Métodos Gráficos para Análise da Dinâmica de Rede de Reações

Elder. T. R. Silva[1] (PG), Fernando M. C. Vieira[1] (PQ)

[1]Universidade de Brasília, **eldertac@gmail.com*

[1]*Campus Universitário Darcy Ribeiro, Brasília – CEP 70910-900 – Brasília/DF*

Palavras Chave: reações químicas, grafo bipartido, bifurcações.

Introdução

Sistemas químicos podem gerar estruturas de bifurcação complexas. A tarefa de examinar bifurcações de maneira analítca é muitas vezes inexequível, assim, métodos que auxiliam na sua detecção e caracterização são desejáveis. A teoria dos grafos fornece ferramentas que ligam a estrutura de um grafo com as condições necessárias para bifurcações.[1]

No ano de 1995, Thomas Wilhelm publicou aquela que seria, de acordo com seus critérios, a menor rede de reações químicas que apresenta bifurcação de Hopf. O objetivo desse trabalho é avaliar por meios de grafos a condição necessária para a bifurcação na rede supracitada.

Resultados e Discussão

Bifurcações que levam a oscilações ou multiestabilidades no modelo de equações diferenciais ocorrem quando um dos coeficientes do polinômio característico da Jacobiana correspondente apresenta uma mudança de sinal. Isso requer um termo negativo no coeficiente, já que a maioria dos termos é positiva. Termos diferentes de zero nos coeficientes do polinômio característico correspondem a subgrafos. Encontrar os subgrafos correspondentes aos termos negativos é fundamental para identificar os termos responsáveis pelas instabilidades.[1]

Um grafo bipartido, G, é definido por dois conjuntos de vértices separados, um para substâncias químicas $V_1 = \{A_1, A_2, ..., Am\}$ e um para reações $V_2 = \{B_1, B_2, ..., B_m\}$. Os arcos (A_k, B_j) e (B_j, A_i) formam um caminho positivo $[A_k, B_j, A_i]$ correspondente à produção de A_i para A_k em uma reação j. Os arcos (A_k, B_j) e (A_i, B_j) formam um caminho negativo $[A_k, B_j, A_i]$, correspondente a A_k e A_i ambos reagentes de j. Um ciclo, C, de G é uma sequência de caminhos distintos com o último vértice de V_1 sendo o mesmo que o primeiro do seguinte caminho. Um subgrafo, $g = \{C_1, C_2, ..., C_s\}$, de G consiste de arestas $C_i = E_i$ ou ciclos C_i, i = 1, ..., S, onde cada uma das arestas e ciclos são mutuamente disjuntos.[1]

O conjunto de todos os subgrafos g de mesma ordem e mesmo conjunto de vértices é chamado de fragmento S_r, onde r é a ordem do fragmento, que corresponde ao posto da matriz estequiométrica da rede de reações. Um fragmento será crítico se e somente se g tiver um número ímpar de ciclos positivos. Uma vez que mudança de sinal é uma condição necessária para multiestabilidade segue-se que um fragmento crítico é uma condição para bifurcação de Hopf.[1]

A rede proposta por Thomas Wilhelm é composta pelas equações[2]:

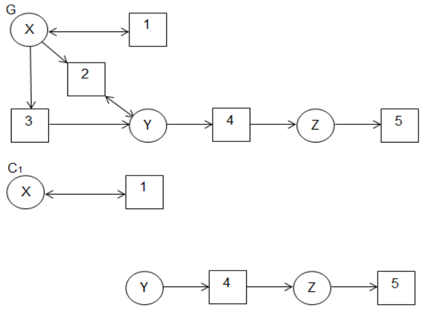
$X + A \xrightarrow{K1} 2X$ $Y \xrightarrow{K4} Z$

$X + Y \xrightarrow{K2} A + Y$ $Z \xrightarrow{K5} A$

$X \xrightarrow{K3} Y$

Para esta rede, o posto da matriz estequiométrica é 3, assim o fragmento deverá ter ordem 3. Por possuir pelo menos um subgrafo que contém um número ímpar de ciclos positivos, visto que um caminho do tipo $[A_i, B_j, A_i]$ é considerado um ciclo positivo, o fragmento é crítico.

Figura 1. Grafo e um dos fragmentos responsáveis pela multiestabilidade.



Conclusões

Sabe-se que ciclos positivos e a presença de um fragmento critico, geralmente, estão ligados a instabilidades nos sistemas químicos, a presença de um fragmento crítico na rede estudada realça a condição necessária para uma bifurcação de Hopf. Contudo esse é um estudo preliminar e fornece apenas a condição necessária, porém não suficiente, para identificação de bifurcações.

Agradecimentos

À Universidade de Brasília e CAPES pelo apoio.

[1] Mincheva, M.; Roussel M. R. Graph-theoretic methods for the analysis of chemical and biochemical networks. *J. Math. Biol.* (2007).

[2] Wilhelm, T.; Heinrich, R. Smallest chemical reaction system with Hopf bifurcation. *J. Math. Chem.* (1995).