

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE BIOCIÊNCIAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ECOLOGIA

Marcelo Henrique Schwade

Efeitos da heterogeneidade ambiental sobre processos
macroevolutivos

Porto Alegre
11 de junho de 2025

Marcelo Henrique Schwade

Efeitos da heterogeneidade ambiental sobre processos macroevolutivos

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Ecologia do Instituto de Biociências da UFRGS, como quesito parcial para obtenção do título de Mestre em Ecologia.

Orientador: Leandro da Silva Duarte

Porto Alegre

11 de junho de 2025

CIP - Catalogação na Publicação

Schwade, Marcelo Henrique
Efeitos da heterogeneidade ambiental sobre
processos macroevolutivos / Marcelo Henrique Schwade.
-- 2025.
133 f.
Orientador: Leandro da Silva Duarte.

Dissertação (Mestrado) -- Universidade Federal do
Rio Grande do Sul, Instituto de Biociências, Programa
de Pós-Graduação em Ecologia, Porto Alegre, BR-RS,
2025.

1. heterogeneidade espacial. 2. simulações
eco-evolutivas. 3. pacote gen3sis. 4. especiação. 5.
extinção. I. Duarte, Leandro da Silva, orient. II.
Título.

Agradecimentos

Agradeço, primeiramente, a Deus, por, em meio a tantas voltas da vida, ter me feito chegar até aqui.

Em segundo, agradeço ao meu orientador, o professor Leandro Duarte, por ter me apresentado a Ecologia naquelas primeiras aulas de Ecologia II e ter aceitado a empreitada de me orientar no mestrado, por ter me recebido no LEFF e me acompanhado durante todo esse período.

Agradeço também a todos os professores e professoras que me educaram na Ecologia, inicialmente online, no período difícil da pandemia de COVID-19, e depois presencialmente, em dias melhores. Obrigado Sandra Hartz, Sandra Muller, Leandro, Renan, Valério, Adriano, Gonçalo, Thales, Fabrício e também profs da Ecologia de Campo, Jeff, Ernesto, Milton, Marcão e Luciane. E um obrigado também a todas e todos meus demais professores da vida, mas em particular aos do curso de Física da UFRGS: pode parecer surpreendente, mas tudo que vocês me ensinaram têm sido muito útil nessa jornada ecológica.

Um obrigado especial ao Renan e ao Tiago Quental, por terem contribuído muito para a melhoria desse trabalho através do comitê de acompanhamento. E um obrigado extra ao Tiago e ao pessoal do LabMEME, em particular ao Gabriel e ao Lucas, que me receberam tão bem no período que passei na USP.

Obrigado também ao Instituto Serrapilheira e à toda a equipe do Programa de Ecologia Quantitativa. Agradeço ainda às professoras e aos professores do curso, e aos colegas pela amizade, companhia e diversão nesses dois intensos meses no Rio de Janeiro.

Quero agradecer também a algumas pessoas que estiveram presentes no dia-a-dia ao longo do mestrado. Muito obrigado Dona Marisa, minha companheira de regar as plantas e organizar a cozinha desde que entrei no LEFF. Obrigado Motorista do Barra/UFRGS das 22:15, por nunca ter me esquecido no campus e pelas conversas e aventuras envolvendo postes caídos e ônibus estragados. Obrigado Guardas dos prédios da Ecologia, pela companhia e a ajuda com as portas do prédio e do banheiro. Também agradeço ao Volmar, pelo seu cuidado com o patrimônio da Ecologia e à secretaria do PPG, especialmente à Paula, pela paciência com minhas matrículas especiais.

Um agradecimento mais que especial aos meus colegas e amigos de laboratório. Obrigado por deixarem o LEFF mais aconchegante, vivo e divertido. Muito obrigado Bianca, Viviana, Dani, Renata, Gabriel Gonçalves, Cristian, Gabriel Dubal e também Arthur e Aline. Espero que vocês me perdoem por todas as vezes que apaguei o quadro para rabiscar alguma ideia.

A todos os amigos dos outros labs e da Ecologia de Campo: muito, muito obrigado pelos almoços, cafés, festas e a companhia que deixaram a jornada do mestrado tão mais leve, rica e divertida. São definitivamente muitas pessoas para agradecer, mas em especial quero agradecer ao Orlando e a Gabi Junqueira, que me ouviram falar bastante desse trabalho, e também a Vick, Jean, Douglas, Leo, Natália, Monik, Carol, Henrique, Kaluan, Lívia, Juliene, Patrícia, Ana, Wellen, José, Kauane, Joice, Davi, Daniele, Paula e Camila. Quero agradecer também aos meus amigos da casa da Traudi, especialmente ao Marco e ao Emanuel. Agradeço também à família do Marco, especialmente a dona Brunilde e o seu Lúcio, por acolherem a mim e minha esposa durante as enchentes. Certamente há pessoas além das mencionadas aqui que eu gostaria de agradecer. De forma geral, agradeço a todas e todos que de alguma forma contribuíram na jornada desse mestrado.

Agradeço ainda à Escola Pública brasileira, que me formou da pré-escola até a graduação. Especialmente, agradeço ao IFFar e à UFRGS pelas muitas portas que abriram na minha jornada. Também agradeço ao CNPq pela bolsa de mestrado, ao PPG Ecologia e à UFRGS pelo apoio financeiro e estrutural a esse trabalho.

Não tenho palavras para agradecer à minha família. Agradeço a minha irmã Joice, meu cunhado Laerte e meus sobrinhos, Maria e Piero, pelo apoio e o carinho. Agradeço de forma especial e com muita ênfase ao meu irmão Tarlei e aos meus pais, Dionisio e Noili: esse mestrado, assim como toda minha trajetória, só foi possível graças a vocês, muito obrigado por todo o amor e o apoio que sempre me deram. Também agradeço de forma especial à família da minha esposa, que me acolheu e me apoiou em tantos momentos ao longo do mestrado.

Por último, agradeço à Fernanda, inicialmente minha namorada e agora esposa. O amor, apoio, carinho, companheirismo e paciência que você teve comigo ao longo desse período foram imprescindíveis para que eu pudesse realizar esse trabalho. Além disso, seu senso crítico e sua disposição para me ouvir falar tanto de Ecologia e de Evolução contribuíram de modo fundamental para esse trabalho.

*E tu, para que queres um barco, pode-se saber, [...]
Para ir à procura da ilha desconhecida, respondeu o homem, [...]
Disparate, já não há ilhas desconhecidas,
Quem foi que te disse, rei, Que já não há ilhas desconhecidas,
Estão todas nos mapas,
Nos mapas só estão as ilhas conhecidas,
E que ilha desconhecida é essa de que queres ir à procura,
Se eu to pudesse dizer, então não seria desconhecida [...].*
(O conto da ilha desconhecida, SARAGAMAGO, 1998)

Resumo

Os processos macroevolutivos emergem da interação entre processos ecológicos e microevolutivos atuando sobre comunidades e metacomunidades em tempo profundo. Reciprocamente, os processos de macroescala também afetam os de microescala, condicionando as interações ecológicas e a evolução nas comunidades. Apesar de haver considerável entendimento da ação individual dos processos em micro e em macroescalas, a compreensão de como eles interagem no espaço e no tempo para dar origem aos padrões macroevolutivos ainda é limitada. A heterogeneidade ambiental, no espaço e no tempo, é um fator que pode afetar a dinâmica eco-evolutiva das espécies. Ela promove a coexistência de espécies, pode gerar isolamento populacional e influenciar a evolução fenotípica das espécies. Entretanto, o efeito da heterogeneidade ambiental sobre os padrões macroevolutivos ainda é pouco compreendido. Nesse trabalho, investiguei como a heterogeneidade espacial de uma condição ambiental contínua influencia a emergência de padrões macroevolutivos. Para isso, implementei um modelo eco-evolutivo de espécies competidoras por meio do pacote *gen3sis* do software R. Com este modelo, simulei a evolução de linhagens hipotéticas sobre paisagens com diferentes graus de heterogeneidade espacial, caracterizada em termos da autocorrelação e da variação espacial da condição ambiental. Os resultados mostram um efeito não linear positivo da heterogeneidade sobre a riqueza originada pela diversificação. As taxas médias absolutas de especiação e extinção aumentaram com a heterogeneidade da paisagem, assim como a taxa de especiação por linhagem. A taxa de extinção por linhagem, porém, diminuiu com a heterogeneidade. Além disso, a magnitude das taxas de extinção foi muito inferior à das taxas de especiação, indicando que a especiação é o processo determinante da diversificação líquida. A análise temporal da diversificação revelou um padrão compatível com processos de diversificação dependente de diversidade observados em filogenias moleculares. Essa análise mostrou, ainda, que a heterogeneidade da paisagem influencia o tempo de início da diversificação, bem como as curvas das taxas de especiação e extinção ao longo do tempo. Assim, foi possível concluir que a heterogeneidade espacial das paisagens é um fator determinante para os processos macroevolutivos que conduzem à diversificação das linhagens, desencadeando especiações e estabelecendo limites para a diversificação.

Palavras-chaves: heterogeneidade espacial; simulações eco-evolutivas; pacote *gen3sis*; especiação; extinção.

Abstract

Macroevolutionary processes arise from the interaction between ecological and microevolutionary processes acting over communities and metacommunities through deep time. Conversely, the macroscale processes also affect the microscale, constraining the ecological interactions and the evolution in the communities. Despite the substantial understanding of the processes in both micro and macro scales, the knowledge about how their interplay in space and time gives rise to macroevolutionary patterns is still limited. The environmental heterogeneity in both space and time is a factor that can affect the eco-evolutionary dynamics of the species. It promotes species coexistence, it may generate population isolation, and it may also influence species phenotypic evolution. However, the effects of environmental heterogeneity over macroevolutionary patterns are still little understood. In this work, I investigated how the spatial heterogeneity associated with a continuous environmental condition influences the formation of macroevolutionary patterns. For this, I implemented an eco-evolutionary model of species competition using the `gen3sis` R package. With this model, I simulated the evolution of hypothetical lineages over landscapes with several degrees of spatial heterogeneity, which was characterized by spatial autocorrelation and variation of the environmental condition. The results showed a positive and non-linear effect of heterogeneity over the species richness originated by diversification. The absolute mean rates of speciation and extinction increased with the heterogeneity, as well as the per lineage speciation rate. The per lineage extinction rate, however, decreased with the heterogeneity. Moreover, the magnitudes of extinction rates were much lower than the magnitudes of speciation rates, implying that speciation was the determinant process for net diversification. The temporal analysis of diversification unveiled a pattern that is consistent with processes of diversity-dependent diversification observed in molecular phylogenies. This analysis also showed that the heterogeneity of the landscape drives the start time of diversification, as well as the temporal patterns of speciation and extinction rates. Thus, I was able to conclude that spatial heterogeneity of the landscapes is a determinant factor for the macroevolutionary processes that drive the lineages diversification, triggering speciations and setting limits to diversification.

Key-words: spatial heterogeneity; eco-evolutionary simulations; `gen3sis` package; speciation; extinction.

Listas de ilustrações

Figura 1 – Relação entre variação espacial, autocorrelação espacial e heterogeneidade	34
Figura 2 – Esquema ilustrando o ciclo de processos simulados através dos módulos do pacote <code>gen3sis</code>	38
Figura 3 – Taxa de crescimento intrínseco a e capacidade de suporte b para diferentes valores de adequação ambiental	42
Figura 4 – Decaimento da probabilidade de dispersão com a distância entre sítios para um <i>kernel</i> N-exponencial	47
Figura 5 – Tempo médio de espera até a especiação para diferentes distâncias entre sítios no modelo de duas populações	60
Figura 6 – Desenho amostral das paisagens: variação e autocorrelação espacial	62
Figura 7 – Riqueza total na paisagem após 10 000 gerações	71
Figura 8 – Distribuição dos estados de diversificação nas diferentes classes de heterogeneidade	72
Figura 9 – Fração máxima de sítios potencialmente habitáveis para uma espécie	74
Figura 10 – Riqueza total na paisagem após 10 000 gerações para as diferentes classes de heterogeneidade	76
Figura 11 – Taxa média de especiação e média da taxa de especiação por linhagem para os diferentes perfis de heterogeneidade	82
Figura 12 – Taxa média de extinção e média da taxa de extinção por linhagem para os diferentes perfis de heterogeneidade	87
Figura 13 – Média da taxa de diversificação $\langle \hat{r} \rangle$ para os diferentes perfis de heterogeneidade	92
Figura 14 – Linhagens através do tempo (LTT) alinhadas na escala de tempo de diversificação efetivo	98
Figura 15 – Linhagens através do tempo (LTT) alinhadas na escala de tempo de diversificação efetivo	99
Figura 16 – Distribuição do tempo de diversificação média para os diferentes perfis de heterogeneidade	101
Figura 17 – Taxas de especiação absoluta ao longo do tempo efetivo de diversificação para as diferentes classes de heterogeneidade	102
Figura 18 – Taxas de especiação por linhagem ao longo do tempo de diversificação efetivo para as diferentes classes de heterogeneidade	104
Figura 19 – Taxas de extinção absoluta ao longo do tempo efetivo de diversificação para as diferentes classes de heterogeneidade	106
Figura 20 – Taxas de extinção por linhagem ao longo do tempo efetivo de diversificação para os diferentes perfis de heterogeneidade	107

Figura 21 – Esquema com os principais resultados do trabalho	112
Figura 22 – Taxas de especiação por linhagem ao longo do tempo de diversificação efetivo para as diferentes classes de heterogeneidade	126
Figura 23 – Taxas de extinção por linhagem ao longo do tempo efetivo de diversificação para os diferentes perfis de heterogeneidade	127

Listas de tabelas

Tabela 1 – Parâmetros do modelo eco-evolutivo e os respectivos valores utilizados nas simulações.	64
Tabela 2 – Classificação dos resultados das simulações de acordo com o grau de diversificação ao final da simulação	69
Tabela 3 – Resultados da classificação dos estados de diversificação	73
Tabela 4 – Resultados da seleção de modelos para a riqueza final	75
Tabela 5 – Resultados do modelo 1 da riqueza final nas simulações	77
Tabela 6 – Resultados da seleção de modelos para as taxas de especiação absoluta e por linhagem	81
Tabela 7 – Resultados do modelo 1 da taxa média de especiação absoluta.	83
Tabela 8 – Resultados do modelo 2 da taxa média de especiação absoluta.	83
Tabela 9 – Resultados do modelo 1 da média da taxa de especiação por linhagem	86
Tabela 10 – Análise multimodelos para as médias das taxas de especiação e extinção	86
Tabela 11 – Resultados da seleção de modelos para as médias das taxas de extinção absoluta e por linhagem	87
Tabela 12 – Resultados do modelo 1 para o número total de extinções.	88
Tabela 13 – Resultados do modelo 2 do número total de extinções	89
Tabela 14 – Resultados do modelo 1 para o logaritmo da média da taxa de extinção por linhagem.	90
Tabela 15 – Resultados da seleção de modelos para a média da taxa de diversificação ao longo do tempo	92
Tabela 16 – Resultados do modelo 1 da média da taxa de diversificação ao longo do tempo.	93
Tabela 17 – Resultados do modelo 2 da média da taxa de diversificação ao longo do tempo.	94
Tabela 18 – Tabela descrevendo as funções do pacote <code>gen3sis</code>	132

Lista de abreviaturas e siglas

BM	<i>Brownian Motion</i> , do inglês “Movimento Browniano”;
OU	Ornstein-Uhlenbeck;
OU-M	Ornstein-Uhlenbeck com múltiplos ótimos;
EB	<i>Early Burst</i> , do inglês “Explosão Precoce”;
DDD	<i>Diversity Dependent Diversification</i> , do inglês “Diversificação Dependente de Diversidade”;
MEEM	<i>Mechanistic Eco-Evolutionary Models</i> , do inglês “Modelos Eco-Evolutivos Mecanísticos”;
IBM	<i>Individual Based Model</i> , do inglês “Modelo Baseado em Indivíduos”;
PBM	<i>Population Based Model</i> , do inglês “Modelo Baseado em Populações”;
LDI	<i>Long Distance Dispersal</i> , do inglês “Dispersão de Longa Distância”;
LT	<i>Lineages Through Time</i> , do inglês “Linhagens Através do Tempo”;
ND	Não Diversificação;
Div	Diversificação;
DI	Diversificação Incompleta;
DC	Diversificação Completa;

List of symbols

λ	Taxa de especiação por linhagem;
Λ	Número absoluto de especiações acumuladas;
μ	Taxa de extinção por linhagem;
E	Número absoluto de extinções acumuladas;
S_γ	Riqueza de espécies na paisagem;
\hat{r}	Taxa de diversificação líquida por linhagem;
t_f	Tempo final das simulações;
Ξ	Autocorrelação espacial;
L	Variação espacial;
L_c	Variação espacial, mas centralizada;
σ_w	Tolerância ambiental (parâmetro);
σ_y	Desvio padrão dos atributos em uma população;
σ_{tol}	Tolerância ambiental (total) das espécies;
$t_{div/2}$	Tempo de diversificação média;
N	Tamanho populacional;
y	Ótimo ambiental da espécie;
z	Atributo neutro da espécie;
h^2	Herdabilidade dos atributos;
θ	Valor da condição ambiental;
W	Aptidão absoluta (<i>fitness</i>);
dW	Processo estocástico de Wiener;
r_{max}	Taxa de crescimento intrínseco máximo;
K_r	Capacidade de suporte por recrutamento;

α	Taxa de competição interespecífica;
N_{min}	Abundância mínima da população;
$N_{initial}$	Abundância inicial após a colonização;
D	Taxa de dispersão;
T_{sp}	Tempo mínimo para a especiação;
γ	Fator de incremento da divergência;
d_{sp}	Distância mínima para a ocorrência de especiação.
t_{sp}	Tempo de espera até a especiação.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	17
	Introdução	17
1.1	Apresentação	17
1.2	Processos ecológicos em comunidades	17
1.3	Processos evolutivos	20
1.3.1	Processos microevolutivos	21
1.3.2	Processos e padrões macroevolutivos	22
1.3.2.1	Modelos de especiação, extinção e diversificação	25
1.3.2.2	Modelos de evolução fenotípica	28
1.4	Conectando Ecologia e Evolução através de Modelos Mecanísticos	30
1.5	Hipóteses	33
2	CONSTRUINDO UM MODELO ECO-EVOLUTIVO	37
2.1	Introdução	37
2.2	O pacote gen3sis	37
2.3	Ecologia	38
2.4	Dispersão	43
2.5	Evolução de atributos	47
2.5.1	Agrupamento (<i>clustering</i>) de populações e matriz de divergência	51
2.5.2	Seleção local e seleção regional	53
2.6	Especiação	54
2.6.1	Relações entre dispersão e especiação	55
3	METODOLOGIA DAS SIMULAÇÕES	61
3.1	Desenho amostral	61
3.2	Modelagem e parametrização das simulações	62
3.3	Construção e caracterização das paisagens	64
3.4	Implementação do modelo eco-evolutivo	66
3.5	Execução das simulações	68
3.6	Análise de dados	68
4	DIVERSIFICAÇÃO, NÃO DIVERSIFICAÇÃO E RIQUEZA DE ESPECIES	69
4.1	Análise	69
4.1.1	Classificação dos <i>estados de diversificação</i>	69

4.1.2	Efeito da heterogeneidade espacial sobre a riqueza final de espécies	70
4.2	Resultados e Discussão	70
4.2.1	Classificação dos estados de diversificação	70
4.2.2	Riqueza final de espécies	75
5	TAXAS MÉDIAS DE ESPECIAÇÃO, EXTINÇÃO E DIVERSIFICAÇÃO	78
5.1	Análise	78
5.1.1	Cálculo das taxas de especiação e extinção ao longo do tempo	78
5.1.2	Cálculo das taxas médias de especiação e extinção	78
5.1.3	Ajustes e seleção de modelos	79
5.1.4	Cálculo da taxa de diversificação por linhagem, ajuste e seleção de modelos	80
5.2	Resultados e Discussão	81
5.2.1	Taxas médias de especiação absoluta e por linhagem	81
5.2.2	Taxas médias de extinção absoluta e por linhagem	86
5.2.3	Média da taxa de diversificação	91
6	ESPECIAÇÃO E EXTINÇÃO ATRAVÉS DO TEMPO	95
6.1	Análise	95
6.1.1	Ajuste do número de linhagens através do tempo e tempo de diversificação efetivo	95
6.1.2	Taxas de especiação e extinção ao longo do tempo efetivo de diversificação	95
6.2	Resultados e Discussão	96
6.2.1	Linhagens através do tempo (LTT) e tempo efetivo de diversificação	96
6.2.2	Taxas de especiação ao longo do tempo	102
6.2.3	Taxas de extinção ao longo do tempo	105
7	CONCLUSÃO	110
Conclusão	110
Referências	116
APÊNDICES		125
APÊNDICE A – TAXAS DE EXTINÇÃO E ESPECIAÇÃO EM ESCALA LOGARÍTMICA	126
APÊNDICE B – EFEITOS DA HETEROGENEIDADE AMBIENTAL SOBRE A EVOLUÇÃO DE ATRIBUTOS	128

ANEXO A – TABELA RESUMO DOS MÓDULOS DO PACOTE GENESIS132

1 Introdução

1.1 Apresentação

Nesta dissertação de mestrado, investiguei a relação entre a heterogeneidade espacial das condições ambientais e o processo de diversificação. O texto da dissertação foi dividido em sete capítulos e não segue o formato de um artigo. Neste primeiro capítulo, a Introdução, é feita uma revisão da literatura de interesse, são apresentados o problema e as perguntas que se almeja responder e são discutidas as principais hipóteses.

No capítulo 2, utilizei o ferramental teórico e matemático da Ecologia e da Genética Quantitativa para construir o modelo através do qual o processo eco-evolutivo foi representado. Esse capítulo incorpora muitos elementos de revisão da literatura, mas também representa parte fundamental da metodologia do trabalho: a descrição detalhada do modelo utilizado nas simulações com as quais busquei responder as perguntas apresentadas na Introdução. No capítulo 3, dá-se sequência à descrição da metodologia do trabalho, apresentando de forma mais direta o desenho amostral, a construção e caracterização das paisagens e os procedimentos para realização das simulações.

Nos capítulos 4, 5 e 6 são apresentadas e discutidas as análises realizadas e os resultados obtidos. Por fim, na Conclusão (capítulo 7), retoma-se a proposta do trabalho, menciono os principais desafios enfrentados, e sintetizo os principais resultados juntamente com as respostas obtidas para as perguntas apresentadas na Introdução.

1.2 Processos ecológicos em comunidades

Em sentido amplo, uma comunidade ecológica consiste em um conjunto de indivíduos, de diferentes espécies, que compartilham um mesmo local ao mesmo tempo. Comunidades onde os indivíduos pertencem ao mesmo nível trófico, categoria taxonômica, ou fazem uso de um recurso comum (guilda) são chamadas de assembleias de espécies ou comunidades horizontais (VELLEND, 2016).

Conforme Vellend (2016), o estado de uma comunidade ecológica pode ser descrito por um vetor de abundância das espécies. No caso de um conjunto de várias comunidades (associadas a diferentes sítios), a estrutura dos dados toma forma de uma matriz de sítios por espécies. Esses dados são a base de diferentes descritores das comunidades ecológicas, tais como riqueza, composição e distribuição de abundância das espécies (propriedades de primeira ordem) e também da diversidade e composição de atributos (propriedades de segunda ordem).

Diferentes processos podem influenciar a estrutura e a dinâmica das comunidades ecológicas, o que se reflete nos padrões de abundância das espécies. De acordo com Vellend (2016), os processos que afetam as comunidades podem ser classificados em processos de baixo e de alto nível.

Os processos de baixo nível nas comunidades representam as **causas** da dinâmica ecológica em sistemas e em escalas específicos. Alguns exemplos de processos de baixo nível são predação, competição, facilitação e filtro ambiental. Esses processos afetam a dinâmica das comunidades por meio dos processos populacionais: natalidade, mortalidade e migração de indivíduos, que determinam a abundância das espécies¹. Contudo, há uma enorme variedade de processos de baixo nível que, em diferentes sistemas e escalas de tempo e espaço, representam causas da dinâmica ecológica das espécies².

Os processos de alto nível, por sua vez, representam um conjunto reduzido de processos que descrevem as **consequências** da ação dos diversos processos de baixo nível sobre a dinâmica ecológica, independentemente da natureza destes ou dos mecanismos pelos quais eles operam.

A teoria das comunidades ecológicas, proposta por Vellend (2016), trata dos principais processos que estruturam as comunidades ecológicas horizontais. Construindo um paralelo com os processos da genética de populações, os quais são apresentados na seção 1.3.1, a teoria de Vellend propõe que os processos operantes na escala de uma comunidade, pelos mais variados mecanismos, podem ser resumidos a quatro **processos de alto nível**: deriva ecológica, seleção, dispersão e especiação.

A **deriva ecológica** consiste na flutuação estocástica³ das abundâncias das espécies na comunidade (VELLEND, 2016), podendo ser de natureza demográfica (inerente aos processos de nascimento e morte de indivíduos) ou ambiental (relacionada às flutuações nas condições ambientais, bióticas e abióticas). A deriva ecológica é um processo de grande importância para a ocorrência de extinções (locais e regionais) e, portanto, para a perda de espécies, sendo seu efeito proporcionalmente mais relevante para espécies com menor abundância.

A **seleção** consiste no desfavorecimento, redução da abundância, de indivíduos e espécies que apresentam menor aptidão (*fitness*) sob as condições de ambiente, disponibili-

¹ A competição, por exemplo, pode ocorrer pela redução da abundância de um recurso em consequência do seu consumo por indivíduos de outra espécie (exploração), ou pela disputa direta desse recurso entre os indivíduos (interferência). Se esse recurso for alimento, com menos acesso a ele, os indivíduos têm, por exemplo, menor aporte energético para ser investido na geração de prole, o que pode reduzir sua taxa de natalidade.

² Na tabela 5.1 do livro *The theory of ecological communities* (2016) (VELLEND, 2016, p. 63), é apresentado um sumário de teorias e modelos da Ecologia de Comunidades, junto de uma descrição dos processos de baixo nível envolvidos (causas) e dos correspondentes processos e alto nível (consequências). Como exemplos, podemos mencionar a dinâmica de manchas, os efeitos de estocagem e a seleção de espécies (*species sorting*).

³ Seja verdadeiramente estocástica ou pela ação conjunta de muitos fatores complexos.

dade de recursos ou interações biológicas presentes em determinado local, e, por outro lado, no favorecimento relativo, aumento de abundância, de indivíduos e espécies com maior aptidão sob tais condições (VELLEND, 2016). A seleção é um processo atuante tanto a nível de espécie, limitando a ocorrência de certas espécies em locais onde condições e recursos essenciais a elas não estejam disponíveis, como a nível intraespecífico, selecionando os indivíduos de cada espécie mais aptos a viverem sob as condições da comunidade em questão.

A **dispersão**, por sua vez, consiste no processo de mobilidade dos organismos dentro da sua comunidade ou entre comunidades, seja por meio do movimento dos próprios indivíduos ou por meio da emissão de propágulos (VELLEND, 2016). A dispersão é um mecanismo fundamental para viabilizar o fluxo gênico entre as populações ocorrendo em diferentes comunidades e também permite o compartilhamento e a troca de espécies entre as assembleias, produzindo dinâmicas de migração, colonização e recolonização (pós extinção local).

Por último, a **especiação** representa o processo de cladogênese, com o surgimento de uma ou mais novas espécies, que será detalhado na seção sec:macroevolution. A especiação é um processo chave para a manutenção da diversidade de espécies, especialmente nas escalas regional e global (VELLEND, 2016). O surgimento de novas espécies contrapõem a perda de diversidade decorrente dos processos de seleção e deriva ecológica. Os mecanismos pelos quais novas espécies surgem são variados. Em síntese, efeitos acumulados dos processos microevolutivos, discutidos em maior detalhe nas sessões seguintes, podem levar duas populações a divergirem, culminando em seu isolamento reprodutivo.

É na escala das comunidades ecológicas que ocorre a interação entre os organismos de diferentes espécies e o ambiente. Também é nessa escala que as espécies coexistem e, portanto, seus indivíduos interagem (MCPEEK, 2017). Assim, a natureza da dinâmica ecológica dentro de cada comunidade é intrinsecamente relacionada às interações bióticas e abióticas ocorrendo nela (MORIN, 2011).

Em comunidades horizontais, as interações (bióticas) *diretas* entre indivíduos⁴ se dão principalmente por facilitação (positiva) e competição (negativa). Além dessas, algumas interações *indiretas* podem emergir a partir de interações com outros níveis tróficos (VELLEND, 2016). A competição, em particular, têm potencial para excluir espécies de uma comunidade (GAUSE, 1934; MACARTHUR e LEVINS, 1967), reduzindo sua diversidade. Vários mecanismos têm sido propostos para explicar como espécies podem coexistir sob efeito de competição (CHESSON, 2000, 2018), com especial destaque para a importância das heterogeneidades espacial e temporal.

Uma das principais fontes de heterogeneidade é a variabilidade das condições

⁴ Interações tanto inter como intraespecíficas.

ambientais, tanto no espaço como no tempo (CHESSON, 2000; GRAVEL *et al.*, 2006). Tais condições, como temperatura, umidade, pH, etc., podem ser dimensões de nicho fundamentais para as espécies (GRAVEL *et al.*, 2006). Por meio da seleção, as condições ambientais podem determinar quais espécies são capazes de persistir em uma comunidade e, dentre estas, quais têm maior chance de sucesso, podendo se tornarem mais abundantes (GRAVEL *et al.*, 2006). A heterogeneidade ambiental, através das diferenças nas condições ambientais em localidades próximas, também pode induzir a adaptação fenotípica nas populações locais, contribuindo para o processo de evolução de atributos das espécies, para a diferenciação e o isolamento reprodutivo, influindo diretamente no processo de especiação (TURELLI, BARTON e COYNE, 2001; GAVRILETS e LOSOS, 2009).

As comunidades, de fato, raramente são isoladas umas das outras e a conexão entre elas se dá por meio da dispersão de indivíduos (LEIBOLD *et al.*, 2004). Um conjunto de comunidades conectadas por dispersão é chamado de **metacomunidade**. Embora a dinâmica de uma metacomunidade possa ser bastante complexa, ela envolve essencialmente os mesmos quatro processos de alto nível que ocorrem nas comunidades: deriva ecológica, seleção, dispersão e especiação (VELLEND, 2016).

As dinâmicas ecológicas, tanto das comunidades como da metacomunidade em si, são fortemente afetadas pela variabilidade (heterogeneidade) espacial e temporal (VELLEND, 2016) do ambiente. Particularmente, a heterogeneidade do ambiente desempenha um papel importante para a manutenção da diversidade tanto nas assembleias como no *pool* regional de espécies (CHESSON, 2000; LEIBOLD *et al.*, 2004).

1.3 Processos evolutivos

A evolução é um elemento fundamental dentro dos sistemas biológicos e age através de diferentes processos. A síntese evolutiva moderna estabeleceu as populações como as unidades evolutivas básicas e quatro processos fundamentais (de alto nível) que agem na microescala determinando a evolução das populações das espécies (TEMPLETON, 2021). A teoria prevê que a ação desses processos, entremeados à complexidade da dinâmica ecológica no tempo e no espaço, são responsáveis por promover a evolução das espécies, incluindo as mudanças genotípicas e fenotípicas (WALSH e LYNCH, 2018) e o processo de especiação (GAVRILETS, 2003).

Entretanto, quando estudamos a evolução sobre escalas de tempo muito grandes, escalas de tempo paleontológicas, o papel dos processos de microescala perde nitidez e torna-se conveniente entender a evolução da diversidade biológica a partir de processos macroevolutivos (RICKLEFS, 1987; WIENS, 2004). A natureza fundamental dos processos microevolutivos como motores da evolução é incontestável. Todavia, a compatibilidade entre

a ação dos processos microevolutivos com padrões macroevolutivos, como os padrões observados no registro fóssil, ainda não é bem compreendida (MARQUES, MEIER e SEEHAUSEN, 2019; ROLLAND *et al.*, 2023). Essas lacunas na compreensão da história evolutiva têm sido fonte de debates sobre a existência de processos intrinsecamente macroevolutivos, tais como a seleção de espécies (JABLONSKI, 2008), e também sobre o modo de ação dos processos evolutivos, como as tensões entre gradualismo e equilíbrio pontuado (COYNE e ORR, 2004; HUNT, 2013). Nas sessões seguintes, apresento em maior profundidade os processos agindo nas escadas micro e macroevolutivas.

1.3.1 Processos microevolutivos

A microevolução é a escala evolutiva onde acontecem mudanças dentro das espécies: mudanças genéticas e fenotípicas a nível das populações. De acordo com a genética de populações, os processos atuantes nessa escala podem ser resumidos a quatro: deriva genética, seleção, mutação e fluxo gênico (NOWAK, 2006; FUTUYMA e KIRKPATRICK, 2017; TEMPLETON, 2021).

A **deriva genética** consiste nas flutuações das frequências alélicas em uma população em razão de fatores aleatórios e do tamanho finito da população. A **seleção** é a tendência de favorecimento de certos genes, aumento da sua frequência alélica, em virtude de eles conferirem características que favorecem a aptidão dos indivíduos, junto com a tendência de redução da frequência de genes que conferem características prejudiciais à aptidão dos indivíduos.

Por sua vez, a **mutação** é o processo de surgimento de novos alelos, em geral a partir de mudanças nos alelos originais; os novos alelos **podem** se traduzir em novos fenótipos. Com grande frequência as mutações têm caráter deletério, mas aquelas que conferem características vantajosas podem ter boas chances de se estabelecerem de forma estável na população. Por último, o **fluxo gênico** é o intercâmbio de genes dentro de uma mesma população e também entre populações⁵ e tem um importante papel na homogeneização da composição e na equalização das frequências alélicas.

Os mecanismos e processos de baixo nível através dos quais esses quatro processos de alto nível operam são muito variados. Eles dependem do organismo, do seu modo reprodutivo, seu modo de vida, ecologia e até mesmo de fatores abióticos (TEMPLETON, 2021). Dessa maneira, o aprofundamento desses processos de baixo nível foge ao interesse desse trabalho.

Os dois primeiros processos citados atuam removendo diversidade genética por meio da perda de alelos (NOWAK, 2006). A deriva através da perda de alelos decorrente de flutuações aleatórias, a seleção por meio da eliminação contínua dos alelos que conferem

⁵ O fluxo gênico pode ocorrer pela migração de indivíduos, pela reprodução sexuada, e, em certos organismos (como bactérias), também por transferência horizontal de genes.

menor aptidão aos indivíduos. A mutação, por sua vez, gera novos alelos, aumentando a diversidade genética e, junto com a recombinação genética, gera novos fenótipos (WALSH e LYNCH, 2018; TEMPLETON, 2021). Essa variabilidade genotípica e fenotípica é a base de ação da deriva e da seleção. O fluxo gênico mantém a coesão dos padrões genotípicos e fenotípicos dentro de uma população⁶. Assim, ele previne o acúmulo de diferenças e incompatibilidades que podem causar isolamento reprodutivo (TURELLI, BARTON e COYNE, 2001; COYNE e ORR, 2004).

Esses quatro processos moldam as frequências alélicas das populações biológicas, as quais determinam os genótipos dos indivíduos que as compõem. Genótipo e ambiente determinam o fenótipo. Este, por sua vez, influencia diretamente o *fitness* dos indivíduos, que resulta da sua interação com outros indivíduos da mesma espécie, de outras espécies e com o ambiente. As mudanças fenotípicas na população surgem a partir das mudanças nas frequências alélicas decorrentes das pressões bióticas e abióticas (seleção), do acaso (deriva), ou ainda do surgimento de novos alelos (mutações) (LANDE, 1976; WALSH e LYNCH, 2018; HARMON, 2019).

As especiações decorrem do acúmulo de divergência genética entre populações, que gera incompatibilidades pré e/ou pós-zigóticas entre populações⁷. Tais incompatibilidades inviabilizam o fluxo gênico entre as populações, gerando isolamento reprodutivo (COYNE e ORR, 2004). O principal mecanismo responsável pelo acúmulo de divergência genética é a interrupção do fluxo gênico, frequentemente por ação de barreiras geográficas. A partir dessa interrupção inicial, mutação, deriva e seleção tendem, em diferentes medidas, a promover diferenças entre as populações isoladas. Contudo, a interrupção prévia do fluxo gênico por algum tipo de isolamento geográfico ou de habitat não é um pré-requisito para a especiação (GAVRIELTS, 2003). Outros mecanismos, como a presença de seleção disruptiva, podem promover o acúmulo de divergência e gerar isolamento reprodutivo. Alguns tipos de mutação, como rearranjos cromossômicos e poliploidia, relativamente comuns em plantas, podem ocasionar especiações em uma única geração (TURELLI, BARTON e COYNE, 2001).

1.3.2 Processos e padrões macroevolutivos

A macroevolução é a escala evolutiva atuante em níveis taxonômicos maiores, ou seja, a macroevolução trata de como evoluem as diferenças, e semelhanças, entre espécies e níveis taxonómicos superiores (HARMON, 2019; TEMPLETON, 2021). Dessa maneira, o

⁶ Isolamento geográfico, comportamental e também seleção sexual são alguns mecanismos que podem agir limitando o fluxo gênico entre populações, permitindo o acúmulo de incompatibilidades decorrentes da ação dos outros processos.

⁷ Em Biologia existem diversos conceitos de espécies (DE QUEIROZ, 2007), o uso de cada um frequentemente depende da área e da conveniência que cada definição proporciona. Esse trabalho pressupõe uma definição baseada no conceito biológico de espécie, em que uma espécie representa um conjunto de indivíduos que geram uma prole viável e fértil ao reproduzirem entre si.

objeto focal da macroevolução não são as populações, mas as espécies, e também estruturas taxonômicas maiores. Dessa forma, é conveniente reconhecer alguns processos ocorrendo na escala macroevolutiva (e também macroecológica): são eles especiação, extinção e dispersão de linhagens (RICKLEFS, 1987; WIENS, 2004).

Embora haja certo consenso de que a macroevolução possa ser entendida a partir da ação prolongada dos processos microevolutivos fundamentais, estes processos podem se manifestar de forma emergente e diferenciada acima da escala de espécies (ROLLAND *et al.*, 2023). Por exemplo, a dispersão de linhagens, embora coloque em contato as espécies em contato ecológico e geográfico, não gera fluxo gênico entre elas, salvo exceções em que possa ocorrer hibridismo. Além disso, alguns processos, tais como a seleção a nível de espécies (JABLONSKI, 2008), são propostos para atuarem exclusivamente na escala macroevolutiva.

Do ponto de vista da macroevolução, a evolução pode ocorrer de duas formas: anagênese e cladogênese (COYNE e ORR, 2004). Anagênese é o processo contínuo de mudança fenotípica (e genotípica) dentro de uma linhagem. Já a cladogênese é o processo de divisão de uma linhagem em um ou mais ramos independentes, cujas relações evolutivas podem ser representadas por uma filogenia. Neste trabalho, o termo especiação será usado como sinônimo de cladogênese e a anagênese será tratada de forma independente, através da evolução de atributos.

A **especiação** é o processo fundador da escala macroevolutiva (TEMPLETON, 2021). Nela, duas (ou mais) populações de uma mesma espécie divergem pela ação dos processos microevolutivos a ponto de atingirem um estado de isolamento reprodutivo, tornando-se espécies distintas: entidades que evoluem através de *pools* genéticos independentes.

O processo de especiação pode acontecer de diferentes **modos**, os quais estão relacionados à geografia (configuração espacial) em que o processo ocorre (GAVRILETS, 2003).

A **especiação alopátrica** ocorre quando as populações que divergem estão geographicamente isoladas (GAVRILETS, 2003). Esse modo ainda pode ser separado em outros dois tipos (COYNE e ORR, 2004). O primeiro deles, a especiação por vicariância, ocorre quando a distribuição geográfica de uma espécie é fragmentada pelo surgimento de uma barreira. O segundo, a especiação peripátrica, ocorre quando uma pequena população, geralmente na borda da distribuição da espécie, consegue dispersar através de uma barreira pré-existente e colonizar uma nova área. Nessas situações a população, ainda incipiente, pode experimentar fortes pressões seletivas devido a diferenças ambientais e também efeitos da deriva genética, produzindo altas taxas de mudança genética e morfológica, o que pode encurtar o tempo de formação da nova espécie. Em qualquer desses casos, a ausência de fluxo gênico entre as populações acarreta o acúmulo de incompatibilidades

de Dobzhansky-Muller⁸ por meio da ação independente de mutações, deriva e seleção em cada população.

A **especiação parapátrica** ocorre quando as populações estão em áreas geograficamente distintas, mas não em isolamento, havendo possibilidade de fluxo gênico entre elas (GAVRILETS, 2003). Diferenças ambientais podem favorecer esse processo, produzindo pressões seletivas diferenciadas sobre as populações, que podem reduzir a aptidão de indivíduos híbridos. A pressão seletiva pode fomentar mecanismos de seleção sexual e acelerar o acúmulo de incompatibilidades genéticas que geram isolamento reprodutivo entre as populações divergentes. Contudo, mesmo na ausência de seleção, deriva e acúmulo de mutações podem conduzir ao acúmulo de incompatibilidades, gerando isolamento reprodutivo (DE AGUIAR *et al.*, 2009).

Por fim, a **especiação simpátrica** ocorre quando as populações divergentes não estão separadas geograficamente (GAVRILETS, 2003). Nesse caso, a divergência pode emergir a partir de uma força de seleção divergente, que favorece o surgimento de mecanismos de isolamento reprodutivo pré-zigóticos, tais como seleção sexual, comportamento, seleção de habitat, e pós-zigóticos, pelo acúmulo de incompatibilidades genéticas entre as populações (COYNE e ORR, 2004). Em particular, alguns tipos de mutações, como rearranjos cromossômicos e cruzamento entre populações poliploides, podem resultar em isolamento reprodutivo em uma única geração (TURELLI, BARTON e COYNE, 2001).

O processo de **extinção**, por sua vez, consiste no desaparecimento de uma espécie. A extinção é um resultado da dinâmica ecológica, uma consequência da ação dos processos de seleção e deriva ecológica. Ela pode ocorrer apenas localmente ou por completo, mas apenas esta última representa uma extinção no sentido macroevolutivo. As extinções podem ser determinadas por fatores bióticos, tais como predação e competição, e abióticos, como mudanças climáticas (VOJE *et al.*, 2015; AGUILÉE *et al.*, 2018). Além disso, o processo de extinção também pode ser influenciado por mecanismos evolutivos, tais como a depressão endogâmica⁹ e a fixação de alelos deletérios por deriva genética.

Já o processo de **dispersão de linhagens** consiste na dispersão geográfica das espécies, ocupando e até migrando completamente para novas regiões (RICKLEFS, 1987; HACKEL e SANMARTÍN, 2021). A dispersão de linhagens pode ser resultado da simples difusão dos indivíduos das espécies pelo espaço ou da sua busca ativa por ambientes favoráveis. Ela interage com a dinâmica ecológica através da limitação de dispersão gerada por áreas inadequadas para as espécies. Essa inadequação pode ser causada pela

⁸ Incompatibilidades de Dobzhansky-Muller são diferentes tipos de incompatibilidades genéticas que acarretam no isolamento reprodutivo pós-zigótico entre duas populações, inviabilizando o desenvolvimento de indivíduos híbridos férteis.

⁹ A depressão endogâmica consiste na redução do *fitness* decorrente do acúmulo de alelos deletérios em populações com diversidade genética muito baixa, particularmente na presença de altas taxas de endogamia (reprodução entre indivíduos aparentados). Esse fenômeno tende a ser particularmente comum em populações muito pequenas.

presença de outras espécies competitivamente superiores, pela presença de predadores, pela falta de recursos necessários para o desenvolvimento da espécie ou pela sua inadequação às condições ambientais (WIENS e GRAHAM, 2005). Mudanças ambientais e bióticas, tais como espécies invasoras, podem forçar adaptações e migrações, alterando a área de distribuição das espécies.

Em escalas macroevolutivas e macroecológicas, a especiação é o processo responsável pelo aumento local e global da diversidade de espécies; a extinção é o processo de perda local e global de espécies; e a dispersão é o processo de ganho local e homogeneização da diversidade na paisagem (RICKLEFS, 1987; WIENS, 2011).

1.3.2.1 Modelos de especiação, extinção e diversificação

Uma forma simples de representar um processo de diversificação baseado em especiações e extinções é por um modelo de nascimento e morte (*birth-death*) (HARMON, 2019). Esse modelo é um processo markoviano de tempo contínuo, onde ocorrem dois tipos de eventos: nascimentos, onde o número de espécies aumenta em um, e morte, onde o número de espécies diminui em um. Nesse modelo, λ representa a taxa de “nascimento” (especiação) por linhagem e μ a taxa de “morte” (extinção) por linhagem. Por princípio, assume-se que ambas essas taxas são constantes.

Em um modelo *birth-death*, as ocorrências de nascimentos e mortes seguem um processo de Poisson. Assim, na presença de S linhagens vivas, o tempo entre eventos segue uma distribuição exponencial, com parâmetro $(\lambda + \mu)S$. Portanto, a probabilidade desse evento ser uma especiação é $\lambda/(\lambda + \mu)$ e de ser uma extinção é $\mu/(\lambda + \mu)$.

Considere um intervalo de tempo Δt , pequeno o suficiente para que ocorra no máximo um único evento nesse intervalo. Para um total de S espécies vivas, a probabilidade de ocorrência de uma especiação é dada pela equação

$$P_{spc} = S \lambda \Delta t , \quad (1.1)$$

e a probabilidade de uma extinção é dada por

$$P_{ext} = S \mu \Delta t . \quad (1.2)$$

Considere agora um total de $S(t)$ espécies vivas no tempo t . Neste caso, o valor esperado de $S(t + \Delta t)$ é dado pela equação

$$S(t + \Delta t) = S(t) + S(t) \lambda \Delta t - S(t) \mu \Delta t . \quad (1.3)$$

Subtraindo $S(t)$ de ambos os lados e tomando o limite $\Delta t \rightarrow 0$, é obtida a equação diferencial

$$\frac{dS}{dt} = (\lambda - \mu) S = \hat{r} S , \quad (1.4)$$

sendo \hat{r} a taxa de diversificação líquida por linhagem:

$$\hat{r} = \lambda - \mu . \quad (1.5)$$

Além disso, outro parâmetro importante em macroevolução é a taxa de extinção relativa, ϵ , definida por

$$\epsilon = \mu/\lambda . \quad (1.6)$$

No caso em que as taxas λ e μ são constantes, essa equação pode ser facilmente integrada, obtendo-se a equação

$$S(t) = S_0 e^{\hat{r}t} , \quad (1.7)$$

onde S_0 é o número de espécies vivas quando $t = 0$. Esse resultado mostra que o valor esperado da diversidade cresce exponencialmente com o tempo quando \hat{r} é positivo ($\lambda > \mu$), que representa o caso de interesse neste trabalho.

Uma forma análoga de representar o número de espécies vivas no tempo t é simplesmente pelo número de espécies vivas no tempo inicial, S_0 , somado ao número de especiações acumuladas até o tempo t , $\Lambda(t)$, e subtraído do número de extinções acumuladas, $E(t)$:

$$S(t) = S_0 + \Lambda(t) - E(t) . \quad (1.8)$$

Derivando essa equação, obtém-se

$$\frac{dS}{dt} = \frac{d\Lambda}{dt} - \frac{dE}{dt} = \lambda S - \mu S = (\lambda - \mu) S . \quad (1.9)$$

Nessa equação, $\frac{d\Lambda}{dt}$ representa a taxa de especiação total (absoluta) e $\frac{dE}{dt}$ a taxa de extinção total (absoluta).

De forma geral, ainda que λ e μ não sejam constantes, elas se relacionam com as taxas de especiação e extinção absolutas, respectivamente

$$\lambda = \frac{1}{S} \frac{d\Lambda}{dt} \quad (1.10)$$

e

$$\mu = \frac{1}{S} \frac{dE}{dt} . \quad (1.11)$$

Uma extensão desse modelo, onde λ e μ podem variar no tempo, são os modelos de diversificação dependente de diversidade (RABOSKY, 2013). Assim como o modelo *birth-death*, esses modelos são inspirados na dinâmica reprodutiva, e presumem que a diversidade pré-existente pode afetar as taxas de diversificação, geralmente de forma negativa. O principal pressuposto é de que as espécies de um mesmo clado podem competir pelo mesmo conjunto de recursos. Além disso, a segregação de nicho pode ser limitada

pela dimensionalidade do nicho das espécies (MACARTHUR e LEVINS, 1967) e pelas oportunidades ecológicas disponíveis.

Na ausência de inovações evolutivas que alterem muito a biologia das espécies, a medida que a diversidade de um clado cresce, é esperado que as espécies passem a competir cada vez mais umas com as outras. Alternativamente, elas podem evitar a competição tornando-se especialistas, contudo, isso diminui sua capacidade de explorar novas oportunidades ecológicas. Como consequência, é esperado que a taxa de diversificação diminua à medida que a diversidade aumente. Além disso, a diversidade pode apresentar um valor de saturação, que é chamado de **capacidade de suporte de espécies**. A redução da taxa de diversificação $\hat{r}(t)$ pode ocorrer tanto pela redução da taxa de especiação $\lambda(t)$, como pelo aumento da taxa de extinção $\mu(t)$. Contudo, esses dois mecanismos têm efeitos bastante distintos sobre os padrões observados nas árvores filogenéticas (RABOSKY e LOVETTE, 2008; QUENTAL e MARSHALL, 2009).

Uma forma simples de modelar isso é assumindo que as taxas de especiação e extinção por linhagem são funções lineares da riqueza de espécies do clado:

$$\lambda(S) = \lambda_0 - \alpha_\lambda S \quad (1.12)$$

e

$$\mu(S) = \mu_0 + \alpha_\mu S. \quad (1.13)$$

Nas equações (1.12) e (1.13), a taxa de especiação por linhagem é modelada como uma função decrescente da riqueza ($\alpha_\lambda > 0$) e a taxa de extinção como uma função crescente da riqueza ($\alpha_\mu > 0$). Nesse caso, a taxa de diversificação líquida por linhagem também é uma função linear da riqueza de espécies, pois

$$\begin{aligned} \hat{r}(S) &= \lambda(S) - \mu(S) \\ &= (\lambda_0 - \mu_0) - (\alpha_\lambda + \alpha_\mu) S \end{aligned} \quad (1.14)$$

$$= \hat{r}_0 - \alpha_r S. \quad (1.15)$$

Substituindo a expressão (1.15) na equação (1.4), é obtida equação

$$\frac{dS}{dt} = (\hat{r}_0 - \alpha_r S) S. \quad (1.16)$$

a qual pode ser reparametrizada em termos da capacidade de suporte de espécies K_{sp} , na forma da equação

$$\frac{dS}{dt} = \hat{r}_0 S \left(1 - \frac{S}{K_{sp}}\right). \quad (1.17)$$

Essa é a mesma equação diferencial do modelo de crescimento logístico, tradicionalmente utilizado para representar a dinâmica de uma população com competição intraespecífica

e limitação de recursos¹⁰. Esse modelo de diversificação dependente de diversidade é puramente fenomenológico, não estabelecendo nenhum mecanismo em particular pelo qual a riqueza afeta as taxas de especiação e extinção. Ainda assim, ele representa um modelo básico que descreve um padrão de diversificação dependente de diversidade usando parâmetros de fácil interpretação em termos ecológicos e evolutivos.

Integrando a equação (1.17) obtém-se a expressão

$$S(t) = \frac{K_{sp}}{1 + [(K_{sp} - S_0)/S_0] e^{-\hat{r}_0 t}}, \quad (1.18)$$

que descreve a evolução temporal da riqueza de acordo com esse modelo, em termos da taxa de diversificação inicial, \hat{r}_0 , da capacidade de suporte de espécies, K_{sp} , e da riqueza inicial do clado, S_0 .

Além disso, as taxas de especiação e extinção, e também a capacidade de suporte de espécies podem mudar com o tempo por ação de outros fatores (MARSHALL e QUENTAL, 2016). Isso pode ocorrer como resultado da evolução, que pode gerar inovações fenotípicas que permitam a certas linhagens explorar novos recursos (HARMON, 2019), e também como resultado da ecologia, como mudanças em fatores bióticos e abióticos que afetam a dinâmica das espécies (AGUILÉE *et al.*, 2018).

1.3.2.2 Modelos de evolução fenotípica

A ação dos processos microevolutivos sobre longos períodos têm potencial de produzir grandes alterações fenotípicas sobre as espécies (HANSEN e MARTINS, 1996), levando suas características a divergirem ou convergirem com o passar do tempo. Na tentativa de generalizar e compreender os padrões de variação de atributos contínuos em um clado, vários modelos de evolução fenotípica têm sido propostos (HARMON, 2019).

Dentre os modelos de evolução de atributos contínuos, o mais fundamental é o movimento browniano (BM) (HARMON, 2019). Esse modelo é baseado em dois parâmetros, o valor inicial de atributo $y_i(0)$ e a taxa evolutiva σ^2 , podendo ser representado pela equação

$$dy_i(t) = \sigma dW_i(t). \quad (1.19)$$

Nessa equação, $dy_i(t)$ representa a variação diferencial (estocástica) no atributo $y_i(t)$ e o subscrito i indica a espécie (BLOMBERG, RATHNAYAKE e MOREAU, 2020). A diferencial $dW_i(t)$ representa uma diferencial estocástica, que está associada a um processo estocástico gaussiano com média 0 e variância 1, também conhecido por ruído branco ou processo de Wiener (KLEBANER, 2012). Esse modelo costuma ser usado para representar um processo de evolução por deriva genética, sem memória e sem efeitos

¹⁰ A dedução completa da equação (1.17), a partir das equações (1.4), (1.12) e (1.13), pode ser encontrada no capítulo 2 do livro Ecologia (2007) (GOTELLI, 2007). No livro, a dedução é feita em um contexto de Ecologia de Populações, mas é inteiramente análoga ao caso de diversificação descrito aqui.

de seleção relevantes. Contudo, ele também se aplica a uma gama maior de situações, como, por exemplo, uma seleção ambiental forte em um contexto de variação ambiental aleatória (HANSEN e MARTINS, 1996).

O modelo browniano pode, ainda, ser estendido pela adição de uma tendência direcional de evolução, o que é representado por

$$dy_i(t) = sdt + \sigma dW_i(t). \quad (1.20)$$

A intensidade e a direção da tendência evolutiva são determinadas pelo parâmetro s . Essa versão modificada é conhecida como movimento browniano com tendência (HARMON, 2019). Conforme Harmon (2019), essa forma de evolução não pode ser distinguida de um modelo puramente browniano somente com dados do estado morfológico atual das espécies, necessitando, para isso, o uso de informação do registro fóssil.

Situações onde um clado passa por uma grande diversificação acompanhada de grande variação morfológica são chamadas de radiações adaptativas (GAVRILETS e LOSOS, 2009). Frequentemente, radiações também estão associadas à expansão da distribuição de ocorrências do clado. Em um cenário de radiação adaptativa de uma linhagem sobre habitats bastante diferentes, é esperado que a maior parte da variação fenotípica ocorra no início da radiação (ocupação dos novos habitats), ou seja, próximo aos nós mais basais da filogenia. Além disso, espera-se uma menor variação próximo aos nós mais terminais, decorrente, por exemplo, de especializações e da partição de nicho entre novas espécies nos habitats já ocupados (HARMON *et al.*, 2003). Um modelo capaz de representar esse comportamento é o modelo de *Early-Burst* (EB) (HARMON, 2019). O modelo EB também pode ser entendido como uma extensão do modelo browniano, onde o parâmetro de taxa evolutiva σ^2 varia no tempo,

$$\sigma^2 = \sigma_0^2 e^{bt}. \quad (1.21)$$

Nesse modelo, o parâmetro σ^2 é substituído pela taxa evolutiva básica, σ_0^2 , e pelo parâmetro de decaimento da taxa evolutiva, b , tal que $b \in (0, -\infty)$.

O modelo mais comumente utilizado para descrever situações onde a evolução ocorre sob efeito de uma seleção estabilizadora é o modelo de Ornstein-Uhlenbeck (OU) (HANSEN, 1997), representado por

$$dy_i(t) = -\alpha(y_i(t) - \theta)dt + \sigma dW_i(t). \quad (1.22)$$

Assim, o modelo OU é descrito pelos parâmetros σ^2 , a taxa evolutiva, θ , representando o ótimo adaptativo do atributo para o clado, e α , representando a intensidade da força de seleção sobre o clado em direção ao ótimo adaptativo, além da condição inicial do atributo $y_i(0)$ (BLOMBERG, RATHNAYAKE e MOREAU, 2020).

O modelo OU têm sido flexibilizado de diversas formas para buscar generalizações: mudanças nas forças de seleção, na taxa evolutiva e nos ótimos adaptativos, tanto ao longo

do tempo como entre taxa (BEAULIEU *et al.*, 2012). Embora a forma do modelo não se altere, os parâmetros θ , α e σ podem deixar de serem fixos no tempo e passarem a variar entre subclados. Essa generalização é conhecida como modelo OU com múltiplos ótimos (OU-M).

1.4 Conectando Ecologia e Evolução através de Modelos Mecanísticos

De acordo com Weber *et al.* (2017), embora haja entendimento de que evolução e interações ecológicas, bióticas e abióticas, sejam intrinsecamente relacionadas, há uma grande dificuldade em estudar as dinâmicas ecológica e evolutiva juntas por longos períodos de tempo. Mesmo na escala de comunidades (GOVAERT *et al.*, 2021), a compreensão da ação conjunta de processos ecológicos (VELLEND, 2016) e evolutivos (TEMPLETON, 2021) ainda é bastante limitada. Apesar disso, avanços recentes em várias frentes têm mudado esse cenário e apontado direções promissoras para conectar o entendimento de padrões e processos em ecologia de comunidades, macroecologia e macroevolução (WEBER *et al.*, 2017; MCGILL *et al.*, 2019).

Uma linha de investigação que têm obtido vários desenvolvimentos recentes é a de modelagem mecanística de dinâmicas eco-evolutivas (WEBER *et al.*, 2017; ROSINDELL, HARMON e ETIENNE, 2015; HAGEN, 2022). Conforme Hagen (2022), existem duas principais abordagens de modelos eco-evolutivos mecanísticos (MEEMs): modelos baseados em indivíduos e modelos baseados em populações.

Modelos baseados em indivíduos (IBMs¹¹) têm como unidade eco-evolutiva o indivíduo¹² (ROMERO-MUJALLI, JELTSCH e TIEDEMANN, 2019; HAGEN, 2022). Nesses modelos, cada indivíduo pode ser caracterizado por valores de atributos e até mesmo genótipos individuais. A dinâmica desses modelos incorpora explicitamente a modelagem de processos microevolutivos, frequentemente modelando mecanismos de reprodução dos indivíduos de forma explícita (DE AGUIAR *et al.*, 2009; AGUILÉE, CLAESSEN e LAMBERT, 2013; GASCUEL *et al.*, 2015). Contudo, tal grau de detalhamento nos processos microevolutivos e na dinâmica dos indivíduos tem um custo computacional elevado, tornando frequente que esses modelos analisem a dinâmica eco-evolutiva em conjuntos de comunidades pequenos (AGUILÉE, CLAESSEN e LAMBERT, 2013; GASCUEL *et al.*,

¹¹ Do inglês, *Individual Based Models*.

¹² Em certos casos, o termo IBM também é utilizado como sinônimo de **modelo baseado em agentes** (DEANGELIS e MOOIJ, 2005). Essa é uma nomenclatura geral para modelos baseados em unidades interagentes, as quais podem representar partículas, células, indivíduos, populações, espécies, etc. Os próprios PBMs também são modelos baseados em agentes e, sob essa nomenclatura mais ampla, podem ser considerados um caso especial de IBM, onde os “indivíduos” (agentes) são populações. Não obstante, nesse trabalho utilizei a nomenclatura adotada por Hagen (2022), descrita no corpo do texto dessa seção, e que diferencia IBMs e PBMs.

2015; FIELDING e PANTEL, 2020), ou considerando dinâmicas ecológicas relativamente simples, tais como a dinâmica neutra (DE AGUIAR *et al.*, 2009; COSTA *et al.*, 2019; MARQUITTI, FERNANDES e DE AGUIAR, 2020).

Modelos baseados em populações (PBMs¹³) partem das populações como unidades eco-evolutivas. As populações costumam estar associadas a uma assembleia ou sítio, e são caracterizadas por valores médios ou distribuições de atributos. Em geral, esses modelos não incorporam processos microevolutivos a nível genético como os IBMs, mas modelam a variação de atributos, geralmente associados a características de nicho e a dispersão (RANGEL *et al.*, 2018; HAGEN *et al.*, 2021). Modelos populacionais têm sido empregados para simular dinâmicas eco-evolutivas em escalas continental e global sob longos períodos de tempo, em geral buscando reproduzir padrões de diversidade observados nessas escalas (HAGEN, 2022). Contudo, em boa parte das aplicações atuais, as resoluções temporal e espacial são relativamente baixas e pouco representativas das escalas de tempo reais da dinâmica ecológica no âmbito de comunidades.

O uso de modelos eco-evolutivos mecanísticos permite obter filogenias completas, com informação de especiações e extinções, trajetórias de evolução de atributos, área de distribuição das espécies e padrões ecológicos e macroecológicos ao longo do tempo e do espaço. Os MEEMs permitem testar a relação entre esses e outros padrões com uma variedade de modelos de dinâmica eco-evolutiva, modos de dispersão, condições iniciais e diferentes cenários geográficos e ambientais, no espaço e no tempo (HAGEN, 2022).

Os MEEMs têm sido aplicados para diferentes fins. Alguns exemplos de aplicações de IBMs são o uso de dinâmica neutra para entender a origem de padrões globais de diversidade (DE AGUIAR *et al.*, 2009) e avaliar o efeito de diferentes modos geográficos de especiação sobre propriedades das filogenias (COSTA *et al.*, 2019; MARQUITTI, FERNANDES e DE AGUIAR, 2020); comparações entre dinâmicas neutra e de seleção fraca (ROSINDELL, HARMON e ETIENNE, 2015); avaliação de padrões de diversificação em cenários de radiação adaptativa (AGUILÉE, CLAESSEN e LAMBERT, 2013); efeitos da dinâmica da paisagem sobre propriedades das filogenias (GASCUEL *et al.*, 2015); influência de fatores bióticos e abióticos em taxas de especiação e extinção (AGUILÉE *et al.*, 2018); e evolução de atributos das espécies sob cenários de mudança ambiental (FIELDING e PANTEL, 2020). Além disso, alguns trabalhos investigaram o efeito da estrutura da paisagem, fragmentação e autocorrelação espacial, sobre padrões macroecológicos e macroevolutivos (BIRAND, VOSE e GAVRILETS, 2012; CAMPOS *et al.*, 2013; CICCHETO, CARNAVAL e ARAUJO, 2024).

Dentre as aplicações de modelos populacionais (PBMs), Rangel *et al.* (2018) avaliam padrões de diversidade e mapeiam eventos de especiação, persistência e extinção de espécies em simulações baseadas em dados de reconstrução paleoclimática do período Quaternário

¹³ Do inglês, *Population Based Models*.

Tardio na América do Sul. Por sua vez, Hagen *et al.* (2021) comparam modelos com diferentes hipóteses para explicar o gradiente latitudinal de diversidade ao longo da era Cenozoica, medindo padrões espaciais de diversidade, a distribuição de tamanho das áreas de ocorrência das espécies e propriedades estruturais das filogenias. Já Hagen *et al.* (2024) investigam os efeitos da dispersão e da competição sobre a diversificação em um sistema insular.

Enquanto o papel do tempo é quase onipresente nas discussões em macroevolução, o papel do espaço na evolução é negligenciado por muitos estudos (WEBER *et al.*, 2017; MCGILL *et al.*, 2019). Contudo, a evolução também ocorre no espaço: seja através da dinâmica espacial das populações (KIRKPATRICK e BARTON, 1997) ou da interação entre indivíduos e destes com o ambiente, que acontece no âmbito das comunidades (WEBER *et al.*, 2017; MCPEEK, 2017). Assim, é necessária mais atenção para como a dinâmica espacial se reflete nos padrões de diversificação e de evolução fenotípica dos clados.

Atualmente, grande parte dos modelos eco-evolutivos mecanísticos incorporam a dinâmica espacial de forma explícita e têm sido uma importante ferramenta para desvelar o papel do espaço nos processos macroevolutivos (HAGEN, 2022). No entanto, ainda há uma ampla gama de questões para as quais eles têm potencial de contribuir (WEBER *et al.*, 2017; GOVAERT *et al.*, 2021; HAGEN, 2022). Entre elas, está a compreensão mais profunda do papel da heterogeneidade ambiental, no espaço e no tempo, na formação dos padrões macroevolutivos.

Embora seja um tópico bastante explorado em ecologia, o entendimento de como a heterogeneidade espaço-temporal do ambiente se reflete nos padrões macroevolutivos ainda é bastante limitado (WEBER *et al.*, 2017). De fato, vários trabalhos utilizando MEEMs incorporam elementos de heterogeneidade espaço-temporal, tanto ambiental como geográfica, como forma de aumentar o realismo dos modelos ou mesmo para investigar os padrões emergentes em cenários específicos de variabilidade (AGUILÉE, CLAESSEN e LAMBERT, 2013; GASCUEL *et al.*, 2015; AGUILÉE *et al.*, 2018; RANGEL *et al.*, 2018; FIELDING e PANTEL, 2020; HAGEN *et al.*, 2021). Entretanto, esses trabalhos não enfocam especificamente o efeito da heterogeneidade sobre a diversificação.

Alguns trabalhos porém, abordam a heterogeneidade da paisagem de forma mais direta, especialmente o efeito da fragmentação da paisagem – que está diretamente relacionada com a autocorrelação espacial. Birand, Vose e Gavrillets (2012) consideram uma paisagem composta por sítios com diferentes tipos de recursos (4, no total), e dois níveis de fragmentação desses recursos no espaço, simulando a dinâmica eco-evolutiva para diferentes capacidades de dispersão das espécies; nesse trabalho, atributos de preferência e uso de habitat evoluem no tempo e o critério de definição das espécies é ecológico. Essa definição de espécie não considera nenhuma contribuição neutra para a divergência e a ocorrência de especiações, que poderiam ocorrer de forma alopátrica e parapátrica, e por

isso limita a emergência de diversidade na paisagem.

Nos trabalhos de Campos *et al.* (2013) e Ciccheto, Carnaval e Araujo (2024), as paisagens são representadas por conjuntos de sítios habitáveis e não habitáveis e a fragmentação é avaliada em termos do arranjo dos sítios habitáveis (50%) no espaço. Ciccheto, Carnaval e Araujo (2024) avaliam os efeitos tanto da fragmentação como da habilidade de dispersão das espécies sobre os números de especiações e extinções.

Contudo, nenhum desses trabalhos explora o efeito da heterogeneidade associado a um gradiente contínuo de condições ambientais, nem consideram um cenário onde as espécies possam se adaptar às diferentes condições da paisagem por meio da evolução dos seus atributos.

Além disso, a heterogeneidade espacial não se limita ao grau de fragmentação das paisagens, mas também é determinada pela quantidade de variação ambiental existente na paisagem. Para uma condição discreta, como diferentes tipos de recursos (como no trabalho de Birand, Vose e Gavrillets (2012)), isso pode ser expresso pelo número de categorias (recursos) diferentes ou por um índice de diversidade. Para uma condição contínua, isso pode ser representado simplesmente pela magnitude do intervalo de valores da condição ambiental, ou pelo desvio padrão da condição ambiental na paisagem (LI e REYNOLDS, 1995).

Assim, nesse trabalho, investiguei o efeito da heterogeneidade ambiental, com foco na variabilidade espacial de uma condição ambiental contínua, sobre os processos macroevolutivos de especiação e extinção. Para isso, utilizamos um modelo eco-evolutivo mecanístico (MEEM) para simular a evolução e diversificação de uma linhagem hipotética em paisagens com diferentes cenários de heterogeneidade espacial.

1.5 Hipóteses

A heterogeneidade espacial é um conceito complexo, que está associado a diferentes características da paisagem e pode ser mensurado por diferentes métricas (LI e REYNOLDS, 1995; LOKE e CHISHOLM, 2022). O conceito de heterogeneidade que foi adotado neste trabalho está associado à distribuição das condições ambientais ao longo da paisagem, as quais foram mantidas fixas ao longo do tempo. Assim, a análise da heterogeneidade espacial incluiu duas dimensões: a variação das condições ambientais na paisagem, heterogeneidade composicional, e o arranjo espacial dessas condições, heterogeneidade configuracional (FAHRIG *et al.*, 2011; BENHUR e KADMON, 2020).

Para melhor compreender seu efeito, investiguei essas dimensões da heterogeneidade a partir de duas métricas independentes: a **autocorrelação espacial** (forma da variação do ambiente) e a **variação espacial** (quantidade de variação do ambiente).

A primeira diz respeito a como as condições ambientais estão distribuídas através do espaço (heterogeneidade configuracional), se elas estão distribuídas aleatoriamente ou se há algum padrão de associação entre as condições ambientais de um local e sua vizinhança, formando agregações de condições similares. Assim, a **autocorrelação espacial** também está intimamente associada à fragmentação da paisagem. Por sua vez, a variação espacial está associada com o quanto a condição ambiental varia ao longo da paisagem (heterogeneidade composicional), ou seja, com o tamanho do intervalo de valores em que as condições ambientais estão distribuídas. Portanto, a **variação espacial está diretamente associada ao desvio padrão da condição ambiental na paisagem**.

A figura 1 ilustra como essas duas métricas se relacionam com a heterogeneidade. A nível local, a **autocorrelação espacial têm uma relação inversa com a heterogeneidade**, pois o aumento da autocorrelação gera padrões espaciais nas condições ambientais que tornam a paisagem **localmente mais homogênea**. Já a **variação espacial tem uma relação direta com a heterogeneidade**, pois seu aumento causa maior dissimilaridade ambiental entre os sítios ao longo da paisagem.

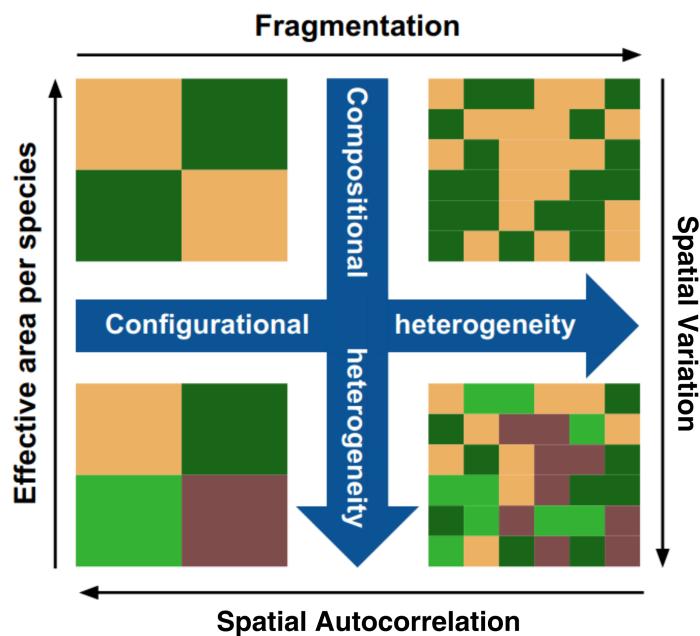


Figura 1 – Relação entre variação espacial, autocorrelação espacial e heterogeneidade.
Fonte: adaptado de BenHur e Kadmon (2020). As setas indicam que a variação espacial está positivamente relacionada com a heterogeneidade composicional, enquanto a autocorrelação espacial possui uma relação negativa com a heterogeneidade configuracional.

O objetivo deste trabalho é investigar como diferentes cenários de heterogeneidade ambiental no espaço afetam os padrões macroevolutivos de especiação e extinção. Dessa forma, almejei responder à questão (1) *qual o efeito da heterogeneidade espacial de uma condição ambiental, em termos da variação espacial, L , e da autocorrelação espacial, Ξ ,*

sobre as taxas de especiação e extinção?

Para responder à questão (1), formulei um conjunto de hipóteses e previsões sobre o comportamento das taxas de especiação e extinção, absoluta e por linhagem, em diferentes cenários de heterogeneidade espacial.

Hipótese 1: Em cenários de baixa autocorrelação espacial (maior heterogeneidade), os sítios com condições ambientais semelhantes estão espalhados na paisagem de forma aleatória, e, assim, frequentemente desconectados. Além disso, a diferença ambiental em relação aos sítios da sua vizinhança pode promover uma seleção desfavorável aos indivíduos de uma população. Portanto, há grande potencial para geração de populações pequenas e isoladas, ou pouco conectadas. Assim, estas podem evoluir independentemente, se diferenciar e gerar novas espécies (WIENS, 2004), aumentando as taxas de especiação absoluta e por linhagem. Por outro lado, populações pequenas e isoladas também são mais suscetíveis a efeitos de deriva, tanto genética quanto ecológica. Portanto, elas têm maiores chances de sofrerem mutações desfavoráveis ao acaso e flutuações populacionais. Esse papel da aleatoriedade tende a contribuir para o aumento das extinções locais (GRAVEL *et al.*, 2006), o que pode conduzir a um aumento nas taxas de extinção absoluta e por linhagem. Portanto, espera-se que *cenários onde a autocorrelação espacial da variável ambiental é baixa produzem altas taxas de especiação e extinção em relação aos cenários de maior autocorrelação*.

Hipótese 2: Em cenários de autocorrelação espacial alta, o agrupamento de sítios com condições ambientais parecidas gera domínios espaciais onde a seleção estabilizadora sobre o ótimo ambiental das espécies atua na mesma direção. Dentro de cada domínio, o ambiente é pouco diverso e a seleção não atua como barreira à dispersão de indivíduos entre os sítios, embora possa atuar fortemente nas fronteiras entre domínios com condição ambiental diferente, promovendo um isolamento entre estes e dificultando a dispersão de indivíduos entre domínios disjuntos com condição ambiental similar. Com isso, espera-se que as populações das espécies sejam maiores e estejam distribuídas entre os sítios de um mesmo domínio, mas isoladas de populações em outros domínios. Assim, espera-se que especiações sejam menos frequentes, pois elas tenderiam a ocorrer apenas nas situações, pouco prováveis, em que indivíduos consigam atravessar as barreiras de seleção contrária entre domínios e dar origem a populações isoladas estáveis, que poderiam evoluir de forma independente e divergir (WIENS, 2004). Por outro lado, se as populações estiverem difundidas e conectadas dentro dos domínios, elas estarão menos suscetíveis à deriva ecológica e, portanto, menos vulneráveis à extinção (GRAVEL *et al.*, 2006). Assim, *espera-se que cenários com maior autocorrelação espacial da condição ambiental produzam menores taxas de especiação e extinção*.

Hipótese 3: Em cenários de autocorrelação espacial intermediária, temos um cenário intermediário entre a predominância de sítios ambientalmente isolados e a formação

de agregados (domínios) de condições ambientais semelhantes. Nesse cenário, a presença de pequenas agregações de sítios com condições ambientais semelhantes, e o simultâneo enfraquecimento das barreiras de seleção, têm potencial para tornar mais frequente o surgimento de populações isoladas estáveis, as quais têm potencial de originarem novas espécies (WIENS, 2004). Embora as agregações de condições ambientais nesse cenário sejam menores que os domínios descritos anteriormente, elas ainda são maiores e possivelmente mais conectadas do que sítios isolados, de modo que as populações de espécies adaptadas às condições de uma agregação estarão menos sujeitas a efeitos de deriva ecológica (GRAVEL *et al.*, 2006) e, portanto, têm menor risco de extinção. Dessa forma, espera-se que *cenários de autocorrelação espacial intermediária produzirão taxas de especiação intermediárias e taxas de extinção baixas*.

Hipótese 4: Por fim, cenários com baixa variação espacial aproximam um ambiente homogêneo. Desse modo, indivíduos de diferentes espécies possuem aptidões mais semelhantes, independentemente do sítio em que estiverem, similar ao que ocorre em uma dinâmica neutra (HUBBELL, 2001; GRAVEL *et al.*, 2006; SOKOL *et al.*, 2015). Nesse caso, a seleção deixa de atuar como barreira ao processo de dispersão e as espécies têm pouca dificuldade para dispersar entre sítios (GRAVEL *et al.*, 2006; WIENS, 2004), além de terem facilidade para se adaptar aos novos ambientes, ultrapassando barreiras geradas pelos diferentes perfis de autocorrelação espacial da paisagem. Assim, as diferenças observáveis entre os diferentes cenários de autocorrelação espacial devem se tornar mais tênues ou até desaparecer quando a variação espacial do ambiente é muito pequena. Com o aumento da variação espacial, a seleção passa a atuar mais fortemente como barreira dispersiva e adaptativa (WIENS, 2004) e as diferenças descritas para os cenários nas hipóteses **H1**, **H2** e **H3** se tornam mais evidentes. Portanto, espera-se que *a variação espacial da condição ambiental não altere o perfil de resultados para os diferentes cenários de autocorrelação espacial, mas atue explicitando a diferença entre cada um destes. De modo que, para baixa variação espacial, relativa à tolerância das espécies, as diferenças entre os cenários sejam pequenas e cresçam conforme a variação espacial aumenta*.

2 Construindo um modelo eco-evolutivo

2.1 Introdução

Nesse capítulo, apresento a estrutura do pacote `gen3sis`, o arcabouço básico das nossas simulações. Nele também é apresentada a base teórica e o processo de construção do modelo eco-evolutivo adotado no restante do trabalho. Ao longo do texto, são discutidos os pressupostos e exploradas algumas consequências teóricas do modelo. Tais considerações ajudarão a compreender a parametrização adotada nas simulações, discutida no capítulo 3, e também serão relevantes para a compreensão da metodologia e a interpretação dos resultados do trabalho.

2.2 O pacote `gen3sis`

Para realizar as simulações, foi utilizado o pacote `gen3sis`, desenvolvido por Hagen *et al.* (2021). O `gen3sis` é um arcabouço para realização de simulações eco-evolutivas baseadas em modelos mecanísticos. Ele foi desenvolvido em R e C++ e implementado na forma de um pacote R. A escolha por realizar as simulações utilizando esse pacote foi motivada pela sua flexibilidade para a implementação de diferentes modelos eco-evolutivos e também pela praticidade de utilizar um arcabouço previamente desenvolvido e testado para o trabalho.

O `gen3sis` é construído de forma a estruturar o processo eco-evolutivo em quatro módulos: *Speciation*, *Dispersal*, *Evolution* e *Ecology*¹, conforme ilustrado na figura 2. Dentro de cada um desses módulos o usuário pode configurar diferentes processos relacionados à dispersão, interações bióticas e abióticas, dinâmica populacional, fluxo gênico e evolução de atributos. Os quatro módulos atuam em interdependência mútua e definem um ciclo eco-evolutivo iterado ao longo de vários passos temporais, dando origem à dinâmica eco-evolutiva. Mais informações sobre as entradas, saídas e o funcionamento de cada um dos módulos é dado na tabela 18, que consta no anexo A, e também no artigo original de Hagen *et al.* (2021).

¹ Respectivamente *Especiação*, *Dispersão*, *Evolução* [de atributos] e *Ecologia*.

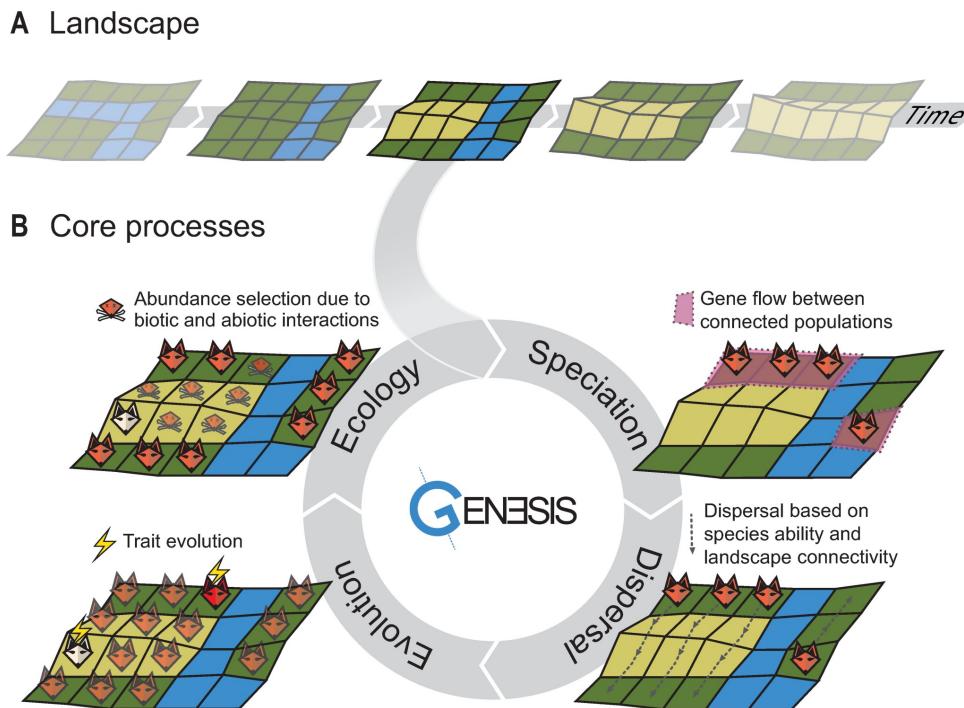


Figura 2 – Esquema ilustrando o ciclo de processos simulados através dos módulos do pacote *gen3sis*. Fonte: Hagen *et al.* (2021). (A) Paisagem. Uma série temporal de paisagens é usada como entrada, com a paisagem sendo atualizada após cada passo temporal, ao fim do ciclo. (B) Modelagem dos processos centrais. Primeiro, o processo de especiação determina a divergência entre os agrupamentos geográficos de populações que não estão conectados e divide os agrupamentos em duas novas espécies se um gatilho é atingido. Segundo, no processo de dispersão, as espécies dispersam para novos sítios que elas alcançam. Terceiro, o processo de evolução pode modificar os valores dos atributos nas populações. Quarto, o processo de ecologia recalcula a abundância das espécies em cada sítio baseado nas condições abióticas e na coocorrência de espécies, possivelmente resultando em extinções locais. Eventos de especiação e extinção emergem da simulação de múltiplos ciclos desses processos, que podem ser customizados.

O detalhamento dos processos definidos em cada um dos módulos do *gen3sis* será dado nas seções abaixo. O conjunto de todos esses processos compõem o modelo eco-evolutivo que foi utilizado nesse trabalho.

2.3 Ecologia

No *gen3sis*, o módulo *Ecology* é responsável pela dinâmica das abundâncias das espécies em cada sítio. O *gen3sis* permite utilizar informações da paisagem, tais como condições ambientais, as abundâncias e os valores de atributos das espécies em um sítio para atualizar os valores de abundância das espécies. A cada passo temporal esse processo é realizado individualmente para cada sítio e iterado sobre todos os sítios.

O modelo ecológico implementado nesse módulo foi baseado no modelo generalizado

de competição de Lotka-Volterra (GOTELLI, 2007), descrito pela equação

$$\frac{dN_i}{dt} = N_i r_i \left[1 - \frac{1}{K_i} \left(N_i + \sum_{j \neq i}^S \alpha_{ij} N_j \right) \right]. \quad (2.1)$$

Na equação, N_i e N_j representam as abundâncias (tamanho da população) das espécie i e j , respectivamente. r_i é um parâmetro que representa a taxa de crescimento intrínseca da população da espécie i , K_i é um parâmetro que representa a capacidade de suporte da espécie i ², α_{ij} representa o coeficiente de competição interespecífica entre as espécies i e j , e S é o número total de espécies competitivas presentes no sistema de interesse.

Um caso particular desse modelo, com apenas duas espécies competitivas ($S = 2$), foi desenvolvido de forma independente por Lotka (1920) e Volterra (1930). Esse modelo é baseado no modelo de crescimento logístico, compartilhando com ele muitas de suas premissas (GOTELLI, 2007). Desde seu desenvolvimento inicial, ele se tornou a representação clássica da Ecologia Teórica para um sistema de competição entre espécies, embora outros modelos, alguns mais sofisticados e realistas, tenham sido desenvolvidos com o passar do tempo, como os modelos de consumidor-recurso (ARDITI e GINZBURG, 2012).

Conforme Gotelli (2007), a versão básica do modelo de competição de Lotka-Volterra tem como premissas básicas as ausências de estrutura genética e etária nas populações, além da inexistência de migração e de retardos na resposta do crescimento populacional à abundância passada. Esse modelo também tem como pressupostos que os recursos utilizados pelas espécies são limitados e têm disponibilidade constante (as capacidades de suporte K_i não variam no tempo); que os coeficientes de competição α_{ij} são constantes; e que a denso-dependência é linear, de modo que um incremento da população de qualquer espécie produz uma redução linear no crescimento populacional per capita (de qualquer das espécies).

Contudo, introduzi algumas modificações importantes nesse modelo, algumas das quais apenas simplificam e outras que alteram alguns desses pressupostos. Além disso, parte dos pressupostos desse modelo é alterada ao nível da simulação, em função da ação dos outros módulos do `gen3sis`. Por exemplo, a migração através do módulo de dispersão, a variabilidade fenotípica intraespecífica (associada com a estrutura genética local e espacial das populações), e a variação das capacidades de suporte associadas à evolução e adaptação das espécies às diferentes condições ambientais, que alteram sua capacidade de uso dos recursos. Essas alterações são descritas e discutidas ao longo desse capítulo.

² Nesse caso, K_i representa a abundância máxima atingida pela espécie i na ausência das outras espécies competitivas.

A primeira modificação introduzida é a simplificação dos coeficientes de competição interespecífica α_{ij} . No modelo deste trabalho, foi adotado que tais coeficientes são iguais, independentemente do par de espécies (i, j) , $\alpha_{ij} = \alpha$,

$$\frac{dN_i}{dt} = N_i r_i \left[1 - \frac{1}{K_i} \left(N_i + \alpha \sum_{j \neq i}^S N_j \right) \right] . \quad (2.2)$$

Além disso, foi estabelecido que $\alpha = 1$, de modo que a equação (2.2) pode ser simplificada,

$$\frac{dN_i}{dt} = N_i r_i \left(1 - \frac{1}{K_i} \sum_j^S N_j \right) . \quad (2.3)$$

Através da equação (2.3), assume-se que a competição interespecífica é igual entre qualquer par de espécies i e j . Por sua vez, introduzindo o vínculo de $\alpha = 1$ na equação (2.3), foi estabelecido que os coeficientes de **competição intraespecífica e interespecífica são iguais**. Desse modo, independentemente da sua espécie, cada indivíduo consome o mesmo recurso e ocupa uma proporção equivalente da **capacidade de suporte local**. Essa simplificação segue na direção de um modelo de neutralidade ecológica, onde, de um ponto de vista demográfico e de consumo de recursos, os indivíduos de todas as espécies são equivalentes.

Adicionalmente, a equação (2.3) foi reparametrizada, de modo a desacoplar o coeficiente de crescimento intrínseco, r_i , da parte não linear da equação,

$$\frac{dN_i}{dt} = N_i \left(r_i - \frac{1}{K_{r_i}} \sum_j^S N_j \right) . \quad (2.4)$$

Desse modo, a tradicional capacidade de suporte K_i foi substituída pelo parâmetro K_{r_i} , que foi denominado **capacidade de suporte por recrutamento**. O parâmetro K_{r_i} está relacionado à capacidade de suporte, e está diretamente associado às taxas de competição intra e interespecíficas.

Assim, a capacidade de suporte correspondente a esse sistema é dada por $K_i = r_i K_{r_i}$. Novamente, a complexidade do modelo foi reduzida por meio da fixação de valores idênticos do parâmetro $K_{r_i} = K_r$ para todas as espécies. Desse modo, a capacidade de suporte de cada espécie i é dada por

$$K_i = r_i K_r . \quad (2.5)$$

No modelo deste trabalho, foi adotada como unidade temporal o **tempo de geração** e a taxa de crescimento intrínseca da espécie i , r_i , foi definida como uma função quadrática do valor de ótimo ambiental dessa população, y_i , conforme

$$r_i(y_i, \theta) = r_{\max} - \frac{(y_i - \theta)^2}{2\sigma_w^2} . \quad (2.6)$$

Nessa expressão, r_{\max} é um parâmetro que representa o valor máximo da taxa de crescimento intrínseco e θ é o valor de condição ambiental local. Assim, a taxa de crescimento intrínseca, que se reflete na aptidão dos indivíduos, está relacionada à adequação do valor de ótimo ambiental da espécie com o valor de condição ambiental local, θ .

Em um modelo de crescimento discreto, a aptidão (*fitness*) absoluta W de uma população da espécie i consiste na razão entre o número de indivíduos em dois tempos consecutivos $t + 1$ e t , $W_i = N_i(t + 1)/N_i(t)$. Conforme McPeek (2017), para um modelo de crescimento populacional contínuo, a aptidão absoluta é dada em termos do logaritmo de W_i ,

$$\ln(W_i) = \frac{1}{N_i} \frac{dN_i}{dt} . \quad (2.7)$$

A aptidão absoluta representa um conceito chave conectando a dinâmica ecológica com a dinâmica evolutiva causada por seleção natural.

Seguindo essa definição, no modelo adotado aqui, o *fitness* absoluto é dado pela equação

$$\ln(W_i) = r_i - \frac{1}{K_r} \sum_j^S N_j = r_{\max} - \frac{(y_i - \theta)^2}{2\sigma_w^2} - \frac{1}{K_r} \sum_j^S N_j . \quad (2.8)$$

Entretanto, com o objetivo de gerar um mecanismo para a seleção do atributo a nível local, conforme será detalhado na seção 2.5, foi introduzida variação intraespecífica nos atributos de cada população. Para isso, o perfil do atributo de uma população (em um sítio) foi descrito por uma distribuição gaussiana com média \bar{y}_i e desvio padrão σ_y . Assim, não foi considerado no modelo a possibilidade de haver variação ao longo do tempo na distribuição do atributo para além da variação da média, \bar{y}_i .

Dado que a população não é homogênea em termos de atributos, a aptidão média da população não corresponde simplesmente à aptidão do atributo médio da população. A aptidão média foi obtida integrando a aptidão associada a cada valor de atributo ponderado pela sua frequência relativa, conforme a equação (2.9)

$$\bar{W} = \int_{-\infty}^{\infty} f(y) W(y) dy , \quad (2.9)$$

aplicando essa definição à equação (2.8)

$$\bar{W} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_y} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{(y - \bar{y})^2}{2\sigma_y^2}\right] \exp\left[r_{\max} - \frac{(y - \theta)^2}{2\sigma_w^2} - \frac{1}{K_r} \sum_j^S N_j\right] dy ,$$

foi obtida a relação para a aptidão média

$$\bar{W}(\bar{y}) = \frac{\sigma_w}{\sqrt{\sigma_w^2 + \sigma_y^2}} \exp\left[r_{\max} - \frac{(\bar{y} - \theta)^2}{2(\sigma_w^2 + \sigma_y^2)} - \frac{1}{K_r} \sum_j^S N_j\right] . \quad (2.10)$$

Desse modo, a equação da dinâmica ecológica (2.4) pôde ser reescrita para a aptidão média, \bar{W}_i . Após algumas manipulações algébricas, foi obtida a expressão

$$\frac{dN_i}{dt} = N_i \ln(\bar{W}_i) = N_i \left[\tilde{r}_i(\bar{y}_i) - \frac{1}{K_r} \sum_j^S N_j \right] \quad (2.11)$$

$$= N_i \left[r_{\max} - \frac{1}{2} \ln \left(\frac{\sigma_y^2 + \sigma_w^2}{\sigma_w^2} \right) - \frac{(\bar{y}_i - \theta)^2}{2(\sigma_w^2 + \sigma_y^2)} - \frac{1}{K_r} \sum_j^S N_j \right]. \quad (2.12)$$

A partir das equações (2.11) e (2.12), pode-se identificar a taxa de crescimento intrínseco \tilde{r}_i associada à aptidão média, a qual pode ser expressa na forma da equação

$$\tilde{r}_i(\bar{y}_i) = r_{\max} - \frac{1}{2} \ln \left(\frac{\sigma_y^2 + \sigma_w^2}{\sigma_w^2} \right) - \frac{(\bar{y}_i - \theta)^2}{2(\sigma_w^2 + \sigma_y^2)}. \quad (2.13)$$

As curvas para \tilde{r}_i e K_i podem ser observadas na figura 3.

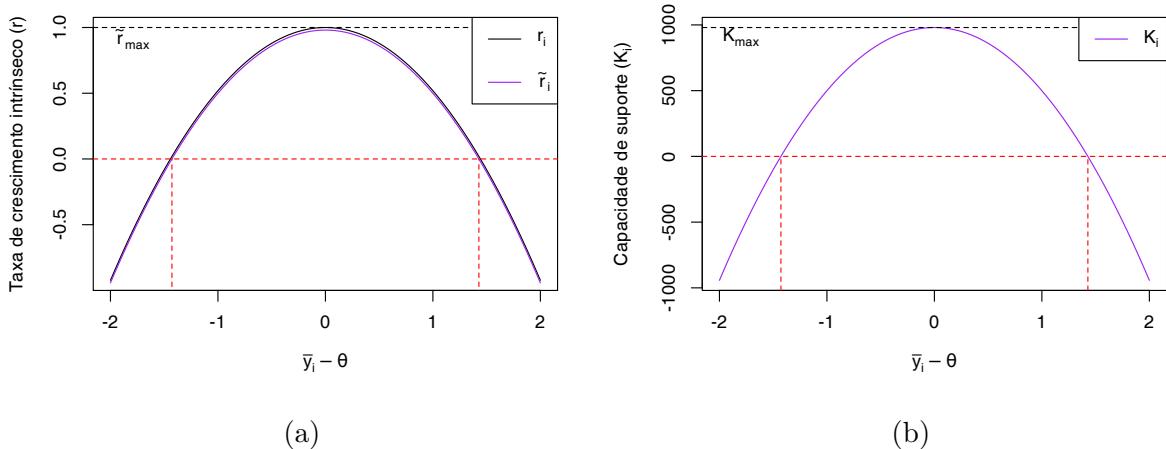


Figura 3 – Taxa de crescimento intrínseco a e capacidade de suporte b para diferentes valores de adequação ambiental $|\bar{y}_i - \theta|$. Os valores de parâmetros utilizados nessas curvas são $r_{\max} = 1$, $\sigma_w = 1$ e $\sigma_y = 0.2$ (os mesmos utilizados na simulação). Na figura a, r_i é a taxa de crescimento intrínseco associada a uma população homogênea (sem variação intraespecífica), conforme equação (2.6), e \tilde{r}_i é a taxa de crescimento intrínseco média associada a uma população com distribuição gaussiana do valor do atributo y_i , conforme a equação (2.13). As linhas tracejadas vermelhas indicam os limites de tolerância ambiental das espécies. Os valores negativos de K mostrados no gráfico ocorrem onde a condição ambiental é inadequada à sobrevivência da espécie.

O parâmetro de tolerância ambiental, σ_w , foi definido como $\sigma_w = 1$, de modo que a condição ambiental é medida em termos de σ_w . Contudo, no modelo, o parâmetro σ_w não representa a tolerância total de uma espécie. Como pode ser observado na figura 3, tanto a taxa de crescimento intrínseca, r_i , quanto a capacidade de suporte associada, K_i , são positivas sobre um intervalo de valores mais amplo. Na ausência de outras espécies

competidoras, o intervalo de condições ambientais em que uma espécie i é capaz de sobreviver pode ser determinado tomando $\tilde{r}_i > 0$. Após algumas manipulações algébricas, é possível mostrar que o intervalo de tolerância ambiental das espécies é delimitado por

$$|y - \theta| < \sqrt{2(\sigma_w^2 + \sigma_y^2)} \sqrt{1 - \frac{1}{2} \ln \left(\frac{\sigma_w^2 + \sigma_y^2}{\sigma_w^2} \right)} = \sigma_{tol}. \quad (2.14)$$

Note que essa equação assume que a espécie possui um único valor de ótimo ambiental y . Portanto, σ_{tol} representa a tolerância ambiental total para uma espécie que possui um valor único de ótimo ambiental (uma população). Entretanto, diferentes populações de uma mesma espécie podem ter valores distintos de ótimo ambiental, de modo que uma mesma espécie com populações espacialmente desagregadas pode, em teoria, ocupar uma faixa de condições ambientais ainda mais ampla que σ_{tol} . Além disso, para $\sigma_w^2 \gg \sigma_y^2$, o intervalo de tolerância ambiental das espécies pode ser aproximado pela relação $|y - \theta| \lesssim \sqrt{2(\sigma_w^2 + \sigma_y^2)}$.

No modelo adotado nesse trabalho, também foi incorporada uma **abundância mínima** necessária para a sobrevivência de uma população N_{min} , a qual foi fixada em $N_{min} = 1$, de modo que a abundância N_i é contabilizada em unidades de abundância mínima. Todavia, esta não representa, necessariamente, 1 indivíduo³. Assim, quando $N_i < N_{min} = 1$, a população é considerada extinta no sítio e sua abundância local é redefinida para $N_i = 0$.

Por fim, o modelo também apresenta uma **abundância inicial**, $N_{initial}$, a qual representa a abundância inicial de uma população que coloniza um novo sítio, assim como a abundância inicial da espécie ancestral no início da simulação. A abundância inicial foi definida como $N_{initial} = N_{min} = 1$. Assim, as colonizações só são bem sucedidas quando a população incipiente é capaz de se manter ou aumentar sua abundância no sítio recém colonizado, frente à condição ambiental e à (possível) presença de outras espécies no novo sítio, ou seja, quando $\frac{dN_i}{dt}(N_i = 1) \geq 0$.

2.4 Dispersão

No **gen3sis**, o módulo de dispersão avalia a conexão entre as populações em diferentes sítios e realiza a colonização de novos sítios pelas espécies. Para avaliar a conexão entre as populações, é computado se há conexão entre os sítios já ocupados pela espécie. O critério de conexão é definido pelo usuário e geralmente é baseado na distância entre os sítios e na capacidade de dispersão das espécies. Os sítios entre os quais há conexão são agrupados no mesmo *cluster* (agrupamento), indicando que eles estão sujeitos a fluxo

³ Como em um modelo de crescimento populacional contínuo a abundância da população possui valores não inteiros, o valor $N_{min} = 1$ não representa um indivíduo, mas está associado a um tamanho populacional mínimo ou uma densidade populacional mínima necessária à sobrevivência da espécie.

gênico e, assim, que as populações desses sítios estão evoluindo em conjunto. Os sítios entre os quais não há conexão são agrupados em *clusters* distintos. Populações agrupadas em diferentes *clusters* estão sujeitas a uma evolução de atributos independente, e tem um incremento no seu índice de divergência em relação às populações de outros *clusters*.

Em segundo lugar, é realizada a colonização de novos sítios. Para isso, é avaliada a conexão entre cada sítio ocupado pela espécie e os sítios não ocupados. Os sítios não ocupados que estão conectados a pelo menos um sítio ocupado são colonizados por uma população inicial⁴. A origem de cada população incipiente é vinculada a um dos sítios ocupados com que o sítio colonizado manteve conexão. O processo de dispersão, incluindo tanto a avaliação da conexão entre populações como a colonização de novos sítios, é iterado para todas as espécies a cada passo temporal (HAGEN *et al.*, 2021).

O meio pelo qual a dispersão foi incorporada ao modelo eco-evolutivo deste trabalho foi através de um critério de dispersão estocástico, similar ao utilizado originalmente no pacote **gen3sis** (HAGEN *et al.*, 2021). Nele, a probabilidade de dispersão entre dois sítios é dada por um *kernel* de dispersão (NATHAN *et al.*, 2012), que consiste em uma função representando a probabilidade de dispersão de um sítio para outro com base na distância entre eles.

De acordo com Nathan *et al.* (2012), *kernels* de dispersão leptocúrticos e *fat-tailed* costumam ser mais adequados para representar a dispersão de organismos vivos, pois representam melhor as **LDDs** (*Long Distance Dispersal*), que consistem em eventos de dispersão de longa distância. No entanto, pela sua maior familiaridade e simplicidade, modelos de *kernels* gaussiano e exponencial (*thin-tailed*) estão na base da teoria ecológica clássica e de modelos de dinâmica populacional espacializada, baseados em equações de reação-difusão. Neste trabalho, foi utilizado um *kernel* de dispersão baseado no *kernel* exponencial (*thin-tailed*), escolhido pela sua simplicidade e também por ter uma cauda com decaimento mais lento que o popular *kernel* gaussiano.

Seguindo essa abordagem, a probabilidade de dispersão entre dois sítios, k e l , é uma função da distância entre eles, $r_{kl} = r$. Para um *kernel* de dispersão exponencial, com taxa de dispersão D , a densidade de probabilidade é por

$$f(k, l) = f(r) = \frac{1}{D} \exp\left(-\frac{r}{D}\right). \quad (2.15)$$

A definição do *kernel* de dispersão acima não segue a definição formal dada por Nathan *et al.* (2012) para um *kernel* bidimensional, mas é compatível com a implementação de dispersão realizada por Hagen *et al.* (2021) no pacote **gen3sis**. Na implementação do **gen3sis**, a dispersão entre sítios ocorre somente nos sentidos de **colonização** e **fluxo**

⁴ Tanto nas configurações originais do **gen3sis** como nesse trabalho, os sítios colonizados recebem uma população colonizadora com abundância inicial $N_{\text{initial}} = 1$, mas a colonização não acarreta uma perda de população no sítio fonte.

gênico, sem efetiva troca de indivíduos entre os sítios. No processo de colonização, um sítio desocupado (l) pela espécie focal pode ser ou não alcançado por dispersores vindos de um sítio fonte (k). Caso seja alcançado, uma população inicial mínima é estabelecida (ver seção 2.3) e passa a se desenvolver no sítio l . Já no processo de fluxo gênico, a dispersão é computada da mesma forma, mas no sentido de **conexão entre as populações** localizadas em diferentes sítios (nesse caso, k e l).

A função distribuição de probabilidade associada à equação (2.15) é dada por

$$F(r) = \int_0^r f(x) dx = 1 - \exp\left(-\frac{r}{D}\right). \quad (2.16)$$

De acordo com essa implementação, a dispersão entre os sítios k e l é computada a partir do sorteio de uma distância d , seguindo a função de densidade de probabilidade (2.15). A dispersão ocorre quando a distância d sorteada é maior ou igual à distância entre os sítios r (HAGEN *et al.*, 2021), ou seja,

$$d \geq r.$$

Assim, a probabilidade de dispersão entre dois sítios a uma distância r , $P(d \geq r)$, é, efetivamente, dada pelo complemento da função distribuição de probabilidade

$$P(d \geq r) = 1 - F(r) = \exp\left(-\frac{r}{D}\right). \quad (2.17)$$

Note, contudo, que nesse modelo de dispersão a probabilidade de dispersão da população k para o sítio l independe do seu tamanho populacional. Ou seja, a probabilidade de uma população colonizar um novo sítio a uma distância r não depende da sua abundância local N_k , de modo que a chance de uma espécie abundante em k colonizar l é a mesma de uma espécie rara.

Na Teoria Neutra da Biodiversidade e da Biogeografia, Hubbell (2001) incorpora o efeito das abundâncias regionais das espécies na sua probabilidade de recrutar indivíduos em diferentes sítios (VOLKOV *et al.*, 2003; HUBBELL, 2001), de modo que espécies com maior abundância relativa na metacommunidade têm maior probabilidade de serem recrutadas como imigrantes nas comunidades locais. O efeito da abundância regional na dispersão também promove o **efeito de massas**, que ocorre quando espécies conseguem manter populações em sítios com condições desfavoráveis por meio da dispersão provinda de sítios favoráveis nas quais elas são abundantes (RECH *et al.*, 2019). Dessa forma, fui motivado a desenvolver um mecanismo teórico pelo qual espécies mais abundantes tenham maior probabilidade de colonizar novos sítios que as espécies raras.

Para isso, parti da ideia de que a equação (2.17) representa a probabilidade de dispersão associada a 1 unidade populacional⁵, $N = 1$, e que o tamanho da população

⁵ Veja a discussão sobre unidade populacional, população mínima e número de indivíduos ao final da seção 2.3.

do sítio fonte, $N_k = N$, representa o **número de tentativas de colonização** do sítio l pela população do sítio k . Para que a colonização de l por k seja bem sucedida, basta que apenas uma dessas N tentativas seja bem sucedida. Logo, basta que a **máxima distância sorteada** de N sorteios seja maior que a distância r , $\max(\{d\}_N) \geq r$. Portanto, a probabilidade de colonização é dada pela **distribuição do máximo** de N sorteios $\max(\{d\}_N)$.

Para determinar essa distribuição, considere $f(r)$ a função densidade de probabilidade associada ao *kernel* de dispersão e $F(r)$ sua função de distribuição. De acordo com Arnold, Balakrishnan e Nagaraja (2008), a **função densidade de probabilidade do máximo de um conjunto de n sorteios seguindo a distribuição $f(r)$** ⁶, denotada por f_n , é dada pela equação

$$f_n(r) = n F(r)^{n-1} f(r) . \quad (2.18)$$

Já a função distribuição de probabilidade associada, $F_n(r)$, é dada por

$$F_n(r) = \int_0^r f_n(x) dx = \int_0^r n F(x)^{n-1} f(x) dx . \quad (2.19)$$

Como F é uma primitiva de f , isto é, $\frac{dF(x)}{dx} = f(x)$. É possível resolver essa equação a partir de uma simples substituição: $u(x) = F(x)$ e $du = f(x)dx$. Logo,

$$\int n F(x)^{n-1} f(x) dx = \int n u^{n-1} du = n \frac{u^n}{n} + C = u^n + C .$$

Retornando a substituição e aplicando os limites de integração,

$$F_n(r) = [(F(x))^n]_0^r = F(r)^n - F(0)^n = F(r)^n - 0 ,$$

obtém-se a equação

$$F_n(r) = F(r)^n . \quad (2.20)$$

Logo, de acordo com esse raciocínio, a probabilidade de dispersão para a função F associada ao *kernel* exponencial (equação (2.16)) com um número de tentativas de dispersão $n = N$, onde N é a abundância da espécie no sítio fonte, k , é dada pela equação

$$\begin{aligned} P_N(d \geq r) &= 1 - F_{n=N}(r) \\ &= 1 - \left[1 - \exp\left(-\frac{r}{D}\right)\right]^N . \end{aligned} \quad (2.21)$$

Assim, a equação (2.21) descreve a probabilidade de colonização (e também de fluxo gênico) do sítio l pela população no sítio k , onde N representa a abundância da

⁶ Cada sorteio representa uma tentativa de colonização.

espécie no sítio k e r a distância entre os sítios k e l . Denominei essa formulação de *kernel* de **N-exponencial**.

A partir da formulação desse *kernel* de dispersão baseado na abundância, foi recuperado o efeito da abundância regional da espécie na probabilidade de colonização de novos sítios (VOLKOV *et al.*, 2003; HUBBELL, 2001), de modo que espécies mais abundantes apresentam maior chance de colonizar sítios desocupados em relação às espécies raras. Esse efeito é ilustrado nas curvas da figura 4. Utilizando esse *kernel*, foi obtido um aumento da sofisticação e do realismo do modelo de dispersão – embora ele ainda limite a conexão ecológica entre sítios somente à colonização de novos sítios e não realize, de fato, uma transferência populacional entre sítios (HAGEN *et al.*, 2021).

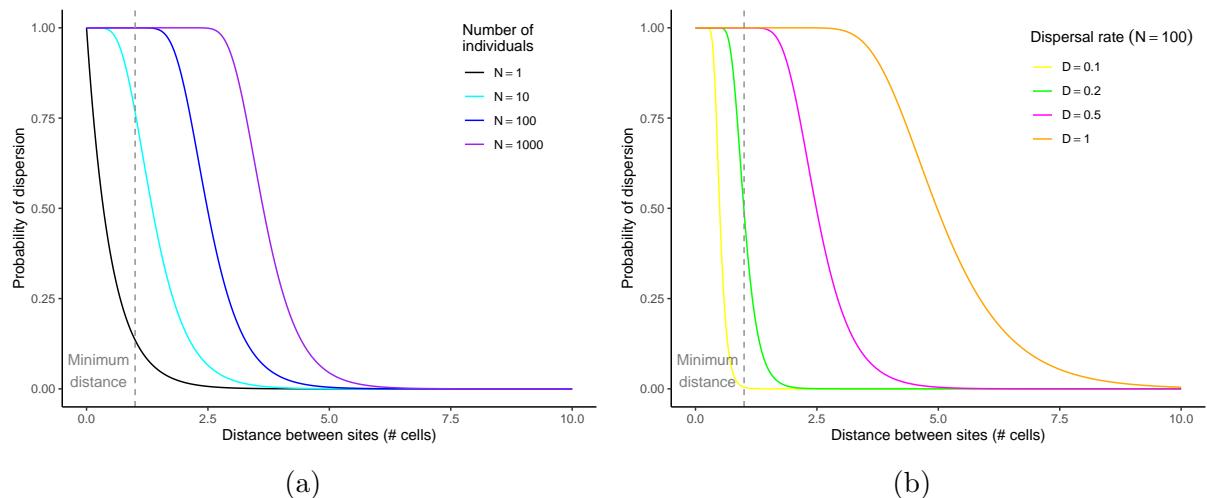


Figura 4 – Decaimento da probabilidade de dispersão com a distância entre sítios para um *kernel* N-exponencial. A figura 4a mostra o comportamento da probabilidade de dispersão com a distância entre sítios para diferentes abundâncias, com taxa de dispersão fixa em $D = 0.5$. A figura 4b mostra o comportamento da probabilidade de dispersão com a distância entre sítios para diferentes taxas de dispersão, com abundância fixa em $N = 100$. A linha vertical cinza tracejada representa a menor distância entre os sítios na simulação ($r = 1$).

2.5 Evolução de atributos

No **gen3sis**, a evolução dos atributos ocorre dentro do módulo *Evolution*. Dentro desse módulo, a evolução é realizada de forma independente para cada agrupamento de populações (sítios) de cada espécie. Assim, o novo valor de atributo de cada população de uma espécie é calculado com base no seu próprio valor de atributo e no valor de atributo das demais populações pertencentes ao mesmo agrupamento, no passo temporal em questão (ou seja, com fluxo gênico). Esse procedimento é iterado sobre todas as espécies e sobre todos os agrupamentos de populações de cada espécie, a cada passo temporal.

Na proposta básica do pacote, a evolução do atributo das populações de um mesmo

agrupamento é uniforme, não dependendo da distância entre os sítios, da divergência entre as populações nem das condições ambientais locais. O novo valor de atributo é calculado como a média do valor de atributo dos sítios do mesmo agrupamento (*cluster*), ponderado pela abundância das populações e, por fim, somado a uma variação estocástica no atributo das diferentes populações, associada a mutações e deriva genética (HAGEN *et al.*, 2021). O processo pode ser representado pela equação

$$y_k(t+1) = \frac{\sum_{l \in C} N_l y_l(t)}{\sum_{l \in C} N_l} + \sigma_{\bar{y}} \xi_k(t). \quad (2.22)$$

Dentro do modelo eco-evolutivo deste trabalho, considerei a existência de dois atributos evolutivos contínuos. O primeiro é uma **condição ambiental ótima**, ou **ótimo ambiental**, y , o qual está diretamente relacionado ao **nicho ecológico** da espécie. E o segundo é um atributo neutro, z , que inicia com o mesmo valor do ótimo ambiental, mas não está vinculado à dinâmica ecológica.

No modelo, o atributo y influencia diretamente a dinâmica ecológica da população determinando sua aptidão, W , através de uma relação com a taxa de crescimento intrínseco, r , conforme a equação (2.6)⁷

$$r_i(y_i, \theta) = r_{\max} - \frac{(y_i - \theta)^2}{2\sigma_w^2}.$$

Essa equação mostra que a influência de y é modulada pelo ambiente. Ou seja, o crescimento populacional é favorecido, localmente, quando y se aproxima da condição ambiental local, θ , a qual pode variar e, de fato, varia ao longo da paisagem.

Assim, o valor do atributo y de cada população está sujeito a uma força de seleção a nível local. Contudo, a seleção só ocorre em uma população quando há variabilidade fenotípica associada ao genótipo. A variabilidade no fenótipo resulta em um desempenho diferencial de acordo com o valor de atributo, y . Por sua vez, a característica selecionada só é herdada pela prole na proporção em que a variabilidade fenotípica está correlacionada com a variabilidade genotípica (aditiva) da população (WALSH e LYNCH, 2018). Para desenvolver o modelo, tratei inicialmente da evolução do atributo y ocorrendo em um sítio isolado.

Formulei o modelo evolutivo utilizado nesse trabalho a partir da *Breeder's equation* (LUSH, 1937; WALSH e LYNCH, 2018), com uma abordagem semelhante à desenvolvida por Lande (1976) para modelos populacionais discretos e compatível com a formulação para modelos populacionais contínuos utilizada por McPeek (2017).

⁷ Veja a seção 2.3 para mais detalhes.

A *Breeder's equation*⁸ expressa a resposta intergeracional do fenótipo médio de uma população a uma força seletiva. Na equação

$$\Delta\bar{y} = h^2 S , \quad (2.23)$$

$\Delta\bar{y}$ representa a variação na média do atributo da espécie entre a geração filha e a geração parental, S representa a seleção, ou seja, a diferença no valor médio de y da geração parental decorrente das diferenças de aptidão relacionadas ao atributo y . Já h^2 representa a herdabilidade do atributo y , que consiste na razão entre a variância genética aditiva σ_a^2 e a variância fenotípica σ_y^2 , conforme a equação

$$h^2 = \frac{\sigma_a^2}{\sigma_y^2} . \quad (2.24)$$

Para uma população com uma distribuição de fenótipos contínua $f(y)$, e *fitness* $W(y)$, a seleção S assume a forma da expressão

$$S = \frac{1}{\bar{W}} \int_{-\infty}^{\infty} W(y) f(y) dy - \bar{y} = \int_{-\infty}^{\infty} w(y) f(y) dy - \bar{y} . \quad (2.25)$$

Onde $w(y)$ é o *fitness* relativo, definido com $w(y) = W(y)/\bar{W}$.

Assim como Lande (1976), assumi que a população apresenta uma distribuição de atributos gaussiana, conforme a equação

$$f(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_y} \exp\left[-\frac{(y-\bar{y})^2}{2\sigma_y^2}\right] , \quad (2.26)$$

com média \bar{y} e variância σ_y (a variância fenotípica). Na seção 2.3, mostrei que a aptidão W é dada pelo modelo ecológico, conforme a equação (2.8),

$$\ln(W_i) = r_i - \frac{1}{K_r} \sum_j^S N_j = r_{\max} - \frac{(y_i - \theta)^2}{2\sigma_w^2} - \frac{1}{K_r} \sum_j^S N_j .$$

Mostrei também que a aptidão média da população \bar{W} pode ser obtida a partir da equação (2.9) e é dada por (2.10),

$$\bar{W}(\bar{y}) = \frac{\sigma_w}{\sqrt{\sigma_w^2 + \sigma_y^2}} \exp\left[r_{\max} - \frac{(\bar{y} - \theta)^2}{2(\sigma_w^2 + \sigma_y^2)} - \frac{1}{K_r} \sum_j^S N_j\right] .$$

Tomando a razão entre as expressões (2.8) e (2.10), para a aptidão e a aptidão média, obtém-se a aptidão relativa:

$$\begin{aligned} w(y) &= \frac{W(y)}{\bar{W}} = \frac{\exp\left[r_{\max} - \frac{(y-\theta)^2}{2\sigma_w^2} - \frac{1}{K_r} \sum_j^S N_j\right]}{\frac{\sigma_w}{\sqrt{\sigma_w^2 + \sigma_y^2}} \exp\left[r_{\max} - \frac{(\bar{y}-\theta)^2}{2(\sigma_y^2 + \sigma_w^2)} - \frac{1}{K_r} \sum_j^S N_j\right]} \\ &= \frac{\sqrt{\sigma_w^2 + \sigma_y^2}}{\sigma_w} \exp\left[\frac{(\bar{y} - \theta)^2}{2(\sigma_y^2 + \sigma_w^2)} - \frac{(y - \theta)^2}{2\sigma_w^2}\right] . \end{aligned} \quad (2.27)$$

⁸ Em tradução livre: Equação do criador [de animais].

Substituindo as expressões para $w(y)$, (2.27), e $f(y)$, (2.26), em (2.25),

$$S = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_y} \int_{-\infty}^{\infty} y \frac{\sqrt{\sigma_w^2 + \sigma_y^2}}{\sigma_w} \exp \left[\frac{(\bar{y} - \theta)^2}{2(\sigma_w^2 + \sigma_y^2)} - \frac{(y - \theta)^2}{2\sigma_w^2} \right] \exp \left[-\frac{(y - \bar{y})^2}{2\sigma_y^2} \right] dy ,$$

foi obtida a equação

$$S = -\frac{\sigma_y^2}{\sigma_w^2 + \sigma_y^2} (\bar{y} - \theta) . \quad (2.28)$$

Assim, a variação esperada, a nível local, para a média do atributo, é dada pela equação

$$\Delta\bar{y} = h^2 S = -h^2 \frac{\sigma_y^2}{\sigma_w^2 + \sigma_y^2} (\bar{y} - \theta) , \quad (2.29)$$

um resultado equivalente ao obtido por Lande (1976) para populações com crescimento discreto.

Pode-se tomar o limite diferencial para a equação (2.29) na forma de uma equação diferencial estocástica, onde $\sigma_{\bar{y}}$ é o desvio padrão do atributo médio, \bar{y} , ao longo de uma geração e dW é uma diferencial estocástica, representando um processo de Wiener⁹. Nessa equação, o termo determinístico representa a seleção do atributo, enquanto o termo estocástico representa a **deriva genética**,

$$d\bar{y} = h^2 \frac{\sigma_y^2}{\sigma_w^2 + \sigma_y^2} (\theta - \bar{y}) dt + \sigma_{\bar{y}} dW .$$

A variância da média ($\sigma_{\bar{y}}$) de um atributo (y) com distribuição gaussiana é dada pela razão entre a variância amostral (dos indivíduos) e o número de amostras (tamanho de população efetivo), N . Contudo, como esse processo de “reamostragem” é intergeracional, $\sigma_{\bar{y}}^2$ representa a fração herdável da variância do atributo. Assim, a “variância amostral” não é a variância fenotípica σ_y^2 em si, mas a sua componente herdável: a variância genética aditiva, σ_a^2 (HARMON, 2019). Da equação (2.24), temos que $\sigma_a^2 = h^2\sigma_y^2$. Portanto, a variância do atributo médio da população $\sigma_{\bar{y}}$ é dada pela equação (LANDE, 1976).

$$\sigma_{\bar{y}}^2 = \frac{h^2\sigma_y^2}{N} . \quad (2.30)$$

Assim, foi obtida a expressão para a evolução do atributo y , inteiramente em termos dos parâmetros do modelo: σ_w , σ_y , h^2 , θ e N , conforme a equação

$$d\bar{y} = \frac{h^2\sigma_y^2}{\sigma_w^2 + \sigma_y^2} (\theta - \bar{y}) dt + \sqrt{\frac{h^2\sigma_y^2}{N}} dW . \quad (2.31)$$

Note que essa equação, referente à evolução do atributo de uma população isolada, em um sítio com condição ambiental θ e tamanho populacional N , corresponde a um modelo

⁹ Uma processo browniano padronizado, com média 0 e variância 1. Veja a seção 1.3.2.2 da Introdução.

Ornstein-Uhlenbeck de evolução de atributos, comumente utilizado para descrever uma seleção estabilizadora (WALSH e LYNCH, 2018), com força de seleção $\alpha_S = \frac{h^2 \sigma_y^2}{\sigma_w^2 + \sigma_y^2}$, ótimo evolutivo θ e parâmetro de deriva $\sigma_{\bar{y}} = \sqrt{\frac{h^2 \sigma_y^2}{N}}$.

O modelo desenvolvido até a equação (2.29) se baseia nas hipóteses básicas de gerações discretas e sem sobreposição, o que conflita com o modelo de crescimento populacional contínuo adotado na seção 2.3. Embora isso torne a construção desse modelo eco-evolutivo não inteiramente formal, entendemos que ele é uma boa aproximação e carrega a essência da fenomenologia que buscamos representar. Além disso, o modelo final é consistente com o formalismo desenvolvido por McPeek (2017).

Como o atributo neutro, z , não sofre seleção, sua evolução ocorre somente por deriva e mutação. Dessa forma, a dinâmica da média desse atributo é dada simplesmente por

$$d\bar{z} = \sqrt{\frac{h^2 \sigma_z^2}{N}} dW . \quad (2.32)$$

A equação (2.31) caracteriza a evolução de atributos em um sítio isolado. O efeito das demais populações conectadas por dispersão sobre a evolução dos atributos será considerado nas seções a seguir.

2.5.1 Agrupamento (*clustering*) de populações e matriz de divergência

No *gen3sis*, um *cluster* ou agrupamento consiste em um conjunto de populações entre as quais há fluxo gênico. Ou seja, *clusters* são conjuntos de populações da mesma espécie conectadas por dispersão, onde essa conexão é determinada com base no modelo de dispersão (seção 2.4).

Um *cluster* é definido pelo conjunto de todas as populações de uma espécie em que qualquer dessas populações está conectada por dispersão¹⁰ a pelo menos uma outra população do conjunto.

À medida que a dinâmica avança no tempo, as populações podem ser conectadas e desconectadas. A existência de fluxo gênico intermitente, permite que as populações possam acumular divergências evolutivas e incompatibilidades que são computadas através de uma matriz de divergência, χ , utilizada no cômputo do processo de especiação. No modelo adotado nesse trabalho, a divergência ξ é uma matriz que representa o tempo de divergência genética acumulado entre as populações de uma espécie, ou seja, o tempo que as populações passaram evoluindo de forma independente (sem fluxo gênico). Entrarei em maior detalhe sobre como a divergência é calculada na sessão 2.6.

¹⁰ Conforme discutido na seção 2.4, duas populações estão conectadas por dispersão em um certo passo temporal se a distância d , sorteada de acordo com o *kernel* de dispersão, for maior que a distância r separando os sítios das duas populações.

Na proposta original de evolução de atributos do **gen3sis**, a evolução de atributos é descrita pela equação (2.22)

$$y_k(t+1) = \frac{\sum_{l \in C} N_l y_l(t)}{\sum_{l \in C} N_l} + \sigma_{\bar{y}} \xi_k(t).$$

Quando a divergência entre duas populações aumenta, é esperado que o acúmulo de incompatibilidades reduza a efetividade do fluxo gênico entre elas (ORR e TURELLI, 2001; COYNE e ORR, 2004). Dessa forma, pode-se esperar que, à medida que duas populações acumulam divergências, a contribuição do fluxo gênico para a homogeneização dos seus atributos, no caso de haver contato entre elas, será reduzido. Para expressar isso, o modelo foi modificado para que o fluxo gênico entre as populações seja ponderado pela divergência entre elas. No modelo, a compatibilidade (viabilidade de fluxo gênico) G_{kl} entre duas populações k e l , com divergência χ_{kl} , é dada por

$$G_{kl} = \begin{cases} 1 - \frac{\chi_{kl}}{T_{sp}}, & \chi_{kl} < T_{sp} \\ 0, & \chi_{kl} \geq T_{sp} \end{cases}. \quad (2.33)$$

De acordo com essa expressão, a compatibilidade total, representada por $G_{kl} = 1$, ocorre quando não há divergência acumulada entre as populações e decai linearmente até 0, quando a divergência atinge $\chi_{kl} = T_{sp}$, que representa o valor gatilho para especiação (interrupção total do fluxo gênico). Essa equação também pode ser representada pela expressão

$$G_{kl} = \max \left(0, 1 - \frac{\chi_{kl}}{T_{sp}} \right). \quad (2.34)$$

Incorporando a compatibilidade na equação do **gen3sis** para o fluxo gênico no agrupamento (termo determinístico da equação (2.22)), é obtida a expressão

$$y_k(t+1) = \frac{\sum_{l \in C} G_{kl} N_l y_l(t)}{\sum_{l \in C} G_{kl} N_l} = \sum_{l \in C} g_{kl} y_l(t). \quad (2.35)$$

Onde o peso de abundância-compatibilidade, g_{kl} , é definido como

$$g_{kl} = \frac{G_{kl} N_l}{\sum_{l \in C} G_{kl} N_l} \quad (2.36)$$

e, portanto, satisfaz a relação $\sum_{l \in C} g_{kl} = 1$.

Manipulando a equação (2.35):

$$\begin{aligned} y_k(t+1) - y_k(t) &= \sum_{l \in C} g_{kl} y_l(t) - y_k(t) \\ \Delta y_k(t) &= \sum_{l \in C} g_{kl} y_l(t) - \sum_{l \in C} g_{kl} y_k(t) \\ &= \sum_{l \in C} g_{kl} [y_l(t) - y_k(t)] . \end{aligned}$$

Reescrevendo essa expressão na forma diferencial, foi obtida a equação

$$dy_k(t) = \sum_{l \in C} g_{kl} [y_l(t) - y_k(t)] \delta_{kl} dt . \quad (2.37)$$

Onde δ_{kl} representa a taxa com que o fluxo gênico ocorre entre populações em decorrência da conectividade entre os sítios k e l .

Para simplificar o modelo, foi adotado o pressuposto da formulação original do *gen3sis* de que todos os sítios associados ao mesmo *cluster* estão igualmente conectados, logo $\delta_{kl} = \delta$. Além disso, foi estabelecido que $\delta = 1$, simplificando a expressão para

$$dy_k(t) = \sum_{l \in C} g_{kl} [y_l(t) - y_k(t)] dt . \quad (2.38)$$

A condição de $\delta = 1$ representa que, caso as populações estejam em contato e não possuam divergências acumuladas, elas têm seus valores de atributo completamente homogeneizados após uma geração.

2.5.2 Seleção local e seleção regional

Nas duas últimas seções, foram discutidos dois mecanismos básicos de evolução de atributos. O primeiro é a seleção do atributo a nível local, atuando sobre cada população associada a um sítio. Esse primeiro mecanismo decorre do recrutamento diferencial da variabilidade fenotípica, e genética, nessa população, o qual direciona a variação no valor médio do atributo (ótimo ambiental) para o valor da condição ambiental local.

O segundo mecanismo é o fluxo gênico, através do qual o atributo de cada população é homogeneizado com o atributo de todas as outras populações associadas ao mesmo agrupamento (*cluster*). Nesse processo, populações com maior abundância contribuem proporcionalmente mais para o valor do atributo das demais populações. Esse processo atua como um mecanismo de **seleção regional** do atributo: para um dado agrupamento de populações, o valor médio do atributo é deslocado em direção ao valor do atributo das populações mais bem sucedidas, sendo restringido, contudo, pela compatibilidade entre as populações (viabilidade de fluxo gênico).

Assim, o processo de seleção ocorre em duas escalas, local e regional, que contrabalançam a adaptação local com a adequação regional das populações. Assim, essas duas

escalas do processo de seleção são responsáveis por intermediar o efeito da heterogeneidade da paisagem sobre a evolução dos atributos das espécies.

Adicionalmente, a variação estocástica do valor médio do atributo decorre do tamanho finito das populações (LANDE, 1976), apresentando maior importância na evolução de atributos de populações pequenas. A variância aditiva na população $h^2\sigma_y^2$ (fenotípica e genotípica) é assumida constante, o que representa uma aproximação de equilíbrio em que a variabilidade populacional é mantida através de mutações ao longo das gerações.

A reunião desse conjunto de mecanismos é responsável pela evolução de atributos no modelo eco-evolutivo adotado nesse trabalho. A evolução de atributos para a população de uma espécie i em um sítio k é representada pela equação

$$\underbrace{\frac{dy_{i,k}}{dt}}_{\text{Mudança no atributo}} = \underbrace{\frac{h^2\sigma_y^2}{\sigma_w^2 + \sigma_y^2} (\theta_k - y_{i,k}) dt}_{\text{Seleção local}} + \underbrace{\sum_{l \in \text{Cluster}} g_{i,kl} (y_{i,l} - y_{i,k}) dt}_{\text{Fluxo gênico}} + \underbrace{\sqrt{\frac{h^2\sigma_y^2}{N_{i,k}}} dW_{i,k}}_{\text{Mutação e deriva}} . \quad (2.39)$$

As mesmas considerações também se aplicam ao atributo neutro, denotado por z , com a diferença de que ele, por não ter relação com a dinâmica ecológica, não está sob nenhuma forma de seleção, sendo expresso pela equação

$$\underbrace{\frac{dz_{i,k}}{dt}}_{\text{Mudança no atributo}} = \underbrace{\sum_{l \in \text{Cluster}} g_{i,kl} (z_{i,l} - z_{i,k}) dt}_{\text{Fluxo gênico}} + \underbrace{\sqrt{\frac{h^2\sigma_z^2}{N_{i,k}}} dW_{i,k}}_{\text{Mutação e deriva}} . \quad (2.40)$$

2.6 Espesiação

O módulo de especiação do `gen3sis` itera sobre todas as espécies. Primeiro, as populações (sítios) são agrupadas em *clusters* (agrupamentos), de acordo com os resultados do processo de dispersão entre os sítios ocupados pela respectiva espécie, conforme discutido na seção 2.4. Com base no resultado dessa classificação, é computada a matriz de divergência, χ , entre as populações. Por fim, a matriz de divergência é utilizada para computar eventos de especiação. No caso de ocorrer um evento de especiação, são atualizadas a filogenia e a lista de espécies, reclassificando as populações divergentes como uma espécie nova.

O cômputo da divergência entre duas populações, k e l , ao longo do tempo, se dá de acordo com o seguinte procedimento. Quando classificadas no mesmo agrupamento, e se não possuem divergência prévia, elas mantêm sua divergência nula, $\chi_{kl} = 0$; caso possuam divergência prévia, $\chi_{kl} > 0$, essa divergência é subtraída de 1. Se as duas populações são classificadas em agrupamentos diferentes, a divergência entre elas tem incremento de 1. O processo de especiação ocorre como resultado do isolamento das populações ao longo do

tempo: quando a menor divergência entre dois conjuntos de populações agrupadas atinge um valor gatilho, definido como T_{sp} , que representa o tempo mínimo de isolamento entre populações necessário para a ocorrência de uma especiação (cladogênese).

Embora o `gen3sis` permita a inclusão de outros fatores no cálculo da divergência, como informações de atributos e de condições ambientais, essa não é a implementação padrão do pacote e optamos por manter a formulação original para o cômputo da divergência. Esta segue estritamente a descrição acima, sendo baseada exclusivamente no processo de isolamento geográfico entre populações. Portanto, nesse modelo, o processo de especiação é um resultado exclusivo do isolamento geográfico das populações ao longo do tempo (especiação alopátrica). Por sua vez, a conexão entre as populações em diferentes sítios é definida pelos resultados de dispersão entre sítios ocupados (ver seção 2.4), o que torna o processo de especiação altamente vinculado e dependente do processo de dispersão.

2.6.1 Relações entre dispersão e especiação

Para entender melhor os vínculos que o modelo de dispersão gera sobre o processo de especiação em nosso modelo, analisei um sistema simplificado, composto por apenas dois sítios, **A** e **B**, separados por uma distância d , possuindo populações de tamanho fixo N_A e N_B , respectivamente.

Seja r_A uma distância de dispersão alcançada pelo sítio **A**, dada pela função densidade de probabilidade f_n , $r_A \sim f_n(r_A; D, N_A)$, onde D representa a taxa de dispersão e f_n segue a expressão

$$f_n(r) = n F(r)^{n-1} f(r) ,$$

deduzida na seção 2.4. Analogamente, a distância de dispersão associada ao sítio **B** é dada por $r_B \sim f_n(r_B; D, N_B)$.

Sendo d a distância entre os sítios, da equação (2.20) obtém-se que a probabilidade de dispersão de **A** para **B** é dada por

$$P(r_A \geq d) = 1 - P(r_A < d) = 1 - F_N(d; D, N_A) = 1 - (1 - e^{-d/D})^{N_A} .$$

Analogamente, a probabilidade de dispersão de **B** para **A** é dada por

$$P(r_B \geq d) = 1 - P(r_B < d) = 1 - F_N(d; D, N_B) = 1 - (1 - e^{-d/D})^{N_B} .$$

A conexão entre os sítios **A** e **B** acontece quando a população de pelo menos um deles consegue dispersar para o outro sítio. Portanto, a probabilidade de conexão entre

eles é dada por

$$\begin{aligned}
 P(r_A \geq d \text{ ou } r_B \geq d) &= \overbrace{P(r_A \geq d) \cdot P(r_B \geq d)}^{\mathbf{A} \leftrightarrow \mathbf{B}} + \overbrace{P(r_A < d) \cdot P(r_B \geq d)}^{\mathbf{A} \leftarrow \mathbf{B}} + \\
 &\quad \overbrace{P(r_A \geq d) \cdot P(r_B < d)}^{\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{B}} \\
 &= (1 - P(r_A < d))(1 - P(r_B < d)) + \\
 &\quad P(r_A < d)(1 - P(r_B < d)) + (1 - P(r_A < d))P(r_B < d) .
 \end{aligned}$$

Multiplicando os termos e simplificando, essa expressão é reduzida à equação

$$P(r_A \geq d \text{ ou } r_B \geq d) = 1 - P(r_A < d) \cdot P(r_B < d) . \quad (2.41)$$

Essa equação demonstra que a probabilidade de haver conexão entre as populações dos sítios, ou seja, de ao menos um indivíduo de alguma delas dispersar para o outro sítio, é igual a 1 menos a probabilidade de nenhuma delas dispersar para o outro sítio.

Utilizando as equações (2.20) e (2.21), obtém-se a relação

$$\begin{aligned}
 P(r_A \geq d \text{ ou } r_B \geq d) &= 1 - (F(d)^{N_A}) \cdot (F(d)^{N_B}) \\
 &= 1 - F(d)^{N_A + N_B} \\
 &= 1 - F_n(d; D, N_A + N_B) = 1 - F_n(d; D, N) \quad (2.42) \\
 &= 1 - (1 - e^{-d/D})^{N_A + N_B} = 1 - (1 - e^{-d/D})^N .
 \end{aligned}$$

Logo, a probabilidade de conexão entre as populações de dois sítios, **A** e **B**, a uma distância d , pode ser reduzida à probabilidade de dispersão, $P(r \geq d)$, da soma de suas populações, $N = N_A + N_B$. Nesse caso, r representa a distância associada à combinação das dispersões de **A** e **B**.

Define-se, então, a quantidade x como sendo o estado de conexão entre as populações **A** e **B**, de modo que x vale 0 quando não há conexão entre as populações e 1 quando há conexão. Assim, x é uma função da distância de dispersão r , conforme a equação

$$x = \begin{cases} 0, & r < d \\ 1, & r \geq d \end{cases} = \Theta(r; d) , \quad (2.43)$$

onde $\Theta(r; d)$ é a função degrau, ou Θ de Heaviside.

Como r é definido como um processo estocástico, x também é. Assim, é possível obter o valor esperado de x ,

$$\begin{aligned}
 \langle x \rangle &= 0 \cdot P(x = 0) + 1 \cdot P(x = 1) = 0 \cdot P(r < d) + 1 \cdot P(r \geq d) \\
 &= 0 \cdot P(r < d) + 1 \cdot (1 - P(r < d)) \\
 &= 1 - P(r < d) .
 \end{aligned} \quad (2.44)$$

Onde $P(r < d)$ e $P(r \geq d)$ são, respectivamente, as probabilidades de $r < d$ e $r \geq d$. Como esses eventos são complementares, tem-se que $P(r \geq d) = 1 - P(r < d)$.

A probabilidade $P(r < d)$ é dada pela função distribuição de probabilidade associada ao *kernel* de dispersão. Para o *kernel* de dispersão N-exponencial utilizado no modelo deste trabalho, essa probabilidade é dada por $P(r < d) = F_n(d; D, N) = (1 - e^{-d/D})^N$. Logo, o valor esperado do processo x , que representa a conexão entre os sítios **A** e **B**, é dado por

$$\langle x \rangle = 1 - (1 - e^{-d/D})^N. \quad (2.45)$$

A variação da divergência em uma geração, δ , entre as duas populações **A** e **B** é dada pela equação

$$\delta = \begin{cases} \gamma, & x = 0 \\ -\gamma, & x = 1 \end{cases} = \begin{cases} \gamma, & r < d \\ -\gamma, & r \geq d \end{cases}, \quad (2.46)$$

onde γ é uma constante representando o valor de divergência acumulada em uma geração.

Note que é possível reescrever a equação (2.46) da seguinte forma

$$\delta = (1 - x)\gamma - (x)\gamma = (1 - 2x)\gamma. \quad (2.47)$$

A divergência total entre as populações **A** e **B** após t gerações, $\chi(t)$ ¹¹, é dada pela integração da variação da divergência ao longo do tempo, conforme a equação

$$\chi(t) = \int_0^t \delta(t') dt'. \quad (2.48)$$

Como dispersão e fluxo gênico são aproximados por processos discretos no tempo, $\delta(t')$ também é um processo discreto, de forma que a integral em (2.48) pode ser substituída por um somatório,

$$\chi(t) = \sum_{t'=1}^t \delta(t'). \quad (2.49)$$

Manipulando a relação acima e usando a equação (2.45), é obtida a expressão

$$\begin{aligned} \langle \chi(t) \rangle &= \left\langle \sum_{t'=1}^t \delta(t') \right\rangle = \sum_{t'=1}^t \langle \delta(t') \rangle \\ &= \sum_{t'=1}^t \langle \gamma(1 - 2x(t')) \rangle = \sum_{t'=1}^t \gamma \langle 1 - 2x(t') \rangle = \sum_{t'=1}^t \gamma (\langle 1 \rangle - \langle 2x(t') \rangle) \\ &= \sum_{t'=1}^t \gamma (1 - 2\langle x(t') \rangle) = \sum_{t'=1}^t \gamma \left\{ 1 - 2 \left[1 - (1 - e^{-d/D})^N \right] \right\} \\ &= \sum_{t'=1}^t \gamma \left[2(1 - e^{-d/D})^N - 1 \right], \end{aligned} \quad (2.50)$$

(2.51)

¹¹ Nessa seção χ é usado para representar a divergência escalar entre as populações **A** e **B**: $\chi = \chi_{AB} = \chi_{BA}$, pois esses elementos simétricos são os únicos elementos não nulos da matriz de divergência. Em uma representação mais formal, χ é a matriz de divergência, que consiste em uma matriz simétrica, cuja diagonal principal é 0.

para o valor esperado da divergência acumulada.

Note que a expressão dentro do somatório representa o valor esperado da divergência na geração t' ,

$$\langle \delta(t') \rangle = \gamma [2(1 - e^{-d/D})^N - 1] . \quad (2.52)$$

Nessa dedução, assumo que a distância d entre sítios é constante no tempo, assim como a taxa de dispersão D e a abundância N ¹². Nesse caso, $\delta(t') = \delta$, ou seja, a divergência em uma geração é independente do tempo. Portanto, a divergência esperada entre as populações **A** e **B** após t gerações é dada por

$$\begin{aligned} \langle \chi(t) \rangle &= \sum_{t'=1}^t \langle \delta(t') \rangle = \sum_{t'=1}^t \langle \delta \rangle = t \langle \delta \rangle \\ &= \gamma [2(1 - e^{-d/D})^N - 1] t . \end{aligned} \quad (2.53)$$

A especiação entre duas populações *completamente isoladas* ocorre após T_{sp} gerações, de modo que a especiação ocorre quando a divergência atinge o valor gatilho de $\chi_{sp} = T_{sp}$. Assim, para determinar o tempo médio esperado para a ocorrência de um evento de especiação¹³ entre as populações **A** e **B**, basta tomar $\langle \chi(t_{speciation}) \rangle = \chi_{sp}$,

$$\begin{aligned} \langle \chi(t_{sp}) \rangle &= \gamma [1 - 2P(r \geq d)] \langle t_{sp} \rangle = \chi_{sp} \\ \therefore \quad \langle t_{sp} \rangle &= \frac{\chi_{sp}}{\gamma} \left[\frac{1}{1 - 2P(r \geq d)} \right] \\ \langle t_{sp} \rangle &= \frac{T_{sp}}{\gamma} \left[\frac{1}{2(1 - e^{-d/D})^N - 1} \right] . \end{aligned} \quad (2.54)$$

Nessa equação, $\langle t_{sp} \rangle$ representa o tempo médio esperado para a ocorrência de um evento de especiação no sistema de duas populações. Note que a expressão (2.54) possui uma descontinuidade quando $P(r \geq d) = 1/2$, ou seja, quando a probabilidade de conexão entre as populações é igual 0.5. Para $P(x \geq d) > 1/2$, temos $\langle t_{sp} \rangle < 0$. Esses valores negativos não tem significado biológico, na verdade, esse resultado decorre da divergência não ter sido limitada a valores não-negativos, como de fato ocorre na simulação. Na prática, esses valores negativos indicam que não ocorre especiação para $P(x \geq d) > 1/2$, pois o fluxo gênico entre as duas populações é grande o suficiente para prevenir o acúmulo de divergência.

No limiar de conexão entre as populações, quando $P(x \geq d) = 1/2$, o tempo média de espera para a especiação diverge para infinito, $\langle t_{sp} \rangle \rightarrow \infty$. Abaixo desse limiar, ou seja,

¹² O pressuposto de que a abundância N é constante no tempo é claramente falso nas simulações. Contudo, a relação $2 \leq N \leq 2 K_{max}$ é sempre válida, de modo que, quando as demais dependências são fixas, ainda que haja variação em N há um limite bem definido para os valores da probabilidade de conexão entre as duas populações.

¹³ *Waiting time for speciation* (GAVRILETS, 2003).

quando $P(x \geq d) < 1/2$, a especiação ocorre com tempo médio de espera finito, dado pela equação (2.54)

$$\langle t_{sp} \rangle = \frac{T_{sp}}{\gamma} \left[\frac{1}{2(1 - e^{-d/D})^N - 1} \right]. \quad (2.55)$$

Note que o tempo de espera para a especiação escala linearmente com o parâmetro de tempo mínimo para a especiação, T_{sp} e também que ele é inversamente proporcional ao fator de incremento da divergência, γ .

Por fim, é possível determinar o valor de distância d_{sp} associado a esse gatilho de especiação. Para isso, basta tomar que $P(x < d) > 1/2$, então

$$\begin{aligned} P(x < d) &> 1/2 \\ (1 - e^{-d/D})^N &> 1/2 \\ (1 - e^{-d/D}) &> \sqrt[N]{1/2} \\ e^{-d/D} &< 1 - \sqrt[N]{1/2} \\ -\frac{d}{D} &< \ln(1 - \sqrt[N]{1/2}) \\ d &> -D \ln(1 - \sqrt[N]{1/2}) = d_{sp}. \end{aligned} \quad (2.56)$$

Assim, para que duas populações tenham possibilidade de especiar, é preciso que a distância d entre elas seja maior do que a distância d_{sp} dada pela equação (2.56). Note que, embora esse resultado tenha sido derivado para o modelo de duas populações, mesmo em um sistema de múltiplas populações as especiações são limitadas a populações isoladas por, pelo menos, a distância mínima d_{sp} , uma vez que a existência de mais populações aumenta as chances de dispersão entre o conjunto de sítios e, portanto, de fluxo gênico entre as populações. Note, ainda, que d_{sp} não depende do tempo mínimo de especiação T_{sp} , nem do fator de incremento da divergência γ , mas somente dos parâmetros e variáveis associados ao processo de dispersão.

A figura 5 ilustra os comportamentos da probabilidade de dispersão entre sítios e do tempo de espera para a especiação com a distância d entre os sítios para diferentes valores de taxa de dispersão D e de abundância das populações N .

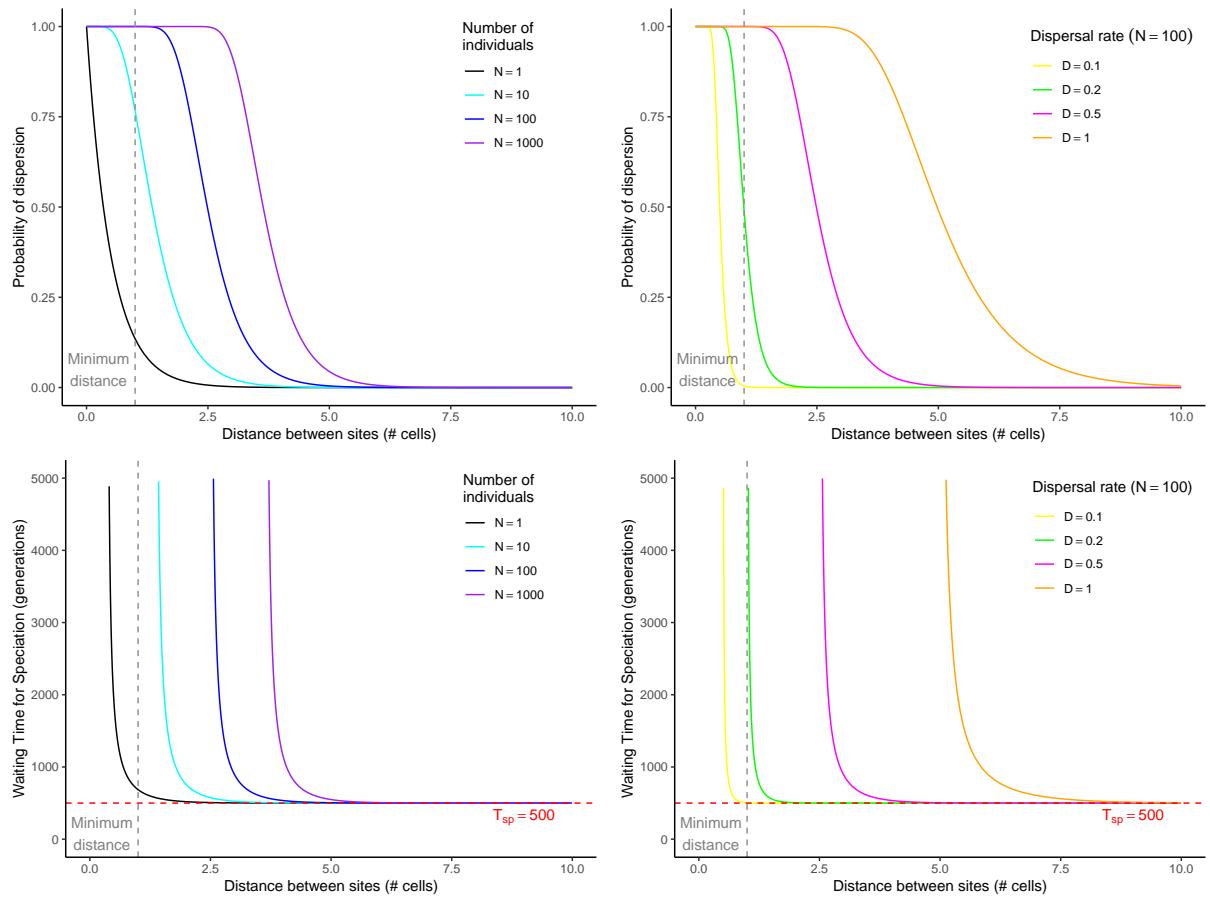


Figura 5 – Tempo médio de espera até a especiação para diferentes distâncias entre sítios no modelo de duas populações

Na figura 5, é possível observar que o tempo de espera para a especiação cai rapidamente após a distância limiar d_{sp} , convergindo para o tempo mínimo de isolamento, T_{sp} , com o aumento da distância entre as populações. A figura também possui uma linha tracejada vertical, indicando a distância mínima entre os sítios na simulação, que consiste simplesmente em $d = 1$. Para as curvas de tempo de espera para a especiação que interceptam essa linha, o fluxo gênico é tão limitado que mesmo populações em sítios vizinhos especiam com o passar do tempo.

Por último, note que, para esse modelo de dispersão-especiação aplicado a uma paisagem, as espécies raras (aqueles com menor abundância local) apresentam maior chance de especiarem que espécies abundantes (com populações locais maiores), em decorrência de a distância limiar para a especiação d_{sp} ser menor para as primeiras, pois d_{sp} cresce com o aumento da abundância das populações.

3 Metodologia das simulações

Nesse capítulo apresento o cerne da metodologia do trabalho. Inicio descrevendo o desenho amostral das simulações, a modelagem e a parametrização dos processos eco-evolutivos. A seguir, detalho a construção e a caracterização das paisagens fictícias utilizadas nas simulações. Por último, descrevo a implementação computacional e execução das simulações utilizando o *gen3sis*.

3.1 Desenho amostral

O desenho amostral utilizado foi um desenho fatorial aleatorizado de 2 fatores: autocorrelação espacial e variação espacial. Assim, o conjunto amostral foi composto por um conjunto de 24 paisagens com condição ambiental fixa, sendo estas agrupadas em 3 categorias de autocorrelação espacial: **baixa**, **média** e **alta**. E, para cada uma dessas paisagens, a variação espacial L foi fixada em 5 valores, $L = 4, 6, 8, 10$ e 12 , conforme ilustrado pela figura 1. Para cada combinação de fatores fixos, foram executadas 5 simulações, cada qual utilizando um valor diferente de semente aleatória e origem da espécie ancestral (condição inicial), que representam fatores aleatórios dentro do desenho experimental, totalizando um total de 600 simulações.

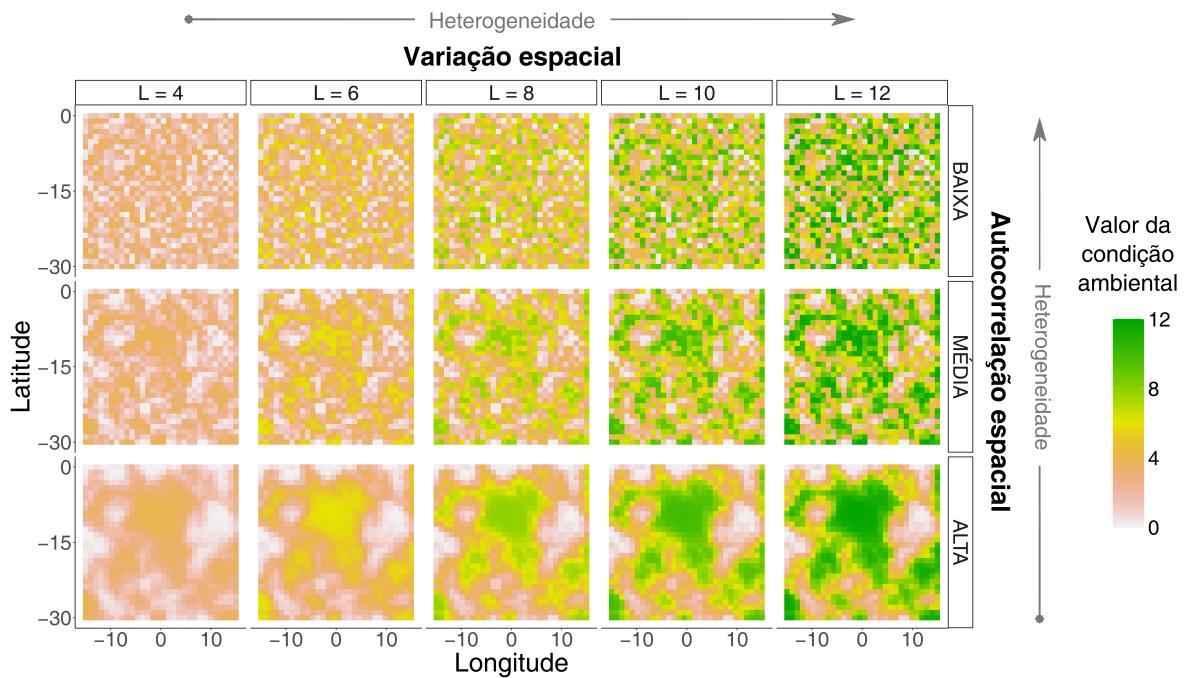


Figura 6 – Desenho amostral das paisagens: variação e autocorrelação espacial. Os valores de condição ambiental seguem uma distribuição uniforme e foram arranjados espacialmente de três formas diferentes, representando as três categorias de autocorrelação espacial. A variação espacial, denotada por L , representa o tamanho do intervalo de valores em que a condição ambiental está distribuída, nesse caso, de 0 a L . O desvio padrão da condição ambiental, σ_{amb} , se relaciona diretamente com L ; para uma distribuição uniforme, essa relação é dada por $\sigma_{amb} = L/\sqrt{12}$. As setas indicam a direção de crescimento da heterogeneidade e a relação desta com a variação e a autocorrelação espacial.

Para padronizar e simplificar a linguagem, convencionei chamar cada combinação de valores de autocorrelação espacial Ξ e variação espacial L de uma **classe de heterogeneidade**, a qual é especificada pelo par de valores (Ξ, L) , por exemplo (MÉDIA, 8), o que significa que a paisagem possui autocorrelação espacial MÉDIA e variação espacial $L = 8$.

3.2 Modelagem e parametrização das simulações

As simulações foram realizadas por meio do pacote `gen3sis`, utilizando o modelo descrito em detalhe no capítulo 1. A **dinâmica ecológica** foi feita utilizando uma modificação do modelo de competição de Lotka-Volterra, assumindo equivalência competitiva entre as espécies, de acordo com a equação (2.12),

$$\frac{dN_i}{dt} = N_i \left[\underbrace{1 - \frac{1}{2} \ln \left(\frac{\sigma_y^2 + \sigma_w^2}{\sigma_w^2} \right)}_{r_i} - \frac{(\bar{y}_i - \theta)^2}{2(\sigma_w^2 + \sigma_y^2)} - \frac{1}{K_r} \sum_j^S N_j \right].$$

Adicionalmente, o modelo apresenta um critério de população mínima $N_{min} = 1$, de modo que populações que atingem abundâncias menores que N_{min} são extintas.

A **dispersão** foi realizada de acordo com o *kernel* N-exponencial, expresso pela equação (2.21)

$$P_N(d \geq r) = 1 - F_{n=N}(r) = \left[1 - \exp\left(-\frac{r}{D}\right) \right]^N.$$

Os novos sítios alcançados pelas espécies foram colonizados por populações com abundância inicial $N_{initial} = 1$.

A **especiação** foi modelada através de um modelo de especiação alopátrica. Nesse modelo, as populações de diferentes sítios são agrupadas de acordo com seu alcance de dispersão, as populações isoladas acumulam mútua divergência até atingir um valor gatilho $T_{sp} = 500$, correspondente a 500 gerações de isolamento.

A **evolução** de atributos (ótimo ambiental, y , e atributo neutro, z^1) foi modelada através das equações (2.39),

$$dy_{i,k} = \underbrace{\frac{h^2 \sigma_y^2}{\sigma_w^2 + \sigma_y^2} (\theta_k - y_{i,k}) dt}_{\text{Seleção local}} + \underbrace{\sum_{l \in \text{Cluster}} g_{i,kl} (y_{i,l} - y_{i,k}) dt}_{\text{Fluxo gênico}} + \underbrace{\sqrt{\frac{h^2 \sigma_y^2}{N_{i,k}}} dW_{i,k}}_{\text{Mutação e deriva}}, \quad (3.1)$$

e (2.40),

$$dz_{i,k} = \underbrace{\sum_{l \in \text{Cluster}} g_{i,kl} (z_{i,l} - z_{i,k}) dt}_{\text{Fluxo gênico}} + \underbrace{\sqrt{\frac{h^2 \sigma_z^2}{N_{i,k}}} dW_{i,k}}_{\text{Mutação e deriva}}, \quad (3.2)$$

resultantes da adaptação dos arcabouços teóricos desenvolvidos nos trabalhos de Lande (1976) e McPeek (2017) ao modelo ecológico do trabalho.

Os parâmetros utilizados nas simulações estão expressos na tabela 1. A taxa de dispersão foi definida de forma operacional, com base em simulações testes e nos resultados obtidos teoricamente no capítulo 1 para um sistema de dois sítios. Para o *kernel* de dispersão adotado, taxas de dispersão $D \geq 0.3$ reduzem a ocorrência de diversificação nas simulações e geram uma predominância de simulações sem diversificação. Por outro lado, taxas de dispersão $D \leq 0.1$ geram um cenário em que a conexão entre os sítios é tão reduzida que especiações ocorrem mesmo entre populações vizinhas com abundância próxima da capacidade de suporte. Assim, optei por fixar a taxa de dispersão em $D = 0.2$, pois avaliei que os cenários limítrofes não atendiam aos objetivos do trabalho.

¹ Nesse trabalho, a evolução dos atributos não foi analisada diretamente, mas a evolução do ótimo ambiental é parte fundamental do modelo eco-evolutivo. O atributo neutro, por outro lado, não tem um papel relevante nessa dinâmica, mas foi incorporado com o objetivo de ser analisado em trabalhos futuros que investiguem a evolução de atributos diretamente.

Tabela 1 – Parâmetros do modelo eco-evolutivo e os respectivos valores utilizados nas simulações.

Parâmetro	Módulo gen3sis	Valor	Descrição
r_{max}	Ecologia	1	Taxa de crescimento intrínseco máxima
σ_w	Ecologia e Evolução	1	Tolerância ambiental das espécies
K_r	Ecologia	1000	Capacidade de suporte por recrutamento
α	Ecologia	1	Coeficiente de competição interespecífica
N_{min}	Ecologia	1	Abundância mínima de uma população
σ_y	Ecologia e Evolução	0.2	Desvio padrão dos atributos em uma população
h^2	Evolução	1	Herdabilidade dos atributos y e z
$N_{initial}$	Ecologia e Dispersão	1	Abundância inicial após a colonização
D	Dispersão	0.2	Taxa de dispersão
T_{sp}	Especiação e Evolução	500	Tempo mínimo para especiação
γ	Especiação e Evolução	1	Fator de incremento da divergência

A duração temporal das simulações foi de 10 000 passos temporais, cada passo representando uma geração, $\Delta t = 1$. O número de 10 000 passos foi estabelecido com base em testes iniciais, que indicaram que essa quantidade de passos era suficiente para gerar estabilização do número de linhagens através do tempo para a maioria das simulações com diversificação. Conforme a estrutura do pacote **gen3sis**, as operações que compõem cada módulo foram realizadas de forma independente para cada passo, com $\Delta t = 1$, e seguindo a sequência de execução dos módulos: respectivamente, Especiação, Dispersão, Ecologia e Evolução. Após a execução de cada módulo, os dados foram atualizados para uso no módulo subsequente.

Para cada combinação de variáveis de heterogeneidade (Ξ , L) em cada paisagem, foram realizadas simulações utilizando 5 diferentes condições iniciais e diferentes sementes aleatórias. Cada condição inicial foi caracterizada por um local de origem diferente para a espécie ancestral (uma única espécie), esses locais consistiram em quadrados de 5x5 sítios. Nos sítios de origem, a espécie ancestral iniciou com abundância $N_{initial} = 1$ e valores dos atributos y e z iguais ao valor da condição ambiental local (em cada sítio), nos demais sítios a simulação foi iniciada com a espécie ausente (abundância nula).

3.3 Construção e caracterização das paisagens

Foram geradas 24 paisagens hipotéticas², com dimensões de 30×30 (900 sítios) e condição ambiental fixa (não variando com o tempo). As paisagens foram construídas através do seguinte procedimento:

² Oito paisagens diferentes para cada uma das três categorias de autocorrelação espacial.

1. Para cada sítio k foi sorteado um valor pseudoaleatório $\hat{\theta}_k \sim Unif(0, 1)$, seguindo uma distribuição uniforme entre 0 e 1;
2. Foi computada a matriz de distâncias euclidianas entre os sítios, baseada nas suas coordenadas espaciais;
3. Foi calculado um peso de correlação entre cada par de sítios $\{k, l\}$, baseado na distância entre eles $d_{k,l}$, seguindo a expressão $w_{k,l} = \exp(-d_{k,l}/D_{env})$;
4. O conjunto de pesos $w_{k,l}$ foi normalizado, tal que, para todo k , $\sum_l w_{k,l} = 1$;
5. Para cada sítio k foi calculado um valor autocorrelacionado $\tilde{\theta}_k = \sum_l w_{k,l} \hat{\theta}_l$;
6. Os valores $\tilde{\theta}$ foram ordenados em ordem crescente;
7. Os valores $\tilde{\theta}$ foram ordenados em ordem crescente;
8. O valor de condição ambiental para cada sítio k , θ_k , foi definido como $\theta_k = \hat{\theta}_m$ tal que $Ordem(\hat{\theta}_m) = Ordem(\tilde{\theta}_k)$.

Os passos 1–5 desse procedimento garantem a autocorrelação espacial na condição ambiental, a qual é controlada pelo parâmetro D_{env} . Quanto maior o valor de D_{env} , maior a influência dos outros sítios na determinação da condição ambiental local e, assim, maior a autocorrelação espacial. Contudo, os valores $\tilde{\theta}$ obtidos por esse procedimento não seguem nenhuma distribuição particular, nem respeitam variância, média ou limites pré-determinados. Desse modo, para diferentes paisagens, os valores $\tilde{\theta}$ apresentam variabilidades indesejadas do ponto de vista estatístico. Os passos 6–8 do procedimento servem para controlar essa variação estatística indesejada. Eles garantem que o conjunto de valores de condição ambiental θ possua as mesmas propriedades estatísticas bem determinadas dos valores $\hat{\theta}$, ou seja, sigam uma distribuição uniforme entre 0 e 1, e, simultaneamente, possuam a mesma estrutura de autocorrelação espacial dos valores $\tilde{\theta}$.

As 24 paisagens foram obtidas seguindo o procedimento descrito acima para valores pseudoaleatórios, $\hat{\theta}$, obtidos a partir de oito sementes aleatórias distintas e três valores do parâmetro de autocorrelação espacial D_{env} (0.01; 0.7 e 1.8)³. Posteriormente, foi computado o índice global de Moran (MORAN, 1950) para cada uma das paisagens, o qual foi a métrica adotada para caracterizar a autocorrelação espacial nas paisagens.

³ Os valores do parâmetro de autocorrelação espacial D_{env} foram definidos com base em testes preliminares, de modo que o valor do índice de Moran para as paisagens geradas fosse próximo dos valores 0, 0.4 e 0.8. Para o modelo eco-evolutivo adotado aqui, valores de autocorrelação muito altos não geraram diversificação, portanto, esses cenários de autocorrelação não foram investigados por serem cenários eco-evolutivos pouco interessantes do ponto de vista desse trabalho. Para modelos eco-evolutivos nos quais dispersões de longa distância (LDDs) sejam mais frequentes e também para modelos que incorporem processos de especiação parapátrica e simpátrica é relevante investigar cenários onde a autocorrelação espacial (índice de Moran) seja maior.

O índice de Moran, I_{Moran} , mede a autocorrelação de um conjunto de valores de uma variável x , distribuídos em diferentes pontos no espaço, utilizando uma matriz de pesos baseados na distância entre os pontos. O índice de Moran varia entre -1 e 1: valores negativos desse índice, próximos a -1, indicam uma autocorrelação espacial negativa, ou seja, os valores da variável x em sítios próximos tendem a ser mais diferentes que a média; valores de I_{Moran} próximos a 0 indicam ausência de autocorrelação espacial, ou seja, a ausência de correlação entre a distância entre os pontos e a semelhança nos seus valores de x ; valores de I_{Moran} positivos e próximos a 1 indicam uma grande autocorrelação espacial, ou seja, que pontos mais próximos tendem a ter valores de x mais parecidos entre si que pontos mais distantes.

O gradiente de amplitude da variação espacial foi obtido a partir da renormalização da condição ambiental das paisagens pelo algoritmo de execução das simulações. Assim, enquanto as paisagens originalmente apresentavam uma distribuição uniforme da condição ambiental entre 0 e 1 ($L = 1$), nas simulações essa condição foi reescalada para os intervalos 0 a 4 ($L = 4$); 0 a 6 ($L = 6$); 0 a 8 ($L = 8$); 0 a 10 ($L = 10$) e 0 a 12 ($L = 12$).

3.4 Implementação do modelo eco-evolutivo

O modelo descrito acima e explorado em maior detalhe no capítulo 1 foi implementado em linguagem R no arquivo de configurações da simulação (*config*).

As equações diferenciais da dinâmica ecológica foram integradas numericamente utilizando o método de integração Runge-Kutta 4 (RK4)⁴, implementado em C++ e utilizando a biblioteca Rcpp para fazer a interface com o R. De forma semelhante, as equações diferenciais estocásticas da dinâmica evolutiva foram integradas numericamente usando o método RK4 adaptado para equações estocásticas (GARD, 1988, p. 201–202), também implementado em C++ utilizando a biblioteca Rcpp. Por fim, a geração dos números aleatórios utilizados nos módulos de evolução e dispersão também foi realizada utilizando funções em C++ baseadas em Rcpp, com o objetivo de reduzir o tempo de execução. As implementações dos algoritmos de integração numérica foram testadas previamente com versões simplificadas do modelo para assegurar a confiabilidade dos resultados.

O pacote *gen3sis* também foi adaptado para a realização das simulações. Do ponto de vista do modelo, a modificação mais importante, embora a mais simples, foi alterar a ordem de execução dos módulos de **Evolução** e **Ecologia** do *gen3sis*, invertendo a ordem de execução das funções *loop_evolution* e *loop_ecology* no código fonte do pacote. Assim, na versão modificada do pacote, o módulo *Ecology* é executado antes do

⁴ Tanto na dinâmica ecológica quanto na evolução de atributos, a integração numérica foi feita sobre o intervalo de cada geração, $\Delta t = 1$, com tamanho de passo $dt = 0.01$.

módulo *Evolution*. Embora sutil, essa mudança foi importante para a consistência causal do modelo eco-evolutivo, já que a seleção local (uma das componentes da evolução) é consequência da reprodução diferenciada dos diferentes fenótipos da população, o que ocorre na dinâmica ecológica.

Além dessa, outras duas modificações foram feitas no pacote **gen3sis**. Ao longo de uma simulação, o **gen3sis** utiliza arquivos de distância entre sítios, criados junto com as paisagens através da função `create_input_landscape`. Esses arquivos são utilizados um para cada passo temporal da simulação, de modo que, para uma simulação com 10 000 passos, como as deste trabalho, são necessários 10 000 arquivos de distâncias, ainda que, como em nosso caso, as distâncias entre os sítios não variem ao longo do tempo. A segunda modificação que fizemos no **gen3sis** consistiu em criar uma nova opção dentro da função `run_simulation`, chamada `fix_distances`, a qual é uma variável booleana⁵. Quando `fix_distances=TRUE`, a simulação considera que as distâncias entre os sítios nas paisagens são fixas e utiliza um único arquivo com valores de distâncias entre sítios ao longo de toda a simulação. Quando `fix_distances=False` (padrão), a simulação do **gen3sis** é executada requerendo um arquivo de distâncias entre sítios para cada passo temporal conforme a implementação original do pacote. Essa modificação permitiu uma grande economia de armazenamento, reduzindo o espaço de disco requerido para cada uma das nossas paisagens, que inicialmente era de cerca de 5.5 GB, para menos de 3 MB.

A terceira modificação no pacote foi no recurso `save_state`, uma opção da função `run_simulation` do **gen3sis** que permite salvar estados intermediários da simulação. Esses estados intermediários permitem que uma simulação possa ser retomada após uma interrupção (como uma queda de luz) sem necessidade de executá-la desde o início. A modificação consistiu, primeiro, em solucionar um problema no código, que acarretava falha da função `run_simulation` quando a opção `save_state` era definida para quaisquer das opções não padrão ("all", "last" e vetor de passos temporais). Solucionado esse problema para as opções "all" e "last", foi criada uma nova opção para essa variável: `save_state="end"`. Essa opção salva somente o estado do último passo da simulação, viabilizando continuar a execução de uma simulação após ela ser finalizada, mas sem gerar custo computacional adicional por salvar a simulação a cada passo, como ocorre nas opções previamente disponíveis "all" e "last".

A versão modificada do pacote **gen3sis**, os arquivos de configuração das simulações, assim como as funções auxiliares e *scripts* utilizados na geração das paisagens e nas simulações estão disponíveis no sitio <https://github.com/mhschwade/heterogeneity-eco-evo>.

⁵ Uma variável booleana é um tipo de variável que pode assumir apenas dois valores ou estados: verdadeiro (TRUE) ou falso (FALSE), que também podem ser representados por 1 e 0.

3.5 Execução das simulações

As simulações foram executadas para as diferentes paisagens (24) e todas as combinações de variação espacial L (5) através de *scripts* em R, incluindo variações de semente aleatória e origem da espécie ancestral para controle estatístico (5), totalizando 600 simulações. Para otimizar o tempo de execução do conjunto de simulações, foi utilizada paralelização por meio das bibliotecas `parallel` e `doParallel`.

O tempo de execução variou bastante entre as simulações, dependendo da diversidade alcançada e da velocidade do processador utilizado, mas foi, em média, aproximadamente 6h por simulação. O tempo real gasto para a execução do conjunto de 600 simulações utilizadas nesse trabalho, utilizando paralelização em dois computadores, em um total de 30 núcleos, foi cerca de 150h.

Para cada uma das simulações foram salvos os dados de abundância local, os valores de atributos e a matriz de divergência das espécies a cada passo temporal, além da filogenia resultante ao final da simulação.

3.6 Análise de dados

Todos os dados obtidos foram analisados através da linguagem R, utilizando a IDE RStudio. O detalhamento das análises desenvolvidas está descrito no início dos capítulos de resultados 4, 5 e 6. Os *scripts* utilizados para a análise de dados e visualização gráfica estão disponíveis em <https://github.com/mhschwade/heterogeneity-eco-evo>.

4 Diversificação, não diversificação e riqueza de espécies

4.1 Análise

4.1.1 Classificação dos *estados de diversificação*

Os dados do número de espécies vivas ao final de cada simulação (10 000 gerações) foram utilizados para classificar as simulações em três categorias de diversificação: **Não Diversificação (ND)**, **Diversificação Incompleta (DI)** e **Diversificação Completa (DC)**¹. Essas diferentes categorias foram denominadas **estados de diversificação**. As simulações incluídas na categoria **ND** foram todas aquelas que apresentaram apenas uma espécie ao final da simulação, ou seja, aquelas que não diversificaram, totalizando 84 simulações.

Nas categorias **DI** e **DC** foram incluídas todas aquelas que apresentaram algum nível de diversificação (Div). A distinção entre as duas categorias foi estabelecida por um procedimento baseado em um método de classificação de *outliers* (ZAR, 2010), o qual foi aplicado ao logaritmo do número final de espécies². Na categoria **DI** foram incluídas as simulações cujo número de espécies final ficou abaixo do primeiro quartil uma distância de 4 vezes a distância entre quartis (*Inter Quartile Range*, IQR), considerando o conjunto dos dados que apresentou diversificação (Div). Esse procedimento foi realizado agrupando os dados para cada cenário de heterogeneidade (combinação de autocorrelação Ξ e variação espacial L). No total, 16 simulações foram classificadas como **DI**. As demais simulações, um total de 500, foram classificadas como **DC**. Um resumo desse procedimento de classificação é dado pela tabela 2.

Tabela 2 – Classificação dos resultados das simulações de acordo com o grau de diversificação ao final da simulação (10 000 gerações).

Categoría	Abreviação		Critério
Não Diversificação	ND		$S_\gamma(\text{final}) = 1$
Diversificação Incompleta	Div	DI	$S_\gamma(\text{final}) < Q1\{Div_{\Xi,L}\} - 4 \times IQR\{Div_{\Xi,L}\}$
		DC	$S_\gamma(\text{final}) \geq Q1\{Div_{\Xi,L}\} - 4 \times IQR\{Div_{\Xi,L}\}$

¹ Apesar da nomenclatura de “Diversificação completa” sugerir que o número de espécies tenha atingido o equilíbrio para essas simulações, isso, de fato, não aconteceu. Essa nomenclatura pretende indicar que essas simulações atingiram, ao fim das 10 000 gerações simuladas, um número de espécies comparável aos valores máximos atingidos por outras simulações da mesma categoria.

² Nessa classificação, foi utilizado o logaritmo do número de espécies. Isso contribuiu para reduzir os efeitos da diferença de escala no número de espécies entre as simulações com diversificação incompleta e aquelas com diversificação completa.

4.1.2 Efeito da heterogeneidade espacial sobre a riqueza final de espécies

Nas análises subsequentes, foram consideradas apenas as simulações com diversificação completa (que totalizaram 500 simulações), ou seja, as pertencentes à categoria DC.

Foi ajustado um modelo linear generalizado misto (GLMM) aos dados de riqueza final das simulações (DC) usando uma distribuição da família t de Student. Para isso foi utilizada a função `glmmTMB` do pacote de mesmo nome (BROOKS *et al.*, 2017). No modelo, foram utilizadas a variação espacial centralizada, L_c ³, e a autocorrelação espacial, Ξ , como efeitos fixos e a paisagem sobre a qual a simulação foi executada, P ⁴, como efeito aleatório. O modelo pode ser representado por

$$S_\gamma(t_f)_{i,P} = a_2(\Xi_i) L_{ci}^2 + a_1(\Xi_i) L_{ci} + a_0(\Xi_i) + \varepsilon_i + \tilde{\varepsilon}_{i,P} . \quad (4.1)$$

Após analisar a consistência dos resíduos, foi realizada uma simplificação do modelo máximo junto de uma seleção de modelos, baseada no menor valor de AICc, com auxílio da função `dredge` do pacote MuMIn (BARTO, 2024).

4.2 Resultados e Discussão

4.2.1 Classificação dos estados de diversificação

A riqueza total na paisagem (γ) ao final da simulação, mostrada na figura 7a, é um resultado primário obtido a partir das simulações. Na parte inferior da figura, é possível observar que um conjunto de simulações apresentam apenas uma espécie, ou seja, não geraram diversificação. Já na parte superior, é observado um acúmulo de resultados de diferentes simulações onde a riqueza final parece seguir uma tendência crescente com o aumento da variação espacial do ambiente (L) e também com o aumento da autocorrelação. Entre esses dois agrupamentos principais de dados, são observados alguns pontos dispersos, que aparecem estar em um estado intermediário de diversificação.

Com base nessa avaliação preliminar, formulei uma classificação dos dados baseada na riqueza final das simulações, que denominei por **estados de diversificação**: não diversificação (**ND**), diversificação incompleta (**DI**) e diversificação completa (**DC**). A distribuição dos estados de diversificação foi determinada por critérios baseados somente na riqueza final das simulações, considerando os resultados para cada classe de heterogeneidade (Ξ, L) de forma independente. Os resultados dessa classificação são mostrados na figura 7b.

³ A transformação consistiu em subtrair a média dos valores de variação espacial $L_c = L - \bar{L} = L - 8.472\sigma_w$. A centralização não altera os resultados do ajuste, mas reduz a correlação entre variáveis preditoras, melhorando a significância calculada para os coeficientes do modelo (p-valores). Esse procedimento é necessário pela presença de termos quadráticos e de interação no modelo (ZAR, 2010).

⁴ A variável aleatória *paisagem*, denotada por P , representa as 24 paisagens fictícias utilizadas como base para as simulações, as quais foram descritas na seção 3.3.

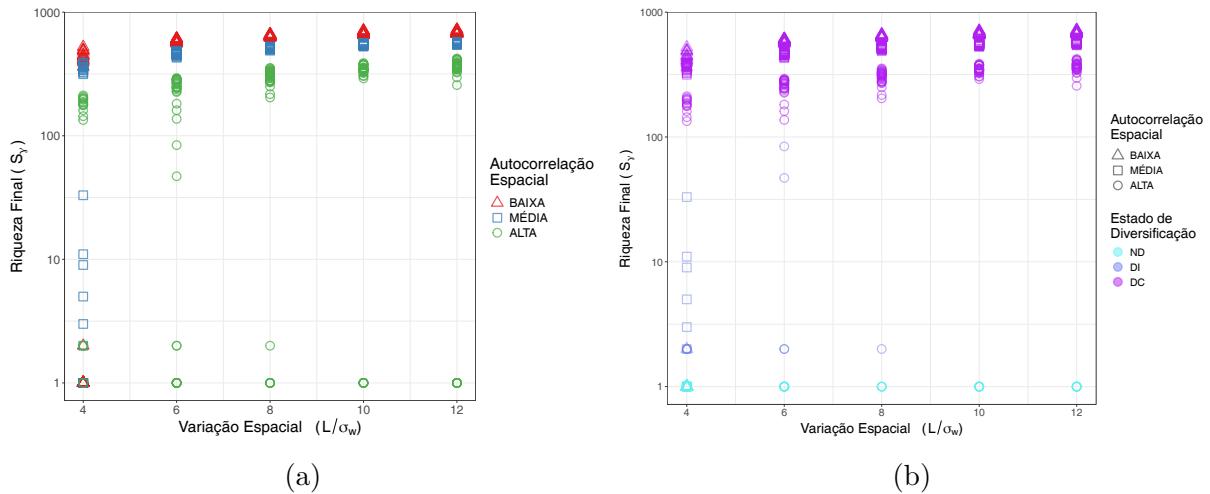


Figura 7 – Riqueza total na paisagem após 10 000 gerações. Na figura 7a são mostrados os dados de riqueza final para todas as 600 simulações, de acordo com a variação espacial L , em unidades de tolerância ambiental σ_w , e com a autocorrelação espacial, representada em cores e no formato dos pontos. Na figura 7b são representados os mesmos dados, mas as **cores representam o estado de diversificação** a que cada ponto foi associado na classificação adotada. Em ambas as figuras, a riqueza é mostrada em escala logarítmica. Note que a heterogeneidade espacial aumenta com a variação L e diminui com a autocorrelação espacial.

A proporção de simulações em cada categoria varia de acordo com a classe de heterogeneidade, o que pode ser observado na figura 8 e também na tabela 3, a qual informa o número de paisagens diferentes que apresentaram diversificação para cada classe. Muitas simulações com autocorrelação espacial ALTA não apresentaram diversificação, o que ocorreu para todo o gradiente de variação espacial. Também há uma fração das simulações que, mesmo diversificando, não atingiu o estado de diversificação completa. Já para as autocorrelações MÉDIA e BAIXA, os estados de não diversificação e diversificação incompleta foram observados somente para $L = 4$, no cenário de menor heterogeneidade.

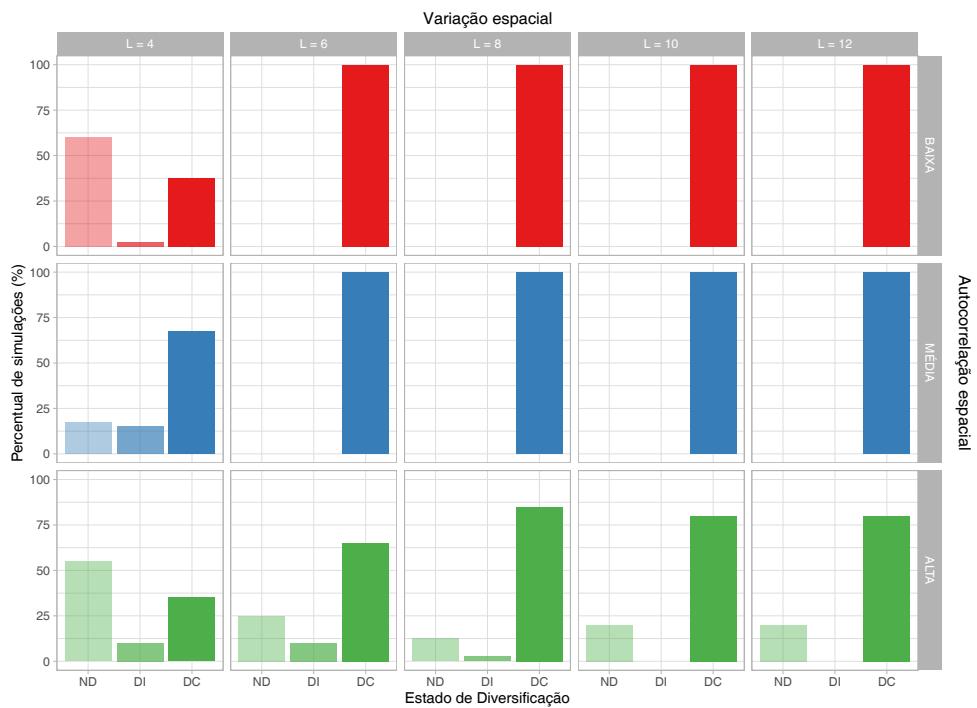


Figura 8 – Distribuição dos estados de diversificação nas diferentes classes de heterogeneidade. O estado de diversificação representa o estado final da riqueza gerada pela diversificação na paisagem. **ND** são as simulações que Não Diversificaram, **DI** as simulações com Diversificação Incompleta e **DC** as simulações com Diversificação Completa. A variação ambiental (L) é medida em unidades de tolerância ambiental σ_w . Note que a heterogeneidade aumenta com L e diminui com a autocorrelação espacial, crescendo do canto inferior esquerdo para o canto superior direito do mosaico de gráficos.

No modelo eco-evolutivo adotado neste trabalho, o processo de especiação⁵ requer a ocorrência de dois processos antagônicos. O primeiro é a colonização de novos sítios (i), e o segundo é o isolamento entre sítios ou grupos de sítios ocupados (ii). Em termos das características das espécies, esses processos são controlados pela capacidade de dispersão e pela tolerância ambiental. Nas simulações deste trabalho, essas características das espécies são determinadas, essencialmente, por quatro parâmetros: σ_w e σ_y , que controlam a tolerância ambiental, e os parâmetros K_r e D , que controlam a abundância máxima e a taxa de dispersão, as quais definem a probabilidade de dispersão das espécies. Como esses parâmetros são fixos nas simulações, toda a variabilidade de resultados de diversificação obtidos se deve à variabilidade das paisagens e à estocasticidade intrínseca do processo.

Nos cenários de baixa variação espacial, como $L = 4$, há maior similaridade nas condições ambientais na paisagem. Esses cenários favorecem a ocorrência de dispersão para novos sítios, processo (i), por apresentarem um maior número de sítios com condições ambientais dentro da faixa de tolerância das populações – cerca de 72% dos sítios para $L = 4$, conforme ilustrado pela figura 9. Por outro lado, a similaridade ambiental entre

⁵ Nesse caso, especiação puramente alopátrica.

Tabela 3 – Resultados da classificação dos estados de diversificação. A coluna “# paisagens DC” indica o número de paisagens independentes para as quais ao menos uma das simulações alcançou o estado de diversificação completa (DC). “# ND”, “# DI” e “# DC” representam o número de simulações registrado para cada uma dessas categorias.

Autocorrelação espacial	Variação espacial (L/σ_w)	# paisagens DC	# ND	# DI	# DC
BAIXA	4	4	24	1	15
	6	8	0	0	40
	8	8	0	0	40
	10	8	0	0	40
	12	8	0	0	40
MÉDIA	4	8	7	6	27
	6	8	0	0	40
	8	8	0	0	40
	10	8	0	0	40
	12	8	0	0	40
ALTA	4	5	22	4	14
	6	8	10	4	26
	8	8	5	1	34
	10	8	8	0	32
	12	8	8	0	32

sítios desfavorece a formação de grupos de populações isoladas, processo (ii), dificultando o acúmulo de divergência e a formação de novas espécies. Para a autocorrelação espacial MÉDIA, o aumento do agrupamento dos sítios inadequados pode gerar barreiras à dispersão que favorecem o isolamento entre populações (ii), resultando em aumento da diversificação. Contudo, para a autocorrelação ALTA, a agregação dos sítios favoráveis é ainda maior, gerando conexões que contornam as barreiras. Isso diminui as chances de isolamento entre populações (ii), e, assim, reduz a fração de simulações com diversificação. Os resultados de não diversificação mencionados aqui são compatíveis com os descritos por Birand, Vose e Gavrilets (2012), que também reportaram altos índices de não diversificação para paisagens altamente fragmentadas e capacidade de dispersão elevada.

Para $L > 4$, a fração de sítios habitáveis para uma população homogênea diminui para menos da metade, sendo cerca de 48% para $L = 6$. Portanto, nesses cenários, a maior parte dos sítios atua como obstáculo à dispersão das populações, o que representa uma transição de conectividade importante em relação ao cenário de $L = 4$. Essa redução da conectividade da paisagem favorece a formação de populações isoladas (ii) e, no regime de L estudado, não comprometeu o processo de dispersão para novos sítios, de forma que a ocorrência de especiações e, portanto, de diversificação foi favorecida para $L > 4$ nos cenários de autocorrelação BAIXA e MÉDIA.

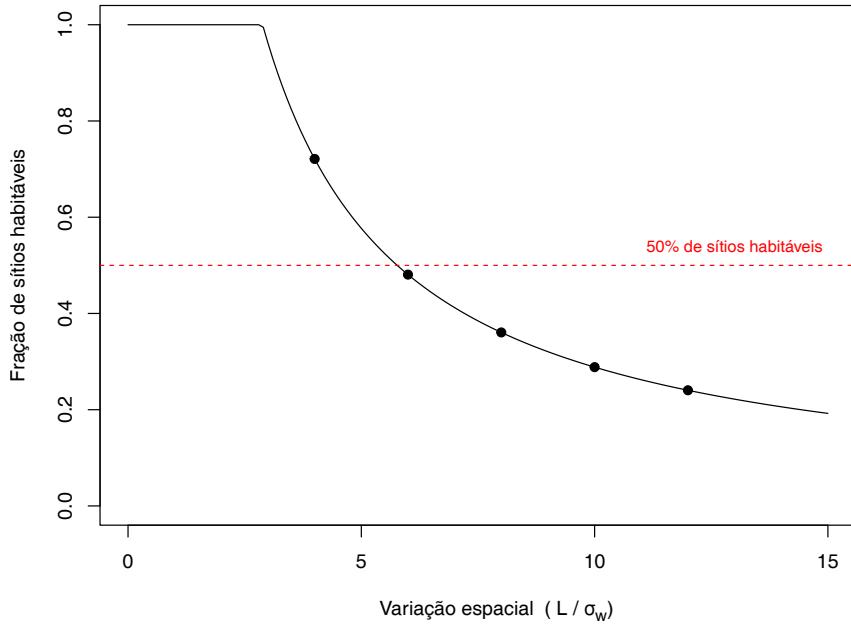


Figura 9 – Fração máxima de sítios potencialmente habitáveis, $r_i > 0$, para uma espécie.

A curva corresponde à fração máxima de sítios da paisagem que podem ser habitados por uma espécie com um valor de ótimo ambiental igual em todas as populações. Os pontos indicam as frações habitáveis para os valores de variação espacial L utilizados no trabalho, em unidades de tolerância ambiental σ_w . Essa relação foi obtida usando a probabilidade de um sítio, com valor de condição ambiental dado por uma distribuição uniforme entre 0 e L , ter seu valor de condição ambiental dentro do intervalo $(L/2 - \sigma_{tol}, L/2 + \sigma_{tol})$, onde σ_{tol} representa a tolerância ambiental total de uma espécie com valor homogêneo de ótimo ambiental, equação (2.14). Note que a **tolerância ambiental** σ_w é o principal parâmetro do modelo que controla a **tolerância ambiental das espécies** σ_{tol} , mas que elas são quantidades distintas. Ao longo do trabalho, o parâmetro σ_w também é utilizado como unidade de medida para o valor da condição ambiental, θ , e para a variação espacial, L .

No cenário de autocorrelação ALTA, a maior agregação espacial dos sítios com condições semelhantes gera maior conectividade entre sítios na escala das agregações, o que favorece o processo de dispersão (i) e desfavorece o processo de isolamento de populações (ii) nessa escala. Por outro lado, na escala de paisagem, mais autocorrelação espacial pode gerar mais isolamento entre agregações de sítios com condições ambientais semelhantes, favorecendo o processo (ii), mas desfavorecendo (i). Desse modo, a diversificação em paisagens de autocorrelação espacial ALTA é mais sensível às peculiaridades de cada paisagem. Dependendo, por exemplo, da existência de manchas ambientalmente similares próximas o suficiente para a ocorrência de uma colonização, mas não demasiado perto a ponto de manter o fluxo gênico entre as populações, além de eventos estocásticos raros, como dispersões de longa distância (LDDs). Isso é evidenciado na figura 8, que mostra a existência de simulações **DC** e **ND** para todos os valores de L no cenário de autocorrelação espacial ALTA.

Assim, esses primeiros resultados já evidenciam um papel importante da heterogeneidade da paisagem no processo de diversificação. Paisagens mais heterogêneas, com autocorrelação mais baixa e variação espacial maior, são cenários mais favoráveis à ocorrência de diversificação (**DI + DC**), pois apresentam maior probabilidade de isolamento entre populações e, portanto, de especiação.

Após essa breve investigação da relação entre os estados de diversificação ND, DI e DC com a heterogeneidade espacial, concentrei o foco das análises nas simulações com diversificação completa (DC).

4.2.2 Riqueza final de espécies

Os dados de riqueza final das simulações foram analisados por meio do ajuste de um modelo linear generalizado misto (GLMM) com distribuição da família t de Student. Essa distribuição foi utilizada porque se mostrou mais adequada para representar os resíduos do modelo. A dependência quadrática na variação espacial centralizada, L_c , foi motivada por reproduzir melhor o comportamento dos dados do que um modelo puramente linear, apresentando também um comportamento mais adequado dos resíduos. A seleção de modelos mostrou que somente o termo de interação quadrática entre autocorrelação e variação espacial é importante para a representação dos dados de riqueza final $S_\gamma(t_f)$. Os resultados podem ser observados na figura 10 e na tabela 4.

Tabela 4 – Resultados da seleção de modelos para a riqueza final ($\Delta\text{AICc} < 4$). Na descrição dos modelos estão representados os termos utilizados como efeitos em cada modelo. O termo 1 representa o intercepto e $1|P$ representa o efeito aleatório da paisagem (24 diferentes paisagens) sobre o intercepto do modelo.

Modelo	DF	logLik	AICc	ΔAICc	Peso	Descrição
1	10	-2127,85	4276,1	0	0,88	$1 + \Xi + L_c + L_c^2 + \Xi : L_c + 1 P$
2	12	-2127,77	4280,2	4,03	0,12	$1 + \Xi + L_c + L_c^2 + \Xi : L_c + \Xi : L_c^2 + 1 P$

Em síntese, os resultados mostram que a **heterogeneidade espacial tem um efeito positivo, mas não linear sobre a riqueza de espécies gerada pelo processo de diversificação**. A riqueza “final” nas paisagens⁶ possui uma relação não-linear com a variação espacial L , a qual tem um efeito positivo sobre a riqueza, mas com intensidade decrescente à medida que a variação espacial aumenta. Por sua vez, a autocorrelação espacial tem um efeito negativo sobre a riqueza final: paisagens com menor autocorrelação alcançam valores maiores de riqueza de espécies ao final das simulações. Os valores do coeficiente do termo de interação $\Xi : L_c^2$, positivos e crescentes com a autocorrelação

⁶ As aspas na palavra “final” são para recordar que, embora os dados representem a riqueza ao final das simulações (10 000 gerações) isso não significa que o processo de diversificação tenha acabado, e também que os dados não representam valores de equilíbrio. Assim, a riqueza poderia aumentar, ou até diminuir, se as simulações fossem estendidas por um período de tempo maior.

espacial, indicam que o aumento da autocorrelação reduz a intensidade do efeito negativo de L_c^2 , o termo quadrático da variação espacial. Assim, o crescimento da riqueza com a variação espacial é maior para paisagens mais autocorrelacionadas.

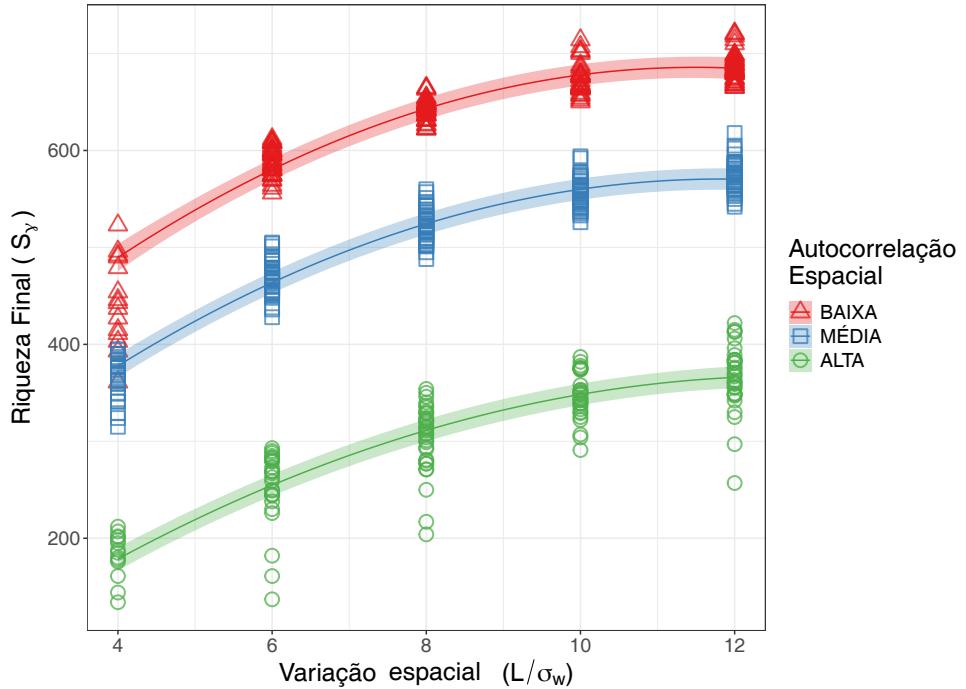


Figura 10 – Riqueza total na paisagem após 10 000 gerações ($S_\gamma(t_f)$) para as diferentes classes de heterogeneidade. A heterogeneidade cresce com a redução da autocorrelação espacial (Ξ) e com o aumento da variação espacial (L , medida em unidades de tolerância ambiental, σ_w). As curvas representam o ajuste do modelo de menor AICc e a área sombreada o intervalo de confiança do ajuste.

Tabela 5 – Resultados do modelo 1 da riqueza final nas simulações (10 000 gerações). O ajuste foi feito por um GLMM utilizando uma distribuição da família t de Student para os erros.

$S_\gamma(t_f)$ – MODELO 1				
Efeitos fixos	Valor	Desv. pad.	z-valor	p-valor
Intercepto	653.85	5.54	118.0	< 2E – 16
$\Xi\{\text{MÉDIA}\}$	-118.8	7.8	-15.20	< 2E – 16
$\Xi\{\text{ALTA}\}$	-332.1	7.9	-41.82	< 2E – 16
L_c	21.11	0.27	77.89	< 2E – 16
L_c^2	-3.49	0.24	-14.59	< 2E – 16
$\Xi\{\text{MÉDIA}\} : L_c$				
$\Xi\{\text{ALTA}\} : L_c$				
$\Xi\{\text{MÉDIA}\} : L_c^2$	0.35	0.28	1.26	0.2
$\Xi\{\text{ALTA}\} : L_c^2$	1.05	0.32	3.31	9E – 04
Efeitos aleatórios	Desv. pad.	σ^2 (t-Student)	N. Grupos	N. Obs.
1 paisagem	15.1	10.1	24	500
R^2 marginal	0.99			
R^2 condicional	0.99			

5 Taxas médias de especiação, extinção e diversificação

5.1 Análise

5.1.1 Cálculo das taxas de especiação e extinção ao longo do tempo

Para cada simulação, obtive os dados do número de linhagens (vivas) através do tempo (*Lineages Through Time*, LTT). A partir desses dados, foram calculadas as taxas totais (absolutas) de especiação $\frac{d\Lambda}{dt}$ e extinção $\frac{dE}{dt}$ ao longo do tempo, a partir de estimativas de derivada centrada (BURDEN e FAIRES, 2011), conforme as equações

$$\frac{d\Lambda}{dt}(t_i) = \frac{\Lambda(t_i + \Delta t/2) - \Lambda(t_i - \Delta t/2)}{\Delta t} \quad (5.1)$$

e

$$\frac{dE}{dt}(t_i) = \frac{E(t_i + \Delta t/2) - E(t_i - \Delta t/2)}{\Delta t}. \quad (5.2)$$

Nessas expressões, Λ e E representam, respectivamente, as especiações e extinções acumuladas ao longo do tempo. Também foram obtidas as taxas de especiação e extinção por linhagem, respectivamente λ e μ , através das equações

$$\lambda(t_i) = \frac{\Lambda(t_i + \Delta t/2) - \Lambda(t_i - \Delta t/2)}{\Delta t \cdot \bar{S}_\gamma[t_i - \Delta t/2, t_i + \Delta t/2]} \quad (5.3)$$

e

$$\mu(t_i) = \frac{E(t_i + \Delta t/2) - E(t_i - \Delta t/2)}{\Delta t \cdot \bar{S}_\gamma[t_i - \Delta t/2, t_i + \Delta t/2]}, \quad (5.4)$$

onde $\bar{S}_\gamma[t_i - \Delta t/2, t_i + \Delta t/2]$ denota a média da riqueza no intervalo de tempo $[t_i - \Delta t/2, t_i + \Delta t/2]$. Para o cálculo dessas taxas, adotei um intervalo de tempo $\Delta t = 100$ gerações entre cada medida.

5.1.2 Cálculo das taxas médias de especiação e extinção

A partir das taxas de especiação e extinção por linhagem ao longo do tempo, foram obtidas as **médias das taxas** de especiação e extinção por linhagem no intervalo simulado, conforme as equações

$$\langle \lambda \rangle = \frac{1}{N_t} \sum_{i=1}^{N_t} \lambda(t_i) \quad (5.5)$$

e

$$\langle \mu \rangle = \frac{1}{N_t} \sum_{i=1}^{N_t} \mu(t_i). \quad (5.6)$$

Nessas equações, o índice i está associado ao tempo para o qual as taxas foram calculadas. Esses tempos estão espaçados por $\Delta t = 100$ gerações, e $N_t = 100$ é o número total de tempos para os quais as taxas foram estimadas.

Obtive também as taxas médias de especiação e extinção absolutas. Para isso, calculei as taxas diretamente para o intervalo total da simulação, com os números de especiações e extinções acumuladas ao longo das 10 000 gerações, conforme as equações

$$\langle \frac{d\Lambda}{dt} \rangle = \frac{\Lambda(t_f) - \Lambda(0)}{\Delta t} = \frac{\Lambda(t_f) - 1}{10\,000 \text{ gerações}} \quad (5.7)$$

e

$$\langle \frac{dE}{dt} \rangle = \frac{E(t_f) - E(0)}{\Delta t} = \frac{E(t_f) - 0}{10\,000 \text{ gerações}}. \quad (5.8)$$

5.1.3 Ajustes e seleção de modelos

Aos dados de taxa média de especiação absoluta, foi ajustado um modelo linear com efeitos mistos (LMM) por meio da função `lmer` do pacote `lme4` (BATES *et al.*, 2015). Foi empregado um **modelo máximo** com dependência quadrática na variação espacial centralizada, L_c , e interação com a autocorrelação espacial, Ξ , como efeitos fixos e com a paisagem, P , como efeito aleatório, conforme a equação

$$\langle \frac{d\Lambda}{dt} \rangle_{i,P} = a_2(\Xi_i) L_{ci}^2 + a_1(\Xi_i) L_{ci} + a_0(\Xi_i) + \tilde{a}_0 P + \varepsilon_{i,P}. \quad (5.9)$$

A adequação dos resíduos foi avaliada com auxílio do pacote DHARMA (HARTIG, LOHSE e SOUZA-LEITE, 2024) e foi realizada uma seleção de modelos, reduzindo termo a termo o modelo máximo até sua versão mais simples e comparando os valores de AICc de cada modelo (BURNHAM e ANDERSON, 2002). Esse procedimento foi realizado com auxílio da função `dredge` do pacote MuMIn (BARTO, 2024).

Foi seguido esse mesmo procedimento para os dados de média da taxa de especiação por linhagem, ajustando um modelo linear misto, conforme a equação

$$\langle \lambda \rangle_{i,P} = b_2(\Xi_i) L_{ci}^2 + b_1(\Xi_i) L_{ci} + b_0(\Xi_i) + \tilde{b}_0 P + \varepsilon_{i,P}, \quad (5.10)$$

e realizando uma seleção de modelos.

Para ajustar um modelo aos dados de extinção, foi utilizada uma estratégia mais complexa. Ao invés de ajustar um modelo diretamente à taxa média de extinção, foi utilizado o número (absoluto) de extinções acumuladas ao longo da simulação, $E(t_f)$, para ajustar um modelo linear generalizado misto (GLMM) com resíduos modelados por uma distribuição de Poisson. Novamente, foi empregado um modelo máximo com efeitos fixos dados por dependências linear e quadrática na variação espacial centralizada, L_c , pela autocorrelação, Ξ e termos de interação entre variação e autocorrelação espacial, $\Xi : L_c$ e $\Xi : L_c^2$, e com efeito aleatório dado pela paisagem, P , conforme a equação

$$E(t_f)_{i,P} = c_2(\Xi_i) L_{ci}^2 + c_1(\Xi_i) L_{ci} + c_0(\Xi_i) + \tilde{c}_0 P + \varepsilon_{i,P}. \quad (5.11)$$

A partir da simplificação desse modelo máximo, foi realizada uma seleção de modelos por um critério de menor valor de AICc. As estimativas da taxa média de extinção pelo modelo foram obtidas dividindo os valores preditos do número de extinções pelo tempo total da simulação (10 000 gerações).

Para a taxa de extinção por linhagem, os dados de $\langle\mu\rangle$ foram summarizados pela média dos resultados das simulações de cada paisagem. Após isso, as médias das taxas de extinção foram transformadas por logaritmo. Com os dados transformados, foi realizada uma regressão linear com dependência quadrática na variação espacial e interação com a autocorrelação espacial, conforme o modelo descrito pela equação

$$\langle \ln(\mu) \rangle_i = d_2(\Xi_i) L_{ci}^2 + d_1(\Xi_i) L_{ci} + d_0(\Xi_i) + \varepsilon_i . \quad (5.12)$$

Partindo desse modelo máximo, foi feita uma simplificação termo a termo e os modelos ajustados foram comparados por um critério de menor valor de AICc.

Os modelos de efeitos mistos selecionados ($\Delta\text{AICc} < 2$) para as taxas médias de especiação e extinção foram reajustados utilizando o método REML (*Restricted Maximum Likelihood*), que produz estimativas de parâmetros menos enviesadas para modelos com efeitos aleatórios (PINHEIRO e BATES, 2000). Para esse ajuste final foram utilizadas as funções `lme` (PINHEIRO, BATES e R CORE TEAM, 2025, pacote `nlme`) e `glmmTMB` (BROOKS *et al.*, 2017, pacote `glmmTMB`), que fornecem diretamente valores de significância (p-valor) para as variáveis do modelo.

5.1.4 Cálculo da taxa de diversificação por linhagem, ajuste e seleção de modelos

Usando as séries temporais das taxas de especiação e extinção por linhagem, λ e μ , também foi obtida a taxa de diversificação $\hat{r} = \lambda - \mu$ e foi calculado seu valor médio ao longo do tempo de simulação, conforme a equação

$$\langle \hat{r} \rangle = \frac{1}{N_t} \sum_{i=1}^{N_t} [\lambda(t_i) - \mu(t_i)] . \quad (5.13)$$

Foi ajustado um modelo linear misto (LMM) aos dados de média da taxa de diversificação $\langle \hat{r} \rangle$, usando a variação (L_c) e a autocorrelação (Ξ) espacial como efeitos fixos e a paisagem (P) da simulação como efeito aleatório, conforme a equação

$$\langle \hat{r} \rangle_{i,P} = \beta_2(\Xi_i) L_{ci}^2 + \beta_1(\Xi_i) L_{ci} + \beta_0(\Xi_i) + \tilde{\beta}_0 P + \varepsilon_{i,P} . \quad (5.14)$$

Utilizando esse modelo como modelo máximo, foi feita uma seleção de modelos por um critério de menor valor de AICc.

5.2 Resultados e Discussão

Após analisar a riqueza ao final das simulações, o padrão resultante do processo de diversificação, explorei as componentes parciais desse processo: especiação e extinção. Para isso, investiguei o efeito da heterogeneidade espacial sobre as taxas de especiação, extinção e diversificação das linhagens.

5.2.1 Taxas médias de especiação absoluta e por linhagem

A figura 11 mostra a taxa média de especiação absoluta e a média da taxa de especiação por linhagem, calculadas para as simulações com diversificação completa (DC), como função da autocorrelação e da variação espacial. Esses dados foram ajustados por um modelo máximo quadrático, e submetidos a uma seleção de modelos. A tabela 6 mostra os resultados da seleção para os modelos com $\Delta\text{AICc} < 4$. A escolha dos modelos ajustados foi puramente fenomenológica. A principal motivação para usar um modelo máximo quadrático na variação espacial (L) foi a aparente curvatura dos dados de taxa média de especiação absoluta. Essa escolha também se refletiu em um comportamento mais adequado dos resíduos, quando comparada a um modelo estritamente linear. De fato, para ambas as taxas de especiação, absoluta e por linhagem, foram selecionados modelos com termos quadráticos em L (L_c), conforme mostrado na tabela 6.

Tabela 6 – Resultados da seleção de modelos para as taxas de especiação absoluta e por linhagem ($\Delta\text{AICc} < 4$). Na descrição dos modelos estão representados os termos utilizados como efeitos em cada modelo. O termo 1 representa o intercepto e $1|P$ representa o efeito aleatório da paisagem (24 diferentes paisagens) sobre o intercepto do modelo.

Modelo	DF	logLik	AICc	ΔAICc	Peso	Descrição
Taxa média de especiação absoluta via LMM						
1	9	2387.17	-4756.0	0	0.525	$1 + \Xi + L_c + L_c^2 + \Xi : L_c^2 + 1 P$
2	11	2389.16	-4755.8	0.2	0.475	$1 + \Xi + L_c + L_c^2 + \Xi : L_c + \Xi : L_c^2 + 1 P$
Média da taxa de especiação por linhagem $\langle \lambda \rangle$ via LMM						
1	9	4561.7	-9105.0	0	0.749	$1 + \Xi + L_c + L_c^2 + \Xi : L_c + 1 P$
2	11	4562.7	-9102.8	2.19	0.250	$1 + \Xi + L_c + L_c^2 + \Xi : L_c + \Xi : L_c^2 + 1 P$

Realizei uma inferência multimodelos (BURNHAM e ANDERSON, 2002), utilizando a soma dos pesos de AICc dos modelos em que cada termo está presente. Deste modo, foi possível avaliar, para além de um modelo em particular, a importância das variáveis e dos termos em que elas aparecem para a descrição dos dados. Os resultados dessa análise, mostrados na tabela 10, revelam que ambos os termos de variação espacial L_c (L centralizado), linear e quadrático, são importantes na representação dos dados das taxas de especiação, pois têm peso 1 (máxima importância). Da mesma forma, o termo de autocorrelação Ξ e os termos de interação entre variação e autocorrelação espacial também

se mostraram importantes na representação dos dados. Em particular, o efeito de interação $\Xi : L_c^2$ foi importante para a taxa média de especiação absoluta, enquanto o termo $\Xi : L_c$ se mostrou importante para a média da taxa de especiação por linhagem $\langle \lambda \rangle$.

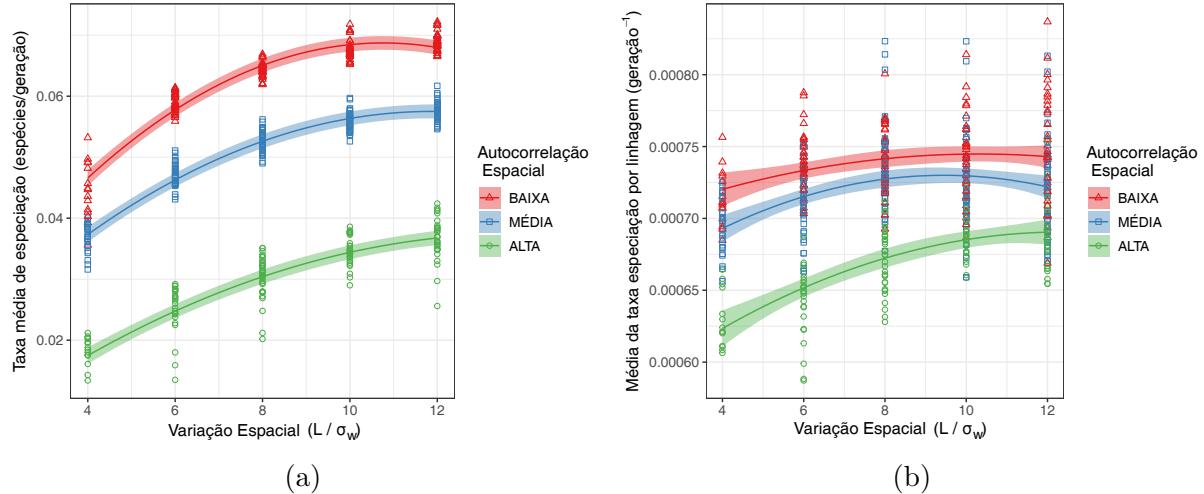


Figura 11 – Taxa média de especiação e média da taxa de especiação por linhagem para os diferentes perfis de heterogeneidade. A heterogeneidade cresce com a redução da autocorrelação espacial (Ξ) e com o aumento da variação espacial (L , medida em unidades da tolerância ambiental, σ_w). As linhas representam o ajuste dos modelos de menor AICc para os dados e a área sombreada em seu entorno representa o intervalo de confiança do ajuste.

Para a taxa de especiação absoluta, os modelos 1 e 2 se mostraram equivalentes na seleção de modelos (tabela 6). Eles diferem somente por um termo de interação linear entre L e Ξ , de pequeno efeito, e possuem valores semelhantes para os coeficientes dos termos de Ξ , L_c e L_c^2 , como pode ser observado nas tabelas 7 e 8.

De forma geral, os resultados mostram que a **heterogeneidade espacial da paisagem tem um efeito positivo e não linear sobre a taxa de especiação absoluta**, apresentando uma tendência de saturação das taxas à medida que a heterogeneidade aumenta. Para ambos modelos, a presença dos termos quadráticos revela que a taxa de especiação possui uma dependência não linear na variação espacial. Assim, a **variação espacial tem um efeito positivo sobre a taxa de especiação absoluta com intensidade que diminui à medida que a variação espacial aumenta**.

Tabela 7 – Resultados do modelo 1 da taxa média de especiação absoluta.

$\langle \frac{d\Lambda}{dt} \rangle$ – MODELO 1				
Efeitos fixos	Valor	Desv. pad.	t-valor	p-valor
Intercepto	6.620E-02	6.2E-04	107.53	< 2E – 16
$\Xi\{\text{MÉDIA}\}$	-1.247E-02	8.7E-04	-14.35	< 2E – 16
$\Xi\{\text{ALTA}\}$	-3.470E-02	8.8E-04	-39.59	< 2E – 16
L_c	2.216E-03	3.4E-05	65.84	< 2E – 16
L_c^2	-4.85E-04	2.5E-05	-19.70	< 2E – 16
$\Xi\{\text{MÉDIA}\} : L_c$				
$\Xi\{\text{ALTA}\} : L_c$				
$\Xi\{\text{MÉDIA}\} : L_c^2$	1.60E-04	3.3E-05	4.93	< 2E – 16
$\Xi\{\text{ALTA}\} : L_c^2$	2.79E-04	3.6E-05	7.77	< 2E – 16
Efeitos aleatórios	Desv. pad.	Resíduo	N. Grupos	N. Obs.
1 paisagem	0.00163	0.00193	24	500
R^2 marginal	0.97	AIC (REML)		-4639.98
R^2 condicional	0.98	logLik (REML)		2328.99

Tabela 8 – Resultados do modelo 2 da taxa média de especiação absoluta.

$\langle \frac{d\Lambda}{dt} \rangle$ – MODELO 2				
Efeitos fixos	Valor	Desv. pad.	t-valor	p-valor
Intercepto	6.618E-02	6.2E-04	107.43	< 2E – 16
$\Xi\{\text{MÉDIA}\}$	-1.242E-02	8.7E-04	-14.27	< 2E – 16
$\Xi\{\text{ALTA}\}$	-3.467E-02	8.8E-04	-39.51	< 2E – 16
L_c	2.307E-03	5.8E-05	39.96	< 2E – 16
L_c^2	-4.84E-04	2.5E-05	-19.70	< 2E – 16
$\Xi\{\text{MÉDIA}\} : L_c$	-1.53E-04	7.9E-05	-1.94	0.05
$\Xi\{\text{ALTA}\} : L_c$	-1.15E-04	8.7E-05	-1.33	0.19
$\Xi\{\text{MÉDIA}\} : L_c^2$	1.53E-04	3.3E-05	4.68	< 2E – 16
$\Xi\{\text{ALTA}\} : L_c^2$	2.77E-04	3.6E-05	7.72	< 2E – 16
Efeitos aleatórios	Desv. pad.	Resíduo	N. Grupos	N. Obs.
1 paisagem	0.00163	0.00192	24	500
R^2 marginal	0.97	AIC (REML)		-4605.71
R^2 condicional	0.98	logLik (REML)		2313.86

Os resultados também indicam que a taxa de especiação difere entre as três categorias de autocorrelação espacial, com diferença menor entre as categorias BAIXA e MÉDIA: $(-1.247 \pm 0.087) \times 10^{-2}$, do que entre as categorias MÉDIA e ALTA¹: $(-2.22 \pm$

¹ Diferença entre os coeficientes das categorias de autocorrelação Ξ do modelo 1 da taxa média de

$0.12) \times 10^{-2}$. Mais do que isso, os resultados mostram que **a autocorrelação espacial tem um efeito negativo sobre a taxa de especiação**.

Esse resultado é compatível com o encontrado por Ciccheto, Carnaval e Araujo (2024), mas não com o encontrado por Birand, Vose e Gavrilets (2012). Essa discrepância pode estar relacionada com as diferenças na modelagem da dispersão entre os dois trabalhos, que resultam em uma capacidade de dispersão efetivamente maior nas paisagens de Birand, Vose e Gavrilets (2012). Além disso, essa discrepança também pode ter origem em diferenças na modelagem da especiação entre os trabalhos. Especiações alopátricas e parapátricas tendem a se tornar progressivamente mais importantes em paisagens mais fragmentadas (com menor autocorrelação espacial), mas, embora estas sejam modeladas tanto por Ciccheto, Carnaval e Araujo (2024) como no presente trabalho, elas não são bem representadas pela definição ecológica de espécie adotada por Birand, Vose e Gavrilets (2012).

A figura 11b e a tabela 9 mostram que a média da taxa de especiação por linhagem tem um comportamento similar ao da taxa de especiação absoluta, embora mais sutil: **paisagens mais heterogêneas promovem aumento da taxa de especiação por linhagem e, portanto, da probabilidade de uma linhagem especiar**, o que está em acordo com as hipóteses apresentadas no final da Introdução. Ainda que as diferenças entre as três categorias de Ξ sejam proporcionalmente menores, os resultados corroboram as hipóteses para a autocorrelação espacial: paisagens com menor autocorrelação espacial (mais heterogêneas) produzem taxas de especiação por linhagem maiores que paisagens com maior autocorrelação (menos heterogêneas).

Por sua vez, a variação espacial tem um efeito positivo sobre as taxas de especiação por linhagem – representado pelo valor positivo do coeficiente do termo L_c –, mas que diminui à medida que L_c aumenta – efeito que é capturado pelo valor negativo do coeficiente de L_c^2 . Embora a curva azul, representando o resultado do ajuste para a categoria de autocorrelação média, sugira uma queda na taxa de especiação por linhagem de $L = 10$ para $L = 12$, a diferença entre as taxas não é significativa ($t = 0.438$, $p = 0.66$). Assim, no intervalo estudado de L , foi observada a estabilização da taxa de especiação por linhagem com o aumento da variação ambiental, não sua redução.

Os resultados dos ajustes também indicam que há interação entre a variação e a autocorrelação espacial, mas o efeito observado na figura 11b vai em sentido contrário às hipóteses iniciais: à medida que L aumenta, a diferença entre as taxas de especiação por linhagem das três categorias se torna menor. Esse efeito pode resultar de uma saturação do número de especiações que ocorrem nas paisagens como consequência do aumento da

especiação absoluta. A diferença entre as categorias MÉDIA e BAIXA é simplesmente o valor do coeficiente de $\Xi\{\text{MÉDIA}\}$; a diferença entre as categorias ALTA e MÉDIA é a diferença entre os coeficientes destas. A incerteza da diferença entre essas categorias foi obtida por propagação de incertezas usando derivadas parciais.

riqueza, um efeito de diversificação dependente de diversidade. Essa saturação desaceleraria as taxas de especiação nas paisagens onde essas taxas são maiores e que, portanto, geram espécies mais rapidamente, afetando particularmente as categorias BAIXA e MÉDIA da autocorrelação espacial. Com isso, o efeito do aumento da variação espacial sobre $\langle \lambda \rangle$ é atenuado para essas categorias. Contudo, essa atenuação não ocorre para autocorrelação ALTA, pois essas paisagens alcançam riquezas menores e, portanto, são menos afetadas pelo efeito de saturação.

A origem desse efeito de saturação das especiações pode estar atrelada ao sistema simulado e aos mecanismos promotores de especiação no modelo eco-evolutivo utilizado neste trabalho. Nesse modelo, o único mecanismo gerador de novas espécies é o isolamento geográfico. Assim, para uma especiação ocorrer, uma espécie necessita colonizar um novo sítio e ambas as populações precisam sobreviver em relativo isolamento por, pelo menos $T_{sp} = 500$ gerações. O número de sítios nas paisagens estudadas é limitado (900) e a estabilidade demográfica das populações leva as espécies a se especializarem localmente, alcançando dominância local, um comportamento também descrito por Loeuille e Leibold (2008). Dessa forma, há um fortalecimento dos efeitos de prioridade com o passar do tempo que, junto com as barreiras ambientais, tornam progressivamente menos provável a ocorrência de colonizações bem sucedidas de novos sítios. Portanto, as chances de ocorrerem novas especiações são reduzidas com o passar do tempo, o que pode ser ilustrado pelas séries temporais das taxas de especiação, que serão discutidas no próximo capítulo. Mais especificamente, a probabilidade de uma linhagem especiar cai à medida que o número de espécies aumenta, em virtude da redução do número de sítios capazes de receber e manter populações das espécies até a ocorrência da especiação. Dessa maneira, a menos que algum mecanismo eco-evolutivo atenue o efeito da exclusão competitiva, viabilizando a manutenção de mais de uma espécie por sítio, o tamanho finito de 900 sítios representa um teto máximo para o número de espécies suportado na paisagem. E, portanto, para o número de especiações que podem ocorrer, já que esse é um cenário onde as extinções são eventos raros².

Por fim, a concavidade negativa das curvas ajustadas para as taxas de especiação (coeficiente do termo L^2 negativo) sugere que valores maiores de L podem ter efeito negativo sobre as taxas de especiação. Ou seja, paisagens com variação espacial muito ampla podem apresentar taxas de especiação menores que paisagens com condições espaciais menos variadas. Contudo, esse efeito não foi encontrado no regime de valores de L explorado neste trabalho, mas representa uma previsão por extrapolação que poderá ser testada em trabalhos futuros, em contraste com uma hipótese de saturação das taxas de especiação

² De fato, a conexão entre sítios ambientalmente similares tende a tornar esse teto efetivamente menor para paisagens com maior autocorrelação espacial. Mas, ainda assim, o aumento da variação ambiental reduz o número de sítios habitáveis (conforme a figura 9) e as ações da seleção local e da exclusão competitiva tendem a restringir a distribuição estável de uma espécie a apenas um sítio, aumentando a riqueza de espécies suportada na paisagem.

com o aumento da variação espacial.

Tabela 9 – Resultados do modelo 1 da média da taxa de especiação por linhagem

$\langle \lambda \rangle$ – MODELO 1				
Efeitos fixos	Valor	Desv. pad.	t-valor	p-valor
Intercepto	7.450E-04	2.4E-06	315.53	< 2E – 16
$\Xi\{\text{MÉDIA}\}$	-1.82E-05	2.8E-06	-6.50	< 2E – 16
$\Xi\{\text{ALTA}\}$	-6.89E-05	3.0E-06	-22.75	< 2E – 16
L_c	2.22E-06	7.9E-07	2.82	0.01
L_c^2	-9.6E-07	1.9E-07	-5.10	< 2E – 16
$\Xi\{\text{MÉDIA}\} : L_c$	4E-07	1.1E-06	0.37	0.71
$\Xi\{\text{ALTA}\} : L_c$	5.2E-06	1.2E-06	4.45	< 2E – 16
$\Xi\{\text{MÉDIA}\} : L_c^2$				
$\Xi\{\text{ALTA}\} : L_c^2$				
Efeitos aleatórios	Desv. pad.	Resíduo	N. Grupos	N. Obs.
1 paisagem	1.7E-09	2.658E-05	24	500
R^2 marginal	0.57	AIC (REML)		-8924.91
R^2 condicional	0.57	logLik (REML)		4471.20

Tabela 10 – Análise multimodelos para as médias das taxas de especiação e extinção. Os valores em negrito representam as variáveis presentes no modelo de menor AICc.

Número de modelos	Ξ	L_c	L_c^2	$\Xi : L_c$	$\Xi : L_c^2$
	9	8	8	3	3
Soma dos pesos de AICc	$\langle \frac{d\Lambda}{dt} \rangle$	1	1	1	0.47
	$\langle \lambda \rangle$	1	1	1	0.25
	$\langle \frac{dE}{dt} \rangle [E(t_f)]$	1	0.87	0.45	0.79
	$\langle \mu \rangle [\ln \langle \mu \rangle]$	0.24	0.95	0.28	0.05

5.2.2 Taxas médias de extinção absoluta e por linhagem

Sob os cenários estudados neste trabalho, as extinções ocorreram com uma frequência muito inferior às especiações, o que pode ser observado ao comparar as taxas de extinção mostradas na figura 12 com as taxas de especiação na figura 11. Assim, as extinções representaram eventos raros e de menor relevância para o processo de diversificação resultante. Em virtude dessa raridade, os números de extinções nas simulações apresentam uma variabilidade relativa muito maior, o que exigiu o uso de modelos estatísticos mais sofisticados (GLMMs) e transformação dos dados (transformação por logaritmo) para realização das análises.

Tabela 11 – Resultados da seleção de modelos para as médias das taxas de extinção absoluta e por linhagem ($\Delta\text{AICc} < 4$).

Modelo	DF	logLik	AICc	ΔAICc	Peso	Descrição
Número total de extinções ³ via GLMM (Poisson)						
1	7	-991.86	1997.9	0	0.494	$1 + \Xi + L_c + \Xi : L_c + 1 P$
2	8	-991.39	1999.1	1.12	0.282	$1 + \Xi + L_c + L_c^2 + \Xi : L_c + 1 P$
3	10	-990.02	2000.5	2.55	0.138	$1 + \Xi + L_c + L_c^2 + \Xi : L_c + \Xi : L_c^2 + 1 P$
4	4	-996.68	2001.4	3.50	0.086	$1 + \Xi + 1 P$
Média da taxa de extinção por linhagem via LM						
1	3	-107.23	220.7	0	0.626	$1 + L_c$
2	4	-107.18	222.7	2.06	0.223	$1 + L_c + L_c^2$
3	5	-106.48	223.5	2.86	0.15	$1 + \Xi + L_c$

Na tabela 11, vemos que a seleção de modelos revelou uma baixa contribuição dos termos quadráticos da variação espacial L para o poder de explicação dos modelos. Para ambas as taxas de extinção, absoluta e por linhagem, os modelos de menor valor de AICc contém apenas termos lineares em L . Isso também é indicado pela soma dos pesos de AICc dos modelos em que cada termo aparece. Na tabela 10 vemos que os pesos dos termos lineares em L_c predominam, indicando que esses termos tem poder explicativo superior aos termos quadráticos para as taxas de extinção.

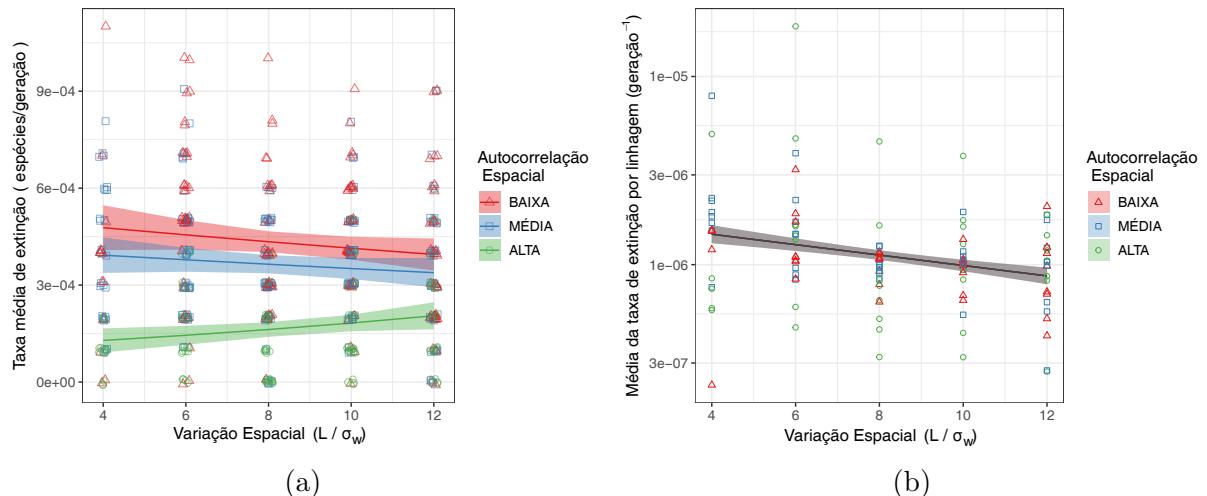


Figura 12 – Taxa média de extinção e média da taxa de extinção por linhagem para os diferentes perfis de heterogeneidade. Na figura, a heterogeneidade cresce com a redução da autocorrelação espacial (Ξ) e com o aumento da variação espacial (L , medida em unidades da tolerância ambiental, σ_w). As linhas representam o ajuste dos modelos de menor AICc para os dados e a área sombreada em seu entorno representa o intervalo de confiança do ajuste.

O resultado do ajuste do **modelo 1** (modelo de menor valor de AICc, conforme a tabela 11) mostra que a **taxa de extinção absoluta é maior para paisagens com menor autocorrelação espacial (mais heterogêneas)**, com uma diferença pequena

entre autocorrelação BAIXA e MÉDIA e uma diferença mais expressiva entre estas e a autocorrelação ALTA. O ajuste também indicou um **efeito negativo da variação espacial na taxa de extinção absoluta**, embora esse efeito seja apenas limiarmente significativo ($p = 0.09$). Não obstante, a interação entre variação espacial e autocorrelação ALTA é significativa ($p = 0.01$) e positiva, indicando que **a taxa de extinção cresce com o aumento da variação espacial quando a autocorrelação espacial é ALTA**. Isso pode ser uma consequência do aumento da riqueza de espécies (e das taxas de especiação absolutas) com o aumento da variação espacial, que é *proporcionalmente maior* para paisagens com autocorrelação ALTA. Como a riqueza de espécies ao longo do tempo é menor para essa categoria (figuras 14 e 7a), o incremento no número de espécies com o aumento de L é proporcionalmente maior para autocorrelação ALTA do que para as autocorrelações BAIXA e MÉDIA. Por sua vez, é esperado que o número total de extinções seja proporcional ao número de espécies vivas. Desse modo, é esperado encontrar taxas de extinção **absolutas** maiores em paisagens com maior riqueza de espécies.

Tabela 12 – Resultados do modelo 1 para o número total de extinções.

$E(t_f)$ – MODELO 1				
Efeitos fixos	Valor	Desv. pad.	z-valor	p-valor
Intercepto	1.457	0.036	39.92	< 2E – 16
$\Xi\{\text{MÉDIA}\}$	-0.172	0.053	-3.24	0.001
$\Xi\{\text{ALTA}\}$	-0.944	0.076	-12.43	< 2E – 16
L_c	-0.024	0.014	-1.67	0.09
L_c^2				
$\Xi\{\text{MÉDIA}\} : L_c$	0.005	0.020	0.26	0.79
$\Xi\{\text{ALTA}\} : L_c$	0.082	0.030	2.77	0.01
$\Xi\{\text{MÉDIA}\} : L_c^2$				
$\Xi\{\text{ALTA}\} : L_c^2$				
Efeitos aleatórios	Desv. pad.	Resíduo	N. Grupos	N. Obs.
1 paisagem	3.877E-05		24	500
R^2 marginal	0.37	AIC (REML)		2029.6
R^2 condicional	0.37	logLik (REML)		-1007.8

Tabela 13 – Resultados do modelo 2 do número total de extinções

$E(t_f)$ – MODELO 2				
Efeitos fixos	Valor	Desv. pad.	z-valor	p-valor
Intercepto	1.482	0.044	33.4	< 2E – 16
$\Xi\{\text{MÉDIA}\}$	-0.170	0.053	-3.19	0.001
$\Xi\{\text{ALTA}\}$	-0.944	0.076	-12.42	< 2E – 16
L_c	-0.025	0.014	-1.67	0.09
L_c^2	-0.0038	0.0039	-0.97	0.33
$\Xi\{\text{MÉDIA}\} : L_c$	0.004	0.020	0.17	0.86
$\Xi\{\text{ALTA}\} : L_c$	0.083	0.030	2.79	0.01
$\Xi\{\text{MÉDIA}\} : L_c^2$				
$\Xi\{\text{ALTA}\} : L_c^2$				
Efeitos aleatórios	Desv. pad.	Resíduo	N. Grupos	N. Obs.
1 paisagem	3.939E-05		24	500
R^2 marginal	0.37	AIC (REML)		2039.9
R^2 condicional	0.37	logLik (REML)		-1011.9

O ajuste do modelo de menor AICc para as taxas de extinção por linhagem μ mostra que, embora a **autocorrelação espacial da paisagem** afete a taxa de extinção absoluta, ela **não influencia a taxa de extinção por linhagem**. Isso sugere que o efeito da autocorrelação sobre a taxa de extinção absoluta tem origem apenas na diferença de riqueza entre as categorias de autocorrelação. Portanto, isso mostra que, no sistema estudado, a **autocorrelação espacial não influencia na probabilidade de extinção das espécies**, diferente do que era esperado pelas hipóteses, mas em acordo com resultados obtidos por Birand, Vose e Gavrillets (2012). Além disso, os resultados indicam que a **variação espacial tem um efeito negativo sobre a taxa de extinção por linhagem**. Esse resultado é compatível com o efeito negativo (limiarmente significativo) da variação espacial sobre as taxas de extinção absolutas, o qual é contrabalançado pelo crescimento da riqueza com o aumento de L . Nas taxas de extinção por linhagem, o efeito do aumento da riqueza é controlado, evidenciando o efeito da variação espacial diretamente sobre a probabilidade de extinção das espécies.

A relação negativa de μ com a variação espacial pode estar relacionada com o **aumento da força de seleção numa paisagem mais variada** (L maior). Este conduz a uma maior especialização das espécies nas condições presentes em seus locais de ocorrência, aumentando as barreiras adaptativas e tornando mais difícil para outras espécies, também especialistas em uma faixa estreita de condições ambientais, invadirem os sítios já ocupados. Em um cenário de estabilidade temporal das suas populações ⁴, as

⁴ Com dinâmica populacional determinística e não caótica e ausência de variação temporal no ambiente.

espécies tendem a se concentrar em populações especializadas, com distribuição espacial pequena, mas localmente abundantes e estáveis. Assim, estas comunidades (sítios) possuem baixo risco de invasão por outras espécies e, portanto, baixo risco de extinção.

Tabela 14 – Resultados do modelo 1 para o logaritmo da média da taxa de extinção por linhagem.

ln ($\langle \mu \rangle$) – MODELO 1				
Efeitos fixos	Valor	Desv. pad.	t-valor	p-valor
Intercepto	1.457	0.036	39.92	< 2E – 16
$\Xi\{\text{MÉDIA}\}$				
$\Xi\{\text{ALTA}\}$				
L_c	-0.064	0.022	-2.93	0.004
L_c^2				
$\Xi\{\text{MÉDIA}\} : L_c$				
$\Xi\{\text{ALTA}\} : L_c$				
$\Xi\{\text{MÉDIA}\} : L_c^2$				
$\Xi\{\text{ALTA}\} : L_c^2$				
R^2	0.072	F		8.598
R^2 ajustado	0.064	N. Obs.		113

Em síntese, a heterogeneidade espacial afeta as taxas de extinção de formas diferentes em termos da variação e da autocorrelação espacial. Em geral, paisagens mais heterogêneas diversificam mais, gerando maior riqueza de espécies e, assim, aumentando a chance de alguma delas se extinguir, resultando em um efeito positivo da heterogeneidade sobre a taxa de extinção absoluta. Por outro lado, a variação espacial sozinha tem um efeito negativo sobre a taxa de extinção. Isso ocorre em virtude da estabilidade demográfica e da ausência de variação temporal do ambiente. Nesse caso, o aumento da heterogeneidade favorece a especialização e o isolamento local das espécies, o que amplia as barreiras para a colonização e invasão de sítios já ocupados e, assim, reduz as chances de uma espécie dominante e localmente adaptada ser eliminada pela competição com uma invasora. Para a taxa de extinção por linhagem, o efeito positivo da heterogeneidade desaparece, pois a influência da riqueza é controlada. Dessa forma, o efeito negativo da heterogeneidade (variação espacial) sobre a taxa de extinção por linhagem é explicitado, indicando que **paisagens mais heterogêneas (mais variadas) possuem menores probabilidades de extinção por espécie**.

Os resultados obtidos para as taxas de extinção mostram um cenário diferente do esperado pelas hipóteses. Embora a autocorrelação espacial afete as taxas de extinção absoluta de maneira compatível com as previsões apresentadas, a taxa de extinção por linhagem não foi afetada dessa maneira. Isso sugere que a diminuição da autocorrelação da

paisagem (aumento da heterogeneidade) **não** influencia a probabilidade de extinção das espécies diretamente, mas somente através do aumento do número de espécies e, assim, da chance de alguma delas se extinguir.

Por sua vez, a relação entre as taxas de extinção e a variação espacial também diferiu das expectativas iniciais. A previsão feita na Introdução foi que o principal efeito da variação espacial seria amplificar a diferença entre as categorias de autocorrelação (interação entre Ξ e L). Contudo, esse efeito não foi encontrado. A figura 12a mostra que, na verdade, as taxas de extinção absoluta das três categorias de autocorrelação se tornam mais similares a medida que a variação espacial aumenta. Enquanto a taxa de extinção por linhagem respondeu somente à variação espacial, de forma negativa e sem interação com a autocorrelação.

A magnitude dos números e taxas de extinção diferem bastante dos obtidos em estudos similares utilizando IBMs⁵ (CICCHETO, CARNAVAL e ARAUJO, 2024; BIRAND, VOSE e GAVRILETS, 2012; AGUILÉE *et al.*, 2018). Nesses trabalhos, os números de extinções alcançam valores mais expressivos, com magnitudes que acompanham as magnitudes do número de especiações e, portanto, afetando de modo relevante o processo de diversificação. Essa diferença tem origem na metodologia adotada para as simulações: os IBMs incorporam estocasticidades demográfica e reprodutiva de forma intrínseca, enquanto os resultados deste trabalho foram obtidos a partir de um PBM⁶ em que não foram incorporadas fontes relevantes de estocasticidade ecológica⁷. No modelo deste trabalho, os mecanismos promotores de extinção são bastante limitados, pois a tendência observada foi de estabilização das populações e das comunidades através da monodominância local das espécies, decorrente de suas especializações. Feitas essas considerações, as taxas de extinção absolutas obtidas aqui mostram uma tendência de redução com a autocorrelação espacial, o que é compatível com a redução do número de extinções para paisagens mais autocorrelacionadas, observada por Ciccheto, Carnaval e Araujo (2024) para as taxas de dispersão $D = 3$ e $D = 4$ (figura 6 em Ciccheto, Carnaval e Araujo (2024)).

5.2.3 Média da taxa de diversificação

Os resultados para a média da taxa de diversificação (ao longo do tempo) podem ser observados na figura 13, enquanto os resultados da seleção de modelos podem ser encontrados na tabela 15. Os resultados dos ajustes dos modelos 1 e 2, com $\Delta\text{AICc} < 2$, são mostrados nas tabelas 16 e 17. Em virtude do baixo número de extinções, a taxa líquida de diversificação é determinada principalmente pelas especiações, de forma que os

⁵ IBM: Modelo Baseado em Indivíduos, do inglês *Individual Based Model*

⁶ PBM: Modelo Baseado em Populações, do inglês *Population Based Model*

⁷ Note que, apesar de haverem diferenças metodológicas entre IBM e PBM, elas não impedem a implementação dos mecanismos de estocasticidade em PBMs. A diferença é que, enquanto para IBMs é frequente que a estocasticidade seja parte inerente da dinâmica do modelo, para PBMs isso costuma depender mais do modelo implementado.

padrões encontrados para a taxa de diversificação líquida diferem pouco dos obtidos para a taxa de especiação por linhagem.

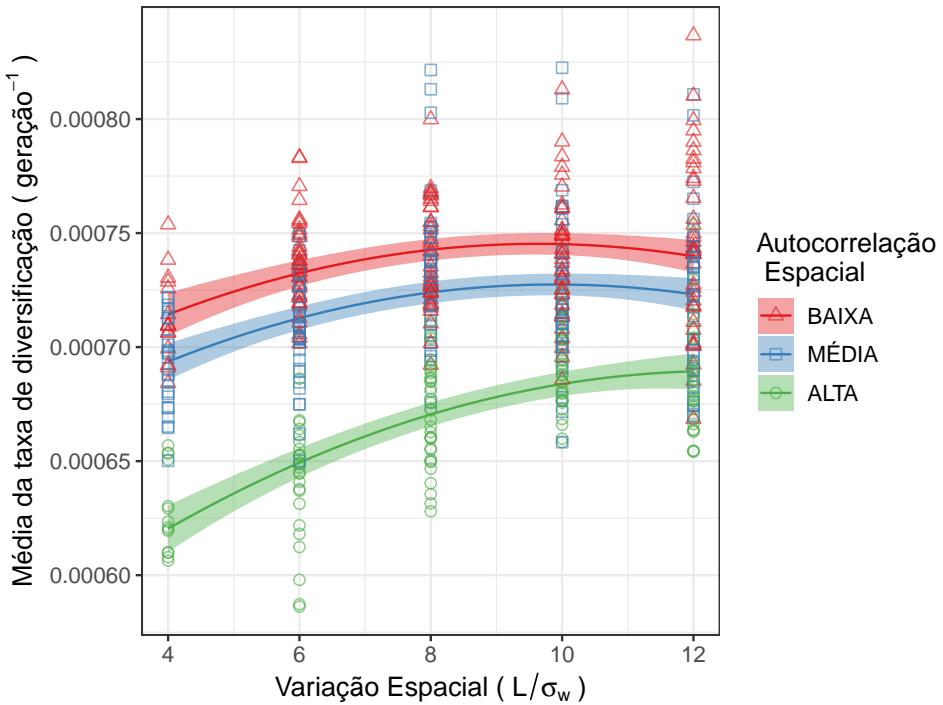


Figura 13 – Média da taxa de diversificação $\langle \hat{r} \rangle$ para os diferentes perfis de heterogeneidade. A heterogeneidade cresce com a redução da autocorrelação espacial (Ξ) e com o aumento da variação espacial (L , medida em unidades da tolerância ambiental das espécies, σ_w). As linhas representam o ajuste do modelo de menor AICc para os dados e as áreas sombreadas representam o intervalo de confiança do ajuste.

A figura 13 mostra que a **média da taxa de diversificação cresce de forma não linear com o aumento da heterogeneidade espacial da paisagem**. Os resultados indicam que a autocorrelação espacial tem um efeito negativo sobre a média da taxa de diversificação $\langle \hat{r} \rangle$, o que representa um efeito positivo da heterogeneidade.

Tabela 15 – Resultados da seleção de modelos para a média da taxa de diversificação ao longo do tempo $\langle \hat{r} \rangle$ ($\Delta\text{AICc} < 4$). Na descrição dos modelos estão representados os termos utilizados como efeitos em cada modelo. O termo 1 representa o intercepto e $1|P$ representa o efeito aleatório da paisagem (24 diferentes paisagens) sobre o intercepto do modelo.

Modelo	DF	logLik	AICc	ΔAICc	Peso	Descrição
1	9	4565,60	-9112,8	0	0,72	$1 + \Xi + L_c + L_c^2 + \Xi : L_c + 1 P$
2	11	4566,74	-9110,9	1,89	0,28	$1 + \Xi + L_c + L_c^2 + \Xi : L_c + \Xi : L_c^2 + 1 P$

Os resultados dos ajustes também mostram que a taxa de diversificação aumenta de forma não-linear com a variação espacial, com intensidade que cai à medida que L

aumenta. As curvas do modelo 1 ajustadas para autocorrelação BAIXA e MÉDIA sugerem uma queda na média da taxa de diversificação entre $L = 10$ e $L = 12$. Contudo, os dados não indicam isso diretamente, o que pode ser constatado pela ausência de diferença entre as taxas de diversificação para $L = 10$ e $L = 12$ (BAIXA: $t = -0.53$, $p = 0.6$; MÉDIA: $t = 0.43$, $p = 0.7$; resultados obtidos para um teste t sem considerar o efeito da paisagem⁸). Ainda assim, essa aparente concavidade de $\langle \hat{r} \rangle$ em L capturada pelo modelo pode ser real, indicando uma queda na diversificação para $L > 12$. Ou então, alternativamente, ela pode ser fruto de uma inadequação do modelo aos dados, os quais, ao invés de uma redução, podem estar indicando a saturação da diversificação para $L > 12$, um padrão que não pode ser representado por um modelo polinomial quadrático. Entretanto, para esclarecer esse ponto, é necessário estender as simulações para valores de $L > 12$, indo além dos resultados explorados neste trabalho.

Tabela 16 – Resultados do modelo 1 da média da taxa de diversificação ao longo do tempo.

$\langle \hat{r} \rangle$ – MODELO 1				
Efeitos fixos	Valor	Desv. pad.	t-valor	p-valor
Intercepto	7.440E-04	0.023E-04	317.6	< 2E – 16
$\Xi\{\text{MÉDIA}\}$	-1.85E-05	0.28E-05	-6.6	8E – 11
$\Xi\{\text{ALTA}\}$	-6.96E-05	0.30E-05	-23.2	< 2E – 16
L_c	2.27E-06	0.78E-06	2.9	4E – 03
L_c^2	-9.8E-07	1.9E-07	-5.2	3E – 07
$\Xi\{\text{MÉDIA}\} : L_c$	0.5E-06	1.1E-06	0.5	0.6
$\Xi\{\text{ALTA}\} : L_c$	5.4E-06	1.2E-06	4.6	4E – 06
$\Xi\{\text{MÉDIA}\} : L_c^2$				
$\Xi\{\text{ALTA}\} : L_c^2$				
Efeitos aleatórios	Desv. pad.	Resíduo	N. Grupos	N. Obs.
1 paisagem	1.70E-09	2.64E-05	24	500
R^2 marginal	0.58	AIC (REML)		-8932.1
R^2 condicional	0.58	logLik (REML)		4475.1

O termo de interação $\Xi : L_c$ não é significativo para autocorrelação MÉDIA, indicando que não há diferenças no efeito da variação espacial sobre a taxa de diversificação em paisagens de autocorrelação BAIXA e MÉDIA. Contudo, o termo de interação é significativo e positivo para $\Xi = \text{ALTA}$. Assim, o efeito da variação espacial L sobre a média da taxa de diversificação é maior para paisagens de autocorrelação ALTA que para autocorrelações BAIXA e MÉDIA. Esse resultado pode refletir o já mencionado efeito

⁸ O resultado não significativo para a diferença nas médias das taxas de diversificação de $L = 10$ e $L = 12$ também se manteve ao considerar o efeito das paisagens tanto como blocos (BAIXA: $t = 0.54$, $p = 0.6$; MÉDIA: $t = -0.42$, $p = 0.7$) como através de um modelo linear misto (BAIXA: $t = 0.54$, $p = 0.6$; MÉDIA: $t = -0.43$, $p = 0.7$).

de diversificação dependente de diversidade, através de uma maior saturação da riqueza em paisagens com autocorrelação BAIXA e MÉDIA. Assim, a taxa de diversificação em paisagens de autocorrelação ALTA é relativamente mais sensível ao aumento de heterogeneidade proporcionada pelo incremento da variação espacial, o que resulta em maior aumento da taxa de diversificação.

Tabela 17 – Resultados do modelo 2 da média da taxa de diversificação ao longo do tempo.

$\langle \hat{r} \rangle$ – MODELO 2				
Efeitos fixos	Valor	Desv. pad.	t-valor	p-valor
Intercepto	7.416E-04	0.029E-04	252.2	< 2E – 16
$\Xi\{\text{MÉDIA}\}$	-1.39E-05	0.41E-05	-3.4	3E – 03
$\Xi\{\text{ALTA}\}$	-6.75E-05	0.44E-05	-15.3	< 2E – 16
L_c	2.32E-06	0.78E-06	3.0	3E – 03
L_c^2	-6.2E-07	3.3E-07	-1.9	6E – 02
$\Xi\{\text{MÉDIA}\} : L_c$	0.3E-06	1.1E-06	0.2	0.8
$\Xi\{\text{ALTA}\} : L_c$	5.4E-06	1.2E-06	4.6	6E – 06
$\Xi\{\text{MÉDIA}\} : L_c^2$	-6.6E-07	4.4E-07	-1.5	0.13
$\Xi\{\text{ALTA}\} : L_c^2$	-3.3E-07	4.8E-07	-0.7	0.50
Efeitos aleatórios	Desv. pad.	Resíduo	N. Grupos	N. Obs.
1 paisagem	1.71E-09	2.64E-05	24	500
R^2 marginal	0.58	AIC (REML)		-8875.4
R^2 condicional	0.58	logLik (REML)		4448.7

6 Especiação e extinção através do tempo

6.1 Análise

6.1.1 Ajuste do número de linhagens através do tempo e tempo de diversificação efetivo

Os dados do número de linhagens (vivas) através do tempo (LTTs) foram utilizados para ajustar um modelo de crescimento logístico, para cada simulação, por meio de minimização de quadrados para modelos não lineares (PINHEIRO e BATES, 2000). Para isso, foi empregada a função `nlsList` do pacote `nlme`. O modelo ajustado é ilustrado pela equação:

$$S_{\gamma i,j} = \frac{K_S j}{1 + \exp \left[\frac{t_{div/2,j} - t_i}{s_j} \right]} + \varepsilon_{i,j} . \quad (6.1)$$

Nessa equação, $S_{\gamma i,j}$ representa a riqueza observada no tempo t_i para a simulação j e $\varepsilon_{i,j}$ representa o erro (ou desvio do modelo) da riqueza observada no tempo t_i e na simulação j . Nessa parametrização do modelo de crescimento logístico, s_j é um parâmetro relacionado com a taxa de diversificação, $t_{div/2}$ é um parâmetro que representa o tempo necessário para a riqueza atingir metade da capacidade de suporte de espécies, K_S . Utilizei os valores ajustados do parâmetro $t_{div/2}$ para criar uma nova escala de tempo t_{eff} , deslocada da escala original dos dados. Essa escala, que foi denominada escala efetiva de diversificação, foi computada de forma independente para cada classe de heterogeneidade (Ξ, L).

Primeiro, foi computado o valor mínimo de $t_{div/2}$ para cada classe de heterogeneidade, $t_{div/2-min}(\Xi, L)$, conforme a equação

$$t_{div/2-min}(\Xi, L) = \min(\{t_{div/2}\}_{\Xi, L}) . \quad (6.2)$$

Em seguida, calculei o tempo efetivo $t_{eff,i}$ de cada simulação j subtraindo dos valores de tempo original, t_j , o valor de $t_{div/2,j}$ e somando o valor mínimo de $t_{div/2}$ para a respectiva classe de heterogeneidade, $t_{div/2-min}(\Xi_j, L_j)$:

$$t_{eff,i,j} = t_i - t_{div/2,j} + t_{div/2-min}(\Xi_j, L_j) . \quad (6.3)$$

6.1.2 Taxas de especiação e extinção ao longo do tempo efetivo de diversificação

Com as séries temporais dos dados alinhadas de acordo com o tempo de diversificação média, $t_{div/2}$, recalculei as taxas totais de especiação $\frac{d\Lambda}{dt}$ e extinção $\frac{dE}{dt}$ ao longo

do tempo usando a aproximação pela derivada numérica centrada (BURDEN e FAIRES, 2011), conforme as equações (5.1),

$$\frac{d\Lambda}{dt}(t_i) = \frac{\Lambda(t_i + \Delta t/2) - \Lambda(t_i - \Delta t/2)}{\Delta t},$$

e (5.2),

$$\frac{dE}{dt}(t_i) = \frac{E(t_i + \Delta t/2) - E(t_i - \Delta t/2)}{\Delta t}.$$

Também recalculei as taxas de especiação e extinção por linhagem, respectivamente λ e μ , usando as equações (5.3),

$$\lambda(t_i) = \frac{\Lambda(t_i + \Delta t/2) - \Lambda(t_i - \Delta t/2)}{\Delta t \cdot \bar{S}_\gamma[t_i - \Delta t/2, t_i + \Delta t/2]},$$

e (5.4),

$$\mu(t_i) = \frac{E(t_i + \Delta t/2) - E(t_i - \Delta t/2)}{\Delta t \cdot \bar{S}_\gamma[t_i - \Delta t/2, t_i + \Delta t/2]}.$$

Após isso, foram tomadas as médias das simulações para cada classe de heterogeneidade (Ξ , L) e para cada intervalo de tempo $\Delta t = 100$ gerações na escala efetiva t_{eff} .

6.2 Resultados e Discussão

Após analisar as taxas médias de especiação, extinção e diversificação, investiguei como o processo de diversificação se desenvolveu ao longo do tempo, analisando as séries temporais dos dados de diversificação.

6.2.1 Linhagens através do tempo (LTT) e tempo efetivo de diversificação

A figura 14 mostra as curvas de número de linhagens através do tempo para as simulações com diversificação completa. Como tendência geral, observamos que as LTTs tem formato sigmoidal (semelhante à letra “S”), o qual é geralmente associado a processos de diversificação dependente de diversidade¹ (RABOSKY, 2013; MARSHALL e QUENTAL, 2016). Tradicionalmente, esses processos costumam ser representados por modelos de crescimento logístico, equivalentes aos utilizados em dinâmica de populações. Contudo, as LTTs não mostram uma estabilização completa do número de espécies, como seria previsto por um modelo logístico. Embora nas gerações finais do tempo simulado a taxa de crescimento da riqueza diminua em relação ao seu valor em tempos intermediários, a figura 14 mostra que ainda há um crescimento pequeno e visualmente linear do número de espécies no final da série temporal, próximo das 10 000 gerações simuladas.

¹ Processos de Diversificação Dependente de Diversidade, também são referidos pela sigla DDD, do inglês *Diversity Dependent Diversification*.

Esses resultados mostram que a riqueza de espécies não atingiu um estado de equilíbrio nas simulações deste trabalho, o qual é frequentemente almejado em trabalhos teóricos. Contudo, Missa, Dytham e Morlon (2016) mostraram que diferentes padrões eco-evolutivos, tais como riqueza, distribuição de abundância de espécies (SAD) e padrões filogenéticos, atingem estados de equilíbrio em escalas temporais muito diferentes. Argumentando também que, embora sejam de interesse teórico, cenários de equilíbrio *stricto sensu* são pouco prováveis na natureza. Portanto, o fato de a riqueza não atingir um estágio de completo equilíbrio não constitui uma limitação dos resultados deste trabalho, pois não torna os resultados obtidos menos representativos de processos reais de diversificação.

Ainda olhando para os padrões das LTTs, é possível notar que a maioria das curvas apresenta concordância com as outras da mesma classe de heterogeneidade. Entretanto, especialmente para as classes de menor heterogeneidade, algumas curvas se destacam das demais. O ápice desse fenômeno ocorre para a classe (BAIXA, 4). Apesar disso, quando olhamos mais atentamente, notamos que a forma de crescimento da riqueza não difere muito entre as curvas, mas que a principal discrepância se deve à variação no tempo de início da diversificação.

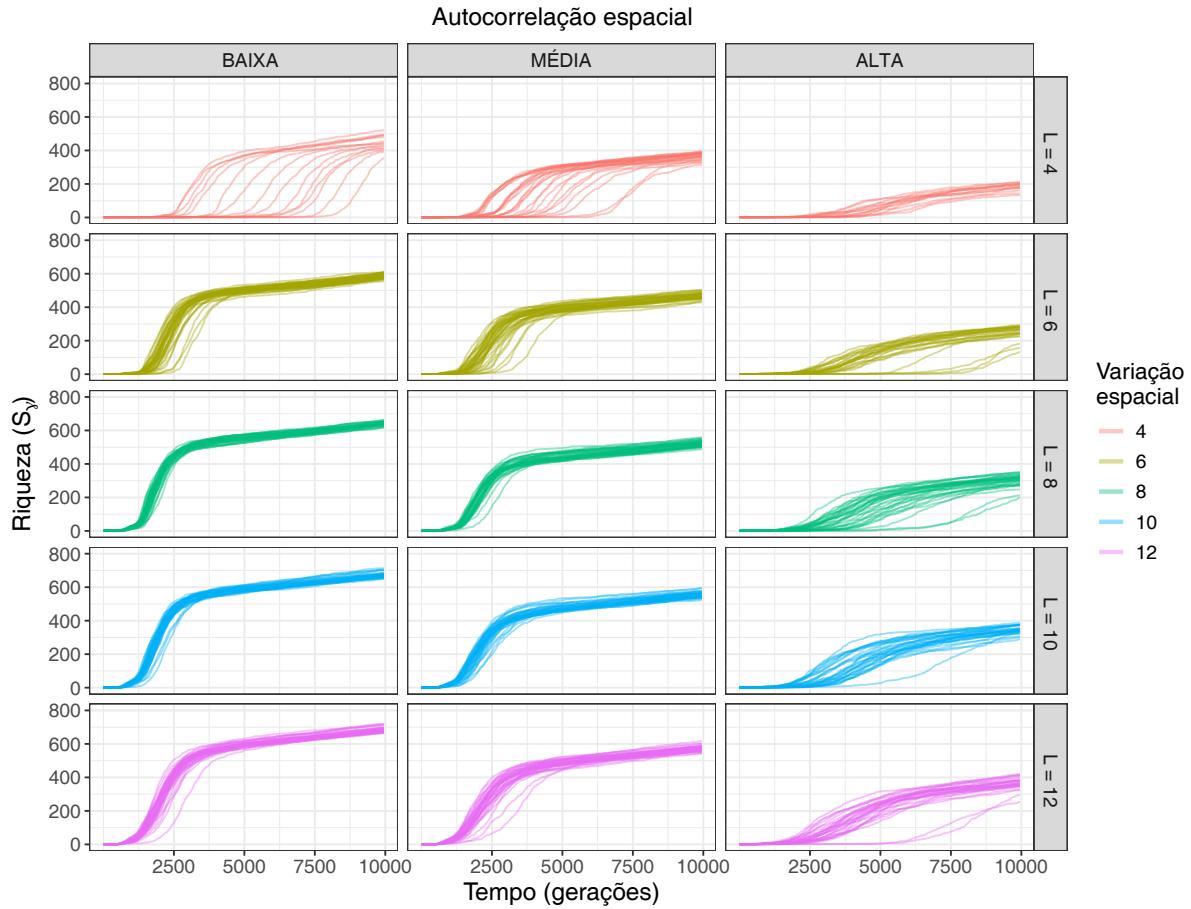


Figura 14 – Linhagens através do tempo (LTTs). A variação espacial é expressa em unidades de tolerância ambiental, σ_w . A heterogeneidade cresce com o aumento da variação espacial e com a diminuição da autocorrelação espacial. Portanto, nessa figura, a heterogeneidade da paisagem cresce do canto superior direito para o canto inferior esquerdo. Note que as informações representadas são os dados brutos das simulações, não os resultados dos ajustes das LTTs.

Para entender esse fenômeno, ajustei um modelo logístico à LTT de cada simulação. Com os valores ajustados do parâmetro $t_{div/2}$, busquei alinhar o tempo de diversificação das curvas da mesma classe de heterogeneidade de acordo com o mínimo do tempo de diversificação média observado. O resultado é apresentado na figura 15. O parâmetro $t_{div/2}$ representa o tempo necessário para a diversidade atingir metade da capacidade de suporte de espécies do modelo logístico, estando correlacionado com o tempo de início da diversificação, uma vez que os outros parâmetros do modelo, a taxa de diversificação e a capacidade de suporte, não variam expressivamente entre as simulações da mesma classe de heterogeneidade. A figura 15 mostra que, embora sem usar diretamente o tempo de início de diversificação, foi possível ajustar satisfatoriamente a escala temporal das curvas para uma escala de tempo de diversificação efetivo, evidenciando a similaridade nas LTTs das simulações da mesma classe de heterogeneidade.

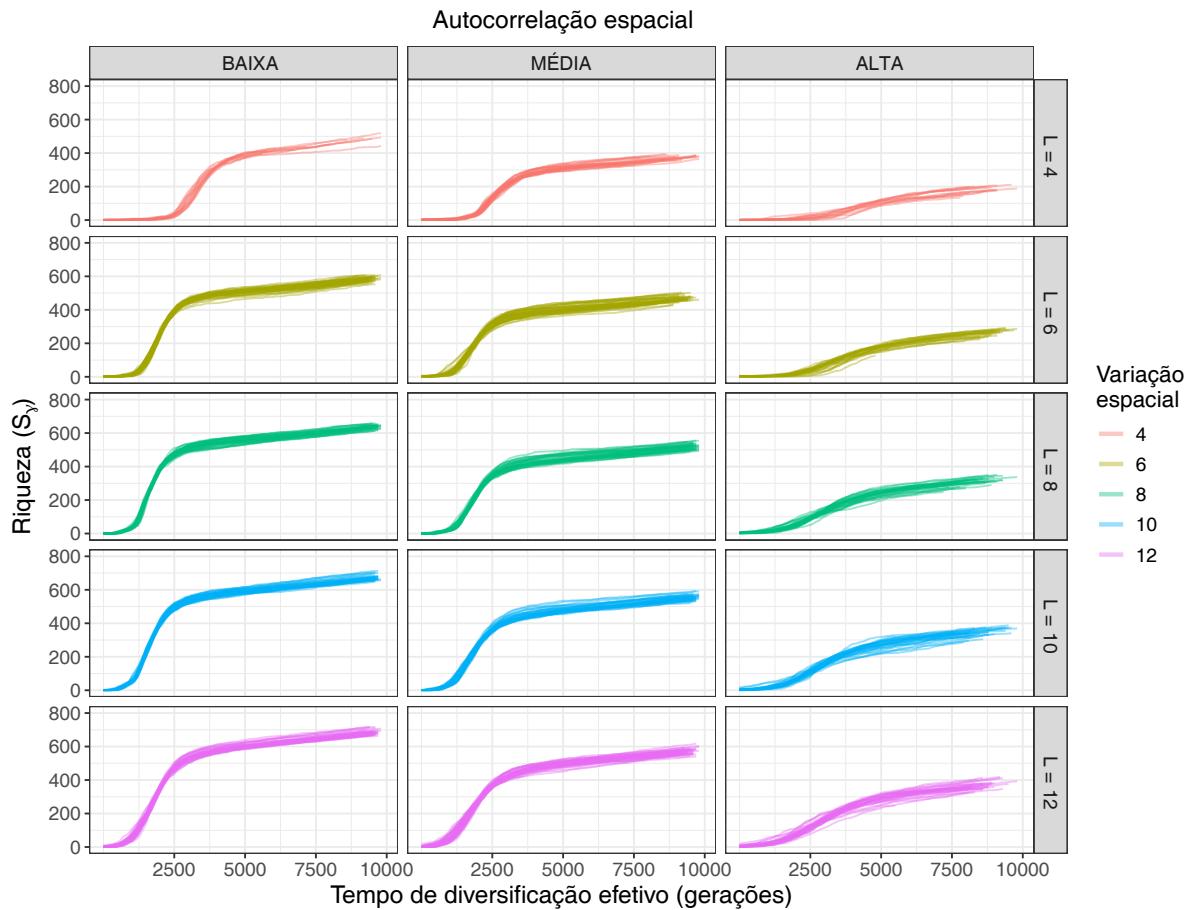


Figura 15 – Linhagens através do tempo (LTT) alinhadas na escala de tempo de diversificação efetivo. A variação espacial é expressa em unidades de tolerância ambiental, σ_w . A heterogeneidade cresce com o aumento da variação espacial e com a diminuição da autocorrelação espacial. Portanto, nessa figura, a heterogeneidade da paisagem cresce do canto superior direito para o canto inferior esquerdo. Note que as informações representadas não são os resultados dos ajustes das LTTs, mas os dados brutos das simulações com a escala de tempo deslocada para a escala de tempo de diversificação efetivo.

É necessário pontuar que duas escolhas feitas nessa abordagem representam suas principais limitações. A primeira é o uso do tempo de diversificação média no lugar do tempo de início de diversificação, e a segunda é o uso do modelo logístico para realizar o ajuste das curvas de diversificação. A primeira escolha foi feita devido a praticidade de utilizar o tempo de diversificação média, o qual pode ser diretamente obtido como parâmetro para pelo menos três classes de modelos, enquanto há maior dificuldade para estimar o tempo de início da diversificação diretamente. Já a segunda escolha, é justificada pelo fato de o modelo logístico se assemelhar às curvas de riqueza ao longo do tempo e ter mostrado maior facilidade para a convergência dos ajustes não lineares, além de ser um modelo fenomenológico tradicionalmente utilizado para representar processos de diversificação dependente de diversidade (RABOSKY, 2013; MARSHALL e QUENTAL, 2016). Contudo, por meio de alguns testes observei que alguns modelos menos tradicionais,

como os modelos de Gompertz e de Holling tipo III (BOLKER, 2008), representam melhor o crescimento da riqueza com o tempo para os resultados deste trabalho, quando comparados por um critério de AIC. Entretanto, estes modelos foram preferidos por apresentarem maior dificuldade de convergência dos ajustes para as classes de heterogeneidade onde os tempos de início da diversificação eram mais discrepantes.

A figura 16 mostra, para cada uma das classes de heterogeneidade, a distribuição dos tempos de diversificação média, $t_{div/2}$, ajustados para as simulações. A dispersão de $t_{div/2}$ indica a influência da aleatoriedade no gatilho inicial do processo de diversificação: quanto maior a dispersão de $t_{div/2}$, mais o início do processo de diversificação depende de eventos determinados ao acaso; quanto menor a dispersão, mais o início da diversificação é previsível e se assemelha a um evento determinista. A distribuição de $t_{div/2}$ apresenta uma tendência de formar picos mais acentuados (menor dispersão) para classes de maior heterogeneidade e de se distribuir mais amplamente (maior influência do acaso) para classes menos heterogêneas. Ou seja, o início da diversificação é um evento mais previsível em paisagens mais heterogêneas que em paisagens menos heterogêneas. Entretanto, para $L = 4$, essa tendência é invertida: à medida que a autocorrelação espacial aumenta, a distribuição do tempo de diversificação se concentra.

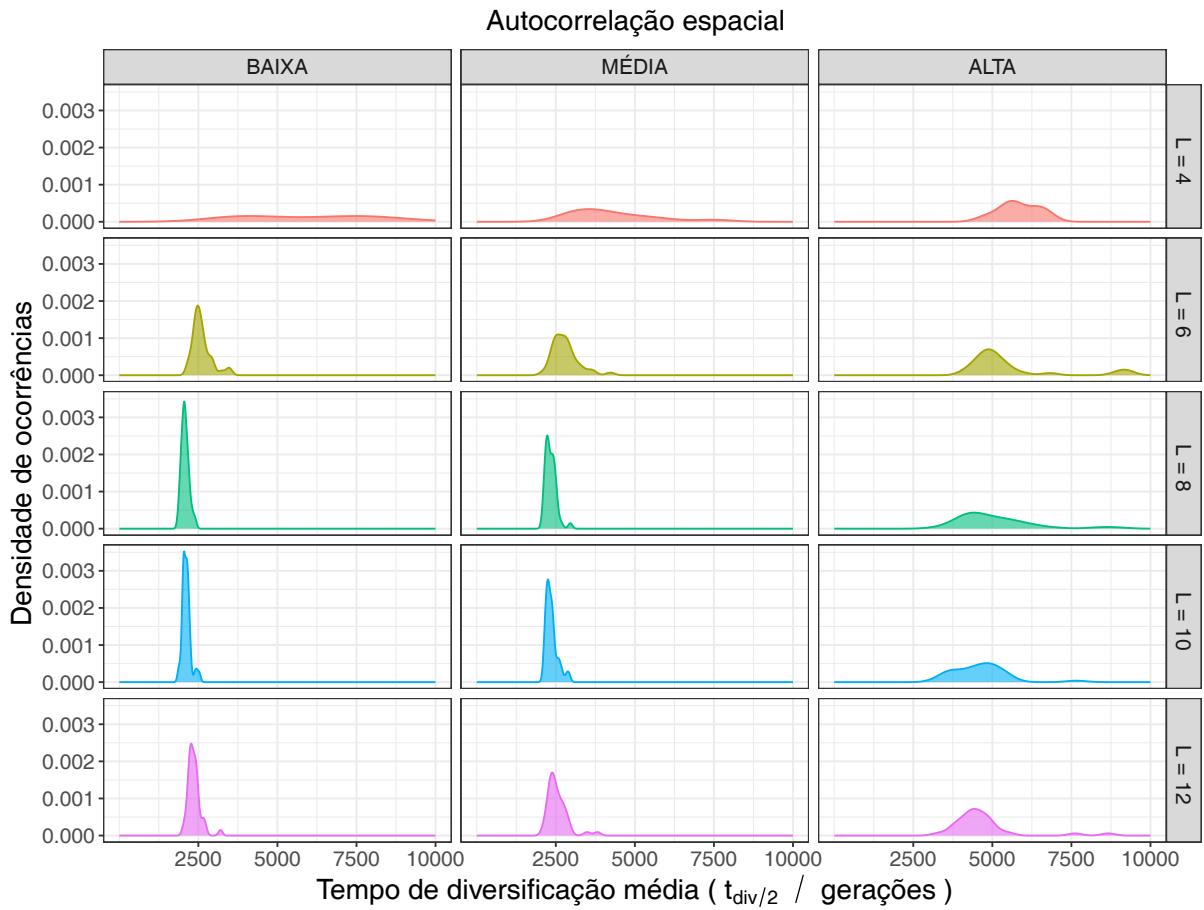


Figura 16 – Distribuição do tempo de diversificação média para os diferentes perfis de heterogeneidade. O tempo de diversificação média é um parâmetro do modelo de crescimento logístico da diversidade, ele caracteriza o tempo em que a riqueza atinge metade da capacidade de suporte de espécies. O tempo $t_{div/2}$ está diretamente relacionado com o tempo de início da diversificação. A variação espacial, L , é expressa em unidades de tolerância ambiental, σ_w . A heterogeneidade cresce com o aumento da variação espacial e com a diminuição da autocorrelação espacial. Portanto, nessa figura, a heterogeneidade da paisagem cresce do canto superior direito para o canto inferior esquerdo.

Para as categorias de autocorrelação BAIXA e MÉDIA, o aumento da variação espacial, L , promove a redução da dispersão de $t_{div/2}$, embora a aparente maior dispersão da distribuição para $L = 12$ possa indicar uma possível reversão dessa tendência para valores de L maiores. Já para autocorrelação espacial ALTA, o efeito da variação espacial na dispersão de $t_{div/2}$ é mais sutil e a avaliação de padrões exige uma análise estatística mais robusta. Contudo, os dados sugerem uma redução da média de $t_{div/2}$ à medida que os valores de L aumentam, indicando que o tempo de espera até o início dos primeiros eventos de especiação diminui à medida que L aumenta. Esse efeito pode ser consequência de um maior isolamento entre populações, induzido pelo aumento da variação espacial.

6.2.2 Taxas de especiação ao longo do tempo

Utilizando os dados na escala de tempo efetivo de diversificação, obtive as taxas de especiação e extinção, absoluta e por linhagem ao longo do tempo. As figuras 17, 18, 19 e 20 mostram as médias dessas taxas, ao longo do tempo, para cada classe de heterogeneidade.

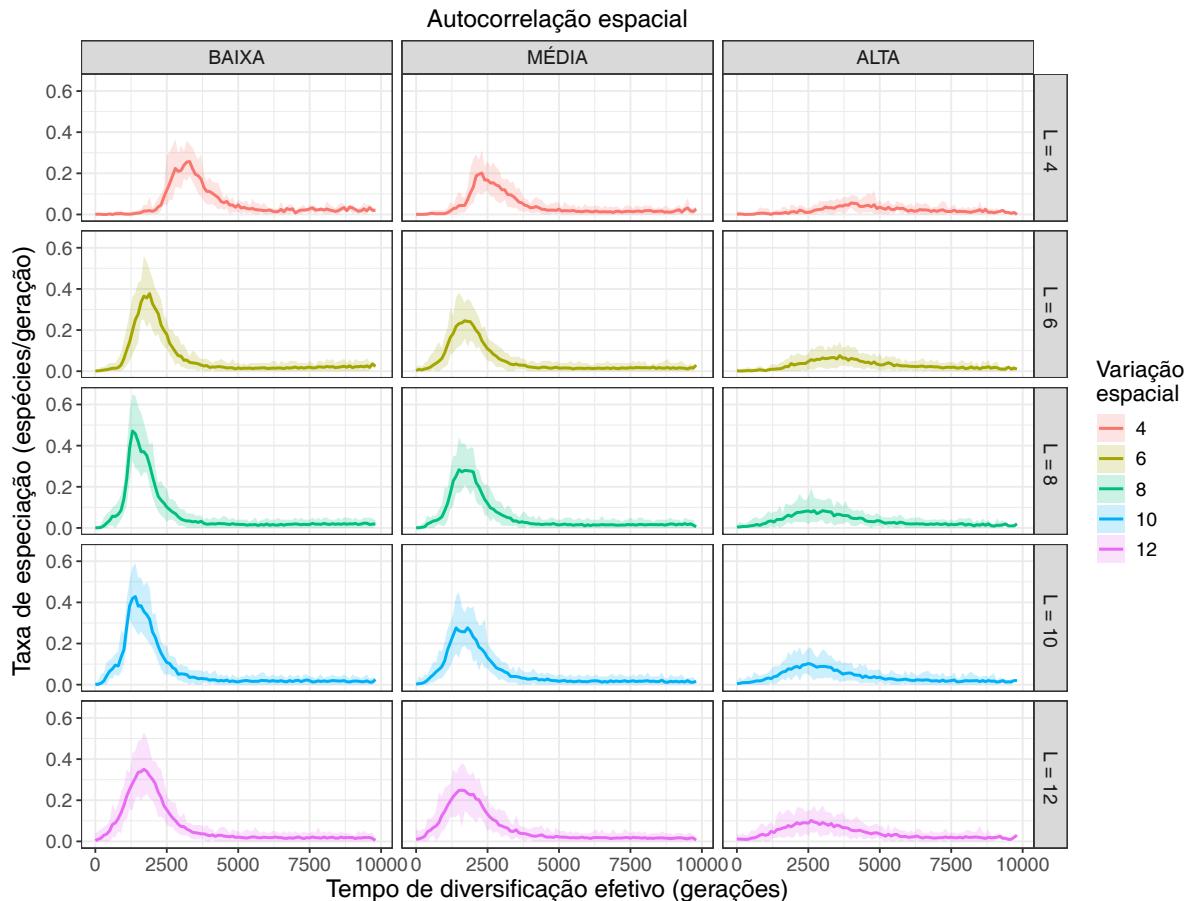


Figura 17 – Taxas de especiação absoluta ao longo do tempo efetivo de diversificação para as diferentes classes de heterogeneidade. As linhas representam a média da taxa de especiação para as diferentes simulações de cada classe de heterogeneidade, os pontos de medida da taxa são espaçados por 100 gerações. A área sombreada representa o intervalo no qual estão contidos 95% dos dados. A variação espacial, L , é expressa em unidades de tolerância ambiental, σ_w . A heterogeneidade cresce com o aumento da variação espacial e com a diminuição da autocorrelação espacial. Portanto, a heterogeneidade da paisagem cresce do canto superior direito para o canto inferior esquerdo do mosaico de gráficos.

A figura 17 mostra a ocorrência de um pico de especiação, aproximadamente entre 1000 e 4000 gerações após o início da diversificação. Após o pico, a taxa de especiação cai expressivamente, mas sem chegar a zero no tempo simulado. No intervalo de tempo que precede o fim da simulação, a taxa de especiação é pequena, mas positiva e aproximadamente constante, sendo responsável pela não completa estabilização da diversidade e pelo padrão de crescimento aproximadamente linear do número de espécies observado

no final das LTTs (figura 14). Essas tendências, contudo, são mais acentuadas quando a autocorrelação espacial é BAIXA, ou seja, quando a heterogeneidade ambiental é alta. Os resultados mostram que o aumento da autocorrelação reduz a altura do pico de especiação, possivelmente também alargando-o, embora esse efeito precise ser confirmado por uma análise estatística mais robusta. Além disso, os resultados sugerem que o aumento da variação espacial (L) tem um efeito negativo sobre o tempo de ocorrência do pico de especiação. Ou seja, na escala de tempo efetivo, o pico de especiação ocorre para tempos menores quanto maior é o valor de L ².

Na figura 18, observamos que a taxa de especiação por linhagem apresenta uma flutuabilidade maior em relação à taxa de especiação absoluta, o que é indicado pela maior amplitude do intervalo de confiança (área sombreada do gráfico). Isso ocorre pois esses resultados dependem da razão entre a taxa de especiação absoluta e o número de espécies vivas no intervalo em que as taxas são calculadas. Especialmente para tempos menores, quando a riqueza ainda é baixa, pequenas diferenças no número de espécies geram variações proporcionalmente grandes nessa razão, amplificando o ruído nos resultados. Um efeito análogo ocorre para a taxa de extinção por linhagem.

Os resultados mostrados na figura 18, revelam uma outra face do processo de especiação. Enquanto a taxa de especiação absoluta reflete o número total de espécies que surgem ao longo do tempo, a taxa de especiação por linhagem, λ , informa quantas espécies novas estão surgindo para cada espécie viva existente. Como o processo de especiação tem natureza exponencial, isto é, o número de novas espécies geradas tende a ser proporcional ao número de espécies pré-existentes, a taxa de especiação por linhagem é particularmente informativa. Mas, diferentemente do que ocorre em um modelo puramente exponencial de diversificação, a taxa λ não é constante, mas varia ao longo do tempo. Particularmente, quando essa variação não é uma consequência do tempo em si, mas do aumento do número de espécies, $\lambda = \lambda(S)$, o processo de especiação, e o de diversificação em geral, é dito um processo dependente de diversidade (RABOSKY, 2013). Essa discussão é inteiramente análoga para as taxas de extinção absoluta e por linhagem (μ).

² É importante destacar que a escala de tempo em que as taxas de especiação e extinção ao longo do tempo foram avaliadas é a escala de tempo efetivo de diversificação. Assim, os resultados dessas análises estão condicionados à metodologia utilizada para calibrar a escala de tempo efetivo, que foi baseada no tempo de diversificação média ajustado pelo modelo logístico. Avalio que essa metodologia se mostrou conveniente para alinhar os dados de diversificação dentro da mesma classe de heterogeneidade. Contudo, também entendo que ela possa ser aprimorada, e ressalto que a interpretação das diferenças no tempo de ocorrência dos picos para as diferentes classes de heterogeneidade deva ser interpretada com cautela.

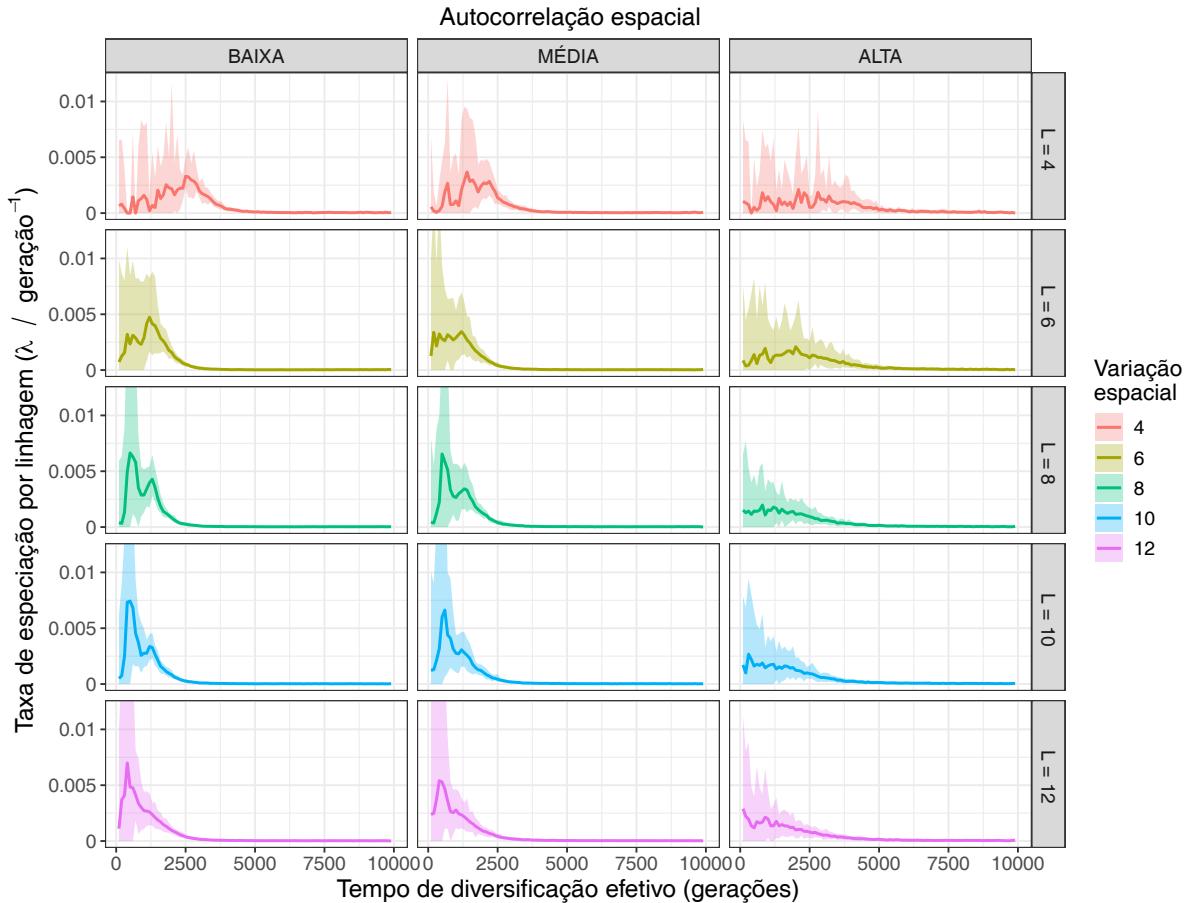


Figura 18 – Taxas de especiação por linhagem ao longo do tempo de diversificação efetivo para as diferentes classes de heterogeneidade. As linhas representam a média da taxa de especiação por linhagem das simulações de cada classe de heterogeneidade, os pontos de medida da taxa são espaçados por 100 gerações. A área sombreada representa o intervalo no qual estão contidos 95% dos dados. Alguns intervalos de confiança foram cortados para preservar a escala dos gráficos, a representação dos mesmos resultados com o intervalo de confiança completo, em escala logarítmica, pode ser consultada na figura 22 do apêndice A. A variação espacial, L , é expressa em unidades de tolerância ambiental, σ_w . A heterogeneidade cresce com o aumento da variação espacial e com a diminuição da autocorrelação espacial. Portanto, a heterogeneidade da paisagem cresce do canto superior direito para o canto inferior esquerdo do mosaico de gráficos.

Na figura 18, observamos a ocorrência de um pico na taxa de especiação por linhagem em um tempo menor que o observado para a taxa absoluta, especialmente para valores de L maiores (maior heterogeneidade). Isso indica que o número de especiações que ocorrem para cada espécie viva tende a ser maior no início da diversificação e cair com o passar do tempo (e o aumento do número de espécies na paisagem). Além disso, o aumento da autocorrelação espacial (diminuição da heterogeneidade) parece estar relacionado com picos menores em λ , indicando um pulso de especiação menor, e também com uma queda mais lenta da taxa de especiação, sugerindo que o processo de especiação está menos

concentrado e mais distribuído ao longo do tempo de diversificação. Para as classes com autocorrelação BAIXA e MÉDIA e variação espacial $L > 4$, os resultados também indicam a existência de dois picos em λ , geralmente com o segundo menor que o primeiro. Isso pode ser consequência de uma onda secundária de especiações, que ocorre a partir da expansão das áreas ocupadas pelas espécies formadas na primeira onda de especiações. Entretanto, é necessário uma investigação mais detalhada para avaliar essa possibilidade. Para heterogeneidades menores, o processo de especiação é mais difuso e ruidoso ao longo do tempo, com λ apresentando múltiplos picos e flutuações, embora as maiores taxas de especiação ainda se concentrem na primeira metade do tempo de diversificação simulado.

6.2.3 Taxas de extinção ao longo do tempo

Nas figuras 19 e 20, observamos que a extinção apresenta um comportamento muito mais ruidoso que a especiação. Notamos também que as taxas de extinção tem magnitudes bem inferiores às das taxas de especiação, com cerca de duas ordens de grandeza de diferença. Isso revela a dominância do processo de especiação em relação à extinção nos cenários simulados. Os resultados mostram um cenário em que o processo de diversificação é controlado pela especiação, enquanto as extinções são eventos raros e esporádicos – e por isso ruidosos, com pouca influência sobre o padrão geral de diversificação. A origem desses resultados provém de dois elementos desse estudo: o primeiro é o uso de um modelo determinístico (e não caótico) para representar a dinâmica ecológica; o segundo é a ausência de variabilidade temporal nas condições ambientais das paisagens estudadas. A ausência de estocasticidades demográfica e ambiental, e também de comportamento caótico na dinâmica populacional, promove uma grande estabilidade das populações, especialmente daquelas mais abundantes. À medida que o isolamento e as especiações reduzem a distribuição espacial das espécies, suas populações tendem a se especializar nas condições ambientais locais, alcançando dominância, excluindo espécies concorrentes e prevenindo novas colonizações nesse sítio. Como as condições ambientais são fixas no tempo, não há mecanismos capazes de alterar o estado de dominância local dessas espécies, o que as mantém distantes de qualquer risco de extinção. Portanto, as simulações deste trabalho representam um sistema biológico em que as populações apresentam uma dinâmica suave (não caótica e pouco suscetível à estocasticidade) sobre paisagens estáveis ao longo do tempo, ou com variação ambiental lenta o suficiente para permitir a contínua adaptação das espécies às mudanças.³

³ Mesmo para dinâmicas populacionais determinísticas e não caóticas, a variabilidade temporal nas paisagens pode afetar a dinâmica ecológica e quebrar a dominância das espécies (CHESSON, 2000; FISCHER *et al.*, 2020), favorecendo a coexistência de espécies e aumentando a frequência e a importância de eventos de extinção (local e total) para a dinâmica das comunidades e da diversificação. Portanto, é relevante que trabalhos futuros busquem explorar como a heterogeneidade influencia os processos macroevolutivos em cenários de variabilidade temporal da paisagem.

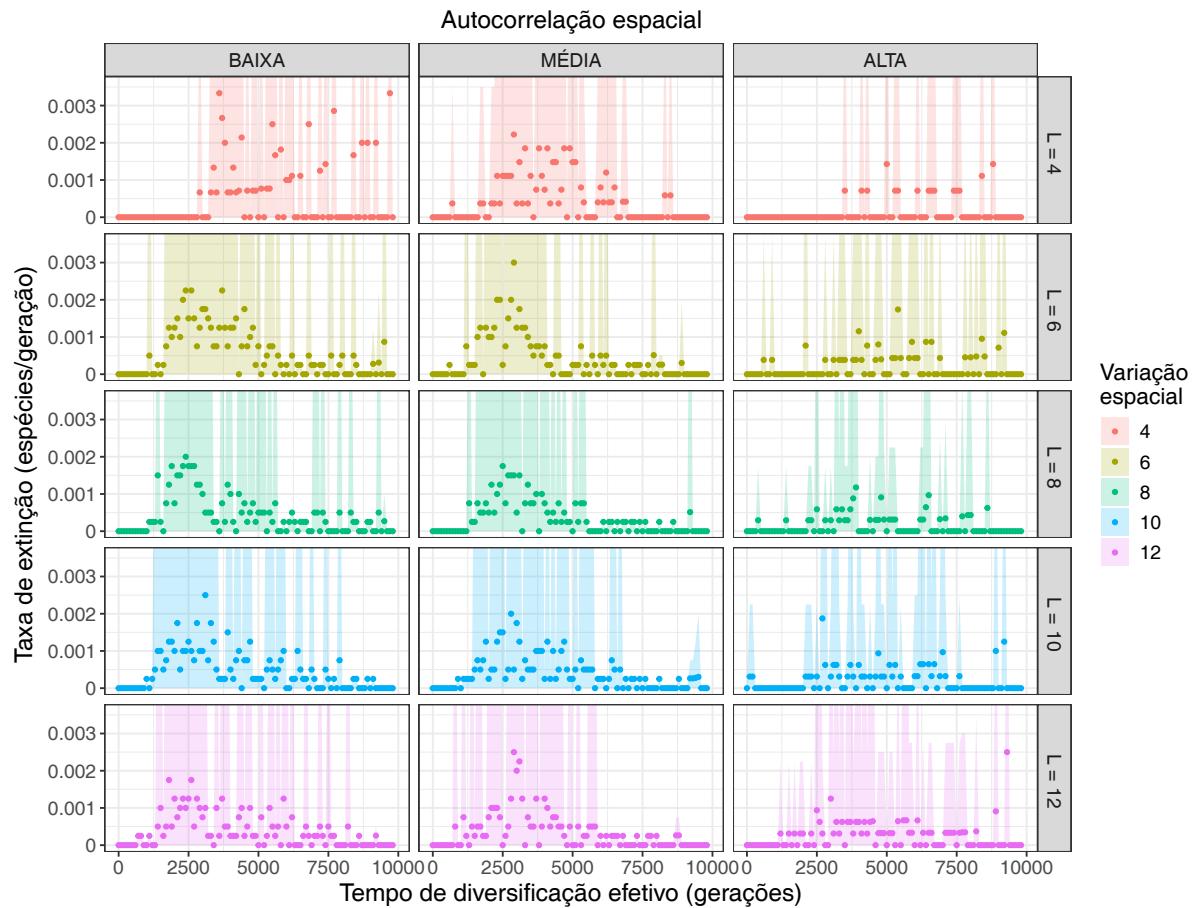


Figura 19 – Taxas de extinção absoluta ao longo do tempo efetivo de diversificação para as diferentes classes de heterogeneidade. Os pontos representam a média da taxa de extinção para as simulações de cada classe e são espaçados por 100 gerações. A área sombreada representa o intervalo no qual estão contidos 95% dos dados. Alguns intervalos de confiança foram cortados para preservar a escala dos gráficos, a representação dos mesmos resultados com o intervalo de confiança completo, em escala logarítmica, pode ser consultada no apêndice A. A variação espacial, L , é expressa em unidades de tolerância ambiental, σ_w . A heterogeneidade cresce com o aumento da variação espacial e com a diminuição da autocorrelação espacial. Portanto, a heterogeneidade da paisagem cresce do canto superior direito para o canto inferior esquerdo do mosaico de gráficos.

Na figura 19, apesar do comportamento ruidoso dos pontos, podemos identificar alguns padrões. Para heterogeneidade intermediária e alta, classes de $L > 4$ e autocorrelação MÉDIA e BAIXA, observamos que a taxa de extinção inicia nula, cresce a partir do aumento da riqueza na paisagem, apresenta um pico largo, entre 2500 e 3000 gerações após o início da simulação, e então cai, lentamente, até o final do tempo simulado. Esse pico das extinções ocorre aproximadamente ao mesmo tempo em que ocorre o final da queda das especiações (figura 17), que também é o momento onde a riqueza nas LTTs (figura 15) transiciona de um crescimento quase exponencial rápido, para um crescimento pequeno e linear. O surgimento de muitas espécies em um período relativamente curto pode gerar instabilidade na dinâmica demográfica das comunidades, tanto pela colonização de novos

sítios favoráveis pelas novas espécies como pela exclusão de populações mal adaptadas. Assim, esse pico nas extinções pode ser consequência de um regime transitório, onde a dominância de populações de espécies mais bem adaptadas leva à exclusão de espécies localmente menos adaptadas.

Nas classes de menor heterogeneidade, tanto as com $L = 4$ como aquelas com autocorrelação ALTA, não é observada a formação de um pico nas extinções. Nesses cenários, as extinções parecem ser eventos ainda mais difusos e esporádicos ao longo do tempo, repetindo o padrão que também foi observado para as taxas de especiação dessas classes.

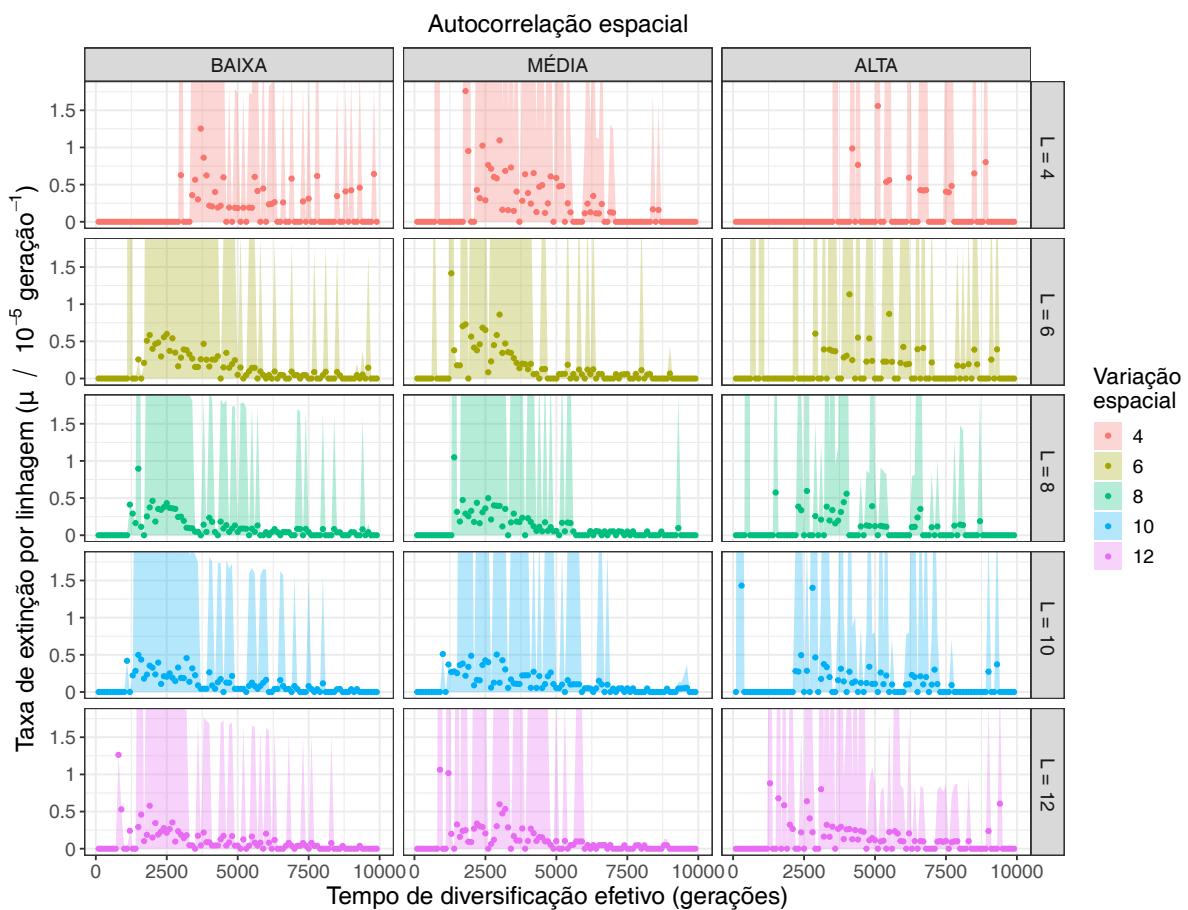


Figura 20 – Taxas de extinção por linhagem ao longo do tempo efetivo de diversificação para os diferentes perfis de heterogeneidade. Os pontos representam a média da taxa de extinção por linhagem para as simulações de cada classe e são espaçados por 100 gerações. A área sombreada representa o intervalo no qual estão contidos 95% dos dados. Alguns intervalos de confiança foram cortados para preservar a escala dos gráficos, a representação dos mesmos resultados com o intervalo de confiança completo, em escala logarítmica, pode ser consultada na figura 23 do apêndice A. A variação espacial, L , é expressa em unidades de tolerância ambiental, σ_w . A heterogeneidade cresce com o aumento da variação espacial e com a diminuição da autocorrelação espacial. Assim, a heterogeneidade da paisagem cresce do canto superior direito para o canto inferior esquerdo do mosaico de gráficos.

A figura 20 mostra um padrão similar para a taxa de extinção por linhagem, μ . Todavia, assim como ocorre para a especiação por linhagem, o pico de μ é deslocado para tempos menores em relação ao pico da taxa de extinção absoluta. Para as classes de maior heterogeneidade, a probabilidade de uma espécie em particular ser extinta é baixa, mas não nula. Ela inicia em zero no começo do processo de diversificação, salta para um valor máximo próximo ao pico da taxa de especiação absoluta e cai continuamente até o fim do tempo simulado. Para heterogeneidades menores, novamente as extinções são mais distribuídas ao longo do tempo. Contudo, ainda parece haver uma tendência de queda em μ com o passar do tempo, à medida que o número total de espécies aumenta.

A coincidência entre o pico da taxa de especiação absoluta e o advento das extinções sugere a existência de uma conexão entre esses dois eventos. Os quais podem estar sendo desencadeados por um mecanismo comum, talvez relacionado à ocupação da paisagem ou à saturação do espaço de nicho. Portanto, esses resultados abrem perspectivas para que trabalhos futuros investiguem essa relação em maior profundidade.

Os resultados mostram que a redução da diversificação observada nas LTTs é controlada pela queda na taxa de especiação e não pelo incremento da taxa de extinção. Esse resultado difere do obtido por Ciccheto, Carnaval e Araujo (2024), mas é compatível com a diversificação de clados cujas filogenias moleculares (contendo apenas espécies vivas) exibem saturação da diversidade, conforme mostrado por Rabosky e Lovette (2008) e corroborado por Quental e Marshall (2009). Isto sugere que cenários como os simulados neste trabalho, onde a dinâmica eco-evolutiva é caracterizada por estabilidade populacional e baixas taxas de extinções, refletem padrões que de fato podem ser observados na natureza.

Os resultados de Rabosky e Lovette (2008) mostram três exemplos de clados cujas filogenias moleculares mostram padrões de diversificação compatíveis com os encontrados nas simulações deste trabalho, ou seja, grande diversificação inicial seguida de queda da taxa especiação. São eles: os lagartos australianos da família Agamidae (HARMON *et al.*, 2003), as toutinegras da América do Norte do gênero *Dendroica* (LOVETTE e BIRMINGHAM, 1999) e as pítons australo-papuas (RAWLINGS *et al.*, 2008). Os resultados deste trabalho, contudo, não permitem inferir se a semelhança dos padrões de diversificação entre as simulações e as filogenias desses clados tem origem na similaridade dos cenários eco-evolutivos dessas radiações com o cenário modelado pelas simulações, pois é possível que outros cenários eco-evolutivos também produzam padrões de diversificação similares.

Por fim, os resultados deste trabalho são compatíveis com um processo de diversificação dependente de diversidade (RABOSKY, 2013; MARSHALL e QUENTAL, 2016). O mecanismo explícito pelo qual esse processo acontece provavelmente está relacionado à evolução dos atributos das espécies e à saturação do espaço de nicho. A avaliação desse mecanismo poderá ser feita em trabalhos futuros, por exemplo, por meio da análise

explícita da evolução dos atributos das espécies nas simulações, assim como da relação entre evolução fenotípica e diversificação.

7 Conclusão

Nesse trabalho, avaliei a influência da heterogeneidade da paisagem sobre o processo de diversificação. Particularmente, investiguei o efeito da heterogeneidade espacial de uma condição ambiental sobre as taxas de especiação e extinção das linhagens se desenvolvendo sobre essas paisagens. Para conduzir essa investigação, foi simulada a dinâmica eco-evolutiva sobre paisagens com diferentes graus de heterogeneidade por meio de um modelo eco-evolutivo mecanístico.

Para isso, parti de modelos bem estabelecidos da teoria ecológica. A partir destes, desenvolvi um modelo eco-evolutivo representando um sistema de competição entre espécies, que interagem com o ambiente por meio da compatibilidade do seu ótimo ambiental com as condições ambientais locais. Modelei a dispersão das espécies com base em um *kernel* exponencial, levando em conta a sua abundância. Utilizando a teoria da Genética Quantitativa e um arcabouço baseado nos trabalhos de Lande (1976) e McPeek (2017), estabeleci uma conexão direta entre o modelo da dinâmica ecológica e o modelo de evolução de atributos. Por último, defini um critério de especiação baseado no isolamento entre populações e explorei algumas das consequências teóricas da combinação desse critério com o modelo de dispersão adotado.

A partir desses primeiros resultados teóricos, avaliei que o *kernel* de dispersão tem influência direta no tempo de espera para especiação. Assim, evidenciei a importância da realização de estudos sobre o efeito do *kernel* de dispersão e, particularmente, sobre o papel das LDDs para as especiações. Concluí que, para o modelo adotado, com *kernel* de dispersão N-exponencial e especiação puramente alopátrica, a ocorrência de especiações depende da (i) taxa de dispersão da espécie; da sua (ii) abundância e do (iii) tamanho das barreiras de dispersão presentes na paisagem. Tais barreiras podem ser de natureza física, como obstáculos que dificultam ou impedem a dispersão entre sítios, ou ambiental, como a existência de sítios com condições ambientais inadequadas para algumas espécies, o que reduz a conectividade entre manchas de habitat favorável. Estas últimas são as únicas barreiras presentes nas paisagens investigadas neste trabalho. Fixada a taxa de dispersão para todas as espécies, avaliei que populações menos abundantes tendem a permanecer mais isoladas e, assim, necessitam um tempo de espera menor para o acúmulo de divergência até a especiação.

Na implementação das simulações, também introduzi algumas modificações no pacote `gen3sis`, com as quais otimizei o uso de espaço de armazenamento para paisagens nas quais as distâncias entre sítios não mudam com o tempo. No caso deste trabalho, onde as paisagens possuem 30×30 sítios e 10 000 passos temporais, isso representou

uma economia de espaço de armazenamento de cerca de 5.5 GB (redução de 99.96%) por paisagem. A implementação do modelo eco-evolutivo foi realizada em R, mas utilizando funções em C++ através da biblioteca Rcpp, de modo a otimizar a execução das simulações. Como resultado, o tempo médio de execução de uma simulação foi aproximadamente 6h, já o tempo real gasto para a execução das 600 simulações utilizadas nesse trabalho, utilizando paralelização em um total de 30 núcleos, foi cerca de 150h.

Caracterizei a heterogeneidade espacial das paisagens utilizando duas métricas independentes: a autocorrelação espacial, Ξ , para a qual defini as categorias de autocorrelação BAIXA, MÉDIA e ALTA; e a variação espacial, $L = \{4, 6, 8, 10, 12\}$, mensurada em termos da tolerância ambiental σ_w . A variação espacial representa a amplitude do intervalo de valores das condições ambientais (*range*) e está diretamente relacionada ao desvio padrão da condição ambiental na paisagem. A autocorrelação espacial é negativamente relacionada com a heterogeneidade, enquanto a variação espacial é positivamente relacionada com a heterogeneidade espacial. Simulei a dinâmica eco-evolutiva sobre 24 paisagens fictícias (8 de cada categoria de autocorrelação), variando o valor de L e totalizando 600 simulações (histórias evolutivas).

De forma geral, os resultados das simulações sobre as diferentes paisagens se mostraram coerentes dentro de cada classe de heterogeneidade e foram pouco influenciados pela identidade das paisagens. A riqueza ao final das simulações apresentou três situações marcadamente distintas, que denominei *estados de diversificação*: não diversificação (ND), diversificação incompleta (DI) e diversificação completa (DC). Concluí que o estado de diversificação é influenciado pela heterogeneidade da paisagem. No regime de dispersão explorado a dispersão ocorre predominantemente entre sítios vizinhos com eventos muito raros de dispersão de longa distância. Nesse cenário, as linhagens evoluindo sobre paisagens pouco heterogêneas apresentam menor probabilidade de alcançar o estado de diversificação completa e probabilidades elevadas de não diversificar ou alcançar diversificação incompleta. Por outro lado, concluí que linhagens evoluindo sobre paisagens mais heterogêneas apresentam alta probabilidade de alcançar o estado de diversificação completa, formando padrões de saturação da diversidade. Assim, evidenciei que a heterogeneidade é um fator determinante para a ocorrência de diversificação, favorecendo os processos de dispersão e isolamento populacional que promovem a especiação alopátrica.

Analisando somente os dados de diversificação completa (DC), encontrei que a heterogeneidade espacial tem um efeito positivo, mas não linear, sobre a **riqueza de espécies** gerada pelo processo de diversificação. Concluí que, à medida que a heterogeneidade aumenta, seja através do aumento da variação espacial, L , ou da diminuição da autocorrelação espacial, a riqueza de espécies também aumenta. Contudo, esse aumento cai em intensidade à medida que a heterogeneidade cresce. Esse e outros dos principais resultados do trabalho são ilustrados no esquema da figura 21.

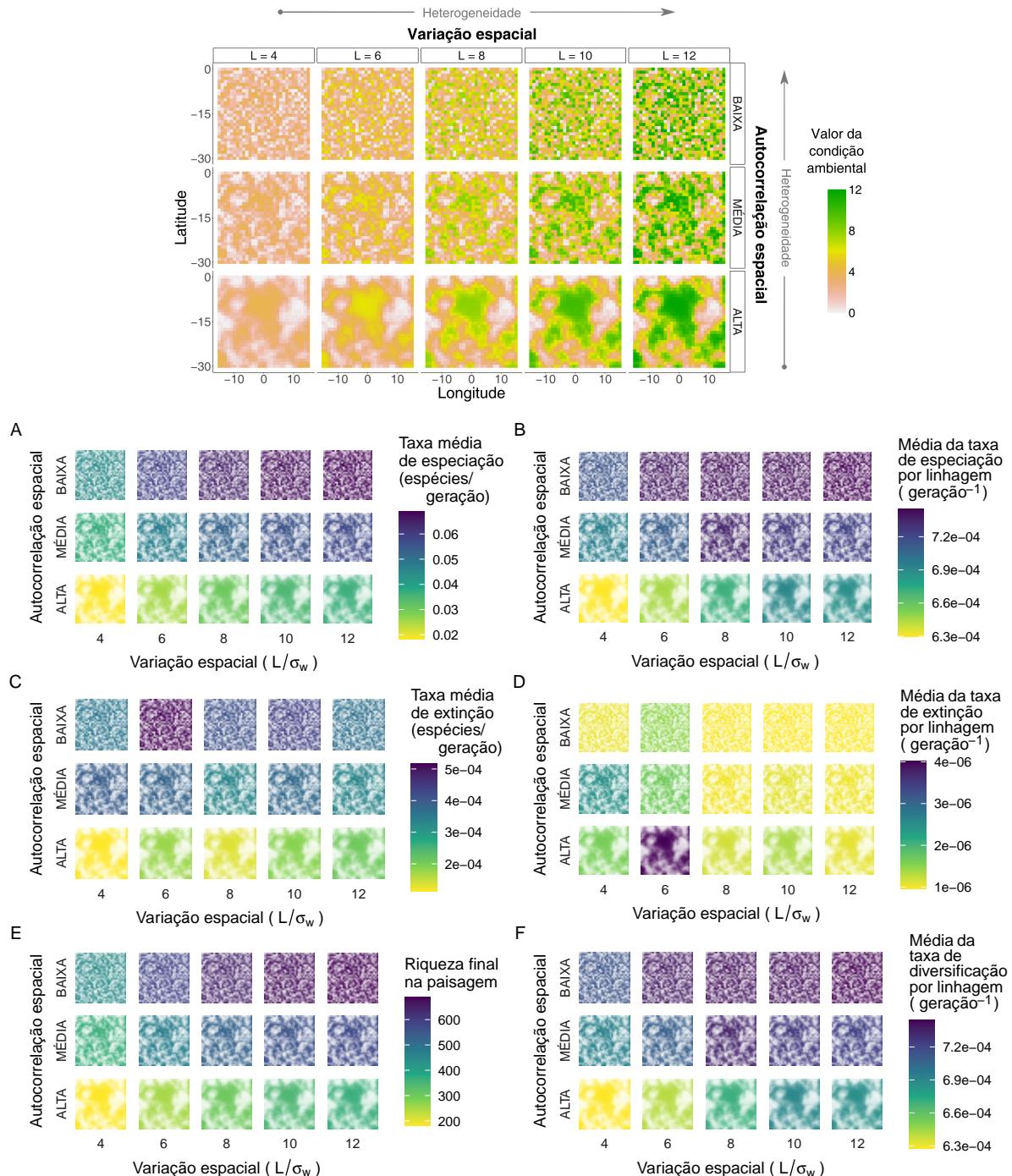


Figura 21 – Esquema com os principais resultados do trabalho. No topo, o mosaico de paisagens ilustra o gradiente de heterogeneidade em termos da variação e autocorrelação espaciais. Tanto a condição ambiental como a variação espacial (L) são expressas em unidades de σ_w , que representa a tolerância ambiental das espécies. Nos painéis A–F, as cores das paisagens representam o valor médio das grandezas para a classe de heterogeneidade correspondente. Em todos os painéis a heterogeneidade cresce da esquerda para a direita e de baixo para cima, ou seja, do canto inferior esquerdo para o canto superior direito. Resultados mostrados nos painéis: A) Média da taxa de especiação absoluta; B) Taxa média de especiação por linhagem; C) Média da taxa de extinção absoluta; D) Taxa média de extinção por linhagem; E) Riqueza final na paisagem; F) Média da taxa de diversificação por linhagem. A variação da intensidade da cor na mesma paisagem (de branco a opaco) não tem relação com a ocupação dos sítios, ela apenas ilustra a configuração espacial de uma paisagem com o correspondente valor de autocorrelação espacial.

Tanto a taxa média de especiação absoluta, quanto a média da taxa de especiação por linhagem crescem com o aumento da heterogeneidade espacial, mas apresentam saturação à medida que a heterogeneidade da paisagem aumenta. Particularmente, paisagens mais autocorrelacionadas têm taxas médias de especiação menores que paisagens menos autocorrelacionadas e as taxas de especiação também crescem para paisagens com maior variação espacial. Assim, a heterogeneidade espacial da paisagem, além de ser um fator promotor de diversificação, também determina quanta diversidade emerge na paisagem por meio da especiação. A saturação observada para as taxas de especiação é resultado da limitação do número de sítios e dos efeitos de exclusão competitiva e de prioridade. Estes, na ausência de flutuações demográficas temporais, geram dominância local das espécies e previnem a colonização de novos sítios, paralisando o mecanismo gerador de novas espécies.

As taxas médias de extinção obtidas foram muito inferiores às taxas de especiação, mostrando que, no sistema estudado, o processo de diversificação é controlado pela especiação, e as extinções são eventos raros. Ainda assim, as taxas de extinção se mostraram sensíveis ao efeito da heterogeneidade espacial. Concluí que a heterogeneidade da paisagem afeta de forma positiva a taxa de extinção absoluta, especialmente por intermédio do aumento do número de espécies. No entanto, a heterogeneidade, em termos da autocorrelação espacial, não afeta a probabilidade de extinção de uma espécie. Por outro lado, a heterogeneidade, por meio da variação espacial, tem efeito negativo sobre a probabilidade de extinção de uma espécie. Esse resultado surpreendente é explicado pelo aumento da dissimilaridade ambiental média entre os sítios com o aumento da variação espacial L , dado que as condições ambientais na paisagem passam a cobrir um intervalo de valores maior. A maior dissimilaridade ambiental dificulta a invasão das comunidades por espécies vindas de outros sítios, as quais são, em geral, menos adaptadas a condição local que as espécies que se estabeleceram no sítio primeiro. Ao prevenir as invasões, diminui também o risco das espécies serem extintas em decorrência de exclusão competitiva, uma vez que elas alcancem a dominância em pelo menos um sítio.

Dessa maneira, os resultados que obtive para a taxa de especiação por linhagem corroboram as hipóteses (Hipóteses 1, 2 e 3) de aumento da taxa de especiação com a redução da autocorrelação espacial, e também estão em acordo com os resultados de outros trabalhos (CICCHETO, CARNAVAL e ARAUJO, 2024). Entretanto, concluí que a taxa de extinção por linhagem não é influenciada pela autocorrelação espacial. É provável que esse último resultado esteja relacionado com a estabilidade demográfica das populações no nosso modelo. Essa estabilidade favorece a especialização local e a dominância de uma única espécie nas comunidades, restringindo as chances de extinção. Esse mesmo efeito também justifica a diferença na escala do número de extinções em relação ao trabalho de Ciccheto, Carnaval e Araujo (2024).

Concluí também que a variação espacial tem um efeito diferente do que o conjecte-

turado. Ao invés de agir acentuando o efeito da autocorrelação espacial (Hipótese 4), a variação espacial determina diretamente, em conjunto com a autocorrelação, o grau de heterogeneidade da paisagem e, assim, influencia por si própria as taxas de especiação e extinção nas paisagens.

A análise das séries temporais do número de linhagens (LTTs) permitiu evidenciar um padrão pouco explorado em estudos de macroevolução: o tempo de início da diversificação. Constatei que as curvas de número de linhagens das diferentes histórias eco-evolutivas podem diferir bastante em termos do tempo em que a diversificação inicia, mas, uma vez que isto ocorre, elas apresentam padrões muito similares de taxas de diversificação e saturação de espécies (dependência de diversidade) dentro da mesma classe de heterogeneidade.

Usando o tempo de diversificação média como um *proxy* para o tempo de início da diversificação, concluí que tanto a média quanto o desvio padrão (dispersão) do tempo de início da diversificação são influenciados pela heterogeneidade da paisagem. Paisagens mais heterogêneas possuem tempo de início da diversificação menor e com baixa dispersão, revelando um cenário onde o processo de diversificação é facilitado e acontece de forma mais assertiva. Já em paisagens pouco heterogêneas, tanto a média quanto a dispersão do tempo de início de diversificação são maiores, indicando que o início da diversificação é mais influenciado pelo acaso, seja através da idiosyncrasia das paisagens ou das histórias eco-evolutivas em si, tornando o início do processo de diversificação um evento menos previsível.

Por fim, analisei o perfil temporal das taxas de especiação e extinção, corrigido pelo tempo de diversificação média. Constatei que a taxa de especiação apresenta um pico logo após o início da diversificação, enquanto a taxa de extinção apresenta um máximo de ocorrências logo após, quando a taxa de especiação passa a cair. Após o pico, ambas, especiações e extinções, diminuem de frequência, mas sem deixarem de ocorrer por completo, especialmente as especiações. A análise qualitativa desses resultados nos permitiu inferir que a diversificação ocorre de forma compatível com um processo dependente de diversidade, controlado essencialmente pelas especiações, que caem de frequência a medida que a riqueza na paisagem aumenta. Além disso, o processo de diversificação é controlado pela heterogeneidade da paisagem, a qual influencia o tempo de início da diversificação, a magnitude e a dispersão das especiações e extinções ao longo do tempo, assim como a riqueza de espécies máxima gerada na paisagem.

Através das simulações eco-evolutivas, também foram obtidas séries temporais dos atributos neutro e ótimo ambiental das espécies. O efeito da heterogeneidade espacial sobre o modo de evolução dos atributos é outro aspecto evolutivo importante que pode ser investigado a partir desses dados, mas que não foram avaliados neste trabalho. No apêndice B, discuto em maior detalhe como isso pode ser explorado utilizando os dados

obtidos pelas simulações. Além disso, os dados de atributos também podem ser usados para examinar a relação entre as taxas de especiação e extinção e a variação fenotípica das linhagens.

Outro aspecto pertinente de ser avaliado é a influência da heterogeneidade temporal sobre os processos macroevolutivos. Do ponto de vista teórico, alguns trabalhos, como o de Fielding e Pantel (2020), investigam a relação entre variabilidade temporal e padrões macroevolutivos em pequenos conjuntos de comunidades. Todavia, não foram encontrados trabalhos investigando o efeito combinado das heterogeneidades espacial e temporal das paisagens sobre processos macroevolutivos. Uma extensão do presente trabalho para um caso mais amplo, onde as condições ambientais variam no tempo, é um projeto que está em andamento.

Outros pontos deste trabalho também poderão ser aprimorados e melhor avaliados no futuro. O primeiro deles é o efeito da deriva ecológica sobre a dinâmica eco-evolutiva. Esta pode, por exemplo, reduzir a dominância nos sítios e aumentar a importância das extinções. Assim, é importante que novos estudos avaliem se a deriva ecológica é capaz de alterar, ou não, a forma como a heterogeneidade influencia a diversificação das linhagens. Um segundo ponto é o mecanismo puramente alopátrico das especiações, o qual também é uma limitação a ser superada para representar outras formas de especiação que podem ocorrer na natureza.

Por último, além do efeito da taxa (intensidade) de dispersão sobre a diversificação, já investigado por outros trabalhos (QIAO *et al.*, 2016; AGUILÉE *et al.*, 2018; CICCHETO, CARNAVAL e ARAUJO, 2024), é importante avaliar o efeito que o *kernel* de dispersão (a forma) tem sobre a diversificação, especialmente a contribuição das LDDs¹. A forma do *kernel* de dispersão pode influenciar diretamente tanto a colonização de novos sítios como o isolamento das populações na paisagem (HAGEN *et al.*, 2024). Desse modo, ela pode afetar diretamente a ocorrência de especiações e extinções e, assim, alterar a maneira como a heterogeneidade espacial da paisagem influencia a diversificação.

Ao fim deste trabalho, é possível concluir que a heterogeneidade espacial da paisagem é um fator importante na dinâmica eco-evolutiva das espécies. O qual atua, principalmente, facilitando a ocorrência de especiações e desencadeando a diversificação das linhagens. Por meio desses processos, a heterogeneidade espacial da paisagem influencia diretamente, e de forma não linear, os processos macroevolutivos de especiação e extinção e estabelece limites para a diversificação nas paisagens.

¹ Long Distance Dispersal events, eventos de dispersão de longa distância

Referências

- AGUILÉE, Robin; CLAESSEN, David; LAMBERT, Amaury. Adaptive radiation driven by the interplay of eco-evolutionary and landscape dynamics. **Evolution**, p. 1291–1306, mai. 2013. DOI: [10.1111/evo.12008](https://doi.org/10.1111/evo.12008).
- AGUILÉE, Robin; GASCUEL, Fanny; LAMBERT, Amaury; FERRIERE, Regis. Clade diversification dynamics and the biotic and abiotic controls of speciation and extinction rates. **Nature communications**, v. 9, n. 1, p. 3013, 2018. DOI: [10.1038/s41467-018-05419-7](https://doi.org/10.1038/s41467-018-05419-7).
- ARDITI, Roger; GINZBURG, Lev R. **How species interact: altering the standard view on trophic ecology**. [S.l.]: Oxford University Press, 2012.
- ARNOLD, Barry C.; BALAKRISHNAN, Narayanaswamy; NAGARAJA, Haikady N. **A first course in order statistics**. Philadelphia: SIAM, 2008. v. 54. (Classics in Applied Mathematics).
- BARTO, Kamil. **MuMIn: Multi-Model Inference**. [S.l.], 2024. R package version 1.48.4. Disponível em: <<https://CRAN.R-project.org/package=MuMIn>>.
- BATES, Douglas; MÄCHLER, Martin; BOLKER, Ben; WALKER, Steve. Fitting Linear Mixed-Effects Models Using lme4. **Journal of Statistical Software**, v. 67, n. 1, p. 1–48, 2015. DOI: [10.18637/jss.v067.i01](https://doi.org/10.18637/jss.v067.i01).
- BEAULIEU, Jeremy M.; JHWUENG, Dwueng-Chwuan; BOETTIGER, Carl; OMEARA, Brian C. Modeling stabilizing selection: Expanding the Ornstein-Uhlenbeck model of adaptive evolution. **Evolution**, v. 66, n. 8, p. 2369–2383, ago. 2012.
- BENHUR, Eyal; KADMON, Ronen. Heterogeneity/diversity relationships in sessile organisms: a unified framework. **Ecology Letters**, v. 23, n. 1, p. 193–207, 2020. DOI: [10.1111/ele.13418](https://doi.org/10.1111/ele.13418).
- BIRAND, Aysegul; VOSE, Aaron; GAVRILETS, Sergey. Patterns of Species Ranges, Speciation, and Extinction. **The American Naturalist**, v. 179, n. 1, p. 1–21, 2012. DOI: [10.1086/663202](https://doi.org/10.1086/663202).
- BLOMBERG, Simone P.; RATHNAYAKE, Suren I.; MOREAU, Cheyenne M. Beyond Brownian Motion and the Ornstein-Uhlenbeck Process: Stochastic Diffusion Models for the Evolution of Quantitative Characters. **The American Naturalist**, v. 195, n. 2, p. 145–165, fev. 2020. DOI: [10.1086/706339](https://doi.org/10.1086/706339).
- BOLKER, Benjamin M. **Ecological models and data in R**. Princeton, NJ: Princeton University Press, 2008. 396 p.

- BROOKS, Mollie E.; KRISTENSEN, Kasper; VAN BENTHEM, Koen J.; MAGNUSSON, Arni; BERG, Casper W.; NIELSEN, Anders; SKAUG, Hans J.; MAECHLER, Martin; BOLKER, Benjamin M. glmmTMB Balances Speed and Flexibility Among Packages for Zero-inflated Generalized Linear Mixed Modeling. **The R Journal**, v. 9, n. 2, p. 378–400, 2017. DOI: [10.32614/RJ-2017-066](https://doi.org/10.32614/RJ-2017-066).
- BURDEN, Richard L.; FAIRES, J. Douglas. **Numerical Analysis**. 9 ed. Boston, MA: Brooks/Cole, 2011. 877 p.
- BURNHAM, Kenneth P.; ANDERSON, David R. **Model Selection and Multimodel Inference: a practical information-theoretic approach**. 2 ed. New York, NY: Springer-Verlag, 2002. 488 p.
- CAMPOS, Paulo R. A.; ROSAS, Alexandre; DE OLIVEIRA, Viviane M.; GOMES, Marcelo A. F. Effect of Landscape Structure on Species Diversity. Edição: Ricard V. Solé. **PLoS ONE**, v. 8, n. 6, e66495, 19 jun. 2013. DOI: [10.1371/journal.pone.0066495](https://doi.org/10.1371/journal.pone.0066495).
- CHESSON, Peter. Mechanisms of Maintenance of Species Diversity. **Annual Review of Ecology and Systematics**, v. 31, n. 1, p. 343–366, nov. 2000.
- _____. Updates on mechanisms of maintenance of species diversity. **Journal of Ecology**, v. 106, n. 5, p. 1773–1794, set. 2018.
- CICCHETO, Juliana R. M.; CARNAVAL, Ana C.; ARAUJO, Sabrina B. L. The influence of fragmented landscapes on speciation. **Journal of Evolutionary Biology**, v. 37, n. 12, p. 1499–1509, 2024. DOI: [10.1093/jeb/voae043](https://doi.org/10.1093/jeb/voae043).
- COSTA, Carolina L. N.; LEMOS-COSTA, Paula; MARQUITTI, Flavia M. D.; FERNANDES, Lucas D.; RAMOS, Marlon F.; SCHNEIDER, David M.; MARTINS, Ayana B.; DE AGUIAR, Marcus A. M. Signatures of microevolutionary processes in phylogenetic patterns. **Systematic biology**, v. 68, n. 1, p. 131–144, 2019. DOI: [10.1093/sysbio/syy049](https://doi.org/10.1093/sysbio/syy049).
- COYNE, Jerry A.; ORR, H. Allen. **Speciation**. Sunderland, MA: Sinauer, 2004.
- DE AGUIAR, M. A. M.; BARANGER, M.; BAPTESTINI, E. M.; KAUFMAN, L.; BAR-YAM, Y. Global patterns of speciation and diversity. **Nature**, v. 460, n. 7253, p. 384–387, 2009. DOI: [10.1038/nature08168](https://doi.org/10.1038/nature08168).
- DE QUEIROZ, Kevin. Species concepts and species delimitation. **Systematic biology**, Society of Systematic Zoology, v. 56, n. 6, p. 879–886, 2007. DOI: [10.1080/10635150701701083](https://doi.org/10.1080/10635150701701083).
- DEANGELIS, Donald L.; MOOIJ, Wolf M. Individual-Based Modeling of Ecological and Evolutionary Processes. **Annual Review of Ecology, Evolution, and Systematics**, v. 36, n. 1, p. 147–168, 2005. DOI: [10.1146/annurev.ecolsys.36.102003.152644](https://doi.org/10.1146/annurev.ecolsys.36.102003.152644).

- FAHRIG, Lenore; BAUDRY, Jacques; BROTONS, Lluís; BUREL, Françoise G.; CRIST, Thomas O.; FULLER, Robert J.; SIRAMI, Clelia; SIRIWARDENA, Gavin M.; MARTIN, JeanLouis. Functional landscape heterogeneity and animal biodiversity in agricultural landscapes. **Ecology Letters**, v. 14, n. 2, p. 101–112, 2011. DOI: [10.1111/j.1461-0248.2010.01559.x](https://doi.org/10.1111/j.1461-0248.2010.01559.x).
- FIELDING, Aidan P.; PANTEL, Jelena H. Eco-Evolutionary Feedbacks and the Maintenance of Metacommunity Diversity in a Changing Environment. **Genes**, v. 11, n. 12, p. 1433, nov. 2020.
- FISCHER, Felícia M.; CHYTRÝ, Krytof; TITEL, Jakub; DANIHELKA, Jií; CHYTRÝ, Milan. Weather fluctuations drive shortterm dynamics and longterm stability in plant communities: A 25year study in a Central European dry grassland. Edição: David Ward. **Journal of Vegetation Science**, v. 31, n. 5, p. 711–721, 2020. DOI: [10.1111/jvs.12895](https://doi.org/10.1111/jvs.12895).
- FUTUYMA, Douglas J.; KIRKPATRICK, Mark. **Evolution**. 4 ed. Sunderland, MA: Sinauer Associates, Inc., Publishers, 2017. 599 p.
- GARD, Thomas C. **Introduction to stochastic differential equations**. 1 ed. New York: Marcel Dekker, Inc, 1988. v. 114. 234 p. (Pure and Applied Mathematics).
- GASCUEL, Fanny; FERRIERE, Regis; AGUILÉE, Robin; LAMBERT, Amaury. How Ecology and Landscape Dynamics Shape Phylogenetic Trees. **Systematic Biology**, v. 64, n. 4, p. 590–607, jul. 2015.
- GAUSE, Georgy F. Experimental analysis of Vito Volterra's mathematical theory of the struggle for existence. **Science**, American Association for the Advancement of Science, v. 79, n. 2036, p. 16–17, 1934.
- GAVRILETS, Sergey. PERSPECTIVE: MODELS OF SPECIATION: WHAT HAVE WE LEARNED IN 40 YEARS? **Evolution**, v. 57, n. 10, p. 2197–2215, 2003. DOI: [10.1111/j.0014-3820.2003.tb00233.x](https://doi.org/10.1111/j.0014-3820.2003.tb00233.x).
- GAVRILETS, Sergey; LOSOS, Jonathan B. Adaptive Radiation: Contrasting Theory with Data. **Science**, v. 323, n. 5915, 2009. DOI: [10.1126/science.1157966](https://doi.org/10.1126/science.1157966). Disponível em: <<https://www.science.org/doi/10.1126/science.1157966>>.
- GOTELLI, Nicholas J. **Ecologia**. 3 ed. Londrina: Ed. Planta, 2007.
- GOVAERT, Lynn; ALTERMATT, Florian; DE MEESTER, Luc; LEIBOLD, Mathew A.; MCPEEK, Mark A.; PANTEL, Jelena H.; URBAN, Mark C. Integrating fundamental processes to understand ecoevolutionary community dynamics and patterns. **Functional Ecology**, Wiley, v. 35, n. 10, p. 2138–2155, 2021. DOI: [10.1111/1365-2435.13880](https://doi.org/10.1111/1365-2435.13880).
- GRAVEL, Dominique; CANHAM, Charles D.; BEAUDET, Marilou; MESSIER, Christian. Reconciling niche and neutrality: the continuum hypothesis. **Ecology Letters**, v. 9, n. 4, p. 399–409, abr. 2006.

- HACKEL, Jan; SANMARTÍN, Isabel. Modelling the tempo and mode of lineage dispersal. **Trends in Ecology & Evolution**, Elsevier, v. 36, n. 12, p. 1102–1112, 2021. DOI: [10.1016/j.tree.2021.07.007](https://doi.org/10.1016/j.tree.2021.07.007).
- HAGEN, Oskar. Coupling eco-evolutionary mechanisms with deep-time environmental dynamics to understand biodiversity patterns. **Ecography**, e06132, 2022. DOI: [10.1111/ecog.06132](https://doi.org/10.1111/ecog.06132).
- HAGEN, Oskar; FLÜCK, Benjamin; FOPP, Fabian; CABRAL, Juliano S.; HARTIG, Florian; PONTARP, Mikael; RANGEL, Thiago F.; PELLISSIER, Loïc. gen3sis: A general engine for eco-evolutionary simulations of the processes that shape Earth's biodiversity. **PLoS Biology**, v. 19, n. 7, e3001340, 2021. DOI: [10.1371/journal.pbio.3001340](https://doi.org/10.1371/journal.pbio.3001340).
- HAGEN, Oskar; VIANA, D. S.; WIEGAND, T.; CHASE, J. M.; ONSTEIN, R. E. The macro-eco-evolutionary interplay between dispersal, competition and landscape structure in generating biodiversity. **Philosophical Transactions of the Royal Society B: Biological Sciences**, v. 379, n. 1907, p. 20230140, 2024. DOI: [10.1098/rstb.2023.0140](https://doi.org/10.1098/rstb.2023.0140).
- HANSEN, Thomas F. Stabilizing selection and the comparative analysis of adaptation. **Evolution**, v. 51, n. 5, p. 1341–1351, out. 1997. DOI: [10.1111/j.1558-5646.1997.tb01457.x](https://doi.org/10.1111/j.1558-5646.1997.tb01457.x).
- HANSEN, Thomas F.; MARTINS, Emilia P. Translating between microevolutionary process and macroevolutionary patterns: the correlation structure of interspecific data. **Evolution**, v. 50, n. 4, p. 1404–1417, ago. 1996. DOI: [10.1111/j.1558-5646.1996.tb03914.x](https://doi.org/10.1111/j.1558-5646.1996.tb03914.x).
- HARMON, Luke J. **Phylogenetic Comparative Methods**. Local de publicação não identificado.: Independente, 2019. 234 p.
- HARMON, Luke J.; LOSOS, Jonathan B.; JONATHAN DAVIES, T.; GILLESPIE, Rosemary G.; GITTELMAN, John L.; BRYAN JENNINGS, W.; KOZAK, Kenneth H.; MCPEEK, Mark A.; MORENO-ROARK, Franck; NEAR, Thomas J.; PURVIS, Andy; RICKLEFS, Robert E.; SCHLUTER, Dolph; SCHULTE II, James A.; SEEHAUSEN, Ole; SIDLAUSKAS, Brian L.; TORRES-CARVAJAL, Omar; WEIR, Jason T.; MOOERS, Arne Ø. Early bursts of body size and shape evolution are rare in comparative data: early bursts of evolution are rare. **Evolution**, no-no, abr. 2010. DOI: [10.1111/j.1558-5646.2010.01025.x](https://doi.org/10.1111/j.1558-5646.2010.01025.x).
- HARMON, Luke J.; SCHULTE, James A.; LARSON, Allan; LOSOS, Jonathan B. Tempo and Mode of Evolutionary Radiation in Iguanian Lizards. **Science**, v. 301, n. 5635, p. 961–964, ago. 2003. DOI: [10.1126/science.1084786](https://doi.org/10.1126/science.1084786).

- HARTIG, Florian; LOHSE, Lukas; SOUZA-LEITE, Melina de. **DHARMA: Residual Diagnostics for Hierarchical (Multi-Level / Mixed) Regression Models**. [S.l.], 2024. R package version 0.4.7. Disponível em: <<https://CRAN.R-project.org/package=DHARMA>>.
- HUBBELL, Stephen P. **The unified neutral theory of biodiversity and biogeography**. Princeton: Princeton University Press, 2001. v. 32. (Monographs in Population Biology).
- HUNT, Gene. Testing the link between phenotypic evolution and speciation: an integrated palaeontological and phylogenetic analysis. Edição: Luke Harmon. **Methods in Ecology and Evolution**, British Ecological Society, v. 4, n. 8, p. 714–723, 2013. DOI: [10.1111/2041-210X.12085](https://doi.org/10.1111/2041-210X.12085).
- JABLONSKI, David. Species Selection: Theory and Data. **Annual Review of Ecology, Evolution, and Systematics**, v. 39, n. 1, p. 501–524, 2008. DOI: [10.1146/annurev.ecolsys.39.110707.173510](https://doi.org/10.1146/annurev.ecolsys.39.110707.173510). Disponível em: <<https://www.annualreviews.org/doi/10.1146/annurev.ecolsys.39.110707.173510>>.
- KIRKPATRICK, Mark; BARTON, Nicholas H. Evolution of a species' range. **The American Naturalist**, v. 150, n. 1, p. 1–23, 1997. DOI: [10.1086/286054](https://doi.org/10.1086/286054).
- KLEBANER, Fima C. **Introduction to stochastic calculus with applications**. Third edition. London: ICP, Imperial College Press, 2012. 438 p.
- LANDE, Russell. Natural Selection and Random Genetic Drift in Phenotypic Evolution. **Evolution**, v. 30, n. 2, p. 314, jun. 1976. DOI: [10.2307/2407703](https://doi.org/10.2307/2407703).
- LEIBOLD, M. A.; HOLYOAK, M.; MOUQUET, N.; AMARASEKARE, P.; CHASE, J. M.; HOOPES, M. F.; HOLT, R. D.; SHURIN, J. B.; LAW, R.; TILMAN, D.; LOREAU, M.; GONZALEZ, A. The metacommunity concept: a framework for multi-scale community ecology. **Ecology Letters**, v. 7, n. 7, p. 601–613, jun. 2004. DOI: [10.1111/j.1461-0248.2004.00608.x](https://doi.org/10.1111/j.1461-0248.2004.00608.x).
- LI, H.; REYNOLDS, James F. On definition and quantification of heterogeneity. **Oikos**, Wiley, v. 73, n. 2, p. 280–284, 1995.
- LOEUILLE, Nicolas; LEIBOLD, Mathew A. Evolution in metacommunities: on the relative importance of species sorting and monopolization in structuring communities. **The American Naturalist**, The University of Chicago Press, v. 171, n. 6, p. 788–799, 2008. DOI: [10.1086/587745](https://doi.org/10.1086/587745).
- LOKE, Lynette H. L.; CHISHOLM, Ryan A. Measuring habitat complexity and spatial heterogeneity in ecology. **Ecology Letters**, v. 25, n. 10, p. 2269–2288, 2022. DOI: [10.1111/ele.14084](https://doi.org/10.1111/ele.14084). Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1111/ele.14084>>.

- LOVETTE, I. J.; BERMINGHAM, E. Explosive speciation in the New World Dendroica warblers. **Proceedings of the Royal Society of London. Series B: Biological Sciences**, v. 266, n. 1429, p. 1629–1636, 1999. DOI: [10.1098/rspb.1999.0825](https://doi.org/10.1098/rspb.1999.0825).
- LUSH, Jay Laurence. **Animal breeding plans**. 1. ed. Ames: Iowa State University Press, 1937.
- MACARTHUR, Robert; LEVINS, Richard. The Limiting Similarity, Convergence, and Divergence of Coexisting Species. **The American Naturalist**, v. 101, n. 921, p. 377–385, set. 1967.
- MARQUES, David A.; MEIER, Joana I.; SEEHAUSEN, Ole. A Combinatorial View on Speciation and Adaptive Radiation. **Trends in Ecology & Evolution**, v. 34, n. 6, p. 531–544, 2019. DOI: [10.1016/j.tree.2019.02.008](https://doi.org/10.1016/j.tree.2019.02.008).
- MARQUITTI, Flavia M. D.; FERNANDES, Lucas D.; DE AGUIAR, Marcus A. M. Allopatry increases the balance of phylogenetic trees during radiation under neutral speciation. **Ecography**, v. 43, n. 10, p. 1487–1498, 2020. DOI: [10.1111/ecog.04937](https://doi.org/10.1111/ecog.04937).
- MARSHALL, Charles R.; QUENTAL, Tiago B. The uncertain role of diversity dependence in species diversification and the need to incorporate time-varying carrying capacities. **Philosophical Transactions of the Royal Society B: Biological Sciences**, v. 371, n. 1691, p. 20150217, 2016. DOI: [10.1098/rstb.2015.0217](https://doi.org/10.1098/rstb.2015.0217).
- MCGILL, Brian J.; CHASE, Jonathan M.; HORTAL, Joaquín; OVERCAST, Isaac; ROMINGER, Andrew J.; ROSINDELL, James; BORGES, Paulo A. V.; EMERSON, Brent C.; ETIENNE, Rampal S.; HICKERSON, Michael J.; MAHLER, D. Luke; MASSOL, Francois; MCGAUGHRAN, Angela; NEVES, Pedro; PARENT, Christine; PATIÑO, Jairo; RUFFLEY, Megan; WAGNER, Catherine E.; GILLESPIE, Rosemary. Unifying macroecology and macroevolution to answer fundamental questions about biodiversity. Edição: Adam Algar. **Global Ecology and Biogeography**, Wiley, v. 28, n. 12, p. 1925–1936, 2019. DOI: [10.1111/geb.13020](https://doi.org/10.1111/geb.13020). Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1111/geb.13020>>.
- MCPEEK, Mark A. **Evolutionary Community Ecology**. Princeton: Princeton University Press, 2017. v. 58. (Monographs in Population Biology).
- MISSA, Olivier; DYTHAM, Calvin; MORLON, Hélène. Understanding how biodiversity unfolds through time under neutral theory. **Philosophical Transactions of the Royal Society B: Biological Sciences**, v. 371, n. 1691, p. 20150226, 2016. DOI: [10.1098/rstb.2015.0226](https://doi.org/10.1098/rstb.2015.0226).
- MORAN, P. A. P. Notes on Continuous Stochastic Phenomena. **Biometrika**, v. 37, n. 1, p. 17, 1950. DOI: [10.2307/2332142](https://doi.org/10.2307/2332142).
- MORIN, Peter J. **Community ecology**. 2 ed. Hoboken, NJ: Wiley, 2011. 407 p.

- NATHAN, Ran; KLEIN, Etienne; ROBLEDO-ARNUNCIO, Juan J.; REVILLA, Eloy. Dispersal kernels: review. In: CLOBERT, Jean; BAGUETTE, Michel; BENTON, Tim G.; BULLOCK, James M. (Ed.). **Dispersal Ecology and Evolution**. Oxford: Oxford University Press, 2012. cap. 15, p. 187–210.
- NOWAK, Martin A. **Evolutionary dynamics: exploring the equations of life**. Cambridge, Mass: Belknap Press of Harvard University Press, 2006. 363 p.
- ORR, H. Allen; TURELLI, Michael. The Evolution of Postzygotic Isolation: Accumulating Dobzhansky-Muller Incompatibilities. **Evolution**, Wiley, v. 55, n. 6, p. 1085–1094, 2001. DOI: [10.1111/j.0014-3820.2001.tb00628.x](https://doi.org/10.1111/j.0014-3820.2001.tb00628.x).
- PINHEIRO, José; BATES, Douglas; R CORE TEAM. **nlme: Linear and Nonlinear Mixed Effects Models**. [S.l.], 2025. R package version 3.1-167. Disponível em: <<https://CRAN.R-project.org/package=nlme>>.
- PINHEIRO, José C.; BATES, Douglas M. **Mixed-Effects Models in S and S-PLUS**. New York, NY: Springer Verlag, 2000. (Statistics and Computing).
- QIAO, Huijie; SAUPE, Erin E.; SOBERÓN, Jorge; PETERSON, A. Townsend; MYERS, Corinne E. Impacts of niche breadth and dispersal ability on macroevolutionary patterns. **The American Naturalist**, University of Chicago Press, v. 188, n. 2, p. 149–162, 2016. DOI: [10.1086/687201](https://doi.org/10.1086/687201).
- QUENTAL, Tiago B.; MARSHALL, Charles R. Extinction During Evolutionary Radiations: Reconciling the Fossil Record with Molecular Phylogenies. **Evolution**, v. 63, n. 12, p. 3158–3167, 2009. DOI: [10.1111/j.1558-5646.2009.00794.x](https://doi.org/10.1111/j.1558-5646.2009.00794.x).
- RABOSKY, Daniel L. Diversity-Dependence, Ecological Speciation, and the Role of Competition in Macroevolution. **Annual Review of Ecology, Evolution, and Systematics**, v. 44, n. 1, p. 481–502, 2013. DOI: [10.1146/annurev-ecolsys-110512-135800](https://doi.org/10.1146/annurev-ecolsys-110512-135800).
- RABOSKY, Daniel L.; LOVETTE, Irby J. Explosive Evolutionary Radiations: Decreasing Speciation or Increasing Extinction Through Time? **Evolution**, v. 62, n. 8, p. 1866–1875, 2008. DOI: [10.1111/j.1558-5646.2008.00409.x](https://doi.org/10.1111/j.1558-5646.2008.00409.x).
- RANGEL, Thiago F.; EDWARDS, Neil R.; HOLDEN, Philip B.; DINIZ-FILHO, José A. F.; GOSLING, William D.; COELHO, Marco T. P.; CASSEMIRO, Fernanda A. S.; RAHBEK, Carsten; COLWELL, Robert K. Modeling the ecology and evolution of biodiversity: Biogeographical cradles, museums, and graves. **Science**, v. 361, n. 6399, eaar5452, jul. 2018.
- RAWLINGS, Lesley H.; RABOSKY, Daniel L.; DONNELLAN, Stephen C.; HUTCHINSON, Mark N. Python phylogenetics: inference from morphology and mitochondrial DNA: Phylogeny of the Pythons. **Biological Journal of the Linnean Society**, v. 93, n. 3, p. 603–619, 2008. DOI: [10.1111/j.1095-8312.2007.00904.x](https://doi.org/10.1111/j.1095-8312.2007.00904.x).

- RECH, Morgana; CARLUCCI, Marcos B.; BERGAMIN, Rodrigo S.; SEGER, Guilherme D. S.; MÜLLER, Sandra C.; DUARTE, Leandro; HARTZ, Sandra M. Mass effects explain sapling community assembly in *Araucaria* mixed forest metacommunities. Edição: Zoltán BottaDukát. **Journal of Vegetation Science**, v. 30, n. 4, p. 664–673, jul. 2019. DOI: [10.1111/jvs.12754](https://doi.org/10.1111/jvs.12754). Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1111/jvs.12754>>. Acesso em: 30 nov. 2021.
- RICKLEFS, Robert E. Community diversity: relative roles of local and regional processes. **Science**, v. 235, n. 4785, p. 167–171, 1987. DOI: [10.1126/science.235.4785.167](https://doi.org/10.1126/science.235.4785.167).
- ROLLAND, Jonathan; HENAO-DIAZ, L. Francisco; DOEBELI, Michael; GERMAIN, Rachel; HARMON, Luke J.; KNOWLES, L. Lacey; LIOW, Lee Hsiang; MANK, Judith E.; MACHAC, Antonin; OTTO, Sarah P.; PENNELL, Matt; SALAMIN, Nicolas; SILVESTRO, Daniele; SUGAWARA, Mauro; UYEDA, Josef; WAGNER, Catherine E.; SCHLUTER, Dolph. Conceptual and empirical bridges between micro- and macroevolution. **Nature Ecology & Evolution**, v. 7, n. 8, p. 1181–1193, 2023. DOI: [10.1038/s41559-023-02116-7](https://doi.org/10.1038/s41559-023-02116-7).
- ROMERO-MUJALLI, Daniel; JELTSCH, Florian; TIEDEMANN, Ralph. Individual-based modeling of eco-evolutionary dynamics: state of the art and future directions. **Regional Environmental Change**, v. 19, n. 1, p. 1–12, 2019. DOI: [10.1007/s10113-018-1406-7](https://doi.org/10.1007/s10113-018-1406-7).
- ROSINDELL, James; HARMON, Luke J.; ETIENNE, Rampal S. Unifying ecology and macroevolution with individual-based theory. **Ecology letters**, v. 18, n. 5, p. 472–482, 2015. DOI: [10.1111/ele.12430](https://doi.org/10.1111/ele.12430).
- SOKOL, Eric R.; BROWN, Bryan L.; CAREY, Cayelan C.; TORNWALL, Brett M.; SWAN, Christopher M.; BARRETT, J.E. Linking management to biodiversity in built ponds using metacommunity simulations. **Ecological Modelling**, v. 296, p. 36–45, jan. 2015.
- TEMPLETON, Alan R. **Population genetics and microevolutionary theory**. 2 ed. Hoboken, NJ: Wiley-Blackwell, 2021. 752 p.
- TURELLI, Michael; BARTON, Nicholas H.; COYNE, Jerry A. Theory and speciation. **Trends in Ecology & Evolution**, v. 16, n. 7, p. 330–343, 2001. DOI: [10.1016/S0169-5347\(01\)02177-2](https://doi.org/10.1016/S0169-5347(01)02177-2).
- VELLEND, Mark. **The theory of ecological communities**. 1 ed. Princeton: Princeton University Press, 2016. v. 57. (Monographs in Population Biology).

- VOJE, Kjetil L.; HOLEN, Øistein H.; LIOW, Lee H.; STENSETH, Nils C. The role of biotic forces in driving macroevolution: beyond the Red Queen. **Proceedings of the Royal Society B: Biological Sciences**, The Royal Society, v. 282, n. 1808, p. 20150186, 2015. DOI: [10.1098/rspb.2015.0186](https://doi.org/10.1098/rspb.2015.0186).
- VOLKOV, Igor; BANAVAR, Jayanth R.; HUBBELL, Stephen P.; MARITAN, Amos. Neutral theory and relative species abundance in ecology. **Nature**, Nature Publishing Group UK London, v. 424, n. 6952, p. 1035–1037, 2003.
- WALSH, Bruce; LYNCH, Michael. **Evolution and Selection of Quantitative Traits**. 1 ed. New York, NY: Oxford University Press, 2018. 1490 p.
- WEBER, Marjorie G.; WAGNER, Catherine E.; BEST, Rebecca J.; HARMON, Luke J.; MATTHEWS, Blake. Evolution in a Community Context: On Integrating Ecological Interactions and Macroevolution. **Trends in Ecology & Evolution**, v. 32, n. 4, p. 291–304, abr. 2017.
- WIENS, John J. Speciation and ecology revisited: phylogenetic niche conservatism and the origin of species. **Evolution**, v. 58, n. 1, p. 193–197, 2004. DOI: [10.1111/j.0014-3820.2004.tb01586.x](https://doi.org/10.1111/j.0014-3820.2004.tb01586.x).
- _____. The causes of species richness patterns across space, time, and clades and the role of ecological limits. **The Quarterly review of biology**, v. 86, n. 2, p. 75–96, 2011.
- WIENS, John J.; GRAHAM, Catherine H. Niche Conservatism: Integrating Evolution, Ecology, and Conservation Biology. **Annual Review of Ecology, Evolution, and Systematics**, Annual Reviews, v. 36, n. 1, p. 519–539, 2005. DOI: [10.1146/annurev.ecolsys.36.102803.095431](https://doi.org/10.1146/annurev.ecolsys.36.102803.095431).
- ZAR, Jerrold H. **Bioestatistical Analysis**. 5 ed. Upper Saddle River, NJ: Prentice Hall, 2010. 944 p.

Apêndices

APÊNDICE A – Taxas de extinção e especiação em escala logarítmica

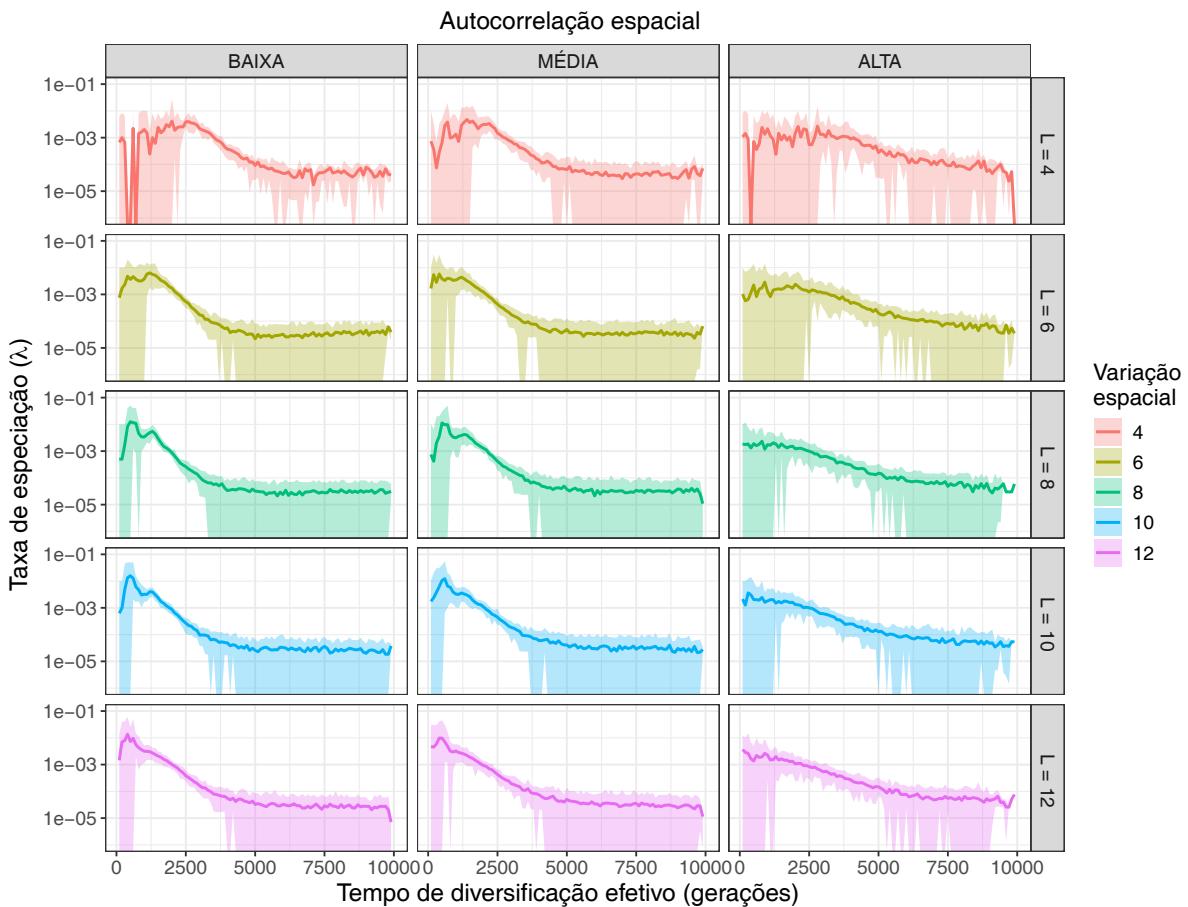


Figura 22 – Taxas de especiação por linhagem ao longo do tempo de diversificação efetivo para as diferentes classes de heterogeneidade. A taxa de especiação é mostrada em escala logarítmica. As linhas representam a média da taxa de especiação por linhagem das simulações de cada classe de heterogeneidade, os pontos de medida da taxa são espaçados por 100 gerações. A área sombreada representa o intervalo no qual estão contidos 95% dos dados. A variação espacial, L , é expressa em unidades de tolerância ambiental, σ_w . A heterogeneidade cresce com o aumento da variação espacial e com a diminuição da autocorrelação espacial. Portanto, a heterogeneidade da paisagem cresce do canto superior direito para o canto inferior esquerdo do mosaico de gráficos.

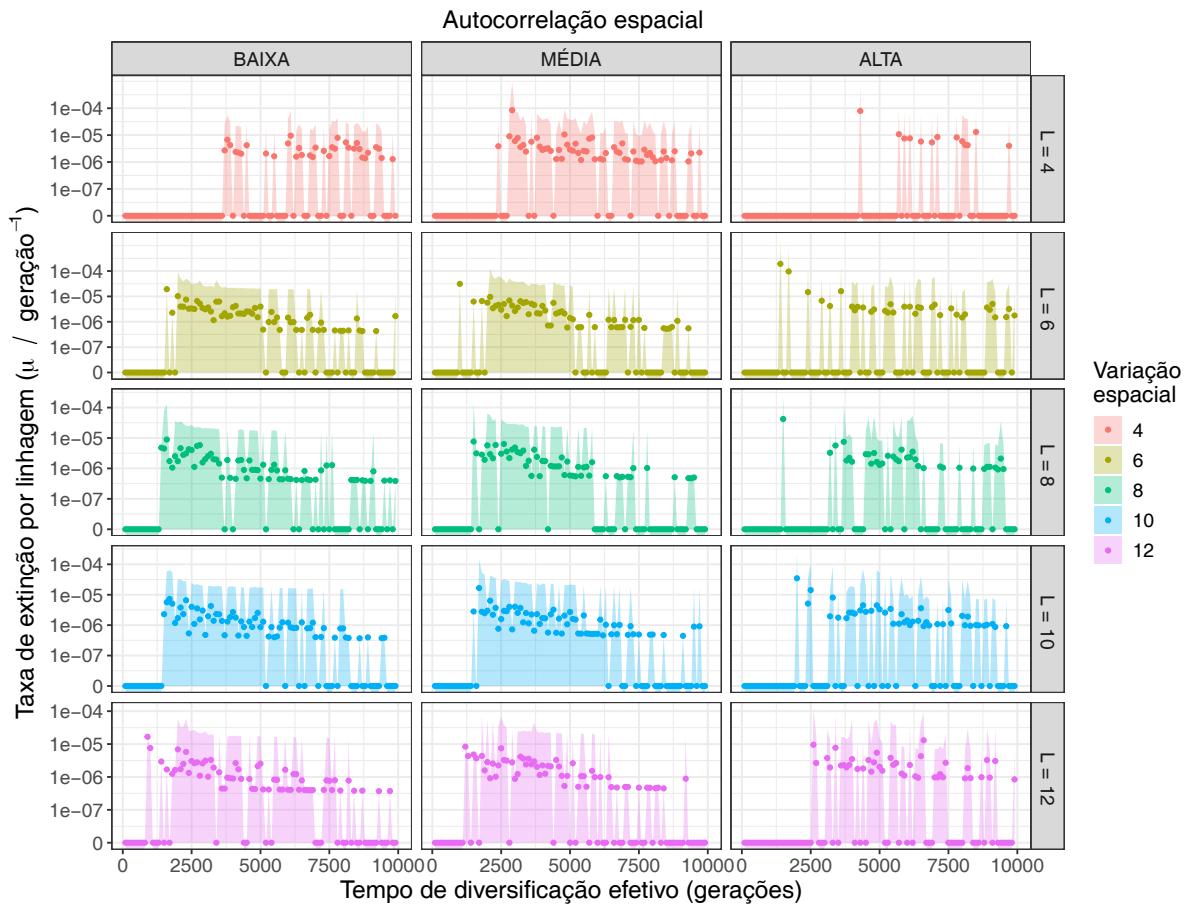


Figura 23 – Taxas de extinção por linhagem ao longo do tempo efetivo de diversificação para os diferentes perfis de heterogeneidade. A taxa de extinção é mostrada em escala logarítmica. Os pontos representam a média da taxa de extinção por linhagem para as simulações de cada classe e são espaçados por 100 gerações. A área sombreada representa o intervalo no qual estão contidos 95% dos dados. A variação espacial, L , é expressa em unidades de tolerância ambiental, σ_w . A heterogeneidade cresce com o aumento da variação espacial e com a diminuição da autocorrelação espacial. Assim, a heterogeneidade da paisagem cresce do canto superior direito para o canto inferior esquerdo do mosaico de gráficos.

APÊNDICE B – Efeitos da heterogeneidade ambiental sobre a evolução de atributos

Em geral, estudos macroevolutivos enfocam a dimensão temporal da evolução dos atributos, dando pouca atenção ao papel do espaço na dinâmica evolutiva das espécies (WEBER *et al.*, 2017; MCGILL *et al.*, 2019). Apesar disso, os modelos evolutivos utilizados em macroevolução são geralmente associados a diferentes cenários ecológicos, tais como seleção estabilizadora, seleção divergente, neutralidade, competição interespecífica e mudanças ambientais. Ainda que isto não seja enfatizado, a dinâmica ecológica em tais cenários intrinsecamente envolve processos espaciais e, portanto, a interação com os padrões ambientais que caracterizam as paisagens no espaço.

Neste trabalho, almejei, inicialmente, responder duas questões. Sendo elas: qual o efeito da heterogeneidade espacial do ambiente, em termos da variação espacial, L , e da autocorrelação espacial da condição ambiental, Ξ , sobre (1) as taxas de especiação e extinção? E (2) o modo de evolução do ótimo ambiental das espécies?

Não foi possível analisar os dados de evolução de atributos gerados nas simulações em tempo hábil para testar hipóteses sobre a questão (2). Ainda assim, apresento aqui uma breve discussão sobre como os diferentes cenários de heterogeneidade, em termos de autocorrelação espacial, podem influenciar o modo de evolução do ótimo ambiental das espécies.

Em um cenário de baixa autocorrelação espacial (alta heterogeneidade), a grande variabilidade das condições ambientais na vizinhança dos sítios faz com que as espécies tenham maior probabilidade de dispersão para sítios com condições ambientais diferentes da sua condição original. Assim, uma mesma espécie pode evoluir simultaneamente sob pressões seletivas de diferentes direções. Portanto, esse cenário pode representar uma seleção estabilizadora a nível local, mas com direção de seleção flutuante em termos regionais. Hansen e Martins (1996) descreveram um cenário de seleção estabilizadora flutuante análogo a esse, mas com flutuações temporais. Nesse trabalho, (HANSEN e MARTINS) mostraram que a correlação entre o fenótipo das espécies diminui linearmente com a distância filogenética, um padrão que associado a uma evolução browniana de atributo (BM). Dessa forma, traçando um paralelo entre flutuações temporais e espaciais, pode-se esperar que em cenários com baixa autocorrelação espacial, a evolução do ótimo ambiental das espécies possa ser melhor descrita por um modelo de evolução fenotípica browniano ou um modelo Ornstein-Uhlenbeck (OU) com força de seleção fraca.

Já em cenários de autocorrelação espacial alta, o efeito da seleção estabilizadora

tende a ser reforçado pela similaridade ambiental dentro dos agregados de sítios com condições similares (domínios), pois espera-se pouca variação do ótimo ambiental das espécies dentro do mesmo domínio. Todavia, a discrepância nas condições ambientais entre domínios deve gerar grande divergência entre os valores de atributo das espécies em domínios diferentes. Dessa forma, espera-se que a maior parte da variação fenotípica tenda a ocorrer no início do processo de diversificação, quando as primeiras populações ocupando diferentes domínios divergirem. À medida que surgem novas espécies adaptadas a diferentes condições ambientais, espera-se que a superioridade competitiva destas tenda a prevenir que populações de outras espécies se instalem de forma permanente (GRAVEL *et al.*, 2006), reduzindo as chances de novas especiações com grandes alterações fenotípicas (HARMON *et al.*, 2010). Nesse cenário de evolução fenotípica há elementos de uma multiplicidade de ótimos fenotípicos (associados a diferentes domínios), que pode ser descrita por um modelo OU com múltiplos ótimos (OU-M) (BEAULIEU *et al.*, 2012), e também de uma radiação adaptativa, que costuma ser associada a um modelo de *early-burst*(EB) (HARMON *et al.*, 2003). Portanto, em cenários com maior autocorrelação espacial, espera-se que a evolução do ótimo ambiental das espécies seja melhor descrita por um modelo OU com múltiplos ótimos ou por um modelo *early-burst*.

Por fim, em um cenário de autocorrelação espacial intermediária, a presença de agregações de sítios com condições ambientais similares pode favorecer a especialização de espécies nos valores médios das agregações, de forma análoga ao que ocorre em um modelo OU com múltiplos ótimos (BEAULIEU *et al.*, 2012). Adicionalmente, o menor tamanho das agregações de sítios favorece a dispersão de indivíduos para regiões com outros valores de condição ambiental, tornando mais provável a ocorrência de variações fenotípicas grandes, ainda que tardivamente, o que distingue esse cenário de um *early-burst* (HARMON *et al.*, 2003). Assim, em cenários com autocorrelação espacial intermediária, pode-se esperar que a evolução do ótimo ambiental das espécies seja compatível com um modelo OU com múltiplos ótimos.

Utilizando os dados de evolução de atributos obtidos pelas simulações realizadas para esse trabalho, é possível testar a relação entre os padrões de heterogeneidade espacial e alguns dos modelos de evolução fenotípica frequentemente utilizados em macroevolução: BM, OU, OU-M e EB.

Para isso, pode-se utilizar os valores médios finais de atributo das espécies (ótimo ambiental) para ajustar esses diferentes modelos de evolução fenotípica (BEAULIEU *et al.*, 2012). A partir dos ajustes dos modelos, podem ser calculados pesos de AIC_c, w_{AIC_c} , os quais representam a probabilidade dos dados serem gerados por um modelo específico com relação aos demais modelos considerados. É possível, então, tomar a média dos valores de w_{AIC_c} de cada modelo sobre o conjunto das simulações de cada classe de heterogeneidade. Assim, para cada classe de heterogeneidade, é obtida uma medida da

probabilidade relativa de cada modelo evolutivo na descrição da evolução desse atributo. Permitindo, portanto, distinguir qual modelo melhor descreve a evolução do atributo em cada cenário de heterogeneidade espacial.

Adicionalmente, os valores médios de atributos dos nós da filogenia podem ser utilizados como fonte de informação complementar para melhorar os ajustes dos modelos. Ou, alternativamente, os valores de atributos dos nós podem ser comparados com os valores estimados pela reconstrução ancestral com base nos ajustes dos modelos. Desse modo, é possível obter uma medida da exatidão com que o ajuste de cada modelo evolutivo representa o real processo de evolução fenotípica ocorrendo sobre as linhagens simuladas nas diferentes classes de heterogeneidade.

A investigação da relação entre heterogeneidade da paisagem e evolução fenotípica pode complementar o entendimento de como a heterogeneidade ambiental afeta padrões macroevolutivos. Esses resultados poderão contribuir para uma melhor compreensão dos mecanismos eco-evolutivos responsáveis pelos padrões de especiação e extinção observados nos diferentes cenários de heterogeneidade estudados nesse trabalho.

Anexos

ANEXO A – Tabela resumo dos módulos do pacote gen3sis

Tabela 18 – Tabela descrevendo as funções do pacote **gen3sis**. Fonte: Hagen *et al.* (2021)

Table 1. Presentation of the core functions of speciation, dispersal, ecology, and evolution implemented in gen3sis. The computation of core functions is customizable in the configuration object. Shown are input objects that are combined to generate updated outputs. The table corresponds to the mechanisms presented in Fig 2B.

Objective	Input	Computation	Output
Speciation			
Determines the divergence between geographic clusters of populations within a species; determines cladogenesis.	Species divergence matrix; species trait matrix; species abundance matrix; landscape values; distance matrix.	Divergence between geographically isolated clusters of populations increases over time, while (re) connected clusters decrease down to zero; speciation happens when the divergence between 2 clusters is above the speciation threshold, but it can also consider trait differences.	Updated species divergence matrix; new species if speciation occurred; updated genealogy table.
Dispersal			
Determines the colonization of vacant sites.	Species trait matrix; species abundance matrix; landscape values; distance matrix.	Species disperse according to a unique value or a distribution of dispersal values.	Updated species abundance matrix.
Evolution			
Determines the change in species traits in each site, anagenesis.	Species trait matrix; species abundance matrix; landscape values; geographic clusters; distance matrix.	Traits might change for each species in the populations of occupied sites.	Updated species trait matrix.
Ecology			
Determines the species abundance in each site.	Species trait matrix; species abundance matrix; landscape values; genealogy.	Change the species abundance, based on landscape environmental values and species co-occurrences; changes species trait values.	Updated species abundance matrix.

<https://doi.org/10.1371/journal.pbio.3001340.t001>