

# Um Modelo Diferencial de Macroevolução: primeiros resultados

Raul Abreu de Assis<sup>1</sup>,

Dep. de Matemática, UNEMAT, 78390-000 – Barra do Bugres/MT.

Wilson Castro Ferreira Jr.<sup>2</sup>,

DMA, IMECC–UNICAMP, 13.083-970 – Campinas/SP.

**Resumo.** Neste trabalho apresentamos um modelo diferencial de macroevolução, detalhando o processo de modelagem para obtenção das equações diferenciais. Primeiros resultados, obtidos a partir da análise numérica, indicam que o comportamento do modelo depende de um parâmetro adimensional das equações, tendo pouca dependência das condições iniciais.

**Palavras-chave:** *Evolução; Modelagem; Equações diferenciais; Biomatemática.*

## 1 Introdução e Objetivos

No ano de 1859, a publicação do livro “A Origem das Espécies”, de Charles Darwin, revolucionou a maneira de se pensar em Biologia. Sob a luz da Teoria da Evolução através da seleção natural, muitas observações biológicas puderam ser melhor compreendidas e interpretadas. Como exemplo, poderíamos citar a similaridade entre os organismos de espécies distintas,

---

<sup>1</sup>raulassis@yahoo.com

<sup>2</sup>wilson@ime.unicamp.br

que, atualmente, pode ser explicado através da existência de uma espécie ancestral comum não muito distante.

Sendo umas das mais poderosas ferramentas do raciocínio humano, a Matemática também foi, e é, utilizada para melhor compreensão do fenômeno de evolução das espécies. R. A. Fisher foi um dos primeiros a propor modelos matemáticos para o processo de propagação de genes vantajosos (Fisher, 1937). Através do desenvolvimento da genética e com uma maior compreensão dos mecanismos que regulam a evolução dos organismos, a aplicação de modelos e conceitos matemáticos nessa área de estudo desenvolveu-se significativamente, sendo conhecida atualmente como “Genética de Populações” - (Crow e Kimura, 1970; Hartl e Clark, 1989).

A Genética de Populações propõe modelos para se estudar a variação da frequência dos genes em uma certa população, sendo, em sua grande maioria, modelos estocásticos. A velocidade de multiplicação de um gene mutante, sua chance de permanência na espécie, a frequência de indivíduos homozigotos e heterozigotos, são objetos de estudo da Genética de Populações. Dessa forma, a Genética de Populações se estabeleceu como uma ferramenta de análise teórica dos processos evolutivos.

Contudo, do ponto de vista biológico, no estudo do processo de evolução há uma distinção entre *micro* e *macroevolução* (Eldredge e Gould, 1972; Eldredge, 1992). Como o próprio nome sugere, o processo de *microevolução* é aquele em que ocorrem “pequenas” modificações na espécie em estudo, ocorrendo de geração em geração. Um exemplo clássico de *microevolução* é o caso da espécie *Biston betularia* (uma mariposa) que teve a frequência do gene que determinava uma cor clara diminuída em sua população durante o período da revolução industrial na Inglaterra (Sargent et al., 1998; Grant et al., 1995). Nesse período, a poluição do ar fez com que as superfícies das árvores ficassem escuras, tornando os indivíduos de cor clara presas de fácil localização por parte dos predadores, de maneira que houve uma seleção natural dos indivíduos (e portanto dos genes) que determinam uma cor escura. Um exemplo de *macroevolução* é a descendência das espécies

de baleias dos mamíferos terrestres. Essa mudança só pode ocorrer em uma larga escala de tempo, comparada com àquela da microevolução, e apresenta mudanças radicais no organismo da espécie, podendo gerar, durante o processo, espécies totalmente diferentes, dependendo da “direção” de evolução (Eldredge, 1992).

Uma diferença fundamental entre micro e macro evolução é que primeira pode ser estudada diretamente, através de experimentos, enquanto a segunda, devido à sua natureza lenta, só pode ser estudada indiretamente, como por exemplo, através de fósseis, análise de seqüências de DNA e, é claro, modelos matemáticos. Naturalmente, isso torna muito mais difícil compreender os mecanismos e processos macroevolutivos do que os processos da microevolução.

Os modelos utilizados em Genética de Populações refletem, em geral, os processos de microevolução, geração após geração. Existe ainda uma controvérsia se a macroevolução é apenas microevolução acumulada ou se esta possui outros mecanismos além daqueles da microevolução (seleção natural, variação genética, fluxo de genes). De qualquer forma, os modelos da Genética de Populações que visam reproduzir a evolução da freqüência de genes na população refletem, na verdade, exatamente esses mecanismos de microevolução. Propomos, então, uma abordagem diferenciada para o processo macroevolutivo, onde “esquecemos”, os detalhes das distribuições de freqüência de genes e buscamos criar um modelo “macro”, onde tenhamos a visão do processo em larga escala de tempo.

De maneira a tornar claras nossas limitações e intenções, listamos a seguir quais são e quais *não* são os nossos objetivos neste artigo:

- Buscamos criar um modelo de macroevolução baseado em uma modelagem em um espaço de aspecto, onde a população se distribui, sujeita às forças de seleção natural e variação genética. Esse modelo pode servir como alternativa aos modelos estocásticos da Genética de Populações.

- Ainda que em fase inicial, testar o comportamento do modelo, através de simulações numéricas.
- *Não* temos a intenção de comparar uma abordagem e outra, apenas oferecer uma alternativa para a modelagem de macroevolução.

## 2 Modelagem Matemática

Nesta seção apresentamos o processo de modelagem através do qual podemos obter as equações diferenciais que regem o modelo.

### 2.1 O Espaço de Aspecto

O conceito de espaço de aspecto, amplamente utilizado em dinâmica de fluidos e na modelagem da movimentação de populações (Lin e Segel, 1988) é a abordagem que utilizaremos para modelar o processo de macroevolução. Os indivíduos de uma população se distribuem em um “espaço de características”. Esse espaço é abstrato, teórico, e sobre ele, ocorrem os processos de seleção natural e variação genética.

Para criar um exemplo mais claro, suponha que estamos estudando apenas a evolução do *tamanho da asa* em uma certa espécie. Então o espaço de aspecto, nesse caso, seria um intervalo da reta real, onde se distribuem os indivíduos, sendo que a seleção natural pode favorecer certos indivíduos com tamanho de asa dentro de um intervalo específico e a variação genética é responsável por gerar indivíduos de diferentes tamanhos de asas. Deixamos claro que esse exemplo é apenas para uma melhor compreensão do modelo, pois não estamos interessados em criar modelos específicos de evolução de certas características ou traços em uma população, senão que estamos interessados no *movimento* de uma população através de um espaço de aspecto abstrato.

De maneira a tornar viável a análise e também por ser esse o primeiro modelo criado com essa intenção, tomaremos nosso espaço de aspecto como

sendo um intervalo da reta real, a dizer  $\Omega = [0, L]$ . Esse será o espaço onde a população irá movimentar-se, sujeita às forças de seleção natural e variação genética.

## 2.2 Modelo Discreto

O modelo pode ser deduzido via uma discretização do domínio  $\Omega$ , para depois tomar-se o limite para o caso contínuo, ou através de uma modelagem de meio contínuo, utilizando-se os princípios de conservação. Aqui apresentaremos apenas o processo de modelagem através da discretização do domínio, por julgar que a mesma torna as idéias mais claras e acessíveis à compreensão. A modelagem via princípios de conservação será apresentada em outra oportunidade.

Dessa forma, dividimos o domínio em  $N$  intervalos iguais, sendo  $\Delta x$ , o tamanho desses intervalos. Dessa forma, criamos  $N$  classes, e definimos  $U_i$ ,  $i = 1, \dots, N$  como sendo o número de indivíduos no intervalo  $[(i-1)\Delta x, i\Delta x]$ . Além disso, consideramos um intervalo de tempo  $\Delta t$ , sob o qual analisaremos a variação no número de indivíduos da classe  $i$  no instante  $t$ , que denotamos por  $U_i$ .

Teremos, como ingredientes do modelo, os seguintes fatores, como na figura 1:

1. Reprodução dos indivíduos da classe  $U_i$ , gerando indivíduos semelhantes aos mesmos, dentro da própria classe  $U_i$ .
2. Reprodução dos indivíduos da classe  $U_i$ , gerando indivíduos distintos aos mesmos, das classes  $U_{i-1}$  e  $U_{i+1}$ . Esse ingrediente, na verdade, representa a variação genética da microevolução.
3. Existência de uma “função de adaptação”, que varia de acordo com a classe do indivíduo.
4. Taxa de reprodução diferenciada entre indivíduos mais aptos e menos aptos, representando a “força” de seleção natural.

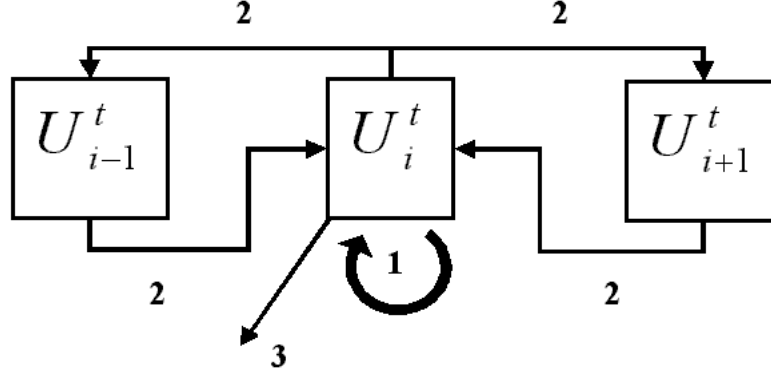


Figura 1: Esquema dos ingredientes a serem incluídos no modelo.  $U_{i-1}^t$  também pode ser escrito como  $U_{i-1}^t = U_{x-\Delta x}^t$ ,  $U_i^t = U_x^t$  e  $U_{i+1}^t = U_{x+\Delta x}^t$ . **1-** Efeito de reprodução dentro de uma mesma classe. **2-** Efeito de variação genética. **3-** Mortalidade.

5. Mortalidade tipo Verhulst devido à saturação do meio por indivíduos.

Definindo  $U_i^t$  como a quantidade de indivíduos na classe  $i$  no instante  $k$ , buscaremos modelar a variação  $\Delta U_i^t = U_i^{t+\Delta t} - U_i^t$ .

Para incluir os ingredientes 1 e 2, acima, definimos  $r$  como a taxa de reprodução no intervalo  $\Delta t$ , a unidade de  $r$  é, então  $1/[\Delta t]$ . Além disso, definimos uma fração  $\sigma$  que representa a fração de indivíduos que nascerão em classes distintas dos pais, sendo metade da classe à direita (classe  $i - 1$ ) e a outra metade à esquerda (classe  $i + 1$ ). Em analogia aos processos de microevolução,  $\sigma$  tem o mesmo papel que o da taxa de mutação. Dessa forma, ficamos, por hora, com:

$$\Delta U_i^t = rU_i^t(1 - \sigma) + \frac{r\sigma}{2}U_{i+1}^t + \frac{r\sigma}{2}U_{i-1}^t \quad (2.1)$$

onde o primeiro termo representa a reprodução dos indivíduos gerando descendentes dentro da própria classe, enquanto os outros dois termos representam a geração de indivíduos da classe  $i$  por parte das populações das classes  $i - 1$  e  $i + 1$ .

Todavia, se utilizássemos a equação 2.1, nosso modelo estaria representando uma taxa de reprodução *igual* para todas as classes. Como queremos

representar o efeito da seleção natural, devemos relacionar a taxa de reprodução dos indivíduos com uma função de adaptação. Para que essa função represente taxas de reprodução diferenciadas, definimos  $f : \Omega \rightarrow [0, 1]$  com valores *adimensionais*, onde 0 representa a impossibilidade de reprodução e 1 a taxa máxima de reprodução da espécie, fazendo:

$$\Delta U_i^t = f(i\Delta x)rU_i^t(1 - \sigma) + \frac{r\sigma}{2}f((i+1)\Delta x)U_{i+1}^t + \frac{r\sigma}{2}f((i-1)\Delta x)U_{i-1}^t \quad (2.2)$$

isto é, quanto maior o valor de  $f$  no intervalo da classe  $i$ , *maior* será a taxa de reprodução dos indivíduos daquela classe. Por questão de clareza, fazemos  $f(i\Delta x) = f_i$ , de forma que a equação 2.2 fica:

$$\Delta U_i^t = rf_iU_i^t + \frac{r\sigma}{2}(f_{i+1}U_{i+1}^t - 2f_iU_i^t + f_{i-1}U_{i-1}^t) \quad (2.3)$$

Finalmente, modificamos a dinâmica vital da equação 2.3 ( $rf_iU_i^t$ ), que é malthusiana, para uma dinâmica de Verhulst, representando o efeito de saturação do meio e da competição entre os indivíduos, substituindo-a por  $rU_i^t(f_i - P/K)$ , onde  $P = \sum_{i=1}^N U_i$  é a população total e  $K$  é a constante de saturação do meio, tendo como unidade  $[U]$ . Assim, a equação para o modelo discreto fica:

$$\Delta U_i^t = rU_i^t(f_i - \sum_{i=1}^N U_i/K) + \frac{r\sigma}{2}(f_{i+1}U_{i+1}^t - 2f_iU_i^t + f_{i-1}U_{i-1}^t) \quad (2.4)$$

Na figura 2 apresentamos um esquema com a formulação matemática do modelo. Se tomamos na equação 2.3 o limite  $N \rightarrow \infty (\Delta x \rightarrow 0)$  e  $\Delta t \rightarrow 0$ , então a dinâmica contínua que representa o modelo discreto acima é:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \bar{r}u(f(x) - \int_{\Omega} u/K) + \frac{\bar{r}\sigma M}{2} \frac{\partial^2 [f(x)u]}{\partial x^2} \quad (2.5)$$

onde  $u(x, t)$  representa a *densidade* populacional no ponto  $x$  no instante  $t$ ,  $\bar{r}$  (que denotaremos por  $r$  daqui por diante) é a taxa máxima de reprodução instantânea e  $M = \lim_{\Delta x \rightarrow 0, \Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta x^2}{\Delta t}$ , uma condição necessária para

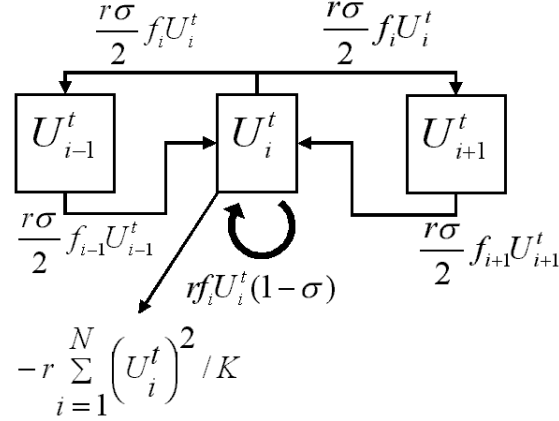


Figura 2: Esquema das equações utilizadas para representar cada um dos efeitos de variação genética, competição, mortalidade e reprodução.

a dedução da equação de difusão, que aqui se repete, devido ao operador discreto  $f_{i+1}U_{i+1}^t - 2f_iU_i^t + f_{i+1}U_{i+1}^t$ . É possível deduzir essa mesma equação através de princípios de conservação em meios contínuos.

Vale notar que a taxa de variação temporal de  $u(x, t)$  vem decomposta como a soma de duas parcelas:  $ru(f(x) - \int_{\Omega} u/K)$  e  $\frac{r\sigma M}{2} \frac{\partial^2[f(x)u]}{\partial x^2}$ , que no modelo representam as forças de seleção e variação genética, respectivamente.

### 3 Simulações do Modelo

#### 3.1 Adimensionalização

Em primeiro lugar, empregamos uma adimensionalização da equação 2.4, fazendo  $x^* = x/L$ ,  $t^* = rt$  e  $u^* = uL/K$ . A equação resultante é, então (já retirando os asteriscos):

$$\frac{\partial u}{\partial t} = u \left( f(x) - \int_0^1 u(z, t) dz \right) + D \frac{\partial^2[f(x)u]}{\partial x^2} \quad (3.1)$$

onde  $D = \sigma M/2L^2$ .



Como buscamos modelar o processo de macroevolução, temos uma hipótese fundamental a ser incluída no modelo, que não se encontra nas próprias equações: que a *mudança* nos indivíduos, de geração para geração é pequena se comparada com o processo inteiro de *macroevolução*.

Ora, a movimentação dos agentes no espaço de aspecto, se dá devido ao termo difusivo  $\frac{r\sigma M}{2} \frac{\partial^2 [f(x)u]}{\partial x^2}$  na equação 2.5, e como  $r$  é a taxa de reprodução instantânea,  $1/r$  é a escala de tempo da reprodução. Para obter a ordem de grandeza da “distância” percorrida pelos agentes nessa escala de tempo basta tomar o coeficiente de difusão  $\frac{r\sigma M}{2}$  fazer uma análise dimensional, obtendo  $L_{ger} = \sigma M/2L$ . Finalmente, incluímos que essa distância deve ser pequena em relação ao domínio inteiro, que tem comprimento  $L$ , ou seja,  $L_{ger}/L = \sigma M/2L^2 = \epsilon \ll 1$ .

Assim, o parâmetro adimensional  $D$  é um número pequeno  $\epsilon$  com relação a 1, uma hipótese fundamental para a representação do processo de macroevolução.

### 3.2 Estabelecimento dos mais aptos

De maneira a testar o comportamento do modelo e sua coerência com os objetivos buscados (isto é, simular o processo de evolução de uma espécie em um espaço de aspecto abstrato), criamos um cenário de simulação onde exista um resultado esperado do ponto de vista biológico, para então, compararmos com o comportamento do modelo matemático.

Nosso primeiro cenário de simulação tem como objetivo testar a capacidade do modelo de fazer com que a população de dirija a regiões de maior valor adaptativo. Para tanto, criamos uma função de adaptação como na figura 3. As condições de contorno adotadas para  $u$  são  $u(0, t) = u(1, t) = 0$ , significando que qualquer indivíduo com essas características não consegue sobreviver, representando a natureza limitada da extensão do domínio. A condição inicial é uma função  $u_0(x)$  que representa a distribuição inicial da população.

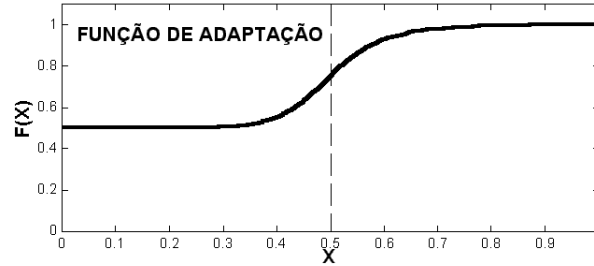


Figura 3: Função de adaptação sobre o espaço de aspecto. A função é dada por  $f(x) = \frac{1}{2} + \frac{(x+k)^n}{(x+k)^n + (1/2+k)^n}$ , onde  $k = 0.01$  e  $n = 10$ .

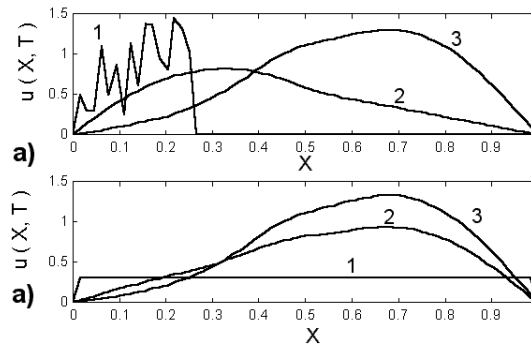


Figura 4: Simulações numéricas do modelo diferencial.  $D = 0.01$ . **a)** 1- condição inicial, 2- estado do sistema após um intervalo adimensional de 6.25 (100 iterações no método numérico). 3- estado do sistema a partir de 18.25(300 iterações). **b)** 1- condição inicial, 2- estado do sistema após um intervalo adimensional de 3.125 (50 iterações no método numérico). 3- estado do sistema a partir de 12.5(200 iterações).

Do ponto de vista biológico, esperamos, como resultados das simulações, que a população caminhe para regiões de maior valor adaptativo, nesse caso, que a população de concentre na região  $[1/2, 1]$ . De fato, simulações do modelo com o parâmetro  $D < 0.01$  apresentaram o comportamento esperado, com a população rumando para uma distribuição estacionária onde os indivíduos se concentram na região de maior valor adaptativo, *independentemente* das condições iniciais. Apresentamos, na figura 4 a evolução do sistema para diferentes condições iniciais.

### 3.3 Sobre o valor de $D$

Simulações para diferentes valores de  $D$  apresentaram comportamentos bem distintos, sendo que esse parâmetro parece reger a dinâmica principal do sistema, tendo as condições iniciais pouca importância para o estabelecimento da solução estacionária final.

Valores de  $D$  não muito pequenos, significam, biologicamente, que a espécie é capaz de mudar muito na escala de tempo da reprodução. Nesse caso, não há um estabelecimento claro dos indivíduos mais aptos. De uma maneira geral, quanto *menor* o valor de  $D$ , maior é o estabelecimento dos indivíduos mais aptos, e quanto *maior*  $D$  menor é esse estabelecimento.

## 4 Conclusões

Dentro de nossos objetivos buscamos apresentar um modelo diferencial de macroevolução que utilizasse uma abordagem diferenciada, que não a análise da frequência de genes em uma população. Apresentamos os argumentos de modelagem bem como os primeiros resultados de análise, através de simulações numéricas.

A análise do comportamento do modelo deve ser aprofundada, principalmente porque parece haver uma dependência direta do valor do parâmetro  $D$ , o que pode facilitar o estudo de seu comportamento. Um mapeamento

dos resultados das simulações do modelo com relação à esse parâmetro é o próximo passo a ser dado.

Uma vez clara a análise do modelo com relação à esse parâmetro, podemos realizar uma reinterpretação biológica do mesmo, confrontando-a com as hipóteses e teorias encontradas no estudo biológico de macroevolução.

Enfim, permanecem amplas possibilidades para o aprofundamento do estudo do modelo, que serão abordadas em trabalhos futuros.

## Referências

- Crow, J. F. e Kimura, M. (1970). *An Introduction to Population Genetics Theory*. Harper & Row.
- Eldredge, N. (1992). *Macroevolutionary Dynamics: Species, Niches and Adaptive Peaks*. McGraw-Hill.
- Eldredge, N. e Gould, S. J. (1972). Punctuated equilibria: an alternative to phyletic gradualism. *Models In Paleobiology*, 5:82–115.
- Fisher, R. A. (1937). The wave of advance of advantageous genes. *Ann. Eugenics*, 7:353–369.
- Grant, B. S., Owen, D. F., e Clarke, C. A. (1995). Decline of melanic moths. *Nature*, 373:565.
- Hartl, D. L. e Clark, A. G. (1989). *Principles of Population Genetics*. Sinauer, Sunderland, Mass, USA.
- Lin, C. C. e Segel, L. A. (1988). *Mathematics Applied to Deterministic Problems in the Natural Sciences*. SIAM, USA.
- Sargent, T. D., Millar, C. D., e Lambert, D. M. (1998). The classical explanation of industrial melanism. *Behavioral Ecology*, 30:299–322.