

Uso do software FreeFEM na simulação de crescimento e propagação do mexilhão dourado – PIIC/UFES

Edital:	Edital PIIC 2023/2024
Área do Conhecimento (CNPq):	Ciências Exatas e da Terra
Subárea do Conhecimento (CNPq):	Ciência da computação
Título do Projeto:	Estratégias Inovadoras na Implementação do Método dos Elementos Finitos utilizando Processamento de Alto Desempenho
Título do Subprojeto:	Uso do software FreeFEM na simulação de crescimento e propagação do mexilhão dourado
Professor(a) Orientador(a):	Lucia Catabriga
Estudante:	Edgard de Souza Theotonio

Resumo

O mexilhão-dourado (*Limnoperna fortunei*), um molusco bivalve invasor nativo do sudeste asiático que adentrou o ecossistema Brasileiro, tem causado sérios danos ambientais e econômicos no Brasil, especialmente em rios que possuem hidroelétricas e/ou pisciculturas. A compreensão do ciclo de vida, da sua forma larval e adulta, e da interação desse organismo com seu principal alimento, a alga, é fundamental para o desenvolvimento de estratégias de controle e mitigação da população desse molusco, tendo em vista que medidas de controle atuais mostram-se ineficazes. Este subprojeto analisa essa relação por meio de um modelo matemático predador-presa, através da utilização do método dos elementos finitos via software FreeFEM, que soluciona equações diferenciais ordinárias 2D e 3D. As simulações visam investigar como diferentes combinações de parâmetros físicos do modelo influenciam a dispersão do mexilhão em diferentes ambientes criados para essas simulações e também como o uso de diferentes funções dentro do FreeFem podem influenciar na otimização do tempo de execução do algoritmo e na solução, contribuindo para o entendimento de sua dinâmica populacional e fornecendo subsídios para a elaboração de medidas de controle mais eficazes.

Palavras-chave: Modelo Mexilhão-Larva-Alga. FreeFem. Método dos Elementos Finitos. Formulação variacional. Predador-Presa. Paraview.

1 Introdução

O mexilhão-dourado (*Limnoperna fortunei*), molusco bivalve originário do sudeste asiático da família Mytilidae [Dunker, 1857]. A espécie chegou à América do Sul provavelmente de modo acidental na água de lastro de navios cargueiros, tendo sido a Argentina o ponto de entrada. Do país vizinho chegou ao Brasil. Hoje a espécie já foi detectada em quase toda a região Sul e em vários pontos do Sudeste e Centro-Oeste [IBAMA, 2017]. É um invasor notório que tem se espalhado rapidamente pelas bacias hidrográficas da América do Sul desde sua introdução no Brasil, na década de 1990. Sua chegada ao país ocorreu principalmente por meio da água de lastro

de navios, o que facilitou a sua propagação para diferentes corpos hídricos [IBAMA, 2017]. Atualmente, o mexilhão-dourado representa uma ameaça significativa a diversos ecossistemas aquáticos e atividades econômicas, como usinas hidrelétricas, sistemas de abastecimento de água e pisciculturas [Barbosa et al., 2016]. Sua capacidade de aderir a superfícies submersas e formar grandes colônias pode causar entupimento de tubulações, além de reduzir a renovação de água em tanques de piscicultura, levando à diminuição de oxigênio e, consequentemente, à mortalidade de peixes.

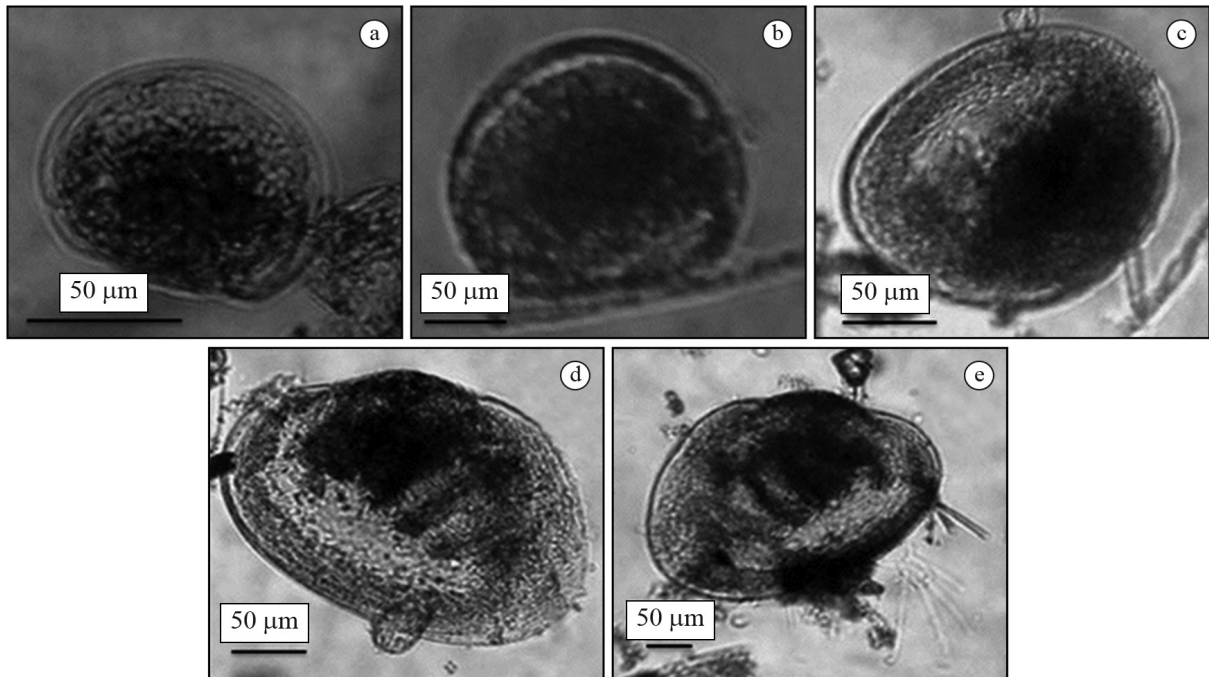
É um molusco bivalve de pequeno porte, com comprimento médio entre 2 e 3 cm, mas podendo chegar a 4 cm. Sua concha é triangular e alongada, de cor marrom-amarelada, muitas vezes com faixas escuras [Mansur, 2012]. Esse bivalve se fixa a superfícies submersas utilizando seus byssus, filamentos fortes que permitem sua adesão a rochas, embarcações, tubulações e outros substratos, conforme ilustrado na Figura 1. A fase larval é crucial no ciclo de vida dessa espécie. As larvas são microscópicas, medindo na ordem de micrômetros, e têm uma forma ovalada (Figura 2). Nesta fase, elas são dotadas de uma concha ainda não completamente formada, que é fina e transparente, tornando-as difíceis de observar sem equipamento adequado [Mansur, 2012]. Além disso, possuem cílios, pequenas projeções semelhantes a pelos, ao longo do corpo, que auxiliam na locomoção e na captura de partículas alimentares.

Figura 1: Foto de Mexilhões Dourado.



Fonte: BioDiversity4All [Bio, 2024]

Figura 2: Fase Larval do Mexilhão Dourado.



Fonte: [Ernandes-Silva et al., 2016]

Os impactos ecológicos advindas dessa invasão do mexilhão ao ecossistema Brasileiro são alarmantes, uma vez que o mexilhão-dourado compete com espécies nativas por alimento, não possui predador natural, não pode ser consumido pelo ser humano por ser tóxico, possui um alto espalhamento e dispersão pelo ambiente, alterando a estrutura trófica e a biodiversidade local. Esse bivalve filtra grandes volumes de água, se alimentando de fitoplâncton e partículas suspensas, o que pode modificar as condições ambientais e influenciar na composição de espécies aquáticas [IBAMA, 2017]. As tentativas de controle desse invasor, até o momento, se mostraram ineficazes, exigindo elevados custos e apresentando impactos secundários para o meio ambiente.

Neste contexto, a modelagem matemática surge como uma ferramenta poderosa para entender e prever a dinâmica de invasões biológicas, como a do mexilhão-dourado, e para auxiliar na formulação de estratégias de controle mais eficazes. Este subprojeto utiliza um modelo matemático predador-presa para simular a interação entre o mexilhão-dourado e as algas, seu principal alimento. As simulações são implementadas no software FreeFEM [Hecht, 2012], utilizando o método dos elementos finitos, que permite uma abordagem eficiente para a resolução das equações diferenciais parciais que descrevem o sistema.

O subprojeto de iniciação científica aqui apresentado faz parte do projeto de pesquisa "Estratégias Inovadoras na Implementação do Método dos Elementos Finitos utilizando Processamento de Alto Desempenho", desenvolvido no Laboratório de Otimização e Modelagem Computacional (LabOtiM) da UFES. Ele tem como objetivo investigar como diferentes combinações de parâmetros e ambientes influenciam a propagação do mexilhão-dourado em ambientes aquáticos através de simulações em ambientes hipotéticos, podendo fornecer informações que poderão

auxiliar no aprimoramento e otimização do modelo em questão, no Projeto em que este subprojeto reside.

2 Objetivos

Os objetivos principais desse subprojeto foram investigar como que o parâmetros físicos do modelo Mexilhão-Larva-Alga influenciam na relação entre o ciclo de vida no Mexilhão Doura, da Larva e da Alga dentro de ambientes e cenários simulados e investigar como o algoritmo desse modelo solucionado via software FreeFem pode ser otimizado e ter seu tempo de execução diminuído. Para atingir os objetivos principais, este subprojeto possui os seguintes objetivos específicos:

- Verificar os resultados das simulações em diferentes ambiente criados, com diferentes geometrias, para analisar como os parâmetros físicos do modelo influenciam no comportamento do mexilhão em 1 ano de simulação.
- Analisar os resultados mediante diferentes valores dos parâmetros, a fim de perceber qual é a influência de determinado parâmetro físico no resultado final da dispersão de Mexilhões, larvas e algas em 6 meses de simulação.

3 Embasamento Teórico

O modelo predador-presa é amplamente utilizado na ecologia matemática para descrever as interações entre duas ou mais espécies, onde uma delas (o predador) se alimenta da outra (a presa). Desde o clássico modelo de Lotka-Volterra [Boyce & DiPrima, 2008], diversos autores têm proposto variações para descrever sistemas mais complexos. O modelo de interação entre o mexilhão-dourado e as algas se assemelha ao cenário predador-presa, onde o mexilhão consome as algas para sua sobrevivência. Estudos como o modelo descrito em [Azevedo et al., 2022] desenvolvem modelos matemáticos semelhantes, incluindo parâmetros que influenciam o comportamento do sistema, como taxa de crescimento, capacidade de suporte e mortalidade. O mexilhão-dourado, sendo um filtrador ativo, exerce forte pressão sobre o fitoplâncton, impactando diretamente o ciclo de nutrientes em ecossistemas aquáticos. Esta interação pode ser analisada com base nos conceitos de ecologia trófica, onde o fluxo de energia e matéria é regulado pelas taxas de consumo e crescimento populacional [Barbosa et al., 2016].

Os métodos numéricos são fundamentais para resolver sistemas de equações diferenciais parciais, como o que descreve a interação entre as populações de mexilhão e alga. Para este subprojeto, utilizou-se o Método dos Elementos Finitos (MEF), que é uma técnica amplamente aplicada para resolver EDPs em domínios complexos [Hughes, 2000]. O MEF é particularmente útil para simulações biológicas que envolvem a dispersão espacial de populações, pois permite a discretização do domínio em pequenas partes (elementos) e a solução das equações de forma aproximada em cada uma dessas partes. No processo de solucionar as equações diferenciais parciais de forma aproximada, surge a necessidade de resolver sistemas lineares numericamente [Becker et al., 1981]. Para essa finalidade, há dois tipos de métodos amplamente utilizados: métodos diretos, como a decomposição LU, e métodos iterativos, como o Método do Gradiente Conjugado ou o método do resíduo mínimo generalizado (GMRES) [Hecht, 2012]. Os métodos diretos fornecem soluções exatas a menos de erros de arredondamento, mas são computacionalmente caros, especialmente para sistemas de grande porte. Em contrapartida, métodos iterativos são mais eficientes em termos de tempo e memória, especialmente quando aplicados a sistemas esparsos de grande porte, mas necessitam de critérios de convergência.

Este subprojeto utiliza o FreeFEM para simular a dispersão e o crescimento do mexilhão-dourado, considerando as condições ambientais e parâmetros físicos que influenciam o ciclo de vida do molusco. A modelagem permite não apenas prever o comportamento populacional, mas também testar diferentes cenários de controle da invasão, auxiliando na criação de estratégias de mitigação. No FreeFEM, as equações são resolvidas numericamente em uma malha bidimensional que representa o domínio aquático onde o mexilhão, as larvas e as algas interagem [Hecht, 2012]. O software facilita a inserção dos parâmetros biológicos e permite realizar simulações com diferentes valores para testar nos cenários hipotéticos. Além disso, oferece a possibilidade de escolha do método para solucionar os sistemas lineares resultantes por métodos diretos e iterativos.

4 Metodologia

Esta seção apresenta a metodologia utilizada para atingir os objetivos principais desta pesquisa, que incluem a revisão de modelos predador-presa aplicados ao mexilhão-dourado e a alga, o estudo e aplicação do Método dos Elementos Finitos na resolução de sistemas de equações diferenciais parciais, e a implementação de simulações numéricas no software FreeFEM para analisar a dinâmica do ciclo de vida do mexilhão-dourado em cenários hipotéticos.

4.1 Revisão Bibliográfica e Teórica

A primeira etapa consistiu em uma ampla revisão da literatura sobre modelos predador-presa e sua aplicação em sistemas ecológicos. Foram estudados trabalhos sobre a dinâmica populacional de espécies invasoras, especialmente o mexilhão-dourado, além de trabalhos sobre métodos numéricos aplicados à biologia matemática [Djilali et al., 2020, Azevedo et al., 2022], que forneceram a base teórica para o desenvolvimento da implementação no FreeFem.

4.2 Modelagem Matemática

O modelo Mexilhão-Larva-Alga adotado nesta pesquisa foi baseado em um sistema de equações diferenciais parciais (EDPs) que descreve a interação entre a alga, o mexilhão-dourado e suas larvas. O modelo matemático é inspirado em sistemas predador-presa, nos quais a alga serve como presa e o mexilhão como predador. As equações governantes são referentes a larva Eq. (1), mexilhão Eq. (2) e alga Eq. (3) propostas por [Silva et al., 2022].

$$\frac{\partial L}{\partial t} = r_1 M \left(1 - \frac{L}{K_L}\right) - b_1 L + D_L \Delta L - V \cdot \nabla L - \lambda_L L, \text{ em } \Omega \times (0, t_F], \quad (1)$$

$$\frac{\partial M}{\partial t} = \lambda \left(\frac{A^2}{c_1^2 + A^2}\right) L \left(1 - \frac{M}{K_M}\right) - b_2 M + D_M \Delta M, \text{ em } \Omega_M \times (0, t_F], \quad (2)$$

$$\frac{\partial A}{\partial t} = r_2 A \left(1 - \frac{A}{K_A}\right) - b_3 \left(\frac{A^2}{c_2^2 + A^2}\right) M + D_A \Delta A - V \cdot \nabla A, \text{ em } \Omega \times (0, t_F]. \quad (3)$$

onde r_1 é a taxa de crescimento das larvas, K_L é a capacidade suporte das larvas, b_1 é a taxa de predação das larvas, D_L é o coeficiente de difusão das larvas, V é o campo de velocidade, λ_L é a taxa de maturação das larvas, λ é o coeficiente que relaciona as larvas com a alimentação pelas algas, K_M é a capacidade suporte dos mexilhões adultos, b_2 é a taxa de predação dos mexilhões adultos, D_M é o coeficiente de difusão dos mexilhões adultos, c_1 e c_2 são constantes de saturação das algas, r_2 é a taxa de crescimento das algas, K_A é a capacidade suporte das algas, b_3 é a taxa de predação das algas pelos mexilhões adultos e D_A é o coeficiente de difusão das algas.

A seguir contextualizamos os principais parâmetros do modelo.

- Difusão (D_L): no modelo Larva-Mexilhão-Alga, a difusão refere-se ao movimento das populações através do ambiente aquático. Especificamente, descreve como as larvas e algas se dispersam na água ao longo do tempo. Matematicamente, a difusão é representada por termos nas equações diferenciais que incluem o operador de Laplace, indicando a taxa de espalhamento espacial das populações. Quanto maior o coeficiente de difusão, mais rapidamente a população se espalha pelo ambiente [Murray, 2007].
- Capacidade de suporte: é um conceito ecológico que descreve o número máximo de indivíduos que um ambiente pode sustentar indefinidamente, dado o nível de recursos disponíveis, como alimentos e espaço. No modelo predador-presa, cada população possui uma capacidade de suporte diferente. Para as algas, K_A , por exemplo, indica o limite máximo de algas que o ambiente pode sustentar antes que a escassez de recursos comece a limitar seu crescimento. Já para o mexilhão, K_M indica a capacidade máxima de adultos que podem sobreviver no ambiente [Becker et al., 1981].
- Taxa de crescimento: refere-se à velocidade com que uma população aumenta ao longo do tempo, em função dos recursos disponíveis e das interações entre as espécies. Para a alga, a taxa de crescimento r_2 depende da disponibilidade de nutrientes e luz, enquanto para o mexilhão, a taxa de crescimento r_1 , está relacionada à quantidade de alimento disponível, que neste caso são as algas [Murray, 2007].
- Predação: Para as larvas de mexilhão (b_1) e mexilhões adultos (b_2), a taxa de mortalidade pode ser afetada por fatores ambientais, predação por peixes e competição por recursos. A mortalidade das algas (b_3) está diretamente relacionada ao consumo por parte dos mexilhões [Murray, 2007].
- Constante de saturação (c_1 e c_2): define o ponto em que o consumo de algas pelos mexilhões se estabiliza, ou seja, quando o predador está suficientemente saciado e não pode mais aumentar sua taxa de consumo, independentemente da quantidade de algas disponíveis. Este conceito é importante para evitar que o modelo preveja um crescimento indefinido da população de predadores, o que não seria realista.

4.3 Simulações com FreeFEM

Para resolver as equações diferenciais que descrevem o sistema, foi utilizado o software FreeFEM, que implementa o Método dos Elementos Finitos (MEF). As equações do modelo foram discretizadas no tempo e no espaço, permitindo simular a evolução das populações de algas e mexilhões ao longo do tempo em diferentes condições ambientais. No contexto do MEF, as Eqs. (4), (5) e (6), representam a formulação variacional do modelo descrito pelas Eqs. (1 - 3).

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{\partial L}{\partial t} v d\Omega + \int_{\Omega} r_1 M \frac{L}{K_L} v d\Omega + \lambda_L L v d\Omega + b_1 L v d\Omega + \int_{\Omega} D_L \nabla v \cdot \nabla L d\Omega - \\ - \int_{\partial\Omega} D_L \frac{\partial L}{\partial n} v ds + \int_{\Omega} V \cdot \nabla L v d\Omega = \int_{\Omega} r_1 M v d\Omega \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{\partial M}{\partial t} v d\Omega + \int_{\Omega} \lambda_M L \left(\frac{A^2}{c_1^2 + A^2} \right) \frac{M}{K_M} v d\Omega + b_2 M v d\Omega + \int_{\Omega} D_M \nabla v \cdot \nabla M d\Omega - \\ - \int_{\partial\Omega} D_M \frac{\partial M}{\partial n} v ds = \int_{\Omega} \lambda_M L \left(\frac{A^2}{c_1^2 + A^2} \right) v d\Omega \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{\partial A}{\partial t} v d\Omega + \int_{\Omega} b_3 \left(\frac{A^2}{c_2^2 + A^2} \right) M v d\Omega - \int_{\Omega} r_2 A v d\Omega + \int_{\Omega} r_2 A \frac{A}{K_A} v d\Omega + \\ + \int_{\Omega} D_A \nabla v \cdot \nabla A d\Omega - \int_{\partial\Omega} D_A \frac{\partial A}{\partial n} v ds + \int_{\Omega} V \cdot \nabla A v d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (6)$$

A partir dessas equações definimos os comandos no FreeFem para encontrar a solução aproximada do mexilhão, larva e alga. O Algoritmo 1 é um pseudo código apresentando desde a definição de funções, geometrias e parâmetros até o resultado final das populações de mexilhão larva e alga que serão visualizadas através do software Paraview [Ahrens et al., 2005].

Dados: Condições iniciais e de contorno das variáveis L , M e A no domínio.

Resultado: Valores aproximados de L , M e A no domínio discretizado.

- 1 Definição da geometria do domínio.
- 2 Geração da malha triangular.
- 3 Cálculo do campo de velocidade V utilizando as equações de Navier-Stokes.
- 4 Definição dos parâmetros físicos do modelo.
- 5 Inicialização das variáveis L , M e A a partir das condições iniciais.
- 6 Aplicação das condições de contorno nas variáveis L , M e A .
- 7 *Solução do sistema Larva-Mexilhão-Alga:*
- 8 **para** t_i **até** t_f **faça**
- 9 **para** cada iteração não linear k **faça**
- 10 Dados $L^{i,k}$, $M^{i,k}$ e $A^{i,k}$ encontre $L^{i,k+1}$, $M^{i,k+1}$ e $A^{i,k+1}$ considerando a formulação variacional das Eqs.(1), (2) e (3).
- 11 **fim**
- 12 Atualize L^{i+1} , M^{i+1} e A^{i+1}
- 13 **fim**
- 14 Salvar os valores de L , M e A para visualização no Paraview.

Algoritmo 1: Pseudocódigo do Modelo Larva-Mexilhão-Alga via FreeFem

4.4 Definição dos Parâmetros do Modelo

Os parâmetros necessários para a simulação – coeficientes de difusão, taxas de crescimento, mortalidade e saturação – foram inicialmente considerados a partir de dados da literatura e ajustados para as condições simuladas, em um dado ambiente hipotético. A variação desses parâmetros é um dos focos principais dessa pesquisa, com o objetivo de compreender como diferentes condições impactam a dinâmica do sistema e a propagação do mexilhão. A Tabela 1 exhibe os parâmetros inicialmente utilizados no modelo, seu valor, sua unidade de medida e a referência desses valores. Na Seção 5.2 os valores escritos em vermelhos serão alterados para estudar sua influência na simulação populacional do Mexilhão, Algas e Larvas.

Tabela 1: Valores base dos parâmetros utilizados no modelo.

Nome do parâmetro	Parâmetro	Valor	Unidade	Referência
Larva				
Coefficiente de difusão	D_L	0,012	$m^2.dia^{-1}$	[van de Koppel et al., 2015]
Taxa de predação	b_1	0,015	dia^{-1}	[Montresor, 2014]
Capacidade de suporte	K_L	20	g/L	Adotado
Taxa de maturação	λ	0,03	dia^{-1}	Adotado
Taxa de crescimento	r_1	0,07	$m^{-1}.dia^{-1}$	Adotado
Mexilhão				
Coefficiente de difusão	D_M	0,0012	$m^2.dia^{-1}$	[Montresor, 2014]
Taxa de predação	b_2	0,01	dia^{-1}	Adotado
Capacidade de suporte	K_M	1732	g/m^2	Medição de Campo
Alga				
Coefficiente de difusão	D_A	1,2	$m^2.dia^{-1}$	[Cangelosi et al., 2015]
Taxa de predação	b_3	0,0002	$m^{-1}.dia^{-1}$	[Montresor, 2014]
Taxa de crescimento	r_2	0,12	$m^{-1}.dia^{-1}$	Adotado
Capacidade de suporte	K_A	0,01	g/L	Adotado
Constante de saturação	c_1 e c_2	0,001	g/L	Adotado

Fonte: produção do próprio autor.

5 Resultados e Discussão

Nesta seção, são apresentados os resultados obtidos por meio das simulações realizadas com o modelo matemático Larva-Mexilhão-Alga, utilizando o software FreeFEM para a solução do modelo e o Paraview para a visualização dos dados. As simulações foram realizadas em diferentes geometrias representando cenários aquáticos hipotéticos, com variações nas condições ambientais e nos parâmetros de difusão e crescimento populacional. Os resultados foram analisados ao longo de um período de 12 meses, com o objetivo de entender a evolução populacional do mexilhão-dourado (*Limnoperna fortunei*) e das algas ao longo do tempo mediante tais mudanças. Foi considerada a presença inicial do mexilhão nula, existindo somente a quantidade inicial de algas e larvas, respectivamente, de 0,001 g/L e 0,02 g/L , ambas distribuídas uniformemente pelo ambiente das geometrias e também ao decorrer da simulação, ocorre a entrada de larvas e algas pelo fluxo do rio, de 0,1 g/L e 0,006 g/L respectivamente. As simulações foram realizadas em um computador com processador Intel Core i3-4170 e memória RAM de 16GB, com a versão 4.14 do FreeFem++.

Professor: Informar as características da máquina e do compilador usado

5.1 Influência da geometria

A primeira geometria representa uma canal reto, formando um domínio retangular, onde a entrada do fluxo de água é na parede esquerda. O domínio discretizado desta geometria possui 3444 nós e 5646 elementos, sendo as áreas laterais mais refinadas(mais elementos) para captar com mais precisão a propagação dos mexilhões. A

Figura 3a exibe o domínio discretizado, formado por elementos triangulares. O campo de velocidade V obtido nessa geometria pode ser visto na Figura 3b. As Figuras 4a, 4b e 4c mostram a população de algas, larvas e mexilhões, respectivamente, após 1 ano de simulação com o tempo de execução de 14 horas e 14 minutos. Observa-se que a Alga se concentrou mais onde o fluxo do rio está maior, que é no interior da geometria, principalmente no início, diferente das larvas, que se concentram na parte direita da geometria, pois o fluxo é menor. O mexilhão se espalhou por toda a parede da geometria de forma uniforme, uma vez que não é afetado pelo fluxo do rio, e sim pelas larvas e algas do ambiente.

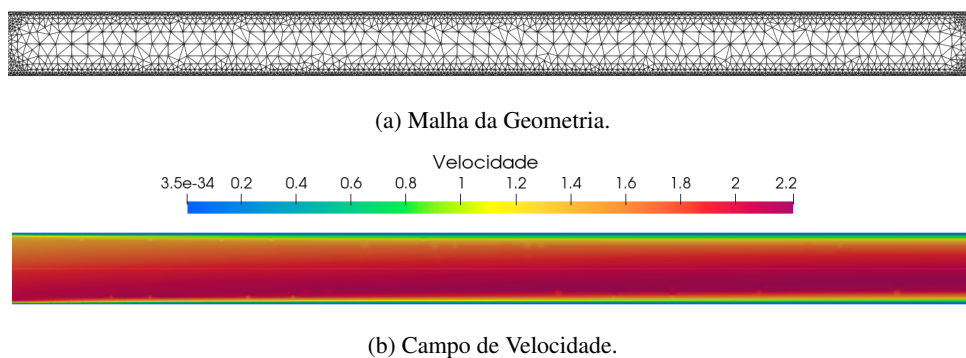


Figura 3: Malha e campo de Velocidade no Domínio Retangular.

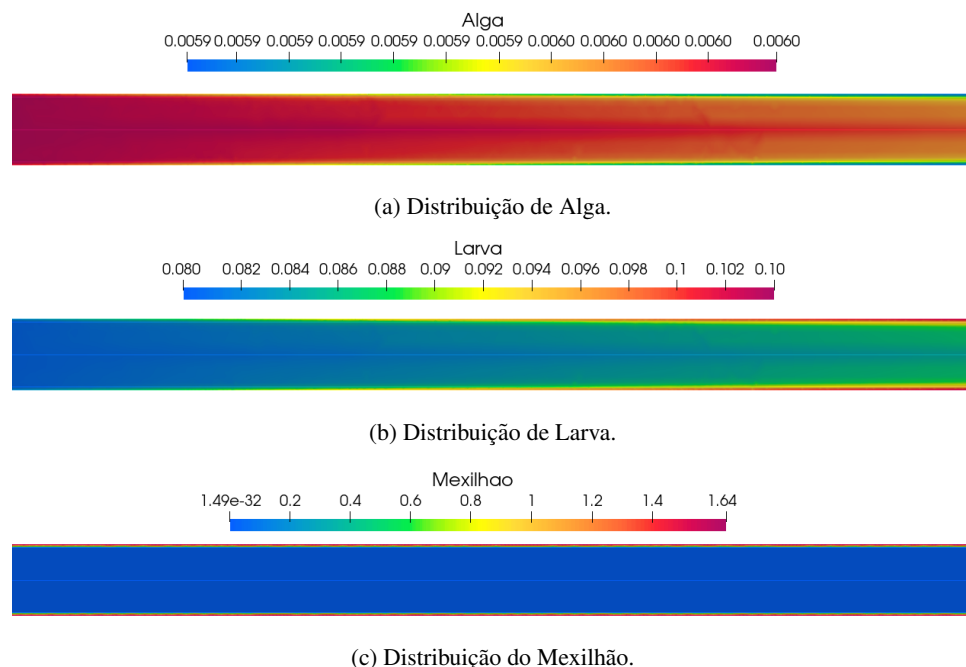


Figura 4: Soluções finais da alga, larva e mexilhão no Domínio Retangular.

A próxima geometria a ser analisada é um canal com reentrâncias, possuindo mais paredes nas laterais, como mostra a Figura 5a. O domínio é mais refinado em relação ao anterior para conseguir captar informações nas

quinas das paredes adicionais, possuindo 15708 elementos e 8535 nós. Como consequência da geometria, o fluxo também muda, como pode ser observado na Figura 5b. Este fato se reflete nos resultados finais da simulações para a alga e a larva, Figuras 6a e 6b. O mexilhão segue em ordem, estabelecendo-se nas paredes do ambiente, assim como no experimento anterior.

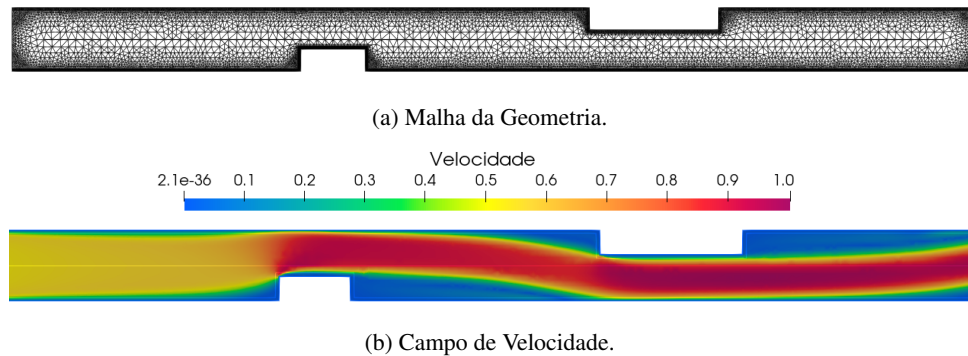


Figura 5: Malha e campo de Velocidade no Domínio Retangular com Paredes Internas.

De forma similar a geometria anterior, mas com ênfase na diferença do fluxo do rio, as larvas estão em maior quantidade nas quinas das paredes adicionais da geometria, além do menor fluxo nessa área, houve a predação de algas por parte das larvas e mexilhões nessas quinas, junto ao fluxo menor, por isso a quantidade de algas nessas regiões são menores comparados às regiões de fluxo principal. Em 1 ano de simulação, o mexilhão permanece estabelecido pelo ambiente de forma homogênea nas paredes, mas muito mais próximo à capacidade de suporte do ambiente. Devido ao alto refino da malha nesta geometria o tempo de execução foi de 46 horas e 11 minutos, bem superior às outras duas geometrias.

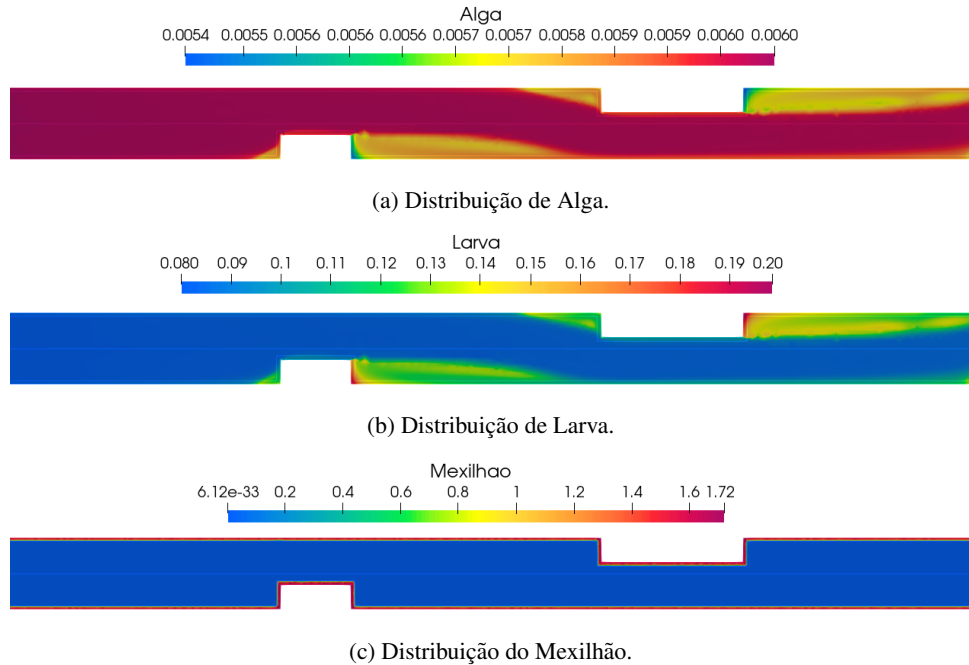


Figura 6: Soluções finais da alga, larva e mexilhão no Domínio Retangular com Paredes Internas.

A terceira geometria em análise possui 4 buracos simulando rochas no interior de um rio, como pode-se observar na Figura 7a. Os mexilhões também se fixam nas regiões do domínio próximos aos buracos, portanto é adequado um refinamento da malha nessa região. Assim, a malha utilizada neste experimento possui um total de 6850 elementos e 4122 nós. Um fator em destaque nesta geometria é o comportamento do fluxo de água ao longo do domínio, como mostra a Figura 7b, onde este fluxo é alterado pela presença das rochas.

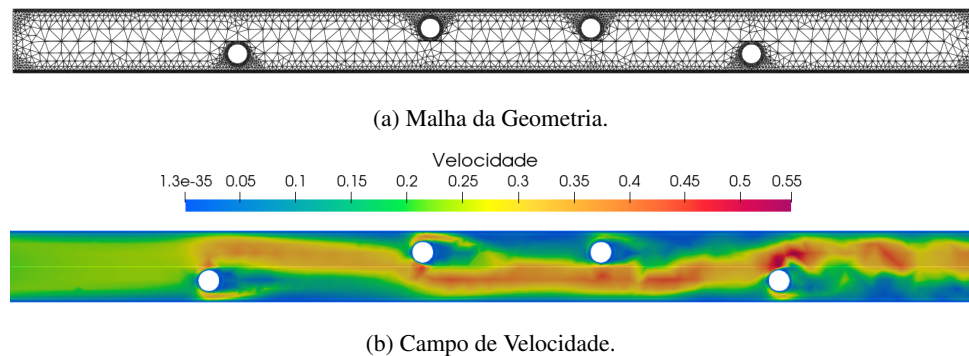


Figura 7: Malha e campo de Velocidade no Domínio Retangular com Buracos no Interior.

As Figuras 8a, 8b, e 8c mostram, respectivamente, a população final de algas, larvas e mexilhões, evidenciando o estabelecimento nas paredes e em torno das rochas ao longo de 1 ano da população de mexilhões com tempo de execução de 17 horas e 12 minutos. Observando as distribuições, destaca-se a pequena área na região superior da geometria, onde a larva possui maior concentração, enquanto a alga possui menor concentração. Esse fato ocorre

devido a grande turbulência que essa geometria proporciona para o fluxo de água, gerando um padrão diferente daqueles observados nas duas geometrias anteriores. Embora tenha acontecido essa peculiaridade, o mexilhão conseguiu se estabelecer tanto na parede quanto nas "rochas" dessa geometria, de forma bem distribuída.

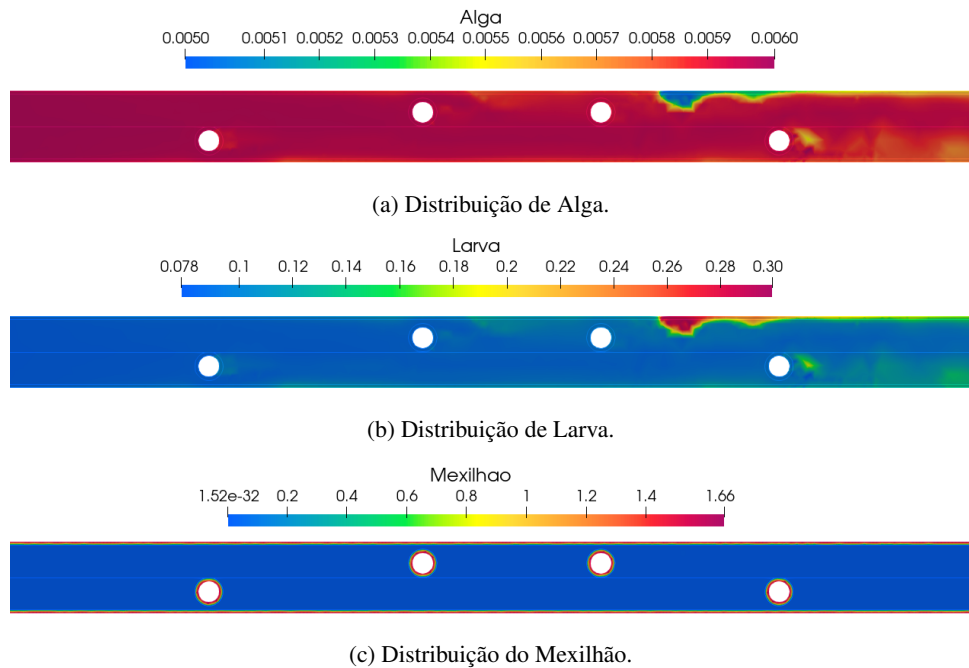


Figura 8: Soluções finais da alga, larva e mexilhão no Domínio Retangular com Buracos no Interior.

5.2 Influência dos parâmetros

Para analisar a influência da Capacidade de suporte do Mexilhão (K_M), das taxas de predação (ou mortalidade) b_1 (larva), da b_2 (alga) e b_3 (mexilhão) e coeficientes de saturação (c_1 e c_2) – destacados em vermelho na Tabela 1 – foi escolhida a geometria retangular sem reentrâncias e buracos. O comportamento das populações em análise não foi significativamente alterado com as modificações introduzidas nos parâmetros destacados. Entretanto, executando a simulação em apenas 6 meses já foi possível observar diferenças na densidade populacional de algas, larvas e mexilhões com a variação dos parâmetros, como podem ser observadas na Tabela 2.

Tabela 2: Valores máximos das populações de larvas, mexilhões ao final de 6 meses de simulação considerando os parâmetros alterados

Parâmetro alterado	Valor	Larva(g/l)	Mexilhão(g/m ²)	Alga(g/l)
b_1	0,05	0,103	1,57	0,00605
b_2	0,1	0,0941	1,02	0,00605
b_3	0,002	0,103	1,57	0,00606
c_1, c_2	0,005	0,103	1,52	0,00606
K_M	5000	0,154	4,7	0,00605

Fonte: produção do próprio autor.

Considerando a capacidade de suporte dos mexilhões $K_M = 1732 \text{ g/m}^2$, observa-se a densidade populacional máxima de $1,64 \text{ g/m}^2$ após 1 ano de simulação. Alterando K_M para 5000 g/m^2 , observou-se que depois de 6 meses de simulação, a população de mexilhões já alcança $4,7 \text{ g/m}^2$, pois o ambiente permitiu comportar mais mexilhões. Além disso, a população máxima de larvas aumentou de $0,10 \text{ g/l}$ para $0,154 \text{ g/l}$, pois como o ambiente comportou mais mexilhões, ocorreram mais reproduções entre eles, levando ao aumento da população de larvas.

Ao aumentar a taxa de mortalidade das larvas b_1 de $0,015$ para $0,05$, foi possível observar uma redução na densidade final máxima de mexilhões, que diminuiu de $1,64 \text{ g/m}^2$ para $1,57 \text{ g/m}^2$. A população máxima de larvas não sofreu alterações, chegando em $0,103 \text{ g/l}$. Assim como a densidade de algas permaneceu praticamente inalterada, em $0,00605 \text{ g/l}$. Esse fato se explica, já que a mortalidade maior das larvas diminui a quantidade de larvas disponíveis para amadurecimento, o que resultou na redução da população de mexilhões adultos, embora não se tenha percebido isso na população das larvas, que assim como as algas, não sofreram impacto pela alteração desse parâmetro.

Quando a taxa de mortalidade dos mexilhões adultos b_2 foi aumentada de $0,01$ para $0,1$, o efeito sobre a população máxima de mexilhões foi ainda mais pronunciado. A densidade final máxima de mexilhões caiu significativamente de $1,64 \text{ g/m}^2$ para $1,02 \text{ g/m}^2$, enquanto a população máxima de larvas foi reduzida para $0,0941 \text{ g/l}$ e a população máxima de algas manteve-se estável, em $0,00605 \text{ g/l}$. O aumento na mortalidade de mexilhões adultos diminuiu substancialmente a população de mexilhões, o que, por sua vez, afeta a quantidade de larvas devido à menor reprodução. A população de algas, no entanto, não sofreu influência dessa alteração.

Ao alterar a taxa de mortalidade das algas b_3 de $0,0002$ para $0,002$, os efeitos sobre as populações foram mínimos. A densidade de mexilhões ficou em $1,57 \text{ g/m}^2$, enquanto a população de larvas se manteve em $0,103 \text{ g/l}$, e a população de algas $0,00606 \text{ g/l}$. Este resultado sugere que, mesmo com uma maior mortalidade das algas, o efeito sobre a população de mexilhões foi mínimo, e desprezível sobre as algas e larvas. Isso pode ser explicado também pela entrada constante de algas no sistema, compensando o aumento da taxa de mortalidade.

As constantes de saturação c_1 e c_2 , que afetam a taxa de consumo de algas pelos mexilhões, foram aumentadas de $0,001$ para $0,005$. Com essa alteração, a população final de mexilhões foi razoavelmente reduzida de $1,64 \text{ g/m}^2$ para $1,52 \text{ g/m}^2$, enquanto as populações de larvas ($0,103 \text{ g/l}$) e algas ($0,00606 \text{ g/l}$) permaneceram praticamente inalteradas. A redução na população de mexilhões pode ser atribuída ao aumento das constantes de saturação que limitaram o consumo de algas, resultando em menos energia disponível para o crescimento dos mexilhões adultos. A saturação no consumo de algas pelos mexilhões afeta a população de mexilhões, mas não tem impacto significativo sobre as populações de larvas e algas.

6 Conclusões

Os resultados indicaram que os mexilhões possuem uma elevada capacidade de colonização, conseguindo se estabelecer em diversos tipos de substratos e geometrias, como paredes de domínios e áreas rochosas. A população de mexilhões demonstrou sensibilidade às variações nos parâmetros de mortalidade e capacidade de suporte, com forte dependência da taxa de mortalidade das larvas e dos adultos. Em contrapartida, os parâmetros relacionados às algas e larvas tiveram pouco ou nenhum impacto sobre as populações finais, pois a entrada constante de larvas e algas no sistema, de $0,100 \text{ g/l}$ e $0,00600 \text{ g/l}$, respectivamente, compensou essas variações, estabilizando as populações, conforme mostrado na Tabela 2.

Embora as simulações tenham apresentado resultados satisfatórios, o tempo elevado de execução foi um desafio em algumas malhas mais refinadas, como ilustrado na Figura 5a. Para mitigar esse problema, recomenda-se a introdução de técnicas de processamento paralelo, que poderiam otimizar significativamente o tempo de execução do algoritmo. Além disso, a substituição dos métodos exatos por solvers iterativos, como o GMRES (*Generalized Minimal Residual*) com pré-condicionadores para acelerar a convergência, oferecem uma alternativa viável, proporcionando maior eficiência computacional sem comprometer a precisão dos resultados. Uma limitação adicional foi a ausência de dados empíricos suficientes para validar os parâmetros biológicos, o que pode ter afetado a precisão das simulações, especialmente no caso da população de algas, que não apresentou mudanças significativas com a alteração dos parâmetros.

Para a continuidade do trabalho, várias direções promissoras podem ser exploradas. Uma possibilidade é a integração de mais dados empíricos provenientes de estudos de campo, atualmente escassos, permitindo uma validação mais robusta do modelo e uma calibração mais precisa dos parâmetros biológicos. Outra abordagem interessante seria expandir as simulações para diferentes ecossistemas aquáticos, investigando como o comportamento do mexilhão varia em regiões com características ambientais distintas, como rios, lagos profundos ou áreas costeiras.

Agradecimentos

Gostaria de expressar minha sincera gratidão às pessoas e instituições que tornaram possível a realização deste trabalho de iniciação científica. Primeiramente, agradeço às minhas orientadoras, Prof^a Dr^a Lucia Catabriga e Dr^a Ramoni Azevedo, pelo apoio constante, orientação e paciência durante todo o desenvolvimento do subprojeto. Seus conselhos e sugestões foram essenciais para a realização deste trabalho. Agradeço também à Universidade Federal do Espírito Santo (UFES) pela concessão da bolsa de iniciação científica, que possibilitou a dedicação integral a esta pesquisa e o acesso aos recursos necessários. A todos os que contribuíram de alguma forma para o sucesso deste subprojeto, muito obrigado.

Referências

- [Bio, 2024] (2024). Biodiversity4all. <https://www.biodiversity4all.org/taxa/151630-Limnoperna-fortunei>. Acesso em 9 de setembro de 2024.
- [Ahrens et al., 2005] Ahrens, J., Geveci, B., & Law, C. (2005). Paraview: An end-user tool for large data visualization. In Hansen, C. D. & Johnson, C. R., editors, *Visualization Handbook*, pages 717–731. Elsevier.
- [Azevedo et al., 2022] Azevedo, R. Z., Barbosa, C. H., Santos, I. P., Silva, J. C., Pastore, D. H., Costa, A. R., Dias, C. M., Figueira, R. M., & Fortunato, H. F. (2022). Numerical solution of a 3d system of transient and nonlinear pdes arising from larvae-algae-mussels interactions. In *Computational Science and Its Applications–ICCSA 2022 Workshops: Malaga, Spain, July 4–7, 2022, Proceedings, Part I*, pages 684–697. Springer.
- [Barbosa et al., 2016] Barbosa, N. P. U., Silva, F. A., de Oliveira, M. D., dos Santos Neto, M. A., de Carvalho, M. D., & Cardoso, A. V. (2016). *Limnoperna fortunei* (dunker, 1857) (mollusca, bivalvia, mytilidae): first record in the são francisco river basin, brazil. *Check List*, 12(1):1–6, <https://doi.org/10.15560/12.1.1846>.

- [Becker et al., 1981] Becker, E. B., Carey, G. F., & Oden, J. T. (1981). *Finite elements - an introduction. Volume 1*. Prentice-Hall, New Jersey.
- [Boyce & DiPrima, 2008] Boyce, W. E. & DiPrima, R. C. (2008). *Elementary Differential Equations and Boundary Value Problems*. Wiley, 9 edition.
- [Cangelosi et al., 2015] Cangelosi, R. A., Wollkind, D. J., Kealy-Dichone, B. J., & Chaiya, I. (2015). Nonlinear stability analyses of turing patterns for a mussel-algae model. *Journal of Mathematical Biology*, 70:1249–1294.
- [Djilali et al., 2020] Djilali, S., Ghanbari, B., Bentout, S., & Mezouaghi, A. (2020). Turing-hopf bifurcation in a diffusive mussel-algae model with time-fractional-order derivative. *Chaos, Solitons & Fractals*, 138:109954.
- [Dunker, 1857] Dunker, G. (1857). Mytilacea nova collections cumingianae. In *Proceedings of the Zoological Society of London*, pages 358 – 366. Zoological Society of London.
- [Ernandes-Silva et al., 2016] Ernandes-Silva, J., Ragonha, F., Jati, S., & Takeda, A. (2016). Larvas de limnoperna fortunei dunker, 1857 em diferentes ambientes de uma planície de inundação neotropical: relação com variáveis abióticas e algas fitoplanctônicas em diferentes estágios de desenvolvimento. *Brazilian Journal of Biology*, 76:154–161.
- [Hecht, 2012] Hecht, F. (2012). New development in freefem++. *J. Numer. Math.*, 20(3-4):251–265.
- [Hughes, 2000] Hughes, T. J. R. (2000). *The finite element method: linear static and dynamic finite element analysis*. Dover Publications.
- [IBAMA, 2017] IBAMA (2017). Diagnóstico sobre a invasão do mexilhão-dourado (limnoperna fortunei) no brasil. <https://www.gov.br/ibama/pt-br/centrais-de-conteudo/arquivos/arquivos-pdf/2017-10-02-consulta-publica-mexilhao-dourado-2-pdf>. Acessado: 09 de junho de 20236.
- [Mansur, 2012] Mansur, M. (2012). Bivalves invasores límnicos: morfologia comparada de limnoperna fortunei e espécies de corbicula spp. *Moluscos Limnicos Invasores no Brasil: Biologia, Prevenção, Controle*. Redes Editora, Porto Alegre, pages 61–74.
- [Montresor, 2014] Montresor, L. C. (2014). *Implicações Ecotoxicológicas do controle químico de Limnoperna fortunei (Dunker, 1857) (Bivalvia: Mytilidae)*. Tese de doutorado, UFMG.
- [Murray, 2007] Murray, J. D. (2007). *Mathematical biology: I. An introduction*, volume 17. Springer Science & Business Media.
- [Silva et al., 2022] Silva, J. C. R., Dias, C. M., Pastore, D. H., Costa, A. R. C., Figueira, R. M. A., Fortunato, H. F. d. M., Barbosa, C. H. X. B., & Carvalho, B. C. (2022). Population growth of the golden mussel (l. fortunei) in hydroelectric power plants: a study via mathematical and computational modeling. *RBRH*, 27:e3.
- [van de Koppel et al., 2015] van de Koppel, J., Rietkerk, M., Dankers, N., & Herman, P. M. J. (2015). Scale-dependent feedback and regular spatial patterns in young mussel beds. *The American Naturalist*, 165:E66–E77.