**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
ESCOLA DE ARTES, CIÊNCIAS E HUMANIDADES.**

SERGIO CANDIDO DE OLIVEIRA JUNIOR

Modelo baseado em agentes para especiação topopátrica

SÃO PAULO

2014

SERGIO CANDIDO DE OLIVEIRA JUNIOR

Modelo baseado em agente para especiação topopátrica

Dissertação apresentada à Escola de Artes, Ciências e Humanidades da Universidade de São Paulo para obtenção do título de Mestre em Ciências do Programa de Pós-Graduação Modelagem de Sistemas Complexos

Versão corrigida contendo as alterações solicitadas pela comissão julgadora em 20 de agosto de 2014. A versão original encontra-se em acervo reservado na Biblioteca da EACH/USP e na Biblioteca Digital de Teses e Dissertações da USP (BDTD), de acordo com a Resolução CoPGr 6018, de 13 de outubro de 2011.

Área de Concentração :

Ciências Biológicas

Orientador (a) :

Prof. Dr. Camilo Rodrigues Neto

*São Paulo
2014*

Autorizo a reprodução e divulgação total ou parcial deste trabalho, por qualquer meio convencional ou eletrônico, para fins de estudo e pesquisa, desde que citada a fonte.

CATALOGAÇÃO-NA-PUBLICAÇÃO
Universidade de São
Paulo Escola de Artes, Ciências
e Humanidades
Biblioteca

Oliveira Junior, Sergio Candido de
Modelo baseado em agentes para especiação topopátrica / Sergio
Candido de Oliveira Junior ; orientador, Camilo Rodrigues Neto. –
São Paulo, 2014
82 f. : il.

Dissertação (Mestrado em Ciências) - Programa de Pós-
Graduação em Modelagem de Sistemas Complexos, Escola
de Artes, Ciências e Humanidades, Universidade de São
Paulo, em 2014
Versão corrigida

1. Genética de populações. 2. Evolução. 3. Mutação. 4.
Genótipos. 5. Interação genótipo-ambiente. I. Rodrigues
Neto, Camilo, orient. II. Título.

CDD 22.ed. – 576.58

Nome: Sergio Candido de Oliveira Junior

Titulo: **Modelo baseado em agentes para especiação topopátrica**

Dissertação apresentada à Escola
de Artes, Ciencias e Humanidades
da Universidade de Sao Paulo, para
obtenção do título de Mestre em
Ciencias.

Aprovado em:

Banca Examinadora

Prof. Dr.: **Camilo Rodrigues Neto**

Instituicao: **EACH-USP**

Julgamento:_____

Assinatura:_____

Prof. Dr..

Instituicao:

Julgamento:_____

Assinatura:_____

Prof. Dr.:

Instituicao:

Julgamento:_____

Assinatura:_____

Dedicatória

A todos aqueles que acreditam que, no passado, as coisas não eram como hoje. Pois, de alguma forma, tudo está mudando, embora não se saiba exatamente como.

Este trabalho foi uma tentativa de abordar esta questão.

Agradecimentos

Em especial a Deus de tantos desígnios inalcançáveis aos homens e tão prazerosos, ao mesmo tempo.

Meus pais, Sergio e Volusia, que insistem em acreditar em mim, sempre me convencendo do contrário. Ao pequeno Diego. Tamanho de criança, missão de gigante. Conte sempre comigo.

Professor Camilo Rodrigues Neto, pela ponte entre o ingresso e a defesa. Que a ciência o abençoe.

Todos aqueles que de alguma forma estiveram envolvidos com evolução em minha trajetória. Professora Edislane, Professor Alberts, Professora Renata Ferreira. Todos os professores que fizeram parte da minha formação, desde o berçário até os dias de hoje.

Aqueles também que de alguma forma estão, ou passaram, pela minha vida, durante esse processo de titulação no mestrado. Se vc é um deles sinta-se agradecido, mesmo não cabendo seu nome neste curto espaço.

Resumo

Oliveira Junior, S. C. Modelo baseado em agentes para especiação topopátrica. 2014. 81 f. Dissertação (Mestrado) – Escola de Artes Ciências e Humanidades, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2014.

No presente modelo em NetLogo, implementou-se um código onde patches genotipicamente homogêneos, reproduzem-se no mapa composto de 64 x 64 células. Buscam parceiros entre si, seguindo algumas orientações. O par reprodutivo deve estar dentro de uma determinada distância genética (G) e espacial (S). Estes parâmetros definem qual a máxima divergência genotípica permitida para a reprodução (G) e qual a distância espacial máxima entre dois possíveis parceiros reprodutivos (S). Além destes, o sliderM determina a probabilidade de ocorrer mutação nos genótipos resultantes das reproduções e A a amplitude, i.e., a quantidade de mudança sofrida pelo genótipo do agente. A princípio, geneticamente homogêneos, todos os indivíduos podem potencialmente formar pares. Contudo, com ocorrência de trocas genéticas e mutações, na formação da prole, aumenta-se a diversidade genética e há isolamento reprodutivo entre indivíduos. Obteve-se especiação dos agentes, ocorrência de corredor de fluxo gênico e mapa robusto de combinação de parâmetros.

Palavras-chave: NetLogo; Especiação; Distância genética; Distância espacial; Prole; Mutação; Genótipos; Isolamento reprodutivo; corredor de fluxo gênico.

Abstract

Oliveira Junior, S. C. Agent-Based modelling for topopatric speciation.2014. 81 f. Dissertação (Mestrado) – Escola de Artes Ciências e Humanidades, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2014.

In the present model in NetLogo, we implemented a code where genotypically homogeneous patches, reproduce in a map consisting of 64 x 64 cells. Seek partners among themselves by following some guidelines. The breeding pair must be within a certain genetic (G) and spatial (S) distance. These parameters define the maximum genotypic divergence which allowed for reproduction (G) and that maximum spatial distance between two potential reproductive partners (S). In addition, the slider M determines the probability of mutation in resulting genotypes and A the amplitude, i.e., the amount of change experienced by the genotype of the agent. Primarily, genetically homogeneous, all individuals can potentially form pairs. However, with the occurrence of genetic changes and mutations in the offspring formation, the genetic diversity increases and there is reproductive isolation between individuals. There were agents speciation, occurrence of genic flow pathway and robust map of matching parameters.

Keywords: NetLogo; Speciation; Genetic distance; Spatial distance; Offspring; Mutation; Genotypes; Reproductive isolation; Genic flow pathway.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: 2000 indivíduos, treliça de 128 x 128.....	14
Figura 2: Sobreposição de espécies marcada com elipse..	15
Figura 3: Aumento do gradiente S	16
Figura 4: Alta taxa de especiação.....	16
Figura 5: Parâmetros responsáveis pela formação do maior número de espécies	17
Figura 6: Redução de especiação para os parâmetros listados.....	17
Figura 7: Gradiente da especiação	18
Figura 8: Período de transição estacionário.....	19
Figura 9: Crescimento e estagnação do numero de espécies.....	19
Figura 10: Aumento no número de espécies relativo à área.....	20
Figura 11: Aumentando S.....	22
Figura 12: Especiação em função de S e G	23
Figura 13: Interface da última versão do modelo.....	39
Figura 14: Histograma.	41
Figura 15: Reprodução "copy-neib".	41
Figura 16: Reprodução "mean-diff"	42
Figura 17: Número simulados de espécies em função do tempo.	45
Figura 18: O mesmo do gráfico anterior para mutação "gaussiana"	45
Figura 19: Mutação "binaria".	46
Figura 20: Número simulado de espécies pelo tempo	49
Figura 21: Resultado da simulação	50
Figura 22: Resultados do experimento <i>in vivo</i> para três tipos de bactérias	51
Figura 23: Resultados estatísticos para diferentes combinações de mutação e migração. ..	53
Figura 24: Formação de espécies em anel e corredor de fluxo gênico.	55
Figura 25: Representação de espécies em anel em nosso modelo.	57
Figura 26: Movimento de formação de espécies em anel.....	58
Figura 27: Instantes da simulação de 25 gerações de agentes em especiação.	61
Figura 28: Gráfico de abundância relativa de espécies.....	63
Figura 29: Distribuição lognormal.....	63

Figura 30: Gráfico de distribuição de espécies.	65
Figura 31: Especiação regida pelos sliders “G” e “S”.	67
Figura 32: Simulação baseada em agentes para diversidade de bactérias	69

Sumário

1 INTRODUÇÃO	12
1.1 COMPLEXIDADE DESORGANIZADA PARA ESTUDAR EVOLUÇÃO	12
1.1.2 EVOLUÇÃO	12
1.1.3 COMPLEXIDADE DESORGANIZADA	13
1.2 PADRÕES EMERGENTES DO SISTEMA	16
1.3 COMPLEXIDADE DESORGANIZADA E ESPECIAÇÃO	16
1.4 LIMITAÇÕES DA COMPLEXIDADE DESORGANIZADA	17
2 JUSTIFICATIVA	19
3 OBJETIVOS	20
3.1 COMPARAÇÃO DOS MODELOS	20
3.1.1 ARTIGO GLOBAL PATTERNS OF SPECIATION AND DIVERSITY	20
3.1.2 JUSTIFICATIVAS DO AUTOR PARA LEGITIMAR O USO DO MODELO	21
3.1.3 COMO FUNCIONA O MODELO DE AGUIAR	22
3.1.4 RESULTADOS E DISCUSSÃO DO MODELO DE AGUIAR	22
3.2 CONSIDERAÇÕES SOBRE DIAGRAMAS DE DISTRIBUIÇÃO DE ABUNDÂNCIA DE ESPÉCIES	32
3.3 COMO FUNCIONA NOSSO MODELO	34
3.3.1 DESCRIÇÃO DO NOSSO MODELO	34
3.3.1.1 VERSÃO APRESENTADA NA QUALIFICAÇÃO	35
3.3.1.2 VERSÃO PARA DEFESA DA DISSERTAÇÃO	36
3.4 DIFERENÇAS E SIMILARIDADES ENTRE OS MODELOS	38
3.4.1 DIFERENÇAS ENTRE OS MODELOS	39
3.4.1.1 VERSÃO APRESENTADA NA QUALIFICAÇÃO	39
3.4.1.2 VERSÃO PARA DEFESA DA DISSERTAÇÃO	41
3.4.2 SIMILARIDADES ENTRE OS MODELOS	43

3.4.2.1 VERSÃO APRESENTADA NA QUALIFICAÇÃO	43
3.4.2.2 VERSÃO PARA DEFESA DA DISSERTAÇÃO	44
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO	45
4.1 PARÂMETROS	47
4.2 REPRODUÇÃO	47
4.2.1 SIMULAÇÕES	49
4.3 TIPO DE MUTAÇÃO	51
4.3.1 SIMULAÇÕES	54
4.4 MIGRAÇÃO	55
4.4.1 SIMULAÇÕES	56
4.5 INFLUÊNCIA DE DIFERENTES MUTAÇÕES	60
4.6 ESPÉCIES EM ANEL	64
4.7 NOVA POSSIBILIDADE PARA A EVOLUÇÃO DE ESPÉCIES SEM COMPETIÇÃO OU SELEÇÃO NATURAL.	68
4.8 DISTRIBUIÇÃO DE ABUNDÂNCIA DE ESPÉCIES.	73
5 CONCLUSÃO	77
5.1 COMPORTAMENTO GERAL DO MODELO PARA OS PARÂMETROS “G” E “S”	77
6 BIBLIOGRAFIA	81

1 Introdução

1.1 Complexidade Desorganizada para estudar Evolução

1.1.2 Evolução

Desde que Darwin publicou a origem das espécies, o tema especiação é pauta em muitos trabalhos científicos de estudos da evolução. Primitivamente a evolução é entendida como a sobrevivência e reprodução diferenciada do mais apto por meio de seleção natural (Futuyma, 2002). Dessa forma, organismos viventes atualmente, são espécies descendentes de ancestrais que não tiveram sucesso em sobreviver em determinada circunstância. O que fez com que as espécies atuais não sucumbissem à circunstância desfavorável, foi o fato de portarem características distintas das espécies ancestrais. A formação dessas características distintas é o que chamamos de especiação, que em definição é a mudança das características hereditárias de grupos de organismos ao longo das gerações (Futuyma, 2002). De forma que, com a extinção dos parentais, os descendentes modificados ocupam o nicho da espécie extinta. Embora se reconheça a possibilidade da coexistência de novas espécies com as respectivas parentais.

Tanto a espécie parental quanto a espécie filha podem ter sucesso na sobrevivência e reprodução diferencial, assim, descarta-se a obrigatoriedade de processos catastróficos para o curso da evolução e para a origem de novas espécies. Nesse sentido, diversas são as possibilidades de surgimento de novas espécies, com ou sem a coexistência de parentais.

Os principais modos de especiação são alopátrica, simpátrica, parapátrica e peripátrica. Todavia os estudos evolutivos recentes lançam mão da possibilidade de especiação sem a necessidade de processos fundamentais da teoria evolutiva primitiva, e.g., seleção natural e isolamento espacial.

Aguiar(Aguiar *et al.*, 2009)inventa o termo especiação Topopátrica, referindo-se às mudanças sem qualquer barreira geográfica, exceto à distância entre os indivíduos. Apenas a subdivisão dinâmica de regiões do espaço é o bastante para resultar na especiação topopátrica.

Dividem-se evolucionistas em três vertentes filosóficas: adaptacionistas, historicistas e estruturalistas (Melanie Mitchell, 2009). Para os primeiros, evolução e seleção natural são processos indissociáveis. Os segundos acreditam que eventos extremos, como catástrofes circunstanciais no tempo evolutivo, resultam em mudanças evolutivas. Os últimos defendem que a origem de novidades evolutivas independem de seleção natural e podem surgir espontaneamente.

A Síntese Estendida (*Extended Synthesis*), visa agrupar todas as três vertentes de estudos para a formação de uma teoria evolutiva abrangente, lançando mão de seleção natural, acidentes históricos, limitações de desenvolvimento e auto-organização como ferramentas explicativas da evolução (Melanie Mitchell, 2009).

1.1.3 Complexidade Desorganizada

Em 1948, Warren Weaver (Weaver; 1948) cunhou o termo complexidade desorganizada referindo-se aos sistemas que não se encaixavam nas abordagens matemáticas tradicionais. Estas reduzem o sistema em questão a uma aproximação grosseira, e.g., desprezar todas as

peculiaridades de uma vaca a ponto de reduzi-la a uma esfera, além de representá-la com número de variáveis insuficientes.

A complexidade desorganizada lançava mão de teorias desenvolvidas no século 18 em busca de uma melhor descrição dos fenômenos que não mais correspondiam às abordagens tradicionais. Estas teorias foram desenvolvidas por matemáticos e estatísticos na área de probabilidade e mecânica estatística. A lei dos grandes números e suas ramificações, como o teorema do limite central, capacitavam os cientistas a lidar com problemas de múltiplas variáveis, cujos comportamentos eram erráticos e desconhecidos. Eis então o campo da complexidade desorganizada.

No caso da lei dos grandes números, por exemplo, um determinado alto valor incomum de uma variável aleatória será compensado por um baixo valor incomum de outra. Possibilitando razoável ordem e análise para tratamento do fenômeno complexo e desorganizado.

Estas ferramentas matemáticas funcionavam porque, apesar do comportamento desordenado das variáveis, o sistema como um todo possuía certa ordem e propriedades analisáveis (Weaver, 1948). Para exemplificar, imagine uma comunidade composta por membros diferentes uns dos outros, contudo interagindo. Conforme se adiciona mais e mais indivíduos para comunidade, as idiossincrasias ajustam-se ao comportamento padrão, i.e., as singularidades dos elementos estocásticos ajustam-se à média. Ou seja, aumentando o número de agentes, as variações individuais cancelam-se mutuamente e previsões tornam-se possíveis (John e Miller, 2007). Esta é a característica chave da complexidade desorganizada. O fato de haver interação entre agentes faz com que limitações e restrições sejam impostas de um para outro.

Diferentemente, por exemplo, um modelo sem restrições reprodutivas¹ como modelos de crescimento populacional, representado por processos iterativos de reprodução. O crescimento populacional acontece ilimitado de maneira linear, de forma completamente irreal para condições naturais, onde os indivíduos competem por recursos escassos que determinam sua sobrevivência e capacidade reprodutiva.

Esta dinâmica é linear uma vez que não há interação entre os agentes do modelo e o único fator influenciando o crescimento é a reprodução. É justamente esta independência que gera o crescimento linear (John e Miller, 2007).

No modelo logístico, o crescimento populacional é influenciado por restrições como mortalidade, capacidade suporte do ambiente e interação entre os agentes². O crescimento neste caso não segue o mesmo padrão linear e previsível como no modelo anterior. Ou seja, temos então um problema de múltiplas variáveis, cujos comportamentos são erráticos e desconhecidos, tal como enfatizou Weaver para a complexidade desorganizada (Weaver, 1948).

Muito da ordem e propriedades analisáveis nestes problemas de complexidade desorganizada, referem-se aos fenômenos resultantes da interação entre os agentes. Fenômenos estes que representam certos padrões. E grande foco tem sido dado, nos estudos dos sistemas complexos, em como esses agentes em interação produzem os chamados padrões emergentes do sistema

¹ População atual = População Anterior x Taxa de Natalidade

² Trata-se do modelo logístico de Pierre François Verhulst

1.2 Padrões emergentes do sistema

A noção é que o comportamento do indivíduo dentro do sistema agrega-se ao comportamento global. Este já não depende do indivíduo e o resultado agregado é resiliente as variações individuais. Ou seja, o padrão emergente não depende da especificidade dos agentes. Estes padrões são o que há de certa ordem e propriedades médias analisáveis nos sistemas como um todo, conforme apontado por Weaver (Weaver, 1948).

Em resumo, podemos numerar as características chaves dos sistemas complexos da seguinte forma:

1. apresentam dinâmicas complicadas;
2. têm auto-organização no comportamento emergente, i.e., o resultado coletivo dos agentes seguindo regras simples, pode produzir comportamento organizado interessante, embora difícil de prever.

Desta última premissa, podemos nomear estes sistemas como sistemas auto-organizáveis.

Contudo, vale ressaltar que em sistemas auto-organizáveis os agentes não tem um panorama da escala global do que está acontecendo. Interagem localmente com outros agentes, obtendo informações da escala global apenas com estas interações limitadas (Mitchell, 2013).

1.3 Complexidade Desorganizada e especiação

Em ecologia e evolução, por exemplo, diferentes estudos ocupam-se do padrão emergente como resultante da interação de agentes individuais, embora não focando nas especificidades

destes agentes. Seguindo assim a mesma orientação dos sistemas complexos desorganizados, i.e., desprezar discrepâncias individuais, uma vez que no contexto geral esses desvios anular-se-ão mutuamente, e o padrão de distribuição final seguirá o padrão emergente de distribuição robusto,.

De acordo com Rosindell (Rosindell, Hubbell e Etienne; 2011), Kimura e colegas em 1964 foram pioneiros da idéia de modelar mudanças na frequência de alelos, onde todos seriam seletivamente neutros, i.e., modelaram alterações aleatórias e independentes nas características dos agentes. Não obstante, a substituição de um alelo por outro não afetou o fitness dos indivíduos (Rosindell, Hubbell e Etienne; 2011), i.e., o padrão emergente não foi dependente das características individuais dos agentes.

O similar ecológico desta idéia, admitia neutralidade de indivíduos dentro de comunidades, ao invés de alelos em populações. O paralelo mostrou-se útil no desenvolvimento da teoria neutra em ecologia (Rosindell, Hubbell e Etienne; 2011).

Em 2001, Stephen P. Hubbell, propôs a teoria neutra que assumia uma controversa suposição: todos os indivíduos em um nível trófico particular, tem a mesma probabilidade de reproduzir-se e morrer. Independentemente das características específicas (Stephen e Hubbell, 2001). Eis o encontro da Complexidade Desorganizada e especiação.

1.4 Limitações da Complexidade Desorganizada

O que é generalizável está de acordo com os sistemas complexos desorganizados. O que é específico, não é compreendido pela complexidade desorganizada. Por um lado, os modelos de complexidade desorganizada são robustos na análise de dados amostrais, resultando em

distribuições comuns. Por outro, possivelmente não distinguirão entre vários modelos. Uma vez que resultarão sempre em distribuições normais para as variáveis em questão.

Além disso, os tais teoremas (Lei dos Grandes Números e Teorema do Limite Central) falhariam em capturar os detalhes essenciais que resultam nos padrões emergentes. Isto é, como um conjunto de agentes, sem controlador central, pode emergir determinados padrões previsíveis ou imprevisíveis?

Assim complexidade desorganizada, embora útil, despreza inúmeros detalhes interessantes dos fenômenos complexos (John e Miller, 2007). Não provêem qualquer discernimento a respeito das inúmeras vias comportamentais e comunicativas entre os agentes. Por exemplo, como (esses) detalhes (foram)são capazes de se agregar (nestes)em padrões de larga escala, que são persistentes e apresentam comportamento completamente distinto de seus agentes individuais?

A Complexidade Organizada aborda melhor questões como essa. Contudo está fora do escopo da atual dissertação. Para maiores detalhes vale consultar o trabalho de Weaver de 1948.

2Justificativa

O modelo que desenvolvemos, apóia-se na base de que o padrão emergente, no caso especiação, ocorrerá como resultado da interação de agentes homogêneos. Uma vez que os agentes são selecionados para reprodução, mutação, substituição e morte de maneira aleatória, supostas variações individuais, e.g., maior sucesso reprodutivo, apresentar-se-ão anuladas. Na média, todos os indivíduos teriam comportamento ajustado a uma distribuição normal para a característica em questão.

Os processos responsáveis por esse resultado, são provavelmente os mesmos para uma ampla variedade de características generalizáveis entre vários sistemas diferentes. Ao contrário dos processos responsáveis por qualidades espécie-específica, i.e., circunscritas apenas a pequenos grupos, pois mudam em diferentes comunidades (Rosindell, Hubbell e Etienne, 2011).

O tratamento deste último caso, é realizado por meio de Individual-Based Modelling (Steven e Railsback, 2012), onde peculiaridades importantes de indivíduos, ou pequenos grupos, estão representadas no modelo em questão.

No presente modelo usamos Modelagem Baseda em Agentes, pois procuramos a ocorrência do padrão emergente (especiação), como resultante da interação de todas as células (patches), independente de características peculiares³, ou circunstanciais⁴.

³ Referentes a indivíduo ou pequenos grupos.

⁴ Que acontecem raramente.

3Objetivos

De posse dos resultados do modelo de Aguiar (Aguiar *et al.*, 2009), confeccionamos um modelo similar em Net Logo a fim de verificar a repetição dos eventos de especiação e dinâmica de agentes. Muito embora fenômenos distintos ocorreram, que serão descritos oportunamente.

Uma vez realizados os pontos acima, a estruturação do modelo almejou a repetição e definição dos resultados, mesmo diante de pequenas alterações, em prol de estabelecer resiliência. Além disso, múltiplas rodadas do modelo foram avaliadas em termos de significância estatística.

Dessa forma pudemos definir uma ferramenta para compreensão da dinâmica de populações e evolução de espécies.

3.1 Comparação dos modelos

3.1.1 Artigo Global patterns of speciation and diversity

Marcus de Aguiar, em colaboração com pesquisadores do Instituto de Sistemas Complexos da Nova Inglaterra, nos Estados Unidos, e de sua doutoranda Elizabeth Baptestini, desenvolveu um modelocomputacional que simula a evolução de uma população geneticamente homogênea ao longo das gerações(Baptestini e Aguiar, 2009).

Os agentes compõem populações geneticamente homogêneas e são submetidos a processo de especiação. A dinâmica é oriunda da interação entre os agentes em uma treliça (grid) em

forma de torus. As variáveis referem-se à distância espacial máxima para reprodução, diferença genética máxima para reprodução e taxa de mutação; nomeadamente, S, G e M, respectivamente.

3.1.2 Justificativas do autor para legitimar o uso do modelo

Existem padrões de espaço, tempo, região geográfica e espécies relativos à distribuição de biodiversidade. Teoremas recentes, assumindo ausência de seleção ambiental ou interação de organismos como competição, conseguem prever muitos destes padrões. Dinamicamente, estas teorias geram novas espécies de forma similar à mutações de ponto, numa população sem reprodução sexual.

Seguindo estas orientações, o modelo simula reprodução, mutação e dispersão dos agentes. Estes são distribuídos uniformemente no espaço e tem genomas idênticos. Os resultados apontam para surgimento de diversidade de espécies sem barreiras físicas.

Além disso, toda dinâmica de especiação ocorre sem a implementação do processo de seleção natural, assumindo-o desnecessário. Não obstante esta divergência, há também outras ressalvas com relação as abordagens clássicas da Evolução. Estas são diferentes formas de especiação, onde diferentes níveis de isolamento espacial são condições essenciais: Alopátrica — isolamento de espécies por barreiras geográficas —, Peripátrica — onde não há sobreposição do espaço de duas espécies — e Parapatrica — o espaço é adjacente mas não se sobrepõe.

Embora ainda se discuta a possibilidade e existência de especiação simpátrica na natureza, esta seria a forma semelhante do que é proposto no modelo. Dado que o modelo gera especiação,

sem considerar qualquer das formas de especiação com isolamento geográfico, Aguiar sugere acrescentar mais uma categoria à lista teórica: “...Inventei o termo ‘especiação Topopátrica’ porque a distância entre os indivíduos é essencial” (Guimarães, 2009).

3.1.3 Como funciona o modelo de Aguiar

Os agentes seguem a seguinte dinâmica no modelo de Aguiar: durante a reprodução, parceiros potenciais são identificados dentre aqueles de uma determinada região espacial (S)⁵ no entorno de um indivíduo. Os genomas dos parceiros são suficientemente similares ao do indivíduo (G)⁶. Um parceiro é escolhido deste grupo aleatoriamente.

Após isso, reprodução com mutação e cross over ocorrem. A prole é então dispersa dentro de uma região próxima ao agente original que morre. A variação genética aumenta com o tempo, devido à mutação e recombinação.

Espécies são identificadas como grupos de organismos separados reprodutivamente por restrições genéticas na cópula. Agrupados, pela ausência de restrições, sem exigir que todos os membros do grupo copulem entre si.

3.1.4 Resultados e discussão do modelo de Aguiar

Observou-se tanto isolamento sexual quanto diferenciação espacial de subpopulações (heterogeneidade espacial). Mas algo notável é que não houve representação de barreiras geográficas, gradiente de recursos ou seleção natural.

O primeiro evento de especiação dos agentes ocorreu após cerca de 300 gerações

⁵ Distância espacial máxima

⁶ Distância genética máxima

(Figura 1).

Figura 1: 2000 indivíduos, treliça de 128 x 128, $S = 6$ e $G = 20$. Diferença de 125 genes entre espécies.
Excerto de: Vol 460| 16 July 2009| doi:10.1038/nature08168; Figure 1.

A densidade populacional das diferentes espécies aumenta e diminui aleatoriamente. Devido a isso, houve eventos de extinção de espécies, fazendo com que a quantidade total de espécies oscilasse com as sucessivas gerações.

Não obstante o isolamento espacial de diferentes espécies, registrou-se a ocorrência de sobreposição de domínios espaciais (figura 2).

Figura 2: Sobreposição de espécies marcada com elipse. 2000 indivíduos, treliça de 128 x 128, $S = 6$ e $G = 20$. Diferença de 125 genes entre espécies. Excerto de: Vol 460| 16 July 2009| doi:10.1038/nature08168; Figure 1.

A diferença genética entre os agentes aumenta conforme se sucedem as gerações (iterações do modelo). Doravante, as espécies recém formadas são geneticamente similares às espécies parentais. Após um grande número de sucessivas gerações, alcança-se distância máxima no espaço do genoma entre uma espécie e seu precursor longínquo, i.e., a diferença genética atinge o valor máximo para os parâmetros do modelo.

Conforme se aumenta a variável S (Distância espacial máxima para escolha de parceiros) a taxa de especiação diminui (Figura 3). Este apontamento do autor está de acordo com a relação inversamente proporcional entre taxa de especiação e espaço disponível para os agentes atuarem.

Figura 3: Aumento do gradiente S (orientação da seta em ciano) reduzindo a taxa de especiação (diminuição da diversidade de cores). 1000 gerações, 2000 indivíduos e treliça de 128 x 128. Excerto de: Vol 460| 16 July 2009| doi:10.1038/nature08168; Figure 2.

Uma observação interessante refere-se a inocuidade de variações isoladas de G ou S na taxa de especiação. Contudo este fenômeno seria destacado variando um dos gradientes e anulando o outro, e.g., $S = 6$ e $G = 0$, ou, $S = 0$ e $G = 6$, e assim variando apenas um dos gradientes, uma vez que o outro está nulo (ou assume valor zero). Isto não foi representado no artigo.

Todavia dispôs-se de boa representação gráfica e clara descrição textual para o grande número de espécies relativo a valores baixos dos parâmetros (Figura 4).

Figura 4: Alta taxa de especiação (diversidade de cores) para os menores valores dos parâmetros. 1000 gerações, 2000 indivíduos e treliça de 128 x 128. Excerto de: Vol 460| 16 July 2009| doi:10.1038/nature08168; Figure 2.

Para valores intermediários de S (e.g., $S = 6$), valores intermediários de G geraram o maior número de espécies (Figura 5).

Figura 5: Parâmetros responsáveis pela formação do maior número de espécies. 1000 gerações, 2000 indivíduos e treliça de 128 x 128. Excerto de: Vol 460| 16 July 2009| doi:10.1038/nature08168; Figure 2.

Para o mesmo valor de S , o autor nota a redução da especiação relacionada a menores valores de G (Figura 6). Atribui este fenômeno à redução da probabilidade de flutuações genéticas oriundas de mutação e recombinação.

Figura 6: Redução de especiação para os parâmetros listados. Excerto de: Vol 460| 16 July 2009| doi:10.1038/nature08168; Figure 2.

O interessante deste ponto é que reduzindo o slider G , reduz-se a taxa de especiação. O que estaria em desacordo com minhas observações sobre relação inversa entre espaço de atuação dos agentes e taxa de especiação.

Porém, a redução que Aguiar destaca, segue um gradiente vertical (Figura 7a). Enquanto o aumento de especiação (diversidade de cores) com a diminuição dos sliders (G e S), seguiria um gradiente oblíquo (diagonal) (Figura 7b).

Além disso, os parâmetros $S = 6$ e $G = 20$, apontaram um resultado isolado, discrepante das outras configurações de valores de G com $S = 6$ (Figura 7c).

Figura 7: a) Gradiente de redução da especiação, seta em ciano. b) Gradiente de aumento da especiação, seta em preto. c) Especiação discrepante de $G = 20$ e $S = 6$, com relação as outras configurações de G com $S = 6$. Excerto de: Vol 460| 16 July 2009| doi:10.1038/nature08168; Figure 2.

Há um período de transição estacionário, onde mutação e recombinação aumentam a variação na população homogênea (Figura 8).

Figura 8: Período de transição estacionário. Excerto de: Vol 460| 16 July 2009| doi:10.1038/nature08168; Figure 3a.

Depois do estado estacionário, o número de espécies cresce rapidamente e atinge um novo estado estacionário (Figura 9).

Figura 9: Crescimento e estagnação do numero de espécies. Excerto de: Vol 460| 16 July 2009| doi:10.1038/nature08168; Figure 3a.

Este segundo estado estacionário de surgimento de novas espécies, diverge da noção oriunda do fenômeno de glaciações, onde taxas crescentes de formação de espécies são devidas a formação de barreiras geográficas. Esta visão defende que a ocorrência de especiação depende de isolamento espacial. O modelo do autor não só propõe a ocorrência de especiação sem a existência de barreiras geográficas, como também evidencia a ocorrência de uma taxa estacionária de formação de novas espécies (steady state), ambos aspectos divergentes do ponto de vista dominante.

O autor sumariza 4 prognósticos chave para a consistência entre a diversidade de espécies e dados empíricos. No segundo prognóstico, afirma-se “... The number of species formed

increases with the available area if the density of individuals (and corresponding values of other parameters) is kept constant...”. Para embasar esta afirmação, lança-se mão da figura 10, ressaltando a alta taxa em ambientes 1D.⁷

Figura 10: Tratando-se de 1D, há um grande aumento no número de espécies relativo à área, corroborando o prognóstico do autor. Quando se faz a mesma coisa para dimensões maiores, .e.g., 2d, o numero de espécies aumenta bem menos. O que está de acordo com o que menciono no texto: “Quanto maior espaço em que os agentes podem agir, menor a taxa (formação) de novos tipos de agentes.” Excerto de: Vol 460| 16 July 2009| doi:10.1038/nature08168; Figure 3b.

Aparentemente o autor está certo: o número de espécies aumenta com a área disponível. Contudo, há um certo aumento na dimensão (1D para 2D) onde se diminui a taxa de formação de novas espécies. No caso do gráfico, aumentou-se uma dimensão (1D para 2D) na área de atuação dos agentes. Isso causou uma redução drástica na taxa de aumento de espécies (Figura 10).

⁷ Quanto maior a distância que os agentes podem agir, menor a formação de novos tipos de agentes. Este prognóstico aplica-se para a alteração de “S” e “G”, sem alterar o tamanho da treliça (grid). O comentário do autor refere-se a aumentos da área do grid, mantendo constante outros parâmetros.

Acredito que quanto mais se enfatiza o aumento do espaço disponível para os agentes, e.g., aumentando a dimensão, mais acentuado é este fenômeno de redução da taxa de crescimento de espécies. Ou seja, disponibilizando mais espaço para os agentes— tanto em área quanto em dimensão— menor será o acréscimo de novas espécies na população (Figura 10, 11 e 12).

3.2 Considerações sobre diagramas de Distribuição de Abundância de Espécies

Nos diagramas de Distribuição de Abundância de Espécies (Species Abundance Distributions) semelhante aos da figura 11, tem-se que as espécies raras (menos indivíduos) são as mais numerosas nas amostragens. Isso, desde que a amostra seja expressiva da população.

O pico da distribuição concentrar-se-á à esquerda do gráfico, com uma longa cauda para o lado direito na distribuição lognormal, ou também em séries logarítmicas de Fisher. Agora um apontamento para explicar um fenômeno dos próximos gráficos. Acredito que, quando se aumenta as espécies comuns em uma amostragem, diminuem-se as espécies raras. Pensemos que novas espécies possivelmente são espécies raras, pois ainda não aumentaram sua representação numa população, ou são recentes.

Já espécies comuns, seriam espécies antigas, que já vem se dispersando a longo tempo na população, ou aumentando sua representatividade na amostragem populacional. Dessa forma, acredito que carência de espécies raras numa amostragem, é um apontamento para a menor ocorrência de especiação. Ou seja, menos espécies raras, menos especiação.

A figura 11 demonstra um deslocamento do gráfico de distribuição para a direita, conforme se aumenta a variável S de 5 para 6. Ou seja, aumentando-se a área que os agentes podem agir em busca de parceiros, você diminui o número de espécies raras. De acordo com a minha idéia, você diminui a especiação.

Figura 11: Aumentado S de 5 para 6, desloca-se o pico do gráfico para a direita. Reduz-se o número de espécies raras (poucos indivíduos), aumenta-se o número de espécies comuns (muitos indivíduos). Este fato poderia ser um apontamento para a redução da taxa de especiação. Excerto de: Vol 460| 16 July 2009| doi: 10.1038/nature08168; Supplementary Figure 1, peripheral panels.

A figura 12 deixa isso bem claro: Razão inversa entre espaço de atuação dos agentes—valores de G e S — e número de espécies formadas (taxa de especiação). Todavia, o autorressaltaque: “...For intermediate values of S , the number of species is higher for intermediate values of G ...”.

Figura 12: Especiação em função de S e G. Os números dentro da área de plotagem, são os números de espécies formadas. O gradiente de aumento da taxa de especiação, segue as setas rosas. Excerto de: Vol 460| 16 July 2009| doi: 10.1038/nature08168; Supplementary Figure 1, Central panel.

3.3 Como funciona nosso modelo

O modelo, em NetLogo, consiste de simulação baseada em agentes. Estes são identificados por localização geográfica e genótipo. Sendo a localização geográfica o próprio agente, uma vez que optamos codificar os Patches ao invés dos Turtles. Há reprodução, orientada por parâmetros de proximidade espacial e genética, tal qual no modelo de Aguiar.

3.3.1 Descrição do nosso modelo

Para cumprir as demandas definidas no campo “Plano de Trabalho”, apresentado no documento de qualificação, muitas alterações e adições foram feitas ao código. Abaixo descrevo a versão apresentada primeiramente, seguida da atual versão auferida à defesa da dissertação.

Dessa forma, comparações podem ser realizadas para certificar o cumprimento do “Plano de Trabalho”. Sem este interesse, já de posse da descrição do código do modelo, pode-se muito bem passar ao campo seguinte, “Versão para a Defesa da Dissertação”, onde alterações e implementações serão detalhadas.

3.3.1.1 Versão Apresentada na Qualificação

O parceiro reprodutivo é escolhido aleatoriamente, nas células vizinhas, dentro de um raio definido pelo slider S. Os genomas assumem valores arbitrários no intervalo entre 1 e 141. Sendo cada Patch representado por um número inteiro destes valores. O parceiro só será reprodutivamente viável se seu genoma estiver dentro de um intervalo de 2 unidades ($20 \div 10$), de um total de 14,1 ($141 \div 10$), de diferença do valor do genoma do indivíduo, e.g., se o indivíduo for 6, o parceiro deve ser no mínimo 5 e no máximo 7.

Dado que o parceiro obedece este requisito, o Patch, em seu local, terá um novo valor de seu genoma: a média aritmética entre ele e seu parceiro. Isto representa a reprodução sexuada. Este novo valor de genoma, será alterado por uma mutação que assume um valor aleatório entre -5 e 5. A magnitude desta alteração depende do slider M. Este parâmetro determinará a alteração real sofrida pelo genoma. Esta alteração é uma porcentagem do valor aleatório assumido pela mutação. Há 1 chance em 11 de não ocorrer mutação.

Para o efeito de borda, i.e., para cancelar a deriva infinita dos valores de genoma, tanto para números positivos quanto negativos, implementou-se que o valor mínimo para o genoma é 1 e máximo é 141. Dessa forma, assume-se que são finitos os fenótipos possíveis assumidos pela

evolução. As espécies possíveis de surgimento estariam dentro da expressão dos fenótipos 1 até 141. Se o indivíduo não achar um parceiro viável dentro das restrições de S, ele irá se transformar em uma célula, aleatoriamente escolhido em seu entorno num raio de 1 unidade⁸. São 14 fenótipos e 141 genótipos. Os fenótipos são 14 cores assumidas pelos Patches dependendo do genótipo. Estes são números inteiros de 1 até 141.

Cada fenótipo é representado por 10 genótipos. Os parceiros possíveis podem abranger um fenótipo acima e um abaixo do espectro das cores. Dessa forma, o modelo assume cruzamento entre espécies— fenótipos— próximas com descendência viável. Quando o genótipo assumir dezenas inteiras, e.g., 10, 20 e 30, o intervalo de parceiros possíveis está numa gama de 10 genótipos abaixo e 10 genótipos acima. Por exemplo, genótipo = 20. $20/10 = 2$. Floor = 1. Ceiling = 3. Intervalo de reprodução de 10 a 30, ou seja, 20 genótipos.

Quando não, reduz-se o intervalo para apenas 10 unidades, e.g., genótipo = 21. $21/10 = 2,1$. Floor = 2 e Ceiling = 3. Intervalo de reprodução = 10 genótipos. Isto seria uma restrição sexual para espécies que não assumem dezenas inteiras. Essas espécies teriam menos parceiros disponíveis e só fariam cruzamento interespecífico com espécies de genótipos imediatamente acima da faixa de sua espécie.

3.3.1.2 Versão para defesa da Dissertação

As alterações e adições mais importantes ao código original são descritas abaixo.

⁸ Como se fosse a mutante Mística, dos X-men, que se transmuta em qualquer indivíduo, embora não aleatoriamente.

Essa simulação, seria algo como um mundo de homossexuais com poderes sobrenaturais, que podem se reproduzir ou, alternativamente, seguir o caminho da transmutação, clonando seus vizinhos aleatoriamente.

O slider “M” refere-se à probabilidade de ocorrer mutação. “A” é a quantidade mutada. Há a possibilidade de patches vazios. Há probabilidade de fracasso reprodutivo, i.e., indivíduos que não reproduzem, definida pelo slider “Qzero”. Ocorre mortalidade de agentes, no caso de fracasso reprodutivo. O vizinho continua substituindo o agente morto.

O slider “ROzero” determina o total de células ocupadas do grid. Pode-se optar por rodar o modelo com agentes nômades (migrantes) ou sedentários (fixos) por meio do switch “migracao”. A locomoção ocorre após a reprodução do migrante, que deixa o local vazio. As espécies mais comuns a cada rodada, recebem a mesma coloração. Dessa forma a coloração representa o ranqueamento do número de indivíduos por espécie. Não mais o histórico de desenvolvimento de uma única espécie a cada rodada.

Cada espécie passa a ser definida por um número inteiro somente. Esta é a identidade de cada espécie. A coloração não mais identifica uma espécie em questão durante todas as gerações (ticks). O button "identifica-esp" determina o ranqueamento de espécies por meio da coloração, i.e., as espécies mais comuns assumem as cores disponiveis, num total de 13 cores, ou o valor assumido pelo slider “num-cores”. O chooser “tipo-mutacao” discrimina entre três modalidades de mutação: “gaussiana”, “uniforme” e “binaria”. Na primeira, a quantidade mutada assume valor entre 0 e “A”, i.e., o valor assumido pelo slider “A”.

A segunda o genótipo se altera dentro de um valor aleatório no intervalo de -1 a 1, multiplicado pelo slider “A”. A última, é similar a anterior, embora os valores são somente aqueles do conjunto -1 e 1, aleatoriamente escolhidos e multiplicados por “A”. O chooser “reproducao” seleciona entre três tipos de reprodução: "media", "max-diff" ou "mean-diff".

A primeira é a modalidade reprodutiva da versão original, onde as flutuações médias dos genomas tendem a ser dissipadas. A segunda, é uma tentativa de amenizar o cancelamento das flutuações médias dos genomas, fazendo com que se acumulem. Na prática o agente copia (clona) um vizinho próximo. A última segue a mesma idéia de preservar as flutuações. Contudo não copia o vizinho. Faz uma média das diferenças (flutuações) entre os genótipos dos agentes em reprodução.

Para anular agentes com genótipos menores que 1 e maiores que 140, impôs-se outra restrição reprodutiva, além de “S” e “G”. Caso o cruzamento resulte em genótipo (prole) fora do intervalo 1 a 140, não há prole resultante. Ou seja, assume-se cruzamento inviável para o par de agentes em questão. Contudo realiza-se a cópia de um agente aleatoriamente escolhido, que assume o local do filho inviável. Funciona como se ocorresse reprodução assexuada do agente aleatoriamente escolhido. Quando prole viável, o pai continua sendo substituído em seu local pelo filho, tal qual o modelo inicial.

3.4 Diferenças e Similaridades entre os modelos

Seguindo o desenvolvimento do item anterior, descrevo abaixo a diferença e a similaridade entre a versão original (documento de qualificação) e o modelo de Aguiar. Para a comparação com a versão final, modelo foco da defesa da dissertação, pode-se seguir para os itens seguintes intitulados “ Versão para Defesa da Dissertação”

3.4.1 Diferenças entre os modelos

3.4.1.1 Versão Apresentada na Qualificação

Em nosso modelo (NM) os patches ocupam todo espaço, no modelo de Aguiar (MA), os agentes distribuem-se uniformemente. Após a reprodução sexuada, MA apresenta cross over e dispersão da prole. Em NM a prole, filho único, ocupa o lugar do pai, não ocorrendo dispersão. Embora no seguinte trecho: "Each offspring replaces a parent and differs", Aguiar aponta para o fato da prole ocupar o lugar do pai.

Caso não haja reprodução, o patch transmuta-se (imita ou clona) para as características de um patch vizinho escolhido aleatoriamente. Em MA o agente transfere a chance de se reproduzir para um vizinho. Múltiplos indivíduos podem existir no mesmo local em MA. Em NM cada patch representa um indivíduo. A densidade populacional de MA é menor do que 1 indivíduo por site. A densidade é 1 indivíduo em NM. Os genomas do agentes consistem de cordas binárias de tamanho 125 em MA. NM consiste de valores arbitrários, assumidos no intervalo de 1 a 141.

Em MA o parâmetro Q determina a probabilidade de perder a chance de se reproduzir para um vizinho, escolhido aleatoriamente. NM não tem este contexto. Este parâmetro causa variação no número de prole de um indivíduo (Aguiar et al., 2009). Indivíduos de uma mesma espécie, definem-se pela proximidade genética e compatibilidade reprodutiva em MA. Em NM, há certa sobreposição de espécies no que se refere a compatibilidade reprodutiva. Caso o patch tenha valor de genoma numa das extremidades dos valores representativos da espécie, poderá ocorrer reprodução com uma espécie diferente (cruzamento interespecífico).

Em MA, espécies recém formadas são completamente separadas por restrições genéticas das espécies originais. Em NM, devido ao que descrevi acima, espécies recém formadas não são separadas reprodutivamente das espécies parentais. MA considera os agentes Haplóides e hermafroditas. NM atribui um número arbitrário para o genoma, não podendo determinar ploidia. Em NM não há qualquer forma de distinção de gênero. Portanto não podemos definí-los como hermafroditas, ou machos ou fêmeas. Embora, faz-se claro que todos têm o mesmo sexo e se reproduzem. Podemos então definí-los como homossexuais.

A distância genética entre os agentes do MA é a quantidade de diferenças genéticas no genoma. No NM, é a distância entre os valores assumidos no intervalo de 1 até 141. Para estar qualificado para a reprodução, o parceiro deve ter diferença genética menor do que o parâmetro G. Em NM o genoma do parceiro difere 10 unidades acima ou abaixo do pretendente. Havendo mais de um parceiro possível, é escolhido 1 aleatoriamente em MA. Em NM, a reprodução ocorre com o primeiro parceiro escolhido aleatoriamente, que obedeça as exigências de reprodução.

Para MA, se houver menos do que P possíveis parceiros, as limitações de reprodução (S e G) são atenuadas, i.e., permite-se maior S e G para um possível parceiro, até que algum parceiro seja eleito. Em NM, caso não se encontre parceiro, o Patch transmutar-se-á em um vizinho, escolhido aleatoriamente em seu entorno num raio de 1 unidade. O parâmetro Q determina a probabilidade de não reprodução do agente em MA. Para NM há probabilidade de não reprodução devida a distribuição aleatória dos genomas. Em determinados locais, toda a vizinhança será incompatível.

Em MA, quando o agente não se reproduz, um vizinho é escolhido aleatoriamente para tal. A prole oriunda deste novo agente, é posicionada no local do agente cedente⁹. Em NM o Patch que não se reproduz, não cede a vez para um vizinho escolhido aleatoriamente. Transforma-se numa cópia do vizinho. Age duplicando a chance deste vizinho se reproduzir¹⁰. A norma acima mantém a densidade populacional sob a capacidade suporte do ambiente no MA. Em NM, não há alteração de densidade populacional. Não há morte de Patches. Havendo prole, sempre de 1 indivíduo¹¹, esta ocupa o lugar do genitor, que morre.

Em MA, o parâmetro D controla a probabilidade de dispersão da prole. Não há dispersão de prole em NM. A prole é disposta em um dos 20 postos vizinhos, aleatoriamente, em MA. No NM, ocupa o lugar do genitor.

3.4.1.2 Versão para Defesa da Dissertação

Em nosso modelo (NM) os agentes distribuem-se aleatoriamente, no modelo de Aguiar (MA), os agentes distribuem-se uniformemente. Após a reprodução sexuada, MA apresenta cross over e dispersão da prole. Em NM a prole, filho único, ocupa o lugar do pai, ocorrendo dispersão em seguida.

Caso não haja reprodução, o patch transmuta-se (imita ou clona) para as características de um patch vizinho escolhido aleatoriamente. Em MA o agente transfere a chance de se reproduzir

⁹ Seria como o “Ricardão” tomar o lugar do indivíduo na reprodução. A prole ocupar o local do indivíduo cedente, é algo como ele criar os filhos de outros machos, vide *Cross-Fostering* ou *Step-Parent*.

¹⁰ Esta dinâmica é semelhante ao que Dawkins descreveu no livro *Gene Egoísta*. Onde genes impelem seus portadores a se reproduzir, ou caso impossível, a propiciar os parentes reproduzirem-se.

¹¹ É possível interpretar então, como um modelo de agentes dióicos, uma vez que um agente gera o descendente em seu próprio patch, tal como a fêmea. O outro agente, parceiro de reprodução, apenas participa com a informação genética, tal como o macho.

para um vizinho. É praticamente a mesma coisa, embora o vizinho não seja duplicado em MA. Múltiplos indivíduos podem existir no mesmo local em MA. Em NM cada patch representa um ou nenhum indivíduo.

Os genomas dos agentes consistem de cordas binárias de tamanho 125 em MA. NM consiste de valores inteiros, assumidos no intervalo de 1 a 141. Este parâmetro causa variação no número de prole de um indivíduo (Aguiar *et al.*, 2009). Em MA, espécies recém formadas são completamente separadas por restrições genéticas das espécies originais. Em NM, espécies recém formadas não são separadas reprodutivamente das espécies parentais. Preserva-se o mesmo aspecto do código da versão apresentada na qualificação.

A distância genética entre os agentes do MA é a quantidade de diferenças genéticas no genoma. No NM, é a distância entre os valores assumidos no intervalo de 1 até 141. Havendo mais de um parceiro possível, é escolhido 1 aleatoriamente em MA. Em NM, a reprodução ocorre com o primeiro parceiro escolhido aleatoriamente, que obedeça as exigências de reprodução. Para MA, se houver menos do que P possíveis parceiros, as limitações de reprodução (S e G) são atenuadas, i.e., permite-se maior S e G para um possível parceiro, até que algum parceiro seja eleito. Em NM, caso não se encontre parceiro, o Patch transmutar-se-á em um vizinho, escolhido aleatoriamente em seu entorno.

Em MA, quando o agente não se reproduz, um vizinho é escolhido aleatoriamente para tal. A prole oriunda deste novo agente, é posicionada no local do agente cedente¹². Em NM o Patch que não se reproduz, não cede a vez para um vizinho escolhido aleatoriamente.

¹² Seria como o “Ricardão” tomar o lugar do indivíduo na reprodução. A prole ocupar o local do indivíduo cedente, é algo como ele criar os filhos de outros machos, vide *Cross-Fostering* ou *Step-Parent*.

Transforma-se numa cópia do vizinho. Age duplicando a chance deste vizinho se reproduzir¹³. A norma acima mantém a densidade populacional sob a capacidade suporte do ambiente no MA. Em NM, não há alteração de densidade populacional. Havendo prole, sempre de 1 indivíduo¹⁴, esta ocupa o lugar do genitor, que morre. A prole é disposta em um dos 20 postos vizinhos, aleatoriamente, em MA. No NM, em um dos 8 postos vizinhos.

3.4.2 Similaridades entre os modelos

3.4.2.1 Versão Apresentada na Qualificação

As populações evoluem sob influência de reprodução, mutação e dispersão. Com relação à reprodução, os parceiros são escolhidos dentro de um entorno definido pelo parâmetro S e similaridade genética expressa por G . Então, reprodução sexuada com mutação ocorrem, fazendo com que a variação genética aumente ao longo do tempo. Com a ocorrência de especiação há diferenciação em coloração entre os indivíduos, de forma que diferentes espécies são coloridas diferentemente.

A reprodução começa com um indivíduo procurando por parceiros dentro de um entorno de raio S . A cada geração, cada indivíduo procura uma vez por parceiro. Cada reprodução é seguida de um cross-over. Há também a ocorrência de mutação: com probabilidade μ em MA e determinada pelo parâmetro M em NM. Finalmente, as reproduções são ditas assíncronas, uma vez que não há ciclos propícios para reprodução.

¹³ Esta dinâmica é semelhante ao que Dawkins descreveu no livro *Gene Egoísta*. Onde genes impõem seus portadores a se reproduzir, ou caso impossível, a propiciar os parentes reproduzirem-se.

¹⁴ É possível interpretar então, como um modelo de agentes dióicos, uma vez que um agente gera o descendente em seu próprio patch, tal como a fêmea. O outro agente, parceiro de reprodução, apenas participa com a informação genética, tal como o macho.

3.4.2.2 Versão para Defesa da Dissertação

As populações evoluem sob influência de reprodução, mutação e dispersão. Com relação à reprodução, os parceiros são escolhidos dentro de um entorno definido pelo parâmetro S e similaridade genética expressa por G . Para estar qualificado para a reprodução, o parceiro deve ter diferença genética menor do que o parâmetro G . Uma espécie define-se pela proximidade genética e compatibilidade reprodutiva. Embora há ocorrência de espécies em anel (Ring Species).¹⁵

Reprodução sexuada com mutação ocorrem, fazendo com que a variação genética aumente ao longo do tempo. Com a ocorrência de especiação há diferenciação em coloração entre os indivíduos, de forma que diferentes espécies são coloridas diferentemente. A reprodução começa com um indivíduo procurando por parceiros dentro de um entorno de raio S . A cada geração, cada indivíduo procura uma vez por parceiro. Cada reprodução é seguida de um cross-over. Há também a ocorrência de mutação: com probabilidade μ em MA e determinada pelos parâmetros M e A em NM .

As reproduções são ditas assíncronicas, uma vez que não há ciclos propícios para reprodução. O parâmetro Q determina a probabilidade de perder a chance de se reproduzir para um vizinho, escolhido aleatoriamente. Após a reprodução sexuada, há dispersão da prole. Os

¹⁵ Nesta situação, indivíduos conectados por fluxo gênico, mesmo que sejam incompatíveis sexualmente, são considerados a mesma espécie em anel (Aguilar novo). O fluxo gênico dar-se-á por meio de espécies intermediárias. Portanto consideraríamos duas espécies, tomando dois indivíduos espacialmente distantes, participantes do fluxo gênico. Uma vez que são reprodutivamente incompatíveis. Embora, ambos seriam uma única espécie, quando considerados membros da população participante do fluxo gênico. Ver item referente às espécies em anel.

agente são haplóides e hermafroditas. Há controle de dispersão da prole, por meio do parâmetro D em MAe o switch “migração” em NM.

4 Resultados e discussão

Esta sessão descreve uma análise geral dos parâmetros da versão final do modelo. Muito antes de determinar o conjunto completo como adequado, o que foi pretendido quando definimos o “Plano de Trabalho”, deparamo-nos com um modelo bastante amplo, com relação aos possíveis discernimentos oriundos de uma exploração minuciosa. Em paralelo, o tempo é restrito para tal pretensão.

Portanto, o que segue não é uma determinação do mais adequado, ou menos, no modelo. Sim uma singela exploração de algumas capacidades analíticas. Tentando, sempre que possível, lançar mão de análises que contemplem o máximo de panoramas gráficos em conjunto. Ao invés de interpretar um dado gráfico isoladamente.

Então, posto que a proposta é a apresentação para defesa da dissertação, faz-se satisfatória a versão que se conclui no prazo definido. Para orientação na sequência dos aspectos discutidos aqui, dever-se-á, preferencialmente, estar familiarizado com o a versão final do modelo. Alternativamente, poder-se-á guiar pela figura 13, onde há visualização de toda a interface do modelo, com seus respectivos comandos e representações gráficas. Cada sessão refere-se à exploração destes itens.

Segue.

Figura 13: Interface da última versão do modelo. Comandos e representações gráficas serão explorados nas seguintes sessões da dissertação.

4.1 Parâmetros

Salvo quando mencionado, todos os resultados gerados para as seções seguintes, assumem os seguintes valores fixos: $M = 0,05$; $ROzero = 0,20$; $Qzero = 0,3$ e $A = 3,00$; $geracoes = 50$; $G = 2,5$; $S = 3,0$; $reproducao = mean-diff$; $tipo\ mutacao = uniforme$; $migracao = on$ e $num-cores = 13$.

4.2 Reprodução

Testamos 3 diferentes formas de reprodução (ver sessão “Descrição do Nosso Modelo” sub item “Versão para defesa da Dissertação”). A reprodução “media” foi a ideia original, onde as flutuações do genótipo da prole tendem a ser anuladas e os resultantes das reproduções concentram-se no centro do histograma (figura 14)

Figura 14: Histograma. Número total de indivíduos para cada um dos possíveis valores de genótipos (Genoma). As cores no canto direito e referem-se as barras do gráfico e representam as espécies (genótipos). Prole concentrada no centro do histograma para reprodução “media”.

A reprodução “copy-neib” clona o parceiro reprodutivo escolhido segundo as orientações dos sliders S e G. Dessa forma cancela-se a tendência de anulação das diferenças e os genótipos da prole espalham-se ao longo do gradiente do Genoma (Figura 15).

Figura 15:Prole espalha-se ao longo do gradiente doGenoma para reprodução "copy-neib".

A última modalidade de reprodução, “mean-diff”, conserva as mutações dos agentes parentais, a prole resultante representa bemasflutuaçõesgenotípicas acumuladas. Resultam histogramas representativos dos mais amplos valores possíveis (Figura 16). Há geração mais diversificada de genótipos, inclusive comparando com a reprodução anterior .

Figura 16: Reprodução "mean-diff" acumula as diferenças dos agentes parentais resultando em proles com maior diversidade de genótipos.

A mais adequada das três seria a última modalidade. Isto porque a primeira age a cancelar a diversidade e a segunda representa uma dinâmica irreal de reprodução por clonagem. Seria adequado tratando-se de reproduções assexuadas, .eg., partenogênese. Um estudo com mais gerações poderia revelar novidades nas dinâmicas de especiação descritas acima. Para um futuro modelo, conciliar as três modalidades em uma só, conservaria o que há de útil em cada uma, sendo bastante interessante.

4.2.1 Simulações

Satisfeito o critério de geração de espécies, é interessante verificar diferenças na quantidade formada por cada modalidade de reprodução. Para isso realizamos um número satisfatório de simulações para cada categoria reprodutiva, a saber cinco. Todos os outros parâmetros fixos.

De acordo com o resultado, cada categoria gera quantidades distintas (ANOVA, um critério, $F = 1012.1498$; $(p) = 0.0000$). O ranking, em ordem crescente é “media”, “mean-diff” e “copy-neib”. O motivo é, como enfatizado anteriormente, a reprodução “media” anula flutuações genômicas. Os genótipos tendem a se concentrar nos valores do centro do histograma (Figura 14). Assim o número de espécies é restrito a este pequeno intervalo.

A segunda maior geração de espécies, reprodução “mean-diff”, conserva as flutuações parentais, ocupando as regiões extremas do histograma (Figura 16). Contudo tende a cancelar os genótipos que ocupariam o centro do histograma. Estas espécies não são representadas nessa modalidade de reprodução, o que representa um ponto fraco, embora as espécies discrepantes da população inicial são muito bem representadas. Esta característica é responsável pela vantagem de “mean-diff” com relação à “media”.

A modalidade que preserva as características vantajosas entre as formas anteriores de reprodução, é “copy-neib”. Não representa restritamente os genótipos da população inicial, concentrados no centro do histograma, tão pouco acumula flutuações excessivas, que ocupam os extremos (Figura 15). Todavia, espécies oriundas do acúmulo de mutações são representadas, tão bem como aquelas da população inicial. Por este motivo “copy-neib” gerou o maior número de espécies na comparação.

4.3 Tipo de mutação

O modelo conta com três tipos de mutação, a saber, “gaussiana”, “uniforme” e “binária”. Para escolher uma das três, usa-se o chooser “tipo-mutacao”. Ajustando-se para “gaussiana”, os agentes sofrem mutação com distribuição de probabilidade seguindo uma curva normal, com desvio padrão 0 até o valor especificado no slider “A”, que, segundo especifiquei acima, assume o valor 3.

A mutação “uniforme” permite os agentes assumirem modificações em seu genoma no intervalo de valores definidos por $-A$ até $+A$. Neste grupo “A” vale 3. Então o universo de valores de incremento/decréscimo no genoma da prole seria de -3 até $+3$. O último tipo, “binária”, assume os valores discretos de “A”. Neste caso -3 ou $+3$.

Um aspecto expressivo da comparação entre as diferentes modalidades de mutação, refere-se aos gráficos de taxa de especiação, i.e., número de espécies vs tempo. Com todos os outros parâmetros fixos, altera-se o tipo de mutação para gerar gráficos do número de espécies em função do tempo. Para mutação “uniforme”, aparentemente a taxa é constante (Figura 17).

Figura 17: Número simulados de espécies em função do tempo (iterações) para mutação "uniforme". O comportamento inicial do gráfico (50 gerações) é relativamente constante.

Já para “gaussiana” e “binária” o comportamento é crescente e tende a um estado estacionário (Figura 18 e 19). Reproduz-se a dinâmica de geração de espécies elucidada pelo modelo de Aguiar, conforme demonstramos na figura 9.

Figura 18: O mesmo do gráfico anterior para mutação "gaussiana". Vê-se taxa crescente de número de espécies, tendendo ao estado estacionário.

Figura 19: Mutação "binária". Repete a tendência do gráfico anterior.

Estes comportamentos gráficos estão de acordos com os valores médios de formação de espécies comparados estatisticamente (vide próxima seção). A mutação uniforme, por ter taxa constante de formação de espécies, gerou o menor número de genótipos com relação as outras duas modalidades.

O motivo para isso é que a modalidade “uniforme” representa um intervalo de números reais que ora contribuem para a geração de variabilidade (gera incrementos no genoma), ora para a redução de variabilidade (gera decréscimos no genoma). Assim a taxa de formação de espécies vs tempo é constante e o número de espécies é o menor do grupo (próxima seção).

Já “gaussiana” e “binária” geram montantes de valores positivos ou negativos para os genótipos. Assim forma-se espécies, em taxa crescente, tanto acima dos valores da população inicial, quanto abaixo (Figuras 14, 15 e 16). Acréscimos constantes ao genótipo são gerados optando-se por “gaussiana”. Já “binária” gera genótipos com valores acrescidos (mutações de valores positivos) e também com valores decrescidos (mutações de valores negativos).

4.3.1 Simulações

Para os parâmetros acima especificados, realizamos 5 simulações com cada tipo de mutação. Como esta age no valor real do genoma da prole, alterando-o, o resultado mais característico da diferença entre as modalidades de mutação seria o número de espécies formado. Comparamos as médias dos resultados e, em seguida, verificamos a existência de diferença significativa entre os valores (Teste ANOVA). Estatisticamente, as mutações “gaussiana” e “binária” geram números de espécies iguais ($F = 46.2322$; $(p) = 0.0000$). Já a mutação “uniforme” diferiu, gerando menos espécies ($F = 46.2322$; $(p) = 0.0000$).

A justificativa reside nas pequenas variações no gradiente do genoma, assumidos pelos valores de mutação no intervalo de -3 a +3 (mutação “uniforme”), que não configuram novas espécies, por não interromper o fluxo gênico entre os indivíduos prole. Consistem de espécies emanel (Ver sessão “Espécies em Anel”).

Já as outras modalidades, que geram valores mais extremos, dentro de intervalos maiores, resultam em proles com genomas diversos, isoladas reprodutivamente. Logo, a contagem de espécies é maior.

4.4 Migração

Para testar o papel da mobilidade na especiação incluiu-se o switch “migração”. Alguns trabalhos apontam que a possibilidade de locomoção de agentes influi diretamente na taxa de extinção e diversidade de espécies, tanto para pesquisas com modelagem quanto para replicações em organismos vivos (Kerr et al.; 2002).

A ideia é que, com possibilidade de dispersão, a incidência de extinção de espécies é maior. Quando a atuação dos agentes é circunscrita a uma vizinhança reduzida, a manutenção da diversidade é mais eficiente.

Posteriormente neste trabalho iremos discutir a replicação deste panorama com o presente modelo. Isto inclusive sendo a tendência principal encontrada em qualquer combinação de parâmetros, i.e., alta taxa de espécies para pequenos valores; uma, ou poucas, espécie conforme se aumenta os valores¹⁶.

¹⁶ Parâmetros relacionados à distância de atuação dos agentes ou número de agentes em interação.

Então “migração” possibilita o agente que se reproduziu, deslocar-se de seu atual patch, para um vizinho, aleatoriamente definido de acordo com uma distância espacial máxima permitida (slider “S”) e a necessidade de localizar um espaço vazio nessa redondeza, ou ausência de genoma no patch. Obedecida estas condições o agente migra. Caso contrário, permanece no mesmo lugar. Testamos como a possibilidade de migrar influencia a taxa de especiação.

4.4.1 Simulações

Comparamos a geração de espécies para o modelo com agentes nômades (migrantes) e sedentários (fixos). Isto pareceu interessante frente ao aspecto distinto do gráfico do número de espécies pelo tempo (número de iterações). A presença de mobilidade faz pensar maior especiação através das gerações (Figura20).

Figura 20: Número simulado de espécies pelo tempo (iterações). A) Agentes sedentários. Número de espécies atinge estado estacionário. B) Agentes nômades. Não apresenta estado estacionário para a quantidade de gerações.

Este panorama gráfico está de acordo com as concepções de manutenção da biodiversidade com diminuição da área de atuação dos agentes (Kerr et al., 2002), i.e., com agentes sedentários, o número de espécies não oscila ao longo das gerações (Figura 20 A). Enquanto com agentes nômades, com maior área de atuação, o número de espécies varia notavelmente ao longo das iterações (Figura 20 B).

Em um estudo onde colônias de microorganismos foram cultivados em locais fixos, houve manutenção da biodiversidade. Enquanto colônias que ora ocupavam um local, ora outro, apresentaram extinção de espécies (Kerr et al., 2002). Estes resultados foram obtidos tanto em simulações quanto em organismos in vivo (Figura 21 e 22).

Figura 21: Resultado da simulação baseada em agentes para três tipos de bactérias: C, S e R. A quantidade de bactérias (Log (abundance)) está em função do tempo (Time). c) Restringe-se a área de atuação dos agentes a uma vizinhança próxima (Local neighbourhood). Não há extinção para as gerações simuladas. d) Os agentes atuam em todo o grid. Os tipos C e S extinguem-se. Extraído de doi:10.1038/nature00823, figura 1.

Figura 22: Resultados do experimento *in vivo* para três tipos de bactérias: C, S e R. A quantidade de bactérias (Log (abundance)) está em função do tempo (Generations). a) Colônias estáticas (Static Plate) não apresentaram extinção. b e c) Mover a cultura ou renová-la continuamente (Flask e Mixed Plate), representando aumento da área de atuação e interação dos microorganismos, resultou em extinção das espécies C e S. Extraído de doi:10.1038/nature00823, figura2.

4.5 Influência de diferentes mutações

Como discutido no item referente as mutações, as modalidades “binária” e “gaussiana” geraram mais espécies que “uniforme”. Vale lembrar que, quando não mencionado, estamos usando mutação “uniforme”. Este foi o caso quando comparamos agentes nômades com sedentários.

Agora, será que combinar mutação “binária” com agentes nômades e sedentários, anularia a diferença da comparação? Ou seja, haveria algum fator que tornaria a mobilidade dos agentes desprezível quando nos referimos à especiação? Esse fator poderia ser a taxa de modificação dos genótipos, ou o tipo de mutação?

Para avaliar esta situação comparamos agentes sedentários com nômades, sofrendo mutação “binária”. Para dez rodadas do programa o resultado foi que a taxa de mutação tem primazia no número de espécies formadas. Mais do que a possibilidade de migração. Não houve diferença estatística no número de espécies formadas entre agentes nômades vs sedentários (Anova (um critério) $F = 26.539$; $(p) = 0.1174$).

Para confirmar a hegemonia da taxa de mutação, comparamos agora agentes nomades vs sedentários para mutação “uniforme” (a de menor taxa de especiação). Neste panorama a possibilidade de migrar torna-se mais importante do que a modalidade de mutação. De forma que nas simulações com agentes nômades gerou-se maior número de espécies (Anova (um critério) $F = 9.5891$; $(p) = 0.0063$). Nas sessões acima, “Migração” e “Simulações”, já tínhamos este

apontamento. Com este resultado estatístico, reafirmamos. Comparamos também mutação “binária” vs “uniforme”, combinando diferentes mutações com a possibilidade ou impedimento de migrar. Lançando especulações com o que já foi discutido até aqui, agentes nomades gerariam menor número de espécies. Combinando-os com mutação “uniforme” (estatisticamente menor especiação do que “binária”), teríamos menores taxas de especiação do que qualquer outras combinações.

Porém não foi isso que aconteceu. Em cinco repetições de cada combinação, mutações “uniforme” e “binária” com migração e não migração, apenas mutação “uniforme” sem migração e mutação “binária” com migração diferiram estatisticamente (ANOVA de Friedman $p = 0,018$). Sendo a primeira menor que a última. Não houve diferença entre os grupos restantes (Figura 23). A média dos grupos foi a seguinte $A = 628,8$, $B = 759,8$, $C = 860,4$ e $D = 1000,4$ (Figura 23).

Sem migração		Migração
"uniforme" A	"binaria" B	
$p > 0,05$	$p > 0,05$	"uniforme" C
$p < 0,05$	$p > 0,05$	"binaria" D

Figura 23: Resultados estatísticos para diferentes combinações de mutação e migração.

É importante frisar que o interessante nestes números não reside no resultado estatístico significativo acima mencionado, mas sim na ausência de diferença estatística entre as combinações “sem migração” “binaria” vs “com migração” “uniforme”. Isto porque, de acordo com os comentários relativos às modalidades de mutação, “binaria” gera mais espécies que “uniforme”. O que está de acordo com o resultado estatístico significativo, i.e., $p < 0,05$ (Figura 23). Contudo, a adição do parâmetro migração, torna “binaria” estatisticamente igual a “uniforme” (Figura 23).

Previsivelmente, a combinação de mutação “uniforme”, que gera menos espécies, com o fator migração, que tende a aumentar a extinção (Kerr et al., 2002), deveria resultar no menor número de espécies do quadro.

4.6 Espécies em anel

A possibilidade de fluxo de genes entre indivíduos isolados reprodutivamente, torna a definição de espécies um tanto complicada. Uma espécie é uma população de organismos que podem trocar genes por meio de cruzamentos e são reprodutivamente isolados de outras populações desse tipo por diferenças biológicas que reduzem ou impedem a troca de genes (Futuyma, 2002). Levando em consideração dois indivíduos isolados reprodutivamente, temos duas espécies por definição. Contudo eles podem estar trocando genes por meio de uma cadeia de indivíduos compatíveis reprodutivamente, que portam os genes de ambas espécies. Este é o conceito de espécies em anel. Uma cadeia de fluxo gênico entre indivíduos que possivelmente estariam isolados reprodutivamente.

Em outras palavras, variantes da espécie de ambos indivíduos, i.e., subespécies, compatíveis reprodutivamente, estariam transportando genes de uma espécie a outra. Até onde conheço, Aguiar e colegas dedicaram dois trabalhos elucidando este fenômeno (Aguiar et al., 2009; Martins et al., 2013). Neles as simulações ilustram como se dá a formação de espécies em anel e do corredor de fluxo gênico (Figura 24).

Figura 24: Formação de espécies em anel e corredor de fluxo gênico. As cores representam a distância genética (“Genetic Distance”) de um indivíduo de referência, aleatoriamente escolhido (pequena estrela preta na parte superior do quadro). Alternativamente, seriam indicativos de espécies distintas. O espaço branco é uma barreira geográfica. Extraído de: www.pnas.org/cgi/content/short/1217034110; Figura 1A.

A abordagem é sem dúvida uma novidade ao conceito de espécies. Contudo ela vem para suprir uma contradição oriunda da dinâmica do modelo de formação de espécies. Olhando para dois agentes, separados reprodutivamente, definimo-los como diferentes espécies. Adicionando outros agentes, podemos colocar em questão esta separação de espécies e impedimento de fluxo gênico. Pois pode haver troca indireta de genes, logo, por definição serem uma só espécie, mesmo isolados reprodutivamente. Contudo são, estritamente, duas espécies.

Considerar um sistema de agentes transmitindo genes, ao invés de um par de agentes, evidencia a insuficiência da definição tradicional de espécie. O conceito de espécies em anel define de forma mais abrangente. Em nosso modelo, conseguimos obter a formação de espécies

em anel (Figura 25A). Obtivemos um corredor de fluxo gênico de espécies relacionadas, embora, no sentido da definição clássica, são espécies diferentes (Figura 25B). As combinações de parâmetros para esta formação são inúmeros (Figura 25C). Cabe um estudo aprofundado das condições propícias para este fenômeno.

Indivíduos com incompatibilidade reprodutiva, estão trocando genes por meio de suas proles e subespécies. Pode-se determinar a comunidade ecológica em questão como portadora de fluxo gênico.

Nas arestas do grid (treliça) há intersecção horizontal e vertical, de forma que o mundo tem forma de torus. Populações de agentes que aparecem em um extremo, estão próximos, ou em contato direto, com agentes do lado oposto. Usando a terminologia de Aguiar e colegas (Martins et al., 2013), área de contato secundário (ACS) é onde os agentes de uma ramificação do corredor de fluxo gênico, encontram os agentes da outra ramificação do corredor (Figura 26). Em outras palavras, onde fecha o anel de fluxo gênico.

Em nosso modelo, devido ao formato torus do grid, a população de um extremo encerra-se com a população do outro, formando um anel (Figura 25 A). Em algum ponto deste anel, situa-se a ACS do nosso modelo. Todavia não pensamos ser importante para a presente dissertação o mapeamento deste ponto.

Figura 25: Representação de espécies em anel em nosso modelo. A) Mundo (Treliça) de agentes. Seta amarela mostrando o corredor de possível fluxo gênico entre diferentes espécies, d´outra forma isoladas reprodutivamente. B) Histograma de genoma. Setas verdes indicam populações com distintos genótipos (espécies distintas), coradas em vermelho para representar fluxo gênico. C) Valores paramétricos do panorama.

Figura 26: Movimento de formação de espécies em anel. População de origem expande-se, criando duas ramificações e circundando a barreira geográfica . O encontro se dá na *área do contato secundário*(ACS). Extraído de www.pnas.org/cgi/doi/10.1073/pnas.1217034110. Figura 3.

4.7 Nova possibilidade para a evolução de espécies sem competição ou seleção natural.

Em seu modelo, Aguiar (Aguiar et al., 2009) elucida especiação sem obrigatoriedade de seleção natural. Acredito que é possível estender ainda mais o leque de repercussões que o modelo de evolução de agentes reflete. Refutar a seleção natural, uma vez que especiação pode emergir a partir de mudanças aleatórias acumuladas com as gerações, é uma repercussão da dinâmica do modelo. Agora, ao meu ver, seria possível descartar também a necessidade de competição entre espécies. Processo necessário para gerar o sucesso reprodutivo de uma vencedora, em detrimento de outra derrotada, na batalha pela sobrevivência.

Este aspecto fica evidente avaliando-se uma das formas de geração de espécies no modelo, a saber, por fissão (Aguiar et al., 2009), ou splitting. Neste, uma grande espécie divide-se

em outras menores, conforme discutirei abaixo. Já é senso que ter vantagem competitiva propriamente não gera o sucesso evolutivo, ou fitness (valor adaptativo). Este vem de sucesso reprodutivo, i.e., maior número de prole que sobrevive até a idade reprodutiva.

Implícito neste raciocínio, porém não admitido, é a irrelevância da vantagem competitiva. Ora, se alguém está vencendo uma competição, não necessariamente está copulando para gerar prole. Embora quem não está competindo, pode estar gastando seu tempo com reprodução. Nesse contexto, ganhar ou perder a competição é irrisório. Dado, é claro, seja possível a ocorrência de cópula independente de vitória competitiva.

É evidente, em nosso modelo de especiação, que dinâmicas simples como pareamento de agentes, geração de prole e acúmulo de mutações aleatórias são dinâmicas suficientes para gerar evolução de agentes por meio de especiação, i.e., origem de novas espécies e extinção de antigas. Tão bem como extinção de espécies recentes e preservação de antigas.

A peça chave oriunda de nosso modelo, e de outros (Kerr et al., 2002; Deffuant, 2006; Aguiar et al., 2009; Araujo e Aguiar, 2012; Martins et al., 2013; Baptestini e Aguiar, 2014), para se entender refutabilidade da competição para a origem de novas espécies, é perceber que a morte de uma espécie não se dá pela derrota por outra espécie. Mas sim da seguinte forma: dois indivíduo, geneticamente relacionados e compatíveis reprodutivamente, acumularam mudanças em seus genótipos. Estas, quando representadas na prole, podem resultar em novas espécies. Com o passar das gerações, há momentos sem especiação. Mas com acúmulo de mudanças, qualquer reprodução entre dois agentes, inevitavelmente resultará em uma nova espécie.

Neste momento a tendência é que muitos cruzamentos, ou a maioria deles, resultem em novas espécies. A densidade destas aumenta. Passam a ser muito comuns. As espécies paternas surgem cada vez menos nos cruzamentos, representando cada vez menos as espécies no grid, até se extinguirem.

Assim descrevi uma dinâmica encontrada em nosso modelo, e em outros (Kerr et al., 2002; Deffuant, 2006; Aguiar et al., 2009; Araujo e Aguiar, 2012; Martins et al., 2013; Baptestini e Aguiar, 2014), de origem e extinção de espécies, sem necessidade de competição. Até mesmo torna a dinâmica de competição desprezível. A figura 27 ilustra a sucessão de espécies acima descrita. As barras coloridas nos histogramas, representam espécies que surgem (especiação) e desaparecem (extinção). Cada barra com novo genótipo é uma especiação e o desaparecimento representa extinção.

Figura 27: Instantes da simulação de 25 gerações de agentes em especiação. De A até E) representação bidimensional do Grid, em formato de torus, de 129 x 129 células (esquerda) e Histograma de quantidade de indivíduos para cada valor de genótipo. O grid representa a posição espacial das espécies. O Histograma, o valor do genótipo. As cores representam diferentes espécies. A cada imagem (A até E), novas espécies surgem e se extinguem unicamente por processos estocásticos (ver texto).

F) Parâmetros para a dinâmica representada.

4.8 Distribuição de abundância de espécies.

Em um trabalho de 2001, Hubbell dedica um capítulo inteiro, e boa parte dos restantes, para tratar sobre distribuição de abundância de espécies. Este termo refere-se à abundância ou raridade de determinadas espécies em uma amostragem. É amplamente referido em estudos ecológicos para discutir suas causas.

O importante para a discussão é o tópico referente à distribuição lognormal. Em uma determinada amostragem, conforme o tamanho da amostra aumenta, uma distribuição lognormal revela-se (Stephen e Hubbell, 2001). Uma “veil line” move-se para a esquerda até o limiar de um indivíduo por espécie (Figura 28).

Figura 28: Gráfico de abundância relativa de espécies. O número de espécies está relacionado à abundância absoluta. Conforme aumenta-se a amostra, a "veil line" move-se para a esquerda. O limiar reside em um indivíduo por espécie, o menor valor representativo de uma amostragem. Extraído de (Hubell) Figura 2.3.

A figura 29 representa três temporadas de amostragem. Possivelmente, dispôs-se de maiores amostras com maior período de coleta.

Figura 29: Extendendo a amostragem para maiores durações a distribuição de indivíduos por espécie torna-se lognormal. Extraído de (Hubell) Figura 2.4.

Em nosso modelo este panorama é reproduzido. Conforme aumentamos o número de agentes no grid, representando aumento do tamanho da amostra, o gráfico de distribuição de abundância vai tomando cada vez mais o perfil de uma distribuição lognormal (Figura30).

Figura 30: Com o aumentando a densidade populacional, representando amostragem cada vez maior, o gráfico de distribuição de espécies toma a forma lognormal.. Este aumento se dá através do slider ROzero. Neste caso, ROzero= 0,03; 0,09; 0,15; 0,20 e 0,30 da esquerda para direita e de cima para baixo, respectivamente. Todos outros parâmetros constantes.

5 Conclusão

5.1 Comportamento geral do modelo para os parâmetros “G” e “S”

A característica robusta, e mais representativa, do modelo em questão é um fator que legitimamos desde as primeiras observações do grid, com diferentes valores de “G” e “S”, nas versões iniciais apresentadas na qualificação. Aumentando os valores de “G” e “S”, reduz-se o número de espécies resultante.

O modelo de Aguiar e colegas (Aguiar et al., 2009) foi preferencial para este modelo. No princípio, o aspecto mais clara da publicação eram as orientações de proximidade espacial (“S”) e proximidade genética (“G”), orientando o comportamento dos agentes em busca de parceiros reprodutivos. Sem delongas, as quatro primeiras versões do presente modelo, tinham muito bem definidas a dinâmica dos agentes por meio destes parâmetros. Embora outros parâmetros importantes, presentes em nossas últimas versões, não estavam nas primeiras versões (vide seção referente à discriminação da mais recente versão para outros parâmetros).

Não obstante isto pareça prejudicar a representatividade dos modelos iniciais para a dinâmica de evolução de espécies, surpreendente foi o panorama oriundo da sofisticação com parâmetros mais similares aos do trabalho de Aguiar. A saber, a tendência de especiação maior para menores valores de “G” e “S”, e a concomitante redução de especiação para valores subsequentes cada vez maiores.

Enfim, as possibilidades de combinações entre os parâmetros G , S , RO_{zero} , Q_{zero} , M e A são inúmeras. Mais tempo seria preciso para delinear melhor a dinâmica de todas as combinações possíveis. A princípio, diríamos que se encontrará a tendência acima descrita e graficamente representada (Figura 31) para, se não todas, boa parte dos valores conjugados. Devido à capacidade computacional limitada, não testamos essas combinações. Mas esgotamos boa parte delas em inúmeras rodadas simuladas durante o desenvolvimento dos resultados e discussão. E o panorama geral é robusto e muito similar à figura 31.

Figura 31: Especiação regida pelos sliders “G” e “S”.

Qualitativamente, os menores valores de “G” e “S” representam maior número de espécies. Com progressivos aumentos, atinge-se o limiar de uma única espécie resultante da simulação (tons escuros de azul). Progressivas reduções, resultam no limite de uma espécie por célula (patch) disponível (tons escuros de marrom).

Esta tendência qualitativa robusta é encontrada para variações quaisquer nos outros parâmetros restantes, e.g., A, M, Qzero e ROzero. Alterar-se-á os valores iniciais e finais de “G” e “S”, mas a representação gráfica permanecerá similar ao mapa acima.

Achados similares encontram-se em outros trabalhos com grid de agentes, e.g., veja figuras 7,12 e 32 e também (Kerr et al., 2002; Aguiar et al., 2009). No trabalho de Kerr e colegas, os agentes representavam bactérias. A combinação de dois parâmetros resultou em perda de

diversidade (menores valores) e coexistência (maiores valores) (Figura 32). De forma similar ao nosso modelo, os parâmetros regiam o comportamento de interação entre os agentes.

Em nosso modelo, enfatizamos a dinâmica de especiação na figura 31. Não falamos de Coexistência ou perda e diversidade— “Coexistence” ou “Loss of diversity”, de acordo com a figura 32 . Contudo, vale lembrar que altas taxas de especiação também representam altas taxas de extinção. De forma que simulações com alta rotatividade de espécies, geram muitas espécies novas, mas também interrompem muitas espécies antigas. O ambiente propício para especiação, é também propício à extinção. Medindo-se as taxas de extinção, ao invés de especiação, ter-se-ia perda de diversidade.

Invertidamente, regiões simuladas com manutenção de uma, ou poucas espécies, são ambientes de baixa especiação, todavia ambientes propícios à coexistência, uma vez que não há eliminação ou desaparecimento de espécies. Dessa forma podemos comparar a figura 31 e 32, observando a mesma tendência de rotatividade de espécies para valores pequenos dos parâmetros e estagnação tanto de surgimento quanto desaparecimento, para valores maiores.

Figura 32: Simulação baseada em agentes para diversidade de bactérias (citar Kerr). Combinação dos parâmetros do modelo segue tendência similar a figura 31. Extraído de doi:10.1038/nature00823, figura 1e.

6 Bibliografia

- AGUIAR, M. A. M. D. et al. Global patterns of speciation and diversity. **Nature**, v. 460, n. 7253, p. 384, 2009. ISSN 0028-0836.
- ARAUJO, S. B. L.; AGUIAR, M. A. M. D. O PAPEL DO ESPAÇO EM MODELOS ECOLÓGICOS. **Oecologia Australis**, v. 16, n. 1, p. 117-126, 2012. ISSN 2177-6199.
- BAPTESTINI, E. M.; AGUIAR, M. A. M. D. especiação espontânea em populações espacialmente distribuídas e padrões de diversidade.pdf. **Ciência & Ambiente**, v. Julho/Dezembro 2009, p. 85-94, 2009. Disponível em: < https://docs.google.com/a/estadao.com.br/file/d/0B_NS9RnlgG3McTJSYjhWQXBwMEU/edit >.
- DAWKINS, R. **O Gene Egoísta**. 2 nd. New York: 1989.
- DEFFUANT, G. Comparing Extremism Propagation Patterns in Continuous Opinion Models. **Journal of Artificial Societies & Social Simulation**, v. 9, n. 3, 2006. ISSN 1460-7425.
- DURAN JUNIOR, L. J. **Análise do surgimento de polos de ocupação urbana à ótica de Sistemas Complexos**. Universidade de São Paulo, Escola de Artes Ciências e Humanidades. São Paulo, p. 130. 2012.
- FUTUYMA, D. J. **Evolução, ciência e sociedade**. São Paulo: São Paulo Sociedade Brasileira de Genética, 2002.
- GUIMARÃES, M. **Biodiversidade sem fronteiras**. Pesquisa Fapesp. São Paulo 2009.
- JOHN, H. M.; MILLER, J. H. **Complex adaptive systems an introduction to computational models of social life**. Princeton, N.J: Princeton, N.J. Princeton University Press, 2007.
- KERR, B. et al. Local dispersal promotes biodiversity in a real-life game of rock-paper- scissors. **Nature**, v. 418, n. 6894, p. 171,2002. ISSN 0028-0836.
- MARTINS, A. B. et al. Evolution and stability of ring species. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, v. 110, n. 13, p. 5080, 2013. ISSN 0027-8424.
- MITCHELL, M. **Complexity a guided tour**. Oxford [England] New York: Oxford England Oxford University Press New York, 2009.
- MITCHELL, M. **Complexity Explorer**. INSTITUTE, S. F. <http://www.complexityexplorer.org/> 2013.
- ROSINDELL, J.; HUBBELL, S. P.; ETIENNE, R. S. The Unified Neutral Theory of Biodiversity and Biogeography at Age Ten. **Trends in Ecology & Evolution**, v. 26, n. 7, p. 340-348, 2011. ISSN 0169-5347.
- SANTOS, B. V. **Impacto de diferentes regras de seleção de assunto sobre variante cultural**. UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, ESCOLA DE ARTES,. São Paulo, p. 50. 2012.
- STEPHEN, P. H.; HUBBELL, S. P. **The unified neutral theory of biodiversity and biogeography**. Princeton: Princeton : Princeton University Press, 2001.
- STEVEN, F. R.; RAILSBACK, S. F. **Agent-based and individual-based modeling a practical introduction**. Princeton: Princeton Princeton University Press, 2012.
- WEAVER, W. SCIENCE AND COMPLEXITY. **American Scientist**, v. 36, n. 4, p. 536-544, 1948. ISSN 00030996.