



CEFET/RJ – Maracanã
4º Encontro de Biomatemática

Formação de padrões: do modelo de Ising na biologia à dinâmica de redes hamiltonianas

Antonio Edimar de Melo Jr

27 de abril de 2022

Dinâmica Equivariante

Formação de padrões em seres vivos

O modelo de Ising

Redes Regulares

Bifurcações em Redes

Sistemas Hamiltonianos

Referências Bibliográficas

A **dinâmica equivariante** examina como as simetrias de uma equação diferencial afetam o comportamento de suas soluções.[1, 2, 4]

Por simplicidade, assuma que o *espaço de fase* de um sistema dinâmico é $X = \mathbb{R}^k$ e considere uma EDO

$$\frac{dx}{dt} = f(x) \quad x \in X, \quad (1)$$

onde $f : X \rightarrow X$ é uma função suave (campo vetorial).

Simetrias surgem quando um grupo Γ de transformações lineares age em X . Exigimos que todos os elementos de Γ associem soluções da EDO a outras soluções. Isso é equivalente a f ser Γ -equivariante, ou seja,

$$f(\gamma x) = \gamma f(x) \quad \forall \gamma \in \Gamma, x \in X \quad (2)$$

Organismos frequentemente exibem padrões de formato ou marcas e muitos destes padrões tem simetria. Turing [10] modelou esses padrões em termos de equações de reação-difusão:

$$\frac{\partial q}{\partial t} = D \nabla^2(q(x, t)) + F(q(x, t)) \quad (3)$$

definidas num domínio Ω , onde $q(x, t)$ é a evolução de concentrações de um sistema de moléculas, chamado *mofógeno*, para $x \in \Omega, t \in \mathbb{R}$ e a função F representa cinética química. O padrão de concentrações q é interpretado como uma referência genética do organismo, criada pela dinâmica de F em conjunto com a difusão definida pelo termo $D \nabla^2(q(x, t))$, onde D é uma matriz de difusão de coeficientes. Quando o organismo desenvolve-se, a referência genética é expressada tanto por uma correspondente mudança de formato ou um padrão de marcas (listras, pintas, etc) produzido por proteínas de pigmento.

Se q é unidimensional e $\Omega = \mathbb{S}^1$, $D \in \mathbb{R}$ é um escalar e as simetrias do domínio são rotações e reflexões de \mathbb{S}^1 , o grupo \mathbb{O}_2 . Usando no lugar de x um ângulo $\theta \in [0, 2\pi)$ como coordenada do domínio, suponha que exista um estado de equilíbrio $q(\theta, t) \equiv q_0$, de modo que $F(q_0) = 0$. Mudando a variável de q para $q - q_0$, de modo que $F(0) = 0$, a linearização de (3) na origem é

$$0 = D\ddot{q}(\theta) + F_0q(\theta) \quad (4)$$

onde $F_0 = \dot{F}(0)$. Reescrevendo isso como

$$\ddot{q}(\theta) + k^2q(\theta) = 0 \quad (5)$$

onde $k^2 = F_0/D$, a solução de (5) é

$$q(\theta) = a \cos k\theta + b \sin k\theta$$

que leva a padrões com simetria rotacional de ordem k .

Exemplo

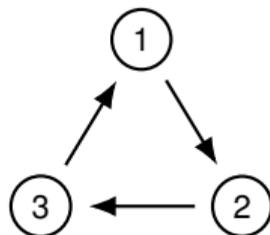
Considere o sistema de equações para 3 neurônios de Fitzhugh-Nagumo acoplados:

$$\begin{aligned} \dot{v}_1 &= v_1(a - v_1)(v_1 - 1) - w_1 - cv_2 & \dot{w}_1 &= bv_1 - \gamma w_1 \\ \dot{v}_2 &= v_2(a - v_2)(v_2 - 1) - w_2 - cv_3 & \dot{w}_2 &= bv_2 - \gamma w_2 \\ \dot{v}_3 &= v_3(a - v_3)(v_3 - 1) - w_3 - cv_1 & \dot{w}_3 &= bv_3 - \gamma w_3 \end{aligned} \quad (6)$$

onde v_i é o potencial de membrana da célula i , w_i é um substituto para uma corrente iônica e a, b, γ são parâmetros constantes com $0 < a < 1$, $b < 0$, $\gamma > 0$.

O grupo de simetria é \mathbb{Z}_3 gerado pelo 3-ciclo (123) atuando nos pares (v_j, w_j) .

Podemos pensar num **diagrama de rede** para o sistema (3) que represente os acoplamentos como mostrado abaixo.



$$\dot{x}_1 = f(x_1, x_3),$$

$$\dot{x}_2 = f(x_2, x_1),$$

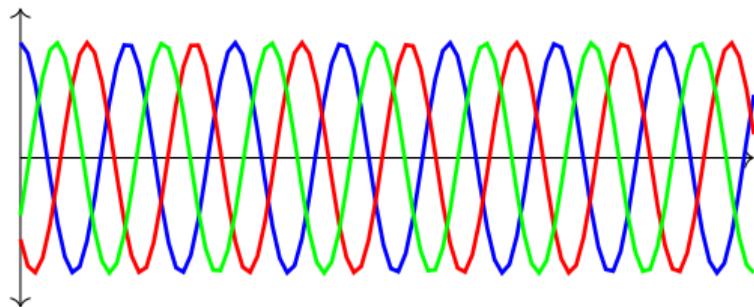
$$\dot{x}_3 = f(x_3, x_2),$$

onde os círculos representam células e setas representam os acoplamentos das variáveis nas equações. Como essas entram nas equações do mesmo modo para cada i sujeita à permutação cíclica, as setas exibem o mesmo tipo assim como as células por terem o mesmo *espaço de estados*.

Acima, fazemos $x_j = (v_j, w_j)$ para exibir a forma geral de outros sistemas com essa configuração.

Ressaltamos que, quando $a = b = \gamma = 0.5$ e $c = 2$, o sistema (3) tem um estado periódico estável em que as células sucessivas têm um terço de um período fora de fase. Abaixo mostramos o padrão para v_j ; o mesmo padrão ocorre para w_j . Este estado é uma *onda rotativa discreta* que exhibe simetria espaço-temporal induzida pela ação de \mathbb{Z}_3 :

$$x_2(t) = x_1(t - T/3) \quad x_3(t) = x_1(t - 2T/3)$$



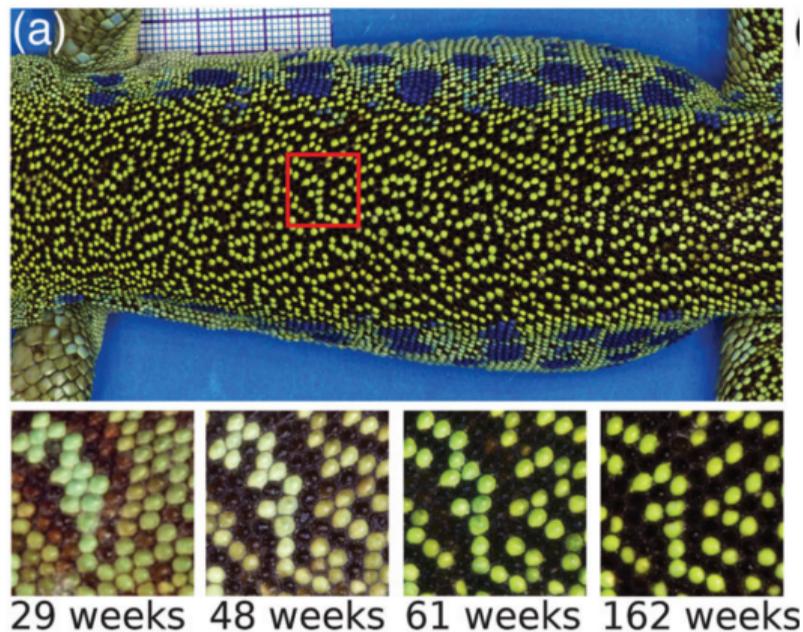
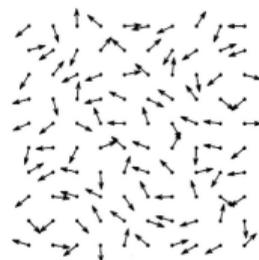
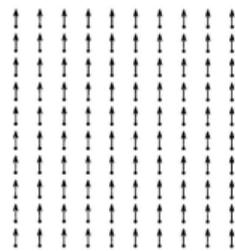


Figure: Ontogenia do padrão de cor em lagartos ocelados. Reproduzido de [11].

Vamos supor um conjunto de “spins” atômicos dispostos em uma rede regular. Quando a temperatura T excede uma temperatura crítica T_c , chamada de temperatura de Curie, o sistema exibe uma transição de fase de um estado paramagnético com poucas propriedades de magnetização para um estado ferromagnético, onde a magnetização é uniforme.



$T > T_c$

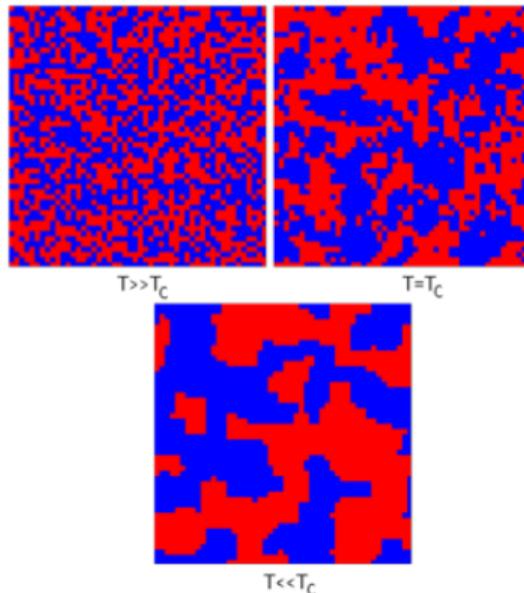


$T < T_c$

O Hamiltoniano (\mathcal{H}) do Modelo de Ising relaciona a interação de troca J a cada uma das interações entre spins vizinhos ($\sigma_i \sigma_j$) que podem assumir os valores 1 ou -1 . O termo H está relacionado ao campo sobre o sistema, que está associado à cada um dos spins (σ_i).

$$\mathcal{H} = -J \sum_{(ij)} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i$$

O modelo de Ising começa nesse estado perfeitamente ordenado ("ordem infinita"). Imagine que agora começamos gradualmente a aquecer a rede de Ising. O que acontece depois? Os spins começam a balançar (porque agora eles têm mais energia), e alguns deles começam a mudar de estado (de cima para baixo, ou de baixo para cima, dependendo do seu estado de spin inicial). À medida que a temperatura aumenta, eles balançam cada vez mais rápido, até atingirem uma temperatura incrivelmente alta na qual toda a ordem original se foi porque os spins estão balançando demais. Agora temos "desordem infinita".



Com as devidas adequações, muitos resultados de dinâmica equivariante se aplicam a redes simétricas. Contudo, poucos modelos em ciências aplicadas exibem simetrias globais.

Em 2002, Marcus Pivato descreveu uma rede de 16 células que tinha um estado periódico em que os nós foram particionados em 4 subconjuntos de 4 nós. [6]

As células em cada partição eram síncronas enquanto células em partições distintas apresentavam a mesma dinâmica a menos de um deslocamento de fase múltiplo de $1/4$ do período. Tratava-se de uma onda rotativa induzida por \mathbb{Z}_4 , exceto pelo fato da rede **não possuir** simetria \mathbb{Z}_4 .

Por volta de 2003, Marty Golubitsky, Ian Stewart e demais colaboradores propuseram uma teoria para estudar esse tipo de rede partindo da noção de simetria local, estabelecendo o **formalismo via grupoides**. [3, 5]

Matematicamente, uma rede é representada por um grafo direcionado cujos nós e arestas são classificados de acordo com rótulos ou “tipos” associados. Os nós (ou “células”) de uma (direcionada e rotulada) rede \mathcal{G} representam sistemas dinâmicos (variáveis de estado) e as arestas (“setas”) representam acoplamentos, interações entre essas variáveis.

Rede Regular

Uma rede homogênea é *regular* se possui todos os acoplamentos do mesmo tipo.

Matriz de Adjacência

A *matriz de adjacência* de uma rede regular é dada pela matriz $A = [a_{ij}]$, onde a_{ij} representa o número de setas recebidas pela célula i que vieram da célula j .

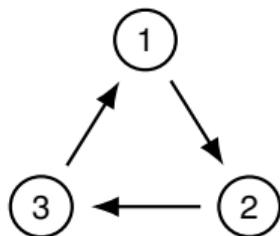
Rede Bidirecional

Uma rede é dita *bidirecional* quando todos os seus acoplamentos entre células se manifestam em pares de setas com sentidos opostos. Dito de outro modo, uma rede é bidirecional quando apresenta matriz de adjacência simétrica.

$$\dot{x}_1 = f(x_1, x_3),$$

$$\dot{x}_2 = f(x_2, x_1),$$

$$\dot{x}_3 = f(x_3, x_2),$$

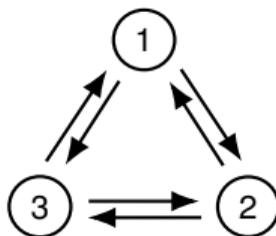


$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\dot{x}_1 = g(x_1, \overline{x_2, x_2}),$$

$$\dot{x}_2 = g(x_2, \overline{x_3, x_1}),$$

$$\dot{x}_3 = g(x_3, \overline{x_1, x_2}),$$

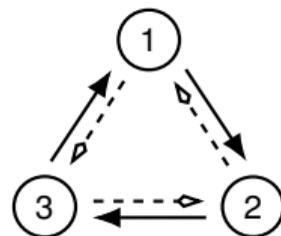


$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\dot{x}_1 = h(x_1, x_2, x_2),$$

$$\dot{x}_2 = h(x_2, x_3, x_1),$$

$$\dot{x}_3 = h(x_3, x_1, x_2).$$



$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Uma *bifurcação* ocorre numa família de EDOs da forma $\dot{x} = F(x, \lambda)$ com um parâmetro λ quando a descrição qualitativa de estados muda próxima a algum valor de parâmetro λ_0 .

Na dinâmica equivariante, restrições de simetria podem forçar autovalores a serem múltiplos, e novos fenômenos ocorrem. Um notável é quebra espontânea de simetria, onde as soluções têm menos simetria do que as equações (Golubitsky e Stewart 2002).

Nas redes, a bifurcação local é mais complicada. A arquitetura de rede pode ter um forte efeito não apenas nos autovalores, mas também nas não-linearidades ao longo do ramo bifurcado. Isso pode se manifestar, por exemplo, na taxa de crescimento do ramo bifurcado. Redes podem exibir bifurcações de quebra de sincronia, onde um estado com algum padrão de sincronia perde estabilidade e o padrão de sincronia muda: algumas células que eram síncronas deixam de ser.

Considere o seguinte modelo de dinâmica evolutiva usado para amontoados de organismos inicialmente idênticos com fenótipos $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$:

$$\begin{aligned}\dot{x} &= \lambda x - (x + y + z) + x^2 \\ \dot{y} &= \lambda y - (x + y + z) + y^2 \\ \dot{z} &= \lambda z - (x + y + z) + z^2\end{aligned}\tag{7}$$

A matriz Jacobiana desse sistema é

$$J = \begin{bmatrix} \lambda - 1 + 2x & -1 & -1 \\ -1 & \lambda - 1 + 2y & -1 \\ -1 & -1 & \lambda - 1 + 2z \end{bmatrix}$$

Note que o sistema admite a solução trivial $(0, 0, 0)$ cuja estabilidade é dada pelos autovalores da *linearização* de J neste ponto, obtendo

$$J_0 = \begin{bmatrix} \lambda - 1 & -1 & -1 \\ -1 & \lambda - 1 & -1 \\ -1 & -1 & \lambda - 1 \end{bmatrix}$$

com autovalores $\lambda - 3$ e λ com multiplicidade 2.

Quando $\lambda < 0$ a solução trivial é estável mas perde estabilidade quando $\lambda > 0$.

Se olharmos para um equilíbrio próximo da origem, encontramos soluções não-triviais (u, u, v) , (u, v, u) , (v, u, u) onde

$$u = \frac{-\lambda + 1 - \sqrt{\lambda^2 - 6\lambda + 1}}{2} \quad v = \frac{-\lambda - 1 + \sqrt{\lambda^2 - 6\lambda + 1}}{2} \quad (8)$$

Observe que, considerando a matriz de adjacência A da rede associada e a matriz identidade, podemos escrever

$$J_0 = (\lambda - 1) \cdot \mathbf{I}_3 + (-1) \cdot A \quad (9)$$

Observe que, considerando a matriz de adjacência A da rede associada e a matriz identidade, podemos escrever

$$J_0 = (\lambda - 1) \cdot \mathbf{I}_3 + (-1) \cdot A \quad (9)$$

A partir daí, assuma que a dinâmica interna de cada célula é k -dimensional com $k > 1$. Num estado completamente síncrono, a matriz Jacobiana é determinada por duas matrizes de ordem k : a dinâmica interna linearizada Φ e o acoplamento linearizado Ψ de onde temos

$$(dF)_0 = \mathbf{I}_r \otimes \Phi + A \otimes \Psi. \quad (10)$$

Lema 1

Os kr autovalores da matriz Jacobiana J são a união dos autovalores das matrizes M_{μ_j} para $1 \leq j \leq s$. Especificamente, suponha que $u \in \mathbb{C}^r$ é um autovetor de A . Então

$$J(u \otimes v) = u \otimes (M_{\mu} v). \quad (11)$$

Portanto, se $v \in \mathbb{C}^k$ é um autovetor de M_{μ} , então $u \otimes v$ é um autovetor de J .

Definição 4

Um par (Φ, Ψ) de matrizes reais de ordem k é um *par de codimensão um* se as partes reais dos autovalores das matrizes $M_{\rho_1}, \dots, M_{\rho_p}, M_{\eta_1}, \dots, M_{\eta_q}$ são distintas (exceto por conjugados complexos dos autovalores de M_{η_i}). O conjunto desses pares é denotado por $\mathcal{L}_2(k)$.

Dada uma função $h(q, p) : P \rightarrow \mathbb{R}$, um sistema dinâmico acoplado hamiltoniano é um sistema definido a partir de $2mn$ equações diferenciais ordinárias

$$(\dot{q}, \dot{p})^T = \mathbf{J} \nabla h(q, p), \quad (12)$$

onde

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} 0_{nm} & \mathbf{I}_{nm} \\ -\mathbf{I}_{nm} & 0_{nm} \end{bmatrix} \quad (13)$$

é uma matriz anti-simétrica, $q = (q_1, \dots, q_n)$ e $p = (p_1, \dots, p_n)$ são chamados vetores de posição e momento, respectivamente, e formam o espaço de fase total $P = (\mathbb{R}^{2m})^n$ e, para $i = 1, \dots, n$, $(q_i, p_i) \in \mathbb{R}^{2m}$ é a variável de posição e momento de cada célula i .

Teorema

Suponha que um sistema hamiltoniano de equações diferenciais possa ser representado como um sistema acoplado de células hamiltonianas e sua rede de células acopladas seja conexa. Então, a rede deve ser acoplada bidirecionalmente.

Teorema

Seja \mathcal{G} uma rede não direcionada que possa ter várias arestas e laços e $A_{\mathcal{G}} = (a_{ij})$ denota a matriz de adjacência da rede \mathcal{G} . Uma função $h : P \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função hamiltoniana admissível associada a \mathcal{G} se, e somente se, existem funções suaves $\alpha : \mathbb{R}^{2m} \rightarrow \mathbb{R}$ e $\beta : \mathbb{R}^{2m} \times \mathbb{R}^{2m} \rightarrow \mathbb{R}$ tais que

$$h(q, p) = \sum_{i=1, i \leq j}^n a_{ij} \beta(q_i, q_j, p_i, p_j) + \sum_{i=1}^n \alpha(q_i, p_i). \quad (14)$$

Se \mathcal{G} é bipartida e além disso existem $v_i \in V_1$ e $v_j \in V_2$ com a mesma valência, ou se \mathcal{G} não é bipartida, então β é invariante pela permutação $\sigma(q_i, q_j, p_i, p_j) = (q_j, q_i, p_j, p_i)$.

Definição

Dizemos que uma matriz M é hamiltoniana se, dada uma matriz J de estrutura simplética na forma (13), esta satisfaz

$$M^T J + J M = 0. \quad (15)$$

Corolário 3.14

Suponha que tenhamos uma rede regular cuja dinâmica interna de cada célula seja hamiltoniana. Então, o sistema linearizado na origem é hamiltoniano se, e somente se, a matriz de acoplamento Ψ for hamiltoniana e a matriz de adjacência da rede for simétrica.

Lema 3.15

Os $2mn$ autovalores da jacobiana \mathcal{J} são a união dos autovalores das matrizes M_{μ_i} . Especificamente, seja $u \in \mathbb{R}^n$ é um autovetor de A . Então

$$\mathcal{J}(u \otimes v) = u \otimes (M_{\mu}v).$$

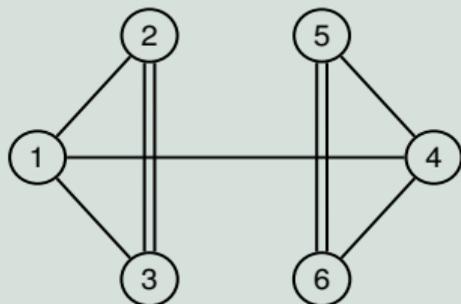
Portanto, se $v \in \mathbb{C}^{2m}$ é um autovetor de M_{μ} , então $u \otimes v$ é um autovetor de \mathcal{J} .

Lema 3.16

Seja $\mu \in \mathbb{R}$ um autovalor de A e denote por $E_{\mu}(A) \subset \mathbb{R}^n$ o autoespaço generalizado associado. Então, $E_{\mu}(A) \otimes \mathbb{C}^{2m}$ é invariante por \mathcal{J} .

Exemplo 3.17

Considere a rede \mathcal{G}_1 mostrada abaixo com sua matriz de adjacência A_1 .



$$A_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 2 & 0 \end{bmatrix}$$

A rede \mathcal{G}_1 possui grupo de simetria abeliano \mathbb{D}_2 . Os autovalores de A_1 são $3, \frac{1}{2}(1 \pm \sqrt{17}), -2, -2, 0$. A simetria \mathbb{D}_2 não é suficiente para garantir o duplo autovalor -2 pois representações irredutíveis de grupos abelianos são unidimensionais. Assim, a multiplicidade 2 do autovalor -2 é uma consequência da estrutura particular da rede.

Bifurcações em Sistemas Hamiltonianos

Autovalores em Sistemas Hamiltonianos



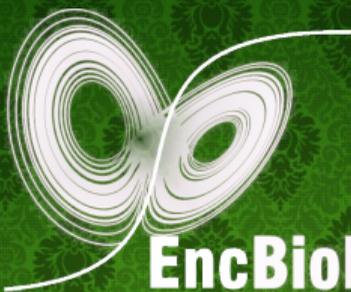
Os autovalores de \mathcal{J} são obtidos calculando os autovalores das matrizes $M_3 = \Phi + 3\Psi$, $M_0 = \Phi$, $M_{\mu_{\pm}} = \Phi + \mu_{\pm}\Psi$ onde $\mu_{\pm} = \frac{1}{2}(1 \pm \sqrt{17})$, e $M_{-2} = \Phi - 2\Psi$, todas de ordem $2m$. Considere agora a decomposição \mathbb{D}_2 -isotípica de \mathbb{R}^6 dada por $\mathbb{R}^6 = T^2 \oplus B_1^2 \oplus B_2^2$. Nessa base, temos $\mathcal{J} = \text{diag}(\Phi_1, \Phi_2, \Phi - 2\Psi, \Phi - 2\Psi)$ onde

$$\Phi_1 = \begin{bmatrix} \Phi + \Psi & \Psi \\ 2\Psi & \Phi + 2\Psi \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \Phi_2 = \begin{bmatrix} \Phi + 2\Psi & \Psi \\ \Phi - \Psi & \Psi \end{bmatrix}.$$

Deste modo, vemos a vantagem computacional de usar a matriz de adjacência para calcular o espectro jacobiano notando que a decomposição por simetria requer o cálculo dos autovalores de matrizes de ordem $4m$ ao invés de ordem $2m$.

- [1] F. Antoneli, I. Stewart. *Symmetry and synchrony in coupled cell networks 1: Group networks*, International Journal of Bifurcation and Chaos, Vol. 16, No. 3 (2006), 559–577.
- [2] F. Antoneli, A.P.S. Dias, and R. Paiva. *Hopf Bifurcation in Coupled Cell Networks with Interior Symmetries*. SIAM Journal on Applied Dynamical Systems, Vol. 7, No. 1 (2008), 220-248.
- [3] M. Golubitsky, I. Stewart. *Nonlinear dynamics of networks: the groupoid formalism*. Bull. Amer. Math. Soc. 43 (2006) 305–364.
- [4] M. Golubitsky, I. Stewart, and D. Schaeffer, *Singularities and Groups in Bifurcation Theory: Vol. 2.*, Appl. Math. Sci. 69, Springer-Verlag, New York, (1988).
- [5] M. Golubitsky, I. Stewart, and A. Török. *Patterns of synchrony in coupled cell networks with multiple arrows*, SIAM J. Appl. Dyn. Sys. 4(1) (2005) 78–100.

- [6] I. Stewart, M. Golubitsky, M. Pivato. *Symmetry groupoids and patterns of synchrony in coupled cell networks*. SIAM J. Appl. Dyn. Syst. 2 no. 4 (2003) 609–646.
- [7] Melo, A. E. Redes de sistemas dinâmicos acoplados com estrutura gradiente ou hamiltoniana. Dissertação de Mestrado, UNIFESP, 2020.
- [8] Othmer, H. G. e Scriven L. E. Instability and dynamic pattern in cellular networks, *J Theor Biol*, 32(3):507-37. 1971. DOI: 10.1016/0022-5193(71)90154-8. ,
- [9] Stewart, I., Golubitsky, M., Pivato, M. Symmetry groupoids and patterns of synchrony in coupled cell networks. *SIAM Journal of Applied Dynamical Systems*, 2 (4), 2003.
- [10] Turing, A. M. The chemical basis of morphogenesis. *Phil. Trans. R. Soc. B*, 237, 37, 1952. DOI: 10.1098/rstb.1952.0012.
- [11] Zakany, S., Smirnov, S. e Milinkovitch, M. Lizard Skin Patterns and the Ising Model, *Phys. Rev. Lett*, 128, 048102, 2022. DOI: 10.1103/PhysRevLett.128.048102.



EncBioMat

Grato pela atenção!