

From Individuals to Populations

Pedro Henrique Pinheiro Cintra^{1,*}

¹ *Instituto de Física Gleb Wataghin, Universidade Estadual de Campinas*

Correspondence*:
pedrohpc@ifi.unicamp.br

”To not know math is a severe limitation to understanding the world.”

— Richard Feynman

1 INTRODUCTION

The realm of theoretical ecology uses heavy mathematical frameworks to predict, test and create hypothesis concerning different questions on ecology [2, 1]. A great deal of these techniques consist of systems of differential equations that describe the macro behavior or trends of a large population, given same assumed processes behind its dynamics. These models are popular due to being simple to solve numerically and opening the possibility of deriving analytical solutions. Yet, they do not capture the full behavior of a population in detail, due to simplifications they must assume.

But how does one arrive at a differential equation to describe a system? There are several models already known such as the Lotka-Volterra, which as many of common models, came to ecology from other fields such as chemistry or physics. One approach to obtaining a differential equation is to modify pre-existing models to fit the desired assumptions. Another approach is to derive the differential equations from first principles, considering the dynamics of individuals and then extending this dynamics to a population. The later, although mathematically more challenging, provides a way of understanding where does each term on a differential equation comes from, and why they are described the way they are.

In this text, my goal is to present an introduction to the master equation formalism, and the assembling of a differential equation as an approximation, to those that wish to work with mathematical modelling of ecological problems. Here I will presume that the reader already had contact with Calculus and its able to understand concepts such as limits, derivatives and integrals. To the reader not familiar with those topics I recommend the series of Youtube videos from 3blue1brown about Calculus, and also the book listed in ref [3].

2 MASTER EQUATIONS

We will begin small. Considering first the dynamics of one individual and some probabilities. Most of the formalism shown here was inspired by the book listed in ref [4].

2.1 Two level system

To get matters into our own hands, let us first imagine a particle that may occupy two different states, 1 and 2. Here I'll be using the term “particle” in a generic way to refer to a individual component of a system, I could call it an agent, or an individual. This “particle” may indeed have physical meaning, if our system

is a atom, for example, that might be found at two different energy states. But this may also not be the case, if our system is a genome, than our particle may be a gene that might be active (1) or inactive (2). It might even represent a living being that might be alive (1) or dead (2). The precise terminology here is not important, since this formalism applies to a wide range of systems, from biological to physical, what matters is that for now, our system is composed of only one piece, our “particle”, and it can only be in two states, either 1 or 2.

Neste caso, a transição entre um estado para outro (de um gene ativo para inativo, por exemplo) ocorre a taxas ω , sendo $\omega_{1 \rightarrow 2}$ a taxa na qual nossa partícula sai do estado 1 e vai para o 2, e $\omega_{2 \rightarrow 1}$ a taxa na qual a partícula vai de 2 para 1. Estas taxas de transição dependem da natureza do sistema em estudo e podem ser diferentes e até variar no tempo.

Para fins de didática e simplicidade, vamos começar supondo que ambas as taxas são constantes no tempo, porém podem ter valores diferentes, isto é $\omega_{1 \rightarrow 2} \neq \omega_{2 \rightarrow 1}$. A probabilidade de que a partícula saia do estado 1 e vá para o 2 entre os instantes de tempo t e $t + \Delta t$ é a taxa na qual o evento ocorre, vezes o intervalo de tempo considerado $\omega_{1 \rightarrow 2} \Delta t$. De forma análoga, $\omega_{2 \rightarrow 1} \Delta t$ é a probabilidade de que a partícula saia do estado 2 e vá para o 1, durante o intervalo de tempo Δt .

Este processo pode ser esquematizado da seguinte forma

$$X \rightleftharpoons Y \quad (1)$$

onde X pode representar o estado 1 e Y o estado 2.

Podemos nos perguntar qual é a probabilidade de que, em um dado instante t a partícula esteja no estado 1 $P_1(t)$ ou no estado 2 $P_2(t)$. Uma vez que somente estes dois estados são possíveis, $P_1(t) + P_2(t) = 1$. Construiremos então uma equação diferencial para a probabilidade $P_1(t)$. Aqui é importante notar que estamos assumindo que nosso processo é um processo de Markov, isto é, a taxa de transição entre dois estados depende apenas do estado atual e não do histórico de transições e estados da partícula. Nem todos os sistemas se comportam assim, alguns deles podem ter uma memória do passado que também afeta o futuro, tais sistemas não seguem processos de Markov.

A probabilidade $P_1(t + \Delta t)$ que a partícula esteja no estado 1 entre os intervalos de tempo t e $t + \Delta t$ possui duas contribuições advindas de duas possibilidades: ou a partícula já estava no estado 1 no instante t e não mudou para 2 durante o intervalo Δt , ou a partícula estava em 2 no instante t e mudou para 1 durante o intervalo Δt . Sendo assim

$$P_1(t + \Delta t) = P_1(t) \times \text{Prob de continuar em 1} + P_2(t) \times \text{Prob de mudar de 2 para 1} \quad (2)$$

Como discutido anteriormente, a probabilidade de transição é dada pela taxa de transição vezes o intervalo de tempo considerado. Ou seja, Prob de mudar de 2 para 1 = $\omega_{2 \rightarrow 1} \Delta t$. A probabilidade de continuar no estado 1, já estando em 1, é $1 - \omega_{1 \rightarrow 2} \Delta t$. Aqui poderíamos argumentar que não são apenas estas possibilidades, também teríamos a chance de que durante o intervalo Δt , a partícula estava em 1, mudou para 2 e voltou para 1.

$$\underbrace{1 \rightarrow 2 \rightarrow 1}_{\Delta t} \quad (3)$$

A probabilidade desta transição ocorrer é $\omega_{1 \rightarrow 2} \Delta t \times \omega_{2 \rightarrow 1} \Delta t = \omega_{1 \rightarrow 2} \omega_{2 \rightarrow 1} \Delta t^2$, ambas as transições precisam ocorrer durante o intervalo Δt . Ou talvez ela estivesse no 2, mudou para 1, voltou para o 2 e mudou para o 1 novamente.

$$\underbrace{2 \rightarrow 1 \rightarrow 2 \rightarrow 1}_{\Delta t} \quad (4)$$

Quem sabe ela poderia já estar em 1, mudar para o 2, voltar para o 1, ir para o 2 novamente e ainda voltar para o 1 mais uma vez

$$\underbrace{1 \rightarrow 2 \rightarrow 1 \rightarrow 2 \rightarrow 1}_{\Delta t} \quad (5)$$

cuja probabilidade de ocorrência é $\omega_{1 \rightarrow 2}^2 \omega_{2 \rightarrow 1}^2 \Delta t^4$. Poderíamos seguir adiante supondo cada vez mais eventos ocorrendo durante o intervalo Δt , todos contribuindo de alguma forma para que ao observarmos nossa partícula, ela estivesse no estado 1. Veremos que, felizmente não precisamos considerar estas transições intermediárias, quando tomamos Δt muito pequeno.

Com tudo o que consideramos até agora, a probabilidade de observar a partícula no estado 1 após Δt é

$$P_1(t + \Delta t) = P_1(t) [(1 - \omega_{1 \rightarrow 2} \Delta t) + (\omega_{1 \rightarrow 2} \omega_{2 \rightarrow 1} \Delta t^2) + (\omega_{1 \rightarrow 2}^2 \omega_{2 \rightarrow 1}^2 \Delta t^4) + \dots] + \quad (6)$$

$$+ P_2(t) [(\omega_{2 \rightarrow 1} \Delta t) + (\omega_{2 \rightarrow 1}^2 \omega_{1 \rightarrow 2} \Delta t^3) + \dots]$$

aqui os \dots indicam mais termos que existem e estão associados a mais transições intermediárias como por exemplo $1 \rightarrow 2 \rightarrow 1 \rightarrow 2 \rightarrow 1 \rightarrow 2 \rightarrow 1$. Vamos dar uma olhada em o que cada termo desta equação representa

$$\underbrace{P_1(t + \Delta t)}_{\text{Prob estado 1 após } \Delta t} = \underbrace{P_1(t)}_{\text{Prob já estar em 1 em } t} \left[\underbrace{(1 - \omega_{1 \rightarrow 2} \Delta t)}_{\text{Prob não mudar para 2}} + \underbrace{(\omega_{1 \rightarrow 2} \omega_{2 \rightarrow 1} \Delta t^2)}_{\text{Prob } 1 \rightarrow 2 \rightarrow 1} + \underbrace{(\omega_{1 \rightarrow 2}^2 \omega_{2 \rightarrow 1}^2 \Delta t^4)}_{\text{Prob } 1 \rightarrow 2 \rightarrow 1 \rightarrow 2 \rightarrow 1} + \dots \right] +$$

$$+ \underbrace{P_2(t)}_{\text{Prob estar em 2 em } t} \left[\underbrace{(\omega_{2 \rightarrow 1} \Delta t)}_{\text{Prob } 2 \rightarrow 1} + \underbrace{(\omega_{2 \rightarrow 1}^2 \omega_{1 \rightarrow 2} \Delta t^3)}_{\text{Prob } 2 \rightarrow 1 \rightarrow 2 \rightarrow 1} + \dots \right]$$

Rearranjando os termos e dividindo toda a equação por Δt , obtemos uma equação para a mudança da probabilidade $P_1(t)$ com o passar do tempo.

$$\begin{aligned} \frac{\Delta P_1(t)}{\Delta t} = & P_1(t) [-\omega_{1 \rightarrow 2} + (\omega_{1 \rightarrow 2} \omega_{2 \rightarrow 1} \Delta t) + (\omega_{1 \rightarrow 2}^2 \omega_{2 \rightarrow 1}^2 \Delta t^3) + \dots] + \\ & + P_2(t) [\omega_{2 \rightarrow 1} + (\omega_{2 \rightarrow 1} \omega_{1 \rightarrow 2} \Delta t^2) + \dots] \end{aligned} \quad (7)$$

Está é uma equação dinâmica nos informando como a probabilidade de encontrar a partícula no estado 1 muda conforme o tempo passa, onde $\Delta P_1(t) = P_1(t + \Delta t) - P_1(t)$. Tomando agora o limite em que $\Delta t \rightarrow 0$, nossa equação se torna uma equação diferencial e todos os termos contendo Δt ou potências de Δt se tornam negligentes.

$$\frac{dP_1(t)}{dt} = -\omega_{1 \rightarrow 2} P_1(t) + \omega_{2 \rightarrow 1} P_2(t) \quad (8)$$

De forma análoga, podemos obter uma equação para $P_2(t)$ que assume uma forma similar

$$\frac{dP_2(t)}{dt} = -\omega_{2 \rightarrow 1} P_2(t) + \omega_{1 \rightarrow 2} P_1(t) \quad (9)$$

Tendo a probabilidade inicial $P_1(t_0)$ e $P_2(t_0)$, podemos resolver o conjunto de equações para saber como a probabilidade muda com o passar do tempo. Estas duas equações são exemplos simples de **Equações Mestras**.

2.1.1 Ponto de vista populacional

Entretanto, equações mestras se tornam mais uteis quando consideramos sistemas formados por N constituintes (falamos aqui N partículas). Considere então um sistema com N partículas que podem realizar estas transições descritas anteriormente entre os estados 1 e 2. Introduzimos aqui o numero ocupacional n para o estado 1, dizendo que das N partículas totais, n delas estão no estado 1. Podemos então nos perguntar qual é a probabilidade de que em um dado instante t , exatamente n das N partículas estejam no estado 1?

Aqui o leitor pode começar a tentar pensar em conexões dessa pergunta com modelos biológicos. Por exemplo, em um sistema com N genes, qual é a probabilidade de que n deles estejam ativos em um dado instante de vida? Ou em uma população de N indivíduos, qual é a probabilidade de que exatamente n deles estejam doentes em um momento t após o início de uma epidemia? Mais tarde mostraremos como este formalismo pode nos levar à equações populacionais para a dinâmica de interações entre espécies como as equações de Lotka-Volterra.

Voltando ao nosso sistema, podemos enumerar 3 contribuições para $P_1(n; t)$:

1. Já haviam n partículas no estado 1 e $N - n$ no estado 2, no instante t , e nenhuma partícula mudou de estado durante o intervalo Δt

2. No instante t haviam $n - 1$ partículas no estado 1, e uma partícula que estava no estado 2 passou para o 1 durante o período Δt
3. Haviam $n + 1$ partículas no estado 1, no momento t , e durante o tempo Δt , uma partícula do estado 1 passou para o 2.

Novamente, poderíamos considerar cenários onde 2 ou mais partículas transicionam de estado, ao invés de uma só, ou até mesmo considerar que uma partícula foi de 1 para 2, ao mesmo tempo que uma foi de 2 para 1, e assim por diante. Mas como no caso da partícula individual, estes termos serão da ordem de Δt^n , com $n \geq 2$. Dizemos que estes são termos de ordem $\mathcal{O}(\Delta t^2)$. E novamente, ao tomarmos o limite $\Delta t \rightarrow 0$, para obter a equação diferencial, estes termos se tornaram insignificantes e desprezíveis. Escrevemos a probabilidade da seguinte forma

$$P_1(n; t + \Delta t) = P_1(n; t) \times \text{Prob nada acontece} + P_1(n - 1; t) \times \text{Prob } 2 \rightarrow 1 + \quad (10)$$

$$+ P_1(n + 1; t) \times \text{Prob } 1 \rightarrow 2 + \mathcal{O}(\Delta t^2)$$

Para o primeiro termo, a probabilidade de que nada ocorra, isto é, nenhuma partícula mude de estado, é o produto das probabilidades de que n partículas no estado 1 continuem no estado 1, e $N - n$ partículas no estado 2 continuem no estado 2. A probabilidade de que uma única partícula no estado 1 não mude de estado é $1 - \omega_{1 \rightarrow 2} \Delta t$. Como as n partículas precisam se manter no estado 1, a probabilidade disso ocorrer é

$$\underbrace{(1 - \omega_{1 \rightarrow 2} \Delta t) \times (1 - \omega_{1 \rightarrow 2} \Delta t) \cdots (1 - \omega_{1 \rightarrow 2} \Delta t)}_{n \text{ vezes}} = (1 - \omega_{1 \rightarrow 2} \Delta t)^n \quad (11)$$

A expansão em Taylor¹ desta expressão nos dá

$$(1 - \omega_{1 \rightarrow 2} \Delta t)^n = 1 - n\omega_{1 \rightarrow 2} \Delta t + \frac{n(n-1)\omega_{1 \rightarrow 2}}{2!} \Delta t^2 - \frac{n(n-1)(n-2)\omega_{1 \rightarrow 2}}{3!} \Delta t^3 + \cdots = \quad (12)$$

$$= 1 - n\omega_{1 \rightarrow 2} \Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2)$$

De forma análoga, a probabilidade de que nenhuma partícula que já está no estado 2, saia do estado 2 é $1 - (N - n)\omega_{2 \rightarrow 1} \Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2)$. Sendo assim, a probabilidade de que o sistema não mude durante o intervalo Δt é $1 - (n\omega_{1 \rightarrow 2} + (N - n)\omega_{2 \rightarrow 1}) \Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2)$.

Juntando as demais probabilidades, obtemos

¹ A expansão em Taylor é uma forma de representar funções contínuas por uma soma infinita de polinômios. Quanto mais termos no polinômio, mais a soma se aproxima ao valor real da função. Neste caso, estamos expandindo uma função onde a variável é Δt , e se esta variável é pequena o suficiente, podemos realizar a expansão sem perder informação. O mesmo argumento é o que faz com que se possa fazer $\sin(x) \approx x$, caso x seja pequeno. Recomento o seguinte vídeo para entender expansões em Taylor Taylor Series — Chapter 10, Essence of Calculus - 3blue1brown

$$\begin{aligned}
P_1(n; t + \Delta t) &= P_1(n; t) [1 - (n\omega_{1 \rightarrow 2} + (N - n)\omega_{2 \rightarrow 1}) \Delta t] + P_1(n - 1; t)(N - n + 1)\omega_{2 \rightarrow 1}\Delta t + \\
&+ P_1(n + 1; t)(n + 1)\omega_{1 \rightarrow 2}\Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2)
\end{aligned} \tag{13}$$

Novamente rearranjando os termos para se obter $\Delta P_1(n; t)$ e tomando o limite $\Delta t \rightarrow 0$, chegamos à equação mestra para a população de partículas, nos fornecendo a mudança no tempo da probabilidade de que n partículas ocupem o estado 1

$$\begin{aligned}
\frac{dP_1(n; t)}{dt} &= - [n\omega_{1 \rightarrow 2} + (N - n)\omega_{2 \rightarrow 1}] P_1(n; t) + (N - n + 1)\omega_{2 \rightarrow 1}P(n - 1; t) + \\
&+ (n + 1)\omega_{1 \rightarrow 2}P(n + 1; t)
\end{aligned} \tag{14}$$

De forma geral, a equação mestra para uma população n de partículas (ou indivíduos) é obtida relacionando as taxas de transições globais (globais pois não estamos considerando heterogeneidades espaciais ainda) definidas pelo símbolo $\Omega_{n' \rightarrow n}$. No nosso caso $\Omega_{n \rightarrow n+1} = (N - n)\omega_{2 \rightarrow 1}$ e $\Omega_{n \rightarrow n-1} = n\omega_{1 \rightarrow 2}$, e a equação mestra é escrita como

$$\frac{dP_1(n; t)}{dt} = - [\Omega_{n \rightarrow n-1} + \Omega_{n \rightarrow n+1}] P_1(n; t) + \Omega_{n-1 \rightarrow n}P(n - 1; t) + \Omega_{n+1 \rightarrow n}P(n + 1; t) \tag{15}$$

2.2 Generalização

Tendo visto a montagem da equação mestra para um sistema de dois níveis, vamos generalizar esta equação para quando nosso sistema possui mais de 2 estados. Digamos que nosso sistema é uma população, e os estados são a quantidade de indivíduos vivos no momento. Sendo assim 0 significa que nenhum indivíduo está vivo, o estado 1 representa um indivíduo na população, e assim por diante. Denotamos então $P(i; t)$ a probabilidade de que o sistema esteja no estado i (com i indivíduos vivos, no exemplo anterior) no instante de tempo t . A partir deste estado, o sistema pode ir para o estado j a uma taxa $\omega_{i \rightarrow j}$. A probabilidade de que ele saia do estado i e vá para algum estado j durante o intervalo t e $t + \Delta t$ é a soma de todas as taxas de transição, excluindo o caso $\omega_{i \rightarrow i}$, multiplicadas por Δt , ou seja, $\sum_{j \neq i} \omega_{i \rightarrow j} \Delta t$.

De forma geral então, a probabilidade de observar o sistema em i , entre t e $t + \Delta t$, para um sistema de muitos estados possíveis é escrita como

$$\begin{aligned}
P(i; t + \Delta t) &= P(i; t) \underbrace{\left(1 - \sum_{j \neq i} \omega_{i \rightarrow j} \Delta t \right)}_{\text{Prob se manter em } i} + \underbrace{\sum_{j \neq i} P(j; t) \omega_{j \rightarrow i} \Delta t}_{\text{Prob sair de algum } j \text{ para } i} + \mathcal{O}(\Delta t^2)
\end{aligned} \tag{16}$$

O que nos fornece a equação mestra para processos discretos

$$\boxed{\frac{dP(i; t)}{dt} = \sum_{j \neq i} (\omega_{j \rightarrow i} P(j; t) - \omega_{i \rightarrow j} P(i; t))} \quad (17)$$

2.2.1 Operadores de transição de estados

Há uma forma útil de reescrever a equação mestra, que tornará muito mais fácil o cálculo da aproximação de campo médio (veremos isso em breve). Para escrever-la de forma simplificada, introduzimos o operador de transição de estados, ou operador *step*², que transicionam uma função definida para inteiros em uma quantidade escolhida.

$$E_n^m[f(n)] = f(n + m) \quad (18)$$

É importante notar que os operadores *step* são apenas definidos como atuantes em funções discretas de variáveis inteiras. O subíndice n denota o parâmetro a ser transicionado e o superíndice m denota a quantidade a ser transicionada. Usando esta notação podemos reescrever o somatório da equação mestra como

$$\frac{dP(i; t)}{dt} = \sum_{j \neq 0} (E_i^j - 1) [\omega_{i-j \rightarrow i} P(i; t)] = \sum_{j \neq 0} [\omega_{i \rightarrow i+j} P_{i+j}(t) - \omega_{i-j \rightarrow i} P(i; t)] \quad (19)$$

3 APROXIMAÇÃO DE CAMPO-MÉDIO

Resolver a equação mestra é um trabalho complicado e frequentemente impossível analiticamente. Sendo assim, é comum que a partir dela, tentemos obter aproximações da dinâmica do sistema. Como a equação mestra é no fundo um sistema de equações que relacionam as probabilidades de um estado com probabilidades de outros estados, podemos trabalhar inicialmente com aproximações que visem eliminar a necessidade de se resolver equações para cada probabilidade possível.

Um método simples para isso aparece se estivermos interessados apenas no valor médio que o sistema possui em um dado momento. Em um sistema ecológico, podemos nos perguntar qual é o valor médio da população naquele sistema, em um certo instante de tempo. A média de um dado valor n^3 é dada por

$$\langle n \rangle = \sum_n n P(n; t) \quad (20)$$

² Os leitores vindos da física ou da matemática podem pensar nos operadores escada comumente vistos em mecânica quântica. Porém, os operadores escada aqui não são os mesmos que atuam em estados físicos. Por este motivo optei pelo nome operadores de transição de estados. Em inglês eles são comumente chamados de *step operators*. Enquanto os operadores escadas atuam no estado físico do sistema, os operadores de transição de estados são apenas ferramentas matemáticas que atuam em uma função genérica, sendo assim, modificam não apenas o estado mas também a probabilidade.

³ Aqui vamos mudar a notação, passando de representar o estado atual do sistema como i para representá-lo como n , afim de aproximar a notação a uma noção mais voltada para problemas ecológicos, onde n frequentemente representa a população de uma dada espécie.

Sendo assim, dada uma equação mestra genérica, podemos multiplicar pela variável de interesse e somar sobre todos os possíveis estados para obter uma equação que relacione às médias dessa variável.

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \langle n(t) \rangle &= \sum_n n \frac{dP(n; t)}{dt} = \sum_n n \sum_{j \neq 0} (E_n^j - 1) [\omega_{n-j \rightarrow n} P(n; t)] = \\
&= \sum_{j \neq 0} \sum_n n \omega_{n \rightarrow n+j} P_{n+j}(t) - \sum_{j \neq 0} \sum_n n \omega_{n-j \rightarrow n} P(n; t) = \\
&= \sum_{j \neq 0} \sum_n (n - j) \omega_{n-j \rightarrow n} P(n; t) - \sum_{j \neq 0} \sum_n n \omega_{j \rightarrow n} P(n; t)
\end{aligned} \tag{21}$$

onde da penúltima para a última linha nós fizemos a mudança de índice $n \rightarrow n + j$ no primeiro somatório, para reescrevê-lo em termos de $P(n; t)$ ⁴. Por fim, a última linha pode ser reescrita como

$$\frac{d}{dt} \langle n(t) \rangle = \sum_{j \neq 0} \sum_n -j \omega_{n-j \rightarrow n} P(n; t) = - \sum_{j \neq 0} \langle j \omega_{n-j \rightarrow n} \rangle \tag{22}$$

Isto é, a variação temporal média de um sistema é dado pelo negativo da soma das médias de todas as taxas de transição entre os possíveis estados, multiplicadas pelo valor do estado do sistema. Em termos mais comuns a problemas ecológicos, pensando em uma equação de população, a variação temporal média no número n de indivíduos em uma população é igual ao negativo da soma das médias de todas as possíveis transições entre níveis populacionais diferentes, multiplicados pelo valor de população em cada um deles.

A aproximação de campo médio nos fornece uma equação determinística para um sistema, permitindo uma solução mais simples e fácil, porém negligenciando os efeitos estocásticos intrínsecos ao processo. Outra consideração feita pela aproximação de campo médio é que ela descarta correlações entre os momentos estatísticos das distribuições de probabilidade de um sistema. Isto é

$$\left\langle \prod_{i=1}^N x_i \right\rangle = \prod_{i=1}^N \langle x_i \rangle \tag{23}$$

4 REPRODUÇÃO E MORTE

Antes de tratar alguns sistemas mais complexos, vamos considerar um caso bem simples onde soluções analíticas podem ser obtidas, afim de comparar o que podemos encontrar a partir da equação mestra, e da aproximação de campo médio.

Imagina uma população de indivíduos que dispõe de recursos infinitos, podem se reproduzir assexuadamente e morrer de causas naturais. A taxa de reprodução é denotada por b , e assim como consideramos no caso exemplo do sistema de dois níveis, podemos esquematizar esta reação no sistema da seguinte forma

⁴ EXPLICAR COMO FUNCIONA A MUDANÇA DE ÍNDICE DE SOMATÓRIOS

$$X \xrightarrow{b} X + X \quad (24)$$

Já a taxa de morte é denotada por d , e esquematizada como

$$X \xrightarrow{d} \emptyset \quad (25)$$

onde \emptyset representa um estado vazio, ou seja, um indivíduo para de existir. Se cada indivíduo possui uma taxa de reprodução b , então a transição da população $\omega_{n \rightarrow n+1}$ pode ocorrer de n formas diferentes (cada um dos n indivíduos pode se reproduzir e aumentar em 1 a população⁵) e a probabilidade de transição de n para $n + 1$ durante Δt é

$$\omega_{n \rightarrow n+1} \Delta t = nb \Delta t \cdot (1 - b \Delta t)^{n-1} \quad (26)$$

onde temos n possibilidades de um indivíduo se reproduzir com uma probabilidade $b \Delta t$, ao mesmo tempo que os demais $n - 1$ indivíduos não se reproduzem, cada um com probabilidade $1 - b \Delta t$. Ao tomarmos o limite $\Delta t \rightarrow 0$, todos os termos de ordem $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ se tornam desprezíveis e a probabilidade é escrita como

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \omega_{n \rightarrow n+1} \Delta t = P_{n \rightarrow n+1} = bn \quad (27)$$

De forma análoga, ao considerarmos a probabilidade de transição de n para $n - 1$ devido à morte de indivíduos, temos n possibilidades nas quais um indivíduo morre e os demais $n - 1$ indivíduos permanecem vivos. Ao tomarmos o processo usual $\Delta t \rightarrow 0$, obtemos

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \omega_{n \rightarrow n-1} \Delta t = P_{n \rightarrow n-1} = dn \quad (28)$$

Finalmente podemos escrever a equação mestra para este sistema, em termos das probabilidades de transição entre níveis populacionais e as probabilidades de que o sistema esteja em um dado nível

$$\frac{d}{dt} P(n; t) = b(n - 1)P(n - 1; t) + d(n + 1)P(n + 1, t) - n(b + d)P(n; t) \quad (29)$$

Ou utilizando a notação do operador de transição

⁵ Lembrando aqui que a chance de dois indivíduos se reproduzirem durante o intervalo de tempo Δt é proporcional à Δt^2 , que é um termo que tende a zero quando fazemos $\Delta t \rightarrow 0$.

$$\frac{d}{dt}P(n; t) = [b(E_n^{-1} - 1) + d(E_n^{+1} - 1)] [nP(n; t)] \quad (30)$$

Para este cenário, podemos obter uma solução analítica da equação mestra, uma vez que ela é linear na variável de estado n . O leitor menos familiarizado com matemática e funções geratrizes pode achar esta próxima sessão demasiadamente complexa, porém o resultado principal da solução analítica é dado na equação (47) e discutido logo em seguida.

4.1 Solução pela função geratriz

Para encontrar um conjunto de soluções analíticas para a equação mestra, introduzimos o formalismo de funções geratrizes. A função geratriz $G(z, t)$ é definida por meio de

$$G(z, t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} z^n P(n; t) \quad (31)$$

note que a soma vai sobre todos os valores de n , se n representa uma população em um sistema ecológico, então n é sempre inteiro e positivo, portanto o somatório vai de $n = 0$ até ∞ , ao invés de $n = -\infty$. Se soubermos a função geratriz, podemos expandir ela em séries a partir da definição e identificar as probabilidades $P(n; t)$ em cada termo da expansão. Importante notar que pela condição de normalização da probabilidade, temos

$$G(1, t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} P(n; t) = 1 \quad (32)$$

para todos os instantes t . Além do mais, saber a função geratriz permite a determinação de todos os momentos estatísticos da variável aleatória de estado n . Para o primeiro momento estatístico, isto é, a média, temos

$$\langle n(t) \rangle = \sum_n nP(n; t) = \sum_n \left. \frac{\partial z^n}{\partial z} \right|_{z=1} P(n; t) = \left. \frac{\partial \sum_n z^n P(n; t)}{\partial z} \right|_{z=1} = \left. \frac{\partial G(z, t)}{\partial z} \right|_{z=1} \quad (33)$$

onde usamos o fato que $n = \left. \frac{\partial z^n}{\partial z} \right|_{z=1}$, onde a barra lateral significa que estamos tomando o resultado da operação na condição em que $z = 1$. Para o segundo momento estatístico, utilizamos o fato $n^2 = \left. \frac{\partial}{\partial z} \left(z \frac{\partial z^n}{\partial z} \right) \right|_{z=1}$

$$\langle n^2 \rangle = \sum_n n^2 P(n; t) = \frac{\partial}{\partial z} \left(z \frac{\partial G(z, t)}{\partial z} \right) \Big|_{z=1} \quad (34)$$

Podemos também obter a probabilidade de qualquer estado $P(n; t)$ através da derivada da função geratriz

$$P(n; t) = \frac{\partial^n G(z, t)}{\partial z^n} \Big|_{z=0} \quad (35)$$

onde a condição $z = 0$ nos permite reduzir a expressão para a n -ésima derivada de $G(z, t)$ apenas no termo de interesse $P(n; t)$. Sem ela, obteríamos

$$\frac{\partial^n G(z, t)}{\partial z^n} = \sum_{m=0}^{\infty} z^{m-n} [m(m-1)(m-2)\cdots(m-n+1)] P(m; t) \quad (36)$$

onde todos os termos $m < n$ serão zero. Com a condição $z = 0$, apenas o termo onde $m = n$ se torna não nulo⁶ e a derivada se resume a $P(n; t)$.

Se multiplicarmos a equação mestra do sistema de reprodução e morte (30) por z^n e somarmos sobre todos os n , obtemos, para o lado esquerdo da igualdade

$$\sum_n z^n \frac{\partial}{\partial t} P(n; t) = \frac{\partial}{\partial t} \sum_n z^n P(n; t) = \frac{\partial G(z, t)}{\partial t} \quad (37)$$

enquanto que para o lado direito da igualdade

$$b \sum_n z^n (n-1) P(n-1; t) = b \sum_n z^{n+1} n P(n; t) = b z^2 \sum_n z^{n-1} n P(n; t) = b z^2 \frac{\partial G(z, t)}{\partial z} \quad (38)$$

$$d \sum_n z^n (n+1) P(n+1; t) = d \sum_n z^{n-1} n P(n; t) = d \frac{\partial G(z, t)}{\partial z} \quad (39)$$

$$(b+d) \sum_n z^n n P(n; t) = (b+d) z \frac{\partial G(z, t)}{\partial z} \quad (40)$$

⁶ Por definição $0^0 = 1$.

onde na primeira e segunda equações nós fizemos a mudança de índice no somatório $n = n - 1$ e $n = n + 1$, respectivamente. Obtemos então a equação diferencial parcial para a função geratriz

$$\frac{\partial}{\partial t}G(z, t) = [bz^2 + d - z(b + d)] \frac{\partial}{\partial z}G(z, t) = (z - 1)(bz - d) \frac{\partial}{\partial z}G(z, t) \quad (41)$$

Esta equação diferencial parcial pode ser resolvida pelo método das características (no qual eu não sei pois quando eu deveria ter aprendido isso em Física Matemática A na graduação o meu professor passou o semestre inteiro para ensinar séries de Fourier e deixou de lado os outros 90% da ementa, portanto quem resolveu esta equação foi o Vavá [leiam a dissertação de mestrado dele] e eu apenas digitei as contas).

Se a variável s parametriza a curva característica, então

$$\frac{dG}{ds} = \frac{dz}{ds} \frac{\partial G}{\partial z} + \frac{dt}{ds} \frac{\partial G}{\partial t} = 0 \quad (42)$$

Substituindo da equação (41), obtemos

$$\frac{dG}{ds} = \frac{dz}{ds} \frac{\partial G}{\partial z} + \frac{dt}{ds} (z - 1)(bz - d) \frac{\partial G}{\partial z} = \frac{\partial G}{\partial z} \left(\frac{dz}{ds} + \frac{dt}{ds} (z - 1)(bz - d) \right) = 0 \quad (43)$$

Portanto, desde que $\frac{\partial G}{\partial z} \neq 0$

$$\frac{dz}{ds} + \frac{dt}{ds} (z - 1)(bz - d) = 0 \Rightarrow \frac{dz}{(z - 1)(bz - d)} + dt = 0 \Rightarrow \int dt + \int \frac{dz}{(z - 1)(bz - d)} = C \quad (44)$$

onde C é uma constante arbitrária. A integral em z pode ser resolvida através de frações parciais

$$t + \frac{1}{b - d} \ln \left| \frac{z - 1}{bz - d} \right| = C \Rightarrow \left| \frac{z - 1}{bz - d} \right| e^{(b-d)t} = (b - d)e^C \quad (45)$$

Uma vez que b e d também são constantes, $(b - d)e^C$ ainda é uma constante que chamamos de α . Esta expressão pode ser reescrita isolando z para obtermos uma expressão para $z(t)$

$$z(t) = \frac{1 \pm d\alpha e^{-(b-d)t}}{1 \pm b\alpha e^{-(b-d)t}} \quad (46)$$

onde teremos o sinal positivo de \pm quando $1 < z < d/b$ ou $d/b < z < 1$, e o negativo sempre que $z > \max(1, d/b)$ ou $z < \min(1, d/b)$. Se desejamos continuar com a solução analítica, precisamos escolher uma condição inicial para a equação mestra, que irá servir como condição de contorno para a equação

diferencial parcial da função geratriz. Uma condição inicial aceitável é que inicialmente, a população é igual a N , ou seja, $P(n; 0) = \delta_{n,N}$. Esta condição reflete na condição de contorno $G(z, 0) = z(0)^N$ para a função geratriz.

Como encontramos já $z(t)$, podemos escrever a solução completa da função geratriz

$$G(z, t) = \left(\frac{1 \pm d\alpha}{1 \pm b\alpha} \right)^N = \left(\frac{|bz - d| \pm d|z - 1|e^{(b-d)t}}{|bz - d| \pm b|z - 1|e^{(b-d)t}} \right)^N \quad (47)$$

Tendo enfim a solução para a função geratriz, podemos utilizar a definição (31) e (35) para obter $P(n; t)$ para qualquer n , apenas fazendo derivações da função geratriz. Entretanto, este trabalho seria extremamente tedioso e o caso mais interessante no momento é a probabilidade de extinção $P(0, t)$ em um instante t .

$$P(0, t) = G(0, t) = \left(\frac{d - e^{(b-d)t}}{d - be^{(b-d)t}} \right)^N \quad (48)$$

sendo N , o valor inicial de população no sistema. Caso $b < d$, a população eventualmente será certamente extinta, uma vez que as exponenciais são ambas negativas e eventualmente nos aproximamos do limite $d/d = 1$. Ou seja, a probabilidade de extinção aumenta até chegar em 1 conforme $t \rightarrow \infty$, garantindo que a população será extinta. O interessante é notar que mesmo se $b > d$, a probabilidade de extinção ainda é não-nula

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P(0, t) = \left(\frac{b}{d} \right)^N \quad \text{se } b > d \quad (49)$$

Apesar de não-nula, notemos que esta fração diminui conforme N aumenta. Portanto, populações pequenas possuem uma chance maior de serem extintas, mesmo quando a taxa de reprodução b supera a taxa de mortalidade d . Conforme a população cresce e N aumenta, a probabilidade de extinção diminui tendendo a 0 quando $N \rightarrow \infty$.

4.2 Aproximação de campo médio

Continuamos ainda com o mesmo modelo, mas agora consideremos uma aproximação de campo médio para o sistema. Neste caso, ao multiplicarmos por n e somarmos sobre todos os n a equação mestra (29), obtemos

$$\sum_n \frac{d}{dt} nP(n; t) = b \sum_n n(n-1)P(n-1; t) + d \sum_n n(n+1)P(n+1; t) - (b+d) \sum_n n^2 P(n; t) \quad (50)$$

Para o primeiro somatório, fazemos a mudança de índice $n = n - 1$, afim de escrevê-lo em termos de $P(n; t)$

$$b \sum_n n(n-1)P(n-1; t) = b \sum_n (n+1)nP(n; t) = b \sum_n n^2P(n; t) + b \sum_n nP(n; t) \quad (51)$$

Já para o segundo termo, no mesmo objetivo fazemos a mudança de índice $n = n + 1$

$$d \sum_n n(n+1)P(n+1; t) = d \sum_n (n-1)nP(n; t) = d \sum_n n^2P(n; t) - d \sum_n nP(n; t) \quad (52)$$

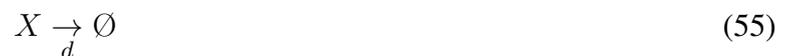
A equação para a população média se torna então

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle n(t) \rangle &= b \sum_n n^2P(n; t) + b \sum_n nP(n; t) + d \sum_n n^2P(n; t) - \\ &\quad - d \sum_n nP(n; t) - b \sum_n n^2P(n; t) - d \sum_n n^2P(n; t) = \\ &= (b-d) \sum_n nP(n; t) = (b-d) \langle n \rangle \end{aligned} \quad (53)$$

Esta é a equação conhecida comumente como a descrição de um modelo malthusiano de crescimento. Se $b > d$, a população cresce exponencialmente, já se $b < d$, a população diminui até a extinção. Aqui, obtivemos uma equação totalmente determinística para o sistema, como sendo a média de um sistema estocástico probabilístico descrito por uma equação mestra (29). Note que aqui, por a dinâmica ser totalmente determinística, não há probabilidade de extinção para $b > d$. Vemos então na prática uma limitação do limite de campo médio. A extinção da população em crescimento é uma realidade que só se torna aparente ao se levar em conta a natureza estocástica do sistema.

5 CRESCIMENTO LOGÍSTICO

Prosseguimos nosso estudo com um modelo um pouco mais complexo. Ainda vamos supor uma população que dispõe de recursos infinitos e pode se reproduzir assexuadamente. Porém, além da morte natural, os indivíduos desta população também competem entre si por recursos, levando às seguintes reações para descrever a dinâmica possível da cada indivíduo no tempo Δt



Estas reações nos dizem que cada indivíduo se reproduz com uma taxa b , morre por mortes naturais com uma taxa d e morre devido à competição por recursos a uma taxa α .

Novamente, iremos construir o passo a passo da equação mestra e desenvolver a teoria de campo médio. Desta vez, a equação mestra não possuirá solução analítica pois, como veremos mais na frente, a equação não será linear na variável de estado n .

Começamos estabelecendo as contribuições para que entre o tempo t e Δt , observemos o sistema com n indivíduos (analogamente dizemos que o sistema está no estado n), lembrando que transições de mais de dois níveis ou transições intermediárias são todas da ordem $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ e serão eliminadas ao tomarmos $\Delta t \rightarrow 0$. Por isso, já optamos por ignorar estes processos

1. No momento t , o sistema já estava no estado n , e não mudou de estado durante o intervalo Δt ;
2. No tempo t , o sistema estava com $n + 1$ indivíduos e um indivíduo morreu por causas naturais, levando o sistema ao estado n ;
3. Novamente, no tempo t o sistema estava com $n + 1$ indivíduos, porém um deles morreu devido à competição por recursos com seus vizinhos;
4. A população em t era de $n - 1$ indivíduos e um deles se reproduziu e gerou um novo integrante.

A princípio, não diremos nada a respeito das taxas de reação b , d e α , no final do cálculo do limite de campo médio veremos como as suposições a respeito delas mudam a equação diferencial que descreve o sistema.

A probabilidade de transição para o item 2 $\omega_{n+1 \rightarrow n} \Delta t = d(n+1)\Delta t (1 - dn\Delta t)^n = d(n+1)\Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2)$. De forma análoga para o item 3 $\omega_{n+1 \rightarrow n} \Delta t = \alpha(n+1)\Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2)$. Podemos representar a probabilidade total $P_{n+1 \rightarrow n} = (d + \alpha)(n+1)\Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2)$.

Para o item 4, escrevemos diretamente $\omega_{n-1 \rightarrow n} \Delta t = b(n-1)\Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2)$. E finalmente, o item 1 pode ser visto como 1 menos a probabilidade de 2, 3 e 4 ocorrerem.

Portanto, podemos escrever a probabilidade de observar o sistema com n indivíduos, após um intervalo Δt como

$$\begin{aligned}
 P(n; t + \Delta t) &= P(n-1; t)b(n-1)\Delta t + & (57) \\
 &+ P(n+1; t)(d + \alpha)(n+1)\Delta t + \\
 &+ P(n; t)(1 - bN\Delta t)(1 - dn\Delta t)(1 - \alpha n\Delta t) + \mathcal{O}(\Delta t^2) = \\
 &= P(n; t)(1 - bN\Delta t - dN\Delta t - \alpha N\Delta t) + \\
 &+ P(n-1; t)b(n-1)\Delta t + P(n+1; t)(d + \alpha)(n+1)\Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2)
 \end{aligned}$$

Dividindo tudo por Δt e tomando $\Delta t \rightarrow 0$, obtemos a equação mestra

$$\frac{d}{dt}P(n; t) = -P(n; t)(b + d + \alpha)n + P(n-1; t)b(n-1) + P(n+1; t)(n+1)(d + \alpha) \quad (58)$$

Esta equação se parece muito com a equação para o modelo de reprodução e morte apenas, com a adição de α . De fato, se α for constante, assim como b e d , podemos redefinir uma constante $\gamma = d + \alpha$ e resolver este sistema da mesma forma que o anterior, obtendo os mesmos comportamentos. O interessante entretanto, é o caso onde a competição não é constante. Exploraremos isso logo após o cálculo da aproximação de campo médio.

Se estamos interessados na média de n em um dado instante t , utilizamos $\langle n \rangle = \sum_n nP(n; t)$ para obter a equação determinística do sistema. Multiplicando a equação mestra por n e somando sobre todos os estados, obtemos

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle n \rangle = & -(b + d + \alpha) \sum_n n^2 P(n; t) + b \sum_n n^2 P(n - 1; t) - b \sum_n n P(n - 1; t) + \\ & + (d + \alpha) \sum_n n^2 P(n + 1; t) + (d + \alpha) \sum_n n P(n + 1; t) \end{aligned} \quad (59)$$

A esta altura, eu torço para que o leitor já esteja habituado a realizar o procedimento de mudança de índices de somatórios, para poder escrever todas as somas em termos de $P(n; t)$. Mesmo assim, faremos com mais detalhes essa etapa aqui.

Nos somatórios contendo $P(n - 1; t)$, fazemos a mudança de índice $n = n - 1$, tornando-os

$$\begin{aligned} b \sum_n n^2 P(n - 1; t) &= b \sum_n (n + 1)^2 P(n; t) = b \sum_n n^2 P(n; t) + 2b \sum_n n P(n; t) + b \sum_n P(n; t) = \\ &= b \sum_n n^2 P(n; t) + 2b \sum_n n P(n; t) + b \end{aligned} \quad (60)$$

onde na última linha utilizamos a normalização $\sum_n P(n; t) = 1$. O outro somatório fica

$$b \sum_n n P(n - 1; t) = b \sum_n (n + 1) P(n; t) = b \sum_n n P(n; t) + b \quad (61)$$

Analogamente para as somas envolvendo $P(n + 1; t)$, fazemos a mudança de índice $n = n + 1$

$$\begin{aligned} (d + \alpha) \sum_n n^2 P(n + 1; t) &= (d + \alpha) \sum_n (n - 1)^2 P(n; t) = (d + \alpha) \sum_n n^2 P(n; t) - \\ &- 2(d + \alpha) \sum_n n P(n; t) + (d + \alpha) \end{aligned} \quad (62)$$

$$(d + \alpha) \sum_n nP(n+1; t) = (d + \alpha) \sum_n (n-1)P(n; t) = (d + \alpha) \sum_n nP(n; t) - (d + \alpha) \quad (63)$$

Juntando tudo, a equação mestra fica escrita como

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle n \rangle &= -(b + d + \alpha) \sum_n n^2 P(n; t) + b \sum_n n^2 P(n; t) + 2b \sum_n nP(n; t) + \\ &+ b - b \sum_n nP(n; t) - b + (d + \alpha) \sum_n n^2 P(n; t) - 2(d + \alpha) \sum_n nP(n; t) + (d + \alpha) + \\ &+ (d + \alpha) \sum_n nP(n; t) - (d + \alpha) = \\ &= b \sum_n nP(n; t) - d \sum_n nP(n; t) - \alpha \sum_n nP(n; t) \end{aligned} \quad (64)$$

Novamente, vemos que caso b , d e α sejam constantes, e equação mestra se torna a mesma equação do modelo de reprodução e morte, com a diferença que o termo de mortalidade é agora adicionado de um fator devido à competição por recursos, e ao invés de $b > d$ ser a condição necessária para o crescimento exponencial, precisamos ter $b > d + \alpha$.

Mais realisticamente, a competição por recursos depende da quantidade de indivíduos na população. Quanto menos indivíduos, menor a necessidade de competir com vizinhos por comida, água, espaço, etc. Portanto, uma consideração mais realística é $\alpha = \alpha_0 n$. Isto é, a competição por recursos aumenta linearmente com o aumento da população. Manteremos a taxa de reprodução e a mortalidade natural constantes.

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle n \rangle &= b \sum_n nP(n; t) - d \sum_n nP(n; t) - \alpha_0 \sum_n n^2 P(n; t) = \\ &= b \langle n \rangle - d \langle n \rangle - \alpha_0 \langle n^2 \rangle \end{aligned} \quad (65)$$

Note que está equação envolve a média de n^2 , isto é, o segundo momento estatístico da distribuição de probabilidades para os estados possíveis do sistema. Poderíamos refazer todo o processo para encontrar uma equação que descreva a variação temporal de $\langle n^2 \rangle$, e substituir a integral desta equação no último termo. Porém, está equação iria depender do terceiro momento estatístico $\langle n^3 \rangle$. Não ajudaria muito.

A aproximação de campo médio também supõe no fundo que todos os momentos estatísticos de ordem maior que 1 são dados em termos do primeiro momento estatístico (a média), como explicitado na equação (23). Logo

$$\frac{d}{dt} \langle n \rangle = b \langle n \rangle - d \langle n \rangle - \alpha_0 \langle n \rangle^2 = \left[\underbrace{(b-d)}_r - \alpha_0 \langle n \rangle \right] \langle n \rangle \quad (66)$$

Esta é a equação conhecida para um crescimento logístico!

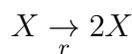
No fundo, o que a aproximação de campo médio está dizendo nesta equação é que a variância na distribuição de probabilidade dos estados n , em um dado instante t , é nula $\text{Var}[n] = \langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2 = 0 \Rightarrow \langle n^2 \rangle = \langle n \rangle^2$. Caso a variância não seja nula, podemos reescrever a equação (66) como

$$\frac{d}{dt} \langle n \rangle = b \langle n \rangle - d \langle n \rangle - \alpha_0 (\langle n^2 \rangle + \text{Var}[n]) \quad (67)$$

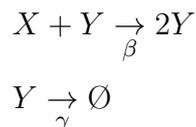
Ou seja, a presença de uma variação na probabilidade de distribuição de estados do sistema, naturalmente provoca uma diminuição no valor esperado de n para um dado instante de tempo t . A estocasticidade não apenas provoca flutuações em torno da média, como também é capaz de mudar o próprio valor esperado de população t tempo após o início da dinâmica.

6 LOTKA-VOLTERRA DE PREDACÃO

Partiremos agora para um sistema envolvendo duas populações. Considere uma população X que se reproduz consumindo algum recurso, que a princípio é ilimitado, como um herbívoro se alimentando de pasto em uma região vasta e sustentável. Portanto, em um dado intervalo de tempo Δt , a seguinte reação pode ocorrer



isto é, o indivíduo X pode se reproduzir com uma taxa r . Ao mesmo tempo, uma segunda população de indivíduos Y se reproduz a partir do consumo de um indivíduo X a uma taxa β e morre por causas naturais a uma taxa γ . Logo, ainda em um dado intervalo de tempo Δt podemos encontrar



Denotaremos por $P_t(x, y)$ a probabilidade de que em um dado instante t haja x indivíduos da população X e y indivíduos da população Y . Em um instante $t + \Delta t$, o total de processos que levam a $P_{t+\Delta t}(x, y)$ nos fornecem a equação mestra do sistema

$$\begin{aligned}
P_{t+\Delta t}(x, y) = & P_t(x, y) (1 - rx\Delta t) (1 - \beta xy\Delta t) (1 - \gamma y\Delta t) + \\
& + P_t(x - 1, y)r(x - 1)\Delta t + P_t(x, y + 1)\gamma(y + 1)\Delta t + \\
& + P_t(x + 1, y - 1)\beta(x + 1)(y - 1)\Delta t
\end{aligned} \tag{68}$$

Reorganizando obtemos a forma usual da equação mestra

$$\begin{aligned}
P_{t+\Delta t}(x, y) - P_t(x, y) = & P_t(x, y) (-\gamma y\Delta t - \beta xy\Delta t - rx\Delta t + \beta\gamma xy^2\Delta t^2 + r\gamma xy\Delta t^2 + \\
& + \beta rx^2y\Delta t^2 - \gamma\beta rx^2y^2\Delta t^3) + \\
& + P_t(x - 1, y)r(x - 1)\Delta t + P_t(x, y + 1)\gamma(y + 1)\Delta t + \\
& + P_t(x + 1, y - 1)\beta(x + 1)(y - 1)\Delta t
\end{aligned} \tag{69}$$

A mudança em probabilidade por tempo é então escrita dividindo toda a equação por Δt

$$\frac{\Delta P(x, y)}{\Delta t} = P_t(x, y) (-\gamma y - \beta xy - rx + \beta\gamma xy^2\Delta t + r\gamma xy\Delta t + \tag{70}$$

$$+ \beta rx^2y\Delta t - \gamma\beta rx^2y^2\Delta t^2) + \tag{71}$$

$$+ P_t(x - 1, y)r(x - 1) + P_t(x, y + 1)\gamma(y + 1) +$$

$$+ P_t(x + 1, y - 1)\beta(x + 1)(y - 1)$$

Conforme fazemos $\Delta t \rightarrow 0$, os termos multiplicados por Δt se tornam desprezíveis e podemos escrever a equação diferencial para a mudança de probabilidade no tempo ignorando todos os termos de ordem $\mathcal{O}(\Delta t)$ ou mais

$$\begin{aligned}
\frac{\partial P(x, y)}{\partial t} = & -P(x, y) (\gamma y + \beta xy + rx) + P(x - 1, y)r(x - 1) + P(x, y + 1)\gamma(y + 1) + \\
& + P(x + 1, y - 1)\beta(x + 1)(y - 1)
\end{aligned} \tag{72}$$

onde a dependência temporal de P está implícita e por isso não escrevemos mais o subíndice t . Afim de obter as equações de Lotka-Volterra, utilizamos uma aproximação de campo médio, na qual nos preocupamos apenas com as médias destas probabilidades, ignorando as flutuações existentes. É importante dizer que neste processo, ainda estamos assumindo uma população homogêneamente distribuída pelo espaço, uma vez que a taxa de predação β e crescimento r dos predadores Y e as presas X são constantes e iguais para todos os indivíduos.

Em uma teoria de campo médio, calculamos o valor médio de uma variável $\langle x \rangle$ somando cada valor assumido por ela, multiplicado pela probabilidade de ocorrência de cada valor, isto é

$$\begin{aligned}\langle x \rangle &= \sum_{x=0}^n \sum_{y=0}^n xP(x, y) \\ \langle y \rangle &= \sum_{y=0}^n \sum_{x=0}^n yP(x, y)\end{aligned}\tag{73}$$

onde n é o máximo da população. Para obter uma equação para a variação temporal da média de x , somamos sobre todos os possíveis x e y a equação (72), e multiplicamos por x

$$\begin{aligned}\sum_x \sum_y x \frac{\partial P(x, y)}{\partial t} &= - \sum_x \sum_y xP(x, y) (\gamma y + \beta xy + rx) + \sum_x \sum_y xP(x-1, y)r(x-1) + \\ &+ \sum_x \sum_y xP(x, y+1)\gamma(y+1) + \sum_x \sum_y xP(x+1, y-1)\beta(x+1)(y-1) = \\ &= -\gamma \sum_x \sum_y xyP(x, y) - \beta \sum_x \sum_y x^2yP(x, y) - r \sum_x \sum_y x^2P(x, y) + \\ &+ r \sum_x \sum_y x^2P(x-1, y) - r \sum_x \sum_y xP(x-1, y) + \gamma \sum_x \sum_y xyP(x, y+1) + \\ &+ \gamma \sum_x \sum_y xP(x, y+1) + \beta \sum_x \sum_y x^2yP(x+1, y-1) - \beta \sum_x \sum_y x^2P(x+1, y-1) + \\ &+ \beta \sum_x \sum_y xyP(x+1, y-1) - \beta \sum_x \sum_y xP(x+1, y-1)\end{aligned}$$

Aqui fazemos o processo usual de mudança de índice nos somatórios. A diferença é que a mudança de índice agora precisa ser em ambos os índices de x e y . Portanto devemos mudar os índices de todos os termos do tipo $P(x \pm 1, y \pm 1)$. Claro que, em termos do tipo $\sum_x \sum_y xP(x, y \pm 1)$ a mudança do índice y nos somatório não muda nada, uma vez que a variável de estado y não aparece explicitamente na soma, apenas x . O mesmo vale para termos do tipo $\sum_x \sum_y yP(x \pm 1, y)$. Desta vez, não faremos o passo a passo da mudança de índice.

Portanto, os únicos termos restantes são

$$\sum_x \sum_y x \frac{\partial P(x, y)}{\partial t} = r \sum_x \sum_y xP(x-1, y) - \beta \sum_x \sum_y xyP(x+1, y-1)$$

que representam

$$\left\langle \frac{\partial x}{\partial t} \right\rangle = r \langle x \rangle - \beta \langle xy \rangle\tag{74}$$

De forma análoga, para y

$$\left\langle \frac{\partial y}{\partial t} \right\rangle = \beta \langle xy \rangle - \gamma \langle y \rangle \quad (75)$$

A aproximação de campo médio assume ainda que $\langle xy \rangle = \langle x \rangle \langle y \rangle$, isto é a média da multiplicação é a multiplicação da média. Isso só é verdade caso os valores de x e y sejam independentes. Escrevendo $x = \langle x \rangle$ e $y = \langle y \rangle$, apenas para simplificação da notação e deixar a equação mais familiar. No fundo aplicar esta notação indica dizer que a população x é sempre igual a média, ou seja, não há variação, portanto o modelo é determinístico.

$$\boxed{\frac{\partial x}{\partial t} = rx - \beta xy} \quad (76)$$

$$\boxed{\frac{\partial y}{\partial t} = \beta xy - \gamma y} \quad (77)$$

Assim obtemos as equações diferenciais conhecidas do modelo de Lotka-Volterra de predação.

7 EQUAÇÃO MESTRA ESPACIAL

A ecologia é intrinsecamente espacial. Até o momento, tudo o que vimos continha uma suposição que nos permitia ignorar as características espaciais. As populações eram totalmente homogêneas no espaço. Isso faz com que possamos ignorar efeitos de movimento individual ou heterogeneidades na densidade populacional. Trataremos desta abordagem a partir de agora. A princípio, para simplificação e melhor entendimento, desconsideraremos a dinâmica de crescimento, morte, competição, etc. Focando apenas em como o movimento espacial dos indivíduos é representado pela equação mestra. Mais tarde, quando aplicarmos este formalismo no caso de crescimento populacional com competição não-local, juntaremos tudo e obteremos o sistema de equações diferenciais que corretamente descreve o sistema.

Imagine um espaço discreto, isto é, a posição espacial de um indivíduo é dada em localizações específicas. Dizemos que o espaço é como uma rede, onde indivíduos podem estar localizados nos nós desta rede. Mais para frente, faremos o espaçamento entre os nós tender a zero, recuperando então um espaço contínuo. Considere ainda que um indivíduo localizado em um sítio i desta rede espacial, só pode se mover para os sítios vizinhos⁷. Neste caso podemos pensar no estado do sistema como sendo descrito pela quantidade de partículas em um dado sítio i . Se uma partícula individual pode, durante o tempo Δt , se mover para algum sítio vizinho, temos as seguintes reações para a dinâmica individual

⁷ O argumento por trás desta consideração é análogo ao porque consideramos apenas mudanças unitárias entre os estados do sistema no caso não espacial. Porque mudanças não unitárias serão da ordem $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ e se tornaram desprezíveis no limite de tempo contínuo.

$$x_i \rightarrow x_{i+1} \quad (78)$$

$$x_i \rightarrow x_{i-1} \quad (79)$$

Isto significa que, durante um intervalo de tempo Δt , dois sítios consecutivos estão ligados pela seguinte reação

$$(n_i, n_{i+1}) \xrightarrow{h_i^R} (n_i - 1, n_{i+1} + 1) \quad (80)$$

$$(n_i, n_{i-1}) \xrightarrow{h_i^L} (n_i - 1, n_{i-1} + 1) \quad (81)$$

onde n_i é a quantidade de partículas no sítio i , e h_i^R e h_i^L são as taxas de movimentação no sítio i , para a direita e para a esquerda, respectivamente. Claro que, estas taxas podem ainda ser funções do tempo. O caso mais simples é o que as taxas de movimentação não dependem da posição, são iguais para qualquer lado e independem do tempo, ou seja, $h_i^R(t) = h_i^L(t) = h$.

Podemos nos perguntar então, qual é a probabilidade de se observar n partículas no sítio i , entre os intervalos de tempo t e $t + \Delta t$. Neste intervalo de tempo, quatro coisas podem ocorrer, cada uma com uma contribuição para a probabilidade

1. Um indivíduo do sítio $i + 1$ pode se mover para i com uma taxa h_{i+1}^L ;
2. Um indivíduo do sítio $i - 1$ pode se mover para i com uma taxa h_{i+1}^R ;
3. Um indivíduo de i pode se mover para $i + 1$ a uma taxa h_i^R ;
4. Uma partícula de i pode se mover para $i - 1$ a uma taxa h_i^L .

Os dois últimos itens cotribuem negativamente com a probabilidade, pois precisamos que eles não ocorram. Sendo assim, a probabilidade de se observar n indivíduos em i , após Δt é

$$\begin{aligned} P(n_i, t + \Delta t) = & P(n_i, t)n_i(1 - h_i^L\Delta t - h_i^R\Delta t) + \\ & + P(n_{i+1}, t)(n_i + 1)h_{i+1}^L\Delta t + \\ & + P(n_{i-1}, t)(n_i + 1)h_{i-1}^L\Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2) \end{aligned} \quad (82)$$

A primeira linha representa a probabilidade de que já tenhamos n indivíduos em i e nenhum deles se mova para $i + 1$ ou $i - 1$, ou seja, é a probabilidade de que os itens 3 e 4 não ocorram. A segunda linha representa a probabilidade de que o item 1 ocorra. E a última linha contem a probabilidade de que o item 2 ocorra, mais as contribuições de saltos múltiplos ou transições intermediárias, dadas por $\mathcal{O}(\Delta t^2)$. Reorganizando esta equação, obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\Delta P(n_i, t)}{\Delta t} &= P(n_{i+1}, t)h_{i+1}^L(n_i + 1) - P(n_i, t)h_i^L n_i - P(n_i, t)h_i^R n_i - \\ &\quad - P(n_{i-1}, t)h_{i-1}^L(n_i + 1) + \frac{\mathcal{O}(\Delta t^2)}{\Delta t} \end{aligned} \quad (83)$$

Tomando o limite $\Delta t \rightarrow 0$, eliminamos as contribuições de ordem Δt^2 .

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(n_i, t)}{\partial t} &= P(n_{i+1}, t)h_{i+1}^L(n_i + 1) - P(n_i, t)h_i^L n_i - P(n_i, t)h_i^R n_i - \\ &\quad - P(n_{i-1}, t)h_{i-1}^L(n_i + 1) \end{aligned} \quad (84)$$

Utilizamos aqui o símbolo de derivada parcial ∂ , ao invés da derivada total, pois agora a probabilidade depende não apenas do tempo, mas também do espaço. Entretanto, não estamos interessados em descrever a dinâmica em apenas um único sítio n_i . O processo para descrever um espaço com N sítios em cada lado, seria extremamente tedioso e demorado. Podemos então pensar em um vetor \vec{n} , onde cada componente representa a quantidade de indivíduos em um sítio. Por exemplo, em um espaço com 5 sítios, temos $\vec{n} = (n_1, n_2, n_3, n_4, n_5)$. Desta forma, se desejamos conhecer a quantidade de partículas em um dado sítio n_i , podemos realizar uma projeção do vetor \vec{n} na direção n_i definindo um vetor unitário \hat{e}_i , tal que

$$\vec{n} \cdot \hat{e}_i = n_i \quad (85)$$

No caso de exemplo, se $i = 2$ temos

$$(n_1, n_2, n_3, n_4, n_5) \cdot (0, 1, 0, 0, 0) = n_1 \times 0 + n_2 \times 1 + n_3 \times 0 + n_4 \times 0 + n_5 \times 0 = n_2 \quad (86)$$

A equação (84) fica reescrita, de forma generalizada para toda a rede de sítios, como

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} P(\vec{n}, t) &= \sum_i h_i^R(n_i + 1) P(\vec{n} + \hat{e}_i - \hat{e}_{i+1}, t) + \\ &\quad + \sum_i h_i^L(n_i + 1) P(\vec{n} + \hat{e}_i - \hat{e}_{i-1}, t) - \\ &\quad - \sum_i (h_i^R + h_i^L) n_i P(\vec{n}, t) \end{aligned} \quad (87)$$

Esta equação relaciona todos os sítios da rede com seus vizinhos através da soma e subtração dos vetores unitários \hat{e} . Por exemplo, o termo do primeiro somatório, quando $i = 2$ é

$$h_2^R(n_2 + 1)P(\vec{n} + \hat{e}_2 - \hat{e}_3, t) = h_2^R(n_2 + 1)P([n_1, n_2 + 1, n_3 - 1, n_4, n_5], t) \quad (88)$$

A equação (87) é **Equação Mestra para movimentação**.

Assim como as demais equações mestras, solucionar analiticamente esta equação é frequentemente impossível, e quando possível, extremamente trabalhoso. Portanto, costumamos aplicar como de costume a aproximação de campo médio.

7.1 Aproximação de campo médio

Como já vimos, estamos interessados agora no valor médio da população em cada sítio. Portanto, aplicamos o processo usual de multiplicação por n e soma sobre todos os estados possíveis. Aqui, multiplicamos por um valor n_j , isto é, a quantidade de partículas no sítio j , para enfim obtermos o valor médio neste sítio. Para o primeiro termo da equação (87), temos

$$\begin{aligned} \sum_n \sum_i h_i^R(n_i + 1)n_j P(\vec{n} + \hat{e}_i - \hat{e}_{i+1}, t) &= \sum_{i \notin \{j, j-1\}} \sum_n h_i^R(n_i + 1)n_j P(\vec{n} + \hat{e}_i - \hat{e}_{i+1}, t) + \\ &+ \sum_n h_j^R(n_j + 1)n_j P(\vec{n} + \hat{e}_i - \hat{e}_{i+1}, t) + \\ &+ \sum_n h_{j-1}^R(n_{j-1} + 1)n_j P(\vec{n} + \hat{e}_i - \hat{e}_{i+1}, t) \end{aligned} \quad (89)$$

Aqui nós apenas separamos os termos $i = j$ e $i = j - 1$ do somatório em i , pois eles resultaram em uma diferença ao realizar a troca de índices.

$$\begin{aligned} \sum_n \sum_i h_i^R(n_i + 1)n_j P(\vec{n} + \hat{e}_i - \hat{e}_{i+1}, t) &= \\ &= \sum_{i \notin \{j, j-1\}} \sum_n h_i^R n_i n_j P(\vec{n}, t) + \sum_n h_j^R n_j (n_j - 1) P(\vec{n}, t) + \sum_n h_{j-1}^R n_{j-1} (n_j + 1) P(\vec{n}, t) = \\ &= \sum_i \sum_n h_i^R n_i n_j P(\vec{n}, t) + \sum_n \left(h_{j-1}^R n_{j-1} - h_j n_j \right) P(\vec{n}, t) \end{aligned} \quad (90)$$

O mesmo processo para o segundo termo de (87), nos fornece

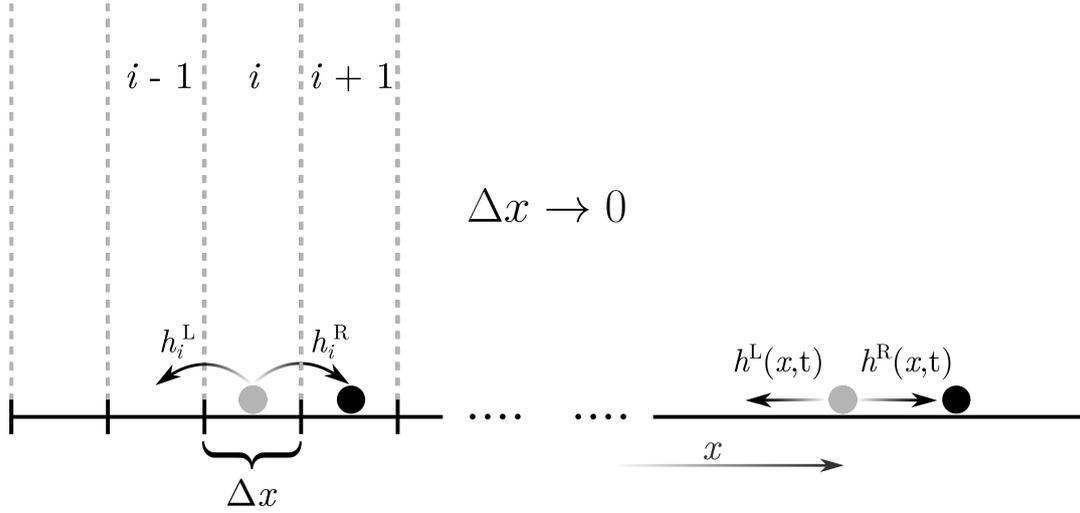


Figura 1. Transição da descrição discreta para contínua da posição espacial. *Esquerda:* espaço discreto dividido em sítios de tamanho Δx . Ao se passar a descrição a partir da posição do sítio para a posição no espaço x , e fazendo o tamanho de cada sítio tender a zero, obtemos um espaço contínuo onde as transições entre sítios se tornam taxas de movimentação para cada lado no espaço.

$$\begin{aligned}
& \sum_n \sum_i h_i^L (n_i + 1) n_j P(\vec{n} + \hat{e}_i - \hat{e}_{i-1}, t) = \\
& = \sum_{i \notin \{j, j+1\}} \sum_n h_i^L n_i n_j P(\vec{n}, t) + \sum_n h_j^L n_j (n_j + 1) P(\vec{n}, t) + \sum_n h_{j-1}^L n_{j-1} (n_j - 1) P(\vec{n}, t) = \\
& = \sum_i \sum_n h_i^L n_i n_j P(\vec{n}, t) + \sum_n \left(h_{j+1}^L n_{j+1} - h_j n_j \right) P(\vec{n}, t) \quad (91)
\end{aligned}$$

Substituindo (90) e (91) em (87), obtemos das duas primeiras linhas apenas os termos em sítios $j - 1$ e $j + 1$

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle n_j(t) \rangle = h_{j-1}^R \langle n_{j-1} \rangle + h_{j+1}^L \langle n_{j+1} \rangle + (h_j^R + h_j^L) \langle n_j \rangle \quad (92)$$

Podemos agora tomar o limite de espaço contínuo. Para tal, notamos que se os sítios são igualmente espaçados, então o sítio j na posição x está a um espaço Δx dos seus vizinhos (figura 1).

Substituímos então a quantidade de partículas n no sítio j pela multiplicação da densidade de partículas, vezes o tamanho do espaço entre os sítios $n_j(t) = \rho(x, t) \Delta x$ e $n_{j\pm 1}(t) = \rho(x \pm \Delta x) \Delta x$. Além disso, as taxas de movimentação se tornam funções da posição espacial x , ao invés de serem escritas em termos do índice do sítio, logo $h_{j\pm 1} = h(x \pm \Delta x)$.

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) = h^R(x - \Delta x) \rho(x - \Delta x, t) + h^L(x + \Delta x) \rho(x + \Delta x, t) + \left[h^R(x) + h^L(x) \right] \rho(x, t) \quad (93)$$

Expandindo as funções espaciais em séries de Taylor até os termos de ordem Δx^2

$$f(x \pm \Delta x) \approx f(x) \pm \Delta x \frac{\partial}{\partial x} f(x) + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x) \quad (94)$$

obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) &= \left[h^R(x, t) - \Delta x \frac{\partial h^R(x, t)}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 h^R(x, t)}{\partial x^2} \right] \left[\rho(x, t) - \Delta x \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 \rho(x, t)}{\partial x^2} \right] \\ &+ \left[h^L(x, t) + \Delta x \frac{\partial h^L(x, t)}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 h^L(x, t)}{\partial x^2} \right] \left[\rho(x, t) + \Delta x \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 \rho(x, t)}{\partial x^2} \right] \\ &+ \left[h^R(x) + h^L(x) \right] \rho(x, t) = \\ &= \Delta x \frac{\partial}{\partial x} \left[\rho(x, t) \left(h^L(x, t) - h^R(x, t) \right) \right] + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[\rho(x, t) \left(h^L(x, t) + h^R(x, t) \right) \right] \quad (95) \end{aligned}$$

onde utilizamos a regra de multiplicação de derivadas entre a terceira e quarta linhas. Podemos compactar esta equação definindo a velocidade de advecção $v(x, t) = \Delta x (h^R(x, t) - h^L(x, t))$ e o coeficiente de difusão $D(x, t) = \Delta x^2 / 2 \cdot (h^L(x, t) + h^R(x, t))$, permitindo reescrever

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) = \underbrace{-\frac{\partial}{\partial x} [\rho(x, t) v(x, t)]}_{\text{Advecção}} + \underbrace{\frac{\partial^2}{\partial x^2} [D(x, t) \rho(x, t)]}_{\text{Difusão}} \quad (96)$$

A dinâmica individual simples de movimentação entre sítios vizinhos, com taxas de movimentação diferentes automaticamente implica em uma equação de advecção-difusão para a dinâmica populacional. Interessantemente, se $h^R(x, t) = h^L(x, t)$, então $v(x, t) = 0$ e apenas a difusão ocorre. Faz sentido, se os indivíduos se movem em taxas iguais para a direita e para a esquerda, então o perfil de densidade todo tende apenas a se espalhar pelo espaço, mas sem ter uma movimentação predileta para algum lado.

REFERÊNCIAS

- [1] Bolker, B. M. (2008). *Ecological models and data in R* (Princeton University Press)
- [2] Jopp, F., Breckling, B., and Reuter, H. (2010). *Modelling complex ecological dynamics* (Springer Berlin)
- [3] Stewart, J. (2007). *Essential calculus: Early transcendentals* (Brooks/Cole, a part of the Thomson Corporation)
- [4] Toral, R. and Colet, P. (2014). *Stochastic numerical methods: an introduction for students and scientists* (John Wiley & Sons)