



Evento	Salão UFRGS 2015: SIC - XXVII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2015
Local	Porto Alegre - RS
Título	Determinação de agrupamentos em redes metabólicas
Autor	JOSÉ ANTÔNIO PELLIZZARO
Orientador	DANIEL GAMERMANN

Este trabalho visa a caracterização de redes metabólicas utilizando a teoria de grafos. A rede metabólica de um organismo é construída de modo que cada molécula represente um nó (vértice) e cada conexão represente uma reação química (cada reagente é ligado a todos os produtos de determinada reação).

Embora as características individuais destas redes variem muito entre diferentes organismos, sua estrutura global tem características semelhantes entre si e semelhantes às de redes construídas a partir de outros sistemas complexos, como por exemplo a internet. Algumas das características comuns às redes que representam estes sistemas complexos é a presença de *hubs* (nós com um número muito grande de conexões), hierarquias e *clusters* (agrupamentos). Nossa análise das redes se focou no estudo das hierarquias e dos agrupamentos de vértices presentes nestas redes pois ainda não há uma única metodologia padrão para quantificar estas características.

Nossa idéia é estudar um *random walk* na rede (a partir de um vértice inicial um caminhante percorre a rede aleatoriamente trocando de nó a cada passo temporal). Definindo a probabilidade de transição (salto) entre cada vértice e seus vizinhos, é possível resolver este problema analiticamente e calcular a probabilidade como função do tempo de se encontrar o caminhante em qualquer nó da rede.

Esta probabilidade é obtida pela resolução da *master equation*:

$$\frac{\partial P_i(j, t)}{\partial t} = \sum_{m=1}^N P_i(m, t) W_{m,j}(t) \quad (1)$$

Onde $W_{m,j}(t)$ é a chamada matriz de transição. Ao resolvermos essa equação diferencial obtemos um vetor de probabilidade $P_i(j, t)$ (a probabilidade de encontrarmos o caminhante no nó j dado que em $t = 0$ ele estava no nó i). Ao resolvermos a equação (1) para todos os N nós da rede podemos agrupar esse resultado em forma de uma matriz de probabilidade $P_{i,j}(t)$ na qual cada linha representará a solução da *master equation* para determinado nó inicial i .

Observando a probabilidade como função do tempo se vê que os valores se estabilizam no limite de t infinito (tendem a um valor estacionário), porém para os nós que fazem parte de um cluster esta probabilidade atingirá um máximo maior que o valor estacionário se o caminhante começou a caminhada em algum vértice do grupo. Isto ocorre pois a partir do momento que o caminhante está em um dos membros do grupo (cluster) a probabilidade dele continuar transitando dentro deste grupo é maior.

A metodologia deste trabalho foi resolver a equação (1) numericamente utilizando a linguagem de programação python, e estudar as correlações entre os máximos das funções $P_{i,j}(t)$ de modo a identificar os *clusters* individuais.