

Proposta de projeto de pesquisa para realização no
IEA/USP

Processos complexos de difusão com aplicações em
fenômenos físico-químicos, socioeconômicos e evolutivo-
reativos. Motivação para o desenvolvimento de
cooperação interdisciplinar

Luiz Bevilacqua

Julho 2016

1. Introdução.

O projeto de pesquisa apresentado a seguir contém duas atividades. A primeira refere-se à contribuição para o avanço do conhecimento em profundidade e a segunda à ampliação do leque de alcance do conhecimento.

A proposta procura se alinhar com os objetivos recomendados pela nova gestão do IEA dando continuidade às iniciativas da gestão anterior sob a direção do professor Martin Grossmann:

O IEA pretende, ao longo da gestão 2016-2020, reforçar a sua triplíce função acadêmica de local de reflexão crítica, sensor de avanços na fronteira internacional do conhecimento e incubadora de ideias propositivas. Dada a amplitude de suas interfaces com todas as áreas da USP, o IEA se propõe a ampliar o seu papel de favorecer a convergência de saberes, buscando analisar temas complexos a partir de uma visão multidisciplinar e de prototipação de modelos inovadores de intervenção contributiva para se lidar melhor com os grandes desafios da sociedade.

Em suas primeiras três décadas de operação o IEA foi primariamente frequentado por professores eminentes e com carreiras consolidadas. Entendemos que o IEA está maduro para mesclar pesquisadores renomados com docentes e estudantes em processo de consolidação de suas carreiras e vocações, mesclando sabedoria com energia, experiência e sonho. Um passo importante nesse sentido foi dado na gestão do professor Martin Grossmann (2012-2016), com a criação, em parceria com a Pró-Reitoria de Pesquisa, do Programa de Ano Sabático no IEA. Após um processo criterioso de avaliação, foram selecionados seis docentes da USP, que preencheram o IEA com novas ideias e com seus orientados.

O projeto a seguir procura enquadrar-se no tempo de doze meses, isto é, procura definir objetivos viáveis de serem alcançados nesse intervalo de tempo. Certamente, como ficará claro da definição das metas, a intenção é que o tema seja bastante rico para que possa prosseguir com a liderança de outros pesquisadores. Isto é, temos a intenção de lançar uma semente e conquistar professores, pesquisadores, técnicos e estudantes para colaborarem e prosseguirem no aprofundamento do tema.

Com características claramente interdisciplinares o projeto tanto na sua componente de aprofundamento científico como no estímulo à convergência disciplinar com a proposta de seminários inter-departamentais necessitará de atrair alguns participantes da comunidade acadêmica da USP para maximizar a sua eficácia. Portanto além da componente científica será importante a busca de pessoas entusiasmadas com a proposta. Embora essa condição não tenha sido testada previamente acredito que os conhecimentos que tenho na USP poderão facilitar a reunião de alguns professores e estudantes para cooperar nas duas vertentes do projeto.

Devo ainda esclarecer que a presente proposta sustenta-se também na avaliação que tive a oportunidade de fazer, no início deste ano, dos cursos de graduação da USP. Os relatórios de auto-avaliação, praticamente de todas as faculdades e institutos, afirmam claramente a necessidade de se caminhar para a convergência disciplinar sobre a qual se assenta a maioria dos avanços científicos de ponta do nosso século. Além de ser coerente com missão do IEA foi um fator importante para a definição temática exposta na sequência.

Assim a proposta descrita a seguir creio responder claramente aos objetivos traçados na missão definida pelo IEA para os próximos quatro anos assim como responder à uma demanda da comunidade acadêmica.

Nas secções a seguir serão definidas com detalhe as várias atividades que compõem o trabalho a ser executado assim como as respectivas justificas.

2. Contextualização e justificativa do projeto de pesquisa

O projeto enquadra-se no uso de Modelos Matemático-Computacionais Aplicados que vem assumindo importância crescente para simular certos fenômenos, provenientes principalmente das áreas biológicas, socioeconômicas, ecológicas, sendo assim também instrumentos de convergência interdisciplinar. Na realidade a construção de modelos é talvez a atividade mais característica da convergência disciplinar. Vamos considerar três pontos principais que foram as fontes inspiradores da seleção temática da proposta e justificam sua apresentação.

2.1. A importância da convergência disciplinar e o uso de computação.

A escolha da motivação via modelagem matemática e computacional deve-se ao fato de ter sido o instrumento dos mais eficazes para o progresso científico ao longo de fios condutores interdisciplinares, isto é, que recorre ao emaranhamento de disciplinas que na classificação clássica são desconexas ou com pouca conectividade. Este processo desenvolveu-se aceleradamente nas últimas décadas. O sucesso das descobertas que recorreram à convergência disciplinar tem sido confirmado pelos avanços em diversas áreas do conhecimento dentre as quais destacamos:

- Mudanças climáticas e previsão do tempo
- Evolução de ecossistemas e dinâmica populacional
- Saúde, biologia, epidemiologia
- Genética e bioquímica
- Neurociências e cognição
- Modelos econômicos e fluxo de capitais

Note que estamos enfatizando a interdisciplinaridade com uso intensivo de computação. De fato os avanços científicos alcançados com a convergência disciplinar [1],[2],[3],[4] não teriam sido possíveis sem o desenvolvimento e uso de computação científica e máquinas cada vez mais rápidas com crescente capacidade de processamento como mostra a figura 1. Até hoje não foi possível estabelecer um limite para a capacidade computacional, exceto talvez pelo crescente consumo de energia.

Várias iniciativas e publicações para estimular o interesse pela modelagem matemática e computacional no ambiente acadêmico têm sido implantadas [5], [6], [7] em várias universidades e institutos de P&D. Essas ações procuram apresentar aos jovens estudantes um caminho promissor para tratar de problemas complexos que recorrem à contribuição de várias áreas do conhecimento. Além disso mostra que a matemática não é uma disciplina fechada em si mesma podendo prestar grande contribuição para todos os campos da ciência. Acredito que a atividade proposta tem colateralmente grande possibilidade de tirar da matemática a fama de disciplina árida e fechada em si mesma.

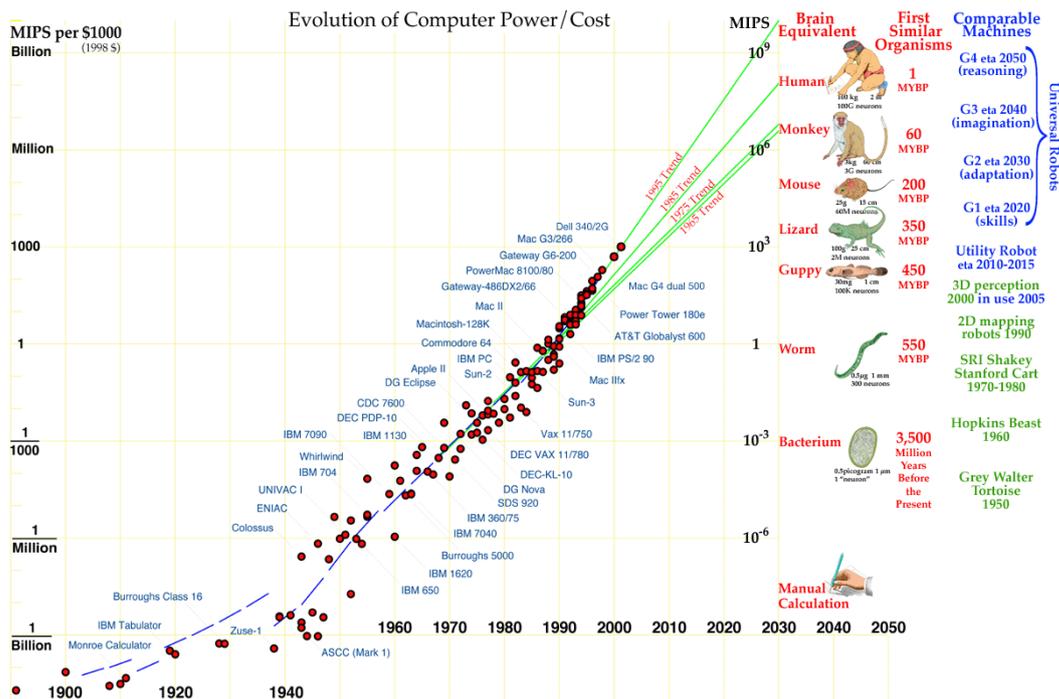


Fig.1. Evolução da capacidade computacional: passado e futuro

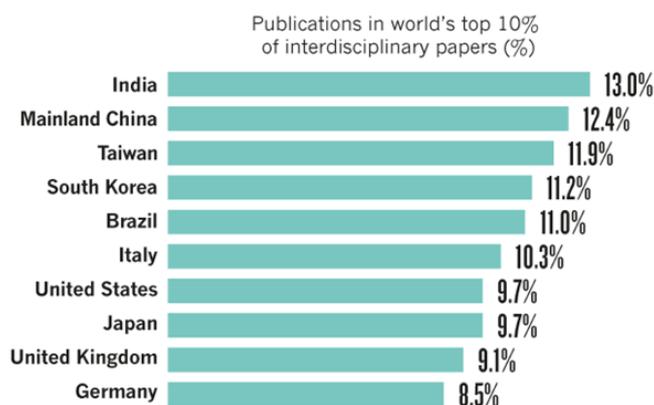
2.2. A maioria das unidades acadêmicas da USP reconhece a necessidade de caminhar para uma maior integração do conhecimento.

Na avaliação dos relatórios das diversas unidades acadêmicas da USP, tratando do desempenho nos cursos de graduação, que tive oportunidade de fazer em janeiro/fevereiro deste ano ficou claro o interesse pela cooperação entre áreas de conhecimento distintas que vêm se interpenetrando nas últimas décadas. Como observação geral tive a oportunidade de escrever:

A preocupação com a formação dentro de uma organização curricular que leve em conta os aspectos "interdisciplinares" está presente em todas as propostas. assim como a concomitante formação para o exercício da cidadania. A definição ou melhor o entendimento de interdisciplinaridade precisa se melhor analisado para que haja um entendimento comum não só do conceito, mas principalmente do seu impacto na estrutura universitária.

Frequentemente tem-se a impressão que a interdisciplinaridade é a agregação de disciplinas que facilitam a extensão do conhecimento. Esse conceito pode induzir a uma formação superficial em que o estudante fica sabendo pouco de muitas coisas. Essa é uma crítica que tem sido apresentada em vários fóruns e que às vezes tem suas razões. A transformação profunda que a convergência disciplinar tem trazido para a formação dos estudantes precisa ser melhor discutida na Universidade. Várias resposta a esse item mostram conceitos diversos e há pouca ação concreta para de fato estimular a interpenetração de disciplinas para construir novos paradigmas.

A interdisciplinaridade tem estado presente na pesquisa com intensidade cada vez maior. O Brasil está bem colocado na produção de conhecimento classificados como interdisciplinares como mostra a figura ao lado. É preciso que essa convergência disciplinar que está formando novos blocos de conhecimento seja introduzida no ensino de graduação. De fato, é necessário um trabalho muito grande mas quem tomar a iniciativa terá condições de formar melhores profissionais para o futuro. Sugiro que a USP promova essa discussão, mas com consequências práticas na revisão do conteúdo das novas disciplinas.



[Richard Van Noorden](#), *Interdisciplinary Research by Numbers*, Nature, number 525, issue 7569, 16 -9-

Resumindo, a maioria das unidades demonstra disposição para trazer para o ensino graduado a “nova ciência” resultante da intensa convergência do conhecimento em andamento, mas frequentemente nota-se agregação de mais matéria ao que já existe e não o movimento de fusão do conhecimento que poderíamos chamar de redução da “entropia do conhecimento”.

A presente proposta alinha-se no sentido de concretizar a sugestão de estimular o intercâmbio entre unidades utilizando como instrumento a modelagem matemática computacional que tem inserção em todos os setores.

2.3. Crescimento da área interdisciplinar no Brasil

A publicação de pesquisa com caráter interdisciplinar vem crescendo no Brasil colocando-o em posição de destaque no cenário mundial. Segundo a classificação publicada na revista Nature [8] ocupamos o 5º lugar na produção de trabalhos

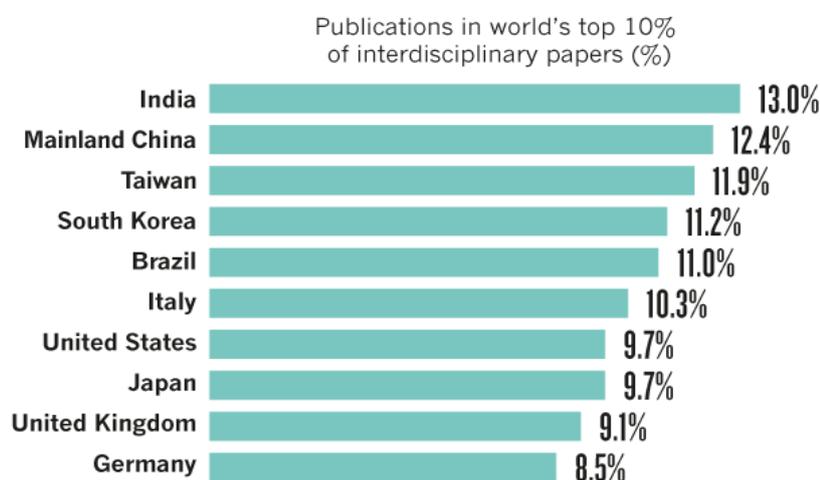


Fig. 2. Desempenho de alguns países na publicação de pesquisas interdisciplinar.

interdisciplinares. (Fig.2). Portanto ao contrário do que tem sido dito em alguns setores da nossa comunidade o resultado do esforço de pesquisa com características interdisciplinares no Brasil não é pobre, ao contrário, está muito bem avaliado na classificação internacional. A grande expansão da área interdisciplinar da CAPES é coerente com a posição do Brasil no ranking mundial não obstante ter menos de 20 anos desde sua fundação.

O aproveitamento dos mestres e doutores formados nas áreas interdisciplinares no mercado de trabalho é excelente como comprova recente estudo publicado pelo CGEE [9]. Após 10 anos de formado os egressos dessa área estão liderando a taxa de empregabilidade comparado com as outras especialidades. Isto comprova a aceitação de doutores com a capacidade de interagir com profissionais de diversas áreas do conhecimento fazendo pontes de cooperação entre eles.. É portanto coerente com a expansão da demanda por pessoal com formação interdisciplinar o reforço da competência no uso de um dos instrumentos mais eficazes para fazer avançar o saber.

Assim acreditamos que os três fatores apresentados justificam plenamente o trabalho proposto para a atividade de pesquisa que em resumo são:

- 1. Modelagem matemática-computacional, claramente um instrumento de grande poder e com características universais (utilizável em todos os setores)**
- 2. Expectativa das unidades acadêmicas da USP em estimular a interação entre as diversas áreas do conhecimento (convergência interdisciplinar)**
- 3. Crescente afluência de candidatos ao mestrado e doutorado para programas interdisciplinares e excelente taxa de empregabilidade**

3. Contribuição ao avanço do conhecimento em profundidade.

Tema Catalisador : Processos complexos de difusão com aplicações em fenômenos físico-químicos, socioeconômicos e evolutivo-reativos.

Este tópico constitui-se no núcleo central da minha atividade de pesquisa primeiro porque é o tema que será objeto da minha maior contribuição, com o qual estou familiar e onde já existe um acúmulo de conhecimento bem desenvolvido. Além disso é um tema muito apropriado para atrair colaboradores uma vez que os processos difusivos, particularmente na nova forma em que serão apresentados, tornam-se bastante flexíveis para atender às certas exigências fenomenológicas associadas a fluxo e contra-fluxo. Isto é a meu ver representa um avanço original na teoria de difusão. Com as novas equações é possível estabelecer modelos que dispensam ajustes artificiais nas equações clássicas fundamentais para fazer as previsões teóricas concordarem com os experimentos.

3.1. Processos de difusão anômala com duplo fluxo. A teoria, estado atual.

Os modelos atuais que procuram representar os processos de transporte de massa são incompletos. São incompletos no sentido de admitirem que o fluxo se dá com característica unimodal (Fig.3 a) sendo no entanto plausível que em certos casos o processo seja bi- modal (Fig.3 b). O caso clássico de difusão é regido por uma distribuição unimodal de fluxo com a equação constitutiva de Einstein-Smoluchowski:

$$\Psi_1 = -D \frac{\partial q}{\partial x} \mathbf{e}_1 \quad (1)$$

onde $D = k_B T / 6\pi\eta r$ para o caso unidimensional.

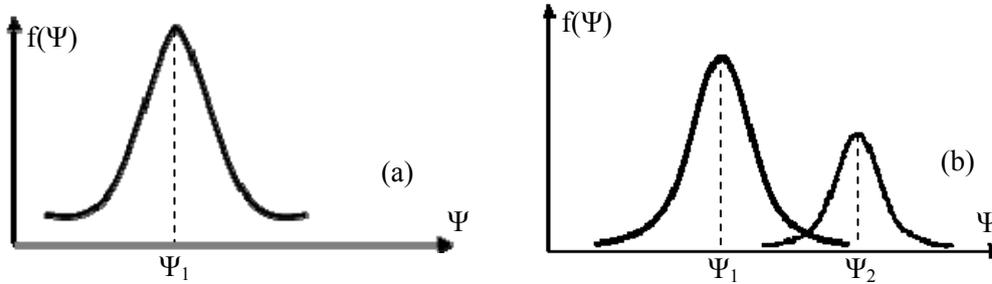


Fig.3. Distribuição do fluxo de massa Ψ com característica unimodal (a) e bi-modal (b)

O princípio de conservação de massa leva então imediatamente a equação que governa o processo de difusão:

$$\frac{\partial q}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial q}{\partial x} \right)$$

Em vários casos porém as partículas que se espalham pelo substrato são dotadas de energia interna ou são sensíveis a campos externos o que introduz uma perturbação no processo de difusão [10]. Particularmente importante é o caso em que apenas uma fração das partículas exibe comportamento anômalo, o que conduz à presença de dois grupos distintos de partículas que se espalham com velocidades diferentes. Pode-se demonstrar que nesse caso um modelo plausível pode ser deduzido a partir de uma abordagem discreta considerando as partículas divididas em dois grupos distintos [11] [12]. O primeiro, correspondendo à fração β , move-se de acordo com o regime clássico (lei de Fick) Ψ_1 dada acima. O segundo constituindo a fração complementar $(1-\beta)$ move-se de acordo com uma nova lei:

$$\Psi_2 = R \frac{\partial}{\partial x} \left(\beta \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \right) \mathbf{e}_1$$

O princípio de conservação de massa [13] conduz imediatamente à nova equação de difusão:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \beta D \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - \beta(1-\beta)R \frac{\partial^4 p}{\partial x^4} \quad (2)$$

Onde D é a constante de difusão clássica e R é um novo coeficiente que chamaremos de coeficiente de reatividade.

Essa nova teoria apresenta características interessantes. A primeira é que o fluxo secundário só existe se o fluxo primário estiver ativado $\beta \neq 0$ conforme se pode ver da definição de Ψ_2 . O fluxo secundário não é autônomo é subsidiário ao fluxo principal. Agora lembrando que a curvatura da função que representa a concentração $q(x,t)$ é proporcional à $\partial^2 q / \partial x^2$ segue-se imediatamente a segunda característica. De fato a expressão para Ψ_2 mostra que esse fluxo secundário é função do gradiente da curvatura do perfil da concentração¹. A terceira característica é variação linear de Ψ_2 com a resistividade R .

Um dos desafios dessa nova teoria é a determinação do coeficiente de resistividade. A determinação de R não é trivial e ainda permanece como um dos problemas a ser resolvido a descoberta de um segundo potencial ou equação constitutiva complementar que permita determiná-lo. É possível que não existe um potencial universal para R , isto é, a resistividade depende de cada fenômeno.

É interessante ainda observar que a solução da equação (2) pode representar retenção, aceleração ou estagnação na evolução do processo de difusão dependendo das condições iniciais, das condições de contorno e dos valores de R/D e β .

Atualmente com a investigação do comportamento de partículas biológicas que podem acumular ou liberar energia ou partículas magnéticas que respondam à excitação de campos externos a presença do segundo fluxo começa a ser observado mais concretamente nos processos de difusão. No entanto como a teoria de processos bimodais ainda é incipiente não se encontram na literatura muitos trabalhos tratando do assunto.

É possível ainda que a equação (2) seja mais completa para contribuir na explicação de vários tipos de fenômenos relativos a flutuações, instabilidades e mudanças de fase.

A aplicação da equação de quarta ordem é ainda um campo inexplorado de modelos possíveis para casos singulares. De qualquer forma fica claro que processos de difusão em que alguns dos componentes tem capacidade de reação estimulada ou por decisão própria ou por influência de estímulos gerados externamente a equação clássica não é satisfatória. A população de certas espécies de insetos por exemplo tem grupos de indivíduos especializados que podem eventualmente mover-se com velocidade diferente para colonizar um território conquistado.

Voltando ao caso do fluxo secundário para soluções estáveis é clara a dependência da intensidade do fluxo secundário do gradiente da curvatura do perfil de concentração. Em geral essa dependência induz à uma certa preferência de concentração em torno dos máximos de $q(x,t)$. Se se pensar em fluxo de capitais, isso significa que há tendência de concentração em torno de pontos de acúmulo de capital, o que é bastante plausível.

A intensidade do fluxo secundário também aumenta proporcionalmente ao valor do coeficiente de resistividade R . Se associarmos R à intensidade de nutrientes em um processo de difusão de partículas orgânicas a teoria induz a previsão de concentração dessas partículas em regiões onde o valor da resistividade é alto. Esse comportamento fica claramente demonstrado no processo de difusão em um meio anisotrópico (Fig.4 b). Comparado com o processo em um meio isotrópico (Fig.4-a) o desvio da concentração para regiões com valores de R crescente fica evidente. Maiores detalhes podem ser encontrados nas referências citadas na bibliografia.

¹ É interessante notar que os processos de deposição molecular em camadas MBE são regidos por equações semelhantes à equação (2). A dependência da densidade de assentamento no gradiente da curvatura do perfil da camada tem nesse caso uma interpretação física plausível.

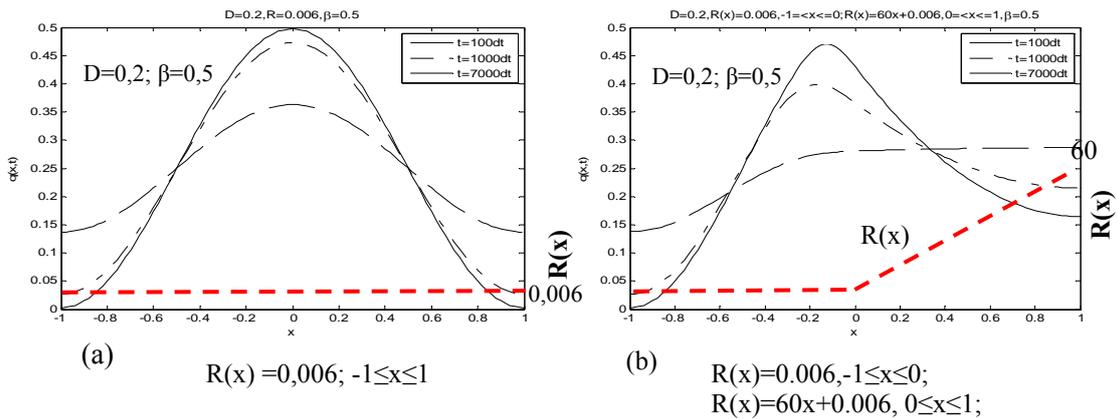


Fig.4. Evolução da concentração em meio isotrópico (a) e meio anisotrópico (b). Condição inicial $q(x,0)=0.25(1+\cos(\pi x))$. C.C. $\Psi_1(-1) = \Psi_1(1) = 0$ $\Psi_2(-1) = \Psi_2(1) = 0$

3..2. Temas a serem desenvolvidos nessa proposta a partir dos resultados expostos acima.

O estágio de investigação alcançado até agora abre grandes perspectivas de aprofundamento tanto da teoria como de aplicações em modelagem de fenômenos físicos e socioeconômicos. Na realidade o trabalho que me proponho a realizar são desdobramentos de alguns temas da teoria descrita no item 3.1 acima. Sendo a proposta muito nova há um número relativamente grande de opções. Vamos concentrar a atenção no significado físico do coeficiente de reatividade R e sua relação com o fracionamento da concentração. Outras opções, embora sejam de grande valor para o prosseguimento da teoria, como a vertente experimental não são viáveis de serem executadas no espaço de tempo programado. De qualquer forma a partir de premissas derivadas do senso comum vamos desenvolver algumas aplicações com a cooperação esperada de alguns professores da USP. Embora enraizadas em pressupostos plausíveis necessitarão de validação posterior.

3.2.1. Desenvolvimento da teoria. No que concerne ao aprofundamento teórico nos concentremos na análise da relação funcional entre os parâmetros β e R . De fato intenso trabalho no sentido de identificar a fração β e a resistividade R conhecida a evolução da concentração, problema inverso, levou à conclusão de que esses parâmetros não são independentes [14] [15]. Isto é deve existir uma relação funcional $\beta=F(R)$. Na realidade essa hipótese é natural uma vez que $\beta \neq 1$ só e só se $R \neq 0$. É de se esperar que β seja uma função decrescente de R , isto é $\beta \rightarrow 1$ quando $R \rightarrow 0$ ($0 < \beta < 1$). O tipo de função precisa ser estudado inclusive para se examinar o seu comportamento para $R \gg 0$.

É importante ainda analisar o significado físico do comportamento da concentração quando $R \rightarrow \infty$ uma vez que a teoria como está prevê congelamento do processo, ou regime estacionário $\partial p / \partial t = 0$. Essa condição pode teoricamente ocorrer com conservação de energia interna desde que se admita um processo em que as partículas acumulem uma forma de energia não conversível em trabalho nas condições normais. Se pensarmos em energia cinética essa forma de energia pode ser atribuída á energia de rotação $E_\omega = (I_\omega)^2 / 2m$ onde $I_\omega = m r / 2\pi T$ é o impulso angular com r , raio de giração, m a massa e T o período. Assim teoricamente pode-se atribuir a essa forma de energia um estado de paralisação translacional sem perda de energia que foi totalmente convertida em rotação. Um estado de repouso com máxima energia interna não

conversível que pode ser associada uma forma de entropia S_{ω} que atinge o máximo nessas condições [16]. Essas considerações são no entanto ainda muito preliminares e necessitam de aprofundamento.

Note-se que dependendo da forma da função que relaciona β com R podemos cair em uma equação diferencial não linear caso o coeficiente de resistividade seja função da concentração.

O desenvolvimento teórico descrito acima será o alvo principal de meu trabalho no período de trabalho no IEA. Farei o possível para conquistar colaboradores para enriquecer a discussão. A teoria é muito nova e por isso está aberta a contribuições originais tanto teóricas como nas aplicações. Proponho a seguir três tópicos de aplicações para os quais a teoria clássica não representa o fenômeno em sua totalidade e complexidade.

3.2.2. Aplicações. Paralelamente à análise da dependência de β com R procuraremos desenvolver modelos uni- e bidimensionais para meios anisotrópicos, $R=R(x,y)$ e anisotrópicos evolutivos $R=R(x,y,t)$. O sucesso na definição e teste dos modelos vai depender da disposição em cooperar de docentes e estudantes de outras unidades. Por isso faz parte da proposta a realização de seminários e discussões em pequenos grupos com alguns docentes interessados nos respectivos assuntos. A primeira atividade de encontros informais e seminários será dedicada a explorar os seguintes temas:

- a. Fluxo de capitais considerando a presença de fontes e sumidouros. A análise com a teoria clássica de difusão com a previsão de apenas um fluxo não é satisfatória. A equação proposta no modelo de Black e Scholes [17] na realidade é uma forma da equação clássica da difusão, admite apenas fluxo em uma direção. É de esperar que na movimentação de capitais hajam pelo menos dois fluxos que guardam certa correlação. O modelo que propomos parece mais adequado. A introdução de duplo fluxo permite a ocorrência concomitante de fluxo interno e externo, produzindo cenários de crescimento, decrescimento e estagnação [18]. A modelagem necessita de cooperação de pessoas com raízes em ciências sociais e economia.
- b. Dinâmica populacional influenciada por fatores externos que podem produzir, pelo menos em uma fração dos componentes, perturbação na direção e intensidade de fluxo. A existência de regiões com presença de nutrientes pode perturbar a movimentação de um grupo de indivíduos que se desvia do processo normal de difusão. Essa perturbação também pode ocorrer quando uma parcela de indivíduos tem atribuição diferenciada no grupo. A presença de feromônio também pode ser o motor de fluxo diferenciado. Essa linha precisaria do suporte de pessoas com expertise em biologia.
- c. Epidemiologia e doenças infecciosas também são temas apropriados para o tratamento com duplo fluxo. Em geral a modelagem do espalhamento de doenças infecciosas como malária por exemplo não considera a movimentação nem do vetor nem dos humanos. O uso do modelo clássico para a movimentação dos humanos não é satisfatória pois admite fluxo apenas em um sentido quando a movimentação de entrada e saída no espaço de potencial infecção é essencial. O tratamento com a opção de duplo fluxo torna-se portanto importante para a previsão mais próxima ao fenômeno real. Estas considerações também poderiam

ser postas para a movimentação em hospitais. Para a análise desses casos é indispensável a cooperação de pessoal com competência em saúde pública e medicina.

O primeiro tema é bastante atrativo particularmente pela sua atualidade e pelas críticas que os modelos atuais tem recebido. Inclusive a grande crise de 2008/09 é atribuída em parte pela orientação proposta nos modelos em uso. O terceiro tema tem sido foco de atenção de vários pesquisadores e tem grande importância para a definição de estratégias de saúde pública. De qualquer forma são propostas três alternativas para que se possa ter maior margem de flexibilidade na obtenção de cooperação. De fato deveremos trabalhar em apenas uma delas exceto se houver excepcional interesse de professores e estudantes.

4. Contribuição para a ampliação do leque de cooperação interdisciplinar. Seminários Mobilizadores

Não obstante haver reconhecimento, de praticamente todos os setores, de que a ciência caminha para um reagrupamento do conhecimento este fato permanece mais na área do discurso do que na prática quando se trata da organização universitária. Na própria reestruturação acadêmica, proposta nos relatórios de auto-avaliação das diversas unidades da USP, o vetor interdisciplinar fica na grande maioria dos casos internos à Faculdade ou ao Instituto. Restringe-se a uma interação interdepartamental. Assim embora em princípio não seja propriamente uma atividade de pesquisa propomos catalisar uma cooperação interdisciplinar mais intensa a partir de demonstrações da importância de modelos matemático-computacionais. A idéia é organizar uma série de seis seminários temáticos reunindo professores, pesquisadores, técnicos e estudantes com raízes em diversas áreas do conhecimento. É importante motivar pessoal de vários setores, ciências da natureza, engenharia, matemática/computação, ciências sociais, humanidades e artes entre outras para promover a troca de experiências no desenvolvimento de modelos matemáticos com aplicações em seus respectivos campos de atividades ou atender a demandas qualificadas dos setores público e privado. Em resumo trata-se de acelerar um processo que está em marcha mas que se sofrer retardos graves pode prejudicar sensivelmente a pesquisa e o processo de aprendizado.

Procuraremos atrair o interesse de pelo menos alguns professores e estudantes, talvez até mais estudantes que professores, para atuar em modelagem de sistemas biológicos e socioeconômicos. O foco será mais nas aplicações do que nos instrumentos.

Note que o principal objetivo dessa segunda atividade não é, em princípio, o desenvolvimento de um programa de pesquisa, mas de demonstrar a importância de modelos matemáticos em alguns setores do conhecimento. Eventualmente poderá ser despertado o interesse por parte de um grupo de desenvolver algum dos temas propostos nos seminários ou definidos a partir da sua motivação. Isto seria excelente e na realidade cumpriria uma das finalidades principais da expansão e uso das técnicas de modelagem.

Para iniciar o processo de estímulo à modelagem proponho realizar três seminários em tópicos que me são mais familiares [19] [20] [21] [22] e servirão de motivação para a seqüência a ser continuada por membros da comunidade acadêmica interna.

1. Propagação de epidemias (dengue, malária) considerando fluxo de humanos recuperados e infectados.
2. Dinâmica populacional de espécies ameaçadas
3. Difusão do conhecimento e de notícias veiculadas pelos meios de comunicação normais.
4. Outros seminários a serem apresentados por membros do corpo docente e estudantes da USP

Será necessário inicialmente conquistar o apoio de alguns dos pesquisadores e estudantes, inclusive de graduação, para se juntar ao projeto, pelo ideal acadêmico apenas. É muito importante acentuar que a participação de estudantes é essencial para o sucesso do projeto pois os jovens são mais abertos a novas iniciativas e aceitam melhor os riscos de novos caminhos fora da esteira em curso. É também essencial a concentração em um número restrito de temas que sejam suficientemente representativos. A modelagem matemática é abrangente e é preciso ter cuidado de evitar a dispersão.

Finalmente a experiência mostra que se alcança maior rendimento no tipo de atividade proposto quando se estabelece uma meta a ser atingida que seja o coroamento do trabalho executado e que deixe a marca permanente do esforço realizado pelos componentes do grupo. É preciso que todos os que se dispuserem a contribuir nas atividades propostas tenham o reconhecimento da comunidade acadêmica. É importante deixar um marco. A proposta é reunir as contribuições em uma publicação de caráter didático.

Resumidamente a estratégia para boa execução da proposta pode ser resumida nos seguintes pontos:

- 1. Organização de um grupo de pesquisadores, professores, estudantes e técnicos, que estejam dispostos a colaborar na seqüência de seminários.**
- 2. Definição dos temas dos seminários.**
- 3. Produção de um texto com a contribuição dos vários participantes que amplie o alcance no tempo e no espaço do trabalho executado**

5. Impactos Científicos e Sociais

A teoria de duplo fluxo é mais completa permitindo a modelagem de processos complexos reativos a partir de potenciais internos. Portanto representa um avanço na modelagem de processos difusivos. Não é apenas uma contribuição fechada mas abre caminho para varias outras análises de fenômenos de difusão. De fato os resultados quem vem sendo alcançados e que serão ampliados com o trabalho de investigação proposto abrem várias vias de desenvolvimento tanto teóricas como experimentais. Particularmente é necessário que se proponham experimentos capazes de avaliar os novos parâmetros envolvidos na teoria particularmente a resistividade R .

Por ser nova a teoria proposta não tem outras referências para comparação exigindo portanto um grande esforço para conquistar reconhecimento na comunidade tanto no Brasil como no exterior. Sem ser pretensioso afirmo que a proposta que

estamos apresentando no item 3 pode ser classificada como contribuição original ao conhecimento. Isto significa grande resistência de aceitação porque não tem referências semelhantes na literatura. O tipo de equação deduzido acima, isto é equação a derivadas parciais de quarta ordem, só encontra semelhança na descrição de fenômenos físicos distintos, como depósito de filmes finos [23], sistemas de lubrificação de eixos em rotação, acoplamento de efeitos de flexão e de membrana em estruturas para citar alguns importantes. Para problemas de difusão equações de quarta ordem aparecem em formulações não lineares a partir da consideração de termos de ordem superior na definição do potencial de difusão [24]. Esses modelos admitem sempre todos os componentes associados apenas a uma corrente de fluxo. É um modelo de fluxo monomodal complexo diferente da nossa hipótese fundamental. De fato estamos diante de uma contribuição a uma formulação de fenômenos de difusão original. A questão é determinar se constitui apenas a uma contribuição para o desenvolvimento de equações diferenciais parciais ou se de fato é uma representação mais realista de certos fenômenos químico-físicos, biológicos, evolutivos e socioeconômicos. Apesar de não ter ainda comprovação experimental considero que vários fenômenos requerem naturalmente a incorporação de fluxo bimodal. Estamos diante de um verdadeiro desafio científico, pesquisa com risco. Do sucesso da confirmação da utilidade do modelo vai depender a extensão e intensidade do impacto científico e social. Espero que seja grande mas certamente teremos que vencer resistência da comunidade acadêmica que no fundo é muito conservadora...

Outra impacto esperado é a ativação de maior intercâmbio entre unidades da USP ajudando a concretizar a atividade interdisciplinar descrita nos relatórios de auto-avaliação dos Institutos e Faculdades.

Finalmente se algumas das contribuições esperadas puderem trazer subsídios para a solução de problemas sociais teremos mais um ganho que, embora não seja garantido à priori no projeto, tem boas chances de ser alcançado.

6. Plano de trabalho

Além do trabalho individual no desenvolvimento da teoria de duplo fluxo como descrita no item Tema Catalisador, será muito útil e conveniente a conquista de parceiros que estejam dispostos a contribuir para o avanço do tema. Para isso deveremos buscar encontros informais e participação nos seminários internos de algumas unidades mais interessadas no tema de modelagem. Dessa forma expõe-se o projeto em um ambiente mais amplo contando com a presença não só de docentes mas também de estudantes. Portanto será feita a escolha das unidades mais receptivas a partir de contatos com alguns docentes que se mostrarem mais abertos à colaboração.

Como foi destacado na estratégia de implantação do projeto é necessário ou pelo menos muito conveniente que se persiga um produto concreto que torne permanente a iniciativa e registre a contribuição de cada participante. Como já referido propomos que esse produto seja uma publicação orientada para modelagem matemática e computacional aplicada. Assim tanto os resultados obtidos a partir do tema catalisador como dos temas complementares constituindo as várias aplicações desenvolvidas em alguns dos seminários comporão um livro ou publicação interna com vários autores que será muito útil para todos os que se interessarem pela arte de modelar.

Serão organizados seminários regulares para acompanhar o desenvolvimento dos trabalhos que darão origem às diversas seções da publicação. Os seminários conforme descritos na seção seguinte são organizados de forma a permitirem a particularização

temática mas sem perder a visão mais ampla do conjunto. Portanto não são encomendas isoladas mas reunidas em torno de um núcleo comum.

7. Cronograma

As tarefas propostas acima serão desenvolvidas conforme o cronograma abaixo em intervalos bimensais.

Item	Intervalo bimensal					
	1-2	3-4	5-6	7-8	9-10	11-12
1						
2						
3						
4						
5						

1. Busca das unidades mais receptivas e dos contatos para desenvolvimento dos trabalhos de investigação, seja no tema catalisador ou em outros dentro do escopo do projeto.
2. Desenvolvimento do núcleo central da pesquisa compreendendo a difusão com fluxo duplo, tema catalisador, com aplicações.
3. Definição dos temas de interesse para apresentação nos seminários mobilizadores.
4. Organização dos seminários mobilizadores.
5. Elaboração dos textos finais para edição e publicação.

Note que a seqüência de seminários do item 2 reúne todos os que estarão contribuindo para a publicação. As discussões poderão extrapolar os conteúdos a serem publicados. Tem intenção de ser um filtro científico e didático de modo a uniformizar o texto. A seqüência de seminários em 4 refere-se aos temas específicos.

8. Elaboração de Trabalhos Científicos (papers, livros, anais e outros)

Além de trabalhos a serem publicados em revistas científicas e de engenharia será preparada a publicação de uma publicação cujo título preliminar é:

Modelos Matemático-Computacionais Aplicados.

Além de uma introdução à modelagem matemática computacional constituindo o primeiro capítulo os demais abordarão problemas específicos explorados nos seminários. Deverá ser escrito de modo a ser acessível a estudantes de graduação dispostos a enfrentar novos desafios. Sempre que possível será dada ênfase a aplicações que possam auxiliar na solução de problemas concretos.

Espera-se conseguir pelo menos dez contribuições. O volume deve reunir cerca de 300 páginas. A publicação fará parte da produção do IEA/USP.

9. Bibliografia

- [1] Melnik R. **Mathematical and Computational Modeling: With Applications in Natural and Social Sciences, Engineering, and the Arts**, Eds, Wiley, 2015
- [2] Murray, J D **Mathematical Biology I : Introduction**, Springer, 2002
- [3] Murray, J D **Mathematical Biology II : Spatial Models and Biomedical Applications**, Springer, 2003
- [4] Volk A., Honingh A. *Mathematical and computational approaches to music: challenges in an interdisciplinary enterprise*, Journal of Mathematics and Music, 6:2, 73-81, 2012
- [5] Mesterton-Gibbons, M., **A concrete approach to mathematical modelling**, John Wiley & Sons, Inc., 1995
- [6] Gershenfeld N., **The nature of mathematical modeling**, Cambridge University Press, 1999
- [7] Ross S. M., **Introduction to Probability Models**, Academic Press, 1993
- [8] Van Noorden, Richard, *Interdisciplinary Research by the Numbers*, NATURE, 17 September 2015 , vol. 525 pp 307
- [9] CENTRO DE GESTÃO E ESTUDOS ESTRATÉGICOS – CGEE. **Mestres e doutores 2015 - estudos da demografia da base técnico-científica brasileira**. Brasília, DF: 2016. 312p.
- [10] Riedel, C., Gabizon, R., Wilson, C.A.M., Hamadan, K., Konstantinos, T., Marqusee, S.P., Bustamente, C., *The heat released during catalytic turnover enhances the diffusion of an enzyme*, Nature, **517**, 227-230 (2015)
- [11] L.Bevilacqua, A.C.N.R.Galeão, F.P.Costa., *On the significance of higher order terms in diffusion processes*, J Braz. Soc. Mech. Sci. Eng. 34 (2011) 166-175.
- [12] L.Bevilacqua., A.C.N.R Galeão, F.P.Costa, An. Acad. Bras. Ciênc. *A new analytical formulation of retention effects on particle diffusion processes*, 83 (4) (2011) 1443-1464.
- [13] L.Bevilacqua., A.C.N.R.Galeão. J.G.Simas, A.P.R.Doce, *A new theory for anomalous diffusion with a bimodal flux distribution* J Braz. Soc. Mech. Sci. Eng. 35 (2013) 431–440.
- [14] L.G.Silva, D.C.Knupp, L.Bevilacqua, A.C.R.Galeão, A.J. Silva Neto, *Inverse Problem in Anomalous Diffusion with Uncertainty Propagation*, Computer Assisted Methods in Mechanics and Science, 21: 245–255, 2014 ISSN 2299-3649

- [15] Jairo R. de Faria, Ana P. P. Wyse, Antonio J. B. dos Santos, Luiz Bevilacqua, Flavio P. Costa, *Second Order Topological Derivative for the Inverse Problem in Diffusion with Retention*, CILAMCE 2015, PUC-RJ, 22-25 Nov 2015
- [16] L. Bevilacqua, M. Jiang, A. Silva Neto, A.C.R.N. Galeão, *An Evolutionary Model of Bi-Flux Diffusion Processes*, J Braz.Soc.Mech.Sci.Eng. (2016)
- [17] Black, Fischer; Myron Scholes (1973). "*The Pricing of Options and Corporate Liabilities*". Journal of Political Economy 81(3): 637–654. doi:10.1086/260062
- [18] L. Bevilacqua, *A second order diffusion model with application in capital flow*, conferência, seminário internacional, O Papel do Estado no Século XXI, desafios para gestão pública, ENAP, Min Planejamento, setembro 2015.
- [19] Wyse, A.P., Bevilacqua, L., Rafikov, M. "*Malaria spreading under the effects of seasonal fluctuation and different classes of health care*", Ecological Modeling, vol. 206, issue 3-4, August 2007, Pg. 322-330
- [20] Rafikov, M ; Bevilacqua, L. ; Wyse, A . "*Optimal control strategy of malaria vector using genetically modified mosquitoes*". Journal of Theoretical Biology, accepted for publication, 2008.
- [21] Coutinho, E.S.S , Bevilacqua L., Queiroz, H.L., *Population Dynamics Modeling Of Arapaima Gigas*, Acta Amazonica, Vol. 40(2) 2010: 333 - 346
- [22] Bevilacqua, L. Galeão, A. C. N. R.. Pietrobon-Costa, F., *Knowledge Diffusion and Transferring in a Research Chain: Paths, Retention and Velocity Influences*, CILAMCE 2015., PUC-RJ, 22-25 Nov 2015
- [23] Barabási A.L., Stanley H.E., **Fractal Concepts in Surface Growth**, Cambridge University Press, 1995
- [24] Cohen DS, Murray JM ,*A generalized model for growth and dispersal in a population*. J Math Biol 12:237–249, (1981)