

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS  
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

# Estudo de ondas viajantes não lineares de perfil saturado

AUTOR – Rubens Gamaliel Bergamo de Souza

ORIENTADOR – Prof. Dr. Salomon Sylvain Mizrahi

UFSCar - São Carlos

Abril/2013

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS  
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

# Estudo de ondas viajantes não lineares de perfil saturado

Rubens Gamaliel Bergamo de Souza

Dissertação submetida ao Departamento de Física da Universidade Federal de São Carlos - DF/UFSCar - como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Física.

ORIENTAÇÃO:

Prof. Dr. Salomon Sylvain Mizrahi

UFSCar - São Carlos

Abril/2013

**Ficha catalográfica elaborada pelo DePT da  
Biblioteca Comunitária da UFSCar**

S729eo Souza, Rubens Gamaliel Bergamo de.  
Estudo de ondas viajantes não lineares de perfil saturado  
/ Rubens Gamaliel Bergamo de Souza. -- São Carlos :  
UFSCar, 2014.  
69 f.

Dissertação (Mestrado) -- Universidade Federal de São  
Carlos, 2013.

1. Física estatística. 2. Equação de difusão. 3. Equações  
diferenciais não-lineares. I. Título.

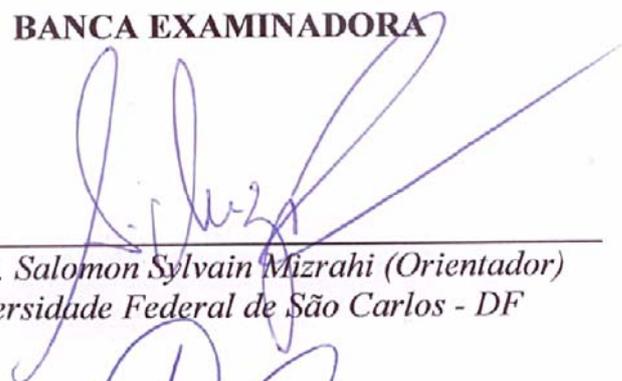
CDD: 530.13 (20ª)

**RUBENS GAMALIEL BERGAMO DE SOUZA**

Dissertação de mestrado submetida à Coordenação do Programa de Pós-Graduação em Física, da Universidade Federal de São Carlos, como requisito parcial para a obtenção do título de mestre em ciências.

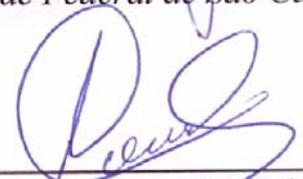
**Aprovado em: 29 de abril de 2013**

**BANCA EXAMINADORA**



---

*Prof. Dr. Salomon Sylvain Mizrahi (Orientador)*  
*Universidade Federal de São Carlos - DF*



---

*Prof. Dr. Alexandre Colato*  
*Universidade Federal de São Carlos – Araras*



---

*Prof. Dr. Leonardo Paulo Maia*  
*Universidade de São Paulo – IFSC*

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Modelo de ondas de perfil saturado</b>	<b>4</b>
2.1	Limite para o valor de $l$ na equação (3)	4
2.2	Método das tangentes hiperbólicas para equação de Fisher e Nagumo	5
2.2.1	Equação de Fisher	5
2.2.2	Equação de Nagumo	9
2.3	Método das Tangentes Hiperbólicas para a equação (3)	12
2.3.1	Colisão entre duas ondas	15
2.3.2	Estudo da largura da frente de onda da equação (85)	16
2.3.3	Estudo da velocidade da onda	19
<b>3</b>	<b>Energia e função de Hamilton para a equação (3)</b>	<b>21</b>
3.1	Caso onde $v = \mu$ , ou $\lambda = 0$	21
3.1.1	Aproximação para pequenos valores do termo contendo a energia, coeficiente de difusão, $d$ e $r$	22
3.1.2	Caso $l = 2$ ,	26
3.2	Obtenção da equação de Hamilton a partir da equação de Lagrange para o sistema	28
3.3	Caso $v \neq \mu$ , sistema “não-conservativo”	29
3.3.1	Energia para sistema não conservativo	30
3.4	Funções de Lagrange e Hamilton	31
3.5	Caso particular da equação (188), $G(\phi) = C\phi^2$	32
<b>4</b>	<b>Solução numérica</b>	<b>37</b>
4.1	Análise da dinâmica	38
4.2	Correlação	46
4.2.1	Correlação Espacial	47
4.2.2	Correlação Temporal	53
4.3	Análise da dinâmica para $p \neq q$	55
<b>5</b>	<b>Sumário e Conclusão</b>	<b>63</b>
<b>6</b>	<b>Apêndice</b>	<b>65</b>
6.1	Inversão de séries	65
6.2	Correlação	65

# Lista de Figuras

1	Evolução temporal da solução $\phi_1$ de Fisher com $r = 1$ e $D = 1$ . . . . .	8
2	Evolução temporal da solução $\phi_3$ de Fisher com $r = 1$ e $D = 1$ . . . . .	9
3	Solução $\phi_1$ da Equação de Nagumo para $x_0 = -7,5$ , $r = 1$ e $D = 1$ . . . . .	11
4	Solução $\phi_3$ da Equação de Nagumo para $x_0 = 7,5$ , $r = 1$ e $D = 1$ . . . . .	12
5	Colisões entre duas ondas - Onda 1 - $\phi_{3,2}$ com $x_0 = 15$ ; Onda 2 - $\phi_{1,2}$ com $x_0 = -15$ ; em ambos os casos $r = 8D$ e $t = 0$ . . . . .	16
6	Evolução temporal para as equações de Fisher e Nagumo, usando a solução (63) e (44) para $x = x_0 = 0$ e constantes $r = 1$ e $D = 1$ . . . . .	17
7	Variação da largura de onda variando com o expoente $l$ para $r = 1$ e $D = 1$ . . . . .	18
8	Abertura da frente de onda com $x_0 = 0$ . . . . .	18
9	Variação da velocidade $v$ em função do expoente $l$ para $D = 1$ e $r = 1$ . . . . .	20
10	Evolução temporal com parâmetros para a equação (248) $l = 1$ , $R = 0,8$ , $p = q = 0,2$ . . . . .	39
11	Evolução temporal para a equação (248) com parâmetros - $l = 1$ , $R = 0,8$ , $p = q = 0,2$ . . . . .	40
12	Dinâmica do segundo tipo de comportamento onde $l = 2$ , $R = 0,8$ e $p = q = 0,2$ . . . . .	40
13	Evolução temporal do sítio 132 - parâmetros para a equação (248) - $l = 1$ , $R = 0,8$ e $p = q = 0,20$ . . . . .	41
14	Evolução temporal do sítio 132 - parâmetros para a equação (248) - $l = 1$ , $R = 1,5$ , $p = q = 0,20$ . . . . .	41
15	Evolução temporal do sítio 132 - parâmetros para a equação (248) - $l = 1$ , $R = 1,9$ , $p = q = 0,20$ . . . . .	42
16	Evolução temporal para $l = 2$ , $p = q = 0,20$ . . . . .	42
17	Gráfico de bifurcação para $l = 1$ , $p = q = 0,2$ . . . . .	43
18	Gráfico de bifurcação para $l = 2$ , $p = q = 0,4$ . . . . .	44
19	Gráfico de bifurcação para $l = 2$ e $p = q = 0,2$ . . . . .	44
20	Gráfico de bifurcação para $l = 1$ , $p = q = 0,4$ . . . . .	45
21	Comportamentos para $p = q = 0,2$ . A linha sólida representa o limite entre o primeiro e o segundo comportamentos, e a tracejada o limite entre o segundo e o terceiro comportamentos . . . . .	46
22	Correlação espacial $l = 1$ , $R = 1,00$ , $p = q = 0,2$ . . . . .	48
23	Correlação espacial $l = 1$ , $R = 0,30$ , $p = q = 0,4$ . . . . .	48
24	Correlação espacial $l = 1$ , $R = 1,6$ , $p = q = 0,2$ . . . . .	49
25	Correlação espacial $l = 1$ , $R = 1,21$ , $p = q = 0,2$ . . . . .	50
26	Correlação espacial $l = 2$ , $R = 0,39$ , $p = q = 0,4$ . . . . .	50
27	Correlação espacial $l = 1$ , $R = 1,65$ , $p = q = 0,2$ . . . . .	51
28	Correlação espacial $l = 1$ , $R = 1,9$ , $p = q = 0,2$ . . . . .	52
29	Correlação espacial $l = 1$ , $R = 0,8$ , $p = q = 0,4$ . . . . .	52
30	Correlação espacial $l = 2$ , $R = 1,0$ , $p = q = 0,2$ . . . . .	53

31	Correlação espacial $l = 2, R = 0,41, p = q = 0,4$ . . . . .	53
32	Correlação temporal $l = 1, p = q = 0,2$ . . . . .	55
33	Correlação temporal $l = 2, p = q = 0,2$ . . . . .	55
34	Evolução Temporal com $l = 2, R = 0,39, p = 0,2$ e $q = 0,4$ . . . . .	56
35	Evolução temporal com $l = 2, R = 0,59, p = 0,2$ e $q = 0,4$ . . . . .	56
36	Evolução temporal com $l = 2, R = 0,65, p = 0,2$ e $q = 0,4$ . . . . .	57
37	Evolução temporal para um sítio para $l = 2, p = 0,2$ e $q = 0,4$ . . . . .	58
38	Gráfico de bifurcação para $l = 1, p = 0,2$ e $q = 0,4$ . . . . .	58
39	Gráfico de bifurcação para $l = 2, p = 0,2$ e $q = 0,4$ . . . . .	59
40	Curva de ajuste para o último ponto antes de cada comportamento com $p = 0,2$ e $q = 0,4$ . . . . .	60
41	Correlação espacial $l = 2, R = 0,39, p = 0,2$ e $q = 0,4$ . . . . .	60
42	Correlação espacial $l = 2, R = 0,59, p = 0,2$ e $q = 0,4$ . . . . .	61
43	Correlação espacial $l = 2, R = 0,65, p = 0,2$ e $q = 0,4$ . . . . .	62
44	Correlação Temporal $l = 2, p = 0,2$ e $q = 0,4$ . . . . .	62

# Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus, que foi quem me proporcionou forças e o ânimo para que eu chegasse até aqui. Agradeço a meus amigos que estiveram comigo em todos os momentos, “Em todo tempo ama o amigo, e na angústia se faz o irmão.” Pv 17:17. Em especial aos amigos que foram “obrigados” pelos laços da amizade a entrar em contato com meu trabalho, dando sugestões e fazendo correções. Agradeço ao meu orientador, professor Salomon Mizrahi que esteve presente em todos os momentos fazendo com que o trabalho andasse, sempre trazendo novas opções quando o trabalho “empacava”. Agradeço também ao professor Alexandre Colato pelas inúmeras vezes que esteve prestando suporte, desde a escolha do programa do mestrado da UFSCar e durante todo o período do mesmo, também auxiliando com as questões numéricas relacionadas a este trabalho. À minha família, que aceitou e apoiou minhas decisões, dando total suporte para que fosse possível continuar estudando. Agradeço ao CNPq pelo suporte financeiro para este trabalho

## Resumo

Neste trabalho, estudamos uma classe de ondas não lineares em uma dimensão utilizando a hipótese de ondas viajantes. Primeiramente encontramos as soluções para a equação diferencial parcial (EDP) contendo um termo de inhomogeneidade não linear,  $r\phi(1 - \phi^l)$ , que condiciona a onda a apresentar um perfil de saturação. Encontramos soluções analíticas para casos específicos e também transformamos a equação diferencial parcial em forma integral, fazendo um estudo das soluções. De posse das soluções, um estudo da variação dos parâmetros de acordo com o valor do expoente  $l$  do termo não linear da equação foi realizado. Também fazemos uma abordagem do problema com as funções lagrangiana e hamiltoniana, tornando possível definir a energia para a onda. Na última parte deste trabalho escrevemos a EDP na forma discreta de diferenças finitas. Resolvemos a equação numericamente e fizemos um estudo para  $l = 1, 2$  e variando o parâmetro que multiplica o termo inhomogêneo. Constatamos que podem passar de uma solução regular de perfil saturado à um comportamento caótico.

# Abstract

In this paper, we study a class of nonlinear waves in one dimension using the assumption of traveling waves. First we found the solutions to the partial differential equation (PDE) containing a term of nonlinear inhomogeneity,  $r\phi(1 - \phi^l)$ , which conditions the wave to present a saturation profile. We found analytical solutions for specific cases and also we transformed the partial differential equation in integral form, studying the solutions. In possession of the solutions, a study of the parameters' variation according to the value of the exponent  $l$  of the equation's nonlinear term was conducted. We also make an approach to the problem with the Lagrangian and Hamiltonian functions, making it possible to define the wave's energy. In the last part of this paper we write the EDP in the discrete form of finite difference. We solved the equation numerically and studied  $l = 1, 2$  and varying the parameter that multiplies the inhomogeneous term. We found that the solution can go from a regular saturated profile to chaotic behavior.

# 1 Introdução

Modelos difusivos são usados para descrever a concentração de algum material se deslocando espacialmente com o tempo. Este material pode representar, por exemplo partículas, membros de uma população biológica, componentes químicos, e pode ainda ser entendido como uma onda desse material se difundindo, espalhando-se por um meio. Os primeiros destes modelos difusivos têm sido atribuídos a Albert E. Fick no século XIX, inspirado pelos experimentos de Thomas Graham de difusão de sal em água. A difusão pode ser enunciada como sendo o deslocamento de partículas devido ao seu movimento aleatório, tal qual o movimento browniano [2]. Os modelos para descrever a difusão são usados para representar os mais variados fenômenos da natureza, como na ecologia, por exemplo, vemos modelos difusivos sendo aplicados para descrever, entre outros, a migração de populações [3, 4, 5, 6, 7]. Um dos temas com grande relevância e aplicabilidade no estudo de modelos difusivos pode ser encontrado no livro de Kundu [8], no qual está reunido um vasto conhecimento sobre a formação e difusão de ondas de tsunamis. Este estudo tinha como objetivo entender grandes desastres naturais como os ocorridos no oceano Índico em 2004, propondo modelos que poderiam ajudar na detecção de ondas gigantes e alertar as possíveis zonas que viriam a ser afetadas, bem como o entendimento dos motivos que tornam esses tipos de ondas tão destrutivas.

Neste trabalho é realizado um estudo de equações diferenciais parciais não lineares conhecidas como equações de reação-difusão. Estas equações, por sua vez, descrevem como um dado material se desloca no espaço e no tempo enquanto reage, podendo aumentar ou diminuir sua quantidade. Para encontrar as soluções destas equações consideramos ondas viajantes, onde o material se desloca como uma onda que mantém seu perfil intacto durante a evolução. Duas equações de difusão nos motivaram neste trabalho, a equação de Fisher e a de FitzHugh-Nagumo, também amplamente difundida como equação de Nagumo. A equação de Fisher foi proposta em 1937 por R. A. Fisher no artigo intitulado “A onda de avanço de genes vantajosos” (“the wave of advance of advantageous genes”) [9]. Neste artigo Fisher supunha uma população distribuída num habitat linear com densidade uniforme onde um gene de um dos indivíduos sofresse uma mutação vantajosa e começasse a espalhar-se pela população. Seu modelo é construído de forma a representar a dinâmica da forma mais simples possível. Nele são considerados a variação temporal, a difusão e o termo de crescimento do gene com mutação vantajosa, sendo dado pelo produto da frequência com que ele aparece por seu par alelomorfo não mutado e por uma constante que considera a intensidade da seleção entre estes. As soluções são por ele encontradas supondo-se ondas estacionárias (ou viajantes), além de estudar a velocidade da onda e obter alguns resultados numéricos. Em 1961 FitzHugh publica um trabalho intitulado “Impulsos e estados fisiológicos em modelos teóricos da membrana nervosa” (“Impulses and physiological states in theoretical models of nerve membrane”) [10], onde desenvolve um modelo teórico, utilizando equações diferenciais com termos não lineares, para explicar como se dá a transmissão de um pulso nervoso em um neurônio. Um ano depois, em 1962, Nagumo publica um artigo intitulado “Uma linha de transmissão ativa de pulsos simulando um axônio nervoso” (“An active pulse transmission line simulating nerve axon”) [11], onde ele também uti-

liza a equação de difusão não linear proposta por FitzHugh para criar um circuito equivalente à transmissão do pulso em neurônios animais. Seus resultados obtidos são também confirmados pelos experimentos com o circuito que construiu. Os modelos de Fisher [9] e o de Nagumo [11] podem ser enunciados através das Equações Diferenciais Parciais (EDP's) não lineares, sendo que nestas equações  $\phi$  representa a densidade do material difundindo. Assim, podemos escrever a equação de Fisher como

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} - D \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = r\phi(1 - \phi), \quad (1)$$

e a equação de Nagumo na forma

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} - D \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = r\phi(1 - \phi^2). \quad (2)$$

É interessante notar que em trabalhos mais recentes, equações de difusão com termos não lineares, e perfil saturado, como as equações de Fisher e de Nagumo, ainda têm sido largamente estudadas. No artigo de Mansour, soluções numéricas para equações de reação difusão, incluindo a equação de Fisher, são aplicadas para o estudo de células se difundindo [12]. No artigo de Feng et al. são encontradas soluções para a equação de Fisher generalizada através da transformação de Cole-Hopf, método das simetrias de Lie e através de soluções de ondas viajantes em termos de funções elípticas [13]. Khuri et al. estuda a equação generalizada de Fisher através do método de diferenças finitas usando um modelo construído pelos autores [14]. Discretizando espacialmente EDP's Slavova et. al. sugeriram um método para estudar a equação de Nagumo, com o método de simulação chamado de redes neurais celulares [15]. Neste artigo eles conseguiram encontrar novos fenômenos que não podem ser observados através das EDP's. Méndez et al. estudam em seu artigo o efeito das flutuações ambientais na invasão de indivíduos biológicos com o auxílio da equação de Fisher, onde são comparados resultados analíticos e também numéricos [16]. No trabalho de Cherniha o resultado de vários métodos por eles estudados, tais como o método de Lie, método das condições adicionais geradas, bem como uma família de soluções multiparâmetros exatas são comparados com resultados numéricos obtidos através do método de elementos finitos. Neste trabalho conclui-se que, para os casos estudados, para um tempo grande, os resultados numéricos tendem aos mesmos valores dos analíticos independentemente das condições iniciais [17]. Kawahara em seu artigo propõe uma solução para duas ondas colidindo, cuja dinâmica é guiada pela equação de Fisher, analítica e numericamente [18]. Na tabela 1 é possível observar uma comparação resumida entre estes artigos.

Artigo	Equação usada	Solução	Motivação
Mansour (2013)	Fisher entre outras	Numérica	Explicar difusão celular
Feng (2010)	Fisher generalizada	Analítica	Propagação de ondas não lineares
Khuri (2010)	Fisher generalizada	Numérica	Encontrar uma solução numérica
Slavova (2003)	FitzHugh-Nagumo	Numérica	Converter EDP's para um método de simulação
Méndez (2011)	Fisher e Nagumo	Analítica e Numérica	Invasão de indivíduos biológicos
Cherniha (2001)	Fisher generalizada	Analítica e Numérica	Utilizar vários métodos analíticos e comparação numérica
Kawahara (1983)	Fisher	Analítica e Numérica	Colisões entre duas ondas
Qiu (1998)	Fisher	Numérica	Investigar a viabilidade da técnica de simulação
Gazdag (1974)	Fisher	Numérica	Mostrar como genes em várias concentrações iniciais evoluem

Tabela 1: Comparação de alguns trabalhos que utilizam equações de difusão

A diferença nas equações de Fisher e Nagumo está no valor do expoente  $\phi$  presente no último termo. Neste trabalho, nos propusemos a investigar os casos quando o expoente  $l$  do termo  $(1 - \phi^l)$  pode assumir outros valores que não apenas 1, equação de Fisher, e 2, equação de Nagumo,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} - D \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = r\phi(1 - \phi^l). \quad (3)$$

Esta dissertação contém mais 4 capítulos. No segundo capítulo, descrevemos o modelo a ser estudado, obtemos as soluções e fazemos um estudo geral para os casos particulares de Fisher e Nagumo, bem como para casos gerais onde o expoente  $l$  pode assumir valores diferentes. No terceiro capítulo, definimos a energia da onda para o sistema usando as funções Lagrangeana e Hamiltoniana, das quais as equações diferenciais derivam e analisamos as equações de movimento delas. No quarto capítulo, a partir da equação (3) escrevemos a forma semelhante, mas não equivalente, usando diferenças finitas desta equação. Verificamos que para valores específicos do parâmetro  $r$ , as soluções coincidem, resultando em uma onda com função distribuição de perfil saturado. Para outros valores do parâmetro  $r$  os comportamentos das funções estudadas são bastante diferentes. No último resumizamos os resultados obtidos e discutimos as conclusões do trabalho.

## 2 Modelo de ondas de perfil saturado

A equação de difusão de perfil saturado é escrita em função de variáveis dependentes do tempo e espaço, bem como, de uma função dependente destas, que será denominada por  $\phi(x, t)$ . A função  $\phi(x, t)$  define a amplitude de uma onda que está se difundindo no instante  $t$ , e na posição  $x$ . Tendo em vista a relevância dos modelos difusivos, nos propomos, neste trabalho, a estudar o caso mais geral das equações conhecidas como equação de Fisher e Nagumo, dadas por

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} - D \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = r\phi(1 - \phi^l), \quad (4)$$

sendo Fisher  $l = 1$  e Nagumo  $l = 2$ .

Nestas equações, o lado esquerdo dessas equações descreve o efeito difusivo. No lado esquerdo, o parâmetro  $D$  é o coeficiente de difusão, sendo responsável por dizer quão facilmente uma onda pode se expandir; a constante  $r$ , é responsável pela variação da amplitude como resposta da intensidade da difusão no meio. Em geral, as equações de difusão inhomogênea com termos não lineares têm expoente inteiro. Neste trabalho estamos interessados nas soluções para equações do tipo da equação (3), quando  $l$  pode também assumir valores fracionários. Equações deste tipo são chamadas de perfil saturado, pois apresentam solução com amplitude saturada, devido ao fator  $(1 - \phi^l)$ , lembrando que

$$(1 - \phi^l) = (1 - \phi) \sum_{k=0}^{l-1} \phi^k. \quad (5)$$

### 2.1 Limite para o valor de $l$ na equação (3)

Segundo a proposta apresentada em [21, 22, 23] vamos supor uma onda viajante

$$\phi(x, t) = \phi\left(\frac{x - x_0 - vt}{d}\right) = \phi(\xi), \quad (6)$$

onde  $\xi = \frac{x - x_0 - vt}{d}$ . Aqui,  $v$  é a velocidade de propagação da onda no meio,  $x_0$  é a posição inicial dela, e  $d$  está inversamente relacionada com a largura do perfil da frente de onda. A equação (3) será agora

$$-\frac{v}{d} \frac{d\phi}{d\xi} - \frac{D}{d^2} \frac{d^2\phi}{d\xi^2} = r\phi(1 - \phi^l). \quad (7)$$

Para encontrar as soluções desta equação usaremos o *Ansatz* proposta em [?]

$$\phi(\xi) = \sum_{i=0}^M a_i \tanh^i \xi, \quad (8)$$

assim, podemos reescrever a equação (7), mas para isso temos que calcular as derivadas da

equação (8)

$$\frac{d\phi}{d\xi} = (1 - \tanh^2 \xi) \sum_{i=0}^M ia_i \tanh^{i-1} \xi, \quad (9)$$

$$\frac{d^2\phi}{d\xi^2} = (1 - \tanh^2 \xi) \sum_{i=0}^M ia_i [(i-1) \tanh^{i-2} \xi - (i+1) \tanh^i \xi]. \quad (10)$$

De forma que a equação (7) escreve-se como

$$\begin{aligned} -\frac{v}{d}(1 - \tanh^2 \xi) \sum_{i=1}^M ia_i \tanh^{i-1} \xi + \\ -\frac{D}{d^2}(1 - \tanh^2 \xi) \sum_{i=2}^M ia_i [(i-1) \tanh^{i-2} \xi - (i+1) \tanh^i \xi] = \\ = r \left( \sum_{i=0}^M a_i \tanh^i \xi \right) \left( 1 - \left( \sum_{i=0}^M a_i \tanh^i \xi \right)^l \right) \end{aligned} \quad (11)$$

Para que a igualdade seja satisfeita, ambos os termos de maior potência dessa equação devem ter o mesmo expoente

$$M + 2 = M + Ml \quad (12)$$

$$M = \frac{2}{l}, \quad (13)$$

como sabemos que  $M$  deve assumir um valor inteiro e positivo, então  $0 \leq l \leq 2$ .

## 2.2 Método das tangentes hiperbólicas para equação de Fisher e Nagumo

Nesta sessão encontraremos as soluções das equações de Fisher e Nagumo.

### 2.2.1 Equação de Fisher

Considerando uma onda viajante para a equação (4), esta toma a seguinte forma

$$-\frac{v}{d} \frac{d\phi}{d\xi} - \frac{D}{d^2} \frac{d^2\phi}{d\xi^2} = r\phi(1 - \phi) \quad (14)$$

Fazendo a mudança de variável

$$\phi(x, t) = u^2 \quad (15)$$

e usando as derivadas

$$\frac{d(u^2)}{d\xi} = 2u \frac{du}{d\xi} \quad (16)$$

e

$$\frac{d^2(u^2)}{d\xi^2} = \frac{d}{d\xi} \left( \frac{d(u^2)}{d\xi} \right) = \frac{d}{d\xi} \left( 2u \frac{du}{d\xi} \right) = 2 \left( \frac{du}{d\xi} \right)^2 + 2u \frac{d^2u}{d\xi^2}, \quad (17)$$

a equação (14) torna-se

$$-\frac{v}{d} \left( 2u \frac{du}{d\xi} \right) - \frac{2D}{d^2} u \frac{d^2u}{d\xi^2} - \frac{2D}{d^2} \left( \frac{du}{d\xi} \right)^2 = ru^2 (1 - u^2) \quad (18)$$

Para encontrar a solução, novamente vamos agora usar o *Ansatz* dado pela equação (8), onde, para não carregar as expressões, chamaremos  $Y = \tanh \xi$ ,

$$u = S(Y) = \sum_{k=0}^M a_k Y^k. \quad (19)$$

Assim as derivadas necessárias são

$$\frac{du}{d\xi} = \frac{dS(Y)}{dY} (1 - Y^2) \quad (20)$$

e

$$\frac{d^2u}{d\xi^2} = \left( \frac{d^2S}{dY^2} (1 - Y^2) - 2Y \frac{dS(Y)}{dY} \right) (1 - Y^2) \quad (21)$$

que substituídas na equação (18) levam-na à forma

$$\begin{aligned} -\frac{v}{d} (1 - Y^2) \left( 2S \frac{dS}{dY} \right) - \frac{2D}{d^2} S (1 - Y^2) \left( \frac{d^2S}{dY^2} (1 - Y^2) - 2Y \frac{dS}{dY} \right) + \\ -\frac{2D}{d^2} \left( \frac{dS}{dY} (1 - Y^2) \right)^2 = rS^2 (1 - S^2). \end{aligned} \quad (22)$$

Da equação (22), e lembrando da substituição dada pela equação (19), ao igualarmos os termos maior potência dos dois lados da igualdade, constatamos que

$$M = 1. \quad (23)$$

Assim

$$S(Y) = a_0 + a_1 Y, \quad (24)$$

$$\frac{dS(Y)}{dY} = a_1 \quad (25)$$

e

$$\frac{d^2S(Y)}{dY^2} = 0. \quad (26)$$

Substituindo as equações (25) e (26) na equação (22) temos

$$\begin{aligned} -\frac{2v}{d} (1 - Y^2) a_1 (a_0 + a_1 Y) - \frac{2D}{d^2} (a_0 + a_1 Y) (1 - Y^2) (-2Y a_1) - \frac{2D}{d^2} (a_1 (1 - Y^2))^2 = \\ = r (a_0 + a_1 Y)^2 (1 - (a_0 + a_1 Y)^2) \end{aligned} \quad (27)$$

que pode ser reescrita como

$$\begin{aligned}
& -\frac{2v}{d} (a_1 a_0 + a_1^2 Y - a_1 a_0 Y^2 - a_1^2 Y^3) + \frac{4D}{d^2} (a_1 a_0 Y + a_1^2 Y^2 - a_1 a_0 Y^3 - a_1^2 Y^4) + \\
& -\frac{2Da_1^2}{d^2} (1 - 2Y^2 + Y^4) = r (a_0^2 + 2a_0 a_1 Y + a_1^2 Y^2) + \\
& -r (a_0^4 + 4a_0^3 a_1 Y + 6a_0^2 a_1^2 Y^2 + 4a_0 a_1^3 Y^3 + a_1^4 Y^4)
\end{aligned} \tag{28}$$

Igualando os termos de mesma potência em  $Y$  de cada lado do sinal da igualdade, encontramos o seguinte sistema de equações

$$-\frac{2v}{d} a_1 a_0 - \frac{2D}{d^2} a_1^2 = r a_0^2 (1 - a_0^2) \tag{29}$$

$$-\frac{2v}{d} a_1^2 + \frac{4D}{d^2} a_1 a_0 = r (2a_0 a_1 - 4a_0^3 a_1) \tag{30}$$

$$\frac{2v}{d} a_1 a_0 + \frac{8D}{d^2} a_1^2 = r (a_1^2 - 6a_0^2 a_1^2) \tag{31}$$

$$\frac{2v}{d} a_1^2 - \frac{4D}{d^2} a_1 a_0 = -4r a_0 a_1^3 \tag{32}$$

$$-\frac{6D}{d^2} a_1^2 = -r a_1^4 \tag{33}$$

cujas soluções determinam os seguintes coeficientes e parâmetros

$$a_0 = \pm \frac{1}{2}, \tag{34}$$

$$a_1 = \pm \frac{1}{2}, \tag{35}$$

$$v = \pm \frac{5\sqrt{Dr}}{\sqrt{6}}, \tag{36}$$

$$d = 2\sqrt{\frac{6D}{r}}. \tag{37}$$

Assim, as soluções possíveis são

$$u_1(x, t) = \left\{ \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \tanh \left[ \frac{1}{2} \sqrt{\frac{r}{6D}} \left( x - x_0 - 5\sqrt{\frac{Dr}{6}} t \right) \right] \right\}, \tag{38}$$

$$u_2(x, t) = \left\{ \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \coth \left[ \frac{1}{2} \sqrt{\frac{r}{6D}} \left( x - x_0 - 5\sqrt{\frac{Dr}{6}} t \right) \right] \right\}, \tag{39}$$

$$u_3(x, t) = \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left[ \frac{1}{2} \sqrt{\frac{r}{6D}} \left( x - x_0 + 5\sqrt{\frac{Dr}{6}} t \right) \right] \right\} \tag{40}$$

e

$$u_4(x, t) = \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \coth \left[ \frac{1}{2} \sqrt{\frac{r}{6D}} \left( x - x_0 + 5\sqrt{\frac{Dr}{6}} t \right) \right] \right\} \quad (41)$$

mas como queremos  $\phi(x, t)$ , lembrando que  $\phi(x, t) = (u(x, t))^2$  teremos as soluções

$$\phi_1(x, t) = \left\{ \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \tanh \left[ \frac{1}{2} \sqrt{\frac{r}{6D}} \left( x - x_0 - 5\sqrt{\frac{Dr}{6}} t \right) \right] \right\}^2, \quad (42)$$

$$\phi_2(x, t) = \left\{ \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \coth \left[ \frac{1}{2} \sqrt{\frac{r}{6D}} \left( x - x_0 - 5\sqrt{\frac{Dr}{6}} t \right) \right] \right\}^2, \quad (43)$$

$$\phi_3(x, t) = \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left[ \frac{1}{2} \sqrt{\frac{r}{6D}} \left( x - x_0 + 5\sqrt{\frac{Dr}{6}} t \right) \right] \right\}^2 \quad (44)$$

e

$$\phi_4(x, t) = \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \coth \left[ \frac{1}{2} \sqrt{\frac{r}{6D}} \left( x - x_0 + 5\sqrt{\frac{Dr}{6}} t \right) \right] \right\}^2 \quad (45)$$

Entre as equações (42)-(45), apenas as equações (42) e (44) representam soluções fisicamente aceitáveis, já que as equações (43) e (45) permitem valores negativos, o que não teria significado real. Usamos a solução (42) e (44) para obter as figuras 1 e 2 respectivamente, que descrevem a dinâmica de uma onda inicialmente localizada em  $x_0 = 0$  e se deslocando. Nota-se nas figuras 1 e 2 o perfil de saturação da onda, com valor máximo 1.

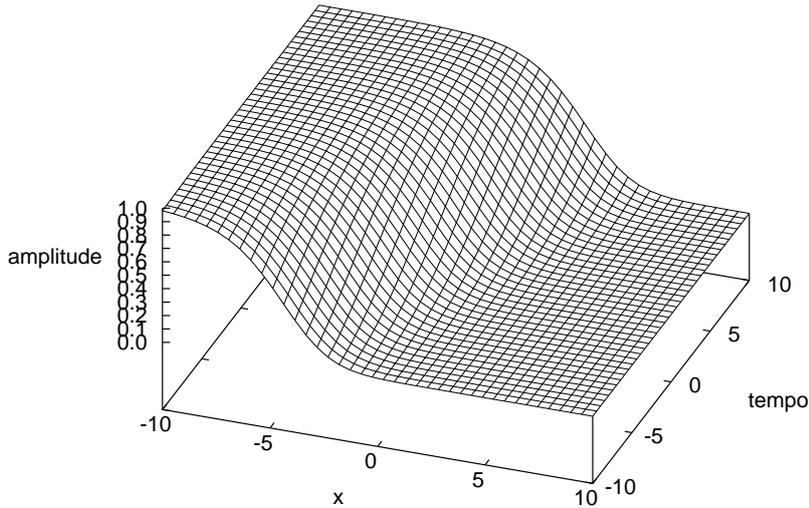


Figura 1: Evolução temporal da solução  $\phi_1$  de Fisher com  $r = 1$  e  $D = 1$

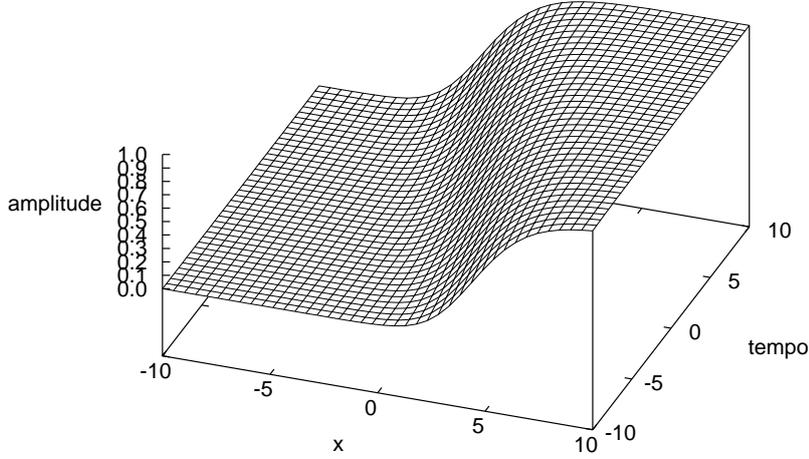


Figura 2: Evolução temporal da solução  $\phi_3$  de Fisher com  $r = 1$  e  $D = 1$

### 2.2.2 Equação de Nagumo

Quando usamos  $l = 2$  na equação (3) ela toma a forma da equação de Fisher. Usando o método das tangentes hiperbólicas propondo uma onda viajante, como na equação (6), temos

$$\phi(x, t) = \phi\left(\frac{x - x_0 - vt}{d}\right) = \phi(\xi), \quad (46)$$

e assim

$$-\frac{v}{d} \frac{d\phi}{d\xi} - \frac{D}{d^2} \frac{d^2\phi}{d\xi^2} = r\phi(1 - \phi^2). \quad (47)$$

Usando o *Ansatz* dado pela equação (8), obtemos as derivadas, como foi mostrado na equação (9)

$$\frac{d\phi}{d\xi} = (1 - Y^2) \sum_{k=0}^M ka_k Y^k \quad (48)$$

e na equação (10)

$$\frac{d^2\phi}{d\xi^2} = (1 - Y^2) \sum_{k=0}^M ka_k [(k-1)Y^{k-2} - (k+1)Y^k]. \quad (49)$$

Assim a equação (47) toma a seguinte forma

$$-\frac{D}{d^2}(1 - Y^2) \sum_{k=0}^M ka_k [(k-1)Y^{k-2} - (k+1)Y^k] - \frac{v}{d}(1 - Y^2) \sum_{k=0}^M ka_k Y^{k-1} =$$

$$= r \left( \sum_{k=0}^M a_k Y^k \right) - r \left( \sum_{k=0}^M a_k Y^k \right)^3. \quad (50)$$

Comparando as maiores potências na equação (50), constatamos que

$$2 + M = 3M, \quad (51)$$

de onde  $M = 1$ , e a equação (50) se escreve então como

$$\begin{aligned} & -\frac{D}{d^2} (1 - Y^2) [-2a_1 Y] - \frac{v}{d} (1 - Y^2) a_1 = \\ & = r (a_0 + a_1 Y) - r (a_0^3 + 3a_0^2 a_1 Y + 3a_0 a_1^2 Y^2 + a_1^3 Y^3). \end{aligned} \quad (52)$$

Comparando as potências na equação (52) obtemos a seguinte sistema de equações

$$-\frac{v}{d} a_1 = r a_0 (1 - a_0^2), \quad (53)$$

$$2\frac{D}{d^2} a_1 = r a_1 (1 - 3a_0^2), \quad (54)$$

$$\frac{v}{d} a_1 = -3r a_0 a_1^2, \quad (55)$$

$$-2\frac{D}{d^2} a_1 = -r a_1^3, \quad (56)$$

que permite determinar os coeficientes e parâmetros

$$a_1 = \pm \frac{1}{2}, \quad (57)$$

$$a_0 = \pm \frac{1}{2}, \quad (58)$$

$$v = \pm 3\sqrt{\frac{Dr}{2}}, \quad (59)$$

$$d = 2\sqrt{\frac{2D}{r}}. \quad (60)$$

e portanto as soluções são 4,

$$\phi_1(x, t) = \frac{1}{2} \left( 1 - \tanh \left[ \frac{1}{2} \sqrt{\frac{r}{2D}} \left( x - x_0 - 3\sqrt{\frac{Dr}{2}} t \right) \right] \right), \quad (61)$$

$$\phi_2(x, t) = \frac{1}{2} \left( 1 - \coth \left[ \frac{1}{2} \sqrt{\frac{r}{2D}} \left( x - x_0 - 3\sqrt{\frac{Dr}{2}} t \right) \right] \right), \quad (62)$$

$$\phi_3(x, t) = \frac{1}{2} \left( 1 + \tanh \left[ \frac{1}{2} \sqrt{\frac{r}{2D}} \left( x - x_0 + 3\sqrt{\frac{Dr}{2}} t \right) \right] \right) \quad (63)$$

e

$$\phi_4(x, t) = \frac{1}{2} \left( 1 + \coth \left[ \frac{1}{2} \sqrt{\frac{r}{2D}} \left( x - x_0 + 3\sqrt{\frac{Dr}{2}} t \right) \right] \right). \quad (64)$$

Como exemplo, podemos visualizar as soluções (61) e (63) e nas figuras 3 e 4 respectivamente. Nestas figuras, temos uma onda unidimensional, que assume valores mais altos primeiramente para os  $x$  da esquerda para a direita nos dois primeiros casos, e da direita para a esquerda nos dois últimos casos. Ainda é importante lembrar que como as soluções (62) e (64) apresentam  $\phi$  com valores negativos, elas não vão representar soluções aceitáveis fisicamente.

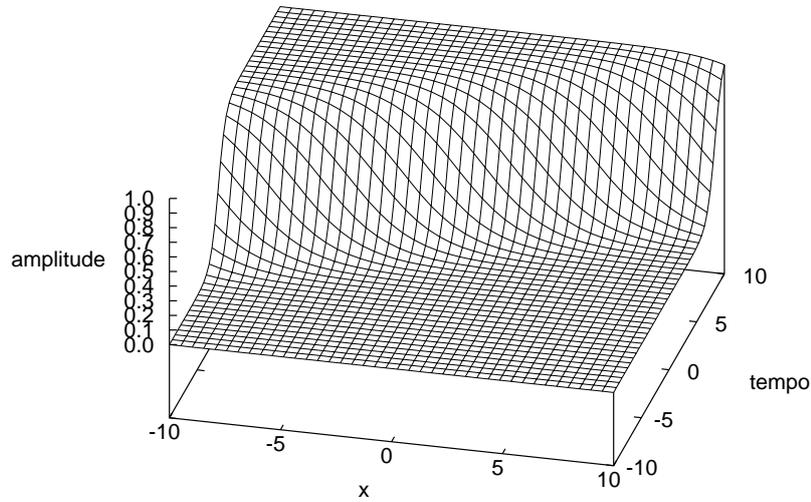


Figura 3: Solução  $\phi_1$  da Equação de Nagumo para  $x_0 = -7,5$ ,  $r = 1$  e  $D = 1$

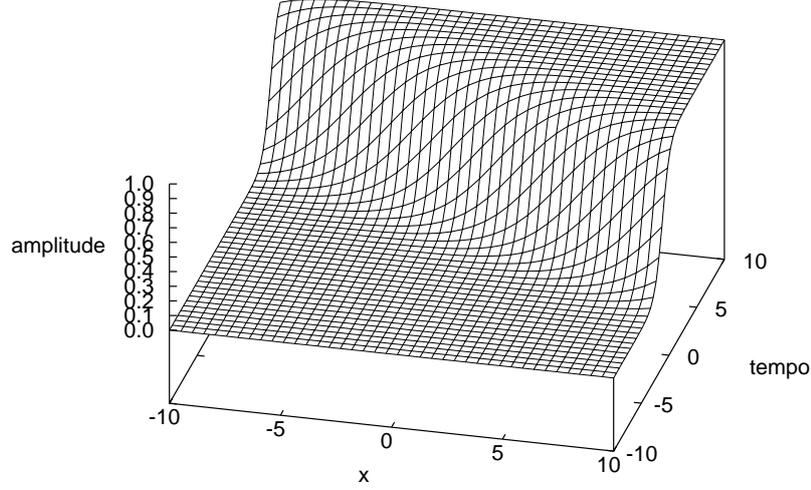


Figura 4: Solução  $\phi_3$  da Equação de Nagumo para  $x_0 = 7,5$ ,  $r = 1$  e  $D = 1$

### 2.3 Método das Tangentes Hiperbólicas para a equação (3)

Como vimos na condição dada pela equação (13), não é qualquer valor de  $l$  que pode ser usado quando é utilizado o método das tangentes hiperbólicas para se encontrar uma solução para a equação (3). Para resolver a equação diferencial utilizamos uma transformação dada em [22]

$$\phi_l(x, t) = u^{\frac{2}{l}} \quad (65)$$

onde para cada valor do expoente  $l$  teremos uma solução diferente,  $\phi_l$ . Considerando uma onda viajante do tipo

$$\phi_l(x, t) = \phi_l\left(\frac{x - x_0 - vt}{d}\right) = \phi_l(\xi) \quad (66)$$

a equação (3) toma a forma

$$-v \frac{d\phi}{d\xi} - \frac{D}{d^2} \frac{d^2\phi}{d\xi^2} = r\phi(1 - \phi^l) \quad (67)$$

que, ao usarmos a transformação dada na equação (65), pode ser escrita como

$$-v \frac{u}{d} \frac{du}{d\xi} - \frac{D}{d^2} u \frac{d^2u}{d\xi^2} - \frac{D}{d^2} \left(\frac{2}{l} - 1\right) \left(\frac{du}{d\xi}\right)^2 = \frac{rl}{2} u^2 (1 - u^2). \quad (68)$$

Usando o *Ansatz* dado pela equação (19),

$$u(\xi) = S(Y) = \sum_{k=0}^M a_k Y^k, \quad (69)$$

calculamos as derivadas

$$\frac{du}{d\xi} = \frac{dS(Y)}{dY} (1 - Y^2) \quad (70)$$

e

$$\frac{d^2u}{d\xi^2} = \left( \frac{d^2S}{dY^2} (1 - Y^2) - 2Y \frac{dS(Y)}{dY} \right) (1 - Y^2) \quad (71)$$

Substituindo as derivadas dadas pelas equações (70) e (71) na equação (68) obtemos

$$\begin{aligned} -\frac{vS}{d} \frac{dS}{dY} (1 - Y^2) - \frac{DS}{d^2} \left[ \frac{d^2S}{dY^2} (1 - Y^2) - 2Y \frac{dS(Y)}{dY} \right] (1 - Y^2) + \\ -\frac{D}{d^2} \left( \frac{2}{l} - 1 \right) \left( \frac{dS(Y)}{dY} (1 - Y^2) \right) = \frac{rl}{2} S^2 (1 - S^2). \end{aligned} \quad (72)$$

Igualando os termos de maior potência desta equação obtemos  $M = 1$ . Portanto a solução é dada por

$$S(Y) = a_0 + a_1 Y \quad (73)$$

e assim a equação (72) cujas derivadas agora são

$$\frac{dS(Y)}{dY} = a_1 \quad (74)$$

e

$$\frac{d^2S(Y)}{dY^2} = 0 \quad (75)$$

toma a forma

$$\begin{aligned} -\frac{v}{d} a_1 (a_0 + a_1 Y) (1 - Y^2) - \frac{D}{d^2} (a_0 + a_1 Y) (-2a_1 Y) (1 - Y^2) = \\ = \frac{D}{d^2} \left( \frac{2}{l} - 1 \right) (a_1 (1 - Y^2))^2 + \frac{rl}{2} (a_0 + a_1 Y)^2 (1 - (a_0 + a_1 Y)^2) \end{aligned} \quad (76)$$

Esta última equação pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} -\frac{va_1}{d} (a_0 + a_1 Y - a_0 Y^2 - a_1 Y^3) + \frac{2a_1 D}{d^2} (a_0 Y + a_1 Y^2 - a_0 Y^3 - a_1 Y^4) = \\ = \frac{D}{d^2} \left( \frac{2}{l} - 1 \right) a_1^2 (1 - 2Y^2 + Y^4) + \\ + \frac{rl}{2} (a_0^2 + 2a_0 a_1 Y + a_1^2 Y^2 - a_0^4 - 4a_0^3 a_1 Y - 6a_0^2 a_1^2 Y^2 - 4a_0 a_1^3 - a_1^4 Y^4), \end{aligned} \quad (77)$$

e igualando os termos com mesma potência em  $Y$  encontramos o sistema de equações

$$-\frac{va_1a_0}{d} = \frac{D}{d^2} \left( \frac{2}{l} - 1 \right) a_1^2 + \frac{rl}{2} a_0^2 (1 - a_0^2), \quad (78)$$

$$-\frac{va_1^2}{d} + \frac{2a_1a_0D}{d^2} = \frac{rl}{2} (2a_0a_1 - 4a_0^3a_1), \quad (79)$$

$$\frac{va_1a_0}{d} + \frac{2a_1^2D}{d^2} = -\frac{2D}{d^2} \left( \frac{2}{l} - 1 \right) a_1^2 + \frac{rl}{2} (a_1^2 - 6a_0^2a_1^2), \quad (80)$$

$$\frac{va_1^2}{d} - \frac{2a_1a_0D}{d^2} = -2r la_0a_1^3, \quad (81)$$

$$-\frac{2a_1^2D}{d^2} = \frac{D}{d^2} \left( \frac{2}{l} - 1 \right) a_1^2 - \frac{r la_1^4}{2}, \quad (82)$$

cuja solução permite determinar os coeficientes e parâmetros

$$a_0 = \pm \frac{1}{2}, \quad (83)$$

$$a_1 = \pm \frac{1}{2}, \quad (84)$$

$$d_l = \frac{2}{l} \sqrt{\frac{2D(2+l)}{r}}, \quad (85)$$

$$v_l = \pm (4+l) \sqrt{\frac{Dr}{2(2+l)}}, \quad (86)$$

Assim que as soluções para a equação (68) são

$$u_{1,l}(x, t) = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \tanh \left[ \frac{l}{2} \sqrt{\frac{r}{2D(2+l)}} \left( x - x_0 - (4+l) \sqrt{\frac{Dr}{2(2+l)}} t \right) \right] \right\} \quad (87)$$

$$u_{2,l}(x, t) = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \coth \left[ \frac{l}{2} \sqrt{\frac{r}{2D(2+l)}} \left( x - x_0 - (4+l) \sqrt{\frac{Dr}{2(2+l)}} t \right) \right] \right\} \quad (88)$$

$$u_{3,l}(x, t) = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \tanh \left[ \frac{l}{2} \sqrt{\frac{r}{2D(2+l)}} \left( x - x_0 + (4+l) \sqrt{\frac{Dr}{2(2+l)}} t \right) \right] \right\} \quad (89)$$

$$u_{4,l}(x, t) = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \coth \left[ \frac{l}{2} \sqrt{\frac{r}{2D(2+l)}} \left( x - x_0 + (4+l) \sqrt{\frac{Dr}{2(2+l)}} t \right) \right] \right\} \quad (90)$$

Lembrando que para obter a solução da equação (3) usamos a transformação (65), então as soluções procuradas, que serão caracterizadas como  $\phi_{s,l}(x, t)$ , sendo  $s$  o número da solução, são

$$\phi_{1,l}(x, t) = \left\{ \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \tanh \left[ \frac{l}{2} \sqrt{\frac{r}{2D(2+l)}} \left( x - x_0 - (4+l) \sqrt{\frac{Dr}{2(2+l)}} t \right) \right] \right\}^{\frac{2}{l}}, \quad (91)$$

$$\phi_{2,l}(x, t) = \left\{ \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \coth \left[ \frac{l}{2} \sqrt{\frac{r}{2D(2+l)}} \left( x - x_0 - (4+l) \sqrt{\frac{Dr}{2(2+l)}} t \right) \right] \right\}^{\frac{2}{l}}, \quad (92)$$

$$\phi_{3,l}(x, t) = \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left[ \frac{l}{2} \sqrt{\frac{r}{2D(2+l)}} \left( x - x_0 + (4+l) \sqrt{\frac{Dr}{2(2+l)}} t \right) \right] \right\}^{\frac{2}{l}} \quad (93)$$

e

$$\phi_{4,l}(x, t) = \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \coth \left[ \frac{l}{2} \sqrt{\frac{r}{2D(2+l)}} \left( x - x_0 + (4+l) \sqrt{\frac{Dr}{2(2+l)}} t \right) \right] \right\}^{\frac{2}{l}}. \quad (94)$$

Nota-se que o índice  $l$  está no expoente  $\frac{2}{l}$  e nas expressões das funções  $\tanh$  e  $\coth$ . Como nos casos de Fisher e Nagumo, as soluções (92) e (94) não tem significado físico por apresentarem valores negativos. Essas soluções são gerais e podem ser usadas para recuperar as soluções das equações de Fisher e Nagumo. Estas soluções, se  $x_0 = 0$ , apresentam simetria espacial aos pares.

$$\phi_{1,l}(-x, t) = \phi_{3,l}(x, t) \quad (95)$$

e

$$\phi_{2,l}(-x, t) = \phi_{4,l}(x, t). \quad (96)$$

Podemos ainda analisar se as soluções são ortogonais aos pares. Para o caso de  $\phi_{1,l}$  e  $\phi_{3,l}$  obtemos

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_{1,l}(x, t) \phi_{3,l}(x, t) dx \neq 0 \quad (97)$$

Como  $\phi_{3,l}(x, t) = \phi_{1,l}(-x, t)$  então podemos também escrever a integral dada na equação (97) da seguinte maneira

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_{1,l}(x, t) \phi_{1,l}(-x, t) dx \neq 0 \quad (98)$$

Sendo assim as soluções (91) - (94) não são ortogonais.

### 2.3.1 Colisão entre duas ondas

Como a equação (3) tem termos não lineares a solução geral não é a soma das soluções das equações (91), (92), (93) e (94). A solução (91) é uma onda que apresenta os maiores valores para os pontos de  $x$  à esquerda, enquanto a equação (93) é uma onda cujos maiores valores para a amplitude aparecem primeiro para  $x$  à direita. Se pensarmos nessas soluções como descrevendo inicialmente duas ondas separadas espacialmente, como pode ser visto na figura 5, quando elas se encontram a colisão é descrita pela superposição destas duas ondas, mas que não é solução da equação diferencial. Quando elas se encontrarem durante sua evolução temporal será caracterizada uma colisão, sempre lembrando que para a soma das ondas não está associada a equação diferencial não-linear para as ondas individualmente.

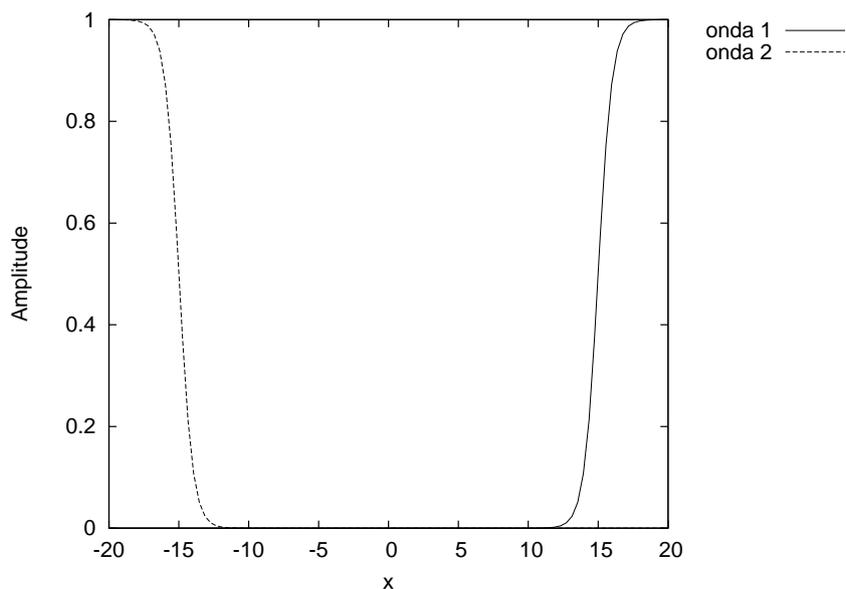


Figura 5: Colisões entre duas ondas - Onda 1 -  $\phi_{3,2}$  com  $x_0 = 15$ ; Onda 2 -  $\phi_{1,2}$  com  $x_0 = -15$ ; em ambos os casos  $r = 8D$  e  $t = 0$

### 2.3.2 Estudo da largura da frente de onda da equação (85)

Podemos fazer uma comparação das soluções (44) e (63) na figura 6. Neste gráfico observamos que para um mesmo conjunto de constantes (no caso  $r = 1$  e  $D = 1$ ) a largura da frente de onda é alterada conforme mudamos o expoente  $l$ .

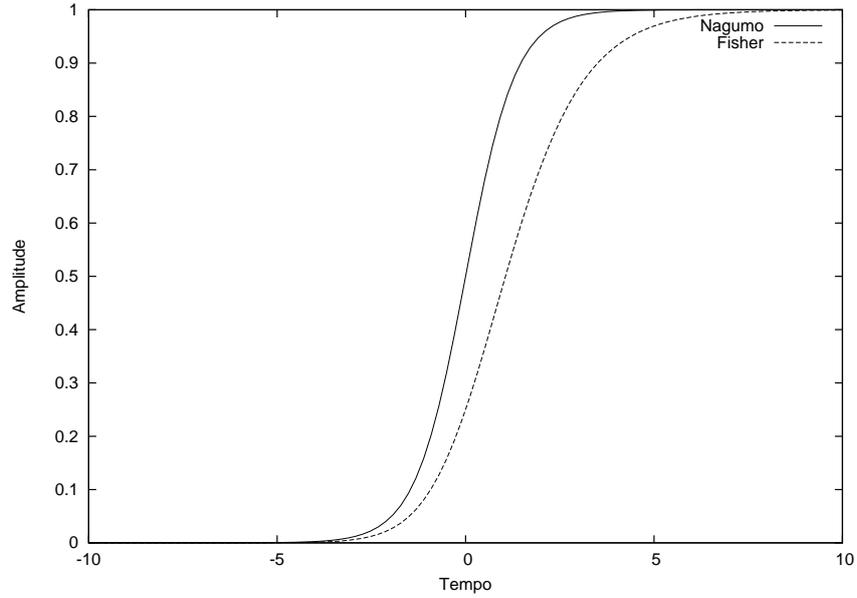


Figura 6: Evolução temporal para as equações de Fisher e Nagumo, usando a solução (63) e (44) para  $x = x_0 = 0$  e constantes  $r = 1$  e  $D = 1$

Sendo  $d$  uma grandeza positiva, inversamente relacionada com a largura da frente de onda, podemos encontrar alguns limites para  $d_l$  conforme varia com  $l$ .

Para  $l \gg 1$

$$d_l \approx 2\sqrt{\frac{2D}{rl}}, \quad (99)$$

e no caso onde  $l \rightarrow \infty$ , obtém-se  $d_l \rightarrow 0$ , e para  $l \rightarrow 0, d_l \rightarrow \infty$ . Podemos então observar o comportamento esperado para  $d_l$  na figura 7 mantendo-se constantes  $r$  e  $D$ .

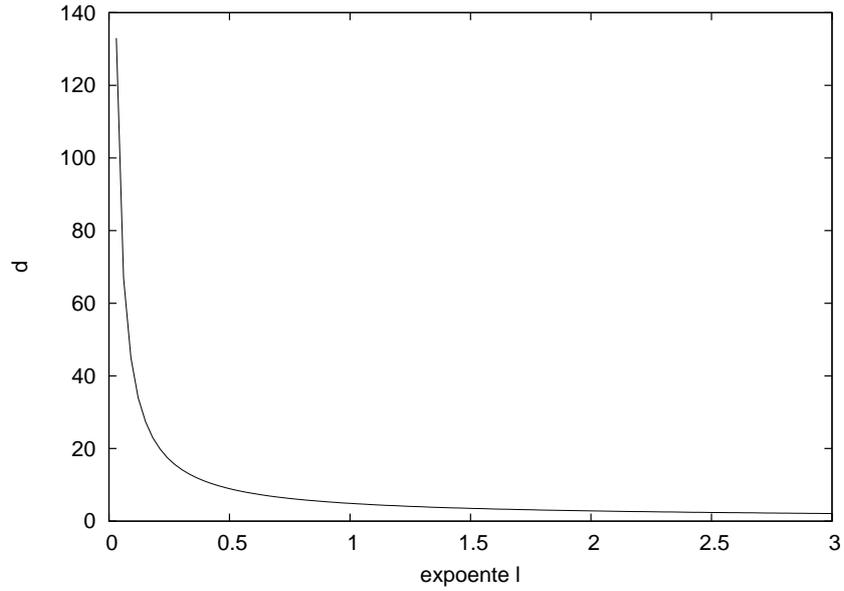


Figura 7: Variação da largura de onda variando com o expoente  $l$  para  $r = 1$  e  $D = 1$

Podemos observar pela equação (85) que a largura da frente de onda pode ser alterada também quando mantém-se constante o valor de  $l$  e variando  $D$  e  $r$ . Isto pode ser observado na figura 8, que foi feita usando o caso onde  $l = 1$  e  $t = 0$ , onde a largura tinha o valor alterado, como exemplo, variando-se a constante  $D$ . Nesta figura vemos que quanto menor o valor da constante  $d_l$  mais larga será a frente de onda e vice versa.

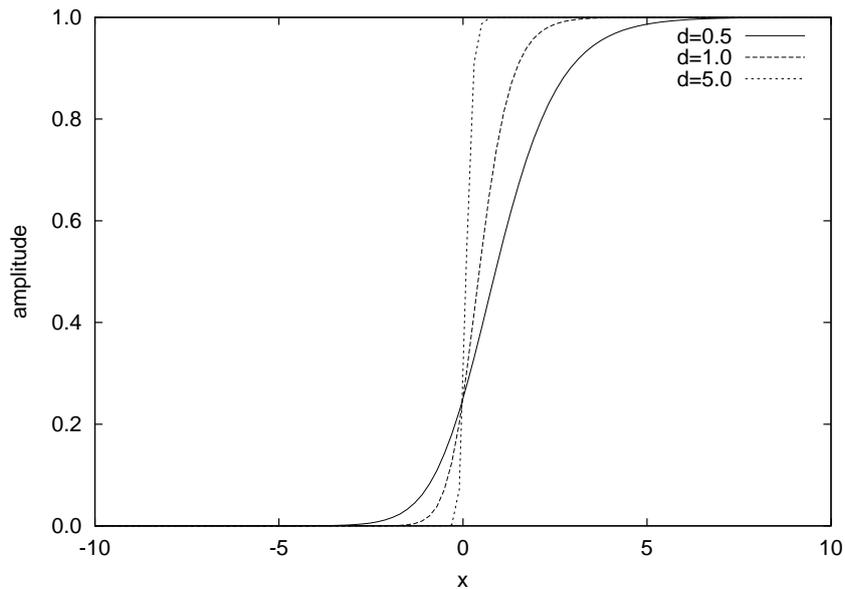


Figura 8: Abertura da frente de onda com  $x_0 = 0$

### 2.3.3 Estudo da velocidade da onda

A velocidade da frente de onda é definida na equação (86) e vamos analisar o caso quando  $v$  é positiva. Para  $l \gg 4$ , obtemos

$$v_l \approx \pm \sqrt{\frac{Dr l}{2}} \quad (100)$$

e assim para o caso  $l \rightarrow \infty$

$$v_l \rightarrow \infty. \quad (101)$$

Isto significa que a velocidade da onda tem valor máximo ilimitado. Para o caso onde  $l \rightarrow 0$

$$v_l \rightarrow 2\sqrt{Dr} \quad (102)$$

Como não vemos nenhum ponto singular no intervalo  $0 < l < \infty$  e tendo os limites determinados acima podemos checar se existe um ponto de mínimo para a velocidade de propagação da onda que é dado ao resolver a derivada desta em relação ao expoente  $l$

$$\frac{dv_l}{dl} = l \sqrt{\frac{Dr}{(4+2l)^3}} = 0, \quad (103)$$

de onde tiramos que, analisando  $l$ , o ponto de mínimo ocorre quando  $l = 0$ . Para confirmar que este é realmente um ponto de mínimo precisamos calcular a segunda derivada

$$\frac{d^2v_l}{dl^2} = (4-l) \sqrt{\frac{Dr}{(4+2l)^5}} \quad (104)$$

que quando tirada no ponto  $l = 0$  nos dá

$$\left. \frac{d^2v_l}{dl^2} \right|_0 = \frac{\sqrt{Dr}}{8} > 0 \quad (105)$$

provando que este é realmente um ponto de mínimo. Podemos observar como a velocidade da onda varia conforme  $l$  aumenta através da figura 9.

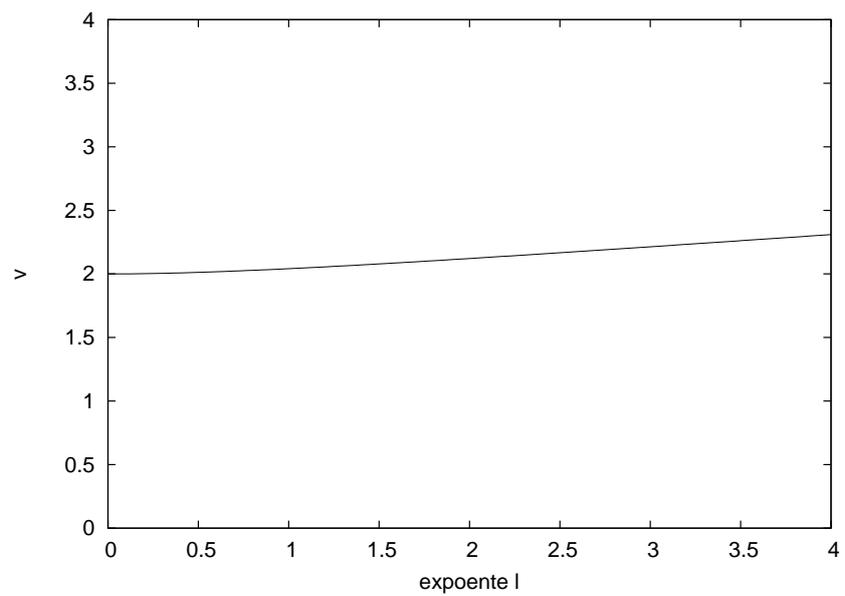


Figura 9: Variação da velocidade  $v$  em função do expoente  $l$  para  $D = 1$  e  $r = 1$

### 3 Energia e função de Hamilton para a equação (3)

Existe uma abordagem mais geral do que o método das *tangentes hiperbólicas* para as equações parciais que se fundamenta na procura de “constantes de movimento”. Assim numa equação do tipo

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mu \frac{\partial \phi}{\partial x} - D \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = r f(\phi), \quad (106)$$

onde  $f(\phi)$  é uma função arbitrária de  $\phi$ ,  $\mu$  e  $r$  são duas constantes. Esta equação é conhecida como equação de Fokker-Planck e um estudo dela pode ser encontrado no livro de Kadanoff [25]. Para uma solução do tipo onda viajante,  $\phi(x, t) = \phi(\frac{x-x_0-vt}{d})$ , chamando  $\xi = \frac{x-x_0-vt}{d}$  e as derivadas parciais

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial \xi}{\partial t} \frac{\partial}{\partial \xi} = -\frac{v}{d} \frac{\partial}{\partial \xi}, \quad \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial \xi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \xi} = \frac{1}{d} \frac{\partial}{\partial \xi}, \quad (107)$$

podemos reescrever a equação (106) como

$$-\frac{-\mu + v}{d} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} - \frac{D}{d^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2} = r f(\phi). \quad (108)$$

Escrevendo  $\lambda = v - \mu$  e admitindo que  $f_l(\phi) = \phi(1 - \phi^l)$ , obtemos uma equação diferencial de segunda ordem da forma da equação(7).

Podemos escrever a equação (108) como

$$\phi'' + \frac{\lambda d}{D} \phi' = -F_l(\phi) \quad (109)$$

onde  $F_l(\phi) = \frac{rd^2}{D} f_l(\phi)$ . Ao invés de usar a equação (109), podemos escrevê-la em termos de duas equações diferenciais de primeira ordem acopladas

$$\begin{cases} \frac{d\phi}{d\xi} = U \\ \frac{dU}{d\xi} = -\frac{\lambda d}{D} U - F_l(\phi). \end{cases} \quad (110)$$

Este é um sistema de equações diferenciais é autônomo, já que o lado direito dele não depende explicitamente de  $\xi$ .

#### 3.1 Caso onde $v = \mu$ , ou $\lambda = 0$

Devido à liberdade de escolha do parâmetro  $v$ , vamos supor que na equação (109) a onda se desloca com velocidade  $\mu$  e, assim ela se reduz à

$$\frac{d^2 \phi}{d\xi^2} = -F_l(\phi), \quad (111)$$

que podemos escrever em duas equações

$$\frac{d\phi}{d\xi} = U \quad (112)$$

$$\frac{dU}{d\xi} = -F_l(\phi) \quad (113)$$

dividindo (113) por (112) obtemos

$$\frac{dU}{d\phi} = -\frac{F_l(\phi)}{U} \Rightarrow U dU = -F_l(\phi) d\phi \quad (114)$$

que pode ser escrita na forma de uma diferencial total

$$d\left(\frac{1}{2}U^2 + G_l(\phi)\right) = 0, \quad (115)$$

onde,

$$G_l(\phi) = \int F_l(\phi) d\phi = \frac{rd^2}{D} \int \phi(1 - \phi^l) d\phi, \quad (116)$$

integrando resulta na equação

$$G_l(\phi) = \frac{rd^2}{D} \left( \frac{1}{2}\phi^2 - \frac{1}{l+2}\phi^{l+2} \right). \quad (117)$$

É possível então escrever  $\frac{dG_l}{d\phi} = F_l(\phi)$  ou  $dG_l(\phi) = F_l(\phi)d\phi$ . A diferencial total (115) indica a existência de uma constante do movimento que chamaremos  $\mathcal{E}$ . De posse destes resultados definimos a função de Hamilton como

$$\mathcal{H}_l(U, \phi) = \frac{1}{2}U^2 + G_l(\phi) = \mathcal{E}_l \quad (118)$$

onde  $\mathcal{E}_l$  pode ser pensado como a densidade de energia da onda, que dependerá dos parâmetros  $\frac{rd^2}{D}$  e  $l$ . Ao reescrever como

$$\frac{1}{2} \left( \frac{d\phi}{d\xi} \right)^2 + G_l(\phi) = \mathcal{E}_l \quad (119)$$

$$\frac{d\phi}{d\xi} = \pm \sqrt{2(\mathcal{E}_l - G_l(\phi))}, \quad (120)$$

podemos integrar esta equação, obtendo

$$\int \frac{d\phi}{\sqrt{2(\mathcal{E}_l - G_l(\phi))}} = \pm \int d\xi, \quad (121)$$

que permite determinar a função  $\phi(\xi)$ , ao fazer a inversão desta.

### 3.1.1 Aproximação para pequenos valores do termo contendo a energia, coeficiente de difusão, $d$ e $r$

No caso  $l = 1$ , onde a integral (121) toma a seguinte forma

$$\frac{1}{d} \sqrt{\frac{3D}{2r}} \int \frac{d\phi}{\sqrt{(\phi^3 - \frac{3}{2}\phi^2 + \frac{3DE_1}{rd^2})}} = \pm \int d\xi \quad (122)$$

Chamando

$$\eta = d \sqrt{\frac{2r}{3D}} \xi \quad (123)$$

e

$$\epsilon = \frac{3DE}{rd^2}, \quad (124)$$

a integral (122) é escrita como

$$\int \frac{d\phi}{\sqrt{(\phi^3 - \frac{3}{2}\phi^2 + \epsilon)}} = \pm \int d\eta \quad (125)$$

O integrando dessa equação pode ser reescrito da seguinte maneira

$$\frac{1}{\sqrt{(\phi^3 - \frac{3}{2}\phi^2 + \epsilon)}} = \frac{1}{\sqrt{g(\phi) + \epsilon'}} \quad (126)$$

chamando

$$g(\phi) = \phi^3 - \frac{3}{2}\phi^2 + a \quad (127)$$

e

$$\epsilon' = \epsilon - a, \quad (128)$$

onde  $a$  é um valor real positivo. Assim a integral (125) toma a forma

$$\int \frac{d\phi}{\sqrt{(\phi^3 - \frac{3}{2}\phi^2 + \epsilon)}} = \int \frac{d\phi}{\sqrt{g(\phi) + \epsilon'}} \quad (129)$$

A integral (125) não tem solução simples e é mais conveniente fazer uma expansão do integrando considerando  $|\epsilon'|$  pequeno. Assim, a equação (129), aproximando em primeira ordem, será a da forma

$$\int \frac{d\phi}{\sqrt{g(\phi) + \epsilon'}} \approx \int \frac{d\phi}{g^{\frac{1}{2}}(\phi)} - \frac{\epsilon'}{2} \int \frac{d\phi}{g^{\frac{3}{2}}(\phi)} = \pm \int d\eta \quad (130)$$

Se usarmos a equação (120), e as novas variáveis, obtemos

$$\frac{d\eta}{d\phi} = \frac{1}{g^{\frac{1}{2}}(\phi)} - \frac{\epsilon'}{g^{\frac{3}{2}}(\phi)}. \quad (131)$$

Dividindo a equação anterior por  $g^{\frac{1}{2}}(\phi)$  teremos

$$\frac{d\eta}{\frac{d\phi}{g^{\frac{1}{2}}(\phi)}} = 1 - \frac{\epsilon'}{g(\phi)}. \quad (132)$$

Como

$$\frac{d\phi}{g^{\frac{1}{2}}} = 2d\left(g^{\frac{1}{2}}(\phi)\right), \quad (133)$$

e ao chamar  $g^{\frac{1}{2}}(\phi) = \chi$ , obtemos a equação (132) na forma

$$\frac{d\eta}{2d\chi} = 1 - \frac{\epsilon'}{\chi^2}. \quad (134)$$

Multiplicando a equação (134) por  $2d\chi$  encontramos

$$d\eta = 2\left(1 - \frac{\epsilon'}{\chi^2}\right)d\chi. \quad (135)$$

A integral (130) é então escrita como

$$\eta = 2\int\left(1 - \frac{\epsilon'}{\chi^2}\right)d\chi + A, \quad (136)$$

onde  $A$  é uma constante de integração a ser definida. Dessa integral obtemos

$$\eta = 2\left(\chi + \frac{\epsilon'}{\chi}\right) + A. \quad (137)$$

Como queremos obter  $\phi(\eta)$ , precisamos inverter a equação anterior. Isso pode ser feito da seguinte forma

$$\chi^2 - \frac{(\eta - A)}{2}\chi + \epsilon' = 0. \quad (138)$$

Essa equação de segundo grau terá 2 soluções

$$\chi = \frac{1}{2}\left[\frac{\eta - A}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\eta - A}{2}\right)^2 - 4\epsilon'}\right], \quad (139)$$

e então  $g$  deverá ser igualada à

$$g = \frac{1}{4}\left[\frac{\eta - A}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\eta - A}{2}\right)^2 - 4\epsilon'}\right]^2. \quad (140)$$

Como estamos usando uma expansão para valores pequenos de  $\epsilon'$ , para termos alguma informação útil, vamos usar apenas a solução

$$g = \frac{1}{4}\left[\frac{\eta - A}{2} + \sqrt{\left(\frac{\eta - A}{2}\right)^2 - 4\epsilon'}\right]^2. \quad (141)$$

O lado direito dessa última equação será chamada de  $F(\eta)$

$$F(\eta) = \frac{1}{4} \left[ \frac{\eta - A}{2} + \sqrt{\left(\frac{\eta - A}{2}\right)^2 - 4\epsilon'} \right]^2. \quad (142)$$

Assim, substituindo o valor de  $g(\phi)$ , encontramos

$$\phi^3 - \frac{3}{2}\phi^2 + a = F(\eta). \quad (143)$$

Para cada valor de  $\epsilon'$  e da constante  $A$ , um valor de  $F(\eta)$  poderá ser atribuído e encontramos algumas condições para a obtenção de ondas viajantes saturadas. Assim, para que  $0 \leq \phi \leq 1$ ,

$$-\frac{1}{2} + a \leq F(\eta) \leq a \quad (144)$$

Considerando  $F(\eta)$  independente do valor de  $\phi$  podemos fazer uma análise da curva dada na equação (143). Sua primeira derivada nos mostra os pontos críticos da curva, obtidos através da seguinte igualdade

$$3\phi^2 - 3\phi = 0, \quad (145)$$

que tem por soluções  $\phi = 0$  ou  $\phi = 1$ . Através da segunda derivada podemos determinar que  $\phi = 0$  é um ponto de máximo local e  $\phi = 1$  é um ponto de mínimo local.

Como queremos que  $F(\eta)$  assumam valores reais, vamos utilizar essa função na forma

$$F(\eta) = \frac{1}{4} \left(\frac{\eta - A}{2}\right) \left[ 1 + \sqrt{1 - \left(\frac{4}{\eta - A}\right)^2 \epsilon'} \right]^2 \quad (146)$$

e assim surge a condição que deverá ser satisfeita

$$\left(\frac{4}{\eta - A}\right)^2 \epsilon' < 1 \quad (147)$$

ou, para o caso específico onde  $l = 1$

$$\left(\frac{4}{\eta - A}\right)^2 \left(\frac{3DE}{rd^2} - a\right) < 1. \quad (148)$$

A constante  $A$  representa um deslocamento para a onda. A condição para que esta solução possa ser usada é que  $\epsilon'$  seja pequeno, sendo  $\epsilon' = \frac{3DE}{rd^2} - a$ . Vimos assim um método geral para qualquer valor de  $l$ , caso seja utilizada uma aproximação para  $\epsilon'$  pequeno, onde é possível obter valores específicos para  $\phi(\eta)$ , obtidos através de  $F(\eta)$  pela equação (143).

### 3.1.2 Caso $l = 2$ ,

Um caso particular que pode ser resolvido para constantes específicas é dado quando  $l = 2$ . A integral (121) é

$$\frac{1}{d} \sqrt{\frac{2D}{r}} \int \frac{d\phi}{\sqrt{(\phi^4 - 2\phi^2 + \frac{4D\mathcal{E}_2}{rd^2})}} = \pm \int d\xi, \quad (149)$$

que não têm solução analítica simples. Chamando

$$\frac{4D\mathcal{E}_2}{rd^2} = \epsilon \quad (150)$$

e,

$$\eta = d \sqrt{\frac{r}{2D}} \xi, \quad (151)$$

para  $\epsilon = 0$ , a equação (149) se escreve

$$\int \frac{d\phi}{\sqrt{(\phi^4 - 2\phi^2)}} = \frac{\arctan(\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\phi^2 - 2}})}{\sqrt{2}} + A = \pm \eta. \quad (152)$$

Como queremos determinar  $\phi(\xi)$ , então precisamos inverter a equação (149),

$$\tan(B \pm \frac{\eta}{\sqrt{2}}) = (\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\phi^2 - 2}}), \quad (153)$$

$$\sqrt{\phi^2 - 2} = \frac{\sqrt{2}}{\tan(B \pm \frac{\eta}{\sqrt{2}})}, \quad (154)$$

$$\phi^2 - 2 = \frac{2}{\tan^2(B \pm \frac{\eta}{\sqrt{2}})}, \quad (155)$$

$$\phi = \sqrt{2} \frac{\sqrt{1 + \tan^2(B \pm \frac{\eta}{\sqrt{2}})}}{\tan(B \pm \frac{\eta}{\sqrt{2}})}, \quad (156)$$

$$\phi = \sqrt{2} \csc(B \pm \frac{\eta}{\sqrt{2}}). \quad (157)$$

Caso tenhamos a igualdade  $\epsilon = 1$ , obtemos a integral

$$\sqrt{\frac{2D}{r}} \int \frac{d\phi}{\sqrt{(\phi^4 - 2\phi^2 + 1)}} = \pm \int d\xi, \quad (158)$$

mudando a variável para

$$\eta = \sqrt{\frac{r}{2D}} \xi, \quad (159)$$

a solução de (149)

$$(\ln(1 - \phi) - \ln(1 + \phi)) = \pm \eta + A, \quad (160)$$

que invertendo esta equação, obtemos

$$\phi = \frac{1 - e^{\pm\eta+A}}{1 + e^{\pm\eta+A}} \quad (161)$$

temos duas soluções

$$\phi_+ = \frac{e^{-\eta-A} - e^{\eta+A}}{e^{-\eta-A} + e^{\eta+A}} = -\tanh(\eta + A) \quad (162)$$

e

$$\phi_- = \frac{e^{\eta-A} - e^{-\eta+A}}{e^{\eta-A} + e^{-\eta+A}} = \tanh(\eta - A) \quad (163)$$

que são escritas como

$$\phi_{\pm} = \tanh(-A \mp \eta). \quad (164)$$

Para pequenos valores de  $\epsilon'$ , sendo  $\epsilon' = \epsilon - a$ , podemos usar o método apresentado na seção anterior. Chamando

$$g(\phi) = (\phi^4 - 2\phi^2 + a), \quad (165)$$

a aproximação para pequenos valores de  $\epsilon'$  é

$$\frac{1}{\sqrt{(\phi^4 - 2\phi^2 + a) + (\epsilon - a)}} \approx g(\phi)^{-\frac{1}{2}} - \frac{\epsilon'}{2} g(\phi)^{-\frac{3}{2}}. \quad (166)$$

Podemos agora utilizar a equação (142)

$$F(\eta) = \frac{1}{4} \left[ \frac{\eta - A}{2} + \sqrt{\left(\frac{\eta - A}{2}\right)^2 - 4\epsilon'} \right]^2 \quad (167)$$

e escrever

$$\phi^4 - 2\phi^2 + a = F(\eta). \quad (168)$$

Ao fazermos um estudo das derivadas da equação (168) vemos que em  $\phi = 1, -1$  são descritos pontos de mínimo locais e em  $\phi = 0$  existe um ponto de máximo local.

A equação (168) tem solução algébrica e apresenta quatro soluções

$$\phi_{1,l=2}(\eta) = -\sqrt{1 - \sqrt{-a + F(\eta) + 1}}, \quad (169)$$

$$\phi_{2,l=2}(\eta) = -\sqrt{1 + \sqrt{-a + F(\eta) + 1}}, \quad (170)$$

$$\phi_{3,l=2}(\eta) = \sqrt{1 - \sqrt{-a + F(\eta) + 1}}, \quad (171)$$

e

$$\phi_{4,l=2}(\eta) = \sqrt{1 + \sqrt{-a + F(\eta) + 1}}. \quad (172)$$

Como queremos soluções reais, precisamos impor a condição que

$$\sqrt{-a + F(\eta) + 1} \leq 1$$

nas soluções dadas nas equações (169) e (171). Todas estas soluções precisam ainda satisfazer, simultaneamente, as condições impostas pelas equações

$$-1 + a \leq F(\eta) \leq a, \quad (173)$$

pela equação (147)

$$\left(\frac{4}{\eta - A}\right)^2 \epsilon' < 1 \quad (174)$$

e desde que  $\epsilon'$  seja pequeno.

### 3.2 Obtenção da equação de Hamilton a partir da equação de Lagrange para o sistema

Partindo da definição da função de Lagrange para o sistema

$$\mathcal{L}_l(\phi, \phi') = \frac{1}{2} (\phi')^2 - G_l(\phi), \quad (175)$$

e usando o princípio variacional podemos obter a equação de Euler-Lagrange

$$\frac{d}{d\xi} \frac{\partial \mathcal{L}_l(\phi, \phi')}{\partial \phi'} = \frac{\partial \mathcal{L}_l(\phi, \phi')}{\partial \phi}, \quad (176)$$

que resulta na equação de movimento de Newton

$$\frac{d\phi'}{d\xi} = -\frac{dG_l(\phi)}{d\phi} \Rightarrow \phi'' = -F_l(\phi). \quad (177)$$

Assim recuperamos a equação (111). O momento canônico é

$$U = \frac{\partial \mathcal{L}_l(\phi, \phi')}{\partial \phi'} = \phi' \quad (178)$$

e a função de Hamilton é obtida através da transformada de Legendre

$$\mathcal{H}_l(U, \phi) = U\phi' - \mathcal{L}_l(\phi, \phi') = \phi'^2 - \left(\frac{1}{2}\phi'^2 - G_l(\phi)\right) \quad (179)$$

$$\mathcal{H}_l(U, \phi) = \frac{1}{2}U^2 + G_l(\phi). \quad (180)$$

Considerando  $\frac{1}{2}U^2$  como a densidade de energia cinética,  $G_l(\phi)$  é a densidade de energia potencial e  $F_l(\phi)$  é a densidade de força externa aplicada.

### 3.3 Caso $v \neq \mu$ , sistema “nã-conservativo”

Na equação (108), supondo que  $v \neq \mu$ , podemos escrever o seguinte sistema de equações de primeira ordem

$$\frac{d\phi}{d\xi} = U = \phi' \quad (181)$$

$$\frac{dU}{d\xi} = -\frac{\lambda d}{D}U - F_l(\phi) \quad (182)$$

Dividindo (182) por (181) obtemos

$$\frac{d(\frac{1}{2}U^2)}{d\phi} = -\frac{\lambda d}{D}U - F_l(\phi) \quad (183)$$

e procedemos de forma análoga à feita anteriormente, podemos escrever a forma diferencial como

$$d\left(\frac{1}{2}U^2 + G_l(\phi)\right) = -\frac{\lambda d}{D}U d\phi. \quad (184)$$

Esta equação não tem o lado direito nulo, assim não temos uma quantidade conservada associada a esta diferencial. O termo do lado direito da equação (184) pode ser reescrito como

$$-\frac{\lambda d}{D}U d\phi = -\frac{\lambda d}{D}U \frac{d\phi}{d\xi} d\xi = -\frac{\lambda d}{D}U \phi' d\xi \quad (185)$$

e usando a equação (181) identificamos

$$-\frac{\lambda d}{D}U \phi' d\xi = -\frac{\lambda d}{D}U^2 d\xi. \quad (186)$$

Sabendo que

$$U^2 d\xi = \phi'^2 \frac{d\xi}{d\phi} d\phi = \phi' d\phi \quad (187)$$

a equação (184) pode ser escrita como

$$d\left(\frac{1}{2}U^2 + G_l(\phi)\right) = -\frac{\lambda d}{D}\phi' d\phi. \quad (188)$$

Como  $\phi' d\phi = d(\phi'\phi) - \phi d\phi' = d(U\phi) - \phi dU$ , não podemos igualar a diferencial total da equação (188) a zero para uma função  $G_l(\phi)$  arbitrária.

Para tentar contornar o problema encontrado, chamaremos  $\mathcal{E}_l(\phi, U) = \frac{1}{2}U^2 + G_l(\phi)$  e assim a equação (188) pode ser escrita como

$$\frac{d\mathcal{E}_l(\phi, U)}{d\xi} = -\frac{\lambda d}{D}\phi'^2. \quad (189)$$

É interessante notar que como a equação (188) não é uma diferencial total, então  $\mathcal{E}_l(\phi, U)$  não é uma grandeza conservada.

Fazendo a mudança de variável  $U = U_0(\xi) e^{-\frac{\lambda d}{D}\xi}$  podemos escrever o termo

$$\frac{dU}{d\xi} + \frac{\lambda d}{D}U = \frac{dU_0(\xi)}{d\xi}e^{-\frac{\lambda d}{D}\xi} - \frac{\lambda d}{D}U_0(\xi)e^{-\frac{\lambda d}{D}\xi} + \frac{\lambda d}{D}U_0(\xi)e^{-\frac{\lambda d}{D}\xi} = \frac{dU_0(\xi)}{d\xi}e^{-\frac{\lambda d}{D}\xi} \quad (190)$$

e obter um sistema equações diferenciais de primeira ordem modificado

$$\frac{d\phi}{d\xi} = U_0(\xi) e^{-\frac{\lambda d}{D}\xi} \quad (191)$$

$$\frac{dU_0(\xi)}{d\xi} = -F_l(\phi)e^{\frac{\lambda d}{D}\xi}, \quad (192)$$

de onde podemos perceber que o sistema não é autônomo, já que depende explicitamente da variável independente  $\xi$ .

### 3.3.1 Energia para sistema não conservativo

Se chamarmos o termo

$$\frac{1}{2}U^2 + G_l(\phi) = \mathcal{E}_l, \quad (193)$$

onde  $\mathcal{E}_l$  é entendido como a densidade de energia da onda, podemos obter a energia  $E_l$  da onda ao integrar a equação (188), que será agora reescrita como

$$d(\mathcal{E}_l(\phi_l)) = -\frac{\lambda d}{D}U d\phi. \quad (194)$$

Integrando esta última equação temos que a densidade de energia não é uma quantidade conservada

$$\mathcal{E}_l(\phi_l) = -\frac{\lambda d}{D} \int U d\phi + C, \quad (195)$$

ou

$$\mathcal{E}_l(\phi_l) = -\frac{\lambda d}{D} \int (\phi_l')^2 d\phi + C, \quad (196)$$

onde  $C$  é uma constante de integração que será definida pelas condições iniciais.

Assim para a equação de Nagumo, onde usamos a solução (61), teremos que  $\phi'$  é

$$\phi' = \frac{1}{2} (1 - \tanh^2 \xi). \quad (197)$$

A energia da onda para a equação de Nagumo, lembrando que neste caso  $l = 2$ , que chamaremos de  $\mathcal{E}_{l,s}$ , com  $l$  sendo o expoente e  $s$  a solução utilizada, é então

$$\mathcal{E}_{2,1}(\phi_{2,1}) = -\frac{\lambda d}{4D} \left[ \frac{2}{3} \tanh \xi + \frac{1}{3} (1 - \tanh^2 \xi) (\tanh \xi) \right] + C \quad (198)$$

Já para a equação de Fisher,  $l = 1$ , a energia da onda para a solução (42) é então

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{1,1}(\phi_{1,1}) = & -\frac{\lambda d}{D} \left[ \frac{1}{8} (1 - \tanh^2 \xi)^2 + \frac{1}{5} \tanh \xi + \frac{1}{10} (\tanh \xi) (1 - \tanh^2 \xi) \right] + \\ & -\frac{\lambda d}{D} \left[ -\frac{1}{20} (1 - \tanh^2 \xi)^2 \tanh \xi \right] + C \end{aligned} \quad (199)$$

### 3.4 Funções de Lagrange e Hamilton

Vamos definir a Lagrangeana do sistema como

$$\mathcal{L}_l(\phi, \phi') = \left( \frac{1}{2} \phi'^2 - G_l(\phi) \right) e^{\frac{\lambda d}{D} \xi} \quad (200)$$

usando a equação de Euler-Lagrange obtemos

$$\frac{d}{d\xi} (\phi' e^{\frac{\lambda d}{D} \xi}) = -F_l(\phi) e^{\frac{\lambda d}{D} \xi} \quad (201)$$

que resulta na equação diferencial (109).

O momento canônico é dado por

$$V = \frac{\partial \mathcal{L}_l(\phi, \phi')}{\partial \phi'} = \phi' e^{\frac{\lambda d}{D} \xi}. \quad (202)$$

A função de Hamilton associada ao sistema é então

$$\mathcal{H}_l(V, \phi) = V \phi' - \mathcal{L}_l(\phi, \phi') = \phi'^2 e^{-\frac{\lambda d}{D} \xi} - \left( \frac{1}{2} \phi'^2 - G_l(\phi) \right) e^{\frac{\lambda d}{D} \xi} \quad (203)$$

$$\mathcal{H}_l(V, \phi) = \frac{1}{2} V^2 e^{-\frac{\lambda d}{D} \xi} + G_l(\phi) e^{\frac{\lambda d}{D} \xi} \quad (204)$$

As equações de Hamilton são

$$V' = -\frac{\partial \mathcal{H}_l(V, \phi)}{\partial \phi} = -\frac{\partial G_l(\phi)}{\partial \phi} e^{\frac{\lambda d}{D} \xi} = -F_l(\phi) e^{\frac{\lambda d}{D} \xi} \quad (205)$$

e

$$\phi' = \frac{\partial \mathcal{H}_l(V, \phi)}{\partial V} = \frac{1}{2} \frac{\partial V^2}{\partial V} e^{-\frac{\lambda d}{D} \xi} = V e^{-\frac{\lambda d}{D} \xi}. \quad (206)$$

Dividindo (205) por (206) encontramos

$$\frac{V'}{\phi'} = \frac{dV}{d\phi} = -\frac{F_l(\phi)}{V} e^{2\frac{\lambda d}{D} \xi} \quad (207)$$

ou então

$$V dV = -e^{2\frac{\lambda d}{D} \xi} F_l(\phi) d\phi = -e^{2\frac{\lambda d}{D} \xi} dG_l(\phi). \quad (208)$$

Sabendo que  $V dV = d(\frac{1}{2} V^2)$  e de posse de

$$e^{2\frac{\lambda d}{D} \xi} dG_l(\phi) = d \left( e^{2\frac{\lambda d}{D} \xi} G_l(\phi) \right) + 2 \frac{\lambda d}{D} e^{2\frac{\lambda d}{D} \xi} G_l(\phi) d\xi \quad (209)$$

podemos escrever

$$d \left( \frac{1}{2} V^2 + e^{2\frac{\lambda d}{D}\xi} G_l(\phi) \right) = G_l(\phi) d \left( e^{2\frac{\lambda d}{D}\xi} \right) \quad (210)$$

de onde entendemos que esta equação não apresenta constantes de movimento para uma função  $G_l(\phi)$  arbitrária. Sendo assim, deve-se encontrar uma solução numérica para este sistema.

### 3.5 Caso particular da equação (188), $G(\phi) = C\phi^2$

Para o caso particular onde  $G(\phi) = C\phi^2$ , podemos redefinir  $V$  e  $\phi$  na equação (200). A função de Lagrange dada em (200) pode ser escrita como

$$\mathcal{L}(\phi, \phi') = \left( \frac{1}{2} \phi'^2 - C\phi^2 \right) e^{\frac{\lambda d}{D}\xi} \quad (211)$$

ou então

$$\mathcal{L}(\phi, \phi') = \frac{1}{2} \left( \phi' e^{\frac{\lambda d}{2D}\xi} \right)^2 - C \left( \phi e^{\frac{\lambda d}{2D}\xi} \right)^2. \quad (212)$$

Fazendo uma mudança de variável

$$\psi = \phi e^{\frac{\lambda d}{2D}\xi}, \quad (213)$$

a sua derivada é

$$\psi' = \phi' e^{\frac{\lambda d}{2D}\xi} + \frac{\lambda d}{2D} \phi e^{\frac{\lambda d}{2D}\xi} \quad (214)$$

ou

$$\psi' = V e^{-\frac{\lambda d}{2D}\xi} + \frac{\lambda d}{2D} \psi. \quad (215)$$

Como

$$\phi = \psi e^{-\frac{\lambda d}{2D}\xi} \quad (216)$$

, a equação (212) pode ser reescrita como

$$V = \phi' e^{\frac{\lambda d}{D}\xi} \Rightarrow \phi' = \left( \psi' - \frac{\lambda d}{2D} \psi \right) e^{-\frac{\lambda d}{2D}\xi} \quad (217)$$

Substituindo as equações (216) e (217) na equação (212), a lagrangiana é escrita como

$$\mathcal{L}(\psi, \psi') = \frac{1}{2} \left( \psi' - \frac{\lambda d}{2D} \psi \right)^2 - C (\psi)^2, \quad (218)$$

ou expandindo o termo quadrático resulta

$$\mathcal{L}(\psi, \psi') = \frac{1}{2} \psi'^2 - \frac{\lambda d}{2D} \psi \psi' + \left( \frac{1}{2} \left( \frac{\lambda d}{2D} \right)^2 - C \right) \psi^2. \quad (219)$$

O momentum canônico associado a esta função lagrangeana é

$$W = \frac{\partial \mathcal{L}(\psi, \psi')}{\partial \psi'} = \psi' - \frac{\lambda d}{2D} \psi \quad (220)$$

de onde obtemos

$$\psi' = W + \frac{\lambda d}{2D}\psi. \quad (221)$$

A nova função de Hamilton é então dada por

$$\bar{\mathcal{H}}(W, \psi) = W\psi' - \mathcal{L}(\psi, \psi') = W \left( W + \frac{\lambda d}{2D}\psi \right) - \left[ \frac{1}{2}\psi'^2 - \frac{\lambda d}{2D}\psi\psi' + \left( \frac{1}{2} \left( \frac{\lambda d}{2D} \right)^2 - C \right) \psi^2 \right] \quad (222)$$

substituindo a equação (221) nesta última, obtemos

$$\bar{\mathcal{H}}(W, \psi) = W^2 + \frac{\lambda d}{2D}\psi W - \frac{1}{2}W^2 - \frac{\lambda d}{2D}\psi W - \frac{(\lambda d)^2}{8D^2}\psi^2 + \frac{\lambda d}{2D}\psi W + \frac{(\lambda d)^2}{4D^2}\psi^2 - \frac{(\lambda d)^2}{8D^2}\psi^2 + C\psi^2 \quad (223)$$

que se simplifica como

$$\bar{\mathcal{H}}(W, \psi) = \frac{W^2}{2} + \frac{\lambda d}{2D}\psi W + C\psi^2. \quad (224)$$

Usando esta função de Hamilton podemos encontrar as equações de movimento são

$$\dot{W} = -\frac{\partial \bar{\mathcal{H}}(W, \psi)}{\partial \psi} = -\frac{\lambda d}{2D}W - 2C\psi, \quad (225)$$

$$\dot{\psi} = \frac{\partial \bar{\mathcal{H}}(W, \psi)}{\partial W} = W + \frac{\lambda d}{2D}\psi. \quad (226)$$

Este é um sistema autônomo, já que não depende explicitamente da variável independente, e tem solução analítica simples.

Para encontrar a solução do sistema, formado pelas equações (225) e (226), lembremos que um sistema de equações diferenciais de primeira ordem de dimensão  $n$  arbitrária pode ser escrito como

$$\dot{\mathbf{x}}(\xi) = \mathbf{A}\mathbf{x}(\xi), \quad (227)$$

onde  $\mathbf{A}$  é uma matriz cujos elementos não dependem de  $\xi$

$$\mathbf{x}(\xi) = e^{\mathbf{A}\xi}\mathbf{x}_0. \quad (228)$$

Para o sistema formado pelas equações (225) e (226), a matriz  $\mathbf{A}$  é

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} -\frac{\lambda d}{2D} & -2C \\ 1 & \frac{\lambda d}{2D} \end{pmatrix}, \quad (229)$$

e  $\mathbf{x}(\xi)$  é o vetor

$$\mathbf{x}(\xi) = \begin{pmatrix} W(\xi) \\ \psi(\xi) \end{pmatrix}. \quad (230)$$

O sistema tem solução para

$$\det \mathbf{A} \neq 0, \quad (231)$$

ou seja

$$-\left(\frac{\lambda d}{2D}\right)^2 + 2C \neq 0, \quad (232)$$

o que impõe a seguinte condição para que o sistema tenha solução

$$C \neq \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda d}{2D}\right)^2 \quad (233)$$

Para resolvermos o sistema de equações usaremos a seguinte propriedade

$$e^{\mathbf{A}} = \mathbf{P} e^{\mathbf{B}} \mathbf{P}^{-1} \quad (234)$$

onde  $\mathbf{B}$  é uma matriz semelhante na forma diagonal e  $\mathbf{P}$  é a matriz que diagonaliza  $\mathbf{A}$ . Para encontrar  $\mathbf{B}$  e  $\mathbf{P}$  precisamos primeiramente achar os autovalores e autovetores de  $\mathbf{A}$ . Os autovalores são obtidos ao escrevermos a equação

$$\det(\mathbf{A} - \alpha \mathbf{I}) = 0, \quad (235)$$

e assim obtemos o polinômio característico

$$-\left(\frac{\lambda d}{2D}\right)^2 + \alpha^2 + 2C = 0, \quad (236)$$

cujos autovalores são

$$\alpha_{1,2} = \pm \sqrt{\left(\frac{\lambda d}{2D}\right)^2 - 2C} \quad (237)$$

Os autovetores são obtidos ao substituir os autovalores na equação

$$\mathbf{A} \mathbf{x} = \alpha \mathbf{x} \quad (238)$$

Substituindo o primeiro autovalor obtemos

$$\mathbf{x}_1 = \begin{pmatrix} \sqrt{\left(\frac{\lambda d}{2D}\right)^2 - 2C} - \frac{\lambda d}{2D} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (239)$$

e do segundo autovalor obtemos

$$\mathbf{x}_2 = \begin{pmatrix} -\sqrt{\left(\frac{\lambda d}{2D}\right)^2 - 2C} - \frac{\lambda d}{2D} \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (240)$$

Determinados os autovetores, podemos escrever a matriz  $\mathbf{P}$

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} \sqrt{\left(\frac{\lambda d}{2D}\right)^2 - 2C} - \frac{\lambda d}{2D} & -\sqrt{\left(\frac{\lambda d}{2D}\right)^2 - 2C} - \frac{\lambda d}{2D} \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (241)$$

e sua inversa é dada por

$$\mathbf{P}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2\sqrt{\left(\frac{\lambda d}{2D}\right)^2 - 2C}} & \frac{\sqrt{\left(\frac{\lambda d}{2D}\right)^2 - 2C} + \frac{\lambda d}{2D}}{2\sqrt{\left(\frac{\lambda d}{2D}\right)^2 - 2C}} \\ -\frac{1}{2\sqrt{\left(\frac{\lambda d}{2D}\right)^2 - 2C}} & \frac{\sqrt{\left(\frac{\lambda d}{2D}\right)^2 - 2C} - \frac{\lambda d}{2D}}{2\sqrt{\left(\frac{\lambda d}{2D}\right)^2 - 2C}} \end{pmatrix}. \quad (242)$$

O fator  $e^{\mathbf{B}}$  é então

$$e^{\mathbf{B}} = \begin{pmatrix} e^{\sqrt{\left(\frac{\lambda d}{2D}\right)^2 - 2C}} & 0 \\ 0 & e^{-\sqrt{\left(\frac{\lambda d}{2D}\right)^2 - 2C}} \end{pmatrix}. \quad (243)$$

Dada a equação (234) obtemos

$$e^{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} \cosh\left(\sqrt{\left(\frac{\lambda d}{2D}\right)^2 - 2C}\right) - \frac{\left(\frac{\lambda d}{2D}\right) \sinh\left(\sqrt{\left(\frac{\lambda d}{2D}\right)^2 - 2C}\right)}{\sqrt{\left(\frac{\lambda d}{2D}\right)^2 - 2C}} & \frac{-2C \sinh\left(\sqrt{\left(\frac{\lambda d}{2D}\right)^2 - 2C}\right)}{\sqrt{\left(\frac{\lambda d}{2D}\right)^2 - 2C}} \\ \frac{\sinh\left(\sqrt{\left(\frac{\lambda d}{2D}\right)^2 - 2C}\right)}{\sqrt{\left(\frac{\lambda d}{2D}\right)^2 - 2C}} & \cosh\left(\sqrt{\left(\frac{\lambda d}{2D}\right)^2 - 2C}\right) + \frac{\left(\frac{\lambda d}{2D}\right) \sinh\left(\sqrt{\left(\frac{\lambda d}{2D}\right)^2 - 2C}\right)}{\sqrt{\left(\frac{\lambda d}{2D}\right)^2 - 2C}} \end{pmatrix} \quad (244)$$

Agora podemos escrever a solução (228)

$$\begin{pmatrix} W(\xi) \\ \psi(\xi) \end{pmatrix} = e^{\mathbf{A}} \begin{pmatrix} W_0 \\ \psi_0 \end{pmatrix}, \quad (245)$$

onde

$$W(\xi) = W_0 \left[ \cosh\left(\sqrt{\left(\frac{\lambda d}{2D}\right)^2 - 2C\xi}\right) + \frac{\left[1 - \left(\frac{\lambda d}{2D}\right)\right] \sinh\left(\sqrt{\left(\frac{\lambda d}{2D}\right)^2 - 2C\xi}\right)}{\sqrt{\left(\frac{\lambda d}{2D}\right)^2 - 2C}} \right], \quad (246)$$

$$\psi(\xi) = \psi_0 \left[ \cosh\left(\sqrt{\left(\frac{\lambda d}{2D}\right)^2 - 2C\xi}\right) + \frac{\left(\frac{\lambda d}{2D} - 2C\right) \sinh\left(\sqrt{\left(\frac{\lambda d}{2D}\right)^2 - 2C\xi}\right)}{\sqrt{\left(\frac{\lambda d}{2D}\right)^2 - 2C}} \right]. \quad (247)$$

Na equação (246), caso  $1 - \left(\frac{\lambda d}{2D}\right) > 0$ , quando  $\xi \rightarrow \infty$ ,  $W(\xi) \rightarrow \infty$  e  $\xi \rightarrow -\infty$ ,  $W(\xi) \rightarrow 0$ . Para caso  $1 - \left(\frac{\lambda d}{2D}\right) < 0$ , quando  $\xi \rightarrow -\infty$ ,  $W(\xi) \rightarrow \infty$  e  $\xi \rightarrow \infty$ ,  $W(\xi) \rightarrow 0$ . E por último, se  $1 = \left(\frac{\lambda d}{2D}\right)$ ,  $W(\xi) \rightarrow \infty$  para  $\xi \rightarrow \pm\infty$ . Na equação (247) vemos um comportamento parecido. Caso  $\frac{\lambda d}{2D} - 2C > 0$ , quando  $\xi \rightarrow \infty$ ,  $\psi(\xi) \rightarrow \infty$  e  $\xi \rightarrow -\infty$ ,  $\psi(\xi) \rightarrow 0$ . Para caso  $\frac{\lambda d}{2D} - 2C < 0$ ,

quando  $\xi \rightarrow -\infty$ ,  $\psi(\xi) \rightarrow \infty$  e  $\xi \rightarrow \infty$ ,  $\psi(\xi) \rightarrow 0$ . E por último, se  $\frac{\lambda d}{2D} = 2C$ ,  $\psi(\xi) \rightarrow \infty$  para  $\xi \rightarrow \pm\infty$ . Assim, as equações (246) e (247) não apresentam perfil saturado, isto porque ao fazer  $G = C\phi^2$  estamos alterando o termo  $r\phi(1 - \phi^l)$  da equação (3) e considerando que ele é agora  $2C\phi$ , não apresentando mais termos não lineares. Mas como a solução (247) não apresenta valores negativos, ela ainda pode representar sistemas reais.

## 4 Solução numérica

Uma das técnicas para obter resultados numéricos de uma equação que não admite uma solução analítica consiste em discretizá-la. Para obter a solução numérica da equação (3), usamos a técnica de diferenças finitas, analogamente ao que propôs Colato [24], onde a equação análoga é

$$U_{m,n+1} = pU_{m+1,n} + qU_{m-1,n} + (1 - p - q)U_{m,n} + R(1 - U_{m,n}^l)U_{m,n}. \quad (248)$$

Na equação (248),  $m = 0, 1, 2, 3 \dots M$ , onde usamos condições de contorno periódicas,  $M + 1 = 1$  e  $-1 = M$ , e  $n$  tem o papel do tempo discretizado. Os parâmetros representam:  $p$  a probabilidade do sítio  $m$  receber informação ou algum material do sítio da direita,  $m + 1$ , e  $q$  a probabilidade do sítio receber do sítio da esquerda,  $m - 1$ , para configurar o passo de tempo  $n + 1$ . Como estamos falando em probabilidades precisamos restringir o valor dessas constantes de tal forma que  $p + q \leq 1$ . Vemos então que a probabilidade de algum indivíduo permanecer no sítio é  $(1 - p - q)$  e assim

$$p + q + (1 - p - q) = 1 \quad (249)$$

Por fim a constante  $R$  dá a taxa de crescimento do sistema devido aos indivíduos presentes no sítio atual.

Escrevendo  $U_{m,n} \simeq U(mdx, ndt)$  na equação (248), e somando um termo nulo  $(p - p)U(x - dx, t)$ , podemos então escrever

$$\begin{aligned} U(x, t + dt) = & pU(x + dx, t) + (p - p)U(x - dx, t) + \\ & + qU(x - dx, t) + (1 - 2p + p - q)U(x, t) + R(1 - U^l(x, t))U(x, t) \end{aligned} \quad (250)$$

esta pode ser rearranjada da seguinte maneira

$$\begin{aligned} U(x, t + dt) - U(x, t) = & pU(x + dx, t) + (p - p)U(x - dx, t) + \\ & + qU(x - dx, t) + (-2p + p - q)U(x, t) + R(1 - U^l(x, t))U(x, t) \end{aligned} \quad (251)$$

Dividindo esta equação por  $\Delta t$ , obtemos

$$\begin{aligned} \frac{U(x, t + dt) - U(x, t)}{\Delta t} = & \frac{p(\Delta x)^2 [U(x + dx, t) - 2U(x, t) + U(x - dx, t)]}{\Delta t (\Delta x)^2} + \\ & + \frac{(p - q)\Delta x [U(x, t) - U(x - dx, t)]}{\Delta t \Delta x} + \frac{R(1 - U^l(x, t))U(x, t)}{\Delta t}. \end{aligned} \quad (252)$$

No limite  $\Delta t \rightarrow 0$  e  $\Delta x \rightarrow 0$ , admitimos que  $\frac{p(\Delta x)^2}{\Delta t} \rightarrow cte \equiv D$ ,  $\frac{(p-q)\Delta x}{\Delta t} \rightarrow cte \equiv -\mu$  e

$\frac{R}{\Delta t} \rightarrow cte \equiv r$  e assim

$$\frac{\partial U}{\partial t} = D \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} - \mu \frac{\partial U}{\partial x} + rU(1 - U^l). \quad (253)$$

Esta é a equação (106), de onde tiramos, para o caso particular onde  $p = q$  que  $\mu = 0$  e assim recuperamos a equação (3)

$$\frac{\partial U}{\partial t} - D \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} = rU(1 - U^l). \quad (254)$$

É interessante notar que se somarmos as amplitudes de cada sítio a partir da equação (248) teremos

$$\sum_{m=0}^M U_{m,n+1} = \sum_{m=0}^M pU_{m+1,n} + \sum_{m=0}^M qU_{m-1,n} + \sum_{m=0}^M (1 - p - q)U_{m,n} + \sum_{m=0}^M R(1 - U_{m,n}^l)U_{m,n} \quad (255)$$

Neste trabalho usamos condições de contorno periódicas de tal forma que

$$U_{M+1,n} = U_{0,n} \quad (256)$$

e

$$U_{-1,n} = U_{M,n} \quad (257)$$

Usando a condição de contorno periódica de contorno, dada pelas equações (256) e (257), podemos reescrever os seguintes somatórios

$$\sum_{m=0}^M U_{m+1,n} = \sum_{m=0}^M U_{m-1,n} = \sum_{m=0}^M U_{m,n}. \quad (258)$$

Substituindo a equação (258) na (255) obtemos

$$\sum_{m=0}^M U_{m,n+1} = \sum_{m=0}^M U_{m,n} + R \sum_{m=0}^M U_{m,n} (1 - U_{m,n}^l) \quad (259)$$

e chamando

$$P_n = \sum_{m=0}^M U_{m,n}, \quad (260)$$

temos

$$P_{n+1} = P_n + R \sum_{m=0}^M (1 - U_{m,n}^l) U_{m,n} \quad (261)$$

Caso  $R = 0$  teríamos o caso onde  $P_{n+1} = P_n$ , onde a população é conservada constante.

## 4.1 Análise da dinâmica

Quando usamos a equação (248) e obtemos a solução numérica encontramos alguns comportamentos interessantes. A configuração inicial é  $U_{m,0} = 0$  para  $m \neq \frac{M}{2}$ , sendo  $\frac{M}{2}$  inteiro, e

$U_{\frac{M}{2},0} = 0,8$ , a menos que esteja explícito o contrário. Inicialmente obtemos a evolução temporal para um conjunto de parâmetros para todos os sítios em alguns instantes, que é mostrada na figura 10, e para um único sítio na figura 11. Aqui vemos um dos comportamentos possíveis para o sistema, onde a função atinge uma amplitude saturada e a partir daí mantém esta amplitude. Mas este não é o único comportamento possível para a equação (248), temos mais dois comportamentos possíveis ao alterar os parâmetros  $R$ ,  $p$ ,  $q$ , e o expoente  $l$  na equação (248). O segundo é caracterizado por, após um período de transiente, a amplitude dos sítios oscilarem com período definido, como vemos na figura 12. O terceiro tipo de comportamento possível é obtido quando a amplitude dos sítios não oscilam com um período fixo. É interessante notar que, para os dois primeiros comportamentos, uma pequena alteração na condição inicial, ou a amplitude do  $U_0$  para os  $M$  sítios, o comportamento geral não é alterado após passado o período transiente. Já o terceiro comportamento altera-se grandemente com uma pequena alteração nas condições iniciais. Isto pode ser visto nas figuras 13, 14 e 15, onde os três comportamentos são retratados respectivamente para o sítio  $\frac{M}{2} + 10$ . Esta forte dependência do terceiro comportamento às condições iniciais aliada com a imprevisibilidade do sistema nos permitem classificar este comportamento como sendo caótico.

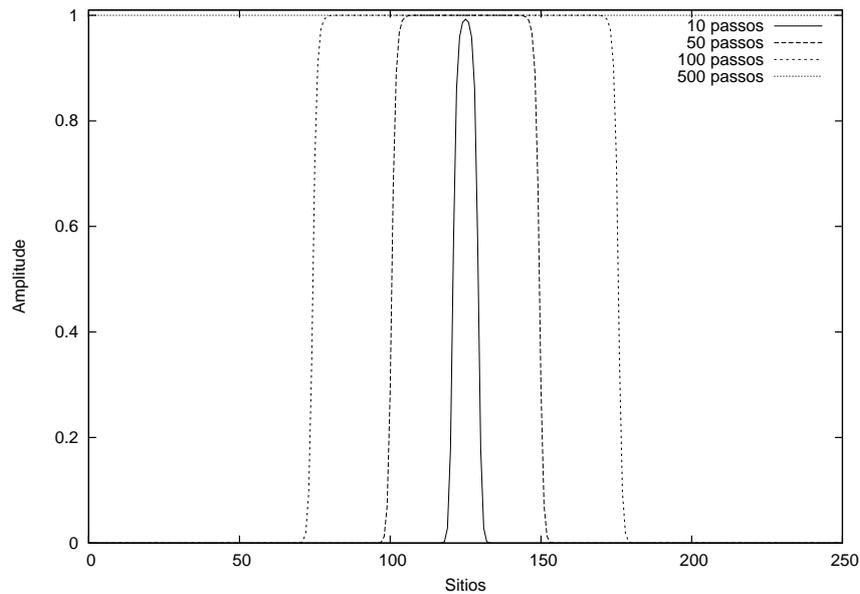


Figura 10: Evolução temporal com parâmetros para a equação (248)  $l = 1$ ,  $R = 0,8$ ,  $p = q = 0,2$

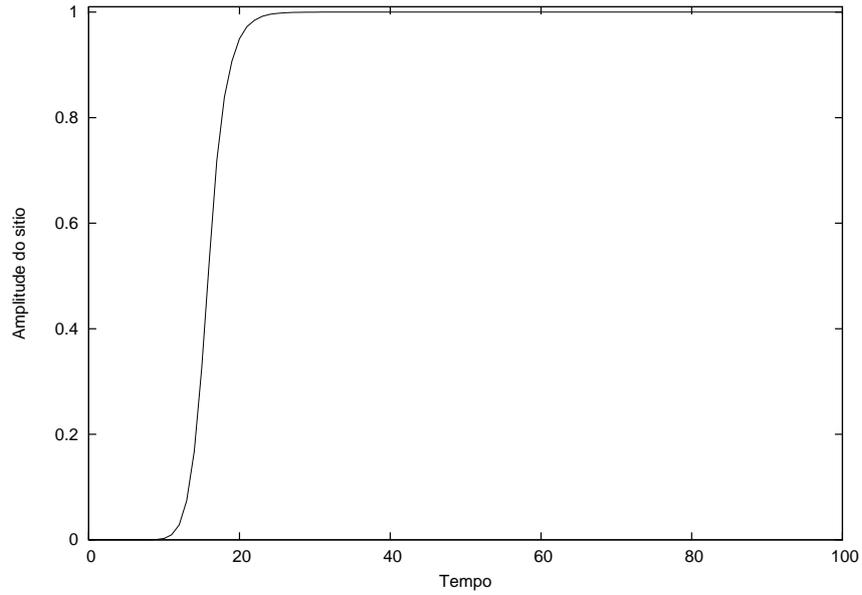


Figura 11: Evolução temporal para a equação (248) com parâmetros -  $l = 1$ ,  $R = 0,8$ ,  $p = q = 0,2$

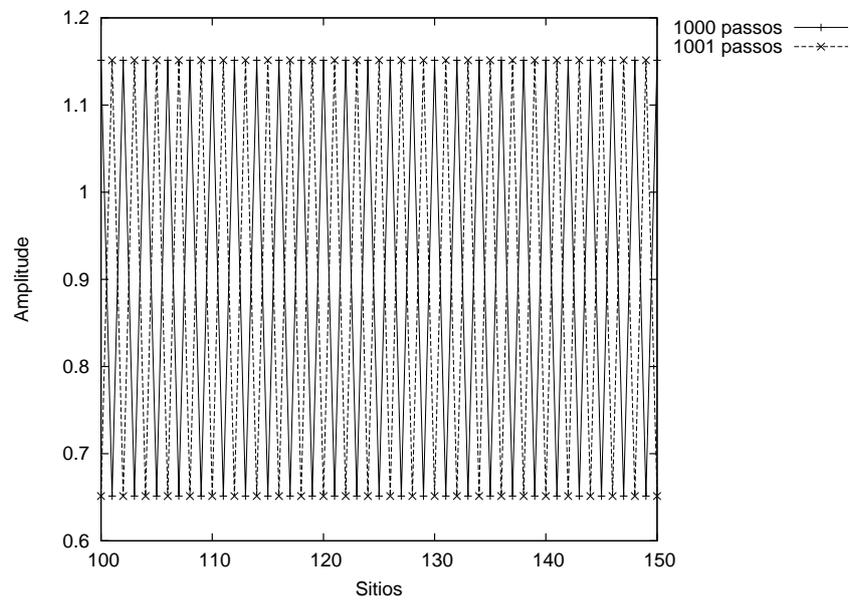


Figura 12: Dinâmica do segundo tipo de comportamento onde  $l = 2$ ,  $R = 0,8$  e  $p = q = 0,2$

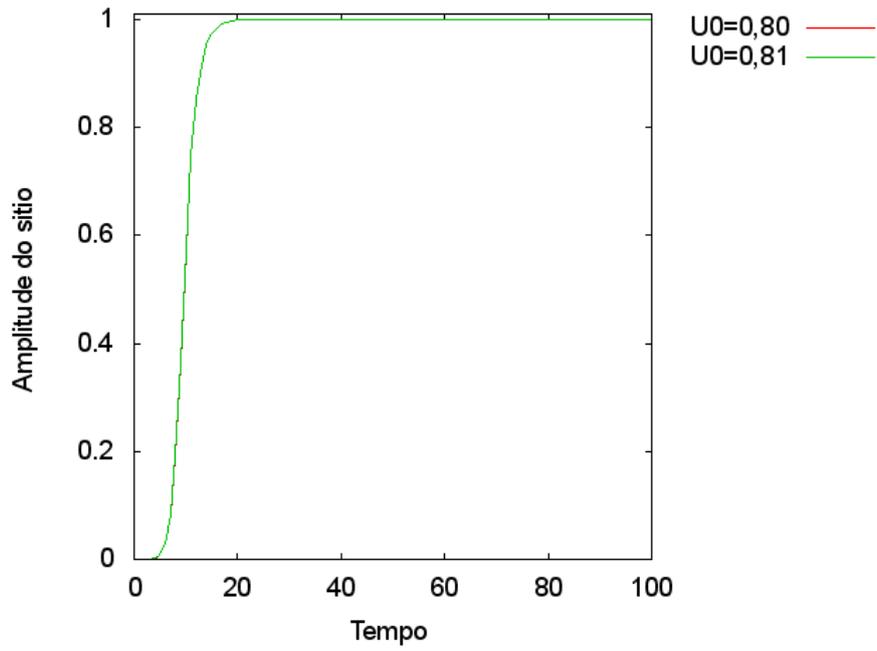


Figura 13: Evolução temporal do sítio 132 - parâmetros para a equação (248) -  $l = 1$ ,  $R = 0,8$  e  $p = q = 0,20$

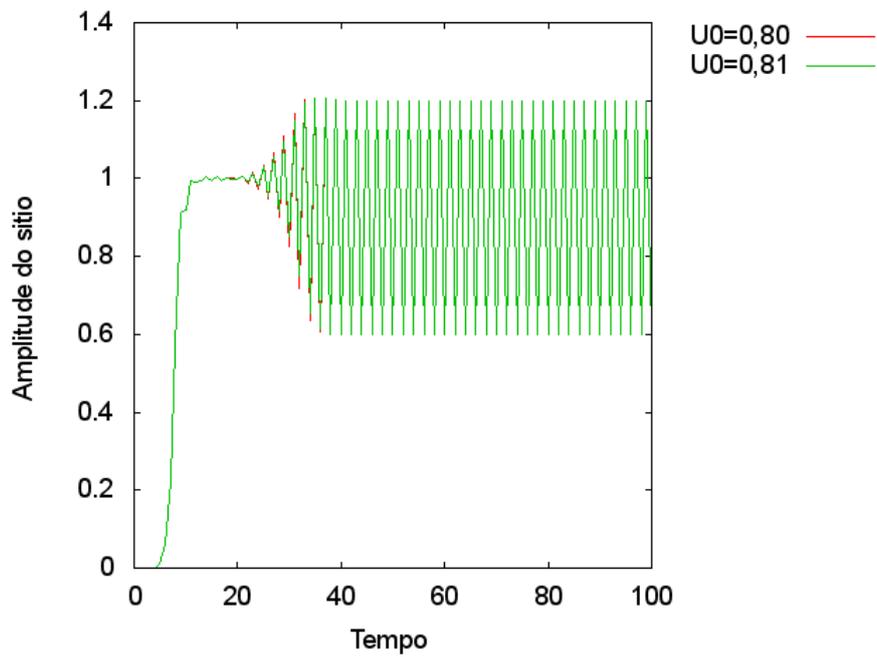


Figura 14: Evolução temporal do sítio 132 - parâmetros para a equação (248) -  $l = 1$ ,  $R = 1,5$ ,  $p = q = 0,20$

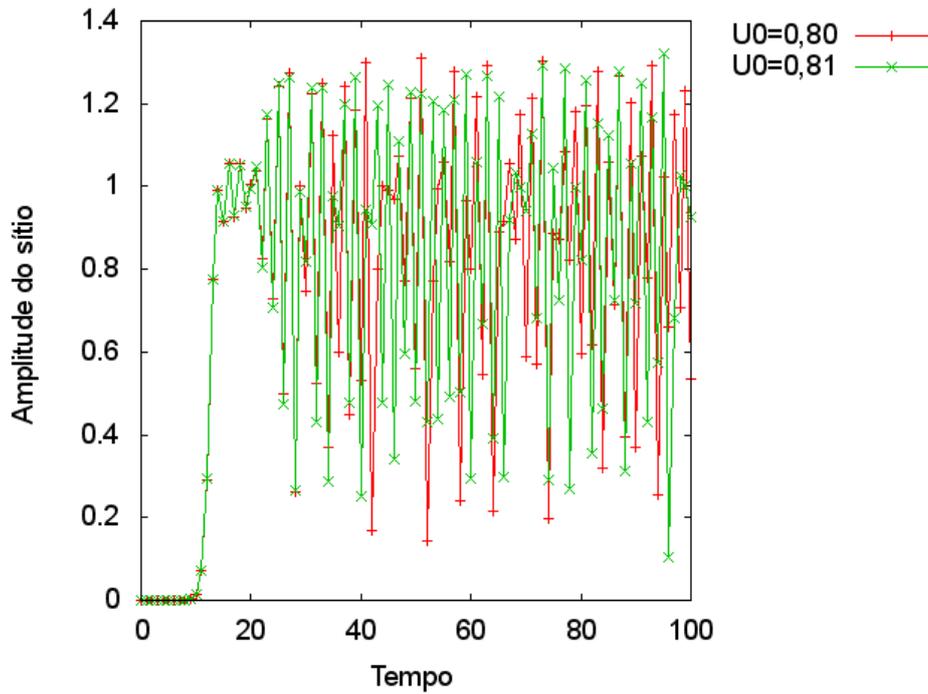


Figura 15: Evolução temporal do sítio 132 - parâmetros para a equação (248) -  $l = 1$ ,  $R = 1,9$ ,  $p = q = 0,20$

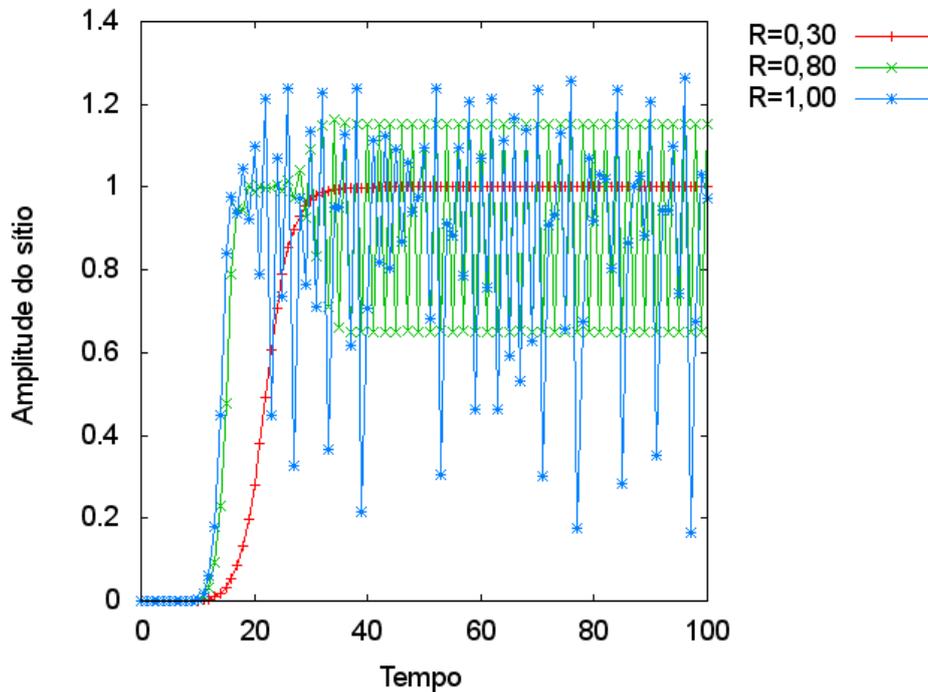


Figura 16: Evolução temporal para  $l = 2$ ,  $p = q = 0,20$

É interessante notar que para cada valor do expoente  $l$  um conjunto de parâmetros diferentes vai gerar esses três comportamentos distintos. Como exemplo, vemos na figura 16 onde foi alterado apenas o expoente  $l$  e mantidos  $p = q$  com o mesmo valor que aqueles usados nas figuras 13, 14 e 15 podemos obter os três comportamentos, só que agora com outros valores para  $R$ . Na figura 13 os parâmetros assumiam os seguintes valores  $l = 1$ ,  $R = 0,8$  e  $p = q =$

0,2 e esses faziam com que a solução pudesse ser classificado como pertencendo ao primeiro comportamento. Já na figura 16, o valor de  $l$  é alterado, sendo agora  $l = 2$ , e observa-se que o caso  $R = 0,8$  apresenta um comportamento do segundo tipo, oscilando com um período definido. Para classificar os diferentes comportamentos é importante notar que nós não usamos os instantes iniciais, deixamos a equação evoluir por algum tempo, no período que chamamos de transiente, e aí então vemos a tendência do comportamento do sistema.

Visualmente pode não ser tão fácil notar quando o sistema está com um comportamento caótico, já que definimos que neste caso não haverá uma oscilação com período definido. Assim, caso o período de repetição dos valores da amplitude seja muito alto, não há como, visualmente, identificar um comportamento periódico. Para facilitar a visualização e o estudo dos modelos, uma vez fixados o expoente  $l$  e, no nosso caso, as constantes  $p$  e  $q$ , podemos utilizar gráficos de bifurcação, onde ignoramos o período transiente e utilizamos apenas as amplitudes para construir esse gráfico. Dessa maneira podemos ter uma noção de qual comportamento podemos esperar para um dado conjunto de parâmetros, como na figura 17. Este gráfico é importante já que agora podemos identificar visualmente os limites entre os três comportamentos. Comparando a figura 17 com a 18 vemos que a velocidade da onda influencia muito no comportamento. É possível ainda ver que com diferentes expoentes  $l$  para a equação (248) um mesmo conjunto de parâmetros não dá o mesmo resultado, já que até as equações são diferentes nestes casos, como é visto comparando as figuras 19, com  $l = 2$ , e a figura 17, com  $l = 1$  bem como nas figuras 18 e 20. Aí vemos uma tendência, quanto maior o expoente  $l$ , fixados  $p$  e  $q$ , menor precisa ser o valor de  $R$  para que sejam observados os três comportamentos.

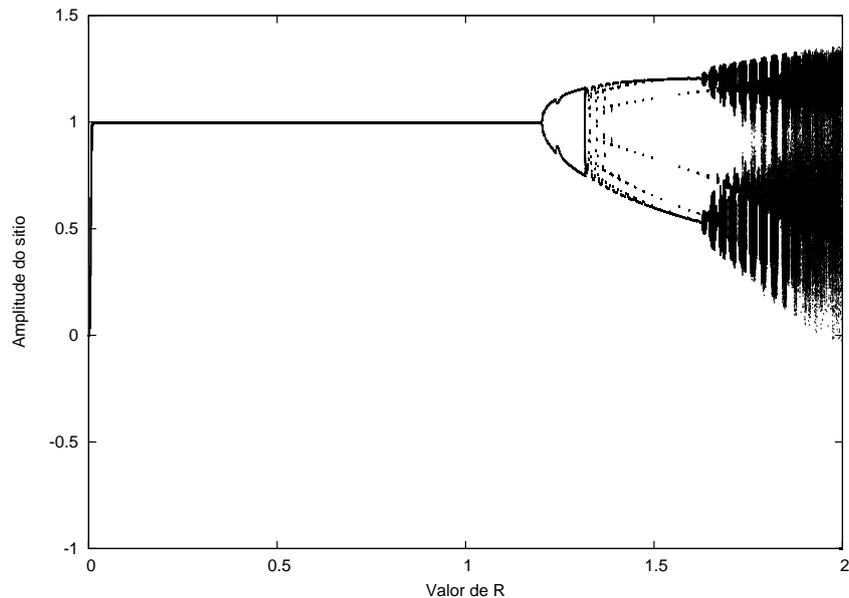


Figura 17: Gráfico de bifurcação para  $l = 1$ ,  $p = q = 0,2$

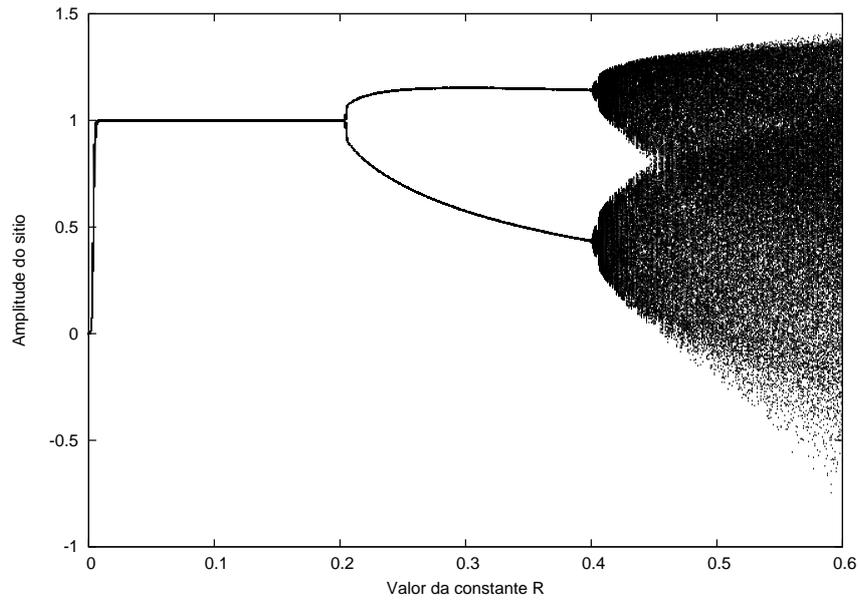


Figura 18: Gráfico de bifurcação para  $l = 2, p = q = 0,4$

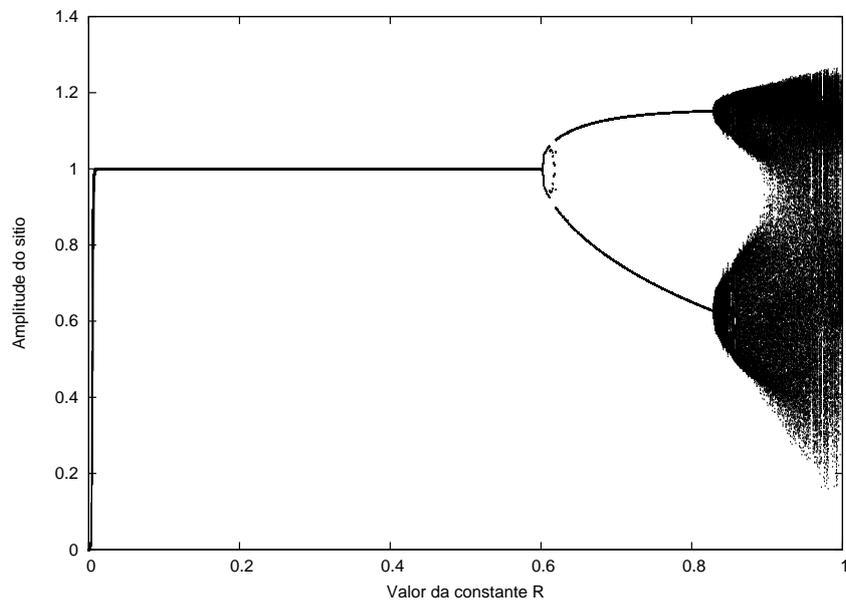


Figura 19: Gráfico de bifurcação para  $l = 2$  e  $p = q = 0,2$

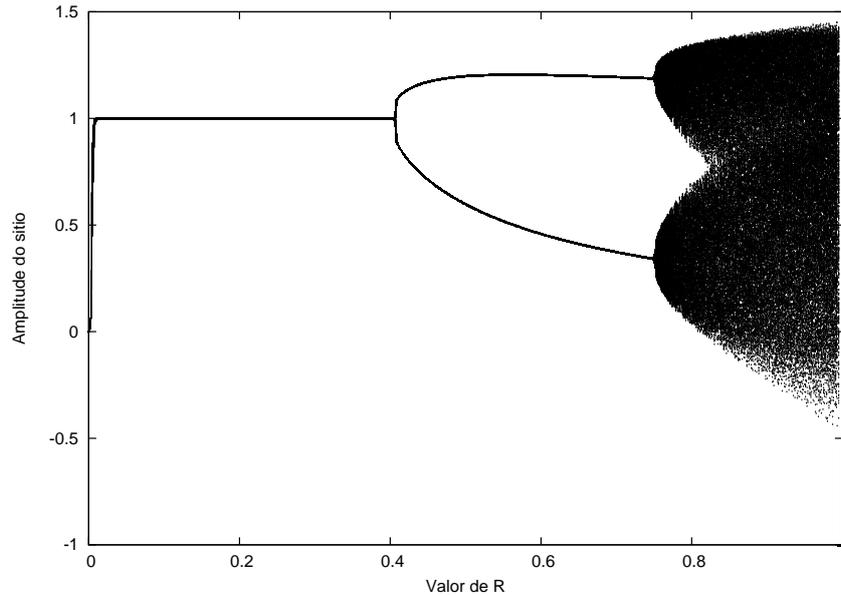


Figura 20: Gráfico de bifurcação para  $l = 1$  ,  $p = q = 0,4$

Seria muito útil encontrar uma maneira de identificar facilmente os regimes para um dado conjunto de parâmetros. Para isso, construímos o gráfico 21 e os dados foram ajustados.

Para a região abaixo da linha sólida na figura 21 é caracterizado o primeiro comportamento, onde todos os sítios possuem um valor igual da concentração de matéria presente após o período transiente e acima da linha temos os outros dois comportamentos. Para separar os dois comportamentos restantes consideramos que se não existe repetição de nenhuma sequência por um tempo grande, aqui considerado como mil passos de iteração, o sistema saiu do segundo comportamento e entrou no regime caótico. A linha tracejada da figura (21) mostra o limite entre o segundo e o terceiro comportamentos. Podemos então representar os diversos comportamentos usando o gráfico 21. Neste gráfico o primeiro regime, onde um único ponto máximo é atingido e a evolução temporal não altera esse valor, se localiza para os parâmetros abaixo da linha sólida. Entre a linha sólida e a tracejada encontramos o regime de bifurcação e acima da linha tracejada o regime caótico.

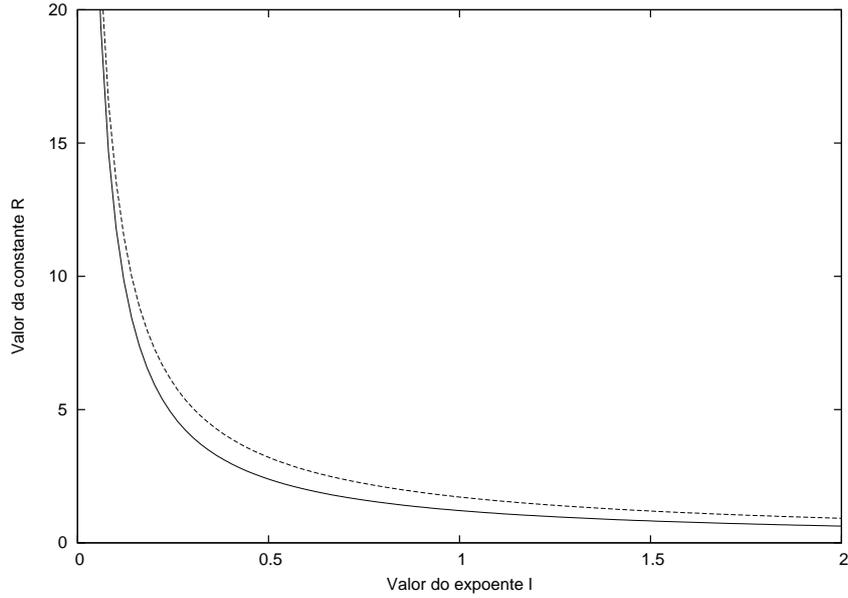


Figura 21: Comportamentos para  $p = q = 0,2$ . A linha sólida representa o limite entre o primeiro e o segundo comportamentos, e a tracejada o limite entre o segundo e o terceiro comportamentos

## 4.2 Correlação

Uma das abordagens para verificar se existe uma relação entre duas variáveis é feita usando a função da correlação. Esta mede a afinidade entre duas variáveis aleatórias e, quando normalizada pela variância de cada variável, ela fica limitada entre os valores  $-1$  e  $1$ . Quanto mais próximo de  $1$  seu valor, maior a afinidade da relação entre ambas. Quando seu valor se aproxima de  $-1$  dizemos que as variáveis são anti-correlacionadas ou que têm afinidades opostas.

A variância associada à  $U_{m,n}$  é pode ser definida como

$$\Delta_n^2(R, p, q) = \sum_{m=0}^M \left( U_{m,n} - \frac{1}{M+1} \sum_{m=0}^M U_{m,n} \right)^2 \quad (262)$$

Usando a equação (260) a variância será

$$\Delta_n^2(R, p, q) = \sum_{m=0}^M U_{m,n}^2 - \frac{P_n^2}{M+1}. \quad (263)$$

Podemos ainda observar que se  $U_{m,n}$  assume um mesmo valor para qualquer que seja  $m$ , e ao chamar

$$U_{m,n} = \frac{Q_n}{M+1} = cte \quad (264)$$

teremos

$$\Delta_n^2(R, p, q) = \sum_{m=0}^M \left( \frac{Q_n}{M+1} \right)^2 - \frac{1}{M+1} \left( \sum_{m=0}^M \frac{Q_n}{M+1} \right)^2 \quad (265)$$

e como o somatório está sendo feito em  $m$  podemos tirar o argumento, já que este não depende mais de  $m$

$$\Delta_n^2(R, p, q) = \left( \frac{Q_n}{M+1} \right)^2 (M+1) - \frac{(M+1)^2}{M+1} \left( \frac{Q_n}{M+1} \right)^2 = 0 \quad (266)$$

Este resultado é esperado, já que para o comportamento com uma distribuição uniforme para todos os  $M$  sítios, o valor médio e os valores que os sítios assumem são os mesmos valores. Assim, a variância, que mede quão longe a variável se encontra do valor médio, deverá ser nula.

A correlação aqui será considerada de duas formas, uma correlação espacial e outra temporal. Na primeira veremos quão forte é a relação entre a densidade de material de um sítio e outro a uma distância  $d$  e na segunda mediremos quão forte é a relação entre a densidade de material de um mesmo sítio nos tempos  $n$  e  $n+t$ .

A correlação espacial,  $C_n(R, p, q)$ , é definida como

$$C_n(R, p, q) = \frac{\sum_{m=0}^M \left[ \left( U_{m,n} - \frac{P_n}{M+1} \right) \left( U_{m-d,n} - \frac{P_n}{M+1} \right) \right]}{\Delta^2(m, n, r, p, q)}. \quad (267)$$

Já a correlação temporal pode ser definida como

$$C_{n,n+t}(R, p, q) = \frac{\sum_{m=0}^M \left[ \left( U_{m,n} - \frac{P_n}{M+1} \right) \left( U_{m,n+t} - \frac{P_{n+t}}{M+1} \right) \right]}{\Delta(m, n, r, p, q) \Delta(m, n+t, r, p, q)}. \quad (268)$$

## 4.2.1 Correlação Espacial

### Primeiro comportamento, perfil saturado

No primeiro comportamento da dinâmica vemos que a correlação espacial assume valor 1, como pode ser visto na figura 22. Isto acontece porque nesse caso, a amplitude da onda satura no valor máximo. Nos instantes iniciais a correlação com distância  $d$  pequena apresenta valores próximos a 1, já que poucos sítios tem valores não nulos e os sítios não nulos têm valores muito próximos. Pouco antes de o período transiente terminar, no caso da figura 22 perto do passo número 3750, as densidades dos sítios apresentam uma pequena oscilação em seus valores próximos à 1, a correlação então assume valores negativos, mas conforme a oscilação desaparece o valor da correlação volta a ser 1 para distâncias  $d$  pequenas. Esta oscilação não acontece para qualquer conjunto de parâmetros, como pode ser visto na figura 23. Para distâncias  $d$  grandes,  $d = \frac{M}{2}$  e  $d = \frac{M}{2} + 1$ , esperamos que a correlação inicialmente apresente valores negativos, já que a dinâmica começa com apenas um sítio povoado, e vai aumentando a amplitude dos outros sítios próximos da origem em direção aos extremos, correlacionando sítios com valores altos com os de valor nulo. Quando o período transiente é ultrapassado, a correlação para  $d$  grande também se aproxima de 1, como pode ser visto nas figuras 22 e 23, mostrando que todos os sítios assumem o mesmo valor da densidade de material presente em cada.

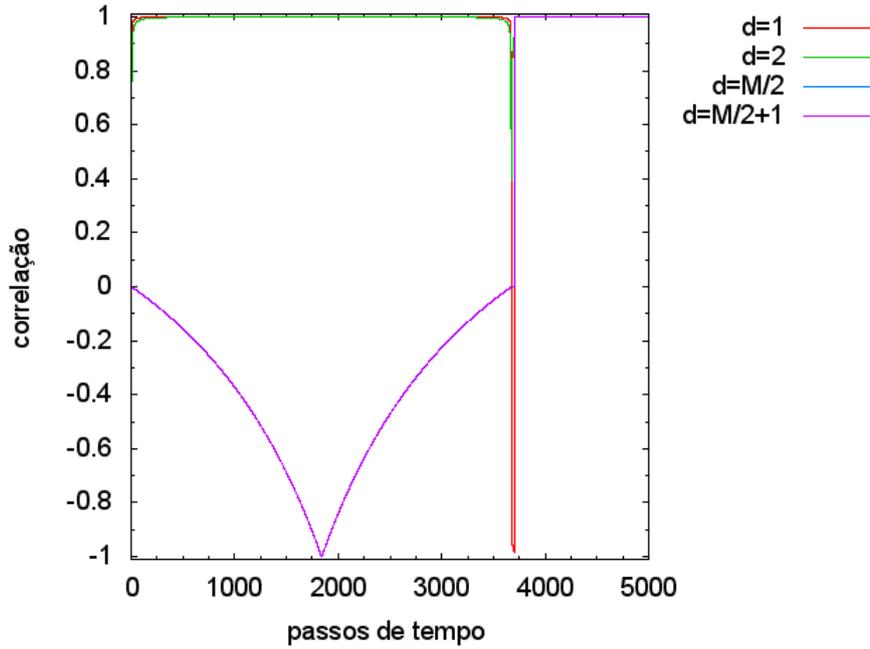


Figura 22: Correlação espacial  $l = 1$ ,  $R = 1,00$ ,  $p = q = 0,2$

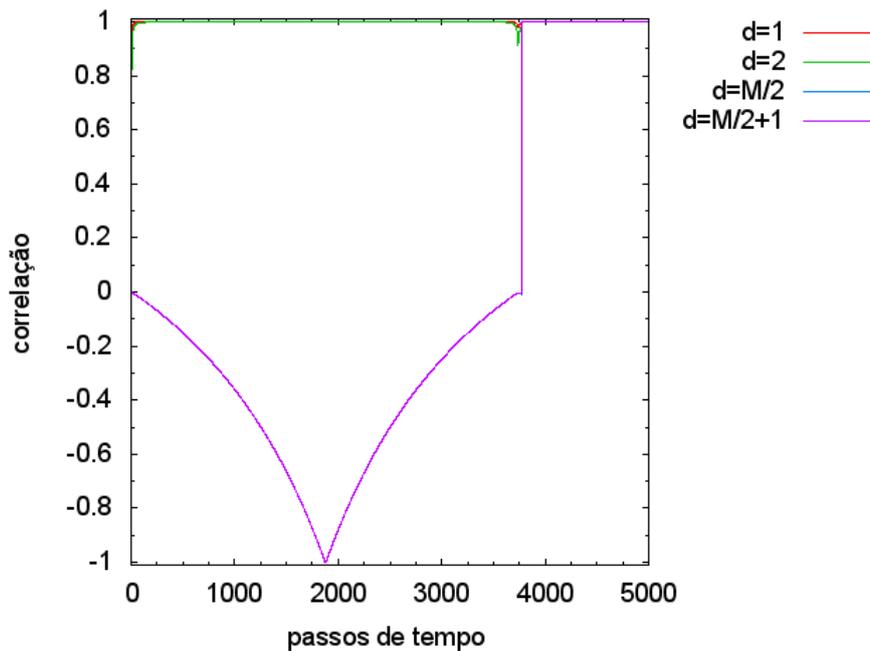


Figura 23: Correlação espacial  $l = 1$ ,  $R = 0,30$ ,  $p = q = 0,4$

### Segundo comportamento, oscilação entre valores fixos

No segundo comportamento a amplitude oscila entre valores fixos, estes valores se repetem a cada 2 sítios. Sendo assim, a correlação realizada com uma distância par tem valor próximo de 1, pois eles são fortemente correlacionados, já a correlação entre sítios com distância ímpar é próxima de  $-1$ , como pode ser visto desde a figura 24 até a 26. Estas figuras foram escolhidas por se encontrarem próximas aos limites de cada um dos comportamentos, mas ainda no segundo comportamento.

Nesta dinâmica, maior distância entre dois sítios é  $M/2$ , já que o sistema, contendo  $M$  sítios, foi construído utilizando-se condições periódicas de contorno. Em alguns casos a correlação nesse segundo comportamento pode apresentar valores altos mesmo quando são utilizados sítios distantes no cálculo, como pode ser visto na figura 26, o que é de se esperar, já que o valor da densidade de material dos sítios está oscilando em torno de dois valores fixos. No entanto, para sítios com distância  $d$  grande, o valor da correlação pode se tornar pequeno, mesmo para o segundo regime, que pode ser visto nas figuras 25 e 24. A explicação para este comportamento é que, apesar de a cada dois sítios a amplitude da onda assumir valores próximos, eles não são necessariamente os mesmos por conta da própria dinâmica ou erros atrelados ao truncamento numérico que o computador tenha que realizar. Assim, ao comparar um sítio com outro muito distante os valores das densidades podem não ser iguais, o que é revelado no valor da correlação neste caso. Isto significa que a afinidade de um sítio diminui com a distância nesses casos.

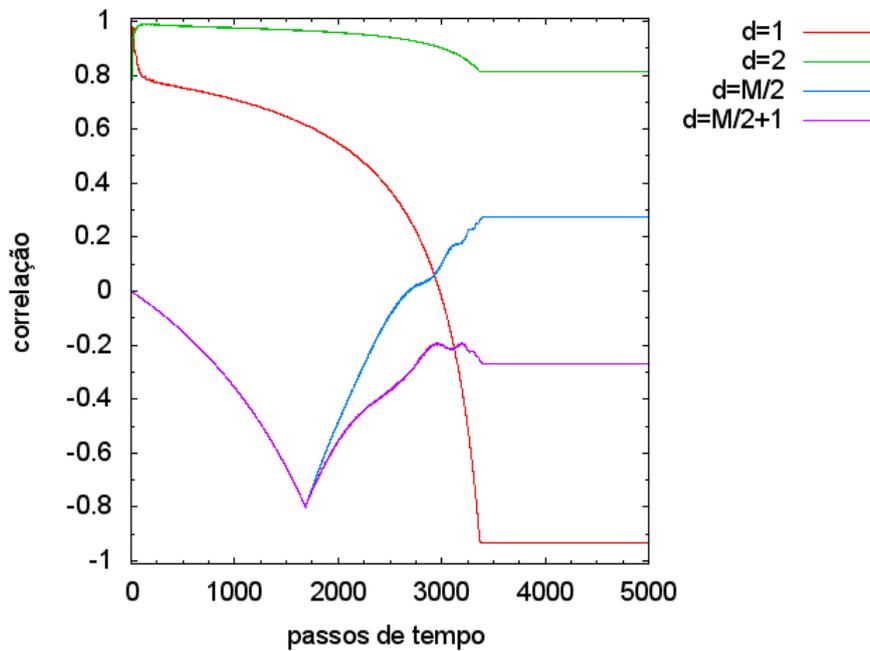


Figura 24: Correlação espacial  $l = 1$ ,  $R = 1, 6$ ,  $p = q = 0, 2$

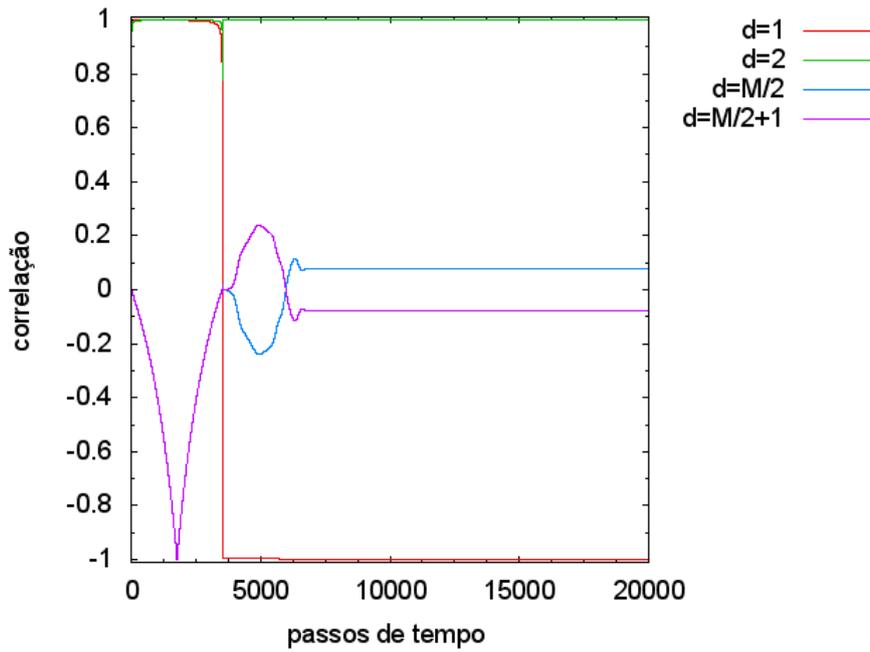


Figura 25: Correlação espacial  $l = 1$ ,  $R = 1, 21$ ,  $p = q = 0, 2$

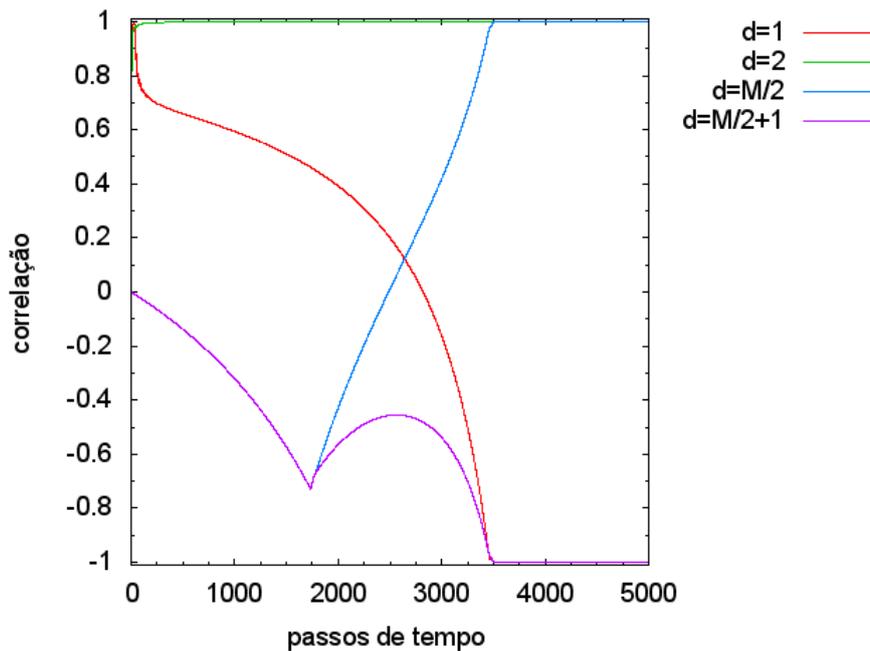


Figura 26: Correlação espacial  $l = 2$ ,  $R = 0, 39$ ,  $p = q = 0, 4$

### Terceiro comportamento, oscilação caótica

No terceiro comportamento a correlação pode ser observada na figura 27, como aparentemente não é possível prever a densidade dos sítios nos próximos instantes de tempo, esperamos uma correlação com valor próximo de 0. Isto não é observado para uma distância  $d = 1$ , já que a dinâmica mesmo imprevisível ainda apresenta a característica que um sítio com um valor alto na amplitude terá um vizinho com valor menor, explicando assim os valores negativos observados. Podemos observar nas figuras 27 e 28 que a correlação se aproxima de zero conforme aumenta

a distância entre os sítios. Sítios mais próximos teriam maior influência sobre os vizinhos. É interessante ressaltar que a dinâmica, mesmo não sendo completamente previsível, ainda apresenta algum padrão. Após o período transiente, sempre ao lado de um sítio com amplitude alta existirá um sítio com amplitude mais baixa.

Da mesma forma que no segundo comportamento os parâmetros  $R$ ,  $p$ ,  $q$  e o expoente  $l$  alteravam a afinidade de um sítio nos seus vizinhos, no terceiro comportamento isto também é uma tendência. Aqui,  $R$  foi escolhido de forma a manter o sistema o mais próximo possível da transição do segundo para o terceiro comportamento, mas garantindo que o mesmo esteja sempre neste último. Comparando as figuras 27 e 28 vemos que conforme o valor de  $R$  aumenta a influência sobre os vizinhos mais distantes pode se tornar mais fraca. É interessante notar que em alguns sistemas nesse terceiro comportamento a influência de um sítio mais distante pode apresentar maior influência que um mais próximo, como é o caso da figura 29, onde  $d = 2$  assume um valor em módulo maior que para  $d = 1$ . Podemos ainda encontrar alguns conjuntos de parâmetros para os quais o valor das densidades de material para os sítios vizinhos são pouco correlacionados, como os das figuras 28 e 30, a influência de um sítio sobre seu vizinho nesses casos já é perdida mesmo com  $d$  pequeno. Por último, na figura 31 podemos ainda encontrar uma correlação alta mesmo quando consideramos sítios distâtes uns dos outros.

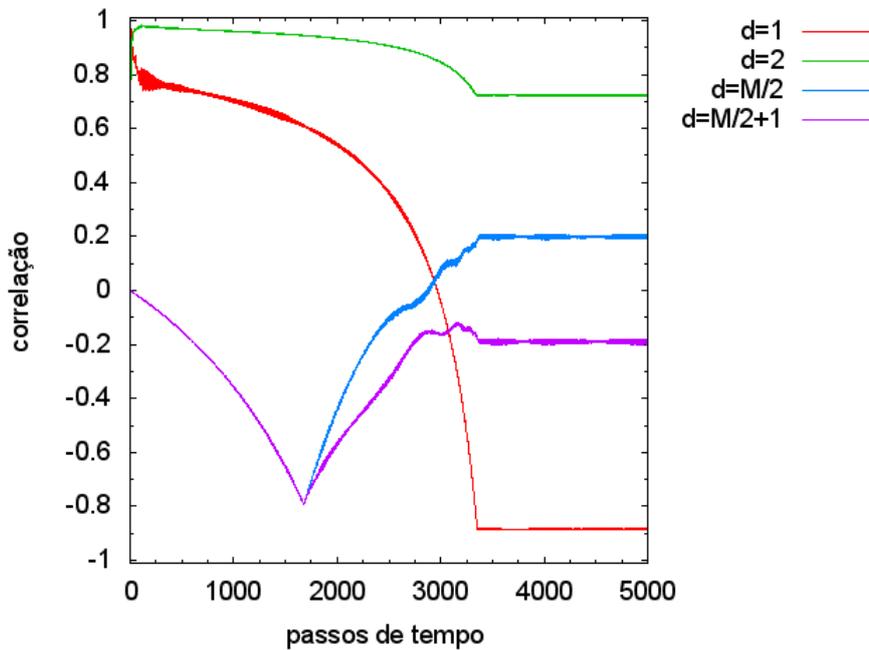


Figura 27: Correlação espacial  $l = 1$ ,  $R = 1,65$ ,  $p = q = 0,2$

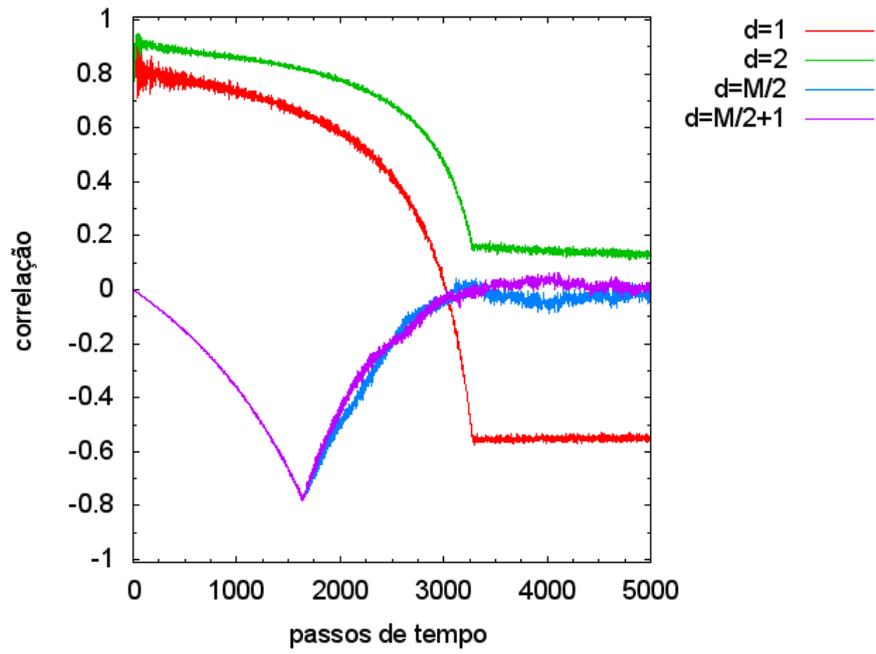


Figura 28: Correlação espacial  $l = 1$ ,  $R = 1, 9$ ,  $p = q = 0, 2$

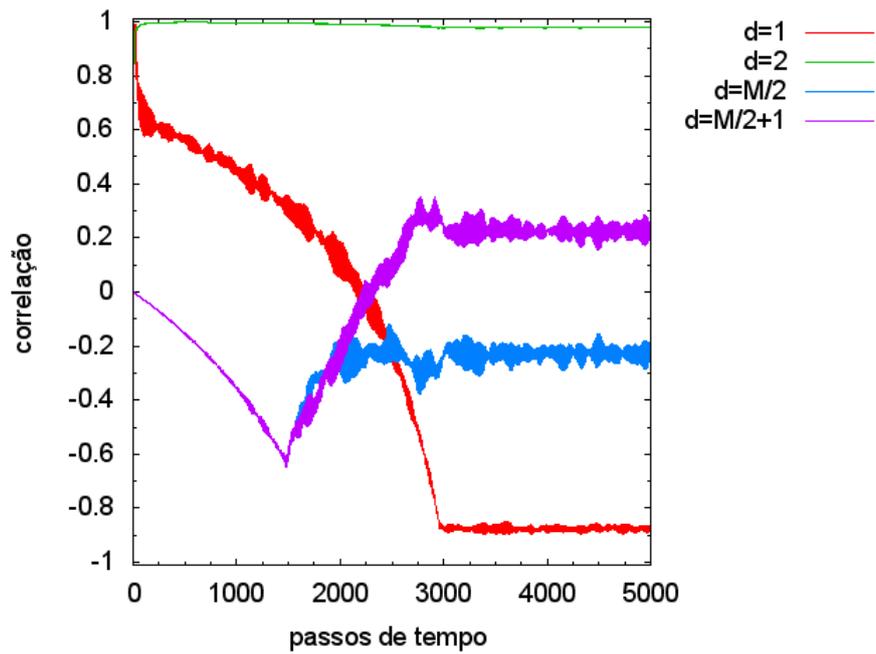


Figura 29: Correlação espacial  $l = 1$ ,  $R = 0, 8$ ,  $p = q = 0, 4$

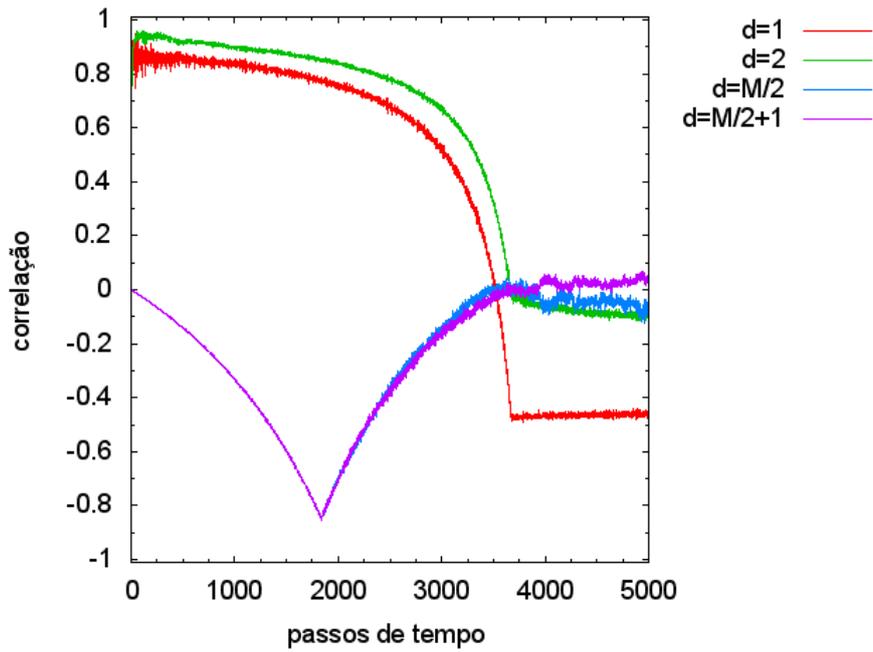


Figura 30: Correlação espacial  $l = 2$ ,  $R = 1, 0$ ,  $p = q = 0, 2$

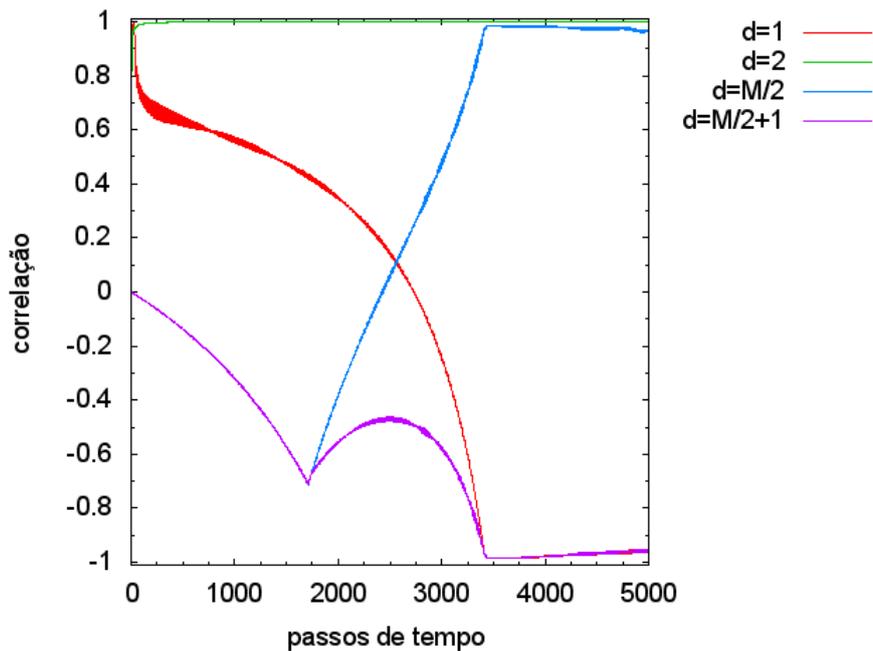


Figura 31: Correlação espacial  $l = 2$ ,  $R = 0, 41$ ,  $p = q = 0, 4$

#### 4.2.2 Correlação Temporal

##### Primeiro comportamento, perfil saturado

A correlação temporal é feita usando na equação (268)  $t = 1$ , sendo assim fazendo a auto-correlação de cada sítio em dois instantes de tempo consecutivos. Os 3 comportamentos também apresentam características diferentes para a correlação temporal, como pode ser visto na figura 32. Nesta figura, para  $R = 1, 0$  verifica-se um comportamento do primeiro tipo. Da mesma

forma como acontecia na correlação espacial, alguns casos podem apresentar uma oscilação, só que agora temporal, perto do fim do período de transiente. Após o período transiente ter acabado, no primeiro comportamento os valores das densidades de material dos sítios sempre apresentarão uma amplitude máxima, sendo assim esperamos como mostra a figura 32 uma correlação com valor 1.

### **Segundo comportamento, oscilação entre valores fixos**

Ao considerar  $R = 1,21$  e  $R = 1,63$  na figura 32 estamos pegando os valores de  $R$  próximos dos limites do segundo comportamento. No segundo comportamento acontece, além da oscilação espacial explicada na seção anterior, oscilação temporal, onde para cada sítio uma amplitude com um valor maior é precedida de uma com valor menor, o que faz com que a correlação assuma um valor negativo. Como os valores de oscilação da amplitude da onda são a cada  $t + 2$ , praticamente os mesmos, esperamos que a correlação assumira valores aproximadamente constantes.

### **Terceiro comportamento, oscilação caótica**

Para  $R = 1,70$  na figura 32 é identificado um comportamento do terceiro tipo. Neste caso não podemos prever com exatidão qual será o próximo valor da densidade de material do sítio, mas a dinâmica dita que na evolução temporal uma amplitude de valor maior sempre será precedida de uma de valor menor. Podemos ainda notar pela figura 33, onde  $l = 2$  e os parâmetros mantidos constantes são  $p = q = 0,2$ , que a correlação para o terceiro comportamento pode em média assumir valores diferentes e não necessariamente próximos de  $-1$  como no caso da figura 32. Aqui, estamos considerando uma auto-correlação que pode também ser identificada como a afinidade que cada sítio tem sobre si mesmo com o passar de um intervalo de tempo. Aqui vemos que um sítio na figura 32 tem maior influência sobre si mesmo no próximo instante de tempo do que no caso da figura 33.

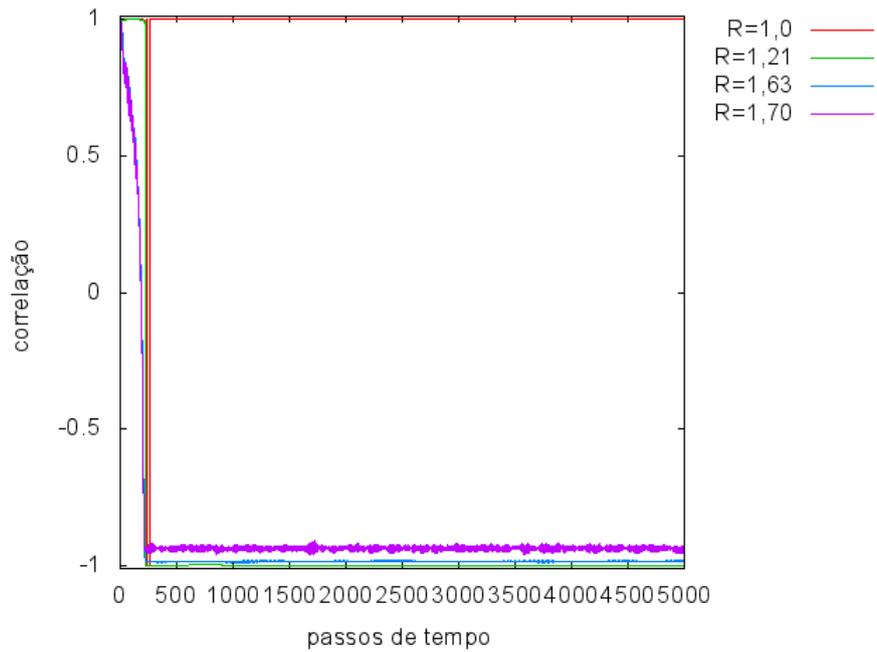


Figura 32: Correlação temporal  $l = 1, p = q = 0, 2$

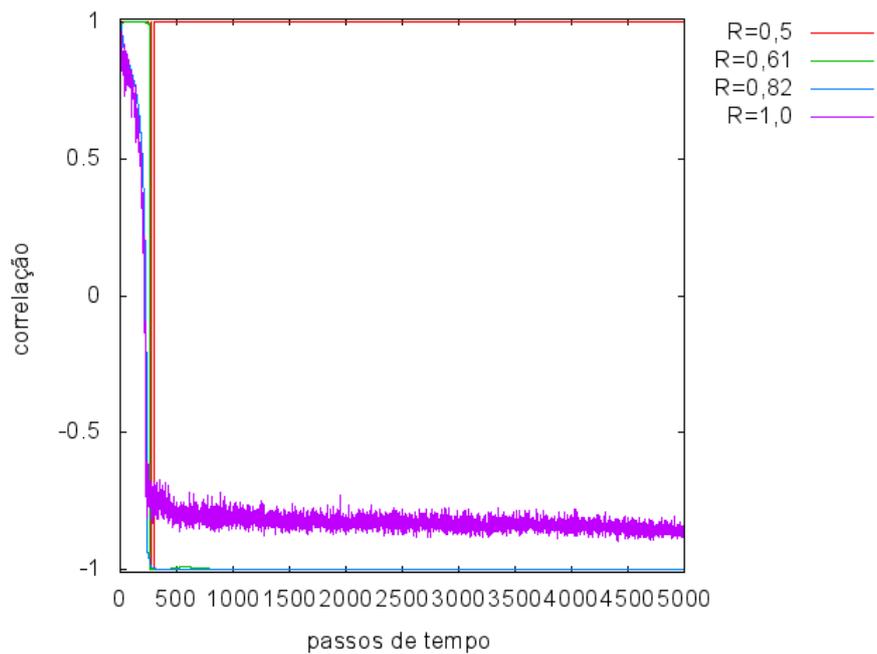


Figura 33: Correlação temporal  $l = 2, p = q = 0, 2$

### 4.3 Análise da dinâmica para $p \neq q$

Quando  $p \neq q$  a dinâmica fica pouco alterada no período transiente, como pode ser visto nas figuras 34, 35 e 36, isto porque ao fazer  $p \neq q$  estamos facilitando a difusão da onda em uma das direções. Nas figuras podemos perceber esta alteração no período transiente mais facilmente a partir de 50 passos de tempo, quando fica claro a maior facilidade que a densidade

de material tem para deslocar-se para a direita, quando a probabilidade de migração nesse sentido é  $q = 0,4$ , do que para a esquerda onde  $p = 0,2$ . Após o período transiente a dinâmica se comporta de maneira similar aos casos onde  $p = q$ . O sistema ainda apresenta os 3 tipos de comportamento, e podemos observar o primeiro comportamento na figura 34, o segundo na figura 35 e o terceiro através da figura 36.

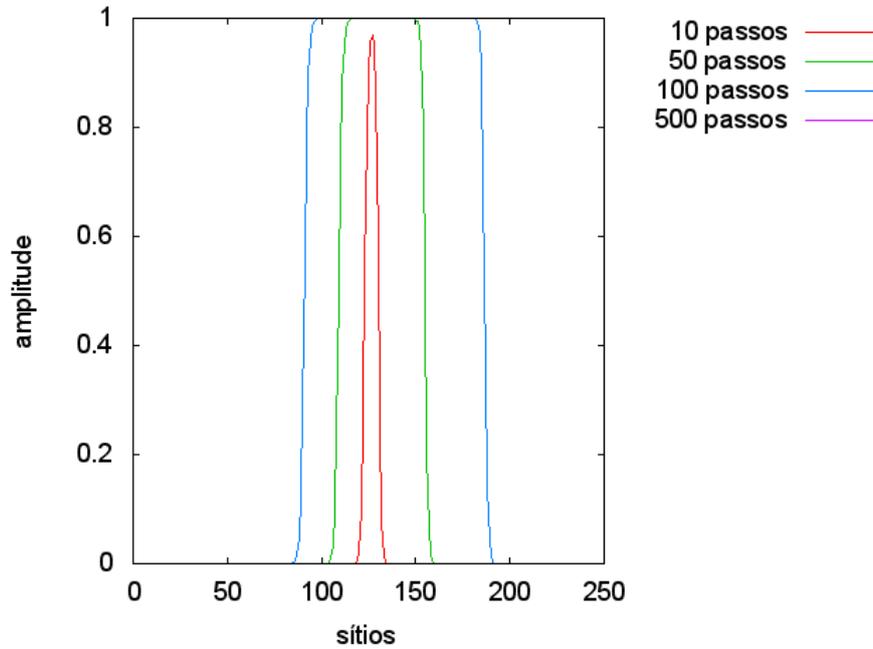


Figura 34: Evolução Temporal com  $l = 2$ ,  $R = 0,39$ ,  $p = 0,2$  e  $q = 0,4$

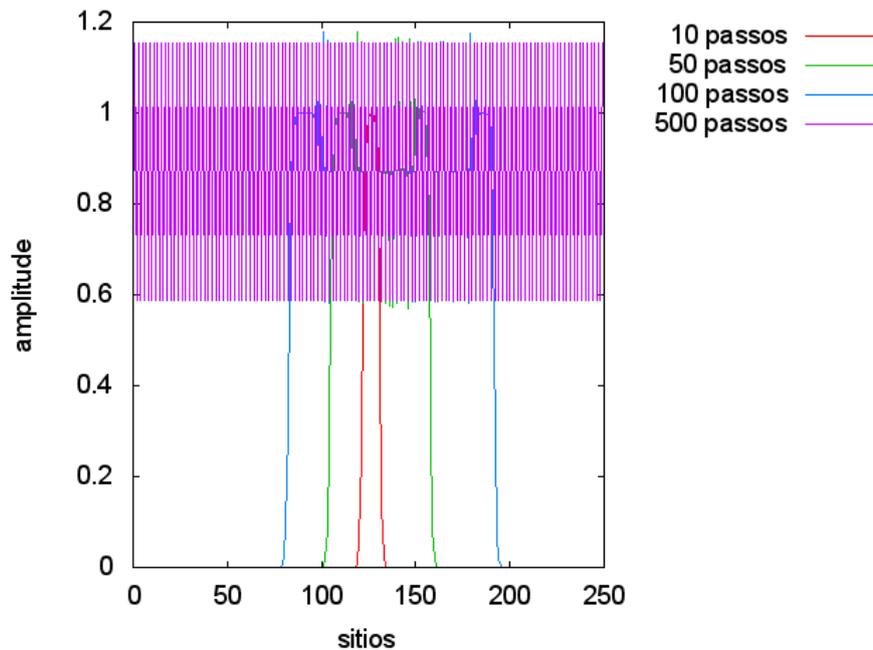


Figura 35: Evolução temporal com  $l = 2$ ,  $R = 0,59$ ,  $p = 0,2$  e  $q = 0,4$

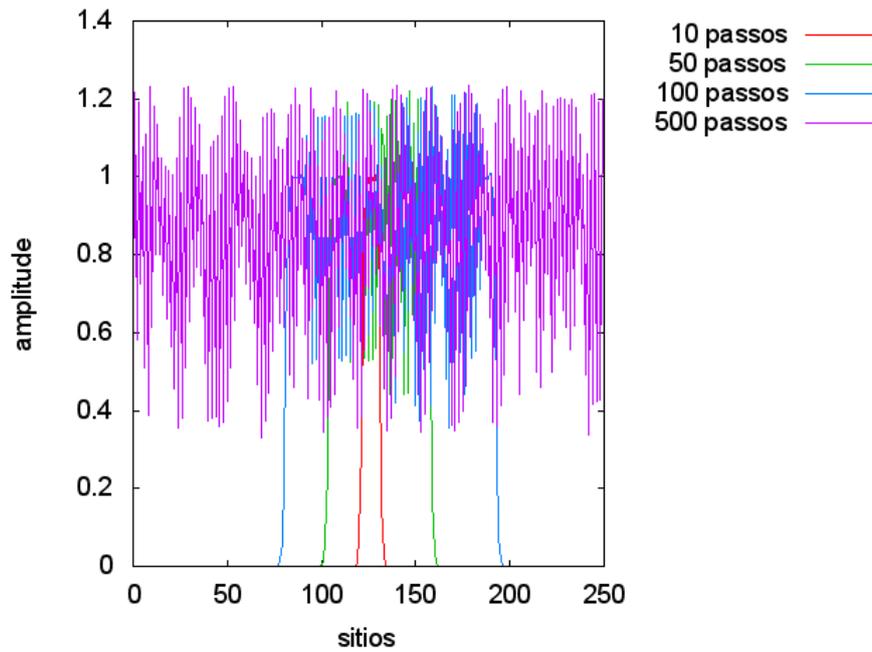


Figura 36: Evolução temporal com  $l = 2$ ,  $R = 0,65$ ,  $p = 0,2$  e  $q = 0,4$

Na figura 37 podemos verificar a evolução temporal de um único sítio nos 3 comportamentos, onde foram mantidos os parâmetros  $l = 2$ ,  $p = 0,2$  e  $q = 0,4$  e alterou-se o parâmetro  $R$ . No caso quando  $R = 0,39$  vemos que ao passar o período transiente o valor da densidade de material do sítio se mantém constante. Ao alterar-se o valor de  $R$  para  $R = 0,59$  temos uma evolução temporal característica do segundo comportamento onde, após o período transiente, a amplitude do sítio oscila entre valores bem definidos. Analisando o caso onde  $R = 0,65$  vemos que o sistema apresenta o terceiro tipo de comportamento, onde não pode ser distinguido um período de oscilação constante, mas onde podemos afirmar que após uma amplitude com valor alto no próximo instante de tempo o valor da densidade de material do sítio assumirá um valor menor.

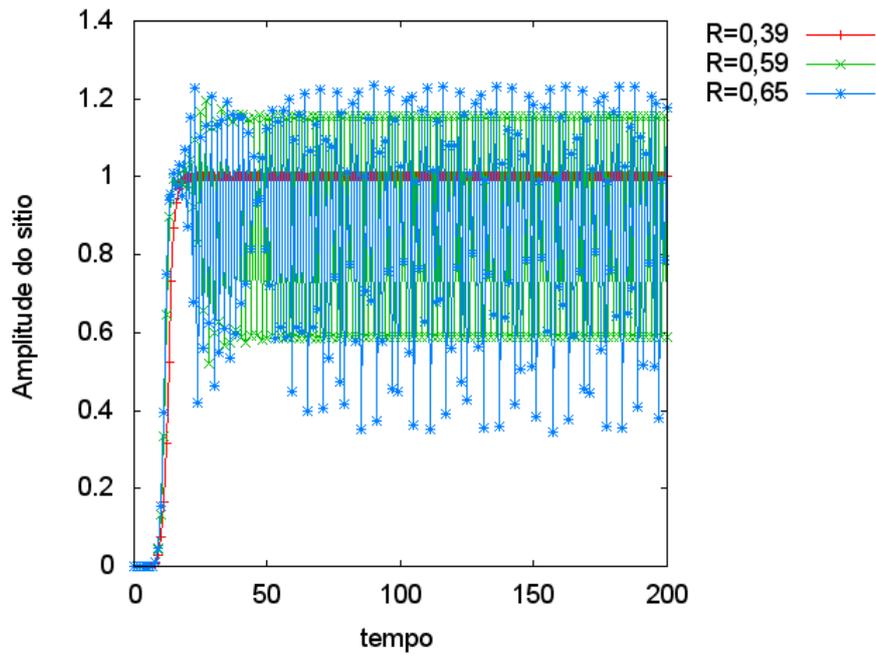


Figura 37: Evolução temporal para um sítio para  $l = 2$ ,  $p = 0,2$  e  $q = 0,4$

Nas figuras 38 e 39 constatamos que realmente os 3 comportamentos estão presentes e que ainda mantêm a mesma sequência, sendo o caso onde a amplitude atinge um valor máximo sucedido do caso quando ocorre oscilação entre alguns valores fixos e após este o comportamento onde não é possível identificar um período fixo para a oscilação.

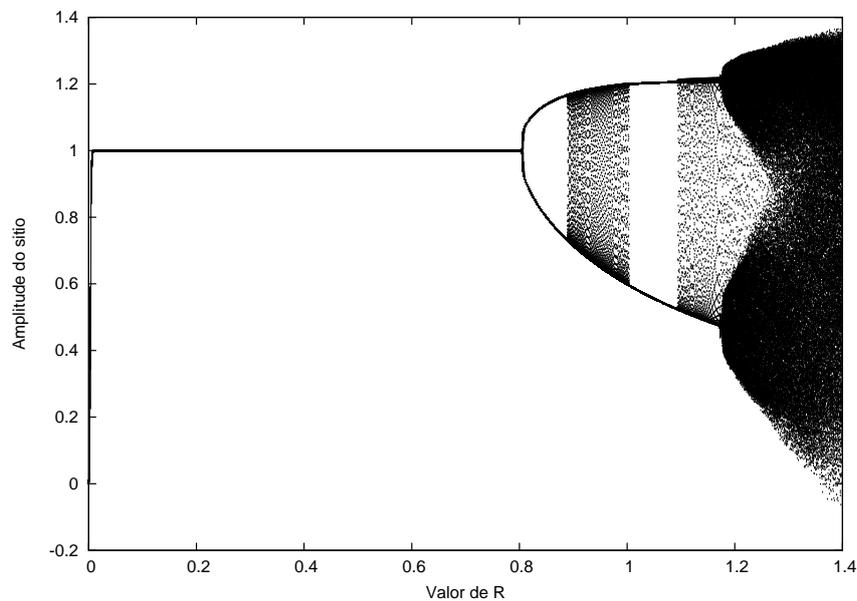


Figura 38: Gráfico de bifurcação para  $l = 1$ ,  $p = 0,2$  e  $q = 0,4$

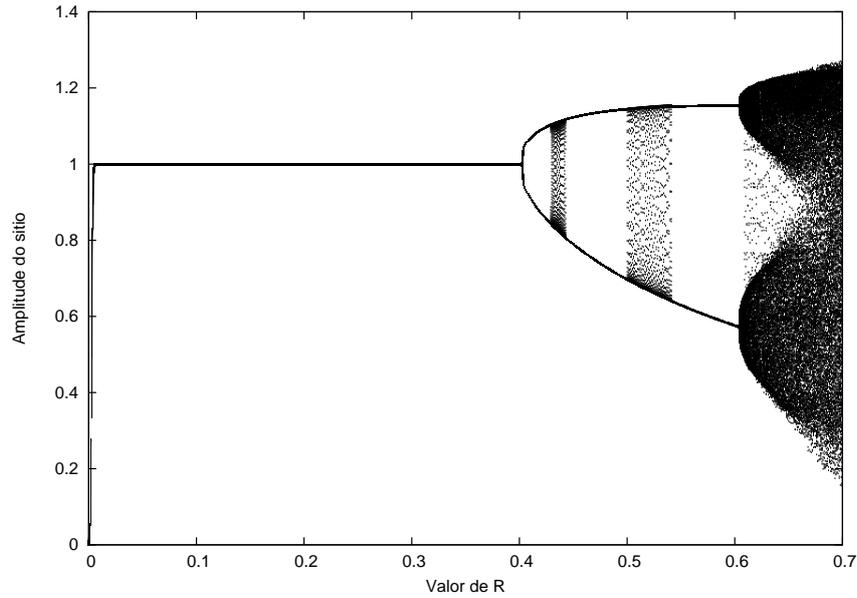


Figura 39: Gráfico de bifurcação para  $l = 2$ ,  $p = 0,2$  e  $q = 0,4$

Na figura 40 vemos as duas curvas que ajustam os últimos pontos de cada um dos comportamentos. A curva vermelha delimita o primeiro do segundo comportamentos e a curva verde delimita o segundo e o terceiro comportamentos. Esta figura garante que para  $p = 0,2$  e para  $q = 0,4$ , se existir espaço entre as duas curvas e elas não se cruzarem então os 3 comportamentos acontecem e na ordem que descrevemos acima. Vemos na figura que, como no caso onde  $p = q$ , quando o expoente  $l$  apresenta valores maiores o transiente entre os comportamentos se dá com valores menores para  $R$ . Vemos ainda que quando o valor do expoente  $l$  é pequeno a transição do segundo para o terceiro comportamento se dá com valores muito próximos.

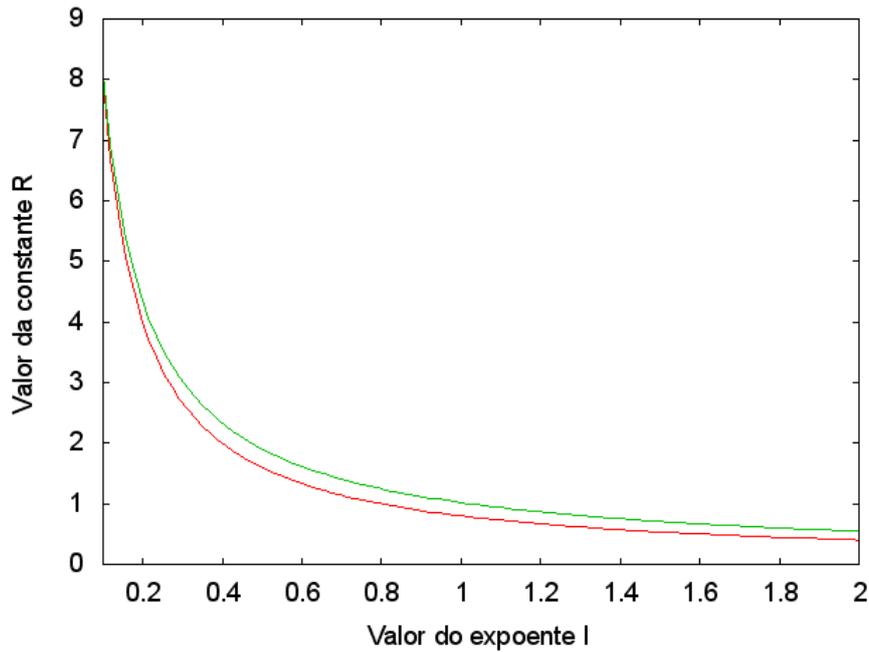


Figura 40: Curva de ajuste para o último ponto antes de cada comportamento com  $p = 0,2$  e  $q = 0,4$

A correlação espacial para o caso onde  $p \neq q$  pode ser observada para os 3 comportamentos nas figuras 41, 42 e 43. Na figura 41, que é um exemplo do primeiro comportamento, vemos que, como no caso onde  $p = q$ , após o período transiente a correlação assume valor 1, isto porque neste caso após o período transiente a dinâmica continua inalterada.

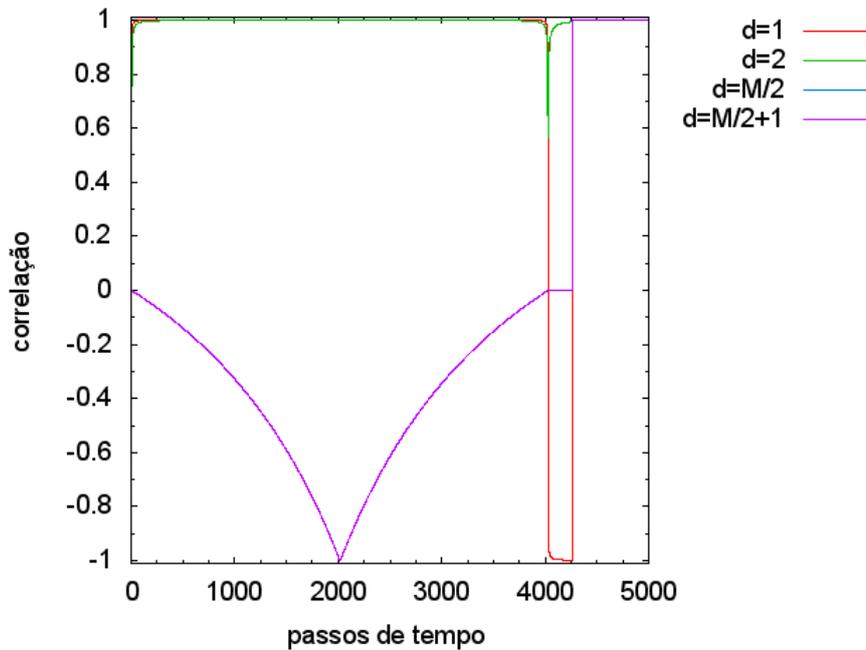


Figura 41: Correlação espacial  $l = 2$ ,  $R = 0,39$ ,  $p = 0,2$  e  $q = 0,4$

Na figura 42 temos um comportamento do segundo tipo. Aqui a correlação não apresenta grandes mudanças quando comparada com os casos onde  $p = q$ . Mesmo quando consideramos

$d$  com valores grandes a correlação, após o período transiente, continua mantendo um valor constante. Assim toda a análise feita para o caso onde  $p = q$  continua valendo nesse caso onde  $p \neq q$ . Isto acontece por ser o sistema construído com condições periódicas de contorno, fazendo com que, mesmo que um sentido tenha preferência na difusão, toda a informação seja transmitida para o sistema como um todo.

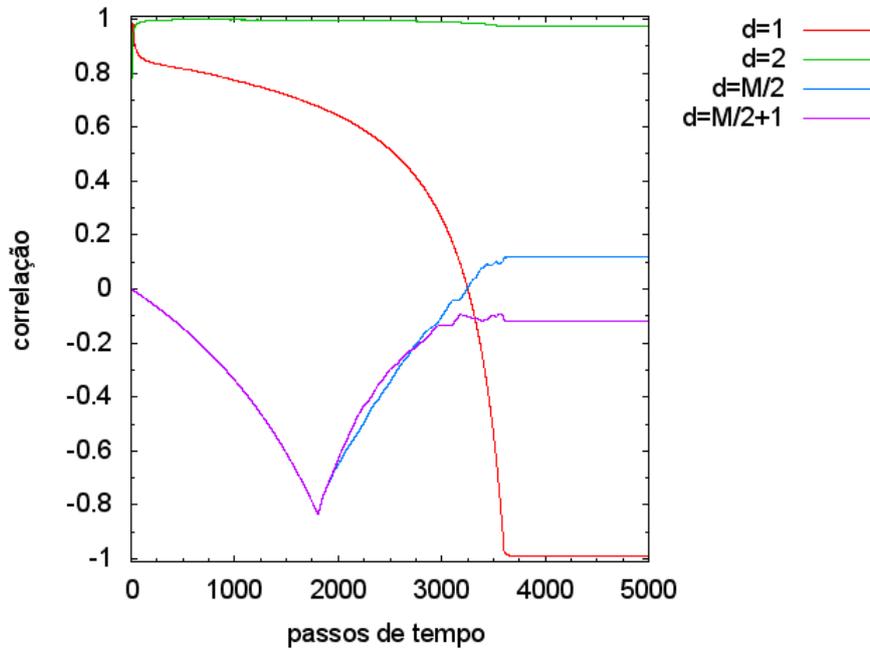


Figura 42: Correlação espacial  $l = 2$ ,  $R = 0,59$ ,  $p = 0,2$  e  $q = 0,4$

A figura 43 representa o terceiro tipo de comportamento. Isto pode ser observado por pelas oscilações observadas na correlação após o período transiente, principalmente para as distâncias  $d$  maiores, mas já presente para  $d$  pequeno.

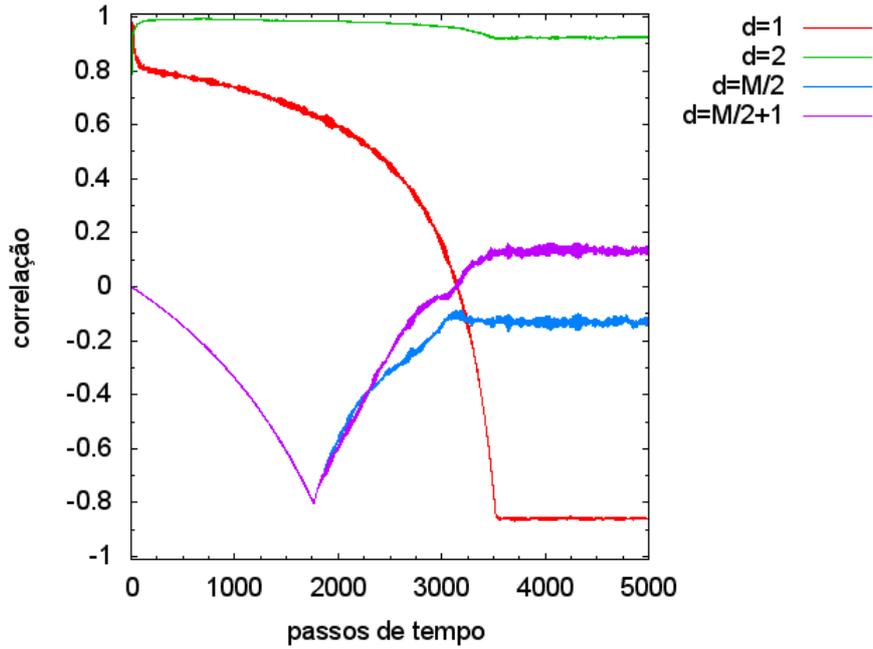


Figura 43: Correlação espacial  $l = 2$ ,  $R = 0,65$ ,  $p = 0,2$  e  $q = 0,4$

Quando analisamos a correlação temporal com a ajuda da figura 44 vemos novamente que após o período transiente a correlação matém os valores relativos aos 3 comportamentos, como no caso onde  $p = q$ . Para o primeiro comportamento, que pode ser observado no caso onde  $R = 0,39$ , a auto-correlação ainda mantém valor 1, mostrando sua forte correlação. Para  $R = 0,59$  podemos observar um valor da correlação próximo de  $-1$  e fixo, já que nesse caso o valor da densidade de material de cada sítio está oscilando entre alguns valores fixos. Em  $R = 0,65$  podemos identificar o terceiro tipo de comportamento, caracterizado por um valor da correlação que oscila, não se estabilizando em algum valor fixo como no segundo comportamento.

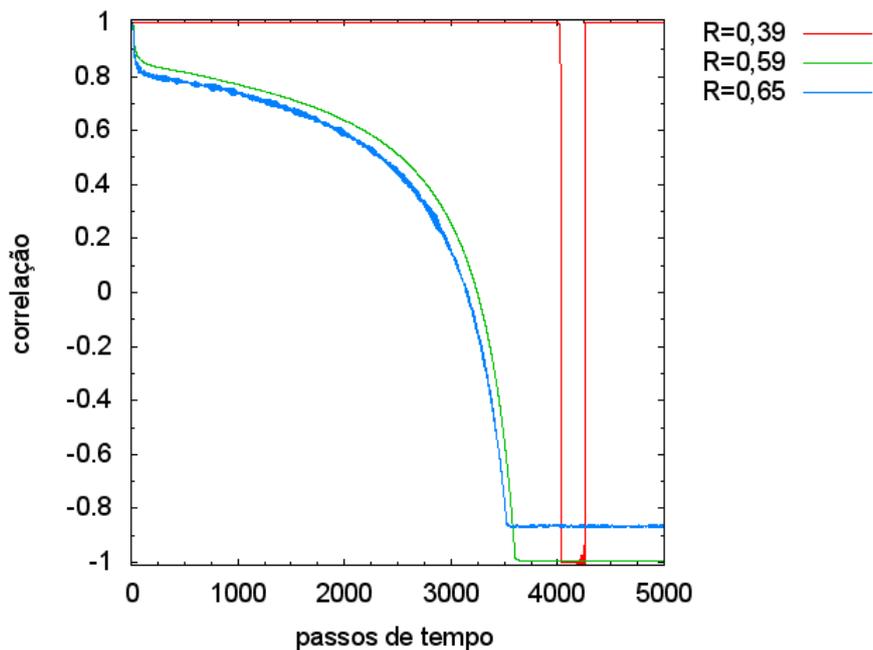


Figura 44: Correlação Temporal  $l = 2$ ,  $p = 0,2$  e  $q = 0,4$

## 5 Sumário e Conclusão

Neste trabalho estudamos uma classe de equações não lineares encontrando soluções tanto analíticas quanto numéricas. Inicialmente encontramos as soluções para dois casos mais particulares, que são as equações de Fisher e Nagumo, e posteriormente para um caso mais geral, dado pela equação (3). O método utilizado foi adotar a hipótese de ondas viajantes e o emprego do *Ansatz* das tangentes hiperbólicas como solução para as equações. Um estudo dos parâmetros da equação foi realizado, primeiramente estudando como a largura da frente de onda poderia ser modificada e em seguida como a velocidade da onda era. Estes parâmetros são dependentes dos valores do coeficiente de difusão  $D$  e da taxa de crescimento do sistema  $r$ . Não definimos uma situação real para definir os parâmetros  $D$  e  $r$ , mas Kenkre e Kuperman em seu artigo de 2003 os encontram para o caso de colônias de bactérias, onde eles utilizaram a equação de Fisher para a extração destes [29].

No terceiro capítulo utilizamos uma nova abordagem para a equação diferencial, trabalhando com as funções hamiltoniana e lagrangeana que representam o sistema. Sempre que  $\mu = v$  o sistema tem uma quantidade conservada. Foram estudados alguns casos havendo conservação de algumas grandezas, uma delas sendo a densidade de energia do sistema. Para os casos não conservativos, como a equação de Fisher e Nagumo, também foi possível encontrar a energia dos sistemas em função dos parâmetros estudados a menos de uma constante de integração. Para os casos não conservativos conseguimos escrever as funções lagrangiana e hamiltoniana. No caso da abordagem hamiltoniana foram montadas as equações de Hamilton, onde também estudamos um caso particular que poderia ser solucionado através desta abordagem ao encontrar as equações de movimento do sistema. Por último escrevemos a equação diferencial por meio de aproximações para a forma integral que, sabendo-se a energia para o sistema, apresentavam soluções para os casos conservativos para os casos onde o expoente  $l$  assumiu  $l = 1$  e  $l = 2$ .

No último capítulo a equação diferencial não linear foi escrita na forma de uma equação de diferenças finitas. O sistema representa a equação diferencial em limites infinitesimais e é consistente com o modelo desenvolvido. Após a comprovação da integridade do programa construído pudemos analisar a dinâmica desses resultados numéricos obtidos. Foi constatado que existe 3 diferentes comportamentos para o sistema, dependendo dos parâmetros utilizados. Um quando a densidade do material difundindo apresenta um perfil saturado, outro quando a densidade de material oscila de forma regular entre valores bem definidos e o último quando a oscilação ocorre de forma irregular e imprevisível. O primeiro comportamento descreve os resultados experimentais do artigo de Kenkre e Kuperman de 2003 com colônias de bactérias [29]. Estes 3 comportamentos foram caracterizados pela evolução temporal da densidade de material para cada sítio específico e pela maneira com que a difusão ocorre. Foram também encontrados os limites entre cada um dos comportamentos ao ajustar os dados obtidos. Usamos ainda a correlação espacial e temporal para caracterizar cada um dos comportamentos, quando estudamos quão forte é a afinidade entre dois sítios, distantes espacialmente e o alcance espacial dessa afinidade, ou a afinidade temporal. Com a correlação pudemos perceber que, a pequenas distâncias, nos dois primeiros comportamentos a densidade de material dos sítios é

fortemente correlacionada tanto espacialmente quanto na temporalmente, enquanto em alguns casos no terceiro comportamento ela podia não apresentar essa forte afinidade com a densidade de material dos vizinhos mais próximos. Por último constatamos que mesmo no caso onde a probabilidade de migração para os lados são diferentes,  $p \neq q$ , a equação apresenta os mesmos comportamentos. Isto foi explicado por termos usado condições periódicas de contorno na construção do modelo, o que faria com que, após o período transiente, a influência de cada sítio se comportasse de acordo com as características possíveis ao comportamento em que estivesse enquadrada.

Este trabalho tem sua importância em ter apresentado um estudo das soluções para uma classe de equações diferenciais não lineares de algumas maneiras distintas, realizando um estudo de seus parâmetros e possíveis comportamentos.

## 6 Apêndice

### 6.1 Inversão de séries

Se tivermos uma série do tipo

$$y = a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + \dots, \quad (269)$$

esta série invertida será dada por

$$x = A_1y + A_2y^2 + A_3y^3 + \dots \quad (270)$$

Os coeficientes  $A_n$  serão obtidos ao substituir (270) em (269) e comparar potências de forma a satisfazer a igualdade. Daí tiramos que os coeficientes  $A_n$  serão

$$A_1 = a_1^{-1} \quad (271)$$

$$A_2 = -a_1^{-3}a_2 \quad (272)$$

$$A_3 = a_1^{-5}(2a_2^2 - a_1a_3) \quad (273)$$

$$A_4 = a_1^{-7}(5a_1a_2a_3 - a_1^2a_4 - 5a_2^3) \quad (274)$$

### 6.2 Correlação

Existem algumas maneiras para se encontrar a relação entre duas variáveis aleatórias. Se quisermos encontrar a afinidade entre essas duas, se é uma relação forte ou fraca, podemos usar duas medidas numéricas chamadas de covariância e correlação, como foi feito por Casella em seu livro [35].

Para escrever a definição da covariância e correlação entre duas variáveis aleatórias,  $X$  e  $Y$ , escreveremos o valor médio de  $X$  como  $\mu_X$  e da variável  $Y$  sendo  $\mu_Y$  e a variância delas como  $\sigma_X^2$  e  $\sigma_Y^2$  respectivamente. Vamos ainda assumir que a variância é positiva e finita  $0 < \sigma_X^2 < \infty$ ,  $0 < \sigma_Y^2 < \infty$ . Agora podemos definir a covariância, que é dada por

$$Cov(X, Y) = \langle (X - \mu_X)(Y - \mu_Y) \rangle. \quad (275)$$

Quando combinam-se valores grandes de  $X$  com valores grandes de  $Y$  ou valores pequenos para ambos vamos encontrar um número positivo para a covariância. Isto acontece porque quando temos  $X > \mu_X$  e  $Y > \mu_Y$  vamos encontrar um valor positivo para produto  $(X - \mu_X)(Y - \mu_Y)$ . Da mesma forma, quando temos  $X < \mu_X$  e  $Y < \mu_Y$  o produto  $(X - \mu_X)(Y - \mu_Y)$  será também um valor positivo. Desta maneira obtemos valores positivos para a covariância

$$Cov(X, Y) = \langle (X - \mu_X)(Y - \mu_Y) \rangle > 0. \quad (276)$$

Se por outro lado tivermos valores grandes de  $X$  com valores pequenos de  $Y$  ou vice-versa a covariância tende a ser um valor negativo, já que nesse caso é provável que aconteça de  $X > \mu_X$  e  $Y < \mu_Y$  e vice-versa, fazendo com que o valor  $(X - \mu_X)(Y - \mu_Y)$  seja negativo, e assim

$$Cov(X, Y) = \langle (X - \mu_X)(Y - \mu_Y) \rangle < 0. \quad (277)$$

Assim a covariância dá a relação entre  $X$  e  $Y$ , mas como ela é um número qualquer, não temos como falar sobre a afinidade entre as duas variáveis aleatórias. Para podermos saber a afinidade seria necessário saber qual o valor máximo que a covariância pode assumir. Isto pode ser encontrado ao tomarmos uma função  $h(t)$  onde

$$h(t) = (\langle (X - \mu_X)t + (Y - \mu_Y) \rangle)^2 \quad (278)$$

Ao expandirmos a função  $h(t)$  obtemos

$$h(t) = t^2 (\langle X - \mu_X \rangle)^2 + 2t \langle X - \mu_X \rangle \langle Y - \mu_Y \rangle + (\langle Y - \mu_Y \rangle)^2 \quad (279)$$

como a variância de  $X$  é definida como  $\sigma_X^2 = (\langle X - \mu_X \rangle)^2$  então podemos escrever a função  $h(t)$  da seguinte maneira

$$h(t) = t^2 \sigma_X^2 + 2t Cov(X, Y) + \sigma_Y^2. \quad (280)$$

Esta é uma função quadrática com  $t$  real onde ela é maior que ou igual a 0,  $h(t) \geq 0$ , para todos os valores de  $t$ , já que ela é o valor médio de uma variável aleatória não negativa. Sendo ela uma função quadrática, a única forma de isso ser possível é se ela tiver no máximo uma única raiz real. Essa condição é satisfeita quando fizermos

$$(2Cov(X, Y))^2 - 4\sigma_X^2\sigma_Y^2 \leq 0, \quad (281)$$

que pode ser arrumado como

$$(Cov(X, Y))^2 \leq \sigma_X^2\sigma_Y^2 \quad (282)$$

e de onde podemos tirar que

$$-\sigma_X\sigma_Y \leq Cov(X, Y) \leq \sigma_X\sigma_Y \quad (283)$$

Se dividirmos esta última equação por  $\sigma_X\sigma_Y$  obtemos

$$-1 \leq \frac{Cov(X, Y)}{\sigma_X\sigma_Y} = \rho_{XY} \leq 1 \quad (284)$$

onde chamamos  $\rho_{XY}$  de correlação entre  $X$  e  $Y$ . Como  $|\rho_{XY}| \leq 1$  podemos então falar de quão fortemente relacionadas estão as variáveis  $X$  e  $Y$ .

## Referências

- [1] WAZWAZ, A.-M. *The tanh method for traveling wave solutions of nonlinear equations*. Applied Mathematics and Computation, v. 154, n. 3, p. 713-723, 2004.
- [2] MEHRER, H. *Diffusion in Solids Fundamentals, Methods, Materials, Diffusion-Controlled Processes*. New York: Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2007.
- [3] MAYO, M.; GHEORGHIU, S.; PFEIFER, P. *Diffusional screening in treelike spaces: An exactly solvable diffusion-reaction model*. Physical Review E, v. 85, n. 1, p. 011115, 2012.
- [4] VISWANATHAN, G. M. *Fish in Lévy-flight foraging*. Nature, v. 465, p. 1018-1019, 2010.
- [5] ARGOLO, C. et al. *Critical short-time dynamics in a system with interacting static and diffusive populations*. Physical Review E, v. 85, n. 1, p. 011111, 2012.
- [6] OLLA, P. *Demographic fluctuations in a population of anomalously diffusing individuals*. Physical Review E, v. 85, n. 2, p. 021125, 2012.
- [7] KWON, S.; KIM, Y. *Effects of excluded volume interaction on diffusion-reaction processes in crowded environments*. Physical Review E, v. 84, n. 4, p. 041103, 2011.
- [8] KUNDU, A. *Tsunami and Nonlinear Waves*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2007.
- [9] FISHER, R. A. *The wave of advance of advantageous genes*. Annals of Eugenics, v. 7, p. 355-369, 1937.
- [10] FITZHUGH, R. *Impulses and physiological states in theoretical models of nerve membrane*. Biophysical Journal, v. 1, p. 445-466, 1961.
- [11] NAGUMO, J. *An Active Pulse Transmission Line Simulating Nerve Axon*. v. 117, n. m V, p. 2061-2070, 1962.
- [12] MANSOUR, M. B. A. *Accurate computation of traveling wavefronts in a biological hydrodynamic model*. Computers in biology and medicine, v. 43, n. 5, p. 405-408, 2013.
- [13] FENG, Z.; CHEN, G.; MENG, Q. *A reaction-diffusion equation and its traveling wave solutions*. International Journal of Non-Linear Mechanics, v. 45, n. 6, p. 634-639, 2010.
- [14] KHURI, S. A.; SAYFY, A. *A numerical approach for solving an extended Fisher-Kolomogrov-Petrovskii-Piskunov equation*. Journal of Computational and Applied Mathematics, v. 233, n. 8, p. 2081-2089, 2010.

- [15] SLAVOVA, A.; ZECCA, P. *CNN model for studying dynamics and travelling wave solutions of FitzHugh–Nagumo equation*. Journal of Computational and Applied Mathematics, v. 151, n. 1, p. 13-24, 2003.
- [16] MÉNDEZ, V. et al. *Effect of environmental fluctuations on invasion fronts*. Journal of theoretical biology, v. 281, n. 1, p. 31-38, 2011.
- [17] CHERNIHA, R.; DUTKA, V. *Exact and numerical solutions of the generalized Fisher equation*. Reports on mathematical physics, v. 47, n. 3, p. 393-411, 2001.
- [18] KAWAHARA, T.; TANAKA, M. *Interactions of traveling fronts: an exact solution of a nonlinear diffusion equation*. Physics Letters, v. 97, n. 8, p. 311-314, 1983.
- [19] QIU, Y.; SLOAN, D. M. *Numerical Solution of Fisher’s Equation Using a Moving Mesh Method*. Journal of Computational Physics, v. 146, n. 2, p. 726-746, 1998.
- [20] TRUST, A. P.; PROBABILITY, A. *Numerical solution of Fisher’s equation*. Journal of applied Probability, v. 11, n. 3, p. 445-457, 1974.
- [21] BANERJEE, R. S. *Exact Solutions of Some Nonlinear Equations*. International Journal of Theoretical Physics, Vol. 32, n. 5, p. 879-884, 1993.
- [22] WAZWAZ, A. M. *The tanh method for generalized forms of nonlinear heat conduction and Burgers–Fisher equations*. Applied Mathematics and Computation, v. 169, n. 1, p. 321-338, 2005.
- [23] KALIAPPAN, P. *An exact solution for travelling waves of  $u_t = Du_{xx} + u - u^k$* . Physica, v. 11 D, p. 368-374, 1984.
- [24] COLATO, A. *Efeitos da difusão sobre a dinâmica de populações em 1 e 2 dimensões*. Dissertação (Mestrado em Física) - Departamento de Física, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos. 2001.
- [25] KADANOFF, L. P. *Statistical Physics: Statics, Dynamics and Renormalization*. World Scientific, p. 69-105, 2000.
- [26] HAMMOND, J. F.; BORTZ, D. M. *Analytical solutions to Fisher’s equation with time-variable coefficients*. Applied Mathematics and Computation, v. 218, n. 6, p. 2497-2508, 2011.
- [27] HARRIS, S. *Contracted Fisher equation*. Physical Review E, v. 69, n. 4, p. 042901-1-3, 2004.
- [28] YANG, L.; LIU, J.; YANG, K. *Exact solutions of nonlinear PDE, nonlinear transformations and reduction of nonlinear PDE to a quadrature*. v. 278, n. January, p. 267-270, 2001.

- [29] KENKRE, V.; KUPERMAN, M. *Applicability of the Fisher equation to bacterial population dynamics*. Physical Review E, v. 67, n. 5, p. 051921, 2003.
- [30] LI, H.; GUO, Y. *New exact solutions to the Fitzhugh–Nagumo equation*. Applied Mathematics and Computation, v. 180, n. 2, p. 524-528, 2006.
- [31] ZHANG, H. *New exact travelling wave solutions for some nonlinear evolution equations, Part II*. Chaos, Solitons & Fractals, v. 37, n. 5, p. 1328-1334, 2008.
- [32] ZHANG, X. Y.; CHERNIAK, D. J.; WATSON, E. B. *Oxygen diffusion in titanite: Lattice diffusion and fast-path diffusion in single crystals*. Chemical Geology, v. 235, n. 1-2, p. 105-123, 2006.
- [33] FENG, Z. *Traveling wave behavior for a generalized fisher equation*. Chaos, Solitons & Fractals, v. 38, n. 2, p. 481-488, 2008.
- [34] MURRAY, J. D. *Mathematical biology*. New York: Springer-Verlag, p. 239-244; 395-400; 437-449, 2001.
- [35] CASELLA, G.; BERGER, R. *Statistical Inference*. Duxbury Press. Belmont, California. p. 160-165, 1990.