

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO JOÃO DEL-REI
DEPARTAMENTO DE ESTATÍSTICA, FÍSICA E MATEMÁTICA

Túlio de Almeida Moreira Ferreira

BIFURCAÇÕES E CAOS EM SISTEMAS BIOLÓGICOS

Ouro Branco - MG
Dezembro de 2019

Túlio de Almeida Moreira Ferreira

BIFURCAÇÕES E CAOS EM SISTEMAS BIOLÓGICOS

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física da Universidade Federal de São João del-Rei, em associação ampla com a Universidade Federal de Alfenas, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Ciências, na área de Física.

Área de Concentração: Física da Matéria Condensada

Orientador: Prof. Dr. Marcelo Martins de Oliveira

Coorientador: Prof. Dr. Alexandre Celestino Leite Almeida

Ouro Branco– MG

Departamento de Estatística, Física e Matemática- UFSJ

Dezembro de 2019

Ficha catalográfica elaborada pela Divisão de Biblioteca (DIBIB)
e Núcleo de Tecnologia da Informação (NTINF) da UFSJ,
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

F383b Ferreira, Túlio de Almeida Moreira.
BIFURCAÇÕES E CAOS EM SISTEMAS BIOLÓGICOS / Túlio
de Almeida Moreira Ferreira ; orientador Prof. Dr.
Marcelo Martins de Oliveira; coorientador Prof. Dr.
Alexandre Celestino Leite Almeida. -- Ouro Branco,
2019.
74 p.

Dissertação (Mestrado - Programa de Pós-Graduação em
Física) -- Universidade Federal de São João del-Rei,
2019.

1. Bifurcações. 2. Caos. 3. Sistemas dinâmicos não
lineares. 4. Sistemas biológicos. I. Martins de
Oliveira, Prof. Dr. Marcelo , orient. II. Celestino
Leite Almeida, Prof. Dr. Alexandre , co-orient. III.
Título.



Universidade Federal
de São João del-Rei



Programa de Pós-Graduação em Física

São João del-Rei, 11 de dezembro de 2019

A Dissertação “**Bifurcações e Caos em Sistemas Biológicos**”, elaborada por **Túlio de Almeida Moreira Ferreira** e aprovada por todos os membros da Banca Examinadora, foi aceita pelo Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de São João del-Rei como requisito parcial à obtenção do título de

MESTRE EM FÍSICA

BANCA EXAMINADORA:

Prof. Dr. Marcelo Martins de Oliveira (UFSJ)
Orientador

Prof. Dr. Alexandre Celestino Leite Almeida (UFSJ)
Coorientador

Prof. Dr. Marco Antônio Amaral (UFSB)

Prof. Dr. José Eloy Ottoni (UFSJ)

Prof. Dr. Adélcio Carlos de Oliveira (UFSJ)

O caos é a rima do inaudito
Zack de la Rocha.

À minha filha, Sophia.

Agradecimentos

Agradeço primeiramente à minha família, em especial minha mãe e minha filha, por dar-me ânimo nos momentos difíceis.

Ao meu orientador Prof. Dr. Marcelo Martins de Oliveira, pela atenção, confiança e paciência que foram fundamentais para me ajudar a vencer todos as dificuldades encontradas durante essa jornada.

Ao meu coorientador Prof. Dr. Alexandre Celestino Leite Almeida, pelo apoio técnico referente aos sistemas computacionais utilizados para gerar as figuras dessa dissertação.

Aos demais professores do PPGF, em especial aos Professores Adélcio Carlos de Oliveira e Humberto César Fernandes Lemos pela contribuição no meu crescimento acadêmico e também pessoal.

Aos colegas de mestrado, principalmente ao Marlon Nunes Gonzaga e Wallace Luís da Silva pela convivência quase que diária nesses dois anos.

Ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de São João del-Rei (UFSJ) em associação ampla com a Universidade Federal de Alfenas (UNIFAL-MG), pela oportunidade concedida.

À FAPEMIG pelo apoio financeiro.

Enfim, agradeço a todas as pessoas que, direta ou indiretamente, contribuíram para a execução dessa dissertação.

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Estrutura da dissertação	2
2	Análise de sistemas não-lineares	3
2.1	Linearização	3
2.2	Estabilidade linear	5
2.3	Classificação dos pontos de equilíbrio	5
2.3.1	λ_1 e λ_2 são reais, distintos, $\lambda_1 \cdot \lambda_2 > 0$	6
2.3.2	λ_1 e λ_2 são reais, $\lambda_1 = \lambda_2 \neq 0$	6
2.3.3	λ_1 e λ_2 são reais, $\lambda_1 \cdot \lambda_2 < 0$	6
2.3.4	λ_1 e λ_2 complexos conjugados, $Re(\lambda_i) \neq 0$	6
2.4	Diagramas de fase e Bifurcação	8
2.4.1	Bifurcação sela-nó ou de dobra ("fold")	9
2.4.2	Bifurcação transcítica	10
2.4.3	Bifurcação de Forquilha ("Pitchfork" ou "Cusp")	11
2.4.4	Bifurcação de Hopf	13
2.4.5	Bifurcação de duplicação de período ("flip")	14
3	Modelos de dinâmica populacional	16
3.1	Modelo para duas espécies interagentes: o modelo presa-predador de Lotka-Volterra	16
3.1.1	Estabilidade linear dos estados estacionários	19
3.2	Modelo para três espécies interagentes: o modelo de Hastings-Powell [15]	21
3.2.1	Determinação dos pontos de equilíbrio	24
3.2.2	Análise da estabilidade	28
3.2.3	Atratores e Diagramas de Bifurcação	31

SUMÁRIO

4	Síntese de etanol	37
4.1	Descrição do modelo de Jobses [16]	38
4.2	Estados Estacionários e Diagramas de Bifurcação	40
4.2.1	Estados Estacionários	40
4.2.2	Diagramas de Bifurcação	43
5	Competição de microrganismos em biorreatores	47
5.1	Competição Pura e Simples	48
5.1.1	Análise da estabilidade	50
5.1.2	Classificação dos pontos de equilíbrio	55
5.2	Extensões do modelo	60
5.2.1	Efeito das condições periodicamente variáveis	60
5.2.2	Efeito do ambiente espacialmente heterogêneo	63
5.2.3	Competição por dois ou mais nutrientes	65
6	Conclusões	67
	Referências Bibliográficas	70

Lista de Figuras

2.1	Comportamento de ciclo limite para diversas condições iniciais.	7
2.2	Bifurcação sela-nó.	10
2.3	Bifurcação transcítica.	11
2.4	Bifurcação supercrítica de forquilha.	12
2.5	Bifurcação subcrítica forquilha.	12
2.6	Bifurcação de Hopf: (a) subcrítica e (b) supercrítica. Retirado de [11]	13
2.7	Retrato de fase da formação de uma bifurcação Hopf: (a) supercrítica e (b) subcrítica. Retirado de [11]	14
2.8	Bifurcação de duplicação de período "flip". Adaptado de [14]	15
3.1	Soluções do modelo presa-predador de Lotka-Volterra, no plano de fase.	18
3.2	Densidade de presas e predadores ao passar do tempo	18
3.3	Valores de z^* variando o parâmetro b_1 no intervalo [2,3].	27
3.4	Equilíbrio do sistema com persistência das três espécies, variando o parâmetro b_1 no intervalo [2,3].	28
3.5	Ciclo limite de período 1 correspondendo ao parâmetro $b_1 = 2,2$	32
3.6	Espécie X ao passar do tempo com parâmetro $b_1 = 2,2$	32
3.7	Ciclo limite de período 2 correspondendo ao parâmetro $b_1 = 2,32$	33
3.8	Espécie X ao passar do tempo com parâmetro $b_1 = 2,32$	33
3.9	Ciclo limite de período 4 correspondendo ao parâmetro $b_1 = 2,39$	34
3.10	Espécie X ao passar do tempo com parâmetro $b_1 = 2,39$	34
3.11	Um atrator caracterizado por comportamento caótico correspondendo ao parâmetro $b_1 = 2,75$	35
3.12	Espécie X ao passar do tempo, para o atrator que corresponde a $b_1 = 2,75$	35

LISTA DE FIGURAS

4.1	Diagrama de fase com dois estados estacionários.	40
4.2	Resultados experimentais da fermentação alcoólica através da <i>Zymomonas mobilis</i> . Retirado de [6].	41
4.3	Concentração de substrato (glicose) ao passar do tempo para C.I. 1 e 2.	41
4.4	Concentração de biomassa (<i>Z. mobilis</i>) ao passar do tempo para C.I. 1 e 2.	42
4.5	Concentração do componente chave (<i>e</i>) ao passar do tempo para C.I. 1 e 2.	42
4.6	Concentração de produto (etanol) ao passar do tempo para C.I. 1 e 2.	43
4.7	Diagrama de bifurcação da concentração do componente chave (<i>e</i>) em relação a taxa de diluição.	44
4.8	Diagrama de bifurcação da concentração de biomassa (<i>Z. mobilis</i>) em relação a taxa de diluição.	44
4.9	Diagrama de bifurcação da concentração de substrato (glicose) em relação a taxa de diluição.	45
4.10	Diagrama de bifurcação da concentração de produto (etanol) em relação a taxa de diluição.	45
5.1	Curvas das taxas de crescimento específica das duas populações [Equações 5.8 e 5.9], sendo $\alpha = 0.7$, $\beta = 0.3$, $\gamma_1 = \gamma_2 = 0$. . .	51
5.2	Curvas das taxas de crescimento específica das duas populações [Equações 5.8 e 5.9], sendo $\alpha = 0.9$, $\beta = 0.25$, $\gamma_1 = \gamma_2 = 0.5$. .	52
5.3	Curvas das taxas de crescimento específica das duas populações [Equações 5.8 e 5.9], sendo $\alpha = 7$, $\beta = 30$, $\gamma_1 = 0.5$ e $\gamma_2 = 2$. .	52
5.4	Curvas das taxas de crescimento específica das duas populações [Equações 5.8 e 5.9], sendo $\alpha = 0.7$, $\beta = 0.2$, $\gamma_1 = 0.2$ e $\gamma_2 = 0.1$	53
5.5	Curvas das taxas de crescimento específica das duas populações [Equações 5.8 e 5.9], sendo $\alpha = 0.45$, $\beta = 0.2$, $\gamma_1 = 0.25$ e $\gamma_2 = 0.03$	53
5.6	Curvas das taxas de crescimento específica das duas populações [Equações 5.8 e 5.9], sendo $\alpha = 3$, $\beta = 6$, $\gamma_1 = 0$ e $\gamma_2 = 0.2$. .	54
5.7	Curvas das taxas de crescimento específica das duas populações [Equações 5.8 e 5.9], sendo $\alpha = 10.5$, $\beta = 100$, $\gamma_1 = 0.01$ e $\gamma_2 = 0.305$	54

LISTA DE FIGURAS

5.8	Diagrama operacional para os casos das curvas específicas da taxa de crescimento mostrado na Figura 5.1. O caráter dos estados estacionários em cada região do diagrama operacional são mostrados na Tabela 5.2.	56
5.9	Diagrama operacional para os casos das curvas específicas da taxa de crescimento mostrado na Figura 5.2. O caráter dos estados estacionários em cada região do diagrama operacional são mostrados na Tabela 5.2.	57
5.10	Diagrama operacional para os casos das curvas específicas da taxa de crescimento mostrado na Figura 5.3. O caráter dos estados estacionários em cada região do diagrama operacional são mostrados na Tabela 5.2.	57
5.11	Diagrama operacional para os casos das curvas específicas da taxa de crescimento mostrado na Figura 5.4. O caráter dos estados estacionários em cada região do diagrama operacional são mostrados na Tabela 5.2.	58
5.12	Diagrama operacional para os casos das curvas específicas da taxa de crescimento mostrado na Figura 5.5. O caráter dos estados estacionários em cada região do diagrama operacional são mostrados na Tabela 5.2.	58
5.13	Diagrama operacional para os casos das curvas específicas da taxa de crescimento mostrado na Figura 5.6. O caráter dos estados estacionários em cada região do diagrama operacional são mostrados na Tabela 5.2.	59
5.14	Diagrama operacional para os casos das curvas específicas da taxa de crescimento mostrado na Figura 5.7. O caráter dos estados estacionários em cada região do diagrama operacional são mostrados na Tabela 5.2.	59
5.15	Configuração de dois quimiostatos interconectados.	63

Lista de Tabelas

2.1	Classificação topológica de equilíbrios no plano. Adaptado de [13]	8
3.1	Parâmetros e valores dos parâmetros utilizados na simulações.	23
4.1	Parâmetros utilizados na simulação do modelo de Jobses.	39
4.2	Pontos de bifurcação.	46
5.1	Valores dos parâmetros utilizados nas equações 5.8 e 5.9 para obtenção das Figuras 5.1, 5.2, 5.3, 5.4, 5.5, 5.6 e 5.7	55
5.2	Características dos estados estacionários nas regiões de coexistência.	60
6.1	Coexistência de n populações microbianas competindo por m nutrientes em uma configuração de k quimiostatos interconectados.	69

Resumo

Este trabalho tem como objetivo principal a análise de sistemas dinâmicos que são representados por equações diferenciais, com aplicações em bioprocessos. É realizada uma breve introdução sobre o comportamento caótico determinístico, através dos conceitos de linearização, estabilidade linear, pontos de equilíbrio e bifurcações. Como exemplo, são realizadas as análises de dois modelos de dinâmica populacional, o modelo presa-predador de Lotka-Volterra e o modelo para três espécies interagentes, de Hastings-Powell; um modelo que representa um fermentador de etanol utilizando a bactéria *Zymomonas mobilis*, e por fim, uma discussão sobre a coexistência de microrganismos em biorreatores. Tais análises foram obtidas através de integração numérica dos sistemas, e das curvas de bifurcação, por continuação numérica através do software MatCont, que é uma caixa de ferramenta disponível para MATLAB com uma interface gráfica de usuário para a continuação de equilíbrios estáticos e dinâmicos de sistemas não-lineares.

Palavras-chave: Bifurcações, Caos, Sistemas dinâmicos não lineares, Sistemas biológicos.

Abstract

This work has as main objective the analysis of dynamical systems that are represented by non-linear equations, with applications in bioprocesses. A brief introduction on chaotic deterministic behavior is performed, through the concepts of linearization, linear stability, equilibrium points and bifurcations. As example, analyzes of two population dynamics models are performed, the Lotka-Volterra prey-predator model and the Hastings-Powell model for three interacting species; a model that represents an ethanol fermenter using the bacterium *Zymomonas mobilis*, and finally, a discussion about the coexistence of microorganisms in bioreactors. Such analyzes were obtained through numerical integration of the systems, and the bifurcation curves, by numerical continuation through the MatCont software, which is a toolbox available for MATLAB with a graphical user interface for the continuation of static and dynamic balance of systems nonlinear.

Keywords: Bifurcations, Chaos, Nonlinear Dynamical Systems, Biological systems.

Capítulo 1

Introdução

Modelos matemáticos usados para representar sistemas dinâmicos são de suma importância pois visa analisar e elaborar teorias, que possam antever, explicar e facilitar a interpretação de um fenômeno. Em muitos casos, devido à alta complexidade, um problema real não pode ser representado de maneira exata por uma equação matemática ou um sistema de equações, porém, se as variáveis essenciais do fenômeno observado forem levadas em consideração, o modelo matemático em questão poderá chegar a resultados satisfatórios que se assemelham bastante com a realidade observada [1, 2].

No estudo dos fenômenos não lineares, o comportamento caótico determinístico tem sido estudado como um aspecto de grande relevância através da introdução do conceito de atrator caótico, sendo possível, na transição ordem-chaos em sistemas dissipativos a identificação de sequências de bifurcações que apresentam certos aspectos universais [3].

O estudo das possíveis rotas para o caos tem sua origem no estudo de equações diferenciais determinísticas (teoria das bifurcações) constituindo a chamada teoria geométrica do caos [4], como exemplo ilustrativo podemos citar o trabalho desenvolvido pelos autores [5], onde através da análise de diagramas de bifurcação e expoentes de Lyapunov detectou-se um comportamento caótico emergindo de sucessivas duplicações de períodos. Observa-se comportamento caótico em sistemas com pelo menos três graus de liberdade.

Com o avanço no estudo de sistemas dinâmicos não-lineares atrelado ao surgimento da teoria do caos, levaram a comunidade científica a repensar a forma como entendem a natureza e seus padrões, bem como a maneira pela qual os sistemas de engenharia são modelados, projetados, operados e controlados [6].

Existem sistemas de equações diferenciais para os quais não são possíveis

de se obterem soluções analíticas e, muitas vezes, quando a solução analítica é encontrada, é de difícil interpretação e suas principais propriedades não são compreendidas. O estudo qualitativo de equações diferenciais visa identificar características importantes de suas soluções sem resolvê-las, sendo atrelado a um conjunto de conceitos e teorias, bem como o uso de computação numérica [7].

Com o intuito de facilitar a aplicação da teoria do caos e da dinâmica não-linear, é interessante a utilização de um software que seja de fácil utilização. Tal software deve realizar através de algoritmos numéricos, soluções para diferentes equações diferenciais, rotas de bifurcação e que seja capaz de computar vários parâmetros dinâmicos de interesse (autovalores, períodos de oscilações, expoentes de Lyapunov etc.) bem como um pacote de visualização avançado e interativo. Isso tornou a otimização de processos muito mais fácil, e trouxe a matemática complexa por trás da dinâmica de fluido computacional ao alcance de trabalhadores não matemáticos [8].

Para análise dos sistemas aprestandos nessa dissertação e geração de algumas imagens, foi utilizado o software MatCont, que é uma caixa de ferramentas MATLAB com uma interface gráfica de usuário para a continuação de equilíbrios estáticos e dinâmicos de sistemas não-lineares, esse software com sua interface gráfica fornece uma vantagem adicional de gerar visualizações diretamente sem usar qualquer outro software. Além disso, ele pode aproveitar ao máximo os recursos avançados do MATLAB, incluindo seus integradores robustos e caixa de ferramentas de computação simbólica.

1.1 Estrutura da dissertação

Esta dissertação apresenta os seguintes tópicos: no Capítulo 2 é realizada uma abordagem sobre sistemas não-lineares, apresentando o conceito de linearização, de estabilidade linear, classificação dos pontos de equilíbrio e uma introdução sobre bifurcações. O Capítulo 3 é dedicado à análise de dois modelos de dinâmica populacional, o modelo presa-predador de Lotka-Volterra, e o modelo para três espécies interagentes, de Hastings-Powell. No Capítulo 4 é apresentado o modelo de Jobses, que representa um fermentador de etanol utilizando a bactéria *Zymomonas mobilis*, no Capítulo 5, é realizada uma discussão sobre a coexistência de microrganismos em biorreatores e, por fim, o Capítulo 6 que é dedicado a conclusão.

Capítulo 2

Análise de sistemas não-lineares

Sistemas dinâmicos normalmente são representados por equações matemáticas que associam instantes iniciais e finais, sempre com o intuito de representar a dinâmica de um sistema de forma realística.

Modelos matemáticos podem ser caracterizados como sendo contínuo ou discreto em relação ao tempo, determinístico ou estocástico, linear ou não-linear, entre outros [9].

Não-linearidade significa que o resultado final não é diretamente proporcional aos valores de entrada, ou que a mudança em uma variável não produz uma mudança proporcional na variável relacionada [10].

Para analisar sistemas não-lineares, é interessante realizar a linearização do sistema de equações diferenciais, obtendo sua matriz Jacobiana (\mathbf{J}), permitindo assim, uma análise de sua estabilidade local através dos autovalores dessa matriz [11]. Caso todos os autovalores da Jacobiana (comumente representados por λ_i , onde i representa o número de autovalores) apresentem na parte real, valores negativos para determinado equilíbrio, diz-se que a solução é assintoticamente estável. Caso contrário a solução é dita assintoticamente instável, já autovalores com parte real negativa e positiva apontam para pontos de sela instáveis [12].

2.1 Linearização

Como primeiro passo para a análise de sistemas não-lineares, é necessário realizar a linearização do sistema de equações diferenciais, o qual pode ser demonstrado da seguinte forma:

Seja o sistema de equações diferenciais não-lineares

2.1. LINEARIZAÇÃO

$$\begin{aligned}\dot{x} &= f(x, y) \\ \dot{y} &= g(x, y)\end{aligned}\tag{2.1}$$

para o qual existe um ponto de equilíbrio $P^* = (x^*, y^*)$, ponto este representado onde a equação é constante, ou seja, a primeira derivada é igual a zero, e a expansão em série de Taylor pode ser escrita como

$$\begin{aligned}\dot{x} &= f(x, y) = f(x^*, y^*) + \frac{\partial f}{\partial x}(x^*, y^*)(x - x^*) + \\ &+ \frac{\partial f}{\partial y}(x^*, y^*)(y - y^*) + \text{termos de ordem superior}; \\ \dot{y} &= g(x, y) = g(x^*, y^*) + \frac{\partial g}{\partial x}(x^*, y^*)(x - x^*) + \\ &+ \frac{\partial g}{\partial y}(x^*, y^*)(y - y^*) + \text{termos de ordem superior}.\end{aligned}\tag{2.2}$$

Definindo-se novas variáveis $\tilde{x} = x - x^*$ e $\tilde{y} = y - y^*$, observando-se que $\tilde{\dot{x}} = \dot{x}$, e $\tilde{\dot{y}} = \dot{y}$, e $f(x^*, y^*) = g(x^*, y^*) = 0$, após desprezar os termos de ordem superior temos que:

$$\begin{aligned}\tilde{\dot{x}} &= \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_* \tilde{x} + \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_* \tilde{y} \\ \tilde{\dot{y}} &= \left. \frac{\partial g}{\partial x} \right|_* \tilde{x} + \left. \frac{\partial g}{\partial y} \right|_* \tilde{y}\end{aligned}\tag{2.3}$$

onde as derivadas $(\partial \dots / \partial \dots) |_* = (\partial \dots / \partial \dots)(x^*, y^*)$ são calculadas no ponto fixo $P^* = (x^*, y^*)$.

Obtém-se, assim, o sistema linear

$$\begin{aligned}\tilde{\dot{x}} &= a\tilde{x} + b\tilde{y} \\ \tilde{\dot{y}} &= c\tilde{x} + d\tilde{y}\end{aligned}\tag{2.4}$$

Essa aproximação é válida para os pontos próximos ao ponto fixo $P^* = (x^*, y^*)$ sendo que $\tilde{\dot{x}}$ e $\tilde{\dot{y}}$ descrevem o comportamento local das soluções próximas a P^* .

2.2 Estabilidade linear

Seja o sistema linear

$$\dot{x} = ax + by = f(x, y); \quad \dot{y} = cx + dy = g(x, y) \quad (2.5)$$

Esse sistema apresenta um ponto de equilíbrio para $(x^*, y^*) = (0, 0)$, e pode ser escrito, sob forma matricial, como

$$\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \partial f / \partial x & \partial f / \partial y \\ \partial g / \partial x & \partial g / \partial y \end{bmatrix} = \mathbf{J} \quad (2.6)$$

denominada matriz Jacobiana. Para determinar os autovalores e autovetores devemos resolver

$$\det(\mathbf{J} - \lambda \mathbf{I}) = 0. \quad (2.7)$$

onde \mathbf{I} é a matriz identidade, e resolvendo a equação 2.7 temos

$$(a - \lambda)(d - \lambda) - bc = 0. \quad (2.8)$$

Essa equação apresenta duas raízes: λ_1 e λ_2 que determinarão a estabilidade do ponto de equilíbrio (ponto fixo) $P^* = (0, 0)$, e a solução do sistema pode ser escrita da seguinte forma

$$\vec{x}(t) = c_1 \mathbf{v}_1 e^{\lambda_1 t} + c_2 \mathbf{v}_2 e^{\lambda_2 t} \quad (2.9)$$

onde c_1 e c_2 são constantes arbitrárias e \mathbf{v}_1 e \mathbf{v}_2 são os autovetores da matriz Jacobiana, associados aos autovalores λ_1 e λ_2 , respectivamente.

2.3 Classificação dos pontos de equilíbrio

Na análise de sistemas dinâmicos é importante determinarmos seus pontos de equilíbrio, ou seja, onde a variação das populações é nula, e analisar a estabilidade linear (local) destes pontos.

No caso geral, n-dimensional, os λ_i podem ser reais ou complexos. Seja $\lambda_i = Re(\lambda_i) + i Im(\lambda_i)$, onde $Re(\lambda_i)$ e $Im(\lambda_i)$ são, respectivamente, as partes real e imaginária do autovalor.

Se $Re(\lambda_i) \neq 0$ para todos λ_i , o equilíbrio é dito hiperbólico ou não-degenerado. A estabilidade do ponto de equilíbrio é determinada pelos autovalores da matriz Jacobiana:

2.3. CLASSIFICAÇÃO DOS PONTOS DE EQUILÍBRIO

- a) $Re(\lambda_i) < 0$ para todo i implica estabilidade assintótica;
- b) $Re(\lambda_i) > 0$ para um (ou mais) valores de i implica instabilidade.

Se $Re(\lambda) = 0$, o equilíbrio é dito não-hiperbólico, elíptico ou degenerado. O ponto é então estável (mas não assintoticamente estável) e é chamado de centro.

Em sistemas maiores, o número de possíveis combinações para os autovalores pode crescer drasticamente, por exemplo, para um sistema tridimensional ($n = 3$) podem existir até 10 tipos diferentes de ponto de equilíbrio não-degenerado. A seguir, serão mostradas as possibilidades para os autovalores λ_1 e λ_2 no caso do sistema bidimensional ($n = 2$).

2.3.1 λ_1 e λ_2 são reais, distintos, $\lambda_1 \cdot \lambda_2 > 0$

Nesse caso λ_1 e λ_2 apresentam o mesmo sinal e o ponto P^* é denominado um nó ou ponto nodal ("node"). A estabilidade do nó é determinada pelos sinais de λ_1 e λ_2 . Se $\lambda_1, \lambda_2 > 0$, P^* é instável. P^* é estável se $\lambda_1, \lambda_2 < 0$. A direção pela qual as trajetórias aproximam-se ou afastam-se do ponto fixo pode ser radial ou não-radial. Isso será definido pelos autovetores de \mathbf{J} .

2.3.2 λ_1 e λ_2 são reais, $\lambda_1 = \lambda_2 \neq 0$

No caso particular em que $\lambda_1 = \lambda_2 \neq 0$ e reais o ponto fixo é também classificado como um nó, chamado nó impróprio ("inflected node"). Existe apenas uma direção de aproximação; as trajetórias são tangentes e paralelas a esta única direção.

2.3.3 λ_1 e λ_2 são reais, $\lambda_1 \cdot \lambda_2 < 0$

Quando λ_1 e λ_2 têm sinais distintos o ponto de equilíbrio é denominado ponto de sela hiperbólico. As trajetórias aproximam-se da origem segundo uma das direções e afastam-se pela outra; como consequência um ponto de sela é sempre instável.

2.3.4 λ_1 e λ_2 complexos conjugados, $Re(\lambda_i) \neq 0$

Considerando $\lambda_{1,2} = \alpha \pm i\beta$, com $\beta \neq 0$. Para $\alpha \neq 0$ as trajetórias descrevem uma espiral convergindo para um ponto fixo que se chama foco. A estabilidade será dada pelo sinal de α .

Se $\alpha > 0$ as trajetórias afastam-se do ponto fixo e o foco é instável. Inversamente, se $\alpha < 0$ as trajetórias aproximam-se do ponto fixo e o foco é estável.

Para $\alpha = 0$ os autovalores são imaginários puros ou complexos conjugados. As soluções são periódicas e o ponto fixo é chamado centro, trata-se de um equilíbrio elíptico ou degenerado. Um centro é um ponto de equilíbrio estável, mas não assintoticamente estável.

A Tabela 2.1 apresenta um resumo sobre a classificação dos pontos de equilíbrio em duas dimensões.

Outra forma do retrato de fase, não apresentada na Tabela 2.1, diz respeito ao comportamento periódico de ciclos limite (Figura 2.1). Ciclos limite só aparecem em sistemas dissipativos, enquanto que comportamentos de centro e pontos de sela hiperbólicos aparecem em sistemas conservativos. A diferença entre comportamentos de centro e ciclo limite é que centros podem ocorrer em sistemas lineares, enquanto que ciclos limite surgem em sistemas não-lineares. A grande diferença entre os dois comportamentos é que ciclos limite são órbitas fechadas, ou seja, perturbações não mudam trajetórias fechadas como em centros onde as perturbações levam o sistema a novas órbitas.

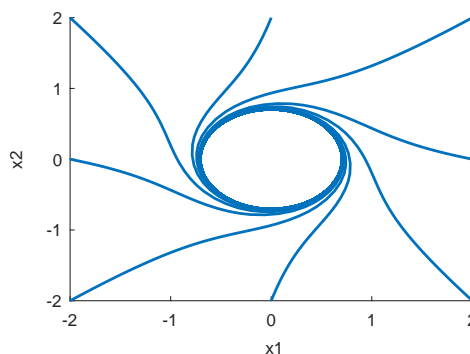


Figura 2.1: Comportamento de ciclo limite para diversas condições iniciais.

2.4. DIAGRAMAS DE FASE E BIFURCAÇÃO

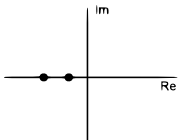
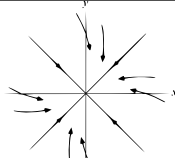
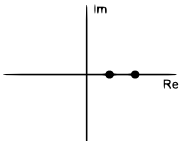
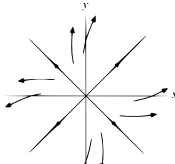
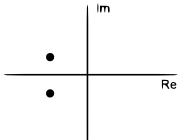
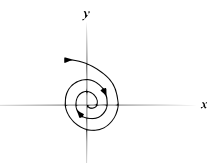
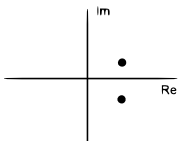
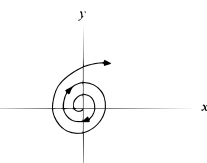
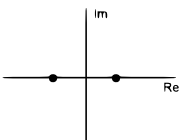
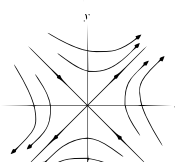
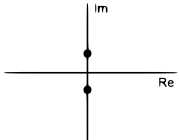
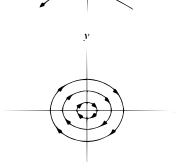
<i>Autovalores</i>	<i>Espaço de Fase</i>	<i>Classificação</i>	<i>Estabilidade</i>
		Nó	Estável
		Nó	Instável
		Foco	Estável
		Foco	Instável
		Sela	Instável
		Centro	Estável

Tabela 2.1: Classificação topológica de equilíbrios no plano. Adaptado de [13]

2.4 Diagramas de fase e Bifurcação

No século XIX, o francês Poincaré introduziu o conceito de bifurcação, como sendo uma mudança qualitativa no diagrama de fase de um sistema dinâmico, através da variação de algum parâmetro de controle. Ou seja, pontos de

equilíbrio podem ser criados ou destruídos, ou alterar sua estabilidade. Estas mudanças qualitativas na dinâmica são chamadas bifurcações e os valores dos parâmetros no qual elas ocorrem são chamados pontos de bifurcações [14].

Uma das técnicas mais importantes no estudo de sistemas não-lineares é a análise do espaço de fase. Quando um parâmetro de bifurcação é varrido e os pontos de equilíbrio referentes à variável de estado são plotados, obtém-se um diagrama de bifurcação. Através dessa técnica, é possível caracterizar comportamentos como o efeito das condições iniciais e da estabilidade de soluções estacionárias. Basicamente, esta técnica consiste em traçar curvas de uma variável de estado versus outra variável de estado, onde cada curva é baseada em uma condição inicial [14]. Desta forma, é possível relacionar os autovalores de um sistema com suas características, pontos estáveis são atratores e pontos instáveis repulsores de soluções. O surgimento de autovalores complexos conjugados é a causa da ocorrência de retratos de fase com o formato de espiral ou foco, como foi mostrado na Tabela 2.1.

O tema bifurcação é bastante extenso e complexo, e vamos discutir de forma resumida e introdutória algumas da bifurcações mais simples.

2.4.1 Bifurcação sela-nó ou de dobra ("fold")

A característica dessa singularidade é a mudança de estabilidade, e está associada ao aparecimento de um autovalor $\lambda = 0$.

Seja a equação diferencial

$$\dot{x} = \mu - x^2 = f_{\mu}(x) \quad (2.10)$$

onde μ é o parâmetro de controle e os pontos de equilíbrio da equação 2.10 são $+\sqrt{\mu}$ e $-\sqrt{\mu}$, cujos autovalores são $-2\sqrt{\mu}$ e $+2\sqrt{\mu}$

À medida que μ decresce e torna-se negativo os dois pontos de equilíbrio deixam de existir, revelando a inexistência de soluções com significado físico, pois o equilíbrio torna-se um número complexo, havendo uma mudança qualitativa nas propriedades dinâmicas quando $\mu = 0$, sendo o ponto $(\mu, x) = (0, 0)$ um ponto de retorno. Através da Figura 2.2 é possível observar o resultado dessa análise de estabilidade (para o equilíbrio estável usam-se linhas contínuas e para o equilíbrio instável linhas pontilhadas). O equilíbrio estável é um nó (ramo superior) e o equilíbrio instável é um ponto de sela hiperbólico (ramo inferior). Para a equação 2.10, o ponto de bifurcação coincide com o ponto de retorno mas nem sempre um ponto de retorno separa um equilíbrio estável de um equilíbrio instável.

2.4. DIAGRAMAS DE FASE E BIFURCAÇÃO

As bifurcações sela-nó são importantes pelo fato de que todas as bifurcações de famílias uniparamétricas com um equilíbrio com autovalor zero podem ser perturbadas via uma bifurcação sela-nó.

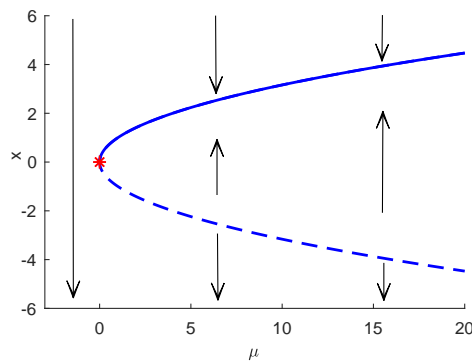


Figura 2.2: Bifurcação sela-nó.

2.4.2 Bifurcação transcritical

Na bifurcação transcritical ocorre a mudança de estabilidade das soluções. Considerando agora a equação

$$\dot{x} = \mu x - x^2 = f_{\mu}(x) \quad (2.11)$$

onde os pontos de equilíbrio são $x = 0$ e $x = \mu$.

Para $\mu > 0$ o equilíbrio $x = 0$ é instável, pois seu autovalor é um número real positivo ($\lambda = \mu$) e para o equilíbrio $x = \mu$ é estável, pois apresenta um autovalor real negativo ($\lambda = -\mu$). Para valores de $\mu < 0$ ocorre o inverso em relação às estabilidades. Quando μ passa por zero não há surgimento nem desaparecimento de equilíbrios, apenas mudança na estabilidade. Este tipo de bifurcação da Figura 2.3 é chamado de bifurcação transcritical.

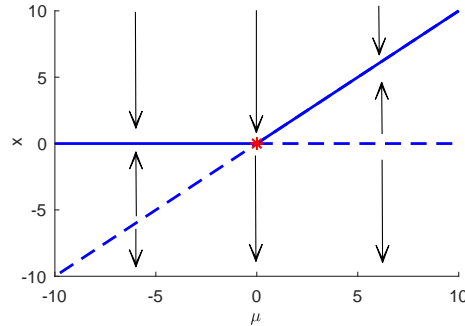


Figura 2.3: Bifurcação transcritical.

2.4.3 Bifurcação de Forquilha ("Pitchfork" ou "Cusp")

Este tipo de bifurcação é caracterizado pelo aparecimento ou desaparecimento de equilíbrios e pela ocorrência de mudança da estabilidade, ocorrem em sistemas que apresentam simetria de algum tipo.

Bifurcação Supercrítica de Forquilha

Considerando a seguinte equação diferencial

$$\dot{x} = \mu x - x^3 = f_{\mu}(x) \quad (2.12)$$

O ponto de bifurcação é $(x, \mu) = (0, 0)$, cujos equilíbrios são $x = 0$ e $x = \pm\sqrt{\mu}$ (para $\mu > 0$).

Para $\mu < 0$ as duas raízes ($x = \pm\sqrt{\mu i}$) se tornam números complexos, existindo então apenas um equilíbrio estável para $x = 0$, que torna-se instável ao cruzar a origem. Para $\mu > 0$ surgem dois equilíbrios estáveis para $x = \pm\sqrt{\mu}$. Conseqüentemente em $\mu = 0$ na Equação 2.12 apresenta uma mudança qualitativa na sua estrutura de órbita.

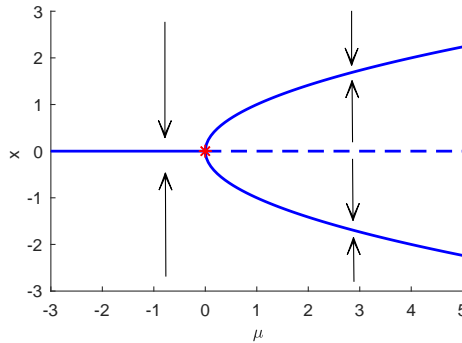


Figura 2.4: Bifurcação supercrítica de forquilha.

Bifurcação Subcrítica de Forquilha

Considerando agora a seguinte equação diferencial

$$\dot{x} = \mu x + x^3 = f_\mu(x) \quad (2.13)$$

O ponto de bifurcação continua sendo $(x, \mu) = (0, 0)$, mas os equilíbrios são agora $x = 0$ e $x = \pm\sqrt{-\mu}$.

Para $\mu < 0$, as raízes do equilíbrio $x = \pm\sqrt{-\mu}$ são instáveis, existindo então apenas um equilíbrio estável para $x = 0$, que se torna instável ao cruzar a origem. Consequentemente em $\mu = 0$ na Equação 2.13 apresenta uma mudança qualitativa na sua estrutura de órbita. As Figuras 2.4 e 2.5 representam uma bifurcação com formato de forquilha, daí o nome bifurcação de forquilha.

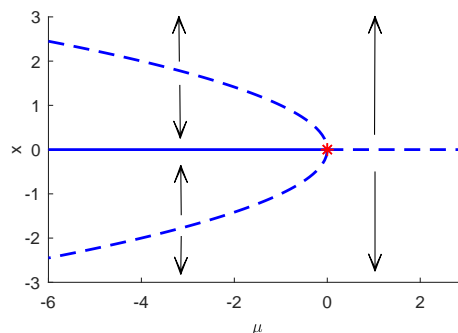


Figura 2.5: Bifurcação subcrítica forquilha.

2.4.4 Bifurcação de Hopf

Bifurcação de Hopf é caracterizada pela existência de um par de autovalores da matriz Jacobiana puramente imaginários (complexos conjugados) no ponto de bifurcação, com surgimento de um ciclo limite, em um sistema contínuo, ou seja, é um tipo de bifurcação que liga equilíbrio a movimento periódico. O diagrama de bifurcação é mostrado na Figura 2.6, em termos das variáveis x_1 e x_2 e do parâmetro α .

A bifurcação de Hopf pode se apresentar na forma subcrítica ou supercrítica. O termo supercrítico é definido como o surgimento de um ciclo limite no ponto de bifurcação e o termo subcrítico como o desaparecimento do ciclo limite no ponto de bifurcação. Obviamente este conceito é relativo à direção de varredura da variável de controle.

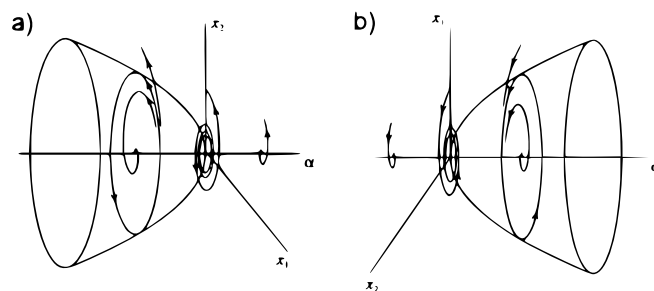


Figura 2.6: Bifurcação de Hopf: (a) subcrítica e (b) supercrítica. Retirado de [11]

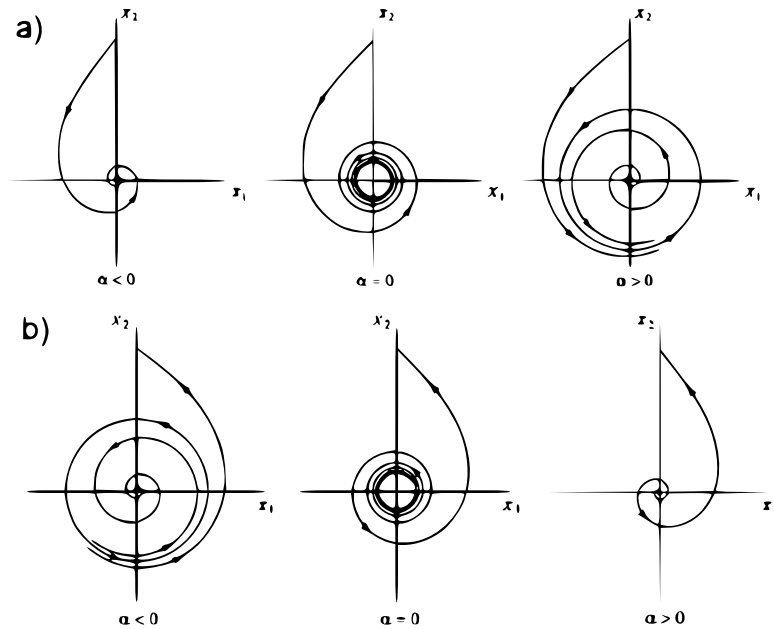


Figura 2.7: Retrato de fase da formação de uma bifurcação Hopf: (a) supercrítica e (b) subcrítica. Retirado de [11]

2.4.5 Bifurcação de duplicação de período ("flip")

Uma bifurcação que aparece com grande frequência é aquela representada por um ponto fixo estável que sofre uma bifurcação de Hopf em um certo valor $\mu = \mu_1$ do parâmetro de controle. Aumentando o parâmetro de controle para $\mu = \mu_2$ o ciclo limite torna-se instável e uma órbita de período duplo aparece. Em geral pode surgir uma série de n duplicações depois das quais um ciclo limite de período $2^n T$ é obtido. Esse tipo de bifurcação é chamada de duplicação de período ou "flip". Diversos sistemas apresentam uma série infinita de bifurcações com um ponto de acumulação finito; o movimento associado além desse ponto é caótico, caracterizando uma rota para o caos via duplicação de período.

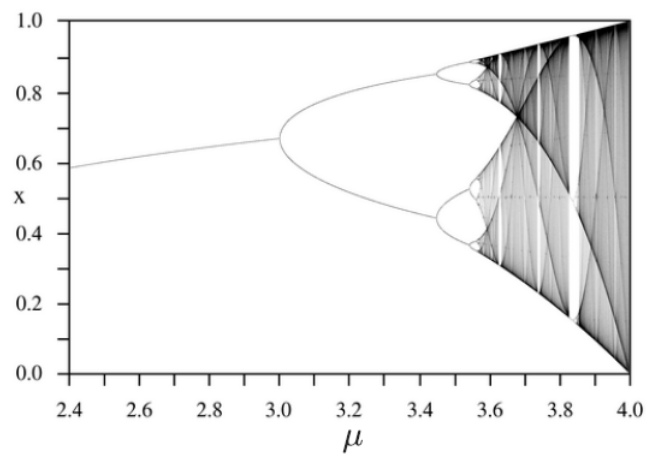


Figura 2.8: Bifurcação de duplicação de período "flip". Adaptado de [14]

Capítulo 3

Modelos de dinâmica populacional

Um dos principais objetivos da elaboração de modelos matemáticos para dinâmica populacional é entender de que forma as interações afetam a dinâmica das espécies envolvidas. No estudo de tais sistemas, onde as populações estão variando de modo contínuo, são analisadas as equações diferenciais que relacionam a taxa na qual as populações estão mudando com o valor das populações em um determinado tempo.

3.1 Modelo para duas espécies interagentes: o modelo presa-predador de Lotka-Volterra

Quando existem interações entre duas ou mais espécies, a dinâmica populacional de uma espécie é afetada pela dinâmica da outra, e o modelo caracterizado como presa-predador é aquele onde a densidade populacional de uma espécie aumenta e a da outra diminui.

O modelo de Lotka-Volterra, proposto em 1926, procurava explicar os níveis oscilatórios entre duas espécies de uma determinada cadeia de peixes no mar Adriático.

Considerando $N(t)$ como sendo a população de presas e $P(t)$ a população de predadores, no tempo t , então o modelo de Lotka-Volterra pode ser representado da seguinte forma:

$$\frac{1}{N} \frac{dN}{dt} = a - bP \quad (3.1)$$

$$\frac{1}{P} \frac{dP}{dt} = -d + cN \quad (3.2)$$

onde a , b , c e d são constantes positivas.

São consideradas as seguintes hipóteses sobre o modelo:

- a) Na ausência do predador, a presa cresce de maneira ilimitada, esse crescimento é representado pelo termo a .
- b) A predação tem como resultado reduzir a taxa de crescimento da presa, através de um termo proporcional à população de predadores, representado pelo termo $-bP$.
- c) Com o desaparecimento das presas, a taxa de mortalidade do predador é representado pelo termo $-d$.
- d) A colaboração de presas para a taxa de crescimento dos predadores é dada por cN , que é proporcional à quantidade de presas.

Primeiramente, é realizada a adimensionalização do modelo de Lotka-Volterra, pois as condições de estabilidade não podem variar conforme as unidades de medida adotadas. Considerando:

$$u(\tau) = \frac{cN(t)}{d} \quad v(\tau) = \frac{bP(t)}{a} \quad \tau = at \quad (3.3)$$

então o modelo Lotka-Volterra torna-se:

$$\frac{du}{d\tau} = u(1 - v) \quad (3.4)$$

$$\frac{dv}{d\tau} = \alpha v(u - 1) \quad (3.5)$$

onde $\alpha \equiv d/a$ é um parâmetro adimensional, e o sistema que apresentava quatro parâmetros dimensionais foi reduzido para um.

Portanto, no plano de fase, temos:

$$\frac{dv}{du} = \alpha \frac{v(u - 1)}{u(1 - v)} \quad (3.6)$$

que apresenta pontos singulares em $u^* = v^* = 0$ e $u^* = v^* = 1$. Integrando a Equação 3.6, obtemos as seguintes trajetórias de fase

$$\alpha u + v - \ln u^\alpha v = C \quad (3.7)$$

que estabelecem a solução geral da equação diferencial 3.6 representando uma família de curvas, sendo que cada uma delas corresponde a um valor distinto

3.1. MODELO PARA DUAS ESPÉCIES INTERAGENTES: O MODELO PRESA-PREDADOR DE LOTKA-VOLTERRA

da constante C . O valor de C deve satisfazer a seguinte desigualdade: $C > 1 + a$. As soluções da Equação 3.7 no plano de fase são trajetórias fechadas e, para alguns valores de $C > 1 + a$, estão ilustradas na figura abaixo.

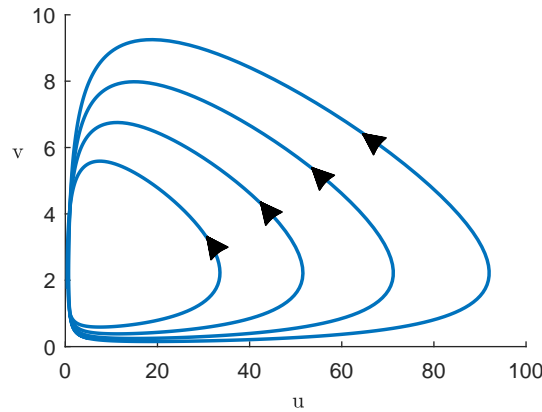


Figura 3.1: Soluções do modelo presa-predador de Lotka-Volterra, no plano de fase.

Para determinar a constante C na Equação 3.7 e representar a trajetória no plano de fase, são necessárias as condições iniciais $u(0)$ e $v(0)$. Cada trajetória fechada (ciclo) no plano uv resulta soluções periódicas em τ , cuja amplitude depende do valor da constante C . Soluções periódicas $u(\tau)$ e $v(\tau)$ são ilustradas na Figura 3.2.

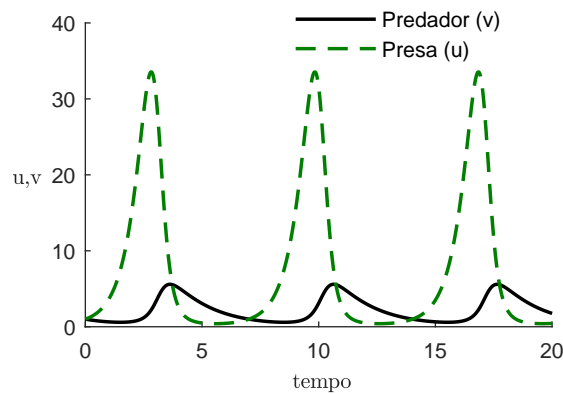


Figura 3.2: Densidade de presas e predadores ao passar do tempo

3.1.1 Estabilidade linear dos estados estacionários

Para analisar a estabilidade local dos estados estacionários do sistema de equações diferenciais 3.4 e 3.5, considera-se uma aproximação linear deste sistema em torno dos pontos fixos (u^*, v^*) . Consideraremos apenas pontos (u, v) suficientemente próximos de (u^*, v^*) , isto é,

$$u(\tau) = u^* + \eta(\tau) \quad (3.8)$$

e

$$v(\tau) = v^* + \xi(\tau) \quad (3.9)$$

onde $|\eta| \ll 1$ e $|\xi| \ll 1$

Expandindo as Equações 3.4 e 3.5 em série de Taylor em torno do ponto (u^*, v^*) e mantendo apenas os termos lineares em $(u - u^*)$ e $(v - v^*)$ o sistema pode ser escrito através da seguinte forma matricial:

$$\begin{bmatrix} \frac{d\eta}{d\tau} \\ \frac{d\xi}{d\tau} \end{bmatrix} \approx \mathbf{J} \begin{bmatrix} \eta \\ \xi \end{bmatrix} \quad (3.10)$$

onde definimos a matriz Jacobiana como sendo:

$$\mathbf{J} \equiv \begin{bmatrix} \frac{\partial(u(1-v))}{\partial u} |_{(u^*, v^*)} & \frac{\partial(u(1-v))}{\partial v} |_{(u^*, v^*)} \\ \frac{\partial(\alpha v(u-1))}{\partial u} |_{(u^*, v^*)} & \frac{\partial(\alpha v(u-1))}{\partial v} |_{(u^*, v^*)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 - v^* & -u^* \\ \alpha v^* & \alpha(u^* - 1) \end{bmatrix} \quad (3.11)$$

denominada matriz comunidade do sistema. E a solução da Equação 3.10 pode ser representada da seguinte forma:

$$\begin{bmatrix} \eta(\tau) \\ \xi(\tau) \end{bmatrix} = c_1 \mathbf{v}_1 e^{\lambda_1 \tau} + c_2 \mathbf{v}_2 e^{\lambda_2 \tau} \quad (3.12)$$

onde c_1 e c_2 são constantes arbitrárias e \mathbf{v}_1 e \mathbf{v}_2 são os autovetores da matriz Jacobiana, associados aos autovalores λ_1 e λ_2 , respectivamente, e estes são as raízes do polinômio característico da matriz \mathbf{J} , isto é, são soluções de

$$\det(\mathbf{J} - \lambda \mathbf{I}) = 0 \quad (3.13)$$

Portanto, a análise dos pontos de equilíbrio podem ser representadas da seguinte forma:

3.1. MODELO PARA DUAS ESPÉCIES INTERAGENTES: O MODELO PRESA-PREDADOR DE LOTKA-VOLTERRA

a) Estado de equilíbrio trivial

Para $(u^*, v^*) = (0, 0)$ denominado estado de equilíbrio trivial, a matriz \mathbf{J} definida na Equação 3.11 é dada por

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -\alpha \end{bmatrix} \quad (3.14)$$

cujos autovalores são $\lambda_1 = 1$ e $\lambda_2 = -\alpha$ e os autovetores correspondentes são $\mathbf{v}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ e $\mathbf{v}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$.

A solução da Equação 3.10 com Jacobiano dado pela Equação 3.14 pode ser representada como sendo:

$$\begin{bmatrix} \eta(\tau) \\ \xi(\tau) \end{bmatrix} = c_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} e^\tau + c_2 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} e^{-\alpha\tau} \quad (3.15)$$

onde $\eta(\tau) = c_1 e^\tau$, $\xi(\tau) = c_2 e^{-\alpha\tau}$, e c_1, c_2 são constantes arbitrárias. Sendo assim, quando $\tau \rightarrow \infty$, tem-se que $|\eta(\tau)|$ cresce exponencialmente enquanto que $|\xi(\tau)|$ decresce exponencialmente pois $\alpha > 0$, concluindo que este ponto é linearmente instável. Como $\lambda_1 > 0$, e $\lambda_2 < 0$ este é um ponto de sela, portanto instável. Qualquer pequena perturbação, com relação ao ponto $(0, 0)$, cresce exponencialmente em módulo, exceto quando a perturbação for estritamente ao longo de \mathbf{v}_2 , isto é, para $C_1 = 0$.

b) Estado de equilíbrio não trivial

Para $(u^*, v^*) = (1, 1)$, temos que a matriz \mathbf{J} definida na Equação 3.11 é dada por

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ \alpha & 0 \end{bmatrix} \quad (3.16)$$

cujos autovalores λ são dados por

$$\begin{vmatrix} -\lambda & -1 \\ \alpha & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \lambda_1, \lambda_2 = \pm i\sqrt{\alpha} \quad (3.17)$$

Sendo os autovalores imaginários puros, conclui-se que o único equilíbrio não trivial do modelo de Lotka-Volterra $(u^*, v^*) = (1, 1)$ é uma singularidade do tipo centro. A solução da Equação 3.10, com \mathbf{J} dado pela Equação 3.16 pode ser representada da seguinte forma:

$$\begin{bmatrix} \eta(\tau) \\ \xi(\tau) \end{bmatrix} = c_1 \mathbf{v}_1 e^{i\sqrt{\alpha}\tau} + c_2 \mathbf{v}_2 e^{-i\sqrt{\alpha}\tau} \quad (3.18)$$

onde c_1 e c_2 são constantes arbitrárias e

$$\mathbf{v}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ -\sqrt{\alpha}i \end{bmatrix} e \quad \mathbf{v}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ \sqrt{\alpha}i \end{bmatrix}$$

são os autovetores associados aos autovalores λ_1 e λ_2 , respectivamente. Portanto, as soluções na vizinhança do ponto singular $(u^*, v^*) = (1, 1)$ são periódicas em τ e tem período igual a $\frac{2\pi}{\sqrt{\alpha}}$.

O modelo de Lotka-Volterra resulta em comportamento oscilatório das populações, podendo ser analisado com o seguinte raciocínio: Se a população de presas aumenta, ela encoraja o crescimento da população de seus predadores, entretanto, mais predadores consomem mais presas, e assim a população destas começa a diminuir, com menos alimento, a população de predadores decresce e quando está suficientemente baixa, permite que a população de presas volte a aumentar, começando o ciclo novamente.

Embora este modelo reproduza a existência de ciclos (curvas fechadas no espaço de fase), o que significa soluções oscilatórias para $x(\tau)$ e $y(\tau)$, ele é considerado biologicamente não realístico, porque a existência de um número infinito de curvas fechadas, correspondendo a diferentes condições iniciais, permitiria que pequenas perturbações transferissem o sistema de um ciclo para outro e não há justificativa biológica para explicar oscilações de qualquer tamanho.

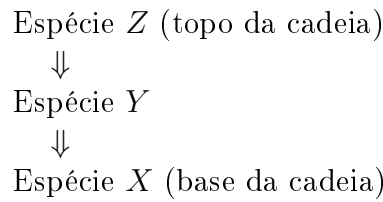
3.2 Modelo para três espécies interagentes: o modelo de Hastings-Powell [15]

Modelos de dinâmica populacional para três ou mais espécies podem apresentar comportamento complexo, e como exemplo vamos elucidar uma cadeia

3.2. MODELO PARA TRÊS ESPÉCIES INTERAGENTES: O MODELO DE HASTINGS-POWELL [15]

alimentar estudada por Hastings-Powell [15], onde é possível detectar pontos de equilíbrio estáveis, ciclo limite ou atratores caóticos dependo dos valores de parâmetros utilizados.

O modelo de Hastings-Powell [15] descreve uma cadeia alimentar composta por três espécies, onde X é a espécie que ocupa o nível mais baixo (base) da cadeia alimentar, Y a espécie que tem X como presas, e Z a espécie que ocupa o nível mais alto da cadeia alimentar (topo) e que tem Y como presas. A cadeia alimentar deste modelo é ilustrada abaixo.



E o modelo Hastings-Powell pode ser representado da seguinte forma:

$$\frac{1}{X} \frac{dX}{dT} = R_0 \left(1 - \frac{X}{K_0} \right) - C_1 Y \frac{A_1}{X + B_1} \quad (3.19)$$

$$\frac{1}{Y} \frac{dY}{dT} = -D_1 + X \frac{A_1}{X + B_1} - Z \frac{A_2}{Y + B_2} \quad (3.20)$$

$$\frac{1}{Z} \frac{dZ}{dT} = -D_2 + C_2 Y \frac{A_2}{Y + B_2} \quad (3.21)$$

Onde T representa o tempo, a constante R_0 é a taxa de crescimento da espécie X , e a constante K_0 é a capacidade de suporte do ambiente para esta espécie. As constantes C_1 e C_2 são as taxas de conversão da espécie X para as espécies Y e Z , respectivamente; as constantes D_1 e D_2 são taxas de mortalidade para as espécies Y e Z , o parâmetro A_1 é a taxa de captura da espécie Y sobre a espécie X enquanto que o parâmetro A_2 é a taxa de captura da espécie Z sobre a espécie Y , tendo ainda os parâmetros B_1 e B_2 como sendo as constantes de meia saturação (o valor do nível populacional de presas, na qual a taxa de captura por predador é a metade de seu valor máximo) para cada uma dessas capturas.

Adimensionalizando o sistema temos:

$$x = \frac{X}{K_0} \quad y = \frac{C_1 Y}{K_0} \quad z = \frac{C_1 Z}{C_2 K_0} \quad t = R_0 T \quad (3.22)$$

onde podemos escrever o seguinte sistema de equações:

$$\frac{dx}{dt} = x(1 - x) - f_1(x)y \quad (3.23)$$

$$\frac{dy}{dt} = f_1(x)y - f_2(y)z - d_1y \quad (3.24)$$

$$\frac{dz}{dt} = f_2(y)z - d_2z \quad (3.25)$$

sendo

$$f_i(u) = \frac{a_i u}{(1 + b_i u)} \quad \text{para } i = 1, 2. \quad (3.26)$$

Portanto, x , y e z são medidas adimensionais do tamanho das populações e t é a nova variável tempo, também adimensional.

Os parâmetros adimensionais: a_i , b_i e d_i ($i = 1, 2$), cujas relações com os parâmetros dimensionais, e os valores numéricos adotados por [15] estão representados na Tabela 3.1.

<i>Parâmetros adimensionais</i>	<i>Parâmetros dimensionais</i>	<i>Valores adotados</i>
a_1	$(K_0 A_1)/(R_0 B_1)$	5.0
b_1	K_0/B_1	variando de 2.0 a 3.0
a_2	$(C_2 A_2 K_0)/(C_1 R_0 B_2)$	0.1
b_2	$k_0/(C_1 B_2)$	2.0
d_1	D_1/R_0	0.4
d_2	D_2/R_0	0.01

Tabela 3.1: Parâmetros e valores dos parâmetros utilizados na simulações.

Considerando os valores numéricos de a_i , b_i e d_i utilizados por Hastings-Powell [15] (Tabela 3.1) o sistema pode ser representado da seguinte forma:

$$\frac{dx}{dt} = x(1 - x) - \frac{5x}{1 + b_1 x} y \quad (3.27)$$

$$\frac{dy}{dt} = \frac{5x}{1 + b_1 x} y - \frac{0.1y}{1 + 2y} z - 0.4y \quad (3.28)$$

$$\frac{dz}{dt} = \frac{0.1y}{1 + 2y} z - 0.01z \quad (3.29)$$

3.2. MODELO PARA TRÊS ESPÉCIES INTERAGENTES: O MODELO DE HASTINGS-POWELL [15]

Um dos fatores para a escolha dos valores para os parâmetros, feito por Hastings-Powell, foi que a escala de tempo natural da interação entre a espécie y e a espécie z fosse relativamente maior do que a escala de tempo da interação entre a espécie x e a espécie y , isto é, $d_1 \gg d_2$. Outro fator foi o interesse em sistemas que pudessem gerar caos, e uma das formas é forçar periodicamente sistemas não lineares que já exibem comportamento de ciclo limite. Então, os parâmetros foram escolhidos de modo que:

- a) com z ausente, o subsistema xy exibisse comportamento de ciclo limite (Lotka-Volterra);
- b) com x constante, o subsistema yz exibisse comportamento de ciclo limite.

A escolha do parâmetro b_1 como parâmetro de controle se deve ao fato de que investigações anteriores [15] mostraram que a constante de meia saturação B_1 , que é proporcional a b_1^{-1} foi um parâmetro chave na determinação da estabilidade de modelos presa-predador. Sendo assim, mostraremos que, dependendo do valor de b_1 , o sistema pode exibir equilíbrio estável, comportamento de ciclo limite ou caos.

3.2.1 Determinação dos pontos de equilíbrio

Pontos de equilíbrio, estados estacionários ou estados de equilíbrio, são pontos (x^*, y^*, z^*) do espaço de fase xyz , tais que as condições abaixo sejam satisfeitas:

$$\left. \frac{dx}{dt} \right|_{(x^*, y^*, z^*)} = 0 \quad \left. \frac{dy}{dt} \right|_{(x^*, y^*, z^*)} = 0 \quad \left. \frac{dz}{dt} \right|_{(x^*, y^*, z^*)} = 0 \quad (3.30)$$

Para determiná-los, reescreveremos o sistema adimensional (3.27)-(3.29), da seguinte forma

$$\frac{dx}{dt} = F(x, y) = xf(x, y) \quad (3.31)$$

$$\frac{dy}{dt} = G(x, y, z) = yg(x, y, z) \quad (3.32)$$

$$\frac{dz}{dt} = H(y, z) = zh(y) \quad (3.33)$$

onde definimos

$$f(x, y) \equiv 1 - x - \frac{5y}{1 + b_1x} \quad (3.34)$$

$$g(x, y, z) \equiv \frac{5x}{1 + b_1x} - \frac{0.1z}{1 + 2y} - 0.4 \quad (3.35)$$

$$h(y) \equiv \frac{0.1y}{1 + 2y} - 0.01 \quad (3.36)$$

Os pontos (x^*, y^*, z^*) devem satisfazer as seguintes condições:

- i. $x^* = 0$ ou $f(x^*, y^*) = 0$
- ii. $y^* = 0$ ou $g(x^*, y^*, z^*) = 0$
- iii. $z^* = 0$ ou $h(y^*, z^*) = 0$

Para satisfazer simultaneamente as três condições, temos as seguintes possibilidades:

1. Se pelo menos uma população for nula ($x^* = 0$ ou $y^* = 0$ ou $z^* = 0$), os pontos de equilíbrio são os seguintes
 - (a) $(x^*, y^*, z^*) = (0, 0, 0)$ que é o ponto de equilíbrio trivial.
 - (b) $(x^*, y^*, z^*) = (1, 0, 0)$ é o ponto onde se tem a extinção de Y e Z , e onde o nível populacional de X é igual a sua capacidade de suporte. Temos $x^* = 1$, pois estamos trabalhando com um sistema adimensional.
 - (c) $(x^*, y^*, z^*) = (0, 1/8, -5)$ sem significado biológico, uma vez que a população da espécie z seria negativa.
 - (d) $(x^*, y^*, z^*) = \left(\frac{0.4}{5 - 0.4b_1}, \frac{(1 + b_1x^*)(1 - x^*)}{5}, 0 \right)$ que varia de acordo com o valor de b_1 . Neste ponto temos a extinção do superpredador e há persistência da presa e do predador.
2. Se os pontos de equilíbrio envolvem persistência das três espécies, eles devem satisfazer simultaneamente

$$f(x^*, y^*) = 0 \quad (3.37)$$

3.2. MODELO PARA TRÊS ESPÉCIES INTERAGENTES: O MODELO DE HASTINGS-POWELL [15]

$$g(x^*, y^*, z^*) = 0 \quad (3.38)$$

$$h(y^*) = 0 \quad (3.39)$$

Da Equação (3.39), obtém-se

$$y^* = \frac{1}{8} \quad (3.40)$$

substituído esse valor na Equação (3.37) nos fornece a seguinte equação

$$8b_1(x^*)^2 - 8(b_1 - l)x^* - 3 = 0 \quad (3.41)$$

cujas soluções são:

$$x_{+,-}^* = \frac{8(b_1 - 1) \pm \sqrt{64(b_1 - 1)^2 + 96b_1}}{16b_1} \quad (3.42)$$

Como b_1 é um parâmetro positivo, a solução

$$x_-^* = \frac{8(b_1 - 1) - \sqrt{64(b_1 - 1)^2 + 96b_1}}{16b_1} \quad (3.43)$$

é sempre negativa e, portanto, não possui significado biológico. A solução

$$x_+^* = \frac{8(b_1 - 1) + \sqrt{64(b_1 - 1)^2 + 96b_1}}{16b_1} \quad (3.44)$$

é sempre positiva, e portanto, é ela que vamos utilizar para determinar o valor de z^* . Substituindo (3.40) e (3.44) na Equação 3.38, obtemos

$$z^* = \frac{125x_+^*}{2(1 + b_1x_+^*)} - 5. \quad (3.45)$$

Para os valores de b_1 considerados na tabela 3.1, z^* é sempre positivo, o que é possível verificar na Figura 3.3.

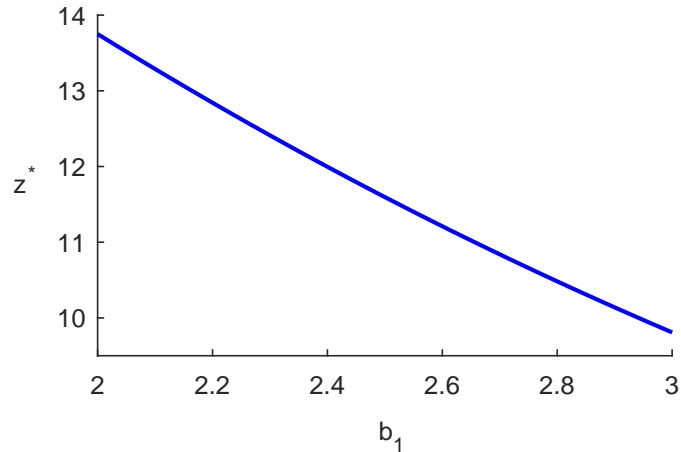


Figura 3.3: Valores de z^* variando o parâmetro b_1 no intervalo $[2,3]$.

Considerando-se todas as possibilidades para os pontos de equilíbrio, chega-se finalmente à conclusão de que existe um único ponto de equilíbrio com persistência das três espécies, que representamos anteriormente por (x^*, y^*, z^*) , onde

$$x^* = \frac{8(b_1 - 1) + \sqrt{64(b_1 - 1)^2 + 96b_1}}{16b_1} \quad (3.46)$$

$$y^* = \frac{1}{8} \quad (3.47)$$

$$z^* = \frac{125x^*}{2(1 + b_1x^*)} - 5 \quad (3.48)$$

A Figura 3.4 mostra a forma como o ponto de equilíbrio evolui à medida que o parâmetro b_1 varia no intervalo $[2,3]$. Observe na Figura 3.3 que para $b_1 = 2$ temos o valor máximo de z neste intervalo.

3.2. MODELO PARA TRÊS ESPÉCIES INTERAGENTES: O MODELO DE HASTINGS-POWELL [15]

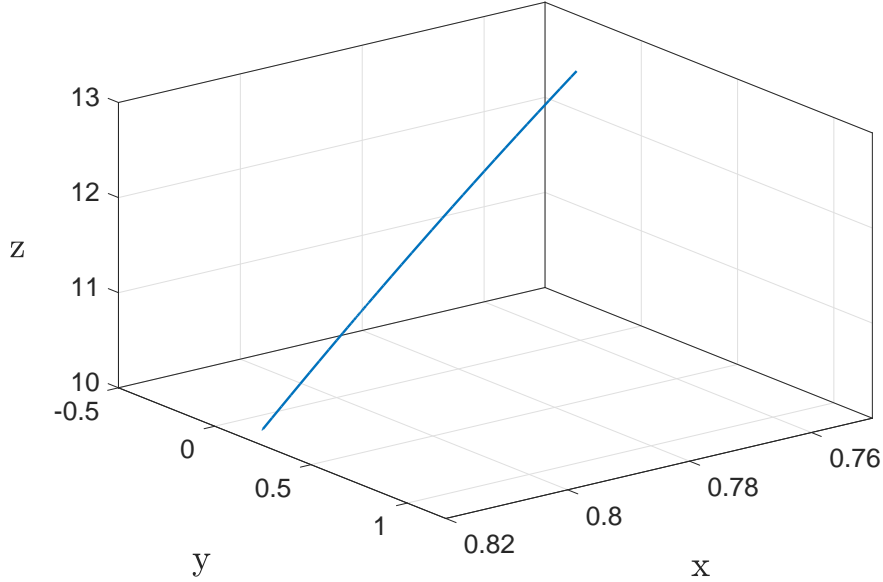


Figura 3.4: Equilíbrio do sistema com persistência das três espécies, variando o parâmetro b_1 no intervalo $[2,3]$.

3.2.2 Análise da estabilidade

A análise da estabilidade linear de um ponto de equilíbrio (x^*, y^*, z^*) de um sistema é realizada através da expansão em série de Taylor das equações não lineares em torno deste ponto.

$$x(t) = x^* + \eta_1(t) \quad y(t) = y^* + \eta_2(t) \quad z(t) = z^* + \eta_3(t)$$

onde $\eta_1(t)$, $\eta_2(t)$ e $\eta_3(t)$ são, em módulo, muito pequenos.

O sistema (3.31)-(3.33) pode ser escrito na forma

$$\begin{aligned} \frac{d\eta_1(t)}{dt} = & F(x^*, y^*) + \frac{\partial F(x, y)}{\partial x} \Big|_{(x^*, y^*)} \eta_1(t) + \frac{\partial F(x, y)}{\partial y} \Big|_{(x^*, y^*)} \eta_2(t) + \\ & + \frac{\partial F(x, y)}{\partial z} \Big|_{(x^*, y^*)} \eta_3(t) + O(\eta_i^2(t)) \end{aligned} \quad (3.49)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\eta_2(t)}{dt} = & G(x^*, y^*, z^*) + \frac{\partial G(x, y, z)}{\partial x} \Big|_{(x^*, y^*, z^*)} \eta_1(t) + \frac{\partial G(x, y, z)}{\partial y} \Big|_{(x^*, y^*, z^*)} \eta_2(t) + \\ & + \frac{\partial G(x, y, z)}{\partial z} \Big|_{(x^*, y^*, z^*)} \eta_3(t) + O(\eta_i^2(t)) \end{aligned} \quad (3.50)$$

$$\frac{d\eta_3(t)}{dt} = H(y^*, z^*) + \frac{\partial H(y)}{\partial x} \Big|_{(y^*, z^*)} \eta_1(t) + \frac{\partial H(y)}{\partial y} \Big|_{(y^*, z^*)} \eta_2(t) + \frac{\partial H(y)}{\partial z} \Big|_{(y^*, z^*)} \eta_3(t) + O(\eta_i^2(t)) \quad (3.51)$$

para $i = 1, 2, 3$.

Mantendo, em (3.49)-(3.51), somente os termos lineares em $\eta_i(t)$, e lembrando que $f(x^*, y^*)=0$, $g(x^*, y^*, z^*)=0$ e $h(y^*)=0$, obtemos:

$$\begin{bmatrix} \frac{d\eta_1(t)}{dt} \\ \frac{d\eta_2(t)}{dt} \\ \frac{d\eta_3(t)}{dt} \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} J_{11} & J_{12} & J_{13} \\ J_{21} & J_{22} & J_{23} \\ J_{31} & J_{32} & J_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \eta_1(t) \\ \eta_2(t) \\ \eta_3(t) \end{bmatrix} \quad (3.52)$$

onde os elementos J_{ij} são dados por:

$$\begin{aligned} J_{11} &= \frac{\partial F}{\partial x} \Big|_{(x^*, y^*)} = 1 - 2x^* - \frac{5y^*}{(1 + b_1x^*)^2} \\ J_{12} &= \frac{\partial F}{\partial y} \Big|_{(x^*, y^*)} = -\frac{5x^*}{1 + b_1x^*} \\ J_{13} &= \frac{\partial F}{\partial z} \Big|_{(x^*, y^*)} = 0 \\ J_{21} &= \frac{\partial G}{\partial x} \Big|_{(x^*, y^*, z^*)} = \frac{5y^*}{(1 + b_1x^*)^2} \\ J_{22} &= \frac{\partial G}{\partial y} \Big|_{(x^*, y^*, z^*)} = \frac{5x^*}{1 + b_1x^*} - \frac{0.1z^*}{(1 + 2y^*)^2} - 0.4 \\ J_{23} &= \frac{\partial G}{\partial z} \Big|_{(x^*, y^*, z^*)} = -\frac{0.1y^*}{1 + 2y^*} \\ J_{31} &= \frac{\partial H}{\partial x} \Big|_{(y^*, z^*)} = 0 \\ J_{32} &= \frac{\partial H}{\partial y} \Big|_{(y^*, z^*)} = \frac{0.1z^*}{(1 + 2y^*)^2} \\ J_{33} &= \frac{\partial H}{\partial z} \Big|_{(y^*, z^*)} = \frac{0.1y^*}{1 + 2y^*} - 0.01 \end{aligned} \quad (3.53)$$

3.2. MODELO PARA TRÊS ESPÉCIES INTERAGENTES: O MODELO DE HASTINGS-POWELL [15]

Após determinar a matriz Jacobiana, calculam-se os autovalores λ , que são as raízes do polinômio característico $P(\lambda)$, isto é:

$$P(\lambda) = \det(\mathbf{J} - \lambda\mathbf{I}) = 0. \quad (3.54)$$

onde \mathbf{I} é a matriz identidade de ordem 3. Ou seja:

$$\begin{bmatrix} J_{11} - \lambda & J_{12} & J_{13} \\ J_{21} & J_{22} - \lambda & J_{23} \\ J_{31} & J_{32} & J_{33} - \lambda \end{bmatrix} = 0 \quad (3.55)$$

de onde obtemos a seguinte equação algébrica de 3º grau:

$$\lambda^3 - (J_{11} + J_{22})\lambda^2 - (J_{12}J_{21} + J_{32}J_{23} - J_{11}J_{22})\lambda + J_{32}J_{23}J_{11} = 0$$

Para definir a estabilidade local assintótica do ponto (3.46)-(3.47)-(3.48), o único ponto de equilíbrio com persistência das três espécies, são os seguintes: Dado o polinômio

$$Q(\lambda) = \lambda^3 + a_1\lambda^2 + a_2\lambda + a_3 \quad (3.56)$$

o ponto de equilíbrio (x^*, y^*, z^*) é linearmente estável se

$$a_1 > 0 \quad a_3 > 0 \quad a_1a_2 - a_3 > 0 \quad (3.57)$$

Para o sistema de Hastings-Powell, temos:

$$\begin{aligned} a_1 &= -(J_{11} + J_{22}) \\ a_2 &= -(J_{12}J_{21} + J_{32}J_{23} - J_{11} + J_{22}) \\ a_3 &= J_{32}J_{23}J_{11} \end{aligned} \quad (3.58)$$

usando as expressões dadas em (3.54) para os elementos J_{ij} , e as condições dadas em (3.57) temos que:

$$\begin{aligned} x^* \left(B_1 + \frac{1}{1 + b_1x^*} \right) &< \frac{8}{10} \\ \left(\frac{32}{10000} - \frac{4x^*}{1 + b_1x^*} \right) B_1x^* &> 0 \\ B_2 \left(\frac{8}{100} - \frac{x^*}{1 + b_1x^*} \right) &> B_1x^* \left(\frac{10032}{10000} - \frac{4x^*}{1 + b_1x^*} \right) \end{aligned} \quad (3.59)$$

Portanto

$$\begin{aligned}
 B_1 &= \left(\frac{5b_1}{8(b_1x^* + 1)^2} - 1 \right) \\
 B_2 &= \frac{25x^*y^*}{(1 + b_1x^*)^3} + \frac{0.01y^*z^*}{(1 + 2y^*)} + \\
 &+ \left(1 - 2x^* - \frac{5y^*}{1 + b_1x^*} \right) \left(\frac{5x^*}{1 + b_1x^*} - \frac{0.1z^*}{1 + 2y^*} - 0.4 \right)
 \end{aligned} \tag{3.60}$$

Para testar as condições de estabilidade linear (3.59)-(3.60), para alguns pontos de equilíbrio onde consideramos o parâmetro (b_1) no intervalo $[2,3]$, observou-se que o ponto de equilíbrio (x^*, y^*, z^*) perdeu estabilidade quando o parâmetro b_1 atingiu o valor 2,113 com precisão de três casas decimais, uma vez que para $b_1 = 2,114$ o ponto de equilíbrio (x^*, y^*, z^*) é instável, já para $b_1 = 2,113$ o ponto de equilíbrio $(x^*, y^*, z^*) = (0.76, 0.125, 13.23)$ é um ponto de bifurcação. Os critérios (3.59)-(3.60), nos dão informação apenas sobre o comportamento local do sistema, mais especificamente sobre a estabilidade linear ou não de um ponto de equilíbrio (x^*, y^*, z^*) .

3.2.3 Atratores e Diagramas de Bifurcação

A escolha para investigação do comportamento da dinâmica global do sistema em questão é a integração numérica, pois ele não possui solução analítica fechada.

Foi utilizado o software MatCont, que é uma caixa de ferramenta disponível para MATLAB, e foi possível observarmos que, dependendo do valor de b_1 , o sistema exibiu comportamento do tipo ciclo limite ao caos.

A Figura 3.5 representa no espaço de fase um ciclo limite de período 1 correspondendo a $b_1 = 2,2$, e a Figura 3.6 representa a curva $x \times$ tempo para $b_1 = 2,2$.

Para um ciclo limite de período 1 é natural a existência de apenas um valor máximo e um valor mínimo para as espécies x, y, z e é o que podemos verificar, para a espécie x , na Figura 3.6. Os gráficos de $y \times$ tempo e $z \times$ tempo apresentam o mesmo comportamento observado na Figura 3.6.

3.2. MODELO PARA TRÊS ESPÉCIES INTERAGENTES: O MODELO DE HASTINGS-POWELL [15]

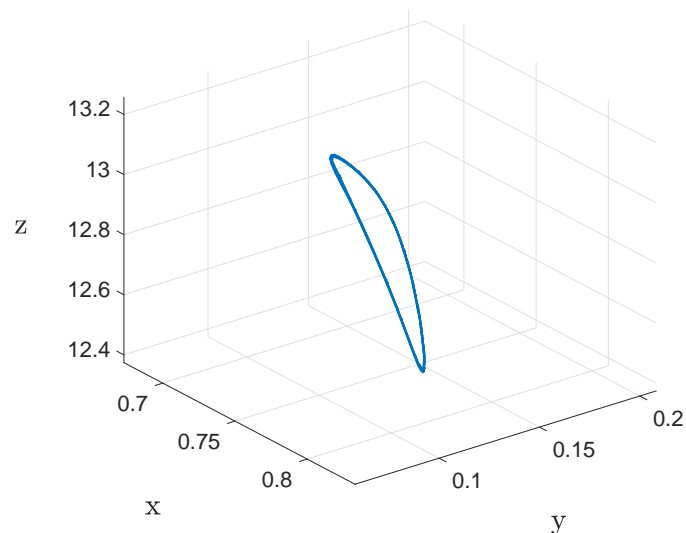


Figura 3.5: Ciclo limite de período 1 correspondendo ao parâmetro $b_1 = 2,2$.

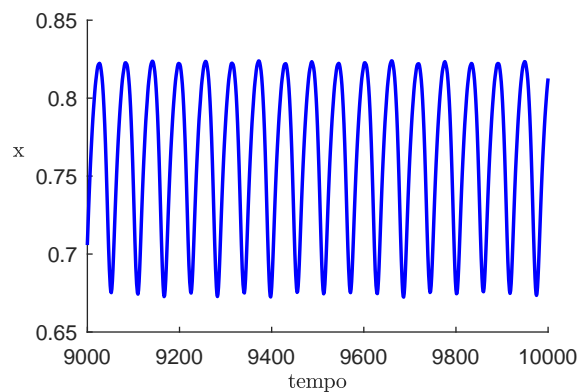


Figura 3.6: Espécie X ao passar do tempo com parâmetro $b_1 = 2,2$.

Já a Figura 3.7 representa no espaço de fase um ciclo limite de período 2 correspondendo a $b_1 = 2,32$, e a Figura 3.8 representa a curva $x \times$ tempo para $b_1 = 2,32$.

Para um ciclo limite de período 2 é natural a existência de dois valores máximos e dois valores mínimos para as espécies x , y , z e é o que podemos

verificar, para a espécie x , na Figura 3.8. Os gráficos de $y \times$ tempo e $z \times$ tempo apresentam o mesmo comportamento observado na Figura 3.8.

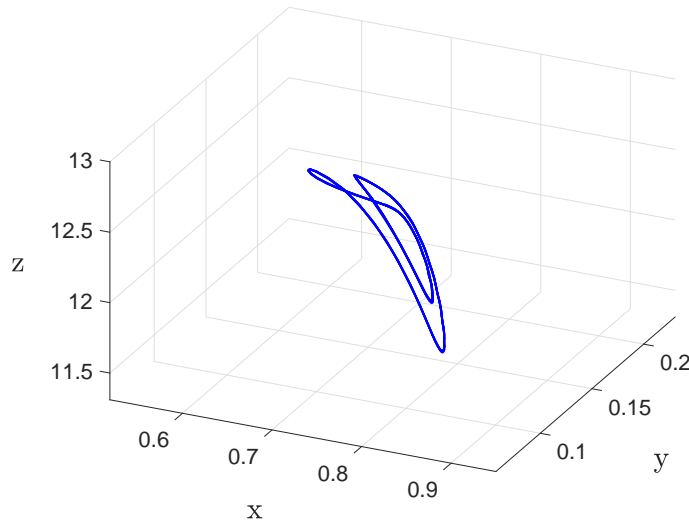


Figura 3.7: Ciclo limite de período 2 correspondendo ao parâmetro $b_1 = 2,32$.

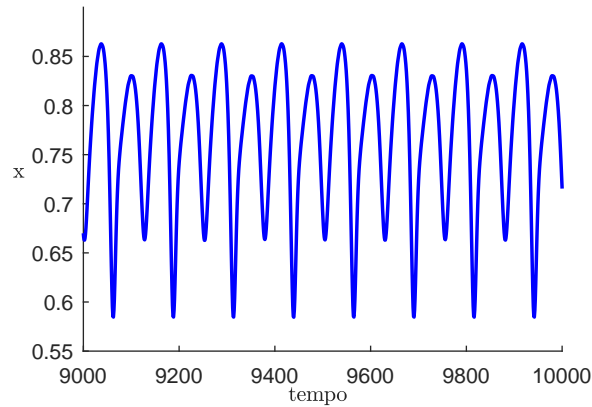


Figura 3.8: Espécie X ao passar do tempo com parâmetro $b_1 = 2,32$.

Na Figura 3.9 temos a representação no espaço de fase um ciclo limite de período 4 correspondendo a $b_1 = 2,39$, e a Figura 3.10 representa a curva $x \times t$ para $b_1 = 2,39$.

3.2. MODELO PARA TRÊS ESPÉCIES INTERAGENTES: O MODELO DE HASTINGS-POWELL [15]

Para um ciclo limite de período 4 é natural a existência de quatro valores máximos e quatro valores mínimos para as espécies x , y , z e é o que podemos verificar, para a espécie x , na Figura 3.10. Os gráficos de $y \times$ tempo e $z \times$ tempo apresentam o mesmo comportamento observado na Figura 3.10.

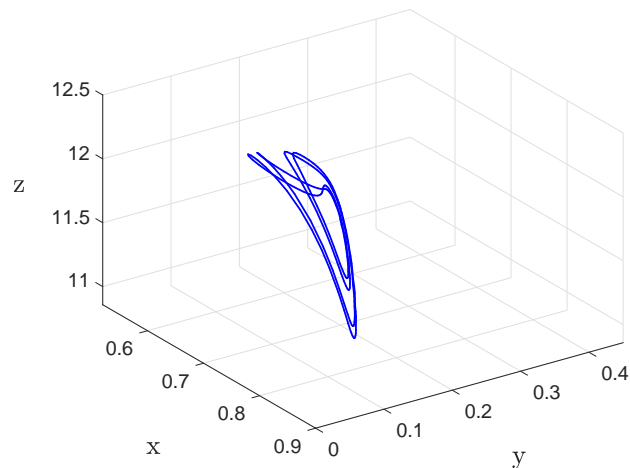


Figura 3.9: Ciclo limite de período 4 correspondendo ao parâmetro $b_1 = 2,39$.

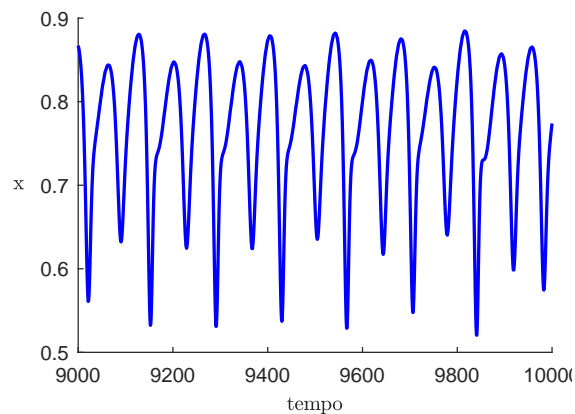


Figura 3.10: Espécie X ao passar do tempo com parâmetro $b_1 = 2,39$.

A Figura 3.11 mostra comportamento irregular, sugestivo de caos, no espaço de fase correspondendo a $b_1 = 2,75$, e a Figura 3.12 representa na curva

$x \times \text{tempo}$ para $b_1 = 2,75$ onde é possível observar que os valores dos máximos primários e máximos secundários variam de forma irregular.

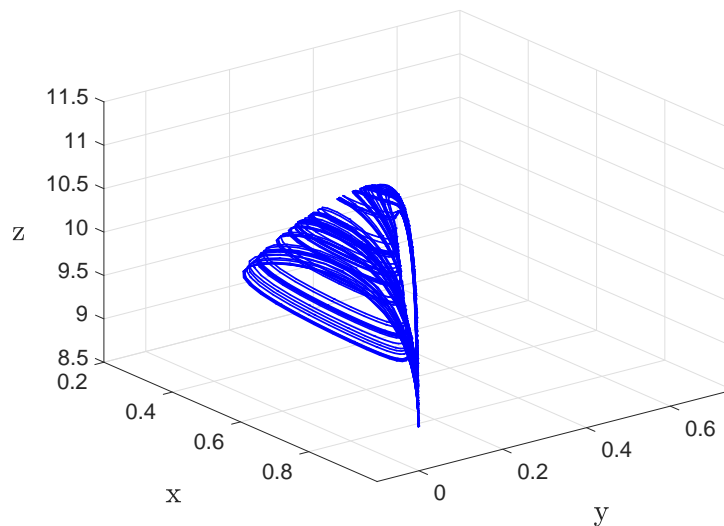


Figura 3.11: Um atrator caracterizado por comportamento caótico correspondendo ao parâmetro $b_1 = 2,75$.

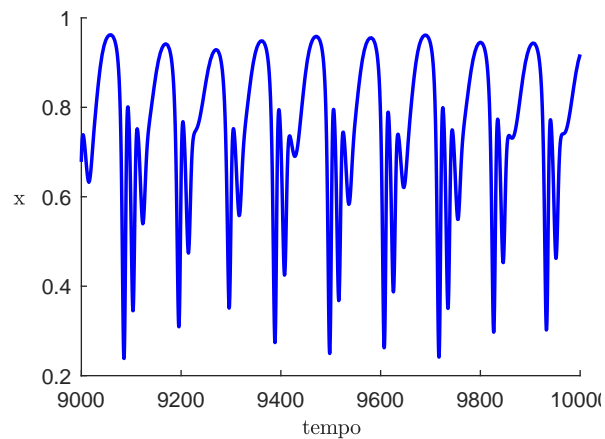


Figura 3.12: Espécie X ao passar do tempo, para o atrator que corresponde a $b_1 = 2,75$.

Nas Figuras 3.5, 3.7, 3.9 e 3.11 observa-se que à medida que variamos o valor

3.2. MODELO PARA TRÊS ESPÉCIES INTERAGENTES: O MODELO DE HASTINGS-POWELL [15]

de b_1 o sistema passa a apresentar comportamento do tipo ciclo limite e esses ciclos vão duplicando o período até que na Figura 3.11 temos comportamento caótico. Essa sequência de duplicação de período é uma das típicas rotas para o caos.

Na seção a seguir, falaremos de um sistemas de equações diferenciais que representam um fermentador de etanol utilizando a bactéria *Zymomonas mobilis*, modelo este proposto por Jobses [16].

Capítulo 4

Síntese de etanol

Os biocombustíveis, principalmente o biodiesel e o etanol, são importantes fontes de energia a serem utilizadas para substituir os combustíveis fósseis. O etanol é o biocombustível mais utilizado mundialmente [17]. O Brasil é uma referência mundial na produção de etanol, sendo um dos produtores mais competitivos nesse segmento, com enorme potencial de crescimento, pois possui uma vasta extensão territorial, clima e relevo favoráveis para sua produção [18].

Como exemplo vamos analisar um sistema de equações que representam um fermentador de etanol, onde é possível detectar multiplicidade de estados estacionários e bifurcações. Neste sistema, o etanol (P) é produzido na fermentação de um substrato à base de açúcar (S) pelo microrganismo *Zygomonas mobilis* (X). A dinâmica deste sistema foi estudada em detalhe em [19, 20], que passaram a demonstrar a nova dinâmica do sistema quando uma membrana seletiva foi incluída no processo para separar o etanol, pois este age como um inibidor do microrganismo (*Z. mobilis*). A incorporação da membrana mostrou estabilizar a regime de operação permitindo a obtenção de maiores rendimentos. Experimentalmente eles também verificaram o modelo e as previsões da teoria da bifurcação [21].

O modelo do sistema, sem a membrana seletiva, consiste em 4 equações diferenciais ordinárias não-lineares. O modelo foi desenvolvido por Jobses e colaboradores, que também verificaram o mesmo experimentalmente [16, 22, 23].

4.1 Descrição do modelo de Jobses [16]

Um dos modelos mais utilizados para representar os processos de fermentação é o modelo de manutenção onde o consumo de substrato é expresso na forma:

$$r_S = \left(\frac{1}{Y_{SX}} \right) r_X + m_S C_X \quad (4.1)$$

onde C_X é a concentração de microrganismos, Y_{SX} é o fator de rendimento da conversão de substrato em biomassa, m_S é um fator de manutenção. O primeiro termo do lado direito da equação 4.1 considera a taxa de crescimento, e o segundo termo a conservação microbiana.

A taxa de crescimento da biomassa é dada por

$$r_X = \mu C_X \quad (4.2)$$

Sendo μ a taxa de crescimento específico dada pela equação de Monod 4.3, onde K_S é a constante de Monod, μ_{max} é a taxa específica de crescimento máxima e C_S a concentração de substrato.

$$\mu = \mu_{max} \left(\frac{C_S}{K_S + C_S} \right) \quad (4.3)$$

Jobses sugere a introdução de um componente chave (e) que torna a inibição por produto um efeito de influência indireta da fermentação, considerando alterações na taxa de crescimento específica máxima μ_{max} devido a presença de etanol. A equação 4.4 representa a taxa de formação de (e), que leva em consideração a concentração de substrato C_S , de produto C_P , e do próprio componente chave C_e .

$$r_e = f(C_S)f(C_P)C_e \quad (4.4)$$

A função $f(C_S)$ é dada pela relação de Monod 4.3 e $f(C_P)$ é um polinômio de grau dois, proveniente de dados experimentais [16, 22, 23], onde os termos K_1 , K_2 e K_3 são constantes empíricas. Afetando de forma indireta a fermentação pela inibição por produto.

$$f(C_P) = K_1 - K_2 C_P + K_3 (C_P)^2 \quad (4.5)$$

O componente (e) pode ser expresso pela Equação 4.6, através de uma fração de biomassa x :

$$Y_e = \frac{C_e}{C_X} \quad (4.6)$$

Portanto, o modelo proposto por Jobses e colaboradores, pode ser representado através de quatro equações diferenciais ordinárias não-lineares, sendo (S) o substrato, (X) a biomassa, (P) o produto, (e) o componente chave e (D) como sendo a diluição.

$$\frac{dC_S}{dt} = \left(-\frac{1}{Y_{SX}} \right) \left(\frac{C_S C_e}{K_S + C_S} \right) - m_S C_X + DC_{S0} - DC_S \quad (4.7)$$

$$\frac{dC_X}{dt} = \left(\frac{C_S C_e}{K_S + C_S} \right) + DC_{X0} - DC_X \quad (4.8)$$

$$\frac{dC_e}{dt} = (k_1 - k_2 C_P + k_3 (C_P)^2) \left(\frac{C_S C_e}{K_S + C_S} \right) + DC_{e0} - DC_e \quad (4.9)$$

$$\frac{dC_P}{dt} = \left(\frac{1}{Y_{PX}} \right) \left(\frac{C_S C_e}{K_S + C_S} \right) + m_P C_X + DC_{P0} - DC_P \quad (4.10)$$

Os valores dos parâmetros utilizados no modelo de Jobses seguem na Tabela 4.1:

<i>Parâmetro</i>	<i>Valor</i>	<i>Unidade</i>
K_1	16.0	h^{-1}
K_2	0.497	$m^3/kg h$
K_3	0.00383	$m^6/kg^2 h$
m_S	2.16	$kg/kg h$
m_P	1.10	$kg/kg h$
Y_{SX}	0.0244498	kg/kg
Y_{PX}	0.0526315	kg/kg
K_S	0.5	kg/m^3
C_{X0}	0	kg/m^3
C_{P0}	0	kg/m^3
C_{e0}	0	kg/m^3

Tabela 4.1: Parâmetros utilizados na simulação do modelo de Jobses.

4.2 Estados Estacionários e Diagramas de Bifurcação

A análise da dinâmica do sistema foi realizada através do software MATLAB pacote MATCONT e foi tomado como parâmetro de bifurcação a taxa de diluição (D), uma vez que é facilmente manipulada durante o projeto e a fabricação. Um estudo detalhado envolvendo vários diagramas de bifurcação foi apresentado por [19].

4.2.1 Estados Estacionários

Primeiramente é possível mostrar que para diferentes condições iniciais o sistema pode apresentar multiplicidade de estados estacionários, o que é possível detectar na Figura 4.1. Para alterar o ponto de convergência, as condições iniciais manipuladas foram a concentração de etanol dentro do reator juntamente com a taxa de diluição.

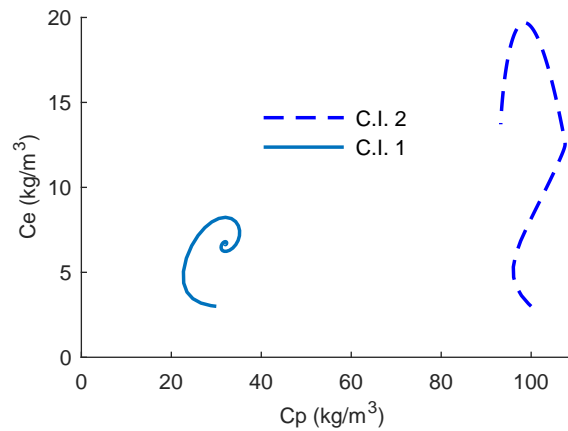


Figura 4.1: Diagrama de fase com dois estados estacionários.

A biestabilidade gera uma discussão referente ao planejamento do processo, podendo conduzir o mesmo a regiões operacionais muito distintas. Em [6] é validada experimentalmente a existência da multiplicidade através de dois experimentos contínuos, iniciados em batelada, simulando diferentes condições iniciais. A Figura 4.2 mostra os resultados desses testes para $C_{S_0} = 200 \text{kg/m}^3$ e $D = 0,25 \text{h}^{-1}$.

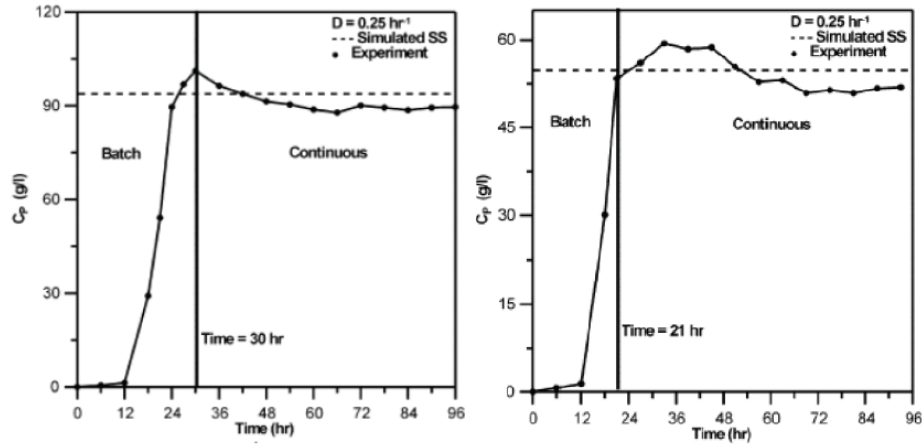


Figura 4.2: Resultados experimentais da fermentação alcoólica através da *Zymomonas mobilis*. Retirado de [6]

As Figuras 4.3, 4.4, 4.5 e 4.6 mostram os resultados de duas simulações da dinâmica do modelo de Jobses. Os valores das condições iniciais foram: C.I. 1 = $\{ C_S = 35\text{kg}/\text{m}^3, C_e = 3\text{kg}/\text{m}^3, C_X = 0,1\text{kg}/\text{m}^3, C_P = 100\text{kg}/\text{m}^3 \text{ e } D = 4\text{h}^{-1} \}$. Para C.I. 2 os estados iniciais são os mesmos, exceto o valor da concentração de etanol, que assume o valor de $100\text{kg}/\text{m}^3$, e o valor da diluição, que assume o valor de 1h^{-1} . A concentração de substrato na alimentação foi de $200\text{kg}/\text{m}^3$ em ambas condições iniciais.

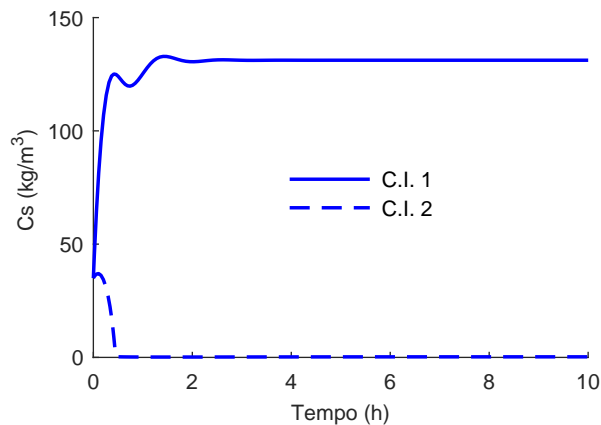


Figura 4.3: Concentração de substrato (glicose) ao passar do tempo para C.I. 1 e 2.

4.2. ESTADOS ESTACIONÁRIOS E DIAGRAMAS DE BIFURCAÇÃO

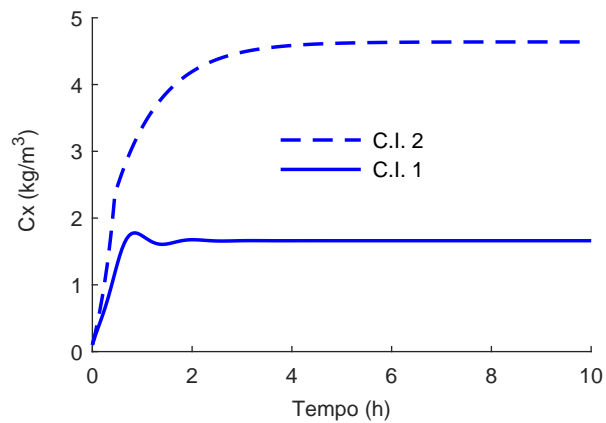


Figura 4.4: Concentração de biomassa (*Z. mobilis*) ao passar do tempo para C.I. 1 e 2.

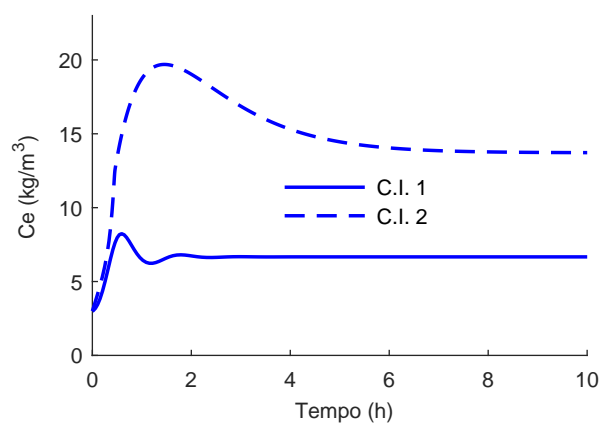


Figura 4.5: Concentração do componente chave (*e*) ao passar do tempo para C.I. 1 e 2.

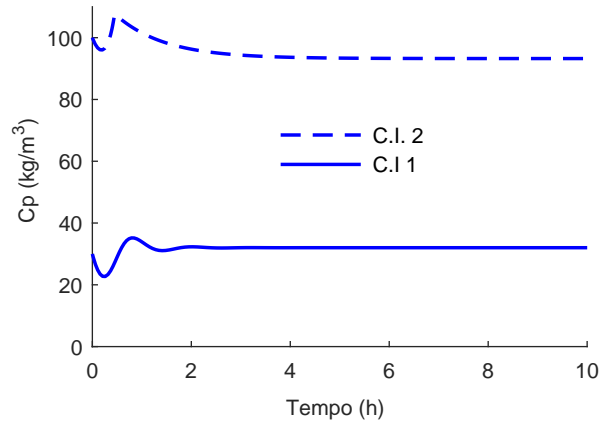


Figura 4.6: Concentração de produto (etanol) ao passar do tempo para C.I. 1 e 2

4.2.2 Diagramas de Bifurcação

As Figuras 4.7, 4.8, 4.9 e 4.10 mostram os diagramas de bifurcação quando o parâmetro de bifurcação D foi varrido, enquanto C_{S_0} foi mantido em $200\text{kg}/\text{m}^3$. Os pontos de bifurcação representados pelos pontos 1,2,3 e 4 estão listados na Tabela 4.2. O diagrama revela algumas características do fermentador como, por exemplo, a multiplicidade de estados estacionários e existência de bifurcação Hopf. A solução trivial, quando não há reações no sistema, isto é, quando o reator é limpo, não está representada nos diagramas de bifurcação. Nesta situação a taxa de conversão de substrato em produto é zero, o que resulta em $C_P = 0\text{kg}/\text{m}^3$ e $C_S = C_{S_0}$.

4.2. ESTADOS ESTACIONÁRIOS E DIAGRAMAS DE BIFURCAÇÃO

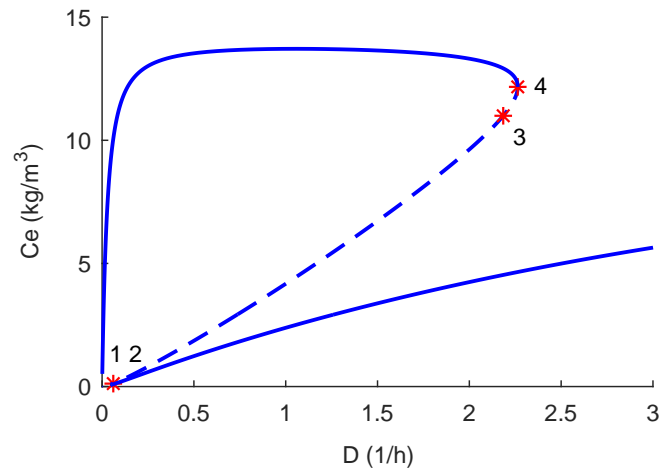


Figura 4.7: Diagrama de bifurcação da concentração do componente chave (e) em relação a taxa de diluição.

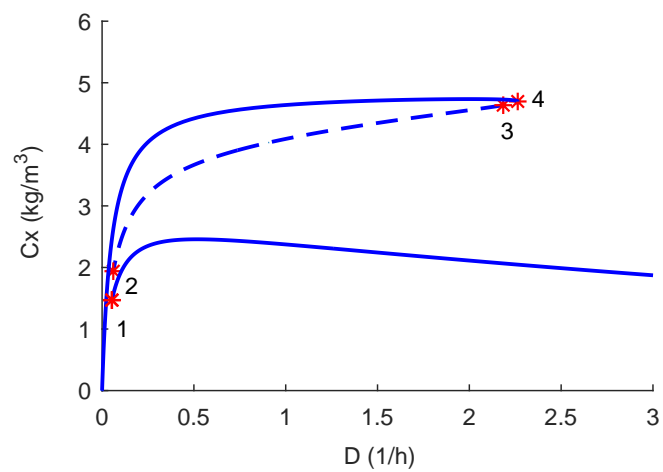


Figura 4.8: Diagrama de bifurcação da concentração de biomassa (*Z. mobilis*) em relação a taxa de diluição.

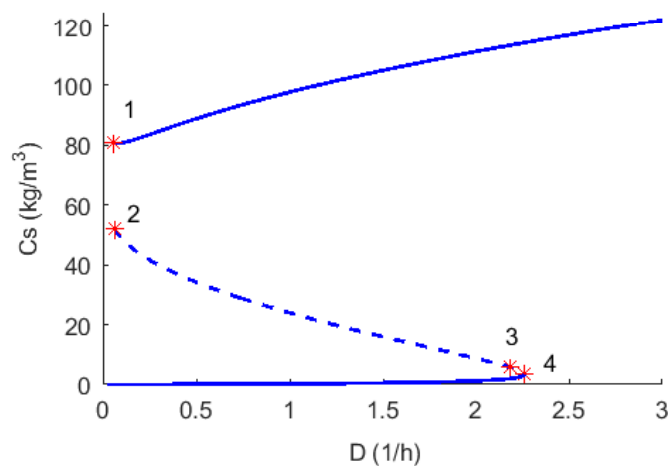


Figura 4.9: Diagrama de bifurcação da concentração de substrato (glicose) em relação a taxa de diluição.

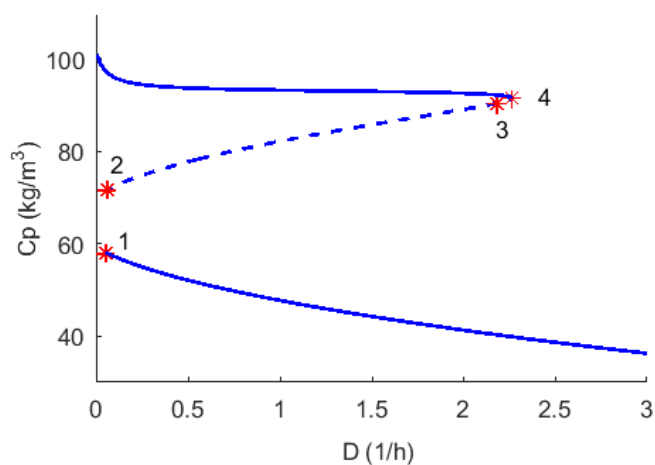


Figura 4.10: Diagrama de bifurcação da concentração de produto (etanol) em relação a taxa de diluição.

Taxas de diluição menores do que $2,26 \text{ h}^{-1}$ recaem em uma região onde existe multiestabilidade, e quando a taxa de diluição é maior do que $2,26 \text{ h}^{-1}$ existem apenas um conjunto de soluções para o sistema, ou seja, a multiplicidade de equilíbrios desaparece. Este único ramo de soluções é estável e mostra

4.2. ESTADOS ESTACIONÁRIOS E DIAGRAMAS DE BIFURCAÇÃO

a tendência da fermentação em produzir menos etanol quanto maior for a diluição, como pode ser visto na Figura 4.10.

A Tabela 4.2 mostra as coordenadas de cada singularidade:

Ponto	Bifurcação	$D(h^{-1})$	$C_s(kg/m^3)$	$C_e(kg/m^3)$	$C_x(kg/m^3)$	$C_P(kg/m^3)$
1	Hopf	0,05	80,67	0,08	1,47	58,08
2	Hopf virtual	0,06	51,99	0,12	1,94	71,83
3	Hopf virtual	2,19	5,75	11,03	4,64	90,44
4	Sela	2,26	3,45	12,17	4,70	91,51

Tabela 4.2: Pontos de bifurcação.

Abaixo de D_{Hopf} existe um ramo estável de alta conversão, bem como um ramo de soluções periódicas instáveis. Em [20] os autores afirmam que a operação nas regiões oscilatórias são mais atrativas, por produzirem mais álcool, do que a operação no ponto estacionário equivalente. Contudo, nesta faixa operacional, a conversão de substrato em produto é maior na região estável superior (Figura 4.10). Mesmo assim a taxa de produção de etanol, nesta ordem de D , é muito baixa para ambos os ramos operacionais. O ponto de bifurcação 4 representa uma mudança qualitativa do comportamento do sistema acompanhada de uma inversão da estabilidade, ou seja, os equilíbrios tornam-se instáveis ao passar pelo ponto 4. Isso caracteriza uma bifurcação sela (saddle point). No próximo capítulo é realizado uma discussão sobre a coexistência de microrganismos em biorreatores.

Capítulo 5

Competição de microrganismos em biorreatores

A competição entre microrganismos é frequentemente estudada através da utilização de biorreatores, que tem como objetivo simular ecossistemas naturais em laboratórios sob condições controladas sendo assim possível analisar os vários tipos de interações existentes entre espécies microbianas que habitam um mesmo ambiente. Essas interações podem ser diretas ou indiretas, dependendo do contato das diferentes espécies analisadas. Dentre as competições indiretas, a competição por nutrientes e/ou outros recursos é a mais comum e a mais importante interação estudada, estando presente em quase todos os sistemas de populações microbianas mistas [24].

A competição entre duas espécies microbianas acontece quando há pelo menos um recurso consumido por ambas as populações, e afetando a taxa de crescimento de pelo menos uma delas. Tal definição pode ser expressa através de uma abordagem teórica de conjuntos. Definindo S_1 como sendo o conjunto de todos os recursos consumidos pela população 1, S_2 o conjunto de todos os recursos consumidos pela população 2, S'_1 o conjunto de todos os recursos consumidos pela população 1 e que afetam sua taxa de crescimento, S'_2 o conjunto de todos os recursos consumidos pela população 2 e que afetam sua taxa de crescimento. Aparentemente $S'_1 \subseteq S_1$ e $S'_2 \subseteq S_2$, e tem-se competição quando $S'_1 \cap S_2 \neq \emptyset$ ou $S_1 \cap S'_2 \neq \emptyset$ [24].

Dependendo dos elementos dos conjuntos citados acima, podem existir vários tipos de competições, uma forma de classificação é baseada no número de recursos disponíveis para a competição. Ela é chamada de simples, dupla, tripla, etc. se as populações competirem por um, dois, três, etc. recursos. É

dita competição total quando as populações competem por todos os recursos que afetam a taxa de crescimento de pelo menos uma das populações, e parcial, caso contrário. Em especial e de grande interesse é a competição total e que também é única, é aquela que apresenta apenas um recurso e este afeta a taxa de crescimento das duas populações e são consumidos por ambas, este tipo de competição é chamado de simples. Quando não existir outras interações além da competição, esta é chamada de pura. A interação competitiva mais simples é a competição pura e simples [24].

Existe um número considerável de trabalhos teóricos e experimentais sobre competições pura e simples, bem como, competições por mais de um recurso. Este capítulo tem como objetivo apresentar e discutir, primeiramente, o caso puro e simples, num ambiente homogêneo e invariante com o tempo, e possíveis extensões do sistema, como exemplo, os efeitos das condições periodicamente variáveis, do ambiente espacialmente heterogêneo, e a competição por dois ou mais recursos. Por questões de simplicidade, estudaremos nesse trabalho situações onde estão sendo levadas em consideração a competição por produtos químicos e não a competição por recursos bióticos, pois seria muito complicado estabelecer relações de crescimento dos recursos consumidos. Não são levadas em consideração as competições não puras, ou seja, aquelas que apresentam outros tipos de interações envolvidas, embora existam vários estudos sobre tais sistemas.

Primeiramente na Seção 5.1, a competição pura e simples será examinada em um ambiente homogêneo e invariante com o tempo, tal ambiente pode ser simulado em laboratório através da utilização de um quimiostato ideal, com condições operacionais constantes. Quimiostato são biorreatores de operação contínua, no qual as espécies microbianas crescem com alimentação de fluxo constante, existindo a presença de dispositivos de controle de temperatura, pH, etc. garantindo que a operação seja invariante com o tempo.

5.1 Competição Pura e Simples

Um modelo de competição pura e simples em um quimiostato pode ser representado através das seguintes equações para as concentrações das duas populações e do substrato limitante [25]:

$$\frac{dc_1}{dt} = -Dc_1 + \mu_1(s)c_1 \quad (5.1)$$

$$\frac{dc_2}{dt'} = -Dc_2 + \mu_2(s)c_2 \quad (5.2)$$

$$\frac{ds}{dt'} = D(s_f - s) - \frac{1}{Y_1}\mu_1(s)c_1 - \frac{1}{Y_2}\mu_2(s)c_2 \quad (5.3)$$

onde c_1 e c_2 são as concentrações de biomassa das populações 1 e 2, respectivamente, s a concentração do nutriente limitante, D a taxa de diluição no quimiostato, s_f a concentração limitante do nutriente na alimentação, Y_1 e Y_2 são os coeficientes de rendimento das duas populações (biomassa produzida por massa de substrato consumido), e μ_1 e μ_2 as taxas de crescimento específicas das duas populações, e são funções da taxa de concentração do substrato limitante. Se o modelo de inibição de substrato de Andrews [26] for empregado para descrever o crescimento das duas populações, a dependência das taxas de crescimento específicas na concentração de substrato tem a seguinte forma:

$$\mu_j(s) = \frac{\mu_{mj}s}{K_{Sj} + s + s^2/K_{Ij}} \quad (j = 1, 2) \quad (5.4)$$

onde K_{Sj} são as constantes de Michaelis e K_{Ij} são as constantes de inibição. O modelo de Andrews reduz ao modelo de Monod [27] para K_{Ij} tendendo ao infinito (sem inibição).

Adimensionalizando o sistema temos:

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{c_1}{Y_1 K_{S1}} & x_2 &= \frac{c_2}{Y_2 K_{S1}} & z &= \frac{s}{K_{S1}} & z_f &= \frac{s_f}{K_{S1}} \\ t &= t' \mu_{m1} & u &= \frac{D}{\mu_{m1}} & \alpha &= \frac{\mu_{m2}}{\mu_{m1}} & \beta &= \frac{K_{S2}}{K_{S1}} \\ & & \gamma_1 &= \frac{K_{S1}}{K_{I1}} & \gamma_2 &= \frac{K_{S1}}{K_{I2}} \end{aligned}$$

o sistema de equações 5.1, 5.2 e 5.3 pode ser escrito em forma adimensional da seguinte forma:

$$\frac{dx_1}{dt} = -ux_1 + f_1(z)x_1 \quad (5.5)$$

$$\frac{dx_2}{dt} = -ux_2 + f_2(z)x_2 \quad (5.6)$$

$$\frac{dz}{dt} = u(z_f - z) - f_1(z)x_1 - f_2(z)x_2 \quad (5.7)$$

onde

$$f_1(z) = z/(1 + z + \gamma_1 z^2) \quad (5.8)$$

e

$$f_2(z) = \alpha z/(\beta + z + \gamma_2 z^2) \quad (5.9)$$

são as taxas de crescimento específicas adimensionais.

Como foi observado por Aris e Humphrey [28], o sistema de equações 5.5, 5.6 e 5.7 pode reduzir a um sistema de duas equações diferenciais pelo uso da equação algébrica:

$$x_1 + x_2 + z = z_f \quad (5.10)$$

eliminando assim, uma das variáveis de estado:

$$\frac{dx_1}{dt} = -ux_1 + f_1(z_f - x_1 - x_2)x_1 \quad (5.11)$$

$$\frac{dx_2}{dt} = -ux_2 + f_2(z_f - x_1 - x_2)x_2 \quad (5.12)$$

Foi mostrado em [29] que os dois sistemas de equações diferenciais 5.5, 5.6, 5.7 e 5.11, 5.12 são assintoticamente dinamicamente equivalentes. Toda a solução das trajetórias do sistema 5.5, 5.6, 5.7 se aproximam exponencialmente ou estão no plano do espaço (x_1, x_2, z) descrito pela Equação 5.10. Os conjuntos invariantes de sistemas 5.5, 5.6, 5.7 e 5.11, 5.12 são os mesmos, e as características de estabilidade são preservadas.

5.1.1 Análise da estabilidade

Uma análise do comportamento dinâmico do sistema de equação 5.11, 5.12 foi realizado por Aris e Humphrey [28], que apresentou todos os possíveis retratos de fase qualitativamente diferentes do sistema.

O sistema de equações 5.11, 5.12 tem quatro classes de estados estacionários:

1. Extinção de ambas as populações: (Limpeza do biorreator)

$$x_1 = 0, x_2 = 0, s = s_F.$$

2. Crescimento apenas da população 1:

$$x_1 > 0, x_2 = 0, s_F > s > 0.$$

3. Crescimento apenas da população 2:

$$x_1 = 0, x_2 > 0, s_F > s > 0.$$

4. Coexistência das duas populações:

$$x_1 > 0, x_2 > 0, s_F > s > 0.$$

O estado estacionário de coexistência só é possível se as curvas descritas por $f_1(z)$ e $f_2(z)$ se cruzarem, onde são obtidos os valores discretos para a taxa de diluição u . Estes valores são dados pela seguinte equação:

$$u_c = f_1(z_c) = f_2(z_c) \quad (5.13)$$

onde z_c é uma raiz da equação $f_1(z) = f_2(z)$, ou seja, um valor de z correspondente a um ponto de intersecção das duas curvas. A partir das equações 5.8 e 5.9, é possível observar que podem existir até dois pontos de intersecção para $z > 0$. Fato este ilustrado nas Figuras 5.1, 5.2, 5.3, 5.4, 5.5, 5.6 e 5.7, onde vários possíveis tipos de intersecções das duas curvas específicas de taxa de crescimento são mostradas. Os valores dos parâmetros α , β , γ_1 e γ_2 para estas figuras estão listados na Tabela 5.1.

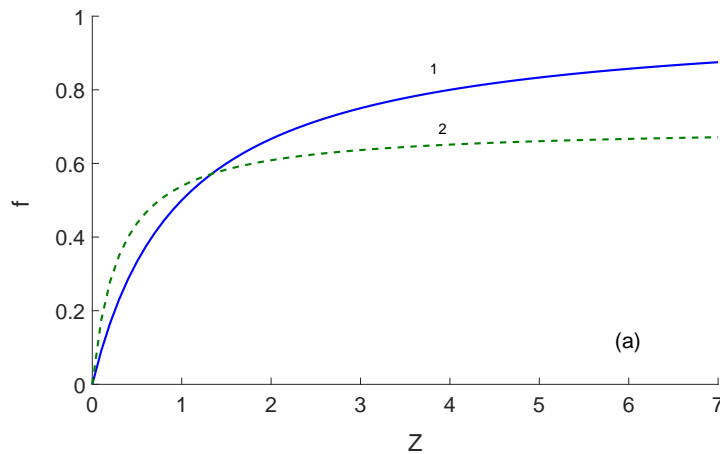


Figura 5.1: Curvas das taxas de crescimento específica das duas populações [Equações 5.8 e 5.9], sendo $\alpha = 0.7$, $\beta = 0.3$, $\gamma_1 = \gamma_2 = 0$

5.1. COMPETIÇÃO PURA E SIMPLES

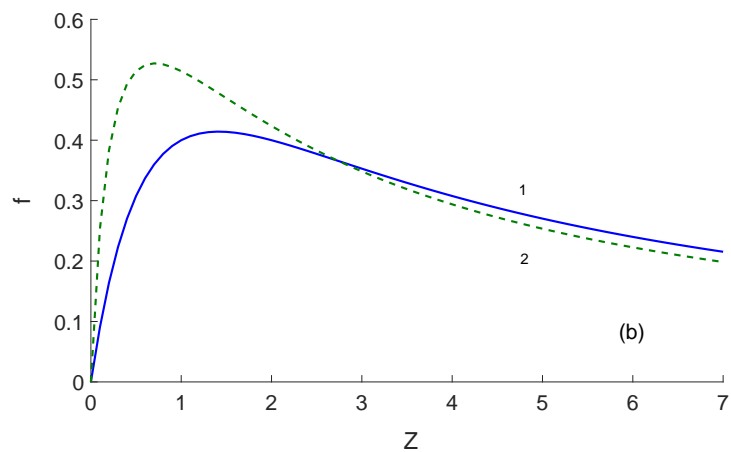


Figura 5.2: Curvas das taxas de crescimento específica das duas populações [Equações 5.8 e 5.9], sendo $\alpha = 0.9$, $\beta = 0.25$, $\gamma_1 = \gamma_2 = 0.5$

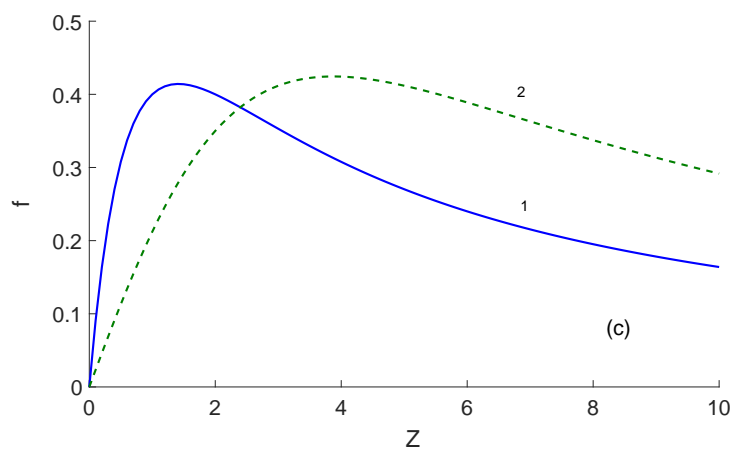


Figura 5.3: Curvas das taxas de crescimento específica das duas populações [Equações 5.8 e 5.9], sendo $\alpha = 7$, $\beta = 30$, $\gamma_1 = 0.5$ e $\gamma_2 = 2$

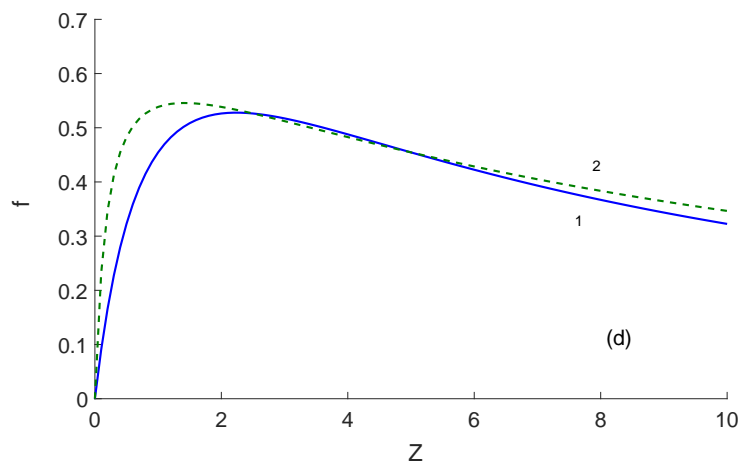


Figura 5.4: Curvas das taxas de crescimento específica das duas populações [Equações 5.8 e 5.9], sendo $\alpha = 0.7$, $\beta = 0.2$, $\gamma_1 = 0.2$ e $\gamma_2 = 0.1$

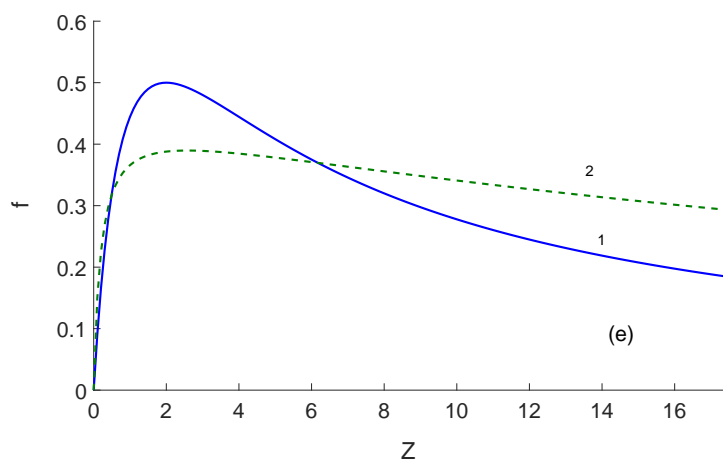


Figura 5.5: Curvas das taxas de crescimento específica das duas populações [Equações 5.8 e 5.9], sendo $\alpha = 0.45$, $\beta = 0.2$, $\gamma_1 = 0.25$ e $\gamma_2 = 0.03$

5.1. COMPETIÇÃO PURA E SIMPLES

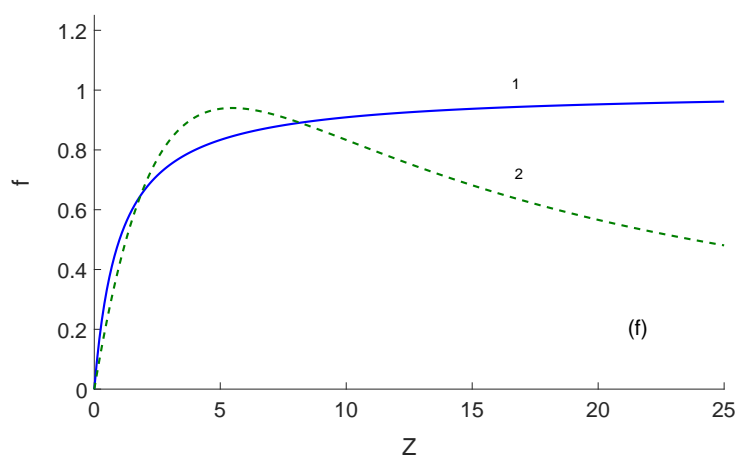


Figura 5.6: Curvas das taxas de crescimento específica das duas populações [Equações 5.8 e 5.9], sendo $\alpha = 3$, $\beta = 6$, $\gamma_1 = 0$ e $\gamma_2 = 0.2$

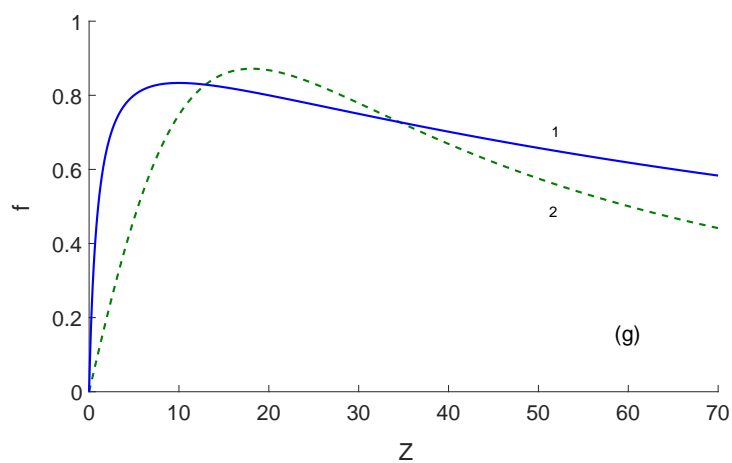


Figura 5.7: Curvas das taxas de crescimento específica das duas populações [Equações 5.8 e 5.9], sendo $\alpha = 10.5$, $\beta = 100$, $\gamma_1 = 0.01$ e $\gamma_2 = 0.305$

CAPÍTULO 5. COMPETIÇÃO DE MICRORGANISMOS EM BIORREATORES

<i>Caso</i>	α	β	γ_1	γ_2
a	0.7	0.3	0	0
b	0.9	0.25	0.5	0.5
c	7	30	0.5	2
d	0.7	0.2	0.2	0.1
e	0.45	0.2	0.25	0.03
f	3	6	0	0.2
g	10.5	100	0.01	0.305

Tabela 5.1: Valores dos parâmetros utilizados nas equações 5.8 e 5.9 para obtenção das Figuras 5.1, 5.2, 5.3, 5.4, 5.5, 5.6 e 5.7

5.1.2 Classificação dos pontos de equilíbrio

Para um determinado conjunto de organismos e meio de crescimento, os parâmetros que podem ser manipulados são a taxa de diluição u e a concentração do substrato na alimentação z_f . O efeito dos parâmetros operacionais u e z_f no comportamento dinâmico do sistema pode ser resumido no diagrama operacional do sistema, onde as várias regiões (1,2,3,4,5,6,7 e 8) representam comportamentos dinâmicos qualitativamente diferentes (retratos de fase). Os diagramas operacionais para os casos das Figuras 5.1, 5.2, 5.3, 5.4, 5.5, 5.6 e 5.7 são mostrados nas Figuras 5.8, 5.9, 5.10, 5.11, 5.12, 5.13 e 5.14, e o caráter de cada estado estacionário e retrato de fase correspondente, estão listados na Tabela 5.2 para cada região dos diagramas operacionais.

Nos casos em que existem dois estados estacionários de uma determinada classe, existem então dois tipos de estabilidade destas classes de estados estacionários. As duas curvas nas várias regiões operacionais representam comportamentos dinâmicos qualitativamente diferentes (retratos de fase). As duas curvas nos diagramas operacionais das Figuras 5.8, 5.9, 5.10, 5.11, 5.12, 5.13 e 5.14 são descritas pelas equações, $u = f_1(z_f)$ e $u = f_2(z_f)$. A estabilidade local com respeito a pequenas perturbações de qualquer estado estacionário é determinada através dos autovalores da matriz jacobiana resultante da linearização do sistema sobre o estado estacionário. Observa-se que os autovalores em cada estado estacionário são sempre reais, e o sistema de equações 5.8, 5.9 não exibe nenhum tipo de comportamento oscilatório. Como pode ser visto nos diagramas operacionais, o estado estacionário de coexistência pode ser alcançado apenas no segmento de um linha horizontal em $u = u_c$, para qual $z_f > z_c$. Os valores de x_1 e x_2 em um estado estável de coexistência não

5.1. COMPETIÇÃO PURA E SIMPLES

são exclusivamente determinados, mas qualquer par de valores satisfazendo a seguinte equação

$$x_1 + x_2 = z_f - z_c \quad (5.14)$$

satisfaz a versão para um estado estacionário do sistema de equações 5.8, 5.9. Em um estado de coexistência, um dos autovalores é sempre zero correspondente a perturbações ao longo da linha definida pela Equação 5.14 no plano (x_1, x_2) . O outro autovalor determina a estabilidade da linha de estados estacionários, isto é, se as trajetórias no plano (x_1, x_2) se aproximam ou afastam desta linha. O sinal deste autovalor depende do declives das curvas específicas de taxa de crescimento no ponto de intersecção. E se ambas as inclinações são positivas (por exemplo, Figura 5.1), o autovalor é negativo e o estado estacionário de coexistência é caracterizado como semi-estável. Se ambos os declives forem negativos (por exemplo, Figura 5.2), o autovalor é positivo e o estado estacionário de coexistência é caracterizado como semi-estável. Um caso interessante surge quando as curvas de taxa de crescimento específico no ponto de intersecção têm sinais opostos (por exemplo, Figura 5.3).

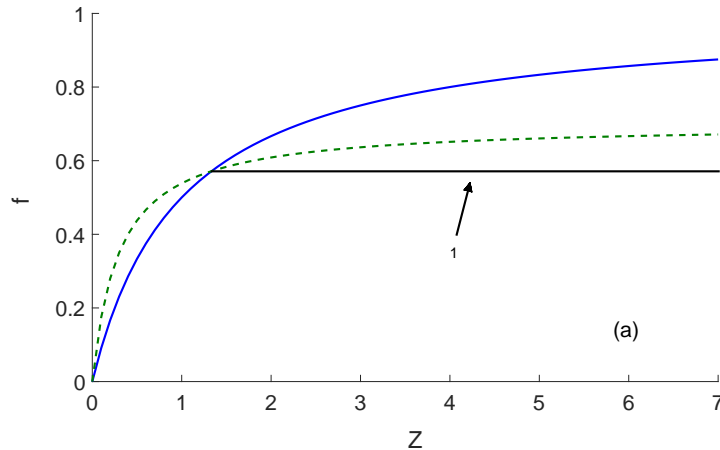


Figura 5.8: Diagrama operacional para os casos das curvas específicas da taxa de crescimento mostrado na Figura 5.1. O caráter dos estados estacionários em cada região do diagrama operacional são mostrados na Tabela 5.2.

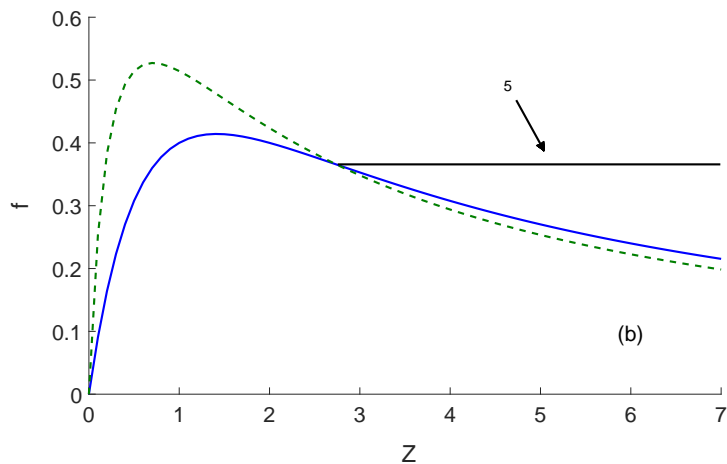


Figura 5.9: Diagrama operacional para os casos das curvas específicas da taxa de crescimento mostrado na Figura 5.2. O caráter dos estados estacionários em cada região do diagrama operacional são mostrados na Tabela 5.2.

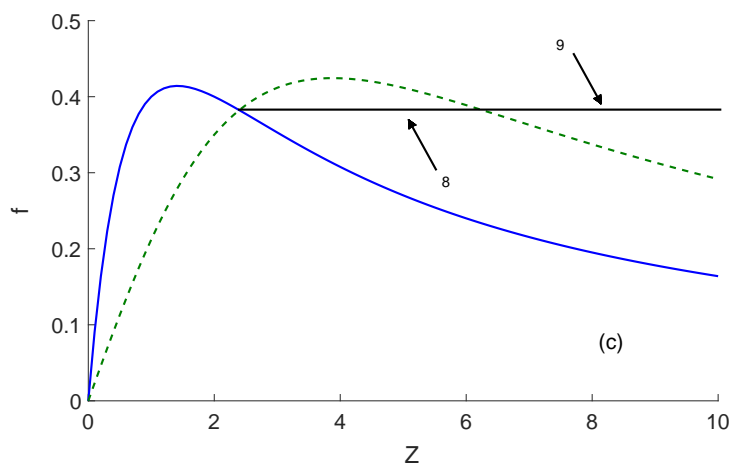


Figura 5.10: Diagrama operacional para os casos das curvas específicas da taxa de crescimento mostrado na Figura 5.3. O caráter dos estados estacionários em cada região do diagrama operacional são mostrados na Tabela 5.2.

5.1. COMPETIÇÃO PURA E SIMPLES

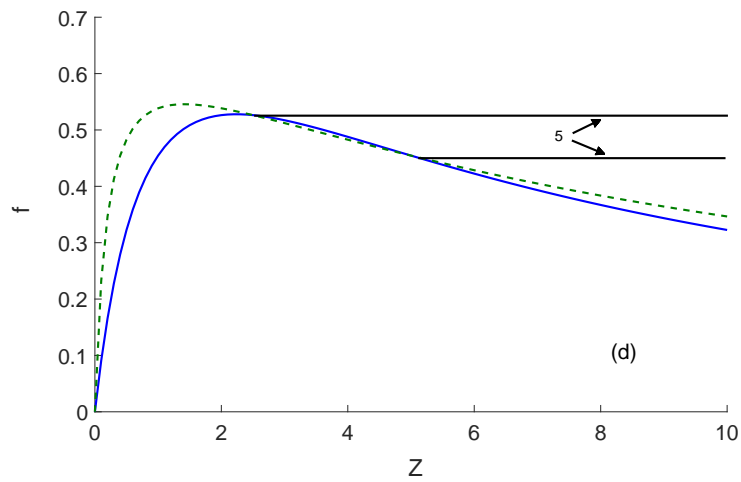


Figura 5.11: Diagrama operacional para os casos das curvas específicas da taxa de crescimento mostrado na Figura 5.4. O caráter dos estados estacionários em cada região do diagrama operacional são mostrados na Tabela 5.2.

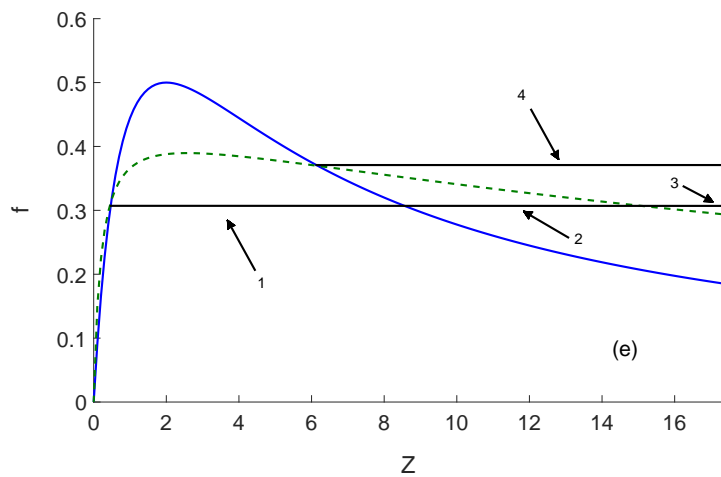


Figura 5.12: Diagrama operacional para os casos das curvas específicas da taxa de crescimento mostrado na Figura 5.5. O caráter dos estados estacionários em cada região do diagrama operacional são mostrados na Tabela 5.2.

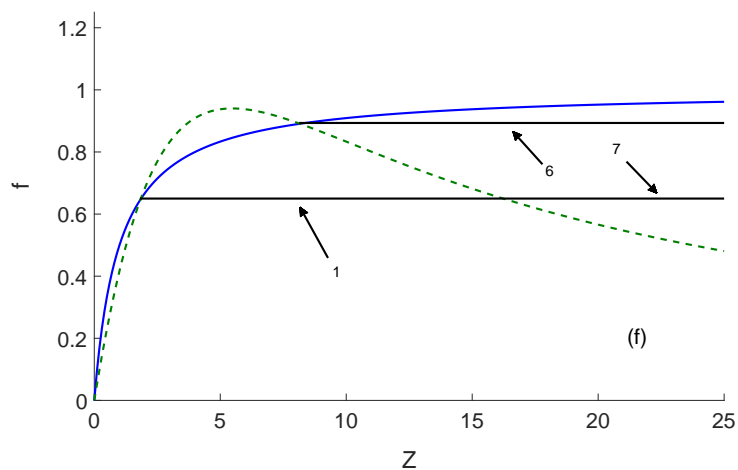


Figura 5.13: Diagrama operacional para os casos das curvas específicas da taxa de crescimento mostrado na Figura 5.6. O caráter dos estados estacionários em cada região do diagrama operacional são mostrados na Tabela 5.2.

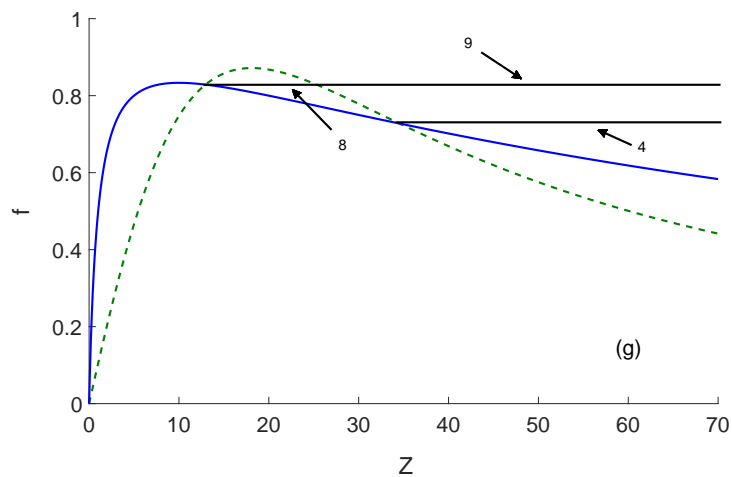


Figura 5.14: Diagrama operacional para os casos das curvas específicas da taxa de crescimento mostrado na Figura 5.7. O caráter dos estados estacionários em cada região do diagrama operacional são mostrados na Tabela 5.2.

5.2. EXTENSÕES DO MODELO

<i>Região</i>	<i>Limpeza</i>	<i>Espécie 1</i>	<i>Espécie 2</i>	<i>Coexistência</i>	<i>Retrato de Fase</i>
1	U	S_0	S_0	S_0	Fig.5.12
2	D	S_0,U	S_0	S_0	Fig.5.12
3	S	S_0,U	S_0,D	S_0	Fig.5.12 e 5.14
4	S	U_0,S	U_0,D	U_0	Fig.5.9 e 5.11
5	S	U_0,D	U_0,S	U_0	Fig.5.13
6	D	S_0	U_0,S	S_0/U_0	Fig.5.13
7	D	S_0	S_0,U	S_0	Fig.5.13
8	D	U_0,S	S_0	S_0/U_0	Fig.5.10 e 5.14
9	S	U_0,S	S_0,D	S_0/U_0	Fig.5.10 e 5.14

* S , nó estável; U , nó instável; D , sela; S_0 , semi-estável; U_0 , semi-instável; S_0/U_0 , parte semi-estável e parte semi-instável.

Tabela 5.2: Características dos estados estacionários nas regiões de coexistência.

Na competição pura e simples em um quimiostato, é possível concluir que a coexistência em um estado estacionário é estabelecida somente para valores específicos discretos da taxa de diluição. Portanto, o quimiostato deve operar exatamente em um desses valores para que as duas populações cresçam juntas, caso contrário, apenas uma espécie irá crescer no quimiostato. Em geral, seja qual for o número de espécies microbianas envolvidas na competição pura por um único nutriente no quimiostato, apenas uma população irá sobreviver, ou seja, aquela que irá prevalecer até o final é aquela que apresentar a menor necessidade de concentração de nutrientes de equilíbrio [30, 31].

5.2 Extensões do modelo

Nas seções 5.2.1, 5.2.2 e 5.2.3 será mostrado que a variação periódica de um dos parâmetros operacionais do sistema permite operação estável no quimiostato em um estado de coexistência para uma ampla gama de parâmetros. Assim, o quimiostato pode operar em alguma faixa e não necessariamente nos valores exatos dos parâmetros operacionais e, pequenas flutuações aleatórias não afetam o estado de coexistência. Foi escolhido a taxa de diluição do quimiostato como variável forçante, $D = D_0 + a \cos(\omega t)$. Onde $D_0 \geq a$ para garantir que a taxa de diluição não seja negativa para todos os tempos.

5.2.1 Efeito das condições periodicamente variáveis

A coexistência de duas populações numa competição pura e simples em um quimiostato é apenas uma possibilidade teórica, pois na prática, não

CAPÍTULO 5. COMPETIÇÃO DE MICRORGANISMOS EM BIORREADORES

é possível operar o quimiostato exatamente com o valor crítico necessário da taxa de diluição, porque sempre haverá flutuações aleatórias no sistema. Stephanopoulos et al. [32] fizeram uma análise estocástica do crescimento de duas populações microbianas concorrentes seguindo o modelo de Monod num quimiostato, com o intuito de estudar o efeito de flutuações aleatórias em sua operação, assumiram que a taxa de diluição esteja sujeita a flutuações que poderiam ser descritas por um ruído branco contínuo:

$$D(t) = D_0 + W(t) \quad (5.15)$$

onde D_0 é o valor médio da taxa de diluição, e as principais conclusões de sua análise foram:

1. Dado o tempo suficiente de operação no quimiostato, é fato que uma das populações será extinta, mesmo que o valor médio da taxa de diluição seja igual ao valor crítico, $D_0 = \mu_c$.
2. Existe uma probabilidade finita de extinção de qualquer uma das duas populações, mesmo quando $D_0 \neq \mu_c$, e mesmo quando uma das duas populações tem a vantagem competitiva.
3. Se o valor médio da taxa de diluição D_0 é próximo do valor crítico μ_0 e a intensidade do ruído é baixa, um tempo muito longo é necessário para a extinção de uma das populações.

A conclusão 1 acima, significa na prática que as flutuações eventualmente causarão a eliminação de um dos dois microrganismos, mesmo se a operação do quimiostato aconteça no valor crítico da taxa de diluição. A conclusão 2 afirma que mesmo com a definição da taxa de diluição de modo que uma população tenha a vantagem competitiva, as flutuações podem levar à sua extinção. E a conclusão 3 é de significado prático, mostrando que existe a possibilidade de operação do quimiostato com as duas populações por um longo período de tempo. Em um quimiostato isso pode acontecer através da variação periódica de um dos parâmetros operacionais.

Stephens e Lyberatos [33] e Pavlou et al. [34] examinaram se o atraso na resposta dos microrganismos às variações ambientais e, especificamente, às mudanças na concentração de nutrientes pode dar essa vantagem às espécies de crescimento mais lento, usando as seguintes equações modelo:

$$\frac{dx_1}{dt} = -Dx_1 + \frac{\mu_{m1}z_1}{K_1 + z_1}x_1 \quad (5.16)$$

$$\frac{dx_2}{dt} = -Dx_2 + \frac{\mu_{m2}z_2}{K_2 + z_2}x_2 \quad (5.17)$$

$$\frac{ds}{dt} = D(s_F - s) - \frac{1}{Y_1} \frac{\mu_{m1}s}{K_1 + s}x_1 - \frac{1}{Y_2} \frac{\mu_{m2}s}{K_2 + s}x_2 \quad (5.18)$$

$$\frac{dz_1}{dt} = \alpha_1(s - z_1) \quad (5.19)$$

$$\frac{dz_2}{dt} = \alpha_2(s - z_2) \quad (5.20)$$

A análise das equações 5.16 - 5.20, mostrou que a coexistência das duas populações é obtida em um estado periódico com variação periódica da concentração de nutrientes na alimentação, mesmo quando a população específica com a maior taxa de crescimento específico também possui a maior adaptabilidade.

Lenas e Pavlon [35] estudaram o caso de competição pura e simples de três populações microbianas em um quimiostato com taxa de diluição variável. Eles fizeram uma análise numérica de bifurcação do sistema e construíram seu diagrama operacional ilustrando a coexistência estável das três populações e o estado de coexistência é geralmente periódico.

Os pesquisadores [36] estudaram analiticamente o caso geral de n espécies microbianas competindo por um único nutriente em um quimiostato alimentado periodicamente. Eles derivaram condições suficientes para a coexistência de todas as espécies em um estado periódico. Este é um caso em que duas espécies não podem coexistir sob certas condições operacionais, e uma espécie se extingue. No entanto, simplesmente introduzindo uma terceira espécie no sistema sob as mesmas condições operacionais, evita-se a extinção e as três espécies coexistem. Note-se que o caso de três ou mais populações é qualitativamente diferente do caso de duas populações. Em um quimiostato com duas espécies sob condições operacionais invariantes no tempo, a coexistência é teoricamente prevista em um estado estacionário semi-estável e apenas para valores discretos específicos da taxa de diluição em que o sistema é estruturalmente instável.

A operação periódica perturba esse estado estacionário, levando a um estado de coexistência estável e a um sistema estruturalmente estável. A operação periódica leva à coexistência de todas as espécies pois cria heterogeneidade temporal no sistema, resultando com que cada uma das populações microbianas possua uma vantagem competitiva por um intervalo de tempo e, portanto,

todas elas coexistam. Outra maneira de alcançar a coexistência de populações microbianas envolvidas em competições puras e simples é criar heterogeneidade espacial. Em um sistema desse tipo, cada população microbiana tem a vantagem competitiva em uma região diferente do espaço e, portanto, elas coexistem.

5.2.2 Efeito do ambiente espacialmente heterogêneo

Um ambiente espacialmente heterogêneo em condições controladas pode ser obtido através de uma configuração de quimiostatos interconectados, conforme mostrado na Figura 5.15 .

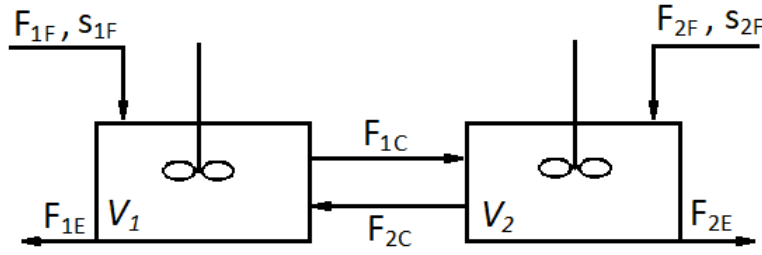


Figura 5.15: Configuração de dois quimiostatos interconectados.

As equações para um sistema de dois quimiostatos com competição pura e simples entre duas populações microbianas são:

$$V_1 \frac{dx_{11}}{dt} = F_{2C}x_{12} - (F_{1E} + F_{1C})x_{11} + V_1\mu_1(s_1)x_{11} \quad (5.21)$$

$$V_1 \frac{dx_{21}}{dt} = F_{2C}x_{22} - (F_{1E} + F_{1C})x_{21} + V_1\mu_2(s_1)x_{21} \quad (5.22)$$

$$V_1 \frac{ds_1}{dt} = F_{1F}s_{1F} + F_{2C}s_2 - (F_{1E} + F_{1C})s_1 - V_1 \left[\frac{\mu_1(s_1)x_{11}}{Y_1} + \frac{\mu_2(s_1)x_{21}}{Y_2} \right] \quad (5.23)$$

$$V_2 \frac{dx_{12}}{dt} = F_{1C}x_{11} - (F_{2E} + F_{2C})x_{12} + V_2\mu_1(s_2)x_{12} \quad (5.24)$$

$$\frac{dx_{22}}{dt} = F_{1C}x_{21} - (F_{2E} + F_{2C})x_{22} \quad (5.25)$$

$$V_2 \frac{ds_2}{dt} = F_{2F}s_{2F} + F_{1c}s_1 - (F_{2E} + F_{2C})s_2 - V_2 \left[\frac{\mu_1(s_2)x_{11}}{Y_1} + \frac{\mu_2(s_2)x_{21}}{Y_2} \right] \quad (5.26)$$

As três primeiras equações são os balanços de massa para as duas populações microbianas e a taxa de nutriente no primeiro quimiostato, as próximas três equações são referentes ao segundo quimiostato.

O sistema das equações acima foi estudado por Stephanopoulos e Fredrickson [37], com o modelo de Monod descrevendo as taxas de crescimento específicas das populações. Eles mostraram que a coexistência das duas populações é obtida em um estado estável. A coexistência é alcançada porque as condições em cada quimiostato favorecem uma população diferente. Smith e Waltman [38] mostraram que o estado estacionário da coexistência é único e globalmente estável. Também foram estudadas populações microbianas em uma configuração de n -quimiostatos. Concluiu-se que a coexistência é mais provável de ocorrer à medida que o número de vasos aumenta [39].

Para o caso geral de competição pura e simples de n populações microbianas, seria de esperar que uma configuração de n quimiostatos interconectados sejam necessários para sua coexistência, uma vez que para cada população um quimiostato deve existir onde possui vantagem competitiva sobre as demais populações. A coexistência de três populações microbianas concorrentes demonstrou ser possível em uma configuração de quatro quimiostatos interconectados [40]. No caso em que as curvas específicas da taxa de crescimento são descritas pelo modelo de Andrews e as oscilações são geradas em uma configuração de quimiostatos interconectados [41], pode-se esperar que várias populações que excedam o número de reatores possam coexistir, não em estado estacionário mas em um estado periódico.

Mesmo em um quimiostato perfeitamente misturado, a heterogeneidade espacial pode ser criada a partir da fixação das células nas paredes do quimiostato. Baltzis e Fredrickson [42] estudaram o caso de competição pura e simples entre duas populações microbianas em um quimiostato quando um deles tem a capacidade de se fixar às paredes do quimiostato. Todos os estudos de competição pura e simples são principalmente relacionados à coexistência das espécies envolvidas e sob quais condições é possível. Quando a competição é por mais de um nutriente, novamente a questão principal é sobre a sobrevivência e a coexistência das espécies.

5.2.3 Competição por dois ou mais nutrientes

Considerando uma competição total de n populações microbianas por m nutrientes em um biorreator, sendo $n > m$, as equações que demonstram tais sistemas são:

$$\frac{dx_i}{dt} = Dx_i + \mu_i(s_1, \dots, s_m)x_i \quad i = 1, \dots, n \quad (5.27)$$

$$\frac{ds_j}{dt} = D(s_{jF} - s_j) * \sum_{i=1}^n r_{ij}(s_1, \dots, s_m)x_i \quad j = 1, \dots, m \quad (5.28)$$

A Equação 5.27 representa o balanço de massa para espécies microbianas e Equação 5.28 o balanço de massa para os nutrientes. As taxas de crescimento específicas μ_i e as taxas de alimentação específicas r_{ij} são, em geral, funções das concentrações dos m nutrientes. Num estado estacionário, onde todas as espécies estão presentes ($x_i > 0$), a equação 5.27 produz:

$$D = \mu_i(s_1, \dots, s_m) \quad i = 1, \dots, n \quad (5.29)$$

Este é um sistema de n equações algébricas não lineares com m incógnitas e, em geral, uma condição necessária para uma solução é que ($n \leq m$). Isso significa que não mais que m espécies podem coexistir em m nutrientes. Se considerarmos que a taxa de diluição D também é desconhecida, ainda assim, pode existir uma solução quando $n = m + 1$, mas a taxa de diluição deve ser fixada em um valor específico e o sistema é estruturalmente instável, como no exemplo de duas populações competindo por um nutriente. Deve-se enfatizar que esta condição não garante a coexistência das espécies.

Estudos de modelagem [43, 44] com duas populações microbianas competindo por dois nutrientes mostram que a coexistência estável pode ser obtida para uma amplas condições operacionais. A coexistência estável também foi demonstrada experimentalmente [43]. Já os autores Gottschal e Thingstad [45, 46] estudaram o caso de três populações microbianas competindo por dois nutrientes e concluindo que a coexistência das três populações era impossível, apenas duas populações poderiam sobreviver, enquanto a terceira se extinguiria. O caso de três populações microbianas competindo por três nutrientes em um quimiostato foi estudado por Vayenas e Pavlou [47], por Husiman e Weissing [48] e Li [49]. Li e Smith [50] mostraram a existência de uma solução periódica na qual quatro espécies coexistem na competição por três recursos. Husiman e Weissing [48] também mostraram a geração

5.2. EXTENSÕES DO MODELO

de oscilações em um sistema de três espécies competindo por três recursos e demonstram que ocorrem oscilações caóticas quando cinco espécies estão envolvidas, concluindo que até nove espécies poderiam ser suportadas por três nutrientes.

A competição por mais do que um nutriente também foi estudada em diferentes configurações de quimiostatos interconectados [51, 52]. Thomopoulos et al. [52] estudaram a competição de três espécies por dois nutrientes em configurações de dois e três quimiostatos. No caso de dois quimiostatos, a coexistência de todas as três espécies seria possível apenas em valores discretos dos parâmetros operacionais em que o sistema é estruturalmente instável. No entanto, no caso de três quimiostatos, observou-se um estado estável de coexistência.

Capítulo 6

Conclusões

O estudo de sistemas ecológicos, principalmente em dinâmica de populações interagentes, tem sido assunto de grande interesse em trabalhos com modelagem matemática. Devido a grande importância deste tema, o objetivo deste trabalho foi o de introduzir alguns conceitos através de uma abordagem sobre sistemas não-lineares, apresentando o conceito de linearização, de estabilidade linear, classificação dos pontos de equilíbrio e uma introdução sobre bifurcações (Capítulo 2), visando analisar alguns sistemas ecológicos. Tais análises foram obtidas através de integração numérica dos sistemas, e das curvas de bifurcação, por continuação numérica através do software MatCont, que é uma caixa de ferramenta disponível para MATLAB com uma interface gráfica de usuário para a continuação de equilíbrios estáticos e dinâmicos de sistemas não-lineares.

No Capítulo 3, através da análise do modelo presa-predador de Lotka-Volterra foi possível detectar um comportamento oscilatório entre duas espécies (Figuras 3.1 e 3.2), embora este modelo reproduza a existência de ciclos (curvas fechadas no espaço de fase), ele é considerado biologicamente não realístico, porque a existência de um número infinito de curvas fechadas, correspondendo a diferentes condições iniciais, permitiria que pequenas perturbações transferissem o sistema de um ciclo para outro e não há justificativa biológica para explicar oscilações de qualquer tamanho. Ainda no Capítulo 3, mas agora para o modelo com três espécies interagentes de Hastings-Powell, foi possível observar a existência de ciclos limite e detectar atratores que dependendo dos valores dos parâmetros envolvidos no sistema, apresentaram desde ponto de equilíbrio, ciclo limite de período 1, ciclo limite de período 2 até comportamento caótico.

Visto que o etanol vem ocupando uma posição de destaque na geração de

bioenergia, o Capítulo 4 foi dedicado a analisar uma síntese industrial realizada via fermentação de glicose com a bactéria *Zymomonas mobilis*, modelo este proposto por Jobses [22]. Através da análise de tal sistema foi possível detectar a existência de singularidades como bifurcação Hopf, multiplicidade de equilíbrios e mudança de estabilidade. A existência de três ramos de soluções estacionárias é a característica que mais chama a atenção. A multiplicidade é composta por dois ramos de soluções estáveis e um conjunto de soluções instável. Embora o modelo de Jobses [22] tenha sido validado, e que a multiplicidade tenha sido verificada experimentalmente (ao menos para baixas taxas de diluição) existem indícios de que a inibição por substrato não é corretamente considerada na descrição matemática. A definição de ótimo operacional levou em conta o aspecto produtividade, concluindo que o ótimo operacional é a fronteira de estabilidade definida pelo conjunto de pontos sela, mais precisamente, no lado estável deste limite. Sendo assim, a finalidade de um sistema de controle é manter o processo nesta faixa de operação, para isso duas características são fundamentais: a manipulação do equilíbrio dentro de um conjunto de soluções e a transição de região operacional.

No que se refere ao Capítulo 5, a principal questão no estudo sobre competição entre microrganismos que habitam o mesmo ambiente é quantas espécies concorrentes e sob quais condições estas podem coexistir. A variação periódica das condições ambientais, modelada em um quimiostato pela variação periódica de um dos parâmetros operacionais, oferece um meio de obter coexistência na forma de oscilações periódicas sustentadas e, às vezes, quase periódicas ou caóticas. O ambiente permite que as espécies concorrentes coexistam sendo a heterogeneidade espacial frequentemente modelada por uma configuração de quimiostatos interconectados. A heterogeneidade espacial de cada quimiostato representa o subambiente em que uma das espécies tem uma vantagem competitiva sobre as outras, e a coexistência é obtida permitindo que cada uma das espécies tenha uma vantagem competitiva em um dos quimiostatos. A questão da coexistência de n populações microbianas competindo por m nutrientes em uma configuração de k quimiostatos interconectados é geral e esses casos estão resumidos na Tabela 6.1 Espera-se que a coexistência seja facilitada à medida que o número de nutrientes m ou o número de reatores k aumenta, ou o número de espécies concorrentes n diminua.

<i>Número de espécies (n)</i>	<i>Número de nutrientes (m)</i>	<i>Número de quimiostatos (k)</i>	<i>Coexistência</i>
2	1	1	instável
2	1	2	estável
2	2	1	estável
3	1	3	instável
3	1	4	estável
3	2	2	instável
3	2	3	estável
3	3	1	estável

Tabela 6.1: Coexistência de n populações microbianas competindo por m nutrientes em uma configuração de k quimiostatos interconectados.

Os casos listados na Tabela 6.1 em que a coexistência é observada em um sistema estruturalmente instável são limitantes. Aumentar m ou k ou diminuir n resulta na coexistência em um estado estacionário estável. Por outro lado, diminuir m ou k ou aumentar n torna impossível a coexistência em um estado estacionário. No entanto, oscilações periódicas geradas no sistema podem, em alguns casos, aumentar o número de espécies coexistentes, mas em um caso periódico estável e não em estado estacionário.

Portanto, esta dissertação serve como texto base para futuros trabalhos que tem como objetivo a modelagem de sistemas dinâmicos e estudos referentes ao tema bifurcações e caos.

Referências Bibliográficas

- [1] Boyce, W. D. and DiPrima, R., Equações diferenciais elementares e problemas de valores de contorno, LTC, (1999).
- [2] Bassanezzi, R. C., Ferreira, W., Equações diferenciais com aplicações, São Paulo: Editora Harbra, (1988).
- [3] N. Ferrara, C. Prado, Caos: Uma Introdução. São Paulo: Edgard Blöcher Ltda, (1995).
- [4] R. Seydel, From Equilibrium to Chaos-Practical Bifurcation and Stability Analysis. Elsevier, New York (1988).
- [5] de Oliveira M.M. and Ladeira D.G. , Chaotic coexistence in a resource-consumer model, Journal of Biological Systems 27, 167-184 (2019).
- [6] Elnashain S. S. E. H., Chen Z., Garhyan P., Prasad P. e Maheca-Botero A., “Practical implications of bifurcation chaos in chemical and biological reaction engineering.” International Journal of Chemical Reactor Engineering 4 (2006).
- [7] Beltrami, E., Mathematics for Dynamic Modeling, Academic Press (1997).
- [8] V.P.G. Anand, R.P. Jason, Evaluation of MATCONT of MATLAB for Constructing Bifurcation Diagrams of Chemical Process Systems, The IUP Journal of Chemical Engineering, Vol. III, No. 3, (2011).
- [9] Ljung, Lennard, System Identification—Theory of the user, Prentice Hall Ptr, Upper Saddle River, New Jersey, (1987).
- [10] Williams G. P., “Chaos theory tamed.” Joseph Henry Press. Washington, (1997).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [11] Kusnetsov, Y. A., “Elements of applied bifurcation theory.” 2 ed., Springer-Verlag New York, Inc. New York, (1998).
- [12] Wiggins, S., “Introduction to applied nonlinear dynamical systems and chaos.” Springer-Verlag New York, Inc. New York, 2 ed., (2003).
- [13] Medio A. e Lines M., “Nonlinear dynamics: a primer.” Cambridge University Press. New York, (2001).
- [14] Bequette B. W., “Process dynamics: modeling, analysis and simulation.” Prentice Hall, Inc. New Jersey, (1998).
- [15] HASTINGS, A., POWELL, T., Chaos in a three-species food chain, *Ecology* 72(3), (1991), pp. 896-903 .
- [16] Jobses I M L, Egberts G T C, Ballen A V and Roels J A (1985), “Mathematical modeling of growth and substrate conversion *Zymomonas mobilis* at 30° and 35°C”, *Biotechnol. Bioeng.* Vol. 27, pp. 984.
- [17] Nigam, P.S. and Singh, A. (2011) Production of Liquid Biofuels from Renewable Resources. *Progress in Energy and Combustion Science*, 37, 52-68.
- [18] Amorim, H. V.; Lopes, L. M.; Oliveira, J. V. C.; Buckeridge, M. S.; Goldman, G. M. Scientific challenges of bioethanol production in Brazil. *Applied Microbiology Biotechnology*, v. 91, p. 1267–1275, (2011).
- [19] Garhyan P, Elnashaie S S E H, Al-Haddad S M, Ibrahim G and Elshishini S S (2003), “Exploration and exploitation of bifurcation/chaotic behavior of a continuous fermentor for the production of ethanol”, *Chem. Eng. Sci.* Vol. 58, pp. 1479 – 1496.
- [20] Garhyan P and Elnashaie S S E H (2004), “Static/Dynamic bifurcation and chaotic behavior of an ethanol fermentor,” *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol. 43, pp. 1260-1273.
- [21] Garhyan P and Elnashaie S S E H (2005), “Experimental investigation and confirmation of static/dynamic bifurcation behavior in a continuous ethanol fermentor. Practical relevance of bifurcation and the contribution of Harmon Ray,” *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol. 44, pp. 2525-2531.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [22] Jobses I M L (1986), "Modeling of anaerobic microbial fermentations: The production of alcohols by *Zymomonas mobilis* and *Clostridium beijerincki*", Ph.D. Thesis, Delft University, Delft, The Netherlands.
- [23] Jobses I M L, Egberts G T C, Luyben K C A M and Roels J A (1986), "Fermentation kinetics of *Zymomonas mobilis* at high ethanol concentrations: Oscillations in continuous cultures", *Biotechnol. Bioeng.*, Vol. 28, pp. 868.
- [24] A.G. Fredrickson, G. Stephanopoulos, Microbial competition, *Science* 213 (1981) 972-979.
- [25] E.O. Powell, Criteria for growth of contaminants and mutants in continuous culture, *J. Gen. Microbiol.* 18 (1958) 259-268.
- [26] J.F. Andrews, A mathematical model for the continuous culture of microorganisms utilizing inhibitory substrates, *Biotechnol. Bioeng.* 10 (1968) 707-723.
- [27] J. Monod, *Recherches sur la croissance des culture bactériennes*, Hermann Et cie., Paris (1942).
- [28] R. Aris, A.E. Humphrey, Dynamics of a chemostat in which two organisms compete for a common substrate, *Biotechnol. Bioeng.* 19 (1977) 1375-1386.
- [29] G.J. Butler and G.S.K. Wolkowicz, A mathematical model of the chemostat with a general class of functions describing nutrient uptake, *SIAM J. Appl. Math.* 45 (1985) 138-151.
- [30] S.B. Hsu, S. Hubbell, P. Waltman, A mathematical theory for single-nutrient competition in continuous cultures of micro-organisms, *SIAM J. Appl. Math.* 32 (1977) 366-383.
- [31] S.B. Hsu, limiting behaviour for competing species, *SIAM J. Appl. Math.* 34 (1978) 760-763.
- [32] G. Stephanopoulos, R. Aris, A.G. Fredrickson, A stochastic analysis of the growth of competing microbial populations in a continuous biochemical reactor, *Math. Biosci.* 45 (1979) 99-135.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [33] M.L. Stephens, G. Lyberatos, Effect of cycling on final mixed culture fate, *Biotechnol. Bioeng.* 29 (1987) 672-678.
- [34] S. Pavlou, I.G. Kevrekidis, G. Lyberatos, On the coexistence of competing microbial species in a chemostat under cycling, *Biotechnol. Bioeng.* 35 (1990) 224-232.
- [35] P. Lenas, S. Pavlou, Coexistence of three competing microbial populations in a chemostat with periodically varying dilution rate, *Math. Biosci.* 129 (1995) 111-142.
- [36] G.S.K. Wolkowicz, X.Q. Zhao, n-species competition in a periodic chemostat, *Differential e Integral Equations* 11 (1998) 465-491.
- [37] G. Stephanopoulos, A.G. Fredrickson, Effect of spatial inhomogeneities on the coexistence of competing microbial populations, *Biotechnol. Bioeng.* 21 (1979) 1491-1498.
- [38] H.L. Smith, P. Waltman, The Gradostat: A model of competition along a nutrient gradient, *Microb. Ecol.* 22 (1991) 207-226.
- [39] H.L. Smith, B. Tang, P. Waltman, Competition in an n-vessel gradostat, *SIAM J. Appl. Math.* 51 (1991) 1451-1471.
- [40] B.C. Baltzis, M. Wu, Steady-state coexistence of three pure and simple competitors in a four-membered reactor network, *Math. Biosci.* 123 (1994) 147-165.
- [41] P. Lenas, N.A. Thomopoulos, D.V. Vayenas, S. Pavlou, Oscillations of two interconnected chemostats, *Math. Biosci.* 148 (1998) 43-63.
- [42] B.C. Baltzis, A.G. Fredrickson, Competition of two microbial populations for a single resource in a chemostat when one of them exhibits wall attachment, *Biotechnol. Bioeng.* 25 (1994) 2419-2439.
- [43] H. Yoon, G. Klinzing, H.W. Blanch, Competition for mixed substrates by microbial populations, *Biotechnol. Bioeng.* 19 (1977) 1193-1210.
- [44] Ballyk, G.S.K. Wolkowicz, Exploitative competition in the chemostat for two perfectly substitutable resources, *Math. Biosci.* 118 (1993) 127-180.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [45] J.C. Gottschal, T.F. Thingstad, "Mathematical description of competition between two and three bacterial species under dual substrate limitation in the chemostat: a comparison with experimental data", *Biotechnol. Bioeng.* 24 (1982) 1403-1418.
- [46] B.T. Li, H. Smith, How many species can two essential resources support?. *SIAM J. Appl. Math.* 62 (2001) 336-366.
- [47] D.V. Vayenas, S. Pavlou, Coexistence of three microbial populations competing for three complementary nutrients in a chemostat, *Math. Biosci.* 161 (1999) 1-13.
- [48] J. Huisman, F.J. Weissing, Biodiversity of plankton by species oscillations and chaos, *Nature* 402 (1999) 407-410.
- [49] B.T. Li, Periodic coexistence in the chemostat with three species competing for three essential resources, *Math. Biosci.* 174 (2001) 27-40.
- [50] B.T. Li, H.L. Smith, Periodic coexistence of four species competing for three essential resources, *Math. Biosci.* 184 (2003) 115-135.
- [51] A.A.S Zaghrou, Asymptotic behaviour of solutions of competition in gradostat with two limiting complementary substrates, *Appl. Math. and Comp.* 49 (1992) 19-37.
- [52] N.A. Thomopoulos, D.V. Vayenas and S.Pavlou, On the coexistence of three microbial populations competing for two complementary substrates in configurations of interconnected chemostats, *Math. Biosci.* 154 (1998) 87-102.