

Simulação da Dinâmica Populacional do Mexilhão-Dourado Utilizando o Método dos Elementos Finitos via FreeFem

Edgard S. Theotônio, Ramoni Z. Sedano Azevedo, Lucia Catabriga

¹Universidade Federal do Espírito Santo (UFES)
Caixa Postal 514 – 29075910 – Vitória – ES – Brasil.

edgard.theotonio@edu.ufes.br, ramoni.zsedano@gmail.com, luciac@inf.ufes.br

Resumo. *Este artigo apresenta uma aplicação do método dos elementos finitos, via o software FreeFem, para resolver um modelo matemático que simula a dinâmica populacional do mexilhão-dourado, suas larvas e as algas. O modelo considera a relação predador-presa e os parâmetros físicos que influenciam o comportamento dessas espécies. A simulação, realizada em diferentes domínios, permite visualizar a concentração do mexilhão-dourado após um ano de experimento. O objetivo é compreender como diferentes condições ambientais afetam a propagação dessa espécie exótica, que é uma praga no Brasil, e assim contribuir para o desenvolvimento de estratégias de controle mais eficazes e menos onerosas.*

1. Introdução

A invasão biológica do mexilhão-dourado, *Limnoperna fortunei* (Dunker 1857), representa uma preocupação significativa em diversos setores, especialmente para hidroelétricas e pisciculturas. Originário do sudeste asiático, esse molusco bivalve tem causado danos substanciais, interferindo no funcionamento adequado das turbinas em hidroelétricas e afetando a qualidade da água em tanques-rede de pisciculturas devido à baixa renovação de água e, conseqüentemente, causando a falta de oxigênio (Barbosa et al. 2016; IBAMA 2017; Djilali et al. 2020). Além disso, trata-se de uma espécie exótica sem predador natural, com uma grande capacidade de propagação nos ambientes em que se encontra.

Diante desses desafios, é essencial conduzir investigações e pesquisas para analisar a biologia e o ciclo de vida desse molusco, com o objetivo de desenvolver novas estratégias de controle e mitigação dos danos que essa espécie exótica causa. Os métodos de controle atuais têm se mostrado insatisfatórios e de alto custo (Azevedo et al. 2022). Este estudo utiliza o software FreeFem (Hecht 2012), que soluciona equações diferenciais parciais de sistemas multifísicos não lineares em domínios 1D, 2D e 3D através do método dos elementos finitos, para modelar a relação predador-presa entre o mexilhão-dourado e as algas.

O principal objetivo desta pesquisa é compreender as influências dos parâmetros físicos que regem o modelo matemático em desenvolvimento, explicando a relação entre o mexilhão, a alga – sua fonte de alimentação – e a larva, que é a fase jovem do mexilhão e se diferencia da forma adulta pela capacidade de deslocamento no ambiente. Além disso, busca-se verificar como o bivalve se comporta em diferentes domínios. Portanto, o mexilhão, a alga e a larva serão simulados para observar seus ciclos de vida e propagação em diversos tipos de domínio. Um objetivo específico importante é entender a relação entre o mexilhão, a alga e a larva, bem como compreender o comportamento do mexilhão em diferentes tipos de ambientes, a fim de analisar quais fatores ambientais impactam na sua propagação.

O restante deste texto é organizado como a seguir. A formulação matemática e a implementação do modelo são apresentadas na Seção 2, onde os sistema de equações diferenciais parciais e a aplicação do método dos elementos finitos são descritos e os passos realizados no algoritmo do FreeFem são detalhados. A Seção 3 inclui uma descrição dos experimentos numéricos realizados para validar o modelo, incluindo as diferentes geometrias do domínio e as simulações correspondentes. Finalmente, a Seção 4 aborda os resultados e conclui com uma análise das consequências do estudo para o manejo da invasão do mexilhão-dourado.

2. Formulação Matemática e Implementação

Nesta seção, é apresentado o modelo matemático utilizado para descrever a dinâmica populacional do mexilhão-dourado (*Limnoperna fortunei*), das larvas e das algas, bem como as estratégias numéricas e os aspectos computacionais envolvidos na implementação do modelo.

2.1. Modelo Matemático e Formulação de Elementos Finitos

O modelo utilizado neste trabalho foi proposto por (Silva et al. 2022), sendo baseado em um sistema de equações diferenciais parciais (EDP's) que descrevem a variação temporal e espacial das densidades populacionais de larvas (L), mexilhões adultos (M) e algas (A), representadas por:

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

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

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

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, \mathbf{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.

As Equações (4), (5) e (6) apresentam, respectivamente, a formulação variacional das Eqs. (1), (2) e (3) que representa o primeiro passo para solucionar o modelo matemático pelo método dos elementos finitos.

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

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

$$- \int_{\partial\Omega} D_M \frac{\partial M}{\partial n} v ds = \int_{\Omega} \lambda_M L \left(\frac{A^2}{c_1^2 + A^2} \right) v d\Omega$$

$$\int_{\Omega} \frac{\partial A}{\partial t} v d\Omega + \int_{\Omega} b_3 \left(\frac{A^2}{c_2^2 + A^2} \right) M v d\Omega - \int_{\Omega} r_2 A v d\Omega + \int_{\Omega} r_2 A \frac{A}{K_A} v d\Omega + \quad (6)$$

$$+ \int_{\Omega} D_A \nabla v \cdot \nabla A d\Omega - \int_{\partial\Omega} D_A \frac{\partial A}{\partial n} v ds + \int_{\Omega} \mathbf{V} \cdot \nabla A v d\Omega = 0$$

2.2. Estratégias Numéricas

O método dos elementos finitos será utilizado para encontrar soluções aproximadas das Eqs.(4), (5) e (6). O Algoritmo 1 apresenta os principais passos do processo de solução utilizando o FreeFem. O primeiro passo para solucionar um sistema de equações diferenciais parciais pelo método dos elementos finitos, consiste na discretização do domínio, ou seja a subdivisão do domínio em um conjunto de pequenos subdomínios denominados elementos – podem ser segmentos de reta para domínios 1D, triângulos ou quadriláteros para domínios 2D e tetraedros ou paralelogramos para domínios 3D. Cada elementos é formado por um conjuntos de arestas, denominadas de nós e nos elementos são consideradas aproximações da função (ou funções) de interesse através de polinômios da ordem desejada. Neste estudo estamos considerando domínios bidimensionais e utilizando elementos triangulares lineares, ou seja, em cada elemento as funções serão aproximadas por polinômios lineares. Assim é necessário gerar um conjunto de nós e arestas definindo o domínio aproximado, denominada "malha" (Linha 2). Quanto mais elementos for considerado, mais refinada será a malha, podendo ser usada malhas com refinamentos diferentes em diferentes locais do domínio.

Em seguida, os parâmetros do modelo e seus respectivos valores são definidos: taxas de crescimento (r_1, r_2), capacidades de suporte (K_L, K_M, K_A), taxas de predação (b_1, b_2, b_3), coeficientes de difusão (D_L, D_M, D_A) e taxas de maturação (λ_L), conforme Linha 3. O campo de velocidade \mathbf{V} da água do rio é calculado através da discretização das equações de Navier-Stokes pelo método dos elementos via FreeFem (Linha 4). Os próximos passos são tratar as condições iniciais para L , M e A em todo o domínio, bem como as condições de contorno apropriadas, isto é, valores nas bordas do domínio), descritas nas Linhas 5 e 6.

O processo de avanço no tempo é aproximado pelo método das diferenças finitas, representado no Algoritmo 1 pelas Linhas 8 a 13. Dada a característica não linear das Eqs.(1), (2) e (3), em cada passo de tempo é considerado um loop não linear, representado pelas Linhas 9 a 11. A solução do sistema de equações é obtida iterativamente para cada passo de tempo, atualizando os valores de L , M e A com a solução obtida. Esse processo de resolução e atualização das variáveis é repetido para cada passo de tempo e para cada iteração não linear até o tempo final, que corresponde a uma simulação de 1 ano, ou seja, $t_f = 1$ ano. Por fim, os resultados são

exportados para visualização, utilizando ferramentas como Paraview (Ahrens et al. 2005) para analisar a evolução das populações de larvas, mexilhões e algas ao longo do tempo e espaço.

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 <i>Solução do sistema Larva-Mexilhão-Alga:</i>
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: Solução do Modelo Larva-Mexilhão-Alga via FreeFem

Parâmetro	Valor	Unidade	Referência
D_A	1,2	$m^2 \cdot dia^{-1}$	(Cangelosi et al. 2015)
D_L	0,012	$m^2 \cdot dia^{-1}$	(van de Koppel et al. 2015)
D_M	0,0012	$m^2 \cdot dia^{-1}$	(Montresor 2014)
b_1	0,015	dia^{-1}	(Montresor 2014)
b_2	0,01	dia^{-1}	Adotado
b_3	0,0002	$m^{-1} \cdot dia^{-1}$	(Montresor 2014)
λ	0,03	dia^{-1}	Adotado
r_1	0,07	$m^{-1} \cdot dia^{-1}$	Adotado
r_2	0,12	$m^{-1} \cdot dia^{-1}$	Adotado
K_L	20	g/L	Adotado
K_M	1732	g/m^2	Medição de Campo
K_A	0,01	g/L	Adotado
c_1	0,001	g/L	Adotado
c_2	0,001	g/L	Adotado

Tabela 1. Valores dos parâmetros utilizados no modelo.

3. Experimentos Numéricos

Nesta seção, são apresentados os experimentos realizados em ambientes hipotéticos com o objetivo de avaliar o efeito dos parâmetros físicos no crescimento populacional do mexilhão. Para isso, foram considerados três tipos de geometrias do domínio para analisar o comportamento do modelo em diferentes ambientes. As geometrias utilizadas foram: retangular, retangular

com paredes internas e retangular com buracos no interior. Para cada tipo de malha, foram geradas visualizações dos resultados utilizando o software Paraview. Portanto, objetivando simular um início da proliferação do mexilhão nas dadas geometrias, são considerados os valores dos parâmetros presentes na Tabela 1 para o modelo Mexilhão-Larva-Alga. Foi considerado a presença inicial do mexilhão nula, existindo somente a quantidade inicial de algas e larvas, respectivamente, de $0,001 \text{ g/L}$ e $0,02 \text{ g/L}$, ambas distribuído uniformemente pelo ambiente das geometrias. As simulações foram realizadas em um computador com processador Intel Core i3-4170 e memória RAM de 16GB.

3.1. Domínio Retangular

Esta é a geometria padrão por se tratar um rio retangular 2D, 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 1a exibe o domínio discretizado, formado por elementos triangulares. O campo de velocidade obtido nessa geometria pode ser visto na Figura 1b. As Figuras 2b, 2a e 2c mostram a população de larvas, algas e mexilhões, respectivamente, após 1 ano de simulação com o tempo de execução de 14 horas e 14 minutos.

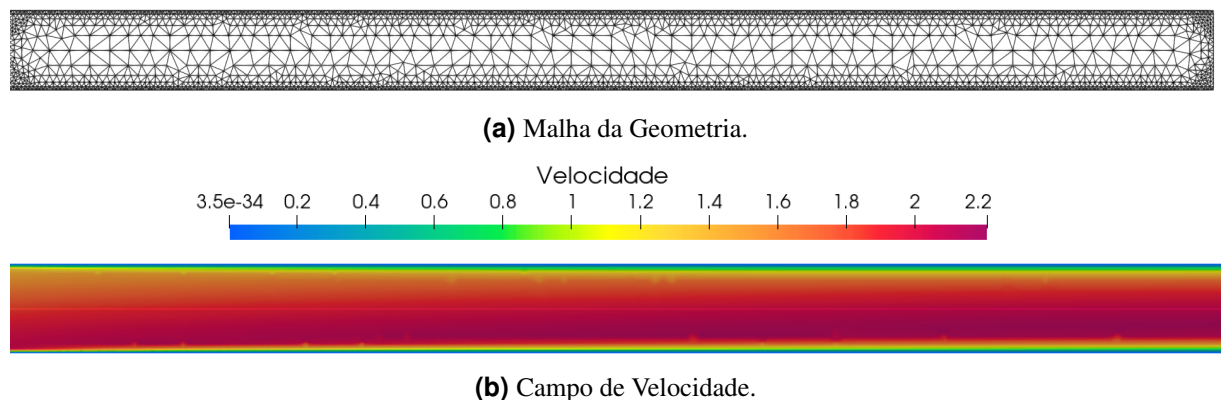


Figura 1. Malha e campo de Velocidade no Domínio Retangular.

Observa-se a distribuição das três populações. 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 geometrias de forma uniforme, pois um fato importante é que o mexilhão não é afetado pelo fluxo do rio, e sim pelas larvas e algas do ambiente.

3.2. Domínio Retangular com Paredes Internas

Semelhante a geometria anterior, esta possui mais paredes nas laterais, como mostra a Figura 3a. O domínio é mais refinado em relação ao anterior para conseguir captar informações nas quinas das paredes adicionais, além de gerar elementos mais homogêneos, possuindo 15708 elementos e 8535 nós. Como consequência da geometria, o fluxo também muda, como pode ser observado na Figura 3b. Este fato se reflete nos resultados finais da simulações para a larva e a alga, Figuras 4b e 4a. O mexilhão segue em ordem, estabelecendo-se nas paredes do ambiente, assim como no experimento anterior.

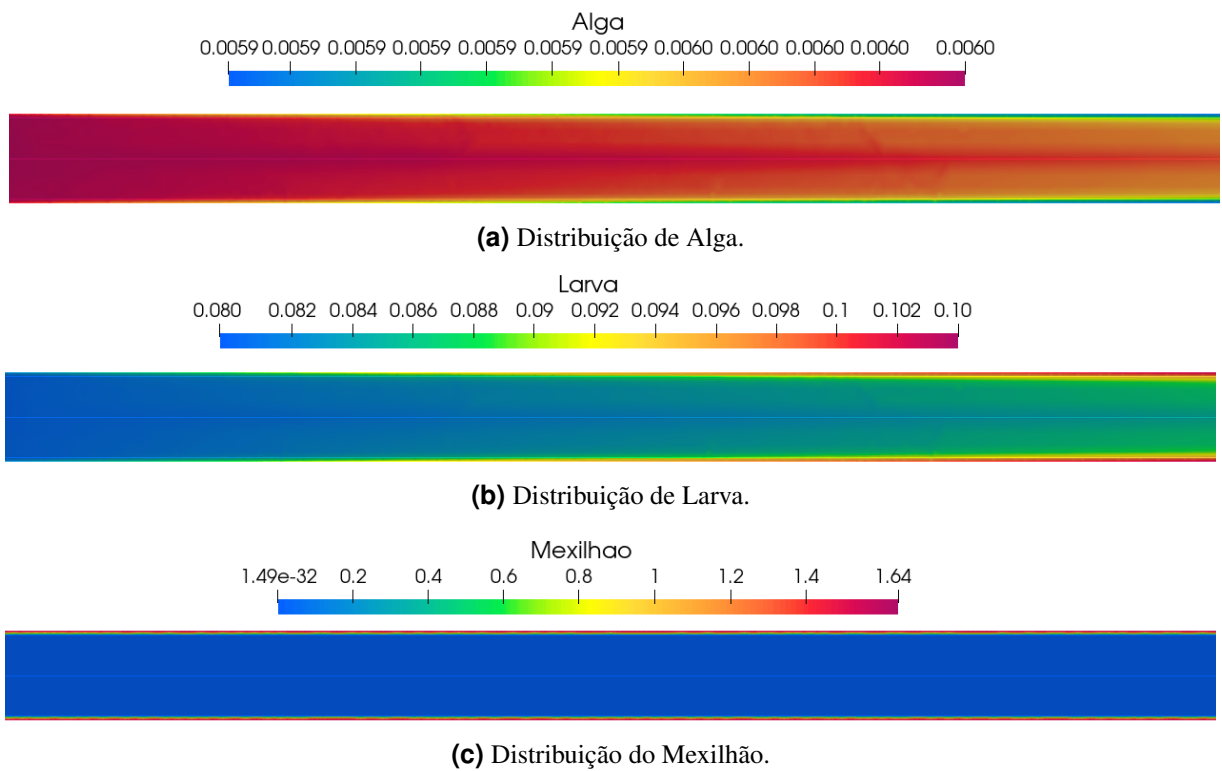


Figura 2. Soluções finais da alga, larva e mexilhão no Domínio Retangular.

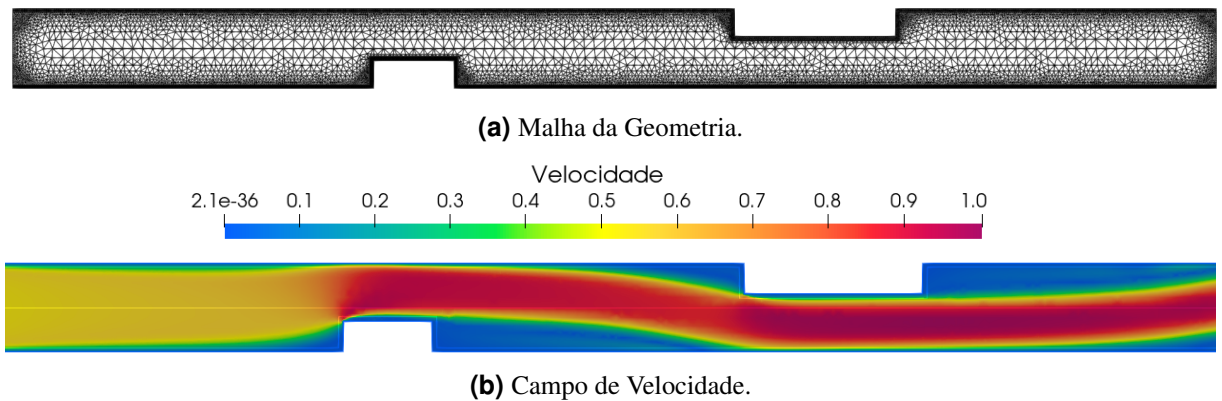


Figura 3. Malha e campo de Velocidade no Domínio Retangular com Paredes Internas.

Semelhante 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. 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.

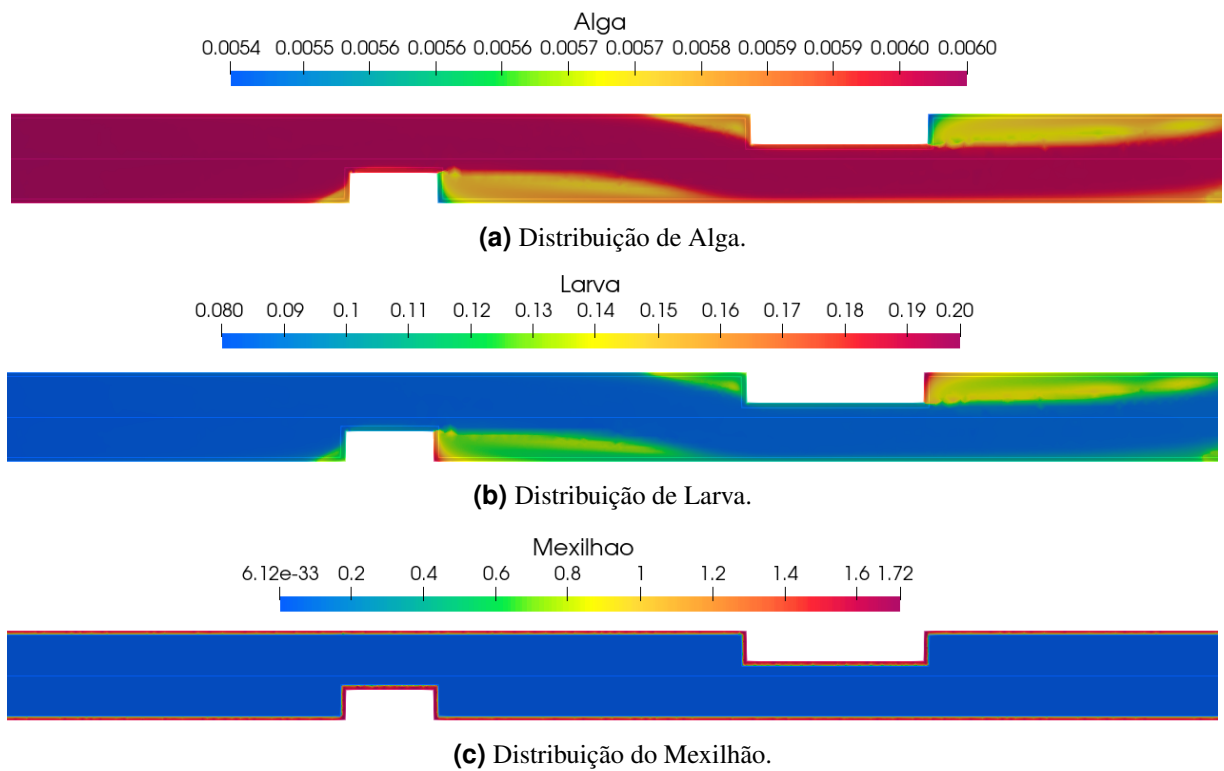


Figura 4. Soluções finais da alga, larva e mexilhão no Domínio Retangular com Paredes Internas.

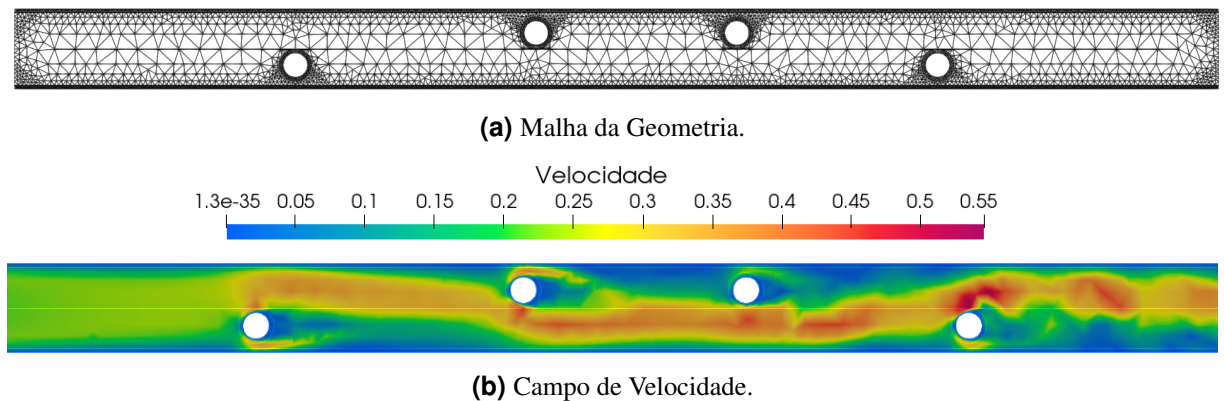


Figura 5. Malha e campo de Velocidade no Domínio Retangular com Buracos no Interior.

3.3. Domínio Retangular com Buracos no Interior

Esta geometria possui 4 buracos simulando rochas no interior de um rio, como pode-se observar na Figura 5a. 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 5b,

onde este fluxo é alterado pela presença das rochas. As Figuras 6b, 6a e 6c mostram, respectivamente, a população final de larvas, algas e mexilhão que evidencia 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 diferentes do ocorrido 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.

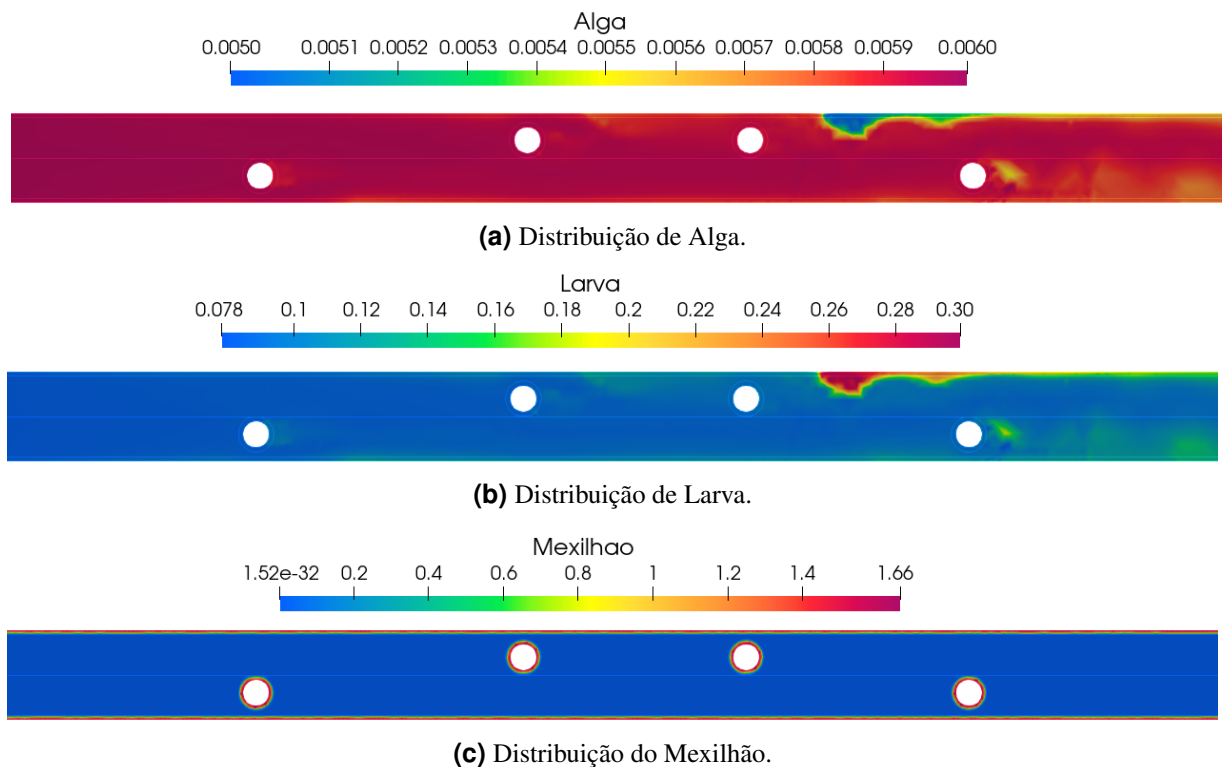


Figura 6. Soluções finais da alga, larva e mexilhão no Domínio Retangular com Buracos no Interior.

4. Conclusão

O estudo realizado visou compreender a dinâmica de infestação do mexilhão-dourado (*Limnoperna fortunei*) em diferentes ambientes aquáticos utilizando o software FreeFem e o método dos elementos finitos. Ao simular a interação entre mexilhões, suas larvas e algas em várias geometrias, foram obtidas importantes *insights* sobre o comportamento e a dispersão desse molusco invasor. Tais experimentos demonstram a eficácia do modelo proposto, fornecendo evidências sobre sua aplicabilidade em cenários reais.

Conclui-se também que, com base nos valores utilizados na Tabela 1 e nos experimentos realizados com o modelo em três diferentes geometrias, é possível evidenciar teoricamente como o mexilhão-dourado pode infestar um ambiente. Observou-se que o mexilhão tende a se

estabelecer em locais como rochas e paredes laterais de rios, partindo de uma população inicial nula de mexilhões adultos, mas presente de larvas e algas. Ao longo da simulação, o mexilhão se espalha onde lhe é permitido, resultando na homogeneização de mexilhões adultos.

Ao analisar as populações de larvas e algas, percebe-se que o fluxo do rio influencia significativamente a distribuição de ambas. Conforme observado nas imagens de resultado final, a concentração de larvas é maior em áreas com menor fluxo, indicando que esses são os locais iniciais de estabelecimento dos mexilhões, que posteriormente se espalham pelo ambiente. Em contraste, a concentração de algas é maior onde o fluxo de água é mais intenso, especialmente em geometrias com paredes internas e buracos. Os resultados destacam a importância de considerar a dinâmica do fluxo de água ao desenvolver estratégias de controle para o mexilhão-dourado, visando mitigar os danos causados por essa espécie exótica invasora no bioma brasileiro.

Os tempos computacionais para as simulações foram bem expressivos. Como trabalhos futuros pretende-se reduzir o tempo de execução considerando processamento paralelo bem como solucionadores dos sistemas lineares por métodos iterativos pré condicionados, já implementados no FreeFem.

Referências

- [Ahrens et al. 2005] Ahrens, J., Geveci, B., and Law, C. (2005). Paraview: An end-user tool for large data visualization. In Hansen, C. D. and 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., and 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., and 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.
- [Cangelosi et al. 2015] Cangelosi, R. A., Wollkind, D. J., Kealy-Dichone, B. J., and 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., and 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 cumingiana. In *Proceedings of the Zoological Society of London*, pages 358 – 366. Zoological Society of London.
- [Hecht 2012] Hecht, F. (2012). New development in freefem++. *J. Numer. Math.*, 20(3-4):251–265.
- [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.

- [Montresor 2014] Montresor, L. C. (2014). *Implicações Ecotoxicológicas do controle químico de *Limnoperna fortunei* (Dunker, 1857) (Bivalvia: Mytilidae)*. Tese de doutorado, UFMG.
- [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., and 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., and Herman, P. M. J. (2015). Scale-dependent feedback and regular spatial patterns in young mussel beds. *The American Naturalist*, 165:E66–E77.