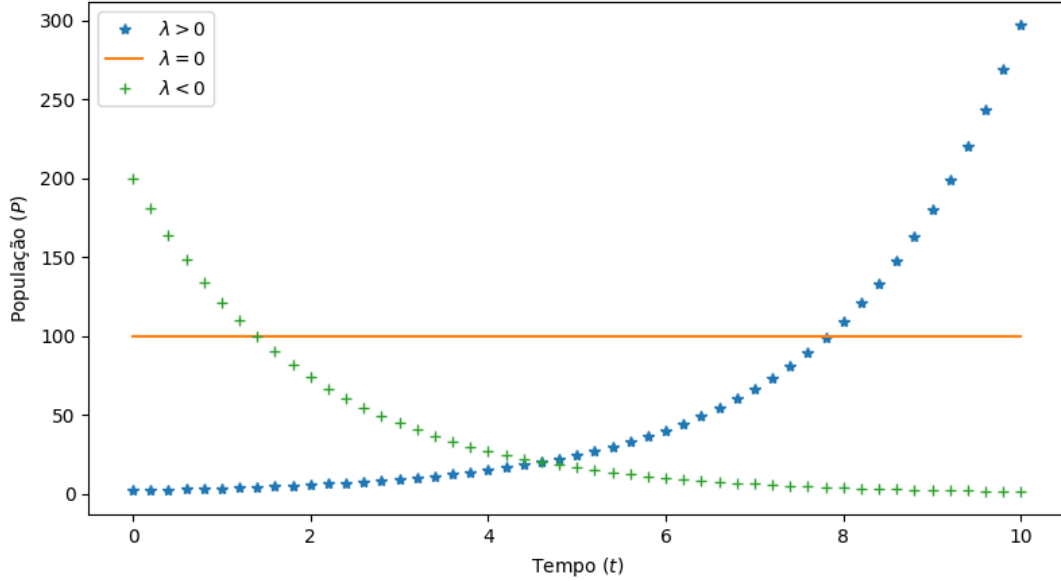


Figura 1.1: Solução para o problema de Malthus em um intervalo  $I = [0, 10]$ , para  $\lambda > 0$ ,  $\lambda = 0$  e  $\lambda < 0$  cuja população inicial é respectivamente  $P(0) = 2$ ,  $P(0) = 100$ ,  $P(0) = 200$

lacionais de curto prazo, principalmente para descrever o crescimento populacional de certas populações de microorganismos em períodos limitados de tempo.

A Lei Malthusiana sustentava que a população cresceria ilimitadamente, e então sofreria com a fome, guerra, condições sanitárias e miséria. O modelo malthusiano falha para estimativas a médio e longo prazo, uma vez que a limitação de recursos se torna um fato e adiciona um efeito negativo no crescimento populacional.

### 1.1.2 Modelo de Verhulst

Em 1838 o matemático e biólogo Pierre François Verhulst (1804-1849) propôs um modelo matemático baseado no modelo de Malthus, porém Verhulst considerou a taxa de crescimento uma função linear dependente da densidade populacional, com um fator limitante de crescimento.[32]

Para sintetizar a ideia de Verhulst, consideraremos na Equação (1.2)  $\alpha : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$  e  $\beta : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$  funções lineares dependentes de  $P$ , ou seja,  $\alpha = b_1 - d_1 P$  e  $\beta = b_2 + d_2 P$  onde  $b_1 \in \mathbb{R}$  é a taxa de natalidade mínima e  $b_2 \in \mathbb{R}$  é a taxa de mortalidade máxima,  $d_1$  é a taxa de variação da natalidade e mede com que rapidez ela diminui, enquanto que  $d_2$  é a taxa de variação da mortalidade e mede com que rapidez ela aumenta.

Substituindo  $\lambda = \alpha - \beta$ , na Equação (1.2) e desenvolvendo conforme a ideia de

Verhulst temos

$$\begin{aligned}\frac{dP}{dt} &= (\alpha - \beta)P \\ &= [(b_1 - d_1P) - (b_2 + d_2P)]P \\ &= [(b_1 - b_2) - (d_1 - d_2)P]P,\end{aligned}$$

de onde obtem-se

$$\frac{dP(t)}{dt} = (b_1 - b_2)P(t) \left[ 1 - \left( \frac{d_1 - d_2}{b_1 - b_2} \right) P(t) \right]. \quad (1.5)$$

Definindo  $r = b_1 - b_2$  e  $k^{-1} = \frac{d_1 - d_2}{b_1 - b_2}$ , chegamos ao modelo de Verhulst, conhecido também como modelo logístico e descrito por

$$\frac{dP(t)}{dt} = rP(t) \left[ 1 - \frac{P(t)}{k} \right], \quad (1.6)$$

onde  $r \in \mathbb{R}^+$  representa a taxa intrínica de crescimento da população  $P$  e  $k \in \mathbb{R}^+$  a capacidade de suporte do ambiente.

Podemos encontrar a solução analítica da Equação (1.6) utilizando o método da separação de variáveis como feito em [3], resultando em

$$P(t) = \frac{kP_0}{P_0 + (k - P_0)e^{-rt}}. \quad (1.7)$$

Fazendo uma análise da solução, se  $t \rightarrow \infty$ , então  $P(t) \rightarrow P_\infty$ , onde  $P_\infty \equiv P(t) = k$ . Esse valor  $P_\infty$  é chamado de limite populacional e é o valor assintótico da população, para qualquer que seja a população inicial  $P_0 > 0$ . Se  $P_0 > P_\infty$ , a população  $P(t)$  decresce exponencialmente tendendo para  $P_\infty$ . Se  $0 < P_0 < P_\infty$ , a população cresce tendendo também para  $P_\infty$  neste caso, o gráfico  $P(t)$  está entre as retas  $P = 0$  e  $P = P_\infty$  como pode ser visto na Figura 1.2.

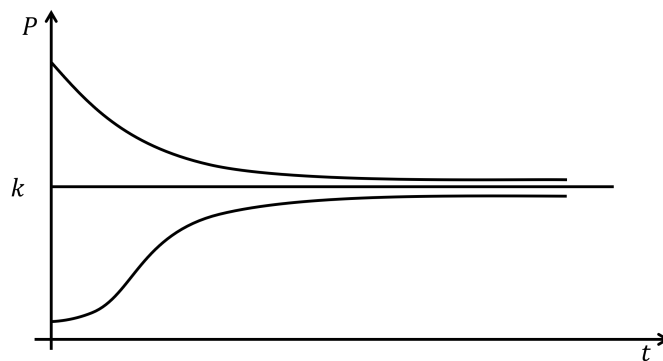


Figura 1.2: Curvas  $P(t)$  obtidas pelo modelo de Verhulst, considerando populações iniciais acima e abaixo da capacidade suporte  $k$ .

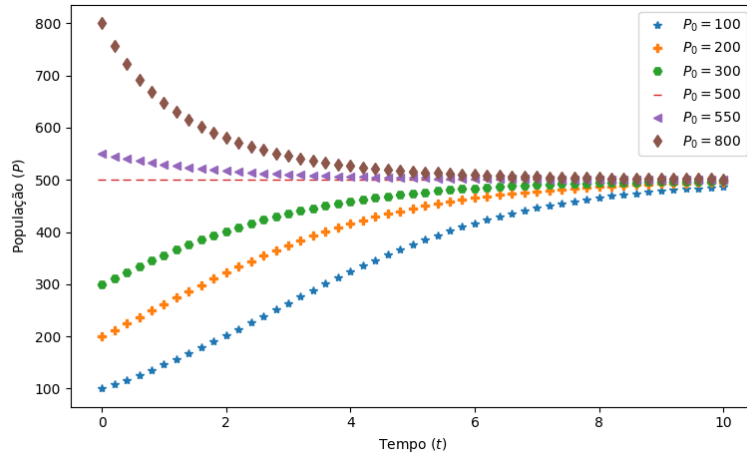


Figura 1.3: Simulação para o modelo de Verhulst em um intervalo de tempo  $I = [0; 10]$ , com  $r = 0,5$ ,  $k = 500$ , populações iniciais  $P(0)$  com valores de 100, 200, 300, 500, 550 e 800 indivíduos.

A Figura 1.3, 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  $I = [0, 10]$ .

## 1.2 Modelos da interação entre populações de mosquitos naturais e geneticamente modificados

O uso de controle genético de mosquitos para combater uma doença surgiu há mais de 60 anos. Knipling propôs a soltura de machos estéreis pela irradiação por raios-X e liberação destes insetos em campo para competirem com machos selvagens, uma vez que fêmeas copuladas por machos irradiados não produzem descendentes o que acarreta na diminuição da transmissão ou na população de insetos [18]. O método de Knipling ficou conhecido por Técnica do Inseto Estéril (do inglês – Sterile Insect Technique - SIT). Mais tarde, modelos foram desenvolvidos para avaliar o uso de Mosquitos Geneticamente Modificados como estratégia de controle da epidemia de Malária. Os mosquitos responsáveis pela transmissão da malária (vetores) foram modificados geneticamente para que a probabilidade de transmissão do parasita causador da doença ao picar um ser humano seja reduzida em relação aos vetores do tipo selvagem.[4], [19], [28]. Neste sentido apresentaremos brevemente nesta secção alguns dos estudos que nortearam a modelagem da interação entre mosquitos selvagens e mosquitos geneticamente modificados.

### 1.2.1 Modelo discreto de Jia Li

O modelo discreto a seguir descreve a interação de mosquitos selvagens  $x$  e mosquitos geneticamente modificados  $y$  ao longo do tempo [19]. O modelo é descrito usando um sistema acoplado de equações a diferenças não-lineares da seguinte forma:

$$\begin{aligned}x_{n+1} &= f_1(x_n, y_n)x_nS(x_n, y_n) \\y_{n+1} &= f_2(x_n, y_n)y_nS(x_n, y_n).\end{aligned}\tag{1.8}$$

Cada uma dessas equações faz uso de duas funções, uma é a probabilidade de sobrevivência  $S(x_n, y_n)$ , e a outra é a taxa de natalidade que descreve a velocidade da nova prole produzida por cada tipo de mosquito  $f_i(x_n, y_n)$ .

#### Probabilidade de Sobrevivência e Taxa de Resposta Funcional

A função  $S(x_n, y_n)$  é a probabilidade de sobrevivência, ou a fração de descendentes que sobrevivem para a próxima geração. A função de mortalidade é assumida como sendo a função linear  $d + kx_n$ , onde  $k > 0$  é a capacidade de suporte e  $d$  a função de mortalidade [19]. A probabilidade de sobrevivência é assumida como uma forma de Ricker não linear,

$$S(x_n, y_n) = e^{-d_i - k(x_n + y_n)}.\tag{1.9}$$

Foi demonstrado em resultados de laboratório que as taxas de mortalidade de ambos os tipos de mosquitos são iguais ou seja os mosquitos transgênicos não sofrem de um nível de *fitness* mais fraco do que os mosquitos selvagens [31]. As taxas de mortalidade  $d_i$  dos mosquitos selvagens e dos geneticamente modificados foram consideradas iguais. Essa suposição é baseada em resultados de laboratório e nos ajuda a simplificar o sistema. Assim, temos que as taxas de mortalidade são equivalentes ou simplesmente  $d_1 = d_2 = d$ . Portanto, de (1.8) e (1.9), segue

$$x_{n+1} = f_1(x_n, y_n)x_n e^{-d - k(x_n + y_n)}\tag{1.10}$$

$$y_{n+1} = f_2(x_n, y_n)y_n e^{-d - k(x_n + y_n)}.\tag{1.11}$$

Para chegar às funções de nascimento  $f_i$  onde  $i = 1, 2$ , primeiro assumimos  $f_1(0, 0) = 0 = f_2(0, 0)$ ; então consideramos duas situações. Em um caso temos uma população esparsa onde a população cresce proporcionalmente à população atual. Isso é ideal para pequenas populações ou quando os números de uma população são baixos devido aos efeitos sazonais. Quanto maior o número de mosquitos, maior o número de acasalamentos entre os mosquitos. Então, se o número total de mosquitos  $N$  for  $x + y = N$ , e temos  $c(N_n)$  como sendo o número total de acasalamentos por indivíduo por unidade de tempo, então o número de acasalamentos dos mosquitos

selvagens ou transgênicos na geração  $n$  é respectivamente  $c(N_n)x_n/(x_n + y_n)$  ou  $c(N_n)y_n/(x_n + y_n)$ . Sejam  $\alpha_1$  e  $\beta_1$  o número de descendentes selvagens que um mosquito selvagem produz ao acasalar com um mosquito selvagem ou transgênico. Da mesma forma, sejam  $\alpha_2$  e  $\beta_2$  o número de descendentes produzidos por um mosquito transgênico por acasalamento com um mosquito selvagem ou transgênico, respectivamente. Então as equações para as funções de nascimento dependentes da densidade são

$$f_1 = c(N_n) \frac{\alpha_1 x_n + \beta_1 y_n}{x_n + y_n} \quad (1.12)$$

$$f_2 = c(N_n) \frac{\alpha_2 x_n + \beta_2 y_n}{x_n + y_n}, \quad (1.13)$$

para  $x_n \geq 0$ ,  $y_n \geq 0$ ,  $(x_n, y_n) = (0, 0)$  para todo  $n \geq 1$ . Substituindo  $f_1$  e  $f_2$  nas equações (1.10) e (1.11), respectivamente, obtemos as seguintes equações para a dinâmica da interação entre mosquitos selvagens e transgênicos:

$$x_{n+1} = c(N_n) \frac{\alpha_1 x_n + \beta_1 y_n}{x_n + y_n} x_n e^{-d-k(x_n+y_n)} \quad (1.14)$$

$$y_{n+1} = c(N_n) \frac{\alpha_2 x_n + \beta_2 y_n}{x_n + y_n} y_n e^{-d-k(x_n+y_n)}. \quad (1.15)$$

A taxa de acasalamento  $c(N_n)$  é dependente da densidade. Assumimos que é baixo quando a população é baixa e aumenta quando a população aumenta. Então, neste caso, a taxa de acasalamento é uma função do tamanho da população  $N_n$ . A interação continua proporcionalmente até que o ambiente fique saturado de mosquitos [19].

Quando as populações de mosquitos são muito grandes, a taxa de acasalamento torna-se constante, denotamos a taxa de acasalamento,  $c(N_n) = c$  para todos os  $N_n$ . Seja  $a_i = c\alpha_i$  e  $b_i = c\beta_i$ , para  $i = 1, 2$  o número de descendentes produzidos por cada mosquito através do acasalamento de mosquitos selvagens ou transgênicos por unidade de tempo, onde assumimos que  $a_1 = a_2$  ou  $b_1 = b_2$ , uma vez que deve haver um mosquito dominante. Então as taxas de natalidade do caso de acasalamento constante são as seguintes:

$$f_1(x_n, y_n) = \frac{a_1 x_n + b_1 y_n}{x_n + y_n} \quad (1.16)$$

$$f_2(x_n, y_n) = \frac{a_2 x_n + b_2 y_n}{x_n + y_n}. \quad (1.17)$$

Com isso, as equações que modelam a interação de mosquitos transgênicos e

selvagens com taxa de acasalamento constante são descritas por

$$x_{n+1} = \frac{a_1 x_n + b_1 y_n}{x_n + y_n} x_n e^{-d-k(x_n+y_n)} \quad (1.18)$$

$$y_{n+1} = \frac{a_2 x_n + b_2 y_n}{x_n + y_n} y_n e^{-d-k(x_n+y_n)} \quad (1.19)$$

O valor  $a_1$  é o número de descendentes selvagens produzidos pelo acasalamento de dois mosquitos selvagens. O valor  $b_1$  define o número de mosquitos selvagens produzidos pelo acasalamento de mosquitos selvagens com mosquitos geneticamente modificados. O valor  $a_2$  é o número de mosquitos transgênicos produzidos pelo acasalamento de mosquitos transgênicos com mosquitos selvagens, e  $b_2$  é o valor dado ao número de descendentes transgênicos produzidos pelo acasalamento de dois mosquitos transgênicos.

### 1.2.2 O Modelo Contínuo de Jia Li

Nesta seção, apresentamos o análogo contínuo do modelo Jia Li discreto, o modelo Jia Li contínuo para populações de mosquitos em interação [20]. Seja  $x$  e  $y$  o número de mosquitos selvagens e transgênicos e assuma que a dinâmica das populações de mosquitos que interagem são do tipo Kolmogorov [20], então a forma geral do modelo é descrita com as seguintes equações.

$$\frac{dx}{dt} = x(b_1(x, y)) - d_1(x, y) \quad (1.20)$$

$$\frac{dy}{dt} = x(b_2(x, y)) - d_2(x, y) \quad (1.21)$$

onde  $b_i$ ,  $i = 1, 2$ , são as taxas de natalidade per capita; e  $d_i$ ,  $i = 1, 2$ , são as taxas de mortalidade per capita. Assumimos que as taxas de mortalidade são funções lineares da forma  $d_i(x, y) = \mu_i + \xi_i(x + y)$ , onde as constantes  $\mu_i > 0$  e  $\xi_i \geq 0$  e  $i = 1, 2$ , caracterizam a densidade independente e taxas de mortalidade dependentes. Foi demonstrado [31] que os níveis de *fitness* de mosquitos selvagens e mosquitos transgênicos são os mesmos. Isso ocorre porque o gene alterado não impõe uma carga de *fitness* ao mosquito, "... os transgenes não afetam a longevidade e a produção de ovos de alguns mosquitos [20]". No caso contínuo, as taxas de natalidade são descritas de forma semelhante ao caso discreto. Seja  $c(N)$  o número total de acasalamentos por indivíduo, por unidade de tempo, onde  $N = x + y$ . Então o número de acasalamentos que são com mosquitos selvagens é  $\frac{c(N)x}{N}$  e para mosquitos transgênicos  $\frac{c(N)y}{N}$ . Sejam  $\alpha_1$  e  $\beta_1$  o número de descendentes selvagens que  $N$  um mosquito selvagem produz através do acasalamento com um mosquito selvagem e um mosquito transgênico, e  $\alpha_2$  e  $\beta_2$  o número de descendentes transgênicos produzidos por um mosquito

transgênico, através do acasalamento com um mosquito selvagem e um mosquito transgênico.

### Taxa de Resposta Funcional

Em seu artigo [20], Li descreve três tipos possíveis de taxas de acasalamento para as interações de populações de mosquitos, um caso proporcional para pequenas populações, um caso constante para grandes populações e um caso em que os dois casos são combinados e referidos como o caso *Holling* tipo II. Os dois primeiros são exatamente como no caso discreto.

A taxa de resposta funcional *Holling* tipo II combina os dois casos anteriores e é vista como a melhor taxa funcional do modelo contínuo por Li. A população cresce a uma taxa decrescente e, quando se torna grande o suficiente, a taxa de crescimento torna-se constante. A seguir temos o modelo contínuo de Jia Li com taxa de resposta funcional *Hollings* tipo II:

$$\frac{dx}{dt} = x \frac{a_1x + b_1y}{1 + x + y} - (\mu + \eta(x + y)) \quad (1.22)$$

$$\frac{dy}{dt} = y \frac{a_2x + b_2y}{1 + x + y} - (\mu + \eta(x + y)), \quad (1.23)$$

com  $\mu > 0$  e  $\eta > 0$ .

### 1.2.3 Modelo da dinâmica entre mosquitos selvagens e transgênicos com sazonalidade

Em 2009, RAFIKOV *et al.* [26] formularam e resolveram um problema de controle ótimo, para um modelo da interação entre mosquitos selvagens e transgênicos, indicando uma forma efetiva de introdução de mosquitos geneticamente modificados no ambiente. Nesse modelo, a dinâmica dos mosquitos foi baseada no modelo de Verhulst, considerando capacidade suporte e taxa de emergência de mosquitos para a fase adulta como coeficientes sazonais, com ciclo anual.

O modelo foi descrito por um sistema de equações diferenciais

$$\frac{dx}{dt} = \frac{r_{11}(t)x + r_{12}(t)y}{x + y} x \left(1 - \frac{x + y}{k(t)}\right) - \delta_1 x \quad (1.24)$$

$$\frac{dy}{dt} = \frac{r_{21}(t)x + r_{22}(t)y}{x + y} y \left(1 - \frac{x + y}{k(t)}\right) - \delta_1 y, \quad (1.25)$$

onde  $x$  é a população de mosquitos selvagens e  $y$  a população de mosquitos transgênicos,  $k$  é a capacidade suporte,  $\delta_1$  é a taxa de mortalidade e  $r_{ii}$  a taxa de crescimento.

Neste modelo são consideradas as seguintes hipóteses:

- Todos os mosquitos transgênicos, sem distinção de zigosidade, são considerados como uma só população;
- os mosquitos selvagens e transgênicos possuem mesma capacidade de suporte e mesmo *fitness*;
- Na ausência de mosquitos transgênicos, a população selvagem segue a dinâmica do modelo logístico de Verhulst; o mesmo acontece com os mosquitos transgênicos na ausência dos selvagens.

#### 1.2.4 Modelo da dinâmica de mosquitos selvagens e transgênicos com *fitness*

Em 2011, Diaz et al. [4] propuseram um modelo da dinâmica populacional de mosquitos quando indivíduos geneticamente modificados são introduzidos em uma população do tipo selvagem e avaliaram o efeito de sua introdução. O modelo descreveu a dinâmica da seleção gênica sob reprodução sexuada em uma população fechada de vetores. Os resultados mostraram que o *fitness* da população heterozigótica resultante é o parâmetro chave para o sucesso da invasão, independentemente do *fitness* dos vetores homozigotos.

O modelo foi descrito por um sistema de equações diferenciais

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= \frac{\lambda_x}{4}(1+x-y)^2(1-x) - \frac{\lambda_x}{4}\theta(1-x+y)^2x - \frac{\lambda_x}{2}\eta(1-x+y)(1+x-y)x \\ \frac{dy}{dt} &= \frac{\lambda_x}{4}(1+x-y)^2y - \frac{\lambda_x}{4}\theta(1-x+y)^2(1-y) - \frac{\lambda_x}{2}\eta(1-x+y)(1+x-y)y,\end{aligned}$$

onde  $x$  é a fração da população de mosquitos selvagens e  $y$  a fração da população de mosquitos transgênicos heterozigotos,  $\lambda_x$  é a taxa intrínseca de natalidade por unidade de tempo para mosquitos selvagens. Foi definido  $\lambda_y = \theta\lambda_x$  e  $\lambda_z = \eta\lambda_x$  as taxas intrínsecas de natalidade para mosquitos transgênicos heterozigotos e homozigotos, respectivamente. Como o modelo se apresenta em valores relativos para as populações, isso implica que  $x + y + z = 1$ . Com a devida simplificação, a equação da população  $z$  foi suprimida do sistema.

#### 1.2.5 Modelos com dinâmica espaço-temporal para a interação de mosquitos selvagens e transgênicos

No trabalho de WYSE *et al.* [35] propõe-se um modelo matemático que descreve a dinâmica da interação considerando que a disseminação do transgene que determina a interrupção de um processo epidemiológico ocorre devido ao acasalamento entre populações selvagens e transgênicas. Para tanto, os mosquitos transgênicos são

diferenciados de acordo com sua zigozidade, sendo heterozigotos ou homozigotos. A interação entre os mosquitos descreve um efeito de dependência da densidade para as taxas vitais e impõe um limite máximo de crescimento populacional que ocorre de acordo com a capacidade de suporte. Além disso, todas as populações estão em números absolutos, preservando parâmetros que podem descrever efeitos como sazonalidade, estocasticidade, etc. O espalhamento é regido pela lei de Fick, com coeficiente de difusão aleatório. Assim, o modelo matemático obtido é um sistema de reação-difusão não linear com parâmetros uniformemente distribuídos.

Para o termo de difusão, seja  $u_i$ ,  $i = 1, 2, 3$  as populações de mosquitos transgênicos selvagens, heterozigotos e homozigotos, assume-se o movimento individual dos mosquitos como sendo semelhante ao movimento browniano em um campo não uniforme, define-se a taxa de variação da densidade de mosquitos no tempo  $t \in I_t \equiv (0, T]$ ,  $T > 0$ , como

$$\frac{\partial u_i(x, t)}{\partial t} = D_i \frac{\partial^2 u_i(x, t)}{\partial x^2}, \quad x \in I_d, \quad (1.26)$$

onde  $\bar{I}_d = [0, L] \subset \mathbb{R}$  é o domínio espacial, com  $L > 0$ ;  $D_i$  denota os coeficientes da difusão aleatória de mosquitos selvagens e transgênicos, heterozigotos e homozigotos.

Para o termo de reação considera-se a equação logística de Verhulst com captura

$$\frac{dP}{dt} = rP \left( 1 - \frac{P}{k} \right) - \delta_2 P \quad (1.27)$$

onde  $P = \sum u_i$  é a população total de mosquitos e  $r = \xi - \delta_1$ , onde  $\xi$  é a taxa de emergência dos mosquitos para idade adulta e  $\delta_1$  é a taxa de mortalidade por causas naturais. O efeito de captura representa a taxa de mortalidade independente da densidade  $\delta_2$  e garante a estabilização da população abaixo da capacidade de suporte  $k$ , uma vez que não há evidências na literatura da existência de uma região onde os mosquitos, em sua fase adulta, tenham atingido tal limiar. Pode-se escrever a equação (1.27) da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{dP}{dt} &= \xi P - \left( \frac{\xi + \delta_1}{k} \right) P^2 - (\delta_1 + \delta_2) P \\ &= \left( \frac{\xi}{P} - \frac{r}{k} \right) P^2 - \delta P, \end{aligned} \quad (1.28)$$

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 (1.28) assume a forma:

$$\frac{d(u_1 + u_2 + u_3)}{dt} = \left( \frac{\xi}{u_1 + u_2 + u_3} - \frac{r}{k} \right) (u_1^2 + u_2^2 + u_3^2 + 2u_1u_2 + 2u_1u_3 + 2u_2u_3) - \delta(u_1 + u_2 + u_3) \quad (1.29)$$

é possível escrever a equação (1.29) como um sistema de três equações acopladas

$$\begin{cases} \frac{du_1}{dt} = \left( \frac{\xi}{u_1 + u_2 + u_3} - \frac{r}{k} \right) (u_1^2 + 2u_1u_2^2) - \delta u_1 \\ \frac{du_2}{dt} = \left( \frac{\xi}{u_1 + u_2 + u_3} - \frac{r}{k} \right) (2u_1u_2 + u_2^2 + 2u_2u_3 + 2u_1u_3) - \delta u_2 \\ \frac{du_3}{dt} = \left( \frac{\xi}{u_1 + u_2 + u_3} - \frac{r}{k} \right) - (u_2^2 + 2u_2u_3 + u_3) - \delta u_3, \end{cases} \quad (1.30)$$

É considerado que os cruzamentos entre os mosquitos selvagens, transgênicos heterozigotos e transgênicos homozigotos, seguem a genética clássica mendeliana. Neste sentido 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 genótípicas 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  $a_{ij} + b_{ij} + c_{ij} = 1$ . As proporções das concepções para os mosquitos são especificadas na seguinte tabela:

Tabela 1.1: Frequências genótípicas considerando herança mendeliana

Frequência	$a_{11}$	$a_{12}$	$a_{13}$	$a_{22}$	$a_{23}$	$a_{33}$
Mendeliana	1,0	0,5	0,0	0,25	0,0	0,0
Frequência	$b_{11}$	$b_{12}$	$b_{13}$	$b_{22}$	$b_{23}$	$b_{33}$
Mendeliana	0,0	0,5	1,0	0,5	0,5	0,0
Frequência	$c_{11}$	$c_{12}$	$c_{13}$	$c_{22}$	$c_{23}$	$c_{33}$
Mendeliana	0	0,0	0,0	0,25	0,5	1,0

A partir das suposições acima, a dinâmica das interações entre os mosquitos selvagens e transgênicos com disseminação pode ser estabelecida pelo seguinte modelo espaço-temporal: Dado  $a_{ij}, b_{ij}, c_{ij}, \xi, r, k, \Delta \in \mathbb{R}$ , o problema do modelo é encontrar

a população de mosquitos  $u_i(x, y, t) \in \mathbb{R}$  para todos os  $x \in \bar{I}_d$  que satisfazem o seguinte problema de valor de contorno não linear

$$\begin{cases} \frac{\partial u_1}{\partial t} = D_1(w) \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} + \left( \frac{\xi}{\sum u_i} - \frac{r}{k} \right) \sum \sum a_{ij} u_i u_j - \delta u_1 \\ \frac{\partial u_2}{\partial t} = D_2(w) \frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2} + \left( \frac{\xi}{\sum u_i} - \frac{r}{k} \right) \sum \sum b_{ij} u_i u_j - \delta u_2 \\ \frac{\partial u_3}{\partial t} = D_3(w) \frac{\partial^2 u_3}{\partial x^2} + \left( \frac{\xi}{\sum u_i} - \frac{r}{k} \right) \sum \sum c_{ij} u_i u_j - \delta u_3, \end{cases} \quad (1.31)$$

com condições de contorno de Neumann dadas por

$$\frac{\partial u_i}{\partial x}(0, t) = \frac{\partial u_i}{\partial x}(L, t) = 0 \quad (1.32)$$

e condições iniciais

$$u_i(x, 0) = \bar{u}_i(x). \quad (1.33)$$

Os coeficientes  $a_{ij}$ ,  $b_{ij}$  e  $c_{ij}$  são resultantes da genética mendeliana, seus valores estão dispostos na Tabela 1.1.

Recentemente ROLIM *et al.* [29] desenvolveu uma versão com dinâmica espacial bidimensional para o modelo proposto em [35], considerando termo de difusão determinístico baseado na lei de Fick. Após análise e validação do modelo com simulações em regiões e situações artificiais e controladas, aplicou-se o modelo na região geográfica da área de Aproveitamento Múltiplo de Manso (APM-Manso), localizada no estado do Mato Grosso, Brasil. De modo que foi necessário adaptar o modelo em (1.31) para o caso bidimensional.

Considerando os dados da genética mendeliana e a equação de difusão em duas dimensões, o sistema de três equações acopladas assume a seguinte forma

$$\begin{cases} \frac{\partial u_1}{\partial t} = D_1 \operatorname{div}(\nabla u_1) + \left( \frac{\xi}{u_1 + u_2 + u_3} - \frac{r}{k} \right) + (u_1^2 + 2u_1 u_2^2) - \delta u_1 \\ \frac{\partial u_2}{\partial t} = D_2 \operatorname{div}(\nabla u_2) + \left( \frac{\xi}{u_1 + u_2 + u_3} - \frac{r}{k} \right) (2u_1 u_2 + u_2^2 + 2u_2 u_3 + 2u_1 u_3) - \delta u_2 \\ \frac{\partial u_3}{\partial t} = D_3 \operatorname{div}(\nabla u_3) + \left( \frac{\xi}{u_1 + u_2 + u_3} - \frac{r}{k} \right) - (u_2^2 + 2u_2 u_3 + u_3) - \delta u_3, \end{cases} \quad (1.34)$$

satisfazendo às condições de contorno:

$$u_l(x, y, t) = \bar{u}_l, \quad \forall (x, y) \in \Gamma, \quad t \in I, \quad (1.35)$$

e as condições iniciais:

$$u_l(x, y, 0) = \hat{u}_l, \quad \forall (x, y) \in \Omega \quad (1.36)$$

onde  $D_i$  é o coeficiente de difusão para cada uma das populações  $u_i$ . É considerado no modelo  $D_i$  como  $D$  pois cada uma das populações com o mesmo coeficiente de difusão constante.

## Capítulo 2

# Fundamentos do Método de Diferenças finitas

A solução numérica de uma equação diferencial parcial pode dar respostas apenas em pontos discretos do domínio, pontos estes chamados de pontos nodais ou pontos da malha. A ideia geral do método de diferenças finitas é a discretização do domínio e a substituição das derivadas presentes na equação diferencial por aproximações envolvendo somente valores numéricos da função. De modo prático, substituímos as derivadas pela razão incremental que converge para o valor da derivada quando o incremento tende a zero. Diz-se portanto, que o problema foi discretizado. Caso o domínio tenha mais de uma variável, a ideia do método de diferenças finitas é aplicada para cada uma das variáveis separadamente. Considere a Figura 2.1, que representa um domínio no plano  $xy$ . Por conveniência assume-se que o espaçamento na malha na direção  $x$  é uniforme e igual a  $\Delta x$ ; da mesma forma definimos o espaçamento em  $y$ , uniforme e dado por  $\Delta y$ . Ainda na Figura 2.1, os pontos da malha são identificados por seus índices, onde  $i$  indica a direção  $x$  e  $j$  a direção  $y$ .

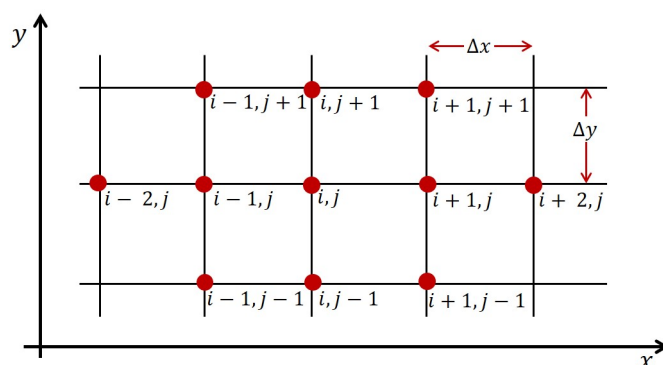


Figura 2.1: Pontos discretos da malha.

## 2.0.1 Ferramenta matemática básica no cálculo de aproximações para as derivadas

Nesta secção apresentamos as ferramentas fundamentais para o cálculo de aproximações por diferenças finitas para derivadas presentes em equações diferenciais. A essência do método de diferenças finitas, consiste numa aproximação das derivadas levando em consideração sua própria definição. Parte do desenvolvimento desta secção pode ser visto em HIRSCH [16].

**Definição 1.** *Seja  $u(x) : D \rightarrow \mathbb{R}$  uma função com domínio  $D \subseteq \mathbb{R}$  e no mínimo, uma função de classe  $C^1(D, \mathbb{R})$ . A derivada no ponto  $x$  é definida por*

$$u_x = \frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{u(x + \Delta x) - u(x)}{\Delta x}.$$

Tais aproximações são calculadas através das séries de Taylor que relacionam valores da função  $u$  e suas derivadas num ponto  $x$  com valores dessa mesma função numa vizinhança de  $x$ , ou seja com  $u(x + \Delta x)$ . Por exemplo, se  $u_{i,j}$  define o componente  $x$  da velocidade de um ponto  $(i, j)$ , então a velocidade  $u_{i+1,j}$  no ponto  $(i + 1, j)$  pode ser expressa em termos de uma expansão em série de Taylor sobre o ponto  $(i, j)$ :

$$u(x + \Delta x) = u_{i+1,j} = u_{i,j} + \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right) \Delta x + \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right) (\Delta x)^2 \frac{1}{2!} + \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right) (\Delta x)^3 \frac{1}{3!} + \dots \quad (2.1)$$

Toda série de Taylor possui um raio de convergência  $R$  com a propriedade que a série converge uniformemente em cada bola  $\Delta x \leq r < R$ . A fórmula de Hadamard fornece o valor deste raio de convergência:

$$R^{-1} = \limsup_{n \rightarrow \infty} \left| \frac{\partial^n u}{\partial x^n} \right|^{1/n}. \quad (2.2)$$

A equação (2.1) é uma expressão matematicamente exata se o número de termos é infinito e a série converge, isto é,  $\Delta x \rightarrow 0$ . Computacionalmente não é possível calcular um número infinito de termos, portanto a equação (2.1) é truncada ocasionando um erro de truncamento, uma vez que  $\Delta x \rightarrow 0$ . A potência em  $\Delta x$  com a qual este erro tende a zero é chamada de ordem da aproximação da diferença, e pode ser obtida a partir do desenvolvimento em série de Taylor para  $u(x + \Delta x)$  em torno do ponto  $x$ , no caso de (2.1) se os termos de magnitude  $(\Delta x)^3$  e termos de ordem superiores forem desprezados a equação (2.1), reduz-se a:

$$u_{i+1,j} \cong u_{i,j} + \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j} \Delta x + \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_{i,j} (\Delta x)^2 \frac{1}{2!}. \quad (2.3)$$

Diz-se então que a expressão acima tem precisão de segunda ordem, pois os termos iguais ou superiores a  $(\Delta x)^3$  foram desprezados. Do mesmo modo, caso despreze-se termos iguais ou superiores a  $(\Delta x)^2$  obtém-se na aproximação uma precisão de primeira ordem, como segue na expressão abaixo:

$$u_{i+1,j} \cong u_{i,j} + \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)_{i,j} \Delta x. \quad (2.4)$$

Nas expressões (2.3) e (2.4), os termos desprezados representam o erro de truncamento na representação da série finita. Se considerarmos (2.3) o erro de truncamento é dado por

$$\sum_{n=3}^{\infty} \left( \frac{\partial^n u}{\partial x^n} \right)_{i,j} \frac{(\Delta x)^n}{n!} = \mathcal{O}(\Delta x^3). \quad (2.5)$$

Inicialmente percebe-se em (2.5) o símbolo  $\mathcal{O}(\Delta x)$  que é uma nomenclatura matemática formal para "*termos de ordem x*". O erro de truncamento pode ser reduzido tomando-se mais termos na série de Taylor, ou seja, aumentando a ordem de precisão de  $u_{i+1,j}$  na equação (2.1), além disto reduzindo-se a magnitude de  $\Delta x$  pode-se obter uma redução do erro de truncamento também.

## 2.1 Fórmulas de Diferenças Finitas

### Fórmulas de diferenças para primeira derivada

Considere a Equação (2.4) com erro de truncamento  $\mathcal{O}(\Delta x^2)$  Assim obtemos a expressão:

$$u_{i+1,j} = u_{i,j} + \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)_{i,j} \Delta x + \mathcal{O}(\Delta x^2). \quad (2.6)$$

Explicitando  $\left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)_{i,j}$  que por simplicidade denotaremos por  $(u_x)_{i,j}$ , obtemos:

$$(u_x)_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x); \quad (2.7)$$

de maneira análoga, obtemos a discretização na direção  $y$ :  $y$

$$(u_y)_{i,j} = \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\Delta y} + \mathcal{O}(\Delta y). \quad (2.8)$$

Como esta fórmula envolve o ponto  $(i + 1)$  que está a direita do ponto  $i$ , ela é chamada de **Fórmula Progressiva de primeira ordem** para a primeira derivada. Consideremos agora que a expansão em série de Taylor seja feita em torno do ponto

$(i - 1)$ , obtém-se o que se segue

$$u(x - \Delta x) = u_{i-1,j} = u_{i,j} - \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j} \Delta x + \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_{i,j} (\Delta x)^2 \frac{1}{2!} - \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_{i,j} (\Delta x)^3 \frac{1}{3!} + \dots \quad (2.9)$$

Truncando a expressão acima de forma a obter uma precisão de segunda ordem, chegamos em:

$$u_{i-1,j} = u_{i,j} - \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j} \Delta x + \mathcal{O}(\Delta x^2). \quad (2.10)$$

Explicitando  $(u_x)_{i,j}$

$$(u_x)_{i,j} = \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x). \quad (2.11)$$

Como esta fórmula envolve o ponto  $(i - 1)$  que está a esquerda do ponto  $i$ , ela é chamada de **Fórmula Regressiva de primeira ordem** para a primeira derivada. Consideraremos agora (2.1) e (2.9), subtraindo uma da outra e explicitando  $(u_x)_i$  encontramos a expressão:

$$(u_x)_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2), \quad (2.12)$$

que é chamada de **Fórmula centrada de segunda ordem**. Essas três aproximações são representadas geometricamente na Figura 2.2.

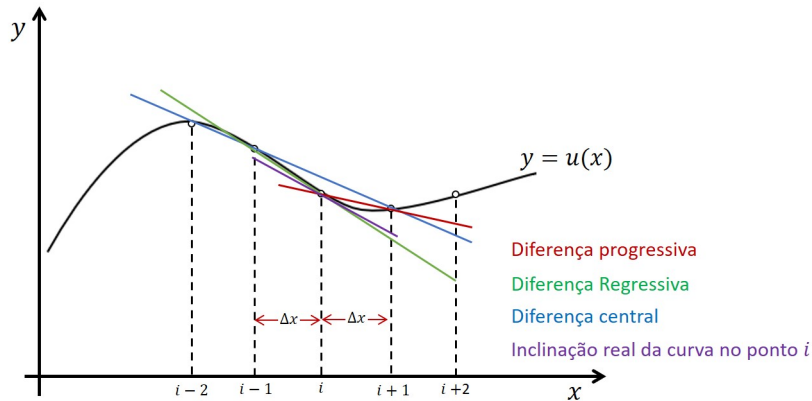


Figura 2.2: Interpretação geométrica das fórmulas de diferenças finitas para as derivadas de 1ª ordem.

Nota-se que a representação da diferença central está mais próxima da curva da função  $y = u(x)$ , o que reflete a sua precisão ser de segunda ordem.

## Diferenças finitas com um número arbitrário de pontos

A seguir mostraremos um procedimento geral para obter fórmulas de diferenças finitas com um número arbitrário de pontos e com uma ordem de precisão proporcional.

Fórmulas de diferenças unilateral de segunda ordem para  $(u_x)_{i,j}$ , contendo os pontos  $i - 2$ ,  $i - 1$  e  $i$  pode ser obtida por uma expansão de Taylor de  $i - 2$  e  $i - 1$ , sobre  $u_{i,j}$ . Considerando as expansões

$$u_{i-2,j} = u_{i,j} - 2\Delta x(u_x)_{i,j} + \frac{(2\Delta x)^2}{2!}(u_{xx})_{i,j} - \frac{(2\Delta x)^3}{3!}(u_{xxx})_{i,j} + \dots \quad (2.13)$$

$$u_{i-1,j} = u_{i,j} - \Delta x(u_x)_{i,j} + \frac{(\Delta x)^2}{2!}(u_{xx})_{i,j} - \frac{(\Delta x)^3}{3!}(u_{xxx})_{i,j} + \dots, \quad (2.14)$$

ao multiplicarmos (2.13) por uma constante  $c$  e (2.14) por uma constante  $b$  e somando ambos resultados, chegamos em:

$$\begin{aligned} bu_{i-1,j} + cu_{i-2,j} &= (b+c)u_{i,j} - \Delta x(b+2c)(u_x)_{i,j} + (b+4c)\frac{(\Delta x)^2}{2!}(u_{xx})_{i,j} \\ &\quad - (b+8c)\frac{(\Delta x)^3}{3!}(u_{xxx})_{i,j} + \mathcal{O}(\Delta x^4). \end{aligned} \quad (2.15)$$

Adicionando o termo  $au_{i,j}$  a ambos os membros de (2.15), chegamos finalmente em:

$$\begin{aligned} au_{i,j} + bu_{i-1,j} + cu_{i-2,j} &= (a+b+c)u_{i,j} - \Delta x(b+2c)(u_x)_{i,j} + (b+4c)\frac{(\Delta x)^2}{2!}(u_{xx})_{i,j} \\ &\quad - (b+8c)\frac{(\Delta x)^3}{3!}(u_{xxx})_{i,j} + \mathcal{O}(\Delta x^4). \end{aligned} \quad (2.16)$$

A partir deste desenvolvimento podemos deduzir uma fórmula unilateral com precisão de segunda ordem, para isto, usaremos a seguinte condição:

$$\begin{aligned} a + b + c &= 0 \\ (b + 2c) &= -1 \\ b + 4c &= 0, \end{aligned} \quad (2.17)$$

chegando em:

$$(u_x)_{i,j} = \frac{3u_{i,j} - 4u_{i-1,j} + u_{i-2,j}}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2). \quad (2.18)$$

Analogamente podemos desenvolver a fórmula de diferença unilateral para os pon-

tos  $i + 2$  e  $i + 1$ , sobre  $u_i$ , resultando em:

$$(u_x)_{i,j} = \frac{-3u_{i,j} + 4u_{i+1,j} - u_{i+2,j}}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2). \quad (2.19)$$

### 2.1.1 Fórmulas de diferenças finitas para segunda derivada

Aproximações de diferenças finitas de derivadas de ordem superior podem ser obtidas por aplicações repetidas de fórmulas de primeira ordem. Por exemplo, uma aproximação de segunda ordem para a segunda derivada  $(u_{xx})_i$  é obtida por

$$\begin{aligned} (u_{xx})_{i,j} &= \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_{i,j} = \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right) \right] \cong \left[ \frac{\left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)_{i+1,j} - \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)_{i-1,j}}{\Delta x} \right] \\ &\cong \left[ \left( \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x} \right) - \left( \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{\Delta x} \right) \right] \frac{1}{\Delta x}, \end{aligned}$$

obtendo a derivada parcial de segunda ordem na direção  $x$  com precisão de quarta ordem tem-se

$$(u_{xx})_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{\Delta x^2} - \frac{\Delta x^2}{12} \left( \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \right)_{i,j}. \quad (2.20)$$

De maneira análoga, obtemos a discretização da segunda derivada na direção  $y$

$$(u_{yy})_{i,j} = \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{\Delta y^2} - \frac{\Delta y^2}{12} \left( \frac{\partial^4 u}{\partial y^4} \right)_{i,j}. \quad (2.21)$$

Além da aplicação direta das várias fórmulas apresentadas na seção anterior, formas adicionais podem ser construídas através de uma interação entre as duas direções espaciais, como exemplo,  $\left( \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} \right)_{i,j}$  que é uma derivada mista, escreve-se:

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} \right)_{i,j} &= \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial u}{\partial y} \right) \right] \cong \frac{\left( \frac{\partial u}{\partial y} \right)_{i+1,j} - \left( \frac{\partial u}{\partial y} \right)_{i-1,j}}{2\Delta y} \\ &\cong \left[ \left( \frac{u_{i+1,j+1} - u_{i+1,j-1}}{2\Delta y} \right) - \left( \frac{u_{i-1,j+1} - u_{i-1,j-1}}{2\Delta y} \right) \right] \frac{1}{2\Delta x}, \end{aligned} \quad (2.22)$$

ou

$$\left( \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} \right)_{i,j} = \frac{1}{4\Delta x \Delta y} (u_{i+1,j+1} + u_{i-1,j-1} - u_{i+1,j-1} - u_{i-1,j+1}) + \mathcal{O}[(\Delta x^2), (\Delta y^2)]. \quad (2.23)$$

## 2.1.2 Métodos gerais para fórmulas de diferenças finitas

Procedimentos gerais desenvolvidos para gerar fórmulas de diferenças finitas em qualquer ordem de precisão e uma teoria geral podem ser encontrados em HILDEBRAND [15]. Esta abordagem é baseada na definição dos seguintes operadores de diferença:

Operador Deslocamento:

$$Eu_i = u_{i+1} \quad (2.24a)$$

Operador Progressivo:

$$\delta^+ u_i = u_{i+1} - u_i \quad (2.24b)$$

Operador regressivo :

$$\delta^- u_i = u_i - u_{i-1} \quad (2.24c)$$

Operador Central :

$$\delta u_i = u_{i+1/2} - u_{i-1/2} \quad (2.24d)$$

Operador Central\* :

$$\bar{\delta} u_i = \frac{1}{2}(u_{i+1} - u_{i-1}) \quad (2.24e)$$

Operador de média :

$$\mu u_i = \frac{1}{2}(u_{i+1/2} + u_{i-1/2}) \quad (2.24f)$$

Operador diferencial:

$$Du_i = u_x = \frac{\partial u}{\partial x} \quad (2.24g)$$

A partir das definições em (2.24), podemos obter algumas relações imediatas entre os operadores, por exemplo:

### Relação 1

$$\delta^+ = (E - 1); \quad (2.25)$$

Para a relação 2, temos que introduzir o operador  $E^{-1}$ , o inverso do operador de deslocamento, definido como:

$$E^{-1}u_i = u_{i-1}. \quad (2.26)$$

### Relação 2

$$\delta^- = (1 - E^{-1}) \text{ e } E^{-1}u_i = u_{i-1}; \quad (2.27)$$

**Relação 3** a relação (2.27) implica que  $E^{-1}u_{i+1} = u_i$  e portanto,

$$\delta^- u_i - u_{i-1} = E^{-1}\delta^+ u_i; \quad (2.28)$$

#### Relação 4

$$\delta^+\delta^-u_i = \delta^-\delta^+u_i \quad (2.29)$$

$$\Rightarrow \delta^+\delta^+ = \delta^-\delta^-; \quad (2.30)$$

#### Relação 5

$$\delta^+\delta^-u_i = u_i(\delta^+ - \delta^-); \quad (2.31)$$

#### Relação 6

$$\delta u_i = \delta^+\delta^-u_i = \delta^-\delta^+u_i; \quad (2.32)$$

É possível representar também o operador  $\delta$  de uma outra forma, vejamos

$$\delta u_i = u_{i+1/2} - u_{i-1/2} = E^{1/2}u_i - E^{-1/2}u_i \Rightarrow \delta = E^{1/2} - E^{-1/2}. \quad (2.33)$$

#### Relação 7

$$\bar{\delta}u_i \Rightarrow \bar{\delta} = \frac{1}{2}(E - E^{-1}); \quad (2.34)$$

#### Relação 8

$$\begin{aligned} \mu u_i &= \frac{1}{2}(E^{1/2}u_i + E^{-1/2}u_i) \\ \Rightarrow \mu &= \frac{1}{2}(E^{1/2} + E^{-1/2}); \end{aligned} \quad (2.35)$$

Portanto, podemos de maneira geral afirmar que, para  $n$  (positivo ou negativo)

$$E^n u_i = u_{i+n} \quad (2.36)$$

qualquer operador elevado a uma potência  $n$  é interpretado como a aplicação de  $n$  vezes este operador.

### 2.1.3 Generalização das fórmulas para a primeira derivada

Fazendo uma relação entre o operador de deslocamento finito  $E$  e o operador derivada  $D$  podemos obter a técnica de geração de fórmulas de diferenças finitas, tal relação é obtida da expansão em série de Taylor. Por simplicidade definimos a variação dos eixos por  $h$  :

$$u(x+h) = u(x) + hu_x + \frac{h^2}{2!}u_{xx}(x) + \frac{h^3}{3!}u_{xxx}(x) + \dots \quad (2.37)$$

Aplicando os operadores convenientes, segue

$$\begin{aligned} Eu(x) &= u(x) + hDu(x) + \frac{h^2}{2!}D^2u(x) + \frac{h^3}{3!}D^3u(x) \\ &= \left(1 + hD + \frac{h^2D^2}{2!} + \frac{h^3D^3}{3!} + \dots\right)u(x). \end{aligned} \quad (2.38)$$

A relação (2.38) pode ser escrita também como

$$Eu(x) = e^{hD}u(x); \quad (2.39)$$

sob a ótica dos operadores podemos escrever (2.38) como

$$E = e^{hD}, \quad (2.40)$$

e ainda podemos ter o inverso da relação (2.40) que resulta em

$$hD = \ln(E). \quad (2.41)$$

## 2.1.4 Diferença progressiva

Para as diferenças progressivas utilizaremos a relação 2.25

$$\delta^+ = E - 1 \Rightarrow E = \delta^+ + 1. \quad (2.42)$$

Aplicando em (2.41), temos

$$hD = \ln(1 + \delta^+). \quad (2.43)$$

A expansão em série de Taylor para a função logaritmo natural é dada por

$$\ln(1 + \delta^+) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{(\delta^+)^{n+1}}{n+1}, \quad (2.44)$$

levando a

$$hD = \delta^+ - \frac{\delta^{+2}}{2} + \frac{\delta^{+3}}{3} - \frac{\delta^{+4}}{4} + \dots \quad (2.45)$$

A ordem da aproximação depende do número de termos considerados no lado direito da equação. Quanto maior o número de termos, maior a precisão do método.

Por exemplo, truncando (2.45) no segundo termo, obtemos

$$\begin{aligned}
hD &= \delta^+ - \frac{1}{2}\delta^{+2} \\
hDu_i &= \left( \delta^+ - \frac{1}{2}\delta^{+2} \right) u_i \\
&= (u_{i+1} - u_i) - \frac{1}{2}\delta^+ (u_{i+1} - u_i) \\
&= (u_{i+1} - u_i) - \frac{1}{2}[(u_{i+2} - u_{i+1}) - (u_{i+1} - u_i)] \\
&= u_{i+1} - u_i - \frac{1}{2}[u_{i+2} - 2u_{i+1} + u_i],
\end{aligned}$$

logo

$$Du_i = \frac{1}{2h} [-u_{i+2} + 4u_{i+1} - 3u_i]. \quad (2.46)$$

### 2.1.5 Diferença regressiva

Para as diferenças regressivas utilizaremos a relação 2.27

$$\delta^-(1 - E^{-1}) \Rightarrow E^{-1} = 1 - \delta^-. \quad (2.47)$$

De maneira análoga a diferenças progressivas usaremos a expansão em série de Taylor para a função logaritmo natural, chegando em

$$hD = \delta^- + \frac{\delta^{-2}}{2} + \frac{\delta^{-3}}{3} + \frac{\delta^{-4}}{4} + \dots \quad (2.48)$$

Para ter-se uma precisão de segunda ordem, considere os dois primeiros termos da série (2.48)

$$\begin{aligned}
hDu_i &= \delta^- u_i + \frac{1}{2}\delta^{-2}u_i \\
&= u_i - u_{i-1} + \frac{1}{2}[\delta^-(u_i - u_{i-1})] \\
&= u_i - u_{i-1} + \frac{1}{2}[(u_i - u_{i-1}) - (u_{i-1} - u_{i-2})] \\
&= u_i - u_{i-1} + \frac{1}{2}(u_{i-2} - 2u_{i-1} + u_i) \\
&= \frac{1}{2}u_{i-2} - 2u_{i-1} + \frac{3}{2}u_i,
\end{aligned}$$

logo

$$Du_i = \frac{1}{2h} [u_{i-2} - 4u_{i-1} + 3u_i]. \quad (2.49)$$

### 2.1.6 Diferença Central

As fórmulas de diferença centrada podem ser obtidas a partir da relação (2.33)

$$\delta u_i = u_{i+1/2} - u_{i-1/2} = (E^{1/2} - E^{-1/2}) u_i.$$

Utilizando a identidade

$$\sinh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{2}$$

temos

$$\delta = e^{hD/2} - e^{-hD/2} = 2\sinh\left(\frac{hD}{2}\right). \quad (2.50)$$

Expressando (2.50) em função de  $\delta$ , temos

$$hD = 2\operatorname{arcsenh}\left(\frac{\delta}{2}\right). \quad (2.51)$$

Aplicando a expansão em série de Taylor da função  $\operatorname{arcsenh}$ , dada por

$$\operatorname{arcsenh}(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n (2n)!}{4^n (n!)^2 (2n+1)} \left(\frac{\delta}{2}\right)^{2n+1} \quad \text{para } |x| < 1 \quad (2.52)$$

na expressão (2.51) obtemos

$$hD = \delta - \frac{\delta^3}{24} + \frac{3\delta^5}{640} - \frac{5\delta^7}{7168} + \dots \quad (2.53)$$

A fórmula (2.53) nos fornece uma família de aproximações por diferença centrada para derivada primeira  $(u_x)_{i,j}$  baseada nos valores da função  $u$  sobre pontos de ordem fracionária da malha de discretização. Considerando os dois primeiros termos da série (2.53)

$$\begin{aligned} hDu_i &= \left(\delta - \frac{\delta^3}{24}\right) u_i \\ &= \frac{-u_{i+3/2} + 27u_{i+1/2} - 27u_{i-1/2} + u_{i-3/2}}{24} \end{aligned}$$

portanto, obtemos a aproximação

$$Du_i = \frac{-u_{i+3/2} + 27u_{i+1/2} - 27u_{i-1/2} + u_{i-3/2}}{24h}, \quad (2.54)$$

cuja precisão é de quarta ordem. Note que este esquema envolve termos em pontos centrais da malha, o que não é conveniente, pois inicialmente não temos informações sobre tais pontos. Deste modo com o propósito de sanar o problema, ou seja, utilizar apenas pontos conhecidos e internos da malha, aplicamos o mesmo procedimento anterior, porém, desta vez, utilizaremos o operador central\* ( $\bar{\delta}$ ). Assim da relação (2.34)

$$\bar{\delta} = \frac{1}{2}(E - E^{-1}) = \frac{1}{2}(e^{hD} - e^{-hD}) = \operatorname{senh}(hD), \quad (2.55)$$

que em função de  $\bar{\delta}$  produz

$$hD = \operatorname{senh}^{-1}(\bar{\delta}) = \bar{\delta} - \frac{\bar{\delta}^3}{6} + \frac{\bar{\delta}^5}{40} - \dots \quad (2.56)$$

Considerando os dois primeiros termos da série (2.56), temos

$$hDu_i = \left(\bar{\delta} - \frac{\bar{\delta}^3}{6}\right)u_i,$$

o que produz

$$Du_i = \frac{-u_{i+3} + 27u_{i+1} - 27u_{i-1} + u_{i-3}}{48h} + \mathcal{O}(h^4). \quad (2.57)$$

Apesar de (2.57) ser uma aproximação de quarta ordem envolvendo os quatro pontos  $i - 3, i - 1, i + 1, i + 3$ , este esquema não é interessante computacionalmente pois esperava-se que a aproximação envolva-se os pontos  $i - 2, i - 1, i + 1, i + 2$ . Para resolver tal problema vamos manipular o operador de média da seguinte forma

$$\begin{aligned} \mu u_i &= \frac{1}{2}(E^{1/2} + E^{-1/2})u_i \\ \mu^2 &= \frac{1}{4}(E^{1/2} + E^{-1/2})^2 \\ &= \frac{1}{4}(E + 2E^{1/2}E^{-1/2} + E^{-1}) \\ &= \frac{1}{4}(E + 2 + E^{-1}); \end{aligned}$$

por outro lado verifica-se também que

$$\begin{aligned} \delta^2 &= (E^{1/2} - E^{-1/2})^2 = (E - 2E^{1/2}E^{-1/2} + E^{-1}) \\ &= E - 2 + E^{-1}. \end{aligned}$$

Com isso temos que

$$\mu^2 = \frac{1}{4}(E + 2 - 2 + 2 + E) = \frac{1}{4}(4 + \delta^2)$$

e portanto

$$\mu^2 = 1 + \frac{\delta^2}{4},$$

o que implica em

$$1 = \mu \left( 1 + \frac{\delta^2}{4} \right)^{-1/2}. \quad (2.58)$$

Desenvolvendo (2.58),

$$1 = \mu \left( 1 + \frac{\delta^2}{4} \right)^{-1/2} = \mu \left( 1 - \frac{\delta^2}{8} + \frac{3\delta^4}{128} - \frac{5\delta^6}{1024} + \dots \right).$$

Multiplicando esta equação por

$$hD = 2 \operatorname{senh}^{-1} \left( \frac{\delta}{2} \right) = 2 \left[ \frac{\delta}{2} - \frac{1}{2 \cdot 3} \left( \frac{\delta}{2} \right)^3 + \frac{1 \cdot 3}{2 \cdot 4 \cdot 5} \left( \frac{\delta}{2} \right)^5 - \frac{1 \cdot 3 \cdot 5}{2 \cdot 4 \cdot 6 \cdot 7} \left( \frac{\delta}{2} \right)^7 + \dots \right]$$

obtemos o que se segue

$$\begin{aligned} hD &= \mu \left( \delta - \frac{1}{3!} \delta^3 + \frac{1^2 \cdot 2^2}{5!} \delta^4 - \frac{2^2 \cdot 3^2}{7!} \delta^6 + \dots \right) \\ &= \bar{\delta} \left( 1 - \frac{\delta^2}{3!} + \frac{2^2}{5!} \delta^4 - \frac{2^2 \cdot 3^2}{7!} \delta^6 + \dots \right) \end{aligned}$$

Com isso são obtidas aproximações de diferença centrada que envolvem somente pontos da malha de discretização com valores de ordem inteira. Segue respectivamente, os esquemas de precisão de segunda e quarta ordem :

$$(Du)_i = \frac{u_{i+1} - u_i}{2h} + O(h^2) \quad (2.59)$$

e

$$(Du)_i = \frac{-u_{i+2} + 8u_{i+1} - 8u_{i-1} + u_{i-2}}{2h} + O(h^4). \quad (2.60)$$

### 2.1.7 Derivadas de Ordem Superior

Manipulando matematicamente os operadores deduzidos até aqui podemos encontrar um número ilimitado de fórmulas de diferenças finitas. Essas fórmulas podem ser aplicadas para obter esquemas de ordem superior.

De (2.45) temos:

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial^n u}{\partial x}\right)_{i,j} &= D^n u_{i,j} \\
&= \frac{1}{h^n} [\ln(1 + \delta^+)]^n u_{i,j} \\
&= \frac{1}{h^n} \left[ \delta^{+n} - \frac{n}{2} \delta^{+(n+1)} + \frac{n(3n+5)}{24} \delta^{+(n+2)} - \frac{n(n+2)(n+3)}{48} \delta^{+(n+3)} + \dots \right] u_{i,j}.
\end{aligned} \tag{2.61}$$

Para o operador de diferença regressiva, tem-se

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial^n u}{\partial x^n}\right) &= \frac{1}{h^n} [\ln(2 - \delta^-)]^n u_{i,j} \\
&= \frac{1}{h^n} \left( \delta^- + \frac{\delta^{-2}}{2} + \frac{\delta^{-3}}{3} + \dots \right)^n u_{i,j},
\end{aligned}$$

obtendo

$$\frac{1}{h^n} \left[ \delta^{-n} + \frac{n}{2} \delta^{-(n+1)} + \frac{n(3n+5)}{24} \delta^{-(n+2)} + \frac{n(n+2)(n+3)}{48} \delta^{-(n+3)} + \dots \right] u_{i,j}. \tag{2.62}$$

Fórmulas de diferenças centrais também podem ser obtidas para derivadas de ordem superiores, como segue

$$\begin{aligned}
D^n u_{i,j} &= \left( \frac{2}{h} \operatorname{senh}^{-1} \left( \frac{\delta}{2} \right) \right)^n u_{i,j} \\
&= \frac{1}{h^n} \left[ \delta - \frac{\delta^3}{24} + \frac{3\delta^5}{640} - \frac{5\delta^7}{7168} \right]^n u_{i,j},
\end{aligned}$$

obtendo assim o seguinte resultado

$$\frac{1}{h^n} \delta^n \left[ 1 - \frac{n}{24} \delta^2 + \frac{n}{64} \left( \frac{22+5n}{90} \right) \delta^4 - \frac{n}{4^5} \left( \frac{5}{7} + \frac{n-1}{5} + \frac{(n-1)(n-2)}{3^5} \right) \delta^6 + \dots \right] u_{i,j}. \tag{2.63}$$

Para  $n$  um número par a equação(2.63) gera esquemas com valores inteiros nos pontos da malha. Para valores de  $n$  ímpar, obteremos esquemas com valores fracionários para os pontos da malha.

Para envolver somente pontos de ordem inteira para  $n$  ímpar, usamos mais uma

vez a equação (2.58), assim

$$\begin{aligned} (D^n u)_{i,j} &= \frac{\mu}{[1 + (\delta^2/4)]^{1/2}} \left( \frac{2}{h} \operatorname{senh}^{-1} \frac{\delta}{2} \right)^n u_{i,j} \\ &= \mu \frac{\delta^n}{h^n} \left[ 1 - \frac{n+3}{24} \delta^2 + \frac{5n^2 + 52n + 135}{5760} \delta^4 + \dots \right] u_{i,j}. \end{aligned} \quad (2.64)$$

### 2.1.8 Derivadas de segunda ordem

Fazendo  $n = 2$  em (2.61) obtemos uma família de operadores de diferença progressiva para derivada segunda com diversas ordens de precisão

$$D^2 u_{i,j} = \frac{1}{h^2} \left( \delta^{+2} - \delta^{+3} + \frac{11}{12} \delta^{+4} - \frac{5}{6} \delta^{+5} + \dots \right) u_{i,j}. \quad (2.65)$$

De maneira análoga faz-se  $n = 2$  em (2.62) e obtem-se família de operadores de diferença regressiva para derivada segunda com diversas ordens de precisão

$$D^2 u_{i,j} = \frac{1}{h^2} \left( \delta^{-2} + \delta^{-3} + \frac{11}{12} \delta^{-4} - \frac{5}{6} \delta^{-5} + \dots \right) u_{i,j}. \quad (2.66)$$

Da mesma forma, segue para a fórmula em (2.63)

$$D^2 u_{i,j} = \frac{1}{h^2} \left( \delta^2 - \frac{\delta^4}{12} + \frac{\delta^6}{90} - \frac{\delta^8}{560} + \dots \right) u_{i,j} \quad (2.67)$$

e para a fórmula em (2.64) obtendo-se

$$D^2 u_{i,j} = \frac{\mu}{h^2} \left( \delta^2 - \frac{5}{24} \delta^4 + \frac{259}{5760} \delta^6 + \dots \right) u_{i,j}. \quad (2.68)$$

Mantendo-se somente o primeiro termo das equações imediatamente acima obtêm-se as seguintes fórmulas de diferenças finitas:

- *Diferença progressiva com precisão de primeira ordem;*

$$\begin{aligned} D^2 u_{i,j} &= \frac{1}{h^2} (\delta^{+2}) u_{i,j} \\ &= \frac{1}{h^2} [u_{i+2,j} - 2u_{i+1,j} + u_{i,j}] - h(u_{xxx}); \end{aligned} \quad (2.69)$$

- *Diferença regressiva com precisão de primeira ordem;*

$$\begin{aligned}
D^2 u_{i,j} &= \frac{1}{h^2} (\delta^{-2}) u_{i,j} \\
&= \frac{1}{h^2} (u_{i-2,j} - 2u_{i-1,j} + u_{i,j}) + h(u_{xxx}); \quad (2.70)
\end{aligned}$$

- *Diferença central para pontos inteiros com precisão de segunda ordem;*

$$\begin{aligned}
D^2 u_{i,j} &= \frac{1}{h^2} (\delta^2) u_{i,j} \\
&= \frac{1}{h^2} (u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}) - \frac{h^2}{12} \left( \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \right); \quad (2.71)
\end{aligned}$$

- *Diferença central com pontos de malha fracionária com precisão de segunda ordem;*

$$\begin{aligned}
D^2 u_{i,j} &= \frac{\mu}{h^2} (\delta^2) u_i \\
&= \frac{1}{2h^2} (u_{i+3/2} - u_{i+1/2} - u_{i-1/2} + u_{i-3/2}) - \frac{5}{24} h^2 \left( \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \right). \quad (2.72)
\end{aligned}$$

Com exceção de (2.72) que envolve quatro pontos da malha, as demais fórmulas de aproximações de diferenças finitas para primeira e segunda derivada envolvem apenas três pontos da malha. Verifica-se ainda que as fórmulas de diferença centrada apresentam uma precisão mais alta em relação as demais fórmulas de aproximação unilateral. Considerando os dois primeiros termos das fórmulas podemos obter uma ordem de precisão mais elevada como pode ser visto a seguir:

- *Diferença progressiva com precisão de segunda ordem*

$$(u_{xx})_{i,j} = \frac{1}{h^2} (2u_{i,j} - 5u_{i+1,j} + 4u_{i+2,j} - u_{i+3,j}) + \frac{11}{12} h^2 \left( \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \right); \quad (2.73)$$

os cálculos de (2.73) com mais detalhes podem ser verificados em (A.1).

- *Diferença regressiva com precisão de segunda ordem*

$$(u_{xx})_{i,j} = \frac{1}{h^2} (2u_{i,j} - 5u_{i-1,j} + 4u_{i-2,j} - u_{i-3,j}) - \frac{11}{12} h^2 \left( \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \right); \quad (2.74)$$

- *Diferença centrada de pontos inteiros com precisão de quarta ordem*

$$(u_{xx})_{i,j} = \frac{1}{12h^2} (-u_{i+2,j} + 16u_{i+1,j} - 30u_i + 16u_{i-1} - u_{i-2,j}) - \frac{h^4}{90} \left( \frac{\partial^6 u}{\partial x^6} \right); \quad (2.75)$$

- *Diferença centrada de pontos de malha fracionado com precisão de quarta ordem*

$$(u_{xx})_{i,j} = \frac{1}{48h^2} (-5u_{i+5/2} + 39u_{i+3/2,j} - 34u_{i+1/2,j} - 34u_{i-1/2,j} + 39u_{i-3/2,j} - 5u_{i-5/2,j}) + \frac{259}{5760} h^4 \left( \frac{\partial^6 u}{\partial x^6} \right). \quad (2.76)$$

Comparando (2.72) com (2.76) verifica-se que esta última precisa de seis pontos da malha para se obter uma aproximação com precisão de quarta ordem, enquanto que (2.72) precisa de apenas quatro pontos, desta forma (2.76) é de pouco uso prático.

## 2.2 Esquemas de Diferença Finita para o Operador de Laplace

Considere o operador de Laplace  $\nabla u = u_{xx} + u_{yy}$  em duas dimensões. Aplicando o operador de Diferença Central para discretização do operador de Laplace, temos

$$\Delta u_{i,j} = \left( \frac{\delta_x^2}{\Delta x^2} + \frac{\delta_y^2}{\Delta y^2} \right) u_{i,j} \quad (2.77)$$

$$= \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{\Delta y^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2, \Delta y^2). \quad (2.78)$$

Fazendo  $\Delta x = \Delta y$  para obter uma malha uniforme, encontramos

$$\frac{u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1} - 4u_{i,j}}{\Delta x^2} = \Delta u_{i,j} + \frac{\Delta x^2}{12} \left( \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + \frac{\partial^4 u}{\partial y^4} \right)_{i,j}. \quad (2.79)$$

Esta fórmula está ilustrada na molécula computacional da Figura (2.3)

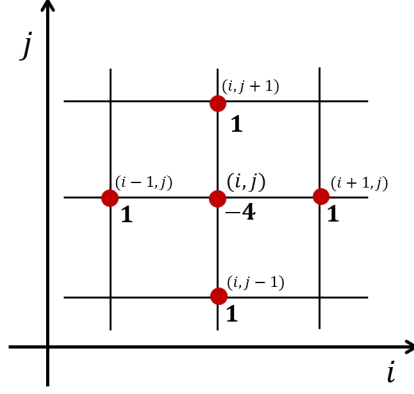


Figura 2.3: Molécula computacional com 5 pontos para o operador de Laplace (Equação(2.79)).

## 2.3 Esquemas Implícitos para Problemas Multidimensionais - Métodos Implícitos de Direção Alternada (ADI)

Quando esquemas totalmente implícitos são aplicados para resolver problemas de dimensões maiores que um, o sistema matricial resultante não é mais tridiagonal, o que aumenta o esforço computacional. Por exemplo, considere o problema bidimensional da condução de calor (2.80)

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \left[ \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right]. \quad (2.80)$$

A equação (2.80) discretizada pelo método de diferenças finitas possui a seguinte forma:

$$\frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{\Delta t} = D \left[ \frac{u_{i+1,j}^\theta - 2u_{i,j}^\theta + u_{i-1,j}^\theta}{(\Delta x)^2} + \frac{u_{i,j+1}^\theta - 2u_{i,j}^\theta + u_{i,j-1}^\theta}{(\Delta y)^2} \right] + \mathcal{O} [\Delta t, (\Delta x)^2, (\Delta y)^2] \quad (2.81)$$

onde  $\theta$  corresponde ao passo no tempo.

### 2.3.1 Formulação Totalmente Implícita 2D( $\theta = n + 1$ )

Fazendo  $\theta = n + 1$  em (2.81) e desprezando o termo  $\mathcal{O} [\Delta t]$  obtemos

$$\frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{\Delta t} = D \left[ \frac{u_{i+1,j}^{n+1} - 2u_{i,j}^{n+1} + u_{i-1,j}^{n+1}}{(\Delta x)^2} + \frac{u_{i,j+1}^{n+1} - 2u_{i,j}^{n+1} + u_{i,j-1}^{n+1}}{(\Delta y)^2} \right] \quad (2.82)$$

Considerando  $r_x = \frac{D\Delta t}{(\Delta x)^2}$  e  $r_y = \frac{D\Delta t}{(\Delta y)^2}$ , chegamos em:

$$-r_y [u_{i+1,j}^{n+1} + u_{i-1,j}^{n+1}] + (1 + 2(r_x + r_y))u_{i,j}^{n+1} - r_y [u_{i,j+1}^{n+1} + u_{i,j-1}^{n+1}] = u_{i,j}^n. \quad (2.83)$$

Admitindo  $\Delta x = \Delta y \rightarrow r_x = r_y$ , podemos reescrever (2.83) como

$$u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n = r_x (u_{i+1,j}^{n+1} - 4u_{i,j}^{n+1} + u_{i-1,j}^{n+1} + u_{i,j-1}^{n+1} + u_{i,j+1}^{n+1}). \quad (2.84)$$

Parte deste desenvolvimento pode ser encontrado em [17]. Para uma visualização melhor de uma matriz pentadiagonal redefiniremos os coeficientes das incógnitas dos valores de  $u$  desconhecidos como  $a, b, c, d$  e  $e$

$$a_{i,j}u_{i+j}^{n+1} + b_{i,j}u_{i-1,j}^{n+1} + c_{i,j}u_{i,j}^{n+1} + d_{i,j}u_{i,j-1}^{n+1} + e_{i,j}u_{i,j+1}^{n+1} = u_{i,j}^n \quad (2.85)$$

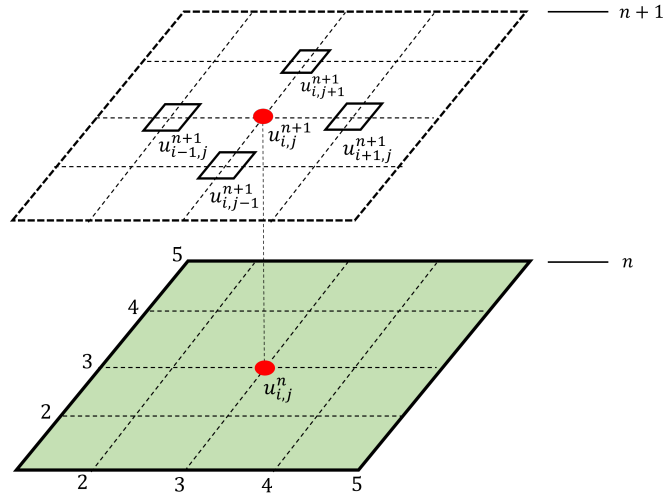


Figura 2.4: Molécula computacional para o método totalmente implícito

Considere a malha 5 por 5, conforme mostrado na Figura 2.4. Há um total de nove incógnitas no nível de tempo  $n + 1$ . Portanto, um total de nove equações simultâneas devem ser resolvidas. As equações de diferenças finitas implícitas para

o sistema da malha da Figura 2.4 são

$$\begin{aligned}
a_{2,2}u_{3,2} + c_{2,2}u_{2,2} + e_{2,2}u_{2,3} &= u_{2,2}^n - b_{2,2}u_{1,2} - d_{2,2}u_{2,1} \\
a_{2,3}u_{3,3} + c_{2,2}u_{2,3} + d_{2,3}u_{2,2} + e_{2,3}u_{2,4} &= u_{2,3}^n - b_{2,3}u_{1,3} \\
a_{2,4}u_{3,4} + c_{2,4}u_{2,4} + d_{2,4}u_{2,3} &= u_{2,4}^n - b_{2,4}u_{1,4} - e_{2,4}u_{2,5} \\
a_{3,2}u_{4,2} + b_{3,2}u_{2,2} + e_{3,2}u_{3,3} &= u_{3,2}^n - d_{3,2}u_{3,1} \\
a_{3,3}u_{4,3} + b_{3,3}u_{2,3} + c_{3,3}u_{3,3} + d_{3,3}u_{3,2} &= u_{3,4}^n - e_{3,4}u_{3,5} \\
b_{4,2}u_{3,2} + c_{4,2}u_{4,2} + e_{4,2}u_{4,3} &= u_{4,2}^n - a_{4,2}u_{5,2} - d_{4,2}u_{4,1} \\
b_{4,3}u_{3,3} + c_{4,3}u_{4,3} + d_{4,3}u_{4,2} + e_{4,3}u_{4,4} &= u_{4,3}^n - a_{4,3}u_{5,2} \\
b_{4,4}u_{3,4} + c_{4,4}u_{4,4} + d_{4,4}u_{4,3} + e_{4,4}u_{4,4} &= u_{4,4}^n - a_{4,4}u_{5,4} - e_{4,4}u_{4,5}
\end{aligned}$$

Todos os valores conhecidos das condições de contorno foram movidos para o lado direito e adicionadas às quantidades conhecidas do nível de tempo anterior  $n$ . Os dados no nível de tempo  $n$  são fornecidos a partir da condição inicial imposta para o primeiro nível de cálculo e, subsequentemente, da solução no passo anterior. Podemos visualizar os sistemas em forma matricial

$$\begin{bmatrix}
c_{2,2} & e_{2,2} & 0 & a_{2,2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
d_{2,3} & c_{2,3} & e_{2,3} & 0 & a_{2,3} & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & d_{2,4} & c_{2,4} & 0 & 0 & a_{2,4} & 0 & 0 & 0 \\
b_{3,2} & 0 & 0 & c_{3,2} & e_{3,2} & 0 & a_{3,2} & 0 & 0 \\
0 & b_{3,3} & 0 & d_{3,3} & c_{3,3} & e_{3,3} & 0 & a_{3,3} & 0 \\
0 & 0 & b_{3,4} & 0 & d_{3,4} & c_{3,4} & 0 & 0 & a_{3,4} \\
0 & 0 & 0 & b_{4,2} & 0 & 0 & c_{4,2} & e_{4,2} & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & b_{4,3} & 0 & d_{4,3} & c_{4,3} & e_{4,3} \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & b_{4,4} & 0 & d_{4,4} & c_{4,4}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
u_{2,2}^{n+1} \\
u_{2,3}^{n+1} \\
u_{2,4}^{n+1} \\
u_{3,2}^{n+1} \\
u_{3,3}^{n+1} \\
u_{3,4}^{n+1} \\
u_{4,2}^{n+1} \\
u_{4,3}^{n+1} \\
u_{4,4}^{n+1}
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
u_{2,2}^n - b_{2,2}u_{1,2} - d_{2,2}u_{2,1} \\
u_{2,3}^n - b_{2,3}u_{1,3} \\
u_{2,4}^n - b_{2,4}u_{1,4} - e_{2,4}u_{2,5} \\
u_{3,2}^n - d_{3,2}u_{3,1} \\
u_{3,3}^n \\
u_{3,4}^n - e_{3,4}u_{3,5} \\
u_{4,2}^n - a_{4,2}u_{5,2} - d_{4,2}u_{4,1} \\
u_{4,3}^n - a_{4,3}u_{5,3} \\
u_{4,4}^n - a_{4,4}u_{5,4} - e_{4,4}u_{4,5}
\end{bmatrix}$$

Em casos que a discretização é feita em uma malha arbitrária, ou em algum domínio irregular, pontos adicionais aparecem quando aplicamos o método de diferenças finitas(3.10), e a matriz implícita terá uma estrutura mais complicada do que a pentadiagonal mostrada em (2.83).

### 2.3.2 Métodos de Direções Alternadas (ADI)

Para evitar o manuseio de uma matriz pentadiagonal e, conseqüentemente, o custo computacional envolvido na solução do sistema linear resultante, foi elaborado os Métodos de Direções Alternadas (ADI). Este método consiste em separar os operadores em componentes unidimensionais, dividindo o esquema em dois (ou em

três para problemas tridimensionais) passos, de forma que em cada passo, somente uma das variáveis é tratada implicitamente. No primeiro passo  $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$  é discretizado implicitamente na medida em que  $\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$  é tratado explicitamente, já no segundo passo os papéis se invertem e assim sucessivamente como na Figura 2.5. Este método foi introduzido por DOUGLAS e RACHFORD [6] e PEACEMAN e RACHFORD [25] e generalizado por DOUGLAS e GUNN [5].

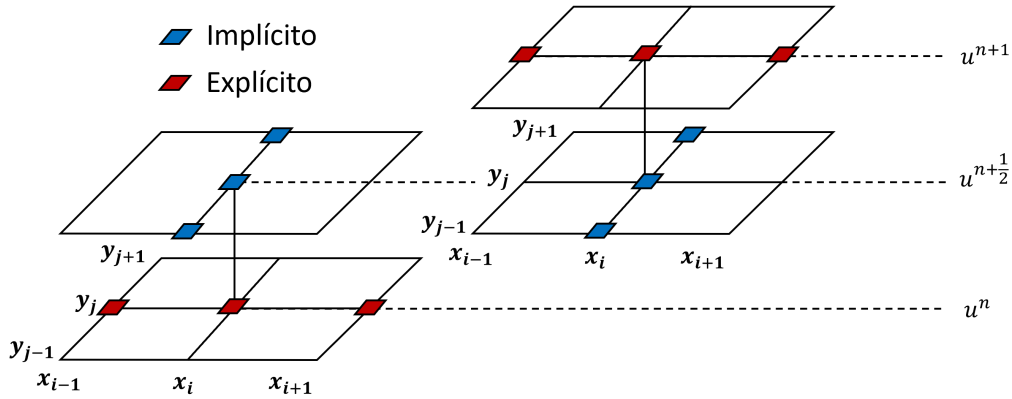


Figura 2.5: Molécula computacional para o método implícito de direção alternada

Seja  $S$  um operador que represente as derivadas de segunda ordem nas direções apresentadas em seus índices e aproximadas por diferenças centradas de segunda ordem, por exemplo  $S_x$  e  $S_y$  podem ser escritas como segue:

$$S_x u_{i,j} = \frac{D}{\Delta x^2} (u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}) \quad (2.86)$$

$$S_y u_{i,j} = \frac{D}{\Delta y^2} (u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}). \quad (2.87)$$

Utilizando o operador  $S$  definido em (2.86 -2.87) em (2.84)

$$u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n = \Delta t [S_x + S_y] u_{i,j}^{n+1}. \quad (2.88)$$

Perceba que o operador, separou  $S$  em duas submatrizes que agem sobre os componentes de  $u$ , isto é  $S = S_x + S_y$ . Explicitando  $u_{i,j}^n$ , obtemos

$$[1 - \Delta t (S_x + S_y)] u_{i,j}^{n+1} = u_{i,j}^n. \quad (2.89)$$

Generalizando assim, a obtenção dos operadores implícitos. Notemos portanto que a ideia básica do método ADI é fatorar o operador  $S$  em um produto de opera-

dores unidimensionais. Desta forma, a equação (2.89) pode ser reescrita como:

$$(1 - \tau \Delta t S_x)(1 - \tau \Delta t S_y)u_{i,j}^{n+1} = u_{i,j}^n, \quad (2.90)$$

onde  $\tau$  é um parâmetro livre, mais especificamente um parâmetro de relaxação e recomenda-se que seja usado como 1, em caso de simulações numéricas dependentes do tempo [16]. Desenvolvendo a equação (2.90), obtemos

$$\begin{aligned} u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n &= \tau \Delta t (S_x + S_y) u_{i,j}^{n+1} - \\ &\quad - \tau^2 \Delta t^2 (S_x + S_y) u_{i,j}^{n+1} + \tau^3 \Delta t^3 S_x S_y u_{i,j}^{n+1} \end{aligned} \quad (2.91)$$

Quando comparamos (2.88) com (2.91) verificamos que a última possui dois termos adicionais, estes representam os erros com respeito ao esquema original a ser resolvido. Entretanto as ordens dos erros são as mesmas que a ordem do truncamento original, e, portanto, não afeta a precisão global do esquema.

A técnica ADI é aplicada também em problemas estacionários, por meio da qual tenta-se alcançar o limite de convergência tão rápido quanto possível e, para tal, o parâmetro de relaxação  $\tau$  pode ser escolhido de modo à acelerar o processo de convergência, uma vez que  $\tau \Delta t$  representa uma escala do passo no tempo. O esquema (2.91) é então resolvido em três passos:

$$(1 - \tau \Delta t S_x)u_{i,j}^{n+1*} = [1 + \tau \Delta t (S_y)] u^n \quad (2.92)$$

$$(1 - \tau \Delta t S_y)u_{i,j}^{n+1**} = u_{i,j}^{n+1*} - \tau \Delta t S_y u^n. \quad (2.93)$$

Em outras palavras, o sistema algébrico linear tridimensional no esquema implícito (2.91) é decomposto em um sistema algébrico linear de três equações unidimensionais.

Para  $\tau = 1$  obtém-se o esquema DOUGLAS e RACHFORD [6], para  $\tau = \frac{1}{2}$  obtém-se o método PEACEMAN e RACHFORD [25] que em duas dimensões tem a formulação que se segue:

$$\begin{aligned} \left(1 - \frac{\Delta t}{2} S_x\right) u^{n+1*} &= \left(1 + \frac{\Delta t}{2} S_y\right) u^n \\ \left(1 - \frac{\Delta t}{2} S_y\right) u^{n+1} &= \left(1 + \frac{\Delta t}{2} S_x\right) u^{n+1*} \end{aligned} \quad (2.94)$$

Tomando o passo intermediário igual a  $n + \frac{1}{2}$  a expressão (2.94) quando aplicada

em (2.80) gera o esquema:

$$\begin{aligned} -r_x u_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}} + (1+2r_x)u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - r_x u_{i+1,j}^{n+\frac{1}{2}} &= r_y u_{i,j-1}^n + (1-2r_y)u_{i,j}^n + r_y u_{i,j+1}^n \\ -r_y u_{i,j-1}^{n+1} + (1+2r_y)u_{i,j}^{n+1} - r_y u_{i,j+1}^{n+1} &= r_x u_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}} + (1-2r_x)u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + r_x u_{i+1,j}^{n+\frac{1}{2}}, \end{aligned} \quad (2.95)$$

representado em forma matricial como:

$$\begin{aligned} &\begin{pmatrix} 1+2r_x & -r_x & 0 & \cdots & 0 \\ -r_x & 1+2r_x & -r_x & \cdots & 0 \\ \vdots & & & & \vdots \\ 0 & \cdots & -r_x & 1+2r_x & -r_x \\ 0 & \cdots & 0 & -r_x & 1+2r_x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{1,j}^{\theta+\frac{1}{2}} \\ U_{2,j}^{\theta+\frac{1}{2}} \\ \vdots \\ U_{N-2,j}^{\theta+\frac{1}{2}} \\ U_{N-1,j}^{\theta+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} r_y U_{1,j-1}^\theta + (1-2r_y)U_{1,j}^\theta + r_y U_{1,j+1}^\theta \\ r_y U_{2,j-1}^\theta + (1-2r_y)U_{2,j}^\theta + r_y U_{2,j+1}^\theta \\ \vdots \\ r_y U_{N-2,j-1}^\theta + (1-2r_y)U_{N-2,j}^k + r_y U_{N-2,j+1}^\theta \\ r_y U_{N-1,j-1}^\theta + (1-2r_y)U_{N-1,j}^\theta + r_y U_{N-1,j+1}^\theta \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} r_x U_{1,j}^{\theta+\frac{1}{2}} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ r_x U_{N,j}^{\theta+\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

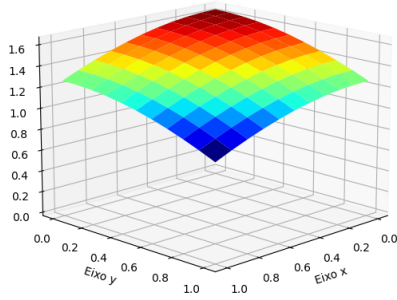
**Experimento 2.1:** A fim de verificar a convergência do método ADI, este experimento ilustrado na Figura 2.6 compara a solução analítica e aproximada da equação de difusão bidimensional com os seguintes dados:

- Domínio espacial:  $x \in [0, 1]$  e  $y \in [0, 1]$
- Instantes inicial e final:  $t_0 = 0$  e  $t_f = 0, 2$
- Termo fonte:  $g(x) = 0$
- Coeficiente de difusão:  $D = 1$
- Condição inicial:  $f(x) = \cos(x) + \cos(y)$
- Condições de contorno:

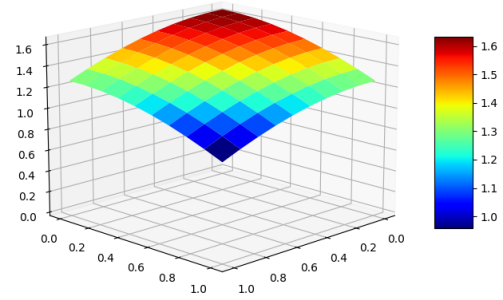
$$\begin{aligned} u(x; 0; t) &= e^{-t}(\cos x + 1); u(x; L; t) = e^{-t}(\cos x + \cos L) \\ u(0; y; t) &= e^{-t}(\cos y + 1); u(L; y; t) = e^{-t}(\cos L + \cos y) \end{aligned}$$

- Espaçamento da malha:  $\Delta x = \Delta y = 0, 1$  (espacial) e  $\Delta t = 0, 05$  (temporal)

- Solução analítica:  $u(x, t) = e^{-0,2}(\cos x + \cos y)$



(a) Solução numérica.



(b) Solução analítica.

Figura 2.6: Solução numérica via método ADI 2.6(a) e solução analítica 2.6(b) do Experimento 2.1, da equação de difusão bidimensional.

No capítulo seguinte formularemos o 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. Com base em, WYSE *et al.* [35] propomos uma extensão natural dessa modelagem, para uma herança genotípica baseada na técnica de Reação em Cadeia Mutagênica (MCR).

## Capítulo 3

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

O modelo matemático para a descrição da interação de mosquitos selvagens e transgênicos proposto por WYSE *et al.* [35] em versão unidimensional e por ROLIM *et al.* [29] em versão bidimensional diferencia as populações de mosquitos transgênicos de acordo com a sua zigosidade e considerando as populações em valores absolutos, mantendo assim parâmetros que podem ser relevantes na análise do comportamento das espécies. Este modelo considera três populações  $u_i$ ; são elas: mosquitos selvagens, mosquitos transgênicos heterozigotos e transgênicos homozigotos,  $i = 1, 2, 3$  respectivamente.

A taxa intrínseca de crescimento  $r$  é a diferença entre o fator limitante e o fator regulador, onde, o fator limitante é qualquer força que afeta o tamanho de uma população de seres vivos através de fenômenos físicos e químicos e o fator regulador é qualquer força que afeta o tamanho de uma população de seres vivos através de fatores biológicos, assim,  $r = \xi - \delta_1$ . A taxa de mortalidade  $\delta$ , comum as três variedades de mosquitos, é a soma da mortalidade dependente da densidade  $\delta_1$  e de uma mortalidade independente da densidade  $\delta_2$ , assim,  $\delta = \delta_1 + \delta_2$ . Na expressão  $\frac{r \sum u_i}{K}$  introduzimos também a capacidade de suporte do ambiente  $K$ . Além disso, considere o fato de que o material genético introduzido pelo impulso do gene pode ter um custo para o indivíduo, denominado *fitness cost*. Com essas informações, e considerando que a disseminação de mosquitos selvagens e transgênicos se deve a um processo difusivo, o modelo matemático que descreve a dispersão e interação entre mosquitos selvagens e transgênicos é:

$$\begin{cases} \frac{\partial u_1}{\partial t} = D_1 \Delta u_1 + \left( \frac{\xi}{\sum u_i} - \frac{r}{K} \right) \sum \sum a_{ij} u_i u_j - \delta u_1 \\ \frac{\partial u_2}{\partial t} = D_2 \Delta u_2 + \left( \frac{\xi}{\sum u_i} - \frac{r}{K} \right) \sum \sum b_{ij} u_i u_j - \delta u_2 \\ \frac{\partial u_3}{\partial t} = D_3 \Delta u_3 + \left( \frac{\xi}{\sum u_i} - \frac{r}{K} \right) \sum \sum c_{ij} u_i u_j - \delta u_3, \end{cases} \quad (3.1)$$

com condições de contorno

$$u_i(x, y, t) = \bar{u}_{i\Omega}, \quad \forall x, y \in \partial\Omega, \quad (3.2)$$

e condições iniciais

$$u_i(x, y, 0) = \bar{u}_i, \quad \forall x, y \in \Omega, \quad (3.3)$$

onde  $D_i$  é o coeficiente de difusão das populações  $u_i$ .

Estabelecendo o genótipo de mosquitos selvagens como  $(w, w)$ , genótipo transgênico homozigoto como  $(g, g)$  e genótipo transgênico heterozigoto como  $(w, g)$ , podemos denotar  $a_{ij}$ ,  $b_{ij}$  e  $c_{ij}$  as frequências genotípicas para  $u_1$ ,  $u_2$  e  $u_3$  obtidas a partir do acasalamento  $u_i \times u_j$ ,  $i, j = 1, 2, 3$ , conforme mostrado na Tabela 3.1. Os valores resultantes devem satisfazer a condição  $a_{ij} + b_{ij} + c_{ij} = 1$ .

Tabela 3.1: Frequências de descendência genotípica obtidas a partir do acasalamento de mosquitos selvagens, transgênicos heterozigotos e transgênicos homozigotos.

Acasalamento Genótipo	$u_1 \times u_1$	$u_1 \times u_2$	$u_1 \times u_3$	$u_2 \times u_2$	$u_2 \times u_3$	$u_3 \times u_3$
$(w, w)$	$a_{11}$	$a_{12}$	$a_{13}$	$a_{22}$	$a_{23}$	$a_{33}$
$(w, g)$	$b_{11}$	$b_{12}$	$b_{13}$	$b_{22}$	$b_{23}$	$b_{33}$
$(g, g)$	$c_{11}$	$c_{12}$	$c_{13}$	$c_{22}$	$c_{23}$	$c_{33}$

Nota: Esta tabela foi copiada de "Modeling the spreading and interaction between wild and transgenic mosquitoes with a random dispersal", por Wyse, A.P. et al., 2018, PloS One, 13(10):e0205879.

Os valores de  $a_{ij}$ ,  $b_{ij}$  e  $c_{ij}$  considerando a genética Mendeliana podem ser obtidos do Quadro de Punnett, para cada acasalamento [33].

Tabela 3.2: Exemplo do Quadro de Punnett para o acasalamento  $u_2 \times u_2$ , com frequência genotípica  $p = q = 1/2$ , resultando em  $a_{22} = 1/4$ ,  $b_{22} = 1/2$  e  $c_{22} = 1/4$ .

		p	q
	Gametas	$w$	$g$
p	$w$	$ww$	$wg$
q	$g$	$wg$	$gg$

GANTZ e BIER [9] desenvolveram o método chamado reação em cadeia mutagênica (MCR), que se baseia no sistema de edição do genoma CRISP/Cas9. De modo

geral, mutações autocatalíticas produzem a conversão alélica para gerar mutações homozigóticas de perda de função. Portanto, o MCR usa o alelo mutado inicial para causar uma mutação no alelo do cromossomo oposto, levando a homozigosidade da característica. A Figura 3.1 mostra um comparativo entre a descendência obtida por herança mendeliana e herança MCR. Em *Drosophila*, foi observado que as mutações MCR se espalham com uma eficiência de 97% [9] de seu cromossomo de origem para o cromossomo homólogo, ocorrendo na grande maioria das células somáticas e de linhagem germinativa. Para mosquitos o estudo [10] demonstra uma diferenciação na eficiência de conversão entre machos e fêmeas, sendo 98% e 14%, respectivamente.

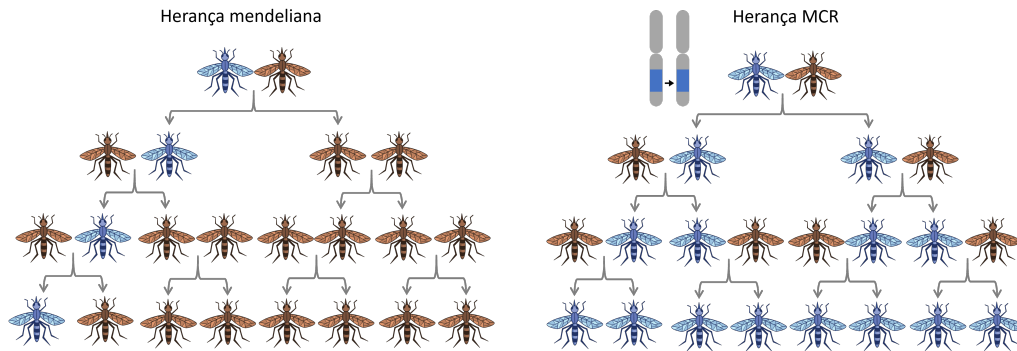


Figura 3.1: Comparação de padrão de herança mendeliana contra MCR. Mosquitos transgênicos (azul) são obtidos em maior proporção em relação aos mosquitos selvagens (laranja) quando a herança MCR é considerada.

Considerando a herança MCR, os mosquitos transgênicos heterozigotos são convertidos em mosquitos transgênicos homozigotos com uma taxa de sucesso  $c$ , com  $(1 - c)$  sendo a resistência a essa conversão.  $w_{ij}$  é o *fitness* médio da população associada obtida a partir do acasalamento de  $u_i \times u_j$ . Os respectivos coeficientes de seleção para genótipos  $(w, w)$ ,  $(g, g)$  e  $(g, w)$  são  $1$ ,  $1 - s$  e  $1 - hs$ , onde  $s$  é o coeficiente de seleção e  $h$  é o grau de dominância do *fitness cost*. Estudos têm mostrado que é possível obter frequências genotípicas a partir da herança mendeliana sem efeito significativo, desde que sejam utilizadas cepas heterozigotas [1, 22]. As frequências genotípicas considerando a herança Mendeliana e MCR estão na Tabela 3.3.

Tabela 3.3: Frequências genótípicas considerando herança mendeliana e MCR

Frequência	$a_{11}$	$a_{12}$	$a_{13}$	$a_{22}$	$a_{23}$	$a_{33}$
Mendeliana	1,0	0,5	0,0	0,25	0,0	0,0
MCR	1,0	$\frac{0,5}{w_{12}}$	0,0	$\frac{0,25}{w_{22}}$	0,0	0,0
Frequência	$b_{11}$	$b_{12}$	$b_{13}$	$b_{22}$	$b_{23}$	$b_{33}$
Mendeliana	0,0	0,5	1,0	0,5	0,5	0,0
MCR	0,0	$\frac{0,5(1-c)(1-hs)}{w_{12}}$	$\frac{1,0(1-c)(1-hs)}{w_{13}}$	$\frac{0,5(1-c)(1-hs)}{w_{22}}$	$\frac{0,5(1-c)(1-hs)}{w_{23}}$	0,0
Frequência	$c_{11}$	$c_{12}$	$c_{13}$	$c_{22}$	$c_{23}$	$c_{33}$
Mendeliana	0	0,0	0,0	0,25	0,5	1,0
MCR	0	$\frac{0,5cs}{w_{12}}$	$\frac{1,0cs}{w_{13}}$	$\frac{(0,25+0,5c)s}{w_{22}}$	$\frac{(0,5+0,5c)s}{w_{23}}$	1,0

### 3.1 Formulação Numérica

Nesta seção desenvolveremos a formulação do problema e aplicaremos as técnicas computacionais para resolver numericamente o modelo proposto. De acordo com a técnica de decomposição de operadores [11] e [12], desacoplaremos o sistema de reação-difusão não linear (1.31) gerando assim uma combinação equivalente de dois subsistemas físicos distintos de menor complexidade. Esta técnica tem sido utilizada a bastante tempo para resolver equações diferenciais, estudos de como dividir termos de reação de termos de difusão em Equações Diferenciais Parciais de reação-difusão podem ser encontrados em [2], [13] e [14]. Algumas das principais aplicações, especialmente, de como resolver um sistema de Equações Diferenciais Parciais não linear pode ser encontrado em [23], [24], [29], [30] e [34].

Para descrever o algoritmo de resolução, procedemos com a decomposição natural do sistema 1.31 em um problema de difusão (equação diferencial parcial) e um problema de reação (equação diferencial ordinária) e usamos o Método da direção implícita alternada das diferenças finitas para resolver o problema difusivo e Runge-Kutta de quarta ordem para resolver o problema reativo. O algoritmo de decomposição de operadores sequencial resolve os dois subproblemas sequencialmente em cada intervalo de tempo e os conecta por meio das condições iniciais.

Para descrever o algoritmo consideramos  $I = [0, T]$  o intervalo de tempo, com  $T > 0 \in \mathbb{R}$  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 isto, procedemos com os seguintes passos:

**Passo 1:** Para o instante inicial  $t = 0$ , inicialize as variáveis  $u_i(x, y, 0) = \bar{u}_i(x, y)$ , para  $i = 1, 2, 3$ .

**Passo 2:** Tomando um  $n \geq 0$  fixo, conhecidas as condições iniciais  $u_i(x, y, t_n)$  e definindo  $\check{u}_i(t_n) = u_i(x, y, t_n)$ , calculamos  $\tilde{u}_i(x, y, t)$  no passo do tempo  $t_{n+1}$  através

do problema a seguir:

**Problema A:** Encontrar  $\tilde{u}_i(x, y, t)$  com  $(x, y) \in \tilde{\Omega}$ ,  $t \in I$ , tal que

$$\frac{\partial \tilde{u}_i(x, y, t)}{\partial t} = D_i \Delta \tilde{u}_i(x, y, t), \quad (3.4)$$

com condições de contorno

$$(\tilde{u}_i)_x(x, y, t) = u_{\partial} \bar{I}_d, \quad (3.5)$$

e condições iniciais

$$\tilde{u}_i(x, y, t_n) = \check{u}_i(t_n). \quad (3.6)$$

**Passo 3:** No mesmo intervalo de tempo  $I_n$ , utilizamos a solução do Problema A, dada pelo passo anterior, como condição inicial para o cálculo da solução do sistema de equações diferenciais ordinárias não lineares acopladas (3.7), associadas ao modelo termo de reação, e expresso pelo seguinte problema:

**Problema B:** Dados os parâmetros  $\{a_{ij}, b_{ij}, c_{ij}, \xi, r, K\} \in \mathbb{R}$ , encontrar  $u_i(t) \in \mathbb{R}^2$ ,  $t \in I_{t_n}$  que satisfaça:

$$\begin{cases} \frac{du_1}{dt} = \left( \frac{\xi}{\sum u_i} - \frac{r}{K} \right) \sum \sum a_{ij} u_i u_j - \delta u_1 \\ \frac{du_2}{dt} = \left( \frac{\xi}{\sum u_i} - \frac{r}{K} \right) \sum \sum b_{ij} u_i u_j - \delta u_2 \\ \frac{du_3}{dt} = \left( \frac{\xi}{\sum u_i} - \frac{r}{K} \right) \sum \sum c_{ij} u_i u_j - \delta u_3, \end{cases} \quad (3.7)$$

com condições iniciais

$$u_i(t_n) = \tilde{u}_i(x, t_{n+1}), \quad (3.8)$$

onde  $\tilde{u}_i(x, t_{n+1})$  é a solução do Problema A.

**Passo 4:** A solução do Problema B é a solução aproximada do modelo bidimensional (3.1) no instante de tempo  $t_{n+1} \in I_{t_n} \subset I_t$ . Se  $t_{n+1} < T$ , incrementa-se  $n$  e retorna-se ao Passo 2 e repete o processo até que a igualdade ocorra.

### 3.1.1 Solução para o Problema A

Considere o Problema A para uma única população  $u$

$$\frac{\partial u(x, y, t)}{\partial t} = D \Delta u(x, y, t). \quad (3.9)$$

A equação (3.9) discretizada pelo método de diferenças finitas possui a seguinte

forma:

$$\frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{\Delta t} = D \left[ \frac{u_{i+1,j}^\theta - 2u_{i,j}^\theta + u_{i-1,j}^\theta}{(\Delta x)^2} + \frac{u_{i,j+1}^\theta - 2u_{i,j}^\theta + u_{i,j-1}^\theta}{(\Delta y)^2} \right] + O[\Delta t, (\Delta x)^2, (\Delta y)^2], \quad (3.10)$$

onde  $\theta$  corresponde ao passo no tempo.

Aplicando o Método de Direções Alternadas (ADI) Peaceman-Rachford que em duas dimensões tem a formulação que se segue:

$$\left(1 - \frac{\Delta t}{2} S_x\right) u^{n+1*} = \left(1 + \frac{\Delta t}{2} S_y\right) u^n \quad (3.11)$$

$$\left(1 - \frac{\Delta t}{2} S_y\right) u^{n+1} = \left(1 + \frac{\Delta t}{2} S_x\right) u^{n+1*}. \quad (3.12)$$

Tomando o passo intermediário igual a  $n + \frac{1}{2}$  a expressão (3.11) quando aplicada em (3.9) obtemos os seguintes sistemas:

$$-r_x u_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}} + (1 + 2r_x) u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - r_x u_{i+1,j}^{n+\frac{1}{2}} = r_y u_{i,j-1}^n + (1 - 2r_y) u_{i,j}^n + r_y u_{i,j+1}^n \quad (3.13)$$

$$-r_y u_{i,j-1}^{n+1} + (1 + 2r_y) u_{i,j}^{n+1} - r_y u_{i,j+1}^{n+1} = r_x u_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}} + (1 - 2r_x) u_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + r_x u_{i+1,j}^{n+\frac{1}{2}}. \quad (3.14)$$

utilizamos o Algoritmo de Thomas [7] para resolver os sistemas tridiagonais.

### 3.1.2 Solução para o Problema B

Para resolver o sistema de EDO definido por (3.7), aplicamos o método de Runge-Kutta [8] de quarta ordem dado por

$$\tilde{u}^{n+1} = \tilde{u}^n + \frac{h}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4), \quad (3.15)$$

onde

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(t_n, \tilde{u}^n), \\ k_2 &= hf\left(t_n + \frac{h}{2}, \tilde{u}^n + \frac{k_1}{2}\right), \\ k_3 &= hf\left(t_n + \frac{h}{2}, \tilde{u}^n + \frac{k_2}{2}\right), \\ k_4 &= hf(t_n + h, \tilde{u}^n + k_3), \end{aligned} \quad (3.16)$$

e  $\tilde{u}$  e  $f$  são termos associados ao sistema de reação (3.7). e  $\tilde{u}$  e  $\mathbf{f}$  são termos associados ao sistema de reação (3.7).

# Capítulo 4

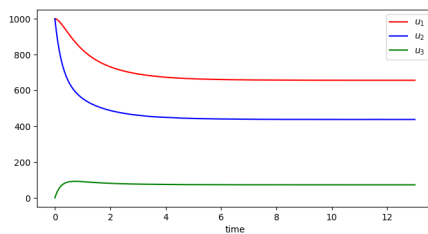
## Simulações Numéricas

Neste capítulo serão apresentados os resultados obtidos da simulação numérica do modelo descrito pela Eq. 3.1 utilizando a técnica de decomposição de operadores descrita no Capítulo 3. Os valores dos coeficientes utilizados estão presentes na Tabela 4.1 e foram obtidos de [35].

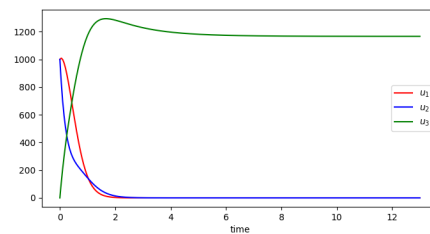
Tabela 4.1: Dados utilizados para a resolução do modelo proposto para os Experimentos 1, 2 e 3.

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

### Experimento 1:



(a) Herança mendeliana.



(b) Herança MCR.

Figura 4.1: Dinâmica temporal de  $u_1$ ,  $u_2$  e  $u_3$

A Figura 4.1 mostra a dinâmica temporal das três populações de mosquitos partindo de uma população inicial  $u_1(0) = u_2(0) = 1000$ ,  $u_3(0) = 0$  para herança

mendeliana 4.1(a) e MCR 4.1(b), esta última considerando uma taxa de sucesso na conversão  $c = 0,8$ , coeficiente de seleção  $s = 0,3$  e grau de dominância do *fitness cost*  $h = 0,2$ . Com esses valores obtivemos o seguinte *fitness* médio, ver Tabela 4.2

Tabela 4.2: Fitness Médio

Frequência	$w_{11}$	$w_{12}$	$w_{13}$	$w_{21}$	$w_{22}$	$w_{23}$	$w_{31}$	$w_{32}$	$w_{33}$
MCR	1,0	0,874	0,748	0,874	0,799	0,724	0,748	0,724	0,7

Utilizando os valores de *fitness* médio e aplicando nas fórmulas da Tabela 3.3 obtivemos as frequências genotípicas vistas na Tabela 4.3

Tabela 4.3: Frequências genotípicas utilizadas nos experimentos

Frequência	$a_{11}$	$a_{12}$	$a_{13}$	$a_{21}$	$a_{22}$	$a_{23}$	$a_{31}$	$a_{32}$	$a_{33}$
MCR	1,0	0,572082	0,0	0,572082	0,312891	0,0	0,0	0	0
Frequência	$b_{11}$	$b_{12}$	$b_{13}$	$b_{21}$	$b_{22}$	$b_{23}$	$b_{31}$	$b_{32}$	$b_{33}$
MCR	0,0	0,107551	0,251336	0,107551	0,117647	0,129834	0,2513369	0,129834	0,0
Frequência	$c_{11}$	$c_{12}$	$c_{13}$	$c_{21}$	$c_{22}$	$c_{23}$	$c_{31}$	$c_{32}$	$c_{33}$
MCR	0,0	0,320366	0,748663	0,320366	0,569461	0,870165	0,748663	0,870165	1,0

Na herança mendeliana ocorre uma prevalência de mosquitos selvagens, em uma proporção de 56% de mosquitos selvagens e 44% de mosquitos transgênicos, conforme estabelecido pelo equilíbrio de Hardy-Weinberg para as frequências genotípicas [27]. Para uma herança MCR com tais características ocorre a prevalência dos mosquitos transgênicos homozigotos, isto porque a taxa de conversão é suficiente para o custo de "fitness" associado. Esse comportamento se reflete na dinâmica espaço temporal apresentada nas Figuras 4.2 e 4.3

**Experimento 1a:** 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  $[14, 16] \times [14, 16]$  ( $km^2$ ). Esta configuração inicial é representada por

$$u_1(x, y, 0) = u_2(x, y, 0) = \begin{cases} 250, & \text{se } 14 \leq x \leq 16 \text{ e } 14 \leq y \leq 16, \\ 0, & \text{se } 0 \leq x < 14 \text{ e } 16 < x \leq 30, \\ 0, & \text{se } 0 \leq y < 14 \text{ e } 16 < y \leq 30, \end{cases} \quad (4.1)$$

$$u_3(x, y, 0) = 0.$$

Em termos de aplicabilidade, para a herança mendeliana, 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. Por outro lado, no experimento utilizando a herança MCR, os mosquitos transgênicos homozigotos nascem da conversão de transgênicos heterozigotos, além de surgirem, também, naturalmente durante os processos de acasalamento. As Figuras 4.2 e 4.3 mostram a dinâmica e espalhamento das três populações após 6 e 13 semanas, respectivamente.

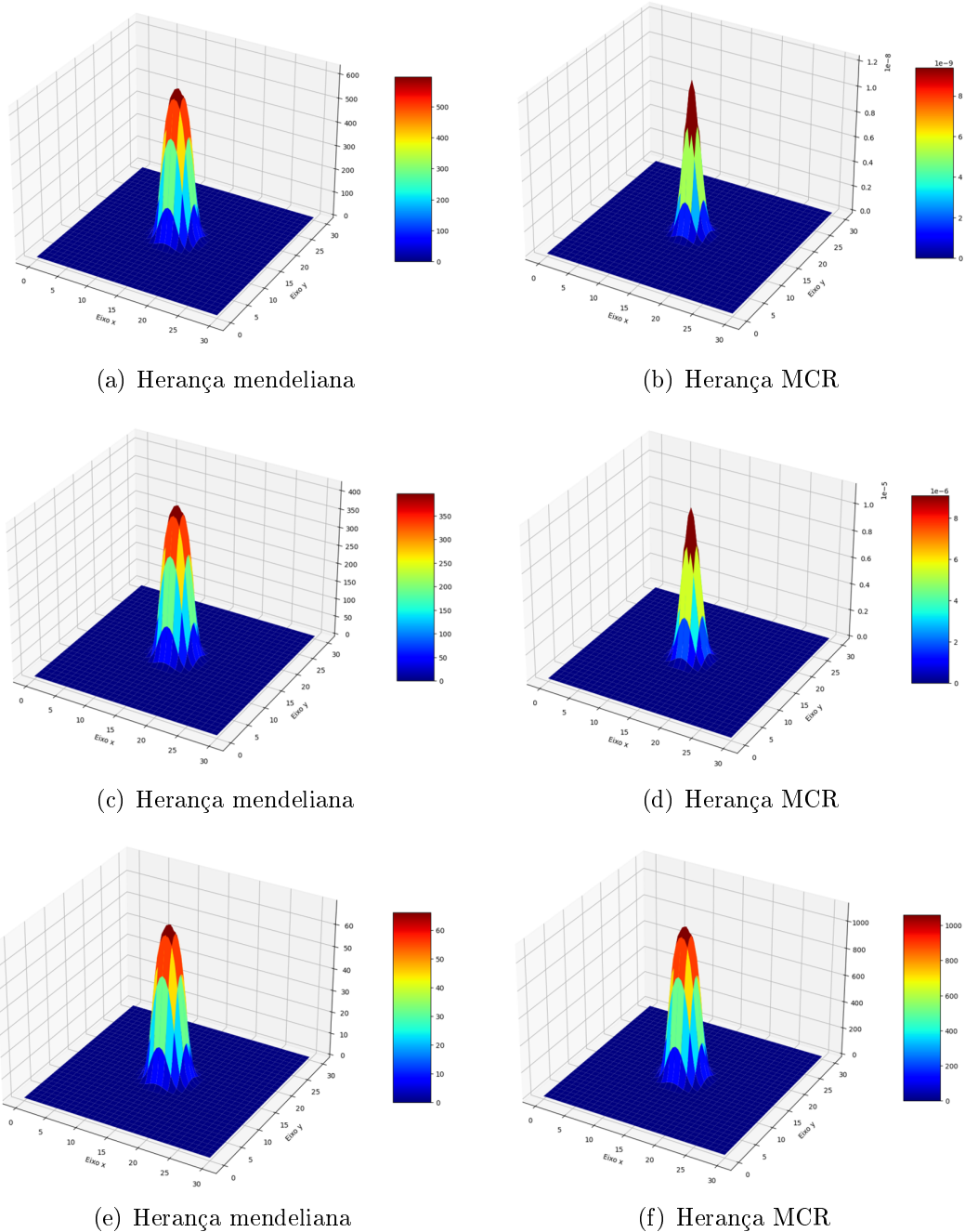


Figura 4.2: Comparação entre a população de mosquitos selvagens (a-b), homozigotos (c-d) e heterozigotos (e-f), em 6 semanas utilizando a herança mendeliana e a herança MCR.

Em 13 semanas observa-se um maior crescimento e espalhamento da população de mosquitos, conforme pode ser visto na Figura 4.3.

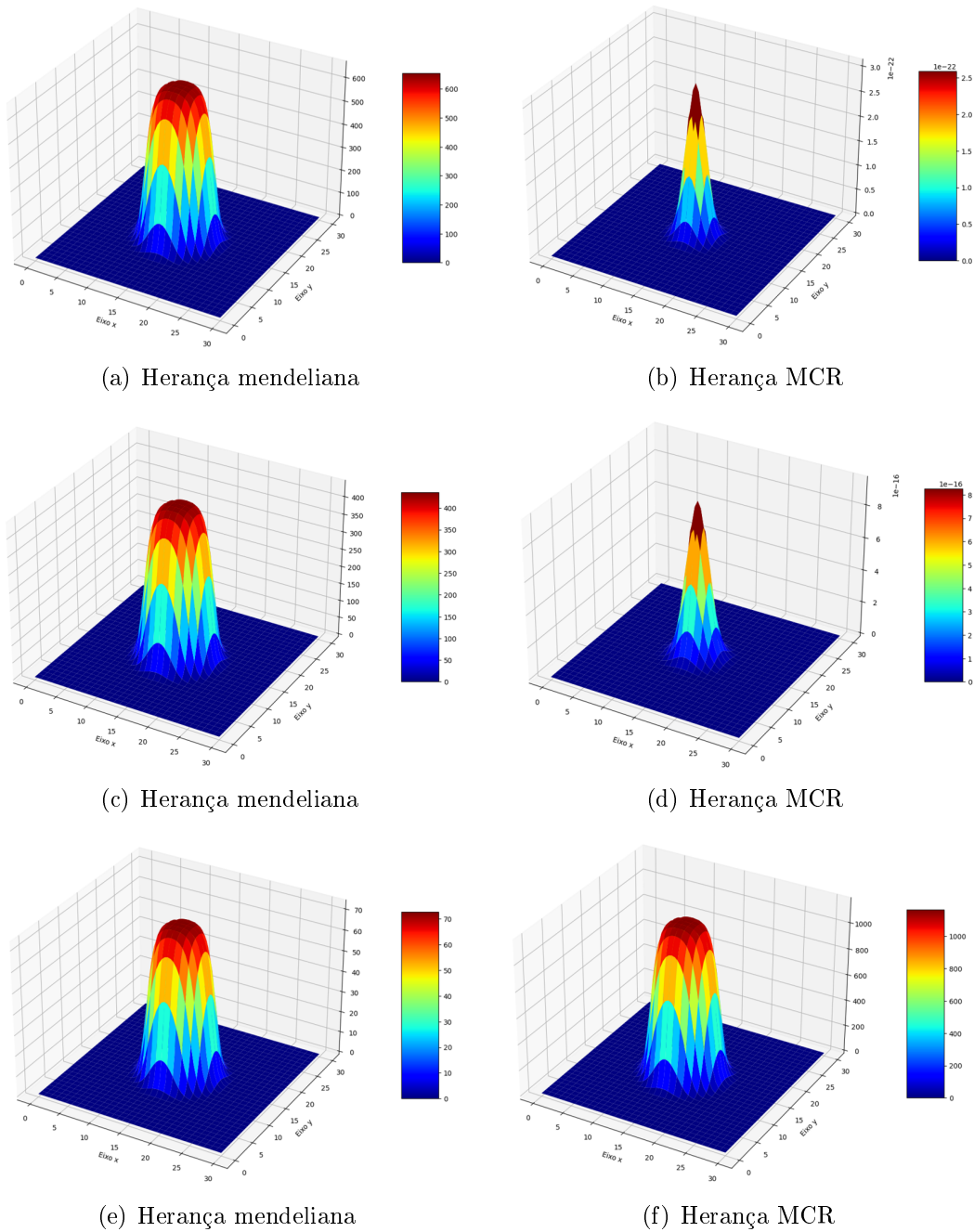


Figura 4.3: Comparação entre a população de mosquitos selvagens (a-b), homozigotos (c-d) e heterozigotos (e-f), em 13 semanas utilizando a herança mendeliana e a herança MCR.

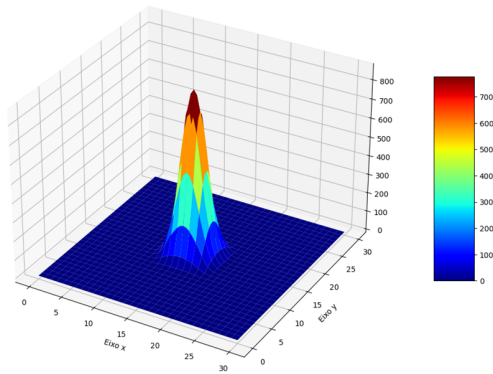
**Experimento 1b:** Neste experimento, simulamos o comportamento dos mosquitos ainda admitindo a mesma quantidade inicial do Experimento 1, ou seja, 1000 mosquitos selvagens e 1000 mosquitos transgênicos heterozigotos, mantendo a mesma distribuição espacial inicial para os mosquitos selvagens e considerando a quantidade de mosquitos transgênicos heterozigotos distribuída homogeneamente em uma região mais abrangente, compreendendo o domínio  $[12, 5; 17, 5] \times [12, 5; 17, 5](km^2)$ . Esta nova distribuição é descrita pelas condições iniciais

$$u_1(x, y, 0) = \begin{cases} 250, & \text{se } 14 \leq x \leq 16 \text{ e } 14 \leq y \leq 16, \\ 0, & \text{se } 0 \leq x < 14 \text{ e } 16 < x \leq 30; 0 \leq y < 14 \text{ e } 16 < y \leq 30, \end{cases} \quad (4.2)$$

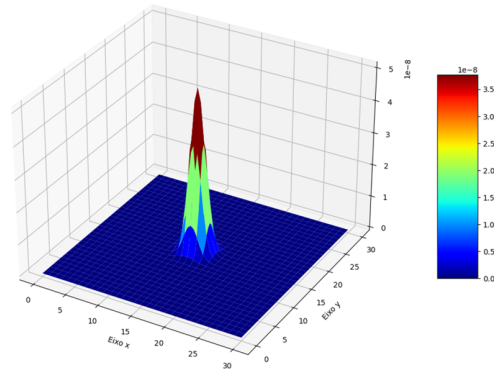
$$u_2(x, y, 0) = \begin{cases} 40, & \text{em } 12,5 \leq x \leq 17,5 \text{ e } 12,5 \leq y \leq 17,5 \\ 0, & \text{em } 0 \leq x < 12,5 \text{ e } 17,5 < x \leq 30; 0 \leq y < 12,5 \text{ e } 17,5 < y \leq 30, \end{cases}$$

$$u_3(x, y, 0) = 0. \quad (4.3)$$

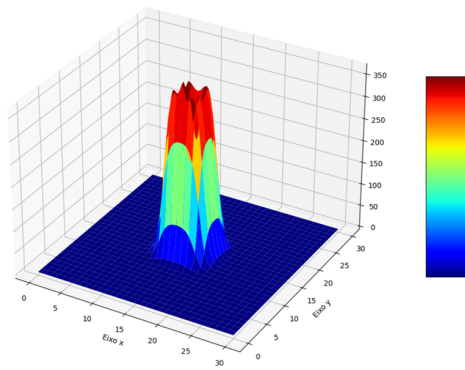
Esta dinâmica significa que, após identificado um foco de mosquitos selvagens, uma quantidade equivalente de mosquitos transgênicos heterozigotos equivalente é liberada, porém, não apenas sobre o foco, mas também no seu entorno, neste caso,  $1,5Km^2$  além dos limites do foco de mosquitos selvagens. Após 6 e 13 semanas, Figuras 4.4 e 4.5 respectivamente, mostram a dinâmica e espalhamento de mosquitos selvagens, transgênicos heterozigotos e homozigotos sob as condições iniciais 4.2. Essas Figuras ilustram mais uma vez a prevalência dos mosquitos transgênicos homozigotos em relação aos mosquitos selvagens e transgênicos heterozigotos.



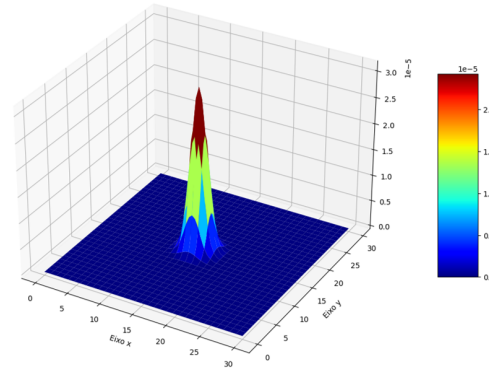
(a) Herança mendeliana



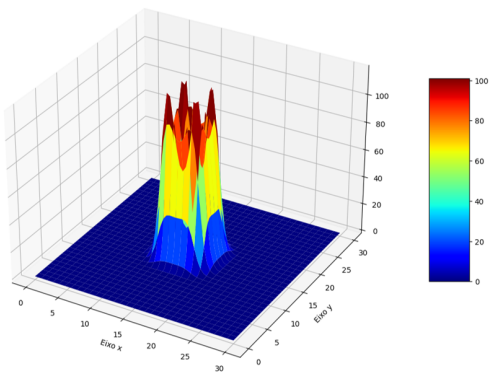
(b) Herança MCR



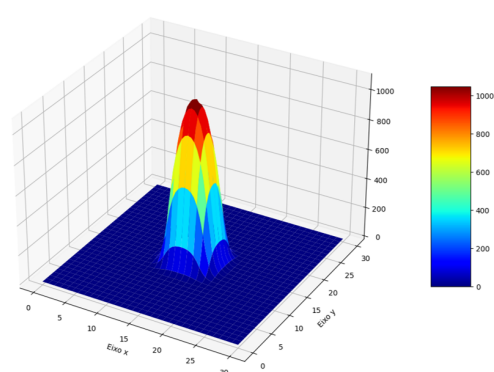
(c) Herança mendeliana



(d) Herança MCR

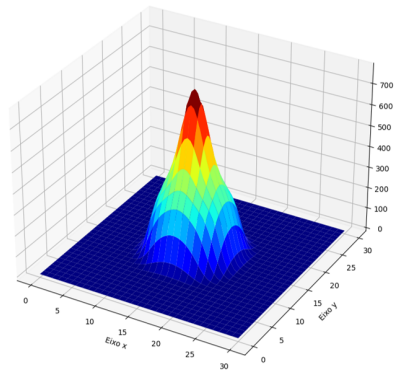


(e) Herança mendeliana

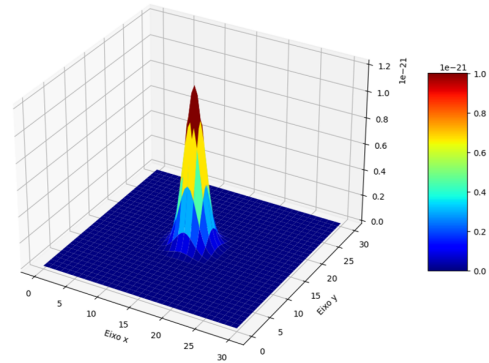


(f) Herança MCR

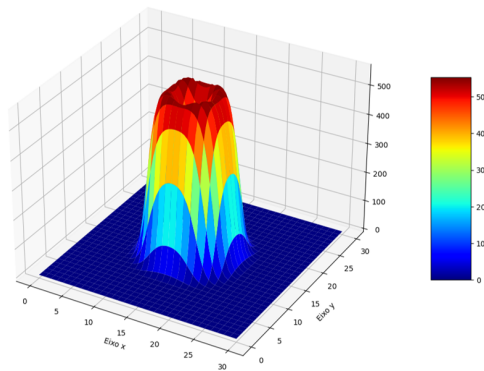
Figura 4.4: Comparação entre a população de mosquitos selvagens (a-b), homozigotos (c-d) e heterozigotos (e-f), em 6 semanas utilizando a herança mendeliana e a herança MCR.



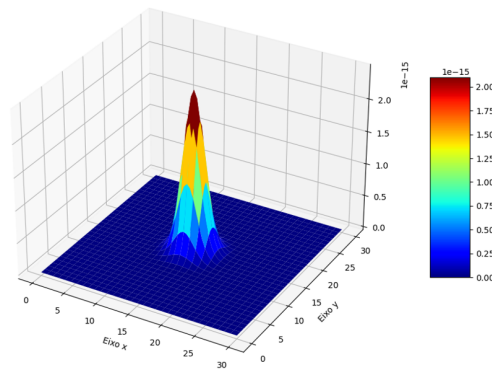
(a) Herança mendeliana



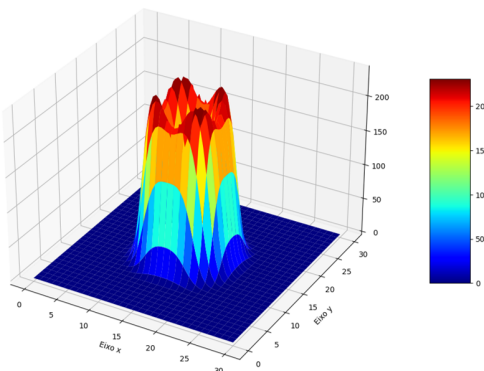
(b) Herança MCR



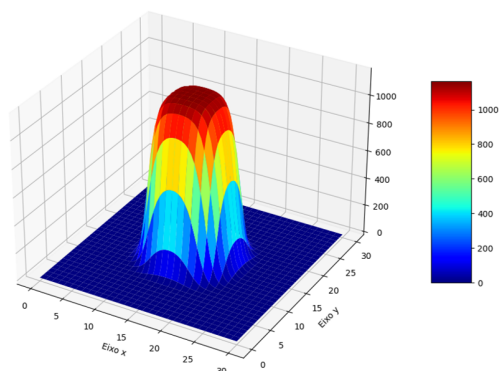
(c) Herança mendeliana



(d) Herança MCR



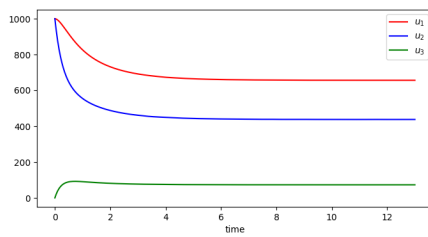
(e) Herança mendeliana



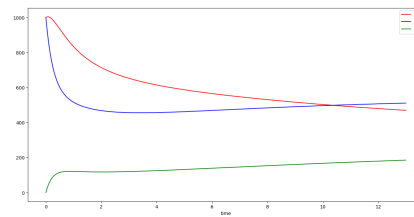
(f) Herança MCR

Figura 4.5: Comparação entre a população de mosquitos selvagens (a-b), homocigotos (c-d) e heterocigotos (e-f), em 13 semanas utilizando a herança mendeliana e a herança MCR.

**Experimento 2:** Neste experimento, modificamos a taxa de conversão de  $c = 0,8$  para  $c = 0,1$ , o que significa que mosquitos transgênicos heterozigotos são convertidos para mosquitos transgênicos homozigotos a uma taxa de 10%. Conser-  
vando os dados utilizados na Tabela 4.3 e considerando as condições iniciais em 4.1. Para uma herança MCR com tais características ocorreu uma situação de coexis-  
tência das três variedades de mosquitos com prevalência dos mosquitos transgênicos heterozigotos. O comportamento visto na dinâmica espaço temporal apresentada na  
Figura 4.6 também é refletido nas Figuras 4.7 e 4.8

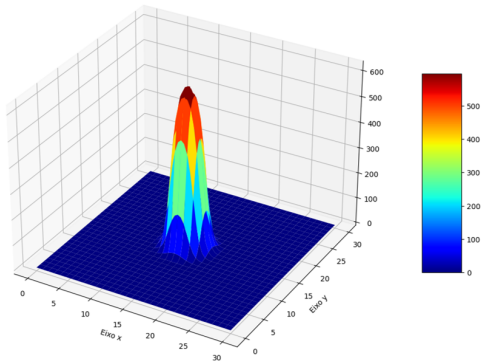


(a) Herança mendeliana.

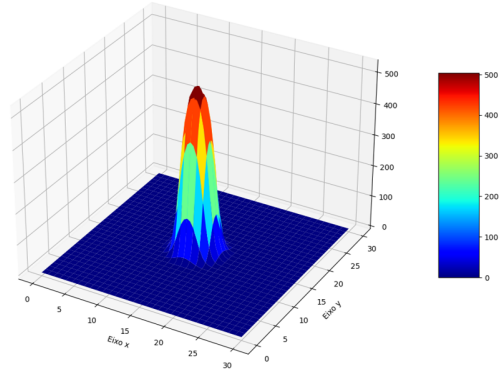


(b) Herança MCR.

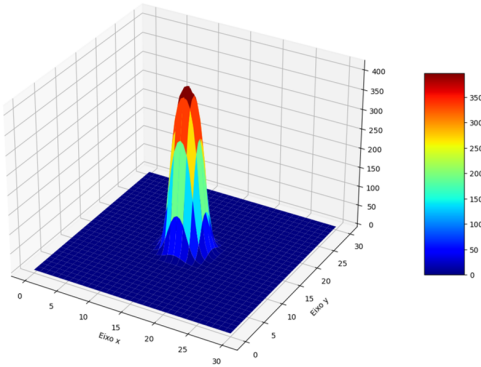
Figura 4.6: Dinâmica temporal de  $u_1$ ,  $u_2$  e  $u_3$



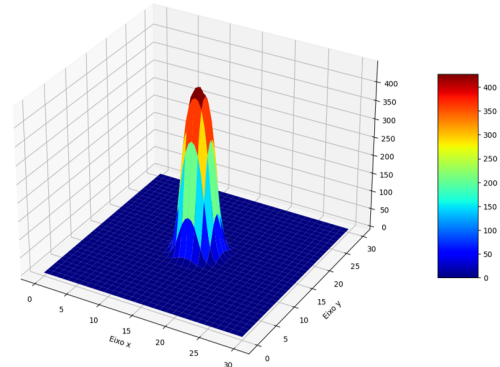
(a) Herança mendeliana



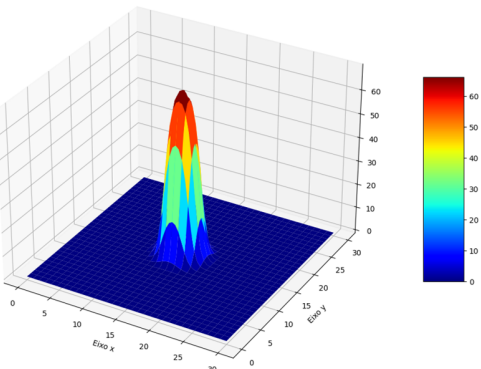
(b) Herança MCR



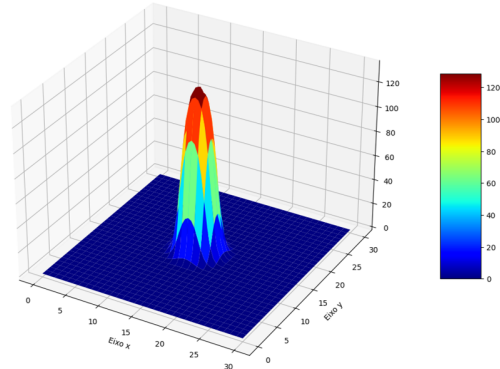
(c) Herança mendeliana



(d) Herança MCR

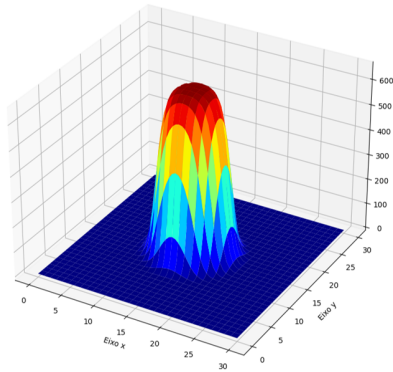


(e) Herança mendeliana

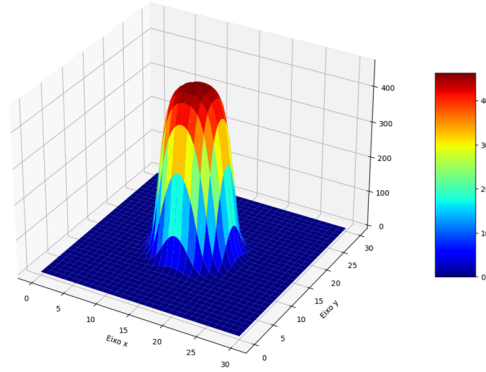


(f) Herança MCR

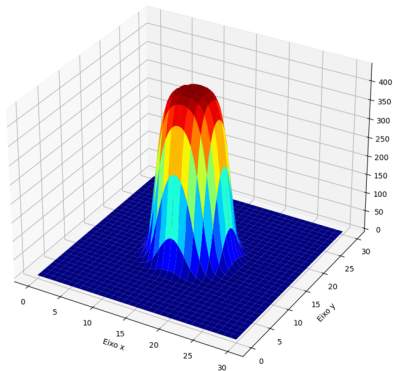
Figura 4.7: Comparação entre a população de mosquitos selvagens (a-b), homozigotos (c-d) e heterozigotos (e-f), em 6 semanas utilizando a herança mendeliana e a herança MCR.



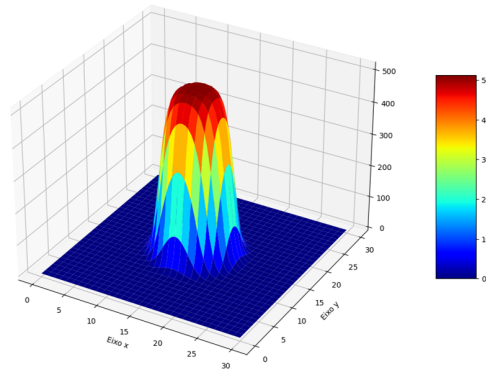
(a) Herança mendeliana



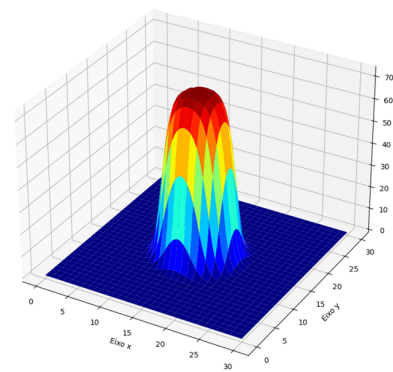
(b) Herança MCR



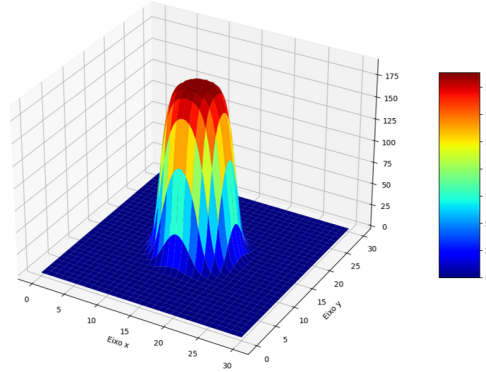
(c) Herança mendeliana



(d) Herança MCR



(e) Herança mendeliana



(f) Herança MCR

Figura 4.8: Comparação entre a população de mosquitos selvagens (a-b), homozigotos (c-d) e heterozigotos (e-f), em 6 semanas utilizando a herança mendeliana e a herança MCR.

# Capítulo 5

## Considerações Finais

Neste trabalho foi proposta uma solução numérica para um modelo bidimensional que rege a dinâmica e espalhamento dos mosquitos selvagens e transgênicos. Esse modelo foi proposto por ROLIM *et al.* [29]. Para a solução numérica do problema, aplicamos a técnica de Decomposição de Operadores, que nos permitiu resolver o problema de difusão separado do problema de reação.

Para resolver o problema de difusão, utilizamos um método de diferenças finitas, o Método Implícito de Direções Alternadas (ADI), e para o termo de reação foi utilizado um método de Runge-Kutta de quarta ordem. Para a implementação computacional utilizamos a linguagem de programação Python, além disso, podemos destacar a baixa complexidade de implementação dos algoritmos utilizados, porém, com um custo computacional relevante.

Comparando a eficiência da herança do método de Reação em Cadeira Mutagênica (MCR) em relação a herança mendeliana clássica, verificamos que nos experimentos considerando uma taxa de conversão  $c = 0,8$ , coeficiente de seleção  $s = 0,3$  e grau de dominância do *fitness cost*  $h = 0,2$ , os mosquitos homocigotos tiveram suas populações aumentadas, enquanto que, as populações de mosquitos selvagens e mosquitos transgênicos heterocigotos diminuíram, o que demonstra que a técnica foi realizada com sucesso, uma vez que as populações que diminuíram são as responsáveis por transmitir as doenças. Deste modo, os resultados obtidos neste trabalho corroboram com a hipótese de que soluções para doenças transmitidas por mosquitos podem ser combatidas também com mosquitos geneticamente modificados.

Como perspectivas futuras, sugerimos considerar o tipo de vegetação sobre a difusão dos mosquitos, os efeitos de sazonalidade que interferem na capacidade de suporte do ambiente e/ou na taxa de emergência dos mosquitos para a fase adulta. Além disso, implementar efeitos estocásticos nos coeficientes, mais especificamente na difusão, tais parâmetros permitirá descrever a dinâmica e o espalhamento de mosquitos geneticamente modificados com mais precisão.

# Referências Bibliográficas

- [1] AMENYA, D. A., BONIZZONI, M., ISAACS, A. T., et al., 2010, “Comparative fitness assessment of *Anopheles stephensi* transgenic lines receptive to site-specific integration”, *Insect Molecular Biology*, v. 19, n. 2, pp. 263–269. doi: <https://doi.org/10.1111/j.1365-2583.2009.00986.x>. Disponível em: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1111/j.1365-2583.2009.00986.x>.
- [2] COUTO, P. R. L., 2006, *Modelagem computacional do transporte de contaminantes com processos de biodegradação e sorção física em um meio poroso saturado*. Tese de Mestrado, Laboratório Nacional de Computação Científica, Petrópolis. Disponível em: <https://tede.lncc.br/handle/tede/92>.
- [3] DE FIGUEIREDO, D., NEVES, A., 2008, “Equações diferenciais aplicadas”. Coleção matemática universitária. IMPA. ISBN: 9788524402821.
- [4] 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. ISSN: 0022-5193. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jtbi.2011.01.053>. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022519311000798>.
- [5] DOUGLAS, J., GUNN, J. E., 1964, “A general formulation of alternating direction methods”, *Numerische Mathematik*, v. 6, n. 1 (Dec), pp. 428–453. ISSN: 0945-3245. doi: 10.1007/BF01386093. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/BF01386093>.
- [6] DOUGLAS, J., RACHFORD, H. H., 1956, “On the Numerical Solution of Heat Conduction Problems in Two and Three Space Variables”, *Transactions of the American Mathematical Society*, v. 82, n. 2, pp. 421–439. ISSN: 00029947. Disponível em: <http://www.jstor.org/stable/1993056>.

- [7] FONTANA, E., 2019, *Introdução ao Método de Diferenças Finitas com Aplicações em Engenharia Química*, v. 1. Universidade Federal do Paraná - UFPR.
- [8] FRANCO, N. M. B. F., 2006, *Cálculo Numérico*. Brasil, Pearson Universidades. ISBN: 8576050870.
- [9] GANTZ, V., BIER, E., 2015, “The mutagenic chain reaction: A method for converting heterozygous to homozygous mutations”, *Science*, v. Vol. 348 (03), pp. pp. 442–444. doi: 10.1126/science.aaa5945.
- [10] 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. E6736–E6743. doi: 10.1073/pnas.1521077112. Disponível em: <<https://www.pnas.org/doi/abs/10.1073/pnas.1521077112>>.
- [11] GEISER, J., 2009, *Decomposition Methods for Differential Equations: Theory and Applications*. Chapman & Hall/CRC Numerical Analysis and Scientific Computing Series. CRC Press. ISBN: 9781439810972.
- [12] GLOWINSKI, R., OSHER, S. J., YIN, W., 2017, *Splitting methods in communication, imaging, science, and engineering*. Springer.
- [13] HELLANDER, A., HELLANDER, S., LÖTSTEDT, P., 2012, “Coupled Mesoscopic and Microscopic Simulation of Stochastic Reaction-Diffusion Processes in Mixed Dimensions”, *Multiscale Modeling & Simulation*, v. 10, n. 2, pp. 585–611. doi: 10.1137/110832148. Disponível em: <<https://doi.org/10.1137/110832148>>.
- [14] HELLANDER, A., LAWSON, M. J., DRAWERT, B., et al., 2014, “Local error estimates for adaptive simulation of the reaction–diffusion master equation via operator splitting”, *Journal of Computational Physics*, v. 266, pp. 89–100. ISSN: 0021-9991. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2014.02.004>. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999114000989>>.
- [15] HILDEBRAND, F., 1968, *Finite-difference equations and simulations*. Englewood Cliffs, New Jersey, Prentice-Hall, Inc.
- [16] HIRSCH, C., 2007, *Numerical Computation of Internal and External Flows: The Fundamentals of Computational Fluid Dynamics*. Elsevier Science. ISBN: 9780080550022.

- [17] HOFFMANN, K., CHIANG, S., 1993, *Computational Fluid Dynamics for Engineers*. N. v. 1, Computational Fluid Dynamics for Engineers. Engineering Education System. ISBN: 9780962373176.
- [18] KNIPLING, E. F., 1959, “Sterile-Male Method of Population Control”, *Science*, v. 130, n. 3380, pp. 902–904. doi: 10.1126/science.130.3380.902. Disponível em: <<https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.130.3380.902>>.
- [19] LI, J., 2004, “Simple mathematical models for interacting wild and transgenic mosquito populations”, *Math Biosci*, v. 189, n. 1, pp. 39–59.
- [20] LI, J., 2008, “Differential equations models for interacting wild and transgenic mosquito populations”, *Journal of Biological Dynamics*, v. 2, n. 3, pp. 241–258. doi: 10.1080/17513750701779633. Disponível em: <<https://doi.org/10.1080/17513750701779633>>. PMID: 22876868.
- [21] MALTHUS, T., 1798, *An Essay on the Principle of Population*. London: John Murray.
- [22] MOREIRA, L. A., WANG, J., COLLINS, F. H., et al., 2004, “Fitness of Anopheline Mosquitoes Expressing Transgenes That Inhibit Plasmodium Development”, *Genetics*, v. 166, n. 3 (03), pp. 1337–1341. ISSN: 1943-2631. doi: 10.1534/genetics.166.3.1337. Disponível em: <<https://doi.org/10.1534/genetics.166.3.1337>>.
- [23] ODENCRANTZ, J. E., 1992, *Modeling the biodegradation kinetics of dissolved organic contaminants in a heterogeneous two-dimensional aquifer*. Tese de Mestrado, University of Illinois at Urbana-Champaign, USA. Disponível em: <<https://www.ideals.illinois.edu/items/22581>>.
- [24] OLIVEIRA, M. F. D., 2017, *Estudo do comportamento antropofílico de mosquitos selvagens e transgênicos baseado em um modelo de reação-difusão-quimiotaxia*. Tese de Mestrado, Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa. Disponível em: <<https://repositorio.ufpb.br/jspui/handle/123456789/12918>>.
- [25] PEACEMAN, D. W., RACHFORD, H. H., 1955, “The Numerical Solution of Parabolic and Elliptic Differential Equations”, *Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics*, v. 3, n. 1, pp. 28–41. ISSN: 03684245. Disponível em: <<http://www.jstor.org/stable/2098834>>.

- [26] RAFIKOV, M., BEVILACQUA, L., WYSE, A., 2009, “Optimal control strategy of malaria vector using genetically modified mosquitoes”, *Journal of Theoretical Biology*, v. 258, n. 3, pp. 418–425. ISSN: 0022-5193. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jtbi.2008.08.006>. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022519308004190>. Special Issue: Mathematics in Biointeractions.
- [27] RAMALHO, M., DOS SANTOS, J., PINTO, C., 1990, *Genética na agropecuária*. Publicações globo rural. FAEPE. ISBN: 9788525006776.
- [28] REYES, A., DÍAZ, H., OLARTE, A., 2012, “An Agent-Based Model For The Control Of Malaria Using Genetically Modified Vectors”. pp. 31–36, 05. ISBN: 9780956494443. doi: 10.7148/2012-0031-0036.
- [29] ROLIM, M. A. P., SANTOS, A. J. B. D., WYSE, A. P. P., 2019, *Modelagem bidimensional da dinâmica e espalhamento de mosquitos selvagens e transgênicos*. Tese de Mestrado, Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa. Disponível em: <https://repositorio.ufpb.br/jspui/handle/123456789/182789>.
- [30] SILVA, E. V. D., 2020, *Modelagem matemática do uso da bactéria Wolbachia como meio de controle da população de mosquitos Aedes aegypti*. Tese de Mestrado, Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa. Disponível em: <https://repositorio.ufpb.br/jspui/handle/123456789/18597>.
- [31] TAKKEN, W., SCOTT, T. W., 2003, *Ecological aspects for application of genetically modified mosquitoes*, v. 2. Springer Science & Business Media.
- [32] VERHULST, P.-F., 1838, “Notice sur la loi que la population poursuit dans son accroissement.” *Correspondance Mathématique et Physique*. 10, pp. 113–121.
- [33] WATSON, J., 2014, *Molecular Biology of the Gene*. Always learning. Pearson. ISBN: 9780321762436.
- [34] WYSE, A. P., SANTOS, A. J. B. D., AZEVEDO, J. D. S., et al., 2018, “Modeling the spreading and interaction between wild and transgenic mosquitoes with a random dispersal”, *PLOS ONE*, v. 13, n. 10 (10), pp. 1–25. doi: 10.1371/journal.pone.0205879. Disponível em: <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0205879>.
- [35] WYSE, A. P., SANTOS, A. J. B. D., AZEVEDO, J. D. S., et al., 2018, “Modeling the spreading and interaction between wild and transgenic

mosquitoes with a random dispersal”, *PLOS ONE*, v. 13, n. 10 (10), pp. 1–25. doi: 10.1371/journal.pone.0205879. Disponível em: <<https://doi.org/10.1371/journal.pone.0205879>>.

# Apêndice A

## Algumas Demonstrações

Diferença progressiva com precisão de segunda ordem;

$$\begin{aligned}(u_{xx})_i &= \frac{1}{h^2} (\delta^{+2} - \delta^{+3}) u_i \\ &= \frac{1}{h^2} (\delta^{+2} u_i - \delta^{+3} u_i) \\ &= \frac{1}{h^2} [(u_{i+2} - 2u_{i+1} + u_i) - (u_{i+3} - 3u_{i+2} + 3u_{i+1} - u_i)] \quad (\text{A.1}) \\ &= \frac{1}{h^2} (2u_i - 5u_{i+1} + 4u_{i+2} - u_{i+3}) + \frac{11}{12} h^2 \left( \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \right)\end{aligned}$$

### A.1 Relações imediatas entre os operadores em (2.24)

**Relação 1**

$$\delta^+ u_i = u_{i+1} - u_i \xrightarrow{\text{Por 2.24a}} E u_i - u_i = u_i (E - 1)$$

logo

$$\delta^+ = (E - 1) \quad (\text{A.2})$$

Para a relação 2 temos que introduzir o operador  $E^{-1}$  o inverso do operador de deslocamento definido como

$$E^{-1} u_i = u_{i-1} \quad (\text{A.3})$$

**Relação 2**

$$\delta^- u_i = u_i - u_{i-1} = u_i - E^{-1} u_i = (1 - E^{-1}) u_i$$

logo

$$\delta^- = (1 - E^{-1}) \text{ e } E^{-1} u_i = u_{i-1} \quad (\text{A.4})$$

### Relação 3

$$\begin{aligned}\delta^- u_i - u_{i-1} &= E^{-1}u_{i+1} - u_{i-1} \\ &= E^{-1}u_{i+1} - E^{-1}u_i \\ &= E^{-1}(u_{i+1} - u_i) \\ &= E^{-1}\delta^+ u_i\end{aligned}\tag{A.5}$$

### Relação 4

$$\begin{aligned}\delta^+ \delta^- u_i &= \delta^+(u_i - u_{i-1}) = [(u_{i+1} - u_i) - (u_i - u_{i-1})] \\ &= \delta^- u_{i+1} - \delta^- u_i \\ &= \delta^-(u_{i+1} - u_i) \\ &= u_i \delta^- \delta^+ \\ \Rightarrow \delta^+ \delta^+ &= \delta^- \delta^+\end{aligned}\tag{A.6}$$

### Relação 5

$$\begin{aligned}\delta^+ \delta^- u_i &= [(u_{i+1} - u_i) - (u_i - u_{i-1})] \\ &= \delta^+ u_i - \delta^- u_i \\ &= u_i(\delta^+ - \delta^-)\end{aligned}\tag{A.7}$$

### Relação 6

$$\begin{aligned}\delta u_i &= u_{i+1/2} - u_{i-1/2} \\ \delta \delta u_i &= \delta u_{i+1/2} - \delta u_{i-1/2} \\ &= (u_{i+1/2+1/2} - u_{i+1/2-1/2}) - (u_{i-1/2+1/2} - u_{i-1/2-1/2}) \\ &= (u_{i+1} - u_i) - (u_i - u_{i-1}) \\ &= \delta^+ \delta^- u_i = \delta^- \delta^+ u_i\end{aligned}\tag{A.8}$$

É possível representar também o operador  $\delta$  de uma outra forma, vejamos

$$\delta u_i = u_{i+1/2} - u_{i-1/2} = E^{1/2}u_i - E^{-1/2}u_i \Rightarrow \delta = E^{1/2} - E^{-1/2}\tag{A.9}$$

### Relação 7

$$\begin{aligned}\bar{\delta}u_i &= \frac{1}{2}(u_{i+1} - u_{i-1}) \\ &= \frac{1}{2}(Eu_i - E^{-1}u_i) \\ \Rightarrow \bar{\delta} &= \frac{1}{2}(E - E^{-1})\end{aligned}\tag{A.10}$$

### Relação 8

$$\begin{aligned}\mu u_i &= \frac{1}{2}(u_{i+1/2} + u_{i-1/2}) \\ &= \frac{1}{2}(E^{1/2}u_i + E^{-1/2}u_i) \\ \Rightarrow \mu &= \frac{1}{2}(E^{1/2} + E^{-1/2})\end{aligned}\tag{A.11}$$