

HENRIQUE OLIVEIRA LEIRAS DA MOTA

**DINÂMICA DE POPULAÇÕES EM ESPÉCIES ALELOPÁTICAS: UM
MODELO HÍBRIDO DE AUTÔMATOS CELULARES**

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Viçosa como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Física, para obtenção do título *Magister Scientiae*

Orientador: Marcelo Lobato Martins.

**VIÇOSA - MINAS GERAIS
2020**

**Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Central da Universidade
Federal de Viçosa - Campus Viçosa**

T

M917d
2020 Mota, Henrique Oliveira Leiras da, 1996-
Dinâmica de populações em espécies alelopáticas : um
modelo híbrido de autômatos celulares / Henrique Oliveira
Leiras da Mota. – Viçosa, MG, 2020.
65 f. : il. (algumas color.) ; 29 cm.

Inclui apêndice.

Orientador: Marcelo Lobato Martins.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Viçosa.

Referências bibliográficas: f.62-65.

1. Ecologia - Modelos matemáticos. 2. Dinâmica
populacional. 3. Autômato celular. 4. Padrões. I. Universidade
Federal de Viçosa. Departamento de Física. Programa de
Pós-Graduação em Física. II. Título.

CDD 22. ed. 577.015118

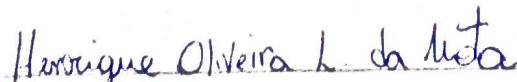
HENRIQUE OLIVEIRA LEIRAS DA MOTA

**DINÂMICA DE POPULAÇÕES EM ESPÉCIES ALELOPÁTICAS: UM
MODELO HÍBRIDO DE AUTÔMATOS CELULARES**

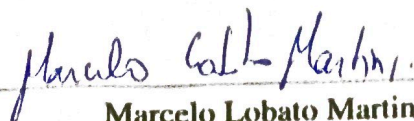
Dissertação apresentada à Universidade Federal de Viçosa como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Física, para obtenção do título *Magister Scientiae*

APROVADA: 4 de agosto de 2020.

Assentimento:



Henrique Oliveira Leiras da Mota
Autor



Marcelo Lobato Martins
Orientador

Agradecimentos

Gostaria de agradecer, primeiro, aos meus pais, que me apoiaram desde sempre na decisão de fazer física, e conseguiram me sustentar em Viçosa durante todo o meu período de graduação. Sem o apoio deles seria impossível ter chegado onde cheguei, portanto tento exprimir aqui meus sinceros agradecimentos a eles. Em seguida, gostaria de agradecer a todas aquelas pessoas que entraram em minha vida nesses seis anos, e conseguiram me transformar de alguma forma em uma pessoa melhor - amigos que fiz ao longo do curso, colegas de república, minha namorada; acredito que sem eles eu não conseguiria lidar com todas as adversidades que a vida universitária nos traz. Agradeço também aos professores do departamento que consegui ter uma conversa para além da Universidade, em especial, ao Jakson, Álvaro Vianna e Oswaldo, que escutaram muitas reclamações minhas sobre a vida e a universidade.

E por fim, gostaria de agradecer ao meu professor e orientador Marcelo Lobato, que me deu a oportunidade de trabalhar em algo que, há seis anos, eu nunca imaginaria que poderia trabalhar, e que quando tive contato, me apaixonei completamente. Modelar sistemas biológicos, seja de forma computacional ou matemática, é algo que acredito ser minha grande paixão nesse universo gigantesco chamado física. Se algum dia eu voltar a fazer pesquisa em física, espero do fundo do meu coração que seja nesta área.

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

Resumo

MOTA, Henrique Oliveira Leiras da, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, agosto de 2020. **Dinâmica de Populações em Espécies Alelopáticas: Um Modelo Híbrido de Autômatos Celulares.** Orientador: Marcelo Lobato Martins.

Alelopatia é a capacidade de plantas, fungos, bactérias e outros organismos secretarem uma toxina no ambiente, muitas vezes inibindo o crescimento de outros indivíduos. Como já bem documentado na literatura, através desse mecanismo, espécies invasoras conseguem suprimir espécies nativas, enquanto prejudica a biodiversidade local. Para entender melhor interações alelopáticas e os fenômenos emergentes que a seguem, este trabalho propõe um modelo baseado em agentes que simula interações entre um determinado número de espécies alelopáticas. Com o modelo proposto, foi possível verificar a sensibilidade destes sistemas quanto ao número de espécies envolvidas e como elas se relacionam, condições iniciais espaciais e intensidade da alelopatia (através da constante de difusão da toxina). Foi observado que em determinadas configurações há organização espacial característica entre as espécies com o intuito de proteger umas as outras, podendo ou não gerar coexistência entre todas as espécies. Observou-se também que muitas vezes a disposição espacial inicial dos espécimes atua mais como um dificultador para se atingir um estado de equilíbrio.

Palavras-chave: Alelopatia. Dinâmica de Populações. Autômatos Celulares. Formação de Padrões.

Abstract

MOTA, Henrique Oliveira Leiras da, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, August, 2020. **Population Dynamics in Allelopathic Species: A Hybrid Model of Cellular Automata.** Adviser: Marcelo Lobato Martins.

Allelopathy is the ability of some plants, fungi, bacteria and other organisms to secrete a toxin into the surroundings, many times injuring other individuals. It is already known in literature that alien species can use this mechanism to suppress natives organisms, harming local biodiversity. In order to understand allelopathics interactions and the emerging phenomena that follow it, the present work proposes an agent based model that simulates the interaction of a specified number of allelopathic species. With this model, it was possible to verify that systems are sensible to the number of species involved and how they interact, as well as initial spatial conditions and allelopathic intensity (using toxin diffusion constant). It was observed that some configurations have spatial organization between species, protecting each other, resulting or not in coexistence of them all. It was also concluded that initial conditions often make it harder for the system to get into a steady state, acting like an obstacle.

Keywords: Allelopathy. Population Dynamics. Cellular Automata. Pattern Formation.

Sumário

1	Introdução	8
2	Fundamentos de Ecologia e Dinâmica de Populações	11
2.1	Interações Ecológicas	11
2.1.1	Competições Alelopáticas	13
2.2	Modelos Matemáticos em Dinâmica de Populações	14
2.2.1	Os Modelos Malthusiano e Logístico	14
2.2.2	Os Modelos de Lotka-Volterra	15
3	Modelos Baseados em Agentes e a Equação de Difusão	20
3.1	Modelos Baseados em Agentes	20
3.1.1	Autômatos Celulares	21
3.1.2	Modelos Híbridos	22
3.2	Equação de Difusão	23
3.2.1	Solução da Equação de Reação-Difusão	24
4	Modelo de Competição Alelopática	27
4.1	Modelo de Múltiplas Escalas	27
4.2	Descrição do Modelo	27
5	Dinâmica Populacional entre Espécies Alelopáticas	30
5.1	Quatro Espécies	31
5.2	Cinco Espécies	37
5.3	Diagramas de Fase e Transições Morfológicas	45
5.4	Extinção e Coexistência em Interações Cíclicas	48
5.5	Discussões Gerais	51
6	Conclusões e Perspectivas	56
A	Sistemas Dinâmicos	58
A.1	Sistemas de Primeira Ordem	58
A.2	Sistemas de Segunda Ordem	59
A.2.1	Sistemas Lineares	59

A.2.2	Sistemas Não-lineares	60
-------	---------------------------------	----

Capítulo 1

Introdução

Em 1944 o físico Erwin Schrödinger publicou suas ideias sobre a biologia em um trabalho cujo título é uma pergunta ontológica, uma instigação derradeira: "O que é vida?"[39]. Schrödinger ainda evidenciou indiretamente o quão engrandecedora pode ser a experiência de um cientista ao sair de sua zona de conforto e dar uma nova óptica a outras áreas do conhecimento. De fato, muito se fala sobre "interdisciplinaridade", e como ela está frequente na ciência atualmente [29, 41].

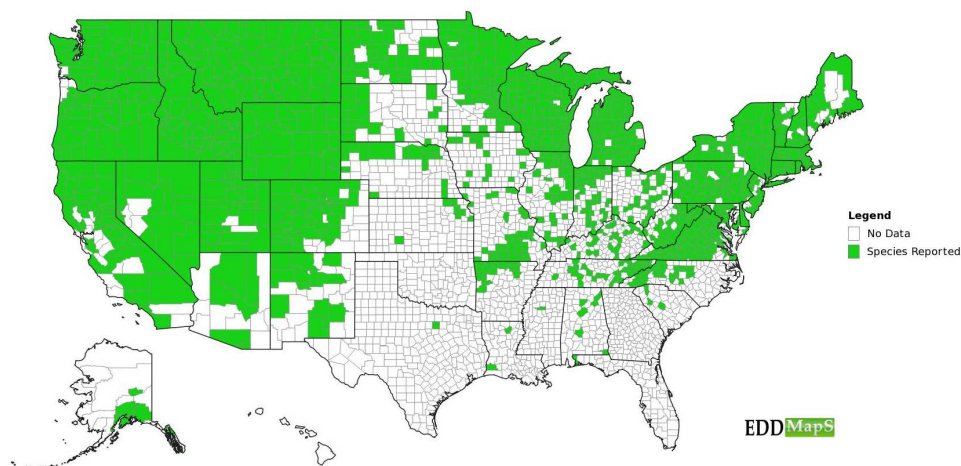
O intercâmbio de conhecimento entre as mais diversas áreas possibilita a resolução de problemas que até então pareciam estagnados. Na perspectiva de Robinson *et al.* [35], a biologia, por exemplo, aliada a outras áreas do conhecimento, pode se tornar capaz de elucidar questões fundamentais sobre como seres vivos respondem a mudanças no meio onde estão inseridos. Este assunto é de extrema relevância nos dias atuais, em que a sociedade enfrenta problemas como aquecimento global, desmatamento, extinção de espécies, entre outros problemas gerados por origem antrópica. Segundo Vidal [45], a modelagem computacional e matemática são ferramentas importantes para entender as nuances destes problemas, que abrangem desde aspectos químicos de uma célula, até fenômenos macroscópicos emergentes, como interações entre comunidades distintas de seres vivos.

Ainda em biologia, um evento de relevância social, ambiental e econômica que pode ser melhor entendido com estudo multidisciplinar é a chamada "invasão biológica". Esse nome é dado a situações em que uma espécie de um organismo vivo é transportada para uma área diferente de seu habitat natural, e neste novo ambiente a espécie estrangeira (ou invasora) se prolifera e compete fortemente com as espécies nativas. Embora haja um crescente movimento negacionista sobre o impacto negativo das espécies invasoras [36], trabalhos semelhantes ao de Lau [26] evidenciam que essas interações podem levar à redução da biodiversidade de um habitat, prejudicando também a região nos aspectos social e econômico. Uma observação a ser feita é que no contexto de invasão biológica em seres vivos, as invasões têm sido intensificadas por ações antrópicas, isto é, as espécies invasoras têm sido transportadas por seres humanos, acelerando o que antes era um processo natural chamado migração.

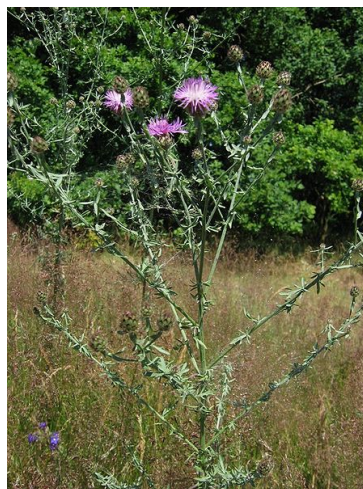
Há varios exemplos ao redor do mundo de espécies invasoras que se acomodaram em seus

novos habitats, causando danos às espécies nativas, como as ervas *Centaurea stoebe* [8] e *Centaurea diffusa* [40], javalis [22], pombos [19], entre outros. Os dois últimos, além de competirem por recursos, também são vetores de doenças, comprometendo a saúde de espécies nativas que nem compartilham dos mesmos recursos. Já as ervas *Centaurea*, da família Asteracea, a mesma do girassol, utilizam-se de um mecanismo diferente para ganharem vantagem no novo habitat: produzem uma substância química [3] que se dispersa pelo solo, envenenando as plantas nativas - matando-as ou impedindo-as de germinar e/ou crescer. Esse processo é chamado de alelopatia ou competição alelopática [9]. Na figura 1 é mostrado a *Centaurea stoebe* e o avanço dela no território americano.

Figura 1: A *Centaurea stoebe* é natural da Europa oriental e chegou nos litorais leste e oeste norte-americanos no final do século XIX e se alastrou para dentro do continente, matando parte da vegetação nativa através de supressão alelopática. (a) Mapa da Invasão e (b) imagem típica da espécie invasora.



(a) Lugares onde foi encontrada a espécie *Centaurea stoebe* ao longo dos Estados Unidos. O mapa está incompleto e foi baseado em dados do site eddmmaps.org e de relatórios feitos por especialistas. Fonte: EDD Maps, 2019.



(b) *Centaurea stoebe*. Fonte: Kristian Peters, Wikimedia Commons.

No Brasil, uma espécie alelopática que prejudica a biodiversidade local é a *Hedychium coronarium*, popularmente conhecida como lírio-do-brejo. Nativa da região do Himalaia, esta macrófita aquática (planta habituada a viver submersa ou flutuando na água por pelo menos um período de tempo no ano) é facilmente encontrada nas Américas [37]. As toxinas são expelidas junto ao óleo essencial, pelas folhas e rizossoma, tornando-a uma espécie agressiva, com potencial de extermínio da vegetação nativa [33].

Para entender melhor os mecanismos e as consequências da competição alelopática é possível modelá-la com métodos matemáticos e computacionais. Para isso, é razoável assumir, por exemplo, que a função resposta de uma planta a uma fitotoxina produzida por uma espécie alelopática se comporta como uma sigmóide, isto é, para baixas concentrações a função resposta¹ é baixa ou nula, e para altas concentrações há uma saturação [2]. Tendo como base a resposta de cada indivíduo, através de simulações computacionais é possível ter uma perspectiva macroscópica de como é a dinâmica entre comunidades de plantas distintas, revelando padrões espaciais característicos. [11]

Neste trabalho, será apresentado um modelo computacional para competições alelopáticas entre plantas de diversas espécies. No Capítulo II faremos uma breve revisão sobre importantes conceitos em ecologia para a compreensão deste trabalho. Discutiremos qualitativamente interações interespecíficas e intraespecíficas entre seres vivos, dando ênfase à competição alelopática. Por fim apresentaremos alguns dos mais importantes modelos matemáticos em dinâmica de populações evidenciando as interações ecológicas por trás delas.

No Capítulo III apresentaremos as características computacionais gerais do modelo proposto e uma discussão sobre a equação de difusão, que será usada no modelo para a dispersão das toxinas. Evidenciaremos ainda a existência dos chamados "modelos híbridos", que mesclam a dinâmica em reticulados (espacial e temporalmente discretos) com equações diferenciais. No Capítulo IV definiremos um modelo "de múltiplas escalas" e descreveremos detalhadamente o modelo proposto para a competição alelopática entre espécies de plantas.

Nos capítulos subsequentes apresentaremos os resultados obtidos por simulação para diferentes condições iniciais, tamanhos de rede, parâmetros de difusão, e ainda discutiremos as particularidades de cada caso, evidenciando as diferenças entre cada situação. Por fim concluiremos o trabalho ressaltando os pontos mais importantes e expondo as contribuições originais deste trabalho para a academia.

¹No contexto deste trabalho, a função resposta da planta é como ela reagirá à fitotoxina. Consequentemente, a função resposta está associada com a facilidade ou não de uma planta morrer ou germinar por conta das toxinas no solo.

Capítulo 2

Fundamentos de Ecologia e Dinâmica de Populações

2.1 Interações Ecológicas

Na natureza pode-se observar que diferentes indivíduos (da mesma espécie ou não) interagem entre si das mais diversas formas. Essas interações podem ser classificadas em relação aos efeitos (positivos ou negativos) nos indivíduos, ou quanto a espécies dos envolvidos (se são da mesma espécie ou de espécies diferentes). A sobrevivência dos seres vivos e, conseqüentemente, a biodiversidade de um local, são resultados destas interações. Nesta breve revisão literária nos inspiraremos em Begon *et al.* [4] e classificaremos as interações em quatro categorias: predação, parasitismo, mutualismo e competição. Ressaltamos, porém, que existem mais interações na natureza que não podem ser enquadradas nestas categorias.

A predação ocorre quando um indivíduo de uma espécie (predador) mata e se alimenta de um indivíduo de outra espécie (presa). Essa interação está vinculada diretamente com o controle de população das espécies e com a pressão seletiva, que seleciona as presas com melhores características anti-predatórias ou técnicas defensivas.

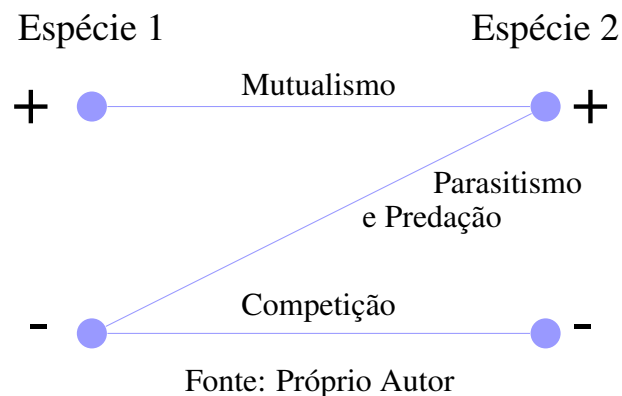
O parasitismo, por sua vez, ocorre quando um indivíduo de uma espécie (parasita) vive em um indivíduo de outra espécie (hospedeiro), o prejudicando de alguma forma. O parasita se alimenta do próprio hospedeiro ou dos nutrientes ingeridos por ele (como em casos de parasitas intestinais). Tanto a predação quanto o parasitismo têm uma conseqüência positiva em um indivíduo e negativa no outro.

O mutualismo facultativo (ou protocooperação) é a interação entre um grupo de indivíduos (da mesma espécie ou não) que visa beneficiar todos. Um exemplo intraespecífico (entre indivíduos da mesma espécie) é a formação de matilhas, que aumenta as chances de sobrevivência de cada lobo. Um exemplo interespecífico (entre indivíduos de espécies diferentes) são as interações existentes entre muitos mamíferos e aves - os pássaros se alimentam de carrapatos e outros parasitas que vivem em muitos mamíferos, como búfalos. Já o mutualismo obrigatório é

a interação benéfica obrigatória entre indivíduos, isto é, os indivíduos não conseguem sobreviver separados. Um exemplo desta relação são os chamados líquens, conjuntos de fungos (que oferecem proteção) e algas (que oferecem alimento gerado por fotossíntese).

A competição, por fim, é a interação entre indivíduos (da mesma espécie ou não) por recursos - como água, luminosidade, comida, espaço físico, entre outros. Todos os indivíduos precisam de recursos para crescerem e se reproduzirem, porém os recursos em um meio são finitos. É uma interação prejudicial a todos os envolvidos, que pode resultar na diminuição da taxa de natalidade e aumento da taxa de mortalidade das espécies competidoras. A competição, assim como a predação, também está intimamente ligada com a seleção natural - a princípio, apenas os mais competentes em obter recursos sobrevivem.

Figura 2: Diagrama de interações interespecíficas. O sinal positivo significa que a interação é benéfica e o negativo que é prejudicial.



Como resultado da competição entre espécies, enuncia-se o Princípio da Exclusão Competitiva: se duas espécies diferentes (i) ocupam o mesmo nicho ecológico¹ e (ii) ocupam o mesmo espaço geográfico, a melhor competidora continuará a existir, enquanto a outra é levada à extinção [21]. Ou, de uma forma mais genérica, "competidores completos não podem coexistir". Esse princípio é facilmente verificado com modelos ecológicos-matemáticos, porém dificilmente observado na natureza; isto porque devido a alta competitividade, o que acontece na prática é uma das espécies sendo forçada a mudar de nicho ecológico - resultando em mudanças comportamentais e/ou morfológicas. Para melhores discussões sobre o Princípio da Exclusão Competitiva, ver Begon *et al.* [4] e Hardin [21].

¹Quando nos referirmos a nicho ecológico, queremos evidenciar o papel funcional da espécie na cadeia alimentar, desconsiderando condições abióticas; para melhor compreensão do termo, consultar Elton [14]. Hoje, a definição de nicho ecológico é mais abrangente e se refere a todos os fatores do ambiente agindo sobre um organismo.

2.1.1 Competições Alelopáticas

Alelopatia é a capacidade que algumas espécies de plantas, fungos, bactérias e algas têm de produzir e liberar toxinas no ambiente. Indivíduos alelopáticos utilizam desse recurso para obter vantagem em competições por espaço e nutrientes, ou como mecanismo de defesa de predadores. Quando o termo alelopatia foi enunciado pela primeira vez por Molisch, em 1937 [34], deu-se a entender que além de prejudiciais, as toxinas produzidas poderiam ser estímulos para outras espécies; porém, neste trabalho, sempre que nos referirmos a alelopatia, uma espécie está sendo prejudicada.

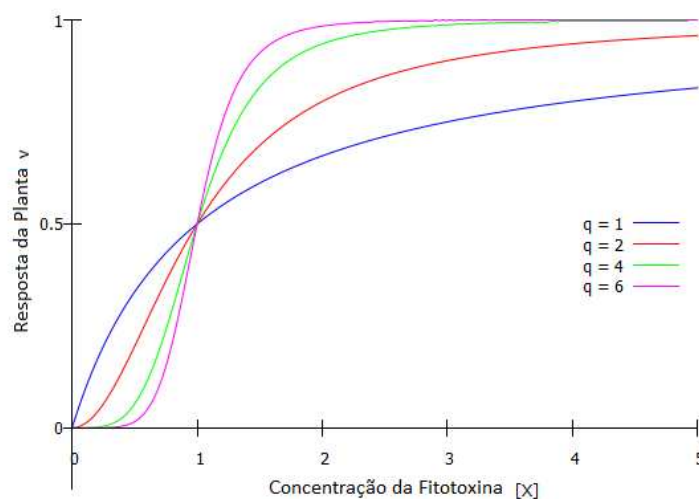
Em muitas plantas as fitotoxinas são secretadas através das raízes para o solo, onde são absorvidas (também pelas raízes) por outras plantas. As plantas que apresentarem sensibilidade à fitotoxina secretada sofrem alterações na sua expressão gênica, inibindo a produção de algumas proteínas, levando enfim à morte de alguns sistemas da planta, ou dela inteira. [3].

A função resposta de plantas susceptíveis às fitotoxinas pode ser modelada com a sigmóide:

$$v = \frac{v_m [X]^q}{K_c^q + [X]^q} \quad (1)$$

sendo $[X]$ a concentração da fitotoxina, v a função resposta da planta, v_m a função resposta à concentração de saturação, K_c a concentração tal que $v = v_m/2$, e q uma constante que ajusta a curva para que o modelo se aproxime dos dados observados em cada situação. De acordo com An *et al.* [2], a motivação de utilizar esta curva é que ela aparece recorrentemente em problemas de biologia que indicam respostas fisiológicas, como por exemplo, a velocidade de reação de uma enzima por concentração de moléculas de enzima em um substrato. Gráficos típicos da resposta sigmoideal expressa pela equação 1 são ilustrados na figura 3.

Figura 3: Resposta da planta em função da concentração da fitotoxina, dada pela equação 1, com os parâmetros $K = 1$ e $v_m = 1$. Para $q = 1, 2, 4$ e 6 , conforme ilustrado no gráfico. As curvas se interseccionam no ponto $(K_c, v_m/2)$.



Fonte: Imagem adaptada de An *et al.* [2]

2.2 Modelos Matemáticos em Dinâmica de Populações

Compreender como as populações das diversas espécies de seres vivos crescem e decrescem ao longo do tempo se apresenta como um grande desafio. Diversos pesquisadores elaboraram modelos matemáticos para descrever estes fenômenos, e alguns dos mais conhecidos serão apresentados nas próximas seções, com uma breve análise de suas vantagens, objetivos e limitações de aplicação.

2.2.1 Os Modelos Malthusiano e Logístico

Um dos primeiros trabalhos sobre dinâmica de populações foi o de Thomas Robert Malthus [32], de 1798, que evidenciava um crescimento de razão geométrica na população de humanos, enquanto a produção de comida crescia numa razão aritmética. Malthus afirmou que a população entraria em colapso, devido a falta de suprimentos, e apresentou possíveis soluções para esse problema, como o controle da taxa de natalidade da população. Este simples modelo de crescimento pode ser resumido na expressão:

$$\begin{aligned}\frac{dN(t)}{dt} &= rN(t) \\ N(t) &= N_0 e^{rt}\end{aligned}\tag{2}$$

sendo $N(t)$ a população, N_0 a população inicial, t o tempo, e r a chamada taxa de crescimento populacional, definida como a subtração entre a taxa de natalidade e a taxa de mortalidade (per capita). Neste modelo, considera-se que o único recurso necessário para o crescimento populacional é alimento, e que, por crescer em razão aritmética, era ilimitado. Foi verificado décadas depois que o crescimento real da população de humanos não segue o exponencial previsto por Malthus. Este modelo ignora a competição intraespecífica por recursos (alimentos, espaço físico), e numa primeira aproximação pode ser observado em bactérias em condições favoráveis. Porém na natureza não há recursos ilimitados, e é preciso levar em consideração a competição entre indivíduos da mesma espécie por recursos.

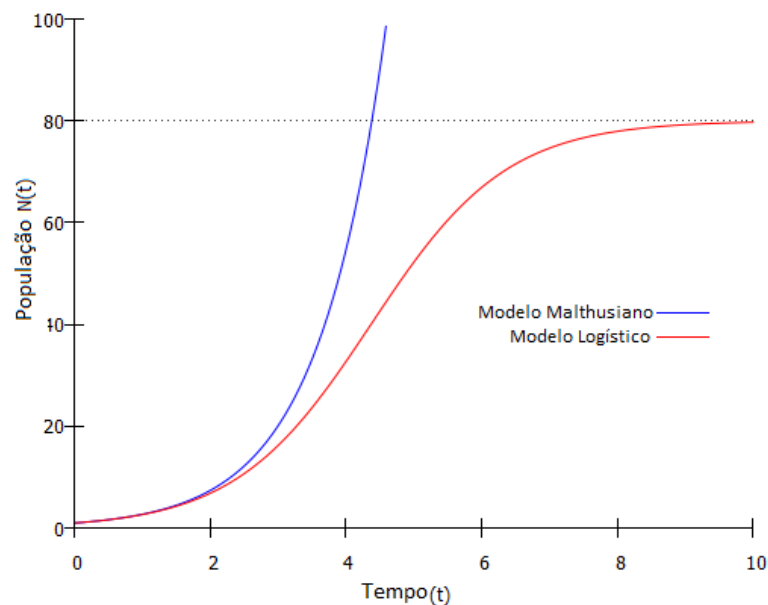
Verhulst, em 1838 [44], publicou seu modelo que levava em consideração a competição intraespecífica. Para isso, ele assumiu que a taxa de crescimento populacional r da equação 2 variasse com $N(t)$. Essa variação é de tal forma que, para $N(t)$ pequeno, o crescimento é semelhante ao exponencial, e para $N(t)$ grande o suficiente, a taxa de crescimento é nula, resultando numa saturação em $N(t) = K$, isto é, uma população máxima representada pela letra K , também chamada de capacidade de suporte. Matematicamente:

$$\begin{aligned}\frac{dN(t)}{dt} &= rN(t) \left(1 - \frac{N(t)}{K}\right) \\ N(t) &= \frac{K}{1 + \left(\frac{K-N_0}{N_0}\right) e^{-rt}}\end{aligned}\tag{3}$$

sendo r a nova taxa de crescimento populacional. Este modelo tem sucesso em descrever crescimentos populacionais diversos [13, 24].

De forma objetiva, no modelo exponencial a população cresce infinitamente, pois o modelo considera que os recursos são infinitos e não há efeito de competição intraespecífica. Já no modelo logístico, quando a população é pequena (muito abaixo da capacidade de suporte), há poucos limites para o seu crescimento, e ela cresce exponencialmente. A medida que a população se aproxima da capacidade de suporte, a competição intraespecífica se torna mais intensa, seu crescimento fica limitado pelos recursos finitos, e o crescimento diminui até a população estabilizar.

Figura 4: Comparação dos modelos de crescimento populacional de Malthus e logístico dado pelas equações 2 e 3 com os parâmetros $r = 1$, $N_0 = 1$ e $K = 80$.



Fonte: Próprio autor.

Uma última ponderação a ser feita acerca desses dois modelos é sobre seus pontos fixos, e portanto, sobre suas dinâmicas (ver Apêndice A). O modelo de Malthus tem apenas um ponto fixo, que é instável em $N = 0$, portanto a dinâmica deste sistema evolui indefinidamente. Já o modelo logístico tem dois pontos fixos, um instável em $N = 0$ e outro estável em $N = K$, portanto o sistema tende a evoluir para a capacidade de suporte, um estado estacionário. Estes dois resultados são evidenciados na figura 4. A versão discreta do modelo logístico (mapa logístico) tem uma dinâmica mais rica e complexa, apresentando atratores estranhos e caos para diferentes valores de r . Para uma discussão detalhada sobre esse assunto, ver referência [42].

2.2.2 Os Modelos de Lotka-Volterra

Os modelos até agora citados dizem respeito à dinâmica de população de apenas uma espécie. Mas como visto na seção 2.1, na natureza espécies diferentes interagem de forma que a

existência de uma influencia fortemente na da outra. O matemático Vito Volterra e o biofísico Alfred J. Lotka, separadamente e no ano de 1925, publicaram trabalhos semelhantes modelando a dinâmica de populações de duas espécies diferentes que interagem através da predação [30, 46].

O modelo de Lotka-Volterra para predação parte dos seguintes pressupostos: (i) na ausência do predador a presa tem um crescimento exponencial; (ii) na ausência de presa o predador tem um decaimento exponencial; (iii) o efeito de predação tem um impacto no decrescimento da presa e no crescimento do predador por um fator proporcional tanto à população de presa, quanto a de predador (esta hipótese considera que não há interferência entre predadores para achar presas, e que toda morte de uma presa contribui identicamente para o crescimento da população de predadores). Assumindo isso, chegamos no sistema de equações não-lineares:

$$\frac{dU}{dt} = f(U, V) = \alpha U - \gamma UV, \quad \frac{dV}{dt} = g(U, V) = \epsilon UV - \beta V \quad (4)$$

sendo U a população de presas, V a população de predadores, t o tempo, α a taxa de crescimento de U , β a taxa de decrescimento de V , e γ e ϵ são constantes associadas às respostas das populações à predação. Note que esse sistema de equações tem como pontos fixos os pares ordenados $(U, V) = (0, 0)$ - o estado estacionário trivial, e (U^*, V^*) , sendo $U^* = \frac{\beta}{\epsilon}$ e $V^* = \frac{\alpha}{\gamma}$. A matriz jacobiana deste sistema aplicado no segundo ponto fixo (U^*, V^*) é dado por:

$$J^* = \begin{pmatrix} \frac{\partial f(U, V)}{\partial U} & \frac{\partial f(U, V)}{\partial V} \\ \frac{\partial g(U, V)}{\partial U} & \frac{\partial g(U, V)}{\partial V} \end{pmatrix}_{(U^*, V^*)} = \begin{pmatrix} 0 & -\gamma U^* \\ \epsilon V^* & 0 \end{pmatrix} \quad (5)$$

Note que o traço de J^* será sempre nulo e o determinante positivo, para quaisquer valores de α, β, γ e ϵ . Como o sistema 4 é não-linear, não podemos afirmar, a princípio, se as soluções sempre serão periódicas ou se as soluções decairão para o estado estacionário de forma oscilatória. (Ver apêndice A)

Com a solução numérica do sistema é possível ver que as soluções são periódicas, como evidenciadas na figura 5. Portanto, conclui-se que para quaisquer valores que os parâmetros assumirem, e quaisquer condições iniciais (com exceção do ponto $(0, 0)$), as populações de presa e predador oscilarão.

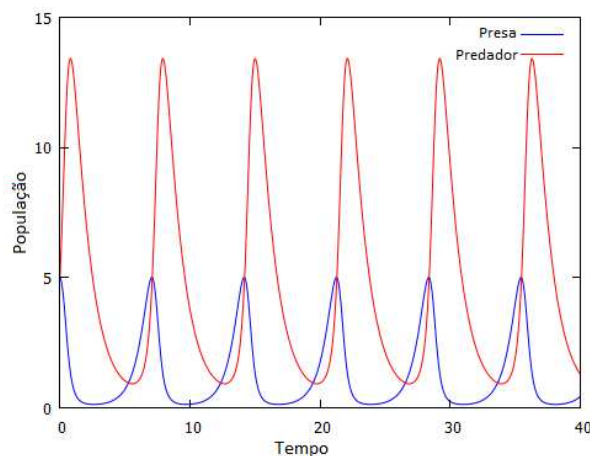
Um meio de se adaptar as equações 4 para levar em consideração a competição intraespecífica no modelo de predação de Lotka-Volterra é adicionando um termo semelhante ao da equação 3. Esta modificação leva a grandes mudanças na dinâmica do modelo - novos pontos fixos com estabilidades distintas aparecem, resultando em um sistema com sensibilidade às condições iniciais. Para uma abordagem aprofundada, ver referência [12].

Para modelar a competição interespecífica, pode-se assumir que essa interação se dá exatamente igual à competição intraespecífica (equação 3). Esse modelo também leva o nome de Lotka-Volterra:

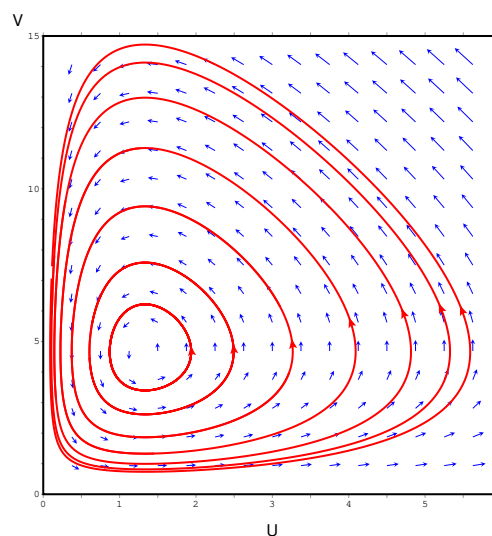
$$\frac{dU_1}{dt} = r_1 U_1 \left(1 - \frac{U_1 + \alpha U_2}{K_1} \right), \quad \frac{dU_2}{dt} = r_2 U_2 \left(1 - \frac{U_2 + \beta U_1}{K_2} \right) \quad (6)$$

sendo U_i , r_i , K_i a população, taxa de reprodução e capacidade de suporte da espécie i e α e β os coeficientes de competição. Os coeficientes de competição estão associados à pressão que uma espécie faz na outra na competição por recursos - nas palavras de Britton [7]: "Suponha que as duas espécies que estão competindo são besouros distintos, e que um indivíduo da espécie 2 come dois grãos de flor para cada um comido por um indivíduo da espécie 1, então $\alpha = 2$ e $\beta = \frac{1}{2}$ ". Note que no exemplo dado ambas as espécies ocupam o mesmo nicho ecológico. Geralmente, quando isso acontece, $\alpha\beta = 1$. Para facilitar a análise do sistema da equação 6, é conveniente fazer as seguintes mudanças de variáveis, $u = \frac{U_1}{K_1}$, $v = \frac{U_2}{K_2}$ e $\tau = r_1 t$, obtendo:

Figura 5: (a) Evolução temporal das populações de predadores e presas e (b) espaço de fase do modelo usando os parâmetros $\alpha = 1.4$, $\gamma = 0.3$, $\beta = 0.8$ e $\varepsilon = 0.6$.



(a)



(b)

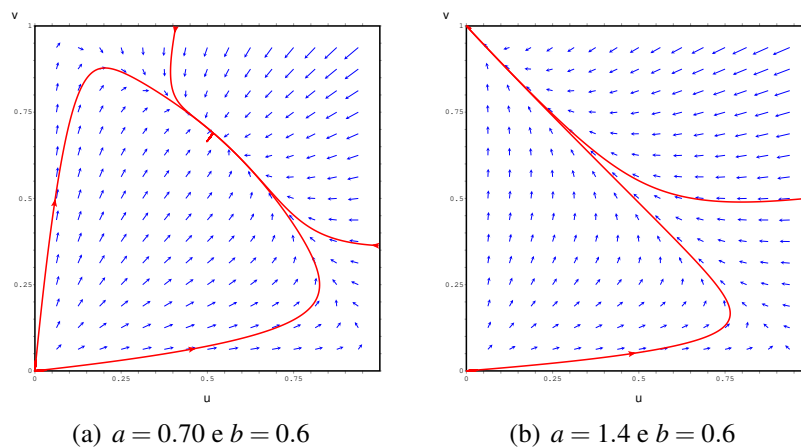
Fonte: Próprio autor.

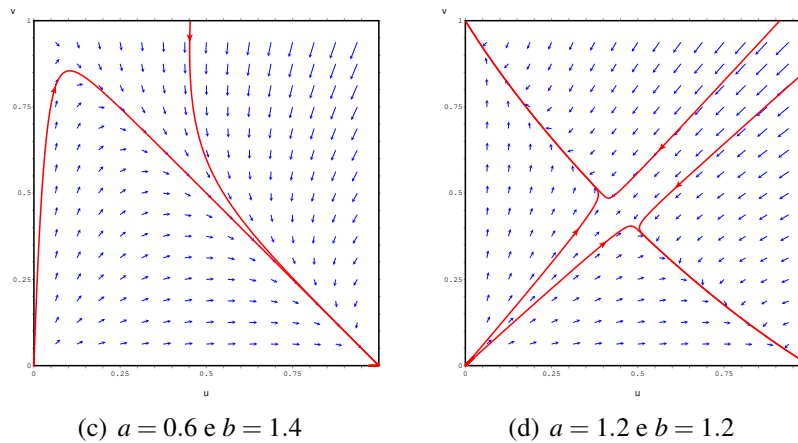
$$\frac{du}{d\tau} = u(1 - u - av), \quad \frac{dv}{d\tau} = cv(1 - bu - v) \quad (7)$$

sendo $a = \alpha \frac{K_2}{K_1}$, $b = \beta \frac{K_1}{K_2}$ e $c = \frac{r_2}{r_1}$. Este novo sistema possui como pontos fixos os pares ordenados: $(0, 0)$, $(1, 0)$, $(0, 1)$ e (u^*, v^*) , sendo $u^* = \frac{1-a}{1-ab}$ e $v^* = \frac{1-b}{1-ab}$. Para uma revisão detalhada sobre a estabilidade desses pontos fixos, consulte a referência [38]. Para diferentes valores dos parâmetros a e b , este sistema apresenta comportamentos distintos, como ilustrado na figura 6. As bifurcações, isto é, mudanças nas estabilidades dos pontos fixos, ocorrem em $a = 1$ e $b = 1$. Na figura 6.a, se $a < 1$ e $b < 1$, há coexistência entre as duas espécies independentemente da condição inicial; Conforme ilustrado na figura 6.b, se $a > 1$ e $b < 1$, o competidor 2, mais forte, sempre suprime o competidor 1, mais fraco; Por outro lado, conforme ilustrado na figura 6.c o contrário acontece, o competidor 1 sempre ganha do competidor 2; e por fim, como pode ser visualizado na figura 6.d há a chamada "biestabilidade", fase em que as condições iniciais determinam o estado final do sistema. Dependendo das condições iniciais, pode restar apenas o competidor A, apenas o B, ou ambos podem coexistir.

Na figura 7 está apresentado o espaço de parâmetros do modelo; note que a curva $ab = 1$, que representa espécies que ocupam o mesmo nicho ecológico, não passa nunca na fase de coexistência, demonstrando assim o Princípio da Exclusão Competitiva, enunciado na seção 2.1.

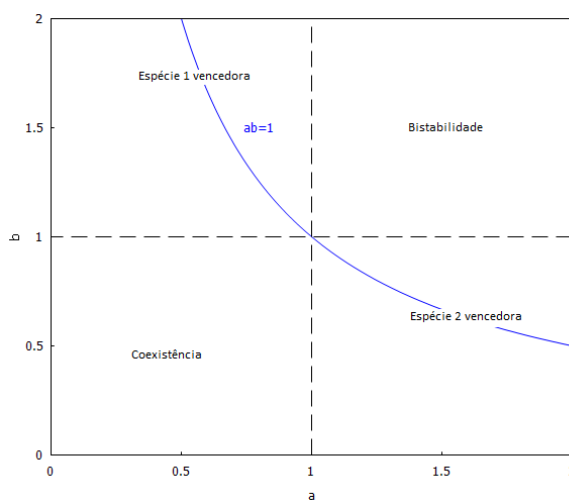
Figura 6: As quatro possibilidades do espaço de fase para o modelo de competição de Lotka-Volterra descrito pelas equações 7, utilizando o parâmetro $c = 1$.





Fonte: Próprio autor.

Figura 7: As quatro possíveis situações apresentadas no modelo de competição de Lotka-Volterra, agora no espaço de parâmetros.



Fonte: Próprio autor.

Capítulo 3

Modelos Baseados em Agentes e a Equação de Difusão

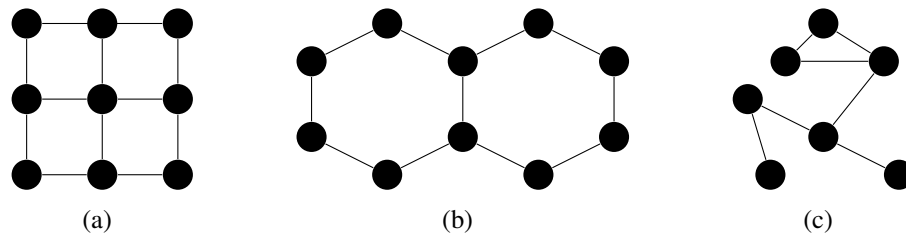
3.1 Modelos Baseados em Agentes

Modelos baseados em agentes (MBA) são formas de se descrever fenômenos através de simulações computacionais. Diferentemente das abordagens matemáticas discutidas até agora neste trabalho, a modelagem baseada em agentes considera separadamente cada indivíduo (agente) com seu conjunto de comportamentos (regras de evolução). Enquanto o sistema evolui, os agentes interagem entre si, e desta interação, comportamentos de grupo emergem do sistema. É uma técnica bastante usada para estudar problemas nas mais diversas áreas, como controle de tráfego aéreo [5], economia [6], ciências sociais [15], entre outros.

Segundo Macal [31], um MBA típico tem três elementos: agentes, relações entre agentes e meio onde o agente vive. Embora não haja um consenso sobre a definição precisa de cada elemento, pode-se dizer que um agente é uma entidade discreta, autônoma, social, que tem seus próprios comportamentos, que assume diferentes estados enquanto o sistema evolui e que se relaciona com seus vizinhos, que podem variar no tempo também (a definição de vizinho depende da rede em que o agente está inserido). Exemplos de vizinhanças em diferentes redes estão na figura 8.

Uma grande vantagem de utilizar MBA é a capacidade de se extrair comportamentos emergentes do sistema. Isto é, dado um conjunto de regras de evolução para os indivíduos, eles poderão se organizar de forma não trivial em estruturas complexas.

Figura 8: Três possíveis vizinhanças para redes diferentes. (a) Rede quadrada. (b) Rede Hexagonal. (c) Rede Complexa.



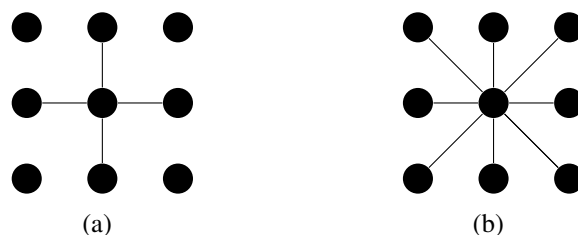
Fonte: Próprio autor.

3.1.1 Autômatos Celulares

O primeiro modelo baseado em agentes feito computacionalmente foi o "Jogo da Vida de Conway", em 1970 [18], que descreve a dinâmica de agentes numa rede quadrada que podem estar "vivos" ou "mortos", dependendo das suas vizinhanças. Dada uma condição inicial para o jogo, um estado de equilíbrio é alcançado, muitas vezes revelando padrões não-triviais com propriedades particulares daquele conjunto de condições. Tempos depois o modelo se enquadrava na definição de "autômatos celulares" (AC), uma classe de MBA.

A principal particularidade dos autômatos celulares é que os agentes sempre estão inseridos num reticulado com vizinhos fixos no tempo. Ou seja, AC são modelos onde os agentes estão fixos na rede e só interagem com seus vizinhos espaciais, enquanto, de modo geral, no MBA os agentes podem se mover, alterando com quem interagem. Pela limitação espacial dos reticulados, é preciso usar condições de contorno nas bordas, que podem ser principalmente de três tipos: periódica, que simula uma rede infinita, e liga os primeiros agentes nos últimos (topologia toroidal); reflexiva, que considera os agentes da borda tendo como vizinhos eles mesmos; e fixa, que assume que os vizinhos das bordas são fixos no tempo, portanto não evoluem com as regras do sistema. As vizinhanças podem ser principalmente de dois tipos: de Von Neuman (ilustrada na figura 9.a), onde só são considerados os primeiros vizinhos; e de Moore (ilustrada na figura 9.b), onde são considerados os primeiros e segundos vizinhos.

Figura 9: Vizinhanças mais recorrentes em redes quadradas. (a) Von Neuman. (b) Moore.



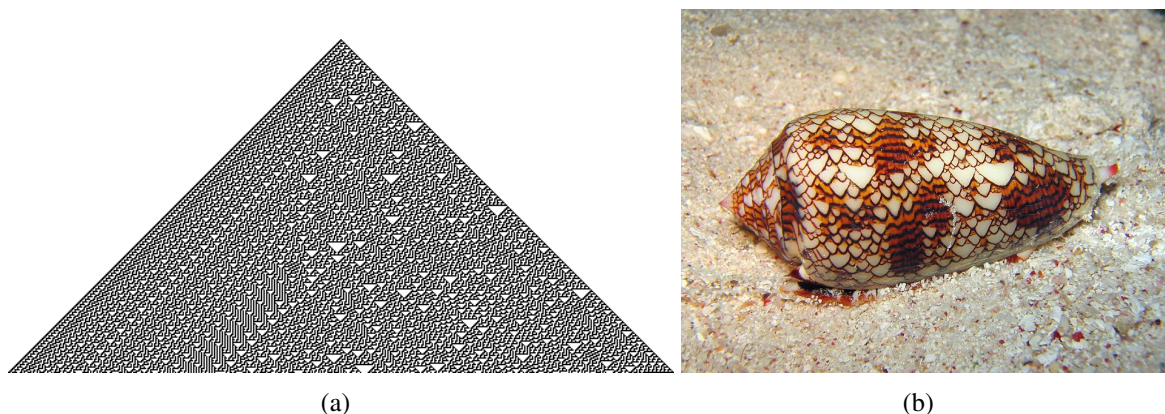
Fonte: Próprio autor.

Em um AC, os agentes são capazes de assumir um conjunto finito e discreto de estados.

Tais estados evoluem no tempo segundo regras ou funções discretas dos valores dos estados dos agentes na vizinhança de cada um deles em tempos anteriores. Por exemplo, para a regra 30 do AC elementar de Wolfram, os agentes σ_i ($i = 1, 2, \dots, N$) são binários ($\sigma_i = 0$ ou 1) e dispostos em uma cadeia linear com condições de contorno periódicas. A vizinhança de cada agente é a de Von Neuman e, portanto, envolve somente os primeiros vizinhos à esquerda e a direita de um dado agente. Por sua vez, a regra de evolução é dada pela equação $\Gamma_i(t+1) = f(\sigma_{i-1}(t), \sigma_i(t), \sigma_{i+1}(t)) = \text{mod}(\sigma_{i-1} + \sigma_i + \sigma_{i+1} + \sigma_i \sigma_{i+1}, 2)$ onde o operador $\text{mod}(x_1, x_2)$ retorna o resto da divisão de x_1 por x_2 .

Na figura 10 é mostrada a evolução do AC unidimensional de Wolfram regra 30 a partir de um estado inicial com semente em que $\sigma_i(0) = 0$ para todo i exceto $\sigma_{\frac{N}{2}}(0) = 1$. Como se pode ver, padrões complexos emergem de regras simples iteradas muitas vezes repetidamente, mesmo a partir de estados iniciais simples. Por essa razão, os ACs despertaram um grande interesse na modelagem de sistemas longe do equilíbrio termodinâmico.

Figura 10: (a) Figura gerada através do modelo de autômatos celulares "Rule 30", de Stephen Wolfram. (b) Padrão semelhante a um gerado por autômatos celulares em uma concha.



Fonte: Wikimedia Commons.

3.1.2 Modelos Híbridos

Embora robustos, muitas vezes os AC por si só não conseguem capturar a essência de alguns problemas que aparecem na natureza. Note que estes sistemas são intrinsecamente discretos, pois os agentes assumem estados com valores discretos, estão inseridos em reticulados e o tempo evolui em passos discretos. O problema que este trabalho se propõe a estudar, por exemplo, além de envolver a dinâmica de população entre espécies distintas, também está preocupado com a dinâmica dos compostos alelopáticos.

Como um adiantamento do próximo capítulo, é possível propor um modelo de AC que descreva a dinâmica de populações de espécies alelopáticas em um reticulado - cada vértice poderia estar vazio ou ocupado por um indivíduo da espécie k . Para estudar a dinâmica das substân-

cias secretadas, entretanto, uma abordagem mais cuidadosa precisa ser feita. Cada vértice do reticulado precisa ter N concentrações de toxinas referentes as espécies interagentes. As concentrações de toxinas, por sua vez, podem assumir valores contínuos, dada que sua dinâmica é regida por uma equação diferencial. A estes modelos que misturam diversas abordagens, damos o nome de Modelos Híbridos.

3.2 Equação de Difusão

A equação de difusão, também chamada de segunda lei de Fick, descreve o movimento de um fluido em um meio. Considera-se que o fluido é formado por partículas microscópicas, e que cada uma dessas partículas descreve um movimento aleatório (caminhada aleatória). De fato, é possível obter a equação da difusão ao tomar o limite contínuo das partículas se movendo aleatoriamente. Neste trabalho, porém, nos inspiraremos em Fick [17] e seguiremos uma abordagem mais fenomenológica.

Considere uma quantidade q que se conserva e flui em um meio. Esta quantidade pode ser vista como a massa, ou como o número de moléculas de um fluido. É útil definir as quantidades ρ como concentração (ou densidade volumétrica), e \mathbf{J} como a densidade de fluxo de q . Note que a grandeza \mathbf{J} é uma grandeza vetorial, e que quando integrada ao longo de uma superfície, dá o próprio fluxo de q ao longo da superfície de integração. Se não há fontes ou sorvedouros em uma região delimitada por uma superfície fechada de integração, pode-se dizer que a variação temporal de q no interior de um volume é igual a menos o fluxo de q pela superfície desse volume. Ou, matematicamente:

$$\frac{dq}{dt} = - \oint_S \mathbf{J} \cdot d\mathbf{a} \quad (8)$$

Aplicando o teorema da divergência na equação 8, encontramos a equação de continuidade em sua forma diferencial:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J} \quad (9)$$

Fica explícito na equação 9 que toda variação local em ρ é devido a um fluxo de q . É razoável postular que \mathbf{J} sempre flui da região de maior concentração para a de menor através de um gradiente de concentração (primeira lei de Fick), ou:

$$\mathbf{J} = -D\nabla\rho \quad (10)$$

sendo D a constante de difusão, que depende das propriedades do meio e do fluido. Substituindo a equação 10 na 9, obtemos enfim a equação de difusão:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D\nabla^2\rho \quad (11)$$

A equação 11 descreve a difusão de um fluido em um meio. Se não houver fontes ou sorvedouros, a tendência do fluido é se tornar homogêneo no meio, igualando as concentrações em todo o espaço. Para uma descrição mais geral, podemos inserir um termo de fonte e um termo de degradação. Considerando que haja fontes do fluido nas coordenadas x_i , e que o fluido se degrade de forma exponencial, temos:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \nabla^2 \rho + \beta \sum \delta(x - x_i) - \gamma \rho \quad (12)$$

sendo β a taxa de produção do fluido, γ a taxa de degradação, e a soma é feita sobre todas as fontes. A equação 12, quando possui os termos de fonte e degradação, também é chamada de equação de reação-difusão.

3.2.1 Solução da Equação de Reação-Difusão

Considere a equação de difusão em uma dimensão:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} \quad (13)$$

sujeita às condições iniciais:

$$\rho(x, 0) = \delta(x) \quad \lim_{x \rightarrow \pm\infty} \rho(x, t) = 0 \quad (14)$$

Para encontrar a solução da equação diferencial, é possível utilizar o método da Transformada de Fourier. Definindo a transformada de $\rho(x, t)$ como $\rho(k, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x, t) e^{ikx} dx$ que possui como inversa $\rho(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(k, t) e^{-ikx} dk$ e substituindo-a na equação 13:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\rho(k, t)}{dt} e^{-ikx} dk = \int_{-\infty}^{+\infty} (-Dk^2) \rho(k, t) e^{-ikx} dk \quad (15)$$

Note que os integrandos da equação 15 são iguais, portanto obtém-se a seguinte equação diferencial ordinária:

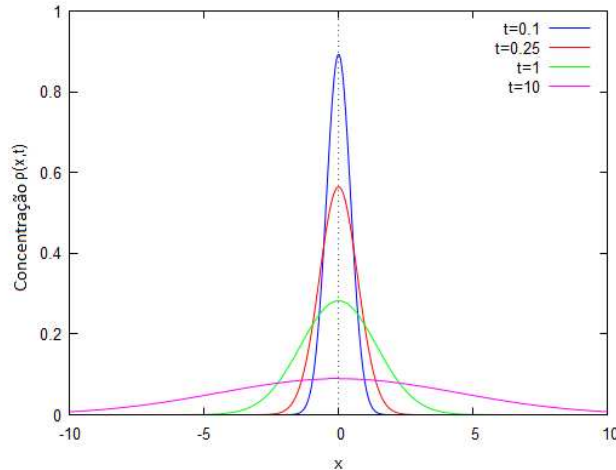
$$\begin{aligned} \frac{d\rho}{dt} &= -Dk^2 \rho \\ \rho(k, t) &= \rho(k, 0) e^{-Dk^2 t} \end{aligned} \quad (16)$$

Aplicando a transformada de Fourier em $\rho(x, 0) = \delta(x) \rightarrow \rho(k, 0) = 1$ e substituindo na equação anterior, temos enfim, $\rho(k, t) = e^{-Dk^2 t}$. Para chegar na solução da equação da difusão, basta aplicar a transformação inversa em $\rho(k, t)$. Usando que $k^2 Dt + ikx = (k + \frac{ix}{2Dt})^2 Dt + \frac{x^2}{4Dt}$ e $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ay^2} dy = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$, através da mudança de variável $y = k + \frac{ix}{2Dt}$ obtém-se, enfim:

$$\rho(x, t) = \frac{e^{-\frac{x^2}{4Dt}}}{\sqrt{4\pi Dt}} \quad (17)$$

Note que a equação 17 satisfaz as condições de contorno. Repare ainda que a expressão é uma gaussiana centrada em $x = 0$ que, conforme o tempo passa, tende a se tornar homogênea no espaço, se achatando, conforme mostrado na figura 11.

Figura 11: Solução da equação de difusão, dada pela equação 17, com $D = 1$. Foram feitas as curvas para diferentes instantes $t = 0.1, 0.25, 1$ e 10 . É possível notar que a curva se achata conforme o tempo passa, tendendo a ficar homogênea no espaço para tempos grandes o suficiente.



Fonte: Próprio autor.

Agora considere a equação de reação-difusão unidimensional com $\beta = 0$:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \gamma \rho + D \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} \quad (18)$$

sujeita às mesmas condições iniciais da equação 14. Note que por convenção o sinal de γ foi alterado - se $\gamma > 0$, o termo não-homogêneo introduz fontes em todo o espaço; se $\gamma < 0$ há sorvedouros em todo o espaço. Para resolver esta equação, considere a função $\Phi(x, t) = \rho(x, t)e^{-\gamma t}$. Substituindo $\Phi(x, t)$ na equação 18, recuperamos a própria equação de difusão, porém para $\Phi(x, t)$:

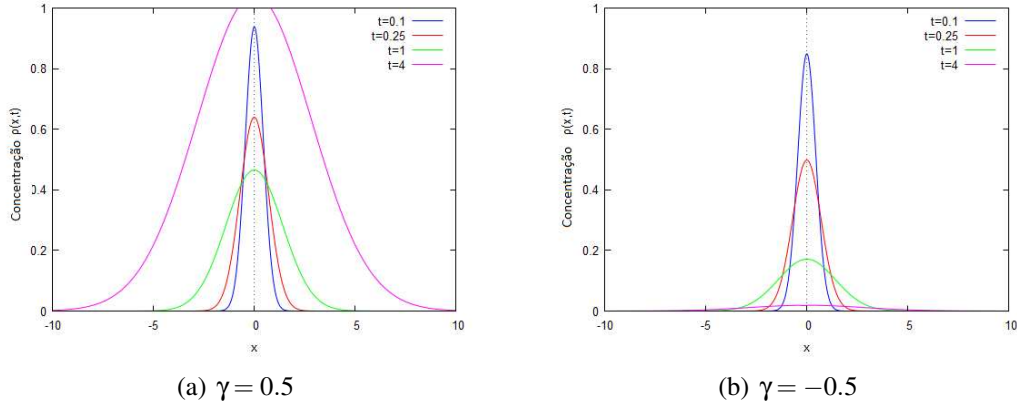
$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} \quad (19)$$

sujeita às mesmas condições iniciais que $\rho(x, t)$. O resultado desta equação, como já apresentado, é dado pela expressão 11. Portanto, chegamos enfim em:

$$\rho(x, t) = \frac{e^{-\frac{x^2}{4Dt}}}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{\gamma t} \quad (20)$$

Para $\gamma > 0$ a exponencial associada ao termo de reação é positiva, e portanto faz a concentração crescer. Já para $\gamma < 0$ a exponencial é negativa, e a concentração decai. Em ambos os

Figura 12: Solução da equação da reação-difusão, dada pela equação 20, com $D = 1$ e $|\gamma| = 0.5$. Foram feitas as curvas para $t = 0.1, 0.25, 1$ e 4 , como explicitado na legenda do gráfico. (a) $\gamma > 0$, é possível notar que para $t > 1$ há um crescimento abrupto nas concentrações, devido à exponencial de reação. (b) $\gamma < 0$, é possível notar um decrescimento abrupto para $t > 1$, devido à exponencial de reação.



Fonte: Próprio autor.

casos, a "massa" introduzida pela condição inicial não é conservada. É possível ver as diferenças destes dois regimes na figura 12.

Por fim, considere o caso estacionário da equação 18, ou seja, $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$. Assumindo ainda que a reação seja do tipo depreciação, ou seja, $\gamma = -\gamma$, temos:

$$\frac{d^2 \rho}{dx^2} = \frac{\gamma}{D} \rho \quad (21)$$

$$\rho(x) = A \exp\left(x \sqrt{\frac{\gamma}{D}}\right) + B \exp\left(-x \sqrt{\frac{\gamma}{D}}\right)$$

Assumindo às condições iniciais $\rho(0) = C_0$ e $\rho(x \rightarrow \infty) = 0$, temos:

$$\rho(x) = C_0 \exp\left(-x \sqrt{\frac{\gamma}{D}}\right) \quad (22)$$

Pela equação 22 é possível estimar um alcance efetivo que a substância atua após partir da origem. Assumindo que para concentrações menores que $\frac{C_0}{2}$ a substância não interfere mais no meio onde está inserido, estima-se que a distância máxima de efeito desta substância é:

$$\frac{C_0}{2} = C_0 \exp\left(-x_{ef} \sqrt{\frac{\gamma}{D}}\right) \quad (23)$$

$$x_{ef} \propto \sqrt{\frac{D}{\gamma}}$$

Portanto o alcance efetivo da substância é proporcional à raiz da constante de difusão. Ou seja, controlando a constante de difusão, é possível diminuir ou aumentar a distância de interação das fontes mesmo em problemas onde há depreciação de substâncias.

Capítulo 4

Modelo de Competição Alelopática

4.1 Modelo de Múltiplas Escalas

Modelagem em múltiplas escalas é uma técnica utilizada para tentar descrever sistemas levando em consideração as diferentes escalas que este sistema abrange. Um exemplo é descrever propriedades mecânicas de um material tanto com uma abordagem atômica (e discreta) quanto com uma abordagem contínua [28].

O fenômeno de competição alelopática pode também ser modelado em múltiplas escalas segundo De Souza [11]. No caso particular de competição entre plantas, temos, no âmbito microscópico, as interações entre as fitotoxinas e o genoma, o fluxo de íons no interior das células, a mudança na síntese proteica, etc. Mesoscopicamente, há as interações físicas entre os espécimes, a difusão dos venenos pela rizosfera e a resposta das plantas que irão absorver os venenos das competidoras. Macroscopicamente há principalmente os processos emergentes na escala do ecossistema, como supressão de alguma espécie, alianças inter/intraespecífica e formação de moiscos. O modelo descrito na próxima seção preocupa-se principalmente com as escalas meso e macroscópica.

4.2 Descrição do Modelo

O modelo proposto é um autômato celular híbrido, com condições de contorno periódicas e vizinhança de Von Neuman. Os indivíduos vivem em uma rede quadrada de tamanho $L \times L$ homogênea. Cada vértice da rede poderá estar vazio ou ocupado apenas por um indivíduo de uma das n espécies. Se ocupado, cada espécime poderá se replicar para um vértice vizinho vazio, ou morrer - ambas as situações dependerão da concentração de veneno das plantas nocivas naquele vértice. Os venenos se difundem na rede através da equação de reação e difusão.

Dado um vértice (i, j) ocupado por uma planta da espécie k sorteado para se multiplicar no tempo t , a probabilidade de ele se reproduzir para um vizinho vazio é $\frac{1}{N_{vv}} \times p_{rep}^k(C_l(\mathbf{x}, t))$, sendo N_{vv} o número de vizinhos vazios e p_{rep}^k é a probabilidade de um indivíduo da espécie k

se reproduzir, calculada da forma:

$$p_{rep}^k(\{C_{l \neq k}(\mathbf{x}, t)\}) = p_{rep}^{0,k} \left(1 - \frac{\left(\sum_{l \neq k}^n M_{l,k} C_l \right)^2}{B_k + \left(\sum_{l \neq k}^n M_{k,l} C_l \right)^2} \right) \quad (24)$$

sendo $p_{rep}^{0,k}$ o inverso da taxa de reprodução natural da espécie k na ausência de fitotoxinas, $C_{l \neq k}(\mathbf{x}, t)$ a concentração do veneno da espécie l no vértice (i, j) no tempo t , B_k uma constante associada à resistência da espécie k , e $M_{k,l}$ os elementos da matriz de interação, que podem ser 1, se a espécie l envenenar k , ou 0, se não. Um vértice vazio será preenchido pela espécie k com maior probabilidade de germinação p_{ger} , com $p_{ger} = \max(p_{rep}^k(\mathbf{x}')), k = 1, 2, \dots, N$, e \mathbf{x}' o vértice escolhido para germinação.

Dado um vértice (i, j) ocupado por uma planta da espécie k sorteado para morrer no tempo t , a probabilidade de ele morrer $p_{del}^k(C_l(\mathbf{x}, t))$ é dada por:

$$p_{del}^k(\{C_{l \neq k}(\mathbf{x}, t)\}) = p_{del}^{0,k} \left(\frac{\left(\sum_{l \neq k}^n M_{l,k} C_l \right)^2}{A_k + \left(\sum_{l \neq k}^n M_{k,l} C_l \right)^2} \right) \quad (25)$$

sendo A_k uma constante associada à resistência da espécie k ao veneno da espécie l . Note que as equações 24 e 25 têm o mesmo comportamento da equação 1, uma sigmóide. De fato, a probabilidade de reprodução e de morte estão associadas a resposta de uma espécie aos venenos das competidoras.

A dinâmica das fitotoxinas no solo será descrita por uma difusão, apresentada na equação 12.

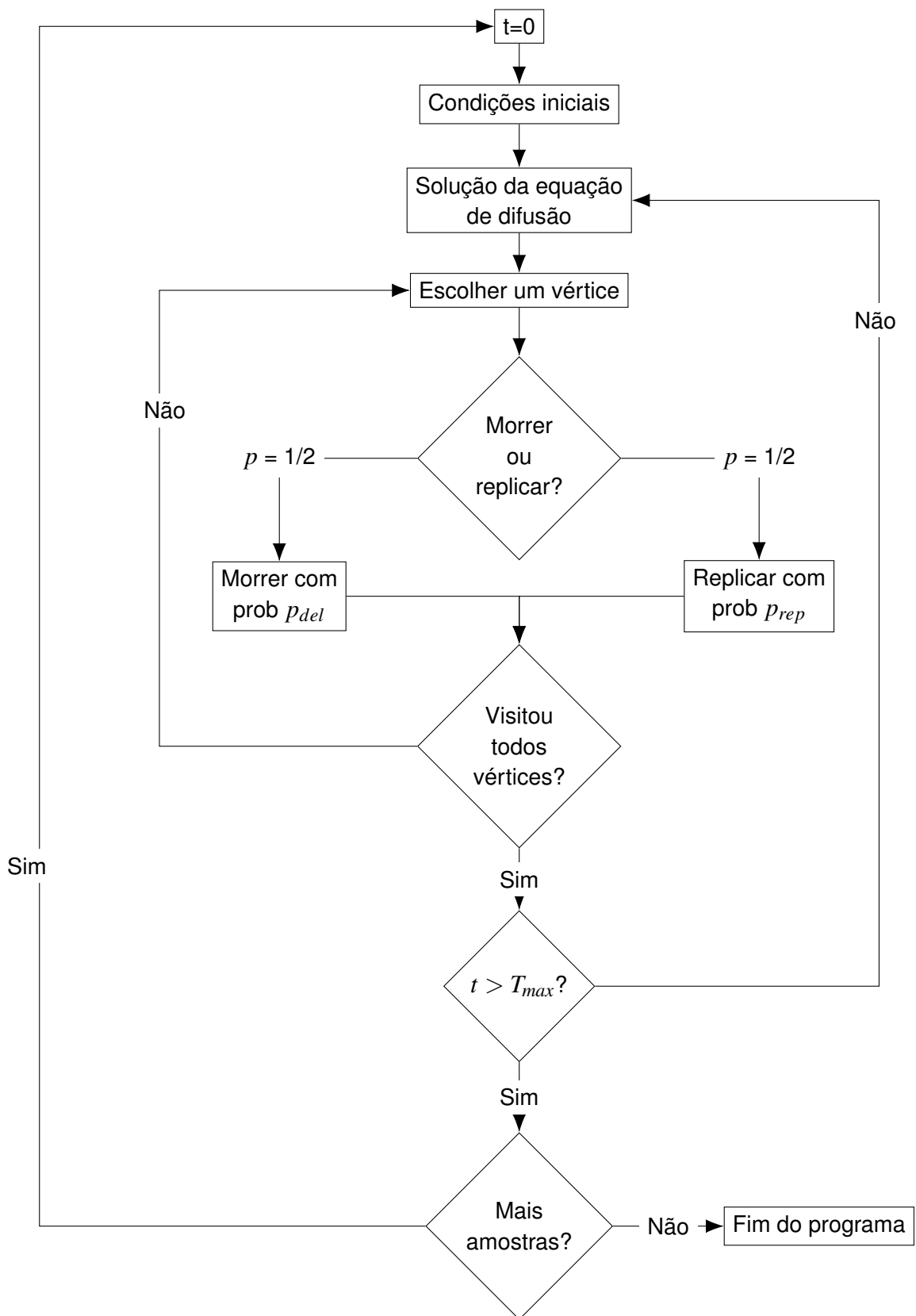
$$\frac{\partial C_k}{\partial t} = D_k \nabla^2 C_k + \beta_k \sum_{\mathbf{x}_i^k} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i^k) - \gamma_k C_k \quad (26)$$

em que o índice k evidencia que o veneno é referente a espécie k e x_i^k são as coordenadas dos vértices onde há indivíduos da espécie k . Esta equação diferencial foi resolvida computacionalmente através do métodos das diferenças finitas, iterando-a até o tempo máximo de $t = 100$, com $\Delta t = 0.25$. Como observado por Lee [27], para que a a solução da equação 26 seja estável, é suficiente que $\Delta t < \frac{1}{2D} \frac{\Delta x^2 \Delta y^2}{\Delta x^2 + \Delta y^2}$ - fixando $\Delta x = \Delta y = 1$, é imposto então que $D < 1$.

O modelo foi aplicado para diferentes condições iniciais, matrizes de interação, valores da constante de difusão D_k e tamanhos da rede - estes diferentes cenários serão melhor abordados no próximo capítulo.

A simulação, portanto, seguirá o algoritmo mostrado na figura 13.

Figura 13: Fluxograma ilustrando a evolução computacional do modelo.



Fonte: Próprio autor.

Capítulo 5

Dinâmica Populacional entre Espécies Alelopáticas

Foram feitas simulações para quatro e cinco espécies distintas, variando a constante de difusão D de 0.001 (baixa alelopatia) até 0.8 (alta alelopatia) para três matrizes de interação diferentes. As simulações foram estudadas partindo de duas condições iniciais diferentes: as espécies sendo distribuídas em focos de tamanhos iguais (CIF) e sendo distribuídas pela rede de forma aleatória com igual probabilidade (CIR).

Todos os resultados discutidos neste capítulo foram obtidos utilizando-se os parâmetros da tabela a seguir.

Tabela 1: Valores dos parâmetros utilizados nas simulações

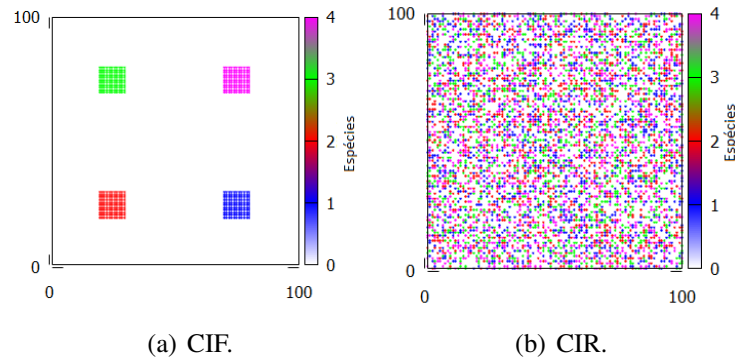
Parâmetro	Descrição	Valor (U.A.)
L	Tamanho da rede	100
$p_{rep}^{0,k}$	$(\text{Taxa de reprodução da espécie } k)^{-1}$	0.5
$p_{del}^{0,k}$	$(\text{Taxa natural de morte da espécie } k)^{-1}$	0.5
A_k	Constante associada com a resistência da espécie k e sua reprodução	0.5
B_k	Constante associada com a resistência da espécie k e sua morte	0.5
β_k	Taxa local de produção de toxina da espécie k	0.7
γ_k	Taxa de depreciação da toxina da espécie k	0.2

Todos os parâmetros listados na tabela são iguais para todas as espécies, portanto, nenhuma delas terá vantagem *a priori* sobre a outra. Uma última observação a ser feita é que, embora a semente dos números aleatórios seja fixada (por reprodutibilidade), é preciso ter cautela ao tirar conclusões sobre as mudanças de comportamento do sistema conforme D aumenta, pois o modelo apresentado é sensível a diversos parâmetros (condição inicial, disposição espacial inicial, constante de difusão das toxinas) e apresenta multiestabilidade.

5.1 Quatro Espécies

Para quatro espécies, foram utilizados as condições iniciais explicitadas na figura 14.

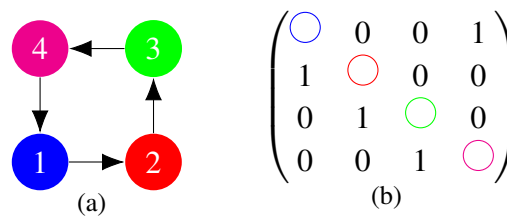
Figura 14: (a) Condição inicial de focos. Cada foco tem 121 espécimes. (b) Condição inicial das espécies distribuídas aleatoriamente. Cada vértice tem probabilidade 0.5 de estar vazio e 0.125 de estar ocupado pela espécie k . Cada espécie é representada por uma cor, e se o vértice não está vazio, seu índice será 0 e será representado pela cor branca.



Fonte: Próprio autor.

A primeira matriz de interação testada foi a ilustrada pela figura 15, que representa uma interação cíclica. Chamamos esta interação de PPT, fazendo alusão ao jogo "Pedra, Papel e Tesoura", pois cada espécie é envenenada por uma, e envenena uma outra.

Figura 15: Rede de Interações PPT para quatro espécies. Cada cor representa uma espécie diferente. (a) Grafo que representa as interações entre as diferentes espécies. (b) Matriz de interação.

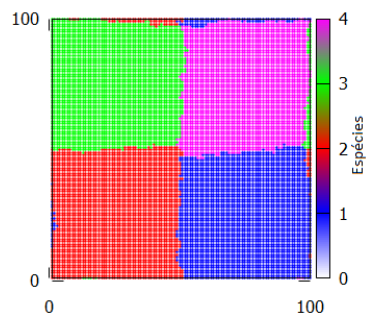


Fonte: Próprio autor.

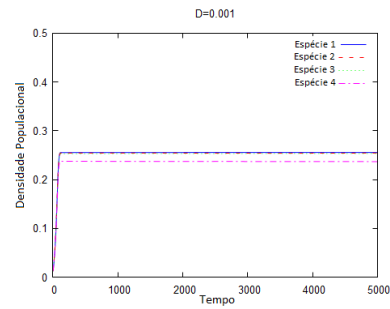
Para $D = 0.001$, um regime de baixa difusividade das toxinas, foi observado que as quatro plantas coexistem, porém o padrão espacial gerado pelos espécimes é sensível à condição inicial. Para CIF o padrão espacial alcançado após 5000 passos de tempo foi algo semelhante à própria condição inicial de focos, os espécimes permaneceram juntos à seus semelhantes, gerando quatro grandes "retalhos quadrados"(ou "patches"). Para CIR, mesmo após 5000 passos de tempo, a distribuição de plantas continuou aleatória. (Figura 16)

Para constantes de difusão maiores, o comportamento da densidade de população se altera para as duas condições iniciais. Para CIF o padrão espacial é perdido completamente em

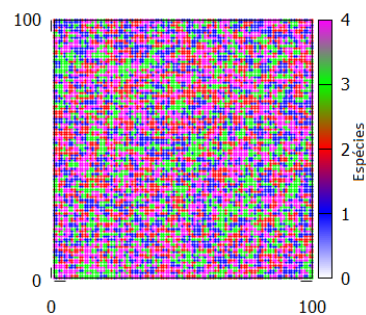
Figura 16: Densidades de população e padrões espaciais gerados para PPT em com espécies, para $D = 0.001$.



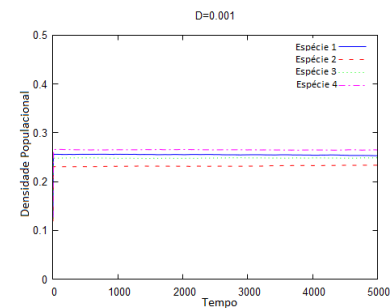
(a) Padrão espacial final para CIF.



(b) Densidade de população para CIF.



(c) Padrão espacial final para CIR.

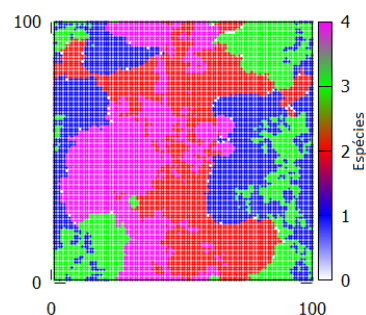


(d) Densidade de população para CIR.

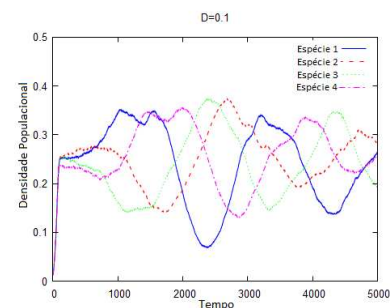
Fonte: Próprio autor.

$D > 0.01$ e grandes oscilações nas populações de espécies aparecem. Conforme D continua a crescer, é possível ver a formação de longas faixas de uma espécie, ainda mantendo as grandes oscilações nas populações. Essas faixas de uma espécie evoluem para faixas constituídas por duas espécies (as duas que não interagem entre si - 1 e 3, 2 e 4), revelando uma aliança entre elas. A consequência dessas alianças é uma diminuição considerável nas amplitudes de oscilações das populações (Figura 17).

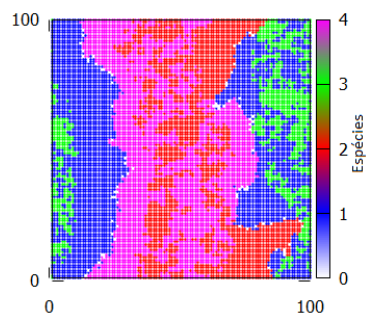
Figura 17: Densidades de população e padrões espaciais gerados para PPT em quatro espécies e diferentes constantes de difusão, partindo de CIF.



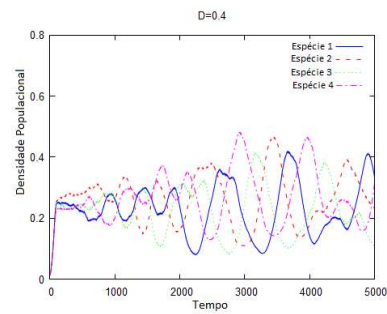
(a) Padrão espacial final para $D = 0.1$.



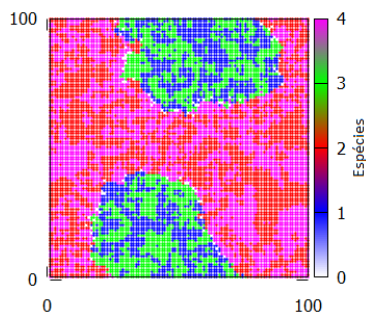
(b) Densidade de população para $D = 0.1$.



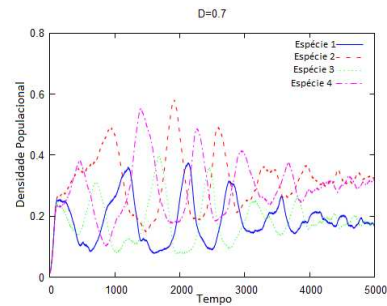
(c) Padrão espacial final para $D = 0.4$.



(d) Densidade de população para $D = 0.4$.



(e) Padrão espacial final para $D = 0.7$.

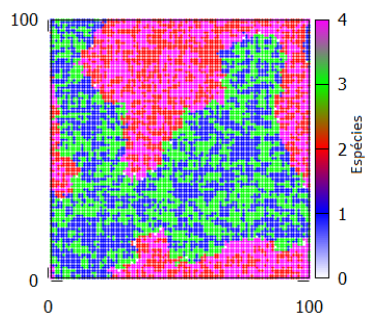


(f) Densidade de população para $D = 0.7$.

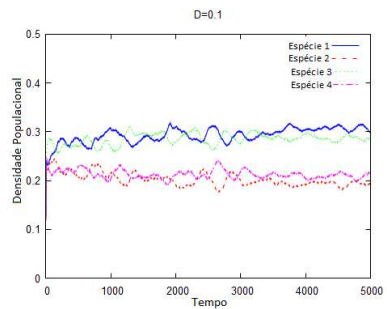
Fonte: Próprio autor.

Evoluindo de CIR é possível perceber que para valores próximos de $D = 0.1$ já há alianças entre as espécies que não interagem. Conforme D aumenta, as duas alianças se organizam em longas faixas. Para difusividades maiores e, portanto, supressões alelopáticas ainda mais fortes, entretando, o que se percebe é que uma das alianças se torna mais forte que a outra, e tende a suprimir as outras duas espécies (Figura 18). Percebe-se que para tempos maiores os sistemas partindo de CIF se igualam aos partindo de CIR, levando a acreditar que as diferenças na condição inicial só retardam a extinção de uma das alianças.

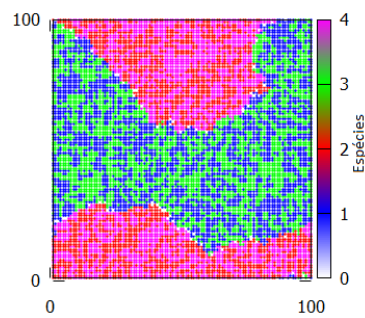
Figura 18: Densidades de população e padrões espaciais gerados para PPT com quatro espécies e diferentes constantes de difusão, partindo de CIR.



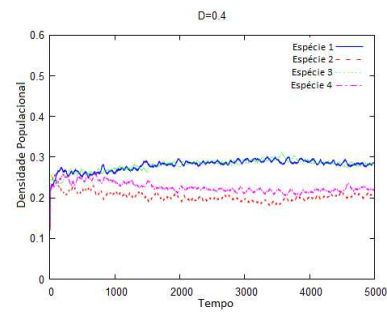
(a) Padrão espacial final para $D = 0.1$.



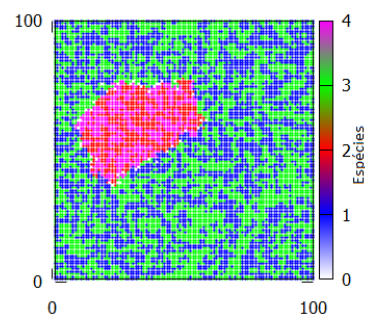
(b) Densidade de população para $D = 0.1$.



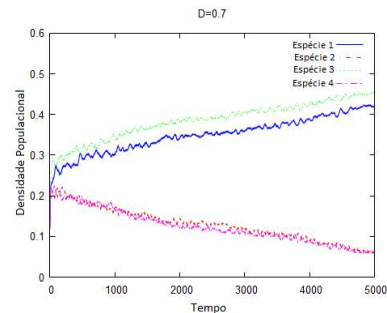
(c) Padrão espacial final para $D = 0.4$.



(d) Densidade de população para $D = 0.4$



(e) Padrão espacial final para $D = 0.7$.

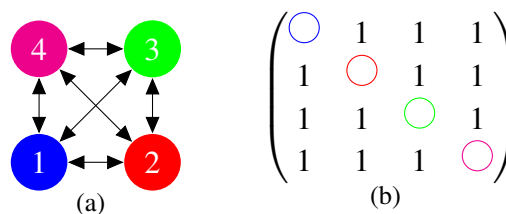


(f) Densidade de população para $D = 0.7$.

Fonte: Próprio autor.

A segunda matriz de interação estudada foi a indicada na figura 19, onde todas espécies são envenenadas e envenenam todas. Chamamos esta interação de FFA, de *Free For All* (cada um por si).

Figura 19: Rede de interações FFA para quatro espécies. Cada cor representa uma espécie diferente. (a) Grafo que representa as interações entre as diferentes espécies. (b) Matriz de interação.

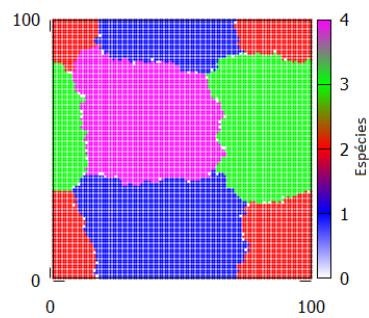


Fonte: Próprio autor.

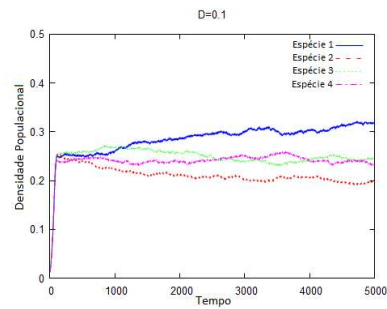
Para competições fracas ($D = 0.001$) os padrões obtidos, assim como as densidades de populações, foram semelhantes aos da figura 16. Evoluindo de CIF, para D próximos de 0.1 os padrões espaciais definidos pela condição inicial de focos ainda são mantidos, porém transladados. Pela densidade populacional, entretanto, não é possível saber se o estado de equilíbrio já foi alcançado ou haverá a supressão de alguma espécie. Para D maiores as espécies tentam

tentam suprimir umas as outras mantendo o formato de grandes focos, podendo alternar o formato entre quadrados e círculos. Para $D = 0.8$ é possível ver nitidamente a tendência de duas espécies serem extintas, enquanto as outras poderão coexistir. (Figura 20)

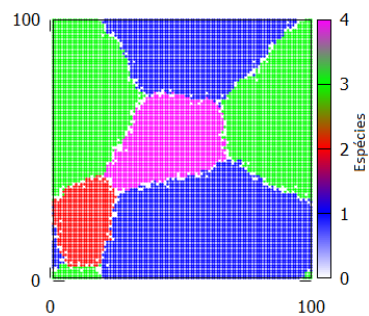
Figura 20: Densidades de população e padrões espaciais gerados para FFA com quatro espécies e diferentes constantes de difusão, partindo de CIF.



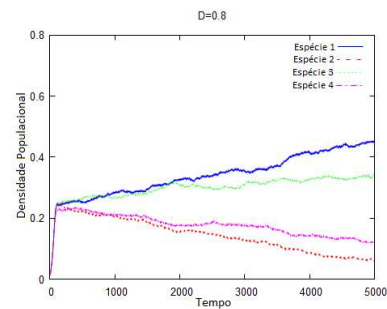
(a) Padrão espacial final para $D = 0.1$



(b) Densidade de população para $D = 0.1$



(c) Padrão espacial final para $D = 0.8$.

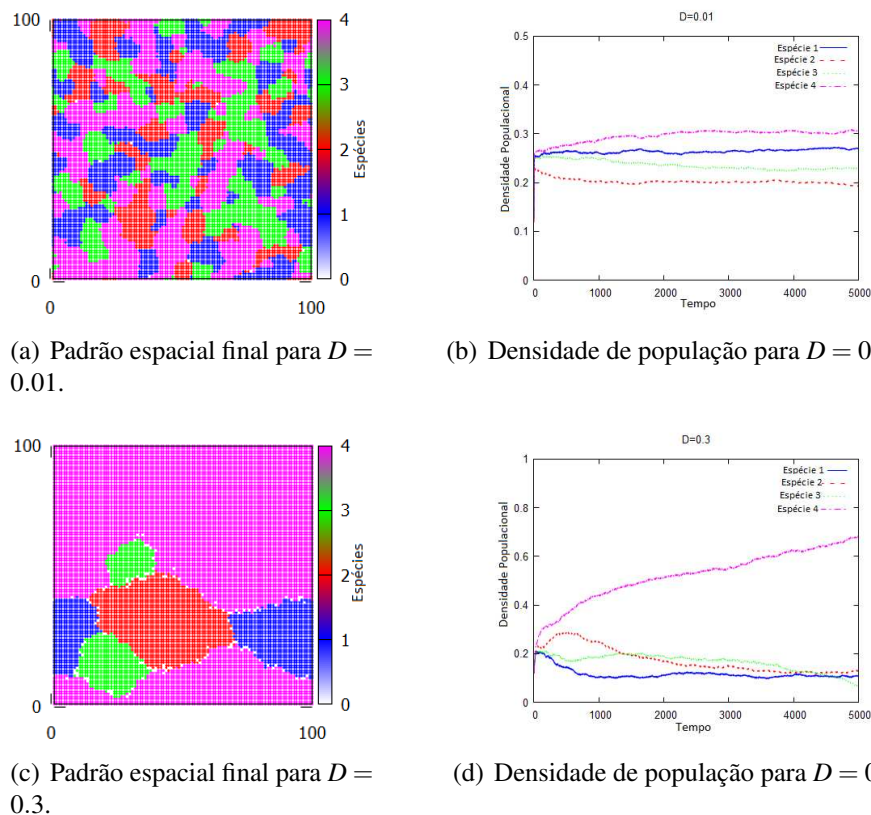


(d) Densidade de população para $D = 0.8$.

Fonte: Próprio autor.

Partindo de CIR, para $D = 0.01$ é possível ver pequenos aglomerados compactos de apenas uma espécie. Conforme D é aumentado uma espécie passa a exterminar as outras três rapidamente (Figura 21). Para amostras com D maior ainda, foi possível observar tanto um padrão semelhante ao gerado na figura 20c quanto a supressão por completa de três espécies. Diferente do que acontece em PPT, aqui não há formação de alianças em hipótese alguma, resultado da natureza da própria interação.

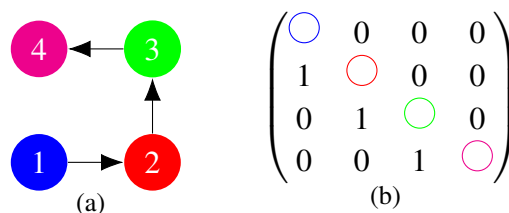
Figura 21: Densidades de população e padrões espaciais gerados para FFA com quatro espécies e diferentes constantes de difusão, partindo de CIR.



Fonte: Próprio autor.

E por fim, foi dada uma vantagem explícita para uma das espécies, com a matriz de interação da figura 22. Note que essa interação é a PPT sem a interação da planta 4 com a 1, causando uma assimetria.

Figura 22: Rede de interações beneficiando uma das plantas. Cada cor representa uma espécie diferente. (a) Grafo que representa as interações entre as diferentes espécies. (b) Matriz de interação.

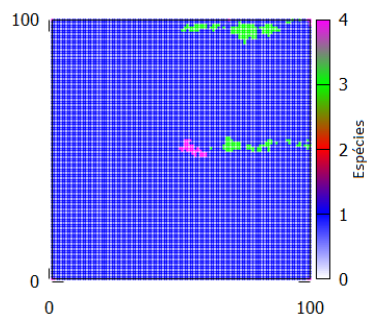


Fonte: Próprio autor.

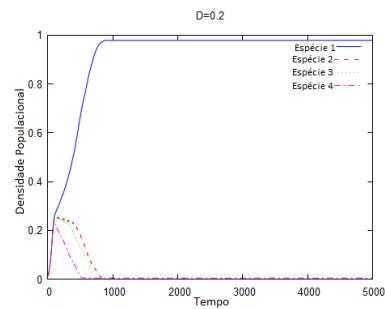
Para baixa taxa de difusão ($D = 0.001$) foram obtidos os mesmos resultados que anteriormente. Para maiores valores de D foi observado a extinção inevitável da espécie 2, pela falta de um controlador biológico da espécie 1; a sobrevivência da espécie 4 depende das flutuações

na disposição espacial inicial das espécies - se a espécie 4 conseguir se posicionar longe o suficiente da 3, será blindada pela 1; por sua vez, haverá sempre a coexistência da espécie 1 e 3. Porém, para as diferentes condições iniciais, se observa uma disposição espacial final diferente, como ilustrado na figura 23.

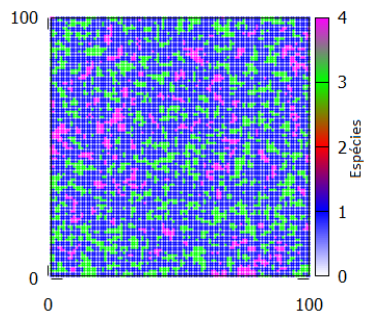
Figura 23: Densidades de população e padrões espaciais gerados por uma rede de interações alelopáticas em que uma das quatro espécies é beneficiada. Diferentes condições iniciais são usadas: (a) CIF. (b) CIR.



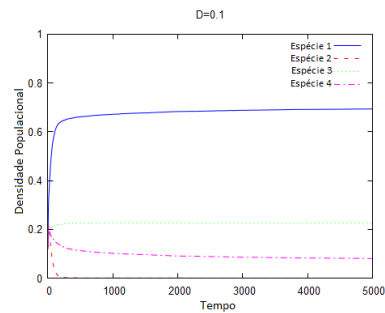
(a) Padrão espacial final para $D = 0.2$, com CIF.



(b) Densidade de população para $D = 0.2$, com CIF.



(c) Padrão espacial final para $D = 0.1$, com CIR.



(d) Densidade de população para $D = 0.1$, com CIR.

Fonte: Próprio autor.

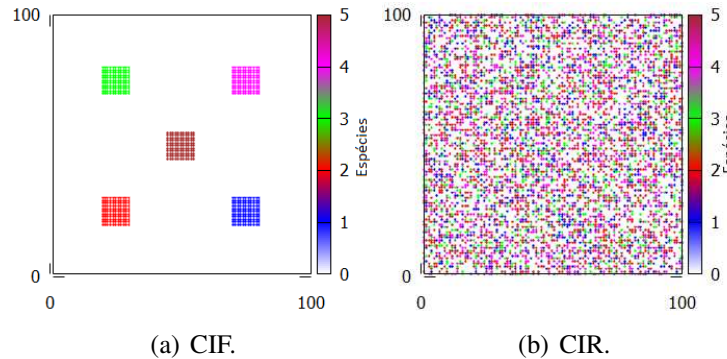
5.2 Cinco Espécies

Para cinco espécies, foram utilizados as condições iniciais explicitadas na figura 24.

A primeira matriz de interação estudada foi a ilustrada pela figura 25, que representa uma interação cíclica. Pela semelhança com a estudada no capítulo anterior, manteremos o nome desta interação como PPT.

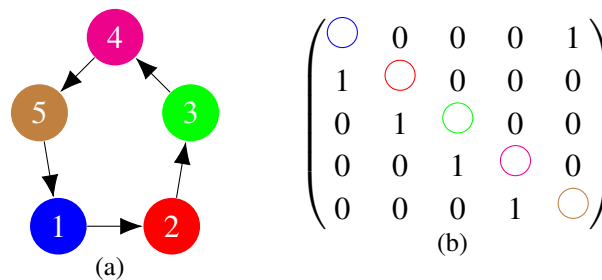
Para regimes de baixa alelopátia ($D = 0.001$), foi observado comportamento semelhantes a todos os casos anteriores. Coexistência entre todas as espécies, mantendo o padrão espacial da condição inicial. Em CIF há a permanência de cinco focos, enquanto que em CIR as plantas se distribuem aleatoriamente. As curvas de densidade populacional são semelhantes para ambos

Figura 24: (a) Condição inicial de focos. Cada foco tem 121 espécimes. (b) Condição inicial das espécies distribuídas aleatoriamente. Cada vértice tem probabilidade 0.5 de estar vazio e 0.1 de estar ocupado pela espécie k .



Fonte: Próprio autor.

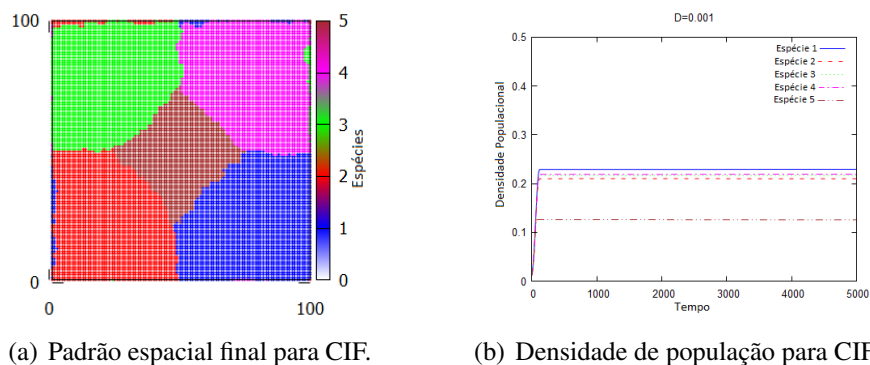
Figura 25: Rede de interações PPT para cinco espécies. Cada cor representa uma espécie diferente. (a) Grafo que representa as interações entre as diferentes espécies. (b) Matriz de interação.

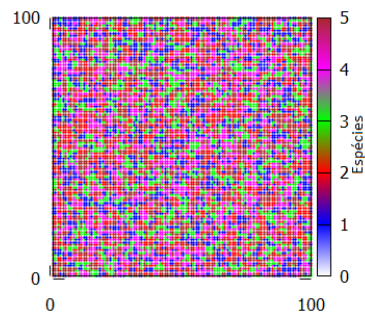


Fonte: Próprio autor.

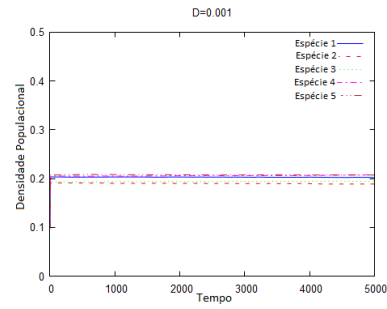
os casos, diferenciando-se apenas no total de indivíduos da espécie 5 - nota-se que a espécie posicionada no meio das demais tem seu crescimento populacional prejudicado, como pode ser visualizado na figura 26.

Figura 26: Densidade de população e padrões espaciais gerados para PPT em cinco espécies, para $D = 0.001$.





(c) Padrão espacial final para CIR.

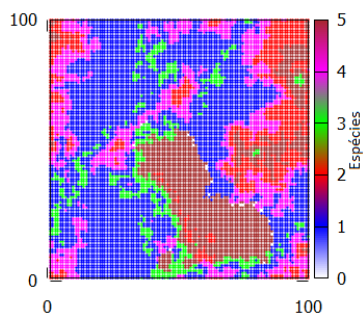


(d) Densidade de população para CIR.

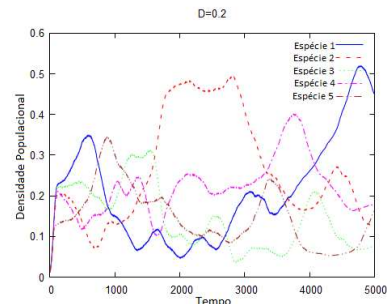
Fonte: Próprio autor.

Para D com valores maiores a dinâmica se diferencia bastante para condições iniciais distintas. Em CIF observa-se grandes oscilações nas populações das cinco espécies enquanto os indivíduos tendem a ficar próximos de seus semelhantes - a princípio, as plantas não se organizam de uma forma ordenada. Para D maiores é possível notar uma tendência das oscilações populacionais diminuírem conforme o tempo evolui, emergindo um padrão espacial - as espécies se organizam de forma que sempre estão protegidas por uma, e estão protegendo outra - organizam-se em "camadas", mantendo a ordem $1 \rightarrow 3 \rightarrow 5 \rightarrow 2 \rightarrow 4 \rightarrow 1$, conforme ilustrado na figura 27.

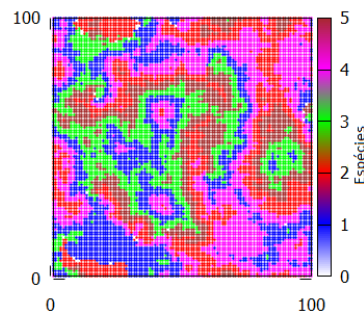
Figura 27: Densidades de população e padrões espaciais gerados para PPT com cinco espécies e diferentes constantes de difusão, partindo de CIF.



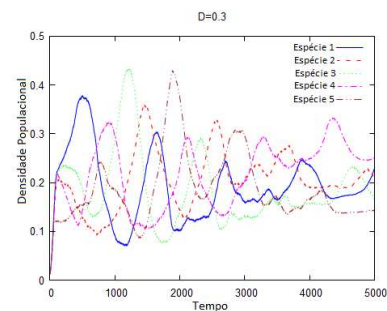
(a) Padrão espacial final para $D = 0.2$.



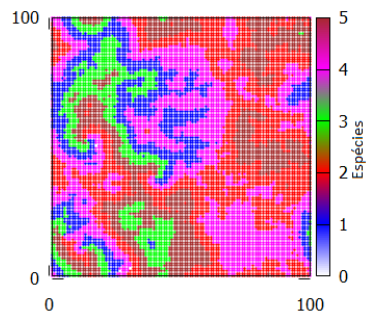
(b) Densidade de população para $D = 0.2$.



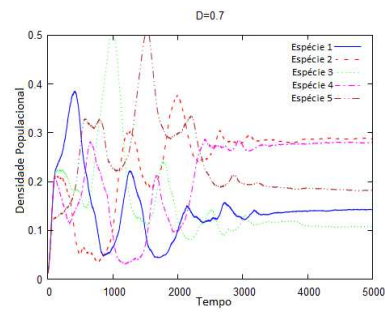
(c) Padrão espacial final para $D = 0.3$.



(d) Densidade de população para $D = 0.3$.



(e) Padrão espacial final para $D = 0.7$.

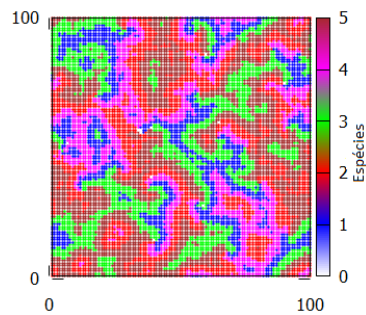


(f) Densidade de população para $D = 0.7$.

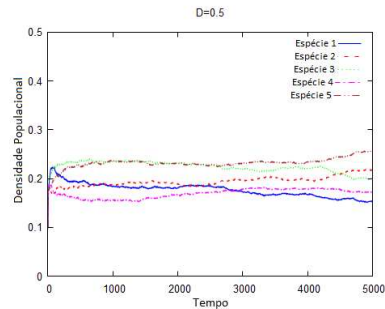
Fonte: Próprio autor.

Partindo de CIR, entretanto, nota-se que as plantas não ficam desordenadas resultando em grandes oscilações, e atingem um "estado de equilíbrio" mais rapidamente. Este estado de equilíbrio é caracterizado principalmente pela organização em "camadas", citada anteriormente, e a constância das populações, sem variações abruptas (Figura 28). Fica evidente que os sistemas que evoluem de CIF tendem ao mesmo estado que os que evoluem de CIR. Note que ao usar o termo "estado de equilíbrio" aqui, estamos nos referindo principalmente ao padrão de organização das espécies, de forma geral, e as variações de populações. É nítido que os estados finais são bem diferentes, se comparados localmente.

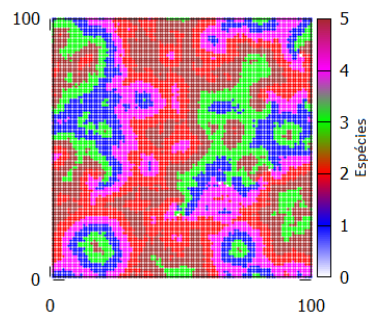
Figura 28: Densidades de população e padrões espaciais gerados para PPT com cinco espécies e diferentes constantes de difusão, partindo de CIR.



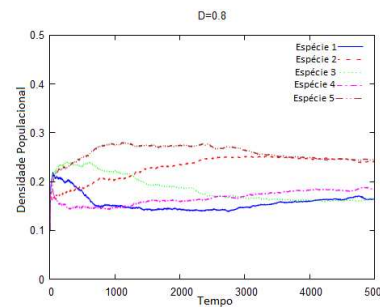
(a) Padrão espacial final para $D = 0.5$.



(b) Densidade de população para $D = 0.5$.



(c) Padrão espacial final para $D = 0.8$.

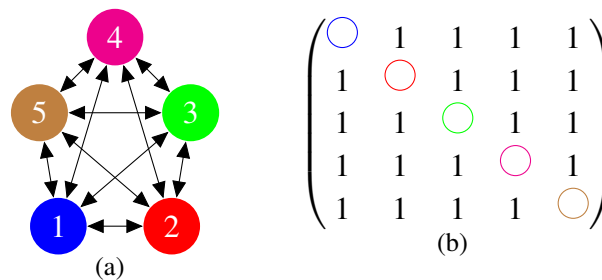


(d) Densidade de população para $D = 0.8$.

Fonte: Próprio autor.

A segunda matriz de interação estudada foi uma versão de FFA para cinco espécies, onde todas envenenam e são envenenadas por todas, como indicado na figura 29.

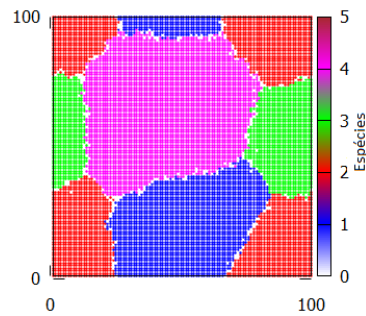
Figura 29: Rede de interações FFA para cinco espécies. Cada cor representa uma espécie diferente. (a) Grafo que representa as interações entre as diferentes espécies. (b) Matriz de interação.



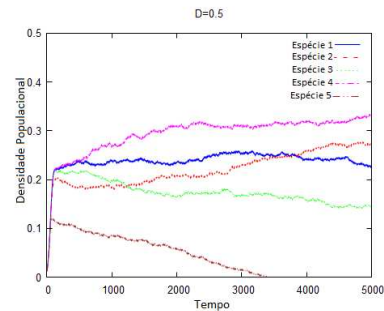
Fonte: Próprio autor.

Os resultados para FFA em cinco espécies foram bem semelhantes aos obtidos para quatro. Foi possível observar, em CIR, a criação de pequenos aglomerados compactos para baixas constantes de difusão, e conforme D assumia valores maiores, os indivíduos tentavam suprimir uns aos outros. Os padrões obtidos tanto para CIF quanto para CIR se assemelham bastante para D acima de 0.1, e uma ponderação a ser feita é que para CIF a espécie cinco sempre foi a primeira a se extinguir (figura 30.a-b), devido a sua posição desfavorável na rede em $t = 0$, e em CIR a extinção aparenta ser aleatória. Observou-se também, em apenas uma amostra (CIR, $D = 0.8$), um padrão diferente - coexistência entre duas espécies em uma longa faixa, como ilustrado na figura 30.e-f. Esta disposição aparenta ser um estado de equilíbrio de coexistência entre duas espécies que interagem entre si.

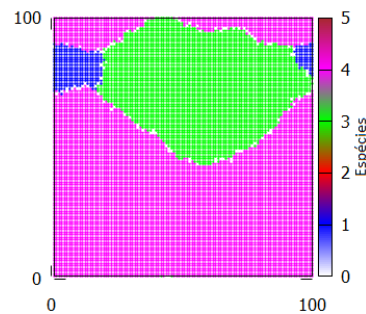
Figura 30: Densidades de população e padrões espaciais gerados para FFA com cinco espécies e diferentes constantes de difusão.



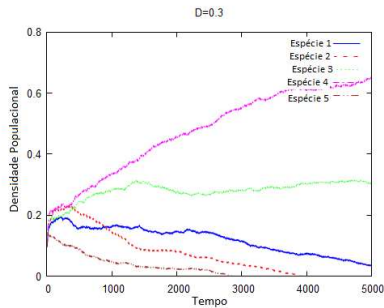
(a) Padrão espacial final para $D = 0.5$, com CIF.



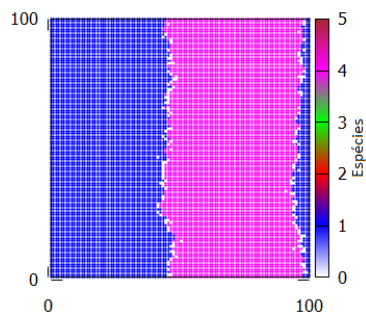
(b) Densidade de população para $D = 0.5$, com CIF.



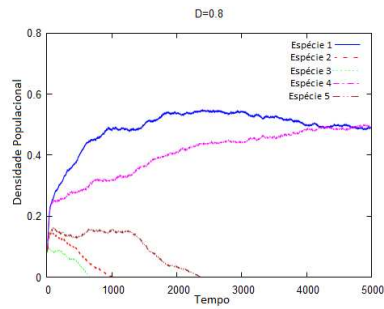
(c) Padrão espacial final para $D = 0.3$, com CIR.



(d) Densidade de população para $D = 0.3$, com CIR.



(e) Padrão espacial final para $D = 0.8$, com CIR.

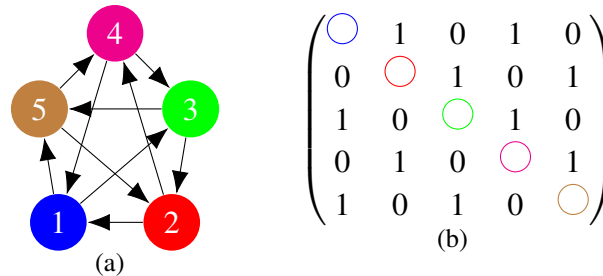


(f) Densidade de população para $D = 0.8$, com CIR.

Fonte: Próprio autor.

A última matriz de interação testada foi uma generalização de PPT. Cada espécie envenena duas e é envenenada por duas. Esta interação foi escolhida de modo que existam várias interações cíclicas (do tipo PPT) com três espécies, assim como interações acíclicas com três espécies. A forma escolhida para estas interações está representada na figura 31, e vamos chamá-la de PTG.

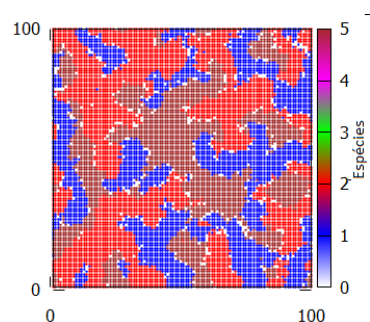
Figura 31: Rede de interações PTG para cinco espécies. Cada cor representa uma espécie diferente. (a) Grafo que representa as interações entre as diferentes espécies. (b) Matriz de interação.



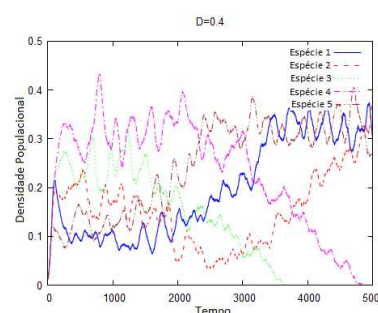
Fonte: Próprio autor.

Para baixa alelopatia ($D = 0.001$) foram encontrados resultados semelhantes aos já citados. Para D próximo e acima de 0.1, os padrões espaciais e curvas de densidade de população obtidos foram semelhantes, independentemente da constante de difusão e da condição inicial escolhida. Em geral, as curvas oscilam com grandes amplitudes e frequências, enquanto não há uma organização ordenada dos indivíduos. Nota-se, entretanto, que as espécies tendem a desaparecer em duplas e coexistirem em trios, permanecendo ainda com oscilações com amplitudes grandes, em relação aos outros casos estudado. Na figura 32 é possível notar que as espécies que sobrevivem sempre interagirão de forma cíclica, e o trio sobrevivente varia com as flutuações das disposições iniciais. Entretanto, observa-se também que nem sempre uma dupla de espécies é extintas, como pode ser observado na figura 32f, em que a espécie 1 e 5 quase foram extintas, porém conseguiram voltar a se reproduzirem.

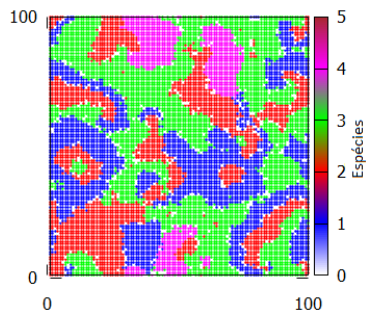
Figura 32: Densidades de população e padrões espaciais gerados para PTG com cinco espécies e diferentes constantes de difusão.



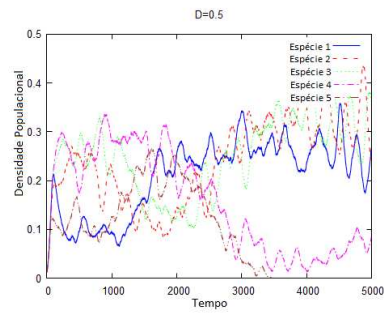
(a) Padrão espacial final para $D = 0.4$, com CIF.



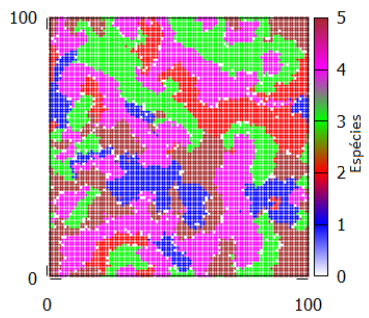
(b) Densidade de população para $D = 0.4$, com CIF.



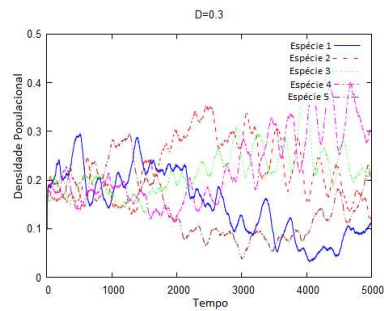
(c) Padrão espacial final para $D = 0.5$, com CIF.



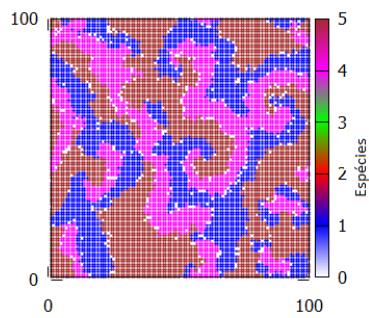
(d) Densidade de população para $D = 0.5$, com CIF.



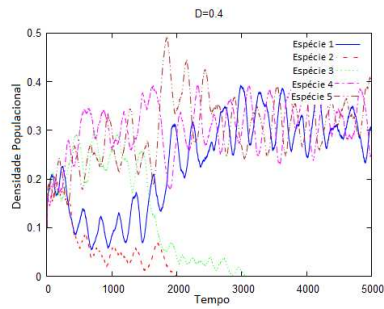
(e) Padrão espacial final para $D = 0.3$, com CIR.



(f) Densidade de população para $D = 0.3$, com CIR.



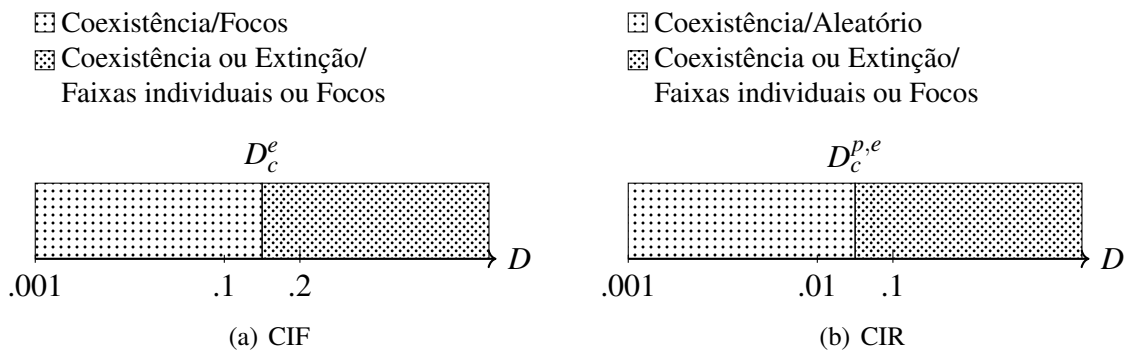
(g) Padrão espacial final para $D = 0.4$, com CIR.



(h) Densidade de população para $D = 0.4$, com CIR.

Fonte: Próprio autor.

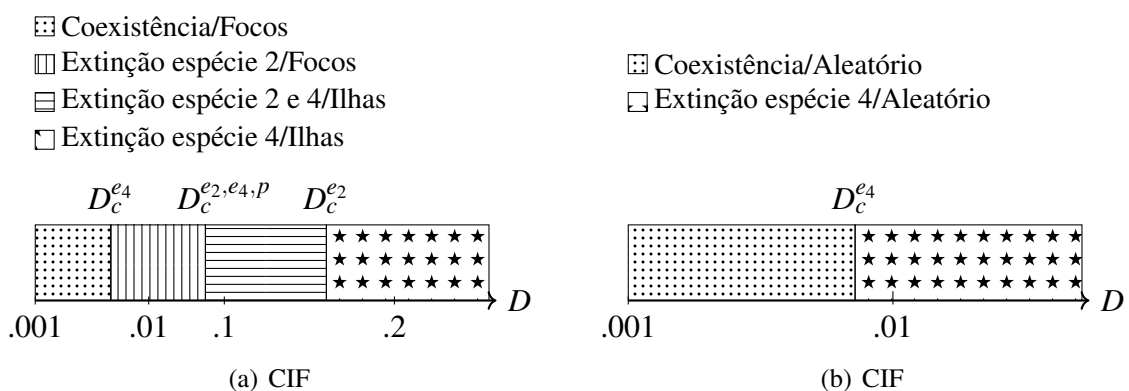
Figura 34: Diagramas de fase e transições morfológicas para interação FFA com quatro espécies. (a) CIF e (b) CIR.



Fonte: Próprio Autor.

Concedendo uma vantagem explícita à espécie 1 através da interação descrita na figura 22, partindo de CIF, observa-se três D s críticos: o primeiro, $0.001 < D_c^{e4} < 0.01$, separa a região de coexistência com o padrão inicial de uma região onde a espécie 2 sempre morre, e as demais mantêm a disposição em focos; o segundo, $0.01 < D_c^{e2,e4,p} < 0.1$, separa a região anterior de uma onde a espécie 2 e 4 são extintas, e a 3 fica disposta em "ilhas" dentro de grandes regiões dominadas pela espécie 1; o terceiro, $0.1 < D_c^{e2} < 0.2$, separa a região anterior de uma região onde apenas a espécie 4 é extinta enquanto a 2 e 3 ficam dispostas em ilhas. Entretanto, partindo de CIR, só há $0.01 < D_c^{e4} < 0.1$ que separa a região de coexistência entre todas as espécies mantendo a disposição aleatória inicial da uma região onde a espécie 4 sempre é extinta e as demais ainda ficam dispostas aleatoriamente. Os diagramas de fase são mostrados na figura 35.

Figura 35: Diagramas de fase e transições morfológicas para a interação da figura 22, em que uma das espécies é beneficiada. (a) CIF e (b) CIR.

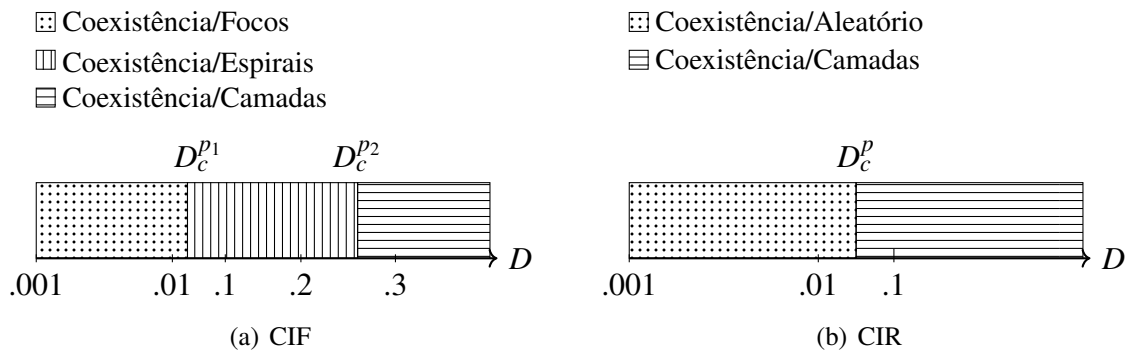


Fonte: Próprio Autor.

Para PPT em cinco espécies partindo de CIF, há um D_c^{p1} tal que $0.01 < D < 0.1$ onde o padrão inicial de focos é perdido e as espécies tendem a assumir formatos espirais. Há ainda um D_c^{p2} entre 0.2 e 0.3 em que as espécies atingem uma disposição estável em formato de

"camadas", se protegendo uma das outras. Partindo de CIR há apenas um D_c^p tal que $0.01 < D_c^p < 0.1$ onde a disposição inicial aleatória é perdida e a disposição em camadas emerge. Em todas as fases há a coexistência entre as cinco espécies. Os diagramas de fase são mostrados na figura 36.

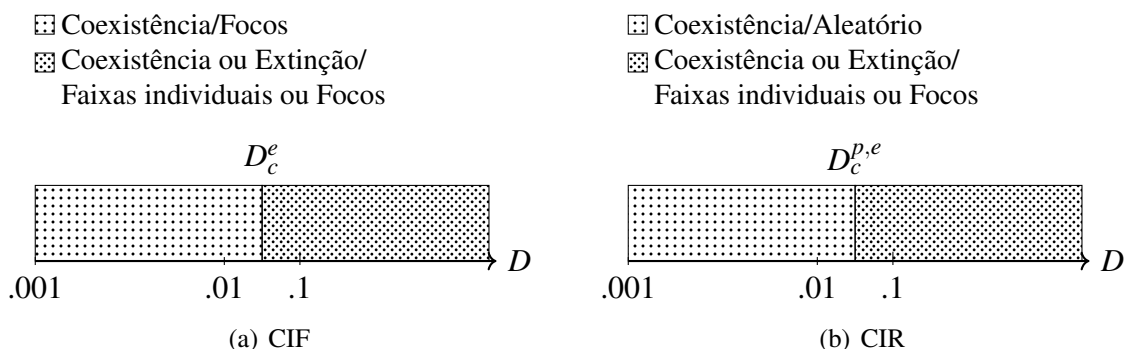
Figura 36: Diagramas de fase e transições morfológicas para interação PPT com cinco espécies. (a) CIF e (b) CIR.



Fonte: Próprio Autor.

Para FFA em cinco espécies com CIF, há um D_c^e tal que $0.01 < D_c^e < 0.1$ em que os focos estáveis e estáticos tendem a se tornar maiores, podendo virar longas faixas, ou levar outras espécies à extinção - esta região, assim como a que aparece em FFA de quatro espécies, é uma região de multiestabilidade. Partindo de CIR há um comportamento parecido com o anterior, o padrão inicial (neste caso, aleatório) de coexistência é perdido, e uma região de multiestabilidade emerge. Os diagramas de fases são mostrados na figura 37.

Figura 37: Diagramas de fase e transições morfológicas para interação FFA com cinco espécies. (a) CIF e (b) CIR.

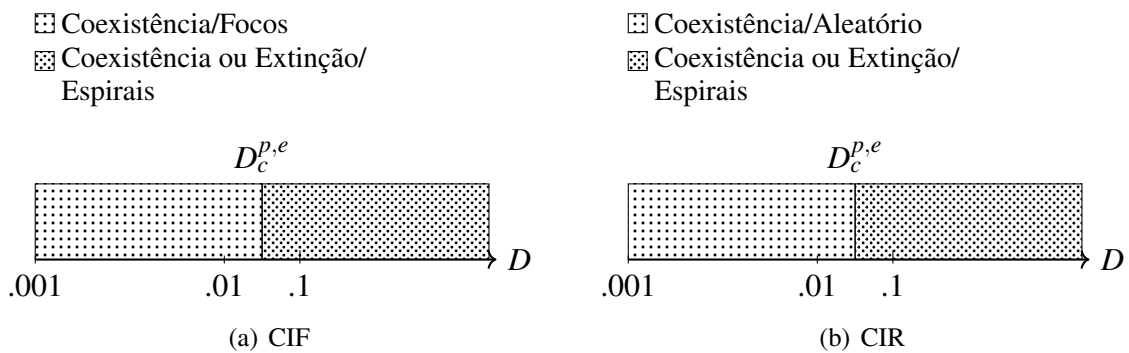


Fonte: Próprio Autor.

Por fim, para PTG com cinco espécies, independentemente da condição inicial, há um $D_c^{p,e}$ tal que $0.01 < D_c^{p,e} < 0.1$ onde a coexistência com o padrão inicial é perdida e aparece uma região de multiestabilidade onde, geralmente, trios que interagem de forma cíclica sobrevivem

em padrões espaciais espirais. Há a possibilidade, ainda, de quatro ou cinco espécies sobreviverem, dependendo das flutuações das condições iniciais. Os diagramas são mostrados na figura 38.

Figura 38: Diagramas de fase e transições morfológicas para interação PTG com cinco espécies. (a) CIF e (b) CIR.



Fonte: Próprio Autor.

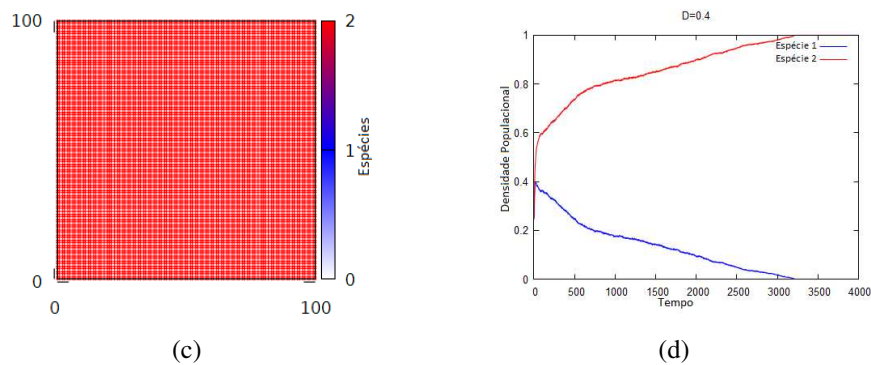
5.4 Extinção e Coexistência em Interações Cíclicas

Afim de compreender melhor a relação PPT (cíclica) com a extinção ou não de espécies, foram feitas amostras com diferentes número de espécies, utilizando como condição inicial CIR.

Para duas espécies interagindo como ilustrado na figura 39.a-b, o resultado obtido foi sempre o mesmo - vitória de uma das espécies, se tornando homogênea em todo o espaço, como mostrado na figura 39.c-d. A espécie vencedora é determinada por flutuações nas condições iniciais, explicitando um estado de biestabilidade.

Figura 39: Rede de interações PPT para duas espécies. Cada cor representa uma espécie diferente. (a) Grafo que representa as interações. (b) Matriz de interação. (c) Padrão espacial final e (d) Densidade de população para $D = 0.4$, partindo de CIR.

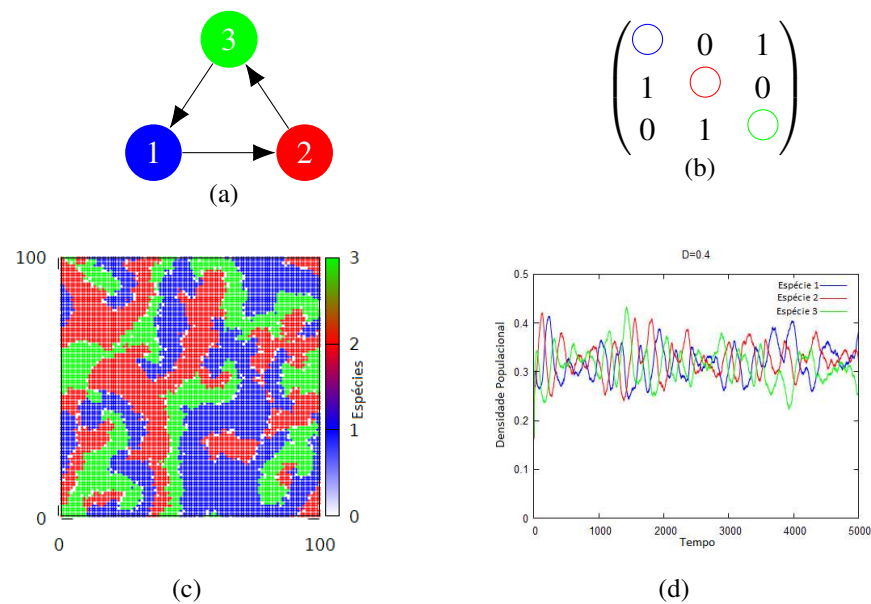




Fonte: Próprio autor.

Para três espécies interagindo de forma cíclica, como ilustrado na figura 40a-b, é possível notar os padrões já observados anteriormente em PTG. Como é possível observar na figura 40c-d, há coexistência estável entre as três espécies, com padrões espaciais espiralados e oscilações notáveis na densidade populacional.

Figura 40: Rede de interações PPT para três espécies. Cada cor representa uma espécie diferente. (a) Grafo que representa as interações. (b) Matriz de interação. (c) Padrão espacial final e (d) Densidade de população para $D = 0.4$, partindo de CIR.

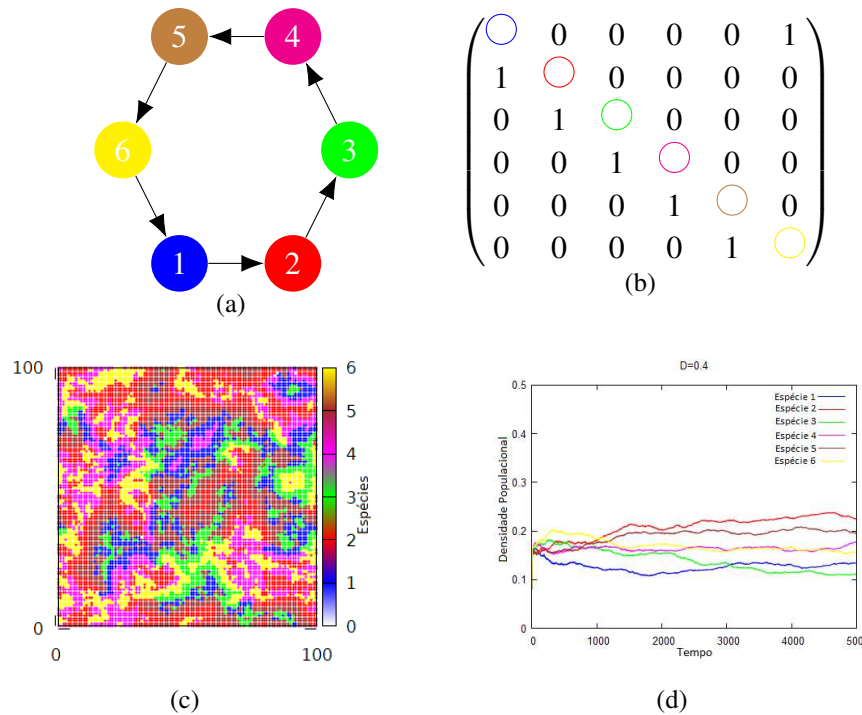


Fonte: Próprio autor.

Em seis espécies interagindo da forma representada na figura 41.a-b também há coexistência entre todas as espécies, e os padrões espaciais gerados são parecidos com os observados pra PPT em cinco espécies, a disposição em camadas - como pode ser visto na 41.c-d.

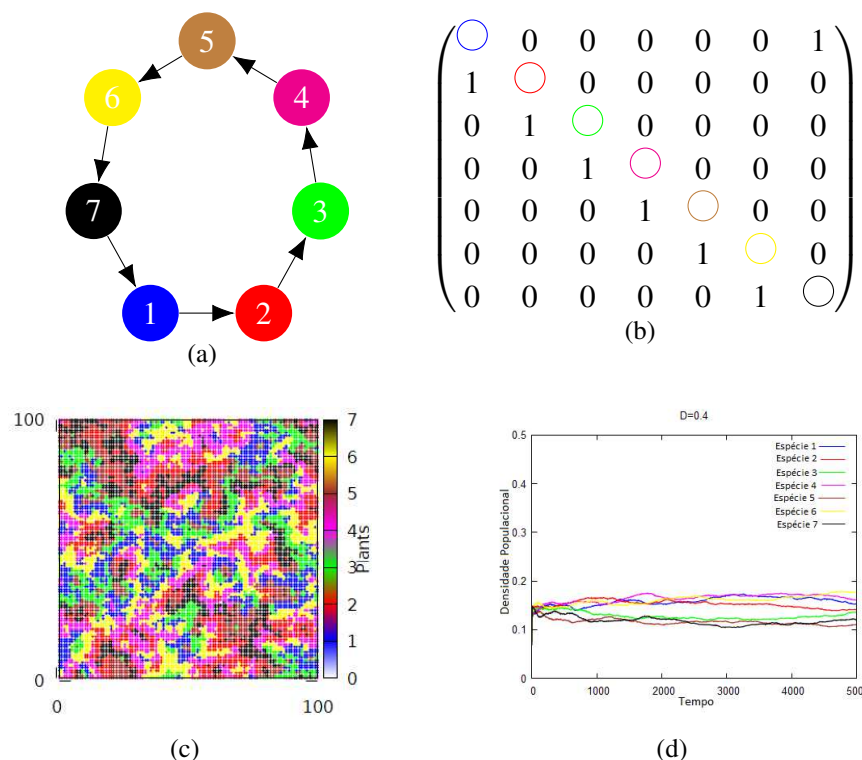
De forma semelhante à anterior, sete espécies interagindo também coexistem em padrões semelhantes à camadas, onde as mais externas blindam as mais internas, como pode ser visto na figura 42.

Figura 41: Rede de interações PPT para seis espécies. Cada cor representa uma espécie diferente. (a) Grafo que representa as interações. (b) Matriz de interação. (c) Padrão espacial final e (d) Densidade de população para $D = 0.4$, partindo de CIR.



Fonte: Próprio autor.

Figura 42: Rede de interações PPT para sete espécies. Cada cor representa uma espécie diferente. (a) Grafo que representa as interações. (b) Matriz de interação. (c) Padrão espacial final e (d) Densidade de população para $D = 0.4$, partindo de CIR.



Fonte: Próprio autor.

O comportamento das densidades de populações foram semelhantes para constantes de difusões $D = 0.6$ e 0.8 para todos os diferentes números de espécies. Pode-se concluir então que quando há interação cíclica haverá coexistência entre as espécies envolvidas, com exceção do número de espécies sendo igual a dois ou quatro. Quando só há duas espécies, uma delas é levada à extinção e a outra se torna homogênea pela rede e o que determina a vencedora são flutuações nas condições iniciais. E quando há quatro espécies, como visto anteriormente, alianças de duas espécies são formadas, e uma é levada à extinção - também sendo determinado pelas flutuações nas condições iniciais.

5.5 Discussões Gerais

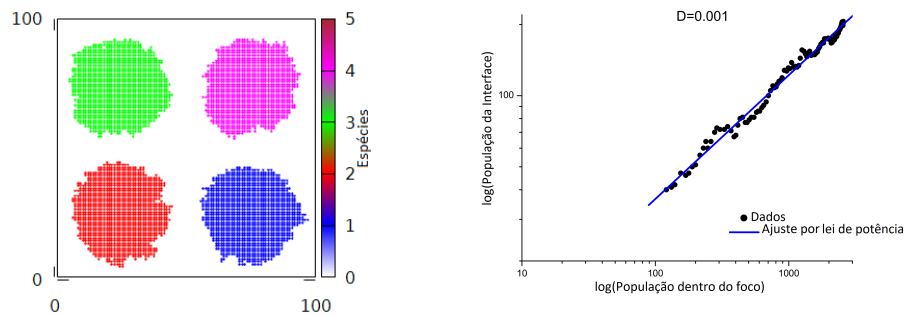
O modelo sugerido neste trabalho para o estudo de competições entre espécies alelopáticas possui grande sensibilidade a diversos parâmetros, como o número de espécies, constante de difusão das toxinas, rede de interações interespecíficas e as condições iniciais. Entretanto, nota-se que a condição inicial influencia mais em regimes de alelopatia fraca ($D < 0.1$), alterando significativamente a distribuição espacial das espécies. Para regimes de competições mais intensas, pelos diagramas de fase é possível concluir que as condições iniciais agem principalmente como uma facilitadora para se alcançar o "estados de equilíbrio".

Foi observado que para baixa alelopatia $D = 0.001$ todas as espécies envolvidas na interação sobreviviam em todas as situações, mantendo os padrões espaciais iniciais - disposição em focos ou aleatória pela rede. Biologicamente, segundo o modelo proposto, espécies diferentes que interagem de forma extremamente fraca ($D = 0.001$) podem coexistir respeitando as limitações de recurso do ambiente. Observa-se, porém, que o único recurso limitado que o modelo apresenta é o espaço e os parâmetros biológicos das diferentes espécies de plantas são idênticos, portanto não há melhor competidora.

Para CIF foi observado também que os focos iniciais crescem em expansão livre, como se fossem "ondas circulares". Pode-se concluir isso ao analisar o número de indivíduos na superfície S do foco crescendo em função do número total de indivíduos dentro do foco N , como mostrado na figura 43. Ajustando uma reta no gráfico foi encontrado um coeficiente angular de 0.524 ± 0.005 , valor muito próximo ao obtido em modelos de crescimento de superfície, com o modelo de Éden e seus variantes [20].

Nas situações estudadas, coexistência estável entre quatro espécies nunca existiu em alelopatia forte. No entanto, para cinco espécies, a interação PPT revelou coexistência estável, e na interação PTG, após a extinção de duas espécies, três continuavam a coexistir, interagindo de forma semelhante à própria PPT, porém apenas para três espécies. Isto indica uma sensibilidade do sistema quanto ao número de espécies e como elas interagem - se um número ímpar de espécies interagem de forma cíclica (PPT), elas coexistirão, como já observado por Carvalho [10] em um estudo de dinâmica de populações em espécies alelopáticas. Se o número de espécies for dois ou quatro interagindo de forma cíclica, o que se observou foi a formação de alianças

Figura 43: Estudo sobre a forma que os focos crescem. As imagens foram feitas com quatro espécies se relacionando via PPT e $D = 0.001$, apenas no regime de crescimento de focos. (a) Padrão espacial para $t=50$. (b) Ajuste por lei de potências no número de indivíduos na interface pelo número total de indivíduos da espécie 1 - a mesma curva foi feita para as outras espécies, mas nenhuma diferença significativa foi obtida.



(a) Padrão espacial para $t=50$.

(b) Ajuste por lei de potências no número de indivíduos na interface \times número total.

Fonte: Próprio autor.

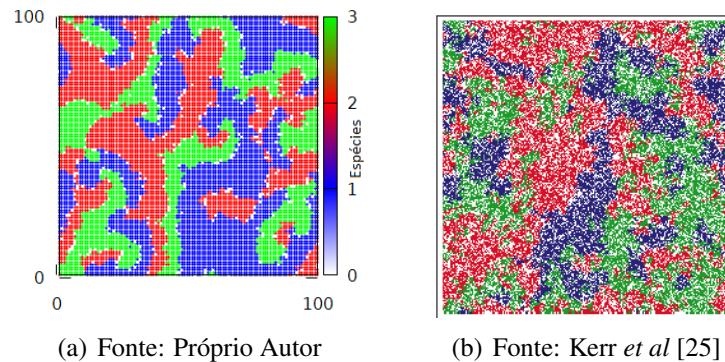
estáveis para se combater uma outra aliança. Entretanto, para o número de espécies sendo par e maior que quatro, ocorre coexistência entre as espécies também.

Na literatura já é bem sabido que o número de espécies competindo inicialmente está intimamente ligado com o estado de equilíbrio e quantas espécies coexistirão. Como já reportado por Allesina [1], quando há infinitos recursos disponíveis por diferentes espécies, o estado de equilíbrio tende a ser a coexistência entre um número ímpar de espécies. Para redes de competição cíclicas em três espécies, Kerr *et al* [25] obteve resultados semelhantes aos obtidos aqui (Figura 44), e ainda, outros trabalhos [23, 16] sugerem que há coexistência entre mais espécies interagindo ciclicamente. Não foi encontrado na literatura resultados semelhantes ao obtido para quatro espécies - formação de duplas alianças - em competições, entretanto, Szabó *et al* [43] estudou um modelo de alelopátia com nove espécies interagindo cujo padrão espacial foram três alianças formadas por três espécies distintas que, devido ao tamanho finito da rede, resultavam em uma aliança vencedora.

Note ainda a diferença dos padrões espaciais entre o estado final de PPT para três espécies e para cinco espécies ou mais: a de três, até os tempos observados, é algo extremamente dinâmico, lembrando espirais, e quando há cinco ou mais o padrão aparenta ser mais robusto e estático, com uma organização em camadas. Esta última conclusão pode ser conferida também nos gráficos de densidade populacional: para PPT de três espécies as curvas oscilam com alta frequência, enquanto as os outros casos a densidade populacional varia muito pouco ao longo do tempo.

Interagindo por FFA as espécies tendem sempre a extinguirem. O que determina a espécie vencedora, basicamente, é a aleatoriedade dos eventos que ocorrem na evolução do sistema,

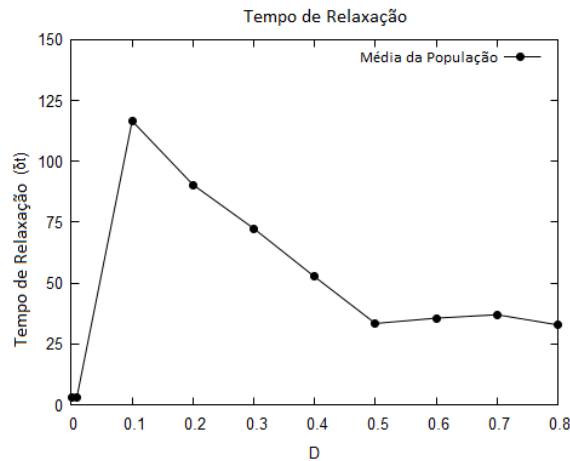
Figura 44: Resultados obtidos para (a) interações alelopáticas cíclicas entre três espécies e (b) três espécies competindo ciclicamente: a azul tem vantagem sobre a verde por ter uma taxa de crescimento maior, a verde tem vantagem sobre a vermelha por ter uma taxa de crescimento maior, e a vermelha tem vantagem sobre a verde por poder matá-la (através de supressão alelopática).



como a disposição inicial dos primeiros espécimes e as probabilidades de cada indivíduo morrer ou se replicar. Porém, como já citado anteriormente, deve haver um conjunto limitado de disposições espaciais que possibilitam a coexistência de duas (ou mais) espécies - um exemplo é a disposição em faixas de largura aproximadamente iguais. Estes estados finais, embora de equilíbrio, aparentam ser instáveis, uma vez que ocorrem com pouca frequência e devem ser sensíveis a perturbações (como a adição de indivíduos de uma das espécies).

Para uma descrição mais quantitativa sobre os sistemas estudados, estimar D_s críticos, isto é, onde há uma transição de fase, é de extrema importância. Entretanto, para estimar este parâmetro é preciso encontrar grandezas que explicitam a mudança de comportamento do estado de equilíbrio do sistema. Encontrar essas grandezas pode se tornar uma tarefa complicada, principalmente por conta da natureza das transições existentes: uma quanto à sobrevivência ou não de espécies, e uma referente à disposição espacial final das espécies sobreviventes. Para casos semelhantes ao de cinco espécies interagindo via PPT, partindo da condição inicial de focos, propõe-se usar o tempo de relaxação t_r . Foram criadas janelas de tempo de tamanho $\delta t = 100$, e a janela de tempo em que o desvio padrão das populações fica menor do que 10^{-3} , assim como as janelas subsequentes, é o chamado t_r . Porém, note que o tempo de relaxação pode não ser tão preciso em outros sistemas - ele é um bom indicador neste sistema em específico porque as grandes oscilações da densidade populacional estão vinculadas diretamente com a quebra dos focos e a reorganização dos espécimes em "camadas" estáveis. Na figura 45 é mostrado como o tempo de relaxação varia com a constante de difusão D .

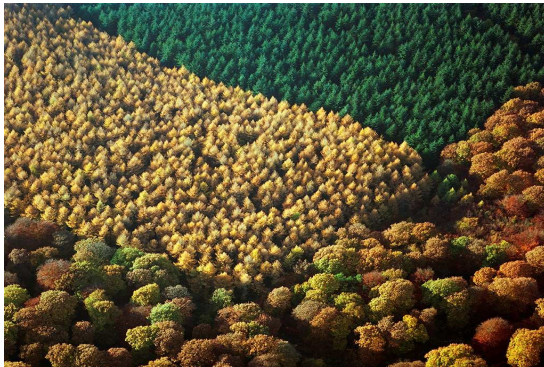
Figura 45: Tempo de relaxação t_r (em unidades de δt) em função da constante de difusão. As simulações foram até $t = 15000$. Há um pico entre $D = 0.01$ e 0.1 indicando que o estado de equilíbrio é alterado, portanto há uma transição de fase. Simulações para $D = 0.02$ e 0.05 foram feitas, porém o tempo de relaxação não foi alcançado. A curva desenhada é a média entre a feita para as cinco populações.



Fonte: Próprio autor.

Na natureza é possível identificar diversos padrões gerados por diferentes espécies de plantas, ou diferentes biomas. Mesmo que, a princípio, nestes padrões não estejam inseridas espécies alelopáticas, é provável que os padrões tenham emergido por difusão de substâncias químicas no solo, ou condições de umidade e temperatura que sejam, de alguma forma, alterada pela presença de algumas espécies. Alguns exemplos de padrões que emergem naturalmente em vegetações pode ser visto na figura 46, e nele são observados padrões como os retalhos bem demarcados, disposições aleatórias e padrões parecidos com espirais.

Figura 46: Exemplos de padrões em vegetações encontrados na natureza. (a) Dois grandes recortes de duas espécies diferentes de árvores, envoltos por uma distribuição aparente aleatória de outras espécies, Floresta de Dean, Gloucestershire, Inglaterra. (b) Distribuição aleatória ou em espirais, Michigan, Estados Unidos. (c) Encontro entre dois diferentes tipos de vegetação, República Democrática do Congo. (d) Grandes recortes com distinção entre diferentes espécies dentro dos mesmos recortes, Recklinghausen, Alemanha.



(a) Fonte: Historic England Services.



(b) Fonte: marchello74, Deposit Photos.



(c) Fonte: Frans Lanting, Robert Harding.



(d) Fonte: Ina Fassbender, Reuters.

Capítulo 6

Conclusões e Perspectivas

A modelagem de sistemas biológicos vivos aparenta ser uma tarefa extremamente complexa. Cada indivíduo está sujeito a um conjunto gigantesco de interações externas: temperatura e umidade, quantidade de recursos, vizinhança, mutações genéticas, humor. De fato, a modelagem de cada indivíduo é uma tarefa quase impossível: imagine, por exemplo, se tentássemos criar modelos computacionais para prever as ações de um determinado agricultor no interior da China, ou um empresário de Wall Street - dada as particularidades destes dois indivíduos, embora os dois sejam humanos, os modelos precisariam ser completamente diferentes e levar em conta toda a história deles. Entretanto, para prever comportamentos de grupo, as modelagens computacionais apresentam um grande êxito. Mesmo que uma comunidade seja formada por muitos indivíduos, é possível observar que quando agrupados, seus comportamentos são bem mais previsíveis do que analisados individualmente. Note, por exemplo, como o modelo sugerido apresenta tão poucos parâmetros quando comparado com as infinitas adversidades que uma planta (ou outra espécie alelopática) pode sofrer.

Com este trabalho foi possível estudar diferentes espécies interagindo por alelopatia, considerando diferentes número de espécies, condições iniciais, capacidade de difusão de toxinas pela rede e formas de interações entre as espécies. Concluímos através deste estudo que o modelo é sensível principalmente ao número de espécies e como elas interagem entre si. Foram observados diferentes padrões espaciais emergindo do sistema para diferentes parâmetros. Além disso, foi possível notar a criação de alianças entre espécies, facilitando a sobrevivência de cada indivíduo. O modelo proposto para dinâmica de populações alelopáticas reproduz resultados bem semelhantes a modelos de competição por recursos, já bastante abordados na literatura.

Este trabalho ainda abre diversos caminhos a serem explorados. Um estudo mais aprofundado sobre os padrões que emergem do sistema: verificar como se dá a evolução dos pequenos agregados até as disposições finais; como é a correlação espacial entre as espécies, e como ela evolui no tempo. É possível também encontrar características gerais do sistema estudando-se a natureza das transições morfológicas (dinâmicas) conforme os parâmetros são alterados - um estudo desse tipo pode levar à determinação de parâmetros de ordem e dos expoentes críticos

do sistema, para enfim, poder classificar o sistema em uma classe de universalidade. É possível também sistematizar a relação do número de espécies com a extinção ou não de espécies, para que se possa compreender melhor este fenômeno.

Apêndice A

Sistemas Dinâmicos

A.1 Sistemas de Primeira Ordem

Considere a seguinte equação diferencial:

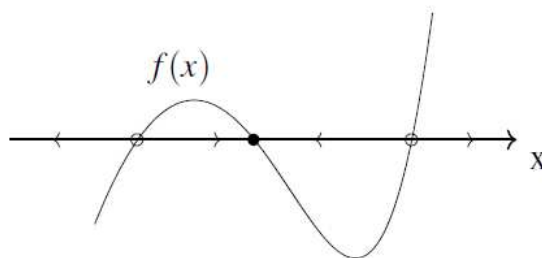
$$\dot{x} = f(x) \quad (27)$$

Sujeito às condições iniciais $x(0) = x_0$.

Sendo x uma função do tempo t e $f(x)$ uma função suave de x . Esse tipo de equação é chamado de unidimensional, ou um sistema de primeira ordem. Todo x^* tal que $f(x^*) = 0$ é chamado de ponto fixo, e pode-se dizer que neste ponto o sistema se encontra num estado estacionário. Perceba que para $f(x) > 0$, x é uma função crescente, e para $f(x) < 0$, x é decrescente.

Geometricamente, é possível entender este sistema como um campo vetorial em uma linha (sistema unidimensional). Em um gráfico de $f(x) \times x$, conseguimos identificar a velocidade \dot{x} em cada ponto em x . Se a velocidade é positiva, a representamos por vetores apontando para esquerda, e se for negativa, para direita, como feito na figura 47. Nota-se na figura que existem dois tipos de pontos fixos (diferenciados pela hachura): os que atraem o fluxo vetorial, chamados de estáveis, e os que repelem, chamados de instáveis.

Figura 47: Uma função $f(x)$ arbitrária com dois pontos fixos instáveis e um estável. Note as setas indicando o fluxo no eixo x .



Fonte: Próprio autor.

Quantitativamente, a análise da estabilidade do ponto fixo é feita a partir de uma perturbação. Seja x^* um ponto fixo e $\eta = x - x^*$ uma pequena perturbação em torno de x^* . Derivando η , expandindo em série de Taylor e usando que $f(x^*) = 0$ obtém-se:

$$\dot{\eta} = \dot{x} = f(x^* + \eta) = f'(x^*)\eta + O(\eta^2) \quad (28)$$

Para perturbações suficientemente pequenas, os termos $O(\eta^2)$ de ordens superiores podem ser desprezados:

$$\dot{\eta} = f'(x^*)\eta \quad (29)$$

Da equação 29 é possível então concluir que se $f'(x^*) > 0$ a perturbação cresce exponencialmente, portanto sendo um ponto fixo instável, e decresce exponencialmente se $f'(x^*) < 0$, classificado como ponto fixo estável. Se $f'(x^*) = 0$ é preciso olhar para os termos desprezados na equação 29.

A.2 Sistemas de Segunda Ordem

A.2.1 Sistemas Lineares

Considere o sistema de equações:

$$\begin{aligned} \dot{x} &= ax + by \\ \dot{y} &= cx + dy \end{aligned} \quad (30)$$

Sujeito às condições iniciais $x(0) = x_0$ e $y(0) = y_0$.

Sendo a, b, c e d parâmetros quaisquer. Ou, de forma compacta:

$$\dot{\mathbf{x}} = A\mathbf{x} \quad (31)$$

Sendo

$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}, \quad \mathbf{x} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \quad (32)$$

As soluções de 31 podem ser vistas como trajetórias no plano (x, y) , chamado de espaço de fase. Todo ponto (x^*, y^*) tal que $\dot{\mathbf{x}} = 0$ é dito como ponto fixo. Note ainda que para qualquer escolha de A , $\mathbf{x} = 0$ é ponto fixo.

Em sistemas bidimensionais as classificações dos pontos fixos são mais complexas do que apenas estável e instável, e dependem dos autovalores de A . Definindo Δ como o determinante de A e τ o traço, temos que:

Se $\Delta < 0$ o ponto fixo é um ponto de sela. No ponto de sela, existem duas trajetórias em que o sistema evolui em linha reta, uma se aproximando do ponto, e outra se afastando. Todas

as outras trajetórias em torno do ponto de sela tendem a se tornar paralelas com as trajetórias retas, de forma que para $t \rightarrow \infty$ elas se alinham com a que diverge, e para $t \rightarrow -\infty$ se alinham com a que converge. Portanto o ponto de sela é um ponto fixo instável.

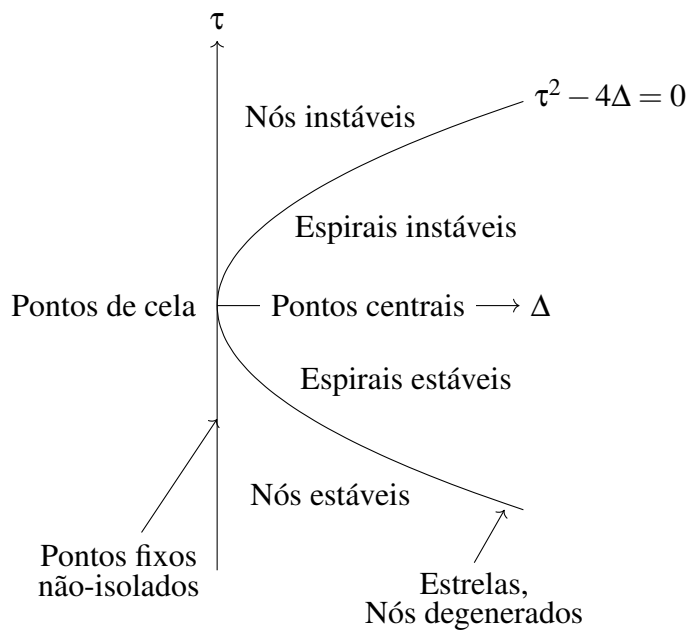
Se $\Delta > 0$ e $\tau > 0$, os pontos são instáveis e podem ser: nós instáveis, se $\tau^2 - 4\Delta > 0$, que repelem exponencialmente todas trajetórias em torno do ponto fixo; ou espirais instáveis, se $\tau^2 - 4\Delta < 0$, que repelem de forma oscilatória todas trajetórias em torno do ponto fixo.

Se $\Delta > 0$ e $\tau < 0$, os pontos são estáveis e podem ser: nós estáveis, se $\tau^2 - 4\Delta < 0$, que atraem exponencialmente todas trajetórias em torno do ponto fixo; ou espirais estáveis, se $\tau^2 - 4\Delta > 0$, que atraem de forma oscilatória todas trajetórias em torno do ponto fixo.

Se $\tau = 0$ o ponto fixo é um ponto central, e todas as trajetórias em torno do ponto fixo são periódicas (trajetórias fechadas no espaço de fase).

Os demais casos, onde $\Delta = 0$ ou $\tau^2 - 4\Delta = 0$, são situações menos recorrentes. Para uma leitura mais aprofundada, ver Strogatz [42]. Todas as situações estão demonstradas no diagrama da figura 48.

Figura 48: Diagrama para classificação de pontos fixos e suas estabilidades.



Fonte: Imagem adaptada de Strogatz [42].

A.2.2 Sistemas Não-lineares

Generalizando as equações 30, considere as seguintes equações:

$$\begin{aligned} \dot{x} &= f(x, y) \\ \dot{y} &= g(x, y) \end{aligned} \tag{33}$$

Sujeito às condições iniciais $x(0) = x_0$ e $y(0) = y_0$.

Considere ainda que (x^*, y^*) é ponto fixo.

Seja $u = x - x^*$ e $v = y - y^*$ pequenas perturbações em torno do ponto fixo, é preciso ver como que estas perturbações evoluirão. Derivando u , expandindo em séries de Taylor, usando $f(x^*, y^*) = 0$ e desprezando os termos de ordem superior a um, obtém-se:

$$\dot{u} = \dot{x} = f(x^* + u, y^* + v) = u \frac{\partial f}{\partial x} + v \frac{\partial f}{\partial y} \quad (34)$$

E de forma análoga:

$$\dot{v} = u \frac{\partial g}{\partial x} + v \frac{\partial g}{\partial y} \quad (35)$$

Sendo todas as derivadas parciais avaliadas no ponto (x^*, y^*) .

Portanto a perturbação evolui da seguinte forma:

$$\begin{pmatrix} \dot{u} \\ \dot{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x} & \frac{\partial f}{\partial y} \\ \frac{\partial g}{\partial x} & \frac{\partial g}{\partial y} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \quad (36)$$

A equação 36 é chamada de sistema linearizado. E a matriz

$$J = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x} & \frac{\partial f}{\partial y} \\ \frac{\partial g}{\partial x} & \frac{\partial g}{\partial y} \end{pmatrix}_{(x^*, y^*)} \quad (37)$$

é chamada de Jacobiana. A dinâmica desse sistema pode ser analisada pelo diagrama 48. Lembre-se, porém, que nas expressões 34 e 35 foram desprezados os termos quadráticos e de ordem superior. Essa aproximação é válida desde que o ponto fixo seja classificado como um ponto de sela, nó (instável ou estável) ou espiral (instável ou estável). Caso o ponto fixo seja classificado como um dos casos limites (pontos centrais, pontos fixos não-isolados, estrelas e nós degenerados) é preciso uma abordagem mais atenta, pois o sistema ali é sensível a perturbações extremamente pequenas.

Bibliografia

- [1] ALLESINA, S., AND LEVINE, J. M. A competitive network theory of species diversity. *Proceedings of the National Academy of Sciences* 108, 14 (2011), 5638–5642.
- [2] AN, M., JOHNSON, I. R., AND LOVETT, J. V. Mathematical modeling of allelopathy: Biological response to allelochemicals and its interpretation. *Journal of Chemical Ecology* 19, 10 (1993), 2379—2388.
- [3] BAIS, H. P., ET AL. Allelopathy and exotic plant invasion: From molecules and genes to species interactions. *Science* 301, 5638 (2003), 1377–1380.
- [4] BEGON, M., TOWNSEND, C. R., AND HARPER, J. L. *Ecologia: De Individuos a Ecosistemas*. ARTMED, 2007.
- [5] BONGIORNO, C., MICCICHÈ, S., MANTEGNA, R. N., ET AL., Eds. *An Agent Based Model of air traffic management* (2013), Proceedings of the 3rd SESAR Innovation Days.
- [6] BOOKSTABER, R. M. Using agent-based models for analyzing threats to financial stability, 2012 (acessado em 10 de outubro, 2019). www.treasury.gov/ofr.
- [7] BRITTON, N. F. *Essential Mathematical Biology*. Springer, 2003.
- [8] BROENNIMANN, O., ET AL. Contrasting spatio-temporal climatic niche dynamics during the eastern and western invasions of spottedknapweed in north america. *Journal of Biogeography* 41, 6 (2014), 1126–1136.
- [9] CALLAWAY, R. M., AND ASCHEHOUG, E. T. Invasive plants versus their new and old neighbors: A mechanism for exotic invasion. *Science* 290, 5491 (2000), 521–523.
- [10] CARVALHO, S. A. *Theoretical Essays About Complex Ecological Network of Emergent Systems*. PhD thesis, Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, Minas Gerais, BRA, 2020.
- [11] DE SOUZA, D. R., MARTINS, M. L., AND CARMO, F. M. S. A multiscale model for plant invasion through allelopathic suppression. *Biological Invasions* 12, 6 (2010), 1543—1555.

- [12] DOUST, M. R., AND HAGHIGHIFAR, F. The lotka-volterra predator-prey system; having interespecific interactions or harvested factor. *Journal of Intelligent System Research* 5, 2 (2011), 105–111.
- [13] EISEN, E. J. Results of growth curve analyses in mice and rats. *Journal of Animal Science* 42, 4 (1976), 1008–1023.
- [14] ELTON, C. *Animal Ecology*. Macmillan, New York, 1927.
- [15] EPSTEIN, J. M., AND AXTELL, R. *Growing Artificial Societies: Social Science From The Bottom Up*. Cambridge, MA: MIT Press., 1996.
- [16] FENG, S.-S., AND QIANG, C.-C. Self-organization of five species in a cyclic competition game. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* 392, 19 (2013), 4675–4682.
- [17] FICK, A. On liquid diffusion. *Annalen der Physik und Chemie* 94, 59 (1855). reprinted in A. Fick, 'On liquid diffusion'. *Journal of Membrane Science*, vol. 100, no. 1, pp. 33–38, 1995.
- [18] GARDNER, M. Mathematical games – the fantastic combinations of john conway's new solitaire game 'life'. *Scientific American* 223, 4 (1970), 120–123.
- [19] GONZÁLEZ-OREJA, J. A., ET AL. Using variation partitioning techniques to quantify the effects of invasive alien species on native urban bird assemblages. *Biological Invasions* 20, 10 (2018), 2861—2874.
- [20] GOUYET, J.-F. *Physics and Fractal Structures*. Springer New York, 1996.
- [21] HARDIN, G. The competitive exclusion principle. *Science* 131, 3409 (1960), 1292–1297.
- [22] HERNÁNDEZ, F. A., PARKER, B. M., AND PYLANT, C. L. Invasion ecology of wild pigs (*sus scrofa*) in florida, usa: the role of humans in the expansion and colonization of an invasive wild ungulate. *Biological Invasions* 20, 7 (2018), 1865—1880.
- [23] HUISMAN, J., AND WEISSING, F. J. Biodiversity of plankton by species oscillations and chaos. *Nature* 402 (1999), 407—410.
- [24] KACENA, M. A., ET AL. Bacterial growth in space flight: logistic growth curve parameters for escherichia coli and bacillus subtilis. *Applied Microbiology and Biotechnology* 51, 2 (1999), 229–234.
- [25] KERR, B., ET AL. Local dispersal promotes biodiversity in a real-life game of rock–paper–scissors. *Nature* 418 (2002), 171–174.
- [26] LAU, J. A. Beyond the ecological: Biological invasions alter natural selection on a native plant species. *Ecology* 89, 4 (2008), 1023–1031.

- [27] LEE, J. Stability of finite difference schemes on the diffusion equation with discontinuous coefficients, 2017 (acessado em 5 de fevereiro, 2020). <https://math.mit.edu/research/highschool/rsi/documents/2017Lee.pdf>.
- [28] LEE, K., MOORTHY, S., AND GHOSH, S. Multiple scale computational model for damage in composite materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 172, 1-4 (1999), 175–201.
- [29] LEYDESDORFF, L., DE MOYA-ANEGÓN, F., AND GUERRERO-BOTE, V. P. Journal maps, interactive overlays, and the measurement of interdisciplinarity on the basis of scopus data (1996-2012). *JASIST* 66, 6 (2015), 1001–1016.
- [30] LOTKA, A. J. *Elements of Physical Biology*. Williams and Wilkins Company, 1925.
- [31] MACAL, C., AND NORTH, M., Eds. *Introductory tutorial: Agent-Based modeling and simulation* (2014), Proceedings of the Winter Simulation Conference.
- [32] MALTHUS, T. R. *An essay on the principle of population, as it affects the future improvement of society. With remarks on the speculations of Mr. Godwin, M. Condorcet and other writers*. London, J. Johnson, 1798.
- [33] MIRANDA, C. A. S. F., ET AL. Chemical characterisation and allelopathic potential of essential oils from leaves and rhizomes of white ginger. *Revista Ciência Agronômica* 46, 3 (2015), 555—562.
- [34] MOLISCH, H. *Der Einfluss einer Pflanze auf die Andere, Allelopathie*. Nature, 1937.
- [35] ROBINSON, G. E., ET AL. Empowering 21st century biology. *BioScience* 60, 11 (2010), 923–930.
- [36] RUSSEL, J. C., AND BLACKBURN, T. M. The rise of invasive species denialism. *Cell-Press* 32, 1 (2017), 3–6.
- [37] SANTOS, S., PEDRALLI, G., AND MEYER, S. *Aspectos da fenologia e ecologia de Hedychium coronarium (Zingiberaceae) na estação ecológica do Tripuí, Ouro Preto-MG*, 2005 (acessado em 6 de Outubro, 2020). http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1806-66902015000300555&lng=en&nrm=iso.
- [38] SARDARA, A. K., ET AL. Mathematical analysis of the two species lotka-volterra predator-prey inter-specific game theoretic competition model. *AMO - Advanced Modeling and Optimization* 18, 2 (2016).
- [39] SCHRODINGER, E. *What Is Life? The Physical Aspect of the Living Cell*. Cambridge University Press, 1944.

-
- [40] SEASTEDT, T. R., AND SUDING, K. N. Biotic constraints on the invasion of diffuse knapweed (*Centaurea diffusa*) in north american grasslands. *Oecologia* 151, 4 (2007), 626—636.
- [41] STIRLING, A. A general framework for analysing diversity in science, technology and society. *J. R. Soc. Interface* 4, 15 (2007), 707–719.
- [42] STROGATZ, S. H. *Nonlinear Dynamics And Chaos: With Applications To Physics, Biology, Chemistry, And Engineering*. CRC Press, 1994.
- [43] SZABÓ, P., CZÁRÁNB, T., AND SZABÓ, G. Competing associations in bacterial warfare with two toxins. *Journal of Theoretical Biology* 248, 4 (2007), Pages 736–744.
- [44] VERHULST, P. F. Notice sur la loi que la population poursuit dans son accroissement. *Correspondance mathématique et physique* 10 (1838), 113–121.
- [45] VIDAL, M. A unifying view of 21st century systems biology. *FEBS Letters* 583, 24 (2009), 3891–3894.
- [46] VOLTERRA, V. Variazioni e fluttuazioni del numero d'individui in specie animali conviventi. *Memoria della Reale Accademia Nazionale dei Lincei* 2 (1926), 31–113.