



Universidade de Brasília

Instituto de Física  
Grupo de Sistemas Complexos

# **Estudo da Formação de Padrão em Dinâmica de Populações através das Equações de Reação-Difusão**

Orestes Tumbarell Aranda

Brasília  
2020



Universidade de Brasília

Instituto de Física  
Grupo de Sistemas Complexos

# **Estudo da Formação de Padrão em Dinâmica de Populações através das Equações de Reação-Difusão**

Orestes Tumbarell Aranda

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

Orientador

Prof. Dr. Fernando Albuquerque de Oliveira

Coorientador

Prof. Dr. André Luis Almeida Penna

Brasília  
2020

AAR662e Aranda, Orestes Tumbarell  
Estudo da Formação de Padrão em Dinâmica de Populações  
através das Equações de Reação-Difusão / Orestes Tumbarell  
Aranda; orientador Fernando Albuquerque de Oliveira; co  
orientador André Luis Almeida Penna. -- Brasília, 2020.  
109 p.

Tese (Doutorado - Doutorado em Física) -- Universidade de  
Brasília, 2020.

1. Formação de Padrão. 2. Equações de Reação-Difusão. 3.  
Kernel não local. 4. Dinâmica de Populações. 5. Populações  
Bacterianas. I. de Oliveira, Fernando Albuquerque, orient.  
II. Penna, André Luis Almeida, co-orient. III. Título.



Universidade de Brasília

Instituto de Física  
Grupo de Sistemas Complexos

## **Estudo da Formação de Padrão em Dinâmica de Populações através das Equações de Reação-Difusão**

Orestes Tumbarell Aranda

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

Aprovada por:

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

Prof. Dr. Tarcísio Marciano Rocha Filho  
IF/UnB

Prof. Dr. Marco Aurélio Barbosa  
UnB - Planaltina

Prof. Dr. Jefferson Adriany Ribeiro da Cunha  
UFG

Prof. Dr. Bernardo de Assunção Mello  
IF/UnB

Prof. Dr. Sebastião William da Silva  
Coordenador do Programa de Pós-graduação em Física

Brasília, 17 de abril de 2020



# Dedicatória

*A mim mesmo, pelo trabalho realizado.*

# Agradecimentos

Ao Professor Fernando Albuquerque de Oliveira, pela oportunidade pela oportunidade de estudar na UnB.

Aos meus colegas de grupo, a minha família, assim como a todos aqueles que de uma forma ou de outra me ajudaram.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

# Resumo

A evolução temporal de uma população é estudada utilizando equações de reação-difusão. Partindo de uma formulação baseada em operadores não locais, é proposto um modelo que tem como casos particulares várias das equações tradicionalmente empregadas nas pesquisas sobre dinâmica de populações. Então, utilizando uma forma funcional relativamente simples do kernel não local determinamos as condições sob as quais a população analisada desenvolve padrões espaciais, assim como as principais características dos mesmos. Finalmente estabelecemos uma relação entre o modelo desenvolvido e sistemas reais, ao fazer simulações de populações bacterianas submetidas a condições não homogêneas de iluminação. Nosso modelo reproduz alguns dos resultados experimentais que outros modelos empregados anteriormente não tinham conseguido obter.

**Palavras-chave:** Formação de Padrão, Equações de Reação-Difusão, Kernel não local, Dinâmica de Populações, Populações Bacterianas.

# Abstract

The temporal evolution of a population is studied using reaction-diffusion equations. We proposed a model based on non-local operators that has several of the equations traditionally used in research on population dynamics as particular cases. Then, using a relatively simple functional form of the non-local kernel, we determine the conditions under which the analyzed population develops spatial patterns, as well as their main characteristics. Finally, we establish a relationship between the developed model and real systems by making simulations of bacterial populations subjected to non-homogeneous lighting conditions. Our model reproduces some of the experimental results that other models employed previously had not been able to obtain.

**Keywords:** Pattern Formation, Reaction-Diffusion Equations, Non-local Kernel, Population Dynamics, Bacterial Populations.

# Sumário

Lista de figuras	xii
Lista de tabelas	xiii
Lista de Abreviaturas e Siglas	xiv
Lista de Símbolos	xv
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2 Equações de reação-difusão</b>	<b>7</b>
<b>3 Uma equação geral para a dinâmica de populações</b>	<b>12</b>
3.1 Introdução do capítulo . . . . .	12
3.2 Solução analítica para a equação não local . . . . .	17
3.3 Estudando diferentes configurações . . . . .	23
3.3.1 Um coeficiente não nulo . . . . .	24
3.3.2 Dois coeficientes não nulos . . . . .	27
3.3.3 Três coeficientes não nulos (CM) . . . . .	29
3.3.4 CM <i>corrigida</i> . . . . .	33
3.4 Conclusão do capítulo . . . . .	36
<b>4 Simulações</b>	<b>37</b>
4.1 Introdução do capítulo . . . . .	37

4.2	Implementação computacional . . . . .	37
4.3	Resultados das simulações . . . . .	40
4.3.1	Influência das condições iniciais . . . . .	42
4.3.2	Comparando as simulações com os modelos . . . . .	44
4.4	Conclusão do capítulo . . . . .	46
<b>5</b>	<b>Reação às mudanças do ambiente</b>	<b>49</b>
5.1	Introdução do capítulo . . . . .	49
5.2	Trabalho numérico . . . . .	51
5.2.1	A equação de Fisher . . . . .	51
5.2.2	Considerando a não localidade . . . . .	56
5.3	Entendendo o parâmetro $\beta$ . . . . .	59
5.4	Conclusão do capítulo . . . . .	62
<b>6</b>	<b>Conclusões</b>	<b>64</b>
	<b>Apêndices</b>	<b>69</b>
<b>A</b>	<b>A equação de Riccati</b>	<b>69</b>
A.1	Introdução . . . . .	69
A.2	Soluções analíticas aproximadas da equação de Riccati . . . . .	70
A.3	Algumas soluções exatas . . . . .	74
A.3.1	Exemplo 1 . . . . .	74
A.3.2	Exemplo 2 . . . . .	75
A.3.3	Exemplo 3 . . . . .	76
A.3.4	Exemplo 4 . . . . .	78
A.4	Vários métodos de cálculo . . . . .	79
A.5	Relação entre as discretizações espacial e temporal . . . . .	81
A.6	Comentários finais . . . . .	82
<b>B</b>	<b>Cálculo do coeficiente <math>B_0(t_e)</math> para o caso de dois termos não nulos</b>	<b>84</b>

C Trabalhos publicados ou submetidos para publicação durante o doutorado	86
Referências	87

# Lista de Figuras

1.1	Alguns padrões que encontramos na natureza. . . . .	2
1.2	Alguns padrões que encontramos em nossos trabalhos. . . . .	2
1.3	Partículas elementares. . . . .	3
1.4	Trajetórias de cinco partículas brownianas. . . . .	4
1.5	Propagação do <i>SARS-CoV-2</i> e a <i>COVID-19</i> ao redor do mundo. . . . .	5
3.1	Diagrama de fases obtido a partir de (3.59). . . . .	25
3.2	Diagrama de fases obtido a partir de (B.12). . . . .	29
3.3	$B_0$ vs. $M$ no caso em que $\alpha = 0,005$ ; $\beta = 0,050$ . . . . .	34
4.1	Valores de alguns coeficientes $B_n(t)$ para diferentes combinações de $\alpha$ e $\beta$ . . . . .	41
4.2	Densidade $u(x)$ para as mesmas combinações de $\alpha$ e $\beta$ da figura 4.1. . . . .	41
4.3	Resultados das simulações feitas considerando $\alpha = 0,010$ ; $\beta = 0,100$ e diferentes distribuições iniciais. . . . .	43
4.4	Densidade estacionária para combinações $(\alpha, \beta)$ não degeneradas. . . . .	44
4.5	Densidade estacionária para combinações $(\alpha, \beta)$ não degeneradas. . . . .	46
4.6	Efeito da troca do sinal do coeficiente $B_M$ . . . . .	47
5.1	Perfil de crescimento da densidade ao longo do canal . . . . .	51
5.2	Resultados das simulações feitas sem considerar o parâmetro $\beta$ . . . . .	54
5.3	Resultados das simulações feitas considerando o parâmetro $\beta$ . . . . .	57
5.4	Evolução temporal do sistema com $v = 0,25v_f$ e $\beta = 0,2$ . . . . .	59



6.1	Influência das condições iniciais. . . . .	67
A.1	Soluções exata e aproximada da equação (A.21). . . . .	75
A.2	Soluções exata e aproximada da equação (A.26). . . . .	76
A.3	Soluções exata e aproximada da equação (A.29). . . . .	77
A.4	Soluções exata e aproximada da equação (A.32). . . . .	78
A.5	Valores estacionários da densidade para diferentes valores de $\alpha$ e $\beta$ . . . . .	79

# Lista de Tabelas

3.1	Alguns valores de $n$ para os quais a função $f(k_n\beta)$ toma valores negativos. .	21
3.2	Valores de $M$ , $B_0(t_e)$ e $ B_M(t_e) $ para algumas combinações de $\alpha$ e $\beta$ . . . . .	26
3.3	Valores de $M$ , $B_0(t_e)$ , $ B_M(t_e) $ e $B_{2M}(t_e)$ para algumas combinações de $\alpha$ e $\beta$ . . . . .	28
3.4	Resultados da CM para algumas combinações de $\alpha$ e $\beta$ . . . . .	32
3.5	Degenerescência dos estados. . . . .	35
4.1	Valores dos coeficientes fornecidos pela CM. . . . .	45
4.2	Valores dos coeficientes fornecidos pelas simulações. . . . .	47
A.1	Soluções exata e aproximada da equação (A.21). . . . .	75
A.2	Soluções exata e aproximada da equação (A.26). . . . .	76
A.3	Soluções exata e aproximada da equação (A.29). . . . .	77
A.4	Soluções exata e aproximada da equação (A.32). . . . .	78
A.5	Número de iterações necessárias para atingir o estado estacionário para diferentes passos e combinações de $\alpha$ e $\beta$ . . . . .	80

# Lista de Abreviaturas e Siglas

**CCP** condições de contorno periódicas.

**CM** Configuração Mínima.

**ER** Equação de Riccati.

**ERD** equações de reação-difusão.

**ESFP** estado sem formação de padrão.

**FE** Método Forward-Euler.

**MP** Modelo Padrão.

**Ref.** Referência.

**RK** Método de Runge-Kutta.

# Lista de Símbolos

$\alpha$	Comprimento de correlação de crescimento
$\beta$	Comprimento de correlação de competição
$\hat{H}$	Operador funcional
$a$	Taxa de crescimento da população
$b$	Constante de saturação
$D$	Coefficiente de difusão
$G$	Grandeza arbitrária
$g_\kappa$	Kernel não local
$L$	Tamanho do sistema analisado (no caso unidimensional)
$N_P$	Tamanho da população estudada
$t$	Tempo
$t_e$	Instante de tempo no qual o sistema atinge o estado estacionário
$u$	Densidade populacional
$v$	Velocidade
$x$	Posição

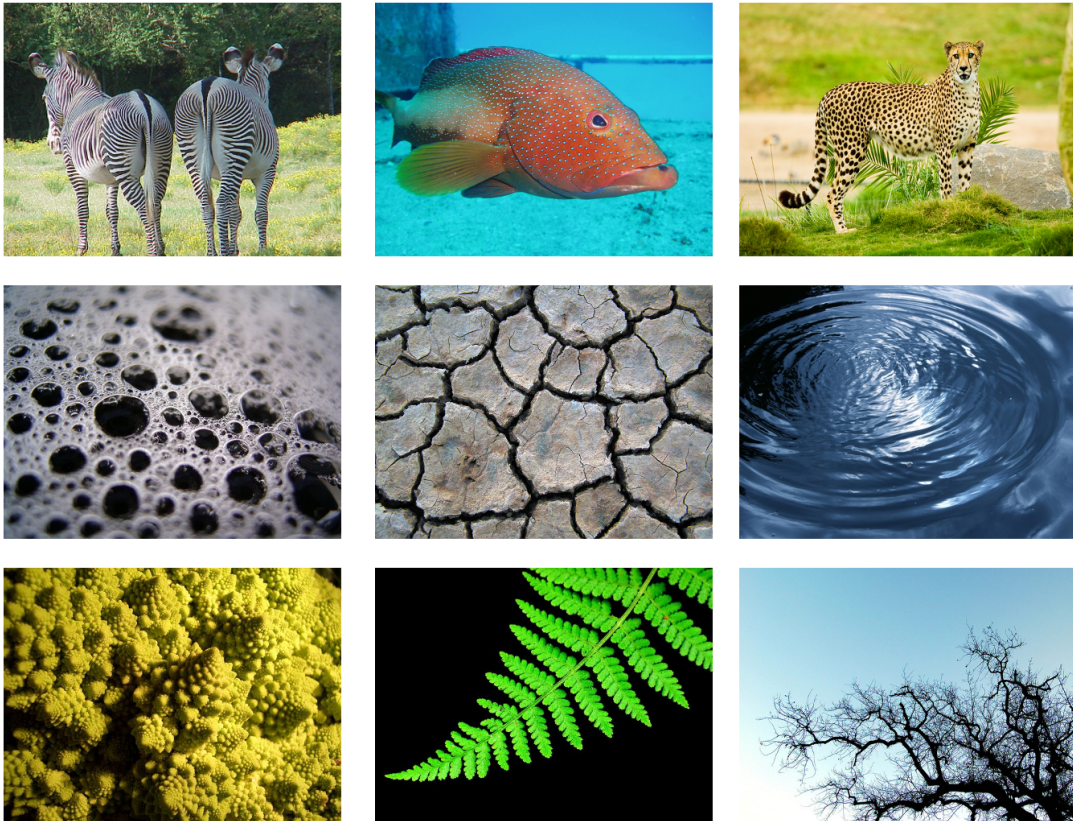
# Capítulo 1

## Introdução

Uma das nossas maiores virtudes como seres humanos é o desejo inato de conhecer, no nível mais fundamental possível, as leis que governam o funcionamento do mundo ao nosso redor. Nessa busca incessante pela verdade, sempre encontramos um conjunto inumerável de fenômenos que, em princípio, não têm relação entre si e que complicam nossa pesquisa. É aqui que, para começar a resolver o problema, aplicamos, quase inconscientemente, um axioma que nasce gravado em nossa mente e que podemos definir da forma seguinte: *“os elementos constituintes dos diferentes sistemas e processos com os quais interagimos, sempre apresentam certa regularidade, de modo que são repetidos de maneira mais ou menos previsível”*.

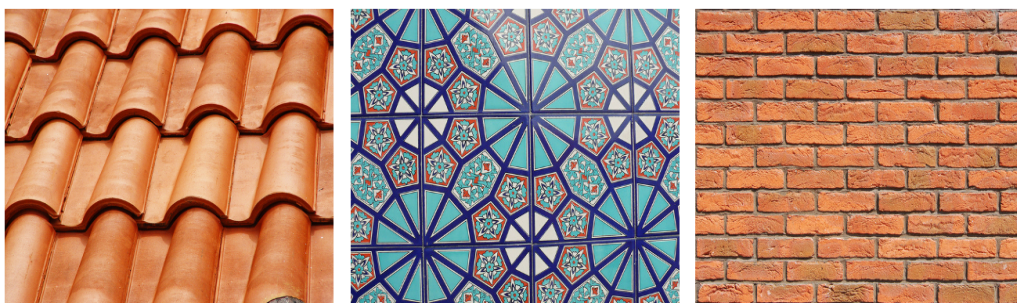
O dito acima significa que sempre seremos capazes de encontrar a presença de padrões que nos ajudarão a compreender melhor nossa realidade. Entendendo como padrão àquela regularidade que podemos perceber na natureza, nos objetos que construímos, e inclusive em nossas ideias [1]. Com isso a presença de padrões resulta evidente, como mostrado nas figuras 1.1 e 1.2, onde se observam diferentes regularidades que normalmente podemos encontrar tanto na natureza como em nossos trabalhos. No caso das criações humanas resulta recorrente a ideia da existência de uma unidade básica a partir da qual se desenvolve toda a estrutura. Os padrões naturais também parecem apresentar certa estrutura básica, que em alguns casos pode ter um caráter fractal, mas, de modo geral,

a regularidade tende a não se repetir exatamente, revelando a presença de certo grau de caos.



<https://www.freeimages.com>

Figura 1.1: Alguns padrões que encontramos na natureza.



<https://www.freeimages.com>

Figura 1.2: Alguns padrões que encontramos em nossos trabalhos.

Por outro lado, a presença de padrões nas ideias abstratas é quase obrigatória, já que as diferentes teorias que desenvolvemos são, em grande parte, a união de diferentes modelos,

ou seja, representações simplificadas da realidade que tentam reproduzir as principais características do fenômeno estudado. Dito de outro modo, um modelo é, em si, um padrão. Assim encontramos que a combinação de diferentes teorias com importantes trabalhos experimentais permitiu o desenvolvimento, estabelecimento e verificação do chamado Modelo Padrão (MP), cujos blocos fundamentais (as partículas elementares das quais está composto o universo) são apresentados na figura 1.3.

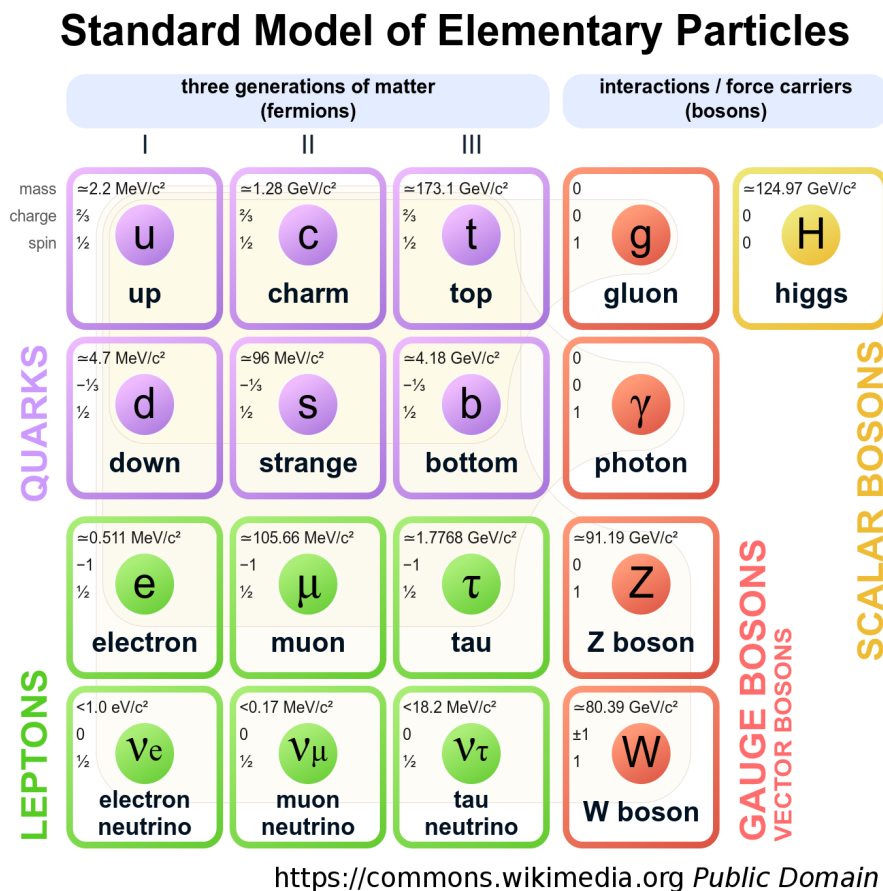


Figura 1.3: Partículas elementares.

No seu estado atual, o MP consegue descrever várias das interações fundamentais: a forte, a fraca e a eletromagnética. Embora não consiga descrever a interação gravitacional, resulta impressionante que a partir da mistura de um número reduzido de partículas elementares (presença de padrões) seja possível construir boa parte do mundo com o qual nos relacionamos diariamente.

Também podemos encontrar padrões em situações onde o caos parece reinar. Esse é o caso da figura 1.4, que mostra as trajetórias de cinco partículas submersas em certo fluido que efetuam o movimento browniano (difusão normal) [2].

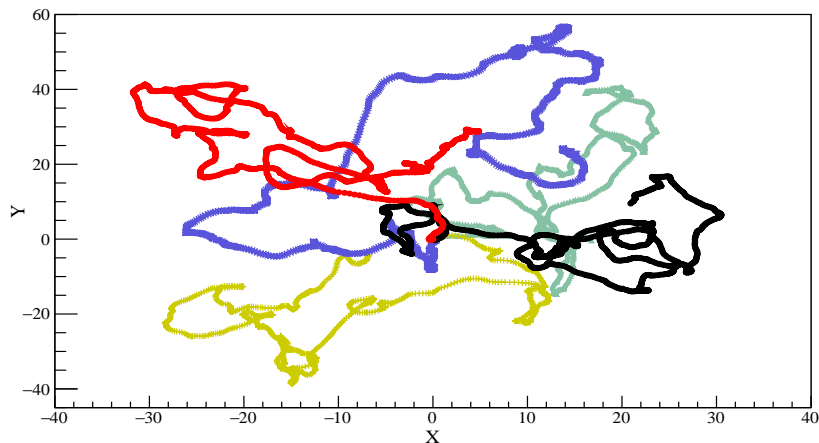


Figura 1.4: Trajetórias de cinco partículas brownianas.

Cada uma das trajetórias foi obtida ao aplicar a segunda lei de Newton na forma

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = -m\gamma_F \vec{v} + \vec{F}(t), \quad (1.1)$$

onde foi assumida a ausência de forças externas. Aqui  $m$  e  $\vec{v}$  representam a massa e a velocidade da partícula estudada. A forma do lado direito de (1.1) se deve aos trabalhos de Langevin [3], que teve a genialidade de dividir a força resultante em dois termos: um termo dissipativo que é assumido proporcional à velocidade, onde  $\gamma_F = \zeta/m$ , sendo  $\zeta$  o coeficiente de viscosidade do fluido; e um termo flutuante  $\vec{F}(t)$  representando uma força estocástica, cujas componentes satisfazem as seguintes condições:

$$\overline{F_i(t)} = \langle F_i(t) \rangle = 0, \quad (1.2)$$

$$\overline{F_i(t')F_i(t'')} = \langle F_i(t')F_i(t'') \rangle = \sigma_D \delta(t' - t''), \quad (1.3)$$

sendo  $\overline{G}$  a média no tempo,  $\langle G \rangle$  a média no ensemble e  $\sigma_D$  uma constante que serve como medida do valor da força estocástica  $F(t)$ . Nas equações (1.2) e (1.3) é assumida a vali-



dade da hipótese ergódica, assim como que as forças correspondentes com dois instantes de tempo diferentes são não correlacionadas (o que implica que o processo analisado é markoviano).

De modo que (1.1) pode ser vista como a superposição de uma força ordenada (fricção) com outra totalmente caótica, cujo origem está nas múltiplas colisões da partícula estudada com às do fluido. A partir dela pode ser obtido o teorema de flutuação-dissipação [4–15], uma ferramenta poderosa para estudar sistemas fora do equilíbrio, e que estabelece uma relação entre ordem e desordem. Esta curiosa interação entre ordem e desordem é um dos elementos que caracteriza o desenvolvimento de uma população. Aqui entendemos por população o conjunto de indivíduos que compartilhem o mesmo espaço em um determinado período, assim que poderiam ser pessoas, átomos, bactérias ou vírus.

No caso das bactérias e dos vírus resulta particularmente evidente a influência que os mesmos têm na vida das pessoas. De modo mais ou menos regular surgem, produto de mutações, novos vírus para os quais não temos defesa, e que se espalham pelo mundo a uma velocidade incrível, sendo o caso mais recente o coronavírus originado presumivelmente a finais de 2019 na cidade china de Wuhan (*SARS-CoV-2*), causante da doença *COVID-2019*. Os sintomas desta doença são muito parecidos com o resfriado comum, podendo acontecer complicações como pneumonia grave, falência de órgãos e morte. A dia de hoje<sup>1</sup> este vírus tem se espalhado por todo o mundo, como mostrado na figura 1.5.

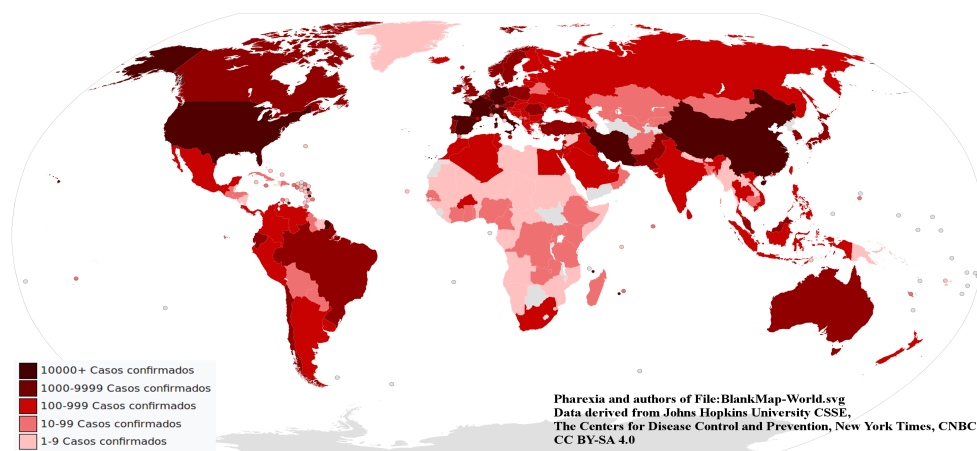


Figura 1.5: Propagação do *SARS-CoV-2* e a *COVID-19* ao redor do mundo.

<sup>1</sup> Dados reportados no final de março de 2020

O conhecimento das condições que levam à ocorrência de mutações e ao estabelecimento de padrões temporais no surgimento de novos vírus é de vital importância tanto para o desenvolvimento de vacinas como para a criação de políticas públicas que minimizem o impacto das epidemias sobre os seres humanos. O mesmo se aplica às populações bacterianas, que frequentemente apresentam comportamentos coletivos que produzem uma maior resistência das mesmas aos antibióticos.

Exemplos como os descritos explicam o porquê do grande interesse existente no estudo da dinâmica das populações, dos padrões que as mesmas podem formar (espaciais, temporais, ou uma mistura de ambos), assim como suas causas. Por isso, os principais objetivos do presente trabalho serão:

1. Estudar o fenômeno da formação de padrões através da utilização das equações de reação-difusão (ERD).
2. Aplicar todo o conhecimento gerado ao estudo de sistemas biológicos, principalmente populações de bactérias.

Visando cumprir esses objetivos vamos desenvolver as seguintes atividades: o Capítulo 2 apresentará as equações de reação-difusão, junto com uma breve panorâmica da evolução do estudo da dinâmica de populações. O Capítulo 3 vai se focar na proposta do nosso grupo para estudar a formação de padrões, a qual será analisada detalhadamente, o que permitirá revisar resultados anteriores e fazer novas propostas, que serão testadas posteriormente no Capítulo 4, que mostra os resultados da implementação computacional do nosso modelo. Já no Capítulo 5 aplicaremos o modelo ao estudo de populações bacterianas, o que nos permitirá reproduzir resultados experimentais que modelos anteriores não tinham conseguido reproduzir. Finalmente no Capítulo 6 será feito um resumo dos principais resultados obtidos, ao tempo que serão apresentadas algumas propostas para trabalhos futuros.

## Capítulo 2

# Equações de reação-difusão

Já no capítulo anterior ficou evidenciada a importância do estudo do comportamento das populações, assim como dos padrões que as mesmas podem formar. Tradicionalmente este tema tem sido abordado a partir do estabelecimento de equações de conservação que levem em conta, da forma mais realista possível, os diferentes fatores que afetam o tamanho da população estudada. De modo que podemos estabelecer que o tamanho da população  $N_P$  vai depender do número de nascimentos ( $N_+$ ) e de mortes ( $N_-$ ), assim como do número de indivíduos que entram ( $N_E$ ) e saem ( $N_S$ ) da região analisada na unidade de tempo, com o qual a equação pode ser escrita como

$$\frac{dN_P}{dt} = N_+ - N_- + N_E - N_S, \quad (2.1)$$

onde a forma de cada um dos termos do lado direito de (2.1) vai depender das características específicas da população sob estudo.

Se não consideramos a migração (em certas situações, os nascimentos (mortes) são matematicamente equivalentes às entradas (saídas)) obtemos que

$$\frac{dN_P}{dt} = c_+ N_P - c_- N_P, \text{ cuja solução é } N_P(t) = N_P(0)e^{(c_+ - c_-)t}, \quad (2.2)$$

sendo  $c_+$  e  $c_-$  constantes positivas, enquanto que os nascimentos e as mortes são considerados como proporcionais a  $N_P$ . Este modelo foi apresentado por Thomas Robert Malthus (de modo inicialmente anônimo) no livro “An Essay on the Principle of Population”, publicado em Londres no ano de 1798, tornando-se uma das obras mais influentes da sua época. De acordo com (2.2), quando  $c_+ > c_-$  a população cresce exponencialmente, e se  $c_+ < c_-$  acontece a extinção da mesma.

O modelo de Malthus não é muito realista, devido a que não existem limites para o crescimento. No entanto, resulta significativo que algumas etapas do crescimento da população humana têm um marcado caráter exponencial [16], o que demonstra o quão difícil é fazer uma predição correta sobre a evolução das populações, sendo necessário o aprimoramento constante dos modelos utilizados.

Uma das razões pelas quais o tamanho de uma população não pode aumentar infinitamente é que a quantidade de recursos necessários para a manutenção da mesma tem um valor finito. Então podemos supor que, de uma forma ou de outra, vai surgindo certa competição entre os indivíduos para acessar esses recursos, limitando o crescimento. Baseado em ideias semelhantes o matemático Pierre Verhulst propôs, em 1838, uma generalização do modelo de Malthus. Concretamente o novo modelo calcula o tamanho da população como

$$\frac{dN_P}{dt} = aN_P(1 - N_P/K), \text{ cuja solução é } N_P(t) = \frac{N_P(0)Ke^{at}}{[K + N_P(0)(e^{at} - 1)]}, \quad (2.3)$$

onde  $a$  e  $K$  são novamente constantes positivas. Verhulst nomeou a equação (2.3) como de *crescimento logístico*. Este modelo resulta mais completo porque leva em consideração a competição existente entre os membros da população, a qual se torna mais evidente com o aumento do número de indivíduos e a diminuição da quantidade de recursos disponíveis. A partir de (2.3) obtemos que  $N_P(t) \rightarrow K$  quando  $t \rightarrow \infty$ , de modo que  $K$ , a denominada *capacidade de suporte*, representa o tamanho da população no estado estacionário, quando

as taxas de nascimentos e mortes se equilibram. Além disso, a constante  $a$  caracteriza à rapidez com que o sistema atinge esse estado.

O Modelo de Verhulst é importante porque leva em conta a competição entre indivíduos da mesma espécie, com o qual consegue descrever corretamente alguns dados experimentais [16]. Ao mesmo tempo serve de base para outros modelos populacionais. No entanto, existem detalhes que o modelo não considera, como as características do movimento dos indivíduos no espaço em que a população analisada se encontra. Já sabemos que o movimento dos integrantes de uma população qualquer vai apresentar sempre uma componente aleatória, o que nos leva a pensar em processos difusivos (embora possam existir outros processos).

Então podemos supor que a dinâmica da população estudada vai obedecer a Lei de Fick, ou seja, que o fluxo dos indivíduos  $\vec{J}_{NP}$  é proporcional ao gradiente da densidade desses mesmos indivíduos  $u_{NP}$  em um determinado ponto:

$$\vec{J}_{NP}(\vec{x}, t) = -D\vec{\nabla}u_{NP}(\vec{x}, t), \quad (2.4)$$

onde  $D$  é o coeficiente de difusão e o sinal negativo indica que os indivíduos se movem das zonas de maior densidade para as zonas de menor nível de ocupação.

Se consideramos a população localizada no volume  $V$  delimitado pela superfície fechada  $S$ , podemos escrever a equação de conservação na forma

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V u_{NP}(\vec{x}, t) dV = - \int_S \vec{J}_{NP}(\vec{x}, t) \cdot d\vec{S} + \int_V \Gamma(u_{NP}, \vec{x}, t) dV, \quad (2.5)$$

que estabelece que a variação do número de indivíduos em  $V$  se deve tanto aos indivíduos que deixam o volume ao atravessar a fronteira delimitada por  $S$  como àqueles que são criados ou destruídos no próprio volume. Aqui  $\Gamma$  é a fonte que cria (ou destrói) os indivíduos. Aplicando o teorema da divergência ao primeiro termo do lado direito de

(2.5) obtemos que

$$\int_S \vec{J}_{N_P}(\vec{x}, t) \cdot d\vec{S} = \int_V \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_{N_P}(\vec{x}, t) dV, \quad (2.6)$$

que ao ser substituído em (2.5) leva, após agrupar convenientemente, à seguinte relação:

$$\int_V \left\{ \frac{\partial u_{N_P}(\vec{x}, t)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_{N_P}(\vec{x}, t) - \Gamma(u_{N_P}, \vec{x}, t) \right\} dV = 0. \quad (2.7)$$

Como o volume  $V$  é arbitrário, o integrando de (2.7) se anula, de modo que podemos escrever a equação de conservação como

$$\frac{\partial u_{N_P}(\vec{x}, t)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_{N_P}(\vec{x}, t) = \Gamma(u_{N_P}, \vec{x}, t), \quad (2.8)$$

a qual é válida para um fluxo geral  $\vec{J}_{N_P}$ , sem importar que o processo seja difusivo ou não.

Na presença de processos difusivos podemos utilizar a relação (2.4), obtendo que

$$\frac{\partial u_{N_P}(\vec{x}, t)}{\partial t} = \Gamma(u_{N_P}, \vec{x}, t) + \vec{\nabla} \cdot (D\vec{\nabla} u_{N_P}(\vec{x}, t)), \quad (2.9)$$

onde  $D$  não precisa ser constante. Esta equação recebe o nome de *equação de reação-difusão*, e a mesma poderia ser generalizada de modo que sejam consideradas situações em que existem várias populações interagindo no mesmo espaço. Nesse caso teríamos um *sistema de reação-difusão*.

Estas equações surgem frequentemente no estudo de sistemas da mais diversa natureza [16–19], dando lugar à aparição de vários fenômenos interessantes, como comportamento crítico, múltiplos estados estacionários, padrões espaciais, frentes de onda e oscilações. A forma do termo fonte  $\Gamma(u_{N_P}, \vec{x}, t)$  resulta fundamental, já que o mesmo está diretamente relacionado com as características específicas do sistema analisado.

Se na equação (2.9) considerássemos  $D$  constante e  $\Gamma$  como sendo o termo logístico apresentado em (2.3), obteríamos que

$$\frac{\partial u_{NP}(\vec{x}, t)}{\partial t} = au_{NP}(\vec{x}, t) [1 - u_{NP}(\vec{x}, t)/K_u] + D\nabla^2 u_{NP}(\vec{x}, t), \quad (2.10)$$

onde trabalhamos com as densidades e não com o tamanho da população. Aqui  $K_u = a/b$ , sendo  $b$  a constante de saturação do sistema. Esta é a *equação de Fisher-Kolmogorov*, cujo nome se deve aos trabalhos quase simultâneos destes científicos. Por um lado a versão unidimensional foi utilizada por Fisher em 1937 para estudar a propagação de certo gene vantajoso em uma população [20], enquanto que Kolmogorov obteve vários resultados analíticos da mesma [21].

No presente trabalho utilizaremos as ERD para estudar o fenômeno da formação de padrões. Especialmente uma generalização desenvolvida por nosso grupo de pesquisa que tem várias das equações apresentadas anteriormente como casos particulares, o que poderá ser comprovado no capítulo seguinte. A nossa proposta, além de incorporar casos conhecidos, também leva em conta aspectos como o carácter não local da interação entre os indivíduos da espécie analisada; o que vai nos permitir reproduzir resultados experimentais que modelos anteriores não tinham conseguido reproduzir.

# Capítulo 3

## Uma equação geral para a dinâmica de populações

### 3.1 Introdução do capítulo

A dinâmica de uma população de uma espécie pode ser estudada usando equações não lineares do tipo reação-difusão [16, 22–47]. Para essa dinâmica propomos um conjunto geral de equações da forma

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = a\hat{H}(g_\alpha, u(x, t)) - bu(x, t)\hat{H}(g_\beta, u(x, t)), \quad (3.1)$$

onde  $u(x, t)$  é a densidade populacional e  $\hat{H}(g_\kappa, u)$  é um operador funcional que atua sobre  $u$  por meio do kernel  $g_\kappa$ , sendo  $\kappa = \alpha, \beta$ . Aqui  $a$  e  $b$  são constantes que representam as taxas de crescimento e concorrência, enquanto que  $\alpha$  e  $\beta$  são os comprimentos de correlação de crescimento e competição respectivamente, parâmetros que caracterizam o alcance das interações no sistema estudado. No caso em que  $g_\alpha = g_\beta$  a equação (3.1) apresenta um estado estacionário ( $du/dt = 0$ ) com densidade

$$u_0 = \frac{a}{b}. \quad (3.2)$$



Precisamente esse estado no qual a densidade é a mesma para todos os pontos do espaço analisado será considerado como o “estado sem formação de padrão” (ESFP). Ou seja, vamos interpretar a uniformidade na densidade como ausência de padrões. Mais na frente encontraremos outros estados que também serão incluídos na categoria de ESFP.

Agora é possível obter várias formulações para a dinâmica de crescimento, como a famosa equação de Fisher [20]:

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

onde escolhemos  $\hat{H}(g_\beta, u(x, t)) = u(x, t)$  e  $\hat{H}(g_\alpha, u(x, t)) = u(x, t) + \frac{D}{a} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}$ , sendo  $D$  o coeficiente de difusão.

O operador funcional pode ser expresso como

$$\hat{H}(g_\kappa, u) = \int_{\Omega} g_\kappa(x - x') u(x', t) dx', \quad (3.4)$$

que foi usado nas referências [48] e [49] para estudar o fenômeno da formação de padrões. Substituindo a equação (3.4) em (3.1) obtém-se que

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = a \int_{\Omega} g_\alpha(x - x') u(x', t) dx' - bu(x, t) \int_{\Omega} g_\beta(x - x') u(x', t) dx', \quad (3.5)$$

onde  $g_\alpha(x - x')$  e  $g_\beta(x - x')$  são correlações não-locais para crescimento e competição que ponderam a interação entre os indivíduos. Aqui vamos assumir que estes kernels são funções pares normalizadas à unidade no domínio  $\Omega$ .

As integrais na equação (3.5) podem ser expandidas em série, no caso unidimensional, como [48]

$$\begin{aligned} I_\kappa &= \int_{\Omega} g_\kappa(x - x') u(x', t) dx' = \int_{\Omega} g_\kappa(z) u(z + x, t) dz \\ &= u(x, t) + \sum_{n=1} c_n(\kappa) \frac{\partial^{2n} u(x, t)}{\partial x^{2n}}, \end{aligned} \quad (3.6)$$

onde  $c_n(\kappa) = \frac{1}{(2n)!} \int_{\Omega} g_{\kappa}(z) z^{2n} dz$ . Introduzindo o primeiro termo na equação (3.5) obtemos a equação de Verhulst. O segundo termo ( $n = 1$ ) é a parte difusiva, enquanto que os termos de ordem superior são dispersivos. Observe que a equação (3.3) pode ser facilmente obtida a partir dessa expansão. Agora, se mantivéssemos a segunda integral na equação (3.5) e, expandíssemos a primeira integral até a segunda ordem, obteríamos a equação generalizada de Fisher-Kolmogorov [21, 23–26]. Assim, essas equações do tipo reação-difusão são casos particulares da equação (3.5), que é um caso particular da equação (3.1).

Uma escolha simples para o kernel não local é

$$g_{\kappa}(x) = \begin{cases} \frac{1}{2\kappa}, & |x| < \kappa, \\ 0, & \text{resto dos casos,} \end{cases} \quad (3.7)$$

que no caso unidimensional permite escrever (3.5) como

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \frac{a}{2\alpha} \int_{x-\alpha}^{x+\alpha} u(x', t) dx' - u(x, t) \frac{b}{2\beta} \int_{x-\beta}^{x+\beta} u(x', t) dx'. \quad (3.8)$$

Esta equação foi resolvida numericamente na Ref. [48], considerando condições de contorno periódicas (CCP) [50]

$$u(x, t) = u(x \pm L, t), \quad (3.9)$$

e a condição inicial  $u(x, 0)$ .

Antes de continuar trabalhando, é conveniente expressar (3.8) em termos de grandezas adimensionais [16], o que pode ser feito através das seguintes transformações:

$$\alpha/L = \hat{\alpha}, \quad (3.10)$$

$$\beta/L = \hat{\beta}, \quad (3.11)$$

$$at = \hat{t}, \quad (3.12)$$

$$x/L = \hat{x}, \quad (3.13)$$

$$L/L = \hat{L} = 1, \quad (3.14)$$

$$\frac{b}{a}u(x, t) = \hat{u}(\hat{x}, \hat{t}), \quad (3.15)$$

onde  $L$  é o tamanho do sistema, enquanto que o acento circunflexo indica que a grandeza é adimensional. Agora a equação (3.8) toma a forma

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \frac{1}{2\alpha} \int_{x-\alpha}^{x+\alpha} u(x', t) dx' - u(x, t) \frac{1}{2\beta} \int_{x-\beta}^{x+\beta} u(x', t) dx', \quad (3.16)$$

que será a nossa equação de trabalho neste capítulo. Aqui todas as grandezas envolvidas são adimensionais. O acento circunflexo foi descartado por uma questão de simplicidade na notação. Observe que (3.16) não depende de  $a$  ou  $b$ . Ao mesmo tempo,  $x$ ,  $\alpha$  e  $\beta$  são frações de  $L = 1$ , portanto, seus valores vão ficar sempre na faixa  $[0, 1]$ . Desta forma, podemos trabalhar com (3.16) e posteriormente obter os resultados correspondentes com sistemas de dimensões específicas através das transformações (3.10)-(3.15).

À primeira vista, parece que os parâmetros  $\alpha$  e  $\beta$  podem assumir qualquer valor dentro do intervalo  $(0, 1)$ . No entanto, o fato de usar CCP irá impor restrições significativas sobre eles. Vamos analisar, por exemplo, o caso de uma certa população localizada em um espaço unidimensional de comprimento  $L = 1$ .

Se o valor do parâmetro que caracteriza o alcance da interação entre os indivíduos for  $\kappa = L/2$ , então um membro  $A_1$  da população localizado exatamente na metade do espaço poderia interagir com todos os membros da população. No caso de um membro

$A_2$  localizado à direita de  $A_1$  na posição  $x_2$ , o mesmo poderá interagir com os membros da população que se encontram na faixa  $x_2 - L/2 < x < L$ , enquanto que uma parte do seu alcance se estende além da fronteira  $x = L$  do sistema, especificamente o intervalo  $L < x < x_2 + L/2$ . Mas esta região, de acordo com as CCP, corresponde com a faixa  $0 < x < x_2 - L/2$ . Com isso, obtemos que o membro localizado em  $A_2$  também pode interagir com todos os membros da população. Esse mesmo resultado é alcançado ao analisar pontos à esquerda de  $A_1$ .

Fazendo uma análise similar para  $\kappa > L/2$ , observamos que parte da interação é contada de forma dupla, de modo que ao utilizar CCP os valores de  $\alpha$  e  $\beta$  ficam restritos à seguinte faixa:

$$0 < \kappa < \frac{1}{2}, \quad \kappa = \alpha, \beta. \quad (3.17)$$

Nos parágrafos seguintes veremos que existem restrições que limitam ainda mais os valores destes parâmetros, principalmente do  $\alpha$ .

A relação (3.17) é o resultado da aplicação das CCP. Se fossem utilizadas outras condições de fronteira, os intervalos de variação dos parâmetros que caracterizam as interações poderiam ser diferentes [51, 52]. O uso das CCP no presente trabalho se deve a que as mesmas são uma escolha bastante comum na literatura que estuda fenômenos como a formação de padrões [23, 48, 49, 52–54], permitindo uma descrição bastante correta de diferentes resultados experimentais. No entanto, no capítulo 5 será feito um estudo no qual serão utilizadas condições de contorno diferentes, o que permitirá ter uma medida da influência das condições de fronteira nos resultados finais.

## 3.2 Solução analítica para a equação não local

Agora vamos procurar a solução de (3.16) na forma

$$u(x, t) = B_0(t) + \sum_{n=1}^{\infty} B_n(t) \cos(k_n x), \quad (3.18)$$

onde  $B_0(t)$  é a contribuição para a parte homogênea da densidade, enquanto que os coeficientes  $B_n(t)$ , com  $n \geq 1$ , estão associados ao comportamento espacial não homogêneo de  $u(x, t)$ , sendo  $k_n = 2\pi n$ . Ao substituir (3.18) em (3.16) obtemos o seguinte sistema de equações diferenciais:

$$\frac{dB_0(t)}{dt} = -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} B_n^2(t) f(k_n \beta) + B_0(t) - B_0^2(t), \quad (3.19)$$

$$\frac{dB_n(t)}{dt} = \psi_n(t) + \gamma_n(t) B_n(t), \quad (n \geq 1), \quad (3.20)$$

onde

$$f(k_n \kappa) = \frac{\sin(k_n \kappa)}{k_n \kappa}, \quad (3.21)$$

$$\gamma_n(t) = f(k_n \alpha) - B_0(t) [1 + f(k_n \beta)] - \frac{1}{2} B_{2n}(t) [f(k_n \beta) + f(k_{2n} \beta)], \quad (3.22)$$

$$\begin{aligned} \psi_n(t) &= -\frac{1}{2} B_{n/2}^2(t) f(k_{n/2} \beta) \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq n}}^{\infty} B_m(t) \left\{ B_{n+m}(t) [f(k_m \beta) + f(k_{n+m} \beta)] + B_{n-m}(t) [f(k_m \beta) + f(k_{n-m} \beta)] \right\}, \end{aligned} \quad (3.23)$$

com  $B_{n/2}(t) = 0$  se  $n$  ímpar e  $B_{n-m}(t) = 0$  se  $m \geq n/2$ .

Utilizando (3.18) obtemos que o tamanho da população em qualquer instante de tempo será

$$N_P(t) = \int_0^L u(x, t) dx = L B_0(t), \quad (3.24)$$

já que a contribuição das funções periódicas é nula. De modo que o valor de  $B_0(t)$  é diretamente proporcional ao tamanho da população. No entanto,  $B_0(t)$  depende de todos os outros coeficientes, como mostrado pela equação (3.19).

No estado estacionário ( $t_e$ ), as equações (3.19) e (3.20) tornam-se zero, o que permite calcular os coeficientes como

$$B_0(t_e) = \frac{1}{2} \left[ 1 \pm \sqrt{1 - 2 \sum_{n=1}^{\infty} B_n^2(t_e) f(k_n \beta)} \right], \quad (3.25)$$

$$B_n(t_e) = -\frac{\psi_n(t_e)}{\gamma_n(t_e)}, \quad (n \geq 1). \quad (3.26)$$

Em ausência de padrões,  $u(t_e) = a/b$ , que em termos de grandezas adimensionais pode ser escrito como  $u(t_e) = 1$ . Isso implica que  $B_0(t_e) = 1$ . Por outro lado, esperamos que a presença de padrões maximize o tamanho da população quando o estado estacionário é atingido. Então, para observar padrões, é necessário que  $1 < B_0(t_e) < \infty$ , o que suprime a solução negativa em (3.25), obtendo que

$$S_{B_0} = \sum_{n=1}^{\infty} B_n^2(t_e) f(k_n \beta) = 2B_0(t_e) [1 - B_0(t_e)] < 0. \quad (3.27)$$

Dessa maneira, a série  $S_{B_0}$  é (pelo menos condicionalmente) convergente. Então sempre é possível encontrar um número real  $\mu > 1$  de modo que o termo geral da série convergente

$$S_D = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{f(k_n \beta)}{n^\mu} \quad (3.28)$$

é proporcional ao termo geral de  $S_{B_0}$ , ou seja:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left[ B_n^2(t_e) f(k_n \beta) : \frac{f(k_n \beta)}{n^\mu} \right] = \lim_{n \rightarrow \infty} B_n^2(t_e) n^\mu = \lambda, \quad (3.29)$$

com  $0 < \lambda < \infty$ . Portanto, a forma assintótica dos coeficientes  $B_n(t_e)$  é dada por

$$\lim_{n \rightarrow \infty} B_n^2(t_e) = \frac{\lambda}{n^\mu}. \quad (3.30)$$

Com base em (3.30), vamos supor que os coeficientes  $B_n$  são “bem comportados” no sentido de que

$$|B_n(t_e)| > |B_{n+1}(t_e)| \quad (n \geq 1), \quad (3.31)$$

e que seus valores absolutos diminuam rapidamente com o aumento de  $n$ , de modo que o sinal da soma

$$S_b = \sum_{n=1}^{\infty} B_n(t_e) \quad (3.32)$$

é determinado pelo primeiro coeficiente diferente de zero da série.

Como  $S_{B_0} < 0$ , o dito acima permite estabelecer que o primeiro termo não nulo de  $S_{B_0}$  deve ser negativo. Considerando que  $0 < \beta < 1/2$ , obtém-se que  $f(k_1\beta) > 0$ , sendo necessário que

$$B_1(t_e) = 0. \quad (3.33)$$

Quando  $n = 1$  a equação (3.23) vira

$$\psi_1(t_e) = -\frac{1}{2} \sum_{m=2}^{\infty} B_m(t_e) B_{m+1}(t_e) [f(k_m\beta) + f(k_{m+1}\beta)] = 0, \quad (3.34)$$

o que implica que todos os termos da soma devem ser identicamente nulos. Como o fator entre colchetes é, em geral, diferente de zero, conclui-se que pelo menos um dos coeficientes,  $B_m(t_e)$  ou  $B_{m+1}(t_e)$ , deve ser zero.

Se o índice do primeiro termo diferente de zero em  $S_{B_0}$  for  $n = 2$ , então  $B_2(t_e) \neq 0$  e  $\psi_1(t_e)$  teria a sequência

$$\begin{aligned} \psi_1(t_e) = & B_2(t_e)B_3(t_e) [f(\dots) + f(\dots)] + B_3(t_e)B_4(t_e) [f(\dots) + f(\dots)] + \quad (3.35) \\ & \dots + B_m(t_e)B_{m+1}(t_e) [f(\dots) + f(\dots)] = 0, \end{aligned}$$

obtendo que  $B_3(t_e) = 0, \psi_3(t_e) = 0$ . A expressão para  $\psi_3(t_e)$  é semelhante com (3.34), alterando 1 por 3, com  $p \neq 3$ , levando à sequência

$$\begin{aligned} \psi_3(t_e) = & B_2(t_e)B_5(t_e) [f(\dots) + f(\dots)] + B_4(t_e)B_7(t_e) [f(\dots) + f(\dots)] + \quad (3.36) \\ & \dots + B_m(t_e)B_{m+3}(t_e) [f(\dots) + f(\dots)] = 0, \end{aligned}$$

que mostra que  $B_5(t_e) = 0, \psi_5(t_e) = 0$ . Assim é finalmente obtido que todos os termos ímpares são nulos, e  $S_{B_0}$  assume a forma

$$S_{B_0} = \sum_{m=1}^{\infty} B_{2 \times m}^2(t_e) f(k_{2 \times m} \beta). \quad (3.37)$$

Se o índice do primeiro termo não nulo em  $S_{B_0}$  for  $n = 3$ , então  $B_3(t_e) \neq 0$  e  $B_2(t_e) = B_4(t_e) = 0$ , enquanto que

$$\psi_2(t_e) = B_3(t_e)B_5(t_e) [f(\dots) + f(\dots)] + \dots + B_m(t_e)B_{m+2}(t_e) [f(\dots) + f(\dots)] = 0, \quad (3.38)$$

$$\psi_4(t_e) = B_3(t_e)B_7(t_e) [f(\dots) + f(\dots)] + \dots + B_m(t_e)B_{m+4}(t_e) [f(\dots) + f(\dots)] = 0, \quad (3.39)$$

mostrando que  $B_5(t_e) = B_7(t_e) = 0$ . Então seria possível estabelecer que

$$\psi_5(t_e) = B_3(t_e)B_8(t_e) [f(\dots) + f(\dots)] + \dots + B_m(t_e)B_{m+5}(t_e) [f(\dots) + f(\dots)] = 0, \quad (3.40)$$

$$\psi_7(t_e) = B_3(t_e)B_{10}(t_e) [f(\dots) + f(\dots)] + \dots + B_m(t_e)B_{m+7}(t_e) [f(\dots) + f(\dots)] = 0, \quad (3.41)$$

obtendo que  $B_8(t_e) = B_{10}(t_e) = 0$ . Ao continuar trabalhando dessa maneira, será finalmente obtido que os termos diferentes de zero são aqueles cujo índice é múltiplo de  $p = 3$ , e  $S_{B_0}$  poderia ser expresso como

$$S_{B_0} = \sum_{m=1}^{\infty} B_{3 \times m}^2(t_e) f(k_{3 \times m} \beta). \quad (3.42)$$



$n$	$f(k_n\beta)$ $\beta = 0,050$	$n$	$f(k_n\beta)$ $\beta = 0,200$	$n$	$f(k_n\beta)$ $\beta = 0,350$
11	-0,089	3	-0,156	2	-0,216
12	-0,156	4	-0,189	5	-0,091
13	-0,198	8	-0,059	8	-0,054
14	-0,216	9	-0,084	11	-0,033
15	-0,212	13	-0,036	13	-0,011
16	-0,189	14	-0,054	14	-0,019
17	-0,152	18	-0,026	16	-0,017
18	-0,104	19	-0,040	17	-0,008
19	-0,052	23	-0,020	19	-0,019

Tabela 3.1: Alguns valores de  $n$  para os quais a função  $f(k_n\beta)$  toma valores negativos.

Generalizando o procedimento anterior é possível estabelecer que, quando o índice do primeiro termo não nulo da série apresentada na equação (3.27) é  $M$ , os únicos coeficientes diferentes de zero serão aqueles cujo índice é múltiplo de  $M$ , obtendo que

$$S_{B_0} = \sum_{n=1}^{\infty} B_{M \times n}^2(t_e) f(k_{M \times n} \beta). \quad (3.43)$$

Como o primeiro termo de (3.43) deve ser negativo, podemos escrever que

$$f(k_M \beta) < 0, \quad (3.44)$$

de modo que  $\pi < k_M \beta < 2\pi$ , o que também pode ser expresso como

$$0.5 < \beta M < 1. \quad (3.45)$$

A tabela 3.1 mostra valores de  $n$  em que a função  $f(k_n\beta)$  se torna negativa. Esses são; de fato, alguns dos valores possíveis de  $M$ .

Agora a equação (3.18) toma a forma

$$u(x, t_e) = B_0(t_e) + \sum_{n=1}^{\infty} B_{n \times M}(t_e) \cos(k_{n \times M} x), \quad (3.46)$$

onde a soma é feita sobre um conjunto de funções cosseno cujos números de onda são múltiplos de  $M$ . No caso da função  $\cos(k_M x)$ , ela possui  $M$  picos (vales) na região de interesse ( $0 < x \leq 1$ ), localizados nas posições

$$x_{P_1} = \frac{M_{P_1}}{M} \quad (\text{picos}), \quad (3.47)$$

$$x_{V_1} = \frac{2M_{V_1} + 1}{2M} \quad (\text{vales}), \quad (3.48)$$

com  $M_{P_1} = 1, 2, \dots, M$ ,  $M_{V_1} = 0, 1, \dots, M - 1$ . Por outro lado, a função  $\cos(k_{M \times s} x)$ , ( $s > 1$ ), possui  $M \times s$  picos (vales), localizados em

$$x_{P_s} = \frac{M_{P_s}}{M \times s} \quad (\text{picos}), \quad (3.49)$$

$$x_{V_s} = \frac{2M_{V_s} + 1}{2M \times s} \quad (\text{vales}), \quad (3.50)$$

com  $M_{P_s} = 1, 2, \dots, M \times s$ ;  $M_{V_s} = 0, 1, \dots, M \times s - 1$ . Observe que os picos de  $\cos(k_M x)$  são picos de  $\cos(k_{M \times s} x)$ , enquanto seus vales também coincidem com um valor extremo de  $\cos(k_{M \times s} x)$ .

Diferenciando (3.46) em relação a  $x$  e calculando é obtido:

$$\left. \frac{du(x, t_e)}{dx} \right|_{x_{P_1}} = \left. \frac{du(x, t_e)}{dx} \right|_{x_{V_1}} = 0, \quad (3.51)$$

enquanto que, ao calcular a derivada nos picos (vales) da função  $\cos(k_{M \times s} x)$ , o resultado é diferente de zero, exceto nos pontos que coincidem com os picos (vales) de  $\cos(k_M x)$ . Somente os valores de  $x$  correspondentes aos picos e vales de  $\cos(k_M x)$  atendem à condição necessária para a existência de um extremo. Portanto, o padrão de interferência fornecido em (3.46) terá um máximo de  $2M$  pontos extremos.

A segunda derivada de  $u(x)$  nos pontos citados acima assume os valores:

$$\left. \frac{d^2 u(x, t_e)}{dx^2} \right|_{x_{P_1}} = -B_M(t_e)k_M^2 - \sum_{n=1}^{\infty} B_{(2n+1) \times M}(t_e)k_{(2n+1) \times M}^2 - \sum_{n=1}^{\infty} B_{2n \times M}(t_e)k_{2M}^2, \quad (3.52)$$

$$\left. \frac{d^2 u(x, t_e)}{dx^2} \right|_{x_{V_1}} = B_M(t_e)k_M^2 + \sum_{n=1}^{\infty} B_{(2n+1) \times M}(t_e)k_{(2n+1) \times M}^2 - \sum_{n=1}^{\infty} B_{2n \times M}(t_e)k_{2M}^2, \quad (3.53)$$

cujo sinal depende do valor de  $B_M(t_e)$ . Dessa forma, se  $B_M > 0$ ,  $u''(x_{P_1}, t_e) < 0$  e  $u''(x_{V_1}, t_e) > 0$ , os picos (vales) de  $\cos(k_M x)$  coincidem com os picos (vales) de  $u(x, t_e)$ . Por outro lado, se  $B_M < 0$ ,  $u''(x_{P_1}, t_e) > 0$  e  $u''(x_{V_1}, t_e) < 0$ , os picos (vales) de  $u(x, t_e)$  coincidem com os vales (picos) de  $\cos(k_M x)$ . Finalmente, é possível estabelecer que o padrão formado pela densidade terá  $M$  picos e  $M$  vales. Observe que, como  $B_1(t_e) = 0$ , então  $M \geq 2$ . Ou seja, os padrões vão ter sempre dois ou mais picos. Assim, aquelas distribuições da densidade que apresentem um pico só serão também consideradas como ESFP. No caso de  $B_M(t_e)$ , a Eq. (3.23) assume a forma

$$\psi_M(t_e) = -\frac{1}{2} \sum_{n=2}^{\infty} B_{Mn}(t_e)B_{M(n+1)}(t_e) [f(k_{Mn}\beta) + f(k_{M(n+1)}\beta)], \quad (3.54)$$

que nos diz que, pelo menos, os coeficientes  $B_{2M}(t_e)$  e  $B_{3M}(t_e)$  precisam ser não nulos, garantindo assim que  $B_M(t_e)$  também seja diferente de zero. Isso significa que a solução composta pelos três primeiros termos da série em (3.46), sem contar o coeficiente  $B_0(t_e)$ , representa a Configuração Mínima (CM) de coeficientes não nulos que consegue descrever a formação de padrões. Esta configuração, assim como outras mais simples, serão estudadas na próxima seção.

### 3.3 Estudando diferentes configurações

Agora vamos estudar as configurações obtidas ao considerar um número finito de termos da série dada em (3.46) (sem contar o coeficiente  $B_0$ ). Analisaremos o comportamento do sistema dado pelas equações (3.19) e (3.20) ao atingir o estado estacionário, obtendo as condições que devem ser cumpridas para que se formem padrões. Deste modo nas subseções seguintes estudaremos as soluções para a densidade  $u(x, t)$ , considerando uma série mínima com um, dois e três termos respectivamente.

### 3.3.1 Um coeficiente não nulo

A densidade para este sistema estaria dada por

$$u(x, t) = B_0(t) + B_M(t) \cos(k_M x), \quad (3.55)$$

sendo que  $\psi_M(t_e) = 0$ , o que de acordo com (3.20) implica que  $\gamma_M(t_e) = 0$ , já que  $B_M(t_e) \neq 0$ . Então podemos escrever que

$$B_0(t_e) = \frac{1}{2} \left[ 1 + \sqrt{1 - 2B_M^2(t_e)f(k_M\beta)} \right] = \frac{f(k_M\alpha)}{1 + f(k_M\beta)} > 1, \quad (3.56)$$

sendo possível determinar os valores permitidos de  $M$ ,  $B_0(t_e)$  e  $|B_M(t_e)|$  para uma dada combinação de  $\alpha$  e  $\beta$ , como mostrado na tabela 3.2. Observe que a equação (3.56) não oferece informação sobre o sinal de  $B_M(t_e)$ , o qual poderia estar determinado pelas condições iniciais do sistema.

Devemos lembrar que a densidade da população  $u(x, t)$  é uma grandeza real e positiva, o qual vai impor restrições adicionais ao comportamento dos coeficientes. Já conhecemos que  $B_0(t)$  está diretamente relacionado com o tamanho da população, pelo que seu valor é sempre não negativo. No caso de  $B_M(t)$  temos que, para garantir que  $u(x, t) \geq 0$ , é necessário que

$$B_0(t) \geq |B_M(t)|. \quad (3.57)$$

Ao observar a tabela 3.2 notamos que a condição dada em (3.57) é frequentemente descumprida, o que nos permite dizer que o sistema composto por um coeficiente não nulo não é um bom candidato para descrever o fenômeno de formação de padrões que estamos estudando. No entanto, é possível obter alguns resultados cuja validade vai se manter em sistemas de maior complexidade (com maior número de termos não nulos). Assim, a

relação (3.56) mostra que para garantir que  $B_0(t) > 0$  é necessário que

$$f(k_M\alpha) > 0. \quad (3.58)$$

Com o aumento do número de termos não nulos a forma explícita de  $B_0(t)$  vai mudar, mas isso não vai afetar a validade da condição (3.58). De modo similar, outra relação que também permanecerá válida é

$$\frac{f(k_M\alpha)}{1 + f(k_M\beta)} > 1, \quad (3.59)$$

já que não depende dos coeficientes. Esta condição permite determinar as regiões do espaço  $(\alpha, \beta)$  em que acontece a formação de padrão ( $B_0 > 1$ ), estabelecendo um diagrama de fases, como mostrado na figura 3.1. Os valores de  $M$  utilizados em (3.59) são calculados aplicando a condição (3.44).

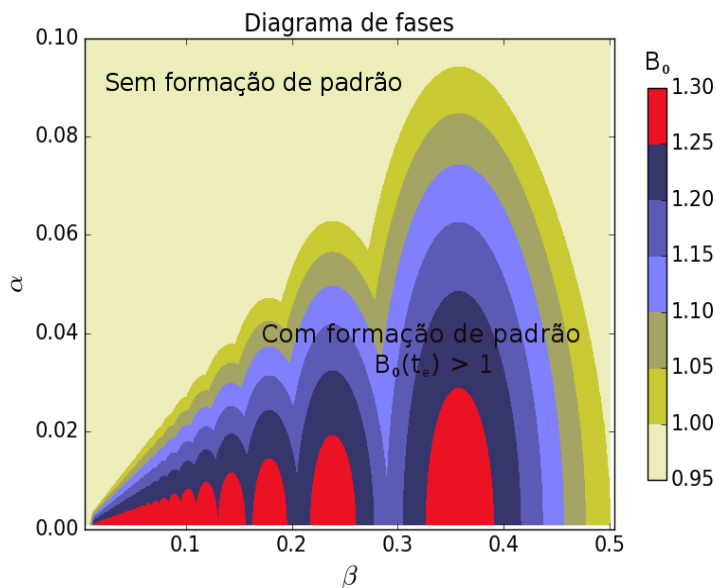


Figura 3.1: Diagrama de fases obtido a partir de (3.59).

Expressões muito similares à condição (3.59) já tinham sido obtidas em trabalhos anteriores do nosso grupo [48, 49], utilizando a análise perturbativa. De modo que o estudo de sistemas com menos coeficientes não nulos do que os requeridos pela configuração mí-

$\alpha = 0,005$			$\alpha = 0,010$		
$\beta = 0,050$			$\beta = 0,100$		
$M$	$B_0(t_e)$	$ B_M(t_e) $	$M$	$B_0(t_e)$	$ B_M(t_e) $
11	1,076	1,356	6	1,157	1,523
12	1,157	1,526	7	1,235	1,639
13	1,213	1,613	8	1,182	1,508
14	1,235	1,639	9	1,057	1,081
15	1,222	1,602			
16	1,182	1,508			
17	1,123	1,352			
18	1,057	1,081			
$\alpha = 0,020$			$\alpha = 0,030$		
$\beta = 0,110$			$\beta = 0,300$		
$M$	$B_0(t_e)$	$ B_M(t_e) $	$M$	$B_0(t_e)$	$ B_M(t_e) $
5	1,027	0,793	2	1,157	1,527
6	1,140	1,252	3	1,057	1,081
7	1,102	1,046			

Tabela 3.2: Valores de  $M$ ,  $B_0(t_e)$  e  $|B_M(t_e)|$  para algumas combinações de  $\alpha$  e  $\beta$ .

nima é equivalente à realização da análise perturbativa da equação de trabalho. Inclusive os gráficos do diagrama de fases são muito parecidos, com a diferença de que nas referências citadas anteriormente os mesmos foram obtidos depois de fazer várias simulações considerando diferentes pares de valores de  $\alpha$  e  $\beta$ . O gráfico da figura 3.1 constitui uma primeira aproximação, já que com o aumento do número de coeficientes não nulos (até atingir a configuração mínima) é de se esperar um aumento do valor de  $B_0$  para cada combinação dos parâmetros que caracterizam a interação, o que poderia modificar a forma do diagrama.

### 3.3.2 Dois coeficientes não nulos

Agora a densidade é dada por

$$u(x, t) = B_0(t) + B_M(t) \cos(k_M x) + B_{2M}(t) \cos(k_{2M} x), \quad (3.60)$$

com  $\psi_M(t_e) = 0$ ,  $\gamma_M(t_e) = 0$ . Ao mesmo tempo temos que  $\psi_{2M}(t_e) \neq 0$ ,  $\gamma_{2M}(t_e) = \bar{\gamma}_{2M}(t_e) \neq 0$ , sendo

$$\bar{\gamma}_{nM}(t) = f(k_{nM}\alpha) - B_0(t) [1 + f(k_{nM}\beta)], \quad n = 1, 2, 3 \dots \quad (3.61)$$

de modo que

$$B_{2M}(t_e) = \frac{B_M^2(t_e) f(k_M \beta)}{2\gamma_{2M}(t_e)} = \frac{2\bar{\gamma}_M(t_e)}{f(k_M \beta) [1 + \cos(k_M \beta)]}, \quad (3.62)$$

$$B_M^2(t_e) = \frac{4\bar{\gamma}_M(t_e) \bar{\gamma}_{2M}(t_e)}{f^2(k_M \beta) [1 + \cos(k_M \beta)]}, \quad (3.63)$$

$$B_0(t_e) = \frac{f(k_M \alpha)}{1 + f(k_M \beta)} - B_{2M}(t_e) f(k_M \beta) \frac{[1 + \cos(k_M \beta)]}{2 [1 + f(k_M \beta)]}. \quad (3.64)$$

A partir de (3.63) obtemos que  $\bar{\gamma}_M(t_e)$  e  $\bar{\gamma}_{2M}(t_e)$  têm o mesmo sinal. No caso em que  $\bar{\gamma}_M(t_e) > 0$ , o coeficiente  $B_0(t_e)$  ficaria limitado à seguinte faixa:

$$1 < B_0(t_e) < \frac{f(k_M \alpha)}{1 + f(k_M \beta)}, \quad (3.65)$$

enquanto que se  $\bar{\gamma}_M(t_e) < 0$ ,  $B_0(t_e)$  teria que cumprir que

$$1 < \frac{f(k_M \alpha)}{1 + f(k_M \beta)} < B_0(t_e). \quad (3.66)$$

A condição dada em (3.66) resulta menos restritiva, produzindo maiores valores de  $B_0(t_e)$  (tamanho da população) que no caso do sistema com um termo não nulo. Então podemos estabelecer que, no caso da geração de padrões, o sinal de  $\bar{\gamma}_M(t_e)$  e  $\bar{\gamma}_{2M}(t_e)$  seria negativo, o qual também traria como consequência que o sinal de  $B_{2M}(t_e)$  seja sempre positivo.

Finalmente, através de (3.25) pode ser obtida uma equação quadrática (veja o Apêndice B) que fornecerá dois valores de  $B_0(t_e)$ . Por analogia com o caso anterior, escolhemos a raiz positiva do discriminante. A tabela 3.3 mostra os valores dos coeficientes para as mesmas combinações de  $M, \alpha$  e  $\beta$  da tabela 3.2. Observe que  $B_{2M}(t_e)$  é sempre positivo. Entretanto, a figura 3.2 mostra o diagrama de fases para dois termos não nulos. A principal diferencia com respeito à figura 3.1 é o aumento nos valores de  $B_0(t_e)$ .

$\alpha = 0,005$				$\alpha = 0,01$			
$\beta = 0,05$				$\beta = 0,1$			
$M$	$B_0(t_e)$	$ B_M(t_e) $	$B_{2M}(t_e)$	$M$	$B_0(t_e)$	$ B_M(t_e) $	$B_{2M}(t_e)$
11	1,077	1,410	0,360	6	1,166	1,644	0,520
12	1,166	1,644	0,520	7	1,314	2,007	0,828
13	1,247	1,835	0,668	8	1,335	2,102	1,002
14	1,314	2,007	0,828	9	1,112	1,475	0,518
15	1,353	2,121	0,965				
16	1,335	2,102	1,002				
17	1,246	1,900	0,868				
18	1,112	1,475	0,518				
$\alpha = 0,02$				$\alpha = 0,03$			
$\beta = 0,11$				$\beta = 0,3$			
$M$	$B_0(t_e)$	$ B_M(t_e) $	$B_{2M}(t_e)$	$M$	$B_0(t_e)$	$ B_M(t_e) $	$B_{2M}(t_e)$
5	1,028	0,799	0,080	2	1,166	1,644	0,520
6	1,158	1,358	0,302	3	1,112	1,475	0,518
7	1,145	1,267	0,296				

Tabela 3.3: Valores de  $M, B_0(t_e), |B_M(t_e)|$  e  $B_{2M}(t_e)$  para algumas combinações de  $\alpha$  e  $\beta$ .



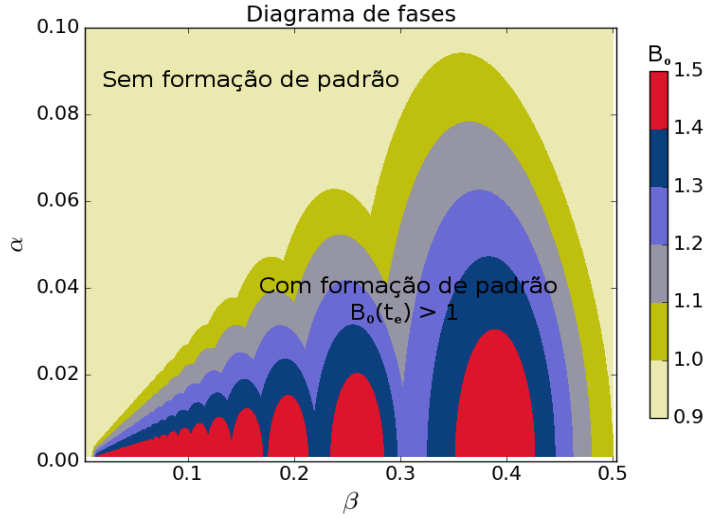


Figura 3.2: Diagrama de fases obtido a partir de (B.12).

### 3.3.3 Três coeficientes não nulos (CM)

Com três coeficientes não nulos a densidade no estado estacionário estará dada por

$$u(x) = B_0 + B_M \cos(k_M x) + B_{2M} \cos(k_{2M} x) + B_{3M} \cos(k_{3M} x), \quad (3.67)$$

onde, para simplificar a notação, tiramos o índice  $t_e$ , já que todas as operações serão feitas considerando o estado estacionário.

Como dito anteriormente, vamos supor o cumprimento de (3.31), assim como que o valor absoluto dos coeficientes diminui rapidamente com o aumento do índice  $n \times M$ , de modo que

$$|B_M| > |B_{2M}| > |B_{3M}|. \quad (3.68)$$

Ao contrário dos sistemas anteriores, agora  $\psi_{pM}(t_e) \neq 0$  para cada um dos coeficientes não nulos, pelo que cada um deles dependerá explicitamente do produto dos outros dois.

Trabalhando com (3.22), (3.23), (3.26) e (3.27) podemos escrever que:

$$B_M = \frac{2B_{2M}B_{3M}}{3\gamma_M} f(k_M\beta) [1 + \cos(k_M\beta)] \left[ \cos(k_M\beta) - \frac{1}{4} \right], \quad (3.69)$$

$$B_{2M} = \frac{f(k_M\beta)}{2\gamma_{2M}} B_M \left\{ B_M + \frac{2}{3} B_{3M} [1 + 2\cos^2(k_M\beta)] \right\}, \quad (3.70)$$

$$B_{3M} = \frac{f(k_M\beta) [1 + \cos(k_M\beta)]}{2\gamma_{3M}} B_M B_{2M}, \quad (3.71)$$

$$2B_0(1 - B_0) = \sum_{p=1}^3 B_p^2 f(k_{p \times M}\beta). \quad (3.72)$$

Substituindo agora (3.71) em (3.70) obtemos

$$B_{2M} = \frac{2\gamma_{3M}f(k_M\beta)B_M^2}{4\gamma_{2M}\gamma_{3M} - B_M^2h_{12}h_{13}}, \quad (3.73)$$

$$h_{nm} = f(k_{nM}\beta) + f(k_{mM}\beta), \quad n, m = 1, 2, 3, \dots \quad (3.74)$$

Utilizando a nova expressão para  $B_{2M}$  junto com (3.71) em (3.69) obtemos a seguinte relação:

$$\gamma_M = \gamma_{3M} \frac{f^2(k_M\beta)h_{23}h_{12}B_M^4}{[4\gamma_{2M}\gamma_{3M} - B_M^2h_{12}h_{13}]^2}, \quad (3.75)$$

que após algumas operações é transformada na seguinte equação quadrática para  $B_M^2$ :

$$B_M^4 - 4B_M^2 \frac{\bar{\gamma}_{2M}\bar{\gamma}_{3M}}{\phi_F} (2\bar{\gamma}_M h_{12}h_{13} + F_2) + \frac{16\bar{\gamma}_M\bar{\gamma}_{2M}^2\bar{\gamma}_{3M}^2}{\phi_F} = 0, \quad (3.76)$$

onde foi levado em conta que  $\gamma_{2M} = \bar{\gamma}_{2M}$ ;  $\gamma_{3M} = \bar{\gamma}_{3M}$ ; com

$$F_2 = \bar{\gamma}_{3M}f^2(k_M\beta) [1 + \cos(k_M\beta)], \quad (3.77)$$

$$\phi_F = \bar{\gamma}_M h_{12}^2 h_{13}^2 + F_2 h_{12} h_{13} - F_3, \quad (3.78)$$

$$F_3 = \bar{\gamma}_{3M}f^2(k_M\beta)h_{12}h_{23}. \quad (3.79)$$

Finalmente, o coeficiente  $B_M^2$  pode ser calculado como

$$B_M^2 = \frac{3\bar{\gamma}_{2M}\bar{\gamma}_{3M} \left\{ 4\bar{\gamma}_M [1 + 2 \cos^2(k_M\beta)] + 3\bar{\gamma}_{3M} + 3\sqrt{Disc} \right\}}{f^2(k_M\beta) [1 + \cos(k_M\beta)] \varphi_B}, \quad (3.80)$$

$$\varphi_B = 2\bar{\gamma}_M \left[ 1 + 2 \cos^2(k_M\beta) \right]^2 + 3\bar{\gamma}_{3M} \left[ 2 \cos^2(k_M\beta) - 2 \cos(k_M\beta) + 3/2 \right], \quad (3.81)$$

$$Disc = \frac{\bar{\gamma}_{3M}}{3} \left\{ 3\bar{\gamma}_{3M} + 16\bar{\gamma}_M \left[ \cos(k_M\beta) - \frac{1}{4} \right] \right\} > 0, \quad (3.82)$$

onde volvemos a considerar somente a raiz positiva do discriminante.

Utilizando (3.80) podemos calcular  $B_M^2$  como função de  $B_0$  para uma determinada combinação de  $\alpha, \beta$  e  $M$ . Com isso já é possível calcular  $B_{2M}^2 = B_{2M}^2(B_0)$  e  $B_{3M}^2 = B_{3M}^2(B_0)$ . Conhecidos estes valores, podemos utilizar (3.72) para calcular  $B_0$  em função de  $\alpha, \beta$  e  $M$ .

Antes de calcular os valores dos coeficientes, vamos fazer algumas previsões sobre os sinais dos mesmos. Primeiramente podemos afirmar, com base nos resultados obtidos ao estudar sistemas com menor número de coeficientes não nulos, que  $\bar{\gamma}_M, \bar{\gamma}_{2M}$  e  $\bar{\gamma}_{3M}$  têm sinal negativo. Conhecendo isso (e levando em conta a hipótese feita sobre o comportamento do valor absoluto dos coeficientes com o aumento do índice  $n \times M$ ) obtemos, a partir de (3.70), que o sinal de  $B_{2M}$  será sempre positivo. Agora é possível estabelecer, utilizando a equação (3.71), que  $B_M$  e  $B_{3M}$  têm o mesmo sinal, o qual novamente fica indeterminado, já que nos cálculos só podemos obter  $B_M^2$ .

A equação (3.69) também deve refletir o fato de que os coeficientes  $B_M$  e  $B_{3M}$  têm o mesmo sinal, o qual implica que  $\gamma_M$  e a expressão  $c_{\frac{1}{4}} \equiv [\cos(k_M\beta) - 1/4]$  têm sinais opostos. A mesma conclusão é obtida ao analisar a equação (3.75), o que pode ser expresso como

$$\begin{aligned} \gamma_M > 0 & \quad \text{quando} \quad \cos(k_M\beta) < 1/4, \\ \gamma_M < 0 & \quad \text{quando} \quad \cos(k_M\beta) > 1/4, \end{aligned} \quad (3.83)$$

a qual constitui uma condição necessária para que a CM consiga descrever corretamente o padrão formado por certa combinação  $(\alpha, \beta)$ . Assim, ao fazer uma simulação, aqueles padrões formados de modo que  $c_{\frac{1}{4}}/\gamma_M > 0$ , deveriam precisar de mais termos da série dada em (3.46).

Anteriormente foi falado que íamos supor que o valor dos coeficientes caia rapidamente com o aumento do índice  $n \times M$ , isso significa que

$$\frac{B_M^2}{B_{3M}^2} = \frac{\bar{\gamma}_{3M}}{\gamma_M} \left[ \cos(k_M \beta) - \frac{1}{4} \right] \gg 1, \quad (3.84)$$

que representa uma condição suficiente para que a CM consiga descrever corretamente o padrão formado por alguma combinação  $(\alpha, \beta)$ . Ou seja, quando (3.84) é cumprida, os resultados fornecidos pela CM vão se diferenciar muito pouco dos obtidos através de uma simulação que utilize os mesmos parâmetros e que considere muitos mais termos da série dada em (3.46).

$\alpha = 0,005$						$\alpha = 0,010$					
$\beta = 0,050$						$\beta = 0,100$					
$M$	$B_0$	$ B_M $	$B_{2M}$	$ B_{3M} $	$(B_M/B_{3M})^2$	$M$	$B_0$	$ B_M $	$B_{2M}$	$ B_{3M} $	$(B_M/B_{3M})^2$
11	1,077	1,097	0,220	$3,244 \cdot 10^{-3}$	$1,144 \cdot 10^5$	6	1,166	1,640	0,542	$4,938 \cdot 10^{-2}$	$1,103 \cdot 10^3$
12	1,166	1,640	0,542	$4,938 \cdot 10^{-2}$	$1,103 \cdot 10^3$	7	1,316	2,037	0,922	$2,190 \cdot 10^{-1}$	$8,647 \cdot 10^1$
13	1,247	1,850	0,729	$1,230 \cdot 10^{-1}$	$2,262 \cdot 10^2$	8	1,687	4,440	3,214	1,620	7,514
14	1,316	2,037	0,922	$2,190 \cdot 10^{-1}$	$8,647 \cdot 10^1$	9	1,132	1,574	0,649	$1,986 \cdot 10^{-1}$	$6,279 \cdot 10^1$
15	1,368	2,223	1,137	$3,500 \cdot 10^{-1}$	$4,033 \cdot 10^1$						
16	1,687	4,440	3,214	1,620	7,514						
17	1,293	2,050	1,096	$4,196 \cdot 10^{-1}$	$2,388 \cdot 10^1$						
18	1,132	1,574	0,649	$1,986 \cdot 10^{-1}$	$6,279 \cdot 10^1$						
$\alpha = 0,020$						$\alpha = 0,030$					
$\beta = 0,110$						$\beta = 0,300$					
$M$	$B_0$	$ B_M $	$B_{2M}$	$ B_{3M} $	$(B_M/B_{3M})^2$	$M$	$B_0$	$ B_M $	$B_{2M}$	$ B_{3M} $	$(B_M/B_{3M})^2$
5	1,028	0,796	0,079	$3,110 \cdot 10^{-4}$	$6,546 \cdot 10^6$	2	1,166	1,640	0,542	$4,938 \cdot 10^{-2}$	$1,103 \cdot 10^3$
6	1,158	1,361	0,309	$2,466 \cdot 10^{-2}$	$3,048 \cdot 10^3$	3	1,132	1,574	0,649	$1,986 \cdot 10^{-1}$	$6,279 \cdot 10^1$
7	1,614	5,542	3,699	1,541	$1,293 \cdot 10^1$						

Tabela 3.4: Resultados da CM para algumas combinações de  $\alpha$  e  $\beta$ .

A tabela 3.4 mostra os valores dos coeficientes para algumas combinações de  $\alpha$  e  $\beta$ . Veja que o coeficiente  $B_{2M}$  é sempre positivo, enquanto que o sinal de  $B_M$  e  $B_{3M}$  fica indeterminado. Também são apresentados os valores de  $(B_M/B_{3M})^2$ , mas para poder utilizar a condição (3.84), devemos primeiramente estabelecer um valor mínimo a partir do qual  $(B_M/B_{3M})^2 \gg 1$ . Aqui vamos assumir que se  $(B_M/B_{3M})^2 > 30$ , então (3.84) é satisfeita e a CM oferecerá resultados similares aos de uma simulação que utilize os mesmos valores de  $\alpha$  e  $\beta$ .

Levando em conta o anterior na tabela 3.4, obtemos que existem várias tríades  $(\alpha; \beta; M)$  para as quais a CM não daria bons resultados. Nesses casos seria necessário utilizar mais termos da série dada em (3.46). Em princípio, poderíamos calcular mais termos da série utilizando uma operação similar à empregada com a CM, mas o número de equações aumentaria, bem como a complexidade das mesmas. De modo que seria muito mais prático desenvolver algum procedimento (que vamos chamar de “CM *corrigida*”) que consiga modificar os resultados da CM que no cumprem a condição (3.84).

### 3.3.4 CM *corrigida*

Ao fazer o gráfico  $B_0$  vs.  $M$  com os dados da tabela 3.4 correspondentes ao par  $(\alpha = 0,005; \beta = 0,050)$ , notamos que o ponto “fora da curva” é precisamente aquele que não cumpre com (3.84), como mostrado na figura 3.3, a qual nos sugere que quando o número de possíveis valores de  $M$  que cumprem a condição (3.84) (C283 cumprida) para um par  $(\alpha, \beta)$  dado for suficientemente grande, então o valor de  $B_0$  correspondente aos valores de  $M$  que não satisfazem (3.84) (C283 descumprida) pode ser estimado através da interpolação.

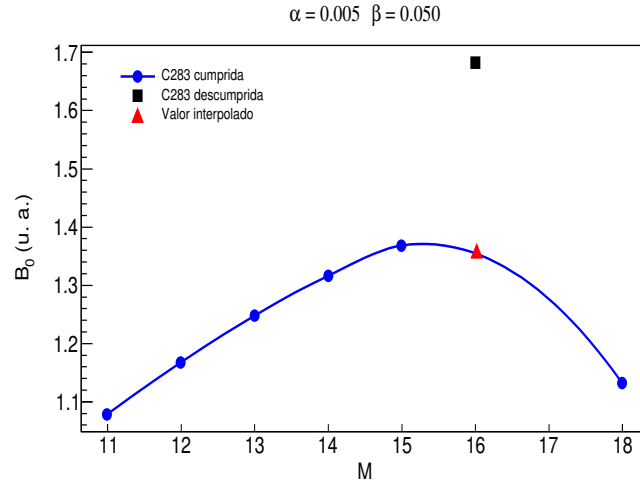


Figura 3.3:  $B_0$  em função do número de picos  $M$  no caso em que  $\alpha = 0,005; \beta = 0,050$ .

Quando o número de possíveis valores de  $M$  que cumprem a condição (3.84) para um par  $(\alpha, \beta)$  dado não for suficiente, utilizaremos a seguinte propriedade dos coeficientes:

$$B_{i \times M}(\alpha, \beta, M) = B_{i \times n \times M} \left( \frac{\alpha}{n}, \frac{\beta}{n}, n \times M \right), \quad i = 0, 1, 2, 3; \quad n = 1, 2, 3 \dots; \quad (3.85)$$

assim como o fato de que o número de possíveis valores de  $M$  aumenta com a diminuição dos valores dos parâmetros. De modo que seria possível encontrar um “par  $(\alpha_{eq}, \beta_{eq})$  equivalente ao dado” com suficientes valores de  $M$  para fazer a interpolação. Levando em conta o anterior encontramos que o valor de  $B_0$  obtido por interpolação para  $(\alpha = 0,005; \beta = 0,050; M = 16)$  é o mesmo correspondente à tríade  $(\alpha = 0,010; \beta = 0,100; M = 8)$ . Conhecido o valor corrigido de  $B_0$  podemos calcular  $B_M, B_{2M}$  e  $B_{3M}$ .

### Degenerescência dos estados

Um detalhe que tem sido utilizado, mas sobre o qual ainda não comentamos, é que nosso modelo prevê a formação de padrões com diferente número de picos  $M$ . Ou seja, cada combinação  $(\alpha, \beta)$  apresenta um certo grau de degenerescência, determinado pelo

número de possíveis valores de  $M$ . De modo geral, este grau de degenerescência diminui com o aumento do valor dos parâmetros, como mostrado na tabela 3.5.

$\alpha \backslash \beta$	0,005	0,010	0,020	0,030	0,040	0,050	0,060	0,070	0,080	0,090
0,050	8	6	-	-	-	-	-	-	-	-
0,100	7	4	3	-	-	-	-	-	-	-
0,150	6	4	3	2	-	-	-	-	-	-
0,200	6	4	2	2	2	1	-	-	-	-
0,250	4	2	1	1	1	1	1	-	-	-
0,300	5	4	2	2	2	1	1	1	-	-
0,350	4	3	2	1	1	1	1	1	1	1
0,400	5	3	2	1	1	1	1	1	1	-
0,450	4	3	2	1	1	1	1	-	-	-

Tabela 3.5: Degenerescência dos estados.

Imediatamente surge a questão de qual dos possíveis valores de  $M$  será “o correto”, no sentido de que um sistema real (ou uma simulação do mesmo) só poderia apresentar um número fixo de picos na densidade ao atingir o estado estacionário. Ao existir diferentes estados finais, poderíamos assumir que o estabelecimento de um deles está relacionado com as condições iniciais do sistema. Ou seja, que mudando a distribuição inicial da população é possível que a forma (número de picos) do estado final também mude, para um par  $(\alpha, \beta)$  dado.

Se for comprovada, a degenerescência dos estados estabeleceria uma forte relação entre as condições iniciais e o estado estacionário. Mas no caso da formação de padrões o que se espera é que o estado final seja relativamente independente das condições iniciais do sistema [55,56] para um par  $(\alpha, \beta)$  dado. Então a degenerescência deveria ser interpretada como um fenômeno que limita os possíveis valores de  $\alpha$  e  $\beta$ . Ou seja, só aqueles pares  $(\alpha, \beta)$  que produzem estados não degenerados (um único valor possível de  $M$ ) serão úteis quando tentarmos descrever algum sistema real com nosso modelo.

### 3.4 Conclusão do capítulo

Ao contrário de trabalhos anteriores, aqui utilizamos uma expansão em série de Fourier para expressar a densidade  $u(x, t)$ , o que nos permitiu aproveitar melhor a simetria do problema estudado, já que a partir de supor que os coeficientes da expansão cumpriam certas regras, conseguimos estabelecer as principais características dos padrões formados pelo sistema ao atingir o estado estacionário, como o número de picos  $M$  e os valores dos coeficientes. Também foi possível construir o diagrama de fases (determinação das regiões com e sem formação de padrão), obtendo resultados muito parecidos com trabalhos anteriores do nosso grupo, mas dessa vez sem precisar fazer simulações. Inclusive foi possível prever a existência de estados degenerados, onde o sistema não esquece das condições iniciais. Então tem sido gerado um conjunto de resultados cuja validade pode ser testada através da realização de simulações, o que será feito no capítulo seguinte.



# Capítulo 4

## Simulações

### 4.1 Introdução do capítulo

Aqui apresentaremos os resultados da implementação computacional do sistema dado pelas equações (3.19) e (3.20), o que permitirá comprovar várias das predições feitas anteriormente sobre o comportamento dos coeficientes que descrevem a densidade. Primeiramente será descrito o procedimento utilizado para obter as soluções numéricas das equações e imediatamente depois mostraremos gráficos e tabelas com os resultados das simulações, alguns dos quais serão comparados com os resultados teóricos do capítulo anterior.

### 4.2 Implementação computacional

A equação (3.19) é uma Equação de Riccati (ER), a qual não tem solução analítica exata, de modo que a mesma deve ser resolvida numericamente. No presente trabalho foi desenvolvido um novo método para resolver esta equação (veja o Apêndice A) que oferece uma solução iterativa muito fácil de implementar. Com isso, se o valor do coeficiente no instante  $t_0$  for  $B_0(t_0)$ , o valor dele no instante seguinte  $t = t_0 + \Delta t$  poderá ser calculado

utilizando a equação (A.9):

$$B_0(t) = \frac{B_0(t_0) + (t - t_0) [p(t_0) + B_0(t_0)]}{1 + (t - t_0)B_0(t_0)}, \quad (4.1)$$

a qual depende dos coeficientes da ER

$$\frac{dB_0(t)}{dt} = p(t) + q(t)B_0(t) + r(t)B_0^2(t), \quad (4.2)$$

avaliados no instante  $t_0$ , sendo

$$p(t) = -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} B_n^2(t) f(k_n \beta), \quad (4.3)$$

$$q(t) = 1, \quad (4.4)$$

$$r(t) = -1. \quad (4.5)$$

Por outro lado temos que a equação (3.20) é linear, portanto, sua solução está dada por

$$B_n(t) = \exp\left(\int_{t_0}^t \gamma_n(t') dt'\right) \left[ B_n(t_0) + \int_{t_0}^t \psi_n(t') \exp\left(-\int_{t_0}^{t'} \gamma_n(t'') dt''\right) dt' \right], \quad (4.6)$$

que para  $t \rightarrow t_0$  toma a forma

$$\begin{aligned} B_n(t) &= B_n(t_0) + (t - t_0) [\psi_n(t_0) + \gamma_n(t) B_n(t_0)], \\ &= B_n(t_0) + (t - t_0) \left. \frac{dB_n}{dt} \right|_{t_0}, \end{aligned} \quad (4.7)$$

a qual representa a solução iterativa para os coeficientes com índice  $n \geq 1$ .

De modo que para realizar as simulações devemos implementar computacionalmente as equações (4.1) e (4.7), com as condições iniciais dadas por

$$B_0(0) = \frac{1}{L} \int_0^L u(x, 0) dx, \quad (4.8)$$

$$B_n(0) = \frac{2}{L} \int_0^L u(x, 0) \cos(k_n x) dx, \quad (n \geq 1), \quad (4.9)$$

escolhendo (salvo indicação em contrário)

$$u(x, 0) = \frac{G}{\sqrt{2\pi}\sigma_0} \exp\left[-\frac{\left(x - \frac{L}{2}\right)^2}{2\sigma_0^2}\right], \quad (4.10)$$

sendo  $\sigma_0 = 0.01L$ , enquanto que  $G$  é uma constante arbitrária.

A equação (4.1) só é válida se o valor de  $\Delta t = t - t_0$  for suficientemente pequeno. No método de resolução da ER apresentado no Apêndice A também é feita uma estimativa do valor de  $\Delta t$  a ser utilizado nas simulações, o qual representa uma fração do “tempo característico” da equação, dado pelo valor inverso do coeficiente  $q(t_0)$ , ou seja:

$$|\Delta t| \leq \frac{0,3}{|q(t_0)|} = 0,3. \quad (4.11)$$

Junto com a ER devemos resolver um conjunto de equações diferenciais lineares, cada uma das quais também possui um tempo característico, determinado pelo valor inverso de  $\gamma_n(t_0)$ , de modo que

$$|\Delta t| \leq \frac{0,3}{|\gamma_n(t_0)|}. \quad (4.12)$$

Com isso, o valor de  $\Delta t$  a ser utilizado em cada instante da simulação estará determinado pelo menor valor obtido ao utilizar as relações (4.11) e (4.12).

Em resumo, para obter a evolução temporal dos coeficientes, usaremos as equações (4.1) e (4.7), juntamente com as condições iniciais dadas por (4.8) e (4.9), enquanto que  $\Delta t$  é determinado pelo menor dos valores obtidos de (4.11) e (4.12). A simulação continua

até que o estado estacionário seja alcançado, o qual é assumido como estabelecido quando é cumprido que

$$\eta_B = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} [B_n(t_0 + \Delta t) - B_n(t_0)]^2 < 10^{-16}. \quad (4.13)$$

### 4.3 Resultados das simulações

A figura 4.1 mostra os resultados dos cálculos dos coeficientes  $B_0(t)$ ,  $B_1(t)$  e todos os outros com um valor absoluto no estado estacionário superior a 0,1. Estes valores foram obtidos usando a equação (4.1) para  $B_0(t)$  e a equação (4.7) para os demais, considerando os primeiros cem termos da série em (3.18), incluindo  $B_0(t)$ .

Observe  $B_1(t_e) = 0$  para todas as combinações apresentadas. Como  $B_0(t)L$  representa o número total de indivíduos; o valor do coeficiente  $B_0(t)$  deve ser sempre positivo, o qual é confirmado pelas simulações.

Na figura 4.1 (a) vemos que o primeiro termo não nulo, excluindo  $B_0$ , é  $B_{14}$ . Todos os outros termos são nulos, exceto seus múltiplos com índices  $n \times 14$ ,  $n = 1, 2, 3, \dots$ , e eles se tornam cada vez mais fracos, gerando uma figura com 14 picos, como mostrado na figura 4.2. O mesmo comportamento é observado em (b), (c) e (d), mudando só o número de picos. No total, temos os coeficientes  $n \times M$ ,  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ , com  $M \neq 0$ , o qual se corresponde completamente com os resultados obtidos no capítulo anterior.

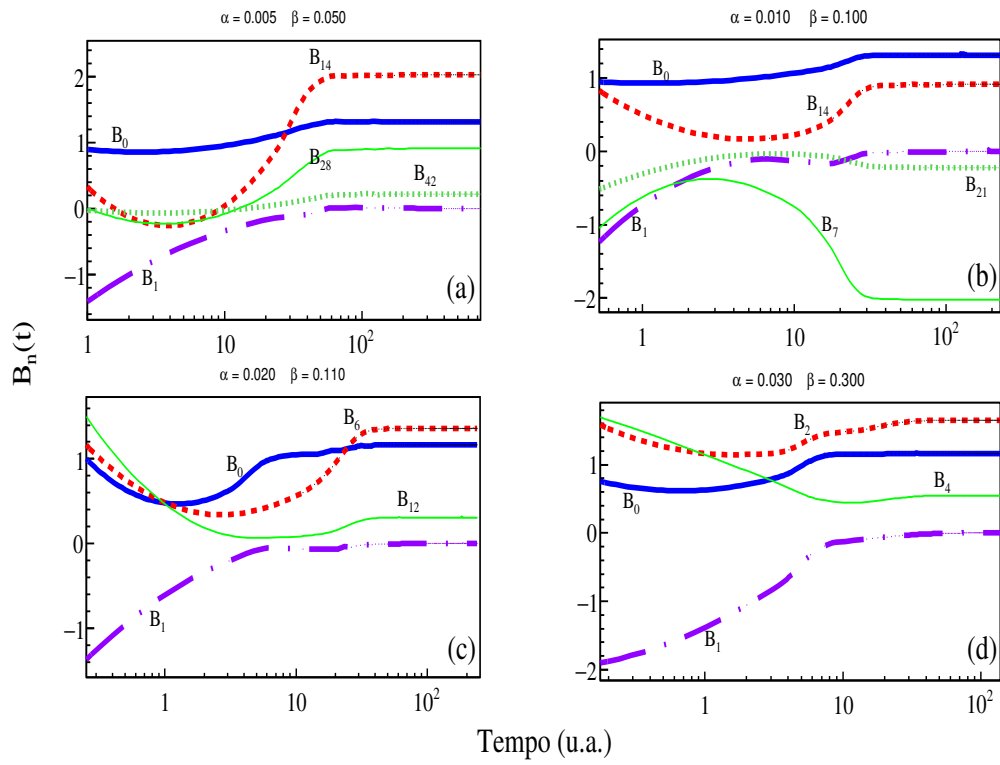


Figura 4.1: Valores de alguns coeficientes  $B_n(t)$  para diferentes combinações de  $\alpha$  e  $\beta$ .

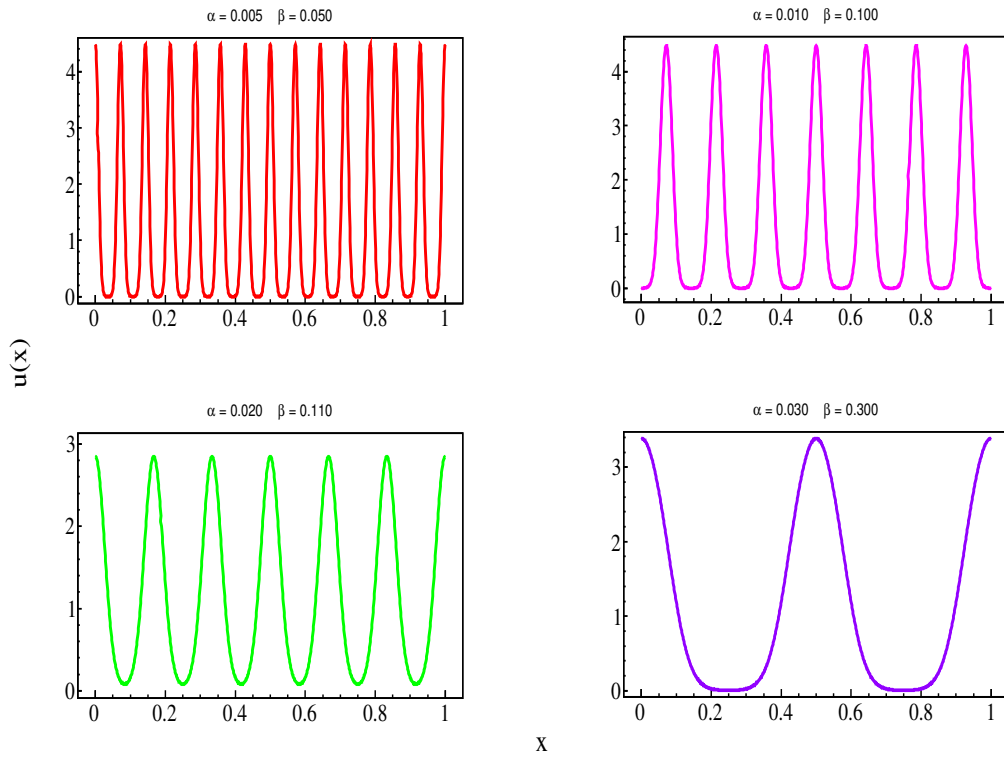


Figura 4.2: Densidade  $u(x)$  para as mesmas combinações de  $\alpha$  e  $\beta$  da figura 4.1.

### 4.3.1 Influência das condições iniciais

Como dito anteriormente, a realização de simulações vai nos permitir comprovar vários dos resultados obtidos no capítulo anterior. Esse é o caso, por exemplo, da degenerescência dos estados. Para comprovar a mesma vamos fixar os valores de  $\alpha$  e  $\beta$ , variando só a distribuição inicial da população no início da simulação.

A figura 4.3 mostra os resultados das simulações feitas considerando  $\alpha = 0,010$ ;  $\beta = 0,100$ . Ao todo foram utilizadas distribuições iniciais com 3, 4, 5 e 9 picos, a quais deram como resultado estados finais com 6, 7, 8 e 9 picos respectivamente, o que coincide com os valores de  $M$  reportados na tabela 3.4.

Também foram feitas simulações para os restantes pares  $(\alpha, \beta)$  reportados na tabela 3.4, variando as condições iniciais. Em todos os casos a degenerescência foi comprovada. Inclusive foi utilizada a condição dada em (4.10), mudando somente o valor de  $\sigma$ , o qual foi suficiente para que o número de picos do estado final fosse diferente.

De modo similar estudamos vários dos pares  $(\alpha, \beta)$  reportados na tabela 3.5 como não degenerados, confirmando; para cada um dos casos analisados, que o estado final não mudava quando a distribuição inicial era trocada.

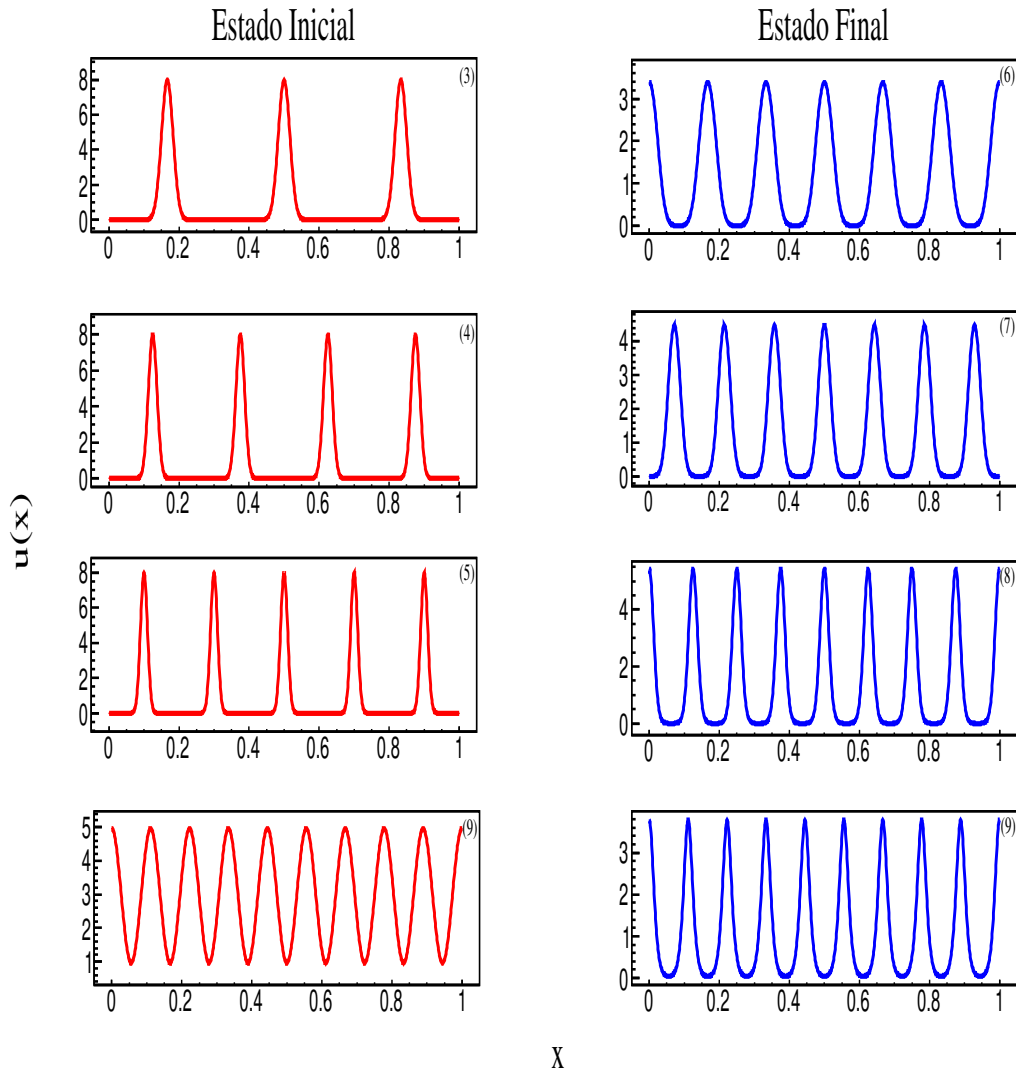


Figura 4.3: Resultados das simulações feitas considerando  $\alpha = 0,010$ ;  $\beta = 0,100$  e diferentes distribuições iniciais.

Assim, as simulações confirmam os resultados do capítulo 3 sobre a degenerescência dos estados. Existem pares  $(\alpha, \beta)$  para os quais a forma do estado estacionário depende da distribuição inicial do sistema. Ao mesmo tempo, encontramos combinações cujo estado final é independente das condições iniciais. Este último caso resulta mais compatível com os princípios da Termodinâmica, já que reflete o fato de que o sistema, durante a sua evolução, eventualmente esquece as condições iniciais [55].

### 4.3.2 Comparando as simulações com os modelos

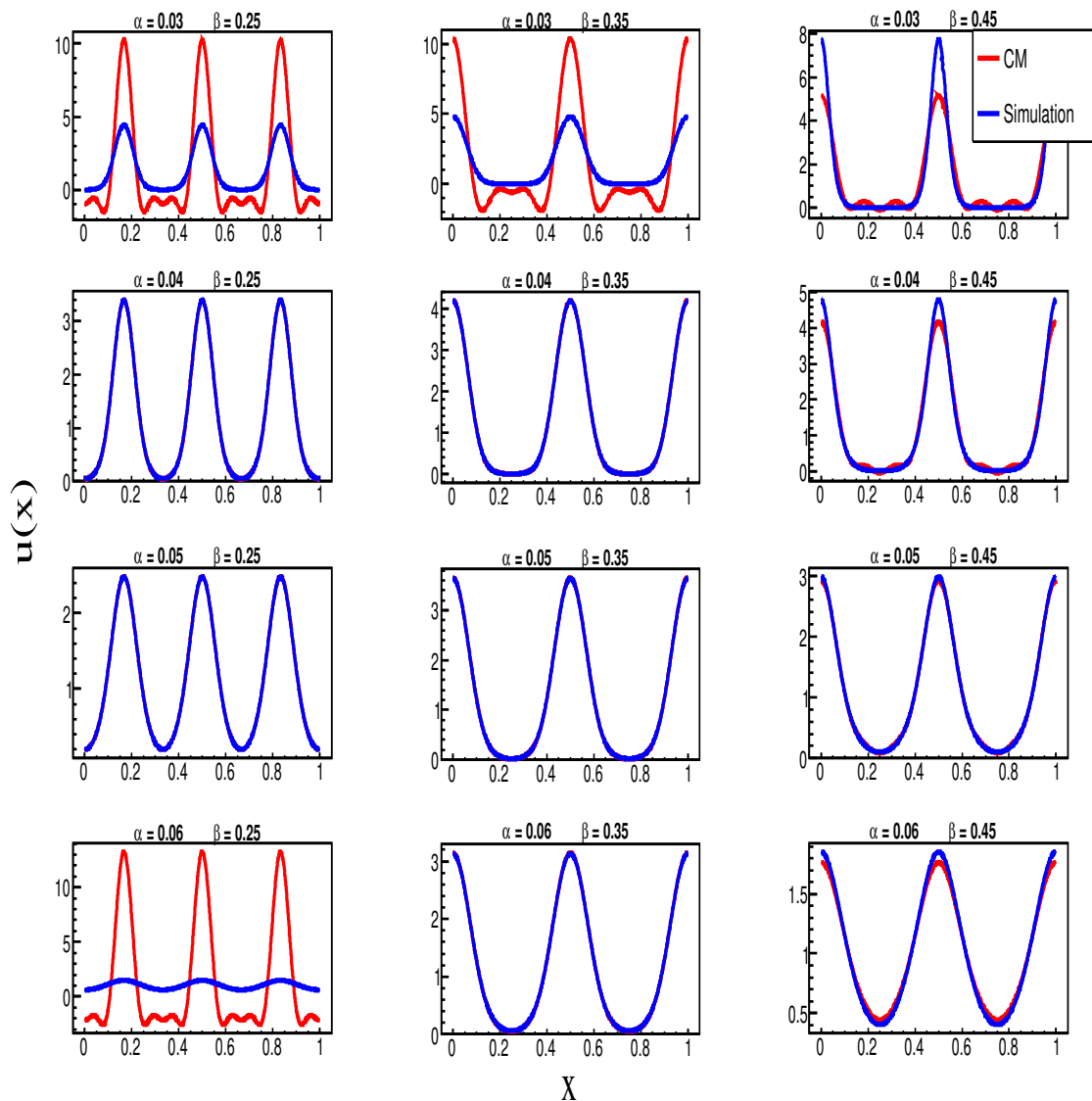


Figura 4.4: Densidade estacionária para combinações  $(\alpha, \beta)$  não degeneradas.

Conhecendo as combinações  $(\alpha, \beta)$  que produzem estados não degenerados, podemos comparar os resultados das simulações com os fornecidos pelos modelos do capítulo 3 (CM e CM *corrigida*). A figura 4.4 mostra a densidade estacionária obtida ao final das simulações, a qual é comparada com a densidade estacionária calculada a partir dos coeficientes fornecidos pela CM. Observamos que na maioria dos casos a CM oferece resultados muito parecidos aos das simulações.



Entretanto a tabela 4.1 contém os valores dos coeficientes utilizados para obter os gráficos da figura 4.4. Ao comparar notamos que precisamente aqueles jogos de coeficientes que descumprem a condição  $(B_M/B_{3M})^2 > 30$  são os que geram padrões que não coincidem com os fornecidos pelas simulações. De modo que a escolha feita no capítulo 3, embora arbitrária, tem resultado ser bastante acertada.

$\alpha - \beta$	M	$B_0$	$ B_M $	$B_{2M}$	$ B_{3M} $	$(B_M/B_{3M})^2$
0,030 - 0,250	3	1,575	4,325	3,065	1,277	$1,147 \cdot 10^{01}$
0,030 - 0,350	2	1,488	4,100	3,387	1,375	8,885
0,030 - 0,450	2	1,255	2,003	1,278	$6,254 \cdot 10^{-01}$	$1,025 \cdot 10^{01}$
0,040 - 0,250	3	1,218	1,583	0,496	$8,639 \cdot 10^{-02}$	$3,358 \cdot 10^{02}$
0,040 - 0,350	2	1,294	1,932	0,798	$1,670 \cdot 10^{-01}$	$1,339 \cdot 10^{02}$
0,040 - 0,450	2	1,176	1,777	0,890	$3,317 \cdot 10^{-01}$	$2,868 \cdot 10^{01}$
0,050 - 0,250	3	1,119	1,120	0,220	$2,398 \cdot 10^{-02}$	$2,181 \cdot 10^{03}$
0,050 - 0,350	2	1,247	1,723	0,584	$9,425 \cdot 10^{-02}$	$3,343 \cdot 10^{02}$
0,050 - 0,450	2	1,090	1,316	0,415	$9,798 \cdot 10^{-02}$	$1,803 \cdot 10^{02}$
0,060 - 0,250	3	1,512	6,167	4,025	1,556	$1,570 \cdot 10^{01}$
0,060 - 0,350	2	1,196	1,496	0,405	$4,976 \cdot 10^{-02}$	$9,039 \cdot 10^{02}$
0,060 - 0,450	2	1,022	0,655	0,083	$8,173 \cdot 10^{-03}$	$6,420 \cdot 10^{03}$

Tabela 4.1: Valores dos coeficientes fornecidos pela CM no caso de combinações  $(\alpha, \beta)$  não degeneradas.

Finalmente a figura 4.5 mostra a densidade estacionária obtida ao aplicar a CM *corrigida* quando a CM falha. No caso dos pares  $(0, 030; 0, 250)$  e  $(0, 030; 0, 350)$  os resultados são bem melhores quando comparados com as simulações. O par  $(0, 040; 0, 450)$  também apresenta certa melhoria, mas ainda persistem pequenas diferenças. Isso também acontece, de modo mais evidente, quando  $(\alpha, \beta) = (0, 030; 0, 450)$ , indicando que para obter melhores resultados seria estritamente necessário utilizar mais termos da série dada em (3.46). Já o par  $(0, 060; 0, 250)$  mostra a maior diferença entre a simulação e o modelo, mas aqui a origem da discrepância não reside no número de coeficientes utilizados, senão no processo de interpolação, já que nas diferentes tentativas realizadas, o valor a ser interpolado sempre ficava fora da faixa de interpolação. Ou seja, em lugar de interpolar,

a gente sempre acabava extrapolando o valor de  $B_0$ , sem garantia nenhuma de que o resultado obtido fosse o correto.

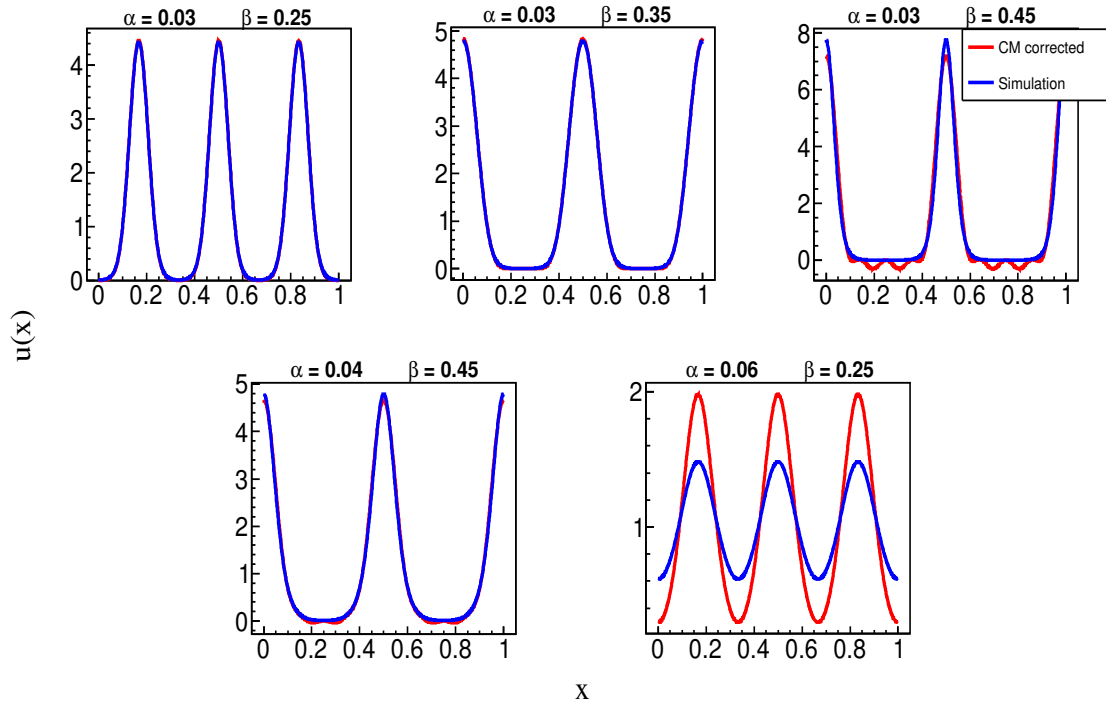


Figura 4.5: Densidade estacionária para combinações  $(\alpha, \beta)$  não degeneradas.

## 4.4 Conclusão do capítulo

As simulações feitas têm nos permitido comprovar vários dos resultados obtidos no capítulo 3. Primeiramente, os padrões formados estão compostos por  $M$  picos e  $M$  vales, coincidindo  $M$  com o índice do primeiro coeficiente não nulo da série dada em (3.46). Ao mesmo tempo, os únicos coeficientes não nulos nessa série são precisamente aqueles cujo índice é múltiplo de  $M$ . Também confirmamos que existem combinações  $(\alpha, \beta)$  degeneradas, no sentido de que a forma do padrão no estado estacionário depende do estado inicial do sistema. Já no caso dos pares não degenerados os modelos do capítulo anterior conseguem prever com total exatidão o número de picos do estado estacionário, e utilizando  $B_0$  mais os três primeiros coeficientes não nulos de (3.46) é possível reproduzir a maioria dos resultados das simulações, como mostrado nas figuras 4.4 e 4.5.

Diferentemente dos modelos, o sinal de todos os coeficientes fornecidos pelas simulações é conhecido, como mostrado na tabela 4.2, a qual inclui diferentes combinações de  $\alpha$  e  $\beta$ . Também confirmamos que  $B_M$  e  $B_{3M}$  têm o mesmo sinal, e na figura 4.6 observamos que ao trocar o sinal destes coeficientes, o que acontece é uma transformação dos picos em vales e vice-versa. Com isso, a indeterminação observada nos modelos fica justificada, devido a que uma mudança do sinal dos coeficientes  $B_M$  e  $B_{3M}$  não altera a forma (número de picos) do estado estacionário.

$\alpha - \beta$	M	$B_0$	$B_M$	$B_{2M}$	$B_{3M}$	$B_{4M}$	$B_{5M}$
0,030 - 0,250	3	1,315	1,982	0,872	0,231	0,033	$-4,007 \cdot 10^{-3}$
0,030 - 0,350	2	1,335	2,119	1,042	0,289	0,0224	-0,014
0,030 - 0,450	2	1,352	2,423	1,772	1,097	0,596	0,292
0,040 - 0,250	3	1,218	-1,583	0,496	-0,088	$8,333 \cdot 10^{-3}$	$1,324 \cdot 10^{-4}$
0,040 - 0,350	2	1,294	1,928	0,795	0,169	$7,465 \cdot 10^{-3}$	$-5,463 \cdot 10^{-3}$
0,040 - 0,450	2	1,197	1,893	1,022	0,437	0,162	0,055
0,050 - 0,250	3	1,119	-1,120	0,220	-0,024	$1,502 \cdot 10^{-3}$	$9,058 \cdot 10^{-6}$
0,050 - 0,350	2	1,247	1,718	0,581	0,094	$2,379 \cdot 10^{-3}$	$-2,051 \cdot 10^{-3}$
0,050 - 0,450	2	1,092	1,330	0,427	0,106	0,023	$4,781 \cdot 10^{-3}$
0,060 - 0,250	3	1,019	-0,433	0,029	$-1,157 \cdot 10^{-3}$	$2,865 \cdot 10^{-5}$	$-1,050 \cdot 10^{-7}$
0,060 - 0,350	2	1,196	1,488	0,400	0,049	$7,474 \cdot 10^{-4}$	$-7,104 \cdot 10^{-4}$
0,060 - 0,450	2	1,022	0,6527	0,08231	0,008145	$0,747 \cdot 10^{-3}$	$6,692 \cdot 10^{-5}$

Tabela 4.2: Valores dos coeficientes fornecidos pelas simulações.

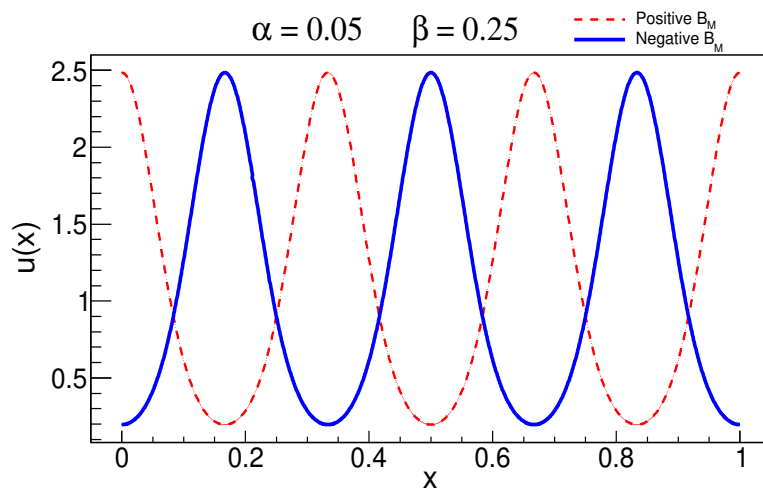


Figura 4.6: Efeito da troca do sinal do coeficiente  $B_M$ .

Vamos finalizar este capítulo dizendo que as simulações realizadas, em conjunto com os modelos desenvolvidos anteriormente, têm nos permitido fazer uma ampla avaliação dos resultados obtidos ao resolver a equação (3.16). Portanto, estamos em uma posição imbatível para explicar alguns resultados experimentais, que serão essenciais para fornecer uma interpretação física do parâmetro  $\beta$ , que é o mais importante para a geração de padrões.

# Capítulo 5

## Reação às mudanças do ambiente

### 5.1 Introdução do capítulo

As atividades desenvolvidas anteriormente permitiram cumprir um dos nossos principais objetivos, ou seja, o estudo da formação de padrões através da utilização de equações de reação-difusão. Assim conseguimos revisitar vários dos resultados obtidos previamente por nosso grupo, ao tempo que fizemos novas propostas. De modo que estão criadas as condições para abordar o segundo objetivo: a utilização do modelo no estudo de sistemas biológicos, especialmente populações de bactérias.

Entre os diferentes experimentos realizados que encontramos na literatura, vamos destacar o realizado por Anna L. Lin e colaboradores, publicado em 2004 no *Biophysical Journal* sob o título “*Localization and extinction of bacterial populations under inhomogeneous growth conditions*”. Este trabalho (doravante referido como Ref. [42]), pelo arranjo adotado, permite que o nosso modelo, expresso em diferentes variantes da equação (3.1), possa ser utilizado para descrever o comportamento das bactérias.

O experimento consiste de um canal retangular de comprimento  $L$ , altura  $h < L$  e espessura  $E \ll L$ , que está cheio de nutrientes que podem sustentar uma população de bactérias por longo tempo. Este canal é quase totalmente iluminado com luz ultravioleta,

com exceção de uma região de comprimento  $W$  que está coberta por uma placa protetora (oásis) que se move com velocidade  $v$ .

A espécie utilizada nos estudos foi a *E. coli RW 120*, já que o resultado da exposição da mesma à radiação ultravioleta é a morte das bactérias e não a sua mutação. Com isso a população localizada sob a placa pode crescer normalmente. Já no restante do canal, o crescimento é inibido pela ação da luz ultravioleta, que eventualmente mata as bactérias.

Cada uma das corridas experimentais foi iniciada com o oásis localizado em um extremo do canal. Então uma pequena quantidade de bactérias era inserida na região protegida pelo oásis, onde podia crescer normalmente. Quando (depois de várias horas) a concentração de bactérias na região protegida atingia um valor de saturação, o oásis começava a se mover com velocidade constante  $v$ .

Entre uma execução e outra o parâmetro que geralmente mudava era a velocidade de oásis, cujos valores variaram entre  $1,5 \cdot 10^{-5} \text{ cm/s}$  e  $3,6 \cdot 10^{-4} \text{ cm/s}$ , de modo que o oásis podia demorar entre dezenove horas e vinte dias para atingir o extremo oposto do canal. Outros parâmetros ficaram sempre os mesmos, como as dimensões do canal (25 *cm* de comprimento, 0,2 *cm* de espessura e 2,5 *cm* de altura), o comprimento do oásis (3 *cm*, com espessura igual à do canal), e a intensidade da fonte de luz (10 *Watt/m<sup>2</sup>*), consistente em uma lâmpada de mercúrio de 120 *cm* localizada a 8,5 *cm* acima do canal.

A grande maioria das bactérias vivas permanecia perto da superfície canal, enquanto que as bactérias mortas demoravam cerca de dois dias para se depositarem no fundo. O canal tinha acoplado um sistema de medição que permitia obter, cada sete minutos, o valor da concentração das bactérias localizadas perto da superfície ao longo de todo o espaço analisado. Utilizando os dados fornecidos pelo sistema de medição foram obtidos gráficos como o apresentado na figura 5.1, que mostra o comportamento da densidade da população de bactérias com o passo do oásis ao longo do canal.

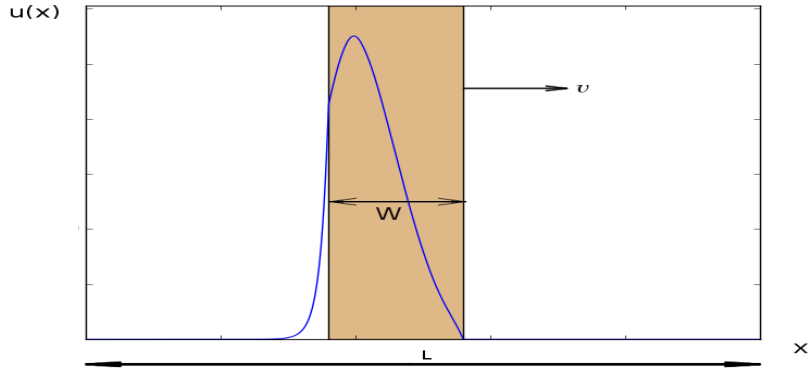


Figura 5.1: Perfil de crescimento da densidade ao longo do canal. No oásis a taxa de crescimento é  $a$ , enquanto que no resto do canal, submetido à influência da luz ultravioleta, a taxa de crescimento é  $-\epsilon a$ , com  $\epsilon \geq 0$ .

## 5.2 Trabalho numérico

### 5.2.1 A equação de Fisher

Perfis parecidos ao da figura 5.1 foram obtidos experimentalmente na Ref. [42], onde também foram feitas simulações do sistema utilizando uma generalização da equação de Fisher na forma [43, 46]

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \epsilon_x a u(x, t) + D_{exp} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} - b u^2(x, t), \quad (5.1)$$

que basicamente é igual à (3.3), com a diferença de que agora o termo de crescimento apresenta um coeficiente que varia em função da posição do oásis que se move com velocidade  $v$ , de modo que

$$\epsilon_x = \begin{cases} 1, & x_{oásis} < x < x_{oásis} + W, \\ -\epsilon, & \text{resto do canal,} \end{cases} \quad (5.2)$$

sendo  $x_{oásis} = x_0 + vt$  a posição do extremo esquerdo do oásis, enquanto que o valor de  $\epsilon$  está diretamente relacionado com a intensidade da luz.

As simulações realizadas na Ref. [42] conseguiram descrever o comportamento qualitativo geral observado da densidade da população de bactérias em função da velocidade do oásis. Ou seja, para velocidades do oásis relativamente altas, a população ao longo de todo o canal eventualmente morre, enquanto que a velocidades menores as bactérias localizadas no oásis conseguem sobreviver, e dependendo da intensidade da radiação as bactérias fora do oásis também sobrevivem por longo tempo, diminuindo a sua concentração com o aumento da distância até o oásis.

Aqui o significado de velocidade alta ou baixa é definido a partir do valor da velocidade média  $v_{F_{exp}}$  da frente de uma população bacteriana que cresce, em condições favoráveis, sobre um disco de laboratório (*petri dish*). Assim, velocidades do oásis próximas de  $v_{F_{exp}}$  são consideradas altas.

Com as simulações os experimentadores conseguiram fazer um estudo extensivo dos diferentes parâmetros que caracterizam o comportamento da população, como a velocidade do oásis, o seu comprimento  $W$  e a intensidade da radiação, o que não aconteceu nos experimentos devido à longa duração dos mesmos (entre três e dez dias, dependendo da velocidade do oásis).

Os gráficos da figura 5.2 confirmam várias das ideias expostas anteriormente. A mesma apresenta os resultados de quatro simulações feitas no presente trabalho a diferentes velocidades do oásis, utilizando como base a equação (5.1) e alguns dos dados experimentais reportados na Ref. [42]. Concretamente consideramos que  $a = 6 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ ,  $b = 7,93 \cdot 10^{-11} \text{ cm/s}$ ,  $D_{exp} = 1,6 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$  e  $v_{F_{exp}} = \sqrt{2aD_{exp}} = 4,4 \cdot 10^{-4} \text{ cm/s}$ . Outros parâmetros, no entanto, foram estabelecidos por nós, tal é o caso de  $\epsilon_x$ , que fora do oásis é considerado igual a zero, e o comprimento do oásis, fixado como  $W_{exp} = 0,3L_{exp}$ , sendo  $L_{exp}$  o comprimento do canal, igual a 25 cm.

De modo similar aos capítulos anteriores, aqui utilizamos variáveis e constantes adimensionais, as quais são obtidas através das relações (3.10) - (3.15). No caso do coeficiente de difusão, o valor adimensional aparece ao dividir a quantidade experimental pela gran-



deza  $aL_{exp}^2$ , enquanto que a velocidade deve ser dividida por  $aL_{exp}$ . Assim obtemos que  $D = D_{exp}/(aL_{exp}^2) = 4,3 \cdot 10^{-4}$ ;  $v_f = v_{F_{exp}}/(aL_{exp}) = 0,029$ ;  $W = 0,3$ ; e  $L = 1$ .

Além dos dados apresentados na figura 5.2, como parte desta pesquisa foram realizadas muitas outras simulações utilizando a equação (5.1). Nas mesmas foi possível testar diferentes valores de  $\epsilon_x$  e  $W$ , sendo sempre observado o mesmo comportamento qualitativo descrito anteriormente.

Embora não apareça explicitamente, é possível associar um valor do parâmetro  $\alpha$  apresentado no capítulo 3 à equação (5.1). Em trabalhos anteriores [48] foi demonstrado que

$$\alpha_{exp} = \sqrt{\frac{6D_{exp}}{a}}, \quad (5.3)$$

sendo então  $\alpha_{exp} = 1,26 \text{ cm}$ , enquanto que  $\alpha = \alpha_{exp}/L_{exp} \approx 0,05$ .

Nos cálculos assumimos que [57]

$$\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} = \frac{u(x + \Delta x, t) - 2u(x, t) + u(x - \Delta x, t)}{(\Delta x)^2}, \quad (5.4)$$

o que nos permite reescrever (5.1) na forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} &= D \frac{[u(x + \Delta x, t) + u(x - \Delta x, t)]}{(\Delta x)^2} \\ &+ \left[ \epsilon_x - \frac{2D}{(\Delta x)^2} \right] u(x, t) \\ &- u^2(x, t), \end{aligned} \quad (5.5)$$

com  $\Delta x \approx 0,01$ . Esta equação estabelece que em cada ponto ao longo do canal a evolução temporal da densidade  $u(x, t)$  é descrita por uma ER, de modo que podemos utilizar o método apresentado no Apêndice A para obter a solução numérica da mesma.

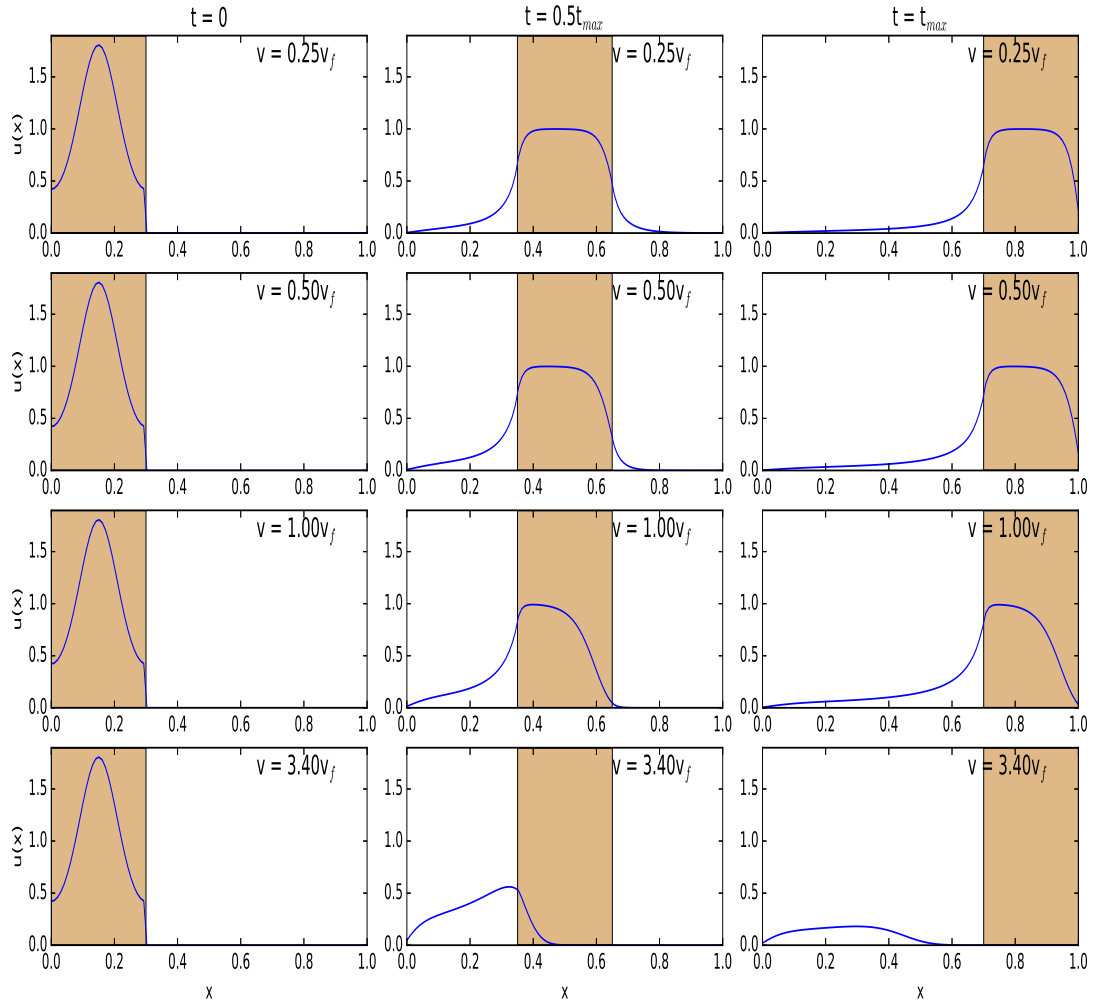


Figura 5.2: Resultados das simulações feitas sem considerar o parâmetro  $\beta$ .

Agora cada ponto do espaço terá associada uma ER. O número de equações a serem resolvidas simultaneamente vai depender da forma em que o espaço seja discretizado, ou seja, do valor de  $\Delta x$ . Para  $\Delta x \approx 0,01$  teremos um sistema de 100 ER. Este valor de  $\Delta x$  estará muito relacionado com o valor de  $\Delta t$  utilizado para fazer a evolução temporal (veja o Apêndice A.5). No presente capítulo, trabalhamos considerando  $\Delta t = 0,01$ .

As simulações começam com o extremo esquerdo do oásis localizado na posição  $x = 0$ . Inicialmente só é permitido que a população possa crescer no trecho do canal protegido pelo oásis, até que a densidade atinja um valor estacionário. O resultado anterior se consegue fazendo uma simulação similar às descritas no capítulo 4, mas considerando  $L = W$ , como a equação (5.1) não depende de  $\beta$ , nesta etapa trabalhamos com (3.16), utilizando

qualquer valor de  $\beta$  na faixa  $\alpha < \beta < W$ . Dessa forma podemos testar diferentes distribuições ao início do movimento do oásis, mas os resultados (não apresentados aqui) mostraram-se independentes das mesmas.

Quando a densidade da população atinge um valor estacionário na região protegida pelo oásis, começa o movimento do mesmo (de esquerda à direita) com velocidade  $v$ . Durante esta etapa utilizamos condições de contorno abertas, ou seja,  $u(x, t) = 0$  se  $x < 0$  ou  $x > L$ . No momento em que o extremo direito do oásis atinge a posição  $x = L$  a simulação termina. Então o tempo que demora para o oásis chegar ao final do canal é  $t_{max} = (L - W)/v$ . A figura 5.2 apresenta simulações feitas utilizando as seguintes velocidades do oásis:  $0,25v_f$ ,  $0,5v_f$ ,  $v_f$  e  $3,4v_f$ . Para cada uma destas velocidades é mostrada a densidade em três instantes de tempo diferentes:  $t = 0$ ,  $t = 0,5t_{max}$  e  $t = t_{max}$ .

Um resultado significativo obtido na Ref. [42] e confirmado aqui foi que, embora os parâmetros variaram amplamente, as simulações não conseguiram reproduzir o pico duplo observado na densidade das bactérias para velocidades do oásis menores que  $v_{F_{exp}}$ . Essa discrepância levou os autores a sugerir que o modelo utilizado deveria ser modificado de modo que o mesmo leve em conta a dinâmica interna das diferentes redes de expressão genética presentes dentro das bactérias. Dessa forma seriam reproduzidas as oscilações observadas, as quais poderiam representar uma manifestação da variação que ocorre nos níveis de certas proteínas presentes nas bactérias em resposta às mudanças ambientais [58].

Neste ponto, a estreita relação existente entre o experimento descrito e o nosso modelo fica bastante clara. Por um lado, a equação de Fisher utilizada na Ref. [42] é um caso especial da equação (3.1), como mostrado na seção 3.1. Enquanto que por outro lado já sabemos, a partir dos resultados dos capítulos anteriores, que a solução da equação (3.16) pode gerar padrões com diferente número de picos. Então podemos supor que ao realizar simulações utilizando como base o nosso modelo conseguiremos descrever a formação de picos na densidade para certas combinações de  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $v$  e  $W$ .

Na próxima seção serão realizadas simulações utilizando como base a equação (3.1). Se a tentativa for bem sucedida, teríamos encontrado uma bela aplicação prática para

o nosso modelo, ao tempo que o significado físico do parâmetro  $\beta$  (o mais importante para a geração de padrões) poderia ser estabelecido no caso das populações bacterianas: o mesmo representaria uma medida macroscópica das mudanças que a nível individual acontecem dentro das bactérias, produto de variações significativas do ambiente.

## 5.2.2 Considerando a não localidade

Agora utilizaremos a equação (3.1) para fazer simulações. Vamos assumir que

$$\hat{H}(g_\alpha, u(x, t)) = \epsilon_x u(x, t) + \frac{D}{a} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}, \quad (5.6)$$

$$\hat{H}(g_\beta, u(x, t)) = \int_0^L g_\beta(x - x') u(x', t) dx', \quad (5.7)$$

sendo possível reescrever (3.1) como

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \epsilon_x a u(x, t) + D \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} - b u(x, t) \int_0^L g_\beta(x - x') u(x', t) dx', \quad (5.8)$$

a qual difere de (5.1) devido à inclusão do kernel não local dependente de  $\beta$ , de modo que este parâmetro será responsável por qualquer diferença obtida nos resultados.

Levando em conta (5.4), o kernel dado em (3.7) e usando o método dos trapézios para resolver a integral obtemos, após agrupar convenientemente os termos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} &= \frac{D}{(\Delta x)^2} [u(x + \Delta x, t) + u(x - \Delta x, t)] \\ &+ \left\{ \epsilon_x - \frac{2D}{(\Delta x)^2} - \frac{\Delta x}{2\beta} \left[ \sum_{\substack{n=0 \\ n \neq \frac{\beta}{\Delta x}}}^{N_\beta} u_{x\beta n, t} - \frac{1}{2} [u_{x\beta 0, t} + u_{x\beta N_\beta, t}] \right] \right\} u(x, t) \\ &- \frac{\Delta x}{2\beta} u^2(x, t), \end{aligned} \quad (5.9)$$

onde também foram inseridas as variáveis e constantes dimensionais. Aqui  $u_{x\beta n, t} \equiv u(x - \beta + n\Delta x, t)$ , enquanto que  $N_\beta$  é o inteiro mais próximo de  $2\beta/\Delta x$ . Novamente temos uma ER, pelo que a solução numérica será obtida através da aplicação do método

apresentado no Apêndice A, considerando as mesmas condições e valores dos parâmetros utilizados na seção anterior.

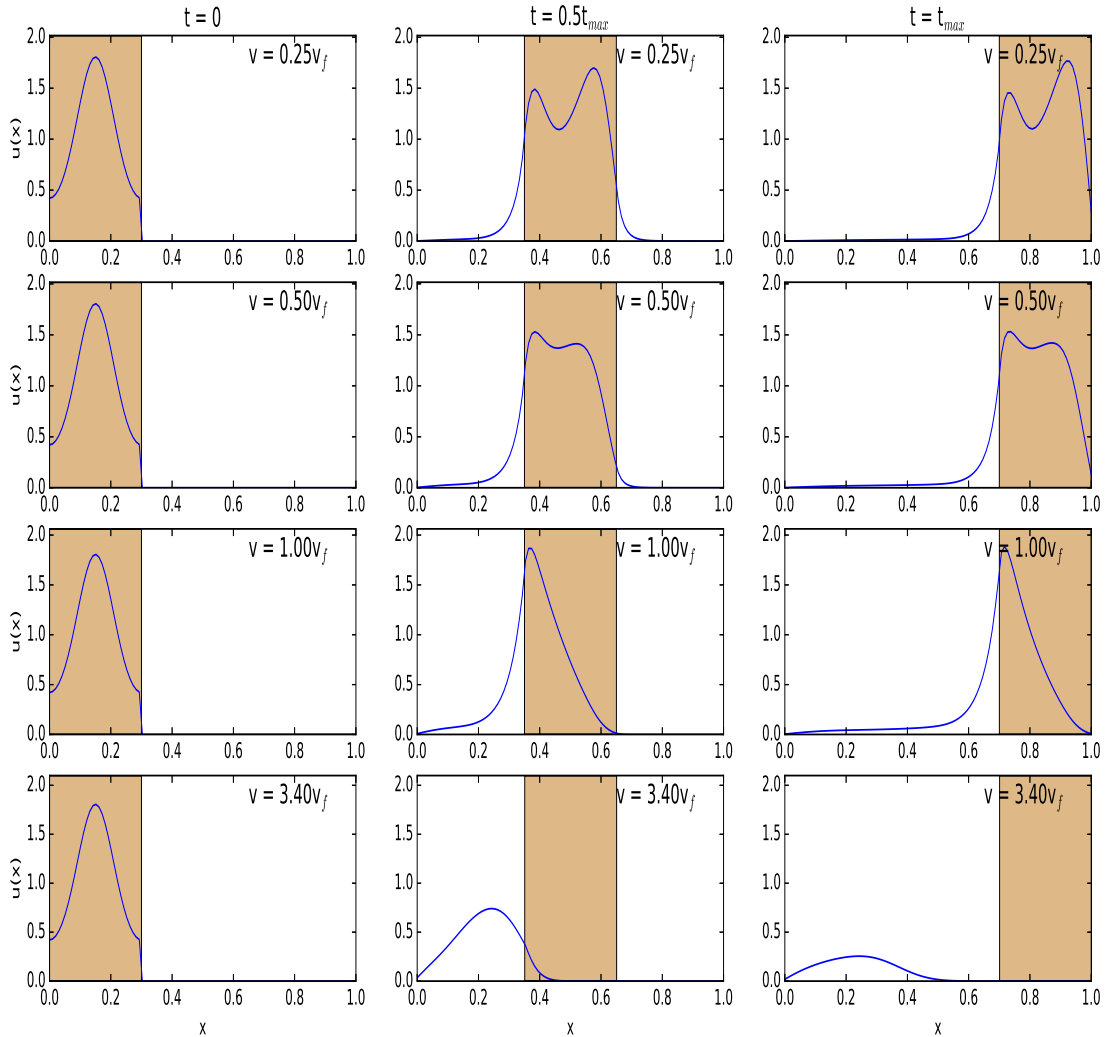


Figura 5.3: Resultados das simulações feitas considerando o parâmetro  $\beta$ .

A informação apresentada na figura 5.3 é similar à da figura 5.2, mas no caso da figura 5.3 as simulações usaram como base a equação (5.9), considerando  $\beta = 0,2$ . Imediatamente observamos a presença de picos duplos na densidade para velocidades menores do que  $v_f$ , o que não aconteceu na figura 5.2. Esses picos ficam melhor definidos para velocidades do oásis próximas de  $0,25v_f$ , o que está em total correspondência com os valores experimentais reportados na Ref. [42], onde a aparição de mais de um pico foi observada para  $v/v_f \approx 0,23$ .

Com o aumento da velocidade do oásis a intensidade de um dos picos vai diminuindo, ficando apenas um quando  $v \approx v_f$ . Poderíamos tentar explicar o resultado anterior com base na distribuição das velocidades das bactérias, lembrando que  $v_{F_{exp}}$  representa a velocidade média das mesmas.

Supondo que as bactérias com  $v \approx v_f$  são as mais abundantes, teremos que a baixas velocidades do oásis uma grande parte da população consegue acompanhar o movimento do mesmo, de modo que em cada instante há suficiente população na região do oásis para formar dois picos bem definidos, ficando as bactérias mais rápidas no pico direito. Quando a velocidade do oásis aumenta, diminui a parte da população que consegue seguir junto com ele, causando a diminuição da intensidade do pico direito, o que eventualmente vai provocar um reforço da intensidade do pico que contém as bactérias de menor velocidade que ainda conseguem se mover com o oásis (veja a figura 5.3 para o caso em que  $v = v_f$ ).

Já quando  $v > v_f$  existem pouquíssimas bactérias que conseguem ficar na região protegida pelo oásis, de modo que chega o momento em que toda a população fica exposta à radiação, acontecendo eventualmente a morte da mesma.

Na figura 5.4 é possível apreciar com maior detalhe a evolução temporal do sistema com velocidade do oásis  $v = 0,25v_f$ . Inicialmente a população na região protegida pelo oásis aumenta de modo que a distribuição da mesma é assimétrica, com o pico deslocado em direção ao extremo esquerdo do oásis. A amplitude desse pico vai diminuindo na medida em que vai surgindo um outro pico perto do extremo direito do oásis. Quando  $t = 0,16t_{max}$  a amplitude dos dois picos é quase a mesma. A partir desse momento o pico da direita terá maior amplitude, atingindo o máximo para  $t \approx 0,24t_{max}$ , momento em que o sistema atinge o estado estacionário, já que a forma da onda que se move com o oásis é conservada até o fim da simulação.

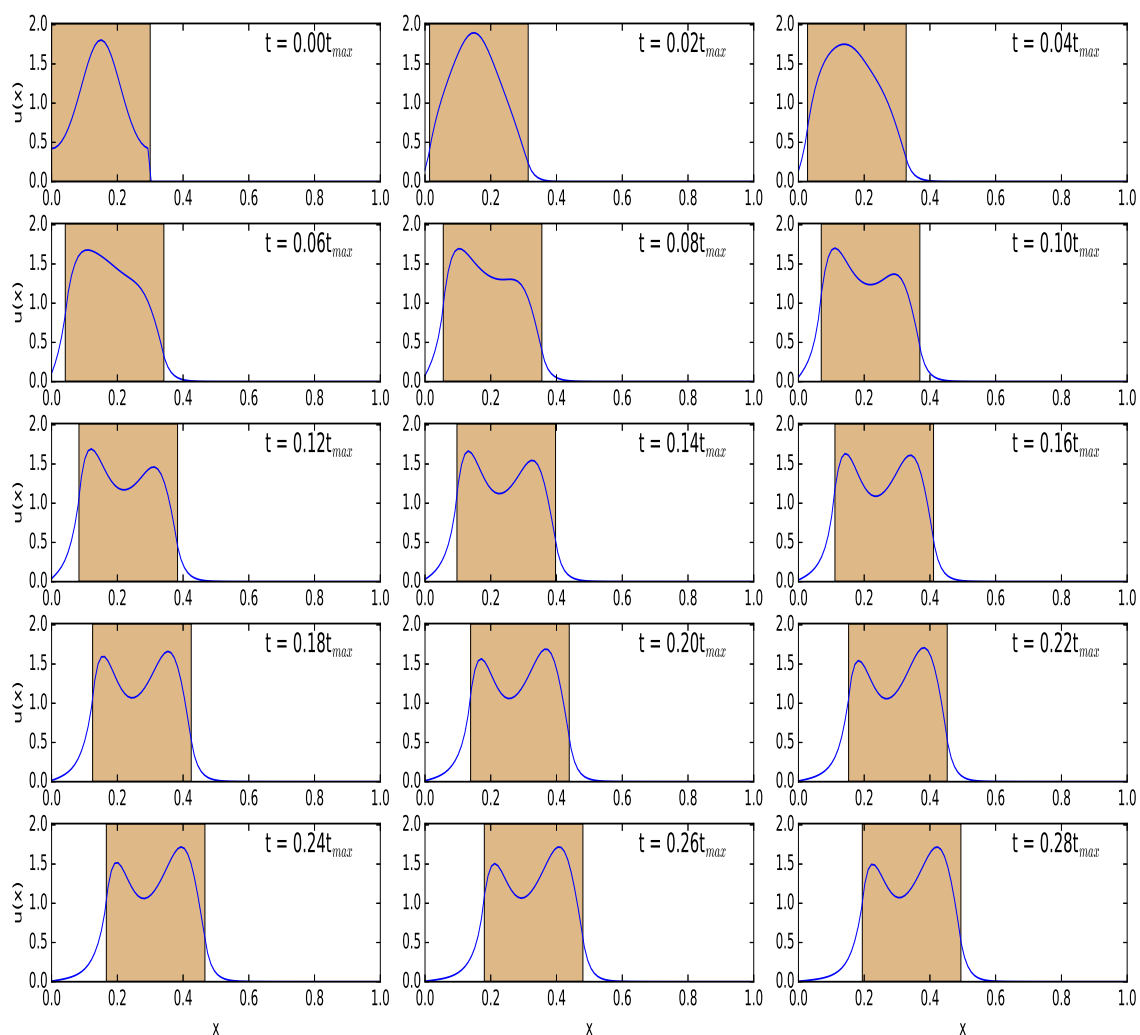


Figura 5.4: Evolução temporal do sistema com velocidade do oásis  $v = 0,25v_f$  e  $\beta = 0,2$ .

### 5.3 Entendendo o parâmetro $\beta$

A partir da análise das figuras 5.2-5.4 fica claro que o parâmetro  $\beta$ , inserido nas equações através do operador (5.7), é o principal responsável pela aparição de um pico duplo oscilante na densidade da população bacteriana durante o movimento do oásis pelo canal. Mas ainda não tem sido estabelecida uma relação entre  $\beta$  e alguma grandeza experimental, como a que existe entre  $\alpha$  e as grandezas  $a$  e  $D$ .

Com base na relação  $\alpha^2 a = 6D$  podemos pensar na grandeza  $\alpha^2 a$  como sendo o deslocamento quadrático médio realizado na unidade de tempo por qualquer uma das bactérias

da população analisada, sob “condições favoráveis de crescimento”, onde o termo entre aspas faz referência a que a taxa de crescimento  $a$  é a mesma em todo o espaço. A definição anterior tem caráter estatístico (devido à dependência com respeito de  $D$ ), e estabelece a ligação entre um dos parâmetros de nossa equação e uma propriedade intrínseca do sistema estudado, no caso, os deslocamentos das bactérias em condições homogêneas de crescimento.

Então podemos supor que  $\beta$  se relaciona de um modo similar com o sistema estudado, mas dessa vez os deslocamentos estariam associados com condições não homogêneas de crescimento. Ou seja, todos aqueles fatores que propiciam o crescimento desigual vão se combinar de modo que, além do movimento “normal”, exista uma componente de movimento adicional como resposta às condições externas, cuja origem se localiza nos processos internos que acontecem nas bactérias.

Procurando na literatura [58–60] encontramos que muitos organismos (incluindo as bactérias) utilizam os chamados relógios circadianos como sensores da atividade ambiental, o que permite que as bactérias possam reagir adequadamente aos estímulos externos. A maioria destes relógios utiliza redes de expressão genética intracelular compostas basicamente por elementos reguladores positivos e negativos cuja interação dá lugar ao surgimento de oscilações da expressão genética. O elemento positivo ativa os genes associados ao relógio, ao tempo que também promove a expressão do elemento negativo, cujo objetivo é diminuir a concentração do elemento positivo. O ciclo se fecha com a degradação do elemento negativo e a reparação do elemento positivo.

Uma característica crucial dos relógios descritos acima é que os mesmos conseguem manter um período constante [61], inclusive sob a influência de flutuações externas e internas (variações de temperatura, reações químicas que acontecem de modo aleatório dentro das bactérias, concentrações anormais de algumas espécies químicas), permitindo assim que um grande conjunto de processos seja sempre realizado na hora certa.

Isso implica que existe certo limite na amplitude das flutuações abaixo do qual os relógios conseguem operar normalmente. Mas, o que acontece quando esse limite é ultra-



passado? Neste ponto podemos retornar ao experimento realizado na Ref. [42], onde uma parte do espaço foi submetida a uma radiação muito intensa. A radiação pode ser vista como uma modificação do ambiente tão significativa que afeta de modo irreversível o funcionamento dos diferentes relógios dentro das bactérias, alterando o correto funcionamento das mesmas e causando, eventualmente, a sua morte.

Também resulta lógico supor que antes que aconteça o colapso definitivo da bactéria, na mesma se ativa um mecanismo que avisa sobre a impossibilidade de manter o correto desempenho das funções vitais nas atuais condições ambientais. Ou seja, que é emitida uma mensagem de alerta que pede para que a bactéria, literalmente, “corra pela sua vida”. Com isso o surgimento de uma componente adicional no movimento das bactérias fica explicado: o mesmo representa, no caso analisado, uma “resposta desesperada”, visando encontrar melhores condições de vida. Observe que, por sua natureza, a nova componente vai ser sempre maior do que a componente “normal”, o que estaria em correspondência com o nosso modelo, onde os padrões surgem para valores de  $\beta$  maiores que  $\alpha$ , sendo necessário, de modo geral, que  $\beta \geq 3\alpha$ .

Finalmente poderíamos propor, por analogia com (5.3), a seguinte relação para o parâmetro  $\beta$ :

$$\beta = \sqrt{\frac{6D_{em}}{a}}, \quad (5.10)$$

sendo  $D_{em}$  a “difusão emergencial” desenvolvida pelas bactérias submetidas a condições muito desfavoráveis. Esta relação também teria um caráter estatístico, já que  $D_{em}$  representa uma média dos deslocamentos quadráticos das bactérias. Mas a dependência funcional de cada um destes deslocamentos é, em geral, bastante complicada, já que estará relacionada com fatores internos e externos que agem sobre cada bactéria.

Entre os fatores internos encontramos o “estado físico-químico” da bactéria, determinado em grande medida pelo correto funcionamento dos relógios internos e pela quantidade de energia acumulada (obtida a partir do consumo de nutrientes) no momento em

que ela decide fugir do lugar em que está. Assim, uma bactéria cujos sistemas estejam funcionando corretamente no momento em que o ambiente se torna hostil deve percorrer maiores distâncias do que outra bactéria da mesma espécie previamente danificada. De modo similar, quanto maior for a energia acumulada, maior será a energia cinética no momento do escape, o que vai se traduzir em uma maior distância percorrida na unidade de tempo.

Como fator externo temos a localização espacial, já que uma bactéria que se encontra em uma zona com densidade populacional relativamente baixa, vai colidir menos com as suas vizinhas, sendo capaz de percorrer maiores distâncias do que outra bactéria localizada em uma zona de alta densidade. No entanto, em baixas densidades a bactéria poderia escolher o caminho errado e acabar morrendo, devido a que mecanismos de comunicação como o Quorum Sensing [62–68] resultam pouco estimulados.

Os elementos listados anteriormente foram analisados individualmente, mas em uma situação real os mesmos deveriam interferir, dando lugar a um movimento complicado cujos resultados só poderiam ser conhecidos através da realização de simulações especialmente preparadas.

## 5.4 Conclusão do capítulo

Podemos destacar vários resultados neste capítulo. Primeiramente, o nosso modelo, na forma dada pela equação (5.8), consegue reproduzir resultados experimentais que em trabalhos anteriores não tinham sido reproduzidos. Concretamente nos referimos ao pico duplo que aparece na densidade das bactérias que acompanham o oásis durante o seu movimento pelo canal. De acordo com a hipótese feita na literatura consultada [42], a origem dessas oscilações na densidade devia estar na dinâmica das diferentes redes de expressão genética presentes nas bactérias.

A ideia anterior foi confirmada na seção 5.3 onde, analisando o funcionamento dos relógios circadianos, concluímos que, no caso de condições ambientais muito desfavoráveis,

a bactéria deve responder com um deslocamento muito maior do que o normal. Assim chegamos a um outro grande resultado: uma ligação entre o experimento e o parâmetro  $\beta$ , já que este último pode ser visto como uma medida macroscópica das mudanças que a nível individual acontecem nas concentrações de certas proteínas nas bactérias, produto de variações significativas do ambiente. Então, por analogia, a grandeza  $\beta^2 a$  representaria **“o deslocamento quadrático médio realizado na unidade de tempo pelas bactérias sob condições muito desfavoráveis de crescimento”**.

A validade de alguns resultados dos capítulos 3 e 4 foi mantida, mesmo quando a equação e as condições de fronteira utilizadas não foram exatamente as mesmas. Esse foi o caso do valor de  $\beta$  a partir do qual começou a ser observado o pico duplo. Para  $\alpha = 0,05$  o pico duplo aparece a partir de  $\beta = 0,20$ ; o que está em correspondência com a tabela 3.5, onde se observa que para  $\alpha = 0,05$  os padrões começam a aparecer precisamente quando  $\beta \approx 0,20$ . Isso confirma a generalidade do nosso modelo, assim como o fato de que  $\beta$  é o parâmetro de mais peso na geração de padrões.

Por último, podemos estabelecer que para observar mais de um pico ao fazer simulações utilizando a equação (5.8), além da condição  $\beta \geq 3\alpha$ , também é necessário que

$$W > \beta, \tag{5.11}$$

já que o tamanho a região onde as condições de crescimento são favoráveis (similares às utilizadas no capítulo 4) deve ser suficientemente grande. A condição (5.11) foi comprovada nas simulações, justificando assim o valor do comprimento do oásis das figuras 5.3 e 5.4 ( $W = 0,3L$ ), que é maior do que o utilizado no experimento da Ref. [42].

# Capítulo 6

## Conclusões

Levando em conta os objetivos inicialmente propostos, o trabalho realizado até aqui pode ser dividido em dois grandes blocos. Por um lado, o estudo das ERD através do enfoque tradicionalmente utilizado por nosso grupo, para determinar as condições sob as quais os padrões são gerados. Por outro, as atividades dirigidas a estabelecer o significado físico de cada um dos parâmetros e resultados associados ao modelo desenvolvido no bloco inicial.

Na primeira parte, uma das mudanças inseridas a respeito de trabalhos anteriores foi a utilização de uma série de Fourier para expressar a densidade (equação (3.18)), que junto com as suposições iniciais feitas sobre o comportamento dos coeficientes  $B_n$  no estado estacionário permitiu estabelecer as principais características dos padrões que seriam obtidos nas simulações. Inclusive foi possível prever a existência de estados degenerados, onde o sistema não esquece das condições iniciais.

As simulações confirmaram os resultados dos modelos, permitindo determinar aquelas combinações  $(\alpha, \beta)$  que poderiam ser de utilidade para descrever padrões no caso de sistemas reais. Adicionalmente foi comprovada a efetividade do método apresentado no Apêndice A para resolver numericamente a ER, que se mostrou muito estável, oferecendo bons resultados em todos os casos em que foi utilizado.

O segundo bloco estava construído em boa parte, já que em trabalhos prévios [48,49,69] tinha sido estabelecida uma relação entre o parâmetro  $\alpha$  e o coeficiente de difusão. Aqui estendemos a ideia ao caso do parâmetro  $\beta$  e propusemos a relação (5.10). Mas agora os movimentos não seriam totalmente caóticos, senão que teriam o objetivo de fazer com que a bactéria conseguisse deixar aquela região do espaço que não oferecia condições para a manutenção da vida, motivo pelo qual era necessário que, de modo geral,  $\beta \geq 3\alpha$ . Dito de outro modo, estabelecemos que, além da componente aleatória, as bactérias podem desenvolver uma segunda componente no seu movimento, mais organizada, em resposta a condições ambientais muito desfavoráveis.

A interpretação física do parâmetro  $\beta$  (uma tarefa que estava pendente desde trabalhos anteriores, e que aqui teve uma primeira resposta) está indissoluvelmente ligada ao sucesso que tivemos ao adaptar nosso modelo às condições do experimento. Nesse processo foi perdida a alta simetria presente nos capítulos 3 e 4, mas mesmo assim vários resultados foram mantidos. Finalmente as simulações mostraram que com as adaptações realizadas nosso modelo consegue reproduzir resultados experimentais que modelos anteriores não tinham conseguido reproduzir.

Este último resultado é muito significativo, já que demonstra a utilidade do nosso modelo e deixa a porta aberta para futuras pesquisas. E existem varias atividades que poderiam ser desenvolvidas. Primeiramente temos que o presente trabalho esteve focado no estudo de uma população no caso unidimensional, o que ofereceu resultados muito bons. De modo que uma extensão natural seria o estudo do modelo em duas dimensões, considerando uma especie só ou várias interagindo no mesmo espaço, de modo que possam ser consideradas interações do tipo presa-predador.

Quando as ERD foram apresentadas, ficou claro que a forma do termo fonte teria uma influência muito grande nos resultados obtidos, já que o mesmo estava diretamente relacionado com as características do sistema estudado. No caso do nosso modelo, é a forma dos kernels não locais que tem um peso significativo. Aqui utilizamos o kernel dado em (3.7) porque facilita o trabalho matemático a ser desenvolvido, mas ele cumpre as

principais propriedades esperadas para uma distribuição que caracteriza a interação entre os indivíduos de uma população [69]. De modo que seria interessante utilizar outra forma funcional do kernel (por exemplo, o decaimento exponencial) e observar as mudanças que podem acontecer. Claro que, levando em conta o presente trabalho, mudar o kernel seria equivalente a escrever outra tese.

As simulações do capítulo 5 consideravam (de modo similar ao experimento) que os nutrientes estavam igualmente distribuídos por todo o espaço, e que sua quantidade permanecia constante, sendo a radiação intensa o único fator que alterava o comportamento das bactérias. Na realidade, resulta muito provável que os nutrientes não estejam igualmente distribuídos pelo espaço, dando lugar a ocorrência de fenômenos como a quimiotaxia (movimento dos organismos em direção ou longe de um químico) [70], que podem fazer que o coeficiente de difusão seja dependente da posição e do tempo [71]. Estas variações do coeficiente de difusão poderiam provocar oscilações adicionais na densidade, de modo que as mesmas poderiam ser observadas para comprimentos do oásis menores do que os previstos por nosso modelo, que é o que de fato acontece no experimento. Assim que a incorporação da quimiotaxia ao nosso modelo seria uma adição muito útil e interessante.

Agora vamos nos referir a um resultado obtido nos capítulos 3 e 4, e que é, até certo ponto, intrigante: a existência de estados degenerados para algumas combinações  $(\alpha, \beta)$ . Devido à marcada dependência com respeito às condições iniciais, estes estados foram descartados como candidatos viáveis para descrever os padrões formados pelo sistema ao atingir o estado estacionário que têm relação com sistemas reais. Então a única utilidade que encontramos para eles foi a de servir de base para ajustar os valores dos coeficientes fornecidos pela CM que não satisfaziam a condição (3.84). Mas sempre ficou no ar a questão de se seria possível associar estes estados com algum outro sistema ou processo real.

Em termos gerais, o grau de degenerescência aumenta com a diminuição do valor de  $\alpha$ . Ao mesmo tempo, este parâmetro está estreitamente ligado ao coeficiente de difusão, ou seja, se o valor de  $\alpha$  diminui o mesmo acontece com  $D$  (algo similar acontece com  $\beta$

e  $D_{em}$ ). Uma diminuição do valor do coeficiente de difusão traz como consequência um aumento do tempo necessário para que o sistema estudado atinja o estado estacionário (tempo de relaxação). No caso dos padrões espaciais formados pelas populações para maximizar seu tamanho e se adaptar às mudanças repentinas do ambiente, esperamos que o passo até o estado estacionário seja relativamente rápido. De modo que poderiam existir pares  $(\alpha, \beta)$  cujos tempos de relaxação sejam bem maiores do que os requeridos para descrever corretamente os padrões mencionados anteriormente, o que estaria de acordo com os comentários feitos ao final do capítulo 3.

Mas a escala temporal dos pares degenerados poderia ser compatível com os tempos associados a processos como a mutação, que são, em geral mais demorados quando comparados com as redes de expressão genética. Essa suspeita é reforçada pela figura 6.1, que mostra os resultados das simulações (feitas de acordo com as especificações do capítulo 4) correspondentes à combinação  $(\alpha, \beta) = (0,01; 0,10)$ , obtidos a partir de duas condições iniciais diferentes. Para cada condição inicial mostramos as distribuições inicial e final da densidade, assim como a evolução temporal do coeficiente  $B_0$ , cujo valor é diretamente proporcional ao tamanho da população.

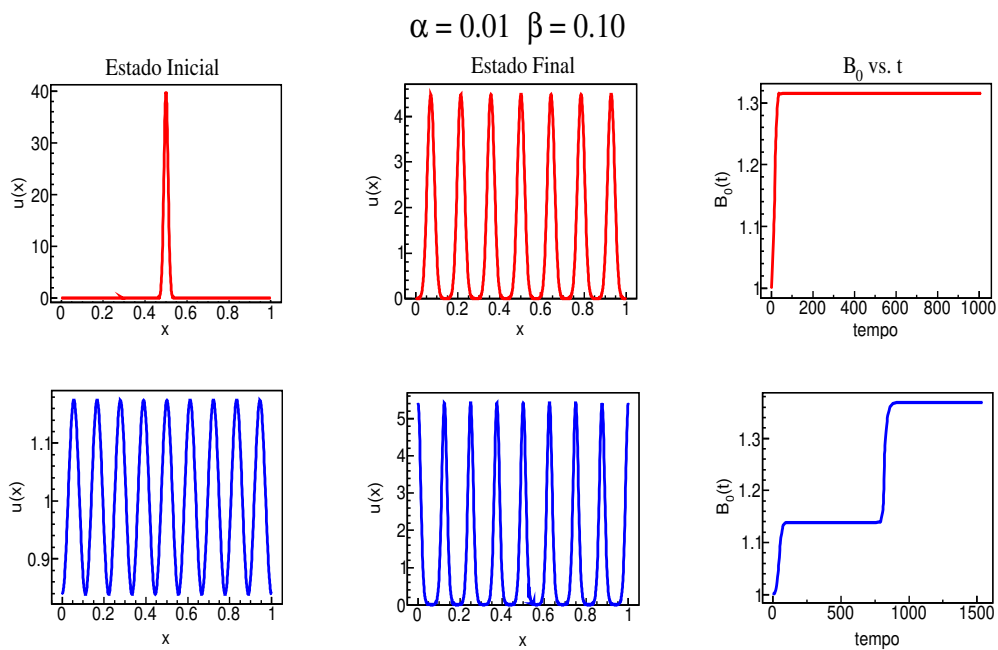


Figura 6.1: Influência das condições iniciais.

Observamos que para uma das condições iniciais, o coeficiente  $B_0$  apresenta durante sua evolução temporal o que poderíamos chamar de “estado metaestável”, durante o qual o valor de  $B_0$  fica praticamente constante, acontecendo posteriormente a transição para o estado final. Nesse ponto, poderíamos associar às condições iniciais com diferentes agentes mutagênicos que poderiam afetar a população. O estado metaestável representaria o intervalo de tempo em que toda a população é afetada de modo irreversível pelo agente, garantindo assim que as gerações seguintes apresentem a mesma mutação, que vai se manifestar através de uma resposta coletiva que varia de acordo com o agente (dependência entre os estados inicial e final). Claro que, o dito anteriormente é uma especulação. Ela só serve para estabelecer que, em efeito, seria muito interessante estudar essa “informação residual” fornecida por nosso modelo a partir de assumir que a mesma descreve outros processos reais.

Então podemos concluir afirmando que os objetivos inicialmente propostos foram cumpridos, já que foi demonstrada a grande utilidade das equações de reação difusão para descrever fenômenos como a formação de padrões, ao tempo que conseguimos adaptar nosso modelo para descrever, de modo muito satisfatório, o comportamento de sistemas reais.



# Apêndice A

## A equação de Riccati

### A.1 Introdução

A Equação de Riccati (ER) é uma equação diferencial não linear de primeira ordem que aparece frequentemente em diferentes ramas das ciências aplicadas e da engenharia [72–78]. Sua forma é dada por

$$\frac{dy}{dt} = p(t) + q(t)y + r(t)y^2, \quad (\text{A.1})$$

onde assumimos que todas as variáveis e funções são reais. Esta equação aparece, por exemplo, durante o estudo da relaxação linear de moléculas diatômicas em um gás sem estrutura [79], em problemas relacionados com a relatividade geral [80], bem como na teoria de controle [81–83]. Por outro lado, várias equações diferenciais de segunda ordem pode ser reduzidas a uma ER. Esse é o caso do oscilador harmônico amortecido dependente do tempo [84], a equação de Schrödinger unidimensional [85] e a equação do soliton [84, 86, 87].

Soluções analíticas da equação (A.1) podem ser encontradas em alguns casos especiais; a saber, quando uma solução particular  $y_p$  é conhecida, ou quando existem certas relações entre os coeficientes  $p(t)$ ,  $q(t)$  e  $r(t)$  [79, 84, 85, 88–90]. Mas, na maioria das vezes, a solução particular é desconhecida e não existe uma relação conveniente entre os coe-

ficientes. Portanto, é necessário usar métodos numéricos para resolver a equação, como Forward-Euler, Runge-Kutta, o método de decomposição de Adomian, ou o variacional iterativo [91–102].

No entanto, esses métodos geralmente apresentam um limitado intervalo de validade ou a sua implementação é complicada. Por isso no presente capítulo será desenvolvido um novo método que, além de resolver os problemas anteriores, é capaz de oferecer informação adicional útil tanto para otimizar o processo de solução da ER, como para resolver outras equações que possam surgir junto com ela no contexto do problema em estudo.

## A.2 Soluções analíticas aproximadas da equação de Riccati

Quando  $p(t) = 0$ , a equação (A.1) se torna uma equação de Bernoulli, que pode ser resolvida fazendo  $y = z^{-1}$  e utilizando o método da variação de parâmetros [103], obtendo que

$$y(t) = \frac{\exp\left(\int_{t_0}^t q(t') dt'\right)}{\tau - \int_{t_0}^t r(t') \exp\left(\int_{t_0}^{t'} q(t'') dt''\right) dt'}, \quad (\text{A.2})$$

sendo  $\tau$  uma constante de integração.

Supondo agora que  $\tau = \tau(t)$  e substituindo (A.2) em (A.1) se produz a seguinte equação para a função  $\tau$ :

$$\begin{aligned} \frac{d\tau}{dt} = & -p(t) \exp\left(-\int_{t_0}^t q(t') dt'\right) \left\{ \tau^2 - 2\tau \int_{t_0}^t r(t') \exp\left(\int_{t_0}^{t'} q(t'') dt''\right) dt' \right. \\ & \left. + \left[ \int_{t_0}^t r(t') \exp\left(\int_{t_0}^{t'} q(t'') dt''\right) dt' \right]^2 \right\}, \quad (\text{A.3}) \end{aligned}$$

que é outra ER, mas desta vez a dependência explícita de  $t$  leva a obter soluções aproximadas para  $\tau$  e  $y$ . Assim, quando  $t \rightarrow t_0$ , é possível fazer

$$\exp\left(\pm \int_{t_0}^t q(t') dt'\right) \approx 1 \pm \int_{t_0}^t q(t') dt', \quad (\text{A.4})$$

enquanto que o terceiro termo do lado direito de (A.3) é pequeno, resultando em

$$\frac{d\tau}{dt} = -p(t) [1 - \epsilon(t)] \tau^2 + 2p(t) [1 - \epsilon(t)] \tau \int_{t_0}^t r(t') [1 + \epsilon(t')] dt', \quad (\text{A.5})$$

onde

$$\epsilon(t) = \int_{t_0}^t q(t') dt'. \quad (\text{A.6})$$

A equação (A.5) é uma equação de Bernoulli, então sua solução é

$$\tau = \frac{1+2 \int_{t_0}^t p(t') [1-\epsilon(t')] \int_{t_0}^{t'} r(t'') [1+\epsilon(t'')] dt'' dt'}{1/\tau(t_0) + \int_{t_0}^t p(t') [1-\epsilon(t')] \left\{ 1+2 \int_{t_0}^{t'} p(t'') [1-\epsilon(t'')] \int_{t_0}^{t''} r(t''') [1+\epsilon(t''')] dt''' dt'' \right\} dt'}, \quad (\text{A.7})$$

que, depois de algumas operações torna-se

$$\tau = \frac{1}{1/\tau(t_0) + p(t_0)(t - t_0)}. \quad (\text{A.8})$$

De modo que a solução aproximada de (A.1) estará dada por

$$y(t) = \frac{y(t_0) + (t - t_0) [p(t_0) + y(t_0)q(t_0)]}{1 - y(t_0)r(t_0)(t - t_0)}, \quad (t \rightarrow t_0) \quad (\text{A.9})$$

com  $\tau(t_0) = 1/y(t_0)$ .

Por outro lado, quando  $t \gg t_0$ , a equação (A.3) toma a forma (considerando  $q(t) > 0$ ):

$$\begin{aligned} \frac{d\tau}{dt} &= p(t) \exp\left(-\int_{t_0}^t q(t') dt'\right) \\ &\times \left\{ 2\tau \int_{t_0}^t r(t') \exp\left(\int_{t_0}^{t'} q(t'') dt''\right) dt' - \left[ \int_{t_0}^t r(t') \exp\left(\int_{t_0}^{t'} q(t'') dt''\right) dt' \right]^2 \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Esta é uma equação diferencial linear cuja solução é

$$\tau = \exp\left(\int_{t_0}^t F(t') dt'\right) \left[ \tau(t_0) + \int_{t_0}^t G(t') \exp\left(-\int_{t_0}^{t'} F(t'') dt''\right) dt' \right], \quad (\text{A.11})$$

onde as funções  $F(t)$  e  $G(t)$  são definidas como

$$F(t) = 2p(t) \exp\left(-\int_{t_0}^t q(t') dt'\right) \int_{t_0}^t r(t') \exp\left(\int_{t_0}^{t'} q(t'') dt''\right) dt', \quad (\text{A.12})$$

$$G(t) = -p(t) \exp\left(-\int_{t_0}^t q(t') dt'\right) \left[ \int_{t_0}^t r(t') \exp\left(\int_{t_0}^{t'} q(t'') dt''\right) dt' \right]^2. \quad (\text{A.13})$$

Além das soluções aproximadas fornecidas acima, o novo método permite estimar o tamanho da passo de integração  $\Delta t = t - t_0$  a ser usado nos cálculos, já que existe um valor máximo de  $\epsilon(t)$  para o qual a aproximação feita em (A.4) permanece válida. Assim, para  $\epsilon(t) \leq 0,3$ ; a diferença relativa entre as funções  $\exp[\pm\epsilon(t)]$  e  $[1 \pm \epsilon(t)]$  é inferior ao cinco por cento, o que impõe a seguinte condição ao passo

$$|\Delta t| \leq \frac{0,3}{|q(t_0)|}, \quad (\text{A.14})$$

sendo possível usar um passo de integração variável, o que pode diminuir significativamente o número de iterações necessárias para encontrar a solução do problema em estudo.

De acordo com (A.14), quando  $q(t_0) = 0$ , o valor de  $\Delta t$  poderia ser qualquer um. No entanto, a equação (A.9) é válida apenas se  $\Delta t$  for pequeno o suficiente. Então o tamanho do passo de integração deve ser estimado de uma maneira diferente. Isso pode ser feito

por meio da substituição

$$y(t) = Y(t) + \sqrt{\left| \frac{p(t)}{r(t)} \right|}, \quad (\text{A.15})$$

que transforma (A.1) em outra ER; a saber,

$$\frac{dY}{dt} = P(t) + Q(t)Y + R(t)Y^2, \quad (\text{A.16})$$

com

$$P(t) = \frac{1}{2|r(t)|} \left[ \frac{d|r|}{dt} \sqrt{\left| \frac{p(t)}{r(t)} \right|} - \frac{d|p|}{dt} \sqrt{\left| \frac{r(t)}{p(t)} \right|} \right] + p(t) + r(t) \left| \frac{p(t)}{r(t)} \right|, \quad (\text{A.17})$$

$$Q(t) = 2\sqrt{|p(t)r(t)|}, \quad (\text{A.18})$$

$$R(t) = r(t), \quad (\text{A.19})$$

sendo possível resolver (A.16) e logo depois encontrar a solução para o problema original usando (A.15).

Assim, o resultado mais importante desta seção está dado pela equação (A.9), a qual oferece uma solução iterativa de (A.1) que depende apenas dos seus coeficientes avaliados em um valor anterior  $t_0$  da variável independente, portanto, sua implementação computacional é muito simples. Aqui a equação (A.9) substitui a fórmula correspondente ao método FE:

$$y(t_0 + \Delta t) = y(t_0) + \Delta t \left. \frac{dy}{dt} \right|_{t_0}. \quad (\text{A.20})$$

No caso do FE, o valor de  $\Delta t$  não é conhecido *a priori*, portanto, ele deve ser arbitrariamente fixado no início do cálculo ou estimado considerando termos de ordem superior na expansão, o que leva a equações cuja implementação computacional é frequentemente inviável, uma vez que o tempo de cálculo aumentaria consideravelmente. No caso da equação (A.9),  $\Delta t$  vem de (A.14). Esse valor de  $\Delta t$  terá efeito não apenas na ER, mas

também em qualquer outra equação diferencial que possa surgir junto com ela, uma vez que o valor de  $\Delta t$  usado para obter a solução deve ser o mesmo para cada uma delas. Então (A.9) parece ser uma boa opção para obter a solução aproximada de (A.1), como será visto nas próximas seções.

## A.3 Algumas soluções exatas

### A.3.1 Exemplo 1

Temos que [91, 95, 97, 104, 105]

$$\begin{aligned}\frac{dy_1}{dt} &= 1 + 2y_1(t) - y_1^2(t), \\ y_1(0) &= 0,\end{aligned}\tag{A.21}$$

com  $p(t) = 1$ ,  $q(t) = 2$  e  $r(t) = -1$ . A solução exata é

$$y_1(t) = 1 + \sqrt{2} \tanh \left[ \sqrt{2}t + \frac{\log \left( \frac{-1+\sqrt{2}}{1+\sqrt{2}} \right)}{2} \right],\tag{A.22}$$

que é comparada na figura A.1 com a equação (A.9). Os resultados são muito bons, como também pode ser verificado na Tabela A.1. A figura A.1 também mostra a solução de (A.21) obtida pela aplicação do método RK de quarta ordem, que oferece resultados similares ao nosso modelo.

As equações (A.11)-(A.13) permitem estudar o comportamento assintótico de  $y_1(t)$ . Para  $t \gg t_0$  é obtido que

$$\begin{aligned}F_1(t) &= -1, \\ G_1(t) &= -\frac{1}{4}e^{2t}, \\ \tau_1 &= -\frac{e^{2t}}{12},\end{aligned}\tag{A.23}$$

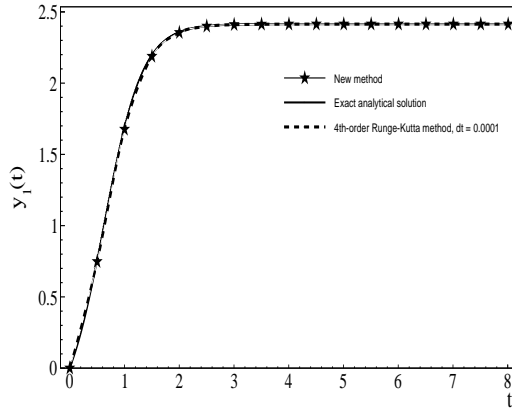


Figura A.1: Soluções exata e aproximada da equação (A.21).

$t$	Solução exata ( $S_e$ )	Solução aproximada ( $S_{app}$ )	$\frac{ S_e - S_{app} }{ S_e }$ (%)
0,48	0.718	0,709	1,26
1,00	1.691	1,676	0,89
2,00	2.358	2,355	0,13
3,00	2.411	2,410	0,01
4,00	2.414	2,414	0,00
5,00	2.414	2,414	0,00
6,00	2.414	2,414	0,00

Tabela A.1: Soluções exata e aproximada da equação (A.21).

de modo que

$$\lim_{t \gg t_0} y_1(t) = \frac{e^{2t}}{\frac{e^{2t}}{2} - \frac{e^{2t}}{12}} = \frac{12}{5} = 2,40; \quad (\text{A.24})$$

enquanto que (A.22) estabelece que

$$\lim_{t \gg t_0} y_1(t) = 1 + \sqrt{2} \approx 2,41; \quad (\text{A.25})$$

observando que as soluções aproximadas oferecem um bom estimado do valor assintótico da solução exata.

### A.3.2 Exemplo 2

$$\frac{dy_2}{dt} = 1 + t^2 - y_2^2(t), \quad (\text{A.26})$$

$$y_2(0) = 1,$$

com  $p(t) = 1 + t^2$ ,  $q(t) = 0$  e  $r(t) = -1$ . A solução exata é

$$y_2(t) = t + \frac{e^{-t^2}}{1 + \int_0^t e^{-x^2} dx}, \quad (\text{A.27})$$

que é comparada com a solução aproximada na figura A.2 e a Tabela A.2, respectivamente; obtendo, como no Exemplo 1, excelentes resultados. Novamente o RK fornece resultados semelhantes aos obtidos usando o novo método.

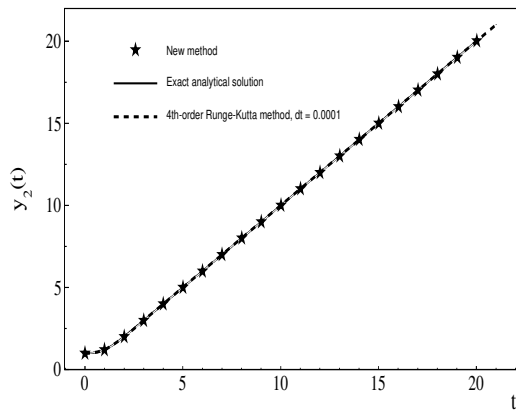


Figura A.2: Soluções exata e aproximada da equação (A.26).

$t$	Solução exata ( $S_e$ )	Solução aproximada ( $S_{app}$ )	$\frac{ S_e - S_{app} }{ S_e }$ (%)
0,50	1,033	1,031	0,18
1,00	1,211	1,206	0,44
3,00	3,003	2,993	0,33
5,00	5,005	4,995	0,20
10,01	10,010	10,000	0,10
15,01	15,010	15,005	0,06
20,00	20,000	19,990	0,05

Tabela A.2: Soluções exata e aproximada da equação (A.26).

### A.3.3 Exemplo 3

$$\frac{dy_3}{dt} = e^t - e^{3t} + 2e^{2t}y_3(t) - e^t y_3^2(t), \quad (\text{A.28})$$

$$y_3(0) = 1,$$

com  $p(t) = e^t - e^{3t}$ ,  $q(t) = 2e^{2t}$  e  $r(t) = -e^t$ . A solução exata é

$$y_3(t) = e^t. \quad (\text{A.29})$$



A presença do fator exponencial em  $q(t)$  impede o uso da solução aproximada dada por (A.9), uma vez que o valor de  $\Delta t$  necessário para garantir sua eficácia tende a zero muito rapidamente. Para casos como esse, resulta melhor eliminar o termo linear em  $y_3$ , o que é feito através da transformação [106, 107]

$$y_3(t) = v_3(t) - \frac{q(t)}{2r(t)}, \quad (\text{A.30})$$

que no presente caso resulta em

$$\begin{aligned} \frac{dv_3}{dt} &= -e^t v_3^2(t), \\ v_3(0) &= 0, \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

que, embora tenha uma solução exata, também pode ser vista como uma equação de Riccati com  $p(t) = q(t) = 0$ .

Agora a equação (A.9) pode ser usada para calcular  $v_3(t)$ , enquanto  $y_3(t)$  é determinado a partir de (A.30). Os resultados deste procedimento são mostrados na figura A.3 e na Tabela A.3, juntamente com a solução exata. Novamente, os resultados são excelentes. A figura A.3 também mostra a solução correspondente ao RK, que é muito semelhante à solução exata.

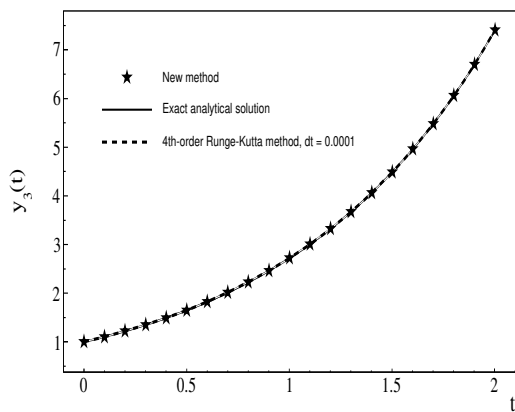


Figura A.3: Soluções exata e aproximada da equação (A.29).

$t$	Solução exata ( $S_e$ )	Solução aproximada ( $S_{app}$ )	$\frac{ S_e - S_{app} }{ S_e }$ (%)
0,00	1,000	1,000	0,00
0,50	1,649	1,649	0,00
1,00	2,716	2,716	0,00
1,50	4,479	4,479	0,00
2,00	7,389	7,389	0,00

Tabela A.3: Soluções exata e aproximada da equação (A.29).

### A.3.4 Exemplo 4

Agora temos o sistema [108]

$$\begin{aligned}\frac{dy_4}{dt} &= \frac{3 \cos^2 t - 1}{2 \cos t} + \frac{y_4^2(t)}{2 \cos t}, \\ y_4(0) &= -1.\end{aligned}\tag{A.32}$$

A solução exata é

$$y_4(t) = \sin t - \frac{1}{0.5 \sin t + \cos t},\tag{A.33}$$

que apresenta pontos singulares quando  $\tan t = -2$ . A tabela A.4 e a figura A.4 mostram as soluções exata e aproximada da equação (A.32). Mais uma vez a equação (A.9) dá bons resultados, exceto para os pontos próximos às singularidades. No caso da RK, oferece bons resultados entre a condição inicial e a primeira singularidade, quando começa a divergir.

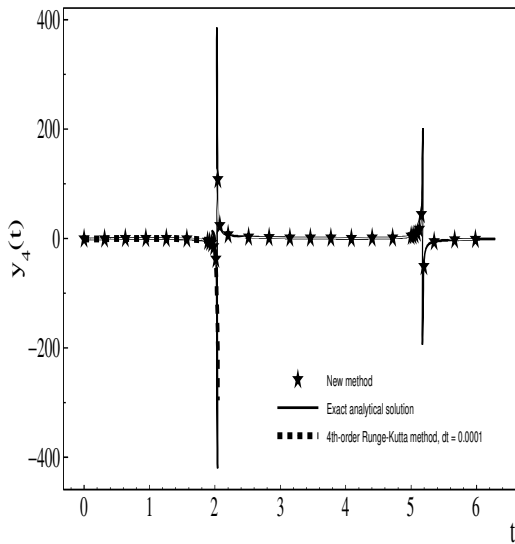


Figura A.4: Soluções exata e aproximada da equação (A.32).

$t$	Solução exata ( $S_e$ )	Solução aproximada ( $S_{app}$ )	$\frac{ S_e - S_{app} }{ S_e }$ (%)
0,00	-1,000	-1,000	0,00
1,00	-0,199	-0,196	1,51
1,50	-0,768	-0,758	1,33
2,03	268,210	426,160	58,89
3,00	1,229	1,229	0,00
4,00	0,212	0,210	0,99
5,00	4,152	4,096	1,36
5,18	-4447,300	823,680	118,52
6,00	-1,498	-1,498	0,00
6,28	-1,000	-1,000	0,00

Tabela A.4: Soluções exata e aproximada da equação (A.32).

## A.4 Vários métodos de cálculo

A partir dos resultados anteriores, obtemos que a densidade populacional  $u(x, t)$  (solução da equação (3.16)) pode ser calculada de duas maneiras:

i) através da equação (3.18) (Riccati), que quando substituída em (3.16) produz um sistema de  $n$  equações diferenciais para os coeficientes  $B_n(t)$  ( $n \geq 0$ ), sendo que a equação de  $B_0(t)$  é uma ER, enquanto que as outras são lineares de primeira ordem; então podemos usar (4.1) para calcular  $B_0(t)$  e (4.7) para determinar os outros coeficientes  $B_n(t)$ , junto com um intervalo de tempo variável determinado a partir de (4.11) e (4.12),

ii) integração direta da condição inicial  $u(x, 0)$  (DI), por meio da expansão

$$u(x, t_0 + \Delta t) = u(x, t_0) + \Delta t \left. \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} \right|_{t_0}, \quad (\text{A.34})$$

com  $\partial u(x, t)/\partial t$  dado por (3.16) e considerando  $\Delta t = 0, 1$ .

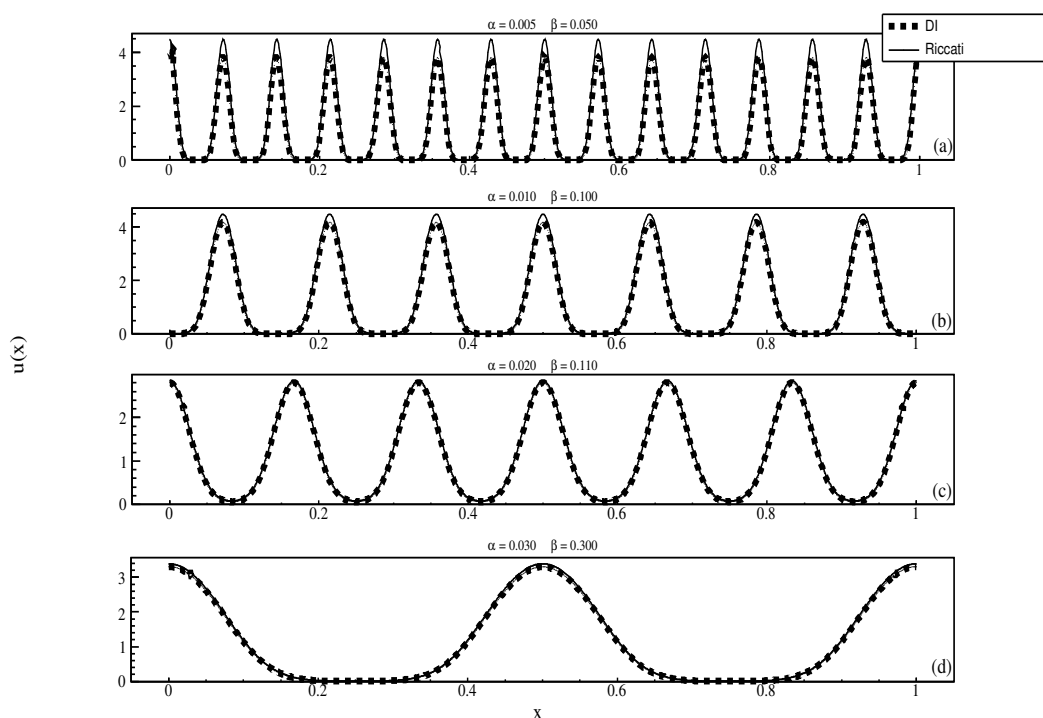


Figura A.5: Valores estacionários da densidade para diferentes valores de  $\alpha$  e  $\beta$ .

A figura A.5 mostra os valores estacionários da densidade  $u(x)$  para os mesmos valores de  $\alpha$  e  $\beta$  da figura 4.1. Também é possível observar a formação de padrões na densidade. A

$\alpha - \beta$	Passo ( $\Delta t$ )	Iterações necessárias para obter a solução estacionária
0,005-0,050	0,1	39254
	variable	8765
0,010-0,100	0,1	7790
	variable	2551
0,020-0,110	0,1	3464
	variable	1121
0,030-0,300	0,1	2267
	variable	773

Tabela A.5: Número de iterações necessárias para atingir o estado estacionário para diferentes passos e combinações de  $\alpha$  e  $\beta$ .

concordância entre os resultados oferecidos por DI e Riccati é bastante boa, e as diferenças podem estar relacionadas com erros sistemáticos apresentados pelo método de integração utilizado em DI, que neste trabalho foi a regra trapezoidal.

Agora é possível comparar os métodos para determinar  $u(x)$  (DI e Riccati), tomando como referência o número de iterações necessárias para atingir o estado estacionário, que é assumido como estabelecido quando as condições

$$\eta_{DI} = \int_0^L [u(x, t + \Delta t) - u(x, t)]^2 dx < 10^{-16}, \quad (DI) \quad (A.35)$$

$$\eta_B = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} [B_n(t_0 + \Delta t) - B_n(t_0)]^2 < 10^{-16}, \quad (Riccati) \quad (A.36)$$

se tornam verdadeiras. A este respeito, a tabela A.5 mostra o número de iterações necessárias para atingir a densidade estacionária  $u(x)$  para diferentes combinações  $\alpha - \beta$ . Para DI, foi utilizado  $\Delta t = 0,1$ , enquanto as Eqs. (4.11) e (4.12) serviram para determinar o tamanho de  $\Delta t$  em cada iteração feita usando Riccati. O número de iterações para as simulações executadas com um passo variável é consideravelmente menor do que no caso daquelas com  $\Delta t = 0,1$ .

## A.5 Relação entre as discretizações espacial e temporal

Como dito no capítulo 5, o valor de  $\Delta x$  vai determinar o tamanho do passo  $\Delta t$  a ser utilizado na evolução temporal descrita pela equação (5.9). De acordo com (A.14),  $\Delta t$  pode ser estimado a partir do coeficiente  $q(t)$  da ER, que no caso de (5.9) está dado pelo fator entre chaves no segundo termo do lado direito da mesma. Um dos termos que compõe este fator depende dos valores da densidade em pontos diferentes daquele que é analisado; concretamente o termo representa uma integral da densidade em uma  $\beta$  - vizinhança do ponto  $x$ . Para fazer o estimado, vamos substituir essa integral por  $2a\beta/b$  (lembrando que ao trabalhar com grandezas adimensionais  $a/b = 1$ ), de modo que

$$q(t) \approx \epsilon_x - \frac{2D}{(\Delta x)^2} - 1, \quad (\text{A.37})$$

$$\Delta t \leq \frac{0,3(\Delta x)^2}{|(\Delta x)^2(\epsilon_x - 1) - 2D|}. \quad (\text{A.38})$$

Assumindo que  $\epsilon_x = 1$  podemos escrever

$$\Delta t \approx \frac{0,3(\Delta x)^2}{2D}. \quad (\text{A.39})$$

Com os dados experimentais reportados na Ref. [42] podemos obter valores numéricos de  $\Delta t$ . Lá foi estabelecido que para  $a = 6 \cdot 10^{-4} \text{s}^{-1}$  o coeficiente de difusão é  $D_{exp} = 1.6 \cdot 10^{-4} \text{cm}^2 \text{s}^{-1}$ . Se o comprimento do canal for  $L_{exp} = 25 \text{cm}$  então o valor adimensional do coeficiente de difusão será  $D = D_{exp}/(aL_{exp}^2) = 4,27 \cdot 10^{-4}$ . Assim, para  $\Delta x = 0,001$  obtemos  $\Delta t = 0,35 \cdot 10^{-3}$ , o qual é compatível com os resultados das simulações, onde foi observado que quando  $\Delta x = 0,001$ , se o valor de  $\Delta t$  utilizado era maior do que  $1 \cdot 10^{-3}$  então os valores da densidade divergiam a partir de certo valor de  $t$ , o que no aconteceu para valores de  $\Delta t$  menores. Da mesma forma, se  $\Delta x = 0,01$ , então  $\Delta t = 0,35 \cdot 10^{-1}$ , que é cem vezes maior do que o  $\Delta t$  obtido ao considerar  $\Delta x = 0,001$ .

De modo que o número de iterações necessárias para completar uma simulação que utiliza  $\Delta x = 0,01$  será bem menor do que o número de iterações necessárias para completar uma simulação que utiliza  $\Delta x = 0,001$ , supondo que o resto das condições são as mesmas nos dois casos. As diferenças a respeito da duração das simulações são ainda maiores se levamos em conta que em cada iteração, para cada valor de  $x$ , deve ser resolvida numericamente uma integral, e o tempo de resolução da mesma aumenta com a diminuição do valor de  $\Delta x$ . Como resultado, a duração das simulações feitas com  $\Delta x = 0,01$  é significativamente menor daquelas feitas com  $\Delta x = 0,001$ . A título de exemplo, temos que em simulações realizadas com velocidade do oásis  $v = 5\sqrt{2aD}$ , aquela que utilizou  $\Delta x = 0,01$  e  $\Delta t = 0,01$  demorou  $6,12s$  (500 iterações), enquanto que aquela na que  $\Delta x = 0,001$  e  $\Delta t = 0,001$  demorou  $389,35s$  (5000 iterações). Com a diminuição da velocidade do oásis estas diferenças são muito mais expressivas.

## A.6 Comentários finais

O método da variação de parâmetros levou à obtenção de novas soluções analíticas aproximadas a Equação de Riccati (ER), que podem ser úteis em cálculos numéricos. A forma matemática das novas soluções é extremamente simples, portanto sua implementação computacional é imediata, independentemente do problema estudado.

Vários exemplos correspondentes à ER com soluções exatas conhecidas serviram para testar a aplicabilidade das novas soluções, obtendo excelentes resultados em todos os casos. Como as condições impostas aos coeficientes da equação (A.1) são poucas, podemos dizer que a aplicabilidade dos resultados da seção A.2 é bastante grande.

Por outro lado, um exemplo prático correspondente à dinâmica populacional também foi utilizado para verificar as novas soluções aproximadas. Desta vez, as equações apresentadas na Seção A.2 ajudaram a desenvolver outro método para determinar a densidade populacional  $u(x, t)$ , oferecendo resultados muito semelhantes aos obtidos pela integração direta da condição inicial. Da mesma forma, o tempo de cálculo foi consideravelmente

reduzido, tanto pelo uso de um step variável quanto pela eliminação das integrações espaciais.

O sistema formado pelas Eqs. (3.19) e (3.20) é muito semelhante ao obtido na Ref. [25], onde não foi resolvido diretamente. Neste trabalho, os novos métodos apresentados na seção A.2 permitiram a resolução efetiva desse sistema de equações, levando a uma relação entre o coeficiente da expansão que gera o padrão e o número de picos observados no padrão. Ao mesmo tempo, foi possível determinar o tamanho da população (o valor estacionário de  $B_0$ ) para cada par  $(\alpha, \beta)$ , o que poderia servir de base para o desenvolvimento de um modelo evolutivo que explique o papel ainda pouco conhecido do parâmetro  $\beta$  na geração de padrões [49].

# Apêndice B

## Cálculo do coeficiente $B_0(t_e)$ para o caso de dois termos não nulos

A partir de (3.25) podemos estabelecer, para o caso do sistema com dois termos não nulos no estado estacionário, que

$$\begin{aligned} B_0(1 - B_0^2) &= B_M^2 f(k_M \beta) + B_{2M}^2 f(k_{2M} \beta), \\ &= \frac{2\bar{\gamma}_M \bar{\gamma}_{2M}}{f(k_M \beta) [1 + \cos(k_M \beta)]} + \frac{2\bar{\gamma}_M^2 \cos(k_M \beta)}{f(k_M \beta) [1 + \cos(k_M \beta)]^2}, \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

onde levamos em conta as equações (3.62) e (3.63), tirando o índice ( $t_e$ ) para simplificar a notação, já que todas as operações serão realizadas considerando o estado estacionário.

Agora vamos definir as seguintes grandezas:

$$c_\beta = \cos(k_M \beta), \quad (\text{B.2})$$

$$\nu_{c_\beta} = 1 + \cos(k_M \beta), \quad (\text{B.3})$$

$$\eta_\beta = f(k_M \beta) [1 + \cos(k_M \beta)]^2, \quad (\text{B.4})$$

$$f_\alpha = f(k_M \alpha), \quad (\text{B.5})$$



$$f_\beta = f(k_M\beta), \quad (\text{B.6})$$

$$f_{2\alpha} = f(k_{2M}\alpha), \quad (\text{B.7})$$

$$f_{2\beta} = f(k_{2M}\beta), \quad (\text{B.8})$$

$$\nu_{f_{2\beta}} = 1 + f(k_{2M}\beta), \quad (\text{B.9})$$

$$\nu_{f_\beta} = 1 + f(k_M\beta). \quad (\text{B.10})$$

Substituindo (B.2)-(B.10) em (B.1) obtemos, depois de algumas operações, a seguinte equação quadrática:

$$0 = B_0^2 - B_0 \frac{\eta_\beta + 2\nu_{c_\beta} (f_\alpha \nu_{f_{2\beta}} + f_{2\alpha} \nu_{f_\beta}) + 4c_\beta f_\alpha \nu_{f_\beta}}{2\nu_{c_\beta} \nu_{f_\beta} \nu_{f_{2\beta}} + 2c_\beta \nu_{f_\beta}^2 + \eta_\beta} + 2 \frac{\nu_{c_\beta} f_\alpha f_{2\alpha} + c_\beta f_\alpha^2}{2\nu_{c_\beta} \nu_{f_\beta} \nu_{f_{2\beta}} + 2c_\beta \nu_{f_\beta}^2 + \eta_\beta}, \quad (\text{B.11})$$

de modo que o coeficiente  $B_0$  pode ser calculado como

$$B_0 = \frac{\eta_\beta + 2\nu_{c_\beta} (f_\alpha \nu_{f_{2\beta}} + f_{2\alpha} \nu_{f_\beta}) + 4c_\beta f_\alpha \nu_{f_\beta} + \sqrt{Disc}}{2 [2\nu_{c_\beta} \nu_{f_\beta} \nu_{f_{2\beta}} + 2c_\beta \nu_{f_\beta}^2 + \eta_\beta]}, \quad (\text{B.12})$$

onde o discriminante  $Disc$  estaria dado por

$$Disc = \left[ \eta_\beta + 2\nu_{c_\beta} (f_\alpha \nu_{f_{2\beta}} + f_{2\alpha} \nu_{f_\beta}) + 4c_\beta f_\alpha \nu_{f_\beta} \right]^2 - 8 \left[ \nu_{c_\beta} f_\alpha f_{2\alpha} + c_\beta f_\alpha^2 \right] \left[ 2\nu_{c_\beta} \nu_{f_\beta} \nu_{f_{2\beta}} + 2c_\beta \nu_{f_\beta}^2 + \eta_\beta \right], \quad (\text{B.13})$$

# Apêndice C

## Trabalhos publicados ou submetidos para publicação durante o doutorado

1. **Tumbarell, O.** et al. *Calculation of the Coulomb barrier and the level density parameter at the fission saddle point in spallation nuclear reactions.* **Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics**, v. 45, n. 11, p. 115103, 2018.
2. **Tumbarell, O.**, and Oliveira, F. A., *Analytical and numerical solutions of the Riccati equation using the method of variation of parameters. Application to population dynamics.* **Submetido ao Journal of Computational and Nonlinear Dynamics**
3. **Tumbarell, O.**, Penna, A.L.A., and Oliveira, F. A., *Evolutionary dynamics of bacterial pattern formation driven by mutation and selective binary division.* **Submetido à Physical Review Research**

# Referências

- [1] Ball, Philip: *Patterns in nature: why the natural world looks the way it does*. University of Chicago Press, 2016. 1
- [2] Brown, Robert: *A brief account of microscopical observations made in the months of june, july and august 1827, on the particles contained in the pollen of plants; and on the general existence of active molecules in organic and inorganic bodies*. Philosophical Magazine Series 2, 4(21):161–173, 1828. 4
- [3] Langevin, Paul: *Sur la théorie du mouvement brownien*. Compt. Rendus, 146:530–533, 1908. 4
- [4] Kubo, R: *The fluctuation-dissipation theorem*. Reports on Progress in Physics, 29(1):255, 1966. 5
- [5] Ciesla, M, SP Dias, Lech Longa e Fernando A Oliveira: *Synchronization induced by Langevin dynamics*. Physical Review E, 63(6):065202, 2001. 5
- [6] Morgado, Rafael, Fernando A Oliveira, G George Batrouni e Alex Hansen: *Relation between anomalous and normal diffusion in systems with memory*. Physical Review Letters, 89(10):100601, 2002. 5
- [7] Costa, Ismael VL, Rafael Morgado, Marcos VBT Lima e Fernando A Oliveira: *The fluctuation-dissipation theorem fails for fast superdiffusion*. EPL (Europhysics Letters), 63(2):173, 2003. 5
- [8] Costa, Ismael VL, Mendeli H Vainstein, Luciano C Lapas, Adriano A Batista e Fernando A Oliveira: *Mixing, ergodicity and slow relaxation phenomena*. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 371(1):130–134, 2006. 5
- [9] Vainstein, Mendeli H, Ismael VL Costa e FA Oliveira: *Mixing, ergodicity and the fluctuation-dissipation theorem in complex systems*. Em *Jamming, Yielding, and Irreversible Deformation in Condensed Matter*, páginas 159–188. Springer, 2006. 5
- [10] Vainstein, Mendeli H, Ismael VL Costa, Rafael Morgado e Fernando A Oliveira: *Non-exponential relaxation for anomalous diffusion*. EPL (Europhysics Letters), 73(5):726, 2006. 5
- [11] Lapas, Luciano C, Rafael Morgado, Mendeli H Vainstein, J Miguel Rubí e Fernando A Oliveira: *Khinchin theorem and anomalous diffusion*. Physical Review Letters, 101(23):230602, 2008. 5

- [12] Ferreira, RMS, MVS Santos, CC Donato, JS Andrade Jr e FA Oliveira: *Analytical results for long-time behavior in anomalous diffusion*. Physical Review E, 86(2):021121, 2012. 5
- [13] Ferreira, RMS, LC Lapas e FA Oliveira: *General scaling relations in anomalous diffusion*. Acta Physica Polonica B, 44(5), 2013. 5
- [14] Salinas, Silvio: *Introduction to Statistical Physics*. Springer Science & Business Media, 2013. 5
- [15] Lapas, Luciano C, Rogelma MS Ferreira, J Miguel Rubí e Fernando A Oliveira: *Anomalous law of cooling*. The Journal of Chemical Physics, 142(10):104106, 2015. 5
- [16] Murray, James D.: *Mathematical Biology I: An Introduction*. Interdisciplinary Applied Mathematics. Springer New York, 3ra edição, 2002. 8, 9, 10, 12, 15
- [17] Turing, A. M.: *The chemical basis of morphogenesis*. Philosophical Transactions Biological Sciences, 237, 1952. 10
- [18] C. Fife, Paul: *Mathematical Aspects of Reacting and Diffusing Systems*. Lecture Notes in Biomathematics 28. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1979. 10
- [19] Rothe, Franz: *Global solutions of reaction-diffusion systems*. Lecture Notes in Mathematics 1072. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1984. 10
- [20] Fisher, Ronald Aylmer: *The wave of advance of advantageous genes*. Annals of eugenics, 7(4):355–369, 1937. 11, 13
- [21] Kolmogorov, Andrei N: *A study of the equation of diffusion with increase in the quantity of matter, and its application to a biological problem*. Moscow University Bulletin of Mathematics, 1:1–25, 1937. 11, 14
- [22] Delprato, Anna M, Azadeh Samadani, A Kudrolli e LS Tsimring: *Swarming ring patterns in bacterial colonies exposed to ultraviolet radiation*. Physical Review Letters, 87(15):158102, 2001. 12
- [23] Fuentes, MA, MN Kuperman e VM Kenkre: *Nonlocal interaction effects on pattern formation in population dynamics*. Physical Review Letters, 91(15):158104, 2003. 12, 14, 16
- [24] Kenkre, VM: *Results from variants of the Fisher equation in the study of epidemics and bacteria*. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 342(1-2):242–248, 2004. 12, 14
- [25] Fuentes, MA, MN Kuperman e VM Kenkre: *Analytical considerations in the study of spatial patterns arising from nonlocal interaction effects*. The Journal of Physical Chemistry B, 108(29):10505–10508, 2004. 12, 14, 83
- [26] Showalter, Alexander S. Mikhailov; Kenneth: *Control of waves, patterns and turbulence in chemical systems*. Physics Reports, 425, 2006. 12, 14

- [27] Clerc, MG, E Tirapegui e M Trejo: *Pattern formation and localized structures in reaction-diffusion systems with non-fickian transport*. Physical Review Letters, 97(17):176102, 2006. 12
- [28] Bolster, Diogo, David A Benson, Tanguy Le Borgne e Marco Dentz: *Anomalous mixing and reaction induced by superdiffusive nonlocal transport*. Physical Review E, 82(2):021119, 2010. 12
- [29] Perry, Nicolas: *Experimental validation of a critical domain size in reaction-diffusion systems with Escherichia coli populations*. Journal of The Royal Society Interface, 2(4):379–387, 2005. 12
- [30] Liu, Quan Xing, Max Rietkerk, Peter MJ Herman, Theunis Piersma, John M Fryxell e Johan van de Koppel: *Phase separation driven by density-dependent movement: a novel mechanism for ecological patterns*. Physics of Life Reviews, 19:107–121, 2016. 12
- [31] Levchenko, Evgeniy Anatolievich, Aleksandr Vasilievich Shapovalov e A Yu Trifonov: *Pattern formation in terms of semiclassicaly limited distribution on lower dimensional manifolds for the nonlocal fisher-kolmogorov-petrovskii-piskunov equation*. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, 47(2):025209, 2013. 12
- [32] Blanchard, Andrew E, Venhar Celik e Ting Lu: *Extinction, coexistence, and localized patterns of a bacterial population with contact-dependent inhibition*. BMC Systems Biology, 8(1):23, 2014. 12
- [33] Colombo, Eduardo H e Celia Anteneodo: *Nonlinear diffusion effects on biological population spatial patterns*. Physical Review E, 86(3):036215, 2012. 12
- [34] Silva, DJ Pamplona da e Roberto André Kraenkel: *Population persistence in weakly-coupled sinks*. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 391(1-2):142–146, 2012. 12
- [35] Shapovalov, AV e A Yu Trifonov: *Asymptotic solutions of the 1D nonlocal Fisher-KPP equation*. arXiv preprint arXiv:1409.3158, 2014. 12
- [36] Silva, LA da, EH Colombo e C Anteneodo: *Effect of environment fluctuations on pattern formation of single species*. Physical Review E, 90(1):012813, 2014. 12
- [37] Shapovalov, Alexander V e A Yu Trifonov: *An application of the Maslov complex germ method to the one-dimensional nonlocal Fisher-KPP equation*. International Journal of Geometric Methods in Modern Physics, 15(06):1850102, 2018. 12
- [38] Yin, Hongwei e Xiaoqing Wen: *Pattern Formation through Temporal Fractional Derivatives*. Scientific Reports, 8(1):5070, 2018. 12
- [39] Zhao, Xiao Qiang e Wendi Wang: *Fisher waves in an epidemic model*. Discrete and Continuous Dynamical Systems - Series B, 4:1117–1128, 2004. 12
- [40] Avraham, Daniel ben: *Fisher waves in the diffusion-limited coalescence process  $a + a \rightleftharpoons a$* . Physics Letters A, 247(1-2):53–58, 1998. 12

- [41] Wang, Xiang Sheng, Haiyan Wang e Jianhong Wu: *Traveling waves of diffusive predator-prey systems: disease outbreak propagation*. *Discrete & Continuous Dynamical Systems-A*, 32(9):3303–3324, 2012. 12
- [42] Lin, Anna L, Bernward A Mann, Gelsy Torres-Oviedo, Bryan Lincoln, Josef Käs e Harry L Swinney: *Localization and extinction of bacterial populations under inhomogeneous growth conditions*. *Biophysical Journal*, 87(1):75–80, 2004. 12, 49, 51, 52, 55, 57, 61, 62, 63, 81
- [43] Nelson, David R e Nadav M Shnerb: *Non-hermitian localization and population biology*. *Physical Review E*, 58(2):1383, 1998. 12, 51
- [44] Koch, AJ e Hans Meinhardt: *Biological pattern formation: from basic mechanisms to complex structures*. *Reviews of Modern Physics*, 66(4):1481, 1994. 12
- [45] Cross, Mark C e Pierre C Hohenberg: *Pattern formation outside of equilibrium*. *Reviews of Modern Physics*, 65(3):851, 1993. 12
- [46] Dahmen, Karin A, David R Nelson e Nadav M Shnerb: *Life and death near a windy oasis*. *Journal of Mathematical Biology*, 41(1):1–23, 2000. 12, 51
- [47] Ben-Jacob, Eshel, Ofer Schochet, Adam Tenenbaum, Inon Cohen, Andras Czirok e Tamas Vicsek: *Generic modelling of cooperative growth patterns in bacterial colonies*. *Nature*, 368(6466):46, 1994. 12
- [48] Cunha, Jefferson A. R. da, André L. A. Penna e Fernando A. Oliveira: *Pattern formation and coexistence domains for a nonlocal population dynamics*. *Phys. Rev. E*, 83:015201, Jan 2011. 13, 14, 16, 25, 53, 65
- [49] Barbosa, Fernando V, André AL Penna, Rogelma MS Ferreira, Keila LV Novais, Jefferson AR da Cunha e Fernando A Oliveira: *Pattern transitions and complexity for a nonlocal logistic map*. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 473:301–312, 2017. 13, 16, 25, 65, 83
- [50] Press, William H., Brian P. Flannery, Saul A. Teukolsky e William T. Vetterling: *Numerical recipes in C: the art of scientific computing*. Cambridge University Press, 2nd ed edição, 1992. 14
- [51] Furter, J e Michael Grinfeld: *Local vs. non-local interactions in population dynamics*. *Journal of Mathematical Biology*, 27(1):65–80, 1989. 16
- [52] Pal, Swadesh, Malay Banerjee e S Ghorai: *Effects of boundary conditions on pattern formation in a nonlocal prey-predator model*. *Applied Mathematical Modelling*, 2019. 16
- [53] Ninomiya, Hirokazu, Yoshitaro Tanaka e Hiroko Yamamoto: *Reaction, diffusion and non-local interaction*. *Journal of Mathematical Biology*, 75(5):1203–1233, 2017. 16
- [54] Segal, BL, VA Volpert e Alvin Bayliss: *Pattern formation in a model of competing populations with nonlocal interactions*. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 253:12–22, 2013. 16

- [55] Callen, Herbert B: *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*. John Wiley and Sons, Inc., New York, 1985. 35, 43
- [56] Cunha, J.A.R. da, A.L.A. Penna, M.H. Vainstein, R. Morgado e F.A. Oliveira: *Self-organization analysis for a nonlocal convective Fisher equation*. Physics Letters A, 373(6):661 – 667, 2009. 35
- [57] Biner, S Bulent: *Programming phase-field modeling*. Springer, 2017. 53
- [58] Elowitz, Michael B e Stanislas Leibler: *A synthetic oscillatory network of transcriptional regulators*. Nature, 403(6767):335, 2000. 55, 60
- [59] Vilar, José MG, Hao Yuan Kueh, Naama Barkai e Stanislas Leibler: *Mechanisms of noise-resistance in genetic oscillators*. Proceedings of the National Academy of Sciences, 99(9):5988–5992, 2002. 60
- [60] Barkai, Naama e Stanislas Leibler: *Circadian clocks limited by noise*. Nature, 403(6767):267–268, 2000. 60
- [61] Edmunds, Leland N: *Cellular and molecular bases of biological clocks: models and mechanisms for circadian timekeeping*. Springer, 1988. 60
- [62] Kuipers, Oscar P, Pascale GGA de Ruyter, Michiel Kleerebezem e Willem M de Vos: *Quorum sensing-controlled gene expression in lactic acid bacteria*. Journal of Biotechnology, 64(1):15–21, 1998. 62
- [63] Miller, Melissa B e Bonnie L Bassler: *Quorum sensing in bacteria*. Annual Reviews in Microbiology, 55(1):165–199, 2001. 62
- [64] Ward, John P, John R King, AJ Koerber, P Williams, JM Croft e RE Sockett: *Mathematical modelling of quorum sensing in bacteria*. Mathematical Medicine and Biology, 18(3):263–292, 2001. 62
- [65] Brown, Sam P e Rufus A Johnstone: *Cooperation in the dark: signalling and collective action in quorum-sensing bacteria*. Proceedings of the Royal Society of London. Series B: Biological Sciences, 268(1470):961–965, 2001. 62
- [66] Daniels, Ruth, Jos Vanderleyden e Jan Michiels: *Quorum sensing and swarming migration in bacteria*. FEMS Microbiology Reviews, 28(3):261–289, 2004. 62
- [67] Hense, Burkhard A, Christina Kuttler, Johannes Müller, Michael Rothballer, Anton Hartmann e Jan Ulrich Kreft: *Does efficiency sensing unify diffusion and quorum sensing?* Nature Reviews Microbiology, 5(3):230–239, 2007. 62
- [68] Kannan, Rajesh E e Supreet Saini: *Mathematical modelling of quorum sensing in bacteria*. INAE Letters, 3(3):175–187, 2018. 62
- [69] Cunha, Jefferson Adriany R. da: *Não-Localidade e Formação de Padrão na Equação de Fisher-Kolmogorov*. Tese de Doutorado, Universidade de Brasília, 2008. 65, 66

- [70] Adler, Julius: *Chemotaxis in bacteria*. Science, 153(3737):708–716, 1966. 66
- [71] Murray, JD: *Mathematical Biology II: Spatial Models and Biomedical Applications*. Interdisciplinary Applied Mathematics. Springer New York, 3ra edição, 2002. 66
- [72] Reid, William T.: *Riccati Differential Equations*. Academic Press, New York, 1972. 69
- [73] Dehghan, Mehdi e Ameneh Taleei: *A compact split-step finite difference method for solving the nonlinear Schrödinger equations with constant and variable coefficients*. Computer Physics Communications, 181(1):43–51, 2010. 69
- [74] Rosu, Haret C., Stefan C. Mancas e Pisin Chen: *One-parameter families of supersymmetric isospectral potentials from Riccati solutions in function composition form*. Annals of Physics, 343:87 – 102, 2014. 69
- [75] Lucas, J. de, M. Tobolski e S. Vilariño: *Geometry of Riccati equations over normed division algebras*. Journal of Mathematical Analysis and Applications, 440(1):394 – 414, 2016. 69
- [76] Harko, T., Francisco S. N. Lobo e M. Mak: *A Riccati equation based approach to isotropic scalar field cosmologies*. International Journal of Modern Physics D, 23(7):1450063, 2014. 69
- [77] Gaubert, Stéphane e Zheng Qu: *The contraction rate in Thompson’s part metric of order-preserving flows on a cone – Application to generalized Riccati equations*. Journal of Differential Equations, 256(8):2902 – 2948, 2014. 69
- [78] Grundland, A.M. e J. de Lucas: *A Lie systems approach to the Riccati hierarchy and partial differential equations*. Journal of Differential Equations, 263(1):299 – 337, 2017. 69
- [79] Strelchenya, V M: *A new case of integrability of the general Riccati equation and its application to relaxation problems*. Journal of Physics A: Mathematical and General, 24(21):4965, 1991. 69
- [80] Mak, M.K. e T. Harko: *Isotropic stars in general relativity*. Eur. Phys. J. C, 73(10):2585, 2013. 69
- [81] Lee, Chien Hua, Tzuu Hseng S Li e Fan Chu Kung: *A Riccati equation approach to the robust memoryless stabilization of discrete time-delay systems*. Journal of the Franklin Institute, 332(1):107–114, 1995. 69
- [82] Hendrickson, Erik: *Synthesis of finite-dimensional Riccati-based feedback controls for problems arising in structural acoustics*. Journal of the Franklin Institute, 336(4):565–588, 1999. 69
- [83] Phat, Vu N: *Switched controller design for stabilization of nonlinear hybrid systems with time-varying delays in state and control*. Journal of the Franklin Institute, 347(1):195–207, 2010. 69



- [84] Mak, M.K. e T. Harko: *New integrability case for the Riccati equation*. Applied Mathematics and Computation, 218(22):10974 – 10981, 2012. 69
- [85] Mak, M.K. e T. Harko: *New further integrability cases for the Riccati equation*. Applied Mathematics and Computation, 219(14):7465 – 7471, 2013. 69
- [86] Dunajski, Maciej: *Solitons, instantons, and twistors*. Oxford University Press, New York, 2010. 69
- [87] Miwa, Tetsuji, Masaki Jimbo, Michio Jimbo e E Date: *Solitons: Differential equations, symmetries and infinite dimensional algebras*. Cambridge University Press, Cambridge, 2000. 69
- [88] Rainville, E. D.: *Necessary Conditions for Polynomial Solutions of Certain Riccati Equations*. The American Mathematical Monthly, 43(8):473–476, 1936. 69
- [89] Valentin F. Zaitsev, Andrei D. Polyanin: *Handbook of Exact Solutions for Ordinary Differential Equations*. Chapman & Hall/CRC, 2003. 69
- [90] Soare, Mircea V, Petre P Teodorescu e Ileana Toma: *Ordinary differential equations with applications to mechanics*. Springer, 2007. 69
- [91] El-Tawil, Magdy A, Ahmed A Bahnasawi e Ahmed Abdel-Naby: *Solving Riccati differential equation using Adomian's decomposition method*. Applied Mathematics and Computation, 157(2):503–514, 2004. 70, 74
- [92] Yang, Changqing, Jianhua Hou e Beibo Qin: *Numerical solution of Riccati differential equations by using hybrid functions and tau method*. International Journal of Mathematical and Computational Sciences, 6:216, 2012. 70
- [93] Mukherjee, Supriya e Banamali Roy: *Solution of Riccati equation with variable coefficient by differential transform method*. International journal of nonlinear science, 14(2):251–256, 2012. 70
- [94] Bulut, Hasan e David J Evans: *On the solution of the Riccati equation by the decomposition method*. International Journal of Computer Mathematics, 79(1):103–109, 2002. 70
- [95] Abbasbandy, Saeid: *Homotopy perturbation method for quadratic Riccati differential equation and comparison with Adomian's decomposition method*. Applied Mathematics and Computation, 172(1):485–490, 2006. 70, 74
- [96] Geng, Fazhan, Yingzhen Lin e Minggen Cui: *A piecewise variational iteration method for Riccati differential equations*. Computers & Mathematics with Applications, 58(11-12):2518–2522, 2009. 70
- [97] Lakestani, Mehrdad e Mehdi Dehghan: *Numerical solution of Riccati equation using the cubic B-spline scaling functions and Chebyshev cardinal functions*. Computer Physics Communications, 181(5):957–966, 2010. 70, 74

- [98] Yüzbaşı, Şuayip: *A numerical approximation based on the Bessel functions of first kind for solutions of Riccati type differential–difference equations*. Computers & Mathematics with Applications, 64(6):1691–1705, 2012. 70
- [99] Khader, MM: *Numerical treatment for solving fractional Riccati differential equation*. Journal of the Egyptian Mathematical Society, 21(1):32–37, 2013. 70
- [100] Ghomanjani, Fateme e Esmail Khorram: *Approximate solution for quadratic Riccati differential equation*. Journal of Taibah University for Science, 11(2):246–250, 2017. 70
- [101] Tsai, Pa Yee *et al.*: *An approximate analytic solution of the nonlinear Riccati differential equation*. Journal of the Franklin Institute, 347(10):1850–1862, 2010. 70
- [102] Adomian, George: *Solving frontier problems of physics: the decomposition method*, volume 60. Springer Science & Business Media, 2013. 70
- [103] Elsgolts, L.: *Differential equations and the calculus of variations*. Mir Publishers, 1977. 70
- [104] Abbasbandy, S: *A new application of He’s variational iteration method for quadratic Riccati differential equation by using Adomian’s polynomials*. Journal of Computational and Applied Mathematics, 207(1):59–63, 2007. 74
- [105] Abbasbandy, Saeid: *Iterated He’s homotopy perturbation method for quadratic Riccati differential equation*. Applied Mathematics and Computation, 175(1):581–589, 2006. 74
- [106] Haaheim, D Robert e F Max Stein: *Methods of solution of the Riccati differential equation*. Mathematics Magazine, 42(5):233–240, 1969. 77
- [107] Murphy, George Moseley: *Ordinary differential equations and their solutions*. Courier Corporation, 2011. 77
- [108] Boyce, William E, Richard C DiPrima e Douglas B Meade: *Elementary differential equations and boundary value problems*. Wiley New York, 1992. 78