

<b>Título em Português:</b>	Cooperação e competição na evolução pré-biótica
<b>Título em Inglês:</b>	cooperation and competition in prebiotic evolution
<b>Autor:</b>	Matheus Stefanini Mariano
<b>Instituição:</b>	Universidade de São Paulo
<b>Unidade:</b>	Instituto de Física de São Carlos
<b>Orientador:</b>	Jose Fernando Fontanari
<b>Área de Pesquisa / SubÁrea:</b>	Multidisciplinar
<b>Agência Financiadora:</b>	FAPESP - Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo

## COOPERAÇÃO E COMPETIÇÃO NA EVOLUÇÃO PRÉ-BIÓTICA

**Matheus Stefanini Mariano**

**José Fernando Fontanari**

Instituto de Física de São Carlos / Universidade de São Paulo

matheussmariano@usp.br

### Objetivos

Visto que moléculas tiveram que cooperar entre si para formar sistemas mais complexos, objetiva-se entender como a cooperação foi introduzida na evolução molecular em um contexto pré-biótico. Para isso, será estudada a competição entre populações finitas de replicadores não cooperativos e cooperativos. A partir das equações que descrevem a evolução dessas populações, serão feitos estudos analíticos e simulações computacionais para se explorar as consequências da presença da cooperação na forma de replicação dos replicadores.

### Métodos e Procedimentos

A evolução temporal das populações de replicadores é descrita por equações diferenciais. Encontra-se os pontos fixos e as condições para a estabilidade local desses pontos. São feitos dois tipos de simulações computacionais para descrever a evolução das populações de replicadores: simulação determinística e estocástica. A simulação determinística é feita a partir da solução numérica das equações diferenciais em questão. Já a simulação estocástica é feita por meio do algoritmo de Gillespie. Os resultados desses dois tipos de simulações são comparados e os seus significados biológicos são avaliados.

### Resultados

Considera-se uma população de replicadores que surgiram primeiro na história evolutiva. Esses replicadores são os mais simples, logo não são cooperativos. Supõe-se que surge um replicador mutante nesta população original e ele é cooperativo. Se esse mutante for capaz de dominar a população original e evitar a invasão de outros replicadores, então a cooperação é evolutivamente viável, pois a diferença entre o replicador original e o mutante é a presença da cooperação.

Toma-se que a população 1 corresponde à população original de replicadores não cooperativos e a população 2 corresponde à população mutante de replicadores cooperativos. As equações que descrevem a evolução temporal dessas populações de replicadores são

$$\frac{dX_1}{dt} = X_1(r_1 + b_1X_2 - \psi), \quad (1)$$

$$\frac{dX_2}{dt} = X_2((r_2 - C) + b_2X_2 - \psi), \quad (2)$$

em que  $X_i$  é o número de replicadores da população  $i$ ,  $r_i$  é a taxa de crescimento da população  $i$ ,  $C$  é o custo de catalisar a replicação de outros replicadores e  $b_i$  é a taxa de catalisação da replicação do replicador  $i$ .

O termo  $\psi$  é o vínculo entre as duas equações e é o que introduz a competição entre as duas populações. Ele é obtido a partir da condição de

população constante  $X_1 + X_2 = X_T$ , em que  $X_T$  é a população total, e é dado por

$$\psi = \frac{r_1 X_1 + (r_2 - C) X_2 + b_1 X_1 X_2 + b_2 X_2^2}{X_T}. \quad (3)$$

A suposição de população constante pode ser justificada pela hipótese de que, no contexto pré-biótico, os replicadores surgiram em ambientes repletos de recursos necessários para a manutenção da vida (como por exemplo fendas de rochas nas profundezas quentes dos oceanos primitivos), os quais conseguiam comportar uma quantidade limitada de replicadores.

A equação (1) possui o termo  $b_1 X_2$  pois se considera que, quando os replicadores cooperativos surgiram, os seus mecanismos de catálise ainda não eram muito precisos, de tal forma que eles podiam catalisar a replicação de replicadores não cooperativos com os quais eles estavam competindo.

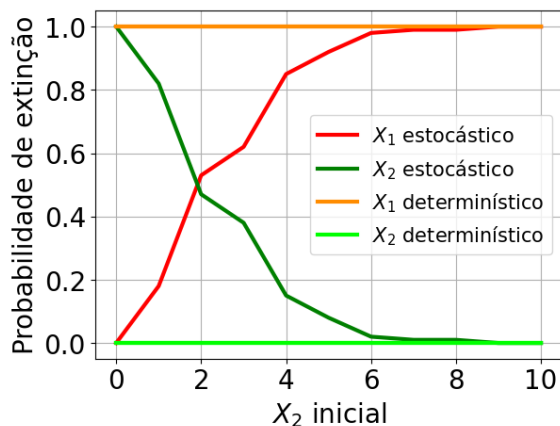


Figura 1: Diagrama de bifurcação da probabilidade de extinção em função da população inicial de replicadores mutantes cooperativos. Os outros parâmetros são  $r_1 = r_2 = 1$ ,  $B_1 = 1$ ,  $B_2 = 2$ ,  $C = 0.5$ ,  $X_T = 10$ .

As curvas determinísticas indicam que a população inicial de replicadores mutantes cooperativos não influencia a probabilidade de extinção das populações de replicadores. Todavia, as curvas estocásticas mostram que a probabilidade de extinção depende da população inicial, mas não depende da razão entre  $X_2$  inicial e  $X_T$ , uma vez que, para outros

valores de  $X_T$ , a intersecção entre essas curvas ocorre em um valor de  $X_2$  inicial igual a 2 e a probabilidade de extinção da população 2 vai para 0 quando  $X_2$  inicial é igual a 10.

## Conclusões

Concluiu-se que a finitude populacional apresenta um desafio adicional à evolução da cooperação, mas, independentemente do tamanho total da população, apenas dois replicadores cooperativos iniciais são suficientes para reduzir a probabilidade de extinção para menos de 50%. Isso sugere que replicadores mutantes cooperativos conseguiram prevalecer sobre os não cooperativos, introduzindo a cooperação na evolução molecular.

## Agradecimentos

Agradecemos à FAPESP pelo apoio financeiro.

## Referências

- [1] MICHOD, R. E. Population biology of the first replicators: On the origin of the genotype, phenotype and organism. American Zoologist, Oxford University Press (OUP), v. 23, n. 1, p. 5–14, 1983.
- [2] GILLESPIE, D. T. A general method for numerically simulating the stochastic time evolution of coupled chemical reactions. Journal of Computational Physics, v. 22, n. 4, p. 403–434, 1976.
- [3] GILLESPIE, D. T. Exact stochastic simulation of coupled chemical reactions. The Journal of Physical Chemistry, v. 81, n. 25, p. 2340–2361, 1977.

## COOPERATION AND COMPETITION IN PREBIOTIC EVOLUTION

**Matheus Stefanini Mariano**

**José Fernando Fontanari**

São Carlos Institute of Physics / University of São Paulo

matheussmariano@usp.br

### Objectives

Since molecules had to cooperate with each other to form more complex systems, the aim is to understand how cooperation was introduced into molecular evolution in a pre-biotic context. For this, the competition between finite populations of non-cooperative and cooperative replicators will be studied. Based on the equations that describe the evolution of these populations, analytical studies and computational simulations will be carried out to explore the consequences of the presence of cooperation in the replicator replication.

### Materials and Methods

The temporal evolution of replicator populations is described by differential equations. The fixed points and the conditions for the local stability of these points are found. Two types of computer simulations are carried out to describe the evolution of replicator populations: deterministic and stochastic simulation. The deterministic simulation is carried out based on the numerical solution of the differential equations studied. The stochastic simulation is done using Gillespie's algorithm. The results of these two types of simulations are compared and their biological meaning is evaluated.

### Results

It is considered a population of replicators that arose first in evolutionary history. These replicators are the simplest, so they are not cooperative. It is assumed that a mutated replicator arises in this original population and it is cooperative. If this mutant can dominate the original population and prevent the invasion of other replicators, then cooperation is evolutionarily viable, since the difference between the original replicator and the mutant is the presence of cooperation.

We assume that population 1 corresponds to the original population of non-cooperative replicators and population 2 corresponds to the mutant population of cooperative replicators. The equations that describe the temporal evolution of these replicator populations are

$$\frac{dX_1}{dt} = X_1(r_1 + b_1X_2 - \psi), \quad (1)$$

$$\frac{dX_2}{dt} = X_2((r_2 - C) + b_2X_2 - \psi), \quad (2)$$

where  $X_i$  is the number of replicators of population  $i$ ,  $r_i$  is the growth rate of population  $i$ ,  $C$  is the cost of catalyzing the replication of other replicators and  $b_i$  is the rate of catalyzing the replication of replicator  $i$ .

The  $\psi$  term is the link between the two equations and is what introduces competition between the two populations. It is obtained from the constant population condition  $X_1 + X_2 = X_T$ , where  $X_T$  is the total population, and is given by

$$\psi = \frac{r_1 X_1 + (r_2 - C) X_2 + b_1 X_1 X_2 + b_2 X_2^2}{X_T}. \quad (3)$$

The assumption of constant population can be justified by the hypothesis that, in the prebiotic context, replicators emerged in environments full of resources necessary for the maintenance of life (such as rock crevices in the warm depths of primitive oceans), which were able to accommodate a limited number of replicators.

Equation (1) has the term  $b_1 X_2$  because it is considered that, when cooperative replicators appeared, their catalysis mechanisms were still not very precise, in such a way that they could catalyze the replication of non-cooperative replicators with which they were competing.

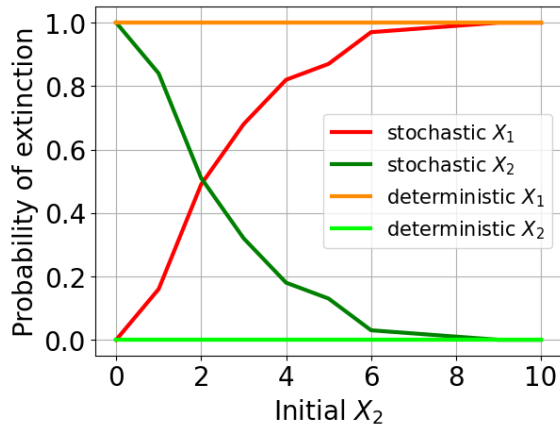


Figure 1: Bifurcation diagram of the probability of extinction as a function of the initial population of cooperative mutant replicators. The other parameters are  $r_1 = r_2 = 1$ ,  $B_1 = 1$ ,  $B_2 = 2$ ,  $C = 0.5$ ,  $X_T = 10$ .

The deterministic curves indicate that the initial population of cooperative mutant replicators does not influence the probability of extinction of the replicator populations. However, the stochastic curves show that the probability of extinction depends on the initial population, but does not depend on the ratio between initial  $X_2$  and  $X_T$ , since, for other values of  $X_T$ , the intersection between these curves occurs at a value of initial  $X_2$  equal to 2 and the extinction probability of population 2 goes to 0 when initial  $X_2$  equals 10.

## Conclusions

It was concluded that population finitude presents an additional challenge to the evolution of cooperation, but, regardless of the total population size, only two initial cooperative replicators are enough to reduce the probability of extinction to less than 50%. This suggests that cooperative mutant replicators managed to prevail over non-cooperative ones, introducing cooperation into molecular evolution.

## Acknowledgements

We thank FAPESP for the financial support.

## References

- [1] MICHOD, R. E. Population biology of the first replicators: On the origin of the genotype, phenotype and organism. *American Zoologist*, Oxford University Press (OUP), v. 23, n. 1, p. 5–14, 1983.
- [2] GILLESPIE, D. T. A general method for numerically simulating the stochastic time evolution of coupled chemical reactions. *Journal of Computational Physics*, v. 22, n. 4, p. 403–434, 1976.
- [3] GILLESPIE, D. T. Exact stochastic simulation of coupled chemical reactions. *The Journal of Physical Chemistry*, v. 81, n. 25, p. 2340–2361, 1977.