



Universidade Federal da Paraíba
Centro de Ciências Exatas e da Natureza
Departamento de Física

Programa de Pós-graduação em Física

Dinâmica estocástica de sistemas biológicos: caos e o efeito do predador de topo

Carlos Alberto de Souza Filho

Tese de Doutorado

João Pessoa - PB

30 de junho de 2017

Catálogo na publicação
Seção de Catalogação e Classificação

S729d Souza Filho, Carlos Alberto de.

Dinâmica estocástica de sistemas biológicos: caos e o
efeito do predador de topo / Carlos Alberto de Souza
Filho. - João Pessoa, 2017.

98f. : il.

Orientação: Jorge Gabriel Gomes de Souza Ramos.
Tese (Doutorado) - UFPB/CCEN.

1. Predador de topo. 2. superpredador. 3. princípio de
máxima entropia. 4. dinâmica caótica. 5. competição
cíclica. 6. dinâmica de populações. I. Ramos, Jorge
Gabriel Gomes de Souza. II. Título.

UFPB/CCEN

Universidade Federal da Paraíba
Centro de Ciências Exatas e da Natureza
Departamento de Física

Carlos Alberto de Souza Filho

Dinâmica estocástica de sistemas biológicos: caos e o efeito do predador de topo

Trabalho apresentado ao Programa de Pós-graduação em Física do Departamento de Física da Universidade Federal da Paraíba como requisito parcial para obtenção do grau de Doutor em Física.

Orientador: *Prof. Dr. Jorge Gabriel Gomes de Souza Ramos*

João Pessoa - PB
30 de junho de 2017

Ata da Sessão Pública da Defesa de Tese de
Doutorado do aluno **Carlos Alberto de Souza
 Filho**, candidato ao Título de Doutor em Física
 na Área de Concentração Física da Matéria
 Condensada.

1 Aos trinta dias do mês de junho do ano de dois mil e dezessete, às 10:00, no Auditório
 2 da Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências Exatas e da Natureza da
 3 Universidade Federal da Paraíba, reuniram-se os membros da Banca Examinadora
 4 constituída para examinar o candidato ao grau de Doutor em Física na área de Física da
 5 Matéria Condensada, **Carlos Alberto de Souza Filho**. A comissão examinadora foi
 6 composta pelos professores doutores: *Jorge Gabriel G. de Souza Ramos* (UFPB),
 7 orientador e presidente da banca examinadora, *Valdir Barbosa Bezerra* (UFPB),
 8 *Laércio Losano* (UFPB), *Paulo Roberto de Araújo Campos* (UFPE) e *Anderson Luiz da*
 9 *Rocha e Barbosa* (UFRPE). Dando início aos trabalhos, o Prof. Jorge Gabriel G. de
 10 Souza Ramos comunicou aos presentes a finalidade da reunião. A seguir, passou a
 11 palavra ao candidato para que o mesmo fizesse, oralmente, a exposição do trabalho de
 12 tese intitulado “*Dinâmica estocástica de sistemas biológicos: caos e o efeito do*
 13 *predador de topo*”. Concluída a exposição, o candidato foi arguido pela Banca
 14 Examinadora, que emitiu o seguinte parecer: “**aprovado**”. Assim sendo, deve a
 15 Universidade Federal da Paraíba expedir o respectivo diploma de Doutor em Física na
 16 forma da lei. E para constar, eu, Danilo Wilson Lemos Menezes, redigi esta ata que vai
 17 assinada por mim e pelos membros da Banca Examinadora. João Pessoa, Paraíba, **30 de**
 18 **junho de 2017.**

Prof. Dr. Jorge Gabriel G. de Souza Ramos
Orientador - UFPB

Prof. Dr. Valdir Barbosa Bezerra
UFPB

Prof. Dr. Laércio Losano
UFPB

Prof. Dr. Paulo Roberto de Araújo Campos
UFPE

Prof. Dr. Anderson Luiz da Rocha e Barbosa
UFRPE

Lic. Danilo Wilson Lemos Menezes
Técnico em Assuntos Educacionais

Jorge Gabriel G. de Souza Ramos
Valdir Barbosa Bezerra
Laércio Losano
Paulo Roberto de Araújo Campos
Anderson Luiz da Rocha e Barbosa
Danilo Wilson Lemos Menezes

Agradecimentos

Ninguém é uma ilha! Ninguém chega a lugar algum sem precisar de auxílio e/ou orientação de alguma pessoa.

Várias pessoas contribuíram, de forma direta ou indireta, para a concretização deste trabalho e sou grato a todas elas. Contudo, duas dentre essas várias pessoas merecem um agradecimento especial:

- Ao meu orientador, Jorge Gabriel, que, ao 40 minutos do segundo tempo, aceitou o desafio de assumir um time jogando bem porém muito desorganizado. Arrumou a casa, indicou o caminho e, quando ninguém (nem eu) mais acreditava que daria certo, conseguimos nos acréscimos o gol que nos deu a vitória;
- À minha esposa, Bárbara, que, desde os tempos de graduação, vem me incentivando, me apoiando, escutando minhas lamúrias, vem sendo meu porto seguro independentemente da direção que eu siga.

Por fim, agradeço a CAPES, pelo apoio financeiro.

“The fairest thing we can experience is the mysterious. It is the fundamental emotion which stands at the cradle of true art and true science. He who does not know it and can no longer wonder, no longer feel amazement, is as good as dead, a snuffed-out candle.”

—ALBERT EINSTEIN (1930)

Resumo

Entender como diferentes espécies interagem e os mecanismos responsáveis por manter a biodiversidade observada na natureza é uma questão ainda aberta em ecologia. Diversos modelos simplificados foram propostos e amplamente estudados nas últimas décadas. Como exemplo podemos citar os modelos de competição acíclica, tipo predador-presa de Lotka-Volterra, usados para estudar a competição entre duas ou mais espécies de forma transitiva (hierárquica), e o modelo cíclico tipo Pedra-Papel-Tesoura, envolvendo três espécies ou mais espécies de forma intransitiva. É bem conhecido que a intransitividade pode levar a coexistência entre várias espécies. Por outro lado, em relações transitivas, a importância ecológica do predador de topo tem sido o foco de extensa pesquisa em todo o mundo. Sua presença em um ecossistema pode favorecer a coexistência de espécies, uma vez que o mesmo interrompe o processo de exclusão competitiva, impondo sua própria ordem à composição de espécies. Tal fenômeno é conhecido como coexistência mediada por predação e tem sido registrado em vários ecossistemas distintos, tais como invertebrados em recifes de corais, comunidades de aves florestais, e diversidade de plantas. Esta tese trata dos efeitos de um predador de topo sobre a competição cíclica entre três espécies distintas que seguem as regras do jogo pedra-papel-tesoura. Adicionamos o predador de topo como a quarta espécie no sistema composto por três espécies que evoluem seguindo as regras padrão de mobilidade, reprodução e predação, e estudamos como o sistema evolui nesse novo ambiente, em comparação com o caso na ausência do predador de topo. Utilizamos o princípio de máxima entropia para derivar uma expressão matemática relacionando a densidade de máximos de um observável com sua função de autocorrelação temporal. Empregamos o conceito de distância Hamming para diferenciar o comportamento aleatório do caótico dos sistemas estudados. Os resultados mostram que as espécies em competição cíclica tendem a se agrupar como mecanismo de sobrevivência e o predador de topo tende a se espalhar uniformemente pela rede, diminuindo o tamanho médio dos aglomerados das espécies que competem de forma cíclica.

Palavras-chave: Predador de topo; superpredador; princípio de máxima entropia; dinâmica caótica; competição cíclica; dinâmica de populações;

Abstract

To understand how different species interact and the mechanisms responsible for maintaining biodiversity observed in nature is a still open issue in ecology. Several simplified models have been proposed and extensively studied in the last few decades. As an example we can mention the acyclic predator-prey model of Lotka-Volterra, used to study the transitive competing relationship (hierarchical) between two or more species, and the rock-paper-scissors models involving three or more species in an intransitive relationship. It is well known that intransitivity may lead to biodiversity. On the other hand, in transitive relationship, the ecological importance of the apex predator has been the focus of several investigations. The presence of an apex predator in a given ecosystem may favor coexistence of species, since it can diminish the process of competitive exclusion, imposing its own order to the set of species. This is known as predator-mediated coexistence and has been identified in several distinct settings, such as coral reef communities, communities of birds, and vegetationally diverse environments. This thesis deals with the effects of an apex predator on the cyclic competition among three distinct species that follow the rules of rock-paper-scissors game. We add the apex predator as the fourth species in the system that contains three species that evolve following the standard rules of migration, reproduction and predation, and study how the system evolves in this new environment, in comparison with the case in the absence of the apex predator. We use the principle of maximum entropy to derive a mathematical expression to connect the density of maxima of an observable to its autocorrelation function. We use the Hamming distance concept to differentiate the random behavior from the chaotic behavior of the systems studied. The results show that species in a cyclic competition engenders the tendency to cluster as a survival mechanism and the apex predator tends to spread uniformly in the lattice, diminishing the average size of the clusters of the species that compete cyclically.

Keywords: Apex predator; superpredator; principle of maximum entropy; chaotic dynamics; cyclic competition; population dynamics;

Sumário

1	Introdução: conceitos básicos em ecologia	1
1.1	Princípio da exclusão competitiva e biodiversidade	4
1.2	Importância ecológica do predador de topo	5
1.3	Objetivo e sumário geral da tese	8
2	Modelos matemáticos em dinâmica de populações	10
2.1	Modelo de Malthus	10
2.2	Modelo de Verhulst	12
2.3	Modelo de Lotka-Volterra	14
2.4	Modelo Pedra-Papel-Tesoura	17
2.4.1	Exemplos de competição cíclica na natureza	18
2.4.2	O Modelo de May-Leonard	20
3	Caos e entropia em sistemas biológicos	23
3.1	Definição de entropia	24
3.1.1	Entropia do ponto de vista da termodinâmica	24
3.1.2	Entropia do ponto de vista da mecânica estatística	29
3.1.3	Entropia do ponto de vista da teoria de informação	32
3.1.4	Equivalência entre entropia estatística e entropia termodinâmica	34
3.2	Entropia em sistemas abertos	36
3.3	Caracterização da dinâmica caótica	38
3.3.1	Definição de Caos	39
3.3.2	Lorenz e o efeito borboleta	40
3.3.3	Caracterização do caos em sistemas biológicos	42
4	Resultados e discussões	47
4.1	Modelo para o superpredador	47
4.2	Densidade de espécies <i>versus</i> tempo	52
4.3	Densidade de máximos	53

4.4	Estatística de <i>clusters</i>	58
5	Considerações Finais	64
A	Algoritmo de Hoshen-Kopelman	66
B	Publicações	69
B.1	C. A. Souza-Filho, D. Bazeia, and J. G. G. S. Ramos; PRE (2017)	69

Lista de Figuras

1.1	Ilustração da cadeia alimentar em um ecossistema aquático. As setas em vermelho indicam o fluxo de energia e de nutrientes, indo do nível trófico mais baixo para um mais alto.	2
1.2	Pirâmide de biomassa, indicando a quantidade de matéria orgânica disponível em cada nível trófico.	3
1.3	Curva de crescimento populacional (volume) do <i>Paramecium caudatum</i> e <i>Paramecium aurelia</i> cultivados juntos e separadamente em um dado meio.	5
1.4	Cadeia alimentar de <i>Pisaster</i> publicada por Paine (1966).	6
1.5	Exemplos de cascatas mediada por predadores causando a extinção de espécies locais.	9
2.1	População do Brasil segundo o IBGE (preto) e o modelo de Malthus (vermelho). Os dados referentes aos anos entre 1872 e 2010 são do censo realizado pelo IBGE enquanto os dados referentes aos anos 2016 a 2060 são projeções.	12
2.2	Evolução temporal de $N(t)$ para três condições iniciais distintas.	13
2.3	Espaço de fases para o modelo predador-presa, definido pelas equações de Lotka-Volterra. Os parâmetros usados foram: $\alpha = 1/10$, $\beta = 1/12000$, $\gamma = 1/25000$ e $\delta = 1/25$. A População inicial de presas foi $N_0 = 2000$ enquanto a população inicial de predadores foi $P_0 = \{600, 1200, 3000\}$ para as cores {vermelho, preto, verde}, respectivamente.	15
2.4	Solução periódica para a população de presas e predadores para as equações de Lotka-Volterra (2.7) e (2.8). Os parâmetros utilizados foram os mesmos da figura 2.3.	16
2.5	(a) Oscilações periódicas na população de lincos e lebres, como indicado pelo número de peles vendidas pela Companhia da Baía de Hudson. (b) Espaço de fases.	16

- 2.6 Diagrama simbólico mostrando a ordem de predação para possíveis interações entre três espécies. A figura (a) corresponde ao caso transitivo, onde A possui apenas presas, sendo a estratégia globalmente dominante, e C possui apenas predadores, sendo a estratégia mais fraca. A figura (b) ilustra o caso intransitivo, em que não há uma estratégia superior absoluta. 18
- 2.7 Três tipos de estratégias de acasalamento dos lagartos *Uta Stansburiana*, caracterizando uma competição cíclica. As estratégias de acasalamento diferem na forma como os lagartos defendem seus territórios. Os três tipos de comportamento de acasalamento estão ligados a polimorfismos. Os machos de garganta laranja (A) dominam a população de machos de papo azul (B) que por sua vez ganham para os machos de garganta amarela (C). A estratégia dos machos de garganta amarela (C) faz com que eles ganhem para os machos de garganta laranja (A), fechando o ciclo. 19
- 2.8 Curva experimental da abundância das três cepas em condições ambientais distintas: Em (a) a interação e dispersão entre as cepas são locais. Em (b) o ambiente foi bem misturado, no qual a dispersão e interação entre as cepas não são exclusivamente locais. Em (c) há um misto entre (a) e (b). As linhas tracejadas indicam que a abundância das cepas diminuiu abaixo do limite de detecção. Os pontos dos dados são uma média de três repetições, e as barras representam o desvio padrão. Os pontos consecutivos são separados por 24h, aproximadamente 10 gerações bacterianas. 20
- 2.9 Solução das equações (2.10) para os parâmetros $\mu = 0.25$ e $\sigma = 0.40$. Em (a) utilizamos a condição inicial $\{a_0, b_0, c_0\} = \{0.22, 0.22, 0.19\}$ e em (b) $\{a_0, b_0, c_0\} = \{0.22, 0.22, 0.25\}$. 21
- 2.10 Evolução temporal para o modelo de May-Leonard estocástico (esquerda). Cada cor representa uma espécie distinta. À direita temos a configuração da rede após 1000 gerações. Os parâmetros utilizados foram $\mu = 0.25$, $\sigma = 0.40$ e $L = 256$. 22
- 3.1 Caminhos irreversível e reversível de um estado inicial a para um estado final b . 26
- 3.2 Solução do sistema de Lorenz para $\sigma = 10$, $r = 28$ e $b = 8/3$. 41
- 3.3 Nível da água do oceano em uma determinada estação (esquerda) com o passar do tempo. o painel à direita mostra a função de autocorrelação correspondente. 43

- 3.4 Densidade da distância Hamming como função do tempo para os sistemas $X3$, $X4$ e $SX3$. Cada cor representa um sistema diferente (ver legenda na figura). 44
- 3.5 Ilustração da distância Hamming para o tempo inicial (em cima), mostrando o quase invisível ponto laranja no centro da rede, e após 5000 gerações (em baixo), indicando como os dois estados estão separados um do outro. 46
- 4.1 Em cima: Diagrama simbólico mostrando a ordem de predação para algumas das possíveis interações entre três e quatro espécies. Em baixo: os respectivos instantâneos de uma simulação após 10^4 gerações. As setas representam a agressão e predação. Setas em preto indicam competição cíclica. Em (a) e (b) temos uma presa para cada espécie e em (c) duas presas para cada espécie. (d) Mostra o esquema onde a quarta espécie é um superpredador. 48
- 4.2 Vizinhança de von Neumann. Dado um sítio (i, j) , o mesmo possui quatro vizinhos mais próximos. 48
- 4.3 Esquerda: densidade populacional como função das gerações para uma realização típica do nosso modelo numa rede quadrada com $L = 128$. Direita: configuração final da rede após $T = 128 \times 128$ gerações. 51
- 4.4 Densidade de espécies como função do tempo para uma típica realização. A curva em preto representa a densidade de sítios vazios; curvas em cores representam as espécies distintas. Em (a) e (b) temos três e quatro espécies, respectivamente, competindo ciclicamente segundo os modelos $X3$ e $X4$. Em (c) temos três espécies competindo ciclicamente na presença de um superpredador (representado pela curva em amarelo). Note que em todos os casos o sistema atinge um estado estacionário após algum tempo transiente. 53
- 4.5 Curva de Bézier, mostrada em azul, da evolução temporal das espécies (a) A e (b) D do modelo $SX3$, no intervalo entre 800 e 1800 gerações. Os quadrados mostrados na figura representam pontos de máximo. A curva é construída a partir dos dados correspondentes às espécies vermelha e amarela que aparecem na figura 4.4(c). 55

- 4.6 Os pontos pretos representam o histograma do número de máximos em um intervalo de 10^3 gerações. Os casos (a) e (b) representam os modelos $X3$ e $X4$ nos quais todas as espécies competem ciclicamente. A figura (c) representa as espécies A , B e C do modelo $SX3$ enquanto (d) representa a espécie D (superpredador). Na tabela 4.1 mostramos os valores obtidos para as densidades médias de máximos em cada modelo e o respectivo desvio padrão. 55
- 4.7 Função de autocorrelação para três (a) e quatro (b) competindo ciclicamente. A curva em pontos pretos representam a autocorrelação de sítios vazios; curvas em cores representam as espécies distintas. Em (c) temos três espécies competindo ciclicamente na presença de um superpredador (curva em amarelo). As curvas foram obtidas após o sistema atingir o estado estacionário. 57
- 4.8 Função de autocorrelação para os modelos $X3$ (vermelho), $X4$ (verde) e $SX3$ (azul e amarelo). A curva em amarelo representa a função de autocorrelação do superpredador. A inserção realizada na figura mostra a perfeita concordância entre função obtida via simulação numérica e a aproximação realizada (ver o texto). 58
- 4.9 Esquerda: densidade populacional como função das gerações para uma realização típica do modelo $SX3$ numa rede quadrada com $L = 128$. Direita: configuração final da rede após $T = 128 \times 128$ gerações. 60
- 4.10 Número médio de *clusters* $\langle N(t) \rangle$, tamanho médio dos *clusters* $\langle S(t) \rangle$ e diversidade de *clusters* como função do tempo para o modelo $SX3$ numa rede com 128×128 sítios. As curvas em vermelho, verde e azul representam as espécies A , B e C respectivamente, enquanto que a curva em amarelo representa o superpredador (D). Nas colunas (a), (b) e (c) foram utilizados os mesmos parâmetros das figuras 4.9(a), 4.9(b) e 4.9(c), respectivamente (ver o texto). 61

- 4.11 Número médio de *clusters* $\langle N(t) \rangle$, tamanho médio dos *clusters* $\langle S(t) \rangle$ e diversidade de *clusters* como função do tempo. As curvas em vermelho e verde representam a evolução temporal de uma das espécies dos modelos $X3$ e $X4$, respectivamente. Azul representa uma das espécies em competição cíclica do modelo $SX3$ e amarelo representa o superpredador. Os gráficos da esquerda foram obtidos com $L = 128$ e $\{\sigma, \mu, \varepsilon, \gamma, \beta, \epsilon\} = \{0.25, 0.25, 0.50, 0.25, 0.15, 0.60\}$. Os gráficos da direita foram obtidos com $L = 512$, $\{\sigma = 0.25, \mu = 0.25, \varepsilon = 0.50\}$ para os modelos $X3$ e $X4$, e $\{\sigma, \mu, \varepsilon, \gamma, \beta, \epsilon\} = \{0.30, 0.30, 0.40, 0.25, 0.15, 0.60\}$ para o modelo $SX3$. 62
- A.1 Vizinhança de von Neumann. Dado um sítio (i, j) , o mesmo possui quatro vizinhos mais próximos. 66
- A.2 Ilustração do algoritmo de Hoshen-Kopelman para uma matriz 8×8 . 67

Lista de Tabelas

- | | | |
|-----|--|----|
| 1.1 | Área, distância para o continente e a ocorrência de pares reprodutores das diferentes espécies para as diferentes ilhas. “+” representa a presença de pares reprodutores e células em branco representam ausência. | 7 |
| 4.1 | Número médio de máximos em um intervalo de 10^3 gerações e o desvio padrão. Nos modelos $X3$ e $X4$ todas as espécies competem ciclicamente, enquanto no modelo $SX3$ a espécie D é um predador de topo. | 56 |
| 4.2 | Número médio de máximos em um intervalo de 10^3 gerações, obtidos através da relação (4.11). | 58 |

CAPÍTULO 1

Introdução: conceitos básicos em ecologia

“It is interesting to contemplate an entangled bank, clothed with many plants of many kinds, with birds singing on the bushes, with various insects flitting about, and with worms crawling through the damp earth, and to reflect that these elaborately constructed forms, so different from each other, and dependent on each other in so complex a manner, have all been produced by the laws acting around us.”

—CHARLES DARWIN, 1859

A palavra ecologia deriva do grego *oikos* (casa) e *logos* (estudo) que, em sentido literal, significa o estudo dos organismos em sua casa. Assim, ecologia é a ciência que estuda a relação dos organismos ou grupo de organismos com o seu ambiente [1, 2]. A unidade básica na ecologia é o **indivíduo**. Uma série de indivíduos de uma espécie que interagem uns com os outros dentro de uma determinada área consiste em uma **população**. Várias populações de diferentes espécies em um local formam uma **comunidade** biológica. As comunidades biológicas e seu meio físico, formam um **ecossistema**. Por sua vez, o conjunto de todos os diferentes ecossistemas na terra formam a **biosfera**.

Em um ecossistema, os organismos capazes de sintetizar seu próprio alimento, seja por quimiossíntese (bactérias) ou por fotossíntese (algas e vegetais) são chamados de *autótrofos* (produtores). Os organismos que não produzem seu próprio alimento precisam consumir outros organismos para obter energia, sendo chamados de *heterótrofos* (consumidores). Assim, em um dado ecossistema, existe uma sequência linear de organismos, em que um serve de alimento para o outro, formando uma **cadeia alimentar**. O primeiro componente da cadeia alimentar é sempre um organismo autotrófico, pois produz seu próprio alimento¹, seguido dos organismos heterotróficos.

¹Embora seja bastante empregado na literatura o termo “produzir seu alimento”, os organismos autótrofos não “produzem” seu alimento do nada, eles são capazes de produzir substâncias orgânicas a partir de substâncias inorgânicas como, por exemplo, na fotossíntese, fenômeno no qual alguns seres vivos utilizam água e gás carbônico para produzir oxigênio e glicose na presença de luz (sol).

Cada organismo da cadeia alimentar é dito estar em um **nível trófico**, estando os produtores no primeiro nível trófico da cadeia. Os organismos que se alimentam diretamente dos produtores são chamados de consumidores primários e compõem o segundo nível trófico, e assim por diante. Na Figura 1.1 apresentamos um exemplo de cadeia alimentar que possui cinco níveis tróficos, em um ecossistema aquático.

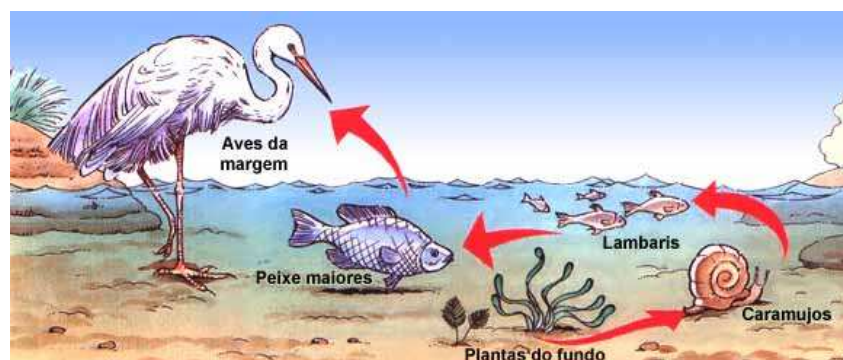


Figura 1.1 Ilustração da cadeia alimentar em um ecossistema aquático. As setas em vermelho indicam o fluxo de energia e de nutrientes, indo do nível trófico mais baixo para um mais alto. Figura retirada de <http://www.sobiologia.com.br/>, acessado em 23/03/2017.

A transferência de energia de um nível trófico para outro é regida pelas leis da termodinâmica, que podem ser enunciadas de diversos modos, incluindo o seguinte:

Energia não pode ser criada nem destruída, apenas pode ser transformada de uma modalidade em outra. – Primeira Lei da Termodinâmica

Não é possível, de forma espontânea, transformar integralmente uma dada quantidade de energia em trabalho útil sem que uma parte dessa energia seja degradada na forma de calor. – Segunda Lei da Termodinâmica

Este processo de transferência de energia começa pelo sol, que fornece a energia que é captada e transformada pelos produtores. Parte desta energia é devolvida ao meio na forma de calor pelos próprios produtores e consumidores. Além disso, ao passar de um nível trófico a outro, parte da energia também é perdida na forma de calor. Isto significa dizer que quanto mais longe o nível trófico está dos produtores, menos energia há disponível naquele nível. É possível representar o fluxo de energia e matéria entre os níveis tróficos na cadeia alimentar utilizando as **pirâmides ecológicas**, gráficos em forma de pirâmide em que cada retângulo representa, de forma proporcional, o parâmetro a ser analisado (número de organismos, biomassa ou energia). Os produtores são representados na base e os consumidores em níveis subsequentes. Na Figura 1.2 mostramos um exemplo

de uma pirâmide de biomassa, onde é considerado a massa dos organismos que participam de uma determinada cadeia alimentar.

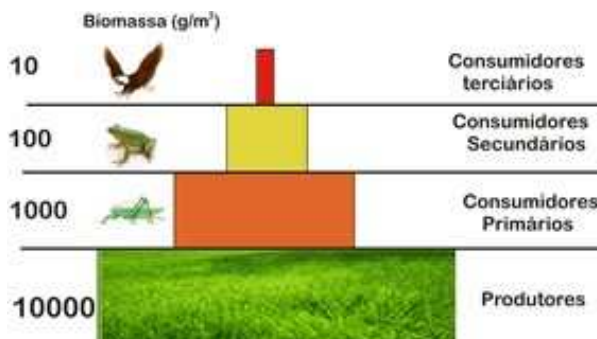


Figura 1.2 Pirâmide de biomassa, indicando a quantidade de matéria orgânica disponível em cada nível trófico. Figura retirada de <http://www.sobiologia.com.br/>, acessado em 23/03/2017.

Alguns ecologistas consideram que apenas 10% da energia disponível em cada nível trófico é passada para o próximo nível. Esta “Lei dos dez por cento”, devido a Lindeman [3], pode explicar porque a Terra poderia suportar mais pessoas se elas fossem vegetarianas, consumindo recursos dos níveis tróficos mais baixos (grãos e vegetais) do que se fossem carnívoras. Ela também explica porque cadeias alimentares em geral não possuem mais que quatro ou cinco níveis tróficos.

Em uma população, o número de indivíduos de uma espécie por unidade de área (ou volume) é definido como **densidade populacional**. Há grande interesse no estudo de densidades populacionais uma vez que populações densas exercem fortes influências em seu membros e em populações de outras espécies. Para tal, é preciso saber quais fatores influenciam no crescimento populacional e como estes fatores funcionam. Nascimentos, mortes, imigração e emigração são eventos comuns dentro de uma população, fazendo com que a estrutura populacional mude continuamente. O entendimento destes eventos fornece uma quantidade surpreendente de informações sobre uma população. A investigação das mudanças na densidade populacional e a distribuição dos organismos através do tempo e espaço chamamos de **dinâmica de populações**.

As interações entre populações de espécies diferentes podem ser classificadas de acordo com a influência que uma população exerce sobre a outra como: parasitismo (+/-), predação e herbivoria (+/-), alelopatia (+/-), competição (-/-), comensalismo (+/0) e mutualismo (+/+), onde os sinais representam uma interação benéfica (+), prejudicial (-) ou neutra (0) para a população. O estudo realizado neste trabalho foca na competição e predação como principais mecanismos de interação entre espécies diferentes.

1.1 Princípio da exclusão competitiva e biodiversidade

Um dos problemas fundamentais da ecologia é entender como diversas espécies interagem e os mecanismos responsáveis por manter a biodiversidade na natureza. Conceitos simples e fundamentais em ecologia contrastam com a biodiversidade observada na maioria dos habitats naturais. Um dos principais conceitos, o *princípio da exclusão competitiva* [4], afirma que duas espécies que compitam exatamente pelos mesmos recursos não podem existir em um mesmo local.

Para chegar a tal conclusão, o biólogo russo George Gause realizou experimentos com duas espécies de protozoários com demandas biológicas semelhantes. A curva de crescimento populacional obtida pode ser vista na Figura 1.3. Quando criadas separadamente, as duas espécies de protozoários possuem curva de crescimento populacional semelhante. No entanto, quando no mesmo meio, a curva de crescimento populacional das espécies *P. caudatum* e *P. aurelia* possuem duas fases distintas: i) na primeira fase (até o oitavo dia), as espécies crescem e competem pelo aproveitamento da energia ainda não utilizada (recursos alimentares). Quando a densidade populacional atinge o valor máximo suportado pelas condições dadas (aproximadamente no oitavo dia), ii) o número de *P. caudatum* diminui gradualmente como resultado da sua expulsão por *P. aurelia*. Ou seja, o processo de competição resultou em uma espécie sendo inteiramente deslocada por outra. A partir desses resultados foi postulado o Princípio de Gause, ou, Princípio da exclusão competitiva. Este mesmo princípio pode ser obtido a partir das equações de Lotka-Volterra, a qual será discutida no próximo capítulo.

Uma das violações mais óbvias do princípio de exclusão competitiva é o paradoxo do plâncton. Descrito por Hutchinson em 1961 [6], o paradoxo consiste na observação de grande diversidade de espécies de fitoplâncton, no mar e na água doce, embora todas elas compitam basicamente pelos mesmos recursos (luz, CO₂, nitrogênio, enxofre e fósforo).

O princípio da exclusão competitiva acontece quando o ambiente está em equilíbrio, sem grandes alterações. É possível obter esta situação ideal em laboratório mas, em ecossistemas reais, tal situação não é encontrada. Assim, a maioria das explicações para o paradoxo do plâncton foca na ausência de equilíbrio, levando em conta perturbação, gradiente de luz ou turbulência, movimento caótico dos fluidos, apenas para citar alguns. Duas outras possibilidades, que discutiremos aqui, são a existência de interações intrasitivas e a coexistência mediada por predação.

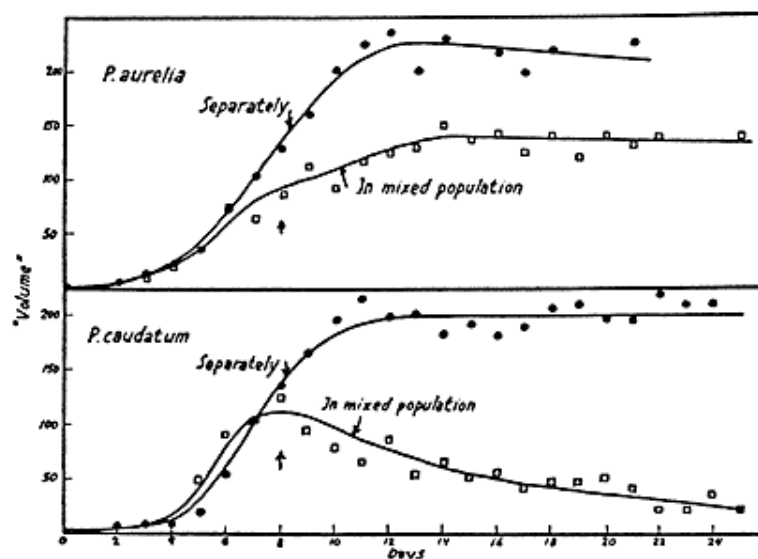


Figura 1.3 Curva de crescimento populacional (volume) do *Paramecium caudatum* e *Paramecium aurelia* cultivados juntos e separadamente em um dado meio. Figura retirada da referência [5].

1.2 Importância ecológica do predador de topo

Predação é a relação trófica em que um indivíduo de uma dada espécie (predador) consome outro indivíduo (presa). Pode ocorrer entre indivíduos de mesma espécie (relação intraespecífica) ou espécies diferentes (relação interespecífica). Quando o predador domina a cadeia alimentar em virtude da superioridade de suas habilidades competitivas, não possuindo nenhum rival em seu habitat natural, é dito ser o predador de topo (ou superpredador). São exemplos de superpredadores (em seus habitats) crocodilos, leopardos, leões, cobras-real, cascavéis, orcas, para citar alguns. Os predadores de topo tem sido descritos como espécies altamente interativas e sua importância ecológica tem sido o foco de extensa pesquisa em todo o mundo [7–11].

Na ausência do predador de topo, a diversidade de espécies pode diminuir por conta da superioridade competitiva de uma das espécies que eram predadas, o que acarreta na exclusão competitiva de outras [4]. Por outro lado, a presença do superpredador pode evitar que haja dominância de uma espécie competidora potencialmente mais apta, produzindo o que os ecólogos chamam de “coexistência mediada por predação” [12], aumentando a biodiversidade.

O exemplo mais citado de coexistência mediada por predação vem do trabalho de Paine [13–15]. Ele demonstrou experimentalmente que a predação realizada pela estrela-

do-mar *Pisaster ochraceus* tem um papel importantíssimo na organização de sua comunidade, composta também por vários crustáceos e moluscos sésseis, cracas (*Balanus glandula*), quítons e outros pequenos carnívoros, esponjas e quatro algas macroscópicas marinhas. Paine removeu manualmente todas as estrelas-do-mar em determinadas áreas delimitadas e comparou com áreas de controle para medir as consequências da remoção do predador. Após 30 meses a diversidade de espécie diminuiu de 15 para 8, sendo que certas cracas e mexilhões (*Mytilus californianus*) se estabeleceram com sucesso e excluíram outras espécies, dominando o espaço disponível. Apenas uma espécie de alga sobreviveu e as espécies carnívoras desapareceram.

No sistema estudado, o espaço é muito disputado por espécies sésseis e certamente é um dos recursos mais limitantes. Embora muitas das espécies extintas não fizessem parte diretamente da cadeia alimentar de *Pisaster* (ver Figura 1.4), elas foram eliminadas pela explosão populacional das espécies liberadas da pressão de predação. O papel de *Pisaster ochraceus* na manutenção da biodiversidade, portanto, está em disponibilizar espaço para espécies competitivamente inferiores, predando preferencialmente as espécies dominantes.

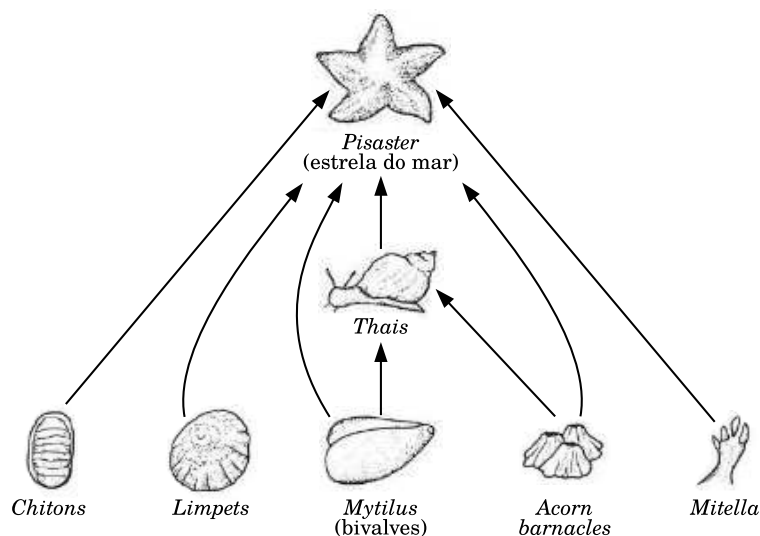


Figura 1.4 Cadeia alimentar de *Pisaster* publicada por Paine (1966). Figura redesenhada de <http://ksuweb.kennesaw.edu/~jdirnber/>, acessado em 27/03/2017.

Na mesma linha, vários animais pastadores são conhecidos por reduzir a abundância de espécies de plantas competitivamente dominantes em pastos, permitindo assim o crescimento de outras, menos aptas competitivamente [16–18]. Parasitas e parasitoides, que preferem atacar espécies de hospedeiros competitivamente dominantes, tem um efeito

Tabela 1.1 Área, distância para o continente e a ocorrência de pares reprodutores das diferentes espécies para as diferentes ilhas. “+” representa a presença de pares reprodutores e células em branco representam ausência.

Ilha	Área (km ²)	Distância ao continente (km)	Coruja Pigmaia	Chapim-carvoeiro	Chapim-do-salgueiro	Chapim-de-poupa
Aland	970	50	+	+	+	+
Ösel	3000	15	+	+	+	+
Dagö	989	10	+	+	+	+
Karlö	200	7	+	+	+	+
Gotland	3140	85		+		
Öland	1345	4		+		
Bornholm	587	35		+		
Hanö	2.2	4		+		
Visingö	30	6		+		

similar no aumento da riqueza de espécies de hospedeiros [19].

No ano 2000, Kullberg e Ekman [20] realizaram um levantamento da distribuição de três espécies de aves (conhecidas como chapins) e um dos seus principais predadores, uma espécie de coruja pigmeia (*Glaucidium passerinum*), em nove ilhas isoladas na Escandinávia. Nas ilhas onde não haviam a coruja predadora, o chapim-carvoeiro (*Periparus ater*) foi a única habitante das três espécies. As duas espécies maiores, o chapim-do-salgueiro (*Poecile montanus*) e o chapim-de-poupa (*Lophophanes cristatus*), coexistiam com o chapim-carvoeiro quando havia presença de indivíduos da coruja pigmeia. A Tabela 1.1 resume estes resultados. A coexistência das três espécies de chapins é o resultado de uma combinação da competição por alimento e locais de forrageio seguros. A menor espécie, o chapim-carvoeiro, é superior na competição por exploração de alimentos, enquanto as duas espécies maiores têm vantagens por meio de interferência competitiva em sítios de forrageio, sendo menos afetadas por predação da coruja. Assim, a presença de corujas da espécie *Glaucidium passerinum* reduz a dominância competitiva do chapim e é responsável pela coexistência mediada por predação.

Diferentes hipóteses podem ser elencadas como base da característica comportamental dos predadores e suas presas: (1) o predador preferencialmente se alimenta da presa dominante; (2) o predador não possui nenhuma preferência, mas opera de forma desproporcional, exercendo forte predação nas presas mais abundantes; e (3) o predador não possui nenhuma preferência, mas concentra sua busca por alimento em porções de presas agregadas de todas as espécies, onde diferentes espécies de presas estão aglomeradas e independentemente distribuídas no espaço. Em todos estes casos, a predação promove a sobrevivência de espécies raras e/ou inferiores competitivamente em uma comunidade,

que pode ser considerada como a essência da coexistência mediada por predação.

Pesquisas recentes também destacam o potencial que os predadores de topo possuem para restaurar ecossistemas [21]. Seu declínio tem sido associado a extinções secundárias mas onde eles foram mantidos ou restaurados puderam amortecer e/ou sanar desafios ambientais, tais como a invasão biológica de espécies não-nativas [22, 23], a transmissão de doenças [24] e os efeitos das mudanças climáticas sobre a dinâmica de suas presas [25]. Tais efeitos, que são disparados pela presença ou ação do predador e influenciam outros níveis da cadeia, são chamados de cascata trófica [26]. Fatores indiretos, como mudanças no comportamento de presas como estratégia de sobrevivência, e fatores diretos, como a predação que diminui a abundância de presas específicas e interfere em níveis mais baixos da cadeia trófica, podem induzir a ocorrência de cascatas tróficas.

A figura 1.5 ilustra alguns exemplos de cascatas mediada por predadores causando a extinção de espécies locais. Em (a) é ilustrado o caso de lobos cinzentos (*Canis lupus*) no Parque Nacional de Yellowstone, representando o cenário em que o desaparecimento de grandes carnívoros levou a um aumento de grandes consumidores (alces) e à extinção local de castores; (b) Numa região no sul da Califórnia, a ausência de coiotes (*Canis latrans*) levou a um aumento na atividade de mesopredadores (gatos, raposas), aumentando a predação de presas pequenas; (c) A remoção do predador (coiote) pode levar à libertação competitiva, ou a libertação ecológica dos concorrentes superiores entre espécies de roedores (por exemplo, o rato-canguru), levando por sua vez a extinção local de espécies competitivamente inferiores; (d) A extirpação de um predador marinho (a lontra do mar) pode causar o desaparecimento de todo um ecossistema (florestas de algas); (e) A troca de presas por baleias assassinas, resultante da exploração humana de baleias, é postulada reduzir as populações de pinípedes e lontras marinhas.

1.3 Objetivo e sumário geral da tese

Neste trabalho, nós propomos um modelo de automato celular para investigar o comportamento de um predador de topo. Nós focamos principalmente na influência que o predador de topo possui sobre a dinâmica de três espécies competindo ciclicamente. Para tal, se fez necessário uma revisão dos conceitos básicos em ecologia, a qual foi feita neste capítulo. No próximo capítulo revisamos os principais modelos matemáticos aplicados a dinâmica de populações e algumas de suas aplicações. No capítulo 3 fazemos um apanhado histórico do conceito de entropia, a fim de usar o princípio de máxima entropia para

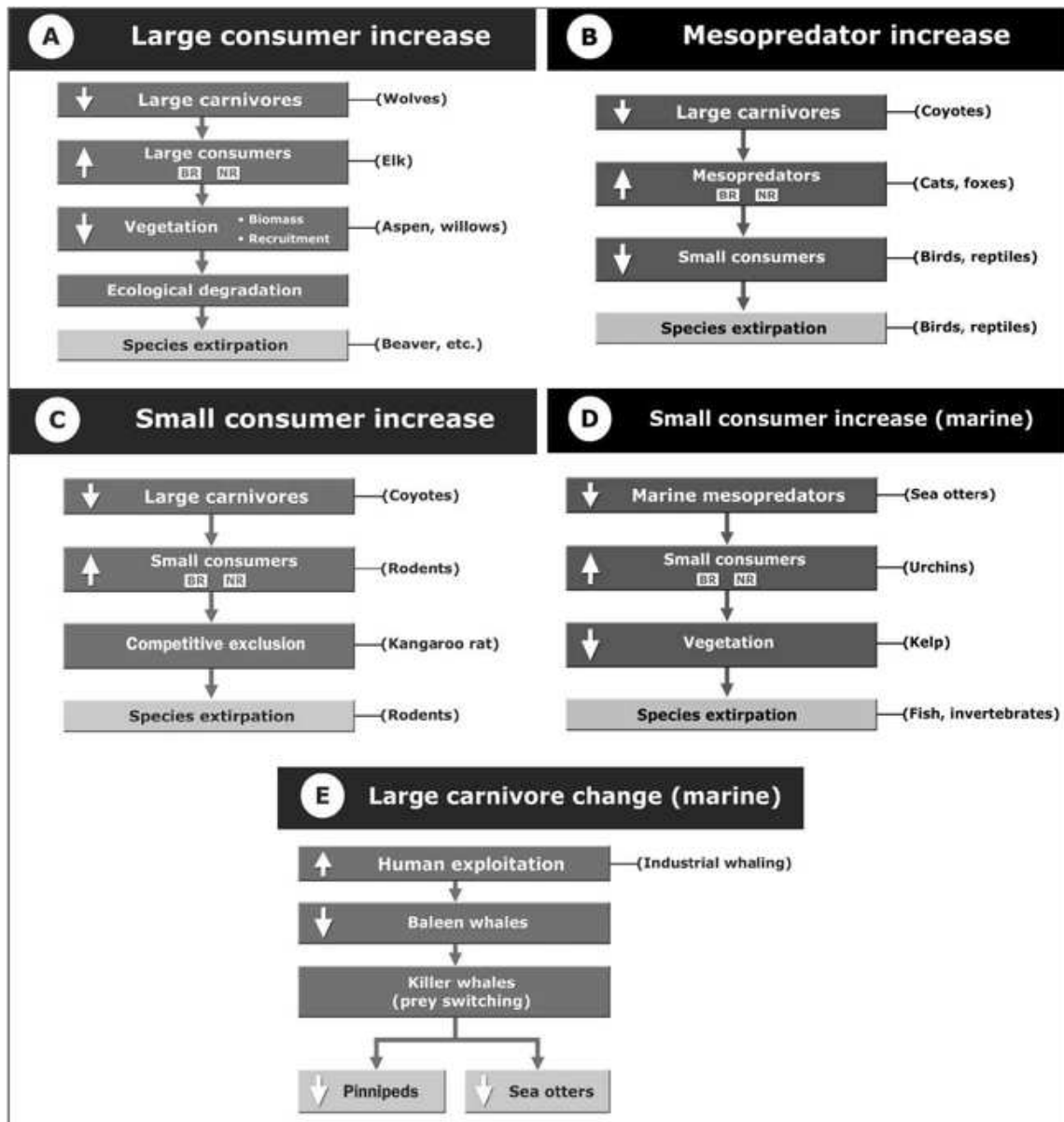


Figura 1.5 Exemplos de cascatas mediada por predadores causando a extinção de espécies locais. Setas em caixas sombreadas indicam um aumento ou diminuição da população; setas entre caixas indicam efeitos de cascata tróficas. Abreviaturas: BR, liberação comportamental; NR, liberação numérica. Figura retirada da referência [27].

encontrar uma expressão matemática que relacione a densidade de máximos de um observável com a função de autocorrelação temporal do mesmo. Resultados e discussões são realizados no capítulo 4. Finalizamos esta tese no capítulo 5 com algumas considerações finais e algumas perspectivas de trabalhos futuros.

Modelos matemáticos em dinâmica de populações

A descrição de um sistema físico real depende de muitos fatores. Se quisermos descrever o movimento de queda de uma bolinha de papel, por exemplo, além da aceleração da gravidade, o problema também depende do vento e da resistência do ar, da forma que a bolinha possui depois de amassada a qual não é perfeitamente esférica, para citar alguns. Se tentarmos incluir todos os fatores que influenciam o problema certamente sua análise se tornará bastante complicada. Em vez disso, construímos uma versão simplificada do problema, um modelo, no qual a bolinha é considerada um corpo puntiforme.

Qualquer representação abstrata ou física da estrutura e do funcionamento de sistemas reais é definida ser um modelo. A proposta de um modelo não é realizar uma descrição literal de algum sistema, mas sim caracterizar o sistema e compreender seu funcionamento, capturando uma feição geral. Não é necessário compreender previamente como um componente de um sistema está estruturado em subcomponentes mais simples para prever seu comportamento. Assim, não é necessário entender completamente a bioquímica, por exemplo, para descrever a fisiologia das células, nem tão pouco é necessário entender completamente a fisiologia para descrever a dinâmica das populações animais.

Em dinâmica de populações, vários modelos foram propostos com o objetivo de descrever o comportamento de espécies distintas em seus habitats. No que segue, descrevemos alguns destes modelos e algumas de suas aplicações.

2.1 Modelo de Malthus

Um dos modelos pioneiros de dinâmica populacional foi proposto por Malthus em 1798 [28]. Em seu modelo, Malthus pressupõe que a taxa segundo a qual a população de uma dada espécie cresce em um determinado instante é proporcional ao número total de indivíduos daquela espécie naquele instante. Matematicamente, se $N(t)$ é o número total de indivíduos de uma determinada espécie, distribuídos uniformemente em uma

área geográfica, num instante de tempo t , então, para t contínuo,

$$\frac{dN(t)}{dt} = kN(t), \quad (2.1)$$

onde a constante de proporcionalidade k é definida como $k \equiv n - m$, em que n e m são as taxas de nascimento e morte, respectivamente. Admitindo que em $t = 0$ a população inicial seja N_0 , a solução da equação (2.1) é

$$N(t) = N_0 e^{kt}. \quad (2.2)$$

Assim, a população cresce exponencialmente se a taxa de nascimento for maior que a taxa de mortalidade ($n > m$) e decresce exponencialmente caso contrário ($n < m$).

Podemos discretizar a equação (2.1) utilizando a definição de derivada. Assim, temos que

$$N(t + \Delta t) = N(t)[1 + k\Delta t]$$

com $\Delta t \rightarrow 0$. Tomando $\Delta t = 1$ na expressão acima e definindo $\alpha = 1 + k$, a relação entre $N(t + 1)$ e $N(t)$ é dada por:

$$N(t + 1) = \alpha N(t). \quad (2.3)$$

Utilizando este modelo, Malthus propôs que o crescimento da população humana sempre superaria o crescimento da produção de alimentos, que segundo ele, aumenta apenas de acordo com uma progressão aritmética. Esse cenário de crescimento alimentar aritmético com o crescimento geométrico da população humana previu um futuro onde os seres humanos não teriam recursos para sobreviver, ou seja, a existência de pobres e miseráveis seria um destino inevitável. Para evitar tal catástrofe, Malthus insistiu em controlar o crescimento populacional.

Na figura 2.1 comparamos a população total do Brasil de acordo com o modelo de Malthus e com os dados fornecidos pelo IBGE. Utilizamos $\alpha = 1,0217$ no Modelo de Malthus e tomamos como população inicial os dados para o ano de 1872. Observa-se no gráfico que o modelo de Malthus possui forte concordância nos primeiros anos de simulação mas tende a infinito com o passar dos anos. Essa é uma visão pouco realista, já que nenhuma espécie pode crescer indefinidamente.

¹INSTITUTO BRASILEIRO DE GEOGRAFIA E ESTATÍSTICA (2011). *Sinopse do Censo Demográfico 2010*. Rio de Janeiro: IBGE. p. 67-68.

²Disponível em <http://www.ibge.gov.br/apps/populacao/projecao/> e acessado em 10/01/2017.

Ano	Tamanho da População	Modelo de Malthus
1872	9.930.478	9.930.478
1890	14.333.915	14.616.803
1900	17.438.434	18.118.419
1920	30.635.605	27.839.159
1940	41.236.315	42.775.189
1950	51.944.397	53.022.456
1960	70.992.343	65.724.570
1970	94.508.583	81.469.614
1980	121.150.573	100.986.558
1991	146.917.459	127.896.384
2000	169.590.693	155.167.008
2010	190.755.799	192.338.974
2016	206.756.201	218.790.288
2020	212.077.375	238.415.893
2030	223.126.917	295.531.046
2040	228.153.204	366.328.764
2050	226.347.688	454.086.854
2060	218.173.888	562.868.361

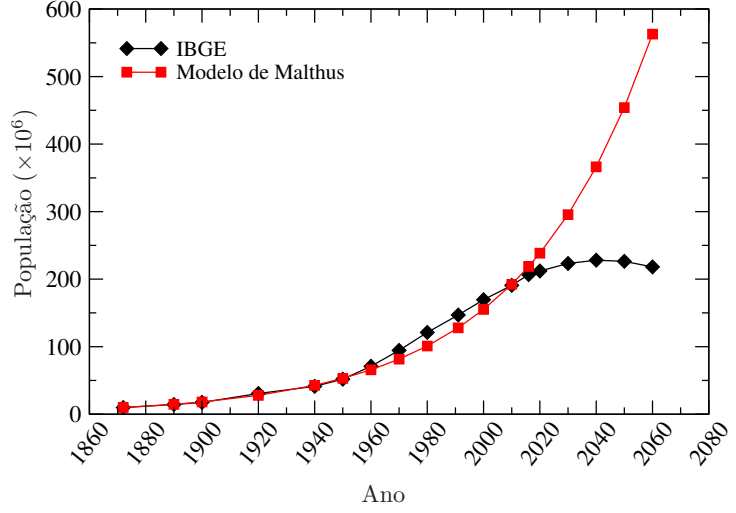


Figura 2.1 População do Brasil segundo o IBGE (preto) e o modelo de Malthus (vermelho). Os dados referentes aos anos entre 1872 e 2010 são do censo realizado pelo IBGE¹ enquanto os dados referentes aos anos 2016 a 2060 são projeções².

2.2 Modelo de Verhulst

Proposto em 1838 [29], o modelo de Verhulst assume que a taxa de crescimento populacional depende do tamanho da população, diminuindo a medida que a população aumenta. Esta limitação no crescimento se deve ao fato de que os recursos disponíveis também são limitados. Matematicamente, este modelo é descrito pela *equação logística* [30]:

$$\frac{dN}{dt} = kN \left(1 - \frac{N}{r} \right), \quad (2.4)$$

onde r e k são constantes positivas. Neste modelo, a taxa de crescimento per capita é $k(1 - N/r)$, que depende de N . Note que, se $N \ll r$, a equação (2.1) é retomada. Se em $t = 0$, $N(0) = N_0$, então a solução da equação (2.4) é

$$N(t) = \frac{N_0 r e^{kt}}{r + N_0(e^{kt} - 1)}. \quad (2.5)$$

A figura 2.2 ilustra o comportamento da equação (2.5).

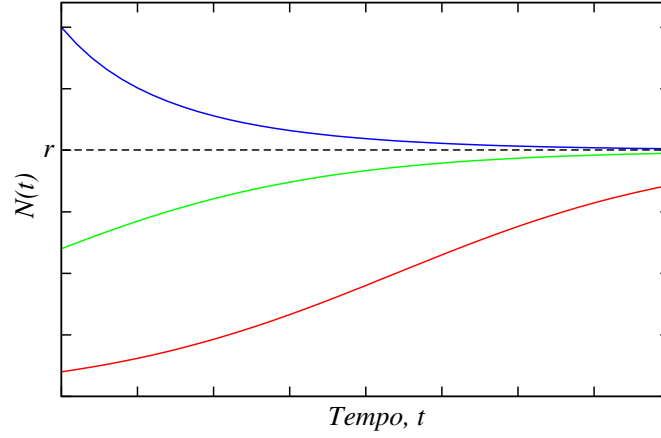


Figura 2.2 Evolução temporal de $N(t)$ para três condições iniciais distintas.

Para $t \rightarrow \infty$, tem-se que

$$\lim_{t \rightarrow \infty} N(t) = r$$

para qualquer condição inicial ($N_0 > 0$). Se ($0 < N_0 < r$), $N(t)$ simplesmente aumenta monotonicamente até r ; se ($N_0 > r$), $N(t)$ decresce monotonicamente até r , ou seja, a taxa de crescimento per capita é negativa. Se $N_0 = 0$ ou $N_0 = r$, o sistema permanece no seu estado inicial para sempre, pois, em ambos os casos, $dN/dt = 0$.

Podemos escrever a equação (2.4) discretizada da seguinte forma:

$$N(t+1) = N(t) + kN(t) \left[1 - \frac{N(t)}{r} \right]$$

onde substituímos a derivada dN/dt como uma diferença com passo de tempo 1. Definindo-se $N(t) \equiv [r(k+1)/k]x(t)$ e $\alpha \equiv (1+k)$, essa equação pode ser reescrita como

$$x(t+1) = \alpha x(t)[1 - x(t)]. \quad (2.6)$$

A equação (2.6) ficou conhecida como *mapa logístico* e foi amplamente estudada devido à riqueza de comportamento que ela exhibe, conforme o parâmetro α é variado [31,32]. A dinâmica desse sistema pode passar de periódica a caótica, devido a pequenas variações no parâmetro α .

Usando este modelo, Verhulst previu que a população limite da Bélgica, sua terra natal, seria de 9.400.000. Em 2016, a população estimada da Bélgica era de 11.372.000 ³.

³United Nations, Department of Economic and Social Affairs, Population Division (2015). World

2.3 Modelo de Lotka-Volterra

O primeiro e mais famoso modelo sobre a interação entre duas espécies é o conhecido modelo de *Lotka-Volterra*. Estudando sistemas diferentes, o matemático Vito Volterra [33] e o biofísico Alfred Lotka [34], propuseram a mesma equação para o estudo da dinâmica predador-presa. Como ambos publicaram a mesma equação, o modelo recebeu o nome de ambos.

Se $N(t)$ representa a população de presas em um dado instante de tempo e $P(t)$ representa a população de predadores, as equações propostas por Volterra (1926) são:

$$\frac{dN}{dt} = N(\alpha - \beta P), \quad (2.7)$$

$$\frac{dP}{dt} = P(\gamma N - \delta), \quad (2.8)$$

onde α , β , γ e δ , são constantes positivas.

O modelo assume que:

- Na ausência de predador, a população da presa cresce ilimitadamente de forma malthusiana, isto é, a uma taxa proporcional a população atual (αN). Assim, efeitos de superpopulação não são considerados;
- A predação tem o efeito de reduzir a taxa de crescimento per capita da presa por um termo proporcional à taxa de encontro entre as populações de presas e predadores ($-\beta NP$);
- O modelo assume que predadores alimentam-se exclusivamente de presas. Assim, se as presas forem extintas, a população de predadores decai exponencialmente ($-\delta P$);
- O crescimento de predadores é proporcional a quantidade de presas disponíveis, bem como ao tamanho da população de predadores (γNP).

Devido a essa relação presa/predador, o sistema pode possuir três estados finais: (i) Todos os sítios da rede estão ocupados por presas. Ou seja, os predadores são extintos; (ii) Todos os sítios da rede estão vazios; (iii) Coexistência entre predadores e presas. Os dois primeiros são estados absorventes. Isto é, uma vez entrando em um destes estados, o sistema nunca sairá do estado. O terceiro é o resultado relevante, do ponto de vista da dinâmica de populações, proporcionado pelo modelo: um estado estacionário ativo oscilante no espaço e no tempo. isto significa que predadores e presas estão continuamente nascendo e morrendo, porém coexistindo.

Population Prospects: The 2015 Revision, custom data acquired via website. Disponível em <https://esa.un.org/unpd/wpp/DataQuery/> e acessado em 16/01/2017.

É possível eliminar a dependência temporal das equações de Lotka-Volterra a fim de obter uma equação nas variáveis N e P . Desta forma, podemos obter analiticamente as trajetórias percorridas no espaço de fases. Para tal, dividimos a equação (2.8) por (2.7)

$$\frac{dP}{dN} = \frac{P(\gamma N - \delta)}{N(\alpha - \beta P)} \implies \frac{dP(\alpha - \beta P)}{P} = \frac{dN(\gamma N - \delta)}{N}.$$

Integrando ambos os lados da equação, obtemos

$$\gamma N - \beta P + \alpha \ln P + \delta \ln N = H \quad (2.9)$$

onde H é a constante de integração e define uma órbita fechada. Na figura 2.3 mostramos três orbitas distintas. Com disponibilidade de presas, o número de predadores vai aumentando. Esse ataque de predadores faz com que as presas tenham menor taxa de crescimento e, depois de um certo tempo, começam a diminuir. A falta de alimento faz com que a população de predadores atinja um valor máximo e comece a diminuir. Após atingir um número mínimo, as presas começam a recuperar-se, uma vez que o número de predadores diminuiu.

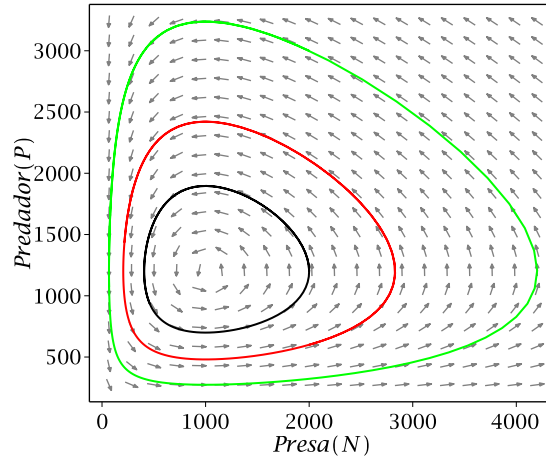


Figura 2.3 Espaço de fases para o modelo predador-presa, definido pelas equações de Lotka-Volterra. Os parâmetros usados foram: $\alpha = 1/10$, $\beta = 1/12000$, $\gamma = 1/25000$ e $\delta = 1/25$. A População inicial de presas foi $N_0 = 2000$ enquanto a população inicial de predadores foi $P_0 = \{600, 1200, 3000\}$ para as cores {vermelho, preto, verde}, respectivamente.

Este sistema é periódico e a amplitude e a frequência deste comportamento oscilatório são determinadas pelas condições iniciais. Na figura 2.4 mostramos uma destas oscilações para uma dada configuração inicial.

Embora a maioria dos predadores dependam de uma variedade de presas, há casos em

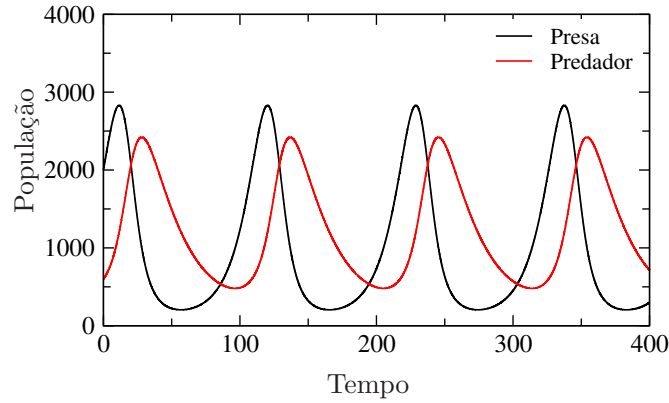


Figura 2.4 Solução periódica para a população de presas e predadores para as equações de Lotka-Volterra (2.7) e (2.8). Os parâmetros utilizados foram os mesmos da figura 2.3.

que alguns predadores tornam-se altamente especializados e procuram quase que exclusivamente uma única espécie de presa. Uma tentativa de aplicar este modelo simplificado da interação predador-presa foi realizada com os registros do número de peles de lincos e lebres vendidas pela Companhia da Baía de Hudson, no Canadá, entre 1845 até a década de 1930. Assumindo que o número de peles vendidas é proporcional a população destas espécies (embora seja questionável a precisão desta suposição, os dados representam um dos poucos registros de longo período disponíveis) é possível observar o caráter oscilatório destes dados (ver figura 2.5(a)).

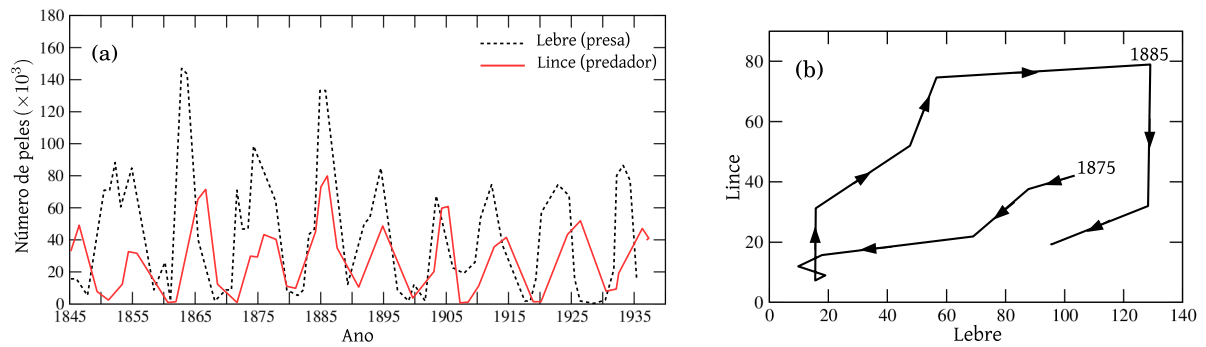


Figura 2.5 (a) Oscilações periódicas na população de lincos e lebres, como indicado pelo número de peles vendidas pela Companhia da Baía de Hudson. (b) Espaço de fases. Figuras redesenhadas da referência [30].

Observe que a direção das setas de tempo no espaço de fases está no sentido horário, diferentemente do esperado (figura 2.3). Isto significa, de acordo com o modelo de Lotka-Volterra, que lebres estariam comendo os lincos, o que não procede. Gilpin [35] contornou este problema sugerindo que as lebres poderiam portar uma doença que matas-

sem o lince. Incorporando um efeito epidêmico em seu modelo, os resultados numéricos se assemelharam ao da figura 2.5(b). Embora explicasse tal comportamento, nenhuma doença fora comprovada. Note também que, enquanto na figura 2.4 o aumento do número de predadores ocorre com a diminuição do número de presas, na figura 2.5 o crescimento de ambos está sincronizado no tempo. Schaffer [36] propôs que esta divergência nos dados obtidos poderia ser evidência de um atrator estranho na natureza.

Alguns elementos do modelo de Lotka-Volterra são claramente irrealistas. Por exemplo: (i) suposição de crescimento ilimitado da presa na ausência do predador. Não contém mecanismo de saturação; (ii) a taxa de predação é proporcional ao número de presas. Isto é, quanto mais presas, mais o predador pode comer. Não há um efeito de saciedade ou incapacidade de consumir mais que uma certa quantidade de presas; (iii) não considera relações intra-específicas, isto é, a competição entre indivíduos da mesma espécie por recursos. (iv) não leva em conta o alimento da presa.

No entanto, apesar de ser um modelo simplificado da dinâmica de predadores e presas, ela captura uma feição geral, que é a existência de oscilações, e serve como uma base robusta para a construção de modelos mais complexos.

2.4 Modelo Pedra-Papel-Tesoura

As equações de Lotka-Volterra apresentadas na seção anterior, descrevem a competição entre espécies de forma transitiva, ou seja, há uma hierarquia onde é possível identificar o competidor com estratégia superior (predador) aos outros. Estendendo o problema para três espécies A , B e C , por exemplo, uma competição transitiva ocorre quando a espécie A vence as espécies B e C e a espécie B vence a espécie C (figura 2.6(a)). Neste cenário é esperado que, se as três espécies estiverem em um mesmo meio competindo por um mesmo recurso, o melhor concorrente irá conduzir todos os outros à extinção [4, 37]. Por outro lado, quando há mais de um recurso, podemos observar relações competitivas intransitivas: neste caso, podemos observar que indivíduos de uma espécie A vencem da espécie B , B vence C e C vence de A (figura 2.6(b)). Esta dinâmica, conhecida como “*pedra-papel-tesoura*”, pode levar à coexistência das três espécies. Como não existe uma estratégia “superior” em competições cíclicas do tipo pedra-papel-tesoura, elas são de grande interesse do ponto de vista biológico, pois considerando as interações complexas que ocorrem entre organismos na natureza, nem sempre é possível apontar a estratégia superior, assim como ocorre no jogo.

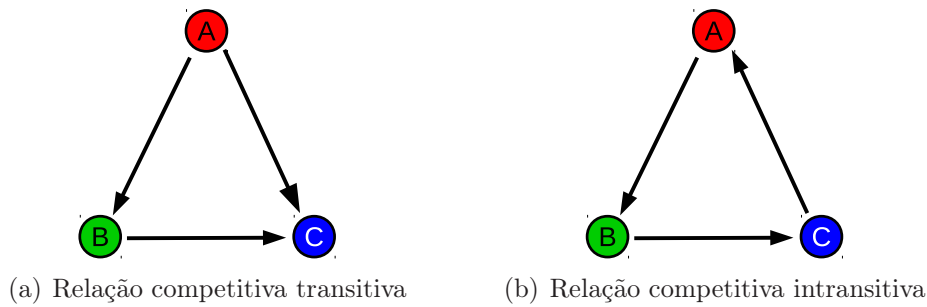


Figura 2.6 Diagrama simbólico mostrando a ordem de predação para possíveis interações entre três espécies. A figura (a) corresponde ao caso transitivo, onde A possui apenas presas, sendo a estratégia globalmente dominante, e C possui apenas predadores, sendo a estratégia mais fraca. A figura (b) ilustra o caso intransitivo, em que não há uma estratégia superior absoluta.

Interações cíclicas entre espécies tem sido observadas em diferentes sistemas ecológicos. Exemplos incluem ecossistemas marinhos [38–40], sistema vegetais [41–45] e população bacteriana [46–50]. Abaixo descrevemos em mais detalhes alguns desses exemplos.

2.4.1 Exemplos de competição cíclica na natureza

Um dos exemplos mais notáveis de competição cíclica na natureza são as estratégias de acasalamento dos lagartos *Uta Stansburiana*, um tipo de lagarto abundante na faixa litorânea da Califórnia. Entre os anos de 1990–95, Sinervo e Lively [51] observaram as estratégias de defesa de território e acasalamento dos machos desta espécie. As estratégias são dependentes da cor da garganta que os machos desenvolvem quando adultos (ver figura 2.7). Machos com a garganta laranja (A) são muito agressivos e defendem grandes territórios. Machos com a garganta azul (B) são menos agressivos e defendem um território menor. Machos com listras amarelas na garganta (C) são furtivos, não defendem territórios (possuem aparência semelhante a fêmeas).

Os machos com a garganta laranja por serem mais agressivos conseguem invadir o território dos machos com garganta azul mas acabam perdendo espaço para os machos de garganta com listras amarelas que, por se parecer com fêmeas, acaba escondendo-se no território dos machos com a garganta laranja e reproduzindo com suas fêmeas. Esta estratégia, no entanto, não funciona com os machos da garganta azul, que defendem melhor um território menor. Ao avaliar a frequência das três diferentes estratégias ao longo do tempo, verificou-se que os três tipos de comportamento coexistem de forma estável, exibindo oscilações no número relativo de lagartos após cada estratégia.

Competição cíclica também foi investigada em um sistema composto por cepas da bac-

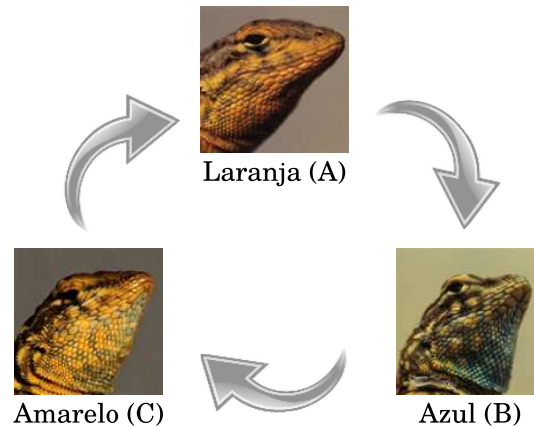


Figura 2.7 Três tipos de estratégias de acasalamento dos lagartos *Uta Stansburiana*, caracterizando uma competição cíclica. As estratégias de acasalamento diferem na forma como os lagartos defendem seus territórios. Os três tipos de comportamento de acasalamento estão ligados a polimorfismos. Os machos de garganta laranja (A) dominam a população de machos de papo azul (B) que por sua vez ganham para os machos de garganta amarela (C). A estratégia dos machos de garganta amarela (C) faz com que eles ganhem para os machos de garganta laranja (A), fechando o ciclo. Figura redesenhada da referência [51].

téria *Escherichia Coli* [46, 48, 50, 52]. Esta competição é promovida pela produção de *colicinas*, um tipo de toxina potente capaz de eliminar as cepas sensíveis a ela. Kerr et al. [46] estudou experimentalmente e teoricamente várias cepas de *E. Coli*. As cepas podem produzir a toxina (ou não) e ser resistente (ou não). Analizando o custo metabólico para produzir a toxina ou o 'antídoto' é que a competição cíclica emerge. A cepa produtora da toxina e resistente a ela (K) mata as cepas que não produzem o antídoto (S). A cepa que produz o antídoto (R) mas não a toxina possui um custo metabólico menor que a cepa que produz ambos, superando-a. Na ausência de cepas produtoras de toxinas, a cepa que não é imune a toxina supera a cepa imune, já que não possui o custo metabólico para produzir o antídoto.

O resultado experimental descrito por Kerr et al. [46] mostra que, se as três espécies estiverem distribuídas uniformemente (bem misturadas), a espécie com menor custo metabólico (S) prevalece. No entanto, quando a interação entre as bactérias é de curto alcance, a coexistência entre as três cepas é mantida (ver figura 2.8).

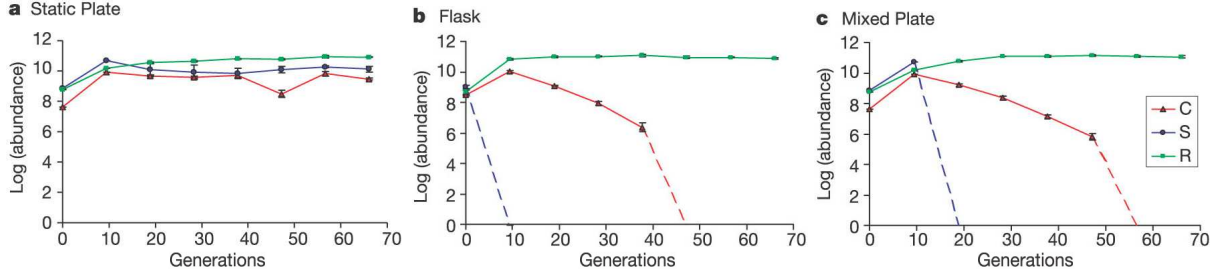


Figura 2.8 Curva experimental da abundância das três cepas em condições ambientais distintas: Em (a) a interação e dispersão entre as cepas são locais. Em (b) o ambiente foi bem misturado, no qual a dispersão e interação entre as cepas não são exclusivamente locais. Em (c) há um misto entre (a) e (b). As linhas tracejadas indicam que a abundância das cepas diminuiu abaixo do limite de detecção. Os pontos dos dados são uma média de três repetições, e as barras representam o desvio padrão. Os pontos consecutivos são separados por 24h, aproximadamente 10 gerações bacterianas. Figura retirada da referência [46].

2.4.2 O Modelo de May-Leonard

O modelo mais utilizado para descrever competição cíclica entre espécies foi proposto por May e Leonard [53]. Em sua versão simplificada⁴, podemos descrever as densidades populacionais $a(t)$, $b(t)$ e $c(t)$ das espécies A , B e C , respectivamente pelas equações

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}a(t) &= a[\mu(1 - \rho) - \sigma c] \\ \frac{d}{dt}b(t) &= b[\mu(1 - \rho) - \sigma a] \\ \frac{d}{dt}c(t) &= c[\mu(1 - \rho) - \sigma b]\end{aligned}\tag{2.10}$$

onde μ representa a taxa de nascimento, σ a taxa de morte e $\rho = a+b+c$. É bem conhecido na literatura que as equações acima possuem quatro estados absorventes $(a, b, c) = (0, 0, 0)$, $(1, 0, 0)$, $(0, 1, 0)$, e $(0, 0, 1)$ e um ponto fixo instável $(a^*, b^*, c^*) = \frac{\mu}{3\mu+\sigma}(1, 1, 1)$, que representa a coexistência entre as três espécies [54]. No entanto, qualquer flutuação na vizinhança deste ponto pode fazer com que apenas uma das três espécies sobreviva e, como os parâmetros μ e σ são iguais para os três competidores, a espécie sobrevivente é determinada pelas condições iniciais. A figura 2.9 ilustra a evolução temporal para duas condições iniciais distintas, em torno do ponto de equilíbrio. Note que uma pequena mudança na densidade inicial da espécie C , faz com que a solução das equações (2.10) sejam totalmente distintas, mudando o competidor vencedor.

⁴O modelo aqui considerado corresponde ao modelo originalmente proposto por May e Leonard com os parâmetros $\alpha = 1$ e $\beta = 1 + \sigma/\mu$, sendo $1/\mu$ a unidade de tempo.

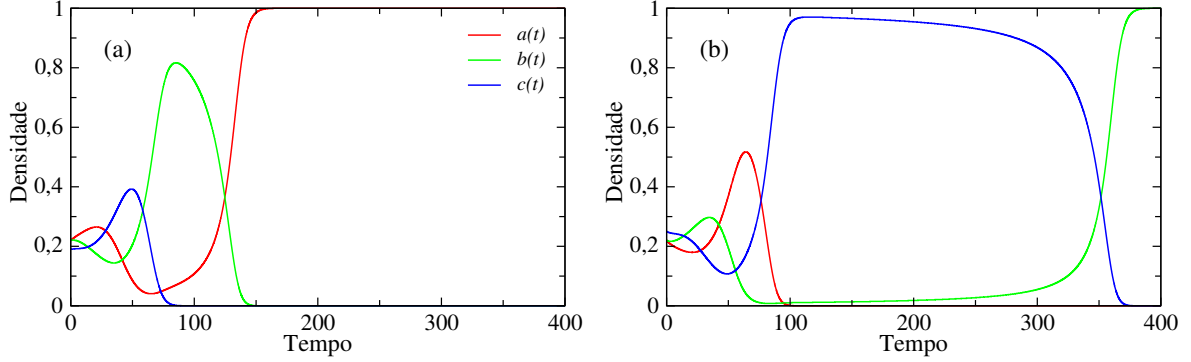


Figura 2.9 Solução das equações (2.10) para os parâmetros $\mu = 0.25$ e $\sigma = 0.40$. Em (a) utilizamos a condição inicial $\{a_0, b_0, c_0\} = \{0.22, 0.22, 0.19\}$ e em (b) $\{a_0, b_0, c_0\} = \{0.22, 0.22, 0.25\}$.

Este modelo pode ser discretizado utilizando um autômato celular estocástico, a fim de estudar os efeitos das interações espaciais. Na versão estocástica, é comum utilizar um modelo de quatro estados: A , B e C representando as espécies distintas e $\emptyset$ representando os sítios vazios. Considera-se uma rede quadrada contendo $N = L^2$ sítios e condições de contorno periódicas. Cada sítio da rede pode estar ocupado por um dos quatro estados. As interações ocorrem apenas entre dois vizinhos mais próximos e as espécies A , B e C competem de acordo com as seguintes regras:

$$AB \xrightarrow{\sigma} A\emptyset, \quad BC \xrightarrow{\sigma} B\emptyset, \quad CA \xrightarrow{\sigma} C\emptyset, \quad (2.11)$$

$$A\emptyset \xrightarrow{\mu} AA, \quad B\emptyset \xrightarrow{\mu} BB, \quad C\emptyset \xrightarrow{\mu} CC, \quad (2.12)$$

A relação (2.11) descreve a interação de predação cíclica, que ocorre com probabilidade σ . A relação (2.12) caracteriza reprodução, que ocorre a uma taxa μ .

Ao início de cada simulação os quatro estados são distribuídos uniformemente na rede com igual probabilidade. Em cada passo de tempo um sítio e um de seus quatro vizinhos mais próximos é escolhido aleatoriamente. Para cada par selecionado, o processo a ser seguido é determinado estocasticamente de acordo com as taxas das equações (2.11) e (2.12). Um passo de tempo (ou uma geração) é definido quando há N tentativas de interação. A figura 2.10 ilustra a evolução temporal de uma realização da simulação.

Embora tenhamos utilizados os mesmos valores de parâmetros no modelo determinístico e no modelo estocástico, no segundo caso ocorre a coexistência das três espécies, com oscilações das densidades em torno de um valor médio. É possível perceber também a formação de aglomerados de mesma espécie.

A adição de outros parâmetros ao modelo, como taxa de mobilidade e mutação, tam-

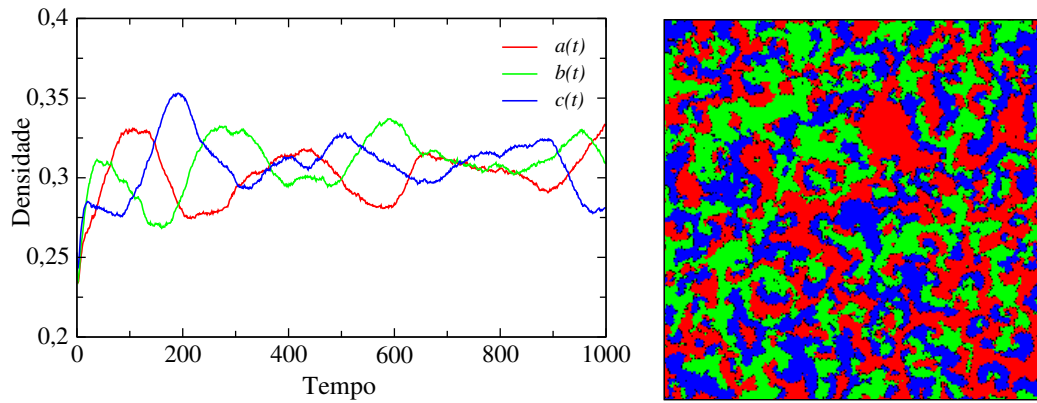


Figura 2.10 Evolução temporal para o modelo de May-Leonard estocástico (esquerda). Cada cor representa uma espécie distinta. À direita temos a configuração da rede após 1000 gerações. Os parâmetros utilizados foram $\mu = 0.25$, $\sigma = 0.40$ e $L = 256$.

bém é amplamente discutido na literatura, descrevendo novas fenomenologias associadas ao problema [54–59].

Caos e entropia em sistemas biológicos

O *status* de “ser vivo” do ponto de vista das leis da física, particularmente as leis da termodinâmica, é bastante controverso e tem sido foco de muitas discussões acerca do tema [60–62]. De fato, células vivas apresentam vários padrões e comportamento coerente, realizam tarefas complexas muito específicas e sincronizadas para manter suas funções biológicas. A evolução de um embrião à um indivíduo adulto, por exemplo, requer que informação genética seja transmitida, processada e uma perfeita sincronização entre diversos eventos, tais como a diferenciação de células específicas e a formação de tecido para, citar alguns, que se ocorressem no tempo ou lugar errado resultaria num comportamento completamente caótico culminando na morte. Um aumento da complexidade do sistema leva a uma maior sensibilidade do sistema às suas condições iniciais.

Por volta do ano de 1900, Poincaré demonstrou que pequenas perturbações no estado inicial, tais como um ligeira mudança na posição inicial do corpo, poderia levar a uma mudança radical em seu estado final, tornando impossível prever a evolução e o estado final do sistema, antecipando a Teoria do Caos. A teoria de caos estuda sistemas que aparentam possuir um comportamento aleatório, mas de fato são parte de um processo determinístico. Sua natureza aleatória se manifesta por conta da sensibilidade característica às condições iniciais, que leva o sistema a uma dinâmica imprevisível. No entanto, em um sistema caótico, esse comportamento não linear é sempre limitado por uma estrutura determinística mais elevada. Por esta razão, sempre existe uma ordem implícita numa dinâmica aparentemente aleatória.

A ideia de evolução apareceu na física por volta do século XIX, com a segunda lei da termodinâmica que, partindo de um ponto de vista puramente fenomenológico, trata da distinção entre processos reversíveis e irreversíveis. Para tal, foi introduzida uma nova função, denominada entropia, a qual aumenta devido à processos irreversíveis e posteriormente foi interpretada como uma medida da desorganização de um sistema. A evolução espontânea para um estado cada vez mais complexo e organizado de um organismo vivo, por exemplo, vai de encontro com a segunda lei da termodinâmica, que diz que a tendência natural é a desordem.

Este capítulo trata de entropia e da caracterização do caos em sistemas dinâmicos, mais especificamente em sistemas biológicos. Para tal, iniciamos fazendo uma discussão sobre a definição da segunda lei da termodinâmica e entropia e suas interpretações em campos distintos do conhecimento e abordamos como este conceito é tratado em sistemas biológicos. O resultado chave aqui é a utilização do princípio de máxima entropia para derivar uma relação entre a densidade de máximos de um observável que flutua e sua função de autocorrelação, como mostrado nas referências [63, 64]. Por fim, discutimos o conceito de caos e sugerimos uma nova rota para caracterizá-lo em sistemas biológicos.

3.1 Definição de entropia

Todos temos uma ideia do que seja energia, embora defini-la não seja uma tarefa trivial: quando todas as luzes de uma residência se apagam de repente, pode ser por falta de energia; a madeira, o carvão, o gás engarrafado são fontes de energia utilizada para cozinhar os alimentos; uma criança mal nutrida não tem energia para praticar esportes. Embora seja uma quantidade conservada, nem toda energia “gerada” está disponível para ser transformada em trabalho útil. Para saber quanto dessa energia está disponível para consumo é necessário conhecer o conceito de entropia.

O conceito de entropia desde sua concepção causa mistério e confusão devido a sua complexidade. Ele esteve sujeito a várias reconstruções e interpretações ao longo do tempo. Veremos nesta seção três interpretações relacionadas ao conceito de entropia: (i) a entropia como uma medida da *irreversibilidade de processos físicos*; (ii) a entropia como uma *medida da desordem de um sistema*; e (iii) a entropia como uma medida da *ignorância acerca de um sistema*. Iniciaremos pela interpretação original, dada do ponto de vista da termodinâmica, que surgiu na revolução industrial no século XIX.

3.1.1 Entropia do ponto de vista da termodinâmica

A primeira aparição do conceito de entropia esteve associada a investigação de máquinas térmicas, no século XIX, em conexão com a segunda lei da termodinâmica. Mais especificamente, o interesse na época era determinar qual o máximo de energia que poderia ser transformada em trabalho útil. Na referência [65] é possível encontrar os enunciados da segunda lei da termodinâmica segundo Clausius (1850) e Thomson (1851), que futuramente ficara conhecido como Lorde Kelvin. Tais formulações podem ser escritas como

segue [66]:

Kelvin: É impossível realizar um processo cujo único efeito seja remover calor de um reservatório térmico e produzir uma quantidade equivalente de trabalho.

Clausius: É impossível realizar um processo cujo único efeito seja transferir calor de um corpo mais frio para um corpo mais quente.

Em ambos os enunciados, “único efeito” significa que o sistema tem de voltar ao estado inicial, ou seja, que o processo é cíclico. Embora estes enunciados sejam diferentes, eles são equivalentes. Na referência [66] encontra-se uma discussão bastante didática sobre a equivalência das duas formulações, baseada no argumento de que a negação de uma implica na negação da outra e vice-versa.

Em 1865 [67] Clausius publicou uma série de trabalhos que abordavam os conceitos de energia, calor, trabalho, entropia, dentre outros. Partindo do estudo realizado por Carnot sobre processos cíclicos em máquinas térmicas, Clausius mostrou que, se em um processo cíclico reversível cada elemento de calor absorvido (positivo ou negativo) for dividido pela temperatura absoluta em que isto ocorre e integrado ao longo do percurso deste processo, a integral obtida tem valor nulo. Matematicamente, tem-se

$$\oint \frac{dQ}{T} = 0. \quad (3.1)$$

Na equação acima, Q representa a quantidade de calor trocada pelo sistema envolvido e T é a temperatura absoluta na qual a troca ocorre. Para qualquer processo, reversível ou não, vale a relação:

$$\oint \frac{dQ}{T} \leq 0, \quad (3.2)$$

onde a igualdade é válida para processos reversíveis. A equação (3.2) é conhecida como *desigualdade de Clausius*.

De acordo com a equação (3.1), se considerarmos dois processos reversíveis distintos, que levem um sistema de um estado de equilíbrio termodinâmico a para um estado de equilíbrio termodinâmico b , a integral

$$\int_a^b \frac{dQ}{T}$$

tem o mesmo valor independente do caminho tomado. Assim, define-se uma função de

estado (S), que depende apenas dos estados final e inicial, de modo que

$$\int_a^b \frac{dQ}{T} = S_b - S_a. \quad (3.3)$$

A função de estado S Clausius chamou de entropia. Dizer que entropia é uma função de estado, significa dizer que, para processos reversíveis, sua variação depende apenas dos estados final e inicial, independente do caminho. Para uma variação infinitesimal, tem-se

$$dS = \frac{dQ}{T} \quad (3.4)$$

na qual dQ representa a quantidade de calor infinitesimal fornecida ao sistema num processo reversível a temperatura T .

Consideremos então um sistema que vai de um estado a para um estado b por um caminho irreversível e retorna para o estado a por um caminho reversível, como ilustra na figura 3.1. Podemos escrever a equação (3.2) como a soma de duas integrais de linha

$$\oint \frac{dQ}{T} = \int_a^b \frac{dQ_{(I)}}{T} + \int_b^a \frac{dQ_{(R)}}{T} \leq 0, \quad (3.5)$$

onde os subíndices (I) e (R) indicam os processos irreversíveis e reversíveis, respectiva-

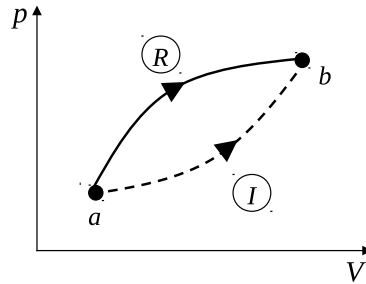


Figura 3.1 Caminhos irreversível e reversível de um estado inicial a para um estado final b .

mente. Para o processo reversível, de acordo com a equação (3.3), tem-se que

$$\int_b^a \frac{dQ_{(R)}}{T} = S_a - S_b = -\Delta S.$$

Substituindo na expressão (3.5), obtém-se que para qualquer processo, a variação da entropia é

$$\Delta S \geq \int_a^b \frac{dQ}{T} \quad (3.6)$$

onde a igualdade aplica-se a processos reversíveis e a desigualdade caso contrário. Para uma variação infinitesimal, tem-se

$$dS \geq \frac{dQ}{T}.$$

A relação (3.6) é válida para qualquer processo. Em particular, se o processo ocorre em um sistema termicamente isolado, não há trocas de calor com meio externo e

$$\Delta S \geq 0$$

(3.7)

que é o princípio do aumento da entropia.

“A entropia de um sistema termicamente isolado nunca pode decrescer: não se altera quando ocorre processos reversíveis, mas aumenta quando ocorrem processos irreversíveis”.

Decorre do princípio de aumento da entropia que, após atingir um estado de equilíbrio, um sistema isolado permanece neste estado, isto é, o sistema é incapaz de uma mudança espontânea de seu estado. Na verdade, qualquer processo espontâneo é irreversível e, conseqüentemente, há um aumento na entropia. A entropia de um sistema isolado tem um valor máximo no estado de equilíbrio. Conseqüentemente, os processos espontâneos continuam em um sistema isolado até que a entropia do sistema alcance seu valor máximo. Ao atingir o estado de equilíbrio, para o qual a entropia é o máximo possível, os processos espontâneos no sistema terminam e o sistema permanece no estado de equilíbrio.

A palavra entropia, segundo Clausius, foi escolhida pra se assemelhar com a palavra energia. Em suas palavras:

“I propose to call the magnitude S the entropy of the body, from the Greek word ($\tau\rho\omega\pi\nu$, trope) transformation. I have intentionally formed the word entropy so as to be as similar as possible to the word energy.”

Para ele, entropia e energia estão intimamente relacionados. Quando um sistema qualquer é deixado livre para evoluir, a energia tende a ser distribuída uniformemente por todo sistema: é o que ocorre quando colocamos dois corpos à temperaturas diferentes em contato térmico; calor flui do corpo mais quente para o corpo mais frio até que ambos tenham a mesma temperatura. O mesmo ocorre quando temos um desnível de água em uma represa; a tendência é que haja uma queda d'água até que os níveis se igualem e a energia potencial gravitacional seja a mesma. Como a conservação de energia era um princípio fundamental já bem estabelecido, nomeado de *primeira lei da termodinâmica*,

Clausius sugeriu que o aumento da entropia também fosse um princípio fundamental, enunciando-o como a *segunda lei da termodinâmica*.

De uma forma mais robusta, na referência [68] a entropia é definida na forma de postulado:

“Existe uma função (denominada entropia S) de todos os parâmetros extensivos de um sistema composto, definida para todos os estados de equilíbrio deste sistema, tendo a seguinte propriedade: Os valores assumidos pelos parâmetros extensivos, após a remoção de um vínculo interno, são tais que maximizam o valor de sua entropia.”

Ou seja, por construção, a entropia é uma função apenas dos parâmetros macroscópicos que definem o estado macroscópico do sistema. Isto é, sendo V e N o volume e o número de partículas do sistema, mudanças fenomenológicas na entropia $S(T, V, N)$ podem ser encontradas a partir de medidas experimentais com calorímetros e termômetros, por exemplo.

Para um sistema descrito pelas variáveis macroscópicas U, V e N , por exemplo, as propriedades matemáticas necessárias para uma formulação quantitativa da entropia, do ponto de vista da termodinâmica clássica, devem satisfazer as seguintes relações [68]

$$S(\lambda U, \lambda V, \lambda N) = \lambda S(U, V, N), \quad \text{para } \lambda \text{ real}, \quad (3.8)$$

$$S(U_2, V, N) \geq S(U_1, V, N), \quad U_2 \geq U_1, \quad (3.9)$$

$$S(U_1 + U_2, V_1 + V_2, N_1 + N_2) \geq S(U_1, V_1, N_1) + S(U_2, V_2, N_2), \quad (3.10)$$

onde os subíndices referem-se a diferentes sistemas formando componentes de um sistema.

A relação (3.8) afirma que entropia S é *homogênea de primeira ordem*, de modo que a entropia é considerada como uma função dos parâmetros extensivos. Isto significa dizer que, se todos os parâmetros de um sistema for multiplicado por uma constante λ , a entropia é multiplicada por esta mesma constante. A relação (3.9) indica que S é *monotônica*, o que permite definir uma temperatura positiva através da relação $T^{-1} = \partial S / \partial U$. A relação (3.10) implica em *superaditividade*, refletindo a essência da segunda lei e a propriedade da entropia ser máxima no equilíbrio. As relações (3.8) e (3.10) implicam ainda que S seja côncava com relação às variáveis extensivas, o que é esperado por ela possuir um máximo. A relação (3.9) garante a invertibilidade de S para obter $U(S, V, N)$, que é convexo, extensivo e subaditivo: $U \leq U_1 + U_2$. Assim, U é mínimo no equilíbrio.

3.1.2 Entropia do ponto de vista da mecânica estatística

A formulação dada por Clausius acerca de entropia, descrita na seção anterior, leva em consideração aspectos macroscópicos do sistema, tais como energia interna U , troca de calor Q , temperatura T , dentre outros. Para uma descrição microscópica do sistema se faz necessário o conhecimento completo acerca de cada partícula constituinte do sistema. Por exemplo, para uma descrição microscópica de um gás, precisaríamos conhecer a posição e o momento de cada partícula constituinte do gás, o que requer um esforço matemático inconcebível. Assim, a descrição macroscópica deste sistema em termos de poucos parâmetros é mais acessível, embora esteja restrito a estados de equilíbrio.

Para um dado sistema macroscópico há muitos estados microscópicos. A ideia chave aqui parte da mecânica quântica na qual o estado de átomos, moléculas, e outros constituintes do sistema são discretos e quantizados. Para exemplificar daremos um exemplo com dados.

Quando lançamos um dado há seis resultados possíveis (seis microestados); um sistema com dois dados, então, possui $6 \times 6 = 36$ microestados e, para um sistema com N dados, temos 6^N microestados. Em particular, para dois dados, há seis maneiras (microestados) de obter 7 como soma dos resultados individuais (macroestado), mas apenas um microestado que corresponde ao macroestado 2 ou 12. O macroestado mais comum é 7 (ou 3, 5 se considerarmos a média, isto é, a razão entre a soma dos resultados individuais e o número de dados). Para um grande número N de dados, o macroestado para o qual o número de microestados possíveis é um máximo é 3, 5 e, quanto maior for N , maior é a probabilidade de obter um número muito próximo de 3, 5. Se lançarmos de uma única vez um grande número de dados, é provável que seja obtido um valor próximo a $3,5 \times N$, que é o mesmo que seria obtido se lançássemos o mesmo dado N vezes.

Para um gás contido em uma caixa de tamanho finito, por exemplo, ou com energia total fixa, existe um número finito de microestados permitidos. Este número pode ser muito grande, mas é finito. Os microestados do sistema mudam continuamente, com o tempo, de um estado quântico para outro, à medida que as moléculas se movem e colidem umas com as outras. A probabilidade de o sistema estar em um estado quântico particular, num dado instante de tempo, é definida por $p_i(t)$. O conjunto de todas as probabilidades $p_i(t)$ é chamado de distribuição de probabilidade. A soma das probabilidades de todos os estados quânticos permitidos deve ser a unidade, portanto, a qualquer instante de tempo t ,

$$\sum_i p_i(t) = 1. \quad (3.11)$$

Quando o sistema atinge o equilíbrio, cada molécula ainda muda de um estado quântico para outro. No entanto, no equilíbrio, o estado do sistema não muda com o tempo, ou seja, as probabilidades para os diferentes estados quânticos são independentes do tempo. No estado de equilíbrio, portanto, podemos interpretar a probabilidade p_i como a fração de tempo que um sistema passa no i -ésimo estado quântico. No que segue, limitamos as considerações aos estados de equilíbrio.

É possível obter as grandezas macroscópicas do sistema a partir das grandezas microscópicas. Por exemplo, para obter a energia do sistema, podemos calcular a média ponderada das possíveis energias do sistema, onde os pesos são o tempo médio que o sistema passa nos microestados correspondentes. Em termos de probabilidades, temos

$$\langle E \rangle = \sum_i p_i \varepsilon_i, \quad (3.12)$$

onde ε_i é a energia do i -ésimo estado quântico.

Boltzmann propôs uma forma de relacionar uma propriedade macroscópica (entropia) com uma informação microscópica do sistema. Para um sistema com energia, volume e número de partículas constantes, a entropia de Boltzmann é dada por ¹

$$S = k \ln W \quad (3.13)$$

onde k é uma constante que fornece a unidade de entropia e W é o número de microestados possíveis para um dado macroestado. Podemos ver a partir da equação (3.13) que (i) S é máximo quando W é máximo, ou seja, há muitos microestados permitidos; e (ii) S é mínimo quando W é mínimo. Em particular, para $W = 1$, há um único microestado possível e $S = 0$. É desta relação que surge a interpretação da entropia como uma *medida de desordem* do sistema: se tomarmos as cartas de um baralho como exemplo e impormos a restrição de que todas as suas 54 cartas estejam em uma dada ordem pré-estabelecida, há apenas uma possibilidade de sequência para as cartas, ou seja, há apenas um microestado acessível a este sistema, de modo que sua entropia seria zero. Se permitirmos que apenas uma carta saia da ordem, o número de microestados sobe para 54, aumentando consideravelmente o valor da entropia. Se a restrição for relaxada ainda mais, impondo-se apenas que as cartas sejam as cartas de um único baralho completo (restrição antes também subentendida) o sistema terá o maior número de configurações

¹A maioria dos trabalhos de Boltzmann sobre termodinâmica e mecânica estatística, iniciado em 1866, é resumido em seu livro *Vorlesungen über Gästheorie* (1896-1898), o qual foi traduzido para o inglês e republicado na referência [69].

possíveis, a maior desordem possível, e portanto a maior entropia possível. Aumentar a desordem, isto é, aumentar a entropia de um sistema termodinâmico significa, de forma similar, dar-lhe condições para que haja um maior número de microestados acessíveis às partículas que o compõem.

Em 1902, J. Willard Gibbs publicou o livro intitulado *Elementary Principles in Statistical Mechanics* [70], no qual formula sistematicamente a teoria da mecânica estatística. Nele, Gibbs deu uma formulação mais geral para a entropia. A entropia de Boltzmann-Gibbs é dada por

$$S = -k_B \sum_{i=1}^W p_i \ln p_i \quad (3.14)$$

onde p_i é a probabilidade do sistema estar no microestado i (ou a fração de tempo que o sistema permanece no estado i) e k_B é a constante de Boltzmann. Em particular, se os valores de p_i são independentes do estado i , a energia, o volume e o número de partículas são constantes. Este conjunto de estados é denominado de *ensemble microcanônico* e, neste caso, os microestados são equiprováveis. Ou seja, se substituirmos $p_i = 1/W$ na equação (3.14) obtemos a equação (3.13).

No *ensemble canônico*, a energia não é mais constante, podendo flutuar em torno de um valor médio. Este valor médio que é mantido constante. Neste caso, os estados permitidos ao sistema não mais são equiprováveis: o sistema passará mais tempo nos estados de menor energia (maior probabilidade) e menos tempo nos estados de energia mais alta (estados pouco prováveis). De acordo com a mecânica estatística de Boltzmann-Gibbs, a distribuição de probabilidades no estado de equilíbrio térmico é dada por

$$p_i = \frac{e^{-\varepsilon_i/k_B T}}{Z} \quad (3.15)$$

onde ε_i é a energia do i -ésimo estado, T é a temperatura absoluta e Z é a função de partição, fator este que garante a normalização das probabilidade:

$$Z = \sum_{i=1}^W e^{-\varepsilon_i/k_B T}. \quad (3.16)$$

Neste formalismo, por exemplo, o valor médio da energia (usualmente chamado de energia interna U) é dado, como já mencionado, pela equação (3.2). Escrevendo $\beta = 1/(k_B T)$

temos:

$$\begin{aligned}
 U &\equiv \langle E \rangle = \sum_{i=1}^W p_i \varepsilon_i = \sum_{i=1}^W \frac{\varepsilon_i e^{-\beta \varepsilon_i}}{Z} = -\frac{\partial Z / \partial \beta}{Z} \\
 &= -\frac{\partial \log Z}{\partial \beta}.
 \end{aligned} \tag{3.17}$$

3.1.3 Entropia do ponto de vista da teoria de informação

A teoria da informação, também conhecida como teoria matemática da comunicação, originou-se no trabalho de Claude Shannon [71], durante a segunda guerra mundial e lida com sistemas de comunicação, transmissão de dados, criptografia, ruído, dentre outros. Shannon foi um dos pioneiros em tratar a comunicação como um problema matemático embasado na estatística. O problema tratado na época consistiu em como reproduzir a mensagem exata ou a mais aproximadamente possível da mensagem original, em um ponto, emitida a partir de outro ponto. Shannon demonstrou que letras e palavras, escolhidas ao acaso, postas em sequência e ditadas exclusivamente por considerações de probabilidade (por exemplo, depois das palavras “no caso”, a probabilidade da próxima ser “de” é muito grande), tendem a formar palavras e frases significativas. Neste contexto, ele interpretou entropia como uma medida da incerteza² (ou ignorância) sobre o sistema, associada a uma distribuição de probabilidade. O estado de equilíbrio (equiprobabilidade entre os estados possíveis) maximiza a entropia do sistema porque qualquer informação acerca da configuração inicial do sistema é perdida, exceto sobre as quantidades conservadas; maximizar a entropia, portanto, maximiza nossa ignorância sobre detalhes do sistema.

Seja X um conjunto de variáveis discretas aleatórias com um número finito de valores possíveis $x_1, x_2, \dots, x_W$ com probabilidades $p_1, p_2, \dots, p_W$ respectivamente, tal que $p_i \geq 0$ e $\sum_{i=1}^W p_i = 1$.

Se conhecemos a probabilidade p_i do sistema estar no i -ésimo estado e, em seguida, um observador constata que de fato o sistema encontra-se em i , o observador obteve uma certa quantidade de informação acerca do sistema e, o que antes era uma probabilidade p_i agora é certeza. Quanto menor a probabilidade p_i , maior é o ganho de informação. Inversamente, se p_i for grande, o ganho de informação é pequeno. Ou seja, o ganho de informação (representado aqui por $I(p_i)$) é uma função que decai com o aumento de

²Não devemos confundir o termo “incerteza” aqui usado com o conceito de incerteza dado por Heisenberg na mecânica quântica: o princípio da incerteza de Heisenberg não tem uma entropia associada.

p_i . A quantidade de informação sobre dois eventos independentes, onde a probabilidade é o produtos das probabilidades individuais, é a soma da informação para cada evento separadamente. A função que obedece ambas propriedades pode ser definida por

$$I(p_i) = -k \ln p_i, \quad (3.18)$$

onde k é uma constante. Como o logaritmo da unidade é zero, então, se há certeza da ocorrência de um evento ($p_i = 1$), não há nenhum ganho de informação e $I = 0$. A constante k define a unidade em que a informação é medida e, se definimos $k = 1/\ln 2$, então

$$I(p_i) = -\log_2 p_i \quad (3.19)$$

e a informação aqui é medida em *bits*. Um bit é a quantidade de informação obtida como resultado de um experimento com dois resultados igualmente prováveis ($p = 1/2$), o qual pode ser representado pelos dígitos binários 0 ou 1:

$$I(1/2) = -\log_2(1/2) = 1$$

A incerteza total associada ao conjunto de eventos possíveis é uma média das incertezas associadas a cada evento i particular ponderada pela sua probabilidade de ocorrência. Além disso, quanto maior o número de possibilidades W maior é a incerteza: se compararmos o lançar de um dado de seis faces com o lançar de uma moeda, nossa incerteza associada ao jogo do dado é maior que a da moeda. Assim, a *entropia de Shannon* é definida por [71]

$$\begin{aligned} S(X) &= \sum_{i=1}^W p_i I(p_i) \\ &= \sum_{i=1}^W p_i \log_2 p_i. \end{aligned} \quad (3.20)$$

A equação para entropia de Shannon nos dá um modo de estimar o número mínimo médio de bits necessários para codificar uma sequência de símbolos, baseado na frequência dos símbolos. Note que a expressão acima é idêntica a expressão para a entropia de Boltzmann-Gibbs, definida na equação (3.14).

Uma aplicação interessante é saber o quanto uma frase é significativa em um texto ou demasiadamente repetitiva. Pode-se calcular a entropia da frase $S(X)$ e, caso seja alta, pode-se eliminar redundâncias até que a entropia seja a menor possível. Por exemplo,

há diversos trabalhos na literatura que buscam a caracterização estatística da linguagem escrita, comumente denominada *linguística quantitativa* [72–75], baseados na aplicação da entropia de Shannon em obras literárias em idiomas distintos.

Cada língua tem uma distribuição característica das letras do alfabeto. Por exemplo, na língua portuguesa³, as letras mais frequentes são “a” e “e” e a menos frequente é a “y”, enquanto que, no inglês⁴, a letra mais frequente é a “e” e a menos frequente é a “z”. Para exemplificar podemos citar um estudo realizado com diversas obras de Machado de Assis, no qual foi calculado a frequência das letras e a entropia do texto como um todo, verificando-se que a entropia ficara em torno de 4,18 bits, independente da obra [76].

Embora o valor da entropia informacional tenha sido praticamente o mesmo para diferentes obras, este fato não pode ser usado para distinguir o escritor Machado de Assis de outros escritores. De fato, se forem analisados um grande número de obras em português, independentemente do autor e assunto, os valores obtidos para a entropia informacional sempre serão próximos de 4,18. Isto ocorre porque as frequências das letras em português, assim como qualquer idioma, é uma característica do idioma e não do autor em particular. O fato é que as frequências das letras não devem variar significativamente de um texto para outro, na mesma língua, mas devem variar de uma língua para outra. Em princípio, isso pode ser utilizado para reconhecer a língua em que um dado texto está escrito.

3.1.4 Equivalência entre entropia estatística e entropia termodinâmica

É possível demonstrar que a definição clássica de entropia, dada na termodinâmica, é equivalente à definição dada na mecânica estatística de Gibbs. De certa forma, no entanto, a declaração clássica poderia ser interpretada como a definição de temperatura. Como veremos abaixo, a derivação depende da definição da temperatura para ser o que ela é.

A definição estatística de entropia, dada pela equação (3.14) é

$$S = -k_B \sum_{i=1}^W p_i \ln p_i \quad (3.21)$$

³*Frequência de ocorrência de letras no Português*. Disponível em <http://www.numaboa.com.br/criptografia/criptoanalise/310-Frequencia-no-Portugues> e acessado em 26/05/2017.

⁴*Letter Frequency (English)*. Disponível em <http://en.algoritmy.net/article/40379/Letter-frequency-English> e acessado em 26/05/2017.

onde W é o número de microestados acessíveis ao sistema, e p_i é a probabilidade de encontrar o sistema no i -ésimo microestado.

Por simplicidade, iremos supor que todos os microestados são equiprováveis: $p_i = 1/W$. Isso torna todos os termos da soma idênticos, de modo que imediatamente obtemos

$$S = k_B \ln W. \quad (3.22)$$

Em seguida, precisamos conhecer o que acontece quando dois sistemas trocam calor dQ . Digamos que temos dois sistemas macroscópicos A e B e os colocamos em contato de tal forma que eles podem trocar calor. O calor é transferido aleatoriamente entre A e B até que eles atinjam o equilíbrio à mesma temperatura, T . A divisão de equilíbrio de calor entre A e B é a divisão que maximiza o número de microestados do sistema combinado $A+B$. Se o sistema A tem W_A microestados e o sistema B tem W_B microestados, então o sistema combinado tem $W_{A+B} = W_A W_B$ microestados. No equilíbrio, W_{A+B} é um máximo em relação à transferência de calor.

Aplicando a expressão para entropia acima, vemos também que, no equilíbrio, $S_{A+B} = S_A + S_B$ é um máximo. Agora podemos ver como a entropia depende de uma pequena transferência de calor dQ . Como temos um máximo de S_{A+B} , uma transferência infinitesimal de calor deixará S inalterado a primeira ordem:

$$dS_{A+B} = \frac{\partial S_A}{\partial Q_A} dQ_A + \frac{\partial S_B}{\partial Q_B} dQ_B = 0. \quad (3.23)$$

Como estamos falando de troca de calor entre dois sistemas, um ganha calor enquanto o outro perde, de modo que $dQ = dQ_A = -dQ_B$. Substituindo na expressão acima e reorganizando os termos, temos

$$\frac{\partial S_A}{\partial Q_A} = \frac{\partial S_B}{\partial Q_B}. \quad (3.24)$$

Deve-se notar que há uma suposição implícita aqui: a de que a única forma pela qual o sistema pode mudar sua energia é através da transferência de calor. Não há mudanças no volume, número de partículas, etc.

O resultado anterior nos diz que a derivada de entropia com relação à transferência de calor é a mesma para sistemas em equilíbrio térmico. A temperatura é, evidentemente, a mesma para sistemas em equilíbrio térmico. Então os dois devem ser relacionados. Para se adequar à definição histórica de temperatura (isto é, para recuperar a lei do gás ideal e outras leis empíricas), temos que definir temperatura por $\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial Q}$. Assim, podemos

escrever a definição de entropia por

$$dS = \frac{dQ}{T}, \quad (3.25)$$

que é a expressão (3.4).

3.2 Entropia em sistemas abertos

Como vimos, entropia é uma medida da “qualidade” de energia: quanto maior a entropia, menor é a quantidade de energia utilizável. Também é uma medida da aleatoriedade ou desordem em uma estrutura microscópica. Para um sistema isolado, a segunda lei da termodinâmica estabelece que uma mudança na entropia em processos irreversíveis é sempre maior do que em processos reversíveis, e esta última é igual a zero. Isto é:

$$dS_{\text{irrev.}} > dS_{\text{rev.}} = 0. \quad (3.26)$$

Desde a mais simples bactéria até os seres humanos, a manutenção da vida requer um troca contínua de energia e matéria com o mundo ao redor, ou seja, vida requer um sistema aberto. Assim, como organismos biológicos não são sistemas isolados, a equação (3.26) não pode ser aplicada a biologia. Para um sistema aberto, contudo, podemos decompor a mudança de entropia dS , num intervalo de tempo dt , em uma soma de duas contribuições:

$$dS = d_e S + d_i S, \quad (3.27)$$

onde $d_e S$ é o fluxo de entropia devido a trocas de energia e/ou matéria com o meio externo e $d_i S$ é a produção de entropia devido a processos irreversíveis dentro do sistema (difusão, calor, reações químicas...). A segunda lei da termodinâmica para sistemas abertos, então, afirma que a produção de entropia em processos irreversíveis é sempre maior que para processos reversíveis e esta última é igual a zero [60]:

$$d_i S_{\text{irrev.}} > d_i S_{\text{rev.}} = 0. \quad (3.28)$$

Desta forma, a segunda lei para sistemas abertos é formulada em termos da produção de entropia.

Para um sistema isolado, não há fluxo de entropia devido a trocas de energia e/ou

matéria com o meio externo, Assim, $d_e S = 0$, e a equação (3.27) nos dá

$$dS = d_i S \geq 0. \quad (3.29)$$

Ou seja, um sistema aberto difere de um sistema isolado apenas pela presença de um termo de fluxo, $d_e S$ na mudança da entropia. Em contraste a $d_i S$, o qual não pode ser negativo, este termo não tem um sinal definido. Como resultado, pode-se imaginar evoluções onde o sistema atinge um estado de entropia inferior ao inicial:

$$\Delta S = \int_{\text{caminho}} dS < 0 \quad (3.30)$$

Este estado, que do ponto de vista da relação de equilíbrio (3.15) seria altamente improvável, pode ser mantido indefinidamente, desde que o sistema possa atingir um estado estacionário tal que $dS = 0$ ou

$$d_e S = -d_i S < 0. \quad (3.31)$$

Assim, em princípio, se damos a um sistema uma quantidade suficiente de fluxo de entropia negativa, podemos permitir que ele mantenha uma configuração ordenada. Como mostra a Eq. (3.31), esta oferta deve ocorrer sob condições fora do equilíbrio, caso contrário ambas as partes desaparecerão.

Em sistemas abertos próximos do equilíbrio termodinâmico, a produção de entropia diminui com o tempo e aproxima-se de um nível mínimo estacionário, de acordo com o princípio de *mínima produção de entropia* [60]

$$\frac{d_i S_{\text{irrev.}}}{dt} < 0. \quad (3.32)$$

Tradicionalmente, a termodinâmica é tratada para sistemas no equilíbrio ou próximo do equilíbrio. Nas referências [60, 77] há uma extensão da termodinâmica de processos irreversíveis longe do equilíbrio que permite tratar ambas, criação e destruição de ordem, com o mesmo formalismo. Embora sistemas biológicos muitas vezes estejam longe do equilíbrio, há situações em que se aproximam do equilíbrio antes de serem interrompidos de uma maneira ou de outra [78]. Isso pode ocorrer em escalas diferentes, desde grandes ecossistemas a uma única célula. Como exemplo, podemos citar quando uma população se aproxima de um estado evolutivamente estável ou uma reação química que se aproxima do equilíbrio.

Os autores da referência [60] defendem que não-equilíbrio pode ser a fonte de ordem.

Isto é de interesse óbvio em sistemas vivos. A biosfera como um todo é um sistema fora do equilíbrio, uma vez que está sujeita a um fluxo de energia proveniente do Sol.

3.3 Caracterização da dinâmica caótica

A investigação sobre o caos pode ser traçada até o início dos anos 1900, quando o físico Henri Poincaré buscava uma formulação matemática para o movimento planetário [79]. Antes das descobertas de Poincaré em astronomia, as equações matemáticas para a órbita dos planetas seguiam as leis de Newton e, portanto, eram completamente determinísticas. Assim, acreditava-se que, com a melhoria nos métodos de medição das condições iniciais, seria possível obter uma previsão mais precisa das trajetórias dos planetas. Contrariamente a essa ideia, Poincaré observou que uma diferença muito pequena na posição e velocidade inicial dos planetas poderia causar um enorme efeito no movimento final. Com isto, ele concluiu que, mesmo se as condições iniciais pudessem ser especificadas com alta precisão, a incerteza ainda seria enorme em certos sistemas. A descoberta de Poincaré foi negligenciada por muitas décadas devido a sua clara contradição à mecânica newtoniana [80].

Um progresso significativo no campo da teoria do caos veio com a proposição de Edward Lorenz do “efeito borboleta”. Em suas investigações meteorológicas, Lorenz descobriu que variações nas casas decimais das medidas iniciais do tempo previam um movimento completamente diferente. Para ilustrar melhor sua teoria, Lorenz deu o exemplo de como um bater de asas de uma borboleta no Brasil pode causar um tornado no Texas, indicando que uma pequena brisa poderia mudar o clima em poucas semanas. Isso ficou conhecido como o **efeito borboleta**⁵, a “assinatura” da teoria do caos, e faz menção de que alguns sistemas sejam altamente sensíveis a mudanças insignificantes nas condições iniciais.

Tradicionalmente, para testar a validade de uma teoria se faz necessário verificar se suas previsões se sustentam quando comparadas com resultados experimentais. Este é o método científico criado por Galileu, e a descoberta de sistemas caóticos afetou o próprio método científico. Assim, se o sistema analisado é caótico, previsões de longo prazo são

⁵O nome “efeito borboleta” faz menção ao título de uma palestra proferida por Lorenz em 1972, no 139º annual meeting of the American Association for the Advancement of Science, em Washington, intitulado “Predictability: does the flap of a butterfly’s wings in Brazil set off a tornado in Texas?”. O texto desta palestra nunca foi publicado, mas é apresentado em sua forma original como um apêndice na referência [81].

intrinsecamente impossíveis, o que dificulta a validação da teoria.

3.3.1 Definição de Caos

Não há um consenso sobre a definição de caos. Assim, para defini-lo, usaremos a definição dada nas referências [82, 83]. Seja X um espaço métrico e $\mathbb{N} = \{0, 1, 2, \dots\}$. Dado um sistema dinâmico $\vec{F} : X \rightarrow X$, podemos classificar o comportamento de um sistema como caótico quando o sistema possui as seguintes propriedades:

- $\vec{F}$ sensibilidade às condições iniciais;
- $\vec{F}$ é transitiva;
- as órbitas de $\vec{F}$ devem formar um conjunto denso em X .

Consideremos a equação discreta

$$\vec{x}(n+1) = \vec{F}(\vec{x}(n)), \quad n \in \mathbb{N}. \quad (3.33)$$

Dado $\vec{x}(0) = \vec{x}_0 \in X$, a solução do problema (3.37) com condição inicial $\vec{x}_0$ é a sequência $(\vec{F}^n(\vec{x}_0))$ onde $\vec{F}^n$ é a n -ésima iterada de $\vec{F}$. Essa sequência é chamada de **órbita** de $\vec{x}_0$ pela $\vec{F}$. Um **ponto fixo** de $\vec{F}$ é um ponto $\vec{x}_0 \in X$ tal que $\vec{F}(\vec{x}_0) = \vec{x}_0$. Se existe $n \geq 1$ tal que $\vec{x}_0$ é um ponto fixo da iterada $\vec{F}^n$, dizemos que $\vec{x}_0$ é um **ponto periódico** de $\vec{F}$. O menor n nessas condições é chamado de **período** da órbita.

Seja A um subconjunto e B um subconjunto de A . Diz-se que B é denso em A se para qualquer ponto $\vec{a} \in A$ e para qualquer $\epsilon > 0$, há um ponto $\vec{b} \in B$ tal que $\|\vec{a} - \vec{b}\| < \epsilon$. Os números racionais são densos nos números reais; os irracionais também são; os inteiros não são.

Dizemos que $\vec{F}$ é **transitiva** se dados arbitrariamente dois subconjuntos abertos A e B de X , existe um número inteiro positivo k tal que $\vec{F}^k(A) \cap B \neq \{\}$. Por exemplo, se X não tem pontos isolados e se $\vec{F}$ possui uma órbita densa em X , então $\vec{F}$ é transitiva. No caso em que X é compacto sem pontos isolados, a existência de uma órbita densa é na verdade equivalente à transitividade. Assim, escolhendo dois pontos quaisquer pertencentes ao domínio de $\vec{F}$, existe uma órbita que passa tão próximo quanto se queira desses dois pontos.

Diremos ainda que $\vec{F}$ tem sensibilidade às condições iniciais se há um número $\epsilon > 0$ tal que, para qualquer condição inicial $\vec{x}_0$ e para qualquer número $\delta > 0$, existe pelo menos um ponto $\vec{x}_0'$ com $\|\vec{x}_0 - \vec{x}_0'\| < \delta$, tal que $\|\vec{F}^k(\vec{x}_0) - \vec{F}^k(\vec{x}_0')\| \geq \epsilon$. Em outras palavras, sensibilidade às condições iniciais significa que dois pontos em tal sistema podem

mover-se em trajetórias muito diferentes no espaço de fases, mesmo que a diferença entre as condições iniciais sejam muito pequenas. O sistema se comporta de forma idêntica apenas se a condição inicial for exatamente a mesma.

3.3.2 Lorenz e o efeito borboleta

O clima é sem dúvida um dos grandes exemplos de sistemas caóticos. Na verdade, foi no estudo da meteorologia que o caos foi de fato definido. No início da década de 1960, o meteorologista Edward Lorenz dedicava-se a estudar o comportamento da atmosfera terrestre, tentando encontrar um modelo matemático capaz de fazer previsões meteorológicas.

Naquela época, usava-se um modelo linear para previsão meteorológicas, baseado em dados experimentais. Lorenz propôs um sistema não-linear formado por três equações diferenciais [84]. O sistema proposto por Lorenz é dado por:

$$\frac{dX}{dt} = -\sigma X + \sigma Y \quad (3.34)$$

$$\frac{dY}{dt} = rX - Y - XZ \quad (3.35)$$

$$\frac{dZ}{dt} = XY - bZ \quad (3.36)$$

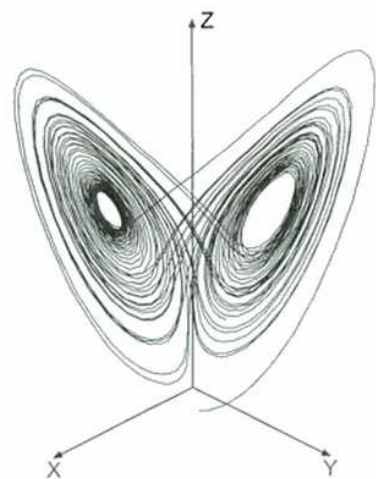
onde o parâmetro $\sigma \equiv \mu/\kappa$ é conhecido como *número de Prandtl*, dado pela razão entre viscosidade e condutividade térmica; $r \equiv R/R_c$ é a diferença de temperatura entre a base e o topo do sistema, denotado como número de Rayleigh; $b \equiv 4/(1 + a^2)$ que depende das dimensões do sistema.

Nestas equações, $X(t)$ é proporcional à intensidade do movimento de convecção: $X = 0$ implica que não há movimento convectivo, ou seja, o calor é transportado apenas por condução; $X > 0$ implica circulação horária e $X < 0$, circulação anti-horária. A variável $Y(t)$ é proporcional a diferença de temperatura entre as correntes ascendentes e descendentes do fluido. A variável $Z(t)$ é proporcional à distorção do perfil vertical da temperatura, em relação ao perfil linear.

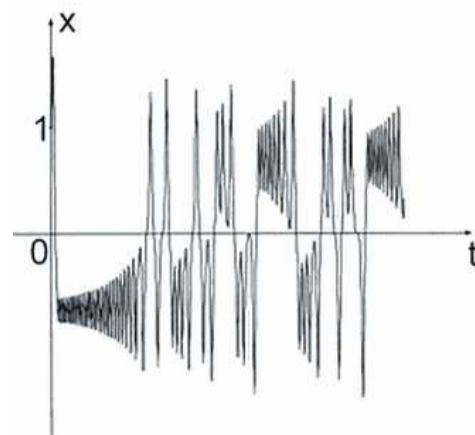
Após algumas iterações, Lorenz notou que pequenas diferenças nas condições iniciais do sistema (tal como o uso de três em vez de seis casas decimais, por exemplo) levam o sistema final ter cenários completamente diferentes, dificultando previsões meteorológicas de longo prazo.

A figura 3.2 exibe a solução do sistema de Lorenz para $\sigma = 10$, $r = 28$ e $b = 8/3$,

a partir da condição inicial $X(0) = 1$, $Y(0) = 2$ e $Z(0) = 3$. Partindo da configuração inicial dada, o caminho percorrido no espaço de fases, isto é, a solução representada no espaço formado pelos eixos X , Y e Z , toma a forma das asas de uma borboleta. A figura 3.2(a) é conhecida como **atrator de Lorenz**.



(a) Atrator do sistema de Lorenz.



(b) Evolução temporal de $X(t)$.

Figura 3.2 Solução do sistema de Lorenz para $\sigma = 10$, $r = 28$ e $b = 8/3$. Figura retirada da referência [83].

Um **atrator** é um conjunto ao qual todas as trajetórias vizinhas convergem. Mais especificamente, define-se um atrator como um conjunto fechado de pontos A com as seguintes propriedades [32]:

1. A é um conjunto invariante: isto é, qualquer trajetória $\vec{x}(t)$ que começa em A permanece em A por todo tempo;
2. A atrai um conjunto aberto de condições iniciais: isto é, há um conjunto aberto U que contém A tal que, se $\vec{x}(0) \in U$, então a distância de $\vec{x}(t)$ a A tende a zero quando $t \rightarrow \infty$. Isto significa que A atrai todas as trajetórias que iniciam suficientemente próximas a ele. O maior conjunto de condições iniciais que satisfaz esta propriedade é chamado de **bacia de atração** de A ;
3. A é mínimo: ou seja, não há nenhum subconjunto e A que satisfaz as condições 1 e 2.

Num sistema dinâmico de tempo contínuo, autônomo e bidimensional, a figura atratora pode ser de dois tipos: (i) ponto de equilíbrio, que corresponde a uma solução cujo comportamento é independente do tempo. e (ii) ciclo-limite, que descreve um comportamento periódico no tempo, com amplitude e período determinados pela forma das equações e pelos valores dos seus parâmetros.

Num sistema tridimensional, existem mais duas figuras atratoras, que são: (a) superfície toroidal, que representa um regime periódico ou quase periódico, com duas frequências fundamentais independentes; e (b) **atrator estranho**, que apresenta dependência sensível às condições iniciais. Um sistema dinâmico determinista, cuja evolução temporal leva assintoticamente para um atrator estranho apresenta dinâmica caótica.

3.3.3 Caracterização do caos em sistemas biológicos

Sabendo-se que a dinâmica estocástica dos modelos propostos aqui nesta tese produzem um comportamento caótico, é de interesse explorar um pouco mais este fato (os detalhes dos modelos e o procedimento computacional realizado é apresentado no próximo capítulo, Cap. 4). Tanto para sistemas de tempo discreto, como para os de tempo contínuo, uma rota padrão para avaliar a sensibilidade às condições iniciais é calcular os expoentes de Lyapunov. A grosso modo, os expoentes de Lyapunov medem a divergência exponencial entre trajetórias inicialmente próximas no espaço de fases. Assim, o comportamento caótico é caracterizado pela divergência exponencial de trajetórias vizinhas. Neste caso, há pelo menos um expoente de Lyapunov positivo.

Nas referências [63, 64] os autores propõem uma nova rota para caracterização do caos. Partindo do princípio de máxima entropia, eles mostram que é possível relacionar a densidade de máximos com o comprimento de autocorrelação de um observável que flutua em torno de um valor médio, como a abundância de espécies, no caso do nosso modelo.

A função de autocorrelação temporal pode ser obtida através da expressão

$$C_{xx}(t, t') \equiv \frac{1}{\sigma^2} \langle x(t)x(t') \rangle - \frac{1}{\sigma^2} \langle x(t) \rangle \langle x(t') \rangle \quad (3.37)$$

onde $x(t)$ é o observável em questão, $\sigma^2 = \langle x(t)^2 \rangle - \langle x(t) \rangle^2$, e $\langle \dots \rangle$ deve ser entendido como uma média do ensemble. Sendo ρ_t o número de máximos por intervalo de tempo do observável, a relação entre a função de correlação e a densidade de máximos é dada por [63]

$$\langle \rho_t \rangle = \frac{1}{2\pi} \sqrt{-\frac{T_4}{T_2}} \quad (3.38)$$

onde

$$T_j \equiv \frac{d^j}{d(\delta t)^j} C(\delta t) \Big|_{\delta t=0}. \quad (3.39)$$

A figura 3.3, retirada da referência [64], mostra o nível da água do oceano em uma determinada estação, com os dados disponibilizados em <http://tidesandcurrents>.

noaa.gov/waterlevels.html?id=1770000. O painel à direita ilustra a função de autocorrelação, indicando visualmente que o comprimento de correlação é cerca de 2 horas. Ajustando a curva, o valor do comprimento de correlação é $\tau = 2.0748$.

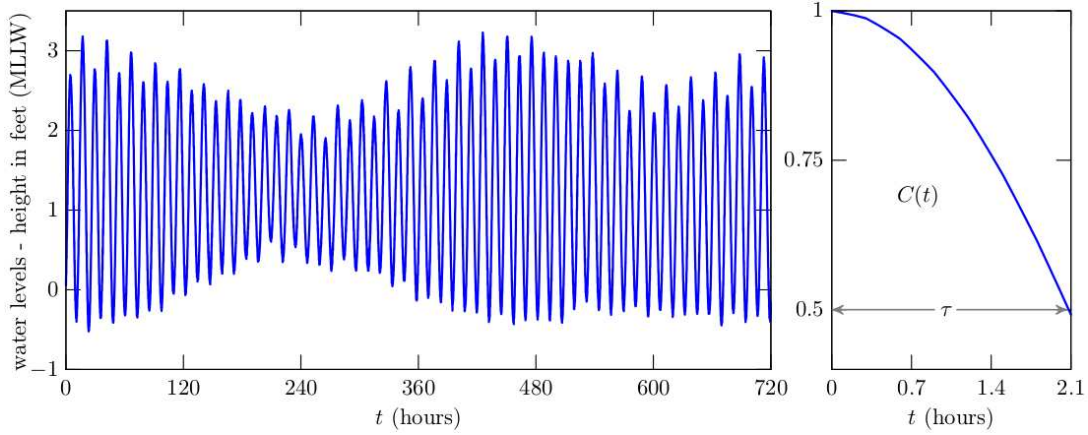


Figura 3.3 Nível da água do oceano em uma determinada estação (esquerda) com o passar do tempo. o painel à direita mostra a função de autocorrelação correspondente. Figura retirada da referência [64]

Se aproximarmos a função de correlação por $C(t) = \cos(\omega t + \phi)$ e substituirmos esta expressão em (3.38), obtemos que a densidade de máximos pode ser dada por

$$\langle \rho_t \rangle = \frac{1}{6\tau}. \quad (3.40)$$

Contando o número de máximos e substituindo na expressão acima, o valor do comprimento de correlação dado é $\tau = 2.0689$.

Para quantificar o comportamento caótico do sistema, nós empregamos um novo método, baseado no conceito de distância Hamming [85], com a finalidade de diferenciar a característica aleatória da caótica do problema. Dado dois vetores $\vec{u}$ e $\vec{v}$ com mesmo número de elementos, a distância Hamming $H(\vec{u}, \vec{v})$ entre estes dois vetores é definida como o número de elementos em que $\vec{u}$ é diferente de $\vec{v}$. Assim, por exemplo, a distância Hamming entre $\vec{u} = (0, 1, 1, 0, 1, 0, 1, 0)$ e $\vec{v} = (1, 1, 0, 1, 1, 0, 1, 1)$ é $H(\vec{u}, \vec{v}) = 4$.

Nós usamos a distância Hamming $H(t)$ para medir a diferença entre dois estados finais, os quais são vistos como duas matrizes $L \times L$ distintas. Para tal, procedemos da seguinte maneira:

- Preparamos o estado inicial do sistema utilizando a técnica padrão, distribuindo os estados acessíveis ao sistema de forma aleatória e fizemos uma cópia deste estado inicial;

- Evoluímos o estado inicial até o estado final, salvando toda a evolução temporal. O ponto chave aqui é que durante a evolução temporal do sistema, um novo arquivo é criado, salvando todos os passos usados para executar a simulação;
- Partindo da cópia do estado inicial, aleatoriamente selecionamos um sítio da rede e modificamos o seu conteúdo. Esse novo estado tem a menor diferença possível do estado original, uma vez que dentre todos os sítios da rede apenas um é diferente;
- Partindo deste novo estado, evoluímos o sistema com os mesmos passos que o sistema anterior, na mesma ordem e lugar, como elas aparecem no arquivo salvo. Esse novo sistema leva a um novo estado final.

Os dois estados finais gerados após este procedimento são diferentes, mas a diferença entre eles não tem nada a ver com a aleatoriedade da simulação estocástica, sendo devido a pequena modificação introduzida no segundo estado inicial. Na figura 3.4 é mostrado a densidade da distância Hamming $h(t) = H(t)/L^2$ como função do tempo para os três sistemas estudados nesta tese: $X3$, $X4$ e $SX3$. Os detalhes dos modelos e da evolução temporal do sistema é mostrado no próximo capítulo.

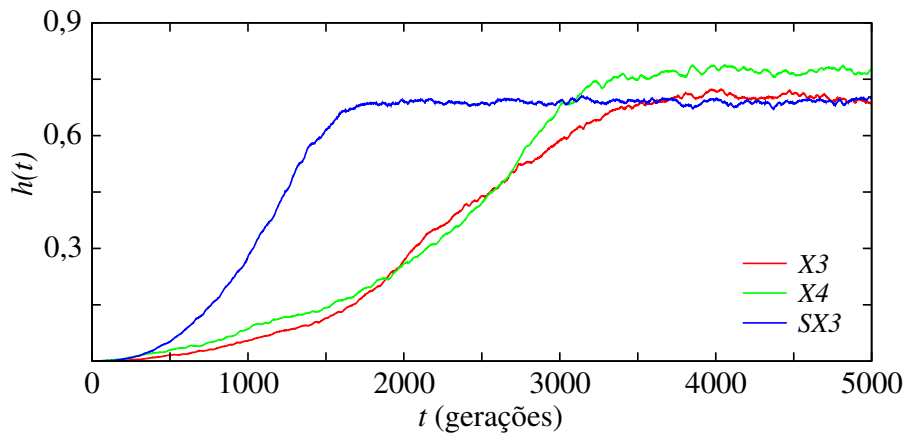


Figura 3.4 Densidade da distância Hamming como função do tempo para os sistemas $X3$, $X4$ e $SX3$. Cada cor representa um sistema diferente (ver legenda na figura).

Analisando a figura 3.4 é possível notar que a densidade da distância Hamming aumenta suavemente e converge para um dado valor. É assintoticamente estável e não preenche a rede completamente. Além disso, a convergência é mais rápida no sistema $SX3$, onde há um superpredador. Nós implementamos outras simulações, mudando os valores dos parâmetros e o tamanho da rede, e obtivemos o mesmo comportamento qualitativo, evidenciando o caráter universal deste resultado.

Também foi observado que, se mudarmos as regras que controlam a evolução temporal, Se os parâmetros são escolhidos de tal forma que preservam a biodiversidade, a densi-

dade da distância Hamming tem o comportamento universal mostrado na figura 3.4. No entanto, se modificarmos os parâmetros de forma a prejudicar a biodiversidade, Contudo, se as modificações realizadas prejudicarem a biodiversidade, o perfil da densidade da distância Hamming mostrado na figura 3.4 muda drasticamente. Por exemplo, se os dois estados iniciais evoluem para o mesmo estado final, a densidade da distância Hamming aumenta, oscila entre no intervalo entre zero e um, e, em seguida, vai a zero. A densidade da distância Hamming vai a unidade, se os dois estados finais são completamente diferentes. O resultado mostra que a estabilidade assintótica da densidade da distância Hamming é intrinsecamente ligado a biodiversidade.

Objetivando inferir a presença do caos, nós medimos a diferença entre os dos estados finais gerados com as mesmas regras estocásticas. Para tal, desenvolvemos um algoritmo que exibe em laranja os sítios da rede que diferem nas duas configurações, deixando em branco os outros sítios. Na figura 3.5 são exibidos seis instantâneos, três para o tempo inicial (um para cada sistema estudado), com um único sítio em laranja quase invisível, marcando a menor diferença entre os dois estados iniciais. Em baixo há os instantâneos indicando o estado final após 5000 gerações, mostrando em laranja os sítios marcando a diferença entre os estados finais.

Estes instantâneos mostram o impacto que uma modificação sutil introduzida no estado inicial causa na evolução do sistema. O resultado sugere que a evolução do tempo que aparece na simulação estocástica gera comportamento caótico.

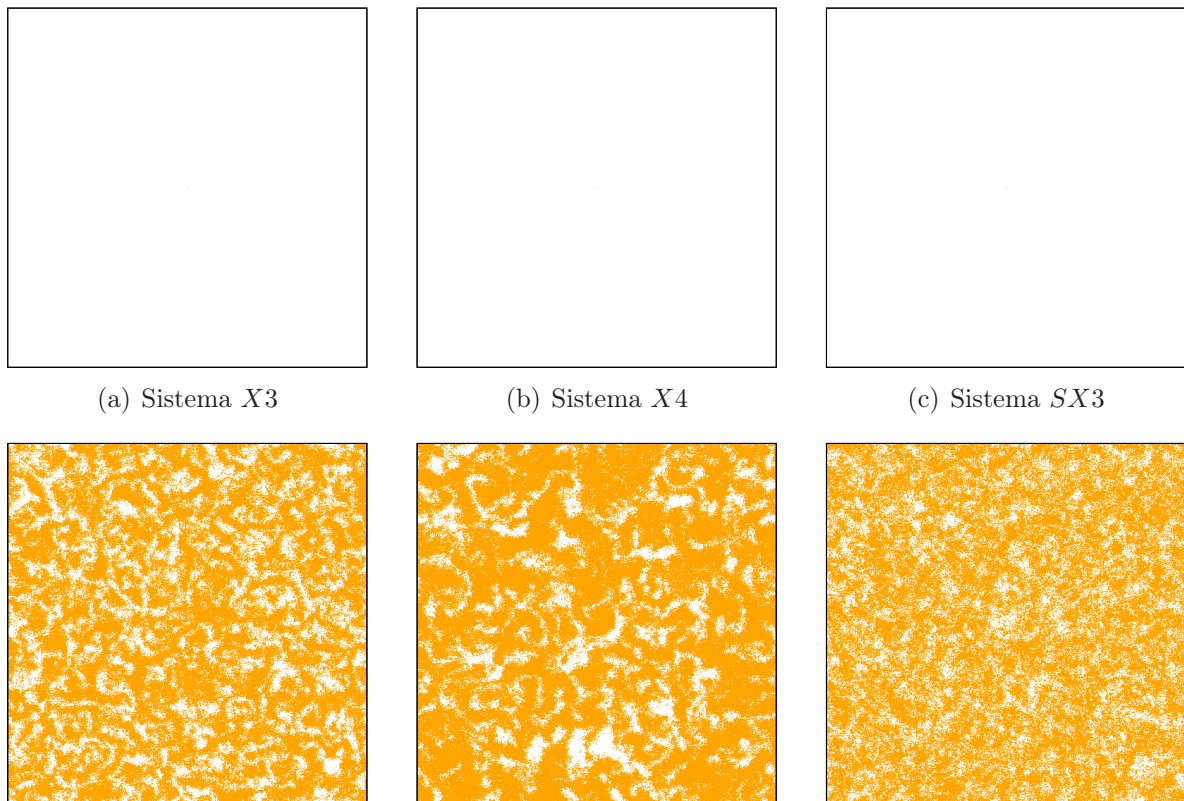


Figura 3.5 Ilustração da distância Hamming para o tempo inicial (em cima), mostrando o quase invisível ponto laranja no centro da rede, e após 5000 gerações (em baixo), indicando como os dois estados estão separados um do outro.

Resultados e discussões

Nos capítulos anteriores apresentamos conceitos básicos em ecologia e fizemos um breve resumo sobre os modelos matemáticos aplicados em ecologia, mais especificamente, em dinâmica populacional, o que se fez necessário para embasar as discussões que seguirão no presente capítulo.

Neste capítulo, apresentamos o nosso modelo de autômato celular para investigar o comportamento de um predador de topo, o qual nos referimos daqui em diante como **superpredador**. Analisamos seu comportamento num ambiente com outros três competidores inferiores, os quais competem entre si por espaço de forma cíclica, semelhante ao que ocorre no jogo *pedra-papel-tesoura*.

4.1 Modelo para o superpredador

Na figura 4.1 ilustramos algumas possíveis interações entre três e quatro espécies. As setas partem da espécie que possui habilidades competitivas superior em relação à outra. Em (a) temos três espécies competindo ciclicamente, como no jogo *pedra-papel-tesoura*. Este modelo foi discutido em mais detalhes na seção 2.4 desta tese. Várias características desse sistema já foram investigadas previamente por diversos autores [59, 86–89], sendo uma delas a formação de padrões espirais. Em (b) temos quatro espécies em competição cíclica. Neste caso, cada espécie interage com duas das três espécies restantes, formando um par neutro com a outra. Este modelo tem sido discutido por diversos autores [90–94] e, diferentemente do caso com três espécies, a coexistência entre as quatro espécies ocorre com a formação de dois grandes grupos de duas espécies não interagente, isto é, cada uma das espécies forma um par neutro com outra, sem a ocorrência dos padrões espirais. Em (c) e em (d) temos as quatro espécies amplamente conectadas, onde o modelo proposto para o superpredador é ilustrado na figura 4.1(d).

Para modelar o sistema com o superpredador nós utilizamos um autômato celular estocástico bidimensional, com condições de contorno periódicas. Para tal, consideramos

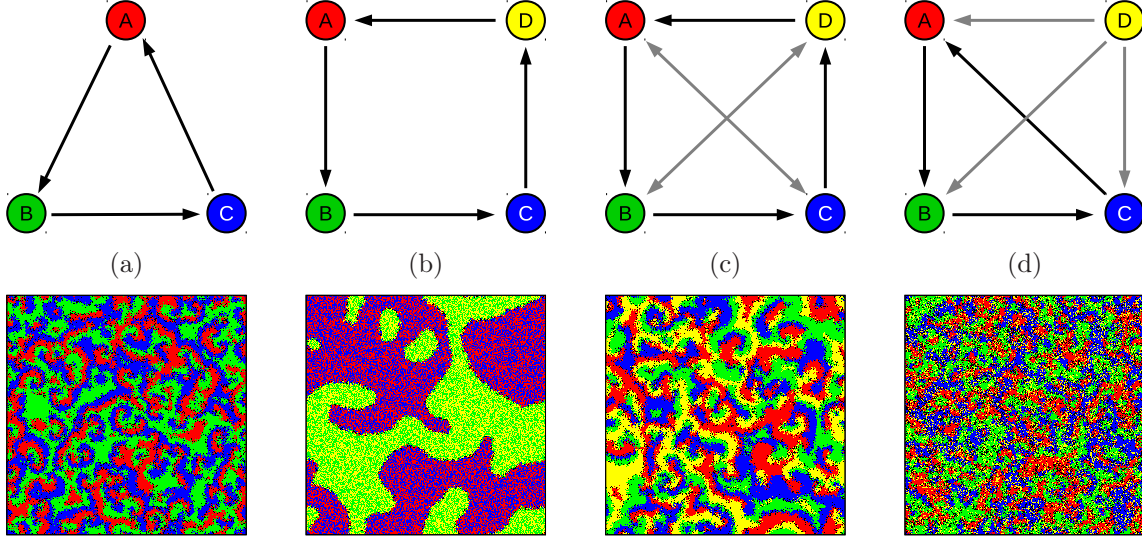


Figura 4.1 Em cima: Diagrama simbólico mostrando a ordem de predação para algumas das possíveis interações entre três e quatro espécies. Em baixo: os respectivos instantâneos de uma simulação após 10^4 gerações. As setas representam a agressão e predação. Setas em preto indicam competição cíclica. Em (a) e (b) temos uma presa para cada espécie e em (c) duas presas para cada espécie. (d) Mostra o esquema onde a quarta espécie é um superpredador.

uma rede quadrada contendo $N = L^2$ sítios. Cada sítio da rede pode estar ocupado por uma de quatro espécies, rotuladas por A, B, C e D , ou vazio, isto é, o autômato possui cinco estados. As interações ocorrem apenas entre dois vizinhos mais próximos, com a vizinhança definida pela vizinhança de von Neumann (Figura 4.2). Isto significa que uma espécie, em um dado sítio, pode apenas interagir com um de seus quatro primeiros vizinhos.

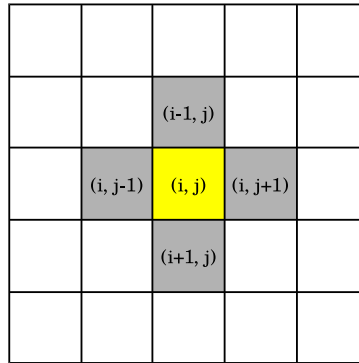


Figura 4.2 Vizinhança de von Neumann. Dado um sítio (i, j) , o mesmo possui quatro vizinhos mais próximos.

As espécies A , B e C competem por espaço de acordo com as seguintes regras [55, 56]:

$$AB \xrightarrow{\sigma} A\emptyset, \quad BC \xrightarrow{\sigma} B\emptyset, \quad CA \xrightarrow{\sigma} C\emptyset, \quad (4.1)$$

$$A\emptyset \xrightarrow{\mu} AA, \quad B\emptyset \xrightarrow{\mu} BB, \quad C\emptyset \xrightarrow{\mu} CC, \quad (4.2)$$

$$A\Box \xrightarrow{\varepsilon} \Box A, \quad B\Box \xrightarrow{\varepsilon} \Box B, \quad C\Box \xrightarrow{\varepsilon} \Box C. \quad (4.3)$$

onde $\emptyset$ representa um sítio vazio e $\Box$ representa um sítio geral que pode estar ocupado com uma espécie arbitrária ou vazio. A relação (4.1) descreve a interação de predação cíclica. As relações (4.2) e (4.3) caracterizam reprodução e migração que ocorrem a uma taxa μ e ε , respectivamente, com $\sigma + \mu + \varepsilon = 1$.

A espécie D interage com os outros sítios da rede obedecendo as seguintes regras:

$$DX \xrightarrow{\gamma} DD, \quad (4.4)$$

$$D\Box \xrightarrow{\beta} \emptyset\Box, \quad (4.5)$$

$$D\Box \xrightarrow{\epsilon} \Box D, \quad (4.6)$$

onde X representa uma das três espécies em competição cíclica (A , B ou C), $\emptyset$ representa um sítio vazio e $\Box$ representa um sítio geral que pode estar ocupado com uma espécie arbitrária ou vazio. De acordo com estas regras, a quarta espécie domina todas as outras sendo, assim, um predador de topo (superpredador). A relação (4.4) garante que o superpredador gere descendentes se, e somente se, consome outra. As relações (4.5) e (4.6) caracterizam morte e migração que ocorrem a uma taxa β e ϵ , respectivamente, com $\gamma + \beta + \epsilon = 1$.

Ao início de cada simulação as quatro espécies e sítios vazios são distribuídos uniformemente na rede com igual probabilidade. A atualização temporal é assíncrona e consiste em sortear um sítio e um de seus quatro vizinhos mais próximos aleatoriamente.

1. Se um dos sítios estiver ocupado pelo superpredador:
 - sorteia-se a ação a ser seguida (predação, morte ou migração), obedecendo os pesos probabilísticos das relações (4.4)– (4.6):
 - se a predação for selecionada, verifica-se se há no outro sítio uma das espécies A , B ou C . Em caso afirmativo, a ação ocorre.
 - se a morte for selecionada, o superpredador morre.
 - se a migração for sorteada, ocorre a troca de posição entre os dois sítios.
2. Se nenhum dos sítios estiver ocupado pelo superpredador, mas sim com uma das três espécies em competição cíclica A , B ou C :

- sorteia-se a ação a ser seguida (predação, reprodução ou migração), obedecendo os pesos probabilísticos das relações (4.1)– (4.3):
- se a migração for sorteada, ocorre a troca de posição entre os dois sítios.
- se a reprodução for selecionada, é verificado se o outro sítio está vazio. Em caso afirmativo, a ação ocorre.
- Se a predação for sorteada, é necessário verificar se a ação pode ocorrer. Caso seja possível, o sítio com a espécie inferior competitivamente torna-se vazio, caso contrário nada acontece.

Um passo de tempo (ou uma geração) é definido quando há N tentativas de interação. Neste caso, cada indivíduo da rede é sorteado, em média, ao menos uma vez a cada geração.

No tradicional jogo *pedra-papel-tesoura* verifica-se que, após de um tempo de espera $T = \mathcal{O}(N)$, a população é composta de todas as espécies ou apenas uma espécie [55], onde o primeiro caso é definido como biodiversidade. Aqui, na presença do superpredador, a situação é bem diferente. Na dinâmica evolucionária de quatro espécies onde há uma espécie superpredadora, dependendo dos parâmetros não-nulos escolhidos para as relações (4.1)–(4.6), a população pode estar em um dos cinco estados seguintes após T gerações:

- morte das quatro espécies;
- uma única espécie sobrevivente, sendo ela uma das três em competição cíclica (A , B ou C);
- duas espécies sobreviventes, sendo o superpredador e uma de suas presas;
- três espécies sobreviventes (A , B e C) em competição cíclica;
- Coexistência das quatro espécies.

Na figura 4.3 mostramos a densidade de espécies como uma função do tempo para cada um dos casos listados acima, assim como o padrão formado pra cada um dos casos após $T = 128^2$ gerações. As cores vermelho, verde, azul e amarelo representam as espécies A , B , C e D , respectivamente, enquanto o preto representa os sítios vazios. O eixo das abscissas (tempo) foi ajustado para uma melhor visualização da fenomenologia associada à simulação e não consiste no intervalo real simulado ($t_{\text{máx}} = T$). Contudo, a partir do valor máximo ilustrado no gráfico, a simulação apresentou um estado estacionário. O conjunto de parâmetros $\{\sigma, \mu, \varepsilon, \gamma, \beta, \epsilon\}$ utilizados nas simulações foram (a) $\{0.25, 0.25, 0.50, 0.83, 0.03, 0.14\}$; (b) $\{0.10, 0.03, 0.87, 0.50, 0.40, 0.10\}$; (c) $\{0.25, 0.25, 0.50, 0.50, 0.10, 0.40\}$; (d) $\{0.25, 0.25, 0.50, 0.30, 0.20, 0.50\}$; (e) $\{0.25, 0.25, 0.50, 0.25, 0.15, 0.60\}$. Focamos neste trabalho no caso (e) onde há coexistência entre as quatro espécies, o que definimos ser biodiversidade. Contudo, não é tema desta tese delimitar em quais regiões

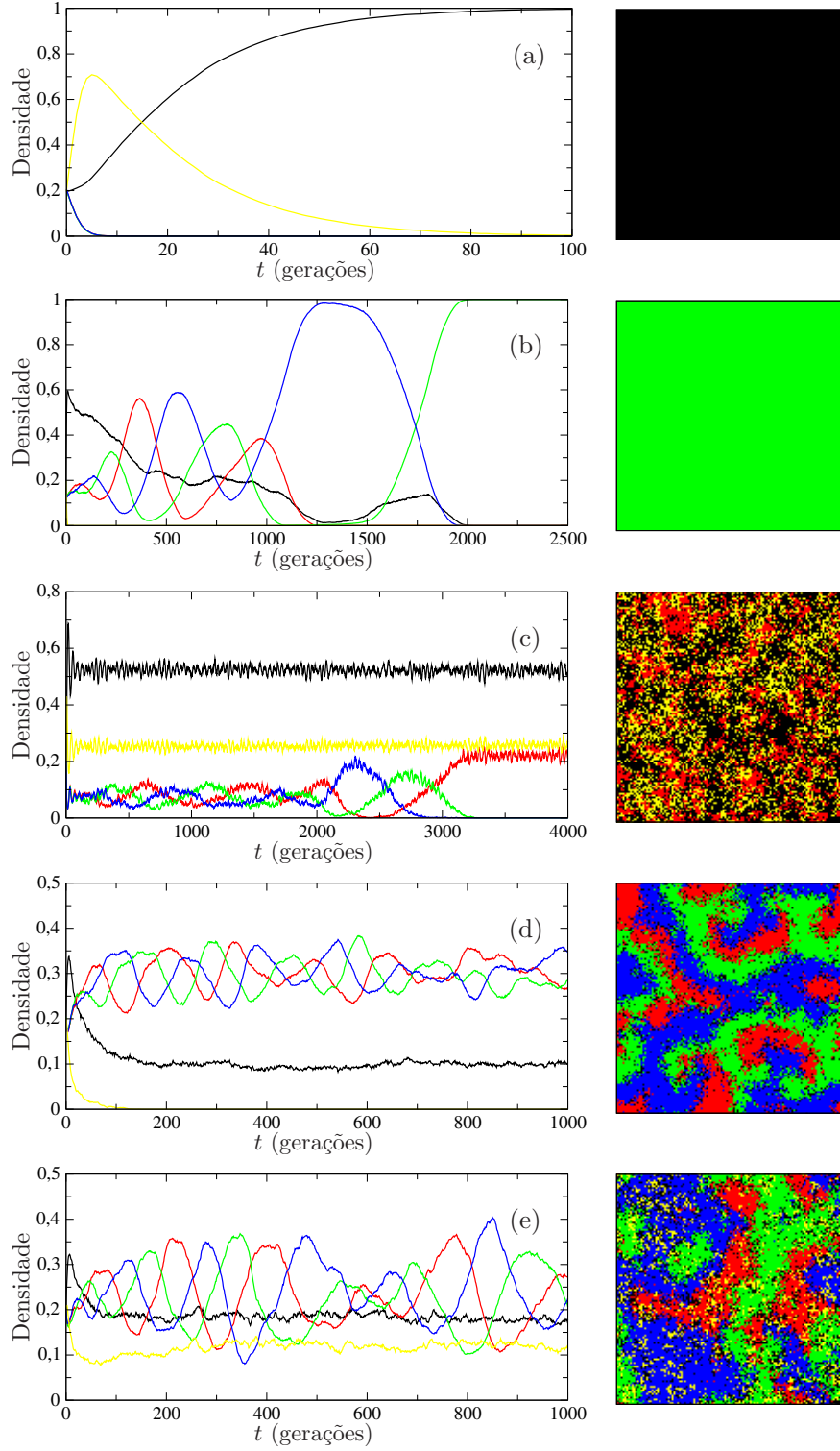


Figura 4.3 Esquerda: densidade populacional como função das gerações para uma realização típica do nosso modelo numa rede quadrada com $L = 128$. Direita: configuração final da rede após $T = 128 \times 128$ gerações.

do espectro de parâmetros esta situação acontece.

4.2 Densidade de espécies *versus* tempo

Nós implementamos as simulações estocásticas para gerar os instantâneos da figura 4.1 considerando uma rede com 512×512 sítios. As taxas de predação, reprodução e migração para os modelos representados nas figuras 4.1(a), 4.1(b) e 4.1(c) foram $\sigma = 0.25$, $\mu = 0.25$ e $\varepsilon = 0.50$, respectivamente. No modelo onde há o predador de topo, as taxas foram $\sigma = 0.30$, $\mu = 0.30$, $\varepsilon = 0.40$, $\gamma = 0.25$, $\beta = 0.15$ e $\epsilon = 0.60$. Nós verificamos que o comportamento qualitativo do sistema não difere com escolhas diferentes de parâmetros, desde que as taxas sejam escolhidas de modo a ter coexistência entre as quatro espécies. O nosso foco principal neste trabalho é comparar e discutir os resultados referentes aos modelos representados pelas figuras 4.1(a), 4.1(c) e 4.1(d) que, por simplicidade, nos referiremos daqui em diante por $X3$, $X4$ e $SX3$, respectivamente.

Na figura 4.4 mostramos a densidade de espécies ($\rho_x(t)$, com $x \in \{a, b, c, d\}$) como função do tempo para uma típica realização (no link <https://goo.gl/QexPxf> é possível visualizar vídeos que mostram a evolução temporal dessas simulações). As curvas em cores representam espécies distintas e a curva em preto representa a densidade de sítios vazios. As figuras 4.4(a), 4.4(b) e 4.4(c) referem-se aos modelos $X3$, $X4$ e $SX3$ respectivamente. Note que depois de algum tempo transiente o sistema atinge um estado estacionário.

Quando nenhum superpredador está presente, a densidade de sítios vazios rapidamente diminui, pois a distribuição inicial uniforme das espécies e de sítios vazios favorece a reprodução, uma vez que há um frequente encontro entre um indivíduo de alguma espécie com um sítio vazio. Este mesmo fato faz com que, na presença do superpredador, a densidade de sítios vazios atinja um pico com uma rápida diminuição de superpredadores, pois o frequente encontro dos predadores de topo com sítios vazios favorece sua morte. Atingido o estado estacionário, as densidades oscilam em torno de um valor médio.

Em todos os casos simulados, a densidade de espécies oscila em torno de um valor médio, o qual depende dos parâmetros iniciais adotados. Por exemplo, os valores obtidos para a figura 4.4(a) foram $\bar{\rho}_x = 0.301$ com $\sigma_x = 0.012$ e para figura 4.4(b), $\bar{\rho}_x = 0.225$ com $\sigma_x = 0.018$, onde σ_x é o desvio padrão. Para a figura 4.4(c) foram obtidos os valores $\bar{\rho}_x = 0.226$ com $\sigma_x = 0.006$ para as espécies em competição cíclica ($x \in \{a, b, c\}$) e $\bar{\rho}_d = 0.142$ com $\sigma_d = 0.001$.

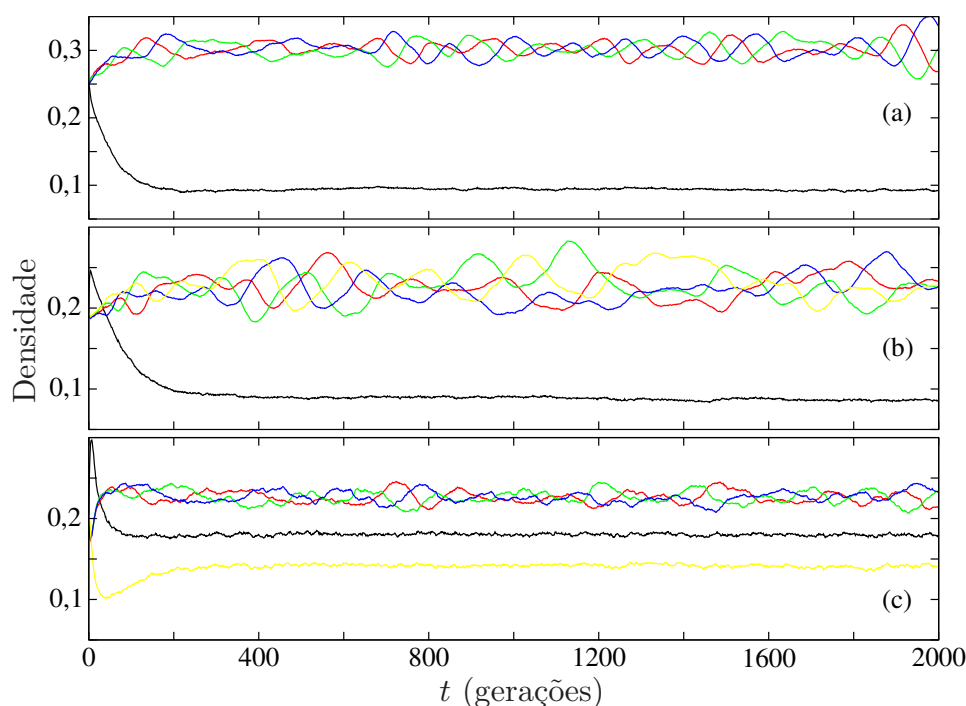


Figura 4.4 Densidade de espécies como função do tempo para uma típica realização. A curva em preto representa a densidade de sítios vazios; curvas em cores representam as espécies distintas. Em (a) e (b) temos três e quatro espécies, respectivamente, competindo ciclicamente segundo os modelos $X3$ e $X4$. Em (c) temos três espécies competindo ciclicamente na presença de um superpredador (representado pela curva em amarelo). Note que em todos os casos o sistema atinge um estado estacionário após algum tempo transiente.

4.3 Densidade de máximos

Como visto na figura 4.4, a densidade de espécies evolui com o tempo oscilando em torno de um valor médio, mostrando um aparentemente imprevisível número de máximos. Nós implementamos curvas de Bézier [95] para suavizar a curva da densidade de espécies e computar no número de máximos.

Curvas de Bézier são curvas paramétricas polinomiais, no plano ou no espaço, que aproxima uma curva polinomial dada, que chamamos de *polígono de controle*, isto é, a curva de Bézier segue a forma do polígono de controle. As curvas de Bézier foram desenvolvidas independentemente pelos engenheiros Paul de Casteljaou da Citroën e Pierre Bézier da Renault, na década de 1960, para auxiliar no design e fabricação dos carros assistida por computador. Atualmente, as curvas de Bézier são extensivamente usadas em computação gráfica, na modelagem de curvas suaves, em animação, no design de interfaces e na produção de fontes.

Matematicamente, dado um polígono de controle com $n + 1$ vértices $\{p_0, p_1, \dots, p_n\}$, a curva de Bézier é uma curva paramétrica polinomial de grau n definida por

$$B(t) = \sum_{i=0}^n b_i^n(t) p_i, \quad 0 \leq t \leq 1, \quad (4.7)$$

onde os polinômios

$$b_i^n(t) = \binom{n}{i} t^i (1-t)^{n-i}, \quad i = 0, \dots, n \quad (4.8)$$

são conhecidos como *polinômios de Bernstein*.

Para formas mais complexas, como no nosso caso, muitas vezes são usadas curvas de Bézier por partes, isto é, curvas compostas de segmentos polinomiais de Bézier de grau baixo. Assim, para suavizar as curvas da densidade das espécies, nós dividimos o intervalo de tempo $T_{\max}$ em curvas menores com intervalos Δt e obtivemos as curvas de Bézier para $n = 3$, ou seja, num intervalo Δt , tomamos quatro pontos de controle. A curva de Bézier para $n = 3$ tem a forma

$$B(t) = (1-t)^3 p_0 + 3t(1-t)^2 p_1 + 3t^2(1-t) p_2 + t^3 p_3. \quad (4.9)$$

Na figura 4.5 mostramos as curvas em vermelho e amarelo da figura 4.4(c), representando as espécies A e D do modelo $SX3$, respectivamente, e a curva de Bézier em azul.

Embora em um curto intervalo de tempo uma das três espécies em competição cíclica possa suprimir outra, a dominância de uma sobre a outra muda com o tempo, invertendo o comportamento, apresentando o mesmo valor médio após uma longa evolução temporal.

Nós obtivemos 3×10^3 realizações para os modelos $X3$ e $X4$, 3×10^4 realizações para o modelo $SX3$ e computamos a densidade média de máximos $\langle \rho_t \rangle$ em um intervalo de 10^3 gerações. A figura 4.6 mostra o histograma normalizado do número de máximos em um intervalo de 10^3 gerações e a tabela 4.1 mostra os valores obtidos para a densidade média de máximos e o desvio padrão. Nós utilizamos os valores médios e do desvio padrão contido na tabela 4.1 para plotar uma curva gaussiana, como pode ser visto na linha vermelha tracejada da figura 4.6. Note que a distribuição de máximos tem um comportamento gaussiano.

Para adquirir mais informações acerca da evolução dinâmica do sistema, computamos

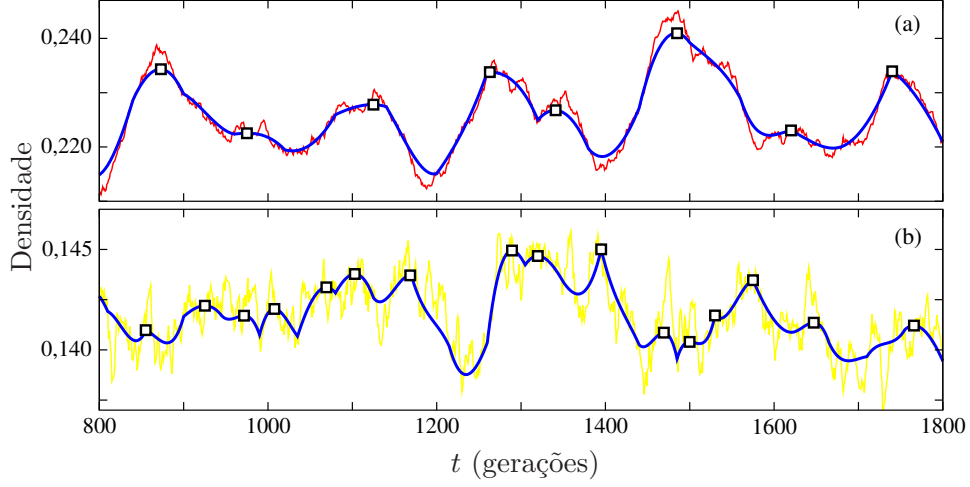


Figura 4.5 Curva de Bézier, mostrada em azul, da evolução temporal das espécies (a) A e (b) D do modelo $SX3$, no intervalo entre 800 e 1800 gerações. Os quadrados mostrados na figura representam pontos de máximo. A curva é construída a partir dos dados correspondentes às espécies vermelha e amarela que aparecem na figura 4.4(c).

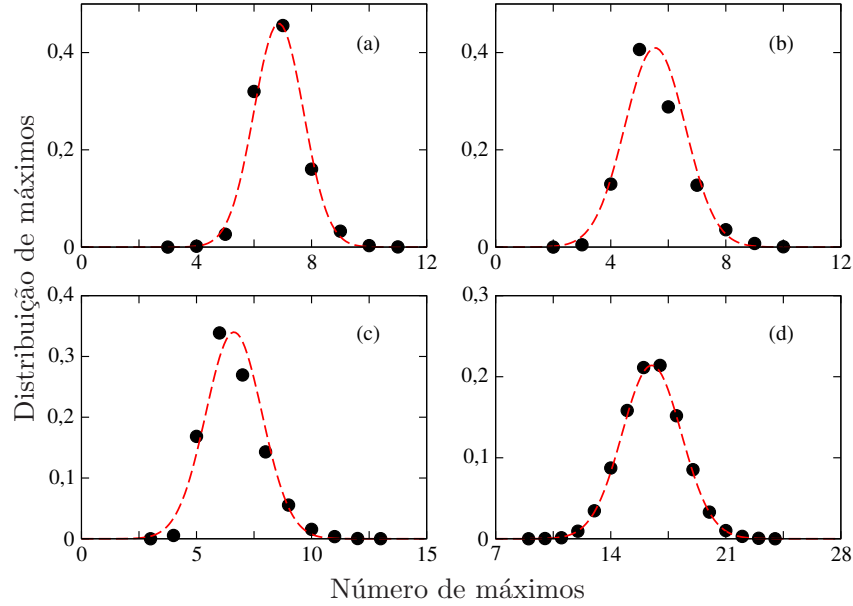


Figura 4.6 Os pontos pretos representam o histograma do número de máximos em um intervalo de 10^3 gerações. Os casos (a) e (b) representam os modelos $X3$ e $X4$ nos quais todas as espécies competem ciclicamente. A figura (c) representa as espécies A , B e C do modelo $SX3$ enquanto (d) representa a espécie D (superpredador). Na tabela 4.1 mostramos os valores obtidos para as densidades médias de máximos em cada modelo e o respectivo desvio padrão.

a função de autocorrelação temporal

$$C_{xx}(t, t') \equiv \frac{1}{\sigma^2} \langle x(t)x(t') \rangle - \frac{1}{\sigma^2} \langle x(t) \rangle \langle x(t') \rangle \quad (4.10)$$

Tabela 4.1 Número médio de máximos em um intervalo de 10^3 gerações e o desvio padrão. Nos modelos $X3$ e $X4$ todas as espécies competem ciclicamente, enquanto no modelo $SX3$ a espécie D é um predador de topo.

Modelo	$X3$	$X4$	$SX3$	$SX3$
Espécies	$\{A, B, C\}$	$\{A, B, C, D\}$	$\{A, B, C\}$	$\{D\}$
$\langle \rho_t \rangle$	6.858	5.544	6.625	16.496
σ_t	0.862	1.052	1.222	1.807

onde $x \in a, b, c, d$, $\sigma^2 = \langle x(t)^2 \rangle - \langle x(t) \rangle^2$, e $\langle \dots \rangle$ deve ser entendido como uma média do ensemble. Em [63], os autores mostraram (em outro contexto) que a densidade média de máximos de um observável que flutua pode ser obtido a partir da função de correlação $C(\delta t)$. Este resultado foi recentemente utilizado [64] para fornecer uma maneira de conectar a densidade de máximos com o comprimento de correlação da densidade de espécies. O resultado é obtido com o uso do princípio de máxima entropia e pode ser escrito na forma [63, 64]

$$\langle \rho_t \rangle = \frac{1}{2\pi} \sqrt{-\frac{T_4}{T_2}}; \quad T_j \equiv \frac{d^j}{d(\delta t)^j} C(\delta t) \Big|_{\delta t=0}. \quad (4.11)$$

Na figura 4.7 mostramos a função de autocorrelação temporal para os modelos $X3$, $X4$ e $SX3$, representados pelos gráficos (a), (b) e (c) respectivamente. A curva em pontos pretos está relacionada com os sítios vazios enquanto as curvas em cores (vermelho, verde, azul e amarelo) representam as espécies distintas (A , B , C e D , respectivamente). Note que há uma forte concordância, para um dado modelo, entre as funções de autocorrelação para espécies distintas em competição cíclica.

Focando nas espécies em competição cíclica, podemos notar a partir da figura 4.7 que, para t próximo à origem, é possível traçar os dados da autocorrelação com

$$C(t) = \cos(\omega t + \phi); \quad (4.12)$$

onde ω e ϕ são parâmetros reais. Substituindo esta aproximação na eq. (4.11), temos que a densidade média de máximos para espécies em competição cíclica é dada por

$$\langle \rho_t \rangle = \frac{\omega}{2\pi}. \quad (4.13)$$

No entanto, para o superpredador, a porção inicial da função de autocorrelação pode ser

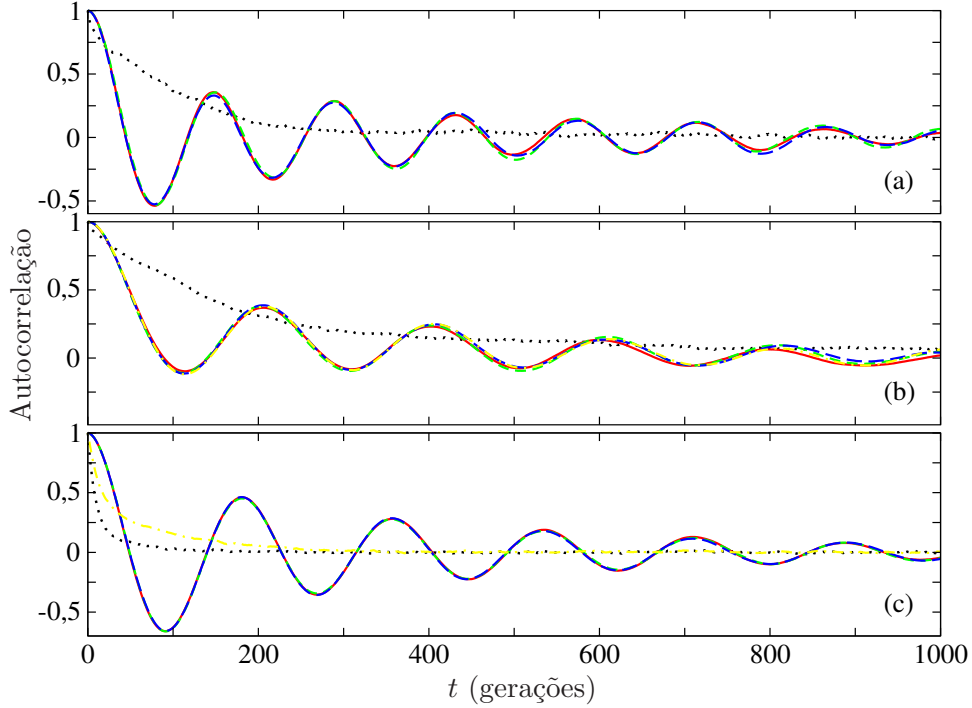


Figura 4.7 Função de autocorrelação para três (a) e quatro (b) competindo ciclicamente. A curva em pontos pretos representam a autocorrelação de sítios vazios; curvas em cores representam as espécies distintas. Em (c) temos três espécies competindo ciclicamente na presença de um superpredador (curva em amarelo). As curvas foram obtidas após o sistema atingir o estado estacionário.

descrita por

$$C(t) = \exp(a_0 t) \sum_{n=1}^n a_n t^n. \quad (4.14)$$

onde $a_0, a_1, a_2, \dots$ são parâmetros reais. Como para $n \geq 3$ os dados estão fortemente correlacionados, nós utilizamos $n = 4$ para obter a densidade média de máximos para o superpredador:

$$\langle \rho_t \rangle = \frac{1}{2\pi} \sqrt{-\frac{a_0^4 + 4a_0^3 a_1 + 12a_0^2 a_2 + 24a_0 a_3 + 24a_4}{a_0^2 + 2a_0 a_1 + 2a_2}} \quad (4.15)$$

A figura 4.8 representa as funções de autocorrelação para os três sistemas distintos, $X3$, $X4$ e $SX3$, com a curva em vermelho representando o sistema $X3$, a curva verde representa o sistema $X4$ e as curvas azul e amarelo para uma das três espécies em competição cíclica e para o superpredador do sistema $SX3$, respectivamente. Além disso, a inserção exibe as mesmas curvas juntamente com suas aproximações, representadas na figura pelos círculos vazios, e mostram excelente concordância com as curvas em cores.

Lembramos que as curvas em cores resultam das simulações estocásticas, e os círculos vazios vêm das aproximações (4.12) e (4.14) usadas acima para ajustar as curvas coloridas. Os valores numéricos são apresentados na tabela 4.2.

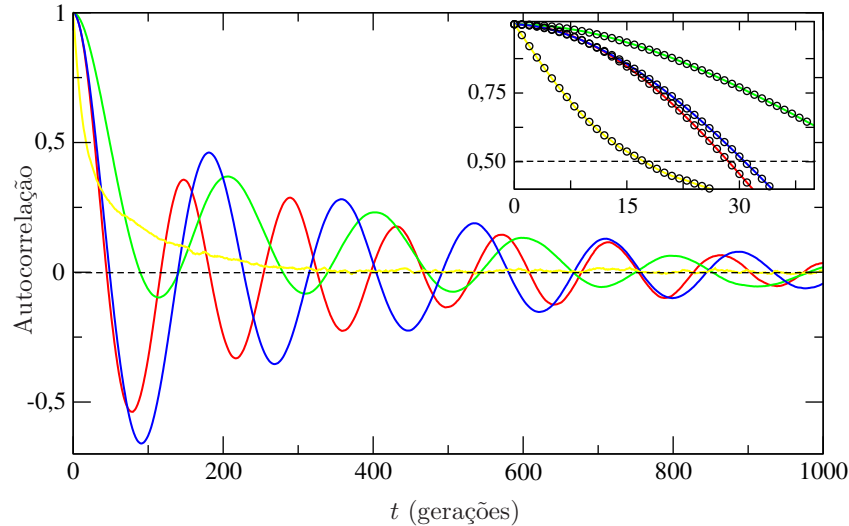


Figura 4.8 Função de autocorrelação para os modelos $X3$ (vermelho), $X4$ (verde) e $SX3$ (azul e amarelo). A curva em amarelo representa a função de autocorrelação do superpredador. A inserção realizada na figura mostra a perfeita concordância entre função obtida via simulação numérica e a aproximação realizada (ver o texto).

Tabela 4.2 Número médio de máximos em um intervalo de 10^3 gerações, obtidos através da relação (4.11).

Modelo	$X3$	$X4$	$SX3$	$SX3$
Espécies	A, B e C	A, B, C e D	A, B e C	D
$\langle \rho_t \rangle$	6.081	4.402	5.802	16.537

4.4 Estatística de *clusters*

O comportamento dinâmico de diversas espécies na natureza origina padrões e agrupamento de espécies. Nestes casos, o sistema transita de um estado para outro formando aglomerados de tamanhos diversos. Nos sistemas $X3$, $X4$ e $SX3$ aqui estudados, é possível perceber a formação desses padrões. Nota-se que as espécies em competição cíclica tendem a se agrupar (aglomerar) como um mecanismo de defesa/ataque. Contudo, o

mesmo não ocorre com o superpredador: observa-se uma tendência de distribuir-se uniformemente ao longo da rede, como mostrado na figura 4.1(d).

A fim de quantificar esta observação, nós investigamos a função $n_s(t)$, que dá o número de aglomerados (*clusters*) de tamanho s em um dado instante de tempo t . Isto nos permite investigar as quantidades

$$N(t) = \sum_s n_s(t) \quad (4.16)$$

$$S(t) = \frac{\sum_s s^2 n_s(t)}{\sum_s s n_s(t)} \quad (4.17)$$

que são o número de *clusters* e o tamanho médio dos *clusters*, respectivamente.

Um *cluster* é definido como um aglomerado de estruturas semelhantes, um grupo de ligações ou sítios da rede conectados. Assim, a definição de *cluster* depende da definição de conexão. No nosso caso, dois indivíduos da mesma espécie pertencerão ao mesmo *cluster* se são vizinhos mais próximos, com a vizinhança definida como a vizinhança de von Neumann (ver figura 4.2).

Para identificar os *clusters* em uma rede, nós implementamos o algoritmo de Hoshen-Kopelman [96], baseado na aplicação de rótulos alternativos aos sítios pertencentes ao mesmo *cluster*. Este algoritmo é discutido em detalhes no Apêndice A.

Uma outra característica importante, oriunda do agrupamento de espécies, que pode ser observada na natureza é a diversidade dos grupos. Ela tem sido usada para descrever a complexidade de diferentes sistemas [97–101]. A diversidade pode estar relacionada a diferentes propriedades do sistema, como o tamanho ou a configuração assumida pelos aglomerados. Aqui, nos referimos a diversidade com relação ao tamanho dos aglomerados. Ou seja, a diversidade é o número de grupos de tamanhos diferentes, independente da forma, em um dado instante de tempo t . Matematicamente, pode-se definir a diversidade por [99]

$$D(t) = \sum_s \Theta[n_s(t)], \quad (4.18)$$

onde $\Theta(x)$ é a função de Heaviside, definida como $\Theta(x) = 1$ se $x > 0$ e $\Theta(x) = 0$ caso contrário.

Como o padrão formado ao final de cada simulação estocástica depende dos parâmetros considerados, nós mantivemos fixas as taxas das espécies em competição cíclica $\{\sigma = \mu = 0.25$ e $\varepsilon = 0.50\}$ e simulamos o modelo *SX3* em três situações distintas: (a) com os parâmetros $\{\gamma = 0.25, \beta = 0.15, \epsilon = 0.60\}$, o que nos dá uma densidade de

superpredadores menor (em média) que a densidade de cada uma das três espécies em competição cíclica (presas); (b) com os parâmetros $\{\gamma = 0.19, \beta = 0.11, \epsilon = 0.70\}$, o que nos dá uma densidade de superpredadores (em média) igual a densidade de cada uma das presas; e (c) com os parâmetros $\{\gamma = 0.28, \beta = 0.12, \epsilon = 0.60\}$, o que nos dá uma densidade de superpredadores maior (em média) que a densidade de cada uma das presas individualmente. A figura 4.9 ilustra estas situações para $L = 128$.

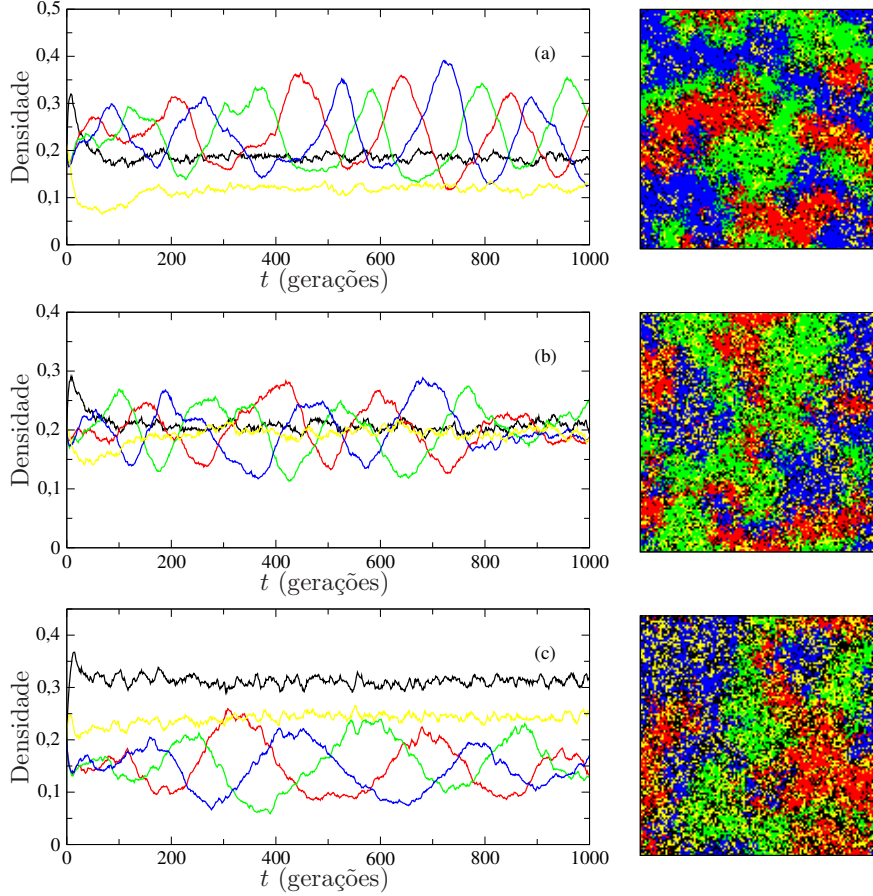


Figura 4.9 Esquerda: densidade populacional como função das gerações para uma realização típica do modelo *SX3* numa rede quadrada com $L = 128$. Direita: configuração final da rede após $T = 128 \times 128$ gerações.

Nós elaboramos 128 realizações para o modelo *SX3*, com os parâmetros da figura 4.9(a), (b) e (c), e obtivemos a evolução temporal do número médio de *clusters* $\langle N(t) \rangle$, do tamanho médio dos *clusters* $\langle S(t) \rangle$ e da diversidade de *clusters*. A figura 4.10 mostra esses resultados. Note que, para as espécies *A*, *B* e *C* em competição cíclica, o valor médio das três grandezas descritas é praticamente o mesmo, o que é esperado pela simetria do problema.

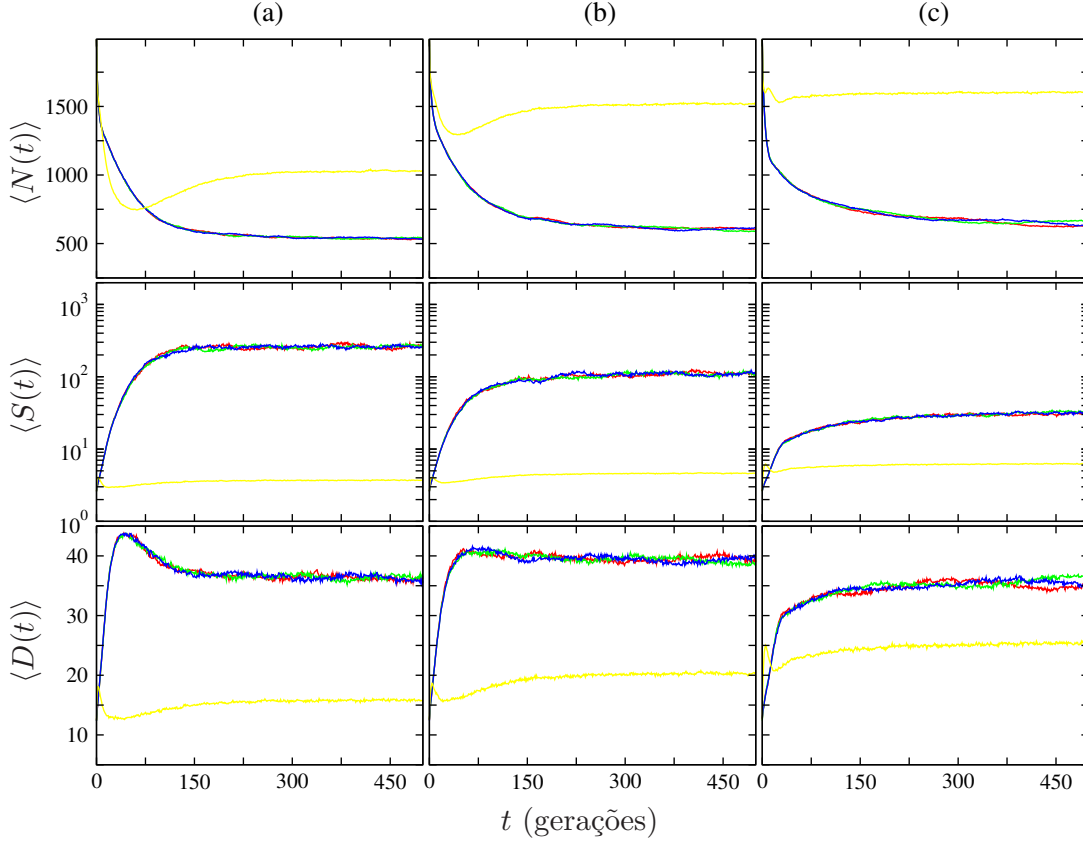


Figura 4.10 Número médio de *clusters* $\langle N(t) \rangle$, tamanho médio dos *clusters* $\langle S(t) \rangle$ e diversidade de *clusters* como função do tempo para o modelo *SX3* numa rede com 128×128 sítios. As curvas em vermelho, verde e azul representam as espécies *A*, *B* e *C* respectivamente, enquanto que a curva em amarelo representa o superpredador (*D*). Nas colunas (a), (b) e (c) foram utilizados os mesmos parâmetros das figuras 4.9(a), 4.9(b) e 4.9(c), respectivamente (ver o texto).

Embora quantitativamente os gráficos fornecidos na figura 4.10 sejam diferentes, alguns aspectos qualitativos são os mesmos: a espécie superpredadora não forma grandes grupos, mesmo em alta densidades, o que pode ser visto na curva do tamanho médio dos *clusters*. Além disso, em relação às espécies *A*, *B* e *C*, o número de grupos formados pelo superpredador é maior e menos diverso, isto é, embora possua um número maior de grupos, o tamanho dos grupos é mais próximo ao tamanho médio dos grupos.

A fim de comparar os resultados obtidos para o modelo *SX3* com os modelos *X3* e *X4*, nós obtivemos a média do número médio, tamanho médio e diversidade dos *clusters*, sobre 128 realizações destes modelos, e plotamos os resultados na figura 4.11.

Analisando as figuras, notamos que a inserção do superpredador faz com que o sistema fique mais fragmentado, dificultando o agrupamento das espécies. Note que, para o modelo sem o superpredador, o tamanho médio dos aglomerados é cerca de uma ordem

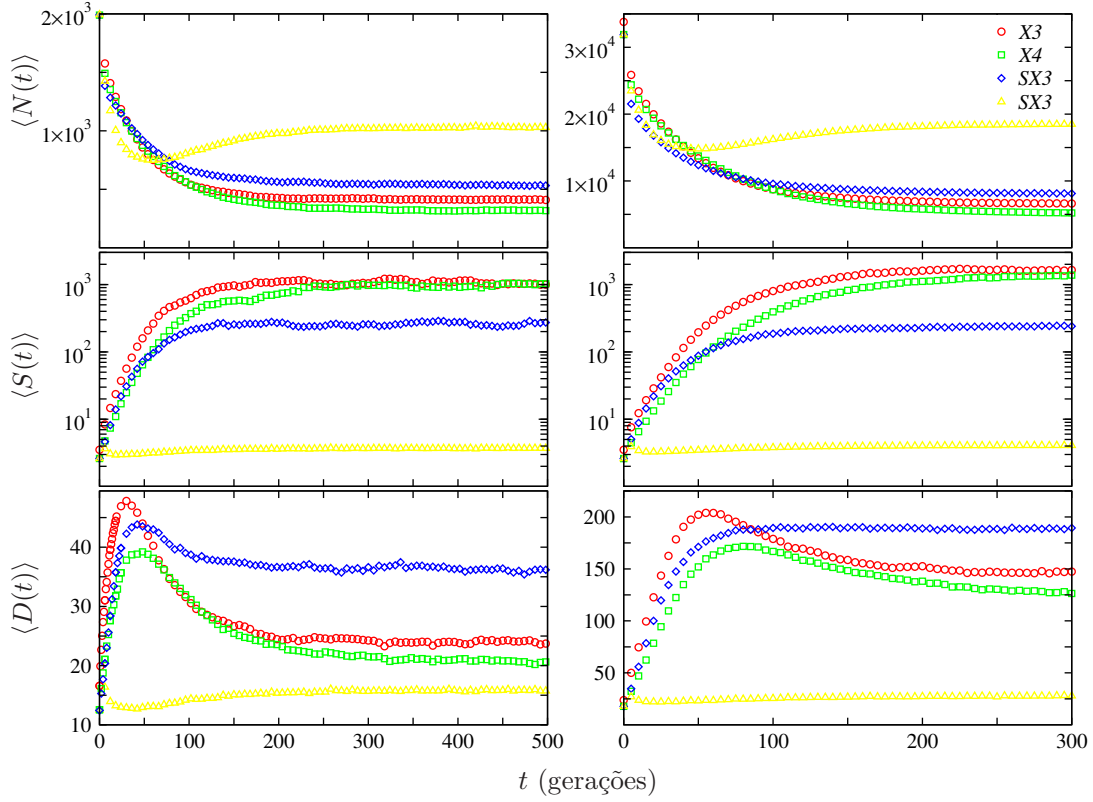


Figura 4.11 Número médio de *clusters* $\langle N(t) \rangle$, tamanho médio dos *clusters* $\langle S(t) \rangle$ e diversidade de *clusters* como função do tempo. As curvas em vermelho e verde representam a evolução temporal de uma das espécies dos modelos X3 e X4, respectivamente. Azul representa uma das espécies em competição cíclica do modelo SX3 e amarelo representa o superpredador. Os gráficos da esquerda foram obtidos com $L = 128$ e $\{\sigma, \mu, \varepsilon, \gamma, \beta, \epsilon\} = \{0.25, 0.25, 0.50, 0.25, 0.15, 0.60\}$. Os gráficos da direita foram obtidos com $L = 512$, $\{\sigma = 0.25, \mu = 0.25, \varepsilon = 0.50\}$ para os modelos X3 e X4, e $\{\sigma, \mu, \varepsilon, \gamma, \beta, \epsilon\} = \{0.30, 0.30, 0.40, 0.25, 0.15, 0.60\}$ para o modelo SX3.

de grandeza maior, com um número médio de aglomerados sendo a metade. Já o superpredador não forma grupos grandes: o tamanho médio de aglomerados fica em torno de 3.

Os resultados mostram que a presença do superpredador contribui para diminuir o tamanho dos aglomerados das espécies que competem de forma cíclica, aumentando o número médio dos *clusters*. Além disso, a tendência do predador de topo em espalhar-se uniformemente por toda a rede é mantida; Como vemos na figura 4.11, o tamanho médio do grupo de superpredadores é muito pequeno, sendo de apenas 3 indivíduos nas simulações mostradas na figura. Note também que a diversidade de *clusters* aumenta na presença do superpredador.

Embora haja um aumento significativo no número e na diversidade de *clusters* quando

se aumenta o tamanho da rede, o mesmo não é observado para o tamanho médio dos *clusters*, o que sugere que esta grandeza não depende do tamanho da rede, há uma dependência apenas com as taxas das relações (4.1)–(4.6) escolhidas para a simulação.

Considerações Finais

Neste trabalho, nós propomos um modelo de automato celular para investigar o comportamento de um predador de topo. Estudamos o sistema $X3$, composto por três espécies distintas cuja dinâmica evolui em competição cíclica, e então dois sistemas de quatro espécies, o sistema $X4$, onde todas as espécies competem entre si e têm um comportamento semelhante, e o sistema $SX3$, onde três espécies competem de forma cíclica e a outra representa o superpredador, que é superior competitivamente com relação às outras três espécies e não pode ser predado por elas. Embora seja um predador de topo, a população de superpredadores não cresce indefinidamente pois é controlada pela taxa de mortalidade β , como sugerido pela regra (4.5).

Mostramos que, quando há coexistência entre as espécies, a densidade de espécies oscilam em torno de um valor médio, produzindo máximos e mínimos. Computamos o número de máximos para os três sistemas estudados e notamos que a presença do superpredador diminui a amplitude de oscilação da abundância das três espécies. Observou-se também que, enquanto espécies em competição cíclica tendem a se agrupar para sobreviver, a presença do predador de topo diminui o tamanho médio dos *clusters*, aumentando seu número e diversidade. Notamos, ainda, que há uma relação de proporcionalidade entre o número e a diversidade de *clusters* com o tamanho da rede. O mesmo não é observado para o tamanho médio dos *clusters*, isto é, o tamanho médio dos *clusters* está relacionado apenas com a escolha das taxas que governam a evolução temporal, não dependendo do tamanho do sistema. Além disso, o superpredador prefere espalhar-se uniformemente ao longo de todo espaço.

Mostramos também como relacionar a função de autocorrelação com a densidade média de máximos da abundância de espécies. Em particular, a função de autocorrelação para a abundância de espécies que evoluem sob competição cíclica apresenta um comportamento senoidal, enquanto que, para o superpredador, o comportamento é exponencial.

Afim de diferenciar aleatoriedade e comportamento caótico, nós evoluímos dois sistemas com configurações iniciais quase idênticas, diferenciadas apenas por um único sítio, utilizando as mesmas regras estocásticas. Computamos a distância Hamming entre estes

dois sistemas e observamos que a densidade da distância Hamming aumenta suavemente e converge para um valor fixo, sendo que, para o sistema *SX3*, a convergência se dá mais rapidamente.

O modelo proposto para um predador de topo neste trabalho é simplista, pois não leva em consideração vários aspectos realísticos tais como a interferência explícita entre indivíduos de mesma espécie pela busca por alimento ou como ele converte o consumo de presas em novos predadores. No entanto, mesmo sem uma interferência explícita entre os predadores, em densidades suficientemente altas é inevitável que haja interferência de uns com os outros pela procura de alimentos e, em densidades suficientemente baixas não deve ocorrer interferência, levando os indivíduos a ficarem suficientemente separados. O modelo também não leva em consideração a idade do superpredador que pode possuir hábitos alimentares diferentes quando jovem e quando adulto. A adição de novas regras com foco em cenários específicos é uma tarefa desafiadora, que pode aparecer como extensões naturais do trabalho atual. Apesar da simplicidade do modelo para um predador de topo estudado, os resultados deste trabalho são de interesse atual e sugerem a necessidade de novas investigações mais detalhadas sobre o comportamento desse predador e como ele pode alterar os aspectos básicos do ambiente que favorecem a biodiversidade. Delimitar cenários de coexistência é um problema em aberto e, certamente, será tema de várias investigações até que o papel do superpredador seja totalmente compreendido.

Algoritmo de Hoshen-Kopelman

Em 1976, Joseph Hoshen e Raoul Kopelman [96] propuseram um método para uma determinação rápida e precisa da distribuição de *clusters*, baseado na aplicação de rótulos alternativos aos sítios pertencentes ao mesmo *cluster*. A técnica originalmente intitulada “*cluster multiple labeling technique* (técnica de rotulagem de aglomerados múltiplos)” logo ficou conhecida como “algoritmo de Hoshen-Kopelman”.

Um *cluster* é definido como um aglomerado de estruturas semelhantes, um grupo de ligações ou sítios da rede conectados. Assim, a definição de *cluster* depende da definição de conexão. No nosso caso, dois indivíduos da mesma espécie pertencerão ao mesmo *cluster* se são vizinhos mais próximos, com a vizinhança definida como a vizinhança de von Neumann (Figura A.1).

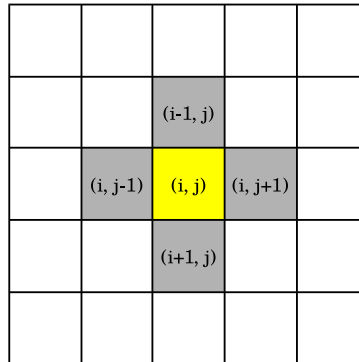


Figura A.1 Vizinhança de von Neumann. Dado um sítio (i, j) , o mesmo possui quatro vizinhos mais próximos.

Consideremos então uma rede quadrada com condições periódicas de contorno. Por simplicidade, exemplificaremos o algoritmo aplicando-o a uma matriz 8×8 , representada pela Figura A.2, onde sítios cinza representam sítios ocupados por indivíduos de uma mesma espécie e sítios em branco representam sítios vazios. O algoritmo de Hoshen-Kopelman consiste em atribuir rótulos (no nosso caso, atribuímos números naturais $m > 0$) aos sítios ocupados que correspondem ao *cluster* ao qual ela pertence. O procedimento é o que segue:

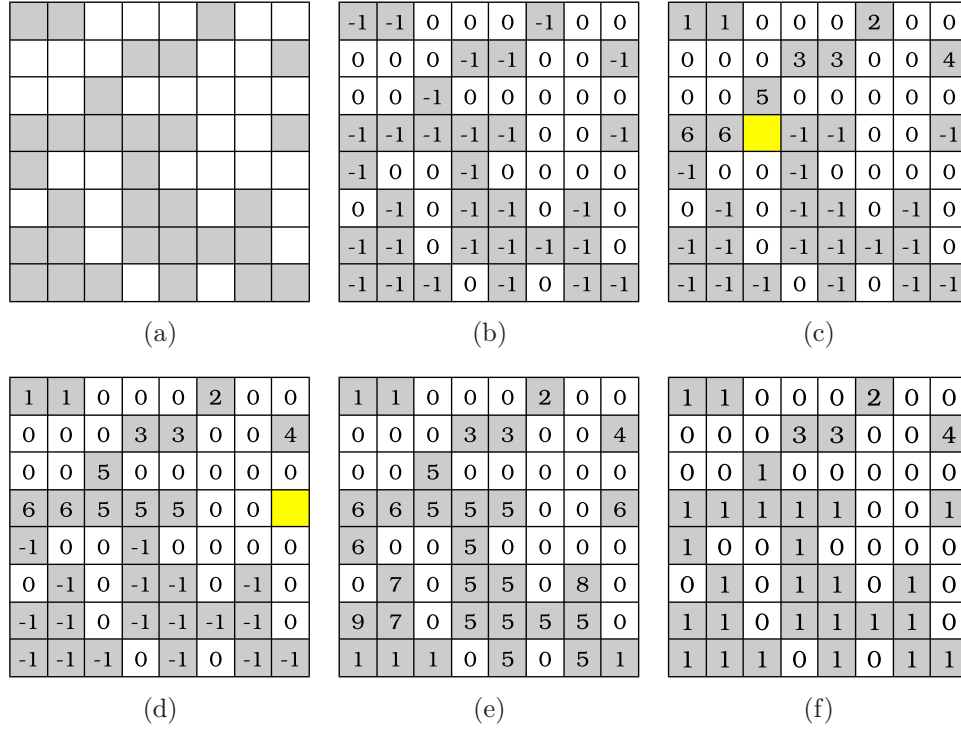


Figura A.2 Ilustração do algoritmo de Hoshen-Kopelman para uma matriz 8×8 .

- Inicialmente rotulamos com -1 todos os sítios $r(i, j)$ da rede ocupados por indivíduos de uma mesma e com 0 todos os outros (Figura A.2(b))¹;
- Varremos a rede de uma maneira datilográfica, isto é, da esquerda para direita e de cima para baixo, e atribuímos rótulos diferentes aos sítios ocupados. Por exemplo, atribuímos $m = 1$ ao primeiro sítio ocupado (no nosso exemplo, $r(1, 1) = 1$); Inicializamos um vetor auxiliar v que armazena o número do *cluster* em sua própria posição. Isto é, para um rótulo m , atribuímos $v(m) = m$;
- Se o próximo sítio ocupado está conectado a um sítio previamente rotulado, colocamos o mesmo rótulo nele $r(i, j) = m$.
No exemplo da Figura A.2(c), $r(1, 2) = 1$;
- Se o próximo sítio ocupado não está conectado a nenhum sítio previamente rotulado, incrementamos m , fazemos $r(i, j) = m$ e $v(m) = m$.
No exemplo da Figura A.2(c), $m = 2$, $r(1, 6) = 2$, $v(2) = 2$; $m = 3$, $r(2, 4) = 3$, $v(3) = 3$; $r(2, 5) = 3$; $m = 4$, $r(2, 8) = 4$, $v(4) = 4$; $m = 5$, $r(3, 3) = 5$, $v(5) = 5$; $m = 6$, $r(4, 1) = 6$, $v(6) = 6$; $r(4, 2) = 6$.
- Se o próximo sítio ocupado está conectado a mais de um sítio previamente rotulado,

¹Rotular todos os sítios ocupados com um número negativo auxilia saber qual sítio já foi rotulado (números positivos).

há duas possibilidades: os sítios vizinhos possuem o mesmo rótulo ou possuem rótulos diferentes. Se os sítios vizinhos possuem o mesmo rótulo, colocamos o mesmo rótulo ao sítio analisado $r(i, j) = m$; Se os sítios vizinhos possuem diferentes rótulos, digamos $m_1, m_2, \dots, m_l$, isto significa que o sítio em análise é o elo através do qual os *clusters* que aparentemente carregam rótulos diferentes, se unem. Neste caso, devemos atribuir um único rótulo a todos os sítios pertencentes ao grande *cluster* formado pela união dos *clusters* vizinhos. Para tal, rotulamos o sítio em análise com $r(i, j) = n = \min(m_1, m_2, \dots, m_l)$ e fazemos $v(m_1) = v(m_2) = \dots = v(m_l) = n$. Isto indica que os $m_1, m_2, \dots, m_l$ são os mesmos e qualquer sítio rotulado por um desses números são um subconjunto de n .

Na Figura A.2(c) destacamos em amarelo onde este conflito ocorre pela primeira vez. Neste caso, fazemos $r(4, 3) = 5$ e $v(6) = 5$, indicando que todos os sítios rotulados com o número 6 são parte do *cluster* 5. Continuando o procedimento, temos $r(4, 4) = 5$; $r(4, 5) = 5$; $r(4, 8) = 6$ (devido a condição de contorno periódica (Figura A.2(d))); e assim por diante. O resultado final está representado na Figura A.2(e) e os elementos do vetor auxiliar são $v = \{1, 2, 3, 4, 1, 5, 1, 5, 1\}$.

- Após a análise do último sítio, varremos a rede novamente para verificar se dois ou mais rótulos pertencem ao mesmo *cluster*. Isto é feito verificando o rótulo atribuído aos sítios. Se um sítio tiver um rótulo n , verificamos $v(n)$ para verificar o *cluster* raiz ao qual o sítio pertence. Se $v(n) = m$, m é verificado. Isso continua até que $v(n) = n$, indicando o *cluster* raiz ao qual o sítio pertence e renumeramos o sítio. Na Figura A.2(f) mostramos o resultado final.

Embora o método tenha sido descrito para uma rede quadrada, ele se aplica a qualquer tipo de rede.

Publicações

- B.1** C. A. Souza-Filho, D. Bazeia, and J. G. G. S. Ramos; *Apex predator and the cyclic competition in a rock-paper-scissors game of three species*. Physical Review E 95, 062411 (2017).

abstract - This work deals with the effects of an apex predator on the cyclic competition among three distinct species that follow the rules of the rock-paper-scissors game. The investigation develops standard stochastic simulations but is motivated by a novel procedure which is explained in the work. We add the apex predator as the fourth species in the system that contains three species that evolve following the standard rules of migration, reproduction and predation, and study how the system evolves in this new environment, in comparison with the case in the absence of the apex predator. The results show that the apex predator engenders the tendency to spread uniformly in the lattice, contributing to destroy the spiral patterns, keeping biodiversity but diminishing the average size of the clusters of the species that compete cyclically.

Apex predator and the cyclic competition in a rock-paper-scissors game of three speciesC. A. Souza-Filho,^{1,2} D. Bazeia,¹ and J. G. G. S. Ramos¹¹*Departamento de Física, Universidade Federal da Paraíba, 58051-970 João Pessoa, Paraíba, Brazil*²*Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia da Paraíba, Campus Princesa Isabel, 58755-000, Princesa Isabel, Paraíba, Brazil*

(Received 10 March 2017; published 19 June 2017)

This work deals with the effects of an apex predator on the cyclic competition among three distinct species that follow the rules of the rock-paper-scissors game. The investigation develops standard stochastic simulations but is motivated by a procedure which is explained in the work. We add the apex predator as the fourth species in a system that contains three species that evolve following the standard rules of migration, reproduction, and predation, and study how the system evolves in this new environment, in comparison with the case in the absence of the apex predator. The results show that the apex predator engenders the tendency to spread uniformly in the lattice, contributing to destroy the spiral patterns, keeping biodiversity but diminishing the average size of the clusters of the species that compete cyclically.

DOI: [10.1103/PhysRevE.95.062411](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.95.062411)**I. INTRODUCTION**

An intriguing problem in biology concerns the understanding of how distinct species interact to maintain the mechanisms underlying biodiversity in nature. Several models focusing on the competing relations among species have been proposed and studied in the last few decades [1–3]. In the simple case where the species compete for a single and restricted resource, their abilities appear to be hierarchical, involving a transitive relationship. In this case, one expects a winner species, leading all the other species to extinction [4,5]. However, there are other possibilities, and when the resource is abundant one may observe intransitive competing relationship, as happens if one uses the rules of the rock-paper-scissors (rps) game, for instance. In this case, when one considers the system with three species, individuals of the species *A* predate those of the species *B*, *B* predates *C*, and *C* predates *A* in a cyclic competition environment. In this rps dynamics, all the species are treated equally and the system is known to lead to biodiversity [6–11].

On the other hand, apex predators are being described as highly interactive from the biological point of view, and their importance in the ecological environment has been the focus of several investigations [11–15]. The presence of an apex predator in a given ecosystem may favor coexistence of species, since it can diminish the process of competitive exclusion, imposing its own order to the set of species. This is known as predator-mediated coexistence [16] and has been identified in several distinct settings, such as coral reef communities [17–19], communities of birds [20], vegetationally diverse environments [21–23], and other scenarios.

Recent works also emphasize the use of the apex predator to restore ecosystems [24] that have been weakened due to distinct causes and motivations. In particular, studies have identified secondary threatened species that could be maintained or restored in order to minimize damage or improve performance, as in the cases of invasion of non-native species [25,26], the transmission of diseases [27], or the effects of climate changes on the dynamics of the species [28]. Such effects, which are triggered by the presence or action of the apex predator and may influence other levels of the chain, contribute to the so-called trophic cascade [29]. Distinct

factors, such as changes in prey cascade behavior as a survival strategy and predation that decreases the abundance of specific prey and interfere at distinct levels of the chain, may induce the occurrence of the trophic cascade.

In this work we investigate systems with three and four species and select three systems: one with three species that compete cyclically, one with four species competing cyclically, and the other with the fourth species representing the apex predator, which predates all the other three species and is not predated by any of them. We focus mainly on the behavior of the apex predator and how it changes the behavior of the other species in the stochastic evolutions in the square lattice which we consider below. As we have commented above, the apex predator has been studied in several distinct scenarios, but the idea to be pursued in this work is of current interest. It develops standard stochastic simulations and was motivated by the recent work in Ref. [30], which makes use of the density of maxima related to the abundance of the species, and by the algorithm developed in Ref. [31], which enables us to explore the clustering of species in a square lattice.

The work is organized as follows. In the next section we introduce four systems and study some specific time evolutions to show how they evolve under the rules there discussed. We move on and in Sec. III we select and investigate three distinct systems, with the results of the stochastic simulations contributing to the current understanding of the behavior of the apex predator and how it changes the behavior of the other three species that compete cyclically. We end the work in Sec. IV, where we include some comments and conclusions.

II. THE MODELS

In this work we investigate systems described by three and four species. Figure 1 illustrates the systems and the interactions among the species, with the arrows going from the predator to the prey. Figure 1(a) shows three distinct species that compete cyclically, as in the rock-paper-scissors game. This is the system X3, and several studies have already been implemented; see, e.g., Refs. [32–36]. Among several interesting characteristics, one notes the presence of spiral patterns. Figure 1(b) shows another system with four distinct species that also interact cyclically, but in this case the fourth

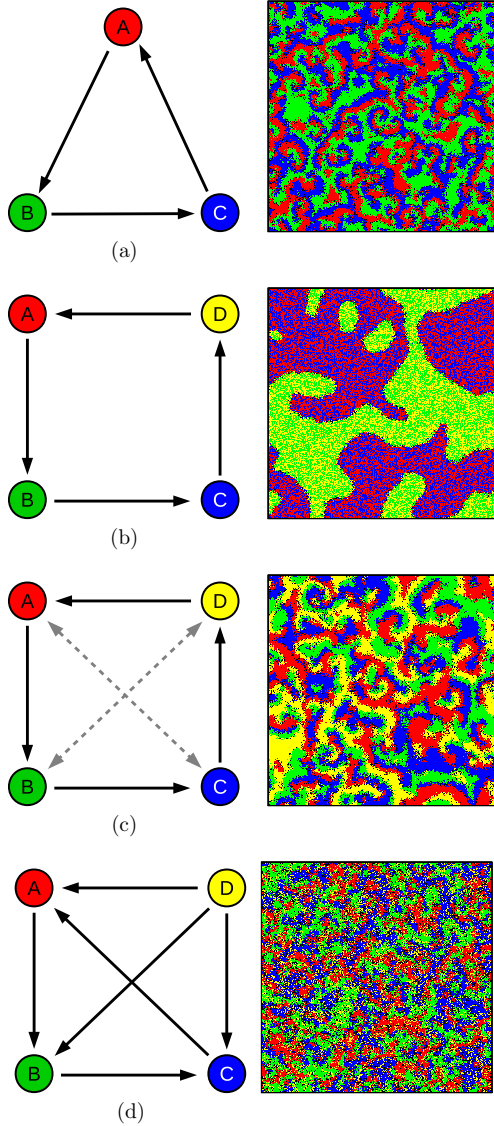


FIG. 1. In the left panel the diagrams show how predation works for three and four species. The black arrows indicate unidirectional predation and the gray dashed arrows indicate bidirectional predation. In the right panel are typical snapshots of stochastic simulations that run for 10^4 generations. Panel (d) shows the system where the fourth species constitutes the apex predator.

species adds the next-to-next neighbor which does not compete and so forms partnerships. This and other similar cases were studied in [37–41] and may generate patterns such as the one shown in the figure, with two subsets of two partner species. In Figs. 1(c) and 1(d) show the systems X_4 and SX_3 , respectively. They have all the four species interacting, but in (c) they are all equivalent, and in (d) we select the yellow species to represent the apex predator.

In order to implement the stochastic simulations, we consider a square lattice with $N = L^2$ sites and use periodic

boundary conditions. We take $L = 512$, so we deal with a square lattice of 512×512 sites. Each site in the lattice is occupied by one of the species A (red), B (green), C (blue), or D (yellow), or is empty E (black). The interactions follows the rules [8,9]

$$AB \xrightarrow{\sigma} AE, \quad BC \xrightarrow{\sigma} BE, \quad CA \xrightarrow{\sigma} CE, \quad (1)$$

$$AE \xrightarrow{\mu} AA, \quad BE \xrightarrow{\mu} BB, \quad CE \xrightarrow{\mu} CC, \quad (2)$$

$$A\Box \xrightarrow{\varepsilon} \Box A, \quad B\Box \xrightarrow{\varepsilon} \Box B, \quad C\Box \xrightarrow{\varepsilon} \Box C, \quad (3)$$

where $\Box$ represents a site that can be empty or occupied by any individual. The relations in (1) describe predation, which is characterized by the σ parameter that shows the cyclic interactions. The relations in (2) and (3) show reproduction and migration, whose occurrence is controlled by the μ and ε parameters, respectively.

In the last system in Fig. 1(d), the D or yellow species interacts obeying the following rules:

$$DX \xrightarrow{\gamma} DD, \quad (4)$$

$$D\Box \xrightarrow{\beta} E\Box, \quad (5)$$

$$D\Box \xrightarrow{\epsilon} \Box D, \quad (6)$$

where X represents one among the three species A, B, or C that compete cyclically. These rules show that the D or yellow species represents the apex predator. The relation (4) ensures that it can reproduces after predating any of the three species under the same ratio γ , and the relations (5) and (6) describe death and migration, which are controlled by the parameters β and ϵ , respectively.

Before starting the simulation one prepares the initial state, in which all the species and empty sites are evenly distributed in the square lattice with the same probability. Each time step randomly selects a site and one of its four nearest neighbors, and for each selected pair, the random process continues using the normalized ratios controlled by σ , μ , ε , γ , β , and ϵ , as described by the above processes (1)–(6). To describe the time evolution of the system, we use a generation, which is the time spent to account for N time steps.

In the right panels in Figs. 1(a) and 1(c), one sees the appearance of spiral patterns, which is typical of the cyclic evolutions that follow the rules of the rock-paper-scissors game. However, in Fig. 1(d) one notices the absence of spirals and the diminishing sizes of the clusters of species that evolve in cyclic competition. This behavior is due to the presence of the apex predator, and we study it below, showing that, although the apex predator does not destroy biodiversity, it diminishes the average size of the clusters of species that compete cyclically. We have added in the Supplemental Material [42] three videos to illustrate how the three systems X_3 , X_4 , and SX_3 evolve in time under the stochastic simulations.

III. RESULTS

Let us now implement the stochastic simulations, taking the parameters for predation, reproduction, and migration in Figs. 1(a) and 1(c) as $\sigma = 0.25$, $\mu = 0.25$, and $\varepsilon = 0.50$,

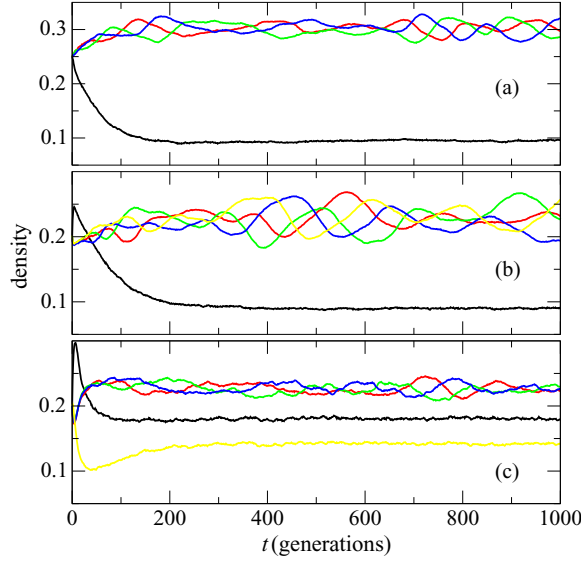


FIG. 2. Density of species as a function of time. The colored curves represent the respective species, and the black curve stands for the empty sites. The (a) and (b) panels represent the X3 and X4 systems, and the (c) panel stands for the last system, SX3, which contains the apex predator. The long-time evolution shows that all the systems evolve ensuring coexistence of species.

respectively. For the system with the apex predator which appears in Fig. 1(d), we use $\sigma = 0.30$, $\mu = 0.30$, $\varepsilon = 0.40$, $\gamma = 0.25$, $\beta = 0.15$, and $\epsilon = 0.60$. We have checked that the results in this work are robust against changes in the values of the parameters, if they are chosen in a way that maintains coexistence among the species. The main focus of the current work is to investigate the systems shown in Figs. 1(a), 1(c), and 1(d), which we refer to as X3, X4, and SX3, respectively.

Figure 2 displays the density of species, $\rho_x(t)$, with $x \in \{A, B, C, D\}$, as a function of the generation time. The colored curves represent the corresponding species, and the black curve identifies the empty sites. The cases displayed in Figs. 2(a), 2(b), and 2(c) represent the systems X3, X4, and SX3 respectively, and one notices that after a transient time interval, all the systems evolve maintaining coexistence of the species.

One sees that in the absence of the apex predator, the density of empty sites diminishes rapidly. This happens because the initial density of species and empty sites favors reproduction, since the species can frequently meet empty sites. In the presence of the apex predator, the density of empty sites increases before diminishing rapidly, and now the reason is that the presence of empty sites contributes to the death of the apex predators, before they starts to increase to reach an equilibrium state that oscillates around a given average.

In all the above cases, the density of species oscillates around an average value. This behavior is expected, since the systems are similar to the famous predator-prey model of Lotka and Volterra [43,44]; see, e.g., Fig. 6 of Ref. [45], which shows similar mean field and stochastic network simulations in a five-species model in the absence of the apex predator. However, in the presence of the apex predator, which we investigate in

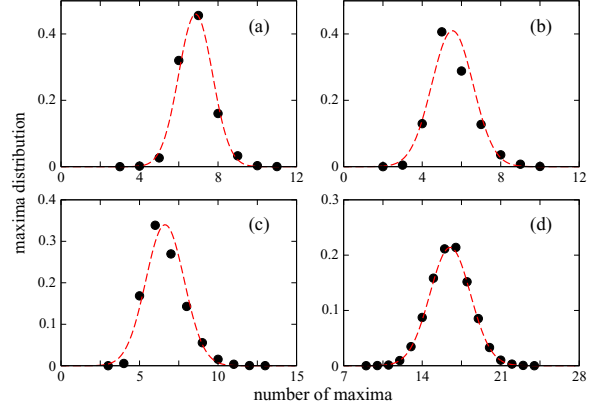


FIG. 3. The black dots represent the histograms of the number of maxima in the interval of 10^3 generations and the red dashed lines show the fits as Gaussian curves. The cases (a) and (b) represent the systems X3 and X4, in which all the species compete cyclically. Panel (c) is for the three species A, B, and C of the system SX3, and the case (d) represents the species D, the apex predator.

the current work, the frequency of oscillation of the density of species increases with decreasing amplitude. This occurs because the apex predator acts uniformly in the square lattice, and is expected to equally suppress all the species. The average value of the density of species depends on the values used for the parameters that we consider in each case; for instance, the value obtained for the X3 system was $\bar{\rho}_x = 0.301$ with $\sigma_x = 0.012$, where σ_x is the standard deviation, and, for the system X4, $\bar{\rho}_x = 0.225$ with $\sigma_x = 0.018$. For the system SX3, we obtained $\bar{\rho}_x = 0.226$ with $\sigma_x = 0.006$ for the three species A, B, C that evolve in cyclic competition, and $\bar{\rho}_d = 0.142$ with $\sigma_d = 0.001$, for the apex predator.

We provided 3×10^3 realizations for the systems X3 and X4, and 3×10^4 for the system SX3, in order to obtain the average density of maxima $\langle \rho_t \rangle$ in the interval of 10^3 generations. Figure 3 shows the histogram normalized for the number of maxima in the interval of 10^3 generations (black dots) and Table I shows the values for the average density of maxima and its standard deviations. We use the average and standard deviations values in Table I to fit a Gaussian curve, as can be seen by the red dashed line in Fig. 3. Note that the peak distributions have a Gaussian behavior.

In order to get further information concerning the dynamical evolution of the systems, we computed the autocorrelation

TABLE I. Average number of maxima in the interval of 10^3 generations. In the systems X3 and X4 all the species evolve in cyclic competition, while in the system SX3 the species D represents the apex predator.

	System			
	X3	X4	SX3	SX3
Species	A, B, C	A, B, C, D	A, B, C	D
$\langle \rho_t \rangle$	6.858	5.544	6.625	16.496
σ_t	0.862	1.052	1.222	1.807

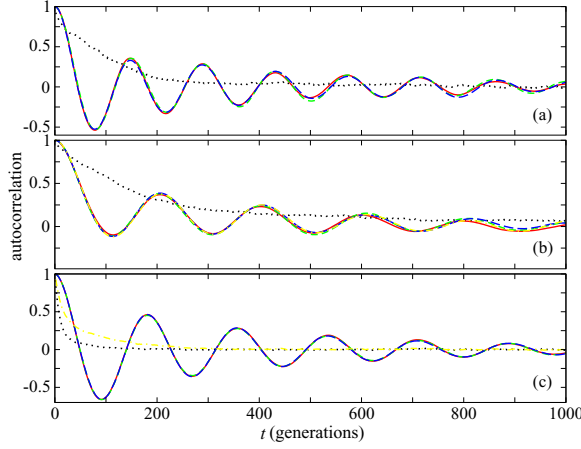


FIG. 4. The autocorrelation functions for the systems X3 (a), X4 (b), and SX3 (c). The colors identify the species, and the black dotted curves stand for the empty sites. In (c) the three species compete cyclically in the presence of an apex predator, represented by yellow.

function, which is defined by

$$C_{xx}(t, t') \equiv \frac{1}{\sigma^2} \langle x(t)x(t') \rangle - \frac{1}{\sigma^2} \langle x(t) \rangle \langle x(t') \rangle, \quad (7)$$

where $x \in A, B, C, D$, $\sigma^2 = \langle x(t)^2 \rangle - \langle x(t) \rangle^2$, and $\langle \dots \rangle$ is to be understood as an average in the ensemble. In Ref. [46], the authors have shown (in a different context) that the density of maxima of an observable that fluctuates can be obtained from its correlation function. This result was recently used [30] to provide a way to connect the density of maxima with the correlation length of the density of species. The result is obtained with the use of the maximum entropy principle and can be written in the form [30,46]

$$\langle \rho_t \rangle = \frac{1}{2\pi} \sqrt{-\frac{T_4}{T_2}}, \quad T_j \equiv \left. \frac{d^j}{d(\delta t)^j} C(\delta t) \right|_{\delta t=0}. \quad (8)$$

We then develop stochastic simulations in the square lattice for the three systems X3, X4, and SX3 and show in Fig. 4 the autocorrelation function for each system, there represented by the curves shown in the panels (a), (b), and (c), respectively. The black dotted curves stand for the empty sites, and the colored curves represent the species with their respective colors. One notices that there is strong accord among the results for the species that evolve in cyclic competition, with an oscillating behavior similar to the one found in Ref. [30].

Let us now focus on the species that compete cyclically. One notices from Fig. 4 that for t near the origin, it is possible to map the data of the autocorrelation with

$$C(t) = \cos(\omega t + \phi), \quad (9)$$

where ω and ϕ are real parameters. Thus, one uses Eq. (8) to write the average density of maxima for species that evolve under cyclic competition in the form

$$\langle \rho_t \rangle = \frac{\omega}{2\pi}. \quad (10)$$

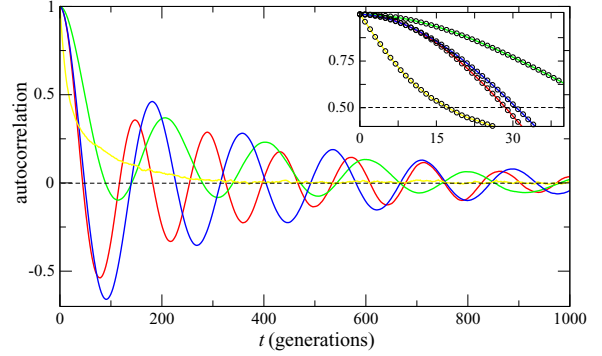


FIG. 5. The autocorrelation function for the systems X3 (red curve), X4 (green curve), and SX3 (blue and yellow curves). The yellow curve represents the apex predator. The inset shows perfect agreement between the numerical simulation and the approximations used to fit the curves, shown as the empty-circle curves.

However, for the apex predator the initial form of its autocorrelation function can be described by

$$C(t) = \exp(a_0 t) \sum_{n=1}^n a_n t^n, \quad (11)$$

where $a_0, a_1, a_2, \dots$, are real parameters. Since the data are strongly correlated for $n \geq 3$, we used $n = 4$ to get the density of maxima for the apex predator. It gives

$$\langle \rho_t \rangle = \frac{1}{2\pi} \sqrt{-\frac{a_0^4 + 4a_0^3 a_1 + 12a_0^2 a_2 + 24a_0 a_3 + 24a_4}{a_0^2 + 2a_0 a_1 + 2a_2}}. \quad (12)$$

Figure 5 depicts the autocorrelation functions for the three distinct systems X3, X4, and SX3, with the red curve representing the X3 system, the green curve the X4 system, and the blue and yellow curves one of the three competing species and the apex predator of the SX3 system, respectively. Also, the inset displays the same curves together with the corresponding fitting functions as the empty-circle curves that show excellent accord with the colored curves. One recalls that the colored curves result from the stochastic simulations, and the empty-circle curves come from the approximations (9) and (11) used above to fit the colored curves. The numerical values are shown in Table II.

In the systems X3, X4, and SX3 that we have studied, we noticed that species in cyclic competition appear to have the tendency to clusters or agglomerate, as a mechanism to survive in the competing environment. However, the apex predator behaves differently, tending to spread uniformly in the lattice,

TABLE II. Average number of maxima in a interval of 10^3 generations, obtained from the relation (8).

	System			
	X3	X4	SX3	SX3
Species	A, B, C	A, B, C, D	A, B, C	D
$\langle \rho_t \rangle$	6.081	4.402	5.802	16.537

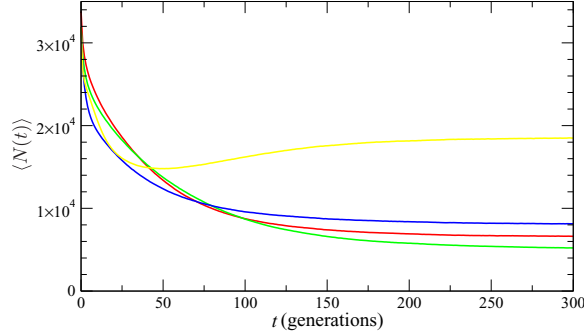


FIG. 6. Average number of clusters $\langle N(t) \rangle$ as a function of time. The red, green, and blue lines represent the species in cyclic competition in the systems X3, X4, and SX3, respectively. The yellow curve stands for the apex predator.

as shown in the right panel of Fig. 1(d). In order to quantify this behavior, one should investigate the number and size of the clusters of the species. To implement this possibility, we used the Hoshen-Kopelman algorithm [31] to compute the average number of clusters $n_s(t)$ of size s as a function of time. This allows us to introduce the quantities

$$N(t) = \sum_s n_s(t), \quad (13)$$

$$S(t) = \frac{\sum_s s^2 n_s(t)}{\sum_s s n_s(t)}, \quad (14)$$

which represent the number of clusters and the average size of the clusters, respectively.

We display the results in Figs. 6 and 7, which show the average of the number of clusters and the average size of such clusters, respectively, as a function of time in the case of 128 realizations. The results show that the presence of the apex predator contributes to diminish the size of the clusters of the species that compete cyclically, increasing its number. Also, the tendency of the apex predator to spread uniformly in the lattice is kept; as we see from Fig. 7, the average size of the group of apex predators is very small, being three individuals in the simulations shown in the figure.

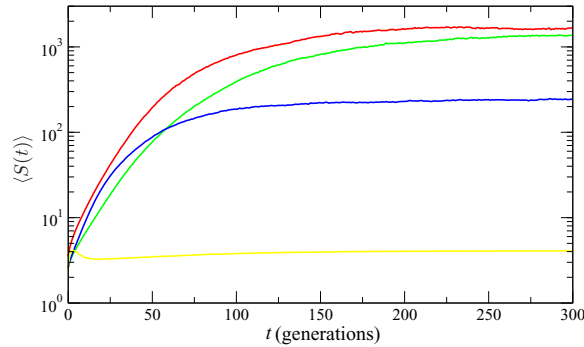


FIG. 7. The mono-log behavior of the average size of the clusters $\langle S(t) \rangle$ as a function of time. The colors are as in Fig. 6.

IV. COMMENTS AND CONCLUSIONS

In this work we studied the presence of an apex predator in a system composed of three distinct species that compete cyclically following the standard rules of reproduction, migration, and predation, where predation controlled as in the paper-rock-scissors game. The apex predator is a superpredator, since it predaes all the other species and is not predated by any of them. The population of the apex predator does not increase indefinitely because it dies with the ratio controlled by β , as suggested by the rule (5).

We studied the system X3, which is composed of three distinct species that evolve in cyclic competition, and then two systems of four species: one, the system X4, where all the species compete among themselves and have similar behavior, and the other, SX3, where three species compete cyclically and the other one represents the apex predator. We followed ideas developed before in the works [30,31] to show that when the species evolve under cyclic competition, the abundance or density of species oscillates around an average value, producing maxima and minima. Also, we computed the average number of maxima for the three models and related it to the correlation length of the abundance of species. We also noticed that the presence of the apex predator decreases the amplitude of oscillation of the three species.

Other results indicated that the autocorrelation function for the abundance of species that evolve under cyclic competition presents a sinusoidal behavior, but for the apex predator the behavior is exponential. It was also noticed that while the species that compete cyclically tend to cluster and form spiral patterns to survive, the presence of the apex predator diminishes the average size of these clusters, increasing their number in a way that contributes to destroying the spiral patterns without jeopardizing biodiversity. We also found that the apex predator does not form large clusters, preferring to spread out uniformly into the lattice.

The model for the apex predator studied in this work does not account for several aspects such as the interference among individuals of the same species in the search for the corresponding prey, the conversion of successful predator-prey hunts into new predators, the age of the predators, which may interfere in the predation ratio, and so on. The addition of new rules with focus on specific scenarios is a challenging task that may appear as natural extensions of the current work. Despite the simplicity of the systems studied, the results of this work are of current interest and suggest the need of new, more detailed investigations on the behavior of the apex predator and how it may change basic aspects of an environment that favors biodiversity. Other areas of investigation are heterogeneous systems and complex networks, the predator-prey Lotka-Volterra mean field theory in the presence of an apex predator, and also Monte Carlo simulations of n -state Potts models and other complex fluid models in statistical physics [47]. We hope to further report on this in the near future.

ACKNOWLEDGMENTS

This work is partially supported by The Brazilian agencies CAPES and CNPq.

C. A. SOUZA-FILHO, D. BAZEIA, AND J. G. G. S. RAMOS

PHYSICAL REVIEW E **95**, 062411 (2017)

- [1] M. Frean and E. Abraham, *Proc. R. Soc. London B* **268**, 1323 (2001).
- [2] N. Bacaër, *A Short History of Mathematical Population Dynamics* (Springer-Verlag, London, 2011).
- [3] C. Adami and A. Hintze, *Nat. Commun.* **4**, 2193 (2013).
- [4] G. Hardin, *Science* **131**, 1292 (1960).
- [5] G. Hutchinson, *Am. Nat.* **95**, 137 (1961).
- [6] B. Kerr, M. A. Riley, M. W. Feldman, and B. J. M. Bohannan, *Nature (London)* **418**, 171 (2002).
- [7] G. Károlyi, Z. Neufeld, and I. Scheuring, *J. Theor. Biol.* **236**, 12 (2005).
- [8] T. Reichenbach, M. Mobilia, and E. Frey, *Nature (London)* **448**, 1046 (2007).
- [9] T. Reichenbach, M. Mobilia, and E. Frey, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 238105 (2007).
- [10] J. Nahum, B. Harding, and B. Kerr, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **108**, 10831 (2011).
- [11] A. Sih, P. Crowley, M. McPeck, J. Petranks, and K. Strohmeier, *Annu. Rev. Ecol. Syst.* **16**, 269 (1985).
- [12] F. Palomares, P. Gaona, P. Ferrerasa, and M. Delibes, *Conserv. Biol.* **9**, 295 (1995).
- [13] J. Terborgh, J. A. Estes, P. Paquet, K. Ralls, D. Boyd-Herger, B. J. Miller, and R. F. Noss, in *Continental Conservation*, edited by M. E. Soulé and J. Terborgh (Island Press, California, 1999).
- [14] J. B. Shurin and E. G. Allen, *Am. Nat.* **158**, 624 (2001).
- [15] A. D. Wallach, I. Izhaki, J. D. Toms, W. J. Ripple, and U. Shanas, *Oikos* **124**, 1453 (2015).
- [16] H. Caswell, *Am. Nat.* **112**, 127 (1978).
- [17] R. T. Paine, *Am. Nat.* **100**, 65 (1966).
- [18] R. T. Paine, *Am. Nat.* **103**, 91 (1969).
- [19] J. W. Porter, *Am. Nat.* **106**, 487 (1972).
- [20] C. Kullberg and J. Ekman, *Oikos* **89**, 41 (2000).
- [21] M. G. Jones, *Emp. J. Exp. Agri.* **1**, 43 (1933).
- [22] J. L. Harper, *Brookhaven Symp. Biol.* **22**, 48 (1968).
- [23] R. T. Paine, *Science* **296**, 736 (2002).
- [24] E. G. Ritchie, B. Elmhagen, A. S. Glen, M. Letnic, G. Ludwig, and R. A. McDonald, *Trends Ecol. Evol.* **27**, 265 (2012).
- [25] A. D. Wallach, C. N. Johnson, E. G. Ritchie, and A. J. O'Neill, *Ecol. Lett.* **13**, 1008 (2010).
- [26] A. D. Wallach, W. J. Ripple, and S. P. Carroll, *Trends Ecol. Evol.* **30**, 146 (2015).
- [27] M. J. Pongsiri, J. Roman, V. O. Ezenwa, T. L. Goldberg, H. S. Koren, S. C. Newbold, R. S. Ostfeld, S. K. Pattanayak, and D. J. Salkeld, *BioScience* **59**, 945 (2009).
- [28] C. C. Wilmsers, E. Post, R. O. Peterson, and J. A. Vucetich, *Ecol. Lett.* **9**, 383 (2006).
- [29] B. R. Silliman and C. Angelini, *Nat. Educ. Knowl.* **3**, 44 (2012).
- [30] D. Bazeia, M. B. P. N. Pereira, A. V. Brito, B. F. Oliveira, and J. G. G. S. Ramos, *Sci. Rep.* **7**, 44900 (2017).
- [31] J. Hoshen and R. Kopelman, *Phys. Rev. B* **14**, 3438 (1976).
- [32] M. Peltomäki and M. Alava, *Phys. Rev. E* **78**, 031906 (2008).
- [33] W.-X. Wang, Y.-C. Lai, and C. Grebogi, *Phys. Rev. E* **81**, 046113 (2010).
- [34] H. Shi, W.-X. Wang, R. Yang, and Y.-C. Lai, *Phys. Rev. E* **81**, 030901(R) (2010).
- [35] L.-L. Jiang, T. Zhou, M. Perc, and B.-H. Wang, *Phys. Rev. E* **84**, 021912 (2011).
- [36] D. Grošelj, F. Jenko, and E. Frey, *Phys. Rev. E* **91**, 033009 (2015).
- [37] G. Szabó and G. A. Sznaider, *Phys. Rev. E* **69**, 031911 (2004).
- [38] G. Szabó, *J. Phys. A* **38**, 6689 (2005).
- [39] P. P. Avelino, D. Bazeia, L. Losano, J. Menezes, and B. F. Oliveira, *Phys. Rev. E* **86**, 036112 (2012).
- [40] B. Intoy and M. Pleimling, *J. Stat. Mech.* (2013) P08011.
- [41] A. F. Lütz, S. Risau-Gusman, and J. J. Arenzon, *J. Theor. Biol.* **317**, 286 (2013).
- [42] See Supplemental Material at <http://link.aps.org/supplemental/10.1103/PhysRevE.95.062411> for three videos to illustrate how the three systems X3, X4, and SX3 evolve in time under the stochastic simulations.
- [43] A. J. Lotka, *J. Am. Chem. Soc.* **42**, 1595 (1920).
- [44] V. Volterra, *Leçons sur la Theorie Mathematique de la Lutte pour la Vie* (Gauthier-Villars, Paris, 1931).
- [45] P. P. Avelino, D. Bazeia, J. Menezes, and B. F. de Oliveira, *Phys. Lett. A* **378**, 393 (2014).
- [46] J. G. G. S. Ramos, D. Bazeia, M. S. Hussein, and C. H. Lewenkopf, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 176807 (2011).
- [47] D. P. Landau and K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. (Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2009).

Referências Bibliográficas

- [1] ODUM, E.; BARRETT, G. *Fundamentos de Ecologia*. 5. ed. Rio de Janeiro: Pioneira Thomson, 2007.
- [2] YODZIS, P. *Introduction to theoretical ecology*. New York: Harper & Row, 1989.
- [3] LINDEMAN, R. The trophic-dynamic aspect of ecology. *Ecology*, v. 23, n. 4, p. 399–417, 1942.
- [4] HARDIN, G. The competitive exclusion principle. *Science*, Washington, v. 131, n. 3409, p. 1292–1297, 1960.
- [5] GAUSE, G. *The struggle for existence*. New York: Dover Publications, Inc., 2003. Originalmente publicado por Williams & Wilkins Co., 1934.
- [6] HUTCHINSON, G. The paradox of the plankton. *The American Naturalist*, v. 95, n. 882, p. 137–145, 1961.
- [7] SIH, A.; CROWLEY, P.; MCPEEK, M.; PETRANKA, J.; STROHMEIER, K. Predation, Competition, and Prey Communities: A Review of Field Experiments. *Annual Review of Ecology and Systematics*, v. 16, p. 269–311, 1985.
- [8] PALOMARES, F.; GAONA, P.; FERRERASA, P.; DELIBES, M. Positive Effects on Game Species of Top Predators by Controlling Smaller Predator Populations: An Example with Lynx, Mongooses, and Rabbits. *Conservation Biology*, v. 9, n. 2, p. 295–305, 1995.
- [9] TERBORGH, J.; ESTES, J.; PAQUET, P.; RALLS, K.; BOYD-HERGER, D.; MILLER, B.; NOSS, R. F. The role of top carnivores in regulating terrestrial ecosystems. In: *Continental Conservation*, M.E. Soulé, J. Terborgh (Eds.). 1999. p. 39–64.
- [10] SHURIN, J.; ALLEN, E. Effects of Competition, Predation, and Dispersal on Species Richness at Local and Regional Scales. *The American Naturalist*, v. 158, n. 6, p. 624–637, 2001.
- [11] WALLACH, A.; IZHAKI, I.; TOMS, J.; RIPPLE, W.; SHANAS, U. What is an apex predator? *Oikos*, v. 124, n. 11, p. 1453–1461, 2015.

- [12] CASWELL, H. Predator-Mediated Coexistence: A Nonequilibrium Model. *The American Naturalist*, v. 112, n. 983, p. 127–154, 1978.
- [13] PAINE, R. Food Web Complexity and Species Diversity. *The American Naturalist*, v. 100, n. 910, p. 65–75, 1966.
- [14] PAINE, R. A Note on Trophic Complexity and Community Stability. *The American Naturalist*, v. 103, n. 929, p. 91–93, 1969.
- [15] PAINE, R. Intertidal community structure. *Oecologia*, v. 15, n. 2, p. 93–120, 1974.
- [16] JONES, M. Grassland management and its influence on the sward. *Empire Journal of Experimental Agriculture*, v. 1, p. 43–57, 1933.
- [17] HARPER, J. The role of predation in vegetational diversity. *Brookhaven symposia in biology*, v. 22, p. 48–62, 1969.
- [18] PAINE, R. Trophic Control of Production in a Rocky Intertidal Community. *Science*, Washington, v. 296, n. 5568, p. 736–739, 2002.
- [19] PRICE, P. Ecological aspects of host plant resistance and biological control: interactions among three trophic levels. *Interactions of plant resistance and parasitoids and predators of insects*, p. 11–30, 1986.
- [20] KULLBERG, C.; EKMAN, J. Does predation maintain tit community diversity? *Oikos*, v. 89, n. 1, p. 41–45, 2000.
- [21] RITCHIE, E.; ELMHAGEN, B.; GLEN, A.; LETNIC, M.; LUDWIG, G.; MCDONALD, R. Ecosystem restoration with teeth: what role for predators? *Trends in Ecology & Evolution*, v. 27, n. 5, p. 265–271, 2012.
- [22] WALLACH, A.; JOHNSON, C.; RITCHIE, E.; O'NEILL, A. Predator control promotes invasive dominated ecological states. *Ecology Letters*, v. 13, n. 8, p. 1008–1018, 2010.
- [23] WALLACH, A.; RIPPLE, W.; CARROLL, S. Novel trophic cascades: apex predators enable coexistence. *Trends in Ecology & Evolution*, v. 30, n. 3, p. 146–153, 2015.
- [24] PONGSIRI, M.; ROMAN, J.; EZENWA, V.; GOLDBERG, T.; KOREN, H.; NEWBOLD, S.; OSTFELD, R.; PATTANAYAK, S.; SALKELD, D. Biodiversity Loss Affects Global Disease Ecology. *BioScience*, v. 59, n. 11, p. 945–954, 2009.
- [25] WILMERS, C.; POST, E.; PETERSON, R.; VUCETICH, J. Predator disease outbreak modulates top-down, bottom-up and climatic effects on herbivore population dynamics. *Ecology Letters*, v. 9, n. 4, p. 383–389, 2006.

- [26] SILLIMAN, B.; ANGELINI, C. Trophic cascades across diverse plant ecosystems. *Nature Education Knowledge*, v. 3, n. 10, p. 44, 2012.
- [27] SOULÉ, M.; ESTES, J.; MILLER, B.; HONNOLD, D. Strongly Interacting Species: Conservation Policy, Management, and Ethics. *BioScience*, v. 55, n. 2, p. 168–176, 2005.
- [28] MALTHUS, T. *An Essay on the Principle of Population*. J. Johnson, in St. Paul's Church-yard, 1798.
- [29] VERHULST, P.-F. Notice sur la loi que la population suit dans son accroissement. correspondance mathématique et physique publiée par a. *Quetelet*, v. 10, p. 113–121, 1838.
- [30] MURRAY, J. Mathematical biology I: an introduction, Vol. 17 of interdisciplinary applied mathematics, 2002.
- [31] MAY, R. Simple mathematical models with very complicated dynamics. *Nature*, London, v. 261, n. 5560, p. 459–467, 1976.
- [32] STROGATZ, S. Nonlinear dynamics and chaos: with applications to physics, biology, chemistry and engineering. 1994.
- [33] VOLTERRA, V. Fluctuations in the abundance of a species considered mathematically. *Nature*, London, v. 118, p. 558–560, 1926.
- [34] LOTKA, A. *Elements of physical biology*. Baltimore: Williams and Wilkins Company, 1925.
- [35] GILPIN, M. Do Hares Eat Lynx? *The American Naturalist*, v. 107, n. 957, p. 727–730, 1973.
- [36] SCHAFFER, W. Stretching and Folding in Lynx Fur Returns: Evidence for a Strange Attractor in Nature? *The American Naturalist*, v. 124, n. 6, p. 798–820, 1984.
- [37] HUTCHINSON, G. E. The Paradox of the Plankton. *The American Naturalist*, v. 95, n. 882, p. 137, Jan. 1961.
- [38] JACKSON, J. B. C.; BUSS, L. Alleopathy and spatial competition among coral reef invertebrates. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, v. 72, n. 12, p. 5160–5163, 1975.
- [39] BURROWS, M. T.; HAWKINS, S. J. Modelling patch dynamics on rocky shores using deterministic cellular automata. *Marine Ecology Progress Series*, v. 167, p. 1–13, 1998.

- [40] GUILL, C.; DROSSEL, B.; JUST, W.; CARMACK, E. A three-species model explaining cyclic dominance of Pacific salmon. *Journal of Theoretical Biology*, v. 276, n. 1, p. 16–21, 2011.
- [41] TAYLOR, D. R.; AARSSSEN, L. W. Complex Competitive Relationships Among Genotypes of Three Perennial Grasses: Implications for Species Coexistence. *The American Naturalist*, v. 136, n. 3, p. 305–327, 1990.
- [42] SILVERTOWN, J.; HOLTIER, S.; JOHNSON, J.; DALE, P. Cellular Automaton Models of Interspecific Competition for Space—The Effect of Pattern on Process. *Journal of Ecology*, v. 80, n. 3, p. 527–533, 1992.
- [43] DURRETT, R.; LEVIN, S. Spatial Aspects of Interspecific Competition. *Theoretical Population Biology*, v. 53, n. 1, p. 30–43, 1998.
- [44] LANKAU, R. A.; STRAUSS, S. Y. Mutual Feedbacks Maintain Both Genetic and Species Diversity in a Plant Community. *Science*, Washington, v. 317, n. 5844, p. 1561–1563, 2007.
- [45] CAMERON, D. D.; WHITE, A.; ANTONOVICS, J. Parasite–grass–forb interactions and rock–paper–scissor dynamics: predicting the effects of the parasitic plant *Rhinanthus minor* on host plant communities. *Journal of Ecology*, v. 97, n. 6, p. 1311–1319, 2009.
- [46] KERR, B.; RILEY, M. A.; FELDMAN, M. W.; BOHANNAN, B. Local dispersal promotes biodiversity in a real-life game of rock–paper–scissors. *Nature*, London, v. 418, p. 171–174, 2002.
- [47] DURRETT, R.; LEVIN, S. Allelopathy in Spatially Distributed Populations. *Journal of Theoretical Biology*, v. 185, n. 2, p. 165–171, 1997.
- [48] KIRKUP, B. C.; RILEY, M. A. Antibiotic-mediated antagonism leads to a bacterial game of rock-paper-scissors in vivo. *Nature*, London, v. 428, p. 412–414, 2004.
- [49] NEUMANN, G. F.; JETSCHKE, G. Evolutionary classification of toxin mediated interactions in microorganisms. *Biosystems*, v. 99, n. 3, p. 155–166, 2010.
- [50] NAHUM, J.; HARDING, B.; KERR, B. Evolution of restraint in a structured rock–paper–scissors community. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, v. 108, n. Supplement 2, p. 10831–10838, 2011.
- [51] SINERVO, B.; LIVELY, C. M. The rock-paper-scissors game and the evolution of alternative male strategies. *Nature*, London, v. 380, n. 6571, p. 240, 1996.
- [52] KERR, B.; NEUHAUSER, C.; BOHANNAN, B.; DEAN, A. M. Local migration promotes competitive restraint in a host–pathogen ‘tragedy of the commons’. *Nature*, London, v. 442, n. 7098, p. 75–78, 2006.

- [53] MAY, R. M.; LEONARD, W. J. Nonlinear aspects of competition between three species. *SIAM journal on applied mathematics*, v. 29, n. 2, p. 243–253, 1975.
- [54] HE, Q.; MOBILIA, M.; TÄUBER, U. C. Coexistence in the two-dimensional May-Leonard model with random rates. *The European Physical Journal B*, Les Ulis, v. 82, n. 1, p. 97–105, 2011.
- [55] REICHENBACH, T.; MOBILIA, M.; FREY, E. Mobility promotes and jeopardizes biodiversity in rock-paper-scissors games. *Nature*, London, v. 448, 2007.
- [56] REICHENBACH, T.; MOBILIA, M.; FREY, E. Noise and Correlations in a Spatial Population Model with Cyclic Competition. *Phys. Rev. Lett.*, v. 99, p. 238105, Dec 2007.
- [57] REICHENBACH, T.; MOBILIA, M.; FREY, E. Self-organization of mobile populations in cyclic competition. *Journal of Theoretical Biology*, v. 254, n. 2, p. 368–383, 2008.
- [58] MOBILIA, M. Oscillatory dynamics in rock–paper–scissors games with mutations. *Journal of Theoretical Biology*, v. 264, n. 1, p. 1–10, 2010.
- [59] JIANG, L.; ZHOU, T.; PERC, M.; WANG, B. Effects of competition on pattern formation in the rock-paper-scissors game. *Phys. Rev. E*, v. 84, p. 021912, Aug 2011.
- [60] NICOLIS, G.; PRIGOGINE, I. *Self-organization in nonequilibrium systems*. New York: John Wiley & Sons, Inc., 1977.
- [61] GRANDY, W. *Entropy and the Time Evolution of Macroscopic Systems*. International Series of Monographs on Physics. New York: Oxford University Press, 2008.
- [62] HARTE, J. *Maximum Entropy and Ecology: A Theory of Abundance, Distribution, and Energetics*. New York: Oxford University Press, 2011.
- [63] RAMOS, J. G. G. S.; BAZEIA, D.; HUSSEIN, M. S.; LEWENKOPF, C. H. Conductance Peaks in Open Quantum Dots. *Phys. Rev. Lett.*, v. 107, p. 176807, Oct 2011.
- [64] BAZEIA, D.; PEREIRA, M.; BRITO, A.; DE OLIVEIRA, B.; RAMOS, J. A novel procedure for the identification of chaos in complex biological systems. *Scientific Reports*, v. 7, 2017.
- [65] THOMSON, W. On the dynamical theory of heat, with numerical results deduced from Mr. Joule’s equivalent of a thermal unit, and M. Regnault’s observations on steam. *Philosophical Magazine*, v. 4, n. 23, p. 174–210, 1852.

- [66] NUSSENZVEIG, H. *Curso de Física Básica – Vol. 2*. 4. ed. São Paulo: Editora Blucher, 2002.
- [67] CLAUSIUS, R. *The mechanical theory of heat*. London: Macmillan and Co., 1879. Traduzido por Walter R. Browne. Originalmente publicado em *Annalen der Physik* (1865).
- [68] CALLEN, H. *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*. 2. ed. New York: John Wiley & Sons, Inc., 1985.
- [69] BOLTZMANN, L. *Lectures on Gas Theory*. New York: Dover Publications, 1995. Traduzido por Stephen G. Brush. Originalmente publicado em duas partes, em alemão (1896 e 1898), sob o título *Vorlesungen über Gästheorie*.
- [70] GIBBS, W. *Elementary Principles in Statistical Mechanics*. New York: Scribner's sons, 1902.
- [71] SHANNON, C. A Mathematical Theory of Communication. *The Bell System Technical Journal*, v. 27, n. 4, p. 623–656, 1948.
- [72] ZIPF, G. *The Psycho-biology of Language*. Routledge & Sons, 1936.
- [73] ZIPF, G. *Human behavior and the principle of least effort: an introduction to human ecology*. Addison-Wesley Press, 1949.
- [74] CANCHO, R.; SOLÉ, R. Least effort and the origins of scaling in human language. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, v. 100, n. 3, p. 788–791, 2003.
- [75] SANTOS, M. R. F. *Aspectos estatísticos da distribuição espacial de palavras em linguagem escrita*. 2014. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal Rural de Pernambuco, Recife, 2014.
- [76] BARBOSA, G. Pequena análise estatística da língua portuguesa: Machado de Assis e Pero Vaz de Caminha, 2006. (Série Edificações do Imaginário).
- [77] GLANSDORFF, P.; PRIGOGINE, I. *Thermodynamic theory of structure, stability and fluctuations*. New York: John Wiley & Sons, Inc., 1971.
- [78] BAEZ, J.; POLLARD, B. Relative entropy in biological systems. *Entropy*, v. 18, n. 2, p. 46, 2016.
- [79] POINCARÉ, H. *Les nouvelles méthodes de la mécanique céleste*. Paris: Gauthier-Villars, 1892.
- [80] GLEICK, J. *Chaos: Making a New Science*. Vinking Penguin Inc., 1987.
- [81] LORENZ, E. N. *The Essence of Chaos*. Seattle: University of Washington Press, 1993.

- [82] DEVANEY, R. *An introduction to chaotic dynamical systems*. Addison-Wesley, 1989.
- [83] MONTEIRO, L. H. A. *Sistemas dinâmicos*. 3a. ed. São Paulo: Editora Livraria da Física.
- [84] LORENZ, E. N. Deterministic Nonperiodic Flow. *Journal of Atmospheric Sciences*, v. 20, p. 130–141, 1963.
- [85] HAMMING, R. W. Error detecting and error correcting codes. *Bell System Technical Journal*, v. 29, p. 147–160, 1950.
- [86] PELTOMÄKI, M.; ALAVA, M. Three- and four-state rock-paper-scissors games with diffusion. *Phys. Rev. E*, v. 78, p. 031906, Sep 2008.
- [87] WANG, W.-X.; LAI, Y.-C.; GREBOGI, C. Effect of epidemic spreading on species coexistence in spatial rock-paper-scissors games. *Phys. Rev. E*, v. 81, p. 046113, Apr 2010.
- [88] SHI, H.; WANG, W.; YANG, R.; LAI, Y. Basins of attraction for species extinction and coexistence in spatial rock-paper-scissors games. *Phys. Rev. E*, v. 81, p. 030901, Mar 2010.
- [89] Grošelj, D.; JENKO, F.; FREY, E. How turbulence regulates biodiversity in systems with cyclic competition. *Phys. Rev. E*, v. 91, p. 033009, Mar 2015.
- [90] SZABÓ, G.; Ariel Sznaider, G. Phase transition and selection in a four-species cyclic predator-prey model. *Phys. Rev. E*, v. 69, p. 031911, Mar 2004.
- [91] SZABÓ, G. Competing associations in six-species predator–prey models. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 38, n. 30, p. 6689, 2005.
- [92] INTOY, B.; PLEIMLING, M. Extinction in four species cyclic competition. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, v. 2013, n. 08, p. P08011, 2013.
- [93] LÜTZ, A. F.; RISAU-GUSMAN, S.; ARENZON, J. J. Intransitivity and coexistence in four species cyclic games. *Journal of Theoretical Biology*, v. 317, p. 286–292, 2013.
- [94] AVELINO, P. P.; BAZEIA, D.; LOSANO, L.; MENEZES, J.; OLIVEIRA, B. F. Junctions and spiral patterns in generalized rock-paper-scissors models. *Phys. Rev. E*, v. 86, p. 036112, Sep 2012.
- [95] BISWAS, S.; LOVELL, B. *Bézier and Splines in Image Processing and Machine Vision*. 1. ed., . Springer-Verlag, 2008.
- [96] HOSHEN, J.; KOPELMAN, R. Percolation and cluster distribution. I. Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm. *Phys. Rev. B*, v. 14, p. 3438–3445, Oct 1976.

- [97] COUTINHO, K.; GOMES, M.; ADHIKARI, S. Robust scaling in fragmentation from $d = 1$ to 5. *Europhysics Letters*, Les Ulis, v. 18, n. 2, p. 119, 1992.
- [98] SALES, T.; GARCIA, J.; JYH, T.; REN, T.; GOMES, M. On the game of life: population and its diversity. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 197, n. 4, p. 604–612, 1993.
- [99] GOMES, M.; SOUZA, F.; ADHIKARI, S. Formation and maintenance of complex systems. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 28, n. 23, p. L613, 1995.
- [100] TSANG, I. R.; TSANG, I. J. Cluster size diversity, percolation, and complex systems. *Physical Review E*, v. 60, n. 3, p. 2684, 1999.
- [101] TSANG, I. J.; TSANG, I. R.; Van Dyck, D. Cluster diversity and entropy on the percolation model: The lattice animal identification algorithm. *Physical Review E*, v. 62, n. 5, p. 6004, 2000.