

Universidade de Brasília
Instituto de Física

Dissertação de Mestrado

**Efeitos da não-localidade na formação de padrão
em dinâmica de populações**

Keila Lopes Viana Novais

Brasília, Março de 2014

Efeitos da não-localidade na formação de padrão em dinâmica de populações

Keila Lopes Viana Novais

Orientador:

Prof. Dr. Fernando Albuquerque de Oliveira

Co-orientador:

Profa. Dra. Rogelma Maria da Silva Ferreira

Brasília, Março de 2014

Efeitos da não-localidade na formação de padrão em dinâmica de populações

Por

Keila Lopes Viana Novais

Dissertação apresentada ao Instituto de Física da Universidade de Brasília como parte dos requisitos necessários para a obtenção do título de Mestre em Física.

Aprovada por:

Prof. Dr. Fernando Albuquerque de Oliveira

(Orientador) IF - UnB

Prof. Dr. André Luiz Almeida Penna

FGA - UnB

Prof. Dr. Ademir Eugênio de Santana

IF - UnB

Brasília, 31 de Março de 2014

Prof. Dr. Demétrio Antônio da Silva Filho

Coordenador de Pós-Graduação

Instituto de Física

Universidade de Brasília

Agradecimentos

Ao professor Dr. Fernando A. de Oliveira, por sua competente orientação, a sua constante disposição em dirimir dúvidas e seus ricos ensinamentos durante todo o mestrado.

À professora Dra. Rogelma, com um olhar criterioso, sempre atenta aos mínimos detalhes, seu apoio foi fundamental na conclusão deste trabalho.

Aos amigos de grupo Vavá (Evandro), Mirian, Gianésio (Feranando Barbosa), Felipe Pinheiro, André e o Pedro sempre presentes, tornando as horas de trabalho mais leves e agradáveis.

À minha xará Queila, primeira amiga em Brasília, pelo apoio e acolhida.

Ao instituto de Física da UnB pela estrutura e amparo necessário a construção deste trabalho.

À CAPES pela bolsa de mestrado.

À minha família, meus pais, Paulino e Cleonice, meus irmãos, Laercio e Delano, minha cunhada Letrícia e minha querida sobrinha Isadora, minha eterna gratidão pela força, apoio e principalmente por todo amor. Tudo isso seria impossível sem a participação de vocês.

Ao meu noivo Pedro, maior incentivador (ajudador) deste trabalho, pela compreensão, dedicação, paciência, pela presença incansável com que me apoiou ao longo de todo o período de mestrado, agradeço todo seu amor e carinho.

Resumo

Nesta dissertação vamos investigar a formação de padrão em dinâmica de populações. Partimos de uma equação integro-diferencial não linear para descrever a densidade populacional $U(x, t)$. A não-localidade é introduzida por meio de dois kernels $g_\alpha(x)$ e $f_\beta(x)$. Os dois parâmetros α e β são os comprimentos de interação de crescimento e competição, respectivamente. Por meio de um método iterativo obtemos a evolução de $U(x, t)$ que leva a uma solução estacionária $U(x)$. Para uma densidade uniforme, $U(x) = U_0$, dizemos que o sistema não forma padrão. Consequentemente a densidade não é uniforme o sistema forma padrão. Definimos um parâmetro de ordem ρ como sendo a integral de $\Delta U(x) = U(x) - U_0$, em todo o intervalo do sistema. Assim podemos mostrar que a natureza cria padrão, $\rho > 0$, de modo a permitir mais indivíduos em um dado nicho ecológico.

Abstract

In this thesis we investigate the pattern formation in population dynamics. We start from a non-linear integro-differential equation to describe the density $U(x, t)$. The non-locality is introduced by means of two Kernels $g_\alpha(x)$ and $f_\beta(x)$. The two parameters α and β are the lengths of the interaction of growth and competition, respectively. By means of an iterative method we obtain evolution of $U(x, t)$ which leads to a stationary solution $U(x)$. For a uniform density, $U(x) = U_0$, we say that the system does not make pattern. Consequently, for a non-uniform density the system makes pattern. We define an order parameter ρ as the integral of $\Delta U(x) = U(x) - U_0$, over the entire range of the system. Thus we show that nature provides pattern $\rho > 0$, in such a way to allow more individuals in a given ecological niche.

Sumário

Agradecimentos	iv
Resumo	v
Abstract	vi
Sumário	vii
Lista de Figuras	xi
Lista de Símbolos e Abreviaturas	xii
1 Introdução	1
2 Modelos clássicos de dinâmica de populações	5
2.1 Introdução	5
2.2 Modelos de populações com homogeneidade espacial	6
2.2.1 Modelo Malthusiano	6
2.2.2 Modelo Verhulst	7
2.2.3 Modelo Lotka-Volterra	8
2.3 Modelos de populações com heterogeneidade espacial	10
2.3.1 Equação de Fisher-Kolmogorov	10
2.3.2 Formação de padrão na equação de Fisher-Kolmogorov	12
2.4 Conclusão	13

3	Transição de fase e formação de padrão	14
3.1	Introdução	14
3.2	Parâmetro de ordem	16
3.2.1	Sistemas Fluidos	16
3.2.2	Sistema Magnéticos	18
3.3	A teoria de Landau das transições de fase	20
3.3.1	Teoria de Landau das transições de fase de segunda ordem . .	20
3.3.2	Teoria de Landau das transições de fase de primeira ordem . .	23
3.4	Formação de padrão	25
3.4.1	A reação de Belousov-Zhabotinsky	25
3.4.2	O mecanismo de Turing	27
3.5	Conclusão	28
4	Formação de padrão em sistemas biológicos	29
4.1	Introdução	29
4.2	Autoorganização em sistemas biológicos	30
4.2.1	Regras para a formação de grupos em animais	31
4.2.2	Agregação em girinos da espécie <i>Rhinella ornata</i>	33
4.2.3	Colônia de bactérias	34
4.3	Conclusão	38
5	Equação de Fisher-Kolmogorov generalizada	40
5.1	Introdução	40
5.2	Efeito da não-localidade no crescimento na formação de padrão . . .	41
5.3	Estudo perturbativo	43
5.4	Conclusão	46
6	Transição de fase padrão-não-padrão em dinâmica de populações	47
6.1	Introdução	47
6.2	Método iterativo	48

6.3	Parâmetro de ordem	51
6.4	Efeitos da interação de competição na mudança de padrão	52
6.5	Entropia	57
6.6	Conclusão	59
7	Conclusões e perspectivas	61
	Referências Bibliográficas	63

Lista de Figuras

2.1	Dinâmica do modelo logístico para três condições iniciais diversas . . .	8
2.2	Solução periódica para presas $N(t)$ e predadores $V(t)$ para o sistema Lotka-Volterra.	9
3.1	Diagrama de fase das projeções PT e $P\rho'$	17
3.2	Projeção da superfície $P\rho'T$ no plano $\rho'T$	18
3.3	Curva de magnetização de um ferromagneto	19
3.4	A densidade de energia livre de Landau para vários valores de temperatura T e campo magnético externo H	22
3.5	Densidade de energia livre em função do parâmetro de ordem em uma transição de primeira ordem	24
3.6	A reação de Belousov-Zhabotinsky	27
4.1	Regras da formação de grupos de animais	32
4.2	Cardume de peixes.	32
4.3	Índice de agregação em função do tamanho em girinos.	33
4.4	Velocidade de deslocamento em função do tamanho dos girinos. . . .	34
4.5	Crescimento de colônias de bactérias	35
4.6	Padrão de colônias do tipo morfologia de densas ramificações	36
4.7	Crescimento de colônias na presença de antibióticos	37

4.8	Mapeamento dos períodos de oscilação de células individuais de uma população, para três experiências em densidades celulares de 0,7%, 0,08% e 0,01%, respectivamente.	38
5.1	Parte real da taxa de crescimento da formação de padrão para uma função influência de Heaviside com comprimento de interação $\beta = 0.55$ e taxa de crescimento $a = 3.0$	46
6.1	Densidade populacional $U(x)$ em função da posição x . Curva a: gaussiana inicial; curva b: formação de padrão; curva c: não formação padrão (distribuição uniforme)	49
6.2	A Precisão $\eta(n)$ em função de n	50
6.3	O número de indivíduos $N(n)$ em função de n	51
6.4	Representação do parâmetro de ordem	53
6.5	A densidade $U(x)$ em função da posição x . Sendo o valor de $\alpha = 0.01$ para todos os gráficos. (a) $\beta = 0.0544$; (b) $\beta = 0.0546$; (c) $\beta = 0.0926$; (d) $\beta = 0.0928$	54
6.6	O número de cristas em função de β^{-1} . Para a curva interna, temos $\alpha = 0.01$ e para a externa $\alpha = 0.07$	54
6.7	O parâmetro de ordem ρ em função de β . Para as curvas de cima para baixo, temos $\alpha = 0.01$, $\alpha = 0.04$ e $\alpha = 0.01$	56
6.8	Posição dos picos em função de β^{-1} para um α fixo ($\alpha = 0.05$).	56
6.9	Entropia em função de ρ	59

Lista de Símbolos e Abreviaturas

$N(t)$	Número de indivíduos ou presas de uma dada população
N_0	Quantidade inicial de indivíduos
a	Taxa de crescimento de uma população
b	Taxa de competição constituintes de uma espécie ou entre espécies
K	Capacidade suporte: densidade máxima suportada por um meio
$V(t)$	Número de predadores
$u(\vec{r}, t)$	Densidade de uma espécie
$\vec{J}(\vec{r}, t)$	Fluxo de partículas
D	Constante de difusão
$f(u, \vec{r}, t)$	Função de suprimento de matéria
$f_\beta(\vec{r})$	Função influência de alcance β
Ω	Domínio de uma determinada colônia
P	Pressão de um fluido
ρ'	Densidade de um fluido
T	Temperatura
\mathcal{H}_Ω	Hamiltoniano
J	Constante de troca
S_i	Operador de spin
H	Campo magnético externo
M	Magnetização
$N(\Omega)$	Número de partículas
F	Energia livre
ϕ_α	Parâmetro de ordem da teoria de Landau

S	Entropia
C_V	Calor específico
C_a	Concentração de ágar
C_n	Concentração de nutrientes
$g_\alpha(x)$	Função influência de alcance α
k	Número de onda da formação de padrão
$\varphi(k)$	Taxa de crescimento da formação de padrão
$\gamma(k)$	Parte real da taxa de formação de padrão
$\Theta(x)$	Função Heaviside
$\delta(x)$	Função delta de Dirac
N_P	Número de indivíduos com padrão
N_{NP}	Número de indivíduos sem padrão
ρ	Parâmetro de ordem
N_c	Número de crista
x_{max}	Posição dos das cristas
EFKG	Equação de Fisher-Kolmogorov generalizada
BZ	Belousov-Zhabotinsky

Capítulo 1

Introdução

Uma das características mais interessantes de sistemas biológicos é que em certas condições seus indivíduos exibem uma abrupta formação de padrão. Deste modo, tais estruturas têm sido observadas exaustivamente em muitos experimentos e novos conceitos têm sido propostos para estudar a universalidade desses sistemas complexos, sendo que alguns fenômenos notáveis têm motivado físicos a investigar em detalhes processos semelhantes, tais como nucleação, agregação, agrupamento, mecanismos complexos de auto-cooperação e alterações morfológicas bacterianas, os quais exigem contribuições mais sofisticadas de modelos fora do equilíbrio [1].

Estudos recentes de sistemas de partículas podem ser empregados para tratar de sistemas auto-organizados com interações biológicas e formação de padrão na transição de fase. De fato, há indícios que estes fenômenos envolvem leis de escalas mais profundas ligadas à quantidades críticas e geométricas que necessitam ser melhor caracterizadas. Recentemente foi observado que uma colônia de bactérias, dependendo da condição específica de crescimento, pode criar morfologias diferentes com inesperados padrões espaciais [2]. Em uma outra experiência, foi observada a existência de fenômenos críticos no comportamento de diversos tipos de processos de crescimento biológico. Outro exemplo é a analogia entre o ferromagnetismo e a transição de fase em de modelos biológicos. Neste âmbito, é sabido que interações ferromagnéticas tendem a alinhar os spins na mesma direção de modo a formar

um padrão específico. Em sistemas biológicos, a regra correspondente é alcançada por meio da suposição de que a difusão dos indivíduos pode levar a um movimento auto-organizado por meio de uma interação.

É conhecido que a formação de padrão de estruturas se deve a processos de transição de fase fora do equilíbrio, os quais associam uma quebra espontânea de simetria, *i.e.*, quando algum parâmetro externo do sistema é alterado, o sistema perde o seu estado estacionário, o que leva ao surgimento de um novo estado, o qual é invariante em um grupo de simetria. Por conseguinte, a geometria dos padrões observados na natureza surge destes grupos. Por exemplo, o estudo da quebra de simetria espacial e rotacional em formações de padrão têm sido amplamente estudados por Sattinger [3]. No entanto, um estudo mais sistemático dos aspectos das transições de fase fora do equilíbrio na formação de padrão de sistemas biológicos tem sido negligenciado.

Neste trabalho, apresentamos um novo modelo que incorpora transição de fase na dinâmica populacional. Partimos de uma equação não linear a qual inclui a interação não-local espacial entre seus indivíduos. Neste nosso modelo de dinâmica de populações com formação de padrão, verificamos a ocorrência de mudanças nas estruturas espaciais relacionadas a intensidade de interações entre os indivíduos. Tais mudanças podem ser caracterizadas por meio de um parâmetro de ordem ρ associado ao número de indivíduos do sistema. Desse modo, com a variação do alcance dos parâmetros de crescimento α e competição β do modelo, buscamos analisar como ocorrem as transições de fase padrão-não-padrão.

O parâmetro de ordem do nosso modelo fornece a diferença entre a quantidade de indivíduos distribuídos de forma heterogênea (padrão) e o número de indivíduos distribuídos uniformemente (não-padrão) no espaço. Quando feito um estudo do parâmetro de ordem em função de α , para um dado parâmetro de competição β fixo, aquele varia continuamente com o aumento de α até se tornar nulo, caracterizando uma transição de fase de segunda ordem de modo análogo a magnetização de um ferromagneto como função da temperatura. Quando o parâmetro

de ordem varia em função de β percebe-se um comportamento anômalo, no qual quando β aumenta e o parâmetro de ordem cresce exibindo pequenos decaimentos e descontinuidades, até um valor máximo, onde a partir daí decai continuamente até se tornar nulo. Neste sentido, pretendemos obter uma relação direta do parâmetro de ordem do sistema em função dos parâmetros α e β .

Verificamos ainda que no comportamento anômalo do parâmetro de ordem em função de β , cada descontinuidade implica uma mudança de padrão, observada na alteração do número de picos no gráfico da densidade de população versus posição. Esta reorganização acontece de modo a permitir aos indivíduos crescerem novamente, mesmo com o aumento da competição. Assim, encontramos para um mesmo valor do parâmetro de ordem, diferentes valores para o parâmetro de competição, mostrando que quando uma população alcança o limiar máximo de crescimento em uma certa estrutura, ela tende a se reorganizar numa nova estrutura, voltando a crescer quando a competição aumenta. Buscamos então estudar estes decaimentos em função de β e verificar na natureza as correspondências biológicas dos fenômenos previstos nas simulações. Organizamos este trabalho da seguinte forma. No Capítulo 2 fazemos uma revisão de alguns modelos clássicos de dinâmica de populações, relatando o contexto em que cada uma delas foram descobertas e suas limitações. Apresentamos definições dos principais termos relacionados à dinâmica de populações utilizados na dissertação. No Capítulo 3 fazemos um estudo sobre os fenômenos de transição de fase. Apresentamos o desenvolvimento analítico da teoria de Landau para as transições de fase contínuas, onde é introduzido o conceito de parâmetro de ordem. Com base na teoria de Landau, fazemos uma descrição analítica para as transições descontínuas. Deste modo, diferenciamos as transições de fase contínuas e descontínuas, e mostramos o comportamento do parâmetro de ordem em cada caso. No Capítulo 4 mostramos alguns exemplos de formação de padrão (autoorganização, formação de grupos) em seres vivos, onde apresentamos alguns fatores vantajosos com respeito a agregação de indivíduos. No Capítulo 5 apresentamos uma nova generalização da equação de Fisher-Kolmogorov a qual

nos permitirá o estudo da transição padrão-não-padrão em dinâmica de populações. Mostramos a existência de um parâmetro de ordem ρ que aponta para a formação de padrão, buscando a presença de um número maior de indivíduos no sistema. No Capítulo 6 encontram-se os resultados deste trabalho. Mostramos por meio do nosso modelo a transição de fase em sistemas biológicos e ainda mudanças abruptas de padrão (transição de um padrão para outro). No Capítulo 7 as principais contribuições deste trabalho são resumidas e discutidas.

Capítulo 2

Modelos clássicos de dinâmica de populações

2.1 Introdução

O estudo de dinâmica de populações é muito importante para a compreensão do desenvolvimento da população, sendo seus modelos matemáticos fundamentais na descrição da evolução espaço-temporal dos indivíduos. Com o auxílio desses modelos é possível compreender, por exemplo, o crescimento, declínio e a formação de cardumes de peixes, colônias de formigas ou abelhas, insetos e bactérias. Portanto, são inúmeras as aplicações, não somente em sistemas biológicos, visto que esses modelos populacionais possuem um grande potencial de aplicabilidade em diversas áreas da ciência[1, 4, 5].

Neste capítulo faremos uma revisão dos principais estudos bionômicos, onde apresentaremos uma análise qualitativa resumida dos modelos clássicos de dinâmica populacional, presentes na literatura, e como eles foram aprimorados ao longo do tempo. Apesar de carecerem de precisão, esses modelos possibilitam a compreensão de tendências populacionais básicas. Além disso, a revisão dessas teorias serão necessárias visto que utilizaremos seus conceitos posteriormente.

2.2 Modelos de populações com homogeneidade espacial

A homogeneidade de uma população biológica é uma hipótese simplificada que tem sido utilizada desde os primeiros estudos de dinâmica populacional. Os modelos matemáticos, neste caso, descrevem a dinâmica da população em um espaço de fase que representa o número de indivíduos. Esta dinâmica é conhecida por “lei da conservação”, e relaciona a taxa de variação do número de indivíduos da população com a fonte, isto é, taxas de natalidade-mortalidade e imigração-emigração. Na literatura encontramos vários modelos que obedecem a estas hipóteses, tais como: Malthus, Verhulst, Lotka-Volterra, entre outros.

2.2.1 Modelo Malthusiano

Malthus, em 1798, apresentou o primeiro modelo na tentativa de descrever o crescimento da população [6], sendo o primeiro a constatar que as espécies tendem a aumentar a uma taxa proporcional a população. Nesta proposta, foi suposto que o número de indivíduos varia apenas com a taxa de nascimentos e a taxa de mortes, não levando em conta o efeito da migração. Assim, sendo $N(t)$ o número de indivíduos da população no instante t , teremos

$$\frac{dN(t)}{dt} = aN(t) - bN(t), \quad (2.1)$$

onde a e b são constantes positivas e representam, respectivamente, taxa de nascimento e morte. Solucionando esta equação, encontramos

$$N(t) = N_0 e^{(a-b)t}, \quad (2.2)$$

com N_0 sendo a quantidade inicial de indivíduos. Podemos notar que se $a > b$ a população cresce indefinidamente, e se $a < b$ a população decresce até ser extinta. Com este modelo, Malthus não levou em consideração que, num dado ambiente, o crescimento pode parar devido as limitações do ambiente, predadores e competição entre os membros de uma mesma espécie. Entretanto, mesmo com suas limitações,

este modelo pode descrever a dinâmica de populações de microorganismos num intervalo de tempo limitado. Em geral, populações crescem exponencialmente quando se movem para uma região inabitada ou quando acontecem mudanças na oferta de alimentos, como aconteceu à população humana após a revolução industrial.

2.2.2 Modelo Verhulst

Para corrigir o problema da população crescer de maneira exponencial indefinidamente, Verhulst, em 1838, propôs uma modificação na equação de crescimento populacional de Malthus. Verhulst considerou que a população atingirá um nível de saturação o qual é caracterizado pelo ambiente. Desse modo, a taxa de crescimento per capita não é constante, como no modelo de Malthus, mas decresce com o aumento do número de indivíduos da população [6].

A equação proposta por Verhulst é escrita como

$$\frac{dN(t)}{dt} = rN(t) \left(1 - \frac{N(t)}{K} \right), \quad (2.3)$$

onde r e K são constantes positivas relacionadas aos processos de crescimento e suporte do meio, ou número máximo de indivíduos que o ambiente pode suportar. Este processo limitado é chamado de “Crescimento Logístico”. Comparando com o modelo de Malthus temos que, $r \left(1 - \frac{N(t)}{K} \right)$ é a taxa de crescimento dependente do número de indivíduos da população, $N(t)$, sendo esta uma relação linear decrescente.

A solução da Eq. (2.3) é dada por

$$N(t) = \frac{N_0 K}{N_0 + (K - N_0)e^{-rt}}, \quad (2.4)$$

com a condição inicial $N(0) = N_0$, $N_0 > 0$, sendo que os estados estacionários de equilíbrio são encontrados fazendo, $dN(t)/dt = 0$, e são $N(t) = 0$ ou $N(t) = K$, onde, $N(t) = 0$, é um ponto instável na medida que um pequeno desvio deste estado inicial de equilíbrio leva a um aumento do crescimento da população.

Por outro lado, $N(t) = K$, é um ponto estável, isto porque após pequenas alterações a população retoma seu estado de equilíbrio.

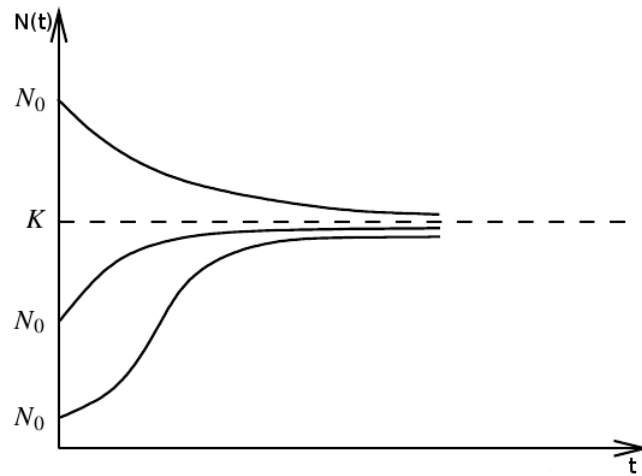


FIGURA 2.1: Dinâmica do modelo logístico para três condições iniciais [6].

Na Fig. (2.1), se $N_0 < K$, $N(t)$ aumenta monoticamente para K , enquanto que se $N_0 > K$, $N(t)$ diminui monoticamente para K . A informação, $N_0 > K$, implica que o número de nascimentos mais imigrações são inferiores aos de morte mais emigração, para o caso, $N_0 < K$, teremos uma situação oposta. Entretanto, apesar da correção feita, o modelo de Verhulst, assim como o modelo malthusiano, não considera a interação entre populações. Um modelo que veio descrever a dinâmica de uma mistura espacial homogênea de duas espécies (presas e predadores) foi o de Lotka-Volterra, que veremos a seguir.

2.2.3 Modelo Lotka-Volterra

Lotka-Volterra, em 1925, foi pioneiro ao descrever matematicamente a interação entre duas populações distintas (presas e predadores). Este modelo teve como objetivo entender porque a densidade das populações de predadores e presas aumentava e diminuía ao longo do tempo. Esta lei foi proposta de modo independente por Lotka e Volterra. Definindo $N(t)$ como o número de presas de uma determinada espécie e $V(t)$ como o número de predadores de outra espécie, essas duas variáveis se relacionam nas equações de Lotka-Volterra como [6]

$$\frac{dN(t)}{dt} = a_N N(t) - b_N N(t)V(t), \quad (2.5)$$

$$\frac{dV(t)}{dt} = a_V N(t)V(t) - b_V V(t), \quad (2.6)$$

onde a_N , b_N , a_V e b_V são constantes positivas, sendo a_N a taxa de crescimento das presas, b_N a taxa de predação das presas ou eficiência dos predadores, a_V a taxa de crescimento dos predadores e b_V a taxa de morte dos predadores. Neste modelo, o crescimento é regulado pelo encontro dos predadores com suas presas.

No modelo malthusiano, sem predadores o crescimento das presas seria exponencial, e sem presas os predadores se extinguiriam.

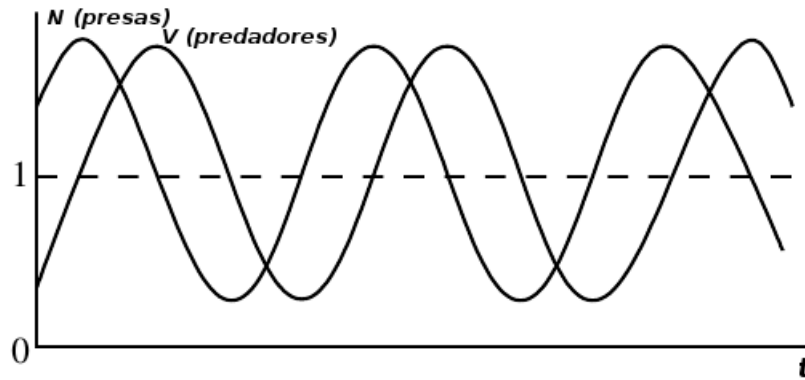


FIGURA 2.2: Solução periódica para presas $N(t)$ e predadores $V(t)$ utilizando o modelo de Lotka-Volterra [6].

Para encontrar uma equação que descreve o comportamento de uma espécie em função da outra, podemos dividir a equação (2.6) pela equação (2.5)

$$\frac{(a_N - b_N V)}{V} dV = \frac{(-b_V + a_V N)}{N} dN, \quad (2.7)$$

integrando a equação (2.7), encontramos

$$V^{a_N} N^{b_V} e^{-b_N V - a_V N} = V_0^{a_N} N_0^{b_V} e^{-b_N V_0 - a_V N_0} \quad (2.8)$$

Na Fig. (2.2) podemos notar que a oscilação do número de predadores está um pouco defasada em relação às presas, ou seja, os máximos e mínimos dos predadores ocorrem sempre um pouco depois dos máximos e mínimos das presas.

Estas hipóteses de homogeneidade na distribuição espacial são razoáveis desde que a escala de comprimento com respeito à extensão da região considerada seja relativamente pequena, ou seja, neste caso a dinâmica deve ser local. Entretanto, esses modelos não abarcam fenômenos de formação de estruturas, morfogênese, ou mesmo a propagação de epidemias, uma vez que estes fenômenos são resultados da não-homogeneidade na distribuição espacial dos indivíduos e assim poderão ser estudados somente com modelos que permitam a representação da heterogeneidade.

2.3 Modelos de populações com heterogeneidade espacial

Até aqui, em todos os modelos apresentados foi assumido implicitamente que os indivíduos estão numa determinada região do espaço, sendo que esta região é homogênea e não influi no desenvolvimento da espécie. Assim, fatores como adversidades ambientais, variações locais da densidade populacional provocada pela locomoção dos indivíduos em busca de locais mais propícios para sobrevivência, entre outros, não são levados em consideração. No entanto, esses fatores podem ser fundamentais para a descrição da dinâmica do sistema.

2.3.1 Equação de Fisher-Kolmogorov

O ingrediente fundamental desta análise será a introdução de uma área de forrageio, que substitui as interações aleatórias entre indivíduos por interações locais. Neste modelo, supomos que os indivíduos se movimentam de forma aleatória, e supomos ainda que eles se movem como se fossem partículas de um gás. Para uma população que se movimenta em uma escala de espaço muito maior que a do movimento dos indivíduos, observamos um fenômeno macroscópico chamado de

difusão. Consideramos então, que este sistema biológico obedece à lei de Difusão Fickiana. Por analogia, podemos dizer que para uma espécie se difundindo em três dimensões, o fluxo material \vec{J} , de animais, bactérias, etc, é proporcional ao gradiente da densidade $u(\vec{r}, t)$ em um determinado ponto,

$$\vec{J}(\vec{r}, t) = -D \nabla u(\vec{r}, t), \quad (2.9)$$

onde D é a constante de difusão.

A equação de matéria biológica pode ser escrita como o fluxo de material que atravessa uma superfície S somada à matéria que é produzida neste volume

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V u(\vec{r}, t) dv = - \int_S \vec{J}(\vec{r}, t) d\vec{S} + \int_V f(u, \vec{r}, t) dv, \quad (2.10)$$

onde a função $f(u, \vec{r}, t)$ é chamada de suprimento de matéria. Utilizando o teorema da divergência e a lei de Fick na equação (2.10), e ainda considerando que a constante de difusão não tenha dependência espacial, encontramos

$$\frac{\partial u(\vec{r}, t)}{\partial t} = f(u, \vec{r}, t) + D \nabla^2 u(\vec{r}, t). \quad (2.11)$$

Os processos de morte e nascimento representados pela função $f(u, \vec{r}, t)$ na Eq. (2.11) podem ser dados num contexto logístico

$$f(u, \vec{r}, t) = au(t) \left(1 - \frac{bu(t)}{a} \right), \quad (2.12)$$

assim encontramos a equação de Fisher-Kolmogorov [6, 7]

$$\frac{\partial u(\vec{r}, t)}{\partial t} = au(\vec{r}, t) - bu^2(\vec{r}, t) + D \nabla^2 u(\vec{r}, t). \quad (2.13)$$

A equação de Fisher-Kolmogorov é a equação mais simples que descreve difusão, crescimento e auto-competição de uma espécie. Esta equação é não linear e faz parte de uma classe de equações tidas como “reação-difusão” [8].

O processo de difusão clássico sempre foi considerado um mecanismo de homogeneização e responsável, portanto, pelo aumento de entropia de um sistema, o que em termodinâmica significa a quebra de estruturas e a desorganização. Entretanto, situações isoladas desafiavam este princípio, desde a observação dos anéis

de precipitação por R. Liesegang em 1896 [9] e de ondas químicas em 1906 por R. L. Luther [10], até às reações oscilantes de B. P. Belousov em 1951 [10].

Apesar de levar em conta a distribuição espacial dos indivíduos, a equação de Fisher-Kolmogorov com interações locais, não é suficiente para explicar a formação de padrão espacial dos indivíduos, isso foi possível somente com a introdução da não-localidade nas interações.

2.3.2 Formação de padrão na equação de Fisher-Kolmogorov

Os estudos de dinâmica de populações cobrem um vasto campo de pesquisas em sistemas biológicos e ecológicos, por exemplo, a formação de padrão na evolução de colônias de bactérias [8, 11]. Tais estudos, como o crescimento de um núcleo de bactérias, são muito importantes, visto que vários tipos de infecções bacterianas podem ser melhor controladas se sua dinâmica de crescimento for compreendida em seu nível mais básico. Ao trabalharmos exclusivamente com a evolução de células de populações e seu comportamento espaço-temporal, usualmente devemos concentrarmos nossa atenção em alguns processos básicos, como a reprodução destes constituintes, sua competição por recursos e a difusão desta população no tempo e espaço, deixando de lado questões não mensuráveis fisicamente, como as mutações destes indivíduos. Diante deste cenário, a equação de Fisher-Kolmogorov torna-se um modelo muito importante na tentativa de estudar estes sistemas, pois incorpora em sua essência, todos esses processos.

Como discutido em vários trabalhos, a equação de Fisher-kolmogorov na forma como usualmente é escrita, Eq. (2.13), não é capaz de descrever a formação de padrão em sistemas biológicos ou outros sistemas [12, 13]. Para que possamos extrair este fenômeno da equação de Fisher-Kolmogorov, ela deve ser generalizada, considerando efeitos não-locais no termo de competição dos indivíduos de uma determinada colônia. Assim como proposto por vários autores [8, 11, 14] em uma dimensão, a equação de Fisher-Kolmogorov generalizada (EFKG) pode ser escrita

como

$$\frac{\partial u(\vec{r}, t)}{\partial t} = D \nabla^2 u(\vec{r}, t) + au(\vec{r}, t) - bu(\vec{r}, t) \int_{\Omega} f_{\beta}(\vec{r} - \vec{r}') u(\vec{r}', t) dr'^3, \quad (2.14)$$

nesta generalização os constituintes de uma determinada colônia têm suas interações pesadas pelo kernel $f_{\beta}(\vec{r} - \vec{r}')$, denominado função influência, sendo esta caracterizada por um alcance β e normalizada no domínio Ω , ou seja

$$\int f_{\beta}(\vec{r}) dr^3 = 1. \quad (2.15)$$

Neste modelo cada indivíduo interage de maneira não-local com cada vizinho, sendo esta interação pesada pela função influência $f_{\beta}(\vec{r} - \vec{r}')$. Desta forma, dado um ponto \vec{r} , o somatório das interações entre um indivíduo neste ponto com indivíduos a uma distância $(\vec{r} - \vec{r}')$, será maior quanto maior for o tamanho do alcance β . Considerando um modelo generalizado de população, podemos deixar a função influência livre para assumir diversas formas de distribuição, por exemplo, podemos assumir uma função bem localizada como a função delta de Dirac, uma distribuição gaussiana, ou mesmo uma distribuição sem derivada na origem, como uma distribuição de Laplace.

2.4 Conclusão

Neste capítulo estudamos os principais modelos de dinâmica populacional. Apresentamos o modelo de Fisher-Kolmogorov generalizado, o qual inclui interações não-locais de competição, sendo que estas não são considerados em nenhum dos outros modelos já apresentados. Esse tipo de interação pode influenciar a dinâmica e evolução da espécie, como também a sua distribuição no espaço. De fato, o modelo EFKG prevê a formação de padrão em populações [8, 11, 12, 13, 14].

Capítulo 3

Transição de fase e formação de padrão

3.1 Introdução

O estudo das transições de fase se iniciaram na termodinâmica do equilíbrio com as transições líquido gás, transições magnéticas, cristais líquidos, supercondutividade e outros sistemas [15, 16]. Paralelamente ao estudo das transições de fase nos sistemas termodinâmicos no equilíbrio se desenvolveu o estudo de sistemas fora do equilíbrio, como exemplo deste tipo de fenômeno temos a percolação, sendo o modelo mais simples de transições de fase geométrica [17]. Suas aplicações não ficam restritas apenas à física, visto que, as transições de fase ocorrem em um conjunto amplo e variado de sistemas de interesse em várias áreas da ciência e tecnologia, sendo usada em teoria de populações biológicas, inteligência artificial e teoria da computação.

Em termodinâmica, transição de fase ou mudança de fase é a transformação de um sistema termodinâmico de uma fase para outra. Uma característica distinguível de uma transição de fase é uma abrupta mudança em uma ou mais propriedades físicas, em particular a capacidade ou susceptibilidade térmica, com uma pequena mudança em uma variável termodinâmica, tal como a temperatura. As investigações dos fenômenos críticos tiveram início com o cientista francês Barão Caig-

nard de La Tour em 1822. Através de experimentos utilizando diversas substâncias, tais como, eter, álcool e água, ele observou que quando esquentados em tubos de vidro hermeticamente fechados, tornavam-se aparentemente, reduzidos a vapor em um espaço que variava de duas a quatro vezes o volume original do líquido considerado, e ainda, demonstrou a existência de uma temperatura limite acima da qual um líquido se vaporizava independente da pressão aplicada. Esta temperatura é o que chamamos hoje de ponto crítico em sistemas líquido vapor [18, 19].

Em meados de 1933, Ehrenfest [20] estudou a classificação das transições de fase de acordo com a ordem n para o caso no qual a n -ésima derivada da energia livre era descontínua. Embora útil, a classificação de Ehrenfest é considerada um método impreciso para classificar as transições de fase, pois não leva em consideração o caso em que a derivada de energia livre diverge, sendo somente possível no limite termodinâmico. Por exemplo, na transição ferromagnética, a capacidade de calor diverge para o infinito.

A classificação mais aceita, foi proposta por Fisher [21]. Segundo essa classificação, uma transição de fase é dita de primeira ordem se a primeira derivada da energia livre é descontínua, quando há descontinuidades em parâmetros, tais como a energia interna e/ou ou magnetização do sistema. Ainda segundo essa classificação, as transições contínuas ou críticas (segunda ordem) são aquelas que apresentam a primeira derivada da energia livre contínua e sua segunda derivada descontínua ou infinita [22, 23, 24].

Vários modelos fenomenológicos surgiram buscando um tratamento adequado para as transições de fase, tais como o de Van der Waals para um fluido simples [22] e o de Curie-Weiss para o ferromagnetismo uniaxial simples [25]. Entretanto, Lev Landau, em 1930, propôs uma teoria mais geral [26], motivada pela analiticidade da energia livre e na simetria do Hamiltoniano, com a introdução do parâmetro de ordem e no estabelecimento de uma expansão da energia livre em termos dessa grandeza.

Neste capítulo apresentamos inicialmente as definições de parâmetro de or-

dem aplicado a sistemas fluidos e magnéticos no contexto das transições de fase, em seguida mostramos a teoria de Landau para as transições de primeira e segunda ordem.

3.2 Parâmetro de ordem

O estudo de fenômenos críticos se justifica no seu caráter universal, onde podemos encontrar variados sistemas que apresentam a mesma fenomenologia sob dadas circunstâncias. A caracterização dessas universalidades de comportamento pode ser aplicada ao estudo de sistemas biológicos.

Neste contexto faz-se importante introduzirmos inicialmente a noção de parâmetro de ordem. Esse parâmetro possui uma propriedade muito importante, isto é, na fase desordenada ele apresenta um valor nulo e na ordenada um valor não-nulo. Nas transições líquido-vapor, é definido como a diferença entre as densidades do líquido e do vapor em coexistência. Nas transições ferromagnéticas, o parâmetro de ordem é a magnetização do sistema, sendo que nesses sistemas o parâmetro de ordem se anula acima da temperatura crítica [27].

3.2.1 Sistemas Fluidos

Iniciamos a descrição de sistemas fluidos com a apresentação de um funcional da forma $f(P, \rho', T) = 0$, o qual relaciona os parâmetros termodinâmicos, pressão, densidade e temperatura. Desse modo, as diversas fases termodinâmicas de uma substância simples são representadas num diagrama PT denominado diagrama de fase. Neste diagrama as fases são representadas por regiões de modo que a projeção no plano PT produz três regiões, correspondendo a três fases da matéria, fases líquida, sólida e gasosa. Neste diagrama, a coexistência entre duas fases distintas é representada por uma linha na qual cada ponto representa um estado de equilíbrio, onde, dois ou mais estados podem coexistir a uma dada pressão

e a uma dada temperatura. Desse modo, as fases sólida e gasosa estão em equilíbrio pela curva de sublimação, as fases sólidas e líquidas pela curva de fusão, e as fases líquidas e gasosas estão em equilíbrio pelas curvas de vapor-pressão. O ponto de encontro de linhas de coexistência constitui o ponto triplo, isto é, o ponto de coexistência entre três fases distintas. Este ponto representa um estado de equilíbrio no qual as três fases podem existir [22, 27, 28].

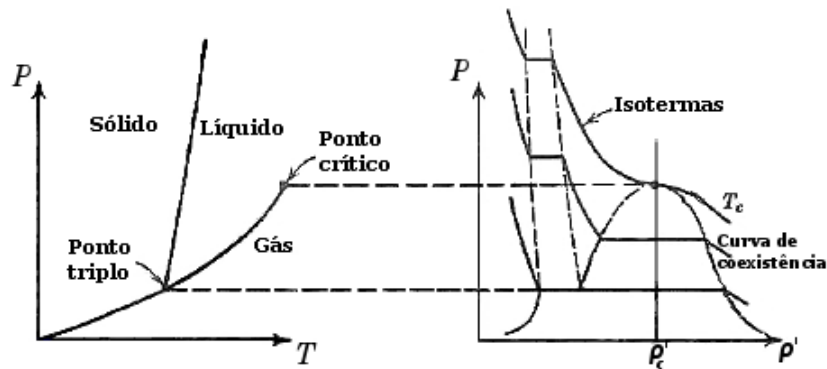
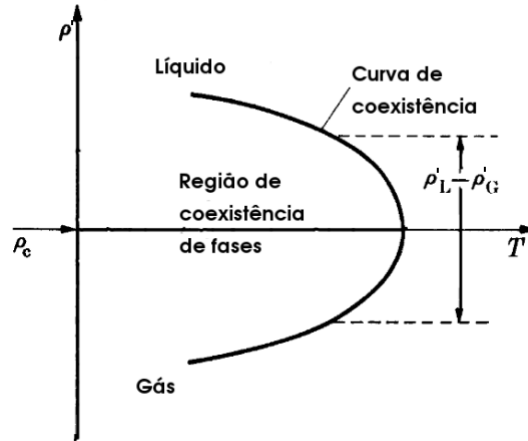


FIGURA 3.1: Nos planos PT e $P\rho'$ mostram a transição líquido-vapor. A linha de transição de primeira ordem termina num ponto crítico [29].

Notamos, porém, que a curva líquido-vapor não se estende como a curva de fusão, mas sim, termina em um ponto. Este ponto é chamado de ponto crítico, e suas coordenadas são (P_c, ρ'_c, T_c) . Assim, a curva líquido-vapor termina em meio a um ponto crítico de onde pode-se converter um líquido para um gás continuamente, sem cruzar a linha de transição de fase, como mostrado na Fig. (3.1).

Na Fig. (3.2), vemos que para baixas temperaturas existe uma larga diferença entre as densidades do líquido e do gás, ρ'_L e ρ'_G , respectivamente, contudo quando aproximamos da temperatura crítica esta diferença tende a zero. Chamamos esta diferença de densidades, $\rho'_L - \rho'_G$, de parâmetro de ordem do sistema líquido-vapor.

FIGURA 3.2: Projeção da superfície $P\rho'T$ no plano $\rho'T$ [22].

3.2.2 Sistema Magnéticos

As substâncias ferromagnéticas são caracterizadas por possuírem uma magnetização espontânea que pode persistir mesmo na ausência de um campo magnético externo. Esse comportamento é bem diferente do que ocorre numa substância paramagnética, onde a magnetização só aparece quando se aplica um campo magnético, desaparecendo quando este se anula. Se uma substância ferromagnética for aquecida a temperaturas suficientemente altas ela perderá a magnetização espontânea e se comportará como uma substância paramagnética, ou seja, ocorrerá uma transição de fase ferromagnética para a fase paramagnética.

Um sistema deste tipo pode ser descrito pelo modelo de Heisenberg, utilizando um Hamiltoniano que é invariante frente aos movimentos de translação e rotação dos spins com respeito a um eixo qualquer, e escrito da seguinte maneira

$$\mathcal{H}_\Omega = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i \cdot S_j - H \cdot \sum_i S_i, \quad (3.1)$$

onde o somatório é realizado apenas sobre os primeiros vizinhos em uma rede cristalina. Ainda na Eq. (3.1), J é chamado de constante de troca, S_i é o operador de spin com magnitude constante e direção variável, H é o campo magnético aplicado

e Ω é o domínio da região. A magnetização de uma substância ferromagnética é definida como o parâmetro de ordem, cuja característica principal é ser nulo acima da temperatura crítica e não-nulo abaixo dela.

Neste sentido, o conceito do parâmetro de ordem é muito importante na teoria das transições de fase representando uma nova variável termodinâmica necessária para a descrição da fase ordenada, neste caso, da fase ferromagnética. Desse modo, quando o sistema apresenta ordem abaixo de uma temperatura T_c , a magnetização é diferente de zero e aponta para uma direção arbitrária, \hat{n} . Então o parâmetro de ordem fica

$$M = \frac{1}{N(\Omega)} \sum_i \langle S_i \rangle = \begin{cases} 0 & T > T_c; \\ M\hat{n} & T < T_c, \end{cases} \quad (3.2)$$

na Eq. (3.2), $N(\Omega)$ representa o número de partículas. Para temperaturas baixas, $M \rightarrow M\hat{n} \neq 0$ quando $H \rightarrow 0$. Para temperaturas altas, $M \rightarrow 0$ quando $H \rightarrow 0$. Na Fig. (3.3) mostramos o comportamento da magnetização em função da temperatura, desse modo, existe uma temperatura crítica T_c abaixo da qual a substância é ferromagnética e acima da qual é paramagnética [22, 27, 28].

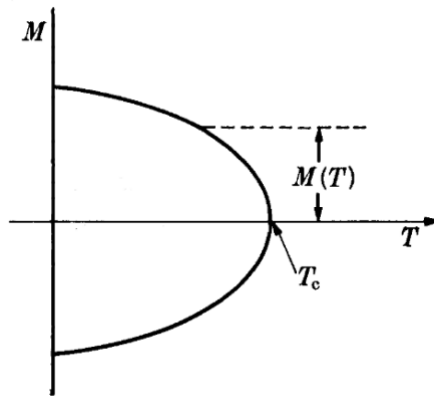


FIGURA 3.3: Magnetização de um ferromagneto como função da temperatura [22].

3.3 A teoria de Landau das transições de fase

A teoria de Landau tornou possível a compreensão da física das transições de fase através de estudos da singularidade na energia livre. Landau fez uma série de pressupostos para a energia livre aproximada de um sistema, de tal forma que a energia livre exibe a não analiticidade de uma transição de fase e nos fornece grande parte da física envolvida neste processo. Além disso, Landau associou à passagem de uma fase a outra, uma mudança nas propriedades de simetria e a esta mudança vinculou a noção de parâmetro de ordem. Esta grandeza física de caráter extensiva é nula na fase simétrica e não nula na fase menos simétrica [26].

O cerne dessa teoria é escrever um funcional do parâmetro de ordem, cujo mínimo funcional nos dá o valor de equilíbrio do parâmetro de ordem e a energia livre do sistema. Este funcional de energia livre pode ser escrito como uma série de potências em ϕ_α

$$F = F_0(T) + \frac{1}{2}f_2(T)\phi_\alpha^2 + \frac{1}{4}f_4(T)\phi_\alpha^4 + \frac{1}{6}f_6(T)\phi_\alpha^6 + \dots, \quad (3.3)$$

observe que as potências ímpares são desprezadas, pois o sinal do parâmetro de ordem é irrelevante, por exemplo, para um sistema ferromagnético é igualmente provável que ocorra magnetização em qualquer direção.

3.3.1 Teoria de Landau das transições de fase de segunda ordem

Considerando o caso particular do modelo de Ising, portanto, $F(\phi_\alpha) = F(-\phi_\alpha)$, na Eq. (3.3), e ignorando os termos de ordem superior da série de potências, com a minimização da energia livre em relação a ϕ_α , obtemos

$$\frac{\partial F}{\partial \phi_\alpha} = f_2(T)\phi_\alpha + f_4(T)\phi_\alpha^3 = 0, \quad (3.4)$$

isso implica que

$$\phi_\alpha = 0 \quad \text{e} \quad \phi_\alpha^2 = -\frac{f_2}{f_4}.$$

A transição de fase nos diz que se $T = T_c$, o parâmetro de ordem deve tornar-se zero, e o sistema segue da fase ordenada para a desordenada. Assumimos que toda a temperatura da energia livre de Landau é dependente do termo $f_2(T)$, assim $f_4(T)$ é independente da temperatura. Portanto,

$$f_2(T_c) = 0, \quad (3.5)$$

isso leva a $\phi_\alpha^2 = 0$ em $T = T_c$. Podemos, então, expandir $f_2(T)$ em série de Taylor em T , em torno de $T = T_c$:

$$f_2(T) \approx f_2(T_c) + (T - T_c) \frac{\partial f_2(T)}{\partial T} \Big|_{T=T_c} = (T - T_c)a, \quad (3.6)$$

onde $a = \frac{\partial f_2(T)}{\partial T} \Big|_{T=T_c}$. Como assumimos que $f_4(T)$ é independente da temperatura, temos que, $f_4(T) = b$ é uma constante. Assim, o funcional de energia livre é escrito da forma

$$F = F_0(T) + \frac{1}{2}a(T - T_c)\phi_\alpha^2 + \frac{1}{4}b\phi_\alpha^4. \quad (3.7)$$

Calculando os pontos críticos da energia livre

$$\frac{\partial F}{\partial \phi_\alpha} = a(T - T_c)\phi_\alpha + b\phi_\alpha^3 = 0, \quad (3.8)$$

com isso obtemos os valores $\phi_\alpha = 0$ e $\phi_\alpha^2 = \frac{a(T_c - T)}{b}$. Comparando (??) e (3.7) vemos que a entropia é dada por

$$S = -\frac{1}{2b}a\phi_\alpha^2 = -\frac{1}{2}a^2(T_c - T). \quad (3.9)$$

Deste resultado obtemos a expressão do calor específico

$$C_V = T \left(\frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \right)_V = T \frac{\partial S}{\partial T} = \begin{cases} 0, & \text{se } T > T_c; \\ \frac{a^2}{2b}T, & \text{se } T < T_c. \end{cases} \quad (3.10)$$

Portanto, o calor específico apresenta uma descontinuidade finita, um salto na temperatura crítica T_c , o que corresponde a uma transição de fase contínua.

Na Fig. (3.4), vemos que, para $T > T_c$, existe um mínimo estável quando o parâmetro de ordem, ϕ_α , é igual a zero. Quando $T = T_c$, vemos que a energia

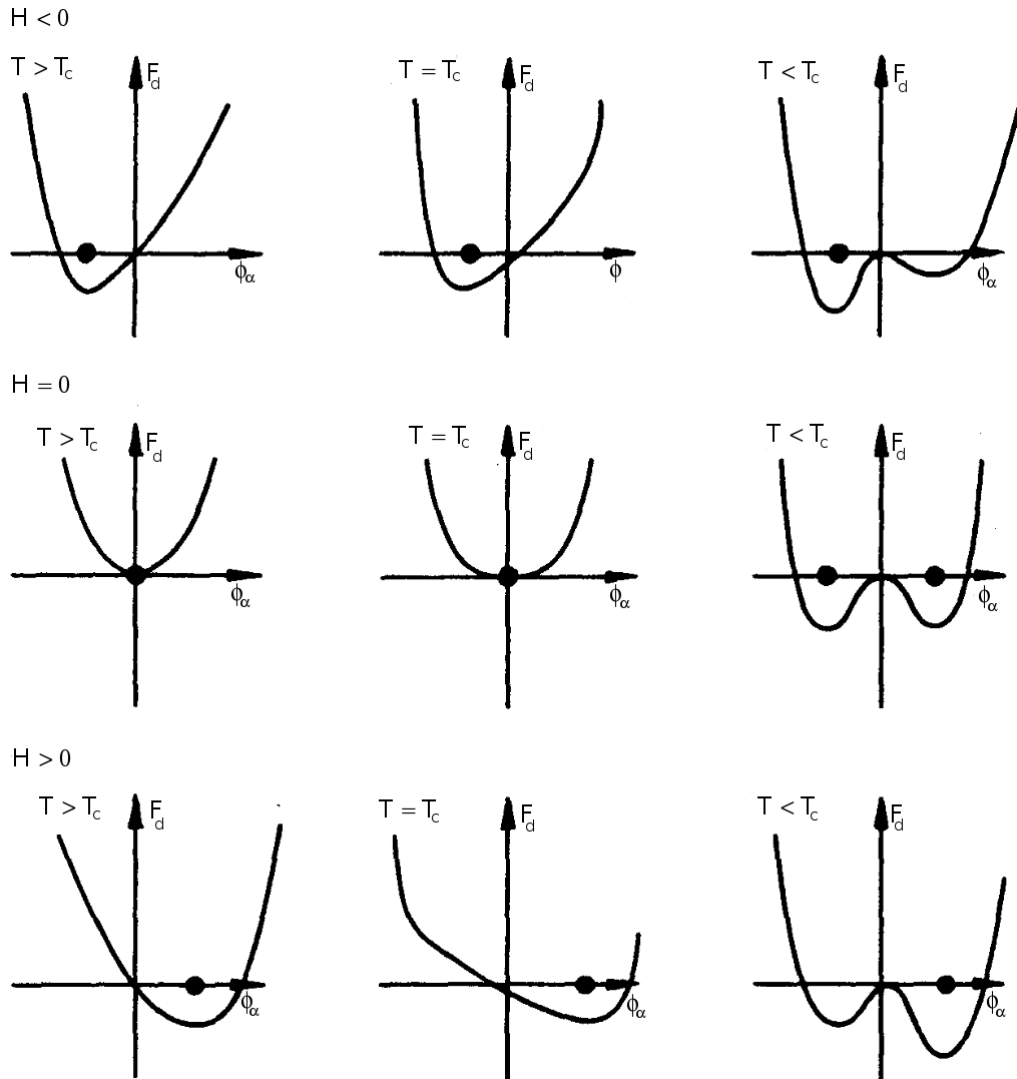


FIGURA 3.4: A densidade de energia livre de Landau para vários valores de temperatura T e campo magnético externo H . O ponto (●) indica o valor de ϕ_α em que F_d alcança um mínimo global. A coluna mais a direita mostra uma transição de primeira ordem, que ocorre para $T < T_c$ quando H varia de valores negativos a positivos. A linha central representa uma transição de segunda ordem que ocorre para $H = 0$ [27].

livre continua apresentando um mínimo estável em $\phi_\alpha = 0$. Abaixo da temperatura crítica, $T < T_c$, temos que em $\phi_\alpha = 0$, o qual anteriormente era um ponto de mínimo,

passa a ser agora um ponto de máximo e o sistema apresenta dois mínimos estáveis, semelhante ao que ocorre na transição de fase de primeira ordem [27, 28].

3.3.2 Teoria de Landau das transições de fase de primeira ordem

Vamos agora considerar a situação em que b é negativo. Levaremos em conta o próximo termo de ordem superior em ϕ_α . Fazendo isso, a energia livre assume a forma

$$F = F_0(T) + \frac{1}{2}a(T - T_0)\phi_\alpha^2 - \frac{1}{4}b\phi_\alpha^4 + \frac{1}{6}c\phi_\alpha^6, \quad (3.11)$$

onde T_0 é uma temperatura diferente da temperatura crítica, T_c . Calculando os mínimos para essa energia livre fazemos a primeira derivada igual a zero

$$\frac{\partial F}{\partial \phi_\alpha} = a(T - T_0)\phi_\alpha - b\phi_\alpha^3 + c\phi_\alpha^5 = 0, \quad (3.12)$$

como soluções, temos:

$$\phi_\alpha = 0 \quad \text{e} \quad \phi_\alpha^2 = \frac{b \pm \sqrt{b^2 - 4ca(T - T_0)}}{2c}. \quad (3.13)$$

Se $\phi_\alpha = 0$ é um mínimo, temos que $\phi_\alpha^2 = \frac{b - \sqrt{b^2 - 4ca(T - T_0)}}{2c}$ é um máximo e $\phi_\alpha^2 = \frac{b + \sqrt{b^2 - 4ca(T - T_0)}}{2c}$ é outro mínimo, se apenas $\phi_\alpha = 0$ é um mínimo, temos para $T > T_c$, a fase desordenada. Para temperaturas inferiores começam a surgir outros mínimos. Para $T = T_c$ aparecem três mínimos estáveis, sendo um deles $\phi_\alpha = 0$, contudo $T < T_c$, $\phi_\alpha = 0$ é ponto de máximo e surgem dois pontos de mínimo.

Podemos notar que a partir das curvas representadas na figura (3.5), mesmo em $T = T_c$, o valor de ϕ_α em um novo mínimo é finito, suficientemente longe de zero. Desta forma, o parâmetro assume saltos de $\phi_\alpha = 0$ para um valor finito, em $T = T_c$. Em contraste, na transição de fase de segunda ordem discutida anteriormente, o parâmetro de ordem começa do zero em $T = T_c$, e torna-se, gradualmente, finito. Assim, pode-se dizer, em geral, que a transição de fase de segunda ordem é uma transição de fase contínua, e a transição de fase de primeira ordem é descontínua. Para $\phi_\alpha = 0$ a energia livre de Landau $F_L(\phi_\alpha) = 0$. Assim,

$$a(T - T_c) - \frac{b}{2}\phi_\alpha^2 + \frac{c}{3}\phi_\alpha^4 = 0. \quad (3.14)$$

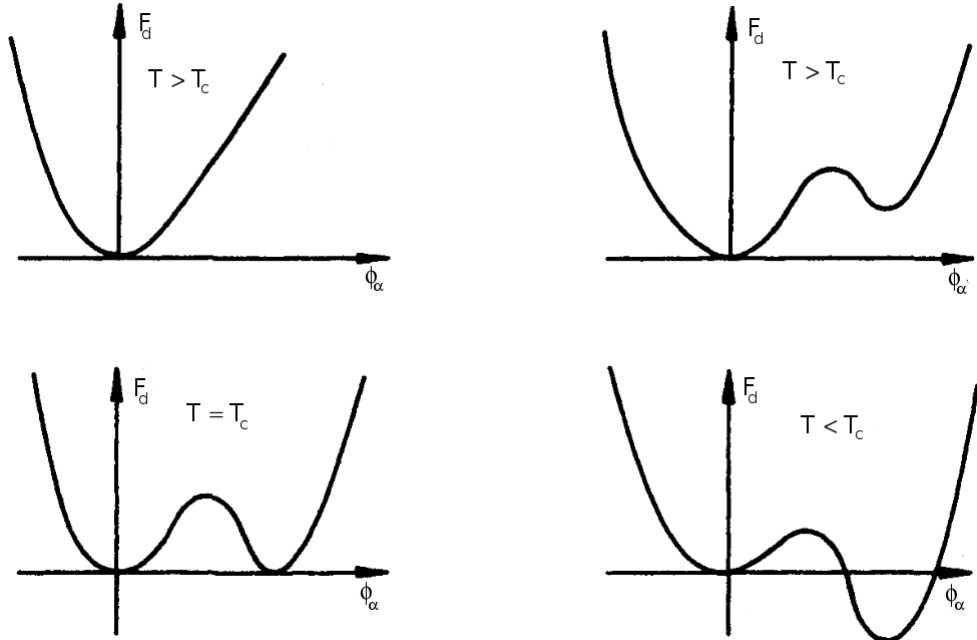


FIGURA 3.5: F_d em função de ϕ_α mostrando a descrição da teoria de Landau para uma transição de fase de primeira ordem [27].

Substituindo o novo mínimo na equação (3.14),

$$a(T - T_c) - \frac{b}{2} \left(\frac{b + \sqrt{b^2 - 4ca(T - T_0)}}{2c} \right) + \frac{c}{3} \left(\frac{b + \sqrt{b^2 - 4ca(T - T_0)}}{2c} \right)^2 = 0,$$

$$T_c = T_0 + \frac{3b^2}{16ac}. \quad (3.15)$$

Esta é a temperatura de transição. Desse modo, abaixo de T_c o sistema está na fase ordenada, e acima de T_c , na fase desordenada. O ponto $\frac{b + \sqrt{b^2 - 4ca(T - T_0)}}{2c}$ é onde a energia tem um salto.

$$\frac{\partial F}{\partial T} = \frac{\partial F_0}{\partial T} + \frac{1}{2} a \phi_\alpha^2 \quad (3.16)$$

Se aproximarmos a temperatura crítica T_c por $T > T_c$, temos que, $\phi_\alpha = 0$, e

$$\left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{T_c} = \left(\frac{\partial F_0}{\partial T} \right)_{T_c}. \quad (3.17)$$

Mas se aproximarmos a temperatura T_c por $T < T_c$, temos que, $\phi_\alpha^2 = \frac{b + \sqrt{b^2 - 4ca(T - T_0)}}{2c}$, e

$$\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{T_c} = \left(\frac{\partial F_0}{\partial T}\right)_{T_c} + \frac{3b}{4c}. \quad (3.18)$$

Podemos observar que a primeira derivada da energia livre é descontínua em $T = T_c$, isto indica uma transição de primeira ordem.

A entropia do sistema está relacionada a energia livre através da relação

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T}, \quad (3.19)$$

se a primeira derivada da energia livre é descontínua na transição de fase, temos como resultado um calor latente de transição dado por $\Delta Q = T\Delta S$, o qual caracteriza uma transição de fase de primeira ordem.

3.4 Formação de padrão

Os estudos pioneiros sobre dinâmica de populações em sistemas biológicos que consideraram a distribuição espacial e sua movimentação pela difusão clássica, são relativamente recentes e podem ser encontrados nos trabalhos de R. A. Fisher sobre genética na década de 1930 [7], de J. G. Skellam, na década de 1950, sobre dispersão de animais e plantas [30], e de A. M. Turing sobre morfogênese [31]. Nas décadas de 1960 e 1970, o interesse estava nos fenômenos de auto-organização em química, reações do tipo Belousov-Zhabotinski [32, 33], entre outros, e em dinâmica dos fluidos, convecção de Bénard, vórtices de Rayleigh-Taylor [34], provocando um grande desenvolvimento de técnicas e teorias matemáticas (teorias de perturbações e bifurcações) que, por sua vez, se relacionaram com diversos problemas de dispersão espacial em dinâmica de populações [35].

3.4.1 A reação de Belousov-Zhabotinsky

A reação de Belousov-Zhabotinsky (reação de BZ) é uma reação química

que oscila entre dois estados [32, 33], e pertence a uma classe de reações modeladas por osciladores químicos não lineares, as quais não são dominadas pelo equilíbrio termodinâmico. Para além do interesse teórico deste tipo de sistemas, que juntamente com a convecção de Bénard desempenharam um papel central no estudo da formação de padrões em sistemas dissipativos, as oscilações químicas são importantes como modelos de reações biológicas que ocorrem longe do equilíbrio [32, 33].

A reação de BZ produz seu próprio catalizador, um dos produtos atua como catalizador para acelerar a formação de mais produto. A reação BZ envolve dezenas de reações químicas, sendo que cada um dos processos produz um reagente necessário a outro levando o sistema para uma espécie de ciclo vicioso.

A redução da química complicada da reação de BZ a um modelo simples chamado “Oregonator”, por causa do lugar em que o trabalho foi desenvolvido, é uma equação diferencial que exhibe o famoso atrator de Rossler. O “Oregonator”, e o sistema químico que ele modela, apresentam comportamentos muito diferentes, ou seja, são descritos por um diagrama de bifurcação complexo que inclui regimes de comportamento caótico. A bifurcação associada ao comportamento oscilatório ocorre quando a taxa de fluxo de reagentes atinge um certo limiar. Para valores inferiores, depois de um transiente oscilatório, o sistema atinge um estado de equilíbrio uniforme. Para valores superiores, o transiente para quaisquer valores das concentrações iniciais [36].

As reações de BZ podem ser realizadas colocando finas camadas de reagentes, sem os misturar, formando-se intrincados padrões espaciais, inicialmente surgem pequenas manchas em regiões diferentes que se propagam numa série de anéis concêntricos (ondas em alvo) ou de espirais, Fig. (3.6). Estas reações apresentam formação de padrões espaciais porque as oscilações em diferentes regiões do espaço não estão sincronizadas, exceto quando os reagentes são bem misturados. De outra forma, a mistura dá-se apenas devido à difusão de diferentes tipos de moléculas no meio. O padrão espacial observado resulta, portanto, da interação da própria reação com este processo de difusão. Assim, este sistema químico homogêneo exhibe

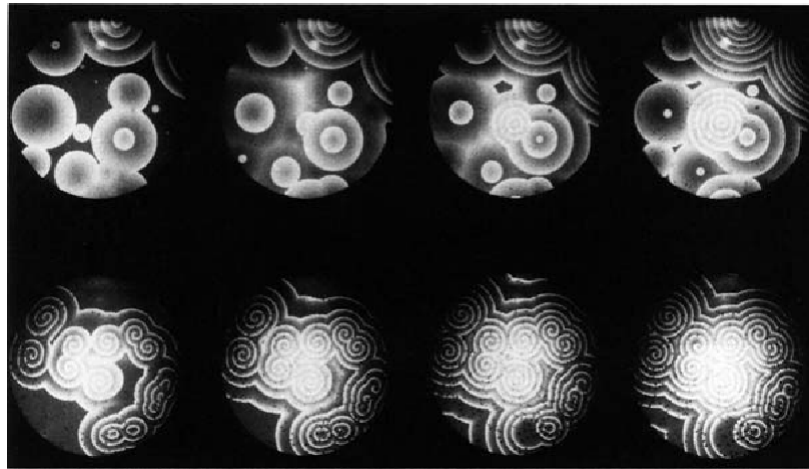


FIGURA 3.6: A primeira linha representa “padrões alvo” (ondas circulares) gerado por núcleos marcapasso na reação Belousov Zhabotinskiide. Na segunda linha observamos ondas espiraladas, iniciadas por uma agitação suave do regente [10].

autoorganização não só temporal, como também espacial.

3.4.2 O mecanismo de Turing

O mecanismo de Turing foi proposto num artigo intitulado, “The Chemical Basis of Morphogenesis”, publicado em 1952, no qual o matemático Alan Turing mostrou que um sistema de morfogêneses, que reagem e se difundem, pode produzir padrões espaciais estáveis a partir de uma distribuição inicial uniforme [31]. O interesse de Turing na Biologia centrou-se na estrutura física dos organismos vivos, em particular no problema da morfogênese, ou seja, a razão que leva os organismos a desenvolverem determinadas formas. Turing considerou a equação de reação-difusão, o modelo matemático que traduz o acoplamento dos dois processos que intervêm, por exemplo, na reação de Belousov-Zhabotinsky, ou em geral, quando temos uma distribuição espacial de substâncias químicas que reagem entre si. Em relação à parte espacial, considerou o modelo mais simples para a difusão, mas supondo que essa difusão se dá com velocidades diferentes para substâncias químicas diferentes.

Com estas hipóteses, Turing mostrou que pequenas flutuações da concentração em torno do estado uniforme, onde as concentrações são constantes no espaço e no tempo, são amplificadas com períodos espaciais, ou comprimentos de onda num certo intervalo de valores que depende dos parâmetros do sistema (constantes de reação e coeficientes de difusão).

3.5 Conclusão

Neste capítulo apresentamos a teoria de transição de fase proposta por Landau, e nesse estudo traçamos um paralelo entre os tipos de transições de fase e o comportamento do parâmetro de ordem em cada situação. Apresentamos também a formação de padrão da reação BZ e a mecanismo de Turing, apesar de diferentes, eles apresentam o mesmo fenômeno de formação de padrão de sistemas magnéticos e fluidos. Os conceitos aqui explanados serão fundamentais para a compreensão do trabalho desenvolvido nesta dissertação.

Capítulo 4

Formação de padrão em sistemas biológicos

4.1 Introdução

Os modelos de dinâmica de populações são muito utilizados no estudo de fenômenos de auto-organização e formação de padrão em sistemas biológicos. Estes modelos são muito importantes nestes estudos por apresentar características não lineares, graus de complexidade e caos. Usualmente, definimos populações como sendo um grupo de indivíduos de uma determinada espécie, por exemplo, bactérias, vírus, vegetais ou animais [37, 38, 39].

Nos últimos anos, o estudo de agregações de animais tornou-se um tema de grande interesse [39, 40]. A compreensão do fenômeno de agregação se mostra importante, pois as ideias oriundas deste estudo trazem aplicações práticas. Por exemplo, através da compreensão do comportamento de um cardume de peixes podemos estabelecer estratégias de pesca mais eficazes, enquanto o estudo de agregações de gafanhotos pode ser útil no controle de surtos dessa espécie.

O fenômeno de interações biológicas ocorre em localizações específicas e

frequentemente, envolvem a redistribuição de organismos ou moléculas no espaço. Mesmo para um estado inicial homogêneo, padrões podem transformar uma região homogênea em heterogênea. Desse modo, devido a importância do espaço, biólogos tem lutado com a dificuldade de coletar dados nas mais numerosas escalas. Em geral, os modelos de dinâmica de populações que consideram a evolução temporal de apenas um tipo de espécie, são muito importantes para estudos em laboratório. No mundo macroscópico, estes modelos são utilizados para realizar previsões de fenômenos que podem influenciar a dinâmica de certos grupos de populações, em níveis regionais ou mundiais. Portanto, estes modelos podem facilitar a exploração biológica permitindo fazer previsões e explorar questões difíceis para tratar no campo ou no estudo em laboratório [8, 11, 12, 13, 14].

Neste capítulo apresentaremos alguns resultados de estudos em sistemas biológicos nos quais os seres vivos apresentam o fenômeno de autoorganização e formação de grupos. São exemplos fascinantes que nos inspiram e motivam a buscarmos uma descrição matemática adequada.

4.2 Autoorganização em sistemas biológicos

Os mecanismos responsáveis pelos fenômenos de formação de padrão são intensamente estudados por várias áreas do conhecimento científico, devido a sua importância na compreensão de diversos processos observados na natureza. A formação de grupos é um comportamento comum em várias espécies de animais, por exemplo, cardume de peixes, bandos de aves, insetos sociais e alcateia de lobos.

Historicamente, o conceito de autoorganização apareceu pela primeira vez no contexto de sistemas físicos com a reação química de Belousov-Zhabotinsky (BZ). Um sistema é definido como autoorganizado quando adquire ordem e estrutura. Desse modo, nestes sistemas de não equilíbrio, a formação de padrão ocorre através de interações internas ao sistema sem a intervenção de algo externo. Este comportamento acarreta vários benefícios e custos à sobrevivência de indivíduos que

fazem parte do grupo, são exemplos de benefícios, o incremento da vigilância contra potenciais predadores, a possibilidade de defesas mais contundentes e eficientes, assim como a redução da probabilidade individual de predação. Entretanto, grupos maiores podem chamar mais a atenção de predadores aumentando a necessidade de divisão de recursos alimentares, intensificando a competição intraespecífica. Portanto, a evolução e a manutenção da vida em grupo estão diretamente relacionados ao balanço entre custos e benefícios desse comportamento.

4.2.1 Regras para a formação de grupos em animais

Um dos aspectos mais estudados destas agregações são as formações de padrões espaciais e espaço-temporais. Na busca da compreensão sobre os diferentes mecanismos que influenciam a formação de padrão, os cientistas utilizam modelos matemáticos motivados por hipóteses de base biológica.

Os modelos matemáticos mais simples de agregação de animais geralmente instruem os indivíduos a seguirem, individualmente, três regras: (a) movimente-se na mesma direção que o seu vizinho; (b) fique perto dos seu vizinho; (c) evite colisões com seus vizinhos [41, 42]. A Fig. (4.1) ilustra estas regras, nas quais os indivíduos tendem a se aproximar de outros se estão dentro da faixa de atração, ou se distanciam para evitar colisões, se estão dentro da faixa de repulsão. Se estiverem dentro da faixa de alinhamento, os indivíduos adotam como orientação de movimento a direção e sentido dos seus vizinhos.

Um bom exemplo de aplicação dessas regras simples são os cardumes de peixes. Em geral, os fatores determinantes nas decisões de um determinado indivíduo participar ou não de um determinado cardume, são a proteção contra predadores, melhor vigilância contra predadores, e o aumento na habilidade de forrageamento [43, 44]. Ao se agregarem, os peixes necessitam de um sistema sensorial, que podem responder com grande velocidade para pequenas alterações na sua posição em relação ao próximo. A linha lateral é uma linha que corre ao longo de cada lado

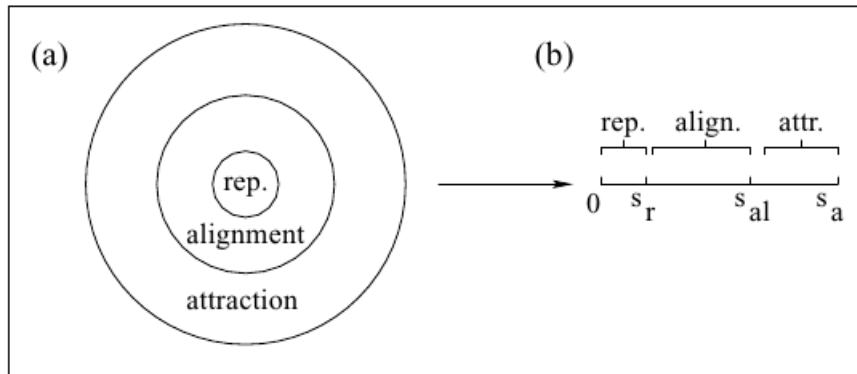


FIGURA 4.1: Ilustração das zonas de repulsão

(s_r), alinhamento (s_{al}), e atração (s_a): (a) caso bidimensional; (b) caso unidimensional [41].

do peixe, abrange a guelra até a base da cauda. Em experimentos de laboratório quando as linhas laterais de cardumes de peixes foram removidas, eles passaram a nadar mais próximo, levando a uma teoria de que as linhas laterais podem fornecer estímulos adicionais quando um peixe se aproxima de outro [45].



Getty Images/FPG/Doug Perrine

FIGURA 4.2: Cardume de peixes [39].

4.2.2 Agregação em girinos da espécie *Rhinella ornata*

Há uma alta taxa de mortalidade entre girinos, estima-se que menos de 10% dos girinos em uma população atinjam a idade adulta [46]. Para se defenderem contra a predação, os girinos formam grupos, conhecidos como cardumes. Estes indivíduos conseguem detectar pistas químicas deixadas por predadores ou de co-específicos recém predados. A resposta frente a essas pistas pode ser a fuga ou o aumento do grau de agregação dos indivíduos. Esse comportamento agregativo entre os girinos varia ao longo da vida larval. Quando pequenos, os girinos possuem uma musculatura natativa pouco desenvolvida e uma maior tendência a agregação, pois conseguem intensificar o sinal aposemático para o predador. Com respeito a recursos alimentares, o comportamento gregário oferece uma desvantagem, aumentando a competição intraespecífica. Quando maiores, os girinos apresentam uma musculatura natatória mais desenvolvida e, portanto, alcançam maiores velocidades de fuga, estando mais propensos a abandonar os cardumes.

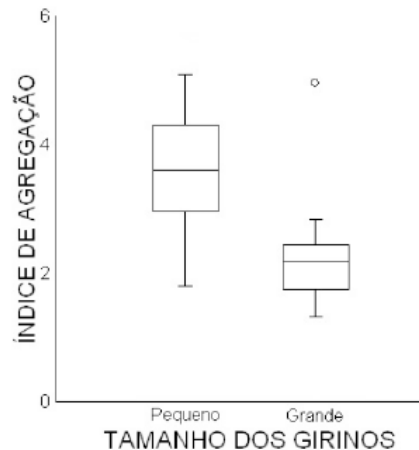


FIGURA 4.3: Índice de agregação em função do tamanho dos girinos [46].

Na Fig. (4.3) observamos que o índice de agregação de girinos pequenos é maior que o de girinos grandes, e na Fig. (4.4) percebemos que a velocidade dos girinos pequenos é menor que a velocidade dos girinos grandes. Levando em

consideração as vantagens defensivas proporcionadas pela agregação, a diminuição do grau de agregação proporcionaria uma desvantagem aos girinos maiores. Entretanto a maior velocidade de fuga acarretará aos girinos maiores um custo mais baixo devido ao seu desgarramento do cardume.

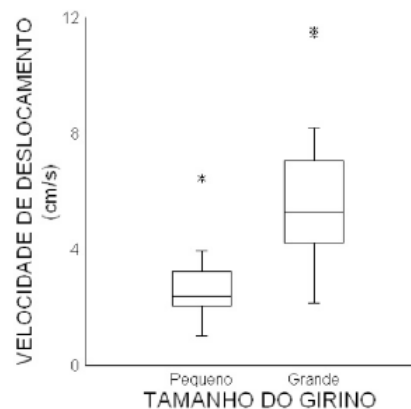


FIGURA 4.4: Velocidade de deslocamento em função do tamanho dos girinos [46].

4.2.3 Colônia de bactérias

A auto-organização em colônias de bactérias tem sido intensivamente estudada, tanto experimentalmente quanto teoricamente. Dependendo de alguns parâmetros, como quantidade de nutrientes, as colônias de bactérias podem apresentar diferentes estruturas espaciais. O estudo de crescimento de colônias de bactérias não é apenas um tópico biológico especial, mas também uma tentativa de explorar e entender a formação de padrão universal. Embora as bactérias sejam uma das formas mais simples de vida, elas produzem padrões muito complexos [47].

Em estudos experimentais feitos por Ohgiwari (1992) [48], foi usado bactérias da espécie *Bacillus subtilis*, as quais possuem hastes com flagelos (cerca de $0,7 \mu m$ de diâmetro e $2 \mu m$ de comprimento). As bactérias foram colocadas no centro de uma placa de ágar contendo peptona como nutriente numa placa de petri de plástico com diâmetro de $88 \mu m$. Foi examinada a morfologia das colônias como uma função

da concentração de ágar, Ca , e da concentração de nutrientes Cn (peptona) no meio de incubação, outros parâmetros foram mantidos constantes, a temperatura, por exemplo, foi mantida a $35\text{ }^{\circ}\text{C}$. Os padrões das colônias mudam drasticamente com a variação das concentrações de Ca e Cn .

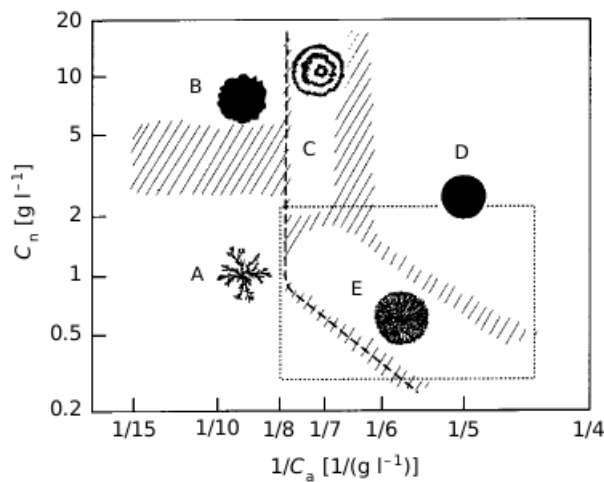


FIGURA 4.5: Diagrama de fase da mudança de padrão da colônia de *B. subtilis* como função uma função da concentração de nutrientes Cn e da consistência média do ágar, $1/Ca$. Os padrões das colônias são classificados em cinco tipos: região *A* - agregação com difusão limitada; região *B* - padrão compacto; região *C* - anel concêntrico; região *D* - disco homogêneo; região *E* - morfologia de densas ramificações [49].

A Fig. (4.6), mostra vários tipos de padrões referentes a diferentes valores de Ca e Cn , na qual o eixo das abcissas indica o inverso da concentração de ágar, $1/Ca$, representando a consistência do meio de ágar. Nas regiões *A* e *B*, nenhum movimento ativo de células individuais foi encontrado. Apenas as células localizadas na parte mais exterior de uma colônia tinham acesso a nutrientes e proliferaram por divisão celular, enquanto que as células na parte interior, devido as condições ambientais (falta de nutrientes), formaram esporos (forma vegetativa). Por outro lado, nas regiões *C*, *D* e *E*, onde as placas de ágar eram relativamente suaves, as

bactérias apresentaram um movimento de passo aleatório, o que parece conduzir o crescimento de colônias.

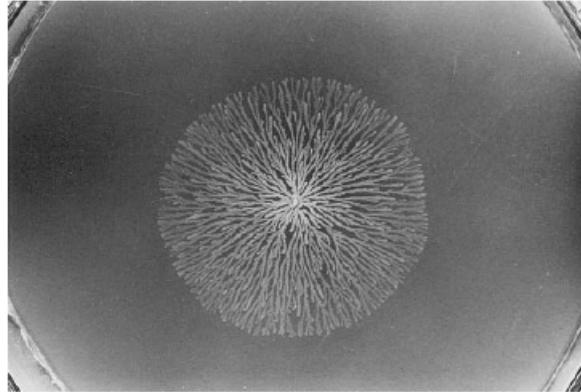


FIGURA 4.6: Uma colônia com padrão típico: morfologia de densas ramificações. A placa de ágar contém $0,5 \text{ gl}^{-1}$ de peptona e 5 gl^{-1} de ágar. A colônia foi fotografada dois dias após a inoculação [48].

Em [47] encontramos um outro estudo feito com bactérias. Neste trabalho várias espécies de bactérias são expostas a ambientes hostis. Foi verificado o efeito de antibióticos sobre colônias, no qual elas desenvolvem um comportamento cooperativo. Numa parte do experimento, foi observado o crescimento de bactérias da espécie *Paenibacillus dendritiformis* na presença de antibióticos co-trimoxazole (Septrin). Três fenômenos foram verificados a) A taxa de expansão da colônia é baixa. b) O início do crescimento é muito mais ramificado. c) Para o crescimento em superfícies duras na presença de Septrin, existe uma quiralidade fraca pronunciada [47].

Na Fig. (4.7) observamos que a menor taxa de expansão se dá na colônia com antibiótico, onde o seu crescimento é muito mais ramificado.

Encontramos em [50] uma investigação sobre as oscilações glicolísticas em populações de células de leveduras da espécie *Saccharomyces carlsbergensis*, tanto em nível individual quanto coletivo. Para esses indivíduos, a organização em colônias se dá através de comunicações providenciadas por oscilações metabólicas. Em po-

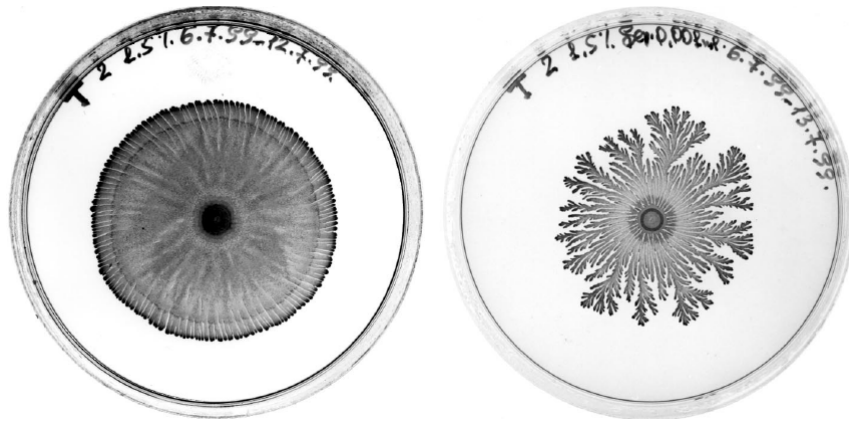


FIGURA 4.7: O efeito do Septrin no crescimento da colônia de bactérias da espécie *Paenibacillus dendritiformis* (esquerda: sem antibiótico, direita: com $3 \mu\text{g/ml}$ Septrin).

T morfológicas cultivadas a 2 g/l de peptona e $1,5\%$ de agar. Tempos de crescimento são de seis dias (à esquerda) e sete dias (direita) [47].

pulações densas, as células individuais sincronizam suas oscilações metabólicas de um modo conjunto. Acredita-se que o acoplamento de células individuais está baseado na difusão de mensagem molecular através do meio extracelular, onde são absorvidos por outras células.

Na Fig. (4.8) podemos ver o período de células individuais e as suas distribuições espaciais. Em populações densas, as células individuais oscilavam dentro de uma estreita faixa de frequência. Com a diminuição da densidade ocorre um aumento na faixa de frequência. Em populações com baixas densidades não há nenhum domínio em que todas as células oscilam com mesmo período, sendo possível encontrar duas células adjacentes oscilando com diferentes períodos. A ausência de período comum de oscilações dessas células adjacentes fornece suporte ao conceito de que as células de leveduras podem ser acopladas através da concentração extracelular de moléculas mensageiras. As razões para este comportamento ainda não são conhecidas, porém, podem estar relacionadas à dinâmica intrínseca destas células, devido a um acoplamento “não-local” em tais sistemas de reação de difusão [50].

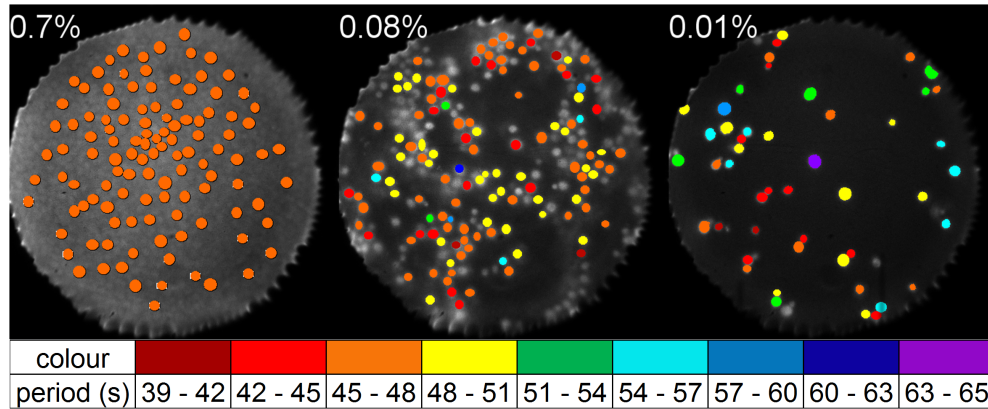


FIGURA 4.8: Mapeamento dos períodos de oscilação de células individuais de uma população, para três experiências em densidades celulares de 0,7%, 0,08% e 0,01%, respectivamente [50].

4.3 Conclusão

Neste capítulo, apresentamos alguns exemplos de formação de padrão em seres vivos. Apresentamos um estudo com animais, girinos da espécie *Rhinella ornata*, em que esses indivíduos, quando na fase pouco desenvolvida (musculatura natatória em desenvolvimento), se auto-organizam, sendo esta uma característica vantajosa com respeito aos predadores. Jacob et al [47] realizaram experimentos com bactérias expostas a diferentes ambientes hostis. Esse estudo mostra que quando as bactérias são expostas a antibióticos apresentam um comportamento cooperativo e formam padrões. Segundo de Ohgiwari (1992) [48], em seu estudo sobre o comportamento da bactéria da espécie *Bacillus subtilis* quando exposta a diversas condições ambientais formam diferentes estruturas. Nesses trabalhos, notamos a grande influência das interações de competição na formação de grupos e padrões diferenciados, sendo que, a análise experimental encontrada em [50], mostra que a organização de leveduras pode ser causada por interações não-locais, sendo esses os fatores (variáveis) do nosso modelo matemático de dinâmica populacional que levam a formação de padrão. Esses são apenas alguns exemplos de formação de padrão na natureza que

nos instigam e justificam o nosso interesse por esse tema.

Capítulo 5

Equação de Fisher-Kolmogorov generalizada

5.1 Introdução

A equação de Fisher-Kolmogorov é a equação mais simples que descreve um processo de difusão, crescimento e auto-interação de uma espécie. Esta equação faz parte de um conjunto de equações muito conhecidas na química, chamadas equações de reação-difusão.

Neste capítulo, vamos apresentar uma nova generalização da equação de Fisher-Kolmogorov que nos permitirá o estudo da transição padrão-não-padrão em dinâmica de populações [51, 52, 53, 54]. Desse modo, mostraremos a existência de um parâmetro de ordem ρ , que mede a diferença entre a população na fase com padrão e a população na fase sem padrão. O valor positivo de ρ mostra que a formação de padrão é um recurso da natureza para possibilitar um maior número de indivíduos em um dado sistema.

5.2 Efeito da não-localidade no crescimento na formação de padrão

Nesta seção apresentaremos um modelo generalizado para entender a transição padrão-não-padrão em dinâmica de populações, partindo de uma equação não-linear que inclui outra interação não-local entre seus indivíduos [51, 53].

Conceitualmente, esta transição pode ser descrita por uma equação diferencial não linear na forma $\partial u/\partial t = F(u)$, onde $u = u(x, t)$ representa a função densidade dependente do espaço e do tempo, por exemplo, a concentração de células, a densidade da população, a concentração de reagente químico, etc. Desta forma F é um funcional de u e suas derivadas espaciais. Assim, podemos definir uma equação diferencial não-local generalizada na forma [51, 53, 54]

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = a \int_{\Omega} g_{\alpha}(x - x')u(x', t)dx' - bu(x, t) \int_{\Omega} f_{\beta}(x - x')u(x', t)dx', \quad (5.1)$$

onde Ω é o domínio do sistema, $u(x, t)$ a medida da densidade populacional no espaço x e no tempo t . Definimos também as constantes a e b como as taxas de crescimento e competição (interação), respectivamente, as quais possuem as mesmas dimensões das usuais na equação de Fisher-Kolmogorov. É importante notar que a Eq. (5.1) apresenta não-localidade no termo de crescimento através da função influência $g_{\alpha}(x)$ de alcance α . Da mesma forma, esta equação apresenta não-localidade no termo de competição que vincula $u(x, t)$ em um ponto x com $u(x', t)$ em um ponto x' , através da função influência $f_{\beta}(x)$ de alcance β . Na Eq. (5.1), $g_{\alpha}(x)$ e $f_{\beta}(x)$ devem ser normalizados no domínio Ω

$$\int_{\Omega} f_{\beta}(y)dy = \int_{\Omega} g_{\alpha}(y)dy = 1, \quad (5.2)$$

e deve depender apenas da distância $y = x - x'$.

Podemos mostrar que a Eq. (2.14) é um caso particular da Eq. (5.1), que contem termos difusivos e dispersivos. Assim, fazendo a expansão de $u(x, t)$ em série

de Taylor em torno do ponto x , obtemos

$$u(x - y, t) = u(x, t) - y \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} + \frac{y^2}{2!} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} - \frac{y^3}{3!} \frac{\partial^3 u(x, t)}{\partial x^3} + \dots \quad (5.3)$$

Assim podemos escrever

$$\begin{aligned} a \int_{\Omega} g_{\alpha}(x - x') u(x', t) dx' &= a u(x, t) \int_{\Omega} g_{\alpha}(y) dy - a \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \int_{\Omega} y g_{\alpha}(y) dy + \\ &+ \frac{a}{2!} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \int_{\Omega} y^2 g_{\alpha}(y) dy - \frac{a}{3!} \frac{\partial^3 u(x, t)}{\partial x^3} \int_{\Omega} y^3 g_{\alpha}(y) dy + \dots \end{aligned} \quad (5.4)$$

Definindo a grandeza

$$g_{\alpha}^{(n)} = \frac{a}{n!} \overline{y^n} \quad (5.5)$$

onde,

$$\overline{y^n} = \int_{\Omega} y^n g_{\alpha}(y) dy. \quad (5.6)$$

Desta forma, a equação de dinâmica de população generalizada pode ser escrita em termos da expansão da seguinte maneira,

$$\begin{aligned} \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} &= g_{\alpha}^{(0)} u(x, t) - g_{\alpha}^{(1)} \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} + g_{\alpha}^{(2)} \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} - g_{\alpha}^{(3)} \frac{\partial^3 u(x, t)}{\partial x^3} + \\ &- b u(x, t) \int_{\Omega} f_{\beta}(x - x') u(x - x') dx'. \end{aligned} \quad (5.7)$$

Vemos nesta equação que os momentos associados à função g_{α} são coeficientes da equação dinâmica, onde $g_{\alpha}^{(0)}$ possui a dimensão de taxa de crescimento, $g_{\alpha}^{(1)}$ representa uma velocidade de fluxo, $g_{\alpha}^{(2)}$ o coeficiente de uma derivada de difusão (coeficiente de difusão), e os outros termos são componentes dissipativos. Com isso, podemos escrever os momentos $g_{\alpha}^{(0)}$, $g_{\alpha}^{(1)}$ e $g_{\alpha}^{(2)}$ como

$$g_{\alpha}^{(0)} = a \quad g_{\alpha}^{(1)} = a \bar{y} = v \quad g_{\alpha}^{(2)} = \frac{a}{2} \overline{y^2} = D. \quad (5.8)$$

Por imposição, temos que g_{α} é uma função par, deste modo, os momentos ímpares serão todos nulos. Considerando esta exigência e substituindo a Eq. (5.8) na Eq. (5.7) e mantendo os termos até segunda ordem, obtemos a equação de Fisher-Kolmogorov generalizada

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = a u(x, t) + D \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} - b u(x, t) \int_{\Omega} f_{\beta}(x - x') u(x - x') dx'.$$

Outro caso limite para as distribuições g_α e f_β pode ser obtido tomando na Eq. (5.1) o limite, $f_\beta(x - x') = g_\alpha(x - x') = \delta(x - x')$, assim

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = au(x, t) - bu(x, t)^2, \quad (5.9)$$

que é a equação logística proposta por Verhulst.

Portanto, este modelo pode ser usado para investigar uma grande variedade de aspectos dinâmicos em populações. Usando expansão em séries, vemos que no termo de crescimento não-local se concentra todas as derivadas de ordem maior que associam a difusão, bem como todos os termos físicos dispersivos. Na prática, a equação (5.1) fornece uma maneira simples para descrever o comportamento complexo de indivíduos de uma população e sua evolução, permitindo uma rápida implementação dos processos de simulação. Do ponto de vista analítico, este modelo lida com escalas de crescimento no domínio físico, onde os parâmetros de interação de crescimento e de competição, α e β , respectivamente, possuem mesma dimensão e podem ser experimentalmente ligados.

Portanto, os processos de formação de padrão podem ser estudados, considerando como estes parâmetros estão relacionados. Além disso, conjecturas preliminares indicam que estes parâmetros apresentam valores críticos para os quais é possível visualizar o fenômeno de transição de fase padrão-não-padrão em sistemas biológicos [53, 54].

5.3 Estudo perturbativo

Podemos fazer um estudo analítico na equação de Fisher-Kolmogorov generalizada com difusão de longo alcance, introduzindo uma pequena perturbação na solução constante, $u(x, t) = U_0$. A solução constante é conhecida como estado estacionário homogêneo e, para nosso modelo $U_0 = a/b$.

Na análise perturbativa aplicamos uma pequena perturbação temporal. Se esta pequena perturbação for amplificada no tempo, a solução final estacionária será

deslocada da solução homogênea U_0 dando origem a formação de padrão no sistema. Desse modo, podemos verificar para quais condições dos parâmetros do modelo, a taxa de formação de padrão é positiva ou negativa [52].

Considere a equação

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = a \int_{\Omega} g_{\alpha}(x - x')u(x', t)dx' - bu(x, t) \int_{\Omega} f_{\beta}(x - x'')u(x'', t)dx''. \quad (5.10)$$

Como solução desta equação podemos testar a seguinte função

$$u(x, t) = U_0 + \varepsilon e^{ikx} e^{\varphi(k)t}, \quad (5.11)$$

onde ε é a amplitude da perturbação oscilante considerada muito pequena, i é a unidade imaginária ($i^2 = -1$), k é o número de onda no espaço de Fourier e $\varphi(k)$ é a taxa de crescimento da formação de padrão, que poderá depender do número de onda k . Para $\varphi(k) < 0$, a perturbação se extinguirá no tempo, não formando padrão. Para $\varphi(k) > 0$, temos alguns modos de perturbação amplificados, originando o fenômeno de formação de padrão.

Substituindo a Eq. (5.11) na Eq. (5.10), serão desprezados os termos de segunda ordem na amplitude de perturbação ε . Fazendo as transformações de variáveis $x' - x = z'$ e $x'' - x = z''$ e considerando que as funções influências obedecem as seguintes propriedades:

$$g_{\alpha}(x - x') = g_{\alpha}(x' - x), \quad f_{\beta}(x'' - x) = f_{\beta}(x - x'')$$

a relação de dispersão pode ser escrita como,

$$\varphi(k) = a(\mathcal{F}_c\{g_{\alpha}(z')\} - \mathcal{F}_c\{f_{\beta}(z'')\} - 1) + ia(\mathcal{F}_s\{g_{\alpha}(z')\} - \mathcal{F}_s\{f_{\beta}(z'')\}). \quad (5.12)$$

Na Eq. (5.12) $\mathcal{F}_c\{g_{\alpha}(z')\}$ e $\mathcal{F}_s\{g_{\alpha}(z')\}$ são as transformadas de Fourier cosseno e seno das funções influências $g_{\alpha}(z')$ e f_{β} , respectivamente,

$$\begin{aligned} \varphi(k) = a \left\{ \int_{\Omega} g_{\alpha}(z') \cos(kz') dz' - \int_{\Omega} f_{\beta}(z'') \cos(kz'') dz'' - 1 \right\} \\ + ia \left\{ \int_{\Omega} g_{\alpha}(z') \sin(kz') dz' - \int_{\Omega} f_{\beta}(z'') \sin(kz'') dz'' \right\}. \end{aligned} \quad (5.13)$$

Assim, a Eq. (5.13) pode ser escrita como

$$\varphi(k) = \gamma(k) + i\eta(k) \quad (5.14)$$

As partes $\gamma(k)$ e $\eta(k)$ representam funções real e imaginária da taxa de formação de padrão $\varphi(k)$. Sendo a evolução da densidade temporal $u(x, t)$ observada no espaço real, vamos considerar apenas a parte real, $\gamma(k)$, dada por

$$\gamma(k) = a \left\{ \int_{\Omega} g_{\alpha}(z') \cos(kz') dz' - \int_{\Omega} f_{\beta}(z'') \cos(kz'') dz'' - 1 \right\}. \quad (5.15)$$

Para encontrar $\gamma(k)$ deverão ser escolhidas funções influência para realizar as transformadas de Fourier. Neste caso foi escolhida a função influência de interação e crescimento tipo Heaviside, na forma

$$g_{\alpha}(z') = \frac{1}{2\alpha} [\Theta(\alpha - z')\Theta(\alpha + z')], \quad f_{\beta}(z'') = \frac{1}{2\beta} [\Theta(\beta - z'')\Theta(\beta + z'')] \quad (5.16)$$

Assim, o resultado é dado por

$$\gamma(k) = a \left[\frac{\sin(k\alpha)}{k\alpha} - \frac{\sin(k\beta)}{k\beta} - 1 \right]. \quad (5.17)$$

Na Fig. (5.1), apresentamos o gráfico da Eq. (5.17), para vários valores de α , com alcance de interação β e taxa de crescimento fixos. Os valores positivos de $\gamma(k)$ são encontrados na região $\pi < k\beta < 2\pi$ e $0 < k\alpha < \pi$. O gráfico mostra ainda que para cada β fixo existe um valor crítico α , para que a taxa de formação de padrão seja positiva. Quando α se aproxima de β , a taxa de formação de padrão se torna negativa.

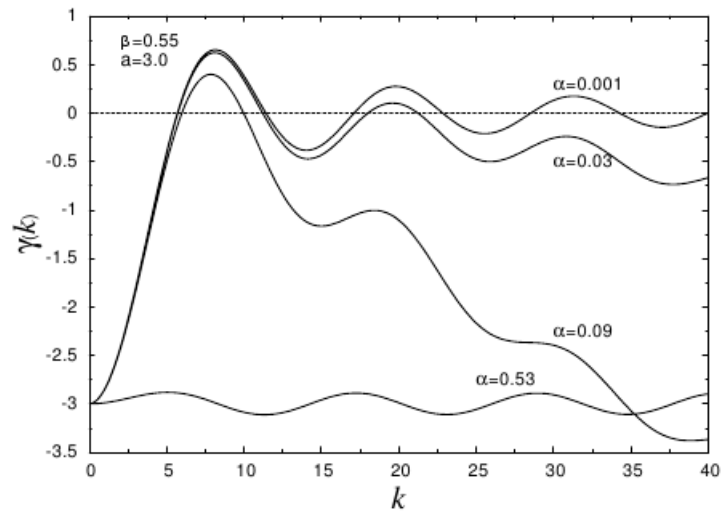


FIGURA 5.1: Parte real da taxa de crescimento da formação de padrão para uma função influência de Heaviside com comprimento de interação $\beta = 0.55$ e taxa de crescimento $a = 3.0$ [52].

5.4 Conclusão

Neste capítulo, apresentamos a equação de Fisher-Kolmogorov com termos não-locais de crescimento e interação. Esta generalização incorpora processos de crescimento local e termos de difusão de longo alcance. Através dessa nova generalização, a formação de padrão fica descrita por meio dos parâmetros α e β que são o crescimento e a competição entre os indivíduos, respectivamente.

Capítulo 6

Transição de fase padrão-não-padrão em dinâmica de populações

6.1 Introdução

Neste capítulo, que representa o ponto central desta dissertação na forma de uma contribuição científica original, estudaremos a transição padrão-não-padrão em dinâmica de populações utilizando a EFKG proposta por [52, 53], a qual introduz a não-localidade por meio dos parâmetros alfa e beta, os quais representam o crescimento e a competição entre indivíduos, respectivamente. Deste modo, apresentaremos inicialmente um método iterativo para o estudo da transição. Logo em seguida definiremos um parâmetro de ordem o qual quantifica o processo da evolução da distribuição da população. Este parâmetro fornece a diferença entre o número de indivíduos na fase onde existe padrão N_P menos o número de indivíduos na fase sem padrão N_{NP} , *i.e.*, $\rho = N_P - N_{NP}$. Observe que podemos chamar ρ de parâmetro de ordem de uma maneira análoga a transição líquido vapor em termodinâmica, onde o parâmetro de ordem é dado por $\rho = \rho_L - \rho_V$, onde ρ_L e ρ_V são as densidades do líquido e do vapor, respectivamente (capítulo 3). Mostraremos a precisão e a rápida

convergência do método iterativo. Obteremos a entropia de Gibbs para o sistema e mostraremos que o comportamento está longe do convencional.

6.2 Método iterativo

Nesta seção descreveremos um método iterativo para a obtenção da densidade populacional $u(x, t)$, através da solução numérica da integral

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = a \int_{\Omega} g_{\alpha}(x - x')u(x', t)dx' - bu(x, t) \int_{\Omega} f_{\beta}(x - x')u(x', t)dx', \quad (6.1)$$

a convergência deste método é cerca de 300 vezes mais rápido do que o método *Operator Splitting* já utilizado em trabalhos anteriores [51, 52] para solucionar numericamente a equação e apresentaremos a precisão do resultado final.

Podemos escrever que a Eq. (6.1) no estado estacionário, $\partial u(x, t)/\partial t = 0$, como

$$u_{n+1} = \frac{a \int_{\Omega} g_{\alpha}(x - x')u_n(x')dx'}{b \int_{\Omega} g_{\beta}(x - x')u_n(x')dx'}, \quad (6.2)$$

onde $n = 1, 2, \dots$ é a ordem de iteração. Consideramos que as funções g_{α} e f_{β} são iguais, mas com alcances α e β diferentes. Após a convergência, eliminamos o índice n , ou o tempo t e denominamos a densidade por $U(x)$. Por simplicidade, vamos assumir que $g_{\alpha}(x)$ e $g_{\beta}(x)$ são funções de Heaviside, definidas na Eq. (5.16). Observe que se g_{α} e g_{β} forem iguais, $\alpha = \beta$, e a Eq. (6.2) apresentará a solução constante $U(x) = U_0 = a/b$, não formando padrão. Assim, para que ocorra a formação de padrão é necessário que $\alpha \neq \beta$.

Um importante ponto a ser destacado é que a distribuição converge para uma solução $U(x)$ independentemente da distribuição inicial $u(x, 0)$, ou $u_1(x)$, desde que ela não seja constante. Na Fig. (6.1), consideramos uma distribuição gaussiana inicial para os indivíduos na forma

$$u_1(x) = \frac{A}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2}} \exp\left(-\frac{(x - L/2)^2}{2\sigma_x^2}\right). \quad (6.3)$$

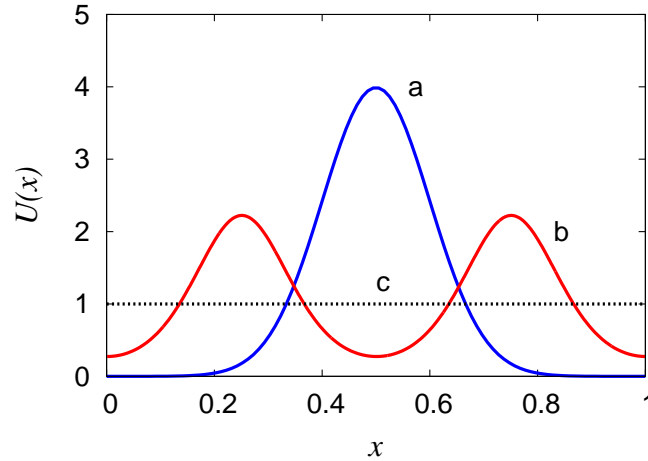


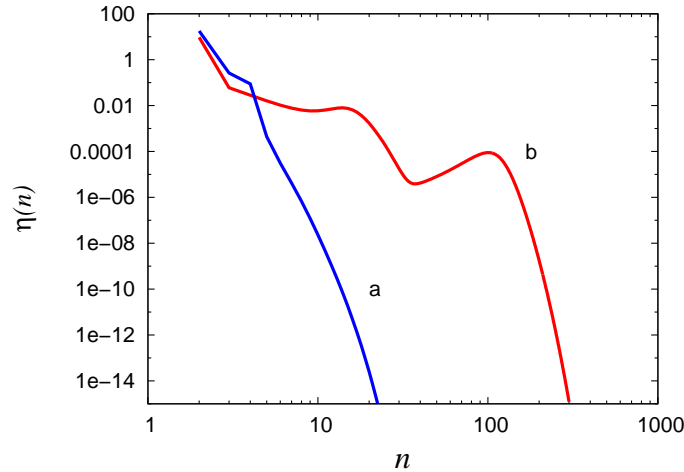
FIGURA 6.1: Densidade populacional $U(x)$ em função da posição x . Curva a: gaussiana inicial; curva b: formação de padrão; curva c: distribuição uniforme (o sistema não forma padrão).

Observe que a distribuição está centrada em $L/2$ para $0 < x < L$, a dispersão é dada por $\sigma_x = 0.05$ e $A = 2$. Para realizar o procedimento numérico, utilizamos $N_d = 1000$ divisões para o comprimento $L = 1.0$. Para $n = 300$ iterações, obtemos $U(x)$ como mostrado em (b) e (c). Em (b) usamos $\alpha = 0.07$ e $\beta = 0.42$, obtendo um padrão. Em (c) usamos $\alpha = 0.07$ e $\beta = 0.14$, e obtemos uma distribuição uniforme.

Para mostrar como se dá a convergência do método iterativo isto é, como a densidade populacional $u(x)_n$ evolui neste processo, definimos uma função que descreve a evolução da precisão da seguinte forma

$$\eta(n) = \int [u_{n+1}(x) - u_n(x)]^2 dx. \quad (6.4)$$

Na Fig. (6.2) mostramos a precisão $\eta(n)$ em função de n . Partimos da distribuição inicial de indivíduos, Eq. (6.3), e mostramos a evolução das curvas (b) e (c) da figura anterior. Na curva (a) temos $\beta = 0.42$, onde a gaussiana evolui para

FIGURA 6.2: A Precisão $\eta(n)$ em função de n .

uma distribuição uniforme. Na curva (b) temos $\beta = 0.14$, que mostra a evolução, mais lenta, da curva gaussiana até a dupla gaussiana, ou seja, distribuição não uniforme, como ilustrado na Fig. (6.1b). Observe que inicialmente a diferença entre passos de iteração diminui até $n \approx 30$, em seguida a diferença começa a aumentar novamente. Neste ponto a curva dividir-se em duas, diferenciando-se da gaussiana original, para $n \approx 120$, $\eta(n)$ começa a diminuir novamente até convergir para o estado estacionário.

Devemos enfatizar que devido a rápida convergência deste método a Eq. (5.1) torna-se eficaz para estudar o comportamento de $U(x)$ numericamente,¹.

Podemos definir agora a função que descreve a evolução de uma quantidade de indivíduos N em um domínio Ω como

$$N(n) = \int_{\Omega} u_n(x) dx, \quad (6.5)$$

onde n é o índice de iteração e $u_n(x)$ é a função densidade na Eq. (6.2). É importante

¹Neste trabalho utilizamos a linguagem fortran 90.

ver que esta equação descreve o comportamento dinâmico da população total no comprimento L .

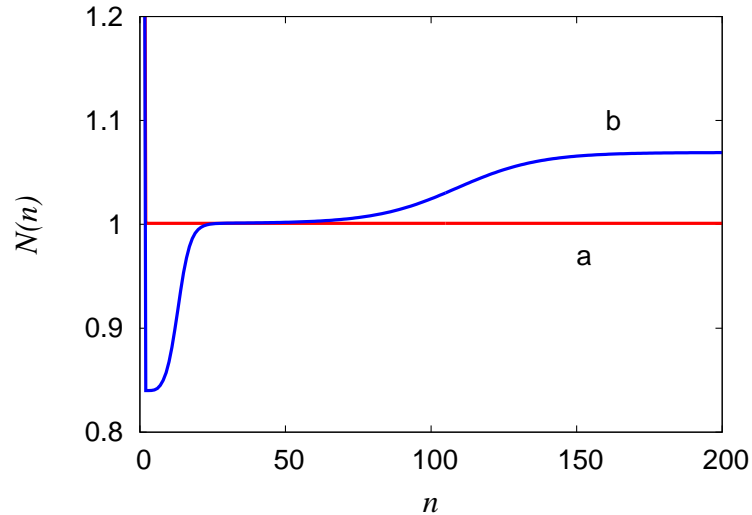


FIGURA 6.3: O número de indivíduos $N(n)$ em função de n .

Na Fig. (6.3) mostramos $N(n)$ em função de n . A curva (a) é equivalente a curva (a) da Fig.(6.1), isto é, $u_n(x)$ evolui para $U_0 = a/b$ e $N(n \rightarrow \infty) = U_0 L = 1$. Para a curva (b), temos $N(n \rightarrow \infty) > 1$, o que equivale a uma situação onde existe padrão.

6.3 Parâmetro de ordem

Até o momento definimos ordem como consequência da não uniformidade da função densidade $U(x)$. Agora definimos um parâmetro de ordem para este modelo, que permite uma análise mais quantitativa do conceito de padrão. Assim, podemos analisar como $N(n)$ evolui em relação ao número de iterações n . É importante notar que a população evolui para um estado de padrão quando $N(t \rightarrow \infty) = N_P$, ou para um estado de não-padrão quando $N(t \rightarrow \infty) = N_{NP} = (a/b)L = 1$. Deste modo,

isto permite definir um parâmetro de ordem ρ a partir da diferença de densidade, $\Delta U = U(x) - U_0$, da população, dado por

$$\rho = \int \Delta U(x) dx = N_P - N_{NP}. \quad (6.6)$$

Esta definição de ρ é interessante porque consiste na diferença entre a quantidade de indivíduos distribuídos de forma não-homogênea (padrão) e o número de indivíduos distribuídos uniformemente (não-padrão) em Ω . Assim, quando $\rho > 0$, temos, $N_P > N_{NP}$, o que leva à formação de padrão ou auto-organização no sistema na fase não-homogênea.

No capítulo 5, mostramos que para pequenos valores de α , a dispersão é dada por

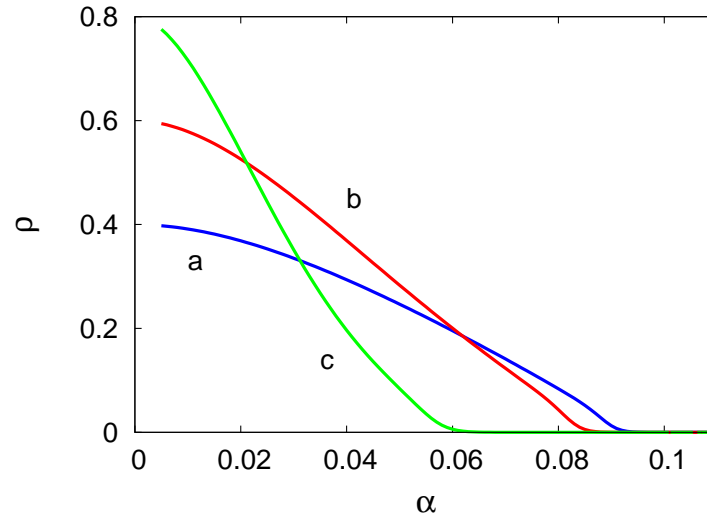
$$D = \frac{1}{2} a \bar{y}^2 = \frac{1}{6} a \alpha^2. \quad (6.7)$$

Deste modo, se considerarmos a difusão como normal temos que $D \propto k_B T$. Logo podemos pensar em α como um parâmetro associado a desordem no sistema. Neste caso, faz-se importante agora estudarmos o comportamento do parâmetro de ordem $\rho = \rho(\alpha)$ em função de α .

Na Fig. (6.4), mostramos o comportamento do parâmetro de ordem em função de α para um dado β . Usamos $\beta = 0.35$, $\beta = 0.40$ e $\beta = 0.45$ para as curvas a, b e c, respectivamente. Com o crescimento de α , o parâmetro de ordem decresce até tornar-se nulo de forma análoga a magnetização de um ferromagneto em função da temperatura, apresentado na seção (3.2.2). Em sistemas biológicos podemos usar esta analogia, no ponto $\rho = 0$ o sistema deixa de apresentar uma ordem e passa a ser uniforme, $U(x) = U_0$, o caracteriza uma transição de fase padrão não-padrão. Para $\rho > 0$ temos $N_P > N_{NP}$, acarretando em auto-organização.

6.4 Efeitos da interação de competição na mudança de padrão

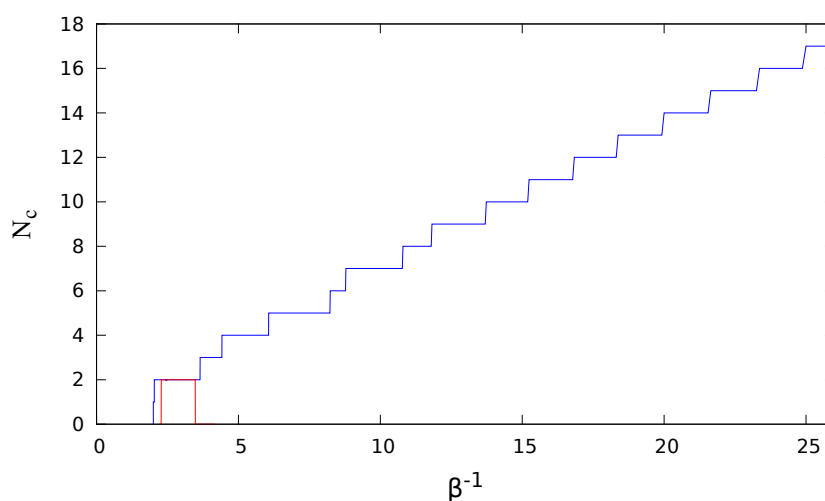
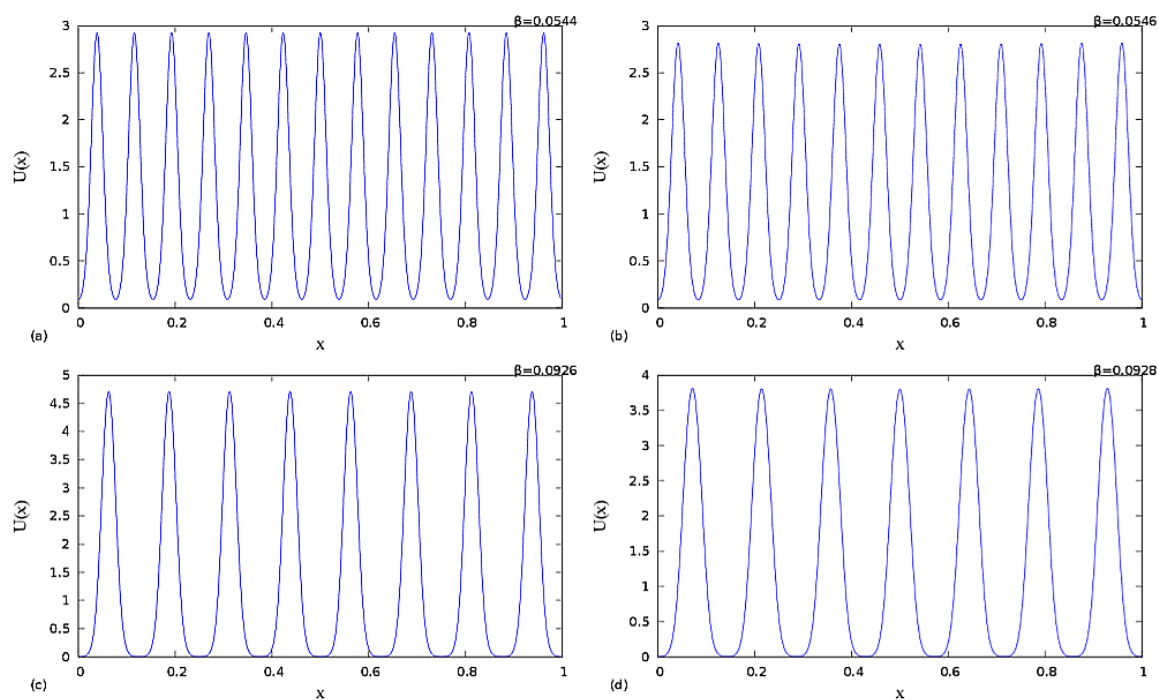
Na Fig. (6.5) mostramos a densidade populacional $U(x)$ em função da posição x no domínio $0 < x < L$, com $L = 1$. Os estados estacionários em $U(x)$ são

FIGURA 6.4: O parâmetro de ordem ρ em função de α

mostrados para $\alpha = 0.01$ e para vários valores de β (a) : $\beta = 0.0544$, (b) : $\beta = 0.0546$, (c) : $\beta = 0.0926$ e (d) : $\beta = 0.0928$). Podemos notar que uma mesma população pode apresentar diversos padrões. Essa diversidade de estruturas são caracterizadas, na Fig. (6.5), pelo número de cristas N_c em $U(x)$. Os gráficos (a), (b), (c), (d) possuem os seguintes números de cristas $N_c = 13, 12, 8$ e 7 , respectivamente.

Compreender como se dá essas mudanças no número de cristas é de fundamental importância. Da observação anterior podemos inferir que as mudanças de padrão estão diretamente relacionadas ao alcance de interação β . Na Fig. (6.6) mostramos o número de cristas em função de β^{-1} , confirmando assim a nossa hipótese. Estão representadas na figura (6.6) duas curvas: para a curva interna (a), $\alpha = 0,07$, temos apenas $N_c = 2$; para a curva externa (b), $\alpha = 0,01$, inicia-se com duas cristas, e a medida que β^{-1} aumenta, N_c é incrementado em uma unidade. Para todos os casos $N_c \geq 2$.

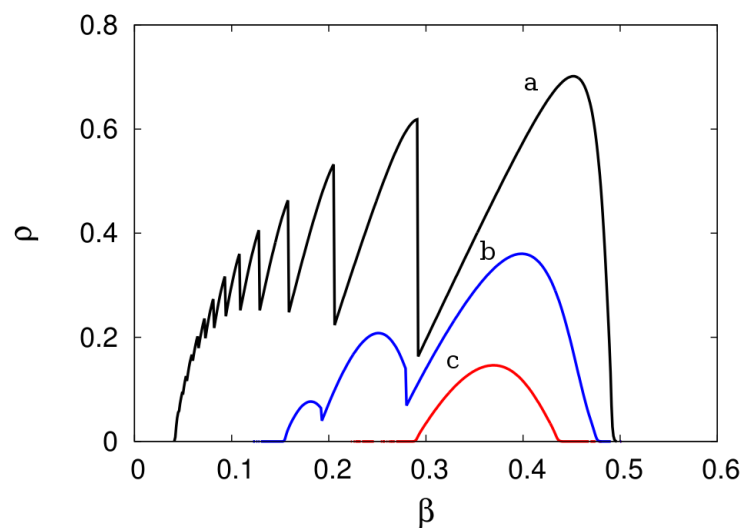
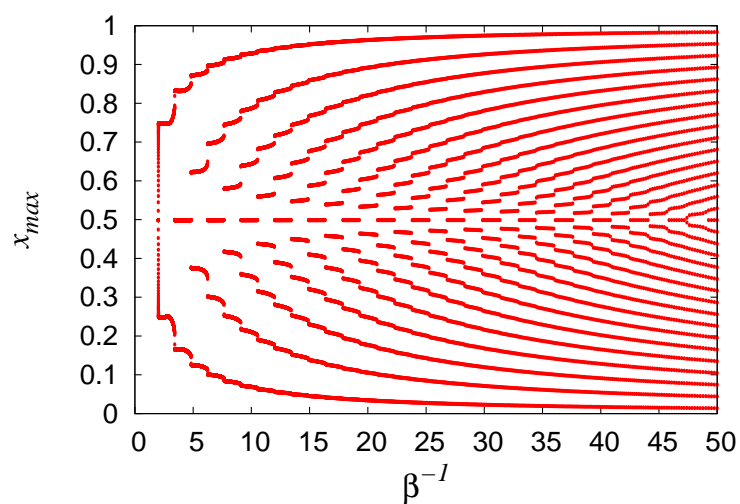
Na Fig. (6.7) o parâmetro de ordem ρ como função do alcance de interação de competição β . Para a curva (a), $\alpha = 0,01$, a curva (b), $\alpha = 0.04$ e para a curva



(c), $\alpha = 0,07$. Percebemos que quando β aumenta, o parâmetro de ordem cresce exibindo pequenos decaimentos e descontinuidades até um valor máximo onde a partir daí decai. Este comportamento inesperado (anômalo) de ρ mostra a complexidade da dinâmica do sistema. Podemos traçar um paralelo entre as figuras (6.7) e (6.6), de modo que deste confronto podemos inferir que esse comportamento inesperado pode ser causado pelas mudanças no número de cristas. Para compreender o comportamento anômalo de $\rho(\beta)$ é importante observar na Fig. (6.5). Podemos ver que para o mesmo valor de α , com diferentes valores de β podemos ter curvas com diferentes números de crista N_c . Cada descontinuidade vista na Fig. (6.7) implica em uma mudança de padrão no sistema (mudança no número de cristas). Podemos observar que para um mesmo valor do parâmetro de ordem podemos encontrar diferentes alcances para o parâmetro de competição β , mostrando que quando uma população alcança o limiar máximo de crescimento em uma certa estrutura, ela tende a se reorganizar numa nova estrutura para voltar a crescer.

Pelo exposto, presumimos que os indivíduos podem formar padrões e dependendo das condições ambientais (competição intraespecífica, pedração entre outros) eles podem formar estruturas diferenciadas. Para compreender como ocorre essas transições entre padrões espaciais voltamo-nos para a Fig. (6.8), onde definimos x_{max} como a posição dos máximos (posição das cristas), ou seja, $U(x_{max}) = U_{max}$. Esta figura mostra a posição dos máximos x_{max} em função de β^{-1} . À medida que aumentamos β^{-1} , temos um aumento do número de crista N_c a partir de 2. Constate que para N_c ímpar, temos sempre uma posição central, que desaparece na próxima etapa, quando temos um número par. Todo o processo ocorre a partir da bifurcação no centro, enquanto os outros máximos deslocam-se para dar espaço para o novo máximo.

A partir da discussão acima, temos maior clareza sobre o comportamento de ρ na Fig. (6.7). Na curva (c), para o valor de $\alpha = 0,07$, e variando o valor de β , podemos observar a formação de padrão quando $\rho > 0$, sendo que para este caso, para quaisquer valor de β que permitam $\rho > 0$, encontraremos duas cristas, ou seja,

FIGURA 6.7: O parâmetro de ordem ρ em função de β .FIGURA 6.8: Posição dos picos em função de β^{-1} para um α fixo ($\alpha = 0.05$).

$N_c = 2$. O parâmetro de ordem cresce de um valor nulo até um máximo e, então, ele decresce até atingir um valor nulo novamente, quando mais uma vez, não é possível a existência de um padrão. Deste modo, esta curva forma um meio laço. Para a curva (a), com $\alpha = 0.01$, iniciamos com um determinado N_c que diminui à medida que β aumenta. Enquanto $N_c > 2$, o aumento de β provocará transições abruptas de padrão até que $N_c = 2$. Neste momento, assim como ocorreu na curva inferior, a transição levará o sistema para a solução uniforme, ou seja, $U(x) = u_0 = a/b$ e $\rho = 0$. Este processo é semelhante ao das bifurcações do mapa logístico, no entanto, não tem uma “duplicação periódica” com o tempo, em vez de termos posições fixas para as cristas, elas se deslocam para as extremidades dando espaço para o surgimento de novas cristas no centro. Assim, não dobramos o número de cristas como mostrado, N_c é apenas acrescido em uma unidade. Esta curva (a), como também a (b), é uma superposição de semi-laços como na curva interna, cada semi-laço corresponde um valor de N_c .

É notória a influência da não-localidade no termo de competição da equação de Fisher-Kolmogorov generalizada na formação de padrão, deste modo, a não-localidade no termo de crescimento ampliou as possibilidades dessa equação em estudos em dinâmica populacional, visto que, além de podermos estudar o fenômeno de formação de padrão com os efeitos de difusão de longo alcance que a não-localidade no crescimento nos permite, ainda nos possibilita estudar os casos em que uma determinada população consegue se estruturar de diversas maneiras.

6.5 Entropia

Agora vamos apresentar o estudo do comportamento da entropia em função do parâmetro de ordem. Começamos definindo a entropia de Gibbs em unidades da constante de Boltzmann k_B como

$$S = - \sum_j P_j \ln P_j \quad (6.8)$$

onde $P_j = U(x_j)\Delta x/N$ representa a probabilidade de encontrar indivíduos na região $x_j - \Delta x/2 < x < x_j + \Delta x/2$. Assim, escrevemos a entropia como

$$S = - \sum_j \frac{U(x_j)\Delta x}{N} \ln \frac{U(x_j)\Delta x}{N}.$$

Para uma distribuição uniforme temos $U_0 = N/L$, logo, $\sum_j \frac{U(x_j)\Delta x}{N} = 1$, desta forma

$$S = - \ln U_0 - \ln \Delta x + \ln N.$$

A entropia de uma distribuição uniforme é escrita como

$$S_{NP} = \ln \left(\frac{L}{\Delta x} \right). \quad (6.9)$$

Como em todo sistema clássico, a entropia depende do tamanho das divisões. Então, a entropia para uma distribuição não-homogênea é dada por,

$$S(\rho) = S_{NP} + \int_{\Omega} \phi(\rho, x) \ln(1 - \phi(\rho, x)) dx, \quad (6.10)$$

onde obtemos ϕ como uma função do parâmetro de ordem, dada por

$$\phi(\rho, x) = \frac{\rho - L\Delta U(x)}{\rho + LU_{NP}} < 1 \quad (6.11)$$

Na Fig. (6.9) mostramos a entropia $S(\rho)$ em função do parâmetro de ordem. Os valores de ρ utilizados são os mesmos da Fig. (6.7a) com $\alpha = 0.01$ e β variando. O gráfico mostra um cenário complexo, onde para um mesmo valor de ρ podemos ter diversos valores da entropia. Observe que a curva que apresenta menos entropia é aquela para a qual a densidade $U(x)$ tem dois picos.

Como já foi mencionado, é comum a formação de padrões na natureza. Essas formações vão desde aglomerados celulares até agrupamento de animais. A questão principal é entender o por quê desses padrões. Uma vez que $U(x) > 0$, temos que $\phi(\rho, x) < 1$, e, por conseguinte, a integral da Eq. (6.10) será sempre negativa.

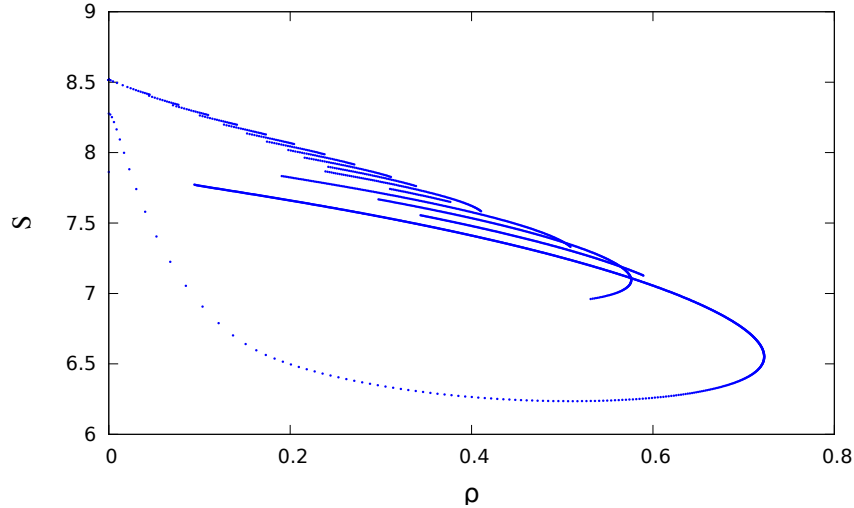


FIGURA 6.9: Entropia em função de $\rho(\beta)$ com $\alpha = 0.07$.

Assim, ela mostra que a entropia em função de ρ , $S(\rho)$ obedecerá a seguinte relação entre entropias $S_P < S_{NP}$, e sempre teremos padrão para $\rho > 0$. Portanto, esta regra prevê que a formação de padrão permite que um maior número de indivíduos ocupam um determinado domínio.

6.6 Conclusão

Neste capítulo mostramos que a transição padrão-não-padrão na dinâmica populacional depende das interações não-locais, dadas pelos comprimentos α e β entre os indivíduos. Com base nesses parâmetros definimos um parâmetro de ordem, onde verificamos que a formação de padrão é uma vantagem para a população, pois em um mesmo nicho ecológico é possível suportar um maior número de indivíduos se eles estiverem organizados. Além disso, verificamos que para diversos comprimentos de β os indivíduos podem se organizar de diversas maneiras. Assim como na reação BZ, quando o comprimento β atinge um certo limiar ocorre uma mudança brusca de padrão. Nesse contexto, fizemos uma análise da entropia do sistema, onde verificamos o seu decréscimo na fase ordenada e um leve aumento quando ocorre mudanças

bruscas de padrão.

Os resultados deste capítulo deverão ser publicados em breve [55]

Capítulo 7

Conclusões e perspectivas

Neste trabalho, apresentamos um novo modelo que incorpora transição de fase na dinâmica populacional. Partimos de uma equação não linear que inclui a interação não-local espacial entre seus indivíduos. Verificamos a ocorrência de mudanças abruptas nas estruturas espaciais relacionadas a intensidade de interações entre os indivíduos. Essas mudanças são caracterizadas por meio de um parâmetro de ordem ρ associado ao número de indivíduos do sistema.

O parâmetro de ordem do modelo apresentado fornece a diferença entre a quantidade de indivíduos distribuídos de forma heterogênea (padrão) e o número de indivíduos distribuídos uniformemente (não-padrão) no espaço. Quando feito um estudo do parâmetro de ordem em função de α para um dado parâmetro de competição β fixo, este varia continuamente com o aumento de α até se tornar nulo, caracterizando uma transição de fase de segunda ordem de modo análogo a magnetização de um ferromagneto como função da temperatura. Contudo quando o parâmetro de ordem varia em função de β percebe-se um comportamento anômalo. Quando β aumenta, o parâmetro de ordem cresce exibindo pequenos decaimentos e descontinuidades até um valor máximo, a partir daí, ρ decresce continuamente até se tornar nulo.

Verificamos ainda que no comportamento anômalo do parâmetro de ordem

em função de β , cada descontinuidade implica numa mudança abrupta de padrão verificada na mudança do número de picos no gráfico da densidade da população versus posição, e esta reorganização acontece de modo a permitir aos indivíduos crescerem novamente, mesmo com o aumento da competição. Deste modo, encontramos para um mesmo valor do parâmetro de ordem, diferentes valores de parâmetros de competição, mostrando que quando uma população alcança o limiar máximo de crescimento em uma certa estrutura, ela tende a se reorganizar numa nova estrutura para voltar a crescer quando a competição aumenta.

Portanto, os indivíduos podem se organizar de diversas maneiras e dependendo das condições ambientais eles podem se reorganizar, ou seja, para uma população que se organiza em vários grupos numa determinada região, pododará se organizar em diferentes agregações. Os fatores que influenciam diretamente no tipo de estrutura são, as interações não-locais (competição intraespecífica, reprodução, entre outros).

Referências Bibliográficas

- [1] M. C. Cross and P. C. Hohenberg. Pattern formation outside of equilibrium. *Rev. Mod. Phys.*, 65:851–1112, (1993). [1](#), [2.1](#)
- [2] J. Y. Wakano, A. Komoto, and Y. Yamaguchi. Phase transition of traveling waves in bacterial colony pattern. *Physical Review E*, 69:051–904, (2004). [1](#)
- [3] D. H. Sattinger. Selection mechanisms for pattern formation. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 66:31–42, (1977). [1](#)
- [4] B. Legawiec and A. L. Kawczynski. Influence of the Bénard rolls on the traveling impulse in the Belousov-Zhabotinsky reaction. *The Journal of Physical Chemistry A*, 101:8063–8069, (1997). [2.1](#)
- [5] P. Berge and M. Dubois. Convective velocity field in the Rayleigh-Bénard instability: Experimental results. *Phys. Rev. Lett.*, 32:1041–1044, May (1974). [2.1](#)
- [6] J. D. Murray. *Mathematical biology: I. An introduction*, volume 2. Springer, (2002). [2.2.1](#), [2.2.2](#), [2.1](#), [2.2.3](#), [2.2](#), [2.3.1](#)
- [7] R. A. Fisher. The wave of advance of advantageous genes. *Annals of Human Genetics*, 7:355–369, (1937). [2.3.1](#), [3.4](#)

- [8] M. A. Fuentes, M. N. Kuperman, and V. M. Kenkre. Nonlocal interaction effects on pattern formation in population dynamics. *Phys. Rev. Lett.*, 91:104–158, (2003). [2.3.1](#), [2.3.2](#), [2.4](#), [4.1](#)
- [9] K. H. Stern. The liesegang phenomenon. *Chemical Reviews*, 54:79–99, (1954). [2.3.1](#)
- [10] J. D. Murry. *Mathematical biology*, (1989). [2.3.1](#), [3.6](#)
- [11] V. M. Kenkre. Results from variants of the fisher equation in the study of epidemics and bacteria. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 342:242–248, (2004). [2.3.2](#), [2.4](#), [4.1](#)
- [12] M. G. Clerc, D. Escaff, and V. M. Kenkre. Patterns and localized structures in population dynamics. *Physical Review E*, 72:056–217, (2005). [2.3.2](#), [2.4](#), [4.1](#)
- [13] A. M. Zhabotinsky, M. Dolnik, and I. R. Epstein. Pattern formation arising from wave instability in a simple reaction-diffusion system. *The Journal of chemical physics*, 103:10–306, (1995). [2.3.2](#), [2.4](#), [4.1](#)
- [14] M. A. Fuentes, M. N. Kuperman, and V. M. Kenkre. Analytical considerations in the study of spatial patterns arising from nonlocal interaction effects. *The Journal of Physical Chemistry B*, 108:10505–10508, (2004). [2.3.2](#), [2.4](#), [4.1](#)
- [15] M. Plischke and B. Bergersen. *Equilibrium statistical physics*. World Scientific, (2006). [3.1](#)
- [16] S. R. Salinas. *Introdução a Física Estatística Vol. 09*. Edusp, (1997). [3.1](#)
- [17] D. Stauffer and A. Aharony. *Introduction to percolation theory*. Taylor and Francis, (1994). [3.1](#)
- [18] B. Berche, M. Henkel, and R. Kenna. Critical phenomena: 150 years since cagniard de la tour. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, 31:26–41, (2009). [3.1](#)

- [19] C. de Tour. Exposé de quelques résultats obtenu par l'action combinée de la chaleur et de la compression sur certains liquides, tels que l'eau, l'alcool, l'éther sulfurique et l'essence de pétrole rectifiée. In *Annales de Chimie et de Physique*, volume 21, pages 127–132. [3.1](#)
- [20] G. Jaeger. The ehrenfest classification of phase transitions: introduction and evolution. *Archive for history of exact sciences*, 53:51–81, (1998). [3.1](#)
- [21] M. E. Fisher. The renormalization group in the theory of critical behavior. *Reviews of Modern Physics*, 46:597, (1974). [3.1](#)
- [22] H. E. Stanley. Introduction to phase transitions and critical phenomena. *Oxford University Press*, 1:336. [3.1](#), [3.2.1](#), [3.2](#), [3.2.2](#), [3.3](#)
- [23] F. Reif. *Fundamentals of statistical and thermal physics*, volume 1. McGraw-Hill New York, (1965). [3.1](#)
- [24] I. F. L. Dias. Introdução à transição de fase. *Semina: Ciências Biológicas e da Saúde*, 3:193–197, (1982). [3.1](#)
- [25] P. Curie. Magnetic properties of bodies at various temperatures. *Ann. Chim. Phys. V*, pages 289–405, (1895). [3.1](#)
- [26] L. Landau. The theory of phase transitions. *Nature*, 138:840–841, (1936). [3.1](#), [3.3](#)
- [27] N. Goldenfeld. Lectures on phase transitions and the renormalization group. (1992). [3.2](#), [3.2.1](#), [3.2.2](#), [3.4](#), [3.3.1](#), [3.5](#)
- [28] J. M. Yeomans. *Statistical mechanics of phase transitions*. Oxford University Press, (1992). [3.2.1](#), [3.2.2](#), [3.3.1](#)
- [29] K. Huang. Statistical mechanics. *J. Wiley, New York*, (1987). [3.1](#)

- [30] J. G. Skellam. Random dispersal in theoretical populations. *Biometrika*, 38:196–218, 1951. [3.4](#)
- [31] A. M. Turing. The chemical basis of morphogenesis. *Bulletin of mathematical biology*, 52:153–197, (1990). [3.4](#), [3.4.2](#)
- [32] G. M. Whitesides and R. F. Ismagilov. Complexity in chemistry. *science*, 284:89–92, (1999). [3.4](#), [3.4.1](#)
- [33] P. Ruoff. Antagonistic balance in the oregonator: about the possibility of temperature-compensation in the belousov-zhabotinsky reaction. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 84:204–211, (1995). [3.4](#), [3.4.1](#)
- [34] H. J. Kull. Theory of the rayleigh-taylor instability. *Physics Reports*, 206:197–325, (1991). [3.4](#)
- [35] I. Prigogine and R. L. Ferreira. *O fim das certezas*. Unesp, (1996). [3.4](#)
- [36] J. G. Freire, R. J. Field, and J. A. C. Gallas. Relative abundance and structure of chaotic behavior: The nonpolynomial belousov–zhabotinsky reaction kinetics. *The Journal of chemical physics*, 131:044105, (2009). [3.4.1](#)
- [37] M. Begon, C. R. Townsend, and J. L. Harper. *Ecology: from individuals to ecosystems*. John Wiley & Sons, (2009). [4.1](#)
- [38] G. M. Souza and M. S. Buckeridge. Sistemas complexos: novas formas de ver a botânica. *Revista Brasileira de Botânica*, 27:407–419, (2004). [4.1](#)
- [39] J. K. Parrish, S. V. Viscido, and D. Grünbaum. Self-organized fish schools: an examination of emergent properties. *The biological bulletin*, 202:296–305, (2002). [4.1](#), [4.2](#)
- [40] S. V. Viscido, J. K. Parrish, and D. Grünbaum. Individual behavior and emergent properties of fish schools: a comparison of observation and theory. *Marine Ecology Progress Series*, 273:239–249, (2004). [4.1](#)

- [41] R. Eftimie, G. de Vries, M. A. Lewis, and F. Lutscher. Modeling group formation and activity patterns in self-organizing collectives of individuals. *Bulletin of mathematical biology*, 69:1537–1565, (2007). [4.2.1](#), [4.1](#)
- [42] R. Eftimie, G. De Vries, and M. A. Lewis. Complex spatial group patterns result from different animal communication mechanisms. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 104:6974–6979, (2007). [4.2.1](#)
- [43] T. J. Pitcher. Functions of shoaling behaviour in teleosts. In *The behaviour of teleost fishes*, pages 294–337. Springer, (1986). [4.2.1](#)
- [44] H. Queiroz and A. E. Magurran. Safety in numbers? shoaling behaviour of the amazonian red-bellied piranha. *Biology letters*, 1:155–157, (2005). [4.2.1](#)
- [45] Q. Bone and R. Moore. *Biology of fishes*. Taylor & Francis, (2008). [4.2.1](#)
- [46] H. B. Cavalheri. Quanto mais melhor? efeito da densidade no comportamento de agregação de girinos de *rhinella ornata* (amphibia, bufonidae). *Universidade de São Paulo, São Paulo*, (2010). [4.2.2](#), [4.3](#), [4.4](#)
- [47] E. Ben-Jacob, I. Cohen, I. Golding, D. L. Gutnick, M. Tcherpakov, D. Helbing, and I. G. Ron. Bacterial cooperative organization under antibiotic stress. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 282:247–282, (2000). [4.2.3](#), [4.2.3](#), [4.7](#), [4.3](#)
- [48] M. Ohgiwari, M. Matsushita, and T. Matsuyama. Morphological changes in growth phenomena of bacterial colony patterns. *Journal of the Physics Society Japan*, 61:816–822, (1992). [4.2.3](#), [4.6](#), [4.3](#)
- [49] K. Kawasaki, A. Mochizuki, M. Matsushita, T. Umeda, and N. Shigesada. Modeling spatio-temporal patterns generated by *bacillus subtilis*. *Journal of Theoretical Biology*, 188:177–185, (1997). [4.5](#)

- [50] A. Weber, Y. Prokazov, W. Zuschratter, and M. J. B. Hauser. Desynchronisation of glycolytic oscillations in yeast cell populations. *PloS one*, 7, (2012). [4.2.3](#), [4.2.3](#), [4.8](#), [4.3](#)
- [51] J. A. R. Da Cunha, A. L. A. Penna, M. H. Vainstein, R. Morgado, and F. A. Oliveira. Self-organization analysis for a nonlocal convective fisher equation. *Physics Letters A*, 373:661–667, (2009). [5.1](#), [5.2](#), [6.2](#)
- [52] Jefferson Adriany R. da Cunha. Não-localidade e formação de padrão na equação de fisher-kolmogorov. *Tese de Doutorado, Universidade de Brasília*, (2008). [5.1](#), [5.3](#), [5.1](#), [6.1](#), [6.2](#)
- [53] J. A. R. da Cunha, A. L. A. Penna, and F. A. Oliveira. Pattern formation and coexistence domains for a nonlocal population dynamics. *Physical Review E*, 83:115–201, (2011). [5.1](#), [5.2](#), [5.2](#), [6.1](#)
- [54] J. A. R. da Cunha, A. L. A. Penna, and F. A. Oliveira. Pattern-non-pattern transition for a nonlocal population dynamics. *Acta Physica Polonica-Series B*, 43:909, (2012). [5.1](#), [5.2](#), [5.2](#)
- [55] F. Barbosa, K. L. V. Novais, R. M. S. Ferreira, A. L. A. Penna, and F. A. Oliveira. Order parameter description for pattern-no-pattern transition in population dynamics. *À ser publicado*. [6.6](#)