

Um Estudo do Modelo de Sel'kov em Derivada Fracionária: Caputo x Riemann-Liouville

Esther S. M. Gonçalves¹ Sandro R. Mazorche²
Matemática-ICE/UFJF, Juiz de Fora, MG

O modelo de Sel'kov [4] descreve oscilações nas concentrações de adenosina difosfato (ADP) e frutose-6-fosfato (F6P) durante a glicólise. Em sua forma adimensional, as equações são

$$\begin{cases} X' = -X + aY + bX^2Y \\ Y' = V - aY - bX^2Y \end{cases} \quad (1)$$

onde X e Y representam as concentrações de ADP e F6P, $a > 0$, $b > 0$ e $V > 0$ são parâmetros cinéticos. O modelo gera oscilações sustentadas via ciclos limites, explicando flutuações observadas experimentalmente. Estudos abordam sua estabilidade, bifurcações, ciclos de relaxamento e extensões com difusão, analisando padrões espaciais e temporais. O modelo de Sel'kov é fundamental para entender dinâmicas não lineares em sistemas bioquímicos.

O modelo de Sel'kov também foi usado para estudar a dinâmica auto-oscilatória de microssismos, que são vibrações de baixa intensidade na superfície da Terra causada pela interação entre fissuras de diferentes escalas [3], onde explorou o uso de derivadas fracionárias para analisá-las. Esses microssismos podem ser causados por fenômenos naturais, como ciclones e ondas oceânicas, bem como por atividades humanas, como construção.

$$\begin{cases} \frac{1}{\sigma_1^{1-\alpha_1}} {}^C D^{\alpha_1}(X) = -X + aY + bX^2Y \\ \frac{1}{\sigma_2^{1-\alpha_2}} {}^C D^{\alpha_2}(Y) = V - aY - bX^2Y \end{cases} \quad (2)$$

onde ${}^C D^{\alpha_i}[y(t)] = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha_i)} \int_0^x \frac{y'(\tau)}{(x-\tau)^{\alpha_i}} d\tau$ é a derivada de Caputo de ordem $\alpha_i \in (0, 1]$, $i \in \{1, 2\}$ e $\Gamma(\cdot)$ a função Gama, e o parâmetro positivo $\sigma_{1,2}$ tem a dimensão do tempo. Nesse contexto, as derivadas de ordem fracionária são fundamentais para descrever a influência da memória na evolução das fissuras, sendo uma poderosa ferramenta para modelar regimes auto-oscilatórios.

Nós iremos apresentar uma outra forma de fracionarizar o modelo de Sel'kov, onde seguiremos as ideias apresentadas nos trabalhos [1],[2].

$$\begin{cases} X' = -r_1X + aY + bX^2Y - r_2^{\alpha_1} e^{-r_1 t} D^{1-\alpha_1}(e^{r_1 t} X) \\ Y' = V - a_1 Y - bX^2Y - a_2^{\alpha_2} e^{-a_1 t} D^{1-\alpha_2}(e^{a_1 t} Y) \end{cases} \quad (3)$$

onde $D^{1-\alpha_i}[y(t)] = \frac{1}{\Gamma(\alpha_i)} \frac{d}{dt} \int_0^t \frac{y(\tau)}{(t-\tau)^{1-\alpha_i}} d\tau$, é a derivada fracionária no sentido de Riemann-Liouville de ordem $1-\alpha_i \in [0, 1]$. Com $r_1+r_2=1$, $\theta_1+\theta_2=1$, $a_1=a\theta_1$ e $a_2=a\theta_2$ com $0 < r_1, r_2, \theta_1, \theta_2 < 1$. Os modelos (2) e (3) possuem um operador não local que incorporam os efeitos de memória e perturbam a natureza do modelo clássico de Sel'kov (1), além disso, eles embutem novos parâmetros, como a ordem da derivada fracionária e no caso (3) ainda temos uma função exponencial e os parâmetros $r_{1,2}$ e $\theta_{1,2}$.

¹esther.scarton@estudante.ufjf.br

²sandro.mazorche@ufjf.br

Nosso objetivo é estudar essas perturbações provocadas por estes operadores e seus parâmetros. Iniciaremos com uma análise nos valores dos pontos críticos. Observe que os valores dos pontos críticos nos modelos (1) e (2) são os mesmos independente dos parâmetros $\alpha_{1,2}$ e $\sigma_{1,2}$.

$$\text{Modelos (1) e (2): } X_{e_1} = X_{e_2} = V, Y_{e_1} = Y_{e_2} = \frac{V}{a + bV^2}.$$

Para o Modelo (3) o equilíbrio é definido pela raiz real do polinômio cúbico ($P(X_{e_3}) = 0$):

$$P(X_{e_3}) = X_{e_3}^3 - \frac{V}{r}X_{e_3}^2 + \frac{a\theta}{b}X_{e_3} - \frac{Va}{rb} \quad \text{e} \quad Y_{e_3} = \frac{V}{a\theta + bX_{e_3}^2},$$

onde $r = r_1 + r_2^{\alpha_1}r_1^{1-\alpha_1}$ e $\theta = \theta_1 + \theta_2^{\alpha_2}\theta_1^{1-\alpha_2}$. Observe que para $\theta = 1$ e $r = 1$ o valor do equilíbrio dos três Modelos são os mesmos e isto ocorre para os casos em que as ordens $\alpha_{1,2} = 1$ das derivadas fracionárias, ou quando $r_1 = r_2 = \theta_1 = \theta_2 = \frac{1}{2}$ e neste caso vale para qualquer valor de $\alpha_{1,2} \in (0, 1)$.

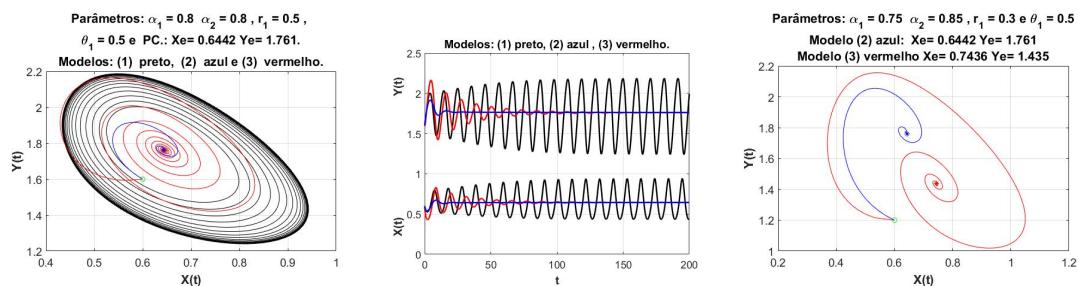


Figura 1: (a) Plano de Fase; (b) Soluções do caso (a); (c) Plano de Fase Fonte: Autor.

Portanto, as derivadas fracionárias afetam a dinâmica auto-oscilatória o que proporciona uma nova análise da dinâmica do modelo Sel'kov. Além disso, com os novos operadores e parâmetros, é possível estudar os pontos críticos e a dinâmica das oscilações, constituindo uma forma alternativa de analisar o modelo Sel'kov em derivadas fracionárias.

Agradecimentos

Agradecemos à Pró-Reitoria de Pós-Graduação e Pesquisa da Universidade Federal de Juiz de Fora, por apoiar nossa pesquisa através de uma bolsa PIBIC.

Referências

- [1] N. Z. Monteiro, R. W. dos Santos e S. R. Mazorche. “Bridging the gap between models based on ordinary, delayed, and fractional differentials equations through integral kernels”. Em: **Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.** 19 (2024), pp. 1–11. DOI: 10.1073/pnas.2322424121.
- [2] N. Z. Monteiro, R. W. dos Santos e S. R. Mazorche. “Constructive fractional models through Mittag-Leffler functions”. Em: **Computational and Applied Mathematics** 177 (2024), pp. 1–26. DOI: 10.1007/s40314-024-02680-z.
- [3] R. I. Parovik. “Studies of the Fractional Selkov Dynamical System for Describing the Self-Oscillatory Regime of Microseisms”. Em: **Mathematics** (2022). DOI: 10.3390/math10224208.
- [4] E. E. Sel'kov. “Self-Oscillations in Glycolysis 1. A Simple Kinetic Model”. Em: **European Journal of Biochemistry** (1968). DOI: 10.1111/j.1432-1033.1968.tb00175.x.