

Título em Português:	Cooperação na evolução pré-biótica: seleção de grupo
Título em Inglês:	Cooperation in prebiotic evolution: group selection
Autor:	João Marcos Rigon Araujo
Instituição:	Universidade de São Paulo
Unidade:	Instituto de Física de São Carlos
Orientador:	Jose Fernando Fontanari
Área de Pesquisa / SubÁrea:	Física Geral
Agência Financiadora:	CNPq - PIBIC

Cooperação na evolução pré-biótica: seleção de grupos

João Marcos Rigon Araujo

José Fernando Fontanari

Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo - Brasil

joao_araujo@usp.br fontanar@ifsc.usp.br

Objetivos

Um dos problemas fundamentais em evolução pré-biótica é explicar a coexistência de moléculas auto-replicadoras distintas. Uma solução para isso é a introdução de elementos cooperativos na dinâmica de interação molecular, levando aos ciclos moleculares catalíticos, denominados hiperciclos. Nesse sentido, o objetivo desse projeto foi de estudar a dinâmica de interação entre moléculas auto-replicadoras usando mecanismos de cooperação e demonstrar como a dinâmica é facilitada em uma população estruturada na distribuição das macromoléculas associadas à replicação, de forma que foram feitas análises mais aprofundadas para as distribuições binomial e de Polya, estudando seus efeitos de forma analítica e computacional.

Metodologia

Seja X_1 e X_2 a população total de dois replicadores distintos em uma população. Na ausência de proteínas, esses replicadores são regidos pela dinâmica *Malthusiana*. Assume-se que um desses replicadores (*replicador 2*) tenha a capacidade de polimerizar aminoácidos em uma proteína e que a ação enzimática do replicador 2 não tem ação específica em relação à catalisar a replicação do replicador 1 ou 2. Além disso, assume-se que a produção do catalisador (enzima) tem um custo C para o replicador 2.

Com $P(y)$ sendo função densidade de probabilidade do *tipo 2*, é possível interpretar essa função como a frequência de habitats com y replicadores do tipo 2 ($y = 0, 1, \dots, N$). Seja um replicador do tipo i ($i = 1, 2$), então $P(y|i)$ é a probabilidade que um replicador do tipo i esteja em um habitat com y replicadores do *tipo 2* (e, portanto ky proteínas catalisadoras). Dessa forma, as equações que regem a dinâmica são dadas por:

$$\dot{X}_1 = X_1(r_1 + B\bar{e}_1 - \psi) \quad (1)$$

$$\dot{X}_2 = X_2(r_2 - C + B\bar{e}_2X_1 - \psi) \quad (2)$$

Sendo r_i definido como a taxa de crescimento intrínseco do replicador i (no presente resumo será feita a suposição $r_1 = r_2$), B o efeito cooperativo do replicador hipercíclico (descrita como a taxa hipercíclica da dinâmica) e e_i a ação enzimática "sentida" por cada replicador, dada por:

$$\bar{e}_1 = k \left[\bar{y} - \frac{\sigma^2}{N - \bar{y}} \right] \quad (3)$$

$$\bar{e}_2 = k \left[\bar{y} + \frac{\sigma^2}{\bar{y}} \right] \quad (4)$$

Por se tratar de uma dinâmica populacional, assume-se que a probabilidade que um replicador seja "escolhido" é influenciada pela escolha anterior. Ou seja, caso um replicador do tipo i seja selecionado, a probabilidade que esse replicador seja escolhido novamente aumenta (perceba que esse modelo assemelha-se bastante ao "*kin selection*"). Dessa forma a distribuição utilizada é a de *Polya* (Urn Model - ref[3]) que, por sua vez, generaliza a distribuição binomial abordada no artigo referência (ref. [2]).

As análises foram feitas a partir dos pontos fixos triviais e o ponto fixo de coexistência.

Sendo $f_i = \frac{X_i}{X_T}$, temos:

Tabela 1: Valor esperado e variância de cada distribuição utilizada.

-	Homogênea	Binomial	Polya
$\bar{y}$	f_2N	f_2N	f_2N
σ^2	0	f_1f_2N	$f_1f_2N \frac{(1+\gamma N)}{(1+\gamma)}$

Resultados

As condições encontradas para que o replicador altruísta aumente em frequência na dinâmica, ou

seja, a condição para a instabilidade do ponto fixo $P^* = (1, 0)$ são:

- Distribuição homogênea: $C < 0$.
- Distribuição binomial: $C < kB$
- Distribuição de Polya: $C < kB \left[\frac{1+\gamma N}{1+\gamma} \right]$

Observe que, ao analisar isoladamente o caso da distribuição homogênea ($\sigma^2 = 0$) chegamos em um problema: a condição $C < 0$ não é satisfeita em um cenário realista. Dessa forma o problema do custo energético requer uma solução que, por sua vez, será encontrada na estruturação da população.

Para isso, a fim de uma maior visualização, será utilizada a condição encontrada na distribuição binomial como efeito comparativo. Vejamos:

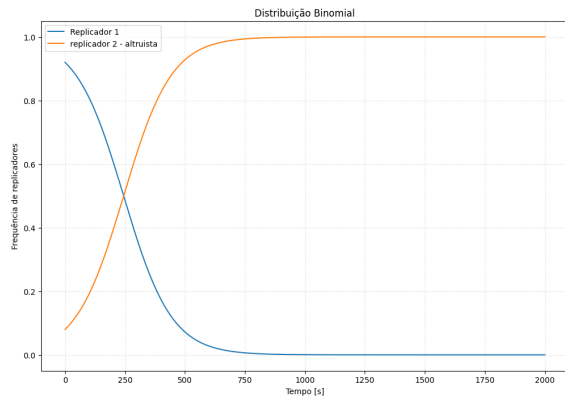


Figura 1: Distribuição Binomial: condição $C < kB$

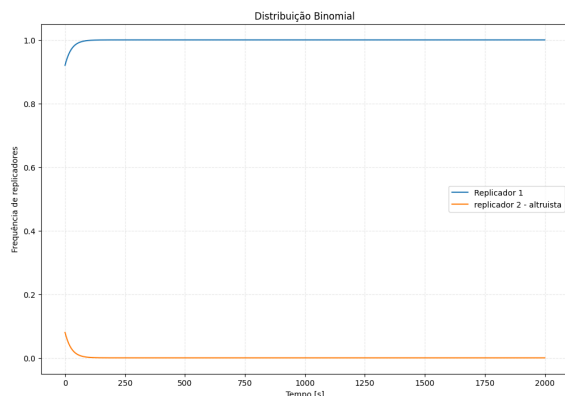


Figura 2: Distribuição Binomial: condição $kB < C < kB \left[\frac{1+\gamma N}{1+\gamma} \right]$

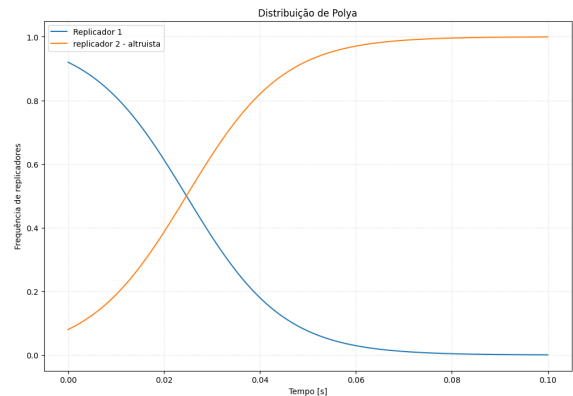


Figura 3: Distribuição de Polya: condição $kB < C < kB \left[\frac{1+\gamma N}{1+\gamma} \right]$

Conclusões

Os resultados obtidos indicam que a ação enzimática em um auto-replicador faz com que esse mesmo auto-replicador tenha uma vantagem significativa em relação à outros competidores. Além disso, outra vantagem significativa nas dinâmicas envolvidas é a escolha da população estruturada. Sendo uma hipótese de como o primeiro auto-replicador com produção enzimática conseguiu superar a barreira do custo da geração enzimática (Figura 1). Ademais, selecionando a distribuição de Polya como forma de variação, foi visto essa ação ainda mais acelerada e, além disso, é obtido um intervalo ainda maior para suprimir o custo da produção enzimática (Figura 2 e 3), fazendo com que o replicador que produz a proteína "experincia" em maiores quantidades o efeito da mesma, de forma que o problema do custo energético tenha uma possível solução.

Referências Bibliográficas

- [1] NOWAK, M.A. **Evolutionary dynamics: exploring the equations of life**. New York: Belknap Press, 2006.
- [2] MICHOD, R.E. Population biology of the first replicators: on the origin of the genotype, phenotype and organism. **American Zoologist**, v. 23, n. 1, p. 5-14, 1983.
- [3] FELLER, W. **An introduction to probability theory and its applications**, Wiley (1957-1971)

Cooperation in Prebiotic Evolution: Group Selection

João Marcos Rigon Araujo
José Fernando Fontanari

São Carlos Institute of Physics, University of São Paulo - Brazil

joao_araujo@usp.br fontanar@ifsc.usp.br

Objectives

One of the fundamental challenges in prebiotic evolution is to explain the coexistence of distinct self-replicating molecules. One solution to this is the introduction of cooperative elements into the dynamics of molecular interactions, leading to catalytic molecular cycles known as hypercycles. In this regard, the aim of this project was to study the interaction dynamics among self-replicating molecules using cooperative mechanisms and demonstrate how this dynamics is facilitated within a population structured in the distribution of macromolecules associated with replication. To achieve this, more in-depth analyses were conducted for the binomial and Polya distributions, studying their effects analytically and computationally.

Materials and Methods

Let X_1 and X_2 be the total population of two distinct replicators in a population. In the absence of proteins, these replicators are governed by Malthusian dynamics. It is assumed that one of these replicators (replicator 2) has the ability to polymerize amino acids into a protein, and the enzymatic action of replicator 2 does not have specific action in catalyzing the replication of replicator 1 or 2. Furthermore, it is assumed that the production of the catalyst (enzyme) has a cost C for replicator 2.

With $P(y)$ being the probability density function of type 2, it is possible to interpret this function as the frequency of habitats with y replicators of type 2 ($y = 0, 1, \dots, N$). Let a replicator of type i ($i = 1, 2$), then $P(y|i)$ is the probability that a replicator of type i is in a habitat with y replicators of type 2 (and therefore ky catalyzing proteins). Thus, the equations governing the dynamics are given by:

$$\dot{X}_1 = X_1(r_1 + B\bar{e}_1 - \psi) \quad (1)$$

$$\dot{X}_2 = X_2(r_2 - C + B\bar{e}_2X_1 - \psi) \quad (2)$$

Where r_i is defined as the intrinsic growth rate of replicator i (for this summary, we will assume $r_1 = r_2$), B is the cooperative effect of the hypercyclic replicator (described as the hypercyclic rate of dynamics), and e_i is the "experienced" enzymatic action by each replicator, given by:

$$\bar{e}_1 = k \left[\bar{y} - \frac{\sigma^2}{N - \bar{y}} \right] \quad (3)$$

$$\bar{e}_2 = k \left[\bar{y} + \frac{\sigma^2}{\bar{y}} \right] \quad (4)$$

As it is a population dynamics, it is assumed that the probability that a replicator is "chosen" is influenced by the previous choice. That is, if a replicator of type i is selected, the probability that this replicator is chosen again increases (note that this model bears resemblance to "kin selection"). Thus, the distribution used is the Polya distribution (Urn Model - ref[3]), which in turn generalizes the binomial distribution addressed in the reference paper (ref. [2]).

Analyses were performed based on the trivial fixed points and the coexistence fixed point.

Letting $f_i = \frac{X_i}{X_T}$, we have:

Tabela 1: Expected value and variance of each used distribution.

-	Homogeneous	Binomial	Polya
$\bar{y}$	f_2N	f_2N	f_2N
σ^2	0	f_1f_2N	$f_1f_2N \frac{(1+\gamma N)}{(1+\gamma)}$

Results

The conditions found for the altruistic replicator to increase in frequency in the dynamics, i.e., the

condition for the instability of the fixed point $P^* = (1, 0)$ are as follows:

- Homogeneous distribution: $C < 0$.
- Binomial distribution: $C < kB$
- Polya distribution: $C < kB \left[\frac{1+\gamma N}{1+\gamma} \right]$

Note that, when analyzing the case of the homogeneous distribution ($\sigma^2 = 0$) in isolation, we encounter a problem: the condition $C < 0$ is not satisfied in a realistic scenario. Therefore, the issue of energy cost requires a solution, which will be found in the population structure.

To visualize this further, for the sake of comparison, the condition found in the binomial distribution will be used. Let's see:

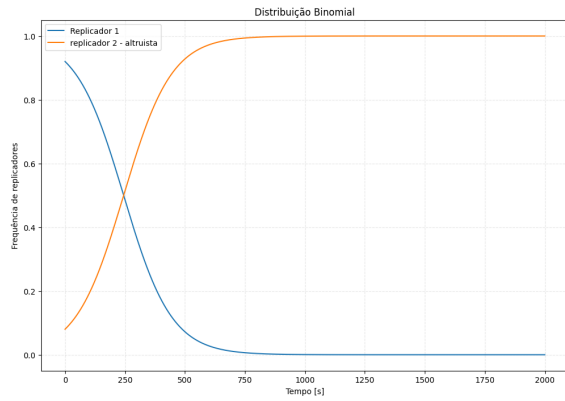


Figura 1: Homogeneous Distribution: condition $C < 0$

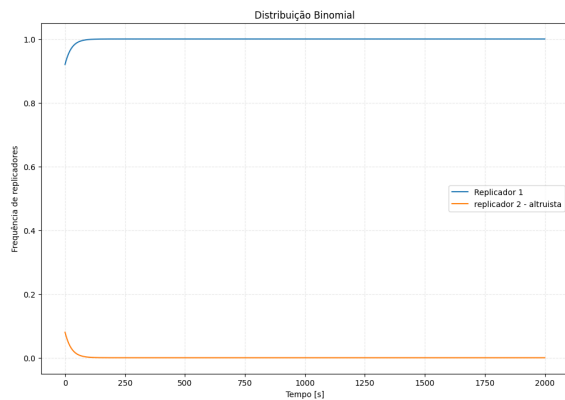


Figura 2: Binomial Distribution: condition

$$kB < C < kB \left[\frac{1+\gamma N}{1+\gamma} \right]$$

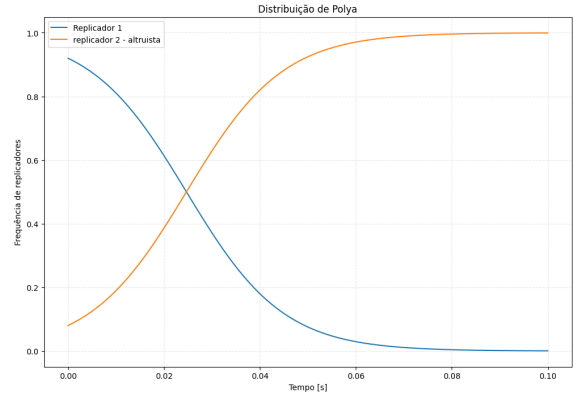


Figura 3: Polya Distribution: condition
 $kB < C < kB \left[\frac{1+\gamma N}{1+\gamma} \right]$

Conclusions

The results obtained indicate that enzymatic action in a self-replicator gives this same self-replicator a significant advantage over other competitors. Furthermore, another significant advantage in the involved dynamics is the choice of a structured population. It is a hypothesis of how the first self-replicator with enzymatic production managed to overcome the barrier of enzymatic generation cost (Figure 1). Moreover, by selecting the Polya distribution as a form of variation, this action was seen to be even more accelerated, and, in addition, a wider range is obtained to offset the cost of enzymatic production (Figures 2 and 3). This means that the replicator that produces the protein 'experiences' the effect of it in larger quantities, potentially providing a solution to the problem of energy cost.

References

- [1] NOWAK, M.A. **Evolutionary dynamics: exploring the equations of life**. New York: Belknap Press, 2006.
- [2] MICHOD, R.E. Population biology of the first replicators: on the origin of the genotype, phenotype and organism. **American Zoologist**, v. 23, n. 1, p. 5-14, 1983.
- [3] FELLER, W. **An introduction to probability theory and its applications**, Wiley (1957–1971)