

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA E INFORMÁTICA

MODELOS DE ECOSSISTEMAS COM INTERAÇÕES NÃO
LINEARES

Danielle Oliveira Costa Santos

*Dissertação apresentada ao Instituto de Física
de São Carlos, Universidade de São
Paulo, para a obtenção do título de Mestre
em Ciências: Física Básica*

USP/IFSC/SBI



8-2-001614

Orientador: *Prof. Dr. José Fernando Fontanari*

São Carlos

2004

IFSC-USP SERVIÇO DE BIBLIOTECA
INFORMAÇÃO

UFSC SBI
CLASS.....
CUTTER.....
TOMBO 1617

Santos, Danielle Oliveira Costa

“Modelos de Ecossistemas com Interações Não Lineares”
Danielle Oliveira Costa Santos – São Carlos, 2004

Dissertação (Mestrado) – Área de Física da Universidade de São Paulo,
2004 - Páginas: 86

Orientador: Prof. Dr. José Fernando Fontanari

1. Ecossistemas; Vidro de Spin, Regra de Hebb Não Linear

I. Título



**IFSC UNIVERSIDADE
DE SÃO PAULO**
Instituto de Física de São Carlos

Caixa Postal 369
13560-970 São Carlos, SP
Av. Trabalhador São-carlense, 400,
13566-590 São Carlos, SP

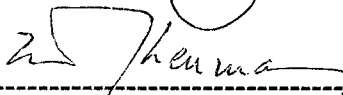
Fone/Fax 16 3373 9777
www.if.sc.usp.br
wladerez@if.sc.usp.br

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE DANIELLE OLIVEIRA COSTA SANTOS , APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 24/09/2004.

COMISSÃO JULGADORA:



Prof. Dr. José Fernando Fontanari (Orientador) – IFSC/USP



Prof. Dr. Walter Karl Theumann - UFRGS



Prof. Dr. Carlos Seihiti Orii Yokoi – IF/USP

Sentado ao pé do fogo eu penso
em tudo o que já vi,
flores do prado e borboletas,
verões que já vivi;

As teias e as folhas amarelas
de outonos de outros dias,
com névoa e sol pela manhã,
no rosto as auras frias.

Sentado ao pé do fogo eu penso
no mundo que há de ser
com inverno sem primavera
que um dia hei de ver.

Porque há tanta coisa ainda
que nunca vi de frente;
em cada bosque, em cada fonte
há um verde diferente.

Sentado ao pé do fogo eu penso
em gente que se desfez,
e em gente que vai ver o mundo
que eu nunca verei.

Mas enquanto sentado penso
em tanta coisa que se foi,
atento espero pés voltando
e vozes junto à porta.

J. R. R. Tolkien

Para minha família querida.

Para Adriano.

iii

SERVIÇO DE BIBLIOTECA
SERVIÇO DE BIBLIOTECA

Este trabalho foi financiado pela CAPES.

A g r a d e c i m e n t o s

- Ao professor Fontanari pela orientação e por ter me permitido conhecer um pouco da Ecologia.
- Ao professor Edvaldo Nogueira, à sua esposa Iris, à Camila e Leonardo. Não tenho como agradecer por toda assistência e atenção fundamentais nos meus primeiros dias em São Carlos e pela amizade.
- Aos colegas Colato, Giovano e Leonardo por toda gentileza, presteza e generosidade. Agradeço também aos colegas Ernani e Anderson.
- A Paulo Campos, Viviane Moraes e Alexandre Rosas pela atenção.
- Cristina, muito obrigada pela gentileza e sobretudo eficiência.
- A Wladerez e Cristiane, muito obrigada por tudo, pela paciência, delicadeza, competência e pela disposição para resolver os maiores pepinos.
- A todos os funcionários da portaria, Dona Teresa em especial. Obrigada pelos sorrisos!
- A todos os funcionários da biblioteca.
- Agradeço a Dona Gessy, ao Sr. Antônio e a toda sua família pelas portas abertas e por falarem do nosso Recôncavo com tanto lirismo.
- Karina, obrigada pela companhia, pelas orações e pelas risadas.
- Fred, muito obrigada por ter me ajudado a enxergar o mundo com novos olhos. Minha saúde hoje em dia se deve grandemente a você.
- Minha querida mãe Jacy, meu querido pai Luiz e meus dois amores Marcel e Kleyton, não tenho palavras para agradecer por tanto amor. Obrigada pelo suporte sob todos os aspectos.
- Adriano, você sempre foi um exemplo. Primeiro pela determinação e valentia nesses últimos dois anos e agora pela vontade de semear o amor pela ciência por todo o canto, sem distinção de sexo, posição social, cor da pele e região de origem. Você me inspira e me leva a ter esperança.
- Obrigada São Carlos!

Conteúdo

1	Introdução	1
2	Breve Introdução aos Sistemas Desordenados	6
2.1	Definindo e caracterizando o comportamento vidro de spin	7
2.2	Modelos de vidro de spin	7
2.3	Médias sobre a desordem	9
2.3.1	Desordem finita	10
2.3.2	Desordem proporcional ao tamanho do sistema	11
3	Modelos de Ecossistemas	13
3.1	Dinâmica de replicadores	14
3.2	Interações	16
3.2.1	Interações aleatórias gaussianas	16
3.2.2	Interações de Hebb	16
3.2.3	Interações não lineares	18
4	Interações Não Lineares: p extensivo	22
4.1	Energia livre	23
4.2	Hipótese de simetria de réplicas	28
4.3	Limite de baixa temperatura	30
4.4	Distribuição cumulativa	32
5	Funções Não Lineares	35
5.1	Filtros	35
5.2	Interações em três níveis	44
5.3	Linearidade e saturação	49
5.4	Comparando funções não lineares	54

6 Conclusão	58
A Demonstração da Propriedade de Sompolinsky	61
B Interações Não Lineares: p finito	66
B.1 Energia livre	66
B.2 Limite de baixa temperatura	70
Bibliografia	73

Lista de Figuras

2.1	Exemplo de sistema frustrado: os sinais correspondem à natureza das interações. O spin em A deve apontar para cima ou para baixo?	8
3.1	Diversidade no equilíbrio do modelo de replicadores aleatórios.	21
3.2	Diversidade no equilíbrio do modelo de replicadores com interações de Hebb. Em preto $\alpha = 0.6$ e em vermelho $\alpha = 1.0$	21
4.1	Energia livre média por espécie do modelo de replicadores aleatórios.	34
4.2	Energia livre média por espécie do modelo com interações de Hebb. Em preto $\alpha = 0.6$ e em vermelho $\alpha = 1.0$	34
5.1	Filtro passa baixa.	36
5.2	Filtro passa alta.	36
5.3	Variância em função de θ dos filtros. Os valores de α estão indicados.	38
5.4	Diversidade em função de θ para diversos valores de α e $u=0.5$. Esquerda: filtro passa baixa. Direita: filtro passa alta.	39
5.5	Diversidade em função de α para alguns valores de θ e $u=0.5$. Esquerda: filtro passa baixa. Direita: filtro passa alta. Em preto o caso linear.	39
5.6	Índice de Simpson em função de u para o filtro passa baixa com alguns valores de θ indicados e $\alpha= 0.2$ (acima), 0.4 (meio), 1.0 (abaixo). Em preto o caso linear.	40
5.7	Índice de Simpson em função de u para o filtro passa alta com alguns valores de θ indicados e $\alpha= 0.2$ (acima), 0.4 (meio), 1.0 (abaixo). Em preto o caso linear.	41

5.8	Descontinuidade da diversidade em função de u para $\alpha < 1/2$, com $\alpha = 0.2$ (esquerda), 0.4 (direita). Valores de θ indicados. Acima: filtro passa baixa. Abaixo: filtro passa alta. Em preto o caso linear.	42
5.9	Distribuição cumulativa para $\alpha = 0.2$ (esquerda), 1.0 (direita), $\theta = 1.0$ e para alguns valores de u indicados. Acima: filtro passa baixa. Abaixo: filtro passa alta.	43
5.10	Interação em três níveis.	44
5.11	Variância em função de θ da interação em três níveis. Os valores de α estão indicados.	45
5.12	Diversidade em função de θ da interação em três níveis para diversos valores de α e $u = 0.5$	46
5.13	Diversidade em função de α da interação em três níveis para diversos valores de θ e $u = 0.5$. Caso linear em preto.	46
5.14	Índice de Simpson em função de u da interação em três níveis para alguns valores de θ e $\alpha = 0.2$ (acima), 0.4 (meio), 1.0 (abaixo). Em preto o caso linear.	47
5.15	Distribuição cumulativa da interação em três níveis para $\alpha = 0.2$ (acima), 1.0 (abaixo) e $\theta = 1.0$	48
5.16	Linearidade e saturação.	49
5.17	Variância em função de θ das interações lineares e saturadas. Os valores de α estão indicados.	50
5.18	Diversidade em função de θ das interações lineares e saturadas para diversos valores de α e $u = 0.5$	51
5.19	Diversidade em função de α das interações lineares e saturadas para diversos valores de θ e $u = 0.5$. Em preto o caso linear.	51
5.20	Índice de Simpson em função de u das interações lineares e saturadas para alguns valores de θ e $\alpha = 0.2$ (acima), 0.4 (meio), 1.0 (abaixo). Em preto o caso linear.	52
5.21	Distribuição cumulativa das interações lineares e saturadas para $\alpha = 0.2$ (acima), 1.0 (abaixo) e $\theta = 1.0$	53

5.22	Diversidade em função de θ com $\alpha=1.0$ e $u=0.5$. Filtro passa baixa em azul, filtro passa alta em verde, três níveis em vermelho e linearidade e saturação em laranja. Os símbolos indicam a solução da equação de replicadores para 300 espécies e 100 amostras de configurações e condições iniciais.	55
5.23	Diversidade em função de α com $\theta=1.0$ e $u=0.5$. Cores e símbolos como na figura acima. Solução da equação de replicadores para 300 espécies e 100 amostras de configurações e condições iniciais.	55
5.24	Índice de Simpson em função de u com $\alpha=\theta=1.0$. Caso linear em preto, filtro passa baixa em azul, filtro passa alta em verde, três níveis em vermelho e linearidade e saturação em laranja. Os símbolos indicam a solução da equação de replicadores para 200 espécies e 100 amostras de configurações e condições iniciais.	56
5.25	Densidade de energia livre em função de u com $\alpha=\theta=1.0$. Cores e símbolos como na figura acima.	56
5.26	Distribuição cumulativa das funções não lineares para $\theta=1.0$ e $u=0.5$. Filtro passa baixa em azul, filtro passa alta em verde, três níveis em vermelho e linearidade e saturação em laranja. $\alpha=0.2$ (acima), 0.6 (meio), 1.0 (abaixo). Os símbolos indicam a solução da equação de replicadores para 200 espécies e 100 amostras de configurações e condições iniciais.	57

R e s u m o

Neste trabalho investigamos as propriedades estatísticas de um modelo de coevolução de N espécies, sob a perspectiva da dinâmica de replicadores. As interações entre pares de espécies são dadas por variáveis aleatórias independentes, fixas no tempo. As interações são também simétricas, de modo que a dinâmica maximiza uma função de Lyapunov (o funcional adaptabilidade). Isto permite usar as técnicas da mecânica estatística de sistemas desordenados para determinar analiticamente as propriedades estatísticas dos estados estacionários, particularmente a diversidade de espécies (total de espécies coexistindo em um sistema ecológico). As auto-interações são iguais a um parâmetro de controle que mede a competição entre indivíduos de uma mesma espécie (competição intraespecífica). A cada espécie associamos um conjunto de p traços ou características, representados por variáveis binárias aleatórias distribuídas com igual probabilidade. As forças de interação são dadas por funções não lineares da regra de Hebb. Estas são funções moduladoras do número de elementos complementares entre os conjuntos de traços de um dado par de espécies. Estudamos analítica e numericamente o caso em que p é proporcional ao total de espécies na comunidade, via método de réplicas. A análise é possível devido ao resultado de Sompolinsky: funções não lineares da regra de Hebb são equivalentes, no limite de p extensivo, à regra de Hebb somada a um ruído gaussiano estático, cuja variância depende da forma da função moduladora. A competição intraespecífica, o total de traços, a presença de espécies altamente complementares e finalmente o peso dos termos de competição interespecífica (elementos não diagonais da matriz de acoplamentos) são as principais influências sobre o comportamento das grandezas termodinâmicas no equilíbrio, principalmente a diversidade. Os resultados analíticos concordam com a solução numérica da equação de replicadores, no regime em que as soluções de réplicas simétricas são estáveis.

A b s t r a c t

We investigate the statistical properties of a coevolution model of N species using the replicator dynamics framework. The pairwise species interactions are given by independent quenched random variables. They are also symmetric, so that the dynamics maximizes a quadratic Lyapunov function (the fitness functional). This allows the use of tools of statistical mechanics of disordered systems to analyze the statistical properties of the equilibrium states, especially the ecosystem diversity (total number of coexisting species in an ecological system). The self-interactions are equal to a control parameter measuring the intraspecies competition. We associate to each species a set of p traits and represent them by independent random variables, equally distributed. The strength of the pairwise interactions are given by nonlinear functions of the Hebb rule. These are modulating functions of the number of complementary elements in the sets of traits of a given species pair. We study analytically and numerically the limit of extensive p , using the replica trick. The analytical approach is possible due to a result derived by Sompolinsky: in the limit of extensive p , nonlinear functions of the Hebb rule are equivalent to the Hebb rule plus a gaussian static noise, whose variance is dependent on the form of the modulating function. The intraspecies competition, the total number of traits, the presence of highly complementary species pairs and the contribution of the nondiagonal elements of the interaction matrix are the main influences over the behavior of the equilibrium properties, principally the diversity. Our analytical results agree with the numerical solutions of the replicator equation in the regime of stable replica symmetric solutions.

Capítulo 1

Introdução

A Ecologia tem como objetivos a procura de respostas para as seguintes questões: quais os princípios responsáveis por regular o número de espécies em uma comunidade biológica, por determinar a distribuição das suas abundâncias e quais os fatores que garantem a estabilidade de um ecossistema?

A primeira questão, relativa à biodiversidade vem ganhando destaque entre ecologistas e ambientalistas, pelo impacto negativo que o avanço da humanidade nos ecossistemas tem gerado, como por exemplo a perda progressiva de espécies, algumas detentoras de um grande potencial farmacológico ou alimentício. Além do mais, a manutenção do equilíbrio dos sistemas ecológicos, responsáveis por regular os processos biogeoquímicos do nosso planeta, depende criticamente da diversidade e da abundância de espécies.

O estudo da interação entre as espécies é um passo importante para elucidar tais questões. Elas são classificadas de acordo com o efeito sobre as populações envolvidas, segundo as definições: predação, competição, comensalismo, protocooperação e mutualismo.

A predação ocorre entre níveis tróficos, ou da cadeia alimentar, distintos. A espécie predadora influencia negativamente o crescimento populacional da espécie presa, pois dela se utiliza como alimento. A competição surge em um mesmo nível trófico, quando os recursos naturais são limitados e existe um impacto negativo sobre as densidades populacionais das espécies competidoras. Este tipo de interação também se dá entre membros de uma mesma espécie, quando é chamada de competição intraespecífica. Entre espécies distintas a competição é dita interespecífica.

Nas relações de comensalismo, comum entre plantas e animais não móveis e organismos móveis, uma espécie é beneficiada enquanto a influência sobre a outra é neutra. Na protocooperação e no mutualismo a interação é benéfica para ambas, mas no primeiro caso,

o qual tem exemplo nas associações entre as plantas e seus polinizadores, a relação é não obrigatória. No mutualismo existe uma relação de dependência, como por exemplo entre formigas e acácias e nos líquens (associações entre algas e fungos).

As interações negativas, a predação e a competição, apesar de tão difundidas quanto as interações positivas, são as mais estudadas e consideradas mais importantes e determinantes da estrutura das comunidades biológicas [1] .

Nos anos 20 aparecem os primeiros modelos matemáticos para espécies interagentes. Em 1920, o químico estadunidense Alfred James Lotka construiu um modelo matemático determinístico, baseado em um sistema de equações diferenciais, inicialmente usado para descrever a dinâmica de reações químicas auto-catalíticas. Em 1926 Vito Volterra, um matemático italiano, derivou um sistema de equações equivalente ao de Lotka, motivado pela questão do aumento da população de predadores entre as espécies de peixes do Adriático, na época da Primeira Guerra Mundial. No modelo predador-presa ou Lotka-Volterra, como é conhecido, o crescimento exponencial da população de presas é dificultado pela população de predadores. Por sua vez, o decréscimo da população de predadores é inibido pela ingestão de presas. Como soluções, os números populacionais oscilam periodicamente, indicando que este sistema ecológico se encontra em um permanente estado de não equilíbrio, no qual a população de predadores perturba periodicamente a população de presas.

A competição entre duas espécies foi explorada por Volterra, em um modelo também determinístico e baseado em um sistema de equações diferenciais, na verdade uma modificação da equação logística, pela adição de um termo inibidor proveniente da espécie competidora. As soluções do modelo são: uma das espécies, a detentora de um diferencial competitivo, extingue a outra ou as duas espécies coexistem num estado de equilíbrio estável ou não. Das soluções inferimos a idéia de um sistema atingindo um estado de equilíbrio, influenciado pelas condições iniciais.

O modelo predador-presa e o de competição se baseiam em algumas suposições pouco realistas: as populações são homogêneas (os indivíduos com mesma idade, tamanho e que não se modificam no tempo), o efeito das interações é imediato e no modelo de predação os membros de uma população não se auto-influenciam. Tais hipóteses não foram obstáculos para que estes modelos inspirassem o biólogo russo G. F. Gause a fazer o teste laboratorial de suas predições, na década de 30. Usando populações de protozoários em tubos de ensaio, ele concluiu que diferentes estratégias evolutivas, adotadas por predadores e presas, conduziam

a resultados experimentais distintos, sendo o comportamento oscilatório clássico observado quando o nível de predação era muito fraco ou as presas desenvolviam melhores estratégias de defesa.

Mas foram os estudos dos modelos de competição que o conduziram à formulação do célebre *Princípio da Exclusão Competitiva*. Trabalhando com populações também de protozoários competindo pela mesma fonte de energia, em um meio fechado, ele confirmou a previsão de extinção da espécie com menor efeito inibidor sobre a outra. Quando competiam por duas fontes de alimento as espécies coexistiam, pois suas populações ocupavam seções distintas do meio de cultura, onde conseguiam se alimentar sem competir.

Estes resultados o levaram à formulação do princípio, estabelecendo uma conexão com o conceito de nicho ecológico¹: duas espécies não ocupam indefinidamente o mesmo nicho ecológico. Gause ainda percebeu, por meio de estudos de colonização, que a exclusão competitiva pode ser responsável pela estruturação das comunidades, ou seja por determinar o número e abundância de espécies em um habitat [2, 3].

As considerações de Gause obviamente se aplicam a várias espécies em um habitat. O desenvolvimento matemático para comunidades compostas por N espécies, a generalização dos modelos de predação e competição, foi também obtido por Volterra, pela analogia com um sistema de moléculas de gás encerradas em um recipiente fechado. Um sistema de N equações diferenciais acopladas governa a variação temporal das populações, nas quais coeficientes, elementos de uma matriz de acoplamentos, medem a força de "colisão" binária, podendo ser negativos, positivos ou neutros. O modelo de predação requer uma matriz de acoplamentos anti-simétrica, enquanto no modelo de competição a matriz é simétrica. Neste último caso os coeficientes também permitem interações benéficas para o par de espécies [4].

Os modelos multi-espécies de Volterra pertencem a uma classe que descreve a evolução biológica em diferentes disciplinas, da química pré-biótica à sociobiologia, sob a hipótese de que as entidades básicas em evolução (concentrações de polinucleotídeos, probabilidades de estratégias para conflito, densidades populacionais, etc.) se reproduzem fazendo cópias de si mesmas². Por isto os denominamos *modelos de replicadores*.

¹Nicho: papel funcional ocupado por um dado organismo em um ecossistema, envolvendo o conjunto de todas as variações potencialmente exploráveis por ele.

²A hipótese da replicação cobre as suposições dos modelos para duas espécies de populações formadas por indivíduos homogêneos.

Nesta dissertação investigamos a estrutura de uma comunidade biológica, em termos da biodiversidade e abundâncias, na qual N espécies coevoluem segundo o contexto da dinâmica de replicadores. Os acoplamentos binários entre espécies distintas, fixos no tempo são dados por variáveis aleatórias independentes e as auto-interações, também fixas no tempo são determinísticas. O modelo permite interações do tipo cooperação ou competição. A cada espécie associamos um conjunto de traços, representando um potencial de aproveitamento dos recursos ambientais. As forças de interação dependem não linearmente dos elementos destes conjuntos de acordo com um princípio de complementaridade, expresso pelo uso de funções não lineares da regra de Hebb. Por desconhecermos o modo pelo qual os traços são distribuídos em um conjunto, usamos variáveis aleatórias para representá-los, justificando os acoplamentos randômicos do modelo.

Esperamos determinar quais as principais influências sobre as propriedades macroscópicas da comunidade biológica dentre os fatores: competição intra e interespecífica, tamanho do conjunto de traços e ainda a forma da função não linear.

Este sistema, formado por N espécies interagentes, possui algumas características especiais: depende de um grande número de graus de liberdade (todos os possíveis valores assumidos pelas densidades populacionais) e suas interações conflituosas (as populações tanto cooperam quanto competem) são variáveis aleatórias fixas. Tais características aparecem em todos os sistemas detentores do comportamento tipo *vidro de spin*, os chamados sistemas desordenados. Os vidros de spin são largamente conhecidos da Física da Matéria Condensada. O sistema protótipo se compõe de momentos magnéticos desordenados orientacionalmente e interações fixas randômicas na fase de baixa temperatura. Os seus estudos conduziram à definição de uma nova classe de sistemas, com vários exemplos na biologia, que podem ser analisados usando o mesmo conjunto de técnicas analíticas, de simulação computacional e em alguns casos experimentais [5].

As especificidades do nosso modelo possibilitam utilizar as ferramentas da mecânica estatística de equilíbrio para a análise de suas propriedades coletivas. Faremos isto usando extensivamente as técnicas empregadas nos estudos dos vidros de spin. No capítulo 2 descrevemos tais técnicas após uma breve revisão sobre os sistemas desordenados.

No capítulo 3 apresentamos alguns detalhes sobre a dinâmica de replicadores, examinamos os modelos de comunidade biológica com interações aleatórias, os quais inspiraram o tema desta dissertação, descrito na última seção.

No capítulo 4 fazemos a análise determinística do caso em que os conjuntos de traços possuem tamanho extensivo, proporcional ao total de espécies, pelo método de réplicas. No capítulo seguinte estudamos quatro funções moduladoras (funções não lineares da regra de Hebb) do número de elementos complementares entre conjuntos de traços, ímpares e não periódicas. Apresentamos os efeitos do total de traços, da dependência de um parâmetro de corte (um limite para o grau de complementaridade entre espécies) e da competição intraespecífica sobre as propriedades estatísticas de equilíbrio, destacando a diversidade de espécies. Por último, comparamos as soluções analíticas com os resultados numéricos da dinâmica de replicadores.

No apêndice A demonstramos a propriedade de Sompolinsky, relativa às funções não lineares da regra de Hebb, fundamental para a análise do capítulo 4. Finalmente, no apêndice B estudamos o caso em que o total de traços é finito.

Capítulo 2

Breve Introdução aos Sistemas Desordenados

Sistemas magnéticos como os compostos diluídos de AuFe e CuMn apresentam algumas características curiosas: seus tempos de relaxação, após a aplicação de um campo magnético são extraordinariamente longos e não apresentam qualquer ordenamento uniforme ou periódico, na fase de baixa temperatura, como nos magnetos comuns.

Compostos como estes, formados por alguns poucos íons magnéticos espalhados por uma matriz não magnética começaram a ser investigados há mais de cinquenta anos. Naquela época, esperava-se estudar a interação pura entre dois íons magnéticos, sem interferência dos fenômenos coletivos predominantes em compostos concentrados ou magnetos puros. O que deveria ser essencialmente um problema de dois corpos tornou-se um problema tão difícil quanto os existentes no formalismo dos muitos corpos [6] ...

Os estudos destes sistemas curiosos, os chamados vidros de spin (o nome vidro é uma referência à desordem dos arranjos atômicos observados nos vidros ordinários), levaram à descoberta de novos conceitos e ao desenvolvimentos de novas técnicas analíticas, experimentais e de simulação computacional. Além disso, por meio dos seus estudos uma nova classe de sistemas pode ser definida, principalmente fora da matéria condensada, abarcando áreas como a ciência da computação, a neurologia, a evolução pré-biótica, a sociobiologia, a dinâmica conformacional e a ecologia [5] .

Tais sistemas consistem de conjuntos formados por um número grande de indivíduos em interação nos quais forças competitivas (e de natureza randômica) conduzem a um comportamento coletivo complexo.

2.1 Definindo e caracterizando o comportamento vidro de spin

O protótipo do vidro de spin é um sistema composto por momentos magnéticos (spins) com orientações desordenadas e interações competitivas, aleatórias (a aleatoriedade se refere tanto à separação randômica entre spins quanto à distribuição dos sinais das interações) e fixas ("quenched": as interações variam muito mais lentamente do que as orientações dos spins. Na prática elas permanecem "congeladas" nas escalas de tempo usuais de observação). Este comportamento é observado na fase de baixa temperatura.

Para que um sistema exiba comportamento tipo vidro de spin são necessários dois ingredientes:

- As interações devem ser aleatórias, pelo menos parcialmente, e devem variar no tempo muito mais lentamente do que as características relacionadas aos indivíduos interagentes (ou seja orientações de spins, densidades populacionais, estado de um neurônio, etc.). A isto damos o nome de aleatoriedade fixa (quenched randomness).
- Frustração: inexistência de configurações dos sítios¹ que satisfaçam a todas as interações simultaneamente.

A frustração surge quando interações de natureza conflitosa impedem que qualquer configuração de indivíduos satisfaça a todas elas. Designando por J_{ij} a força de interação entre um par de indivíduos pertencentes ao conjunto C , a frustração emerge se:

$$\prod_{i \neq j \in C} J_{ij} < 0 \quad (2.1)$$

Uma consequência direta deste fenômeno é que um circuito fechado de sítios possui energias degeneradas. E todo o sistema possui muitos estados de baixa energia (vários estados fundamentais) em vez de um único estado fundamental global. Cada um deles depende do histórico de resfriamentos ou condições iniciais distintos [7, 8].

2.2 Modelos de vidro de spin

A partir da segunda metade da década de 70, a teoria dos vidros de spin tem início com o estudo da Hamiltoniana:

¹O termo sítio designa as unidades microscópicas ou indivíduos interagentes.

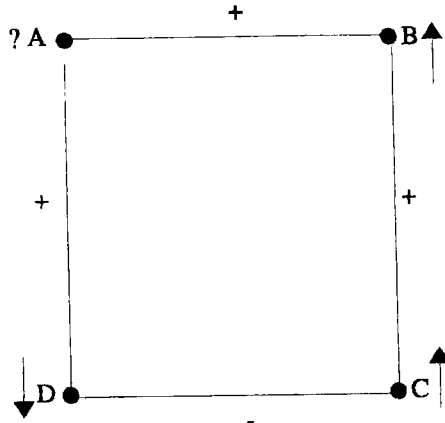


Figura 2.1: Exemplo de sistema frustrado: os sinais correspondem à natureza das interações. O spin em A deve apontar para cima ou para baixo?

$$\mathcal{H} = - \sum_{i,j} J_{ij} s_i s_j - h \sum_i s_i \quad (2.2)$$

onde $s_i = \pm 1$ são spins de Ising, J_{ij} dão as forças de interação par a par e h é um campo magnético externo.

Em 1975, Sam F. Edwards e Philip Anderson propuseram um modelo de curto alcance no qual a hamiltoniana (2.2) traz o índice i indicando interações de primeiros vizinhos entre sítios espalhados por uma rede cúbica d dimensional. As variáveis J_{ij} são números aleatórios independentes, dados pela distribuição gaussiana, com média nula e variância proporcional à distância entre sítios [7, 8] :

$$\mathcal{P}(J_{ij}) = \sqrt{\frac{1}{2\pi\sigma^2|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}} \exp\left[-\frac{J_{ij}^2}{2\sigma^2|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}\right] \quad (2.3)$$

Meses depois uma versão de longo alcance foi proposta por David Sherrington e Scott Kirkpatrick (modelo SK) [9, 10]. Neste modelo as interações têm alcance infinito e continuam sendo dadas pela distribuição gaussiana, equação (2.3), com média igual a J_0/N e variância J^2/N (com J e J_0 constantes e N igual ao total de sítios no sistema. Esta dependência de N , o total de sítios, assegura uma energia livre finita no limite termodinâmico).

O modelo SK é a base para a descrição do nosso modelo de comunidade biológica e por isso será de grande importância de agora em diante. Para estudarmos analiticamente suas propriedades de equilíbrio é necessário aprender a lidar com a desordem inerente a este sistema.

2.3 Médias sobre a desordem

Desejamos solucionar a questão: como obter analiticamente as propriedades macroscópicas de equilíbrio de um sistema com um grande número de graus de liberdade e dependente de um conjunto de variáveis aleatórias fixas?

Para lidar com a questão do número grande de graus de liberdade, seguimos a prescrição usual da Mecânica Estatística. É impossível resolvermos um conjunto de equações de cerca de 10^{23} (número de partículas em 1 grama de matéria) hamiltonianas, cada qual para uma componente do sistema. Sendo assim precisamos buscar grandezas representativas de todo o sistema. Estas grandezas devem possuir a propriedade de *auto-mediância*. Suas flutuações em torno do seu valor médio, relativo a amostras de configurações são proporcionais a $N^{-1/2}$ (N tamanho do sistema) e por isso tendem a zero no limite termodinâmico. Sendo assim, se medirmos o valor da grandeza para um experimento (uma dada configuração) encontraremos um valor igual à média desta grandeza sobre todo o ensemble de configurações. Portanto usamos médias sobre o ensemble estatístico de interesse, dependente das características do sistema, para extrair informações representativas. Chamamos estas médias de médias térmicas ou estatísticas. São grandezas auto-mediantes as quantidades termodinâmicas extensivas, proporcionais ao tamanho do sistema.

Mas ainda resta o problema da dependência de um conjunto de variáveis aleatórias fixas. Para resolvê-lo adotamos um procedimento semelhante. Note que se a hamiltoniana de um sistema depende de um conjunto de variáveis aleatórias então todas as grandezas termodinâmicas, dela derivadas, em princípio serão variáveis aleatórias.

Imagine que possamos dividir o sistema em um número grande de subsistemas macroscópicos, cada qual dependente de uma realização distinta do conjunto de variáveis aleatórias. Os subsistemas devem ser independentes, ou seja fracamente interagentes uns com os outros². Fazendo a divisão por L sistemas, uma grandeza extensiva terá suas flutuações relativas a uma dada realização do conjunto de variáveis aleatórias proporcional a $L^{-1/2}$. No limite termodinâmico as flutuações tendem a zero e assim podemos usar a média desta grandeza sobre todos os subsistemas, ou seja sobre toda a distribuição de variáveis aleatórias, como representativa para o sistema.

² O argumento é perfeitamente ajustável aos modelos com interações de curto alcance. No entanto, a propriedade de auto-mediância sobre a desordem tem sido bem observada em modelos com interações de longo alcance.

Deste modo a auto-mediância também vale para a desordem e grandezas auto-mediantes, representativas de um dado comportamento de um sistema desordenado são dadas por médias sobre a distribuição de variáveis aleatórias (ou seja médias sobre a desordem). Basta nos fixarmos em grandezas extensivas, auto-mediantes, para derivarmos as propriedades macroscópicas de interesse. Para sistemas fechados, uma boa escolha de grandeza auto-mediante é a energia livre de Helmholtz, função geratriz da termodinâmica no ensemble de Gibbs.

$$f = \langle f(a_{ij}) \rangle_{a_{ij}} = -\frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \langle \ln Z(a_{ij}) \rangle \quad (2.4)$$

Calcular a média de $\ln Z$ não é uma tarefa simples. Neste ponto se faz necessário distinguirmos dois casos, relativos ao número de variáveis aleatórias do sistema:

- O total de variáveis aleatórias é finito.
- O total de variáveis aleatórias é proporcional a N .

Concluindo, para os sistemas desordenados, a análise mecânico estatística se faz por meio de dois procedimentos distintos: o cálculo das médias estatísticas usuais, ou médias térmicas e o cálculo de médias sobre a distribuição de variáveis aleatórias, ou média sobre a desordem.

2.3.1 Desordem finita

Neste caso, ao aplicarmos o limite $N \rightarrow \infty$, cada uma das realizações da distribuição de variáveis aleatórias ligadas a cada unidade microscópica, aparecerá no sistema um número muito grande de vezes, aliás infinitas vezes. Deste modo dizemos que amostramos cada variável aleatória um número infinito de vezes, com frequência dada por sua distribuição de probabilidades.

Isto é uma consequência direta da lei dos grandes números aplicada aos sistemas desordenados. Calculando a média de um número muito grande de resultados de diversos experimentos, o valor convergirá ao resultado médio, soma dos resultados de todos os experimentos com peso dado pela probabilidade:

$$\frac{1}{N} \sum_{i,j} G(a_{ij}) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \langle G(a_{ij}) \rangle_{a_{ij}} = \sum_{a_{ij}} P(a_{ij}) G(a_{ij}) \quad (2.5)$$

Em resumo, a propriedade de auto-mediância emerge naturalmente, as grandezas auto-mediantes de interesse são dadas "automaticamente" no limite termodinâmico pelas médias sobre a distribuição de variáveis aleatórias. No caso da energia livre:

$$f = \langle f(a_{ij}) \rangle_{a_{ij}} \quad (2.6)$$

2.3.2 Desordem proporcional ao tamanho do sistema

Quando o total de variáveis aleatórias é da ordem de N , não mais a propriedade de auto-mediância emergirá naturalmente. Sendo assim é preciso calcular a média sobre a distribuição de variáveis aleatórias em um primeiro passo.

A auto-mediância é ainda válida mas as grandezas macroscópicas relevantes são obtidas por meio de médias sobre a desordem, como se existisse um ensemble de sistemas, cada qual com sua realização distinta do conjunto de variáveis aleatórias. No caso da energia livre, o cálculo da média de $\ln Z$ é bastante complicado, para não dizer impossível na prática. Para superar esta dificuldade foi criado o *método de réplicas*. Ele consiste do uso da identidade:

$$\langle \ln Z \rangle = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\langle Z^n \rangle - 1}{n} \quad (2.7)$$

Calculamos a média de Z^n assumindo n qualquer inteiro e não nulo. Em seguida tomamos o limite por uma continuação analítica. Apesar da aparente estranheza deste procedimento, a realização de uma continuação analítica de uma função definida sobre n inteiro, o método de réplicas funciona e tem levado a resultados em diversos problemas envolvendo sistemas desordenados.

Z^n é a função de partição de uma coleção de n cópias idênticas ao sistema original, supostamente não interagentes, as réplicas :

$$Z^n(a) = \prod_{\sigma=1}^n Z^\sigma(a) = \prod_{\sigma=1}^n \text{Tr}_{x^\sigma} \exp[-\beta \mathcal{H}(a, x^\sigma)] \quad (2.8)$$

onde σ é o índice de réplica, a denota o conjunto de variáveis aleatórias e x^σ corresponde aos sítios numa dada réplica. Logo:

$$Z^n(a) = \text{Tr}_{x^1 \dots x^n} \exp[-\beta \mathcal{H}(a, x^\sigma)] \quad (2.9)$$

E obtemos a energia livre pela expressão:

$$f = -\frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{Nn} (\langle Z^n \rangle - 1) \quad (2.10)$$

O cálculo da média $\langle Z^n \rangle$ induz interações entre as réplicas do sistema. Deste modo precisamos assumir hipóteses, como a da simetria entre réplicas para obter os resultados de interesse [8, 11].

Capítulo 3

Modelos de Ecossistemas

Toda teoria do desenrolar dos acontecimentos na natureza está fundamentada necessariamente em algum processo de simplificação, sendo até certo ponto, por conseguinte, um conto de fadas.

Sir Napier Shaw

A palavra modelo designa uma formulação ou representação de um fenômeno do mundo real, simplificada ao ponto de abranger apenas as propriedades e funções básicas, a partir da qual é possível fazer predições. Um modelo pode ser uma representação física (verbal, gráfica ou espacial) mas é uma representação matemática quando o objetivo é prever em termos de quantidades.

A grande complexidade dos sistemas ecológicos torna inevitável o uso extensivo dos modelos matemáticos, seja para predizer mudanças em função do tempo, seja para oferecer uma nova abordagem de um problema ou para a descoberta de novos fatores, componentes, interações, importantes para o entendimento de um dado sistema. Os modelos em ecologia permitem ainda estudar ecossistemas de difícil acesso, controlar condições experimentais que poderiam desvirtuar o objeto de estudo ou que tornariam impossível a sua investigação por seres humanos (por exemplo, os modelos possibilitam simular as longas escalas de tempo para formação e extinção da maioria das espécies) [1, 2, 3].

Estudamos a seguir alguns modelos usados para compreender principalmente o papel das interações em comunidades biológicas sobre a variação dos seus números populacionais.

Nestes modelos a dinâmica das variáveis fundamentais, as abundâncias e as forças de interação é bem definida. Vamos conhecê-la a seguir.

3.1 Dinâmica de replicadores

Os modelos de evolução biológica, nos quais o mecanismo de "reprodução" das entidades básicas é a replicação, guardam uma característica em comum: são descritas pelo mesmo conjunto de equações diferenciais do tipo:

$$\frac{dx_i}{dt} = x_i \left(F_i - \frac{\bar{F}}{C} \right), \quad i = 1, \dots, N \quad (3.1)$$

1. As variáveis $x_i \geq 0 \in \mathbb{R}^n$ representam as variáveis de estado do sistema biológico.
2. $C > 0$ é uma constante.
3. O termo $\bar{F} = \sum_{i=1}^N x_i F_i$ assegura que $\sum_{i=1}^N x_i = C$ é uma constante do movimento.
4. A grandeza F_i é chamada adaptabilidade da entidade básica em evolução.

Na Química Pré-biótica a (3.1) descreve a dinâmica das concentrações de polinucleotídeos em um reator de fluxo e é a equação dos hiperciclos da evolução molecular. Na Genética de Populações é a equação de seleção de Fisher que modela a evolução das frequências de alelos em um agregado de genes. É ainda a equação da dinâmica de jogos da Sociobiologia, cujas entidades básicas em evolução são probabilidades de estratégias para conflitos [12].

Em Ecologia a dinâmica (3.1) corresponde à equação de Volterra:

$$\frac{dy_i}{dt} = y_i \left(b_{0i} - \sum_j b_{ij} y_j \right) \quad (3.2)$$

E descreve a evolução temporal das densidades populacionais em uma comunidade formada por N espécies. É possível demonstrar que a equação de Volterra em $N-1$ variáveis de estado equivale a uma equação de replicadores de primeira ordem em N variáveis [13]:

$$\frac{dx_i}{dt} = x_i \left(F_i - \frac{\bar{F}}{C} \right) = x_i \left(\sum_j J_{ij} x_j - \sum_{i,j} J_{ij} x_i x_j \right), \quad i, j = 1, \dots, N \quad (3.3)$$

Na equação acima a variável de estado x_i designa a densidade, número populacional ou ainda abundância de uma i -ésima espécie. A função $F_i = \sum_j J_{ij} x_j$, o termo de interação, mede o quanto a configuração $\{x_1, \dots, x_N\}$ influencia o crescimento populacional da i -ésima espécie e por isso é denominada adaptabilidade. F_i é dada pela relação:

$$F_i(\{x_i\}) = \frac{\partial F(\{x_i\})}{\partial x_i} \quad (3.4)$$

na qual a grandeza F é o funcional adaptabilidade do sistema. A equação (3.3) nos oferece a interpretação: a taxa de crescimento de uma dada espécie i , medida do seu sucesso evolucionário, é igual à diferença entre sua adaptabilidade F_i e a adaptabilidade média da comunidade biológica, F .

Consideremos o funcional adaptabilidade:

$$F(\{x_i\}) = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} x_i x_j \quad (3.5)$$

Considere ainda a soma total das biomassas, ou densidades populacionais, ou abundâncias, interpretada como a produtividade total, igual ao total de espécies na comunidade: $\sum_{i=1}^N x_i = N$. Este vínculo também insere uma fonte de competição no modelo, para impedir o crescimento ilimitado de uma única espécie.

As variáveis J_{ij} denotam os coeficientes ou forças de interação entre um par de espécies e não variam no tempo. Vamos investigar o caso no qual tais coeficientes são simétricos, de modo que a função de Lyapunov quadrática, a (3.5) é maximizada pela dinâmica (3.1) e no estado estacionário, portanto as soluções de equilíbrio são pontos fixos [14]. Esta propriedade permite estudar as configurações de equilíbrio, correspondentes aos pontos fixos da equação de replicadores, usando as técnicas da mecânica estatística de sistemas desordenados. Isto acontece porque o valor máximo do funcional adaptabilidade corresponde à energia livre no limite de baixa temperatura do sistema termodinâmico correspondente [15]. Interações anti-simétricas, no entanto permitem identificar constantes do movimento, possibilitando a construção de uma mecânica estatística por meio da definição de um ensemble canônico consistente com tais constantes [4]. Coeficientes positivos, $J_{ij} > 0$ indicam interações do tipo competição e no caso contrário $J_{ij} < 0$, as espécies interagem positiva ou cooperativamente.

Ao final do processo coevolucionário, no estado de equilíbrio, algumas espécies são extintas pela influência da competição. Sendo assim é interessante assinalar a função das auto-interações, iguais um parâmetro de controle, $J_{ii} = u > 0, \forall i$ que mede a competição intraespecífica¹. Valores grandes de u favorecem a coexistência de um grande número de espécies: neste caso o crescimento de todas as espécies é limitado pelo fator ux_i^2 . O efeito dos termos de interação J_{ij} se torna desprezível e a configuração de equilíbrio tem valor

¹Além de prevenir o crescimento descontrolado de uma única espécie, quando assumimos que o ecossistema tem população infinita u garante a existência de um limite termodinâmico não trivial.

$x_i^{eq} \simeq 1, \forall i$. Por outro lado, o peso das interações é considerável se u assume valores pequenos e neste caso observamos a predominância de algumas poucas espécies nos estados estacionários. Por isto u é também a chamada pressão de cooperação.

Neste modelo a diversidade de espécies, ou total de espécies coexistindo em um sistema ecológico é uma variável dinâmica, dependente do parâmetro u e também da forma dos acoplamentos. No equilíbrio chamamos de diversidade a fração de espécies sobreviventes à extinção devida aos efeitos de competição. A produtividade total, $\sum_{i=1}^N x_i$, no entanto é sempre uma constante do movimento. Deste modo é possível investigar os efeitos de uma determinada escolha para as forças de interação sobre as medidas da diversidade de espécies no equilíbrio sob esta condição de produtividade constante.

3.2 Interações

3.2.1 Interações aleatórias gaussianas

No ambiente natural um número grande de fatores, processos e mecanismos complexos e desconhecidos governa as interações entre as espécies. Deste modo, uma primeira sugestão para modelar tais forças é, naturalmente, considerá-las variáveis aleatórias independentes. Em 1985, S. Diederich e M. Oppen [15, 16, 17] propuseram que as variáveis J_{ij} fixas obedecem à distribuição de probabilidades gaussiana, com média nula e variância $1/N$:

$$\mathcal{P}(J_{ij}) = \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \exp \left[-\frac{N J_{ij}^2}{2} \right], \quad J_{ij} = J_{ji}, \quad i \neq j \quad (3.6)$$

No modelo de replicadores aleatórios, como é conhecido, a competição intraespecífica, o único parâmetro de controle, é o fator responsável por determinar a abundância e diversidade de espécies no equilíbrio (figura 3.1).

3.2.2 Interações de Hebb

Numa segunda tentativa buscamos alguma estrutura para modelar as forças de interação, baseada em uma propriedade inerente às espécies. Deste modo aumentamos o grau de complexidade do modelo e esperamos aproximá-lo um pouco mais da realidade. Neste sentido

foi proposto um modelo de comunidade biológica ou ecossistema², no qual as interações dependem de um princípio de complementaridade [18, 19]. Entendemos a complementaridade como uma propriedade de um conjunto de objetos existindo quando há diferenças entre objetos de um conjunto e os objetos de um segundo conjunto [20]. No modelo o conjunto de objetos é na verdade um conjunto de traços ou características associadas ou intrínsecas uma dada espécie e diretamente relacionadas à exploração dos recursos do ambiente.

Representamos o conjunto de p traços da i -ésima espécie por um vetor $\vec{\xi}_i$ (ou palavra binária), como no exemplo:

$$\vec{\xi}_i = (\xi_i^1, \xi_i^2, \xi_i^3, \dots, \xi_i^p) = (-1, -1, +1, \dots, +1)$$

O aparecimento do traço μ na espécie i faz a variável ξ_i^μ assumir o valor 1. Caso contrário, seu valor será -1. As variáveis ξ_i^μ e ξ_j^μ , de espécies distintas, são complementares se:

$$\xi_i^\mu \xi_j^\mu = -1 \quad (3.7)$$

Os coeficientes de interação são dados pela regra:

$$J_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\mu=1}^p \xi_i^\mu \xi_j^\mu, \quad i \neq j \quad (3.8)$$

Note que quanto maior o grau de complementaridade, medido pelo número de elementos complementares entre os conjuntos de traços, mais negativo tenderá a ser o coeficiente J_{ij} . Portanto, o par deverá interagir cooperativamente.

O conjunto de traços define todo um potencial de exploração dos recursos do meio ambiente inato a uma dada espécie, estabelecendo um claro paralelismo com o conceito de nicho ecológico [1, 2, 3]. Sendo assim a complementaridade se relaciona a uma menor probabilidade de inter cruzamento de nichos, o que garante maiores possibilidades de sobrevivência para o par interagente de espécies. Inversamente poderíamos pensar no conceito de similaridade, quando o número de traços compartilhados pelas espécies tende a ser grande. Aqui a probabilidade de que os seus nichos se inter cruzem é elevada e portanto uma das espécies deverá ser levada à extinção. Isto está de acordo com o princípio de exclusão competitiva de Gause: espécies muito similares não ocupam indefinidamente o mesmo nicho ecológico e tendem a competir.

²O termo ecossistema se mostra inteiramente apropriado quando fatores abióticos, não vivos, se fazem presentes.

O conjunto de traços é estabelecido a priori e não é modificado pela evolução dinâmica do sistema. Já que desconhecemos o mecanismo que define a distribuição dos traços, as variáveis ξ_i^μ são variáveis aleatórias independentes, distribuídas com igual probabilidade, ou seja:

$$\mathcal{P}(\xi_i^\mu) = \frac{1}{2}\delta(\xi_i^\mu - 1) + \frac{1}{2}\delta(\xi_i^\mu + 1) \quad (3.9)$$

A equação (3.8) é a regra de aprendizagem de Hebb estudada nos modelos de redes neurais atratoras, o que permite utilizar as técnicas desenvolvidas nestas investigações para analisar os estados de equilíbrio do modelo de ecossistema [11, 21].

O modelo define um novo parâmetro de controle, além da pressão de cooperação u , o tamanho do conjunto de traços, p . Sendo assim podemos estudar dois casos, dependentes da natureza do parâmetro p : quando p é um número finito e quando p é extensivo, proporcional ao total de espécies no sistema.

A figura 3.2 traz a diversidade em função do parâmetro u no caso em que p é extensivo (isto é $p = \alpha N$) para dois valores de α . Observe que a diversidade é menor, para um mesmo valor de u quando $\alpha = 1.0$. Quando temos valores crescentes de α , a probabilidade de encontrarmos espécies muito similares, portanto pouco cooperativas é maior. Neste regime, as poucas espécies altamente complementares (e portanto altamente cooperativas) levam as demais à extinção de modo que a produtividade total, $\sum_i x_i$, permaneça constante e igual a N . Sendo assim, em ecossistemas muito complexos (complexidade entendida como o total de traços) a diversidade no equilíbrio é menor.

3.2.3 Interações não lineares

Nesta dissertação estudamos interações aleatórias dadas por funções não lineares da regra de Hebb, numa generalização do modelo anterior.

O uso de funções não lineares, ou de funções moduladoras do número de elementos complementares (ou similares) entre os conjuntos de traços do par de espécies, possibilita escolher diversos mecanismos de interação. Uma escolha a ser explorada é a da efetivação das interações a partir de um dado número de elementos complementares. Ou seja, podemos, por exemplo, eliminar as interações fortes, situação na qual temos espécies altamente

complementares (ou similares) envolvidas, usando um parâmetro de corte. Podemos ainda selecionar uma faixa de forças de interação, tornando-as constantes para estudar exclusivamente o efeito dos seus sinais.

Os modelos de reconhecimento molecular usam uma sugestão de um limite para o grau de complementaridade, como por exemplo nos estudos do sistema imunológico. Nestes modelos as interações anticorpo-antígeno se efetivam quando há o reconhecimento de um número chave de estruturas complementares moleculares [22]. Se este mecanismo ocorre em todo sistema onde há o reconhecimento de estruturas complementares, em se tratando de sinais químicos, é razoável pensar que ele também exista nas interações entre os organismos superiores, quando falamos de complementaridade sobre características ligadas ao aproveitamento de recursos do ambiente.

Propomos coeficientes de interação com a seguinte forma [23]:

$$J_{ij} = \frac{\sqrt{p}}{N} F \left(\frac{1}{\sqrt{p}} \sum_{\mu=1}^p \xi_i^\mu \xi_j^\mu \right), \quad i \neq j \quad (3.10)$$

onde as $F(t_{ij})$ são funções ímpares, não periódicas e com segundo momento finito:

$$\langle F(t_{ij}) \rangle = 0 \quad (3.11)$$

$$\langle F^2(t_{ij}) \rangle < \infty \quad (3.12)$$

As médias são calculadas sobre a distribuição em (3.9).

Com funções ímpares esperamos examinar a influência explícita dos sinais das interações sobre as abundâncias no equilíbrio [24]. Além disso é a mais adequada para a investigação do caso em que o total de traços é proporcional ao total de espécies no ecossistema. Os acoplamentos com a forma (3.10) também foram estudados nos modelos de redes neurais atratoras [11, 25, 26, 27]. Novamente podemos adotar as técnicas utilizadas nesses estudos para obter analiticamente as propriedades termodinâmicas no equilíbrio.

Quais serão os efeitos destas escolhas sobre a diversidade no equilíbrio? Eliminaremos a diminuição da fração de espécies sobreviventes com o aumento da complexidade do ecossistema, como observado no caso linear? Como as propriedades macroscópicas do sistema variam com o valor do limiar de complementaridade? Tais perguntas serão respondidas a

seguir.

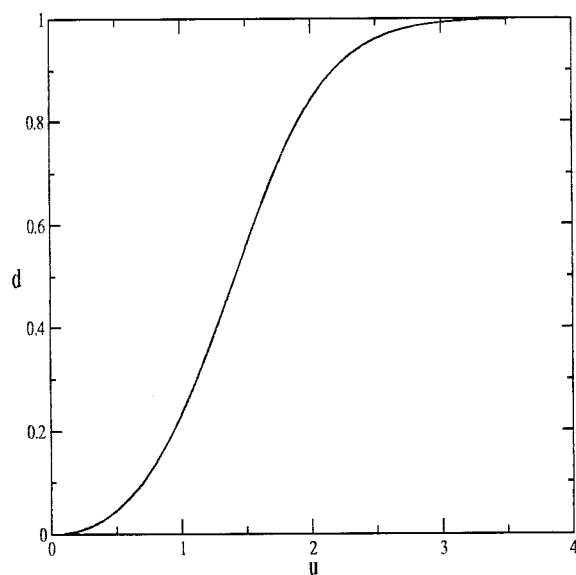


Figura 3.1: Diversidade no equilíbrio do modelo de replicadores aleatórios.

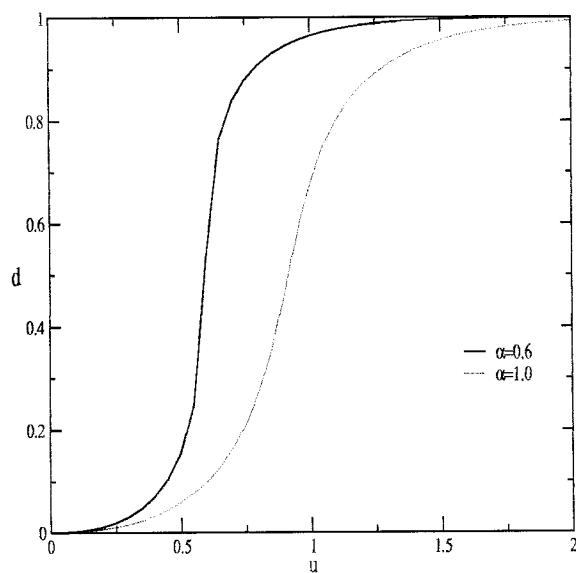


Figura 3.2: Diversidade no equilíbrio do modelo de replicadores com interações de Hebb. Em preto $\alpha = 0.6$ e em vermelho $\alpha = 1.0$.

Capítulo 4

Interações Não Lineares: p extensivo

Neste capítulo usamos as técnicas da mecânica estatística de sistemas desordenados para obter analiticamente as propriedades de equilíbrio do ecossistema de replicadores com interações não lineares da regra de Hebb. Investigamos o caso em que o total de traços é extensivo, ou seja $p = \alpha N$ (ver apêndice B para o caso em que p é finito). Usamos o método de réplicas para calcular a energia livre média por espécie e também derivamos alguns parâmetros que possuem uma interpretação ecológica. O cálculo de baixa temperatura permite determinar tais grandezas como funções das configurações de equilíbrio do modelo.

Na década de 80, H. Sompolinsky derivou uma propriedade relativa às funções não lineares da regra de Hebb, fundamental para a concretização dos objetivos deste capítulo. Esta propriedade nos diz que no limite termodinâmico, quando p é extensivo, funções não lineares equivalem à regra de Hebb somada a um ruído gaussiano estático, cuja variância depende de $F(t_{ij})$ (confira a demonstração no apêndice A) [25, 26]:

$$\frac{\sqrt{p}}{N} F \left(\frac{1}{\sqrt{p}} \sum_{\mu=1}^p \xi_i^\mu \xi_j^\mu \right) \quad (4.1)$$

equivale a:

$$\frac{J}{N} \sum_{\mu=1}^p \xi_i^\mu \xi_j^\mu + \delta_{ij}, \quad J > 0 \quad (4.2)$$

O ruído gaussiano tem média nula e variância:

$$\frac{\delta^2}{N} = \frac{\alpha}{N} (\bar{J}^2 - J^2) \quad (4.3)$$

com:

$$\bar{J}^2 = \langle F^2(t_{ij}) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} Dz F^2(z) \quad (4.4)$$

$$J = \int_{-\infty}^{\infty} Dz z F(z) \quad (4.5)$$

e $Dz = (e^{-z^2/2})/\sqrt{2\pi}$ é a medida gaussiana.

Lembrando, as funções $F(t_{ij})$ obedecem aos critérios:

$$\langle F(t_{ij}) \rangle = 0 \quad (4.6)$$

$$\langle F(t_{ij})^2 \rangle < \infty \quad (4.7)$$

4.1 Energia livre

Seja o funcional adaptabilidade ou hamiltoniana do sistema ecológico:

$$-\mathcal{F}(\{x_i\}) = \mathcal{H}\{x_i\} = \frac{1}{2} \sum_{(i \neq j)=1}^N \frac{\sqrt{p}}{N} F \left(\frac{1}{\sqrt{p}} \sum_{\mu=1}^p \xi_i^\mu \xi_j^\mu \right) x_i x_j + \frac{u}{2} \sum_{i=1}^N x_i^2 \quad (4.8)$$

E a função de partição com réplicas:

$$\langle Z^n \rangle = \prod_{a=1}^n Z^a = \int_0^\infty \prod_{a,i} dx_i^a \delta \left(N - \sum_i x_i^a \right) \langle e^{-\beta \mathcal{H}(x_i^a)} \rangle \quad (4.9)$$

onde a média é feita sobre a desordem.

Para calcular a média da exponencial da hamiltoniana adotamos uma estratégia de linearização¹. Recorremos à propriedade de Sompolinsky já que ela torna a execução dos cálculos mais simples e direta, além de fornecer uma interpretação interessante para o ruído gaussiano estático: ele é uma medida do quanto as $F(t_{ij})$ se distinguem da linearidade. Definimos uma hamiltoniana composta, proveniente da soma da regra de Hebb com o ruído gaussiano:

¹Na literatura existem outros métodos desenvolvidos para lidar com funções não lineares como as $F(t_{ij})$ [27].

$$\begin{aligned}
 -\mathcal{F} = \mathcal{H} &= \sum_a \left[\frac{J}{2N} \sum_{\mu=1}^p \left(\sum_i \xi_i^\mu x_i^a \right)^2 + \frac{1}{2} \left(u - \frac{pJ}{N} \right) \sum_i (x_i^a)^2 \right] + \sum_a \sum_{i \neq j} \delta_{ij} x_i^a x_j^a = \\
 &= \mathcal{H}_{\text{Hebb}} + \mathcal{H}_{\text{Ruído}}
 \end{aligned} \tag{4.10}$$

Substituindo-a na função de partição:

$$\langle \mathcal{Z}^n \rangle = \int_0^\infty \prod_{a,i} dx_i^a \delta \left(N - \sum_i x_i^a \right) \langle e^{-\beta \mathcal{H}_{\text{Hebb}}(x_i^a)} \rangle_{\xi_i^\mu} \langle e^{-\beta \mathcal{H}_{\text{Ruído}}(x_i^a)} \rangle_{\delta_{ij}} \tag{4.11}$$

Média sobre a Hamiltoniana Hebb:

$$\begin{aligned}
 \langle e^{-\beta \mathcal{H}_{\text{Hebb}}} \rangle_{\xi_i^\mu} &= \int_{-\infty}^\infty \prod_{\mu,a} \frac{dy^{\mu a}}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{\mu,a} (y^{\mu a})^2 \right] \left\langle \exp \left[-i \sqrt{\frac{\beta J}{N}} \sum_{\mu,a} \sum_i \xi_i^\mu x_i^a y^{\mu a} \right] \right\rangle \\
 &\quad \times \exp \left[-\frac{\beta}{2} (u - \alpha J) \sum_{a,i} (x_i^a)^2 \right]
 \end{aligned} \tag{4.12}$$

onde a média é feita sobre a distribuição:

$$\mathcal{P}(\xi_i^\mu) = \frac{1}{2} \delta(\xi_i^\mu - 1) + \frac{1}{2} \delta(\xi_i^\mu + 1) \tag{4.13}$$

Temos:

$$\langle \dots \rangle = \prod_{\mu,i} \cosh \left(-i \sqrt{\frac{\beta J}{N}} \sum_a x_i^a y^{\mu a} \right) \simeq \prod_{\mu,i} \left[1 - \frac{\beta J}{N} \left(\sum_a x_i^a y^{\mu a} \right)^2 \right] \tag{4.14}$$

Usando a aproximação:

$$\exp \ln \prod_{\mu,i} [\dots] = \exp \sum_{\mu,i} \ln \left[1 + \frac{1}{2} \chi^2 \right] \simeq \exp \sum_{\mu,i} \left(\frac{1}{2} \chi^2 \right) \tag{4.15}$$

obtemos:

$$\langle \dots \rangle = \exp \left[-\frac{\beta J}{2N} \sum_{\mu,i} \left(\sum_a y^{\mu a} x_i^a \right)^2 \right] \tag{4.16}$$

Portanto:

$$\begin{aligned} \langle e^{-\beta H_{\text{Hebb}}} \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\mu,a} \frac{dy^{\mu a}}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{\mu,a} (y^{\mu a})^2 \right] \\ &\times \exp \left[-\frac{\beta J}{2N} \sum_{\mu,i} \left(\sum_a y^{\mu a} x_i^a \right)^2 - \frac{\beta}{2} (u - \alpha J) \sum_{a,i} (x_i^a)^2 \right] \end{aligned} \quad (4.17)$$

Média sobre a Hamiltoniana ruído:

$$\langle e^{-\beta \mathcal{H}_{\text{Ruído}}} \rangle_{\delta_{ij}} = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i < j} \frac{\sqrt{N}}{\sqrt{2\pi}} d\delta_{ij} \exp \left[-\frac{1}{2} (\sqrt{N} \delta_{ij})^2 - \beta \delta_{ij} \sum_a x_i^a x_j^a \right] \quad (4.18)$$

Usemos a identidade gaussiana:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2} \frac{z^2}{A} - az} = \sqrt{A} e^{-\frac{Aa^2}{2}} \quad (4.19)$$

para encontrar:

$$\langle e^{-\beta \mathcal{H}_{\text{Ruído}}} \rangle = \prod_{i < j} \exp \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\beta \delta}{\sqrt{N}} \sum_a x_i^a x_j^a \right)^2 \right] \quad (4.20)$$

Considere os parâmetros:

$$Q^a = \frac{1}{N} \sum_i (x_i^a)^2, \quad \forall a \quad (4.21)$$

$$q^{ab} = \frac{1}{N} \sum_i x_i^a x_i^b, \quad \forall a < b \quad (4.22)$$

Substituindo-os nas equações (4.17) e (4.20) obtemos:

$$\begin{aligned} \langle e^{-\beta H_{\text{Hebb}}} \rangle &= \prod_{\mu} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_a \frac{dy^{\mu a}}{\sqrt{2\pi}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[\sum_a (y^{\mu a})^2 (1 + \beta J Q^a) + 2\beta J \sum_{a < b} q^{ab} y^{\mu a} y^{\mu b} \right] \right\} \\ &\times \exp \left[-\frac{\beta}{2} (u - \alpha J) N \sum_a (Q^a)^2 \right] \end{aligned} \quad (4.23)$$

$$\langle e^{-\beta \mathcal{H}_{\text{Ruído}}} \rangle = \exp \left[\frac{\beta^2 \delta^2}{2N} \sum_{a < b} (N q^{ab})^2 + \frac{\beta^2 \delta^2}{4N} \sum_a (N Q^a)^2 \right] \quad (4.24)$$

As expressões anteriores nos levam à função de partição:

$$\begin{aligned}
 \langle Z^n \rangle &= \int_0^\infty \prod_{a,i} dx_i^a \delta \left(N - \sum_i x_i^a \right) \\
 &\times \exp \left[-\frac{\beta^2 \delta^2}{2N} \sum_{a<b} (Nq^{ab})^2 + \frac{\beta^2 \delta^2}{4N} \sum_a (NQ^a)^2 \right] \\
 &\times \prod_\mu \int_{-\infty}^\infty \prod_a \frac{dy^a}{\sqrt{2\pi}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[\sum_a (y^a)^2 (1 + \beta J Q^a) \right] \right\} \\
 &\times \exp \left\{ \left[2\beta J \sum_{a<b} q^{ab} y^a y^b - \frac{\beta}{2} (u - \alpha J) N \sum_a Q^a \right] \right\}
 \end{aligned} \tag{4.25}$$

Reescrevemos a função de partição numa forma conveniente para a integração no limite termodinâmico usando as propriedades da função delta:

$$\int_{-\infty}^\infty dy g(y) \delta(y - c) = g(c) \tag{4.26}$$

$$\int_{-\infty}^\infty \frac{dk}{2\pi} e^{ik(y-c)} = \delta(y - c) \tag{4.27}$$

$$\int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty dy \frac{dk}{2\pi} g(y) e^{ik(y-c)} = g(c) \tag{4.28}$$

Começemos por introduzir os parâmetros definidos anteriormente:

$$\sum_{a<b} q^{ab} - \frac{1}{N} \sum_i x_i^a x_i^b = 0 \tag{4.29}$$

$$\begin{aligned}
 \exp \left[\frac{\beta^2}{N} \sum_{a<b} (q^{ab})^2 \right] &= \int_{-\infty}^\infty \prod_{a \neq b} dq^{ab} \exp \left[\frac{\beta^2}{N} \sum_{a<b} (q^{ab})^2 \right] \delta \left[\sum_{a<b} \left(q^{ab} - \frac{1}{N} \sum_i x_i^a x_i^b \right) \right] = \\
 &= \int_{-\infty}^\infty \prod_a \frac{d\tilde{q}^{ab} dq^{ab}}{2\pi} \exp \left[\frac{\beta^2}{N} \sum_{a<b} (q^{ab})^2 \right] \\
 &\times \exp \left[\sum_{a<b} \left(i\tilde{q}^{ab} q^{ab} - \frac{i}{N} \tilde{q}^{ab} \sum_i x_i^a x_i^b \right) \right]
 \end{aligned} \tag{4.30}$$

Idem para k^a e Q^a .

Logo:

$$\begin{aligned}
 \langle Z^n \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \prod_a \frac{dk^a}{2\pi} \exp \left[iN \sum_a k^a \right] \\
 &\times \int_{-\infty}^{\infty} \prod_a \frac{N}{2\pi} dQ^a d\tilde{Q}^a \exp \left[\sum_a \frac{N\beta^2\delta^2}{4} (Q^a)^2 + i\tilde{Q}^a Q^a - \frac{N\beta}{2} (u - \alpha J) Q^a \right] \\
 &\times \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{a<b} \frac{N}{2\pi} dq^{ab} d\tilde{q}^{a,b} \exp \left[\sum_{a<b} \frac{N\beta^2\delta^2}{2} (q^{ab})^2 + i\tilde{q}^{ab} q^{ab} \right] \\
 &\times G_{\text{Hebb}}(q^{ab}, Q^a) G_{\text{Rufo}}(k^a, \tilde{q}^{ab}, \tilde{Q}^a)
 \end{aligned} \tag{4.31}$$

onde:

$$G_{\text{Hebb}} = \prod_{\mu=1}^p \int_{-\infty}^{\infty} \prod_a \frac{dy^a}{\sqrt{2\pi}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[\sum_a (y^a)^2 (1 + \beta J Q^a) + 2\beta J \sum_{a<b} q^{ab} y^a y^b \right] \right\} \tag{4.32}$$

$$G_{\text{Rufo}} = \int_0^{\infty} \prod_{a,i} dx_i^a \exp \left\{ - \left[\sum_a ik^a \sum_i x_i^a + \tilde{Q}^a \sum_i (x_i^a)^2 + \sum_{a<b} \tilde{q}^{ab} \sum_i x_i^a x_i^b \right] \right\} \tag{4.33}$$

Aplicamos as mudanças de variável:

$$ik^a \rightarrow \beta k^a, \quad i\tilde{q}^{ab} \rightarrow -N\beta^2 \tilde{q}^{ab}, \quad i\tilde{Q}^a \rightarrow N\beta^2 \tilde{Q}^a \tag{4.34}$$

E fazemos o traço sobre spins em n réplicas. Obtemos:

$$\begin{aligned}
 \langle Z^n \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \prod_a \frac{\beta dk^a}{2\pi i} \prod_a \frac{N\beta^2}{2\pi i} dQ^a d\tilde{Q}^a \prod_{a<b} \frac{N\beta^2}{2\pi i} dq^{ab} d\tilde{q}^{ab} \\
 &\times \exp N \left[\sum_a \beta k^a \right] \exp N \left[\sum_a \frac{\beta^2\delta^2}{4} (Q^a)^2 + \beta^2 \tilde{Q}^a Q^a - \frac{\beta}{2} (u - \alpha J) Q^a \right] \\
 &\times \exp N \left[\sum_{a<b} \frac{\beta^2\delta^2}{2} (q^{ab})^2 - \beta^2 \tilde{q}^{ab} q^{ab} \right] \\
 &\times \exp N \left\{ \alpha \ln \left[G_{\text{Hebb}}(q^{ab}, Q^a) \right] + \ln \left[G_{\text{Rufo}}(k^a, \tilde{q}^{ab}, \tilde{Q}^a) \right] \right\}
 \end{aligned} \tag{4.35}$$

4.2 Hipótese de simetria de réplicas

Para realizarmos a continuação analítica, $n \rightarrow 0$, sobre a expressão anterior assumimos a hipótese de simetria de réplicas:

$$k^a = k, q^{ab} = q, \bar{q}^{ab} = \bar{q}, Q^a = Q, \bar{Q}^a = \bar{Q}, \forall a, b \quad (4.36)$$

Fazendo a integração em ponto de sela no limite termodinâmico da integral em (4.35) encontramos uma expressão para a densidade de energia livre:

$$\begin{aligned} -\beta f = \lim_{n \rightarrow 0} \text{extr} \frac{1}{n} \left\{ n \left[\beta k + \frac{\beta^2 \delta^2}{4} Q^2 + \beta^2 \bar{Q} Q - \frac{\beta}{2} (u - \alpha J) Q \right] \right. \\ \left. + \frac{\beta^2 \delta^2}{2} \frac{(n^2 - n)}{2} q^2 - \beta^2 \frac{(n^2 - n)}{2} \bar{q} q + \alpha \ln G_{\text{Hebb}}(q, Q) + \ln G_{\text{Rufo}}(k, \bar{q}, \bar{Q}) \right\} \end{aligned} \quad (4.37)$$

Da hipótese de simetria de réplicas obtemos:

$$G_{\dots} = \int Dz g_{\dots}^n(z) \int Dz (1 + \ln[g_{\dots}(z)]) = 1 + n \int Dz \ln[g_{\dots}(z)] \quad (4.38)$$

Logo:

$$\ln G_{\dots} \simeq n \int Dz \ln[g_{\dots}(z)] \quad (4.39)$$

Com isto obtemos a expressão final para a energia livre média por espécie:

$$\begin{aligned} -\beta f = \beta k + \frac{\beta^2 \delta^2}{4} (Q^2 - q^2) + \beta^2 \bar{Q} Q + \beta^2 \bar{q} q - \frac{\beta}{2} (u - \alpha J) Q \\ + \alpha \ln G_{\text{Hebb}}(q, Q) + \ln G_{\text{Rufo}}(k, \bar{q}, \bar{Q}) \end{aligned} \quad (4.40)$$

onde:

$$\ln G_{\text{Hebb}} = -\frac{1}{2} \left\{ \ln [1 + \beta J(Q - q)] + \frac{\beta J q}{[1 + \beta J(Q - q)]} \right\} \quad (4.41)$$

$$\begin{aligned} \ln G_{\text{Rufo}} = \int_{-\infty}^{\infty} Dz \ln \int_0^{\infty} dx \exp \left[- \left[\beta^2 \left(\bar{Q} + \frac{\bar{q}}{2} \right) \right]^2 - \beta (k - \sqrt{\bar{q}} z) x \right] = \\ = \ln \sqrt{\frac{\pi}{4}} - \frac{1}{2} \ln \left[\beta^2 \left(\bar{Q} + \frac{\bar{q}}{2} \right) \right] + \int_0^{\infty} Dz \ln [e^{\sigma^2} \text{erfc}(\sigma)] \end{aligned} \quad (4.42)$$

com:

$$\sigma = \frac{k - \sqrt{\bar{q}}z}{2\sqrt{\bar{Q} + \frac{\bar{q}}{2}}} \quad (4.43)$$

A energia livre média por espécie é determinada sobre os parâmetros de ponto de sela, $q, \bar{q}, Q, \bar{Q}, k$, dados pelas condições:

$$\beta \left(\bar{Q} + \frac{\bar{q}}{2} \right) = \frac{1}{2} \lambda \quad (4.44)$$

$$\lambda = u - \delta^2 v - \frac{\alpha J^2 v}{1 + Jv} \quad (4.45)$$

$$Q - q + \frac{q^{-1/2}}{2\beta^2 \left(\bar{Q} + \frac{\bar{q}}{2} \right)} \int_0^\infty Dz z \frac{I'(\sigma)}{I(\sigma)} = 0, \quad I(\sigma) = e^{\sigma^2} \operatorname{erfc}(\sigma) \quad (4.46)$$

$$Q - \frac{1}{2\beta^2 \left(\bar{Q} + \frac{\bar{q}}{2} \right)} [1 + \beta k + \beta \bar{q}v] = 0 \quad (4.47)$$

onde $v = \beta(Q - q)$.

Os parâmetros de ponto de sela, definidos anteriormente pelas expressões (4.21) e (4.22) são funções das abundâncias nas seguintes formas, assumindo a hipótese de simetria de réplicas:

$$Q = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle x_i^2 \rangle_T \right\rangle \quad (4.48)$$

$$q = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle x_i \rangle_T^2 \right\rangle \quad (4.49)$$

$\langle \dots \rangle_T$ é a média térmica sobre a distribuição de Gibbs:

$$\mathcal{W}(\mathbf{x}) = \frac{1}{Z} \delta \left(N - \sum_i \mathbf{x}_i \right) e^{-\mathcal{H}(\mathbf{x})} \quad (4.50)$$

O parâmetro Q dá a probabilidade de que dois indivíduos selecionados aleatoriamente pertençam à mesma espécie, definição do índice de Simpson. Ou seja Q fornece uma medida do número de espécies em coexistência no equilíbrio [3, 28].

4.3 Limite de baixa temperatura

Nas seções anteriores utilizamos as ferramentas da mecânica estatística e o ensemble de Gibbs de um sistema termodinâmico, um artifício para calcular as expressões analíticas para as propriedades macroscópicas do sistema ecológico em estudo. Nesta seção aplicamos o limite de baixa temperatura determinando as propriedades macroscópicas, mas na situação de equilíbrio, correspondente aos estados para os quais o funcional adaptabilidade é máximo.

Seja $\Delta = k/q$. No limite $\beta \rightarrow \infty$ a variável $v = \beta(Q - q)$ tende a zero, de modo que os parâmetros Q e q sejam iguais. Sendo assim obtemos as expressões:

Energia livre média por espécie no estado fundamental:

$$f_0 = \frac{q}{2} \left[\lambda - \delta^2 v - \frac{\alpha J^2 v}{(1 + Jv)^2} \right] \quad (4.51)$$

Condições de ponto de sela no estado fundamental:

$$\bar{q} = \left[\delta^2 + \frac{\alpha J^2}{(1 + Jv)^2} \right] q \quad (4.52)$$

$$v = \frac{1}{\lambda} \int_{\Delta}^{\infty} Dz z(z - \Delta) \quad (4.53)$$

$$1 = \frac{\sqrt{\bar{q}}}{\lambda} \int_{\Delta}^{\infty} Dz (z - \Delta) \quad (4.54)$$

$$q = \frac{1}{\lambda} (\bar{q}v - \sqrt{\bar{q}}\Delta) \quad (4.55)$$

$$\lambda = u - \delta^2 v - \frac{\alpha J^2 v}{1 + Jv} \quad (4.56)$$

Para resolver as equações de ponto de sela recorreremos a um método numérico. A partir da entrada de valores da variável Δ reescrevemos q e v como funções de Δ e de \bar{q} . Resolvemos uma equação transcendente para \bar{q} pelo método da bisseção e finalmente obtemos os valores de $v(\bar{q}, \Delta)$, $q(\bar{q}, \Delta)$, $u(\bar{q}, \Delta)$, $f_0(\bar{q}, \Delta)$ e ainda de $C(y, \bar{q}, \Delta)$.

Note que recuperamos os casos aleatório e Hebb linear mudando-se os valores de δ^2 e J (veja as figuras 4.1 e 4.2)

- Caso aleatório [16]: $\delta^2 = 1$ e $J = 0$:

Densidade de energia livre:

$$f_0 = \frac{q}{2}(u - 2v) \quad (4.57)$$

Equações de ponto de sela:

$$\tilde{q} = \delta^2 q \quad (4.58)$$

$$v = \frac{1}{u - v} \int_{\Delta}^{\infty} Dz z(z - \Delta) \quad (4.59)$$

$$1 = \frac{\sqrt{\tilde{q}}}{u - v} \int_{\Delta}^{\infty} Dz (z - \Delta) \quad (4.60)$$

- Caso Hebb linear [19]: $\delta^2 = 0$ e $J = 1$:

Densidade de energia livre:

$$f_0 = \frac{q}{2} \left[u - \alpha J - \frac{\alpha J^2 v}{(1 + Jv)^2} \right] \quad (4.61)$$

Equações de ponto de sela:

$$\tilde{q} = \frac{\alpha q}{(1 + v)^2} \quad (4.62)$$

$$v = \frac{1}{\lambda} \int_{\Delta}^{\infty} Dz z(z - \Delta) \quad (4.63)$$

$$1 = \frac{\sqrt{\tilde{q}}}{\lambda} \int_{\Delta}^{\infty} Dz (z - \Delta) \quad (4.64)$$

$$\lambda = u - \alpha + \frac{\alpha}{1 + v} \quad (4.65)$$

4.4 Distribuição cumulativa

A distribuição cumulativa nos informa sobre a distribuição das abundâncias no equilíbrio. É a distribuição das densidades populacionais cujos valores são inferiores a um valor dado y . Por definição:

$$C_j(y) = 1 - \lim_{\beta \rightarrow \infty} \left\langle \int_0^\infty \prod_j dx_j \Theta(x_j - y) \mathcal{W}(\{x_j\}) \right\rangle \quad (4.66)$$

na qual:

$$\Theta(x_j - y) = \begin{cases} 1, & \text{se } x_j > y, \forall j \\ 0, & \text{demais casos.} \end{cases} \quad (4.67)$$

$\langle \dots \rangle_T$ denota a média sobre a distribuição de Gibbs:

$$\mathcal{W}(\{x_j\}) = \frac{\delta(N - \sum_j x_j) e^{-\beta \mathcal{H}(\{x_j\}, J_{ij})}}{\int_0^\infty \prod_j dx_j \delta(N - \sum_j x_j) e^{-\beta \mathcal{H}(\{x_j\}, J_{ij})}} \quad (4.68)$$

Como todas as concentrações x_j são equivalentes escrevemos $C_j(y) = C(y)$.

Escrevemos uma outra expressão para a distribuição cumulativa definindo uma Hamiltoniana efetiva, soma da hamiltoniana composta, eq. 4.10 com um termo proporcional a $\Theta(x_j - y)$:

$$\mathcal{H}_{ef}(\{x_j\}) = \mathcal{H}(\{x_j\}) - h\Theta(x_j - y) \quad (4.69)$$

Deste modo:

$$C_j(y) = 1 - \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\partial}{\partial h} \langle \ln Z_{ef} \rangle \Big|_{h=0} \quad (4.70)$$

Obtemos:

$$C_j(y) = 1 - \lim_{\beta \rightarrow \infty} \int_0^\infty Dz \frac{\text{erfc}(\gamma)}{\text{erfc}(\sigma)} \quad (4.71)$$

com:

$$\gamma = \left(\frac{\beta}{2\lambda} \right)^{1/2} y + \sigma \quad (4.72)$$

$$\sigma = \left(\frac{\beta}{2\lambda} \right)^{1/2} \bar{q}^{1/2} (\Delta - z) \quad (4.73)$$

Após algumas manipulações algébricas encontramos a expressão definitiva:

$$C(y) = 1 - \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\Delta + \frac{\lambda y}{\sqrt{\bar{q}}} \right) \right] \quad (4.74)$$

A diversidade de espécies é dada quando $y=0$:

$$d = 1 - C(0) = \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left[\frac{\Delta}{\sqrt{2}} \right] \quad (4.75)$$

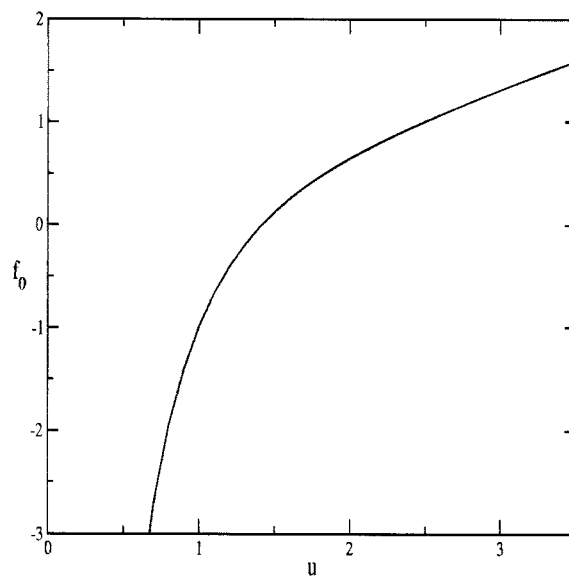


Figura 4.1: Energia livre média por espécie do modelo de replicadores aleatórios.

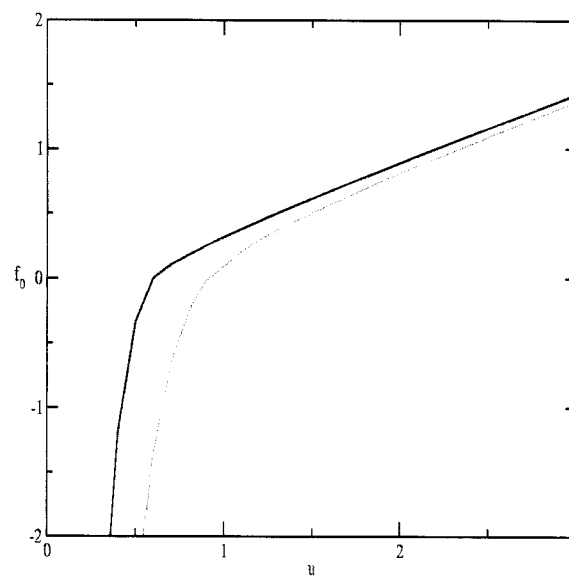


Figura 4.2: Energia livre média por espécie do modelo com interações de Hebb. Em preto $\alpha = 0.6$ e em vermelho $\alpha = 1.0$.

Capítulo 5

Funções Não Lineares

Neste capítulo propomos uma série de "experimentos teóricos" sobre o ecossistema de replicadores com interações não lineares. Estudamos os efeitos das escolhas de um mecanismo específico de interação, no caso em que $p = \alpha N$ sobre as propriedades de equilíbrio do ecossistema, particularmente a diversidade de espécies. Em todos os casos existe a dependência de um valor de corte θ , um limite para o grau de complementaridade (ou de similaridade) entre espécies. Analisamos ainda os comportamentos destas propriedades de equilíbrio sob a influência dos parâmetros de controle u e α .

5.1 Filtros

Com os filtros impomos um limite de similaridade ou complementaridade para que as espécies interajam linearmente. Fazendo isto eliminando um certo número de acoplamentos quando os valores de t_{ij} são pequenos (interações fracas), teremos o filtro passa baixa¹:

$$F(t_{ij}) = \begin{cases} t_{ij}, & \text{se } |t_{ij}| < \theta \\ 0, & \text{se } |t_{ij}| \geq \theta \end{cases} \quad (5.1)$$

Por outro lado, se eliminarmos um certo número de interações com valores de t_{ij} grandes (interações fortes), teremos o filtro passa alta:

$$F(t_{ij}) = \begin{cases} t_{ij}, & \text{se } |t_{ij}| > \theta \\ 0, & \text{se } |t_{ij}| \leq \theta \end{cases} \quad (5.2)$$

¹No filtro passa baixa o número de traços complementares ou similares entre pares de espécies tende a ser intermediário. Já no filtro passa alta, este número tende a ser elevado.

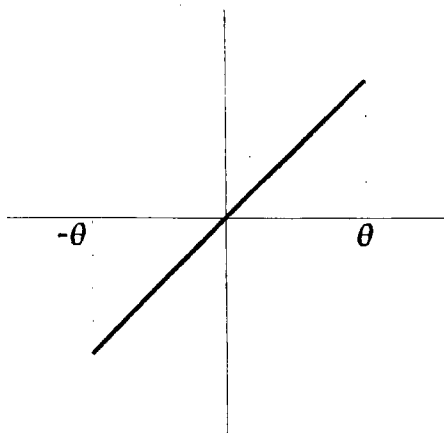


Figura 5.1: Filtro passa baixa.

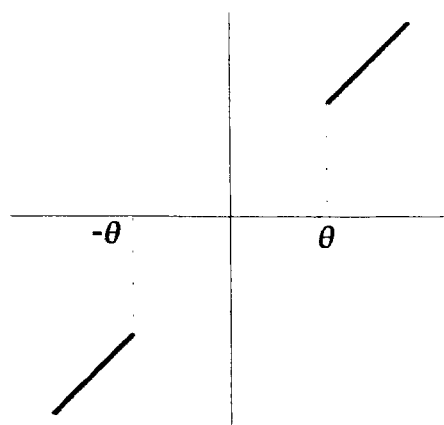


Figura 5.2: Filtro passa alta.

Uma medida do quanto as funções $F(t_{ij})$ se afastam do caso linear é dada pela variância do ruído gaussiano equivalente da propriedade de Sompolinsky (ver capítulo 4 e apêndice A):

Filtro passa baixa:

$$\delta_{f_{pb}}^2(\alpha, \theta) = \alpha(\bar{J}_{pb}^2 - J_{f_{pb}}^2) = \alpha J_{f_{pb}}(1 - J_{f_{pb}}), J_{f_{pb}} = 1 - \operatorname{erfc}\left(\frac{\theta}{\sqrt{2}}\right) - \sqrt{\frac{2}{\pi}}\theta e^{-\theta^2/2} \quad (5.3)$$

Se $\theta \rightarrow \infty$, então $\delta_{pb}^2 \rightarrow 0$ e recuperamos o caso linear. Temos ainda:

Filtro passa alta:

$$\delta_{f_{pa}}^2(\alpha, \theta) = \alpha(\bar{J}_{pa}^2 - J_{f_{pa}}^2) = \alpha J_{f_{pa}}(1 - J_{f_{pa}}), J_{f_{pa}} = \operatorname{erfc}\left(\frac{\theta}{\sqrt{2}}\right) + \sqrt{\frac{2}{\pi}}\theta e^{-\theta^2/2} \quad (5.4)$$

E recuperamos o caso linear quando $\theta \rightarrow 0$,

Observe que $J_{f_{pb}} = 1 - J_{f_{pa}}$ e portanto $\delta_{f_{pb}}^2 = \delta_{f_{pa}}^2$, ou seja os filtros se afastam do caso linear na mesma medida.

A figura 5.3 traz a variância em função de θ para diversos valores de α . Observe o ponto de máximo em 0.25α para $\theta_{0f} \simeq 1.58$, independentemente do valor de α , o qual influencia o comportamento das propriedades de equilíbrio.

Na figura 5.4, à esquerda, a diversidade é função de θ para alguns valores de α e a função não linear é o filtro passa baixa. Note que a diversidade decresce com o aumento de θ , especialmente quando $\alpha > 0.5$, devido ao aumento da contribuição dos termos aleatórios do funcional adaptabilidade (capítulo 4, equação (4.8)), responsáveis pelos efeitos de competição, superando a influência da pressão de cooperação u e portanto levando mais espécies à extinção. Os pontos de mínimo quando $\alpha \leq 0.5$ são frutos dos picos de variância e estão localizados em valores de θ distintos mas próximos a θ_{0f} . Um máximo na variância equivale a um máximo peso das contribuições aleatórias e portanto representa um número maior de espécies extintas.

À direita, o caso correspondente ao filtro passa alta é uma reflexão especular da figura à esquerda. Todas as considerações anteriores valem se considerarmos $\theta \rightarrow 0$.

A redução da diversidade com o aumento de α é melhor observada na figura 5.5, onde cada curva traz um θ distinto e em preto temos o caso linear. O comportamento anômalo da diversidade com θ crescente no filtro passa baixa, que se aproxima monotonicamente do caso linear somente quando $\theta \geq 2.0$ (no filtro passa alta observamos um comportamento semelhante para $\theta \leq 2.0$) se deve ao máximo da variância em $\theta_{0f} \simeq 1.58$.

O comportamento das figuras 5.4 e 5.5 permanece o mesmo sob qualquer mudança da pressão de cooperação. Aumentando o parâmetro u observamos um elevação global e quantitativa dos valores da diversidade.

No capítulo 4 vimos uma definição para uma medida indireta de diversidade: o parâmetro de ponto de sela q (igual a m no limite de baixa temperatura) ou índice de Simpson. Observemos o comportamento desta grandeza em função da pressão de cooperação u nas figuras 5.6 (filtro passa baixa) e 5.7 (filtro passa alta). Verificamos a dominância de poucas espécies para pequenos valores de u , quando temos $q \sim N^2$ e $x_i^{eq} \sim N$. Para valores grandes de u temos $q \sim 1$, o que significa a coexistência das espécies em um número macroscópico, com abundâncias $x_i^{eq} \sim 1$.

Quando θ é grande recuperamos um resultado curioso do caso linear: a descontinuidade em q indicando a coexistência ou não de um número de espécies para $\alpha=u=1/2$. Este comportamento fica evidente na figura 5.8.

Uma outra grandeza de interesse para caracterizar o ecossistema é a distribuição das abundâncias, distribuição cumulativa, ou fração de espécies cuja densidade é inferior a um valor y (figura 5.9). $C(0)$ dá a fração de espécies extintas que tende a ser elevada para valores pequenos de u . Aumentando-se α a fração de espécies extintas cresce, chegando a superar os 90%, quando $u=0.3$ e $\alpha=1.0$ (filtro passa baixa, figura superior à direita). Valores crescentes de u reduzem a fração de espécies raras. Estas tendências se confirmam com o filtro passa alta.

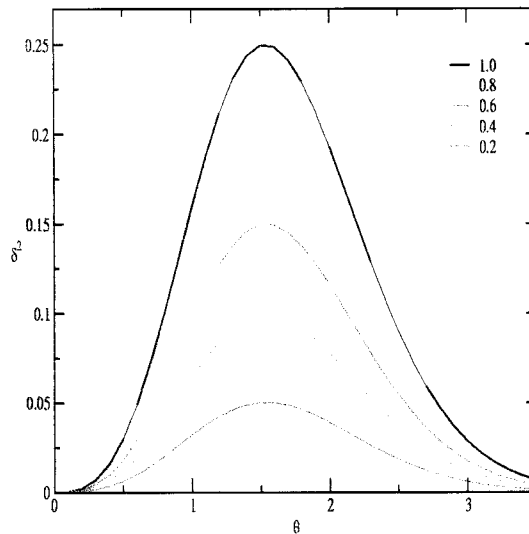


Figura 5.3: Variância em função de θ dos filtros. Os valores de α estão indicados.

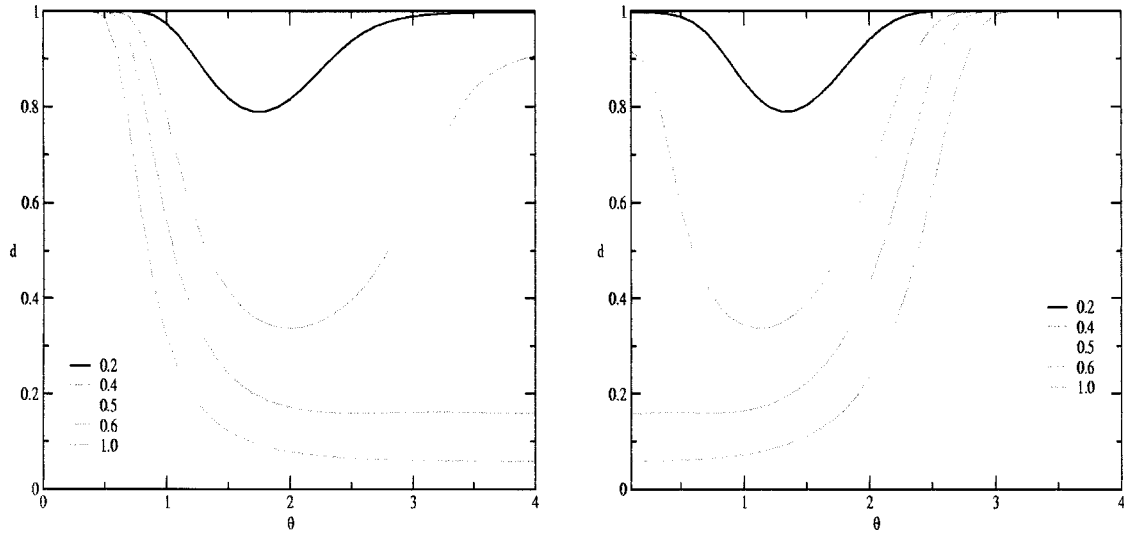


Figura 5.4: Diversidade em função de θ para diversos valores de α e $u=0.5$. Esquerda: filtro passa baixa. Direita: filtro passa alta.

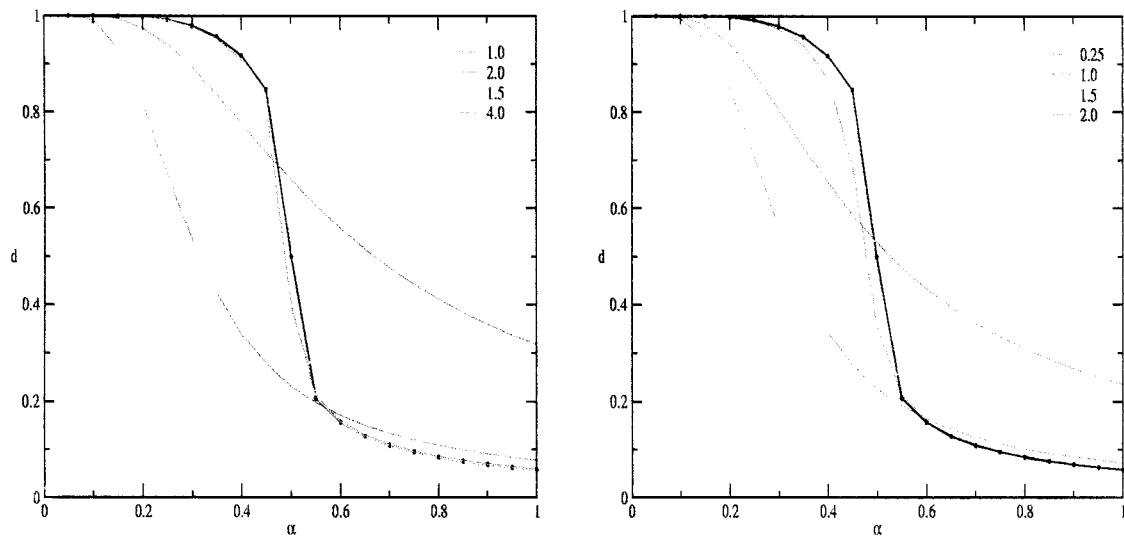


Figura 5.5: Diversidade em função de α para alguns valores de θ e $u=0.5$. Esquerda: filtro passa baixa. Direita: filtro passa alta. Em preto o caso linear.

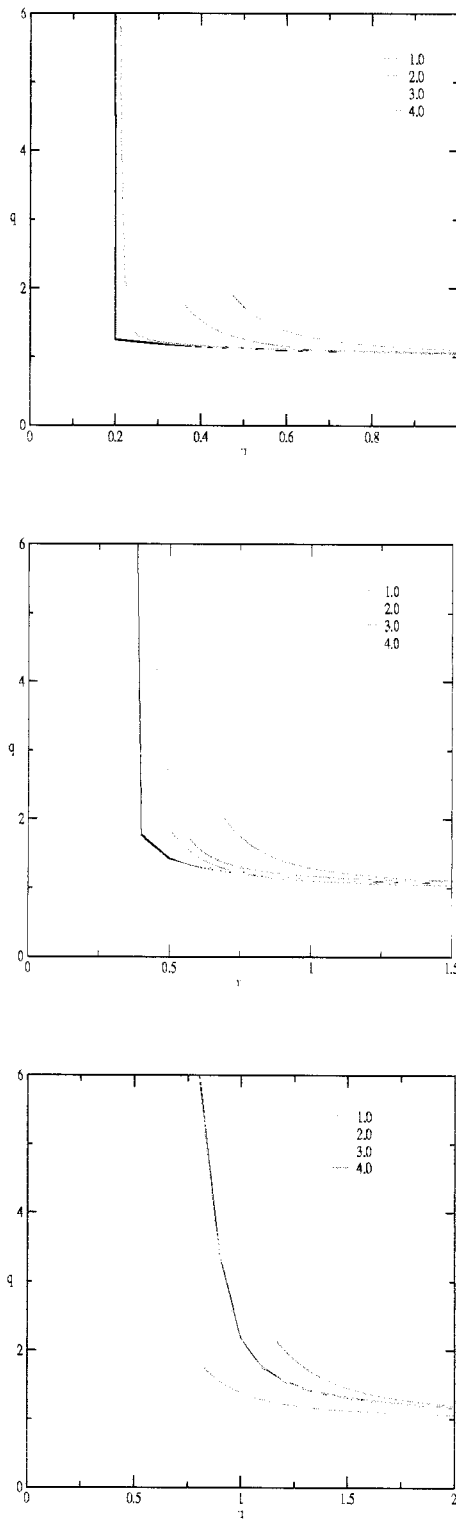


Figura 5.6: Índice de Simpson em função de u para o filtro passa baixa com alguns valores de θ indicados e $\alpha= 0.2$ (acima), 0.4 (meio), 1.0 (abaixo). Em preto o caso linear.

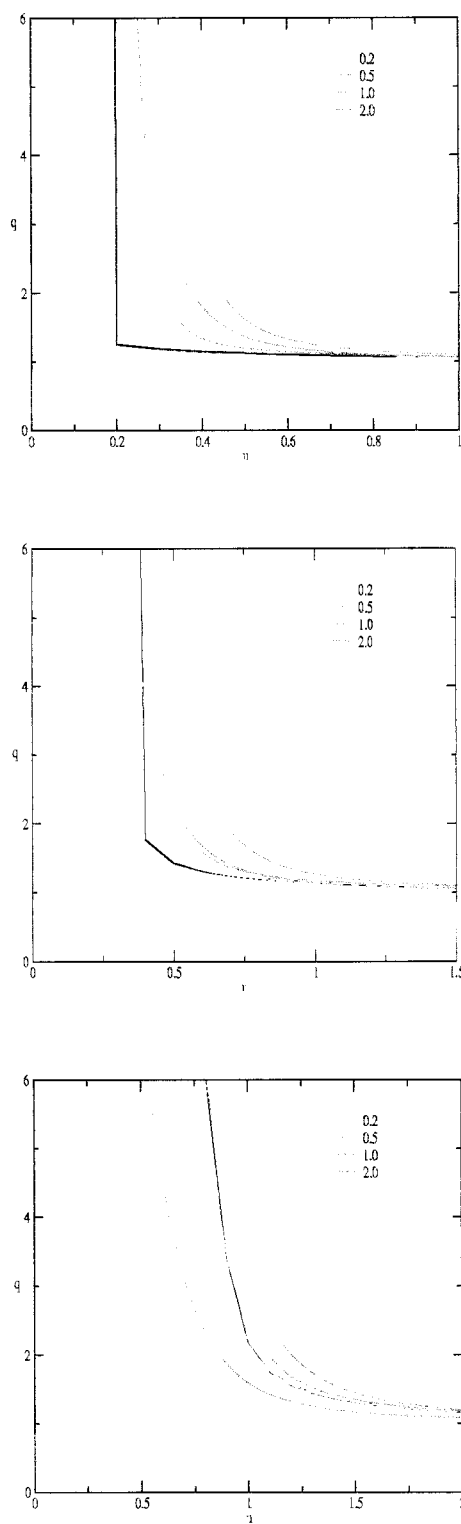


Figura 5.7: Índice de Simpson em função de u para o filtro passa alta com alguns valores de θ indicados e $\alpha = 0.2$ (acima), 0.4 (meio), 1.0 (abaixo). Em preto o caso linear.

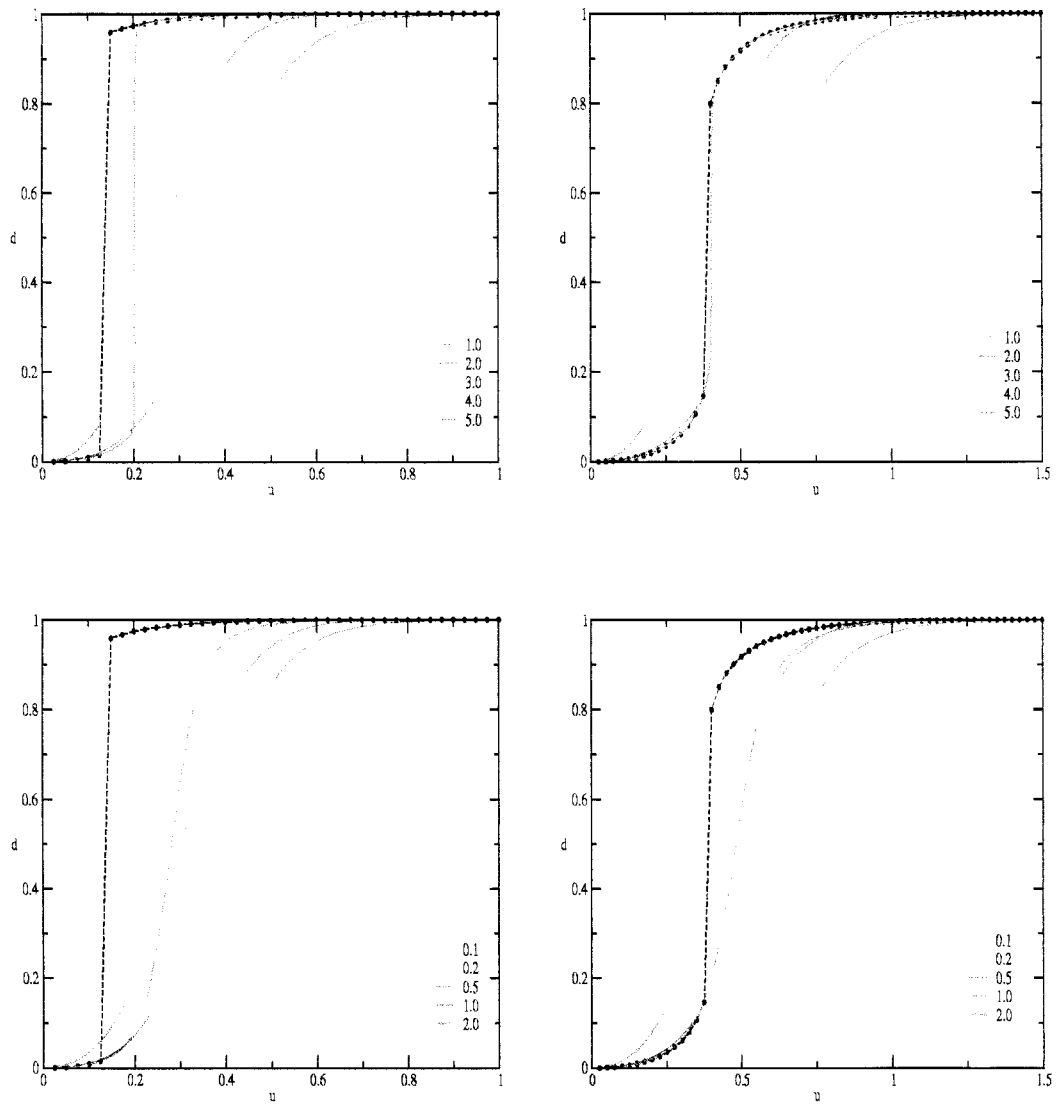


Figura 5.8: Descontinuidade da diversidade em função de u para $\alpha < 1/2$, com $\alpha = 0.2$ (esquerda), 0.4 (direita). Valores de θ indicados. Acima: filtro passa baixa. Abaixo: filtro passa alta. Em preto o caso linear.

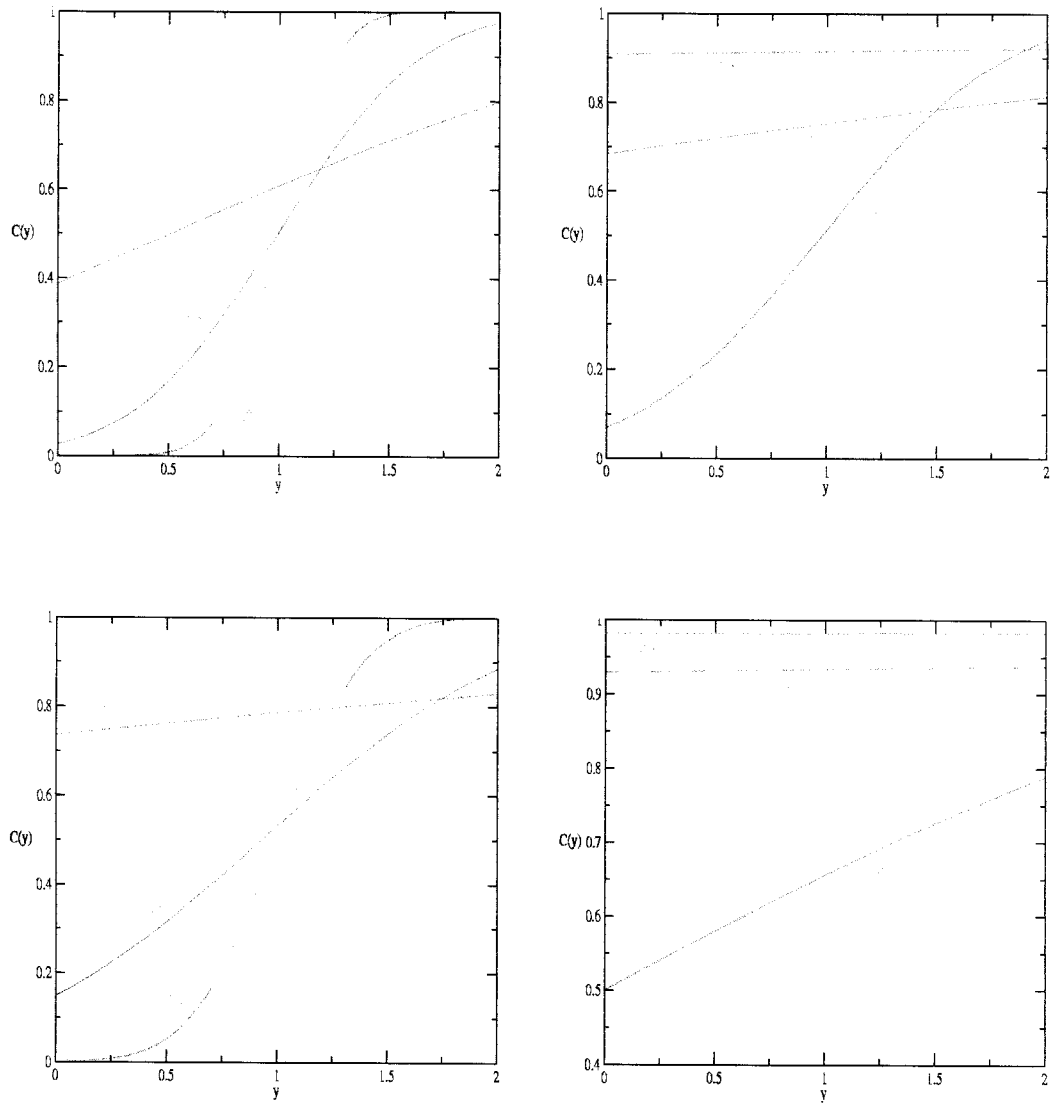


Figura 5.9: Distribuição cumulativa para $\alpha=0.2$ (esquerda), 1.0 (direita), $\theta=1.0$ e para alguns valores de u indicados. Acima: filtro passa baixa. Abaixo: filtro passa alta.

5.2 Interações em três níveis

Neste caso impomos o limite de similaridade de modo que apenas os sinais das interações contribuem para a matriz de acoplamentos. Ou seja, eliminamos os acoplamentos cujas intensidades possuem módulo inferior ao valor de corte e mantemos os demais acoplamentos a valores constantes, dependentes dos sinais. Sendo assim definimos uma interação em três níveis e se $\theta=0$, dizemos que as interações são cortadas.

$$F(t_{ij}) = \begin{cases} \text{sign}(t_{ij}), & \text{se } |t_{ij}| > \theta \\ 0, & \text{se } |t_{ij}| \leq \theta \end{cases} \quad (5.5)$$

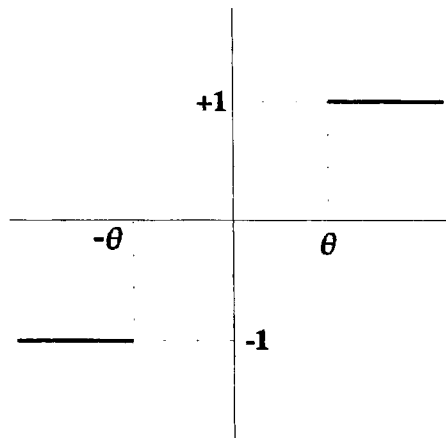


Figura 5.10: Interação em três níveis.

A variância do ruído gaussiano tem expressão:

$$\delta_{tn}^2 = \alpha(\bar{J}_{tn}^2 - J_{tn}^2) \quad (5.6)$$

$$\bar{J}_{tn}^2 = \text{erfc}\left(\frac{\theta}{\sqrt{2}}\right) \quad (5.7)$$

$$J_{tn} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-\theta^2/2} \quad (5.8)$$

A variância, uma função decrescente de θ é aproximadamente nula quando $\theta > 3.0$ (figura 5.11). Neste limite a diversidade é máxima, independentemente do valor de α conforme observamos na figura 5.12. Aqui também existe o decréscimo da diversidade com α pelos motivos já explicados.

Confirmamos esta tendência com a figura 5.13, onde temos $dx\alpha$, para alguns valores de θ e $u=0.5$. Observa-se a diversidade crescer monotonicamente com θ pela eliminação dos termos não diagonais da matriz de acoplamentos, responsáveis pelos efeitos de competição.

As demais grandezas (figuras 5.14 e 5.15) apresentam o comportamento qualitativo observado nos filtros. O caso linear aparece em preto na figura 5.14 para comparação. A dominância de poucas espécies é maior quando $\theta=0.0$. Na figura 5.15, a fração de espécies extintas tende a cair com o aumento de u , como já observamos.

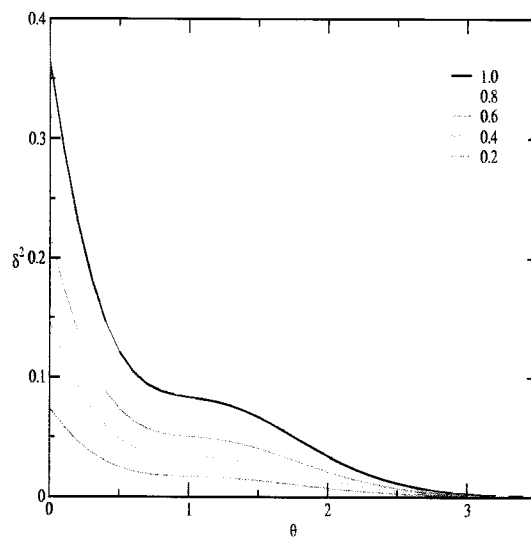


Figura 5.11: Variância em função de θ da interação em três níveis. Os valores de α estão indicados.

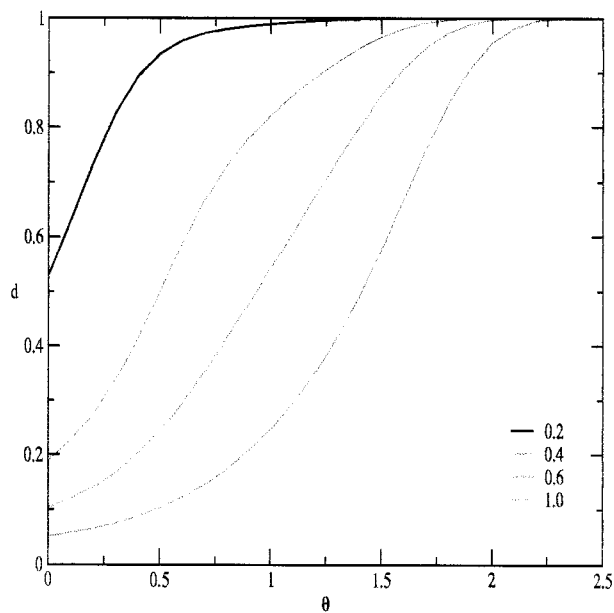


Figura 5.12: Diversidade em função de θ da interação em três níveis para diversos valores de α e $u=0.5$.

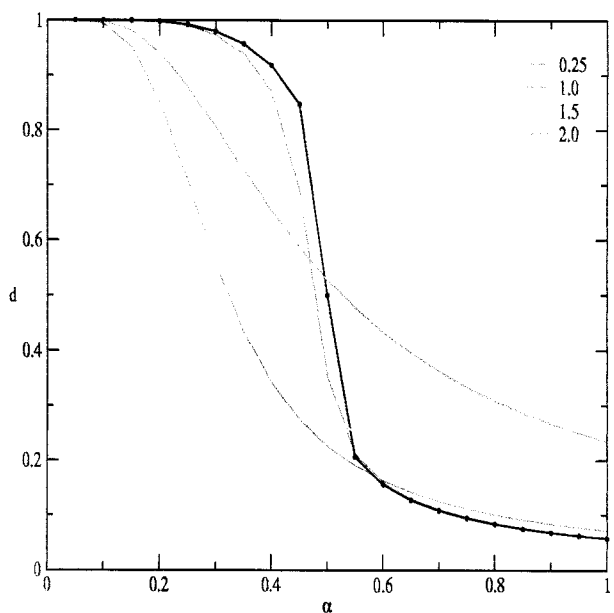


Figura 5.13: Diversidade em função de α da interação em três níveis para diversos valores de θ e $u=0.5$. Caso linear em preto.

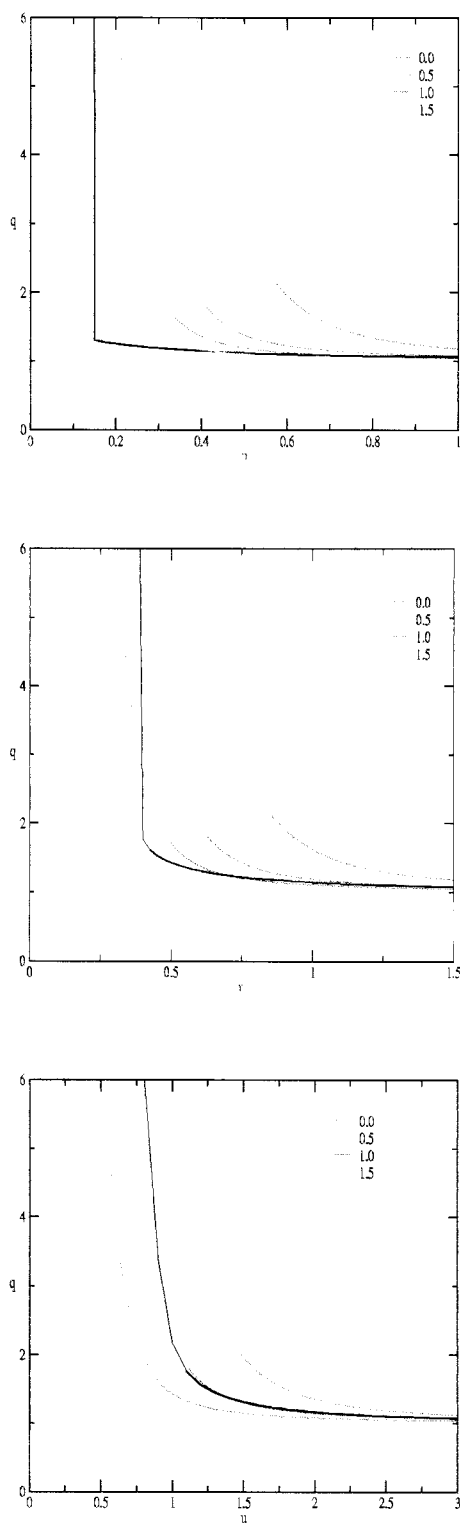


Figura 5.14: Índice de Simpson em função de u da interação em três níveis para alguns valores de θ e $\alpha = 0.2$ (acima), 0.4 (meio), 1.0 (abaixo). Em preto o caso linear.

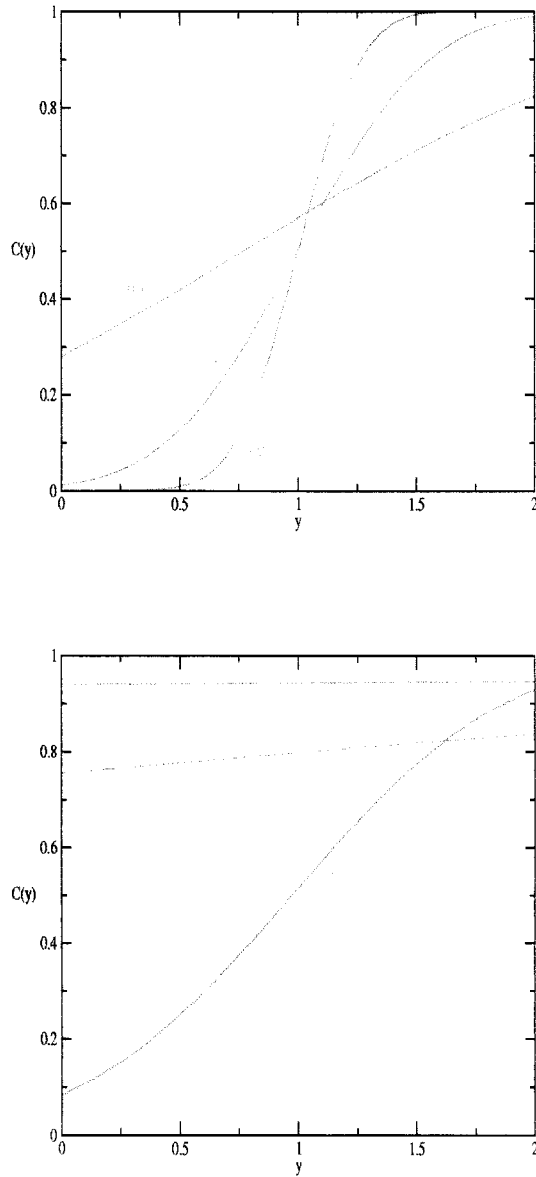


Figura 5.15: Distribuição cumulativa da interação em três níveis para $\alpha=0.2$ (acima), 1.0 (abaixo) e $\theta=1.0$.

5.3 Linearidade e saturação

O experimento final consiste de fazer as espécies com forças de interação suficientemente fracas, cujas magnitudes em módulo são inferiores a θ interagirem linearmente. As demais interações contribuem apenas com os seus sinais, tendo o módulo constante e igual a θ .

$$F(t_{ij}) = \begin{cases} t_{ij}, & \text{se } |t_{ij}| < \theta \\ \text{sign}(t_{ij}), & \text{se } |t_{ij}| \geq \theta \end{cases} \quad (5.9)$$

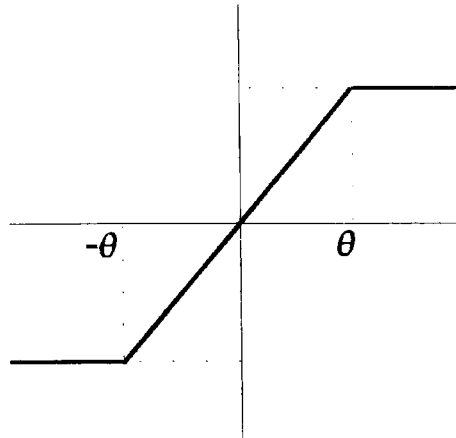


Figura 5.16: Linearidade e saturação.

Esta função possibilita estudar a composição dos efeitos das funções anteriores, o filtro passa baixa e as interações em três níveis (no caso das interações cortadas, com $\theta=0$). Vejamos a variância do ruído gaussiano equivalente:

$$\delta_{ls}^2 = \alpha(\tilde{J}_{ls}^2 - J_{ls}^2) \quad (5.10)$$

$$\tilde{J}_{ls}^2 = (\theta^2 - 1)\text{erfc}\left(\frac{\theta}{\sqrt{2}}\right) - \sqrt{\frac{2}{\pi}}\theta e^{-\theta^2/2} + 1 \quad (5.11)$$

$$J_{ls} = 1 - \text{erfc}\left(\frac{\theta}{\sqrt{2}}\right) \quad (5.12)$$

Note que $J_{ls} = J_{fpb} + J_{tn}$ e $\tilde{J}_{ls}^2 = \tilde{J}_{fpb}^2 + \theta^2 \tilde{J}_{tn}^2$.

A figura 5.17 traz a variância do ruído gaussiano em função de θ para diversos α , cujo comportamento é bastante semelhante ao exibido na figura 5.2, exceto pelo ponto de máximo em $\sim 0.5\alpha$ e $\theta_{0ls} \simeq 0.85$. Portanto o ponto de máximo é deslocado e menor do que o encontrado naquele caso e isto é claramente uma influência das interações constantes.

A redução do máximo da variância tem efeito sobre a figura 5.18, onde d é função de θ , para diversos valores de α . A diversidade decresce com o aumento de θ , conforme visto no filtro passa baixa, e o mínimo para $\alpha \leq 0.05$ ocorre em torno de $\theta_{0LS} \simeq 0.85$, tendo menor pronunciamento do que o do primeiro caso. Quando $\alpha=0.2$ quase não há decréscimo de diversidade e se $\alpha=1.0$ e $\theta \simeq 3.0$, a diversidade é menor do que no filtro passa baixa, já que a variância é proporcional aos termos \tilde{J}^2 e $\tilde{J}_{ls}^2 < \tilde{J}_{fpb}^2$

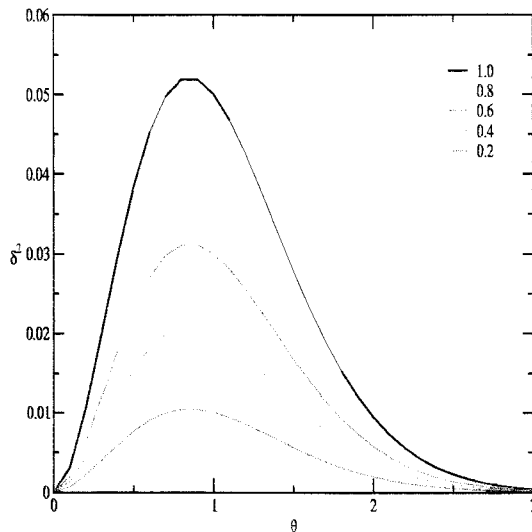


Figura 5.17: Variância em função de θ das interações lineares e saturadas. Os valores de α estão indicados.

Estudando como a fração de espécies sobreviventes varia com α , figura 5.19, observamos que as curvas decaem rapidamente para $\alpha \geq 0.5$ e tendem a se aproximar do caso linear (em preto) já quando $\theta > 2.0$. Quando $\alpha < 0.5$ os valores da diversidade são maiores do que no filtro passa baixa e verificamos uma fração beirando os 100% quando $\alpha < 0.3$. Novamente a variação do parâmetro u não altera o comportamento qualitativo das curvas.

Na figura 5.20, variação do índice de Simpson com o parâmetro u , observamos que uma tendência ao colapso sobre a curva em preto, o caso linear, mais rapidamente do que quando usamos as funções anteriores. O comportamento segue o padrão das demais funções não lineares, assim como na distribuição cumulativa, figura 5.21. A seção seguinte apresenta uma comparação das medidas de diversidade para todas as funções não lineares.

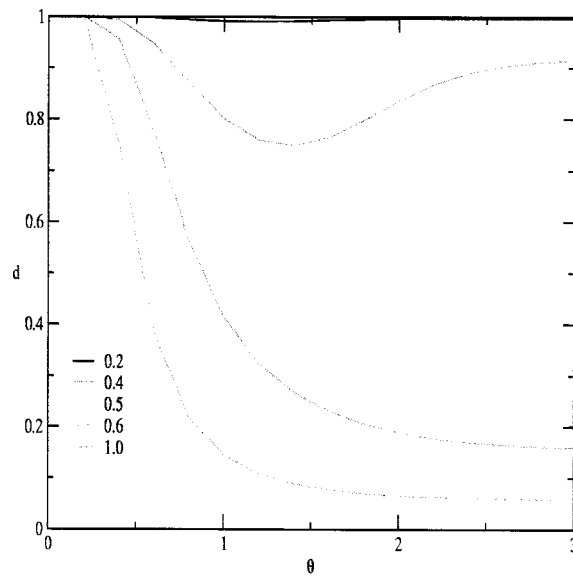


Figura 5.18: Diversidade em função de θ das interações lineares e saturadas para diversos valores de α e $u=0.5$.

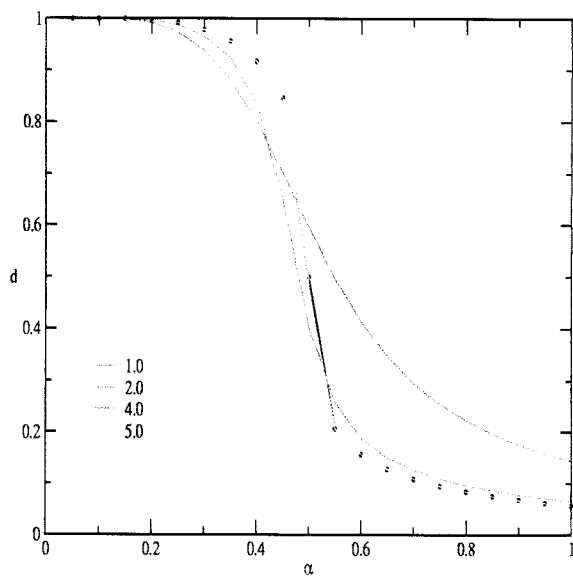


Figura 5.19: Diversidade em função de α das interações lineares e saturadas para diversos valores de θ e $u=0.5$. Em preto o caso linear.

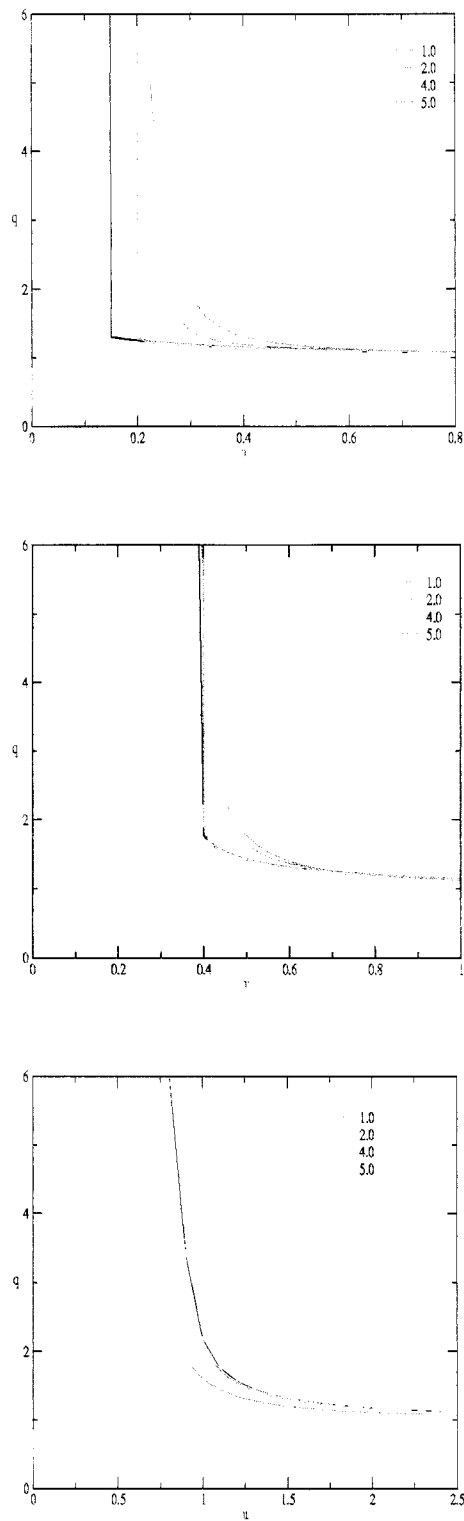


Figura 5.20: Índice de Simpson em função de u das interações lineares e saturadas para alguns valores de θ e $\alpha = 0.2$ (acima), 0.4 (meio), 1.0 (abaixo). Em preto o caso linear.

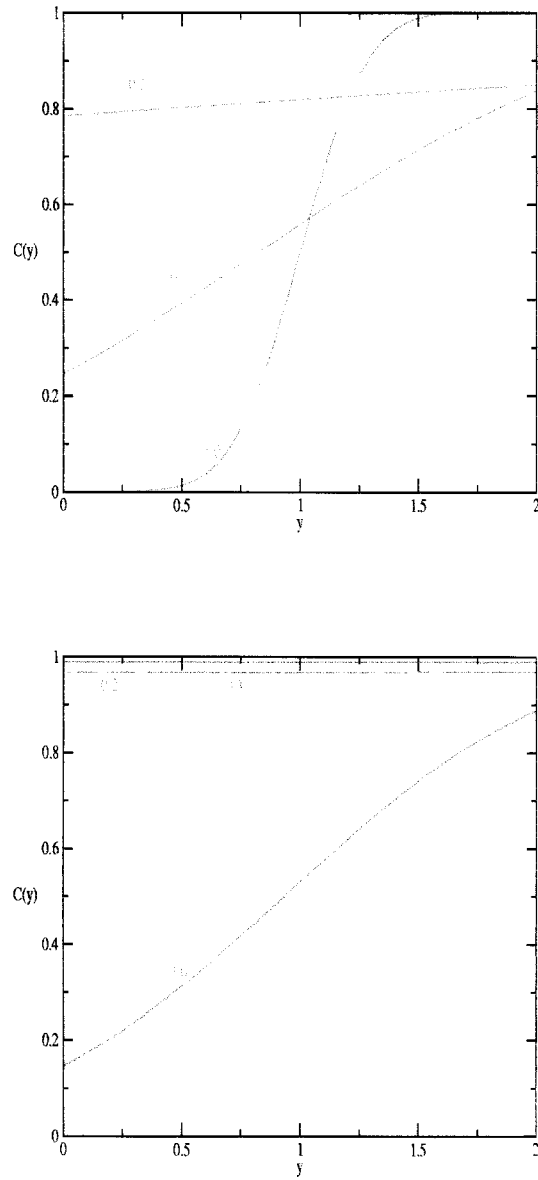


Figura 5.21: Distribuição cumulativa das interações lineares e saturadas para $\alpha=0.2$ (acima), 1.0 (abaixo) e $\theta=1.0$.

5.4 Comparando funções não lineares

Nesta seção comparamos as propriedades estatísticas das funções lineares buscando identificar os principais fatores responsáveis pelo comportamento da diversidade. Ainda comparamos os resultados analíticos e os obtidos da resolução numérica da equação de replicadores (capítulo 3, equação (3.1)).

A eliminação dos termos aleatórios faz a diversidade crescer com θ (figura 5.22), quando escolhemos o filtro passa alta e a interação em três níveis. A diversidade máxima para θ grande também se deve ao efeito da eliminação das interações entre pares altamente complementares. Neste caso a competição intraespecífica é o fator predominante. No filtro passa baixa e na linearidade e saturação o efeito é inverso. Esta última função tem a diversidade caindo mais rapidamente com θ .

Na figura 5.23, onde a diversidade é função de α , o filtro passa alta tem uma fração de espécies sobreviventes decaindo mais rapidamente. Quando $\alpha=1.0$ a diversidade decresce na seguinte ordem de escolha da função não linear: filtro passa baixa, interação em três níveis, linearidade e saturação, filtro passa alta e finalmente o caso linear (em preto). Isto se explica pelo comportamento das variâncias, proporcionais aos termos \bar{J}^2 . Para um dado θ estes termos crescem na seguinte ordem: Esta sequência tem o correspondente efeito também ilustrado na figura 5.26, onde temos a distribuição cumulativa para três valores de α .

$$\bar{J}_{f_{pb}}^2 < \bar{J}_{tn}^2 < \bar{J}_{ls}^2 < \bar{J}_{f_{pa}}^2 < \bar{J}_{linear}^2 = 1.0$$

Os resultados analíticos concordam com os resultados numéricos na região em que as soluções com simetria de réplicas são estáveis em baixa temperatura [29]. No caso aleatório gaussiano a região de estabilidade corresponde a $u < \sqrt{2}$ [15, 16] e no caso linear temos a região quando $u < \alpha=0.5$ e $\alpha > 0.5$, $u \lesssim \alpha$. As curvas seguem o padrão do caso aleatório, com soluções analíticas se distanciando das soluções numéricas para $u < \sqrt{2}$ nas figuras 5.24 e 5.25.

A figura 5.26 sugere que no modelo tal região corresponda a α pequeno, já que a concordância tende a piorar na medida em que α cresce.

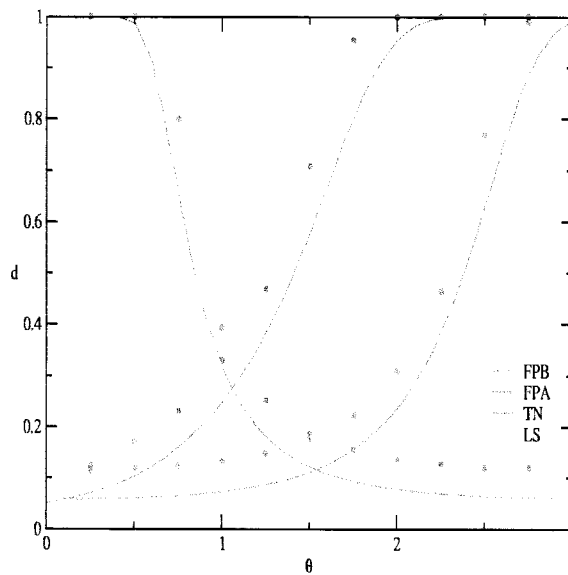


Figura 5.22: Diversidade em função de θ com $\alpha=1.0$ e $u=0.5$. Filtro passa baixa em azul, filtro passa alta em verde, três níveis em vermelho e linearidade e saturação em laranja. Os símbolos indicam a solução da equação de replicadores para 300 espécies e 100 amostras de configurações e condições iniciais.

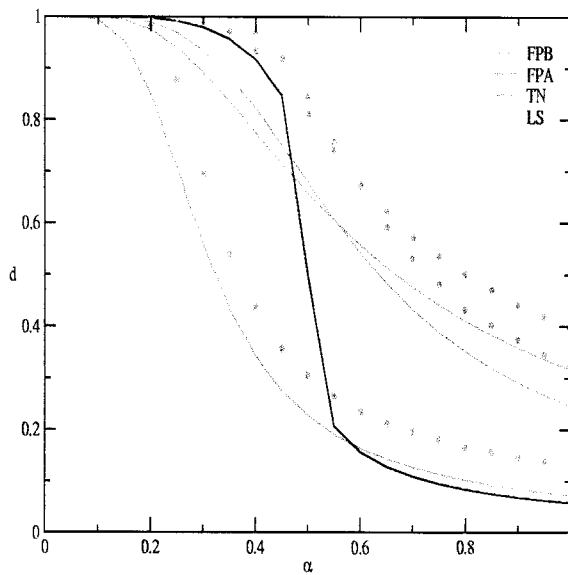


Figura 5.23: Diversidade em função de α com $\theta=1.0$ e $u=0.5$. Cores e símbolos como na figura acima. Solução da equação de replicadores para 300 espécies e 100 amostras de configurações e condições iniciais.

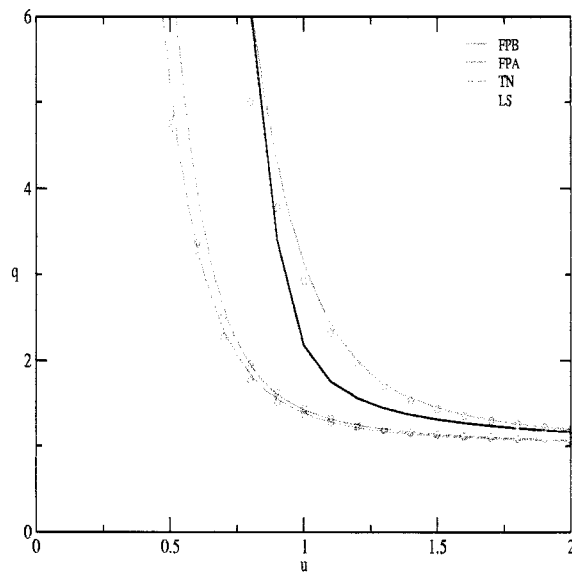


Figura 5.24: Índice de Simpson em função de u com $\alpha=\theta=1.0$. Caso linear em preto, filtro passa baixa em azul, filtro passa alta em verde, três níveis em vermelho e linearidade e saturação em laranja. Os símbolos indicam a solução da equação de replicadores para 200 espécies e 100 amostras de configurações e condições iniciais.

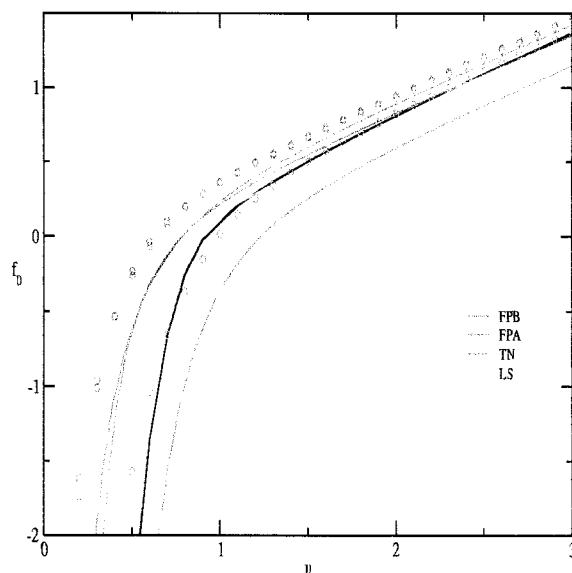


Figura 5.25: Densidade de energia livre em função de u com $\alpha=\theta=1.0$. Cores e símbolos como na figura acima.

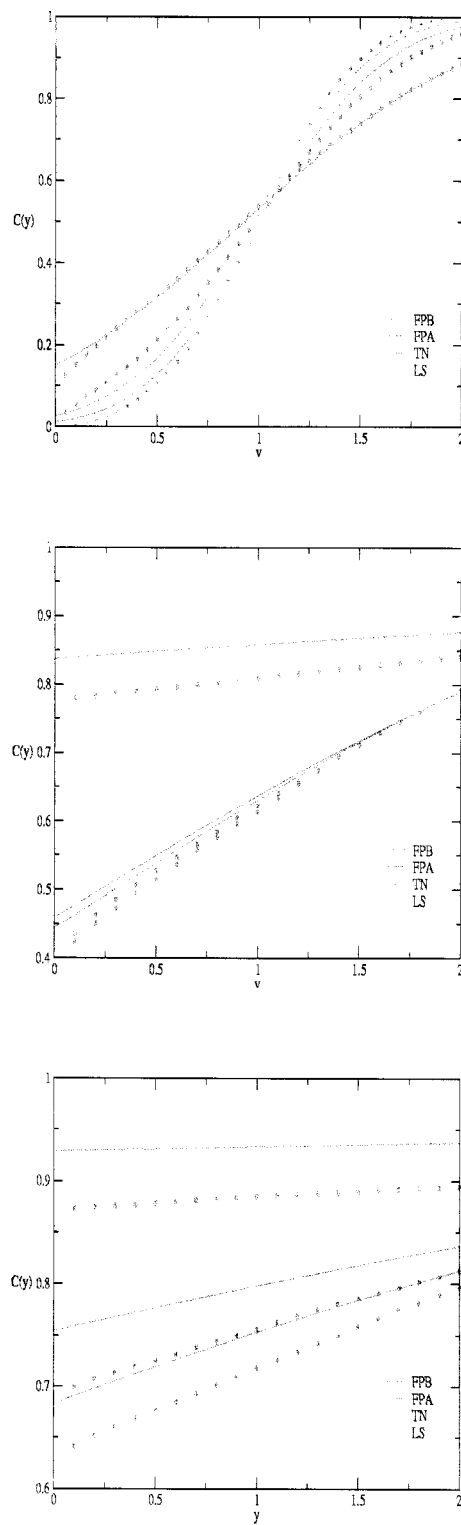


Figura 5.26: Distribuição cumulativa das funções não lineares para $\theta=1.0$ e $u=0.5$. Filtro passa baixa em azul, filtro passa alta em verde, três níveis em vermelho e linearidade e saturação em laranja. $\alpha=0.2$ (acima), 0.6 (meio), 1.0 (abaixo). Os símbolos indicam a solução da equação de replicadores para 200 espécies e 100 amostras de configurações e condições iniciais.

Capítulo 6

Conclusão

Esta dissertação teve como principal motivação investigar as condições que influenciam a estrutura de uma comunidade biológica, em termos da biodiversidade e abundâncias. Propomos um modelo de comunidade biológica no qual N espécies interagem par a par via interações simétricas aleatórias e a evolução temporal de suas abundâncias é descrita pela dinâmica de replicadores.

No capítulo 2 estudamos as técnicas analíticas utilizadas para determinar as propriedades estatísticas de equilíbrio do modelo, um sistema desordenado, cujo comportamento é do tipo vidro de spin.

No capítulo 3 apresentamos a dinâmica de replicadores e os modelos com interações aleatórias, dentre os quais o nosso.

No capítulo 4, por meio do método de réplicas e da propriedade de Sompolinsky, derivamos a energia livre média por espécie, juntamente com os parâmetros de ponto de sela, um dos quais é interpretado como o Índice de Simpson. Esta grandeza é uma medida indireta do número de espécies sobreviventes no equilíbrio. Determinamos ainda, a distribuição cumulativa, fração de espécies com abundâncias inferiores a um dado valor, propriedade que permite calcular a diversidade de espécies ou total de espécies presentes no sistema ecológico em equilíbrio. Neste capítulo ainda validamos a generalidade do modelo, recuperando os casos aleatório gaussiano e linear a partir das expressões analíticas das propriedades estatísticas no equilíbrio.

No apêndice B, um complemento ao capítulo 4, estudamos analiticamente o caso em que p é finito. Derivamos a densidade de energia livre e os parâmetros de ponto de sela, introduzindo um desvio na probabilidade de aparecimento de um traço. Uma perspectiva que se coloca é a da determinação da distribuição cumulativa, bem como da resolução numérica

dos parâmetros de ponto de sela, dados por sistemas de equações acopladas.

No capítulo 5 escolhemos quatro funções moduladoras, ímpares e não periódicas, adequadas à aplicação da propriedade de Sompolinsky e para explicitar os efeitos dos sinais das interações [24]. Supomos a existência de um limite para o grau de complementaridade (ou de similaridade), expresso pelo valor de corte θ , que molda o comportamento de cada função. Estudamos o efeito da eliminação de interações fracas ou fortes (filtros passa baixa e passa alta), da presença de interações saturadas (interações em três níveis ou cortadas) e finalmente de uma função linear e saturada a depender de θ .

Nossas observações mostram que influenciam as medidas de diversidade, além da competição intraespecífica, já conhecida da literatura [15, 16, 17, 19, 28], o total de traços e a presença de espécies altamente complementares (ou altamente similares), além dos termos aleatórios que representam a competição interespecífica.

Independentemente da função não linear, o total de traços influencia todas as medidas da diversidade e a distribuição das abundâncias de um modo similar ao que acontece no caso linear. Quanto maior o tamanho do conjunto de traços, ou seja da complexidade de uma dada espécie (portanto do ecossistema), maior é a probabilidade de encontrarmos pares altamente complementares. Como existe um vínculo de produtividade constante, estas espécies tendem a dominar a comunidade biológica, suas abundâncias tendem a crescer levando um número maior de espécies à extinção. Os termos aleatórios, elementos não diagonais da matriz de acoplamentos, são responsáveis pelos efeitos de competição. Quando suas contribuições superam a influência da competição intraespecífica medimos uma fração menor de espécies em coexistência.

Imaginemos que as espécies estejam conectadas umas às outras por um rede de ligações, a rede comunitária. Esta dissertação abordou o caso em que desconectamos seletivamente suas ligações. Na referência [23] discutimos a desconexão aleatória das ligações (o chamado modelo de diluição aleatória) e temos o mesmo conjunto de equações de ponto de sela descrevendo ambas as situações. Nos casos aleatório gaussiano e linear a rede comunitária é completamente conectada. Na mesma referência ainda fazemos a análise de estabilidade das soluções com simetria de réplicas. Determinamos as regiões de estabilidade para três das funções não lineares estudadas no capítulo 5.

Neste trabalho propomos uma idealização de uma comunidade biológica na qual relações de competição e de cooperação ocorrem entre espécies com igual número de traços, equiva-

lente a um potencial semelhante de exploração do ambiente. Desconhecemos os mecanismos responsáveis pela atribuição de um determinado conjunto de traços a uma dada espécie e por isso os representamos por variáveis aleatórias independentes. Esta é a principal limitação do modelo, se não lembrarmos que as interações não possuem qualquer evolução temporal. Tais limitações sugerem a elaboração e investigação de novos modelos para revelar outros efeitos, mecanismos ou princípios responsáveis por regular o número de espécies e suas abundâncias em um ecossistema.

Apêndice A

Demonstração da Propriedade de Sompolinsky

Neste apêndice provamos que acoplamentos dados por funções não lineares da regra de Hebb são equivalentes, no limite termodinâmico aos acoplamentos dados pela regra de Hebb somada a um ruído gaussiano estático, cuja variância tem relação com as funções não lineares.

Ou seja:

$$\frac{\sqrt{p}}{N} F \left(\frac{1}{\sqrt{p}} \sum_{\mu=1}^p \xi_i^\mu \xi_j^\mu \right) \xleftrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{J}{N} \sum_{\mu=1}^p \xi_i^\mu \xi_j^\mu + \delta_{ij}, \quad J > 0, \quad i \neq j \quad (\text{A.1})$$

na qual:

$$\mathcal{P}(\delta_{ij}) = \sqrt{\frac{N}{2\pi\delta^2}} \exp \left[-\frac{N\delta_{ij}^2}{2\delta^2} \right], \quad \delta^2 = \alpha (\bar{J}^2 - J^2) \quad (\text{A.2})$$

$$\bar{J}^2 = \langle F^2(t_{ij}) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} Dz F^2(z) < \infty \quad (\text{A.3})$$

$$J = \int_{-\infty}^{\infty} Dz z F(z) \quad (\text{A.4})$$

$$\langle F(t_{ij}) \rangle = 0 \quad (\text{A.5})$$

e

$$\mathcal{P}(\xi_i^\mu) = \frac{1}{2} \delta(\xi_i^\mu - 1) + \frac{1}{2} \delta(\xi_i^\mu + 1) \quad (\text{A.6})$$

Recorremos à expansão em potências de β (expansão em série de alta temperatura) da função de partição de n réplicas, $\langle Z^n \rangle$. Fazemos isto para os três casos, gaussiano, Hebb linear e Hebb não linear. No limite termodinâmico demonstramos que a soma das séries dos casos gaussiano e Hebb linear é igual à série do caso Hebb não linear.

Começemos por analisar o caso gaussiano. Seja a função de partição do método de réplicas:

$$\langle Z^n \rangle = \left\langle \text{Tr} \exp \left[-\beta \sum_a \sum_{(i,j)} \delta_{ij} x_i^a x_j^a \right] \right\rangle_{\delta_{ij}}, \quad i < j \quad (\text{A.7})$$

Expansão em série de potências:

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle = \text{Tr} \left\{ 1 - \beta \sum_{(i,j)} \langle \delta_{ij} \rangle \sum_a x_i^a x_j^a \right. \\ + \frac{\beta^2}{2!} \sum_{(i,j)} \sum_{(k,l)} \langle \delta_{ij} \delta_{kl} \rangle \sum_{a_1, a_2} x_i^{a_1} x_j^{a_1} x_k^{a_2} x_l^{a_2} + \dots \\ \left. + \frac{\beta^k}{k!} \sum_{(i,j)} \langle \delta_{ij}^k \rangle \sum_{a_1, \dots, a_k} x_{i_1}^{a_1} x_{j_1}^{a_1} \dots x_{i_k}^{a_k} x_{j_k}^{a_k} + \dots \right\} \Big|_{k \text{ par}} \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Calculando os momentos de δ_{ij} chegamos ao resultado:

$$\langle \delta_{ij}^k \rangle = \begin{cases} 0, & \text{se } k \text{ ímpar} \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}} \Gamma[(k+1)/2] 2^{k/2} \sigma^k, & \text{se } k \text{ par} \end{cases} \quad (\text{A.9})$$

Logo:

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle = \text{Tr} \left\{ 1 + \frac{\beta^2}{2!} \frac{\delta^2}{N} \sum_{(i,j)} \sum_{a_1, a_2} x_i^{a_1} x_j^{a_1} x_i^{a_2} x_j^{a_2} \right. \\ + 3 \frac{\beta^4}{4!} \left(\frac{\delta^2}{N} \right)^2 \sum_{(i,j)} \sum_{a_1, \dots, a_4} x_i^{a_1} x_j^{a_1} \dots x_i^{a_4} x_j^{a_4} \\ + \frac{\beta^4}{4!} \left(\frac{\delta^2}{N} \right)^2 \sum_{(i,j)} \sum_{(k,l)} \sum_{a_1, \dots, a_4} x_i^{a_1} x_j^{a_1} x_i^{a_2} x_j^{a_2} x_k^{a_3} x_l^{a_3} x_k^{a_4} x_l^{a_4} + \dots \\ \left. + \frac{\beta^k}{k!} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \Gamma[(k+1)/2] 2^{k/2} \sigma^k \sum_{(i,j)} \sum_{a_1, \dots, a_k} x_{i_1}^{a_1} x_{j_1}^{a_1} \dots x_{i_k}^{a_k} x_{j_k}^{a_k} + \dots \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Passemos ao caso Hebb linear. Temos a função de partição do método de réplicas:

$$\langle Z^n \rangle = \left\langle \text{Tr exp} \left[-\beta \sum_a \sum_{(i,j)} J_{ij} x_i^a x_j^a \right] \right\rangle_{\xi}, \quad J_{ij} = \frac{J}{\sqrt{N}} \sum_{\mu=1}^p \xi_i^{\mu} \xi_j^{\mu}, \quad i \neq j \quad (\text{A.11})$$

E a respectiva expansão em série de potências:

$$\langle Z^n \rangle = \text{Tr} \left\{ 1 - \beta \sum_{(i,j)} \langle J_{ij} \rangle \sum_a x_i^a x_j^a + \dots \right. \\ \left. + \frac{(-\beta)^k}{k!} \sum_{(i_1, j_1)} \dots \sum_{(i_k, j_k)} \langle J_{i_1 j_1} \dots J_{i_k j_k} \rangle \sum_{a_1, \dots, a_k} x_{i_1}^{a_1} x_{j_1}^{a_1} \dots x_{i_k}^{a_k} x_{j_k}^{a_k} + \dots \right\} \quad (\text{A.12})$$

Calculando os momentos de J_{ij} obtemos a expressão:

$$\langle Z^n \rangle = \text{Tr} \left\{ 1 + \frac{\beta^2}{2!} \left(\frac{p}{N^2} \right) J^2 \sum_{(i_1, i_2)} \sum_{a_1, a_2} x_{i_1}^{a_1} x_{i_2}^{a_1} x_{i_1}^{a_2} x_{i_2}^{a_2} \right. \\ - \frac{\beta^3}{3!} \left(\frac{p}{N^3} \right) J^3 \sum_{(i_1, i_2)} \sum_{(i_2, i_3)} \sum_{(i_3, i_1)} \sum_{a_1, \dots, a_3} x_{i_1}^{a_1} x_{i_2}^{a_1} x_{i_2}^{a_2} x_{i_3}^{a_2} x_{i_3}^{a_3} x_{i_1}^{a_3} \\ + \frac{\beta^4}{4!} \left(\frac{p}{N^4} \right) J^4 \sum_{(i_1, i_2)} \sum_{a_1, \dots, a_4} x_{i_1}^{a_1} x_{i_2}^{a_1} \dots x_{i_1}^{a_4} x_{i_2}^{a_4} \\ + \frac{\beta^4}{4!} \left(\frac{p^2}{N^4} \right) J^4 \sum_{(i_1, i_2)} \sum_{(i_3, i_4)} \sum_{a_1, \dots, a_4} x_{i_1}^{a_1} x_{i_2}^{a_1} x_{i_1}^{a_2} x_{i_2}^{a_2} x_{i_3}^{a_3} x_{i_4}^{a_3} x_{i_3}^{a_4} x_{i_4}^{a_4} \\ + \frac{\beta^4}{4!} \left(\frac{p}{N^4} \right) J^4 \sum_{(i_1, i_2)} \sum_{(i_2, i_3)} \sum_{(i_3, i_4)} \sum_{(i_4, i_1)} \sum_{a_1, \dots, a_4} x_{i_1}^{a_1} x_{i_2}^{a_1} x_{i_2}^{a_2} x_{i_3}^{a_2} x_{i_3}^{a_3} x_{i_4}^{a_3} x_{i_4}^{a_4} x_{i_1}^{a_4} \\ \left. + \dots \right\} \quad (\text{A.13})$$

Finalmente o caso Hebb não linear. Seja a função de partição do método de réplicas:

$$\langle Z^n \rangle = \left\langle \text{Tr exp} \left[-\beta \sum_a \sum_{(i,j)} \frac{\sqrt{p}}{N} F(t_{ij}) x_i^a x_j^a \right] \right\rangle_{\xi}, \quad t_{ij} = \frac{1}{\sqrt{p}} \sum_{\mu=1}^p \xi_i^{\mu} \xi_j^{\mu}, \quad i \neq j \quad (\text{A.14})$$

Fazemos a expansão em série de potências:

$$\langle Z^n \rangle = \text{Tr} \left\{ 1 - \beta \sum_{(i,j)} \frac{\sqrt{p}}{N} \langle F(t_{ij}) \rangle \sum_a x_i^a x_j^a + \dots + \frac{(-\beta)^k}{k!} \sum_{(i_1, j_1)} \dots \sum_{(i_k, j_k)} \left(\frac{\sqrt{p}}{N} \right)^k \right. \\ \left. \langle F(t_{i_1 j_1}) \dots F(t_{i_k j_k}) \rangle \sum_{a_1, \dots, a_k} x_{i_1}^{a_1} x_{j_1}^{a_1} \dots x_{i_k}^{a_k} x_{j_k}^{a_k} + \dots \right\} \quad (\text{A.15})$$

Sabendo que as variáveis aleatórias t_{ij} são dependentes e calculando os momentos de $F(t_{ij})$ chegamos à série:

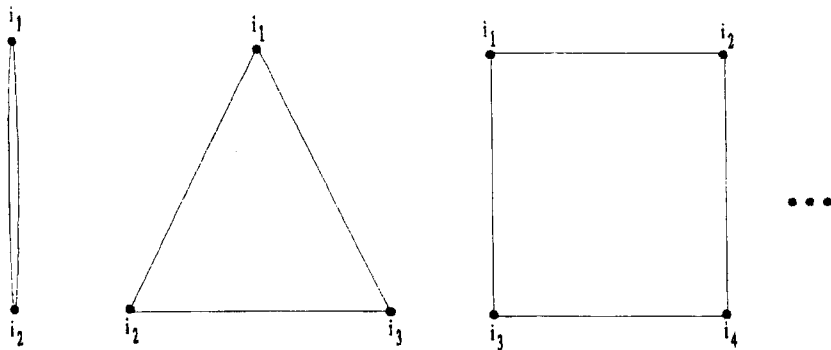
$$\begin{aligned}
 \langle Z^n \rangle = \text{Tr} \left\{ 1 + \frac{\beta^2}{2!} \left(\frac{p}{N^2} \right) \bar{J}^2 \sum_{(i_1, i_2)} \sum_{a_1, a_2} x_{i_1}^{a_1} x_{i_2}^{a_1} x_{i_1}^{a_2} x_{i_2}^{a_2} \right. \\
 - \frac{\beta^3}{3!} \left(\frac{\sqrt{p}}{N} \right)^3 \left(\frac{J^3}{\sqrt{p}} \right) \sum_{(i_1, i_2)} \sum_{(i_2, i_3)} \sum_{(i_3, i_1)} \sum_{a_1 \dots a_3} x_{i_1}^{a_1} x_{i_2}^{a_1} x_{i_2}^{a_2} x_{i_3}^{a_2} x_{i_3}^3 x_{i_1}^{a_3} \\
 + \frac{\beta^4}{4!} \left(\frac{\sqrt{p}}{N} \right)^4 \sum_{(i_1, i_2)} \bar{J}^4 \sum_{a_1, \dots, a_4} x_{i_1}^{a_1} x_{i_2}^{a_1} \dots x_{i_1}^{a_4} x_{i_2}^{a_4} \\
 + \frac{\beta^4}{4!} \left(\frac{\sqrt{p}}{N} \right)^4 \sum_{(i_1, i_2)} \sum_{(i_3, i_4)} (\bar{J}^2)^2 \sum_{a_1, \dots, a_4} x_{i_1}^{a_1} x_{i_2}^{a_1} x_{i_1}^{a_2} x_{i_2}^{a_2} x_{i_3}^{a_3} x_{i_4}^{a_3} x_{i_3}^{a_4} x_{i_4}^{a_4} \\
 + \frac{\beta^4}{4!} \left(\frac{\sqrt{p}}{N} \right)^4 \sum_{(i_1, i_2)} \sum_{(i_2, i_3)} \sum_{(i_3, i_4)} \sum_{(i_4, i_1)} \left(\frac{J^4}{p} \right) \sum_{a_1, \dots, a_4} x_{i_1}^{a_1} x_{i_2}^{a_1} x_{i_2}^{a_2} x_{i_3}^{a_2} x_{i_3}^{a_3} x_{i_4}^{a_3} x_{i_4}^{a_4} x_{i_1}^{a_4} \\
 \left. + \dots \right\}
 \end{aligned} \tag{A.16}$$

onde:

$$p^{(2-k)/2} J^k = \langle F(t_{i_1 i_2}) F(t_{i_2 i_3}) \dots F(t_{i_k i_1}) \rangle \tag{A.17}$$

$$\bar{J}^k = \langle F^k(t_{ij}) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} Dz F^k(z) \Big|_{k\text{par}} \tag{A.18}$$

Agora verificamos quais termos realmente contribuem para as expansões em séries de alta temperatura no limite termodinâmico. Como $\langle Z^n \rangle$ é uma grandeza extensiva, somente os termos proporcionais a N serão efetivos quando $N \rightarrow \infty$. Representando tais termos por grafos temos:



E são justamente os termos correspondentes a circuitos fechados, com cada sítio tendo um número par de ligações, os que realmente contribuem para a função de partição no limite termodinâmico. Sendo assim:

Caso gaussiano:

$$\langle Z^n \rangle = \text{Tr} \left\{ 1 + \frac{\beta^2 \delta^2}{2! N} \sum_{(i_1, i_2)} \sum_{a_1, a_2} x_{i_1}^{a_1} x_{i_2}^{a_1} x_{i_1}^{a_2} x_{i_2}^{a_2} \right\} = \text{Tr} \left\{ 1 + \frac{\beta^2 \alpha}{2! N} (\bar{J}^2 - J^2) \sum_{(i_1, i_2)} \sum_{a_1, a_2} x_{i_1}^{a_1} x_{i_2}^{a_1} x_{i_1}^{a_2} x_{i_2}^{a_2} \right\} \quad (\text{A.19})$$

Hebb linear:

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle = \text{Tr} \left\{ 1 + \frac{\beta^2 \alpha}{2! N} J^2 \sum_{(i_1, i_2)} \sum_{a_1, a_2} x_{i_1}^{a_1} x_{i_2}^{a_1} x_{i_1}^{a_2} x_{i_2}^{a_2} \right. \\ \left. - \frac{\beta^3 \alpha}{3! N^2} J^3 \sum_{(i_1, i_2)} \sum_{(i_2, i_3)} \sum_{(i_3, i_1)} \sum_{a_1, \dots, a_3} x_{i_1}^{a_1} x_{i_2}^{a_1} x_{i_2}^{a_2} x_{i_3}^{a_2} x_{i_3}^{a_3} x_{i_1}^{a_3} \right. \\ \left. + \frac{\beta^4 \alpha}{4! N^3} J^4 \sum_{(i_1, i_2)} \sum_{(i_2, i_3)} \sum_{(i_3, i_4)} \sum_{(i_4, i_1)} \sum_{a_1, \dots, a_4} x_{i_1}^{a_1} x_{i_2}^{a_1} x_{i_2}^{a_2} x_{i_3}^{a_2} x_{i_3}^{a_3} x_{i_4}^{a_3} x_{i_4}^{a_4} x_{i_1}^{a_4} + \dots \right\} \quad (\text{A.20}) \end{aligned}$$

E finalmente temos a expansão do caso não linear cujo resultado é exatamente a soma das contribuições das séries anteriores:

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle = \text{Tr} \left\{ 1 + \frac{\beta^2 \alpha}{2! N} \bar{J}^2 \sum_{(i_1, i_2)} \sum_{a_1, a_2} x_{i_1}^{a_1} x_{i_2}^{a_1} x_{i_1}^{a_2} x_{i_2}^{a_2} \right. \\ \left. - \frac{\beta^3 \alpha}{3! N^2} J^3 \sum_{(i_1, i_2)} \sum_{(i_2, i_3)} \sum_{(i_3, i_1)} \sum_{a_1, \dots, a_3} x_{i_1}^{a_1} x_{i_2}^{a_1} x_{i_2}^{a_2} x_{i_3}^{a_2} x_{i_3}^{a_3} x_{i_1}^{a_3} \right. \\ \left. + \frac{\beta^4 \alpha}{4! N^3} J^4 \sum_{(i_1, i_2)} \sum_{(i_2, i_3)} \sum_{(i_3, i_4)} \sum_{(i_4, i_1)} \sum_{a_1, \dots, a_4} x_{i_1}^{a_1} x_{i_2}^{a_1} x_{i_2}^{a_2} x_{i_3}^{a_2} x_{i_3}^{a_3} x_{i_4}^{a_3} x_{i_4}^{a_4} x_{i_1}^{a_4} + \dots \right\} \quad (\text{A.21}) \end{aligned}$$

Como queríamos demonstrar.

Apêndice B

Interações Não Lineares: p finito

Discutimos o limite em que p permanece finito quando $N \rightarrow \infty$. Usando a expansão da função não linear em série de potências derivamos uma expressão para a energia livre média por espécie e também para os parâmetros ou condições de ponto de sela [25, 26]. Como o total de variáveis aleatórias no sistema permanece finito no limite termodinâmico, a propriedade de auto-mediância emerge naturalmente. A partir deste ponto realizamos o cálculo do limite para o estado fundamental, determinando as propriedades de equilíbrio dos estados estacionários.

B.1 Energia livre

Seja o funcional adaptabilidade ou hamiltoniana do modelo:

$$-\mathcal{F} = \mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{\sqrt{p}}{N} F(t_{ij}) x_i x_j + \frac{u}{2} \sum_i (x_i)^2, \quad (\text{B.1})$$

$$t_{ij} = \frac{1}{\sqrt{p}} \sum_{\mu=1}^p \xi_i^\mu \xi_j^\mu, \quad p < \infty \quad (\text{B.2})$$

No limite termodinâmico, a expansão de F em série de potências conduz à expressão para as intensidades de acoplamento:

$$J_{ij} = \frac{1}{N} \left(J_1 \sum_{\mu} \xi_i^\mu \xi_j^\mu + J_2 \sum_{\mu < \nu} \xi_i^\mu \xi_i^\nu \xi_j^\mu \xi_j^\nu + \cdots + J_p \prod_{\mu=1}^p \xi_i^\mu \xi_j^\mu \right) \quad (\text{B.3})$$

Definindo as variáveis auxiliares a seguir:

$$m^\mu = \frac{1}{N} \sum_i x_i \xi_i^\mu \quad (\text{B.4})$$

$$m^{\mu\nu} = \frac{1}{N} \sum_i x_i \xi_i^\mu \xi_i^\nu \quad (\text{B.5})$$

$$\vdots$$

$$m^{\mu_1 \mu_2 \dots \mu_l} = \frac{1}{N} \sum_i x_i \xi_i^{\mu_1} \xi_i^{\mu_2} \dots \xi_i^{\mu_l} \quad (\text{B.6})$$

Podemos escrever o termo de acoplamento na forma:

$$\sum_{i \neq j} J_{ij} x_i x_j = N \left[J_1 \sum_\mu (m^\mu)^2 + J_2 \sum_{\mu < \nu} (m^{\mu\nu})^2 + \dots + J_p (m^{12\dots p})^2 \right] \quad (\text{B.7})$$

E determinamos os coeficientes J_l multiplicando ambos os lados da eq. (B.3) por termos do tipo $\prod_{\mu=1}^l \xi_i^\mu \xi_j^\mu$ e tomando a média sobre a distribuição das variáveis ξ_i^μ .

Para tornar os resultados mais interessantes, introduzimos um desvio nesta distribuição de probabilidades, interpretado como um viés para favorecer um traço da i -ésima espécie:

$$\mathcal{P}(\xi_i^\mu) = \frac{1+e}{2} \delta(\xi_i^\mu - 1) + \frac{1-e}{2} \delta(\xi_i^\mu + 1) \quad (\text{B.8})$$

Obtemos:

$$J_1 = \frac{N \langle \xi_i^1 \xi_j^1 J_{ij} \rangle_\xi}{1 + (p-1)e^{4 \times 1}} \quad (\text{B.9})$$

$$J_2 = \frac{N \langle \xi_i^1 \xi_j^1 \xi_i^2 \xi_j^2 J_{ij} \rangle_\xi}{1 + e^4 + (p-2)e^{4 \times 2}} \quad (\text{B.10})$$

$$\vdots$$

$$J_l = \frac{N \langle \prod_{\mu=1}^l \xi_i^\mu \xi_j^\mu J_{ij} \rangle_\xi}{1 + e^4 + (p-l)e^{4l}}, \quad 1 < l < p \quad (\text{B.11})$$

$$\vdots$$

$$J_p = N \left\langle \prod_{\mu=1}^p \xi_i^\mu \xi_j^\mu J_{ij} \right\rangle_{\xi} \quad (\text{B.12})$$

Passemos ao cálculo das grandezas termodinâmicas. Temos a função de partição:

$$\mathcal{Z} = \int_0^\infty \prod_i dx_i \delta \left(N - \sum_i x_i \right) e^{-\beta \mathcal{H}(\{x_i\})} \quad (\text{B.13})$$

Substituindo o termo de acoplamento, eq. (B.7) na Hamiltoniana e esta, por sua vez na função de partição encontramos:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \int_0^\infty \prod_i dx_i \delta \left(N - \sum_i x_i \right) \\ &\times \exp \left\{ -\frac{\beta N}{2} \left[J_1 \sum_{\mu} \left(\sum_i \xi_i^\mu x_i \right)^2 + J_2 \sum_{\mu < \nu} \left(\sum_i \xi_i^\mu \xi_i^\nu x_i \right)^2 + \dots + J_p \left(\sum_i \prod_{\mu=1}^p \xi_i^\mu x_i \right)^2 \right] \right\} \\ &\times \exp \left(-\frac{\beta u}{2} \sum_i (x_i)^2 \right) \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

Usando a identidade gaussiana:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2} \frac{z^2}{A} - az} = \sqrt{A} e^{-\frac{Aa^2}{2}} \quad (\text{B.15})$$

E a propriedade da função delta de Dirac:

$$g(c) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dy \frac{dk}{2\pi} g(y) e^{ik(y-c)} \quad (\text{B.16})$$

Escrevemos a função de partição na forma mais adequada para a integração no limite termodinâmico:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{Z} = & \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi i} e^{Nk} \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\mu} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \frac{dY_1^{\mu}}{(-i)} \exp \left[\frac{N}{2} \sum_{\mu} (Y_1^{\mu})^2 \right] \\
 & \times \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\mu \neq \nu} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \frac{dY_2^{\mu\nu}}{(-i)} \exp \left[\frac{N}{2} \sum_{\mu \neq \nu} (Y_2^{\mu\nu})^2 \right] \\
 & \times \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\mu \neq \nu} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \frac{dY_p^{12 \dots p}}{(-i)} \exp \left[\frac{N}{2} \sum_{\mu \neq \nu} (Y_p^{12 \dots p})^2 \right] \dots \\
 & \times \int_0^{\infty} \prod_i dx_i \exp \left[- \sum_i kx_i - \frac{\beta u}{2} (x_i)^2 \right] \\
 & \times \exp \left[\sqrt{\beta J_1} \sum_{\mu} Y_1^{\mu} \sum_i \xi_i^{\mu} x_i + \dots + \sqrt{\beta J_p} Y_p^{12 \dots p} \sum_i \prod_{\mu} \xi_i^{\mu} x_i \right]
 \end{aligned} \tag{B.17}$$

No limite em que $N \rightarrow \infty$ a propriedade de automediância emerge naturalmente da expressão anterior. Isto nos permite fazer a integração em ponto de sela, para obter a expressão para a densidade de energia livre:

$$\begin{aligned}
 -\beta f = & k + \frac{1}{2} \sum_{\mu} (Y_1^{\mu})^2 + \frac{1}{2} \sum_{\mu \neq \nu} (Y_2^{\mu\nu})^2 + \dots + \frac{1}{2} (Y_p^{12 \dots p})^2 \\
 & + \left\langle \ln \int_0^{\infty} dx \exp \left[-\frac{\beta u}{2} x^2 - \left(k + \sqrt{\beta J_1} \sum_{\mu} \xi^{\mu} Y_1^{\mu} + \dots + \sqrt{\beta J_p} \prod_{\mu=1}^p \xi^{\mu} Y_p^{12 \dots p} \right) x \right] \right\rangle_{\xi}
 \end{aligned} \tag{B.18}$$

Usando a relação $\sqrt{\beta} Y_l^{\mu_1 \mu_2 \dots \mu_l} = m^{\mu_1 \mu_2 \dots \mu_l}$ obtemos uma expressão final para a densidade de energia livre:

$$\begin{aligned}
 -\beta f = & k + \frac{1}{2\beta} \left[\sum_{\mu} (m^{\mu})^2 + \frac{1}{2} \sum_{\mu \neq \nu} (m^{\mu\nu})^2 + \dots + \frac{1}{2} (m^{12 \dots p})^2 \right] + \ln \left\langle \sqrt{\frac{\pi}{2\beta u}} \right\rangle_{\xi} \\
 & + \frac{1}{2\beta u} \left\langle \left[k + \sqrt{J_1} \sum_{\mu} \xi^{\mu} m^{\mu} + \dots + \sqrt{J_p} \prod_{\mu} \xi^{\mu} m^{12 \dots p} \right]^2 \right\rangle_{\xi} \\
 & + \left\langle \ln \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{k + \sqrt{J_1} \sum_{\mu} \xi^{\mu} m^{\mu} + \dots + \sqrt{J_p} \prod_{\mu} \xi^{\mu} m^{12 \dots p}}{\sqrt{2\beta u}} \right) \right] \right\rangle_{\xi}
 \end{aligned} \tag{B.19}$$

As variáveis $k, m^{\mu}, m^{\mu\nu}, \dots$ são dadas pelas condições de ponto de sela:

$$\frac{\partial f}{\partial k} = \frac{\partial f}{\partial m^{\mu}} = \frac{\partial f}{\partial m^{\mu\nu}} = \dots = \frac{\partial f}{\partial m^{12 \dots p}} = 0 \tag{B.20}$$

Fornecendo as seguintes expressões:

$$\langle x \rangle_T \xi = 1 \quad (\text{B.21})$$

$$m^\mu = \langle \xi^\mu x \rangle_T \xi \quad (\text{B.22})$$

⋮

$$m^{12\dots p} = \left\langle \prod_\mu \xi^\mu x \right\rangle_T \xi \quad (\text{B.23})$$

Onde $\langle \dots \rangle_T$ indica a média sobre a distribuição de Gibbs:

$$\mathcal{W}(\{x_i\}) = \frac{\delta(N - \sum_i x_i) e^{-\beta \mathcal{H}(\{x_i\}, \xi_i^\mu)}}{\int_0^\infty \prod_i dx_i \delta(N - \sum_i x_i) e^{-\beta \mathcal{H}(\{x_i\})}} \quad (\text{B.24})$$

Note que recuperamos a definição das variáveis auxiliares $m^{\mu_1 \mu_2 \dots \mu_l}$, equações (B.4), (B.5), (B.6) no limite termodinâmico.

B.2 Limite de baixa temperatura

Fazendo o limite de baixa temperatura, $\beta \rightarrow \infty$, obtemos a expressão final para a densidade de energia livre no estado fundamental:

$$f_0 = -\bar{k} - \frac{1}{2} \left[\sqrt{J_1} \sum_\mu (\tilde{m}^\mu)^2 + \dots + \sqrt{J_p} \tilde{m}^{12\dots p} \right] - \frac{1}{2u} \left\langle \left(\bar{k} + \sqrt{J_1} \sum_\mu \xi^\mu \tilde{m}^\mu + \dots + \sqrt{J_p} \prod_\mu \xi^\mu \tilde{m}^{12\dots p} \right) \right\rangle_\xi \quad (\text{B.25})$$

com:

$$\tilde{k} + \sqrt{J_1} \sum_\mu \xi^\mu \tilde{m}^\mu + \dots + \sqrt{J_p} \prod_\mu \xi^\mu \tilde{m}^{12\dots p} > 0 \quad (\text{B.26})$$

Após manipulações algébricas e definindo as variáveis a seguir determinamos os parâmetros de ponto de sela em baixa temperatura. Considere:

$$\Lambda_l / \quad \Lambda_1 = \sum_\mu \tilde{m}^\mu, \quad \Lambda_2 = \sum_{\mu \neq \nu} \tilde{m}^{\mu\nu}, \dots \quad \Lambda_p = \tilde{m}^{12\dots p} \quad (\text{B.27})$$

Temos:

$$\tilde{k} = -u - \sum_{l=1}^p e^l \sqrt{J_l} \Lambda_l \quad (\text{B.28})$$

$$\tilde{m}^{t'}(u + J_t - e^{2t} J_t) = e^t \sqrt{J_t} (u + \sum_{l=1}^p e^l \sqrt{J_l} \Lambda_l) - \frac{1}{2u} \sum_{l \neq t} e^{t+l} \sqrt{J_t J_l} \Lambda_l \quad (\text{B.29})$$

O índice t equivale a um índice de traço, ou seja $t = 1, 2, \dots, p$. O índice t' representa os índices das variáveis auxiliares (equações (B.4), (B.5), (B.6)), ou seja $t' \leftrightarrow \mu, \mu\nu, \dots$.

Bibliografia

- [1] E. P. Odum. *Ecologia*. Editora Guanabara, Rio de Janeiro, 1988.
- [2] S. E. Kingsland. *Modeling Nature*. University of Chicago Press, Chicago, 1985.
- [3] R. M. Pinto-Coelho. *Fundamentos em Ecologia*. Editora Artes Médicas Sul, Porto Alegre, 2000.
- [4] N. S. Goel, S. C. Maitra, and E. W. Montroll. *Rev. Mod. Phys.*, 43(2):231, 1971.
- [5] D. L. Stein. *Spin Glass and Biology*. World Scientific, Singapore, 1992.
- [6] I. Kondor. *Sci. Prog. Oxf.*, (71):145, 1987.
- [7] M. Mezard, G. Parisi, and M. A. Virasoro. *Spin Glass Theory and Beyond*. World Scientific, Singapore, 1987.
- [8] K. H. Fischer and J. A. Hertz. *Spin Glasses*. Cambridge University Press, Cambridge, 1991.
- [9] S. Kirkpatrick and D. Sherrington. *Phys. Rev. Lett.*, 35(26):1792, 1975.
- [10] S. Kirkpatrick and D. Sherrington. *Phys. Rev. B*, 17(44):4384, 1978.
- [11] D. J. Amit. *Modeling Brain Function: The World of Attractor Neural Networks*. Cambridge University Press, Cambridge, 1992.
- [12] P. Schuster and K. Sigmund. *J. Theor. Biol.*, 100:533, 1983.
- [13] J. Hofbauer and K. Sigmund. *Evolutionary Games and Population Dynamics*. Cambridge University Press, Cambridge, 1998.
- [14] R. MacArthur. *Theor. Pop. Biol.*, 1:1, 1970.
- [15] P. Biscari and G. Parisi. *J. Phys. A*, 28:4697, 1995.

- [16] S. Diederich and M. Opper. *Phys. Rev. A*, 39(8):4333, 1989.
- [17] M. Opper and S. Diederich. *Comp. Phys. Comm.*, 121:141, 1999.
- [18] V. M. de Oliveira and J. F. Fontanari. *Phys. Rev. Lett.*, 89(14):148101-1, 2002.
- [19] V. M. de Oliveira. *Eur. Phys. J. B*, 31:259, 2003.
- [20] O. L. Petchey. *Oikos*, (101):323, 2003.
- [21] D. J. Amit, H. Gutfreund, and H. Sompolinsky. *Phys. Rev. A*, 32(2):1007, 1985.
- [22] J. D. Farmer, N. H. Packard, and A. S. Perelson. *Physica D*, 22:187, 1986.
- [23] D. O. C. Santos and J. F. Fontanari. Submetido a publicação. 2004.
- [24] R. May. *Stability and Complexity in Model Ecosystems*. Princeton University Press, Princeton, 1974.
- [25] H. Sompolinsky. *Phys. Rev. A*, 34(3):2571, 1986.
- [26] H. Sompolinsky. The theory of neural networks: The hebb rule and beyond. In *Heidelberg Colloquium on Glassy Dynamics*, page 485, Heidelberg, 1987. Springer-Verlag.
- [27] J. L. van Hemmen and R. Kuhn. *Phys. Rev. Lett.*, 57:913, 1986.
- [28] V. M. de Oliveira and J. F. Fontanari. *Phys. Rev. E*, 64(5):051911, 2001.
- [29] J. R. L. Almeida and D. J. Thouless. *J. Phys. A*, 11(5):983, 1978.