

Universidade Estadual de Campinas
Instituto de Física Gleb Wataghin

Lucas Dias Fernandes

PADRÕES DE TURING E PROCESSOS DINÂMICOS EM REDES COMPLEXAS

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO APRESEN-
TADA AO INSTITUTO DE FÍSICA GLEB
WATAGHIN DA UNICAMP PARA OBTENÇÃO
DO TÍTULO DE MESTRE EM FÍSICA.

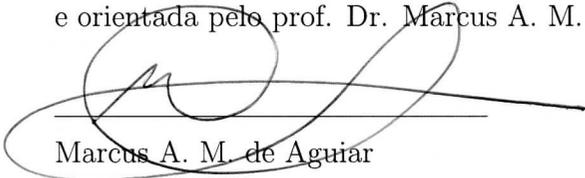
Orientador:

Prof. Dr. Marcus Aloizio Martinez de Aguiar

Departamento de Física da Matéria Condensada

Grupo de Sistemas Dinâmicos

Este exemplar corresponde à versão final da dissertação
de mestrado defendida pelo aluno Lucas Dias Fernandes
e orientada pelo prof. Dr. Marcus A. M. de Aguiar.



Marcus A. M. de Aguiar

CAMPINAS, 2012

**FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA POR
VALKÍRIA SUCCI VICENTE – CRB8/5398 - BIBLIOTECA DO IFGW
UNICAMP**

F391p	<p>Fernandes, Lucas Dias, 1987- Padrões de Turing e processos dinâmicos em redes complexas / Lucas Dias Fernandes. -- Campinas, SP : [s.n.], 2012.</p> <p style="text-align: center;">Orientador: Marcus Aloizio Martinez de Aguiar. Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física “Gleb Wataghin”.</p> <p style="text-align: center;">1. Redes complexas. 2. Padrões de Turing. 3. Sistemas dinâmicos. 4. Ecologia. I. Aguiar, Marcus Aloizio Martinez, 1960- II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Física “Gleb Wataghin”. III. Título.</p>
-------	---

Informações para Biblioteca Digital

Título em inglês: Turing patterns and dynamical processes on complex networks

Palavras-chave em inglês:

Complex networks

Turing patterns

Dynamical systems

Ecology

Titulação: Mestre em Física

Banca Examinadora:

Marcus Aloizio Martinez de Aguiar [Orientador]

Ricardo Egidio de Carvalho

José Antônio Brum

Data da Defesa: 23-03-2012

Programa de Pós-Graduação em: Física



MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE MESTRADO DE **LUCAS DIAS FERNANDES - RA 100750** APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA "GLEB WATAGHIN", DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 23 / 03 / 2012.

COMISSÃO JULGADORA:

Prof. Dr. Marcus Aloizio Martinez de Aguiar - Orientador do Candidato
DFMC/IFGW/UNICAMP

Prof. Dr. Ricardo Egydio de Carvalho
DEMAC/IGCE/UNESP/RIO CLARO - SP

Prof. Dr. José Antônio Brum
DFMC/IFGW/UNICAMP

Agradecimentos

Agradeço, primeiramente, ao professor Marcus Aguiar pelas discussões, pelos seminários, pelas inquietações mútuas, pelos rabiscos no quadro e nas folhas, pela intuição certa nos momentos mais desesperadores, pelo incentivo que me deu durante todo o tempo. Agradeço por ele ser um dos exemplos do profissional que espero me tornar.

Ao Paulo Miúdo e à Carol, por terem colocado na minha cabeça o pouco que eu sei de Biologia e por terem me ajudado a manter os pés no chão, quando minhas pretensões de físico me faziam viajar por outros mundos.

Agradeço aos companheiros de grupo e aos demais amigos do IFGW pelos ótimos encontros das sextas-feiras, pelos pães de queijo com suco, pelos almoços no bandeijão, pelas conversas salvadoras, quando não dava mais pra olhar pro computador, e pelas coxinhas do Jair.

Aos amigos de Campinas, sem os quais tudo teria sido certamente mais difícil. A eles agradeço pelo poker, pelo futebol, pelas picanhas na moradia, pelos almoços de domingo e por todo riso coletivo.

Aos amigos espalhados por esse mundão (Viçosa, Belo Horizonte, Rio de Janeiro, Curitiba, Dublin) por estarem sempre (ou quase sempre) dispostos a ouvir minhas ligações de madrugada e minha conversa fiada na internet. Agradeço por estarem sempre de braços abertos às minhas (constantes) visitas e por serem meus portos seguros nos momentos em que eu precisei chutar o balde.

Agradeço imensamente aos meus pais, David e Nubia, e ao meu irmão, Vitor, por serem meus eternos exemplos de amor incondicional e por me lembrarem o tempo todo que nada na vida é tão difícil que não se possa encontrar um caminho.

Agradeço à Gis que, mesmo longe, esteve presente o tempo inteiro, torcendo comigo nos momentos de expectativa, xingando comigo nos de frustração e abrindo um sorriso (ainda maior que o meu) nos momentos de conquista. Agradeço a ela, acima de tudo, por me mostrar que amor e cumplicidade não ligam nem um pouco para distância.

Agradeço a todos aqueles que, de alguma forma, contribuíram com a minha caminhada até aqui, seja na formação, seja na descontração. A todos vocês, meu muito obrigado!

Agradeço, por fim, ao CNPq e à FAPESP pelo apoio financeiro.

Resumo

Sistemas de reação-difusão podem apresentar, sob certas condições, formação de padrões espaciais heterogêneos estacionários. Chamados padrões de Turing (ou instabilidades de Turing) devido ao trabalho de Alan Turing, sua formulação matemática é importante para o estudo da formação de padrões em geral e desempenha papel central em muitos campos da biologia, tais como ecologia e morfogênese. No presente estudo, focamos no papel exercido pelos padrões de Turing na descrição de distribuições de abundância de espécies de predadores e presas que habitam ambientes fragmentados com estrutura de rede livre de escala, onde as conexões indicam caminhos de dispersão dessas espécies. Para estudar formação de padrões em cadeias tróficas maiores, nós estendemos o modelo de presa-predador original, proposto por Nakao e Mikhailov (Nature Physics, 2010), incluindo pares de presa-predador adicionais. Mostramos que esses sistemas dinâmicos com mais de dois graus de liberdade apresentam não apenas padrões de Turing, mas também transições entre regimes caóticos, sincronizados e estacionários, dependendo dos parâmetros do sistema. Para o caso dos padrões estacionários em uma cadeia trófica com 6 espécies, identificamos distribuições não triviais das presas nos sítios da rede, dependendo da força de acoplamento entre os pares presa-predador, o que sugere que efeitos de competição aparente são importantes nos padrões observados. Nossos resultados sugerem que diferenças nas distribuições de abundância entre fragmentos podem ser, pelo menos em parte, devidos a padrões de Turing auto-organizados, e não necessariamente a heterogeneidades ambientais intrínsecas.

Abstract

Reaction-diffusion systems may lead, under certain conditions, to the formation of steady state heterogeneous spatial patterns. Named Turing patterns (or Turing instabilities) after Alan Turing's work, their mathematical formulation is important for the study of pattern formation in general and play central roles in many fields of biology, such as ecology and morphogenesis. In the present study, we focus on the role of Turing patterns in describing the abundance distribution of species distributed in patches in a scale free network structure, connected by diffusion. In order to study pattern formation in larger trophic food webs, we have extended the original prey-predator model proposed by Nakao and Mikhailov (Nature Physics, 2010) by including additional prey-predator pairs. We observed not only Turing patterns, but also transitions between chaotic, synchronized and stationary regimes, depending on the system parameters. In the case of stationary patterns in trophic webs with 6 species, we identified non trivial prey distributions in the networks nodes, depending on the coupling strength between prey-predator pairs, suggesting that effects of apparent competition are important in the observed patterns. Our results suggest that differences in abundance distribution among patches may be, at least in part, due to self organized Turing patterns, and not necessarily to intrinsic environmental heterogeneities.

Sumário

Agradecimentos	iv
Resumo	v
Abstract	vi
1 Introdução	1
2 Padrões de Turing em Meios Contínuos	4
2.1 Considerações iniciais	4
2.2 Análise de estabilidade linear e formação dos padrões	6
3 Redes Complexas	14
3.1 Introdução	14
3.2 Alguns resultados empíricos	18
3.3 Modelos de redes complexas	20
3.3.1 Rede aleatória - Modelo de Erdős e Rényi	20
3.3.2 Rede mundo pequeno - Modelo de Watts e Strogatz	23
3.3.3 Rede livre de escala - Modelo de Barabási e Albert	25
4 Padrões de Turing em Redes Complexas	29
4.1 Formação dos padrões em meios discretos	29
4.2 Modelo ecológico: 2 espécies	32
5 Padrões de Turing em Redes Complexas: modelo estendido	42
5.1 Estendendo o modelo	42
5.2 Modelo ecológico: 4 espécies	47
5.3 Modelo ecológico: 6 espécies	56
5.4 Considerações adicionais	59
6 Conclusões	63

Capítulo 1

Introdução

Em 1952, o matemático Alan Turing estava interessado no problema da morfogênese. A morfogênese é o processo em que um conjunto inicial de células embrionárias sofre diferenciação, vindo a formar os diversos tecidos, com formas e funções bastante variadas, que compõem um organismo. A pergunta feita era: o que explicava essa diferenciação? Certamente, a “receita” para diferenciação dos tecidos, no desenvolvimento embrionário de cada indivíduo, está codificada no DNA, mas a explicação que Turing buscava era outra: a partir de uma receita para a diferenciação presente no DNA, quais são os mecanismos envolvidos na aplicação dessa receita?

Turing, que se tornou famoso, devido a contribuições notáveis em Matemática e Computação, encontrou uma descrição fenomenológica bastante elegante para o problema da morfogênese. Em seu trabalho a respeito do tema [1], ele foi capaz de mostrar que, sob certas condições, dois reagentes que interagem localmente e difundem num meio homogêneo podem vir a formar padrões de concentração espaciais heterogêneos.

A idéia era simples. Suponha que nesse meio embrionário inicial estivessem presentes duas substâncias, que chamaremos de morfógenos, que pudessem reagir e difundir nesse meio. Suponha também que a resposta das células embrionárias a diferentes concentrações desses morfógenos leve à diferenciação nos várias possíveis tecidos. Nesse cenário, um mecanismo que conseguisse gerar padrões estacionários e heterogêneos desses morfógenos seria capaz de induzir a diferenciação dos tecidos.

O fato é que, por mais elegante tenha sido a explicação teórica, os tais morfógenos não foram encontrados, deixando em aberto a questão da validade desse mecanismo para explicar os padrões de diferenciação na morfogênese. Ainda assim, o mecanismo de Turing, por vezes chamados de instabilidade forçada por difusão, chamou atenção de muitos pesquisadores e acabou se tornando um mecanismo muito importante no estudo de formação de padrões em sistemas fora do equilíbrio. Uma coisa notável nesse mecanismo é que a difusão dos reagentes, que geralmente exerce o papel de força homogeneizadora do sistema, é o elemento chave para

a formação dos padrões heterogêneos finais.

Devido à generalidade do desenvolvimento inicialmente proposto por Turing surgiram inúmeros trabalhos teóricos, nos anos que se seguiram, utilizando o mecanismo de instabilidade forçada por difusão para explicar formação de padrões em várias áreas distintas, por exemplo, formação de padrões de peles de animais [2, 3], padrões ecológicos em sistemas de interação entre espécies [4, 5] e padrões de concentração em sistemas de reagentes químicos [6] (apesar de não ter esse foco, o sistema proposto é interessante para estudo de formação de padrões). Em [7] há uma comparação entre alguns modelos nos quais padrões de Turing podem ocorrer.

Apesar do grande número de trabalhos focando investigação analítica e numérica, confirmação experimental da possibilidade de padrões estacionários heterogêneos originados pelo mecanismo de Turing só foi feita no final da década de 80 (veja [3] para referências). Nas duas últimas décadas, diversos trabalhos surgiram mostrando evidências empíricas do mecanismo de Turing, por exemplo, em padrões de listras de peixes [8], sistemas tridimensionais de reações químicas [9] e sistemas de desenvolvimento de organismos unicelulares [10].

No que tange a padrões ecológicos de distribuição de espécies, a importância desse mecanismo é mais difícil de ser avaliada. Primeiro, pela dificuldade empírica de se obter dados de distribuições de espécies e, segundo, pelo fato de que as condições que devem ser impostas sobre o meio, para testar se o padrão corresponde de fato ao mecanismo de Turing, dificilmente podem ser controladas. Ainda assim, alguns trabalhos tem apontando evidências de formação de padrões de Turing em ambientes reais com condições adversas [11].

Até o momento, grande parte dos modelos havia focado na formação de padrões de Turing em meios contínuos ou meios discretos com poucos sítios. Buscando uma nova abordagem, Nakao e Mikhailov propuseram, em 2011, um modelo presa-predador para estudo da formação desses padrões em redes complexas relativamente grandes [12].

A teoria de redes complexas tem apresentado, nos últimos 10 anos, um desenvolvimento muito grande, apoiado principalmente pela disponibilidade de novos e mais precisos bancos de dados referentes a redes reais e pelo desenvolvimento de poder computacional para tratamento desses dados. Os resultados obtidos acerca da estrutura e dinâmica dessas redes tem sido aplicado em diversos estudos na Física, na Biologia e na Sociologia [13, 14].

Em Ecologia, a maioria dos trabalhos que faz uso da teoria de redes complexas a utiliza para descrição e análise de estrutura de redes de interação entre espécies. Há alguns trabalhos, entretanto, que utilizam esse arcabouço teórico para analisar redes espaciais, onde os nós da rede representam sítios geográficos nos quais as espécies estão distribuídas [15]. A idéia da descrição do espaço na forma de redes não é nova em Ecologia Espacial, todavia, dados os recentes avanços na teoria de redes, essa tem ganhado novas abordagens e ferramentas para análise. Tal descrição é particularmente útil no estudo de habitats geograficamente isolados (como lagos) ou ambientes fragmentados [16].

Modelos do tipo presa-predador são muito importantes para se entender vários aspectos da interação entre duas espécies. A maioria dos trabalhos nessa área considera apenas a interação entre uma espécie de presa e uma espécie de predador, no entanto, muitas das cadeias tróficas reais são compostas por inúmeras espécies, de modo que um modelo que descreva a evolução de apenas duas pode deixar de lado aspectos ecológicos importantes. Tomando o trabalho de Nakao e Mikhailov [12] como ponto de partida, é possível generalizar seu modelo presa-predador incluindo mais espécies e construindo uma cadeia trófica maior, fazendo assim com que interpretações interessantes dos resultados, do ponto de vista ecológico, sejam possíveis.

Na presente dissertação apresentamos os resultados de nossos estudos acerca da formação de padrões de Turing em Redes Complexas, considerando sistemas com mais de 2 variáveis dinâmicas. Tais variáveis podem tanto representar espécies, num problema ecologicamente motivado, como variáveis dinâmicas em um problema mais geral. Nosso foco é estudar quais são os elementos mais importantes da formação de tais padrões em redes e que interpretações podemos dar a esses, em termos de aspectos de formação de padrões naturais reais.

O texto que segue está dividido da seguinte forma: no capítulo 2, revisamos os aspectos mais importantes da formulação clássica da formação dos padrões de Turing em meios contínuos. Nesse capítulo definimos os sistemas de reação-difusão com que trabalhamos e derivamos as condições necessárias para que o padrão se forme. Damos também um exemplo simples como forma de clarificar os conceitos trabalhados. No capítulo 3, fornecemos uma breve revisão sobre teoria de redes complexas. Aqui, mostramos alguns dos conceitos mais importantes para se caracterizar redes complexas, fornecemos alguns resultados recentes a respeito de redes reais e discutimos os três modelos de redes mais comumente utilizados: a rede aleatória, a rede mundo-pequeno e a rede livre de escala. No capítulo 4, mostramos como o desenvolvimento feito para formação de padrões pode ser aplicado quando trabalhamos não mais com meios contínuos, mas com meios discretos (redes). Desenvolvemos as condições para a formação de padrões em redes em analogia direta com as condições expostas no capítulo 2 e reproduzimos os principais resultados do artigo de Nakao e Mikhailov [12], que foi base desse trabalho. No capítulo 5, apresentamos os resultados obtidos para o estudo de formação de padrões de Turing em sistemas com mais de 3 variáveis dinâmicas. Apresentamos os sistemas que trabalhamos, analisando a utilidade dos mesmos para formação de padrões de Turing e, no modelo ecologicamente motivado, apresentamos resultados de padrões não-triviais de abundância de espécies. Por fim, o último capítulo apresenta as conclusões e algumas discussões a respeito dos resultados obtidos.

Capítulo 2

Padrões de Turing em Meios Contínuos

2.1 Considerações iniciais

Esse capítulo tem por objetivo estabelecer o desenvolvimento básico da teoria de formação de padrões de Turing em sistemas de reação-difusão, considerando tempo e espaço contínuos. Apesar de esse não ser o foco do trabalho que desenvolvemos, boa parte da análise para o caso contínuo é bastante similar à análise para o caso discreto, além do fato de que a familiaridade com os conceitos aqui trabalhados trará um melhor entendimento das escolhas feitas nos desenvolvimentos posteriores. A maior parte do texto e figuras apresentadas nesse capítulo são adaptações do excelente livro de J.D Murray [3], o qual apresenta também uma quantidade considerável de referências adicionais sobre o tema.

Pode-se dizer que sistemas de reação-difusão compreendem, por si só, um campo de estudo, tendo aplicações em diversas áreas, como Física, Química, Biologia e Matemática. Nos preocuparemos aqui com sistemas de reação-difusão com dois graus de liberdade, assumindo a forma genérica:

$$\begin{aligned}\frac{\partial A}{\partial t} &= F(A, B) + D_A \nabla^2 A \\ \frac{\partial B}{\partial t} &= G(A, B) + D_B \nabla^2 B,\end{aligned}\tag{2.1}$$

onde $F(A, B)$ e $G(A, B)$ são as funções de interação, com formas que dependem da natureza da interação entre A e B no problema que se pretende modelar. Para as aplicações que concernem a formação de padrões, tais funções são sempre não-lineares. As variáveis $A(\vec{r}, t)$ e $B(\vec{r}, t)$ podem representar, por exemplo, espécies interagentes num problema ecológico ou reagentes químicos, sendo todas as possíveis interpretações também, obviamente, dependentes da natureza do problema em questão. Por ora, na tentativa de um desenvolvimento mais

geral, nos referiremos a elas apenas como variáveis dinâmicas. Por fim, D_A e D_B são as constantes de difusão que, num problema bem geral, podem variar tanto de acordo com a posição quanto com o valor das variáveis dinâmicas num dado ponto. Por uma questão de simplicidade, utilizaremos valores constantes para D_A e D_B .

É importante notar que se o sistema

$$\begin{aligned}\frac{dA}{dt} &= F(A, B) \\ \frac{dB}{dt} &= G(A, B)\end{aligned}$$

possui uma solução de equilíbrio (\bar{A}, \bar{B}) (dada pela solução de $F(\bar{A}, \bar{B}) = G(\bar{A}, \bar{B}) = 0$), então esta será independente de \vec{r} e, portanto, será também solução de 2.1. Suponhamos que esse estado homogêneo (\bar{A}, \bar{B}) seja estável na ausência de difusão. Se esse estado se torna instável ao considerarmos difusão das variáveis dinâmicas, conforme a equação 2.1, então pequenas perturbações espaciais em relação a esse estado tendem a crescer. Essa instabilidade gerada pelo processo difusivo é a base do mecanismo de formação dos padrões de Turing.

Frequentemente na análise de sistemas dinâmicos, é comum optarmos por trabalhar com formas simplificadas e adimensionais das equações. De maneira geral, sistemas de reação-difusão podem, através de um conjunto adequado de adimensionalizações e reescalas, ser escritos da seguinte forma:

$$\begin{aligned}u_t &= \gamma f(u, v) + \nabla^2 u \\ v_t &= \gamma g(u, v) + d\nabla^2 v,\end{aligned}\tag{2.2}$$

onde todas as quantidades acima são adimensionais e o subscrito t denota diferenciação em relação ao tempo (um tempo adimensional, nesse caso). Essa forma é particularmente interessante por explicitar os parâmetros d , que se refere à razão entre as constantes de difusão, e γ , que pode ser relacionado a escalas de comprimento do problema. Além da simplificação dos cálculos, a forma adimensional apresenta algumas vantagens no que tange a interpretação dos resultados. Tais interpretações serão tratadas ao longo do desenvolvimento formal.

Um determinado sistema de equações apresentará formação de padrões dependendo crucialmente das formas das funções $f(u, v)$ e $g(u, v)$ próximas ao estado estacionário uniforme, bem como dos valores dos parâmetros γ e d . Em especial, é necessário que as quantidades u e v tenham taxas de difusão diferentes ($d \neq 1$) e que uma das quantidades apresente um termo auto-catalítico na dinâmica (ou seja, pequenos aumentos dessa quantidade, em relação ao estado homogêneo, aumentam a produção dessa própria quantidade), a que muitas vezes se refere como ativação local.

Estabeleçamos, pois, as condições para a formação de padrões de Turing.

2.2 Análise de estabilidade linear e formação dos padrões

Como dissemos anteriormente, a partir de um sistema de reação-difusão, padrões de Turing podem vir a ser formados se um ponto de equilíbrio homogêneo desse sistema, que é estável (considerando pequenas perturbações) na ausência de difusão, passar a ser instável a pequenas perturbações espaciais, uma vez sujeitas as variáveis dinâmicas ao processo difusivo. Aqui nota-se uma das razões para o grande interesse nesse tipo de padrões: é a difusão, que, na maioria das vezes é tida como um processo homogeneizador, a responsável pela formação da heterogeneidade espacial sobre o sistema.

A formulação matemática do problema exige que, além do sistema geral de equações 2.2, tenhamos condições iniciais e de contorno. Consideramos aqui condições iniciais dadas e fluxo nulo na fronteira do domínio. Definimos assim o seguinte problema:

$$\begin{aligned} u_t &= \gamma f(u, v) + \nabla^2 u \\ v_t &= \gamma g(u, v) + d\nabla^2 v \\ (\hat{n} \cdot \nabla) \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} &= 0, \quad \text{para } \vec{r} \text{ em } \partial B \\ u(\vec{r}, 0) \text{ e } v(\vec{r}, 0) &\text{ dados} \end{aligned} \tag{2.3}$$

onde ∂B é a fronteira fechada do domínio B e \hat{n} é o vetor unitário que aponta para fora na fronteira de B . A razão para escolher fluxo nulo na fronteira é que nosso foco é a formação do padrão através da auto-organização das variáveis dinâmicas, sem influência externa. Se trabalhássemos com condições de contorno não nulas, o padrão no sistema poderia ser formado com influência direta dessas condições.

Consideremos inicialmente o sistema na ausência de difusão:

$$\begin{aligned} u_t &= \gamma f(u, v) \\ v_t &= \gamma g(u, v) \end{aligned} \tag{2.4}$$

O estado estacionário homogêneo, ou ponto de equilíbrio, (\bar{u}, \bar{v}) , relevante, para qualquer aplicação, é a solução positiva de:

$$\begin{aligned} f(\bar{u}, \bar{v}) &= 0 \\ g(\bar{u}, \bar{v}) &= 0 \end{aligned}$$

Vale notar que sistemas de reação-difusão mais complexos podem vir a apresentar mais de um estado estacionário positivo. Isso introduz bastante complexidade ao problema, bem como aos padrões formados, no entanto, optamos por tratar apenas do caso com apenas um estado estacionário positivo.

Estabelecendo pequenos deslocamentos em relação ao ponto fixo (\bar{u}, \bar{v}) , definimos:

$$\vec{w} = \begin{pmatrix} \delta u \\ \delta v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u - \bar{u} \\ v - \bar{v} \end{pmatrix}$$

Assim, aplicamos u e v conforme definidos acima nas equações 2.4 e, tomando a aproximação em primeira ordem das perturbações, temos:

$$\begin{aligned} \frac{d(\delta u)}{dt} &= \gamma \left(\frac{\partial f}{\partial u} \right)_{(\bar{u}, \bar{v})} \delta u + \gamma \left(\frac{\partial f}{\partial v} \right)_{(\bar{u}, \bar{v})} \delta v \\ \frac{d(\delta v)}{dt} &= \gamma \left(\frac{\partial g}{\partial u} \right)_{(\bar{u}, \bar{v})} \delta u + \gamma \left(\frac{\partial g}{\partial v} \right)_{(\bar{u}, \bar{v})} \delta v \end{aligned}$$

ou, em forma matricial:

$$\vec{w}_t = \gamma A \vec{w}, \quad A = \begin{pmatrix} f_u & f_v \\ g_u & g_v \end{pmatrix}_{(\bar{u}, \bar{v})} \quad (2.5)$$

onde os subscritos, novamente, indicam diferenciação em relação às variáveis. As derivadas parciais são sempre avaliadas no ponto fixo (\bar{u}, \bar{v}) , de modo que, no desenvolvimento que segue, omitiremos essa indicação explícita. A matriz γA é conhecida como matriz *Jacobiana* do sistema 2.4 ou, no contexto ecológico, matriz de *Comunidade*.

Procuramos soluções do tipo:

$$\vec{w} \propto e^{\lambda t}$$

onde λ refere-se aos autovalores da matriz γA . Por essa forma, fica fácil ver que se todos os autovalores da matriz γA apresentarem $\text{Re } \lambda < 0$, então o ponto de equilíbrio será linearmente estável (pra sermos mais precisos, assintoticamente estável), dado que as perturbações em relação ao ponto fixo tenderão a zero ($\vec{w} \rightarrow 0$, se $t \rightarrow \infty$).

O polinômio característico de γA é dado por:

$$\det(\gamma A - \lambda I) \implies \lambda^2 - \gamma(f_u + g_v)\lambda + \gamma^2(f_u g_v - f_v g_u) \quad (2.6)$$

Assim, tomando as raízes de 2.6, obtemos os autovalores:

$$\lambda_{\pm} = \frac{1}{2}\gamma \left[(f_u + g_v) \pm \sqrt{(f_u + g_v)^2 - 4(f_u g_v - f_v g_u)} \right] \quad (2.7)$$

Para que ambos os autovalores tenham $\text{Re } \lambda < 0$, devemos ter:

$$\text{tr}(A) = f_u + g_v < 0 \quad (2.8)$$

$$\det(A) = f_u g_v - f_v g_u > 0 \quad (2.9)$$

Uma vez que o ponto de equilíbrio (\bar{u}, \bar{v}) é função dos parâmetros presentes nas funções

f e g , as equações 2.8 e 2.9 estabelecem o primeiro conjunto de restrições sobre esses.

Tomemos agora o sistema completo, 2.3, considerando a difusão das variáveis dinâmicas. Novamente, fazemos uma linearização das equações em torno do ponto (\bar{u}, \bar{v}) e obtemos:

$$\vec{w}_t = \gamma A \vec{w} + D \nabla^2 \vec{w}, \quad D = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & d \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

Note que, devido à presença do operador laplaciano em 2.10, as soluções \vec{w} dessa equação dependem tanto do tempo quanto da posição. O truque para resolver essa equação é procurar soluções da forma:

$$\vec{w}(\vec{r}, t) = \sum_k c_k e^{\lambda t} \vec{W}_k(\vec{r}), \quad (2.11)$$

onde a dependência temporal é novamente dada por $e^{\lambda t}$ e as funções $\vec{W}_k(\vec{r})$, que representam a dependência espacial, são soluções do seguinte problema de autovalor:

$$\nabla^2 \vec{W}_k + k^2 \vec{W}_k = 0, \quad (\hat{n} \cdot \nabla) \vec{W}_k = 0 \quad \text{para } \vec{r} \text{ em } \partial B \quad (2.12)$$

Ora, mas as soluções da equação 2.12 são ondas planas, sujeitas às condições de contorno do problema original! Dessa forma, o que fazemos ao escrever $\vec{w}(\vec{r}, t)$ conforme 2.11 é considerar uma superposição de ondas planas (permitida pela a linearidade do problema), sendo os coeficientes c_k obtidos por análise de Fourier a partir das condições iniciais dadas (pode-se também pensar que sendo \vec{W}_k autofunções do operador hermitiano ∇^2 , elas formam uma base para o espaço em questão, de modo que a perturbação \vec{w} pode ser expandida nessa base). O autovalor k é, por vezes, chamado *número de onda* e $1/k$ é proporcional ao *comprimento de onda*, ω .

Para determinação da estabilidade do ponto (\bar{u}, \bar{v}) estamos interessados no fator λ que determina a dependência temporal. Substituindo 2.11 em 2.10 e cancelando os termos $e^{\lambda t}$, temos:

$$\begin{aligned} \lambda \vec{W}_k &= \gamma A \vec{W}_k + D \nabla^2 \vec{W}_k \\ &= \gamma A \vec{W}_k - D k^2 \vec{W}_k \\ \implies (\lambda I - \gamma A + k^2 D) \vec{W}_k &= 0 \end{aligned} \quad (2.13)$$

Exigindo soluções não-triviais \vec{W}_k para o sistema homogêneo 2.13, temos então que λ será dado pelas raízes do polinômio característico:

$$\det(\lambda I - \gamma A + k^2 D) = \lambda^2 + \lambda[k^2(1 + d) - \gamma(f_u + g_v)] + h(k^2) \quad (2.14)$$

onde:

$$h(k^2) = dk^4 - \gamma(df_u + g_v)k^2 + \gamma^2 \det(A)$$

Temos, portanto, que as raízes de 2.14, serão:

$$\lambda_{\pm} = \frac{1}{2} \left\{ -[k^2(1+d) - \gamma(f_u + g_v)] \pm \sqrt{[k^2(1+d) - \gamma(f_u + g_v)]^2 - 4h(k^2)} \right\} \quad (2.15)$$

Para que o ponto (\bar{u}, \bar{v}) seja instável a perturbações espaciais, devemos ter, para pelo menos um dos λ , $\text{Re } \lambda(k) > 0$, para algum $k \neq 0$. Todavia, como $(f_u + g_v) < 0$ (dada a condição 2.8 que derivamos anteriormente), então $[k^2(1+d) - \gamma(f_u + g_v)] > 0$. Assim, a única forma de que se tenha $\text{Re } \lambda(k) > 0$ é se tivermos $h(k^2) < 0$, para algum $k \neq 0$.

Observando a expressão de $h(k^2)$, uma vez que a condição 2.9 impõe $\det(A) > 0$, vemos que a única possibilidade de que $h(k^2)$ seja negativo é que se tenha $(df_u + g_v) > 0$. Essa nova condição, em conjunto com a condição $(f_u + g_v) < 0$, impõe que se tenha $d \neq 1$ (caso contrário, haveria uma contradição) e que f_u e g_v (aplicados no ponto de equilíbrio) tenham sinais opostos. Ressaltamos, portanto, uma condição adicional obtida para a formação dos padrões:

$$df_u + g_v > 0 \quad (2.16)$$

É fácil notar, dada a presença dos outros termos em $h(k^2)$, que a condição 2.16 não é suficiente para que se tenha $h(k^2) < 0$. Para determinar o ponto mínimo de h , fazemos:

$$\frac{dh}{d(k^2)} = 2dk^2 - \gamma(df_u + g_v) = 0 \implies k_c^2 = \gamma \frac{(df_u + g_v)}{2d}$$

onde, k_c^2 é o valor de k^2 no qual a função $h(k^2)$ é mínima. O ponto mínimo é dado, portanto, por:

$$h_{min} = \gamma^2 \left[\det(A) - \frac{(df_u + g_v)^2}{4d} \right]$$

Dessa forma, da condição de que $h(k^2) < 0$ para algum valor $k^2 \neq 0$, obtemos mais uma condição sobre os parâmetros:

$$\frac{(df_u + g_v)^2}{4d} > \det(A) \quad (2.17)$$

Vemos aqui que o valor de h_{min} depende também do parâmetro d . Podemos estabelecer o valor crítico do parâmetro d a partir da condição $h_{min} = 0$. Esse valor crítico marca a transição na mudança de sinal do mínimo da função h . Sendo d_c o valor crítico de d nessa transição, esse pode ser obtido pela raiz positiva da equação:

$$\det(A) = \frac{(d_c f_u + g_v)^2}{4d_c} \implies d_c^2 f_u^2 + 2(2f_v g_u - f_u g_v)d_c + g_v^2 = 0$$

Na figura 2.1 temos as variações típicas de h e $\text{Re } \lambda$ como funções de k^2 para diferentes

intervalos de variação de d .

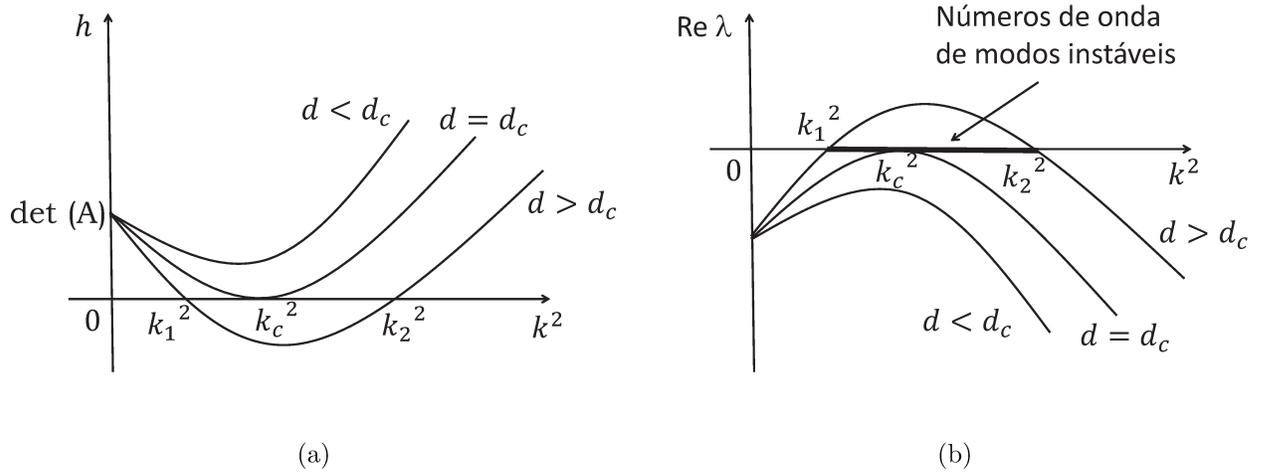


Figura 2.1: Variações típicas de h e de $\text{Re } \lambda$ (para o maior autovalor λ) como funções de k^2 para diferentes intervalos de variação de d . Figura adaptada de [3].

Pela figura 2.1(a) fica fácil ver como se dá a mudança do sinal de h . Para valores de d maiores que o valor crítico, todos os valores de k^2 que correspondem a valores de h menores que zero, correspondem, como se vê na figura 2.1(b), a valores de $\text{Re } \lambda$ maiores que zero, ou seja, esses são os números de onda que determinam os modos instáveis. Como esses modos instáveis apresentam $\text{Re } \lambda > 0$, enquanto que para os outros modos se tem $\text{Re } \lambda < 0$, esses são preponderantes para a formação do padrão, uma vez que, para tempos longos, se tem:

$$\vec{w}(\vec{r}, t) = \sum_k c_k e^{\lambda(k^2)t} \vec{W}_k(\vec{r}) \Rightarrow \vec{w}(\vec{r}, t) \sim \sum_{k_1}^{k_2} c_k e^{\lambda(k^2)t} \vec{W}_k(\vec{r}), \quad (2.18)$$

em que os valores de k_1^2 e k_2^2 são obtidos através de $h(k^2) = 0$ e são dados por:

$$\begin{aligned} k_1^2 &= \frac{\gamma}{2d} \left[(df_u + g_v) - \sqrt{(df_u + g_v)^2 - 4d(\det A)} \right] \\ k_2^2 &= \frac{\gamma}{2d} \left[(df_u + g_v) + \sqrt{(df_u + g_v)^2 - 4d(\det A)} \right] \end{aligned} \quad (2.19)$$

Vale aqui ressaltar que quando se trabalha com domínios finitos, o conjunto dos autovalores da equação 2.12 é discreto e não contínuo. Dessa forma, em vez de ter um contínuo de números de onda representando modos instáveis, como na figura 2.1, teremos um conjunto de pontos que representam tais modos. Além disso, nesse caso, é possível que o valor crítico de d , para o qual aparece o primeiro modo instável, seja ligeiramente maior que o calculado para o caso contínuo.

Por fim, é importante lembrar que, por mais que os termos na equação 2.18 pareçam divergir para tempos longos, a expressão das perturbações nessa forma só vale para valores

pequenos, no limite em que é válida a análise linear. Para tempos longos, as perturbações são limitadas pelos termos não-lineares nas equações da dinâmica e acabam por formar os padrões heterogêneos propriamente ditos. Para que isso seja verdade, uma premissa básica do modelo é que exista um conjunto limitado, considerando valores positivos de u e v , ao qual as soluções de 2.3 estejam confinadas.

Nesse ponto, é interessante resolver um exemplo simples para mostrar como se dá a formação do padrão de Turing. Tomemos o seguinte sistema reação-difusão unidimensional, cujas equações foram propostas por Schnakenberg, em 1979, para estudar oscilações químicas (veja referências em [3, 6, 17]):

$$\begin{aligned}\frac{du}{dt} &= \gamma f(u, v) + u_{xx} = \gamma(a - u + u^2v) + \frac{d^2u}{dx^2} \\ \frac{dv}{dt} &= \gamma g(u, v) + dv_{xx} = \gamma(b - u^2v) + d\frac{d^2v}{dx^2},\end{aligned}\tag{2.20}$$

considerando o domínio $x \in (0, p)$, com $p > 0$, e fluxo nulo na fronteira.

O estado homogêneo positivo, (\bar{u}, \bar{v}) , obtido por $f(\bar{u}, \bar{v}) = g(\bar{u}, \bar{v}) = 0$ é dado por:

$$\bar{u} = a + b, \quad \bar{v} = \frac{b}{(a + b)^2}, \quad b > 0, \quad a + b > 0\tag{2.21}$$

e as derivadas parciais, avaliadas no estado homogêneo, são:

$$\begin{aligned}f_u &= \frac{b - a}{a + b}, & f_v &= (a + b)^2 \\ g_u &= \frac{-2b}{a + b}, & g_v &= -(a + b)^2\end{aligned}\tag{2.22}$$

Como mostrado anteriormente, nos valem do problema de autovalor:

$$\frac{d^2\vec{W}}{dx^2} + k^2\vec{W} = 0,$$

que tem soluções dadas por:

$$\vec{W}_n(x) = \vec{A}_n \cos(n\pi x/p), \quad n = \pm 1, \pm 2, \dots\tag{2.23}$$

onde \vec{A}_n são constantes dependentes das perturbações iniciais e os autovalores são dados pelos valores discretos $k = n\pi/p$. Vemos assim que, se as condições 2.8, 2.9, 2.16 e 2.17 são atendidas e existe pelo menos um dos autovalores dentro do intervalo definido por 2.19, então a autofunção (ou modo) correspondente a esse autovalor é linearmente instável.

Nesse ponto, vale notar algo interessante. Se reescrevemos o intervalo definido por 2.19,

temos:

$$\gamma L(a, b, d) = k_1^2 < k^2 = \left(\frac{n\pi}{p}\right)^2 < k_2^2 = \gamma M(a, b, d), \quad (2.24)$$

onde $L(a, b, d)$ e $M(a, b, d)$ são obtidos substituindo 2.22 em 2.19.

Aqui a escala, definida por γ , tem um papel muito importante: se γ for muito pequeno, de modo que nenhum dos autovalores permitidos se encontre no intervalo dado por 2.24, então todos os modos são estáveis e as soluções do sistema dinâmico tenderão sempre ao estado homogêneo.

Suponhamos que o valor de γ seja ajustado de modo que apenas o autovalor correspondente a $n = 1$ se encontre dentro do intervalo dado por 2.24. Assim, o único modo instável é $\cos(\pi x/p)$ e as perturbações crescem com (veja equação 2.18):

$$\vec{w}(x, t) \sim \vec{C}_1 e^{\lambda\left(\frac{\pi^2}{p^2}\right)t} \cos\left(\frac{\pi x}{p}\right) \quad (2.25)$$

onde λ é dado por 2.15, sendo f_u , f_v , g_u e g_v dados por 2.22 e $k^2 = \frac{\pi^2}{p^2}$. A constante \vec{C}_1 é, como já mencionado, determinada através das condições iniciais. Só para ter uma idéia do que ocorre, tomemos $\vec{C}_1 = (\epsilon, \epsilon)$, sendo ϵ um valor pequeno. Da definição de \vec{w} , temos que a variável u é dada por:

$$u(x, t) \sim \bar{u} + \epsilon e^{\lambda\left(\frac{\pi^2}{p^2}\right)t} \cos\left(\frac{\pi x}{p}\right) \quad (2.26)$$

A figura 2.2(a) ilustra o que ocorre com a variável dinâmica u .

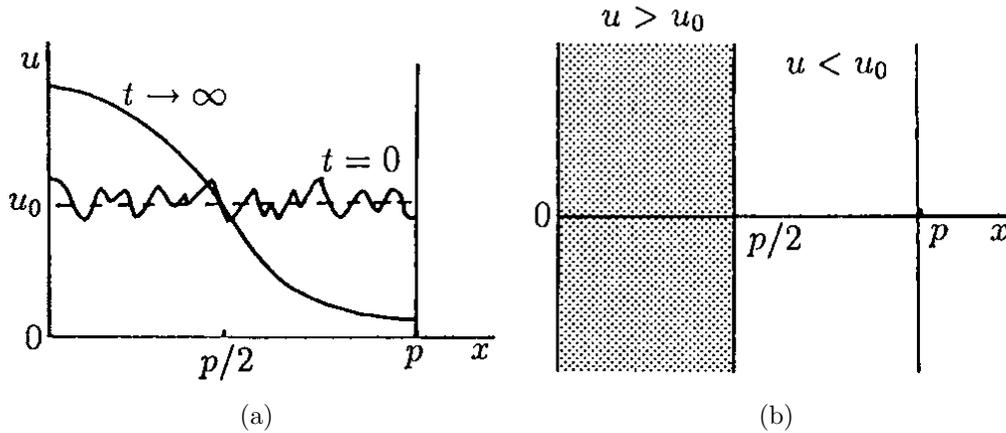


Figura 2.2: Em (a), ilustração representativa do padrão formado para tempos longos a partir de pequenas perturbações em relação ao estado estacionário. Em (b), representação do padrão em regiões de alta concentração de u (acima do valor estacionário), representada como região escura, e baixa concentração de u (abaixo do valor estacionário), representada como região clara. Aqui usa-se u_0 para o valor estacionário em vez de \bar{u} . As figuras foram retiradas de [3].

A partir de pequenas perturbações em relação ao estado estacionário, o padrão começa a se formar, tomando a forma do único modo instável, que é $\cos(\pi x/p)$ (as amplitudes dos

demais modos, que são estáveis, tendem a zero). Daí, para tempos muito longos, forma-se um padrão heterogêneo no intervalo $(0, p)$, que não difere muito da forma do cosseno.

Outra maneira particularmente interessante de se representar o padrão formado é da forma mostrada na figura 2.2(b). Aqui, a região escura representa concentração da quantidade u acima do valor estacionário e a região clara, abaixo do valor estacionário.

Vemos dessa forma, que a análise linear determina as condições que os parâmetros do problema devem satisfazer para que haja a formação dos padrões, além de, para muitos dos casos, ser capaz de estimar a forma final do padrão. Os casos de padrões formados em domínios bi e tridimensionais podem ser facilmente generalizados, embora a análise linear não seja tão eficaz em estimar os padrões formados. Mesmo assim, essa ainda serve como um guia importante para se ter uma idéia da variedade de padrões possíveis, o que constitui uma predição teórica importante em muitos estudos de biologia do desenvolvimento.

Capítulo 3

Redes Complexas

3.1 Introdução

Nesse capítulo, apresentamos uma introdução à teoria de redes complexas, mostrando alguns problemas que fazem uso dessas ferramentas, medidas estruturais importantes e os modelos de construção mais comumente utilizados. Não pretendemos aqui fazer uma apresentação completa de todos os resultados, o que certamente fugiria ao escopo desse trabalho, mas construir uma referência rápida para vários conceitos que serão importantes nas discussões que seguem. Texto e figuras presentes nesse capítulo foram inspirados ou adaptados das referências [13] e [14], as quais indicamos fortemente para o leitor que queira se aprofundar no assunto.

O que chamamos de rede complexa é o que é comum se definir em Matemática ou em Computação como *grafo*. Grafos nada mais são do que abstrações matemáticas para um problema com elementos interagentes. Dessa forma, para se definir um grafo são necessários dois conjuntos: um conjunto de nós (ou vértices) e um conjunto de links (ou conexões). Os nós representam os elementos do problema original, que de, alguma forma, devem ser individualizados, podendo representar moléculas, indivíduos, setores de uma empresa, sítios espaciais, dentre uma infinidade de outras possibilidades que dependem, obviamente, da natureza do problema em questão. Os links representam alguma forma de interação entre os elementos e também dependem da natureza do problema.

A utilização de grafos para resolução de problemas em Física e Matemática não é algo novo. É comum se referir ao início da teoria de grafos com a resolução, em 1736, por Leonard Euler, do *problema das sete pontes de Königsberg* [18]. Em Física, em especial em Mecânica Estatística, redes unidimensionais ou reticulados bidimensionais, já vem sendo utilizados há um bom tempo em modelos focando os mais diversos tipos de problemas. O adjetivo “complexas” usado para se referir às redes que aqui tratamos tem sido utilizado para se estabelecer uma distinção entre a estrutura não-trivial de ligações dessas em relação

à topologia regular dos reticulados e redes unidimensionais.

Uma das razões para o crescente aumento de interesse em problemas envolvendo redes complexas nos últimos anos é a disponibilidade de novos bancos de dados a respeito de estruturas de redes reais, em contextos muito diversos, como biologia, sociologia e economia, por exemplo. Tais bancos de dados, possíveis graças a inúmeros avanços na área de tecnologia de informação, tem fornecido uma base empírica nunca antes alcançada, tanto em termos de precisão quanto em termos de quantidade de dados, possibilitando muitos avanços nesse campo.

A maneira mais usual de representar a estrutura de ligações de uma rede complexa com N nós é através da *Matriz de Adjacência*, $A = \{A_{ij}\}$. Essa é uma matriz $N \times N$ em que $A_{ij} = 1$ se o nó i está relacionado com o nó j e $A_{ij} = 0$ se esses nós não estão relacionados. Note que estando o nó i relacionado com o nó j , não é necessário que j também esteja relacionado com i . Nesse caso, temos o que chamamos de um grafo direcionado, uma vez que há uma “direção” para a interação entre os nós. No caso em que a presença de um link indica sempre uma interação mútua, temos um grafo não-direcionado e a matriz de adjacência é simétrica. Na figura 3.1 mostramos as representações gráficas de um grafo não-direcionado (figura 3.1(a)) e de um grafo direcionado (figura 3.1(b)) e suas respectivas matrizes de adjacência.

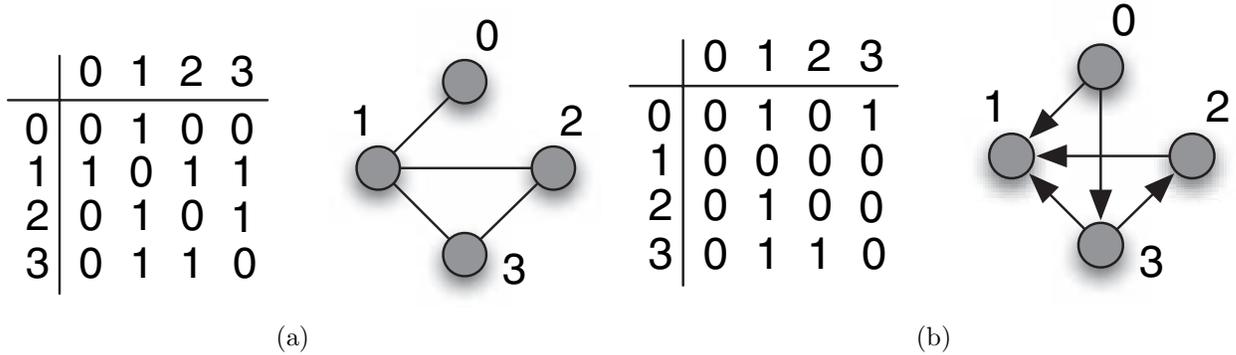


Figura 3.1: Representação gráfica de um grafo não-direcionado, apresentando matriz de adjacência simétrica, (a), e representação gráfica de um grafo direcionado, apresentando matriz de adjacência não simétrica, (b). Figura adaptada de [14].

Há várias formas de caracterizar a estrutura de uma dada rede complexa e essa caracterização é muito importante quando se quer estudar processos dinâmicos nessa rede ou quando se quer entender como se forma a estrutura de interações a partir de processos auto-organizados.

Talvez a medida mais comum para caracterizar a importância de cada nó na rede seja o *grau*. O grau de um determinado nó, num grafo não-direcionado, é simplesmente o número de links (ou, se preferir, o número de vizinhos) que aquele nó apresenta. A partir da matriz

de adjacência, o grau, k_i , do nó i é dado por:

$$k_i = \sum_{j=1}^N A_{ij} \quad (3.1)$$

Conhecendo-se os graus de todos os nós da rede, podemos perguntar qual a probabilidade de que um nó, escolhido aleatoriamente, apresente grau k . Conhecendo tais probabilidades para todos os valores de graus possíveis na rede, podemos construir uma distribuição de probabilidade, $P(k)$, frequentemente chamada *distribuição de grau*.

É interessante o fato de que, para muitas das redes reais que se tem estudado, em contextos completamente diferentes, as distribuições de grau apresentam-se na forma de leis de potência, $P(k) \sim k^{-\gamma}$, com valores bem próximos do expoente γ , o que sugere algum mecanismo comum de auto-organização na formação dessas redes, apesar de terem uma natureza tão distinta.

Uma distribuição de grau na forma de lei de potência indica que os nós são bastante heterogêneos quanto à estrutura de suas ligações: existem muitos nós com poucos links e poucos nós com muitos links. Esses nós muito conectados, por vezes chamados de “hubs”, apesar de poucos, tem um papel muito importante nos processos dinâmicos nessas redes, principalmente no que diz respeito à transferência de informação.

Outro elemento crucial para se entender processos dinâmicos é como se mede distância nessas redes. Da maneira como definimos essas redes anteriormente, podemos dizer que os nós não tem uma posição definida num espaço físico, de modo que não se pode definir uma distância euclidiana entre eles. Quando dizemos que para definir a rede necessitamos apenas de um conjunto de nós e um conjunto de links, subentende-se que importa apenas *quem está ligado com quem* e não *onde* cada nó se encontra.

Portanto, quando se trata de distância em redes complexas, geralmente se trabalha com a distância topológica. Assim, a medida mais usual de distância em redes é chamada *menor comprimento de caminho*, l_{ij} , definida como o número de links percorridos pelo menor caminho entre os nós i e j . Quando não há nenhum caminho entre os dois nós, definimos $l_{ij} = \infty$. Se tomamos a média sobre todos os pares de nós possíveis na rede, temos o *menor comprimento de caminho médio*, $\langle l \rangle$, da rede:

$$\langle l \rangle = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{ij} l_{ij} \quad (3.2)$$

onde a soma é feita sobre todos os valores possíveis de i e de j e a média é feita considerando o número total de pares possíveis (e desconsiderando o fator 2, dado que os somatórios contam duas vezes o mesmo caminho).

Para uma rede totalmente conectada (cada nó conectado com todos os outros), temos $\langle l \rangle = 1$ e para um reticulado d -dimensional, o menor comprimento de caminho médio escala

como $\langle l \rangle \sim N^{1/d}$. Curiosamente, o que muitos dos estudos recentes tem mostrado, é que o menor comprimento de caminho médio de redes reais geralmente cresce com o tamanho da rede de forma bem mais “lenta” do que em reticulados.

Essa característica, de que existe um caminho relativamente curto entre quaisquer dois nós numa rede complexa, ficou conhecida como *efeito mundo pequeno* (ou, como usado com mais frequência, *small world effect*). Esse efeito, todavia, não é algo novo. Em 1967, Milgram (há referências a esse trabalho em [14]) realizou um experimento que consistia em enviar cartas para várias pessoas aleatórias nos Estados Unidos pedindo que essas enviassem cartas a seus conhecidos, pedindo que esses também as enviassem, de modo a construir um caminho de cartas até uma pessoa escolhida pelo experimento. O que Milgram verificou é que as cartas que chegaram ao destino final tinham um comprimento de caminho médio de 6 pessoas. A partir daí, foi cunhada a expressão “seis graus de separação” (por vezes perigosamente extrapolada ao se afirmar que quaisquer duas pessoas no mundo estão separadas por 6 pessoas).

Em 2007, uma imensa rede social mundial, construída a partir de trocas de mensagens pelo Microsoft Messenger [19], teve vários aspectos analisados, dentre eles o comprimento de caminho médio, em que se constatou um valor de 6,6. Mais recentemente, um outro experimento, com uma metodologia bastante similar à do experimento de Milgram, foi proposta pelo Yahoo, utilizando a rede social do Facebook, para testar a hipótese dos “seis graus de separação” [20]. Os resultados desse experimento não foram ainda publicados.

Outra característica muito comum de redes reais é a tendência de formação de agrupamentos de nós. Estando um nó i conectado a um nó j e, ao mesmo tempo, conectado a outro nó l , essa tendência à formação de agrupamentos caracteriza uma probabilidade alta de que j também esteja conectado a l . Pensando numa rede de contatos sociais, essa característica refere-se à tendência de que os nossos amigos também sejam amigos entre si.

Sendo k_i o grau do nó i e sendo e_i o número de links entre os k_i vizinhos do nó i , o *coeficiente de agrupamento* (também conhecido como *clustering* ou *transitivity coefficient*), C_i , é definido da seguinte maneira:

$$C_i = \frac{e_i}{k_i(k_i - 1)/2}, \quad (3.3)$$

ou seja, C_i é dado pela razão entre o número real de ligações entre os vizinhos e o número de ligações possíveis entre os vizinhos. Da definição de e_i , pode-se mostrar que seu valor pode ser obtido através da matriz de adjacência por:

$$e_i = \frac{1}{2} \sum_{jl} A_{ij} A_{jl} A_{li}$$

Por 3.3, é fácil ver que C_i varia de 0 a 1, onde $C_i = 0$ se não há conexões entre os vizinhos

e $C_i = 1$ se todos estão conectados entre si. Se $k_i \leq 1$, definimos $C_i \equiv 0$. A figura 3.2 mostra três exemplos de cálculo do coeficiente de agrupamento para pequenos grafos.

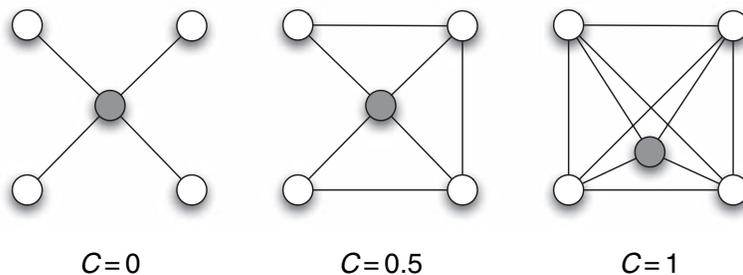


Figura 3.2: Coeficientes de agrupamento do nó central (escuro) para cada um dos grafos.

Para avaliar a tendência de agrupamentos na rede, a quantidade utilizada com mais frequência é o *coeficiente de agrupamento médio*:

$$\langle C \rangle = \frac{1}{N} \sum_i C_i \quad (3.4)$$

Existem várias outras medidas para se avaliar a importância de um determinado nó ou link, bem como outras propriedades estruturais da rede, todavia, focaremos nas três anteriormente apresentadas: distribuição de grau, comprimento de caminho médio e coeficiente de agrupamento médio.

3.2 Alguns resultados empíricos

A tabela 3.1 apresenta uma compilação de resultados referentes a redes reais em diferentes contextos (veja [13] e as referências ali citadas). Para cada rede, são indicados o tamanho (número de nós), o grau médio $\langle k \rangle$, o comprimento de caminho médio ℓ e o coeficiente de agrupamento médio, C . Também são fornecidos, para fins de comparação, o comprimento de caminho médio, ℓ_{rand} , e o coeficiente de agrupamento médio, C_{rand} , para um grafo aleatório (ver próxima seção) de mesmo tamanho e grau médio.

Como se pode notar, apesar da natureza completamente distinta dessas redes, todas apresentam o efeito de mundo pequeno, com comprimentos de caminho médios bem menores que o tamanho das redes. A comparação desses comprimentos de caminho médios com os comprimentos de caminho médios para as redes aleatórias, que, como se sabe, também apresentam efeito de mundo pequeno, mostra que os valores são bem próximos, indicando que deve existir nas redes reais links de longo alcance, interligando grupos distintos de nós.

Todavia, quando comparamos os coeficientes de agrupamento das redes reais com as redes aleatórias, que não apresentam tendência à formação de agrupamentos de nós, vemos que os valores para redes reais são, em geral, bem maiores que os valores para redes aleatórias (em

Network	Size	$\langle k \rangle$	ℓ	ℓ_{rand}	C	C_{rand}	Reference	Nr.
WWW, site level, undir.	153 127	35.21	3.1	3.35	0.1078	0.00023	Adamic, 1999	1
Internet, domain level	3015–6209	3.52–4.11	3.7–3.76	6.36–6.18	0.18–0.3	0.001	Yook <i>et al.</i> , 2001a, Pastor-Satorras <i>et al.</i> , 2001	2
Movie actors	225 226	61	3.65	2.99	0.79	0.00027	Watts and Strogatz, 1998	3
LANL co-authorship	52 909	9.7	5.9	4.79	0.43	1.8×10^{-4}	Newman, 2001a, 2001b, 2001c	4
MEDLINE co-authorship	1 520 251	18.1	4.6	4.91	0.066	1.1×10^{-5}	Newman, 2001a, 2001b, 2001c	5
SPIRES co-authorship	56 627	173	4.0	2.12	0.726	0.003	Newman, 2001a, 2001b, 2001c	6
NCSTRL co-authorship	11 994	3.59	9.7	7.34	0.496	3×10^{-4}	Newman, 2001a, 2001b, 2001c	7
Math. co-authorship	70 975	3.9	9.5	8.2	0.59	5.4×10^{-5}	Barabási <i>et al.</i> , 2001	8
Neurosci. co-authorship	209 293	11.5	6	5.01	0.76	5.5×10^{-5}	Barabási <i>et al.</i> , 2001	9
<i>E. coli</i> , substrate graph	282	7.35	2.9	3.04	0.32	0.026	Wagner and Fell, 2000	10
<i>E. coli</i> , reaction graph	315	28.3	2.62	1.98	0.59	0.09	Wagner and Fell, 2000	11
Ythan estuary food web	134	8.7	2.43	2.26	0.22	0.06	Montoya and Solé, 2000	12
Silwood Park food web	154	4.75	3.40	3.23	0.15	0.03	Montoya and Solé, 2000	13
Words, co-occurrence	460.902	70.13	2.67	3.03	0.437	0.0001	Ferrer i Cancho and Solé, 2001	14
Words, synonyms	22 311	13.48	4.5	3.84	0.7	0.0006	Yook <i>et al.</i> , 2001b	15
Power grid	4941	2.67	18.7	12.4	0.08	0.005	Watts and Strogatz, 1998	16
<i>C. Elegans</i>	282	14	2.65	2.25	0.28	0.05	Watts and Strogatz, 1998	17

Tabela 3.1: Características gerais de redes reais. De acordo com os números da direita, temos: rede de websites interligados por hiperlinks (1), rede de distribuição física de Internet (2), rede de participação de atores em filmes comuns (3), redes de colaborações científicas em artigos comuns (4-9), redes metabólicas de *Escherichia coli* (10-11), redes tróficas (12-13), redes de correlações de palavras em textos (14-15), rede de distribuição elétrica (16) e rede neural de *C. elegans* (17). Essa tabela e as referências aos trabalhos podem ser encontradas em [13].

alguns casos, até 4 ordens de grandeza). Isso mostra uma forte tendência de formação de grupos muito interconectados em redes reais e indica que deve haver algum mecanismo que favoreça esse tipo de estrutura no processo de formação dessas redes.

Quando analisamos as distribuições de grau, é comum dividir as redes em duas classes: as estatisticamente *homogêneas* e as estatisticamente *heterogêneas*. As redes homogêneas apresentam nós com valores de grau próximos ao valor médio, com distribuições de grau geralmente em forma de “sino”, que se aproximam de formas gaussianas ou distribuições de Poisson. Esse decaimento rápido da distribuição é por vezes referido como “light tail”. Já as redes heterogêneas apresentam probabilidades não desprezíveis de se encontrar nós com valores muito distintos de grau. A existência de nós com valores de grau bem maiores que o valor médio faz com que o decaimento das distribuições de grau seja bem lento, daí elas serem chamadas de distribuições com “heavy tails”. A figura 3.3 mostra algumas distribuições de grau para redes reais heterogêneas.

Muitas vezes, as distribuições com “heavy-tail” podem ser aproximadas por leis de potência, $P(k) \sim k^{-\gamma}$, (que apresentam aspecto linear num gráfico com as ordenadas e abscissas em escala logarítmica) indicando, como já falado, a existência de hubs. A existência desses hubs, juntamente com a existência de nós com todos os valores intermediários de grau, mostra que, pelo menos no aspecto da conectividade, a rede foge a um comportamento típico, ou seja, o valor médio do grau, $\langle k \rangle$, deixa de ser uma escala significativa para a análise, o que leva essas redes a serem também chamadas de redes *livres de escala* (ou “scale-free”).

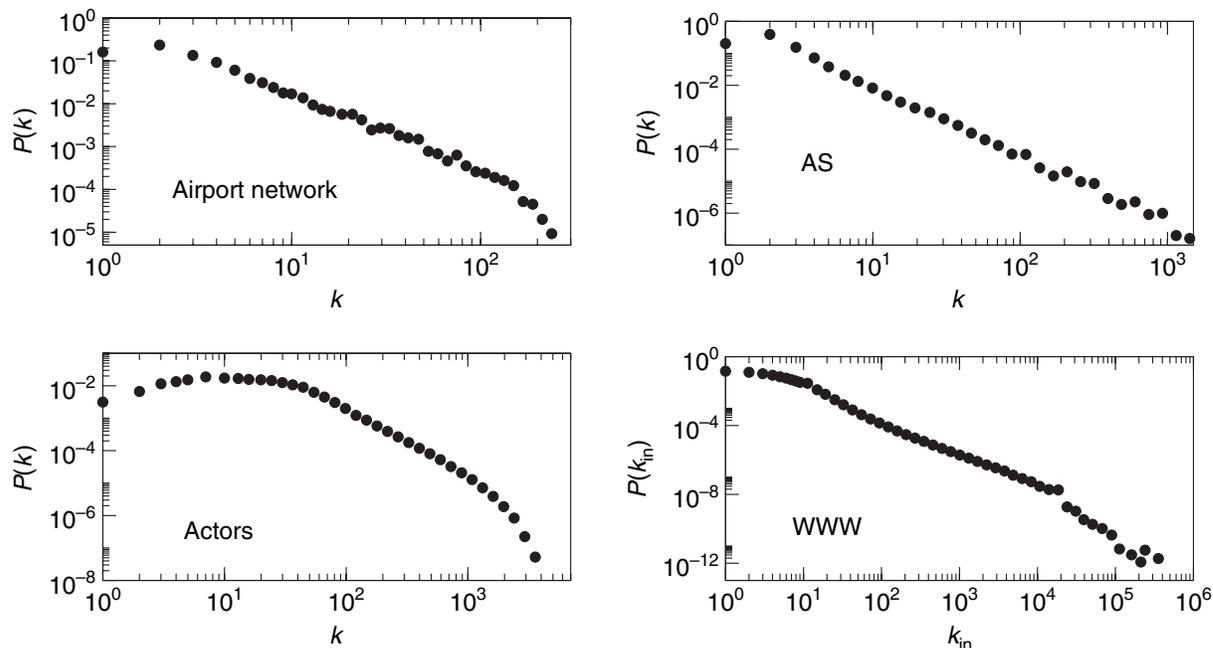


Figura 3.3: Distribuições de grau para redes reais. De cima para baixo e da esquerda para direita, temos: rede internacional de aeroportos, rede de participação de atores em filmes comuns, rede de distribuição física de Internet e rede de websites interligados por hiperlinks. A rede de websites é construída de forma direcionada e aqui é apresentada a distribuição de links que apontam “para dentro” do nó. Figura retirada de [14].

3.3 Modelos de redes complexas

3.3.1 Rede aleatória - Modelo de Erdős e Rényi

No trabalho clássico de Erdős e Rényi (ver referências em [14]), um grafo aleatório é definido como um conjunto de N nós indexados e um conjunto de n links, escolhidos aleatoriamente entre os $N(N - 1)/2$ links possíveis.

Outra forma equivalente de definir um grafo aleatório é começar com N nós indexados e ligar cada par de nós com uma probabilidade p . Dessa forma, o número total de links é uma variável aleatória com valor esperado $\langle n \rangle = p[N(N - 1)/2]$ (note que, por esse processo de construção, o que obtemos é um ensemble de grafos $G_{N,p}$ com $2^{N(N-1)/2}$ elementos a partir do qual muitas das suas propriedades podem ser obtidas).

O modelo proposto por Erdős e Rényi, apesar de bem simples, se configura como uma abordagem importante para o estudo de redes complexas. Uma rede construída dessa forma expressa uma completa falta de conhecimento a respeito dos mecanismos responsáveis pelo surgimento das ligações entre os nós (o máximo que se pode dizer é que uma ligação entre dois dados nós pode existir com uma probabilidade p). Dessa forma, podem ser muito úteis também como forma de comparação ao se estudar mecanismos de formação de links em redes reais.

A figura 3.4 mostra três redes aleatórias construídas com diferentes probabilidades p :

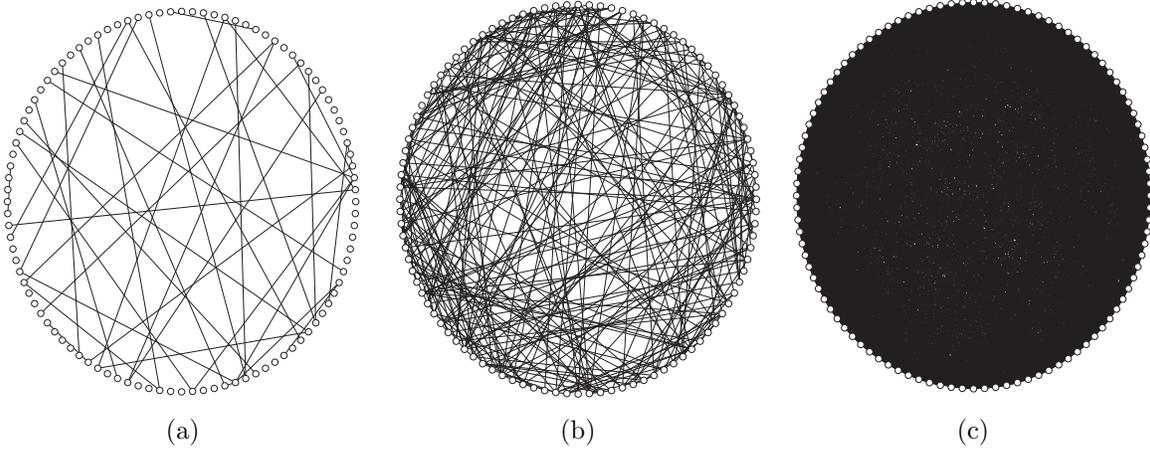


Figura 3.4: Representações gráficas de redes aleatórias com $N = 100$. Em (a), $p=0,009$, em (b), $p=0,05$ e em (c), $p=0,5$. As representações foram construídas com o software *Pajek*.

Uma vez que cada link contribui para o grau de dois vértices, obtemos o grau médio de um grafo aleatório por:

$$\langle k \rangle = \frac{2\langle n \rangle}{N} = (N - 1)p \simeq Np \quad (3.5)$$

onde a última equação é válida para N grande.

De acordo com a equação 3.5 e os parâmetros da figura 3.4, temos: para 3.4(a), $\langle k \rangle \simeq 0,9$, para 3.4(b), $\langle k \rangle \simeq 5$ e para 3.4(c), $\langle k \rangle \simeq 50$. O grau médio, $\langle k \rangle$, de uma rede aleatória é um fator muito importante para avaliar a estrutura de conectividade. De modo geral:

Para $\langle k \rangle < 1$ não há ciclos e as redes são compostas de pequenas sub-redes pouco conectadas.

Para $\langle k \rangle > 1$ aparece um componente (sub-rede) gigante, ou seja, a maioria dos nós da rede está conectada a essa componente, existindo poucos nós isolados. Aqui observa-se uma transição de fase similar à transição de percolação para dimensão infinita.

Para $\langle k \rangle \geq \ln(N)$ quase nenhuma rede que se obtém com os mesmos parâmetros apresenta elementos isolados.

Dado que p é a probabilidade de se criar um link, a probabilidade de se criar um nó com k links deve ser igual à probabilidade de que esse seja ligado a outros k nós e não ligado ao demais $N - 1 - k$ (levando-se em conta todas as formas de se fazer isso). Como o estabelecimento de cada link é um evento independente, a distribuição de grau, $P(k)$ para essa rede aleatória é dada pela distribuição binomial:

$$P(k) = \binom{N-1}{k} p^k (1-p)^{N-1-k} \quad (3.6)$$

que, no limite de N muito grande e para $\langle k \rangle = Np$ constante, pode ser aproximada pela

distribuição de Poisson:

$$P(k) = e^{-\langle k \rangle} \frac{\langle k \rangle^k}{k!} \quad (3.7)$$

A figura 3.5 mostra a distribuição de grau referente a uma rede aleatória gerada por simulação numérica.

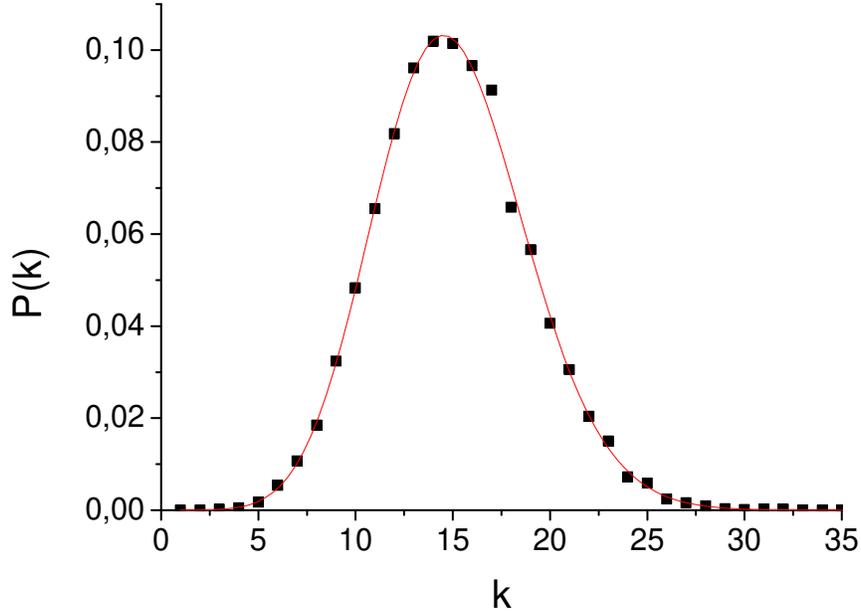


Figura 3.5: Rede aleatória gerada por simulação numérica. Para essa rede, $N = 10000$ e $p = 0.0015$. Note que a distribuição é centrada em torno de $\langle k \rangle = Np = 15$. A curva de ajuste corresponde a uma distribuição de Poisson, como na equação 3.7.

Como pode-se notar pela figura 3.5, a distribuição de grau decai muito rápido (exponencialmente) para valores grandes de k , sendo que as probabilidades de encontrar nós com grau k só são significativas em torno de $\langle k \rangle$. Dessa forma, o modelo de Erdős e Rényi se configura como o caso mais simples de rede estatisticamente homogênea que apresenta um componente de aleatoriedade nos valores dos graus.

Devido à independência das conexões entre os nós, podemos facilmente calcular o coeficiente de agrupamento, $\langle C \rangle$ para a rede aleatória. Como, para cada nó, a probabilidade de que dois dos seus vizinhos sejam conectados é p , para k_i vizinhos, temos $e_i = p[k_i(k_i - 1)/2]$. Pelas equações 3.3 e 3.4, temos:

$$\langle C \rangle = p = \frac{\langle k \rangle}{N} \quad (3.8)$$

Da equação 3.8 vemos que, para um valor fixo de $\langle k \rangle$, o coeficiente de agrupamento diminui com o tamanho da rede, indo a zero no limite de N muito grande. Isso leva à conclusão de que a falta de tendência de agrupamento entre os nós é um elemento intrínseco do modelo, que surge devido à completa aleatoriedade na definição dos links.

Para o comprimento de caminho médio, $\langle l \rangle$, pode-se fazer uma demonstração rigorosa, mas não a faremos aqui (ver [14] para referências). De maneira geral, $\langle l \rangle$ está relacionado com N e com $\langle k \rangle$ da seguinte maneira:

$$\langle l \rangle \sim \frac{\ln(N)}{\ln(\langle k \rangle)} \quad (3.9)$$

O fato de $\langle l \rangle$ crescer logaritmicamente com N para redes aleatórias, e não como alguma lei de potência, mostra que essas redes também estão sujeitas ao efeito de mundo pequeno, como discutimos qualitativamente acima.

3.3.2 Rede mundo pequeno - Modelo de Watts e Strogatz

Como vimos, pela construção de Erdős e Rényi, é possível obter redes que apresentam efeito de mundo pequeno, com crescimento logarítmico do comprimento de caminho médio em função do tamanho da rede, o que parece ser uma característica marcante de muitas redes reais. Todavia, as redes aleatórias geradas por esse modelo apresentam coeficientes de agrupamento que tendem a zero com o aumento do tamanho da rede, mostrando-se bem diferentes de redes reais, que apresentam coeficientes de agrupamento relativamente altos e aparentemente independentes do tamanho da rede.

Com base nesse problema, Watts e Strogatz [21] propuseram um modelo capaz de construir redes de característica intermediária entre redes regulares, que apresentam valores relativamente altos para coeficiente de agrupamento e comprimento de caminho médio, e redes aleatórias, com valores bem menores para essas duas quantidades. Assim, conseguiram construir redes com efeito de mundo pequeno e coeficientes de agrupamento relativamente altos. As redes provenientes do algoritmo de Watts e Strogatz são por vezes chamadas *redes mundo pequeno* (*small world networks*).

A construção proposta pelo modelo é bem simples. Começa-se com uma rede unidimensional regular com condições periódicas (um anel) com N nós, sendo que cada nó é ligado simetricamente com seus K vizinhos mais próximos ($K/2$ à esquerda e $K/2$ à direita), como na figura 3.6(a). A partir daí, cada link é reescrito com uma probabilidade p , escolhendo-se aleatoriamente outro nó com o qual será feita a ligação, evitando auto-conexões e links duplicados, e mantido com uma probabilidade $1 - p$. Dessa forma, são obtidas redes com $\langle k \rangle = K$ e com o mesmo número de nós e links, mas com um efeito de aleatorização na escrita dos links que varia de $p = 0$ (rede regular) a $p = 1$ (aleatória).

Na figura 3.6 podemos ver três redes construídas através desse processo, com três diferentes probabilidades de reescrita dos links, p .

Como podemos notar na figura 3.6(b), com uma probabilidade de reescrita não tão grande, já é possível que sejam criados “atalhos” na rede, ou seja, links entre nós distantes, enquanto

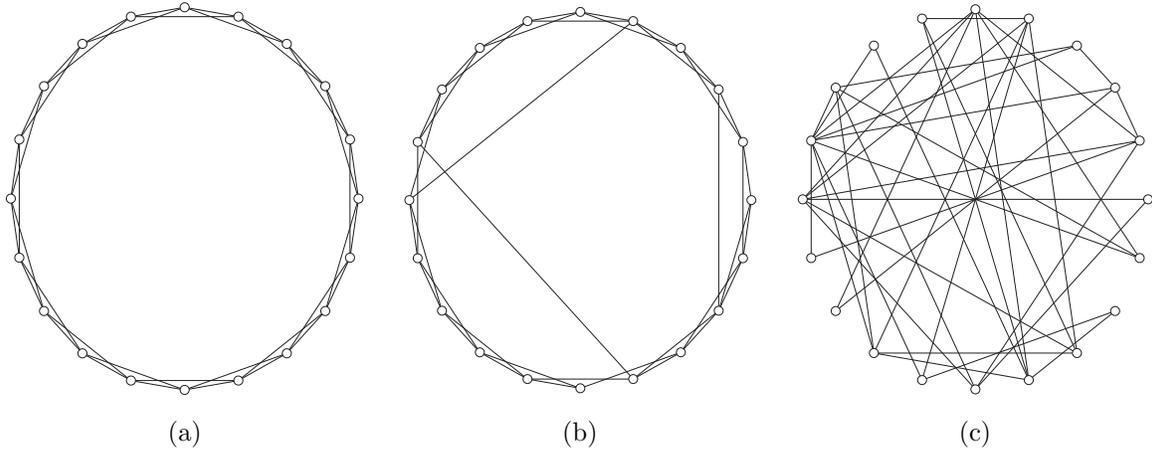


Figura 3.6: Representações gráficas de redes mundo pequeno com $N = 20$ e $K = 4$. Em (a), $p=0,00$, em (b), $p=0,05$ e em (c), $p=1,00$. As representações foram construídas com o software *Pajek*.

ainda são mantidos muitos dos links locais. Dessa forma, os menores comprimentos de caminho são bastante reduzidos, enquanto que, mantendo boa parte dos links locais, o coeficiente de agrupamento ainda se mantém muito próximo do valor encontrado na rede regular.

Essa idéia de criação de links distantes tem bastante coerência no contexto social, em que a maioria das pessoas que conhecemos pertencem a círculos sociais próximos (amigos do trabalho ou da faculdade, por exemplo), mas sempre temos conhecidos que moram em outro estado ou país.

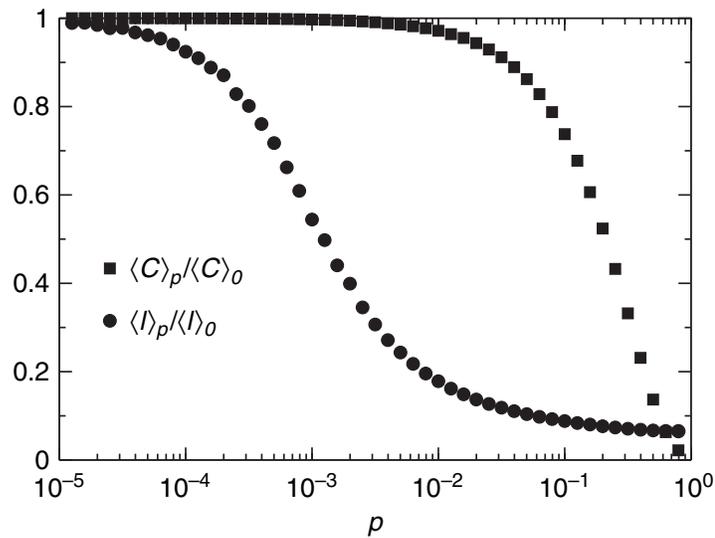


Figura 3.7: Coeficiente de agrupamento médio (quadrados) e comprimento de caminho médio (círculos) como função da probabilidade de reescrita, p , para o modelo de Watts e Strogatz. Os valores obtidos são normalizados pelo coeficiente de agrupamento, $\langle C \rangle_0$, e pelo comprimento de caminho médio, $\langle l \rangle_0$, de uma rede regular com mesmos valores de N e K . Aqui utilizou-se $N = 1000$ e $K = 10$ e os resultados são obtidos por médias sobre 1000 realizações. Retirado de [14].

É possível obter resultados analíticos para o coeficiente de agrupamento médio, $\langle C \rangle$ e leis de escala para o comprimento de caminho médio, $\langle l \rangle$, todavia, vamos nos ater a uma discussão

qualitativa. A figura 3.7 mostra como se dá essa transição nos valores do comprimento de caminho médio e do coeficiente de agrupamento no modelo de Watts e Strogatz.

Como é possível notar, para uma boa faixa de valores de $p \ll 1$, é possível ver uma queda muito significativa no valor do comprimento de caminho médio, enquanto que, para os mesmos valores de p , o coeficiente de agrupamento se mantém praticamente constante com um valor bem elevado e próximo do valor para a rede regular original.

O sucesso do modelo de Watts e Strogatz em construir redes com coeficientes de agrupamento médios elevados e comprimentos de caminho médios bem baixos, características marcantes em redes reais, leva à conclusão de que é possível que pelo menos algumas redes reais, se originem de redes bastante regulares que passaram por algum processo de aleatorização dos seus links, algo provavelmente ligado a processos estocásticos naturais.

As distribuições de grau das rede construídas por esse modelo podem ser obtidas analiticamente (ver [14] para referências) e são dadas por:

$$P(k) = \sum_{n=0}^{f(k,K)} \binom{K/2}{n} (1-p)^n p^{K/2-n} \frac{(pK/2)^{k-K/2-n}}{(k-K/2-n)!} e^{-pK/2}, \quad (3.10)$$

para $k \geq K/2$, onde $f(k, K) = \min(k - K/2, K/2)$.

No limite $p \rightarrow 1$, a equação 3.10 se reduz a:

$$P(k) = \frac{(K/2)^{k-K/2}}{(k-K/2)!} e^{-K/2}, \quad (3.11)$$

que é uma distribuição de Poisson para a variável $k' = k - K/2$ com média $\langle k' \rangle = K/2$.

3.3.3 Rede livre de escala - Modelo de Barabási e Albert

Como mostrado anteriormente, os modelos de rede aleatória e mundo pequeno foram avanços significativos na teoria de redes, conseguindo reproduzir aspectos marcantes de redes reais. Todavia, tais modelos não são capazes de reproduzir as leis de potência muitas vezes encontradas nas distribuições de grau de redes reais. Mesmo as distribuições de grau de redes reais que não tem a forma exata de lei de potência, apresentando cortes exponenciais para valores grandes de grau, são bem diferentes das distribuições de Poisson que emergem das redes criadas por esses modelos.

Apesar de ser possível construir redes aleatórias com distribuições de grau específicas (ver [13, 14]), a pergunta que se faz aqui é diferente: é possível saber quais são os mecanismos mais importantes que atuam na formação da rede para que as distribuições de leis de potência emergem naturalmente, sem a necessidade de serem impostas?

A resposta positiva para essa pergunta foi dada pela primeira vez por Barabási e Albert [22]. O modelo de construção que propuseram é baseado em dois princípios. O primeiro é

baseado no crescimento do número de nós e o segundo, no fato de que novos links são criados preferencialmente com nós que já tem um número grande de links.

Pensando em redes reais, esses dois princípios parecem bastante razoáveis. Muitas das redes já estudadas passam por um constante processo de acréscimo de nós, como a rede de sites na internet, com cada vez mais sites surgindo na rede, ou a rede de citações científicas, com cada vez mais nós representando autores surgindo, à medida que mais artigos são publicados. A *ligação preferencial* (*preferential attachment*) com nós muito conectados é algo bem comum em redes sociais, em que pessoas que tem muitos amigos tendem a conhecer outras pessoas com mais facilidade do que pessoas mais isoladas em pequenos grupos, ou mesmo na rede de sites, sendo que novos sites tendem a estabelecer hyperlinks com sites mais populares.

O algoritmo de Barabási e Albert é bem simples. Começa-se com um pequeno núcleo de m_0 nós conectados. A cada passo de tempo t , adiciona-se um novo nó com m links ($m < m_0$) que são ligados aos nós já existentes na rede. Cada novo link é criado com o i -ésimo nó com uma probabilidade proporcional ao grau, k_i , do nó i , dada por:

$$\Pi[k_i(t)] = \frac{k_i(t)}{\sum_j k_j(t)}, \quad (3.12)$$

onde o fator de normalização $\sum_j k_j(t)$ é dado pela soma dos grau de todos os nós da rede no passo t .

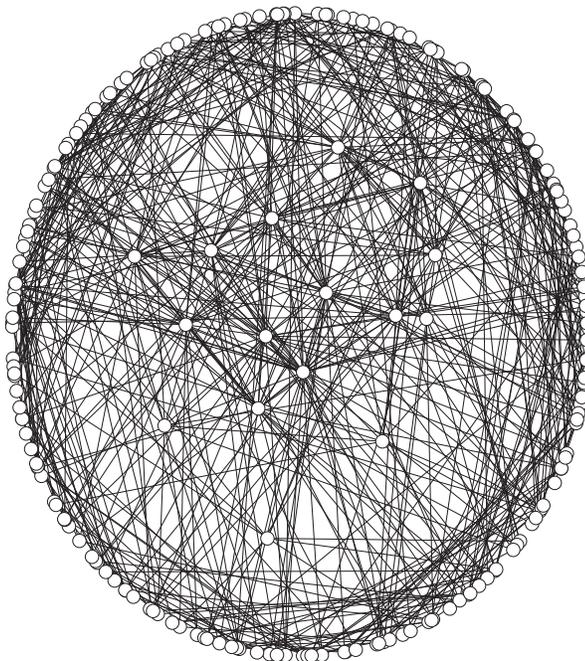


Figura 3.8: Representação gráfica de uma rede Barabási-Albert com $N = 200$ e $\langle k \rangle = 6$. Os nós mais conectados (hubs) são posicionados ao centro. A representação foi construída com o software *Pajek*.

É fácil constatar, via simulações numéricas, que as redes construídas por esse algoritmo,

para o limite de N grande, apresentam $\langle k \rangle = 2m$ e distribuições de grau com a forma $P(k) \sim k^{-3}$. A figura 3.8 mostra uma rede típica construída com o algoritmo de Barabási e Albert para $N = 200$ e $\langle k \rangle = 6$.

É possível mostrar (ver [13, 14]) que, assumindo uma aproximação de valores contínuos para k , a distribuição de grau da rede gerada por tal algoritmo no passo t é dada por:

$$P(k, t) = 2m^2 \frac{t + (m_0/2m)\langle k \rangle_0}{t + m_0} k^{-3},$$

que, no limite para tamanhos muito grandes, $t \rightarrow \infty$, recai em:

$$P(k) = 2m^2 k^{-3} \tag{3.13}$$

Algo muito interessante nesse resultado é que o expoente de k independe de m ou do tamanho da rede. A figura 3.9 mostra resultados obtidos para $P(k)$ por simulações numéricas.

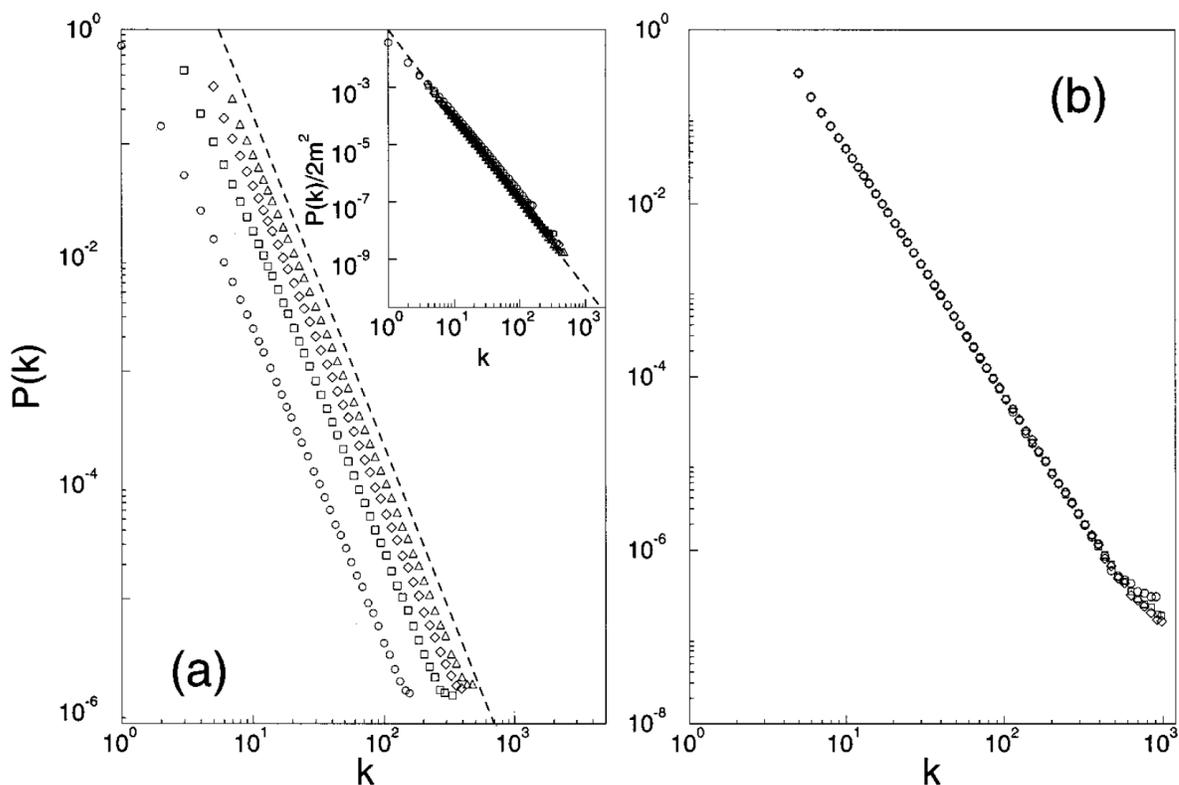


Figura 3.9: Distribuições de grau de redes Barabási-Albert geradas por simulação numérica. Em (a), $N = 300000$, $m_0 = m = 1$ (círculo), $m_0 = m = 3$ (quadrado), $m_0 = m = 5$ (losango) e $m_0 = m = 7$ (triângulo). A inclinação da reta tracejada é 2,9 e representa o melhor ajuste para os dados. O quadro interno mostra as distribuições rescaladas $P(k)/2m^2$ para os mesmos valores de m , com inclinação da reta tracejada igual a 3. Em (b), $m_0 = m = 5$ para os tamanhos de rede $N = 100000$ (círculo), $N = 150000$ (quadrado) e $N = 200000$ (losango). Retirado e adaptado de [13].

É possível obter a forma como o comprimento de caminho médio escala com N (ver [14] para referências). Essa é dada por:

$$\langle l \rangle \sim \frac{\ln(N)}{\ln(\ln(N))} \quad (3.14)$$

É possível ver pela equação 3.14 que, para valores típicos de N , o comprimento de caminho médio das redes Barabási-Albert é bem menor do que o das redes aleatórias do modelo Erdős-Rényi (ver equação 3.9), o que mostra que a topologia heterogênea das redes livres de escala é mais eficiente nessa redução de caminhos do que a topologia homogênea das redes aleatórias.

O coeficiente de agrupamento pode também ser obtido analiticamente (ver também [14] para referências) e é dado por:

$$\langle C \rangle = \frac{m}{8N} (\ln(N))^2 \quad (3.15)$$

Apesar do coeficiente de agrupamento ser maior do que os coeficientes de agrupamento das redes aleatórias (dado pela equação 3.8), com a diferença crescendo com N , o comportamento deste para as redes Barabási-Albert ainda é bastante diferente do obtido para redes mundo pequeno, em que o coeficiente de agrupamento é independente de N .

Capítulo 4

Padrões de Turing em Redes Complexas

4.1 Formação dos padrões em meios discretos

Esse capítulo concerne a formação de padrões de Turing, em sistemas de reação-difusão, na situação em que o meio deixa de ser um domínio contínuo e passa a ser estruturado de forma discreta, como uma rede. O desenvolvimento analítico que faremos para esse caso é bastante similar ao feito anteriormente para meios contínuos e, portanto, seremos mais breves nesse ponto.

O desenvolvimento da teoria e resultados apresentados nesse capítulo foram reproduzidos a partir do modelo proposto por Nakao e Mikhailov, [12], sendo que essa é a referência primária para os trabalhos que desenvolvemos ao longo desse mestrado.

Para apresentar a formação de padrões de Turing em redes, começamos com um modelo simples. Estabelecemos um sistema de reação-difusão com duas variáveis, u_i e v_i definidas em cada um dos nós, i , de uma rede com N nós, ligados entre si de acordo com a topologia dada pela matriz de adjacência, A . As quantidades u_i e v_i interagem localmente através das funções $f(u_i, v_i)$ e $g(u_i, v_i)$ e difundem pela rede através das ligações apresentadas por cada nó. O sistema dinâmico que descrevemos é dado por:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}u_i &= f(u_i, v_i) + \varepsilon \sum_{j=1}^N A_{ij}(u_j - u_i) \\ \frac{d}{dt}v_i &= g(u_i, v_i) + \sigma\varepsilon \sum_{j=1}^N A_{ij}(v_j - v_i),\end{aligned}\tag{4.1}$$

onde ε é a taxa de difusão de u e σ é a razão entre as taxas de difusão de v e u . Note que o processo difusivo das variáveis se dá a partir de um gradiente simples, mas apenas com os nós conectados ao nó i (lembre que $A_{ij} = 1$ se i e j estão conectados e $A_{ij} = 0$ se não estão).

Temos, assim, um sistema de $2N$ equações diferenciais acopladas para descrever a dinâmica completa do sistema.

De posse da matriz de adjacência, A , sabemos o grau, k_i , de cada nó i (veja equação 3.1). Podemos, então, definir uma outra matriz, L , com elementos $L_{ij} = A_{ij} - k_i\delta_{ij}$ (onde δ_{ij} é o *delta de Kronecker*). É fácil mostrar que em termos da matriz L , o sistema 4.1 é dado por:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}u_i &= f(u_i, v_i) + \varepsilon \sum_{j=1}^N L_{ij}u_j \\ \frac{d}{dt}v_i &= g(u_i, v_i) + \sigma\varepsilon \sum_{j=1}^N L_{ij}v_j\end{aligned}\tag{4.2}$$

À matriz L damos o nome de *Matriz Laplaciana*. Como é possível notar, o sistema 4.2 assemelha-se muito ao sistema 2.2, que usamos para trabalhar o caso contínuo. Entretanto, a utilidade de se expressar o sistema definido na rede em termos dos elementos da matriz laplaciana, vai muito além da pura semelhança visual com o sistema definido no meio contínuo.

Quando fizemos a análise de estabilidade linear para o caso contínuo, utilizamos as autofunções, \vec{W}_k , e autovalores, Λ_k , do operador laplaciano, ∇^2 , para expandir as perturbações e determinar as taxas de crescimento, λ_k . Na análise do caso discreto, também estamos interessados em determinar taxas de crescimento, entretanto, como ressaltado em [12], nesse caso, as expansões são feitas em função dos autovetores e autovalores da matriz laplaciana.

A matriz laplaciana é uma matriz real, simétrica (no caso de grafos não-direcionados) e negativa semi-definida. Seus autovetores $\vec{\Phi}^{(\alpha)} = (\phi_1^{(\alpha)}, \dots, \phi_N^{(\alpha)})$ e autovalores, Λ_α , são definidos através da relação:

$$\sum_{j=1}^N L_{ij}\phi_j^{(\alpha)} = \Lambda_\alpha\phi_i^{(\alpha)}\tag{4.3}$$

onde $\alpha = 1, \dots, N$ são os *modos* (em analogia direta com o caso contínuo) e trabalhamos sempre com os autovetores ortonormalizados, $\sum_{j=1}^N \phi_i^{(\alpha)}\phi_i^{(\beta)} = \delta_{\alpha,\beta}$. Os modos α são ordenados com ordem decrescente dos autovalores: $\Lambda_1 \geq \Lambda_2 \geq \dots \geq \Lambda_N$.

Além de facilitar muito as contas no desenvolvimento que faremos, a matriz laplaciana tem um papel fundamental na análise de estrutura de redes complexas, principalmente em trabalhos focando sincronização e análise espectral. Recomendamos [14] e as referências ali citadas para aprofundamentos no tema.

Voltando ao problema de formação de padrões de Turing em redes, procedemos de forma exatamente análoga ao caso contínuo. A partir do sistema 4.2, obtemos o estado homogêneo (\bar{u}, \bar{v}) a partir da solução positiva de $f(\bar{u}, \bar{v}) = g(\bar{u}, \bar{v}) = 0$. Assumimos que esse estado é linearmente estável na ausência de difusão (fazendo necessário que se escolham parâmetros para as funções f e g de modo que as condições 2.8 e 2.9 sejam atendidas quando as derivadas forem avaliadas no estado estacionário).

Em seguida, definimos as quantidades u_i e v_i , para cada nó da rede, como seus respectivos valores no estado estacionário, acrescidos de pequenas perturbações, ou seja: $(u_i, v_i) = (\bar{u}, \bar{v}) + (\delta u_i, \delta v_i)$. Substituindo em 4.2, obtemos:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\delta u_i &= f_u\delta u_i + f_v\delta v_i + \varepsilon \sum_{j=1}^N L_{ij}\delta u_i \\ \frac{d}{dt}\delta v_i &= g_u\delta u_i + g_v\delta v_i + \sigma\varepsilon \sum_{j=1}^N L_{ij}\delta v_i\end{aligned}\tag{4.4}$$

onde, como usual, os subscritos denotam diferenciação em relação às variáveis e as derivadas parciais são sempre avaliadas no estado homogêneo.

Expandindo as perturbações na base dos autovetores da matriz laplaciana, obtemos:

$$\begin{aligned}\delta u_i(t) &= \sum_{\alpha=1}^N c_\alpha e^{\lambda_\alpha t} \phi_i^{(\alpha)} \\ \delta v_i(t) &= \sum_{\alpha=1}^N c_\alpha B_\alpha e^{\lambda_\alpha t} \phi_i^{(\alpha)}\end{aligned}\tag{4.5}$$

Substituindo 4.5 em 4.4 e cancelando os termos $e^{\lambda_\alpha t}$, temos:

$$\begin{aligned}\sum_{\alpha} \lambda_\alpha c_\alpha \phi_i^{(\alpha)} &= \sum_{\alpha} c_\alpha \phi_i^{(\alpha)} (f_u + B_\alpha f_v) + \varepsilon \sum_j L_{ij} \sum_{\alpha} c_\alpha \phi_j^{(\alpha)} \\ \sum_{\alpha} \lambda_\alpha c_\alpha B_\alpha \phi_i^{(\alpha)} &= \sum_{\alpha} c_\alpha \phi_i^{(\alpha)} (g_u + B_\alpha g_v) + \sigma\varepsilon \sum_j L_{ij} \sum_{\alpha} c_\alpha B_\alpha \phi_j^{(\alpha)}\end{aligned}$$

Invertendo a ordem dos somatórios de j e α e usando a relação 4.3, obtemos:

$$\begin{aligned}\sum_{\alpha} c_\alpha \phi_i^{(\alpha)} (\lambda_\alpha - f_u - \varepsilon \Lambda_\alpha - B_\alpha f_v) &= 0 \\ \sum_{\alpha} c_\alpha \phi_i^{(\alpha)} (B_\alpha \lambda_\alpha - g_u - B_\alpha g_v - B_\alpha \sigma\varepsilon \Lambda_\alpha) &= 0\end{aligned}$$

Por fim, dada a ortogonalidade dos autovetores $\vec{\Phi}^{(\alpha)}$, cada um dos parênteses deve ser nulo. Sendo assim, podemos escrever, para cada α , a forma matricial:

$$\lambda_\alpha \begin{pmatrix} 1 \\ B_\alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_u + \varepsilon \Lambda_\alpha & f_v \\ g_u & g_v + \sigma\varepsilon \Lambda_\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ B_\alpha \end{pmatrix}\tag{4.6}$$

A matriz 2 x 2 encontrada é, como era de se esperar, a *Jacobiana* do sistema 4.2 e $\{\lambda_\alpha\}$ correspondem aos seus autovalores. Soluções não-triviais para os autovetores são encontradas

quando λ_α satisfaz:

$$\lambda_\alpha = \frac{1}{2} \left[f_u + g_v + (1 + \sigma)\varepsilon\Lambda_\alpha \pm \sqrt{4f_v g_u + (f_u - g_v + (1 - \sigma)\varepsilon\Lambda_\alpha)^2} \right] \quad (4.7)$$

A expressão 4.7 para as taxas de crescimento corresponde exatamente àquela encontrada no caso contínuo, 2.15, fazendo a substituição de $-k^2$ por Λ_α . Da condição de que o máximo de λ_α seja igual a zero, o que caracteriza a transição a partir do qual os modos passam a ser instáveis, determinamos o valor crítico da razão entre as constantes de difusão, σ_c :

$$\sigma_c = \frac{f_u g_v - 2f_v g_u + 2\sqrt{f_v g_u (f_v g_u - f_u g_v)}}{f_u^2} \quad (4.8)$$

que é também idêntica à expressão que se encontra para d_c , no caso contínuo.

Para o sistema definido na rede, a idéia é a mesma: ajustamos os parâmetros relacionados com a dinâmica e a difusão, de forma que, para pelo menos um modo α , obtenhamos um valor positivo para a parte real de λ_α . Dessa forma, o autovetor correspondente a esse modo, $\vec{\Phi}^{(\alpha)}$, ditará a forma inicial da conformação das variáveis u e v na rede (veja equação 4.5), estando tal conformação sujeita, para tempos longos, às limitações impostas pelos termos não-lineares da dinâmica. O padrão final que emerge é o que denominamos padrão de Turing.

4.2 Modelo ecológico: 2 espécies

Até o momento, todo o desenvolvimento que fizemos para responder a questão da formação de padrões de Turing em redes foi feito de forma genérica. Não demos um significado para as variáveis u e v e nem uma estrutura definida para a rede que tratamos. Fazemos isso agora, reproduzindo o modelo e a discussão presentes em [12].

Para a dinâmica, utilizamos o modelo de presa e predador inicialmente proposto por Mimura e Murray, em 1978, [4]. Nesse modelo, u representa a população de presas e v representa a população de predadores que interagem localmente através das funções:

$$\begin{aligned} f(u, v) &= \left(\frac{a + bu - u^2}{c} - v \right) u \\ g(u, v) &= [u - (1 + dv)]v, \end{aligned} \quad (4.9)$$

onde a , b , c , e d são parâmetros do modelo. Essas são precisamente as funções que serão inseridas em 4.2 para se estabelecer a dinâmica local.

Os termos que indicam a forma da interação entre as espécies são o termo $-vu$ na equação das presas e $+uv$ na equação dos predadores. Essa é a função mais simples que pode ser usada para representar uma interação de predação (muito mais a respeito da natureza dessa

interação, bem como sobre funções usadas em modelos, pode ser obtido em [23]).

Os demais termos em f e g indicam, respectivamente, o crescimento das presas e a mortalidade dos predadores. Para entender o crescimento das presas, é interessante comparar essa função, que chamaremos $f_{all}^*(u) = \left(\frac{a + bu - u^2}{c}\right)u$, com o modelo logístico, dado pela equação $f_{log}^*(u) = r\left(1 - \frac{u}{K}\right)u$.

O modelo logístico é um dos modelos mais estudados e utilizados em dinâmica de populações. Ele expressa o que, em ecologia, se conhece por *competição intraespecífica*, ou seja, indivíduos de uma mesma espécie competem, seja por recursos, por espaço ou algum outro elemento fundamental à sobrevivência. Como se vê, ele possui dois parâmetros característicos: a taxa de reprodução, r , que expressa a rapidez com que os indivíduos nessa população se reproduzem, e a capacidade de suporte, K , que expressa um limite ao crescimento dessa população imposto pelo ambiente. O gráfico da taxa de crescimento per capita, f_{log}^*/u para o modelo logístico, como função de u , é uma reta, como mostra a figura 4.1.

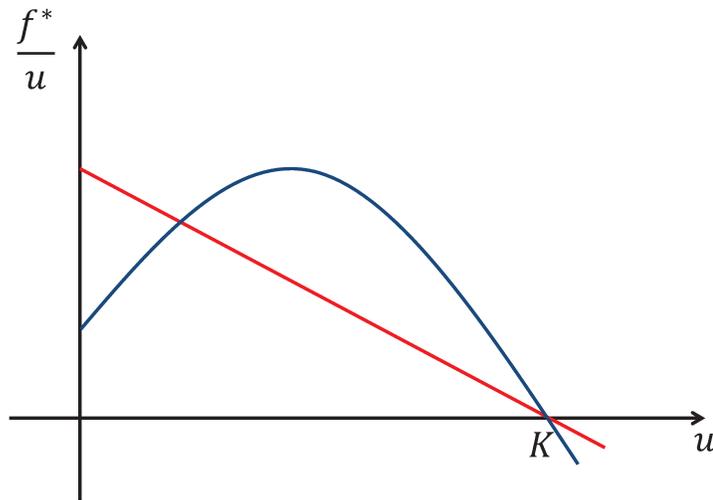


Figura 4.1: Funções de crescimento per capita como função de u . Em vermelho, f_{log}^*/u , modelo logístico, e em azul, f_{all}^*/u , modelo expresso pela equação 4.9. Aqui, K representa a capacidade de suporte.

Como se vê, para o modelo logístico, a taxa de crescimento per capita é máxima quando a população é bem pequena e decresce à medida que u cresce (expressando um aumento da competição entre os indivíduos, como ressaltamos acima), sendo nula quando a população atinge a capacidade de suporte K .

Já o gráfico de crescimento per capita, f_{all}^*/u , do modelo que utilizamos é uma parábola com concavidade voltada pra baixo. Isso indica que a taxa de crescimento per capita cresce com o aumento de u até certo ponto (dado pelo valor de u do vértice da parábola) e passa a decrescer com o aumento de u , para valores de u maiores que esse ponto, até ficar nulo num ponto que também corresponde a uma capacidade de suporte desse modelo (aqui o valor da capacidade de suporte é dado pela maior das raízes da parábola).

Essa correlação positiva entre o crescimento per capita e o número de indivíduos de uma população, para populações pequenas, é chamado em ecologia de *Efeito Allee*, [24, 25]. Esse efeito refere-se ao fato de que, para algumas espécies, o aumento do número de indivíduos numa população pequena pode ser favorável, dada uma maior efetividade para se encontrar alimento em bandos ou uma maior probabilidade de se encontrar parceiros sexuais compatíveis, mas passa a ser desfavorável quando o número de indivíduos fica muito grande, expressando novamente o efeito de competição intraespecífica.

Para a taxa de mortalidade per capita dos predadores, $g^*/v = (1 + dv)$, nota-se que ela também depende do valor de v , sendo que quanto maior v , maior é a taxa de mortalidade. Isso está relacionado também a algum tipo de competição dentro da própria população, podendo indicar competições por comida ou brigas por fêmeas ou território.

Uma vez definidas as equações da dinâmica, falta definir a estrutura da rede que consideramos como nosso espaço. O objetivo principal do trabalho que desenvolvemos era estudar formação de padrões de Turing em redes complexas e, para isso, utilizamos redes livres de escalas, construídas de acordo com o algoritmo proposto por Barabási e Albert (veja referências no capítulo de revisão “Redes Complexas”).

Do ponto de vista ecológico, essa abordagem foca em dois aspectos interessantes: o primeiro, ao tratarmos o espaço como uma rede, é a possibilidade de avaliar formação de padrões de distribuição de espécies em ambientes fragmentados e o segundo, ao usarmos redes livres de escala, é a tentativa de entender como uma estrutura bastante heterogênea de ligações entre esses fragmentos influi nos padrões de distribuição.

No trabalho de referência, [12], foram analisadas redes livres de escala e aleatórias quanto a seus potenciais a formação de padrões de Turing. Ambas apresentaram formação desse tipo de padrão para os modelos dinâmicos trabalhados, cada uma com aspectos particulares interessantes. Reproduzimos aqui a análise feita para o caso de redes livres de escala.

Estabelecendo os parâmetros $a = 35,0$, $b = 16,0$, $c = 9,0$ e $d = 0,4$ (que serão utilizados em todos os resultados desse capítulo) nas equações 4.9, obtemos o estado estacionário $(\bar{u}, \bar{v}) = (5, 10)$. Pela equação 4.8 encontramos $\sigma_c \simeq 15,5$. Após obtermos numericamente os autovalores da matriz laplaciana, Λ_α , substituímos em 4.7 para encontrar λ_α .

Na figura 4.2, mostramos os resultados obtidos para λ_α , bem como os modos críticos, α_c , para três valores diferentes de ε , com $\sigma = \sigma_c$, em função dos autovalores da matriz laplaciana. Para comparação, para $\varepsilon = 0.06$ também mostramos os casos de $\sigma = 15,0$ e $\sigma = 16,0$.

Como vemos no caso $\varepsilon = 0.06$, em analogia direta com o caso contínuo, para $\sigma < \sigma_c$ todos os valores de λ_α são menores que zero, de forma que os modos relacionados são estáveis e não há formação de padrão. A partir de $\sigma = \sigma_c$, um dos modos cruza o eixo horizontal, passando a ser instável e vindo a formar o padrão na rede posteriormente. Para $\sigma > \sigma_c$, todos os modos instáveis que possuem $\lambda_\alpha > 0$ contribuem para a formação do padrão final.

Como se vê na expressão 4.8, o valor crítico σ_c independe do valor de ε . Todavia o modo

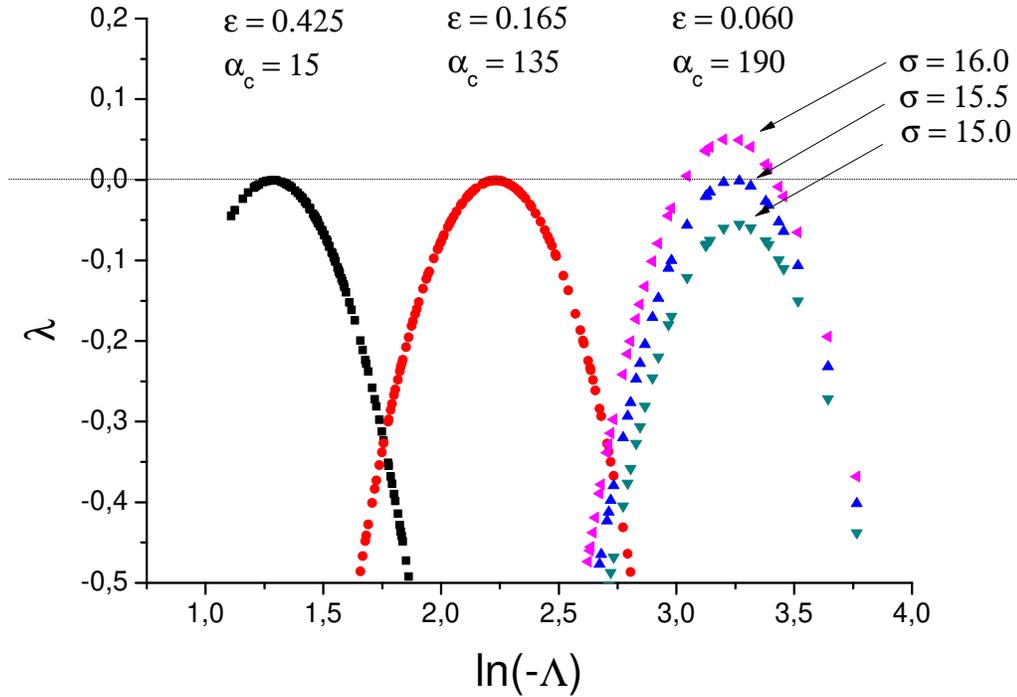


Figura 4.2: Taxas de crescimento λ_α em função dos autovalores da laplaciana Λ_α , para uma rede livre de escala com $N = 200$ e $\langle k \rangle = 10$. Os valores de λ_α são mostrados, juntamente com os índices dos modos críticos, α_c , para $\varepsilon = 0,425$, $\varepsilon = 0,165$ e $\varepsilon = 0,060$, com $\sigma = 15,5 \simeq \sigma_c$. Para $\varepsilon = 0,060$ também mostramos os casos de $\sigma = 15,0$ e $\sigma = 16,0$. Reproduzido a partir de [12].

que se torna instável depende de ε , de forma que se tem $\Lambda_{\alpha_c} \propto 1/\varepsilon$ (o que pode ser mostrado impondo que o máximo de λ_α seja igual a 0).

A partir do momento que um dos modos se torna instável, as perturbações em relação ao estado homogêneo começam a crescer, de modo que o conjunto dessas perturbações na rede tomam inicialmente a forma do autovetor da matriz laplaciana referente a esse modo instável (de acordo com as expansões 4.5). Há, nesse ponto, algo interessante a respeito da estrutura desses autovalores, que se relaciona com os padrões formados posteriormente.

Nas figuras 4.3(a) e 4.3(b), temos os autovetores referentes aos modos críticos (os primeiros que apresentam $\lambda_\alpha > 0$), quando $\varepsilon = 0,060$ e $\varepsilon = 0,425$, respectivamente.

Como se pode notar, em cada um dos autovetores, um certo número de componentes apresenta valores deslocados dos demais (que permanecem próximos de $\phi_i = 0,0$). Estabelecendo como $\phi_i > 0,1$ e $\phi_i < -0,1$ (retas azuis) as componentes que consideramos deslocadas, é possível notar que esse deslocamento é localizado, sendo que os índices das componentes deslocadas relacionam-se diretamente com índices dos nós da rede que apresentam valores próximos de grau (lembre-se que os índices dos nós da rede estão diretamente relacionados com os índices das componentes dos autovetores através das relações 4.5).

Como discutido em [12], as matrizes laplacianas de redes com distribuições de grau bas-

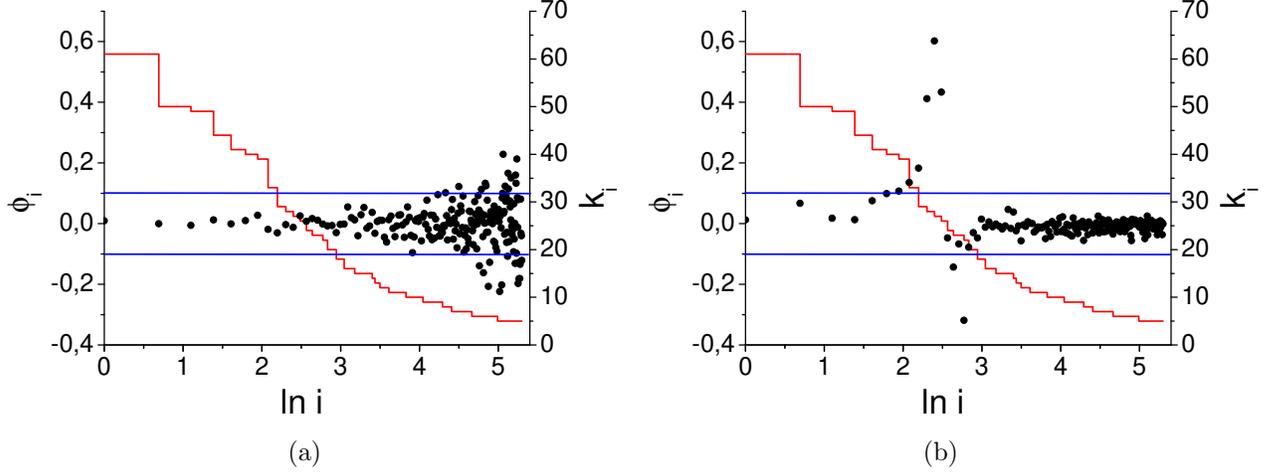


Figura 4.3: Autovetores da matriz laplaciana, para uma rede livre de escala com $N=200$ e $\langle k \rangle = 10$. Em (a), autovetor referente a $\alpha_c = 190$ ($\varepsilon = 0,060$) e, em (b), autovetor referente a $\alpha_c = 15$ ($\varepsilon = 0,425$), ambos em função do índice i dos nós da rede. As curvas vermelhas em escada mostram os graus, k_i , dos nós da rede. Os índices i foram ordenados de forma decrescente nos graus. Reproduzido a partir de [12].

tante heterogêneas, apresentam essa característica de localização dos autovetores, ou seja, grupos localizados de componentes apresentam valores deslocados, enquanto a maioria das demais permanece próxima de 0. Se chamamos \bar{k}_α o valor médio de grau dos índices nos quais ocorre o deslocamento, é possível mostrar (veja [12]) que:

$$\bar{k}_\alpha \propto \frac{1}{\varepsilon} \quad (4.10)$$

sendo que essa localização dos autovetores tem bastante influência sobre o padrão estacionário que se forma, ao integrar o sistema dinâmico em questão.

Para investigar as propriedades do padrão estacionário que se forma, integramos numericamente o sistema de equações 4.2, usando as equações da dinâmica 4.9. Para tal, inicialmente, construímos uma rede de acordo com o algoritmo de Barabási e Albert e determinamos, em cada nó da rede, os valores das variáveis u_i e v_i como sendo iguais ao valor do estado estacionário do sistema 4.9 (que, para o conjunto de parâmetros adotados é dado por $(\bar{u}, \bar{v}) = (5, 10)$), acrescido de pequenas perturbações aleatórias ($0,00005 * p$ vezes o valor do estado estacionário, onde p é uma variável aleatória com distribuição uniforme, definida de -1 a 1).

Na figura 4.4 são mostrados os padrões inicial e final, para uma rede livre de escala, com $N = 1000$ e $\langle k \rangle = 20$, com $\sigma = 15, 6$, pouco acima do limiar de estabilidade, para dois valores de ε , bem como os autovetores referentes aos modos críticos.

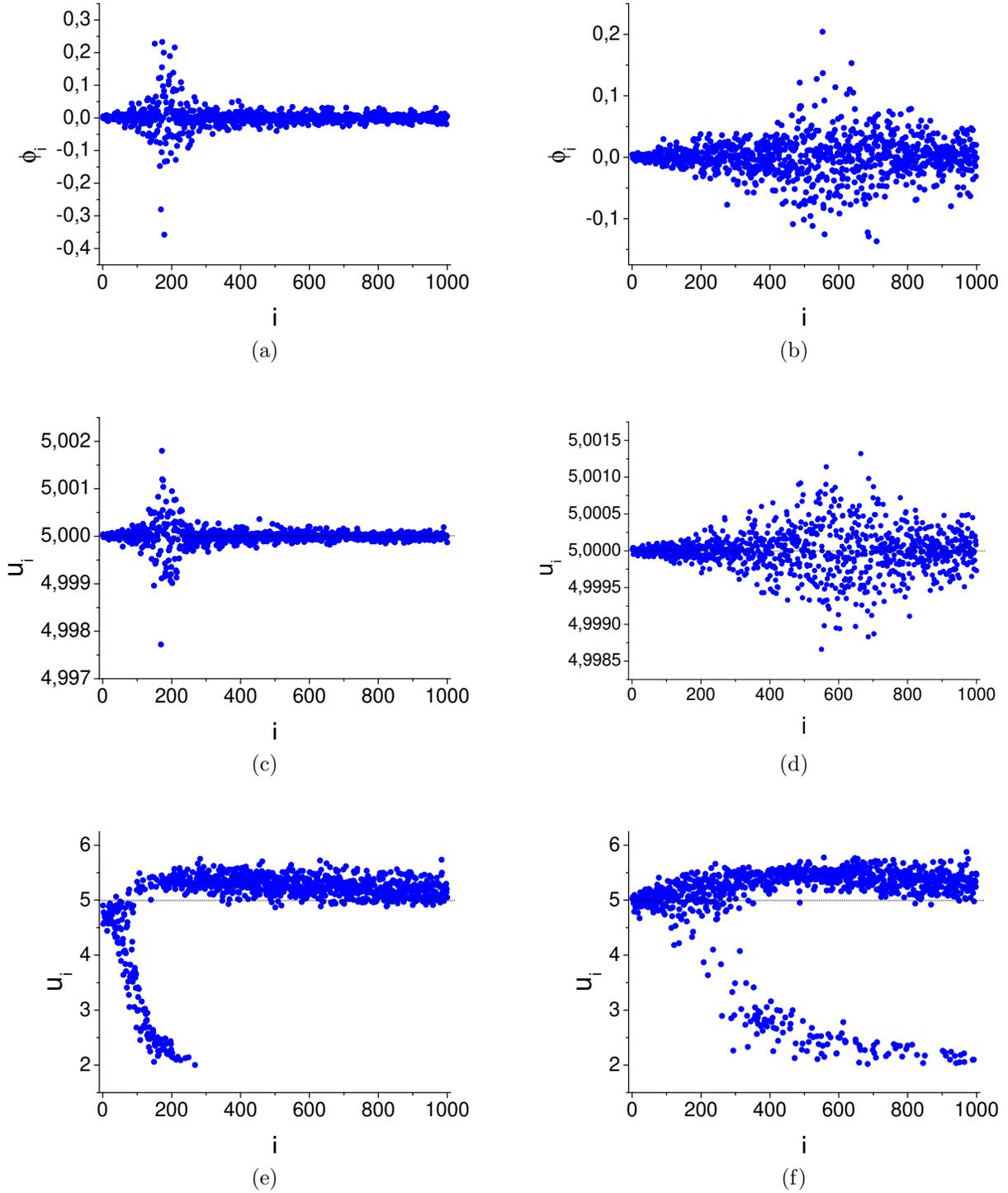


Figura 4.4: Configurações da população de presas, u , em dois diferentes instantes de tempo, numa rede livre de escala, com $N = 1000$ e $\langle k \rangle = 20$, obtidas via integração numérica das equações 4.2, com $\sigma = 15,6$ (pouco acima do limiar $\sigma_c \simeq 15,5$). Em (c), $t = 200$ e $\varepsilon = 0,06$, em (d), $t = 200$ e $\varepsilon = 0,12$, em (e), $t = 1500$ e $\varepsilon = 0,06$ e em (f), $t = 1500$ e $\varepsilon = 0,12$. As linhas tracejadas indicam o valor do estado homogêneo e os índices dos nós estão ordenados de acordo com ordem decrescente de grau. As figuras (a) e (b) mostram os autovetores críticos referentes a esses valores de ε : em (a), $\varepsilon = 0,06$ (modo crítico $\alpha_c = 824$) e em (b), $\varepsilon = 0,12$ (modo crítico $\alpha_c = 422$).

A formação do padrão se dá como descrevemos anteriormente. Depois que um ou mais dos modos se torna instável, pequenas perturbações inicialmente estabelecidas em relação ao estado homogêneo começam a crescer exponencialmente. Esse crescimento exponencial, num estágio posterior, é barrado pelos termos não considerados na análise linear, uma vez que existe um conjunto limitado ao qual as soluções do sistema dinâmico estão confinadas. Por fim, um padrão estacionário de configuração das variáveis dinâmicas emerge na rede.

Nas figuras 4.4(c) e 4.4(d) temos o estágio inicial (para tempo $t = 200$) da divergência da variável u em relação ao estado homogêneo, para $\varepsilon = 0,06$ e $\varepsilon = 0,12$, respectivamente. Nas figuras 4.4(a) e 4.4(b) são mostrados os autovetores referentes ao modo crítico quando são considerados os dois valores de ε acima ($\alpha_c = 824$ e $\alpha_c = 422$, respectivamente). Como vemos, a configuração da variável dinâmica toma a forma dos autovetores para tempos curtos.

Para tempos maiores, entretanto, a configuração da variável u difere bastante da forma do autovetor. As figuras 4.4(e) e 4.4(f) dão as configurações dos padrões estacionários na rede (aqui, usamos $t = 1500$). Note na figura 4.4(e) que apenas os nós mais conectados sofrem diferenciação significativa em relação ao estado homogêneo (lembre-se que os índices foram ordenados com ordem decrescente de grau e a distribuição de grau segue uma lei de potência), enquanto que na figura 4.4(f) a maioria dos nós diferenciados apresenta valores bem mais baixos de grau. Aqui é notável como diferenças nos modos críticos levam a diferenças nos padrões estacionários finais, ainda que esses padrões finais sejam bem diferentes dos autovetores críticos.

É interessante também mostrar como o padrão final da população de predadores, v_i , se estabelece na rede. Na figura 4.5 mostramos as configurações estacionárias de u e v , considerando uma rede com $N = 1000$ e $\langle k \rangle = 20$ e os parâmetros $\varepsilon = 0,12$ e $\sigma = 20,0$.

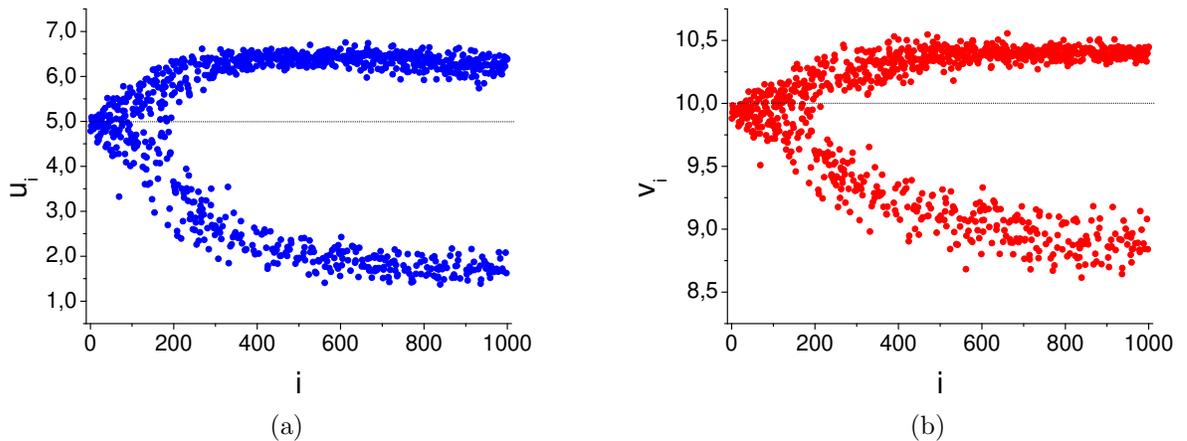


Figura 4.5: Padrões estacionários da população de presas, (a), e da população de predadores, (b). A rede é livre de escala com $N = 1000$ e $\langle k \rangle = 20$ e os parâmetros de difusão são $\varepsilon = 0,12$ e $\sigma = 20,0$.

Note que o padrões estacionários de u e v tem formas bastante semelhantes. Em ambos, a maioria dos nós pode ser separada em nós com populações com “alta” abundância e nós

com populações com “baixa” abundância (sendo “alto” e “baixo” aqui uma referência a “com valor maior que o estado homogêneo” e “com valor menor que o estado homogêneo”). Comparando com a figura 4.4(f), vemos que o número de nós de baixa abundância de presas, para o caso com $\sigma = 20,0$ é bem maior que para o caso com $\sigma = 15,6$, sendo também maior a diferença em relação ao estado homogêneo dos nós de alta abundância.

Interessante também é notar que todos os sítios que apresentam diferenciação significativa dos nós (principalmente aqueles que apresentam $i > 250$) e que tem população estacionária de presas, u_i , acima do estado homogêneo ($\bar{u} = 5,0$ no caso das presas), também tem população estacionária de predadores, v_i , acima do estado homogêneo ($\bar{v} = 10,0$ no caso dos predadores), o mesmo valendo para populações u e v abaixo do estado homogêneo.

Para fins que ficarão claros no próximo capítulo, é interessante fazer uma contagem na figura 4.5(a), dentre os nós significativamente diferenciados (com $i > 250$), quantos apresentam alta abundância ($u_i > 5,0$) e quantos apresentam baixa abundância ($u_i < 5,0$). Um histograma para essa contagem é dado na figura 4.6. A relação entre o número de nós que apresenta alta abundância de presas e o número de nós que apresenta baixa abundância de presas é de, aproximadamente, 2:1. Isso é equivalente a dizer que, para esse conjunto de parâmetros, a probabilidade de que um nó (dentre os que sofrem diferenciação mais pronunciada) apresente alta abundância de presas é $2/3$ e, conseqüentemente, a probabilidade de que um nó apresente baixa abundância é de $1/3$.

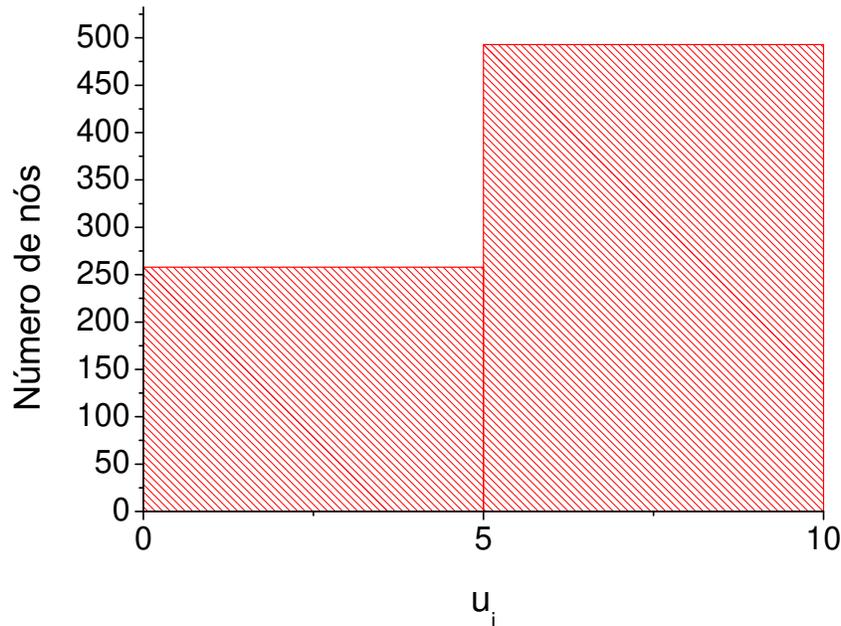


Figura 4.6: Histograma referente a contagem dos nós significativamente diferenciados $i > 250$ para a distribuição de u na rede, na figura 4.5(a). As contagens são feitas nos intervalos $0 < u_i < 5,0$ e $5,0 < u_i < 10,0$.

Como se pode verificar, comparando as figuras 4.4(f) e 4.5(a), o aumento da razão entre

as constantes de difusão de predadores e presas, σ , leva a diferenças notáveis no padrão final, sendo a mais pronunciada o aumento da “abertura” do padrão na rede em relação ao estado homogêneo. Como mostrado em [12], além dessa dependência com os parâmetros, há uma dependência muito forte com as condições iniciais impostas sobre a rede.

Para avaliar essa “abertura” do padrão, definimos, segundo [12], uma quantidade a qual damos o nome de *amplitude*:

$$A = \sum_{i=1}^N (u_i - \bar{u})^2 + (v_i - \bar{v})^2 \quad (4.11)$$

Para avaliar o efeito das condições iniciais, começamos com um valor de σ abaixo do limiar de estabilidade, σ_c , e com condições iniciais levemente perturbadas em relação ao estado estacionário e integramos numericamente o sistema dinâmico. Depois de um tempo suficiente para se atingir uma situação de equilíbrio (no presente caso, utilizamos $t = 1000$), calculamos o valor de A referente a esse conjunto de parâmetros. Daí, aumentamos o valor de σ e começamos com condições iniciais iguais à configuração final anterior. Os resultados desse procedimento são mostrados na figura 4.7.

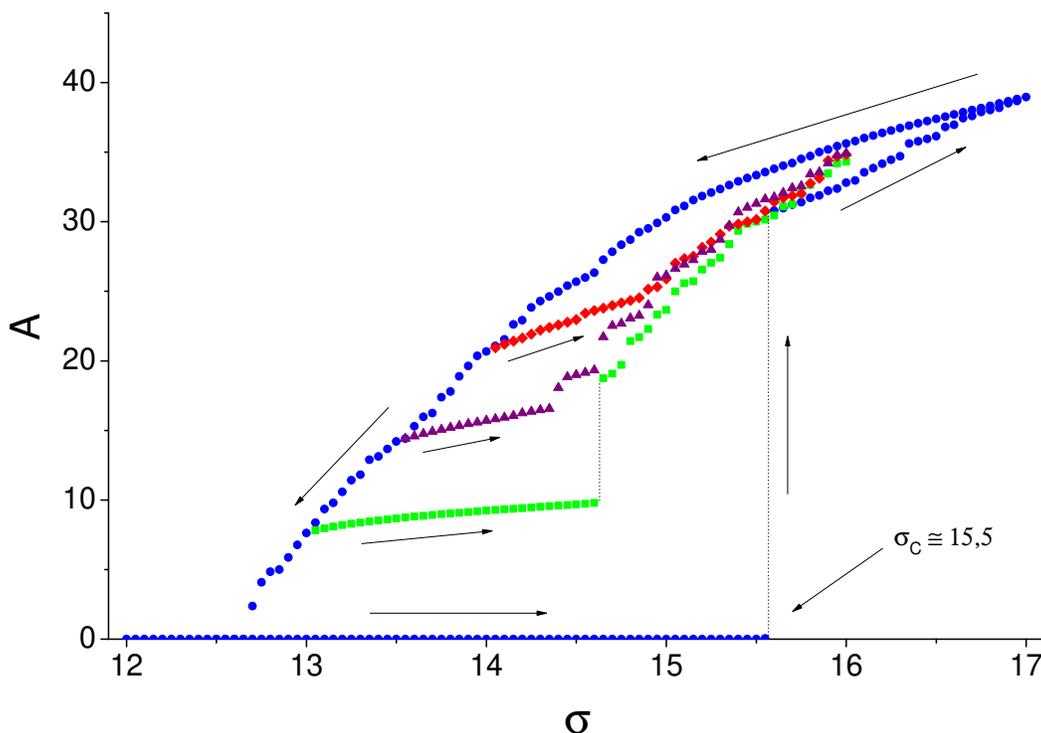


Figura 4.7: Amplitude, A , como função da razão entre as constantes de difusão, σ . As condições iniciais na rede são estabelecidas de acordo com a configuração final da integração anterior. Os caminhos verde, roxo e vermelho, indicam aumentos no valor de σ a partir de configurações diferentes da rede. Reproduzido a partir de [12].

Começando de $\sigma = 12,0$ e condições iniciais bem próximas do estado estacionário, vemos

que pequenos aumentos no valor de σ praticamente não tem efeito sobre a amplitude, uma vez que nenhum dos modos se tornou instável e a configuração permanece próxima ao estado estacionário. Quando o valor de σ passa de 15,5, que corresponde ao valor de σ_c , há uma transição abrupta no valor de A , relacionado com a formação do padrão de Turing que discutimos anteriormente. A partir daí, aumentos de σ levam a aumentos progressivos de A , traduzindo o aumento da “abertura” do padrão que notamos anteriormente.

O mais interessante aqui é que, se o valor de σ para as novas integrações for sendo reduzido, a partir de uma configuração com valor alto de A , o que se nota é que os estados estacionários obtidos na “volta” não são os mesmos dos obtidos na “ida”. Até mesmo quando se utiliza um valor de σ abaixo de σ_c , o valor de A continua decrescendo de forma mais suave, não se notando uma queda abrupta nessa quantidade.

Se a mudança no valor de σ volta a ser revertida em diferentes pontos desse processo, novos estados estacionários são obtidos para o mesmo conjunto de parâmetros, como pode-se visualizar pelos caminhos com cores diferentes na figura 4.7. Esse fenômeno é denominado histerese e geralmente está associado à presença de multiestabilidade em sistemas dinâmicos. O que vemos é que, para um mesmo conjunto de parâmetros, vários estados estacionários para a evolução do sistema são possíveis, sendo que a realização de um ou outro desses estados depende sensivelmente das condições iniciais impostas às variáveis dinâmicas na rede.

Capítulo 5

Padrões de Turing em Redes Complexas: modelo estendido

5.1 Estendendo o modelo

Até o momento, estudamos a formação de padrões de Turing para sistemas definidos em redes complexas que apresentam dois graus de liberdade. Como vimos, é possível associar as variáveis a populações de espécies interagentes e definir as equações da dinâmica de modo que representem essa interação ecológica. Dessa maneira, podemos associar os padrões estacionários, formados via mecanismo de Turing, a padrões de abundância de espécies nessa rede.

Nesse capítulo, estendemos o modelo original proposto em [12], explorando a formação de padrões de Turing em sistemas de reação-difusão com mais de dois graus de liberdade. Todos os resultados mostrados aqui são originais, obtidos durante os trabalhos que desenvolvemos nesse mestrado.

Como primeira tentativa de extensão do modelo, pensamos em estudar sistemas com três graus de liberdade, x , y e z , de acordo com o sistema genérico:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}x_i &= f(x_i, y_i, z_i) + \varepsilon \sum_{j=1}^N L_{ij}x_j \\ \frac{d}{dt}y_i &= g(x_i, y_i, z_i) + \sigma_1\varepsilon \sum_{j=1}^N L_{ij}y_j \\ \frac{d}{dt}z_i &= h(x_i, y_i, z_i) + \sigma_2\varepsilon \sum_{j=1}^N L_{ij}z_j,\end{aligned}\tag{5.1}$$

onde, novamente, cada uma das variáveis dinâmicas está definida em cada nó i de uma rede complexa. As razões entre as constantes de difusão de y e x e entre z e x são dadas por σ_1 e

σ_2 , respectivamente, e as interações locais entre as variáveis são dadas pelas funções f , g e h .

A análise da possibilidade de formação de padrões de Turing para esse caso é a mesma. Definimos o estado homogêneo relevante do sistema como a solução positiva de $f(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}) = g(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}) = h(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}) = 0$. A partir daí, considerando o sistema com difusão, analisamos a evolução de pequenas perturbações em relação ao estado homogêneo, definido em todos os nós da rede. É fácil mostrar que a Jacobiana do sistema 5.1 é dada por:

$$\begin{pmatrix} f_x + \varepsilon A_\alpha & f_y & f_z \\ g_x & g_y + \sigma_1 \varepsilon A_\alpha & g_z \\ h_x & h_y & h_z + \sigma_2 \varepsilon A_\alpha \end{pmatrix}, \quad (5.2)$$

onde as derivadas parciais são avaliadas no ponto $(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$ e A_α são os autovalores da matriz Laplaciana.

Aqui, estabelece-se uma diferença crucial em relação à análise para o sistema com dois graus de liberdade: no sistema com dois graus de liberdade, a Jacobiana do sistema é dada por uma matriz 2 x 2, de modo que pode-se, facilmente, obter as formas analíticas para os autovalores da mesma. Como essas formas são relativamente simples, é possível determinar para quais intervalos nos parâmetros do sistema é possível obter autovalores positivos da Jacobiana, fazendo com que o estado homogêneo se torne instável e o padrão de Turing possa se formar.

Para o sistema com três graus de liberdade, entretanto, a Jacobiana é uma matriz 3 x 3 e, embora seja possível obter formas analíticas para os autovalores de uma matriz de grau 3, as formas que se obtêm para seus autovalores são muito mais complicadas do que as obtidas para as matrizes 2 x 2. Sendo assim, não é possível obter uma forma viável de determinar os intervalos dos parâmetros para os quais é possível a formação de padrões de Turing.

O que se pode fazer, nesse caso, é obter numericamente os autovalores da Jacobiana como função dos autovalores da Laplaciana e analisar se, para algum conjunto de parâmetros, é possível obter pelo menos um autovalor positivo da Jacobiana, que corresponderia a um modo instável, de forma que o padrão pudesse se formar.

Para as interações locais f , g e h , poderíamos escolher dentre uma grande variedade de funções. Todavia, estávamos interessados em um sistema que exibisse um ponto de equilíbrio positivo e estável na ausência de difusão (sobre o qual analisaríamos a mudança de estabilidade devida ao processo difusivo), mas que, através de uma mudança adequada dos parâmetros, pudesse também estar sujeito a regimes caóticos.

É certo que, a rigor, a análise do sistema difusivo a partir de um regime caracterizado como caótico na ausência de difusão foge ao desenvolvimento que fizemos para padrões de Turing, entretanto, a justificativa para essa escolha repousa no potencial que sistemas com tais regimes tem para exibir configurações não-triviais e bastante interessantes.

A partir dessa idéia, propusemos a análise a partir das equações de dois conhecidos sistemas, sendo o primeiro deles o sistema de Lorenz.

As equações propostas por Lorenz, em 1963, [26, 27], resultam de uma simplificação, num modelo para estudo de convecção na atmosfera. As equações são dadas por:

$$\begin{aligned} f(x, y, z) &= -\sigma(x - y) \\ g(x, y, z) &= -xz + rx - y \\ h(x, y, z) &= xy - bz, \end{aligned} \tag{5.3}$$

onde σ , b e r são parâmetros. Os parâmetros σ e b são, geralmente, fixos, com $\sigma = 10$ e $b = 8/3$, e o comportamento do sistema é analisado em função de r . São quatro os regimes mais interessantes:

- Para $r < 1$, o único ponto fixo do sistema é a origem $(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}) = (0, 0, 0)$ e esse ponto fixo é estável;
- Para $1 < r < r_H = \frac{\sigma(\sigma + b + 3)}{\sigma - b - 1}$ (para $\sigma = 10$ e $b = 8/3$, $r_H \simeq 24,74$), a origem passa a ser instável e surgem dois pontos fixos estáveis: $C^+ = (\sqrt{b(r-1)}, \sqrt{b(r-1)}, r-1)$ e $C^- = (-\sqrt{b(r-1)}, -\sqrt{b(r-1)}, r-1)$;
- Para $r > r_H$, todos os pontos fixos se tornam instáveis e surge um atrator estranho caótico na forma de uma borboleta;

É interessante que para $r > r_1 = 24,06$ o atrator estranho já aparece. Assim, no intervalo $r_1 < r < r_H$, os pontos fixos estáveis C^+ e C^- coexistem com o atrator estranho. Nesse intervalo, o sistema apresenta histerese.

O segundo sistema dinâmico que utilizamos para estudar formação de padrões de Turing, foi o modelo ecológico de predação com 3 níveis tróficos, proposto originalmente por Hastings e Powell, [28], cuja forma adimensionalizada é dada por:

$$\begin{aligned} f(x, y, z) &= x(1 - x) - f_1(x)y \\ g(x, y, z) &= f_1(x)y - f_2(y)z - d_1y \\ h(x, y, z) &= f_2(y)z - d_2z, \end{aligned} \tag{5.4}$$

onde as funções f_j são dadas por

$$f_j(u) = \frac{a_j u}{1 + b_j u}$$

e a_j , b_j e d_j são parâmetros do modelo.

No modelo de Hastings e Powell, x representa uma população de presas, que apresenta crescimento logístico, predada pelos predadores da espécie y , cuja população, na ausência de x , decresce exponencialmente, de acordo com o termo $-d_1y$. A espécie y é predada

pelo predador superior z , cuja população, na ausência de sua presa, também decresce exponencialmente, de acordo com o termo $-d_2z$. As funções de predação f_j são comumente chamadas respostas funcionais *Holling tipo-II*, [23], e representam uma predação que satura, representando a incapacidade de um dado predador de comer presas indefinidamente.

Como originalmente proposto por Hastings e Powell, b_1 é o único parâmetro que não permanece fixo. Os demais são fixados em: $a_1 = 5,0$, $a_2 = 0,1$, $b_2 = 2,0$, $d_1 = 0,4$, e $d_2 = 0,01$. A dinâmica é, então, estudada variando-se b_1 .

É possível mostrar que o sistema acima apresenta vários pontos fixos (veja detalhes na referência [29]), porém o único ponto fixo positivo (com as três componentes positivas) é dado por $(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}) = (R_1 + 0, 5\sqrt{R_2}, R_3, R_4)$, onde:

$$R_1 = \frac{b_1 - 1}{2b_1}, \quad R_2 = (2R_1)^2 - 4\frac{a_1\bar{y} - 1}{b_1}, \quad R_3 = \frac{d_2}{a_2 - b_2d_2}, \quad R_4 = \frac{1 + b_2\bar{y}}{a_2} \left(\frac{a_1\bar{x}}{1 + b_1\bar{x}} - d_1 \right)$$

O ponto fixo acima é estável para $1,0 < b_1 < 2,0$. Quando b_1 tem seu valor progressivamente aumentado, a partir de $b_1 = 2,0$, o ponto fixo acima perde sua estabilidade e surgem no sistema órbitas periódicas, na forma de ciclos-limites, e atratores caóticos (de acordo com [28], ciclos-limites começam a aparecer por volta de $b_1 \simeq 2,3$ e atratores caóticos por volta de $b_1 \simeq 2,4$)

Definidos nossos dois sistemas de trabalho, procedemos à análise numérica, que consistiu em avaliar as derivadas parciais de 5.3 e 5.4, de modo a construir a matriz Jacobiana de acordo com 5.2. Como a matriz Jacobiana deve ser avaliada no ponto fixo, escolhemos os pontos fixos positivos (no sistema de Lorenz, o ponto C^+ , e no sistema de Hastings-Powell, aquele que mostramos explicitamente acima), e escolhemos os parâmetros r (para o sistema de Lorenz) e b_1 (para o sistema de Hastings-Powell) em intervalos que garantissem que o ponto fixo escolhido seria estável na ausência de difusão.

No caso com duas variáveis, o parâmetro ε não está ligado à transição, de negativo para positivo, de qualquer dos autovalores da matriz Jacobiana, mas sim com qual dos modos vai ser o modo crítico, uma vez que a transição ocorra. Isso tem uma razão simples: como o parâmetro ε só aparece multiplicando os autovalores da matriz Laplaciana A_α , ele atua simplesmente como uma reescala no eixo horizontal. Como vemos na matriz 5.2, ε atua aqui também como uma reescala horizontal, de modo que fixamos o seu valor em $\varepsilon = 0,12$.

Para ter todos os elementos de 5.2 definidos, precisaríamos também do conjunto de autovalores da matriz Laplaciana, $\{A_\alpha\}$, que, obviamente, depende da rede específica sobre a qual queremos trabalhar (lembre-se que a matriz Laplaciana é definida como a matriz de Adjacência, que define a topologia da rede, menos os graus de cada nó na diagonal principal). Assim, escolhemos trabalhar com redes livres de escala, construídas de acordo com o algoritmo de Barabási e Albert, com $N = 1000$ e $\langle k \rangle = 20$. Obviamente, as redes obtidas através de aplicações sucessivas do algoritmo não são idênticas, todavia, os intervalos em que

estão contidos os autovalores de cada uma das matrizes Laplacianas obtidas assim não variam tanto (no caso de $N = 1000$ e $\langle k \rangle = 20$, os autovalores, geralmente, estão entre $-180,0$ e $0,0$).

Dessa forma, fizemos com que Λ_α assumisse valores de $-180,0$ a $0,0$, com acréscimos de $0,01$. Para os valores de σ_1 e σ_2 , fizemos com que variassem de 1 a 1000 , com acréscimos de 1 . Para cada conjunto de parâmetros, obtivemos três autovalores da matriz 5.2, através de rotina numérica para cálculo de autovalores obtida do pacote LAPACK.

Como resultado da investigação numérica, ainda que os intervalos utilizados para σ_1 e σ_2 tenham sido bem grandes, não encontramos nenhum caso que apresentasse ao menos um autovalor da Jacobiana com parte real positiva.

Isso quer dizer que, para todos os casos que analisamos, tanto nas equações de Lorenz quanto nas equações de Hastings-Powell, os pontos fixos permanecem estáveis a pequenas perturbações, mesmo na presença da difusão. Dessa forma, integrações numéricas das equações 5.1, com as funções f , g e h específicas para cada caso, sempre convergem para o estado homogêneo, para todos os conjuntos de parâmetros que investigamos.

Nesse ponto, através da abordagem que utilizamos, não é possível concluir se o fato de não termos encontrado autovalores com parte real positiva deve-se a uma limitação dos sistemas dinâmicos escolhidos ou simplesmente por não termos escolhido o conjunto adequado de parâmetros para o modelo. Qualquer que seja o caso, resolvemos partir para outra abordagem.

Sabemos que o modelo de presa e predador, proposto por [12], com as equações dinâmicas dadas pelo modelo de Mimura e Murray, [4], é capaz de apresentar padrões de Turing, através de uma escolha adequada de σ . Uma possibilidade de estudar um sistema similar a esse com mais de dois graus de liberdade é considerar um par adicional de presa e predador, idêntico ao primeiro (onde, por “idêntico”, queremos dizer que o par adicional apresenta as mesmas equações para a dinâmica, dadas por 4.9, e os mesmos valores para os parâmetros), e acoplá-lo ao par inicial, de modo que o predador do segundo par, além de possuir um termo de predação direta com sua presa, também possua um termo de predação indireta com a presa do primeiro par. Dessa forma, consideramos que os pares apresentam dinâmicas iguais de nascimento das presas e morte dos predadores, porém predação indireta assimétrica, visto que o predador do primeiro par não preda a presa do segundo. Essa idéia é representada no diagrama da figura 5.1.

Essa formulação apresenta dois pontos interessantes. O primeiro, do ponto de vista prático, como os dois pares são idênticos, se o acoplamento entre os pares é fraco, é de se esperar que a evolução da dinâmica não seja tão distinta em relação ao caso com duas espécies. Do ponto de vista ecológico, esse modelo estendido está mais próximo de cadeias tróficas reais, que em sua maioria apresentam muitas espécies interagindo entre si, do que o modelo com duas espécies, de modo que interpretações em termos da abundância das espécies

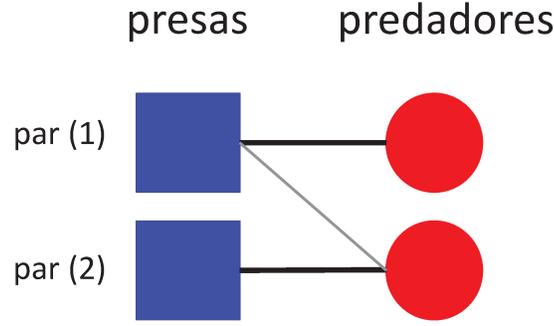


Figura 5.1: Diagrama de representação do modelo com dois pares presa-predador. Além de predação sua presa direta, o predador do par (2) também preda a presa do par (1).

podem ser mais relevantes.

As equações para o modelo estendido, com 4 espécies, são dadas por:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}u_i^{(l)}(t) &= \left(\frac{a + bu_i^{(l)} - (u_i^{(l)})^2}{c} - v_i^{(l)} \right) u_i^{(l)} - \alpha u_i^{(l)} v_i^{(l+1)} + \varepsilon \sum_j L_{ij} u_j^{(l)} \\ \frac{d}{dt}v_i^{(l)}(t) &= [u_i^{(l)} - (1 + dv_i^{(l)})]v_i^{(l)} + f\alpha u_i^{(l-1)} v_i^{(l)} + \sigma\varepsilon \sum_j L_{ij} v_j^{(l)}, \end{aligned} \quad (5.5)$$

onde $l = 1$ e $l = 2$ são os índices dos pares presa-predador. Temos assim, para cada nó i da rede, 4 equações que dão a dinâmica e dispersão de cada uma das 4 variáveis $u_i^{(1)}$, $u_i^{(2)}$, $v_i^{(1)}$ e $v_i^{(2)}$ (como anteriormente, as variáveis u representam as populações de presas e as variáveis v representam as populações de predadores).

Como os pares são idênticos, os parâmetros da dinâmica, a , b , c e d , e os parâmetros da dispersão, ε e σ , são os mesmos nos dois pares. O termo cruzado $\alpha u_i^{(l)} v_i^{(l+1)}$, que representa a predação da presa (1) pelo predador (2), faz com que o sistema de equações diferenciais, em cada nó i , esteja acoplado. Aqui α corresponde à força da predação secundária (ou a força do acoplamento entre os pares) e f representa a razão entre o ganho dos predadores e a perda das presas. Para o caso com 4 espécies, obviamente, $u_i^{(0)} = v_i^{(3)} = 0$.

Procedemos assim para a investigação do sistema 5.5.

5.2 Modelo ecológico: 4 espécies

Para estudar padrões de Turing nesse novo sistema, procedemos da mesma maneira. Primeiro, estabelecemos o estado homogêneo relevante como o ponto fixo positivo do sistema sem difusão (se esse existir). Esse ponto fixo deve ser estável na ausência de difusão e passar a ser instável quando a difusão é considerada na rede. Sabemos que o ponto fixo é

instável quando pelo menos um autovalor da matriz Jacobiana do sistema apresenta parte real positiva. Nesse cenário, pequenas perturbações em relação ao estado homogêneo tendem a crescer e, posteriormente, o padrão tende a se formar (se, como já ressaltado, as soluções do sistema dinâmico forem limitadas).

Dessa forma, determinamos numericamente os pontos fixos do sistema 5.5 na ausência de difusão ($\varepsilon = 0, 0$). Para isso, fixamos os parâmetros $a = 35, 0$, $b = 16, 0$, $c = 9, 0$ e $d = 0, 4$, variando os valores de f e α . Para valores pequenos do acoplamento α , de fato existe um ponto fixo positivo.

Além disso, também avaliamos a estabilidade desse ponto fixo positivo calculando os autovalores da matriz Jacobiana (sem difusão). Vimos assim que independente do valor de f , a estabilidade desse ponto é garantida se $\alpha < 0, 08$ (vale lembrar que os valores biologicamente plausíveis para f estão no intervalo de 0 a 1).

Como toda a análise que realizamos anteriormente aponta, a utilidade desse sistema para o estudo de formação de padrões de Turing deve ser avaliada no intervalo de parâmetros em que o ponto fixo positivo é estável. Todavia, é interessante fazer aqui uma pausa e analisar que outros regimes dinâmicos podem ser obtidos a partir do momento em que o ponto fixo deixa de ser estável.

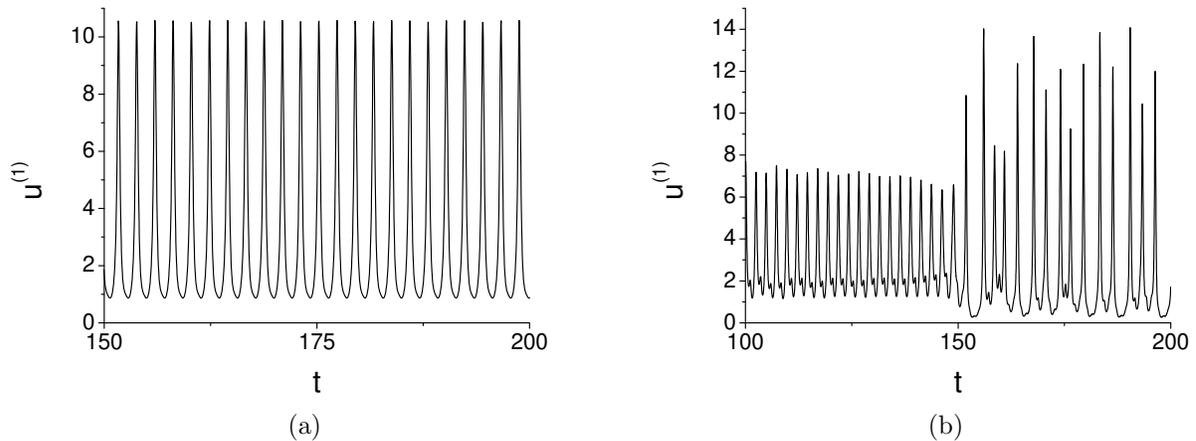


Figura 5.2: Séries temporais para $u^{(1)}$ obtidas via integração numérica de 5.5. Em (a), $f = 0, 2$ e $\alpha = 0, 25$, caracterizando regime periódico, e em (b), $f = 0, 5$ e $\alpha = 0, 35$, caracterizando regime caótico. As demais variáveis dinâmicas, em cada caso, apresentam características de oscilações semelhantes.

Para analisar isso, integramos numericamente o sistema 5.5 até um tempo $t = 300$ (note que, aqui, como não há difusão, o subíndice i pode ser desconsiderado e analisamos puramente o sistema dinâmico com 4 equações). As condições iniciais das variáveis são dadas pelo valor dessa variável no ponto fixo, acrescido de uma pequena perturbação aleatória uniforme. Os parâmetros a , b , c e d são fixados conforme os valores acima e variamos os valores de f e α . Duas séries temporais de $u^{(1)}$ obtidas para diferentes conjuntos de parâmetros são mostradas

na figura 5.2.

Como é possível notar na figura 5.2, os regimes dinâmicos para os diferentes conjuntos de parâmetros são bem distintos. Enquanto que em 5.2(a) é possível notar uma oscilação claramente periódica, em 5.2(b) vemos diferenças marcantes nas posições e intensidades dos picos, o que é marca de um regime caótico.

Para analisar os outros regimes dinâmicos possíveis nesse sistema, fizemos uma escolha com 50 conjuntos distintos de parâmetros, obtidos variando f e α . Depois de passado um transiente inicial, as séries temporais obtidas foram avaliadas via Transformada Rápida de Fourier (FFT), com o software ORIGIN. Os regimes dinâmicos encontrados para o sistema, em função dos parâmetros f e α são mostrados na figura 5.3.

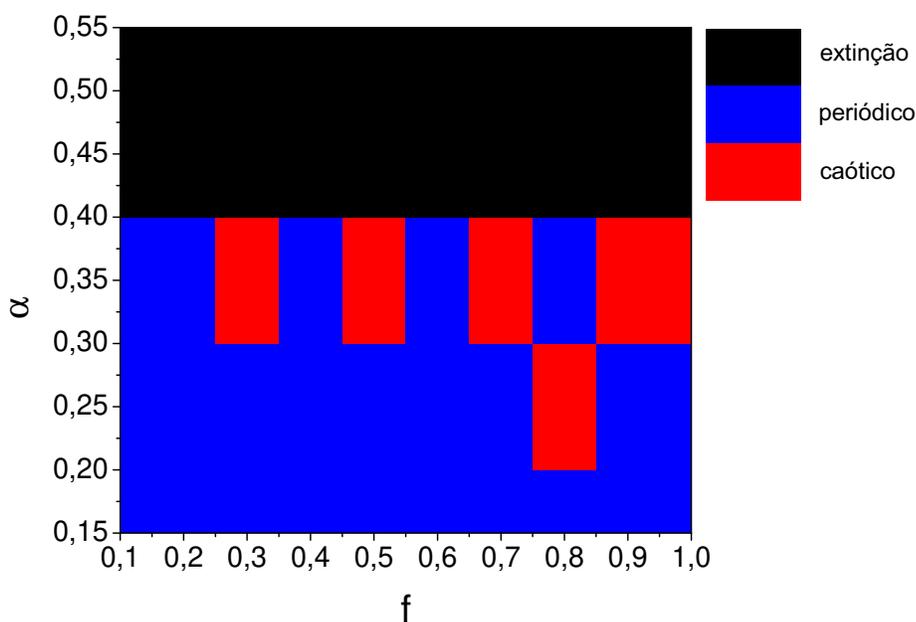


Figura 5.3: Regimes dinâmicos após transiente inicial obtidos para o sistema 5.5, como função dos parâmetros f e α . Aqui, α varia de 0,15 a 0,55, com acréscimos de 0,1 e f varia de 0,1 a 1,0, com acréscimos de 0,1 (os centros dos retângulos coloridos indicam os valores adotados em cada caso). Em azul, regime periódico, em vermelho, regime caótico, e em preto, extinção do par (1), com permanência do par (2).

A região em preto na figura 5.3 indica os casos em que a dinâmica do sistema evoluiu para completa extinção do par (1) e permanência do par (2) no que seria o ponto fixo do sistema com duas espécies, a saber, $(\bar{u}, \bar{v}) = (5, 10)$. É possível interpretar biologicamente esse resultado, uma vez que α representa a força da predação secundária. O aumento de α aumenta a influência que o predador (2) tem sobre a presa (1), de modo que, passado certo limite, o crescimento da população de presas (1) não é capaz de equilibrar a influência de dois predadores fortes e acaba por se extinguir. Seu predador direto, $v^{(1)}$, sem presas, se extingue também. As regiões azul e vermelha indicam os casos em que as séries temporais

das variáveis dinâmicas apresentam regimes periódicos e caóticos, respectivamente.

Quando olhamos para a evolução do sistema, não mais considerando nós isolados, mas definindo as variáveis na rede, sujeitas a difusão através de nós conectados, fenômenos interessantes emergem. Em particular, se consideramos um conjunto de parâmetros da dinâmica tal que o regime de cada nó individual seria caracterizado como caótico é possível notar, através de uma escolha adequada dos parâmetros ligados à difusão, uma sincronização completa da variação temporal das variáveis dinâmicas.

A figura 5.4 mostra como varia, com o tempo, a diferença entre os valores de $u^{(1)}$ para dois nós i e j escolhidos arbitrariamente, sendo a dinâmica de cada nó caótica.

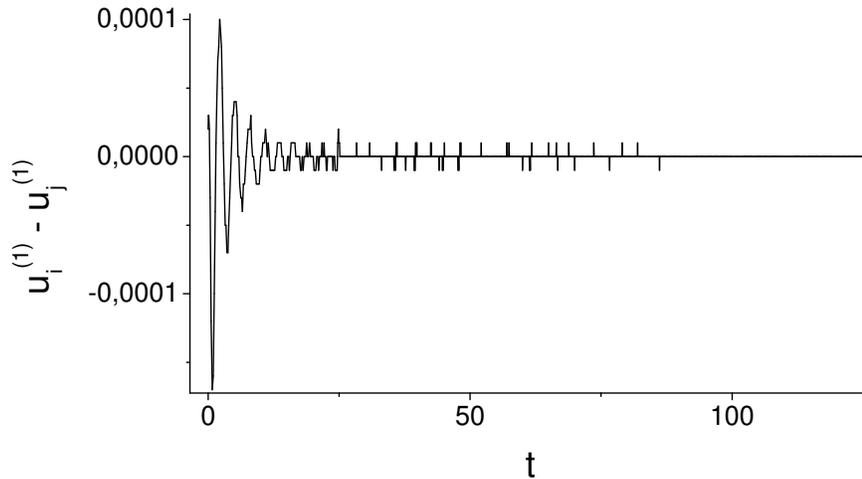


Figura 5.4: Evolução temporal da diferença $u_i^{(1)} - u_j^{(1)}$. A dinâmica é estabelecida sobre uma rede livre de escala com $N = 1000$ e $\langle k \rangle = 20$. Aqui, $\varepsilon = 0,06$ e $\sigma = 2,0$ e os parâmetros da dinâmica, $f = 0,5$ e $\alpha = 0,35$, determinam regimes caóticos.

Veja que depois de um tempo $t = 100$, a diferença entre as variáveis definidas nos dois sítios distintos é nula. Uma vez que as dinâmicas de cada nó da rede estão acopladas via difusão entre nós conectados, o que surge é um estado dinâmico na rede que ainda é caótico, mas que tem todas as variáveis, definidas em cada nó, sincronizadas.

É intuitivo pensar que no limite $\varepsilon \rightarrow 0$, a sincronização entre as variáveis em cada nó desapareça e essas oscilem de forma caótica, mas cada uma à sua maneira. Para avaliar esse efeito, necessitamos de um parâmetro de ordem, que avalie o efeito de sincronização, parcial ou total, na rede como função de ε .

Para isso, usamos o parâmetro R , definido por Garcia-Ojalvo, Elowitz e Strogatz, [30]:

$$R = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{\langle X_i^2 \rangle - \langle X_i \rangle^2}, \quad (5.6)$$

onde $M(t) = (1/N) \sum_{i=1}^N X_i(t)$, os colchetes, $\langle \cdot \rangle$, denotam *média temporal* e a barra superior, $\overline{\cdot}$, (como a que há no denominador) denota *média sobre os nós da rede*.

Como podemos ver, $M(t)$ é a média na rede, num dado instante de tempo t , sobre alguma das variáveis dinâmicas. O numerador de 5.6 é, portanto, a variância temporal de $M(t)$, para um dado intervalo de tempo. Note que o termo $\langle X_i^2 \rangle - \langle X_i \rangle^2$ refere-se à variância temporal da quantidade X no nó i , para esse mesmo intervalo de tempo. Sendo assim, o denominador de 5.6 é a média na rede de todas essas variâncias individuais dos nós.

Suponhamos que estamos numa situação completamente dessincronizada. Nesse cenário, como cada uma das variáveis X_i (para cada nó i) está num regime caótico, suas evoluções temporais são oscilações de grande amplitude e descorrelacionadas (dado que as condições iniciais são aleatórias). Devido a essa falta de correlação, a média dessas variáveis na rede, para cada instante de tempo, $M(t)$, tem um valor aproximadamente constante, de modo que a variância temporal de $M(t)$ tem um valor bem pequeno. Devido às grandes amplitudes de oscilação, cada uma das variâncias temporais, para cada um dos nós, tem um valor grande, de modo que a média dessas variâncias na rede também tem um valor grande. Assim, para o caso completamente dessincronizado, temos $R \approx 0$.

Por outro lado, se as oscilações das variáveis em cada nó estão completamente sincronizadas, então todos os X_i são idênticos em cada instante de tempo. Além disso, a média dos X_i na rede, $M(t)$, também é, obviamente, idêntica a cada X_i . Dessa maneira, o numerador e o denominador são iguais e temos $R = 1$.

Vemos assim que o parâmetro R é adequado para descrever a transição do regime dessincronizado na rede para o regime sincronizado, através de um aumento do parâmetro ε . A figura 5.5 mostra cálculos do parâmetro R em função de ε , considerando a evolução temporal das variáveis $u_i^{(1)}$, com parâmetros referentes ao regime caótico na ausência de difusão, numa rede livre de escala com $N = 1000$ e $\langle k \rangle = 20$.

Como é possível ver, já para valores bem pequenos de ε , começa a haver uma sincronização parcial ($0 < R < 1$) entre os nós da rede. Aqui, a topologia tem papel muito importante no processo de sincronização, de modo que quanto mais heterogênea a rede, menor é o parâmetro crítico, ε_c , a partir do qual alguma sincronização parcial pode ser encontrada (de fato, tal gráfico para transição é bastante semelhante ao encontrado para o limiar de espalhamento de epidemias em redes complexas. Veja [14] para processos epidêmicos em redes complexas e [31] para sincronização em redes heterogêneas). À medida que ε aumenta, as variáveis na rede vão se tornando cada vez mais sincronizadas, até chegar no estado totalmente sincronizado ($R = 1$) por volta de $\varepsilon \simeq 0,35$.

O problema de sincronização em redes complexas é tópico de inúmeros estudos recentes. No presente trabalho, por não ser esse nosso foco principal, optamos apenas por uma descrição superficial de como a sincronização aparece em nosso sistema. Para o leitor mais interessado, sugerimos [14] e o artigo de revisão [32].

Retomemos agora a discussão a respeito da formação de padrões de Turing nesse sistema. Para isso, temos que analisar a situação em que o ponto fixo positivo do sistema é estável

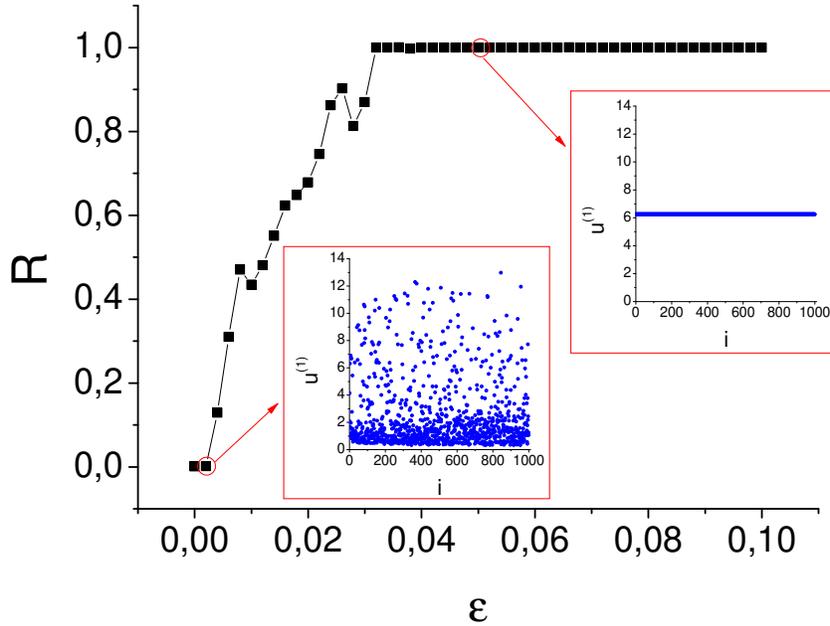


Figura 5.5: Parâmetro R como função de ϵ , calculado a partir da evolução temporal das variáveis $u_i^{(1)}$. Temos $f = 0,5$ e $\alpha = 0,35$, caracterizando regime caótico na ausência de difusão. As variáveis difundem numa rede livre de escala com $N = 1000$ e $\langle k \rangle = 20$. Para esse caso, $\sigma = 2,0$. Os quadrados internos mostram a configuração das variáveis $u_i^{(1)}$ como função dos índices i da rede para um tempo fixo.

na ausência de difusão. Como já mencionado, para $\alpha < 0,08$, independente do valor de f , esse ponto é estável. Sendo assim, devemos analisar a possibilidade de que esse ponto fixo torne-se instável, a partir do momento em que a difusão passe a ser considerada.

Para que o ponto fixo torne-se instável, pelo menos um dos autovalores da Jacobiana do sistema com difusão deve ter parte real positiva, entretanto, diferentemente do caso com 2 espécies, não podemos obter analiticamente qual o valor crítico de σ para o qual isso ocorre.

A análise deve, portanto, ser feita por métodos numéricos. Para tal, obtemos a Jacobiana do sistema completo 5.5 e calculamos seus autovalores. É importante aqui lembrar que para cada autovalor da matriz Laplaciana, temos uma Jacobiana diferente, caracterizada pelo modo referente a esse autovalor da Laplaciana. Como, nesse caso, a Jacobiana do sistema é uma matriz 4×4 , obtemos 4 autovalores, possivelmente complexos, para cada autovalor da Laplaciana.

Os cálculos que realizamos mostraram que, de fato, é possível obter um conjunto de parâmetros para os quais encontramos autovalores da Jacobiana com parte real positiva, indicando que, para tais parâmetros, o estado homogêneo torna-se instável e os padrões de Turing podem emergir.

Procedemos assim para a integração numérica das equações 5.5, estabelecidas sobre uma rede livre de escala com $N = 1000$ e $\langle k \rangle = 20$ (essas serão as características das redes usadas

em todos os demais resultados, a menos que se indique o contrário). Os padrões estacionários para cada uma das espécies, como função dos índices i dos nós da rede são mostrados na figura 5.6.

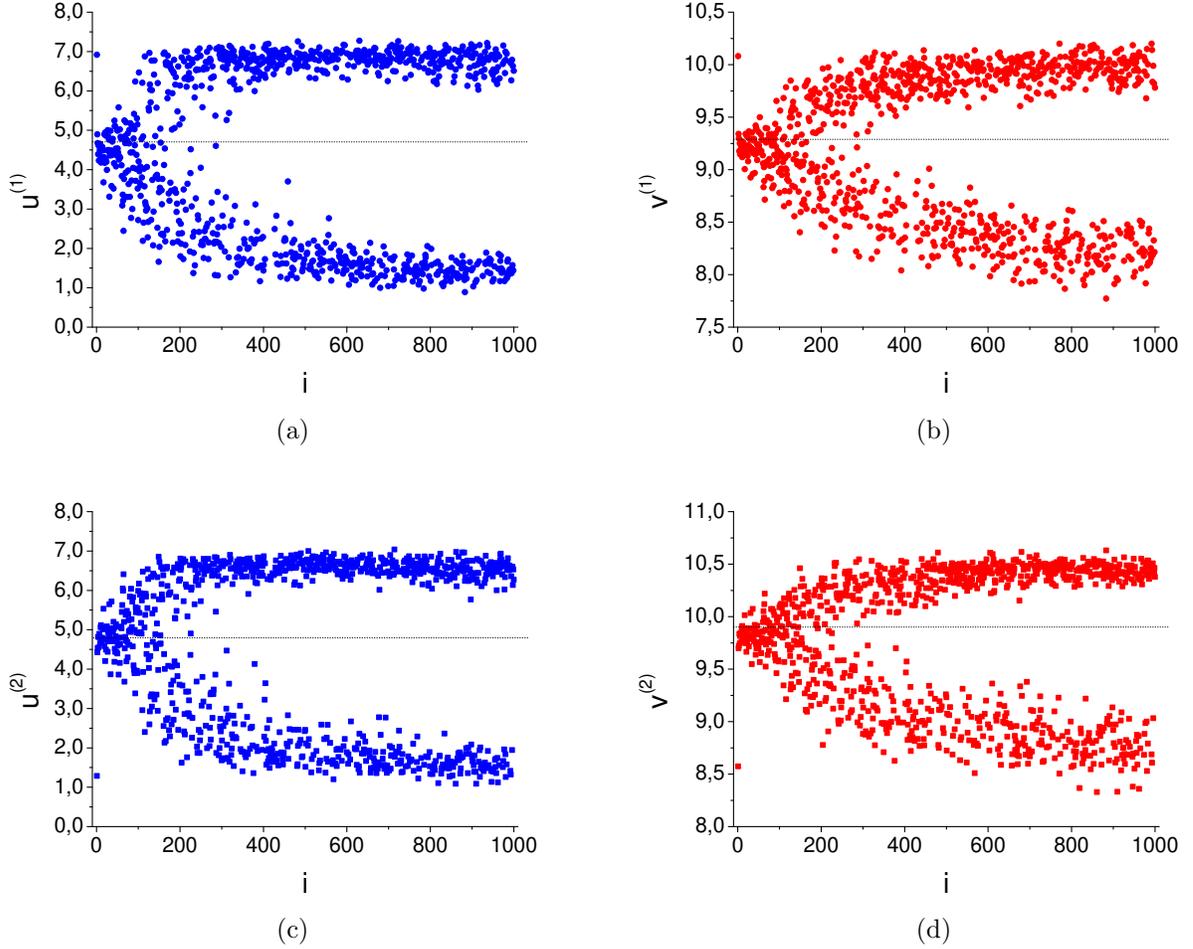


Figura 5.6: Padrões estacionários para $u_i^{(1)}$, (a), $v_i^{(1)}$, (b), $u_i^{(2)}$, (c), e $v_i^{(2)}$, (d), como função dos índices i dos nós da rede. Os índices dos nós estão ordenados de acordo com ordem decrescente de grau. Os padrões foram obtidos integrando numericamente as equações 5.5 numa rede livre de escala com $N = 1000$ e $\langle k \rangle = 20$. Temos $a = 35,0$, $b = 16,0$, $c = 9,0$, $d = 0,4$, $f = 0,5$, $\alpha = 0,05$, $\epsilon = 0,12$ e $\sigma = 20,0$. As linhas pontilhadas indicam o valor do estado homogêneo para cada uma das espécies.

Como vemos, os padrões formados no modelo de 4 espécies apresentam algumas similaridades com os padrões formados no modelo anterior, com 2 espécies. Aqui, também se nota a divisão dos nós em dois grupos: um em que as espécies apresentam alta abundância e outro em que elas apresentam baixa abundância (novamente, “alto” e “baixo” tem como referência o estado homogêneo para cada espécie). Nota-se também nesse caso que a diferenciação é mais acentuada nos nós que apresentam valores menores de grau (a distribuição dos índices está feita em ordem decrescente de grau).

Quando comparamos os padrões estacionários de cada presa com o padrão de seu predador

direto, é possível mostrar que os sítios que correspondem a alta abundância da presa também correspondem a alta abundância de seu predador. Porém, quando comparamos os padrões da presa (1) e da presa (2) a análise não é tão direta.

Para estudarmos a correlação entre as presas em cada sítio, construímos os padrões estacionários da diferença entre as duas populações $u_i^{(1)} - u_i^{(2)}$ em cada sítio i da rede, variando o parâmetro α que corresponde ao acoplamento entre os pares. Tais padrões são mostrados na figura 5.7.

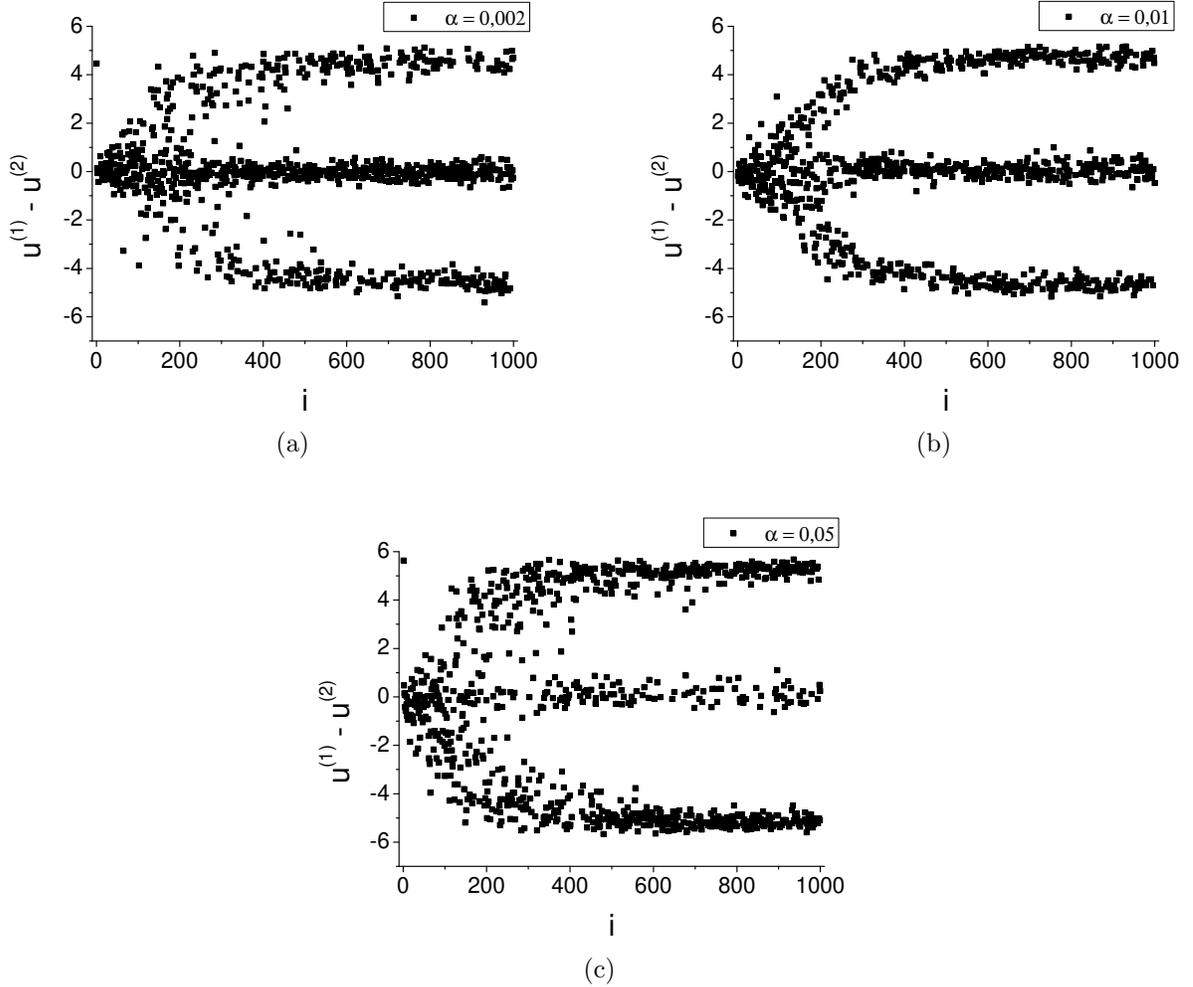


Figura 5.7: Padrões estacionários da diferença entre as populações de presas, $u_i^{(1)} - u_i^{(2)}$, em função dos índices i dos nós da rede, para diferentes valores de α . Em (a), $\alpha = 0,002$, em (b), $\alpha = 0,01$ e, em (c), $\alpha = 0,05$. Em todos os casos, $a = 35,0$, $b = 16,0$, $c = 9,0$, $d = 0,4$, $f = 0,5$, $\epsilon = 0,12$ e $\sigma = 20,0$.

É possível notar que os padrões da figura 5.7 apresentam 3 grupos principais de nós diferenciados: um grupo em torno de +4, um grupo em torno de -4 e um grupo em torno de 0. Da comparação com os padrões estacionários das presas, figuras 5.6(a) e 5.6(c), vemos que os nós em que $u_i^{(1)} - u_i^{(2)}$ tem valor em torno de +4 são aqueles em que $u_i^{(1)}$ tem alta abundância e $u_i^{(2)}$ tem baixa abundância e os nós em que $u_i^{(1)} - u_i^{(2)}$ tem valor em torno de

-4 representam o caso contrário. Para os nós em que $u_i^{(1)} - u_i^{(2)}$ tem valor em torno de 0, ou ambos tem alta abundância ou ambos tem baixa abundância.

A análise dos padrões variando o valor de α revela algo bastante interessante. À medida que o valor de α aumenta, o grupo de nós que corresponde a valores de $u_i^{(1)} - u_i^{(2)}$ em torno de 0 vai ficando menos denso. Isso significa que o acoplamento entre os pares introduz uma correlação negativa entre as distribuições das duas presas, que é tanto maior quanto maior for a força desse acoplamento.

Para ter uma visão mais clara da densidade de nós, apresentamos um histograma, referente ao número de nós em cada grupo diferenciado, para $\alpha = 0,002$ e para $\alpha = 0,05$. Os histogramas são mostrados na figura 5.8.

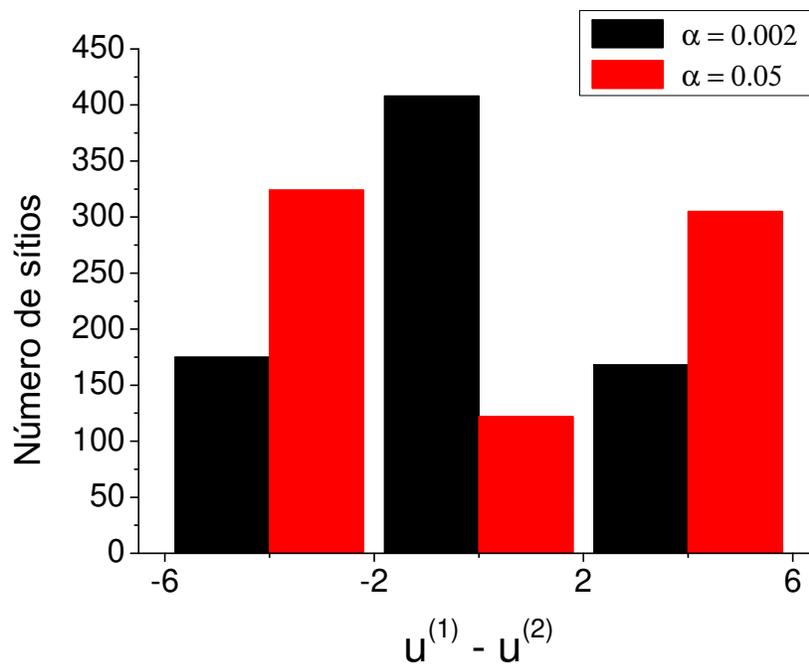


Figura 5.8: Histogramas referentes aos números de sítios em cada um dos 3 grupos de $u_i^{(1)} - u_i^{(2)}$: de -6 a -2, de -2 a +2 e de +2 a +6. As contagens referem-se aos padrões das figuras 5.7(a), barras pretas, e 5.7(c), barras vermelhas. Só são contados os sítios para os quais $i > 250$, que são aqueles em que a diferenciação é mais acentuada.

Fica claro pela análise da figura 5.8 que o aumento de α reduz o número de sítios em que as presas dos dois pares tinham padrões semelhantes de abundância, introduzindo a correlação negativa já mencionada (para acoplamento forte, nos sítios onde uma das presas é muito abundante, o mais provável é que a outra presa seja pouco abundante).

Biologicamente, isso traz uma análise interessante. Note que a correlação negativa entre as populações de presas não se deve a competição direta por recursos ou espaço, uma vez que as equações que regem os crescimento de ambas são idênticas e não há nenhum termo de competição entre elas (que seria expresso, por algo do tipo $-u_i^{(1)}u_i^{(2)}$ nas equações). A correlação negativa notada entre as presas com o aumento de α deve-se ao fato de que as

duas presas dividem um predador em comum (no caso, $v_i^{(2)}$), fenômeno que, em ecologia, é chamado de competição aparente.

5.3 Modelo ecológico: 6 espécies

Nesse ponto, torna-se interessante investigar se a correlação negativa entre presas de pares acoplados é um fenômeno particular do sistema de 4 espécies ou se ela pode também ser encontrada para cadeias tróficas maiores.

Para tal, propomos uma nova extensão do modelo, com a mesma idéia que usamos para construir o modelo com 4 espécies: adicionamos um outro par de presa e predador, idêntico aos anteriores, e acoplamos o predador do novo par com a presa do par anterior.

As equações desse novo sistema com 6 espécies serão também dadas por 5.5, sendo que, nesse caso, l pode assumir os valores 1, 2 e 3, referentes aos índices de cada par presa-predador, e os valores das constantes de acoplamentos entre os pares são iguais a α . Além disso, temos $u_i^{(0)} = v_i^{(4)} = 0$. Integrando numericamente as equações 5.5, obtemos os seguintes estados estacionários para as populações de presas na rede, mostrados na figura 5.9.

Note que os padrões estacionários que se formam na rede, para cada uma das populações de presas, são muitos similares aos padrões que observamos nos modelos anteriores. Há, novamente, uma divisão dos nós da rede em dois grupos: aqueles em que a população tem alta abundância e aqueles em que tem baixa abundância. Todavia, a análise da correlação entre as abundâncias de presas nesse caso, em que há 3 valores por sítio para se avaliar, é um pouco mais complexa. Para tal, definimos a quantidade:

$$\sigma_i^{(l)} = \text{sgn}(u_i^{(l)} - \bar{u}^{(l)}) = \begin{cases} +1, & \text{se } u_i^{(l)} > \bar{u}^{(l)} \\ -1, & \text{se } u_i^{(l)} < \bar{u}^{(l)} \end{cases}, \quad (5.7)$$

onde $\sigma_i^{(l)}$ é definida para cada população de presas (l) e em cada sítio i , indicando se a população de presas tem alta abundância, $\sigma_i^{(l)} = +1$, ou baixa abundância, $\sigma_i^{(l)} = -1$, no respectivo sítio.

Para analisar a correlação entre presas de pares diretamente acoplados, separamos os sítios com índices $i > 250$ (para os quais a diferenciação é mais pronunciada) em dois grupos: aqueles em que $\sigma^{(2)} = +1$ e aqueles em que $\sigma^{(2)} = -1$. Em seguida, analisamos o valor da soma $\sigma^{(1)} + \sigma^{(3)}$ em cada um desses sítios. Os três possíveis valores para essa soma, indicam três possíveis situações: se $\sigma^{(1)} + \sigma^{(3)} = +2$, tanto $u^{(1)}$ quanto $u^{(3)}$ apresentam alta abundância no sítio, se $\sigma^{(1)} + \sigma^{(3)} = -2$, tanto $u^{(1)}$ quanto $u^{(3)}$ apresentam baixa abundância no sítio e se $\sigma_1 + \sigma_3 = 0$, $u^{(1)}$ e $u^{(3)}$ apresentam abundâncias com características opostas.

Se a hipótese de que existe correlação negativa entre presas de pares acoplados, para o sistema de 6 espécies, for válida, devemos esperar que, para valores relativamente altos do

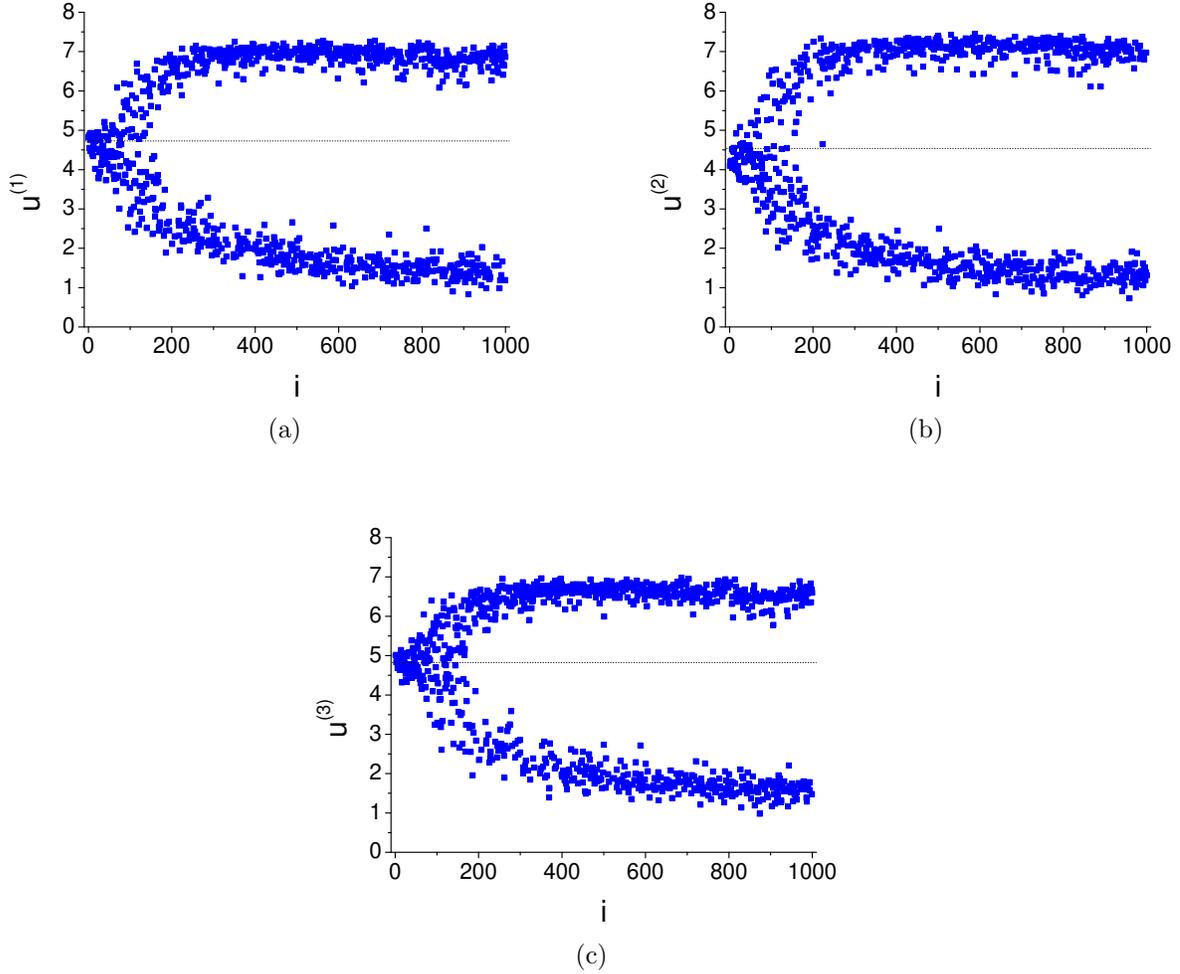


Figura 5.9: Padrões estacionários das populações de presas em função dos índices i dos nós da rede, para o modelo com 3 pares presa-predador. Em (a), $u^{(1)}$, em (b), $u^{(2)}$ e, em (c), $u^{(3)}$. Em todos os casos, $a = 35,0$, $b = 16,0$, $c = 9,0$, $d = 0,4$, $\alpha = 0,05$, $f = 0,5$, $\epsilon = 0,12$ e $\sigma = 20,0$.

acoplamento, α , o grupo de sítios que apresentam $\sigma^{(2)} = +1$ deve ter a maioria de seus sítios apresentando, também, $\sigma^{(1)} + \sigma^{(3)} = -2$ (uma vez que por hipótese, há uma correlação negativa entre as presas dos pares (3) e (2) e também entre as presas dos pares (2) e (1)) e onde $\sigma^{(2)} = -1$, o mais provável deve ser $\sigma^{(1)} + \sigma^{(3)} = +2$.

Assim posto, fazemos a análise acima com os padrões mostrados na figura 5.9, e construímos histogramas dos valores encontrados para a soma $\sigma^{(1)} + \sigma^{(3)}$ na rede, para diferentes valores de α . Os histogramas são mostrados na figura 5.10.

Em cada um dos histogramas da figura 5.10, as barras pretas indicam a contagem dentro do grupo de sítios em que $\sigma^{(2)} = -1$ e as barras vermelhas indicam a contagem dentro do grupo $\sigma^{(2)} = +1$.

O histograma da figura 5.10(a) é mostrado apenas como referência. Nesse caso, $\alpha = 0,0$ e o que o gráfico mostra é que $u^{(1)}$, $u^{(2)}$ e $u^{(3)}$ estão descorrelacionados. Pode-se observar

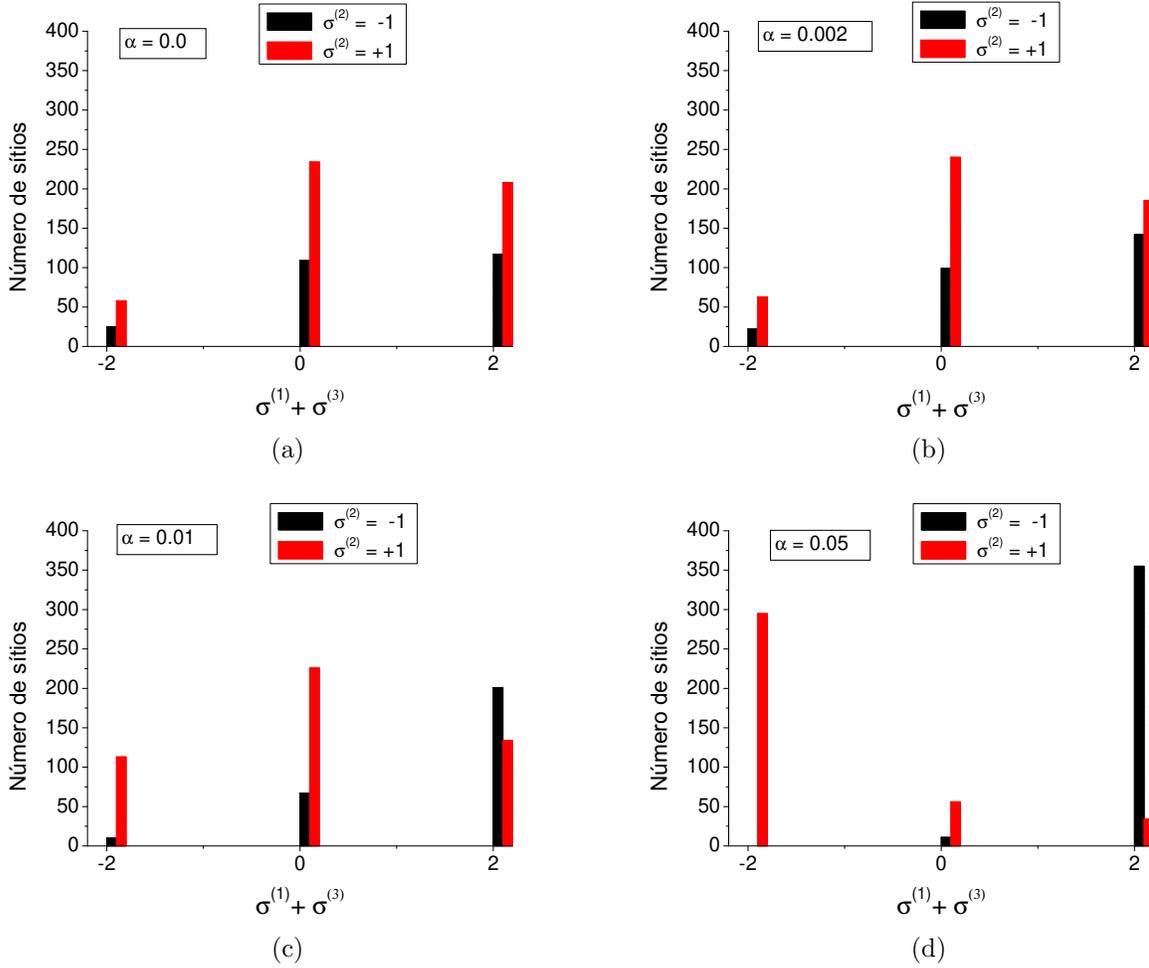


Figura 5.10: Histogramas referentes à soma $\sigma^{(1)} + \sigma^{(3)}$ considerando índices dos sítios $i > 250$. As barras vermelhas indicam que a contagem foi feita no grupo em que $\sigma^{(2)} = +1$ e as barras pretas, no grupo em que $\sigma^{(2)} = -1$. Temos, em (a), $\alpha = 0,0$, em (b), $\alpha = 0,002$, em (c), $\alpha = 0,01$ e, em (d), $\alpha = 0,05$. Em todos os casos, $a = 35,0$, $b = 16,0$, $c = 9,0$, $d = 0,4$, $f = 0,5$, $\epsilon = 0,12$ e $\sigma = 20,0$.

isso usando como referência o histograma da figura 4.6. Se o acoplamento, α , é nulo, então o sistema dinâmico é constituído de três pares de equações idênticos desacoplados, para cada presa-predador (l), de modo que os padrões finais para cada uma das presas devem ter histogramas muito similares ao da figura 4.6. Voltando à figura 5.10(a), se as distribuições finais de cada uma das presas forem descorrelacionadas, o número de sítios em que a soma $\sigma^{(1)} + \sigma^{(3)}$ deve ser igual a +2, considerando tanto o grupo $\sigma^{(2)} = +1$ quanto $\sigma^{(2)} = -1$, deve ser, aproximadamente, $2/3 \times 2/3 \times 750 \simeq 333$ (que se refere à probabilidade de que tanto $u^{(1)}$ quanto $u^{(3)}$ tenham altas abundâncias, avaliando o número total de sítios considerados no histograma, 750). Análises similares podem ser feitas para mostrar que as somas das barras pretas e vermelhas, para os casos em que $\sigma^{(1)} + \sigma^{(3)} = 0$ e $\sigma^{(1)} + \sigma^{(3)} = -2$, correspondem aos valores esperados para o caso descorrelacionado.

À medida que o valor de α cresce, é possível ver que os padrões dos histogramas vão sendo

progressivamente alterados, quando comparados com o caso desacoplado. Quando $\alpha = 0,05$ fica nítido que na maioria dos sítios em que a presa (2) tem alta abundância, $\sigma^{(2)} = +1$, tanto a presa (1) quanto a presa (3) tem baixas abundâncias, $\sigma^{(1)} + \sigma^{(3)} = -2$, e na maioria dos sítios em que a presa (2) tem baixa abundância, $\sigma^{(2)} = -1$, tanto a presa (1) quanto a presa (3) tem abundâncias elevadas, $\sigma^{(1)} + \sigma^{(3)} = +2$.

Dessa forma, é possível concluir que a correlação negativa entre presas de pares diretamente acoplados não é um fenômeno particular para o sistema com 4 espécies, uma vez que notamos também esse efeito quando consideramos uma cadeia trófica maior, com 6 espécies.

5.4 Considerações adicionais

Tratamos nessa última seção de três casos muito similares aos já trabalhados anteriormente, mas que apresentam relevância para o problema biológico.

O primeiro deles diz respeito ao número de sítios na rede. Até o momento, em todos os resultados gerados, utilizamos uma rede livre de escala, construída de acordo com o algoritmo de Barábasi e Albert, com $N = 1000$ e $\langle k \rangle = 20$. Quando se trabalha com estatística de redes, esse é um tamanho relativamente pequeno para se estudar estrutura e propriedades de escala de tais redes. Entretanto, como no nosso caso a rede representa os sítios espaciais através dos quais as espécies dispersam, $N = 1000$ é um tamanho relativamente grande. Isso porque a maioria dos bancos de dados empíricos em ecologia espacial, que consideram o espaço como discreto (seja pela definição dos habitats ou por se tratar de paisagens fragmentadas), geralmente apresentam um número de sítios muito menor (os maiores bancos de dados tem um número de sítios da ordem de 100).

Dada essa limitação, definimos o mesmo modelo de 6 espécies dispersando numa rede menor, para avaliar se a correlação negativa entre presas de pares diretamente acoplados ainda é significativa nesse caso. Trabalhamos então com uma rede livre de escala, $N = 200$ e $\langle k \rangle = 10$. Os resultados são mostrados na figura 5.11.

Na figura 5.11(a) são mostrados os padrões estacionários para as espécies de presas na rede. Também podemos notar, ainda que com diferenças na forma, a separação dos nós em grupos onde as populações são mais abundantes e menos abundantes. Definindo $\sigma^{(l)}$ conforme 5.7, construímos os histogramas para a soma $\sigma^{(1)} + \sigma^{(3)}$, avaliados em cada um dos grupos de valores para $\sigma^{(2)}$, para acoplamento relativamente alto, $\alpha = 0,05$.

O que vemos é que, também no caso em que consideramos uma rede menor, a maioria dos sítios em que $u^{(2)}$ tem alta abundância, tanto $u^{(1)}$ quanto $u^{(3)}$ tem baixas abundâncias e na maioria dos sítios em que $u^{(2)}$ tem baixa abundância, tanto $u^{(1)}$ quanto $u^{(3)}$ tem altas abundâncias, mostrando que a correlação negativa entre pares acoplados também ocorre para esse caso.

O segundo caso que tratamos, diz respeito ao fato de os pares presa-predador possuírem

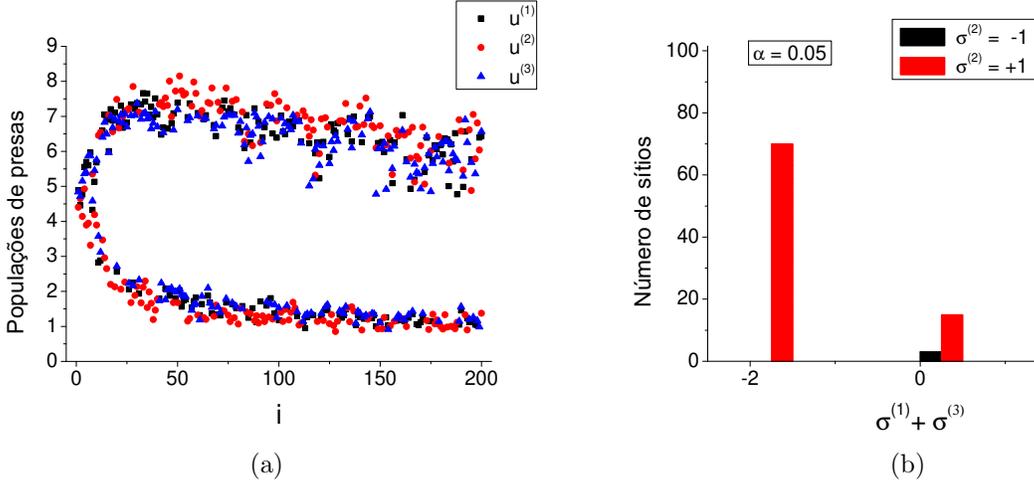


Figura 5.11: Em (a), padrões estacionários para populações de presas $u^{(1)}$, $u^{(2)}$ e $u^{(3)}$ como função dos índices i da rede. Em (b), histogramas referentes à soma $\sigma^{(1)} + \sigma^{(3)}$ considerando todos os sítios. Temos $a = 35, 0$, $b = 16, 0$, $c = 9, 0$, $d = 0, 4$, $f = 0, 5$, $\alpha = 0, 05$, $\epsilon = 0, 12$ e $\sigma = 20, 0$.

parâmetros idênticos. Uma vez que os pares são idênticos não há distinção entre as taxas de natalidade das presas e mortalidade dos predadores, independente da posição que uma dada espécie ocupa na cadeia trófica. Biologicamente, a hipótese de pares idênticos é irreal, uma vez que nas cadeias tróficas reais há, geralmente, distinções notáveis nessas taxas, de acordo com a “hierarquia” da cadeia (onde, por “hierarquia”, queremos dizer “quem come quem”). Muitas vezes essa hierarquia está associada ao tamanho das espécies: presas maiores são predadas por predadores maiores que podem também vir a comer presas menores.

Para tornar o modelo mais real nesse ponto, definimos as equações para o modelo com 6 espécies da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} u_i^{(l)}(t) &= \left(\frac{a + b u_i^{(l)} - (u_i^{(l)})^2}{c^{(l)}} - v_i^{(l)} \right) u_i^{(l)} - \alpha u_i^{(l)} v_i^{(l+1)} + \epsilon \sum_j L_{ij} u_j^{(l)} \\ \frac{d}{dt} v_i^{(l)}(t) &= [u_i^{(l)} - (1 + d^{(l)} v_i^{(l)})] v_i^{(l)} + f \alpha u_i^{(l-1)} v_i^{(l)} + \sigma \epsilon \sum_j L_{ij} v_j^{(l)}, \end{aligned} \quad (5.8)$$

onde $c^{(l)} = (1, 1)^{l-1} c$ e $d^{(l)} = (1, 1)^{l-1} d$. Todos os parâmetros do modelo anterior permanecem os mesmo e mudamos os parâmetros c e d , sendo que para cada par, esses parâmetros serão 10% maiores que os parâmetros do par anterior. Essa modificação é motivada pela idéia de que o tamanho corporal aumenta à medida que aumenta o índice do par, l , sendo que presas maiores possuem taxas de natalidade menores e predadores maiores, na ausência de suas presas, possuem taxas de mortalidade maiores.

Integramos numericamente as equações 5.8 numa rede livre de escala com $N = 1000$ e $\langle k \rangle = 20$. Os resultados são mostrado na figura 5.12.

Como vemos na figura 5.12(a), os sítios também se dividem em grupos de alta e baixa

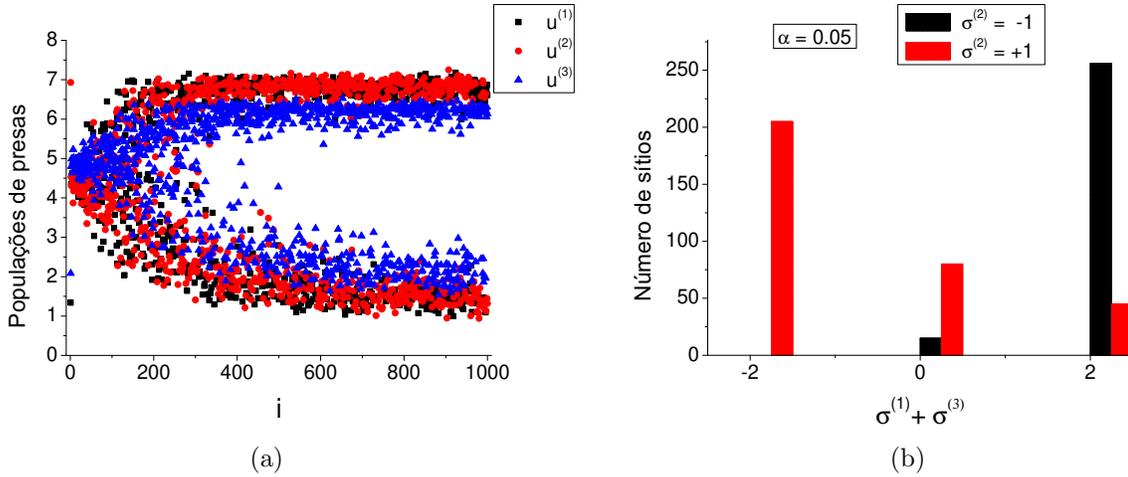


Figura 5.12: Em (a), padrões estacionários para populações de presas $u^{(1)}$, $u^{(2)}$ e $u^{(3)}$ como função dos índices i da rede. Em (b), histogramas referentes à soma $\sigma^{(1)} + \sigma^{(3)}$ considerando índices dos sítios $i > 400$. Temos $a = 35,0$, $b = 16,0$, $c = 9,0$, $d = 0,4$, $f = 0,5$, $\alpha = 0,05$, $\varepsilon = 0,12$ e $\sigma = 20,0$.

abundâncias, porém a diferenciação é mais acentuada para os sítios com $i > 400$. Consideramos então $i > 400$ para construir os histogramas para a soma $\sigma^{(1)} + \sigma^{(3)}$, novamente para acoplamento $\alpha = 0,05$.

Vemos, também para esse caso, que a maioria dos sítios apresenta características alternadas de abundância de espécies quando consideradas presas de pares diretamente acoplados. Concluimos assim, que a hipótese de considerar pares idênticos não interfere na existência da correlação negativa entre presas.

O terceiro e último caso, trata da questão de termos até o momento, considerado que as taxas com que as espécies dos diferentes pares dispersam são as mesmas. Essa é outra limitação do modelo, uma vez que é biologicamente mais plausível considerar que espécies de pares diferentes dispersam de forma diferente.

Para analisar o efeito de taxas de difusão diferentes, consideremos o modelo com 2 pares idênticos de presa e predador, dado pelas equações 5.5, mas com diferentes razões de taxas de difusão de predadores e presas, para cada um dos pares. Chamaremos a razão entre as taxas de difusão de predadores e presas do par (l) de σ_l (o subscripto é usado aqui para que não se confunda essa razão com a quantidade $\sigma^{(l)}$ definida por 5.7). As taxas de difusão das presas, ε , manteremos iguais.

Integramos numericamente as equações 5.5 numa rede livre de escala com $N = 1000$ e $\langle k \rangle = 20$, considerando $\sigma_1 = 12,0$ e $\sigma_2 = 20,0$. Os resultados dos padrões estacionários para as populações de presas são mostrado na figura 5.13.

Como podemos ver na figura 5.13(a), o padrão estacionário obtido para $u^{(2)}$ é bastante similar ao encontrado no sistema em que $\sigma_1 = \sigma_2$ (veja figura 5.6(c)). Já o padrão estacionário para $u^{(1)}$, na figura 5.13(b), é algo bastante interessante. Note que há uma diferenciação clara

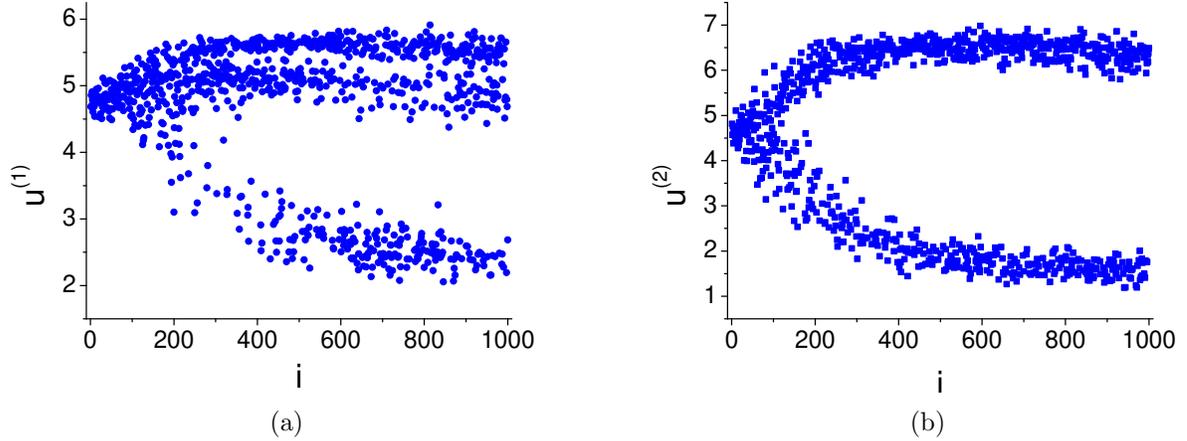


Figura 5.13: Em (a), padrões estacionários para populações de presas $u^{(1)}$, e, em (b), padrões estacionários para populações de presas $u^{(2)}$. Temos $a = 35,0$, $b = 16,0$, $c = 9,0$, $d = 0,4$, $f = 0,5$, $\alpha = 0,05$, $\varepsilon = 0,12$, $\sigma_1 = 12,0$ e $\sigma_2 = 20,0$.

de um grupo de nós que apresentam característica de baixa abundância, o que não era de se esperar se esse par de presa e predador estivesse desacoplado do outro par. Isso porque σ_1 encontra-se abaixo do valor crítico de formação do padrão para o modelo com 2 espécies, σ_c (dado pela equação 4.8).

Assim, concluímos que o acoplamento entre os pares induz a formação do padrão, mesmo se o valor de σ de um dos pares está abaixo do valor crítico de formação do padrão. Biologicamente, isso indica que cadeias tróficas maiores podem facilitar a formação de padrões espaciais heterogêneos de abundância.

Capítulo 6

Conclusões

No presente trabalho, nos propusemos a investigar a formação de padrões de Turing em sistemas de reação-difusão com mais de 2 variáveis dinâmicas, sendo que a difusão das variáveis ocorre através dos nós conectados de uma rede complexa. Todas as análises foram feitas através de rotinas numéricas, uma vez que o tratamento analítico não é viável para os sistemas com os quais trabalhamos.

Para o estudo de sistemas com exatamente 3 variáveis dinâmicas, adaptamos as equações dos modelos de Lorenz [26] e de Hastings-Powell [28] ao nosso modelo de reação-difusão na rede. Através de cálculos numéricos dos autovalores das matrizes Jacobianas de tais sistemas, não fomos capazes de encontrar valores que indicassem a instabilidade dos estados de equilíbrio homogêneos, condição essa necessária à formação de padrões de Turing. Não podemos, entretanto, concluir se tais sistemas são incapazes de apresentar formação de tais padrões ou se não analisamos os intervalos dos parâmetros para os quais os padrões poderiam se formar (ressaltamos novamente que a inviabilidade de um tratamento analítico dá origem a essa dificuldade acerca da escolha dos intervalos dos parâmetros).

Em seguida, tomamos por base o modelo de presa e predador proposto por Nakao e Mikhailov [12], que apresenta formação de padrões de Turing em redes complexas. Como esse é um modelo com duas variáveis dinâmicas, fizemos uma extensão, adicionando um outro par de presa e predador, idêntico ao primeiro, e acoplando esse novo par ao par original, de modo a haver uma predação secundária da presa do primeiro par pelo predador do segundo par. Assim, estabelecemos um sistema acoplado de 4 variáveis dinâmicas.

Sob a perspectiva de análise geral do sistema dinâmico, esse novo modelo estendido apresentou vários regimes interessantes. Detectamos transições entre regimes caóticos, periódicos e estacionários, além de observar sincronização parcial e total entre as variáveis dinâmicas nos diferentes nós da rede. Do ponto de vista de formação de padrões, verificamos a possibilidade de formação de padrões de Turing, através de escolhas adequadas dos parâmetros.

Obtivemos também, para esse modelo, interpretações interessantes dos resultados do

ponto de vista ecológico. Para esse sistema representativo de uma pequena cadeia trófica, a formação dos padrões de Turing na rede, que divide os sítios da rede em grupos nos quais as populações apresentam altas abundâncias ou baixas abundâncias, sugere que diferenças nos padrões espaciais de abundância de espécies reais podem ser, pelo menos em parte, devidas ao mecanismo de Turing e não a heterogeneidades do ambiente. Além disso, verificamos que o aumento da força de acoplamento entre os pares introduz uma correlação negativa nas características de abundância das duas populações de presas, ainda que não haja competição direta, por espaço ou por recursos, entre elas. Esse efeito, muito provavelmente, está ligado ao que em ecologia dá-se o nome de competição aparente e deve-se ao fato de que as duas presas tem um predador em comum.

Essa correlação negativa entre populações de presas de pares diretamente acoplados foi também testada para uma nova extensão do modelo, considerando a adição de outro par presa-predador idêntico (sendo agora a presa do segundo par também predada pelo predador do terceiro par). Verificamos que, também para esse caso, o aumento da força de acoplamento introduz a correlação negativa entre as populações de presas. A correlação negativa também se mostrou significativa para o modelo com 6 espécies quando consideramos pares não idênticos e tamanhos menores para a rede.

As interpretações ecológicas que podemos tirar desse modelo, apesar de muito interessantes, devem ser feitas com cautela. Sob a ótica ecológica, o modelo apresenta duas limitações principais: a primeira deve-se ao fato de que a rede que representa o espaço é uma rede complexa, na qual a distribuição de grau é uma lei de potência, e a segunda deve-se à estrutura bastante específica da cadeia trófica.

Como mencionado no capítulo destinado a revisão sobre redes complexas, quando se define uma rede, importa apenas quem está conectado com quem, de modo que não se definem distâncias espaciais (euclidianas) sobre essas redes. Todavia, uma vez que se trabalha com migrações de indivíduos, distância é algo que, geralmente, não deve ser ignorado. Além do mais, a estrutura de ligações dos sítios como forma de lei de potência é difícil de ser confirmada empiricamente. Isso porque a maioria dos estudos empíricos em ecologia, que consideram sítios interligados por onde as espécies dispersam, apresenta bancos de dados com relativamente poucos sítios, de modo que dizer exatamente se uma determinada distribuição de ligações entre tais sítios segue uma lei de potência é algo delicado.

Quanto à cadeia trófica que utilizamos, podemos dizer que sua estrutura é muito específica, quando comparada a cadeias tróficas reais. Muitas das cadeias tróficas reais são bastante complicadas, apresentando ligações múltiplas, ciclos e um número relativamente grande de espécies.

Apesar de não podermos afirmar categoricamente a validade dos resultados do ponto de vista ecológico, ainda é possível encontrar argumentos que justifiquem a importância dos resultados aqui expostos. Embora, de fato, as redes que trabalhamos não tenham uma

definição clara de distância, os resultados apontam como heterogeneidades nas ligações entre os sítios podem influir nos padrões não-triviais de distribuições de espécies. Isso é interessante quando se trabalha com habitats fragmentados, para os quais definições do espaço como forma de redes encaixam muito bem (veja a extensa revisão [16] sobre ecologia de fragmentos). Para as cadeias tróficas que utilizamos, podemos argumentar que, às vezes, o foco de um determinado estudo repousa não sobre a cadeia trófica real completa, mas sobre algumas espécies chaves, as quais formam cadeias mais simples. Nesses casos, a simplicidade da cadeia que construímos pode ser um elemento interessante para o estudo das interações entre essas espécies.

Lembramos, por fim, que o foco inicial do presente estudo era a formação de padrões de Turing em redes complexas. Acreditamos que os resultados que foram apresentados contribuem de forma importante com novas abordagens e interpretações, além de apontar várias possibilidades para investigações futuras.

Referências Bibliográficas

- [1] TURING, A. M. The chemical basis of morphogenesis. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series B, Biological Sciences*, v. 237, p. 37-72, 1952.
- [2] MURRAY, J.D. How the leopard gets its spots. *Scientific American*, v. 258, p. 80–87, 1988.
- [3] MURRAY, J.D. *Mathematical Biology II: Spatial Models and Biomedical Applications*. 3^a ed. Nova Iorque: Springer, 2003. 736 p.
- [4] MIMURA, M.; MURRAY, J. On diffusive prey-predator model which exhibit patchiness, *Jour. Theor. Biol.*, v. 75, p. 249-262, 1978.
- [5] KISHIMOTO, K. The diffusive Lotka-Volterra system with three species can have a stable non-constant equilibrium solution. *Journal of Mathematical Biology*, v. 16, p. 103-112, 1982.
- [6] SCHNAKENBERG, J. Simple chemical reaction systems with limit cycle behaviour, *Journal of theoretical biology*, v. 81, p. 389-400, 1979.
- [7] MURRAY, J.D. Parameter Space for Turing Instability in Reaction Diffusion Mechanisms: A comparison of Models. *Journal of Theoretical Biology*, v. 98, p. 143-163, 1982.
- [8] YAMAGUCHI, M.; YOSHIMOTO, E.; KONDO, S. Pattern regulation in the stripe of zebrafish suggests an underlying dynamic and autonomous mechanism, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, v. 104, p. 4790-4793, 2007.
- [9] BÁNSÁGI JR, T.; VANAG, V. K.; EPSTEIN, I. R. Tomography of Reaction-Diffusion Microemulsions Reveals Three-Dimensional Turing Patterns, *Science*, v. 331, p. 1309-1312, 2011.
- [10] SAWAI, S.; MAEDA, Y.; SAWADA, Y. Spontaneous Symmetry Breaking Turing-Type Pattern Formation in a Confined Dictyostelium Cell Mass, *Physical Review Letters*, v. 85, p. 2212-2215, 2000.

- [11] RIETKERK, M.; DE KOPPEL, J.V. Regular pattern formation in real ecosystems, *Trends in Ecology and Evolution*, v. 23, p. 169-175, 2008.
- [12] NAKAO, H.; MIKHAILOV, A. Turing patterns in network-organized activator-inhibitor systems, *Nature*, v. 6, p. 544-550, 2010.
- [13] ALBERT, R.; BARABÁSI, A-L. Statistical mechanics of complex networks. *Reviews of Modern Physics*, v. 74, p.47-97, jan. 2002.
- [14] BARRAT, A.; BARTHÉLEMY, M; VESPIGNANI, A. *Dynamical Processes on Complex Networks*. Cambridge: Cambridge University Press, 2008. 347 p.
- [15] FORTUNA, M.A.; GÓMEZ-RODRÍGUEZ, C.; BASCOMPTE, J.; Spatial network structure and amphibian persistence in stochastic environments. *Proceedings of the Royal Society B*, v. 273, p. 1429-1434, 2006.
- [16] HAGEN, M. et al. Biodiversity, species interactions and ecological networks in a fragmented world. (submetido)
- [17] MURRAY, J.D. *Mathematical Biology I: An Introduction*. 3^a ed. Nova Iorque: Springer, 2002. 574 p.
- [18] WEISSTEIN, E.W. Königsberg Bridge Problem. In: MathWorld-A Wolfram Web Resource. Disponível em: <<http://mathworld.wolfram.com/KoenigsbergBridgeProblem.html>>. Acesso em 19 de dez. 2011.
- [19] LESKOVEC, J.; HORVITZ, E. Planetary-scale views on an instant-messaging network. *Microsoft Research Technical Report MSR-TR-2006-186*, jun. 2007.
- [20] Yahoo! Research Small World Experiment. In: Yahoo! Research Small World Experiment. Disponível em: <<http://smallworld.sandbox.yahoo.com/?lang=pt>>. Acesso em 23 de dez. 2011.
- [21] WATTS, D.J.; STROGATZ, S.H. Collective dynamics of “small-world” networks, *Nature*, v. 393, p. 440-442, 1998.
- [22] BARABÁSI, A-L.; ALBERT, R. Emergence of scaling in random networks, *Science*, v.286, p. 509-512, 1999.
- [23] BEGON, M.; TOWNSEND, C.; HARPER, J. *Ecology: From Individuals to Ecosystems*. 4^a ed. Oxford: Wiley-Blackwell, 2006. 752 p.

- [24] COURCHAMP, F.; CLUTTON-BROCK, T.; GRENFELL, B. Inverse density dependence and the Allee effect, *Trends in Ecology & Evolution*, v. 14, p. 405-410, 1999.
- [25] STEPHENS, P.; SUTHERLAND, W. Consequences of the Allee effect for behaviour, ecology and conservation, *Trends in Ecology & Evolution*, v. 14, p. 401-405, 1999.
- [26] LORENZ, E. Deterministic non periodic flow, *J. Atmosf. Sci.*, v. 20, p. 130-141, 1963
- [27] LICHTENBERG, A.; LIEBERMAN, M. *Regular and Chaotic Dynamics*. 2^a ed. Nova Iorque: Springer, 1992. 720 p.
- [28] HASTINGS, A.; POWELL, T. Chaos in a three-species food chain, *Ecology*, v. 72, p. 896-903, 1991.
- [29] EISENBERG, J.; MASZLE, D. The Structural Stability of a Three-Species Food Chain Model, *J. theor. Biol.*, v. 176, p. 501-510, 1995.
- [30] GARCIA-OJALVO, J.; ELOWITZ, M.; STROGATZ, S. Modeling a synthetic multicellular clock: Repressilators coupled by quorum sensing. *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, v. 101, p. 10955-10960, 2004.
- [31] GÓMEZ-GARDENES, J.; MORENO, Y.; ARENAS, A. Synchronizability determined by coupling strengths and topology on complex networks, *Phys. Rev. E*, v. 75, 066106, 2007.
- [32] ARENAS, A.; DÍAZ-GUILERA, A.; KURTHS, J.; MORENO, Y.; ZHOU, C. Synchronization in complex networks, *Physics Reports*, v. 469, p. 93-153, 2008.