

Universidade de São Paulo  
Instituto de Física de São Carlos

**O estudo de mapas equivariantes sob a  
ação do grupo octaédrico: Um sistema  
dinâmico para a evolução do código  
genético.**

Marcio Magini

Tese apresentada ao Instituto de  
Física de São Carlos, da  
Universidade de São Paulo, para a  
obtenção do título de **Doutor** em  
Ciências: **Física Básica**.

ok  
USP/IFSC/SBI



8-2-001457

Orientador: Prof. Dr. José Eduardo Martinho Hornos

São Carlos – 2002

## **FICHA CATALOGRÁFICA**

---

**Magini, Marcio**

**O estudo de mapas equivariantes sob  
a ação do grupo octaédrico: Um  
sistema dinâmico para a evolução do  
código genético.**

**São Carlos, 2002.**

129 p.

Tese (Doutorado) - Instituto de Física de São Carlos,  
2002.

Orientador: Prof. Dr. José E. Martinho Hornos

1. Sistemas Dinâmicos. 2. Evolução. 3. Código  
Genético. I. Título.



**MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE  
MARCIO MAGINI, APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO  
CARLOS, UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 10-06-2002.**

## **COMISSÃO JULGADORA:**

Prof. Dr. José Eduardo Martinho Hornos (Orientador e Presidente) – IFSC -USP

Prof. Dra. Maisa de Oliveira Terra – ITA

Prof. Dr. Francisco Gorgônio da Nóbrega – UNIVAP

Prof. Dr. Júnior Barrera – IME-USP

Prof. Dr. Esmerindo de Sousa Bernardes – IFSC-USP

Dedico este trabalho à minha esposa Maira,  
que em sua grandiosidade me deu tudo  
que um homem precisa para ser feliz e  
com isso realizar o seu melhor.

---

## **AGRADECIMENTOS**

---

Ao meu orientador Prof. Dr. José Eduardo Martinho Hornos que acreditou no meu potencial desde o começo me dando total apoio.

Aos membros da banca Professores Doutores Nóbrega, Esmerindo, Júnior e Maisa pelas discussões e críticas tornando este trabalho ímpar.

A Fundação de Ampara à Pesquisa do Estado de São Paulo pelo suporte financeiro.

Ao Prof. Dr. Michel Forger que junto com o Professor Hornos me incentivou em toda essa caminhada e muito me ensinou.

Ao Prof. Dr. Martin Golubitsky (Universidade de Houston) por seu tempo e pelas discussões durante minha estada em Houston.

Ao amigo Hélio Rodrigues pelas discussões filosóficas ao fim do dia e pelo companheirismo.

Ao pessoal do grupo Marcel, Lígia e Emanuel por tudo aquilo que vivemos juntos e pelo espírito de grupo sempre presente.

A minha mãe Yara, que mesmo longe sempre esteve ao meu lado.

# Conteúdo

0.1	Resumo . . . . .	7
0.2	Abstract . . . . .	8
<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>9</b>
<b>2</b>	<b>Grupos</b>	<b>17</b>
2.1	Grupos: Definições . . . . .	17
2.2	Representações . . . . .	26
2.3	Grupos Contínuos . . . . .	33
2.4	Álgebras de Lie . . . . .	40
<b>3</b>	<b>Código Genético e Teoria de Grupos</b>	<b>50</b>
3.1	Aminoácidos e Pesos . . . . .	55
3.2	Quebra de Simetria no Diagrama de Pesos . . . . .	59
3.3	Aminoácidos e Código de Terminação - Diagrama de Pesos do $sp(6)$ . . . . .	65
<b>4</b>	<b>Construção de Mapas com Simetria</b>	<b>72</b>
4.1	Construção do Equivariantes . . . . .	76
4.2	Construção dos Invariantes . . . . .	84
4.3	Mapa: Forma Geral . . . . .	92
4.4	Estudo das Bifurcações . . . . .	97
4.5	Natureza das Bifurcações . . . . .	111
<b>5</b>	<b>A ação no Espaço dos Códonos</b>	<b>115</b>

5.1	As condições iniciais . . . . .	119
5.2	Regiões de Atração: Simetria Quiral . . . . .	119
5.3	Regiões de Atração com Simetria Diedral . . . . .	121
5.4	Sistema Dinâmico e o Modelo Algébrico . . . . .	125
5.5	Conclusões . . . . .	127

# Lista de Figuras

1.1	Identidade preservada, o objeto só não varia quando multiplicado por 1. . . .	12
1.2	Reflexão e identidade preservados, simetria $Z_2$ . Simetria com maior número de elementos que a anterior. . . . .	12
1.3	Simetria de <i>Klein</i> , quatro operações de invariância. . . . .	13
1.4	Simetria total ou seja, rotações de $\frac{n\pi}{6}$ deixam o objeto invariante, assim como reflexões em torno de $x = 0$ e $y = 0$ . . . . .	14
2.1	Quadrado, ação do grupo de permutação, onde os números representam não só os eixos como as permutações de invariância. . . . .	20
2.2	Atuação das permutações, operação de multiplicação em um grupo de simetria onde a invariância triangular é preservada. . . . .	22
2.3	Regras de ramificação dos grupos cristalográficos onde o grupo de partida é o $O_h$ , de maior simetria. . . . .	24
3.1	Esquema do processo de síntese de proteínas. . . . .	51
3.2	Aminoácidos e códons responsáveis por sua codificação e seu número total de códons por aminoácido. . . . .	52
3.3	Cadeia de ramificação da representação $(2, 1, 0)$ do $Sp(6)$ , sentido evolutivo ao código genético. Uma estrutura primordial é “quebrada” em subestruturas. . . . .	54
3.4	Processo de quebra de simetria da álgebra $sp(6)$ em suas subálgebras. As dimensões se relacionam de 1 para 1 com a degenerescência do código. . . . .	55
3.5	Códons e seus aminoácidos conforme a mudança de posição das bases. . . . .	56
3.6	Diagrama de pesos da representação $(2,1,0)$ do $Sp(6)$ , simetria total. . . . .	60



3.7	Conexão entre a simetria octaédrica via permutação do índices 1,2,3,4,5 e 6 no diagrama. . . . .	61
3.8	Primeira quebra de simetria. . . . .	62
3.9	Segunda quebra de simetria. . . . .	63
3.10	Quarta quebra de simetria. . . . .	65
3.11	Plano $z = 0$ do diagrama de Weyl. . . . .	66
3.12	Aminoácidos e seus respectivos códons para $z = 0$ . . . . .	67
3.13	Plano $z = -1$ do diagrama de Weyl. . . . .	68
3.14	Aminoácidos e seus respectivos códons para $z = -1$ . . . . .	68
3.15	Plano $z = 1$ do diagrama de Weyl. . . . .	69
3.16	Aminoácidos e seus respectivos códons para $z = 1$ . . . . .	70
3.17	Plano $z = 2$ do diagrama de Weyl. . . . .	70
3.18	Aminoácidos e seus respectivos códons para $z = 2$ . . . . .	71
3.19	Aminoácidos e seus respectivos códons para $z = -2$ . . . . .	71
4.1	Simetria Octaédrica - Atrator I. . . . .	84
4.2	Simetria Octaédrica - Atrator II. . . . .	84
4.3	Simetria Octaédrica - Atrator III. . . . .	85
4.4	Conjunto dos pontos fixos para $\delta = 1, \sigma = -0.7, \varphi = -0.8$ e $\lambda = -1.440$ . . . . .	103
4.5	Corte $z = 0$ no conjunto de pontos fixos para $\lambda = -1.440$ . . . . .	103
4.6	Corte $x = 0$ no conjunto de pontos fixos para $\lambda = -1, 440$ . . . . .	104
4.7	Atrator em $\delta = 1, \sigma = -0.7, \varphi = -0.8$ e $\lambda = -1.440$ . . . . .	104
4.8	Bifurcações sob a variação do parâmetro $\lambda$ - componente $f_x$ . . . . .	105
4.9	Bifurcações sob a variação do parâmetro $\lambda$ - componente $f_z$ . . . . .	106
4.10	Corte $x = 0$ no conjunto de pontos fixos para $\lambda = -1.400$ . . . . .	107
4.11	Corte $z = 0$ no conjunto de pontos fixos para $\lambda = -1.400$ . . . . .	107
4.12	Atrator em $\delta = 1, \sigma = -0.7, \varphi = -0.8$ e $\lambda = -1.400$ . . . . .	108
4.13	Atrator em $\delta = 1, \sigma = -0.7, \varphi = -0.8$ e $\lambda = -1.354$ . . . . .	109
4.14	Atrator em $\delta = 1, \sigma = -0.7, \varphi = -0.8$ e $\lambda = -1.332$ . . . . .	111

4.15	Esquema de órbita harmônica para o ponto fixo hiperbólico. . . . .	113
5.1	Quebra da representação de dimensão 16 - Um aminoácido primordial dá origem a 4 aminoácidos que são “quebrados” nos 5 aminoácidos contemporâneos.	116
5.2	Órbita para $\lambda = -1.440$ com a condição inicial no ponto do tipo $(0, \pm 2, \pm 1)$ e $(0, \pm 1, \pm 2)$ . . . . .	120
5.3	Representação das órbitas geradas pelos códonos como condição inicial dos aminoácidos Cys, Tyr e Leu para $\lambda = -1.354$ . . . . .	121
5.4	Quebra final com o grupo $Z_2$ como simetria preservada. Separação dos aminoácidos Cys e Tyr em grupos de atratores distintos. . . . .	122

# Lista de Tabelas

1.1	Tabela de Multiplicação do grupo $D_6$ , 6 primeiras colunas. . . . .	15
1.2	Tabela de Multiplicação do grupo $D_6$ , 6 últimas colunas. . . . .	16
2.1	Tabela de caracteres do grupo $O$ . . . . .	29
2.2	Tabela de caracteres - geral. . . . .	32
2.3	Representações Irredutíveis do $Sp(n)$ . . . . .	41
3.1	Rotulação dos códons conforme os pesos da representação. . . . .	58
4.1	Relação dos parâmetros. . . . .	91
4.2	Diferença entre pontos fixos para $\lambda = -1, 440$ e $\lambda = -1, 354$ . . . . .	109
4.3	Diferença entre pontos fixos para $\lambda = -1, 440$ e $\lambda = -1, 332$ . . . . .	109
4.4	Autovalores da Matriz (4.75) em $\lambda = -1, 440$ . . . . .	113
5.1	Conexão entre os códons via ação da dinâmica no ponto $(1, 1, 1)$ e suas permutações de sinal e posição. . . . .	118
5.2	Conexão entre os códons via ação da dinâmica no ponto $(1, 0, 0)$ e suas permutações de sinal e posição. . . . .	118
5.3	Códons que pertecem à uma mesma órbita: condição inicial do tipo $(0, \pm 1, \pm 2)$ e $(0, \pm 2, \pm 1)$ gerando o mesmo atrator. . . . .	120

## 0.1 Resumo

O estudo dos processos quebra espontânea de simetria na natureza têm atraído interesse em diversas áreas da física, como por exemplo em física quântica no estudo das energias de um átomo tal como em física de altas energias, no estudo das partículas elementares. Esses processos até então envolviam sistemas físicos microscópicos, em 1993 surge uma proposta de agregar as idéias de quebra de simetria à um sistema macroscópico, o código genético. A idéia básica é que os códons que formam código se diferenciam em um processo de quebra de simetria, preservando suas propriedades de degenerescência, nos dando uma “picture” de como se fez essa diferenciação que resultam nos 20 aminoácidos e do sinal de terminação que se conhece nos dias atuais. Esse modelo nos diz por exemplo, quantos eram os aminoácidos primordiais. Nosso interesse está na verificação dessa quebra de simetria e estudar as relações entre os códons do ponto de vista temporal para tanto, usamos aqui um sistema dinâmico. Esse sistema conserva no princípio de sua evolução a simetria proposta pelo modelo e através de um processo de quebra de simetria estudaremos se esse processo reproduz a cadeia de quebra de simetria proposta no modelo. Como primeiro passo estudamos a representação tridimensional do grupo  $Sp(6)$ , que serve como ponto de partida no processo de quebra de simetria no modelo, essa representação é conhecida como grupo de *Weyl* do  $Sp(6)$ . É possível construir um sistema dinâmico ou mapa, que na verdade é uma função do  $\mathbb{R}^3$ , com as mesmas propriedades de simetria do grupo de *Weyl* do  $Sp(6)$ . A construção desse sistema e seu estudo matemático acarreta no segundo passo deste trabalho. O mapa construído depende de parâmetros que variados de forma correta produzem uma cadeia de quebra de simetria. O estudo dessa quebras consiste no terceiro passo deste trabalho. Por fim determinamos a ação ou seja, como esse sistema muda a rotulação dos códons anteriormente proposta no modelo e mais ainda, que informação biológica poderá ser extraída desse sistema. Como resultado obtivemos em grande parte a ratificação do modelo proposto mostrando que a quebra proposta e a rotulação dos códons de acordo com a ordem evolutiva dada pela quebra de simetria segue também uma coerência dinâmica.

## 0.2 Abstract

The study of natural symmetry breaking processes have attracted interest in many physics areas including energy atoms studies in quantum physics as well elementary particles in high energy physics. These processes were related with microscopics physic systems, in 1993 appears one propose to use the ideas of symmetry breaking in one macroscopic system the genetic code. The basic idea is that the differentiation of the codons wich are components of the code was done in a process of symmetry breaking preserving the degeneracy properties given to us one picture of how this process occur resulting in 20 aminoacids and termination sign known in the present days. With this model for example, we can predict how many aminoacids were primordial's. Our interest is in verify this symmetry breaking and study the codon temporal relations for this we use a dynamical system. The preservation of the starting symmetry proposed by the model is the main characteristic of our system and through of the symmetry breaking we will study what relations between the symetry breaking proposed by the model and the dynamical symmetry breaking. As a first step we will study the group  $Sp(6)$  in its tridimensional representation which is the starting point in the symmetry breaking process in the model. This representation in known as *Weyl* group of  $Sp(6)$ . It is possible construct this dynamical system or map, which is one function in the  $\mathfrak{R}^3$ , with the same symmetry properties of the *Weyl* group of  $Sp(6)$ . The construction of this map and its mathematical study is our second step of this work. The map depends on parameter's which are changed in a correct way to produce some symmetry breaking chain. The symmetry breaking studies is our third step. At the end we look at the action of our map in the codons, in other words, how this action change the codons labelling proposed by the model. Moreover, what kind of biological information can be extract from this action. As a result the symmetry breaking and the labelling of codons proposed by the model are isomophics, with little restrictions, when compared with the dynamical systems.

# Capítulo 1

## Introdução

Em 1993 foi construído um modelo [1, 2] que mostrava como os códons que compõem o código genético e são responsáveis pela informação que designam os aminoácidos que por sua vez participam no processo de síntese de proteína imprescindível para a produção da vida, se diferenciavam em um processo de quebra de simetria, mais especificamente através de um processo onde as simetrias são diminuídas gerando subsimetrias que se correlacionam com os 64 códons que encontramos no código genético padrão ao fim de todo o processo. O códon é a seqüência de três bases das quatro que constituem o DNA por exemplo, o códon AGA é o responsável pela designação do aminoácido Arginina. No capítulo 3 entraremos em detalhes sobre os aspectos biológicos relevantes ao modelo. Alguns trabalhos já correlacionados com o modelo foram produzidos mostrando sua coerência matemática [3, 4]. Até então o uso desse tipo de aproximação era restrito à matéria inanimada mais especificamente as Teorias de Gauge como em física de altas energias e partículas elementares.

No primeiro caso a simetria é uma característica selecionada pelo processo evolutivo através da observação das degenerescências do código padrão. No segundo caso existe uma Lagrangiana [5] (equação) que porta a simetria em questão, proporcionando uma dinâmica descrita por equações parciais não lineares. As aplicações biológicas são desta maneira obstruídas pela ausência de um sistema dinâmico ou seja, um sistema que nos dê como resultado um sentido temporal dessa quebra de simetria que permita uma quantificação mais abrangente do processo evolutivo do código. Essa é a questão permanente na linha de nosso

horizonte. As simetrias envolvidas no modelo são de certa forma complexas para que se possa construir um modelo dinâmico mas esse trabalho consiste em uma prática formidável. Existem duas opções de construção desse tipo de sistema: um é através de um mapa ou seja, uma função que contenha as características desse sistema ou, através das equações diferenciais que representam o sistema contínuo. As características que importam em ambos os casos são a simetria e a degenescência do modelo proposto, as simetrias são facilmente reproduzidas por princípios matemáticos bem determinados como os princípios de equivariância e invariância que posteriormente explicitaremos.

Em primeiro lugar a construção de equações diferenciais que preservem a simetria contínua relacionada ao modelo que por sua vez esta relacionada com o código genético não é bem definida e se conhece poucos sistemas dinâmicos relacionam equações diferenciais à essas simetrias. Em segundo lugar devemos ter em mente que o grupo que serve como passo inicial no processo de quebra de simetria ou “evolução” está em 6 dimensões possui 21 geradores que atuam em uma representação de dimensão 64, conferindo ao problema enorme complexidade. Decidimos então atacar o problema sob um outro ângulo. Visando acumular experiências e prever alguns aspectos de sua dinâmica voltamos nossa atenção para o espaço dos pesos da representação ou seja, a representação tridimensional do grupo que serve como principal objeto do modelo algébrico. Esse espaço contém informações cruciais sobre a natureza da representação irredutível mais ainda, se encontra em um espaço de dimensão 3 conferindo uma maior simplicidade para o problema.

Foi a partir das simetrias manifestas nesse espaço que chegamos a observação de uma simetria finita ou seja, uma simetria onde o número de operações seja finito por exemplo: as simetrias de um quadrado nos dando um total de oito operações, preservada nos código padrão e mitocondriais que trouxe implicações importantes correlacionadas com o modelo e sua aplicação com a biologia. Como demonstraremos, apesar das simetrias do grupo de *Weyl* não exaurirem a simetria simplética, os aspectos centrais apontados pelo modelo algébrico são contemplados em nosso enfoque. Em particular vamos mostrar como é feita a diferenciação dos códons a partir das bifurcações que correspondem às etapas de quebra de simetria do sistema dinâmico com a mesma simetria finita associada ao modelo.

Tecnicamente falando o grupo de *Weyl* de uma álgebra de *Lie* é o grupo de invariância de seus pesos e raízes. No presente caso a álgebra simplética  $Sp(6)$  parte principal do modelo, tem rank 3 e seu grupo de *Weyl* atua no  $R^3$ . O diagrama de raízes forma um octaedro e portanto temos que considerar o grupo  $O_h$  de 48 elementos. Este grupo de simetria também pode ser visto em muitas moléculas como no caso  $SF_6$ . A mesma simetria caracteriza todas as representações irredutíveis. A representação  $(2, 1, 0)$  descreve um octaedro truncado que será mostrado em detalhe. Devido ao fato da simetria estar no  $R^3$  somos levados a construção de difeomorfismos do  $R^3$  equivariantes sob a ação do grupo octaédrico.

O passo seguinte consiste em propagar, dinamicamente, os pesos pela iteração do difeomorfismo. O modelo algébrico identifica os vetores de base da representação aos códons e portanto os pesos também são a eles identificados. A partir de um códon, identificamos um único vetor da representação e a partir dele um único peso, na forma de uma terna ordenada. Entretanto a recíproca não é verdadeira. Existem vários códons que possuem o mesmo peso isto é, são representados pelo mesmo ponto no diagrama de *Weyl*. Essa degenerescência matemática, que nada tem a ver com a degenerescência do código genético, se constitui na principal limitação de nosso procedimento. E a partir desses vetores que se estudará a ação de nosso difeomorfismo.

Um melhor entendimento do problema começa com os estudos de mapas com simetria disponíveis na literaturas. Um exemplo pode ser visto no caso de mapas com simetrias diedrais ou seja, funções que preservam as simetrias dos polígonos regulares. O estudo de mapas bidimensionais já foi explorado em diversas aplicações por vários autores [6, 7, 8, 9]. Esses trabalhos focaram a quebra de simetria sob a variação de um parâmetro de controle, em geral chamado de *parâmetro de bifurcação*, e o estudo da evolução dessa dinâmica via a variação dos parâmetros responsáveis pelo controle da simetria vinculada ao sistema. Esse vínculo é estabelecido via uma definição matemática, definição essa que posteriormente será mostrada.

Como um exemplo podemos ver o resultado obtido para o caso da simetria  $D_6$  [8]. Essa simetria corresponde às operações de invariância do hexágono como por exemplo rotações de  $60^\circ$ . O incremento de simetria pode ser verificado através das figuras (1.1),(1.2),(1.3) e



(1.4). A riqueza da dinâmica está vinculada à quebra espontânea de simetria, já que basta variar um parâmetro para obter um conjunto de simetrias de um dado mapa que é sempre iterado com as mesmas condições iniciais e com o mesmo número de iterações.

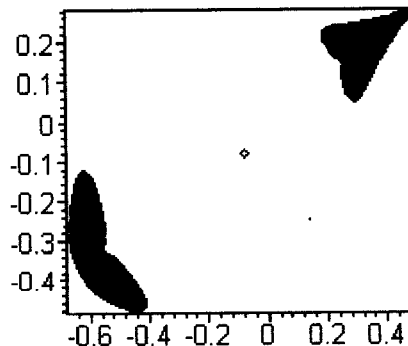


Figura 1.1: Identidade preservada, o objeto só não varia quando multiplicado por 1.

A figura (1.1) tem como simetria preservada a identidade, isto significa que não existe operação de simetria que deixe o objeto invariante a não ser a trivial.

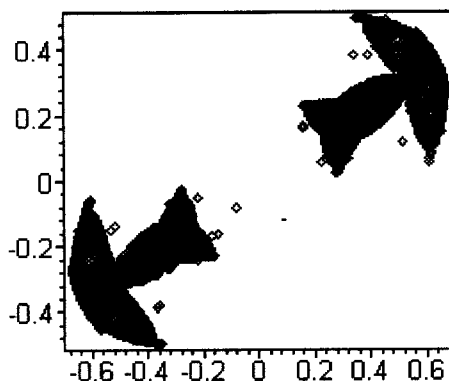


Figura 1.2: Reflexão e identidade preservados, simetria  $Z_2$ . Simetria com maior número de elementos que a anterior.

No caso dado pela figura (1.2) temos o incremento da simetria para a simetria  $Z_2$ . Significa que além da identidade temos uma rotação de  $180^\circ$  preservando a simetria da figura.

A análise das condições de simetria é feita com o elemento de simetria atuando em cada ponto do atrator, no caso dado pela figura (1.2) podemos notar que a simetria de reflexão em

torno do eixo real (conjugação) não existe. O atrator muda de posição no plano complexo se esta operação for executada. A rotação na qual a simetria é preservada existe na diagonal do quadrado que corta o atrator ao meio. Continuando o estudo da relação do parâmetro com a simetria teremos como resultado o grupo *Klein* e seu atrator dado pela figura (1.3).

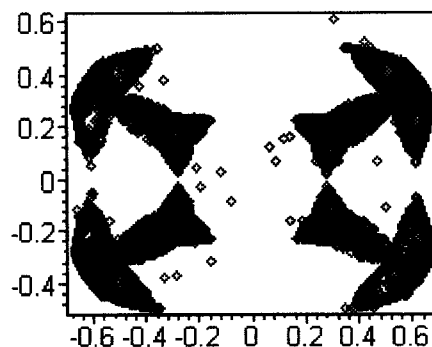


Figura 1.3: Simetria de *Klein*, quatro operações de invariância.

O grupo de *Klein* se caracteriza por ter 4 operações de simetria onde cada operação quadrada nos dá como resultado a identidade, característica que define o grupo de *Klein*. Este grupo também está presente no estudo das simetrias do código genético padrão como posteriormente veremos além do mais, este grupo de simetria determina regras no modelo evolutivo do código genético [11].

Na análise final temos a simetria  $D_6$  recuperada, figura (1.4). O atrator produzido é invariante sob a ação dos elementos do grupo  $D_6$ . Todas as 12 operações de simetria do grupo deixam o atrator invariante ou seja, os pontos da dinâmica gerados pela iteração do difeomorfismo não mudam de posição sob a ação dos elementos do grupo.

A partir desta análise é possível gerar uma cadeia de quebra espontânea de simetria dada por (1.1). O intuito aqui é justamente criar uma cadeia de quebra de simetria dinâmica que esteja vinculada ao modelo algébrico para o código genético. Onde começaremos de uma simetria primordial e através de quebras sucessivas geraremos as subsimetrias que corresponderão à evolução temporal dos códons.

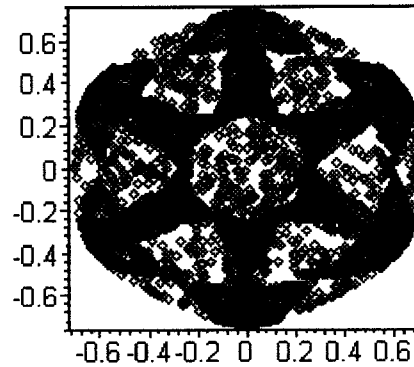


Figura 1.4: Simetria total ou seja, rotações de  $\frac{n\pi}{6}$  deixam o objeto invariante, assim como reflexões em torno de  $x = 0$  e  $y = 0$ .

$$D_6 \supset Klein \supset Z_2 \supset e. \quad (1.1)$$

As operações de simetria que caracterizam cada subgrupo gerado a partir da variação do parâmetro pode ser verificada através das tabelas.(1.1) e (1.2) de multiplicação do grupo  $D_6$ . A tabela foi dividida em duas partes devido ao seu tamanho, note que a primeira coluna nas tabelas. (1.1) e (1.2) é repetida afim de facilitar seu entendimento.

Na tabela de multiplicação do grupo  $D_6$  podemos identificar, em termos das operações de simetria, os subgrupos de simetria dos atratores dados pelas figuras (1.1),(1.2),(1.3) e (1.4). Para o primeiro atrator o grupo é dado por  $\{e\}$ , já no segundo caso temos o grupo  $Z_2$  dado por  $\{e, f_1^3\}$ , o grupo de *Klein* é dado por  $\{e, f_1^3, \sigma, \sigma f_1^3\}$ , note que segundo a tabela de multiplicação cada elemento quadrado neste grupo nos dá a identidade como resultado. Por fim temos o grupo  $D_6$  completo como grupo de invariância. Os elementos operam da seguinte maneira:  $\sigma z = \bar{z}$  e  $f_1^n(z) = e^{\frac{2\pi i}{n}} z$  que significam uma operação de conjugação e operações de rotações no plano complexo, respectivamente.

Neste contexto a quebra espontânea de simetria escolheu um único caminho, apesar da existência de outras possibilidades de quebras de simetria. Notem que quebra de simetria significa diminuição da simetria anterior em um subsimetria, uma simetria mais restrita com menos operações de invariância. Sob o ponto de vista global ou seja, somente pela análise dos

-	$e$	$f_1$	$f_1^2$	$f_1^3$	$f_1^4$	$f_1^5$
$e$	$e$	$f_1$	$f_1^2$	$f_1^3$	$f_1^4$	$f_1^5$
$f_1$	$f_1$	$f_1^2$	$f_1^3$	$f_1^4$	$f_1^5$	$e$
$f_1^2$	$f_1^2$	$f_1^3$	$f_1^4$	$f_1^5$	$e$	$f_1$
$f_1^3$	$f_1^3$	$f_1^4$	$f_1^5$	$e$	$f_1$	$f_1^2$
$f_1^4$	$f_1^4$	$f_1^5$	$e$	$f_1$	$f_1^2$	$f_1^3$
$f_1^5$	$f_1^5$	$e$	$f_1$	$f_1^2$	$f_1^3$	$f_1^4$
$\sigma$	$\sigma$	$\sigma f_1$	$\sigma f_1^2$	$\sigma f_1^3$	$f_1^2 \sigma$	$f_1 \sigma$
$\sigma f_1$	$\sigma f_1$	$\sigma f_1^2$	$\sigma f_1^3$	$f_1^2 \sigma$	$f_1 \sigma$	$\sigma$
$\sigma f_1^2$	$\sigma f_1^2$	$\sigma f_1^3$	$f_1^2 \sigma$	$f_1 \sigma$	$\sigma$	$\sigma f_1$
$\sigma f_1^3$	$\sigma f_1^3$	$f_1^2 \sigma$	$f_1 \sigma$	$\sigma$	$\sigma f_1$	$\sigma f_1^2$
$f_1 \sigma$	$f_1 \sigma$	$\sigma$	$\sigma f_1$	$\sigma f_1^2$	$\sigma f_1^3$	$f_1^2 \sigma$
$f_1^2 \sigma$	$f_1^2 \sigma$	$f_1 \sigma$	$\sigma$	$\sigma f_1$	$\sigma f_1^2$	$\sigma f_1^3$

Tabela 1.1: Tabela de Multiplicação do grupo  $D_6$ , 6 primeiras colunas.

atratores essa foi a única quebra verificada. Notando esse comportamento, aqui relacionaremos as simetrias relacionadas ao modelo com uma função que preserve essas propriedades e através da variação dos parâmetros intrínsecos dessa função produziremos uma quebra de simetria semelhante à quebra vista anteriormente para o caso do grupo  $D_6$ . No nosso caso a simetria é mais complexa possuindo 48 elementos que se encontram no espaço de dimensão 3.

Usando a idéia que o modelo algébrico para código genético possui uma simetria finita vinculada e que é possível construir uma dinâmica que reproduz essa simetria podemos então tentar observar a quebra ou evolução desse sistema. Um ponto importante que será mostrado aqui é a ação do mapa, dessa função, no espaço dos códons e suas implicações para o modelo algébrico.

Esta tese está dividida em 5 capítulos onde no Capítulo 2 faremos uma discussão sobre alguns aspectos técnicos de Teoria de Grupos e abordaremos os conceitos necessários para o entendimento das idéias usadas no modelo algébrico para o código genético. O Capítulo 3 descreve o modelo algébrico e seus aspectos de simetria. Também neste capítulo estudaremos

-	$\sigma$	$\sigma f_1$	$\sigma f_1^2$	$\sigma f_1^3$	$f_1\sigma$	$f_1^2\sigma$
$e$	$\sigma$	$\sigma f_1$	$\sigma f_1^2$	$\sigma f_1^3$	$f_1\sigma$	$f_1^2\sigma$
$f_1$	$f_1\sigma$	$\sigma$	$\sigma f_1$	$\sigma f_1^2$	$f_1^2\sigma$	$\sigma f_1^3$
$f_1^2$	$f_1^2\sigma$	$f_1\sigma$	$\sigma$	$\sigma f_1$	$\sigma f_1^3$	$\sigma f_1^2$
$f_1^3$	$\sigma f_1^3$	$f_1^2\sigma$	$f_1\sigma$	$\sigma$	$\sigma f_1^2$	$\sigma f_1$
$f_1^4$	$\sigma f_1^2$	$\sigma f_1^3$	$f_1^2\sigma$	$f_1\sigma$	$\sigma f_1$	$\sigma$
$f_1^5$	$\sigma f_1$	$\sigma f_1^2$	$\sigma f_1^3$	$f_1^2\sigma$	$\sigma$	$f_1\sigma$
$\sigma$	$e$	$f_1$	$f_1^2$	$f_1^3$	$f_1^5$	$f_1^4$
$\sigma f_1$	$f_1^5$	$e$	$f_1$	$f_1^2$	$f_1^4$	$f_1^3$
$\sigma f_1^2$	$f_1^4$	$f_1^5$	$e$	$f_1$	$f_1^3$	$f_1^2$
$\sigma f_1^3$	$f_1^3$	$f_1^4$	$f_1^5$	$e$	$f_1^2$	$f_1$
$f_1\sigma$	$f_1$	$f_1^2$	$f_1^3$	$f_1^4$	$e$	$f_1^5$
$f_1^2\sigma$	$f_1^2$	$f_1^3$	$f_1^4$	$f_1^5$	$f_1$	$e$

Tabela 1.2: Tabela de Multiplicação do grupo  $D_6$ , 6 últimas colunas.

as simetrias finitas preservadas pelo grupo de Weyl do  $Sp(6)$ . No Capítulo 4 mostraremos como é feita a construção dos mapas a partir da representação matricial do grupo  $O_h$ . No Capítulo 5 discutiremos os aspectos da dinâmica assim como o estudo da quebra dinâmica de simetria, pontos fixos e estabilidade do difeomorfismo. No Capítulo 6 estudaremos a ação do nosso mapa no espaço do códons e suas conseqüências para o modelo algébrico. Também neste Capítulo apresentaremos as conclusões do trabalho.

# Capítulo 2

## Grupos

Neste capítulo o nosso interesse se foca em definições e regras matemáticas correlacionadas com os trabalhos [1, 2, 3, 4] os quais usam ferramentas baseadas em Teoria de Grupos. Queremos explicitar e entender alguns conceitos como grupos, principalmente de grupos finitos, já que nosso objeto de estudo está baseado nestes conceitos e também conceitos como representação. Ainda neste capítulo estudaremos os grupos contínuos e álgebras de Lie, mais especificamente a álgebra  $sp(6)$ . Mostraremos como é gerado o grupo de Weyl representação  $(2, 1, 0)$  do  $Sp(6)$ . Os conceitos aqui listados em sua maior parte se encontram em qualquer livro de Teoria de Grupos e em alguns trabalhos, [14, 15, 16].

### 2.1 Grupos: Definições

Para entender o modelo algébrico é necessário primeiramente entender o conceito de grupo, subgrupo e cadeia de quebra de simetria. Assim como entender o que são operações de simetria e como os subgrupos se relacionam com os grupos pela diminuição da simetria.

Seja  $G$  um grupo abstrato com os elementos  $a, b, c, etc$ , como elementos. Podemos definir também uma “multiplicação abstrata”  $(\cdot)$ , que do ponto de vista matemática é perfeitamente aceitável, que age sobre os elementos do grupo  $G$  através de produtos que obedecem as seguintes propriedades:

Definição 2.1.1 *Fechamento*. Sendo  $a$  e  $b \in G$ , então  $a \cdot b \in G$ .

Definição 2.1.2 *Semi-grupo.* A multiplicação é associativa, e defini um semi-grupo em  $G$ , ou seja,  $(a \cdot b) \cdot c = a \cdot (b \cdot c)$ .

Exemplo 2.1.1 *O conjunto dos números pares é um semi-grupo em relação às operações de adição e multiplicação.*

Definição 2.1.3 *Monóide ou Identidade.* Existe um elemento de  $G$  dado por  $e$  tal que,  $e \cdot a = a \cdot e = a$ , onde  $e$  é denominado de identidade  $\forall a \in G$ .

Exemplo 2.1.2 *O conjunto dos números reais forma um monóide em relação a operação de adição, com o zero como identidade, e em relação à multiplicação com a unidade como identidade.*

Definição 2.1.4 *Grupos.* A estrutura de grupo é definida em  $G$  se e somente se, existir uma multiplicação e esta definir em  $G$  uma estrutura monóide e existir um  $a \in G$ , tal que exista  $a^{-1} \in G$  onde,  $a^{-1} \cdot a = a \cdot a^{-1} = e$ ,  $a^{-1}$  é dito ser o inverso de  $a$ .

Exemplo 2.1.3 *O conjunto dos números naturais forma um grupo em relação a adição onde  $x_1$  é um elemento, e  $-x_1$  é o seu inverso com o zero como elemento neutro, como mostrado abaixo,*

$$\star (0, x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) \in R.$$

$$\star x_1 + x_2 \in R \text{ assim como } x_i + x_j \in R.$$

$$\star 0 + x_1 = x_1 \in R \text{ assim como } 0 + x_n = x_n \in R.$$

Estas 4 definições fecham o conceito de grupo, qualquer conjunto de números ou de propriedades físicas que obedeçam tais regras são chamados de *grupos*. Sabendo como definir um grupo a partir das citações anteriores, devemos agora estudá-los em suas propriedades e relações matemáticas.

Definição 2.1.5 *Grupo Abelian.* Dado dois elementos distintos de um grupo  $G$  tal que  $a \cdot b = b \cdot a$ , e isto acontece para todos os elementos de  $G$ , então o grupo é dito *abeliano* ou *comutativo*.

Definição 2.1.6 *Geradores.* Os elementos que a partir deles pode-se construir todos os outros elementos do grupo, são chamados de geradores. Todos os elementos de um grupo podem ser escritos como uma “multiplicação” de seus geradores.

Exemplo 2.1.4 *O número 1 é o gerador do grupo dos números naturais, onde seu*

*inverso é dado por  $-1$ .*

No caso dos números naturais temos um número infinito de elementos, o nosso interesse se volta, por enquanto, para os grupos finitos. Um exemplo de grupo finito é mostrado na tabela 1.

**Definição 2.1.7** *Ordem.* É o número total dos elementos de um grupo.

**Exemplo 2.1.5** *O grupo dado nas tabs.(1.1) e (1.2) tem ordem 12 pois este é seu número de elementos. Note que na tabela de multiplicação os elementos resultantes sempre estão no grupo de acordo com a definição 2.1.1.*

Uma particular representação dos grupos é representá-los como grupo de permutação.

**Exemplo 2.1.6** *Grupo de Permutação,  $S_n$ .* Grupo formado pelas  $n!$  permutações de grau  $n$ :

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ p_1 & p_2 & \dots & p_n \end{pmatrix}. \quad (2.1)$$

Este tipo de grupo facilita nosso estudo e as propriedades das permutações são na verdade invariâncias geométricas de um modo geral, o que nos proporciona interessantes condições em um determinado sistema que obedeça alguma regra de permutação. Como um exemplo de nosso interesse, no estudo de mapas com simetria e suas bifurcações, assim como na sua construção veremos a importância dessas invariâncias e a influência delas no estudo da dinâmica de quebra de simetria. Posteriormente entraremos em mais detalhes a esse respeito.

Na introdução vemos as invariâncias nas figuras (1.1),(1.2),(1.3),(1.4), neste caso temos as invariâncias dos mapas perante determinados grupos de simetria, sendo esses grupos dados por:  $\{e\}$ ,  $\{e, \sigma\}$ ,  $\{e, f_1^3, \sigma, \sigma f_1^3\}$ , e o grupo  $D_6$  completo dado pela tabela (1), respectivamente. Note que quando falamos invariâncias estamos nos referindo ao aspecto geométrico do mapa ou do grupo, este ponto é importante pois esta tese se baseia em simetrias geométricas e as bifurcações causadas em um mapa que conserva a simetria total para um valor do parâmetro.

A permutação é definida como uma ação. Dado um quadrado no plano  $xy$ , onde seus vértices estão enumerados e as permutações atuam nestes, figura(2.1).



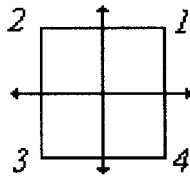


Figura 2.1: Quadrado, ação do grupo de permutação, onde os números representam não só os eixos como as permutações de invariância.

Note que uma possível mudança nos vértices que deixa o quadrado na mesma posição, espacialmente falando, pode ser dada por:

$$1 \rightarrow 2,$$

$$2 \rightarrow 3,$$

$$3 \rightarrow 4,$$

$$4 \rightarrow 1,$$

ou podemos escrevê-la como definimos anteriormente por (2.1).

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 3 & 4 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.2)$$

Este elemento de permutação é um dos elementos do grupo  $D_4$ , que é o grupo das operações de simetria em um quadrado, tendo como 8 o número de operações (elementos). Este grupo de simetria faz parte da cadeia de subgrupo, que posteriormente definiremos, do grupo  $O$ , que é nosso objeto de estudo. Devemos entender que como as simetrias atuam em um objeto físico, devemos analisar como se dá a multiplicação de permutações e como estas atuam neste objeto de simetria.

O produto de duas permutações  $G_1G_2$  é definido como a atuação da permutação  $G_2$  e posteriormente  $G_1$ , por exemplo:

$$G_1 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix}, G_2 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix},$$

de tal maneira que:

$$G_1 \cdot G_2 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & 2 & 1 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix}. \quad (2.3)$$

A idéia principal da permutação é a invariância geométrica. No caso da multiplicação (2.3) as permutações  $G_1$  e  $G_2$  são invariâncias em um triângulo equilátero. Um exemplo de operação de invariância em um triângulo equilátero é uma rotação  $60^\circ$  e um contra exemplo é uma rotação de  $90^\circ$ . Uma rotação de  $90^\circ$  mudaria o triângulo de posição quebrando a invariância geométrica.

O grupo finito que possui todas as operações de simetria em um triângulo equilátero é o grupo  $D_3$ , que tem um total de 6 elementos de simetria, dados da mesma maneira que o grupo  $D_6$  no capítulo 1.

Todo elemento de simetria pode ser representado por um permutação, a atuação das permutações mostradas em (2.3) são exibidas esquematicamente de forma geométrica na figura (2.2). Vemos também que a atuação de um composição de permutações se faz de forma sequencial ou seja,  $G_2$  e depois  $G_1$ .

Os números 1,2 e 3 indicam posições, e a permutação atua nos números que estão nessas posições. Para entendermos o fenômeno da quebra espontânea de simetria temos primeiramente que entender os conceitos de subgrupo e de cadeia de ramificação, ou cadeia de quebra de simetria. Os elementos de um grupo caracterizam esse grupo sob os aspectos de simetria desse. Por exemplo o grupo de simetria  $Z_2$  possui dois elementos de simetria a identidade e uma rotação de  $180^\circ$ . Os elementos que pertencem ao grupo  $Z_2$  também são encontrados em grupos de simetria com mais elementos por exemplo: no caso do grupo  $D_6$  mostrado no Capítulo 1 temos a identidade como um elemento e o elemento  $\sigma$  caracterizando uma operação de conjugação no plano complexo o que resultado em um grupo do tipo  $Z_2$  dentro de

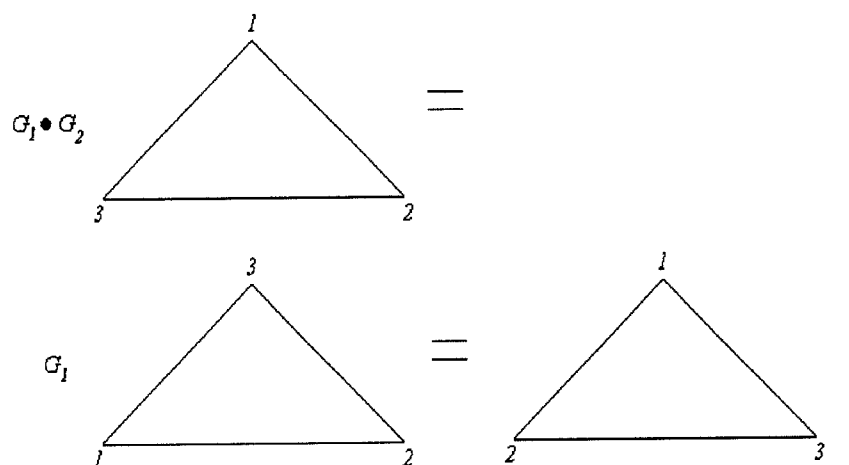


Figura 2.2: Atuação das permutações, operação de multiplicação em um grupo de simetria onde a invariância triangular é preservada.

um grupo de maior simetria. O tamanho do grupo é determinado pelo número de elementos que esse possui. Este fato caracteriza o grupo  $Z_2$  como um subgrupo do grupo  $D_6$  já que este possui um número de operações de simetria menor que o grupo  $D_6$  e forma por si só um grupo de simetria.

A redução sucessiva do grupo em seus subgrupos de simetria menor nos dá como resultado a cadeia de quebra de simetria, onde no começo temos o grupo de maior simetria sendo reduzido à subgrupos de simetria mais baixa em um processo matemático ou físico, dependendo da aplicação que se quer.

**Definição 2.1.8** *Subgrupo.* Um subgrupo  $G_s$  de um grupo  $G$  é um subconjunto dos elementos de  $G$  tal que,  $G_s$  é por si só um grupo em relação as mesmas regras que definiram o grupo  $G$ . Escrevemos então  $G \supset G_s$ , como uma relação de quebra de simetria. Em geral podemos ter uma cadeia de quebra formada por vários subgrupos:

$$G \supset G_{S^0} \supset G_{S^1} \supset G_{S^2} \supset G_{S^3} \dots$$

Na introdução podemos identificar como subgrupo do grupo  $D_6$  o grupo  $C_6$  dado por:

$$C_6 = \{e, f_1, f_1^2, f_1^3, f_1^4, f_1^5\}.$$

Note que é possível gerar uma tabela de multiplicação exclusivamente com estes elementos do subgrupo. Os elementos desse subconjunto permanecem dentro dele perante multiplicação entre seus elementos.

Nos grupos cristalográficos, que envolvem operações de simetria em sólidos, onde existe um exaustivo estudo das propriedades físicas relacionadas com as propriedades de simetria desses objetos e que é muito conhecido dos físicos onde as possibilidades de quebra de simetria a partir do grupo  $O_h$ , grupo conhecido como o de maior simetria, são inúmeras.

Existem várias cadeias de quebra de simetria que podem se formar a partir do grupo  $O_h$ . Um exemplo particular de cadeia e que muito nos interessa é dado por,

$$O_h \supset O \supset D_4 \supset C_4 \supset C_2 \supset C_1. \quad (2.4)$$

O grupo  $C_4$  pode ser um grupo do tipo *Klein*, o grupo  $C_2$  também pode ser denotado por  $Z_2$ , e o grupo  $C_1$  é a identidade e pode ser denotado por  $e$ . O interesse nessa quebra dada por (2.4) se faz presente já que as simetrias envolvidas são as simetrias encontradas no modelo algébrico para o código genético como será mostrado posteriormente.

Todos os subgrupos estão mostradas esquematicamente pela figura (2.3), onde o grupo  $O_h$  é o de maior ordem e o grupo  $C_1$  de menor ordem, referência [14]. Podemos notar, olhando a árvore (2.3), que existem várias possibilidades de quebra de simetria a partir do grupo finito  $O$ , uma delas foi descrita em (2.4). O grupo  $O$  é o grupo de simetria resultante do diagrama de *Weyl* do  $Sp(6)$ , representação  $(2, 1, 0)$ .

**Definição 2.1.9** *Subgrupo isotrópico.* Seja  $\Gamma$  um subgrupo que atua no  $R^n$  então, denominamos de subgrupo isotrópico  $\Sigma_x$  de  $\Gamma$  em um ponto qualquer  $x$ , como o subgrupo que satisfaz:

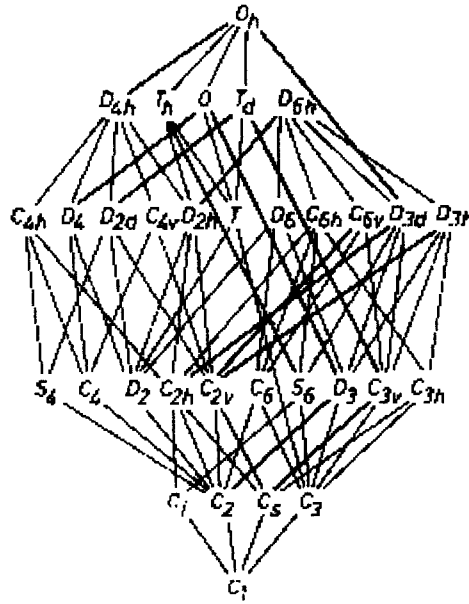


Figura 2.3: Regras de ramificação dos grupos cristalográficos onde o grupo de partida é o  $O_h$ , de maior simetria.

$$\Sigma_x = \{\gamma \in \Gamma / \gamma x = x\}. \tag{2.5}$$

*Exemplo 2.1.7* Consideremos a ação do grupo  $D_3$  atuando em  $C$ , definido em [8] para  $m = 3$ . Seja  $z_r$  um elemento da reta real, como o elemento  $\sigma$  leva o ponto no plano complexo em seu complexo conjugado, então  $\sigma z_r = z_r$ ; segue que o subgrupo isotrópico é dado por  $\Sigma_{z_r} = \{e, \sigma\}$ .

Podemos generalizar esta idéia e construir o grupo de simetrias de um dado conjunto.

*Definição 2.1.10* Grupo de simetrias. Dado um subconjunto  $A$  do  $R^n$ , temos que o conjunto de simetrias de  $A$  é dado por:

$$\Sigma_A = \{\gamma \in \Gamma / \gamma A = A\}. \tag{2.6}$$

Note que se  $A$  consiste em um ponto,  $\Sigma_A$  é justamente o subgrupo isotrópico daquele ponto.

*Exemplo 2.1.8* Dado um subconjunto  $A = \{z \in C / z = e^{\frac{i\pi}{3}}\}$ , o seu subgrupo de simetria é então dado por  $\Sigma_A = \{e, f_1\sigma\}$ .

*Definição 2.1.11* *Subespaços do pontos fixos.* Dado um subgrupo  $\Sigma$  de  $\Gamma$  atuando em  $C$  ( ou um espaço vetorial qualquer), denominamos de subespaço do pontos fixos de  $\Sigma$  e denotamos  $Fix(\Sigma)$  ao conjunto,

$$Fix(\Sigma) = \{z \in C : \sigma z = z, \forall \sigma \in \Sigma\}. \quad (2.7)$$

*Exemplo 2.1.9* Dado  $\Sigma = \{e, \sigma\}$ , então o subespaço dos pontos fixos de  $\Sigma$  são dados por:

$$Fix(\Sigma) = \{z \in C : \text{Im}(z) = 0\}.$$

*Definição 2.1.12* *Subgrupo invariante.* Dado um subgrupo  $\Sigma$  de um grupo  $\Gamma$ , se:

$$a^{-1}\Sigma a = \Sigma \quad \forall a \in \Gamma,$$

isto é,

$$a\Sigma_i a^{-1} \in \Sigma \quad \forall a \text{ e } \Sigma_i \in \Gamma. \quad (2.8)$$

então  $\Sigma$  é dito ser um subgrupo invariante de  $\Gamma$ .

*Exemplo 2.1.10* Dado as tabs.(1.1) e (1.2) temos que  $\{e, f_1^3\}$  é um subgrupo invariante.

Um importante fato é que todo subgrupo de um grupo abeliano é um subgrupo invariante.

*Definição 2.1.13* *Homorfismo.* Sejam  $\Psi$  e  $\Psi^\circ$  dois grupos e que exista uma aplicação de cada elemento do grupo  $\Psi$  em outro elemento do grupo  $\Psi^\circ$ , não inversível, e esta relação não é injetiva, ou seja, mais de um elemento de  $\Psi$  pode se relacionar com um único elemento de  $\Psi^\circ$ .

Definição 2.1.14 *Isomorfismo.* Sejam  $\Gamma$  e  $\Gamma^\circ$  dois grupos e que exista uma aplicação de cada elemento do grupo  $\Gamma$  em outro elemento do grupo  $\Gamma^\circ$  e que esta aplicação seja inversível, então denominamos esta relação entre os grupos como um isomorfismo.

Exemplo 2.1.11 *Dada a aplicação  $\alpha : \Gamma \rightarrow \Gamma^\circ$  onde existe a seguinte propriedade:*

$$\begin{aligned}\alpha(a) &= a^\circ \text{ e } \alpha(b) = b^\circ, \\ ab &= c \text{ e } a^\circ b^\circ = c^\circ, \text{ tal que,} \\ \alpha(ab) &= \alpha(a)\alpha(b) = \alpha(c), \\ \alpha(a^\circ b^\circ) &= \alpha(a^\circ)\alpha(b^\circ) = \alpha(c^\circ) \text{ e} \\ \alpha(ab) &= \alpha(c) = \alpha(a^\circ b^\circ) = \alpha(c^\circ).\end{aligned}$$

e se esta aplicação é inversível, então dizemos que os grupos são isomorfos.

Os conceitos de subgrupo são importantes pois no modelo algébrico as quebras de simetrias caracterizam uma cadeia de subgrupos que por sua vez caracteriza aminoácidos primordiais que evoluem em etapas de quebra de simetria até alcançarem os 20 aminoácidos e o sinal de terminação no código genético padrão.

## 2.2 Representações

O uso das representações de um grupo tem uma importância ímpar no estudo do código genético e em seu modelo dinâmico. O grupo responsável pelo modelamento do código genético padrão tem 21 geradores e se encontra em uma representação de dimensão 64 o que torna o problema um tanto quanto complexo para um modelamento dinâmico. É possível então representar esse grupo de simetria em um espaço que seja possível o modelamento dinâmico. Os trabalhos existentes estabelecem regras para sistemas de dimensão 2, 3 e 4 daí a importância do estudo das representações de um grupo. Leia-se aqui que a palavra representação é levada em seu significado mais abrangente. Assim como é possível tomar a representação de dimensão 64 do grupo  $Sp(6)$  também é possível representá-lo como um grupo de dimensão 3 que no caso da construção do sistema dinâmico será usado.

As representações de um grupo  $G$  é um homomorfismo de  $G$  em um grupo  $\Gamma(G)$ , promovendo uma relação entre os elementos do grupo e os elementos da representação, tal que os elementos são operadores num espaço vetorial  $L$  qualquer ou em matrizes, desde que seja escolhida uma base para  $L$ .

No nosso caso representaremos o grupo  $Oh$  como matrizes  $3 \times 3$ , nos dando como resultado um mapa  $f : R^3 \rightarrow R^3$ . A dimensão de  $L$  determina a dimensão, ou grau, da representação  $\Gamma(G)$ .

Uma representação é definida por ser fiel se o homomorfismo de  $G$  em  $\Gamma(G)$  se reduz à um isomorfismo.

Se  $R$  e  $S$  são elementos do grupo  $G$ , então requer-se:

$$\begin{aligned}\Gamma(RS) &= \Gamma(R)\Gamma(S), \\ \Gamma(R^{-1}) &= \Gamma^{-1}(R), \\ \Gamma(e) &= 1.\end{aligned}\tag{2.9}$$

A importância desse estudo está em saber que tipo de representação o grupo que está sendo estudado admite. Trabalhar com os grupos de um modo geral sem trabalhar com representações se torna deveras complicado do ponto de vista matemático. *Todo grupo pode ser representado por um grupo de permutação*, seja ele finito, ou contínuo.

Se  $L_n$  é um subespaço invariante de  $G$ , então  $L_n$  forma um espaço de representações de  $G$ . As matrizes que representam os elementos do grupo constituem uma representação de  $G$  se uma base  $\{\varphi_i\}$  é escolhida para  $L_n$  :

$$R | \varphi_i \rangle = \sum_{j=1}^n \Gamma_{ji}(R) | \varphi_j \rangle,\tag{2.10}$$

sendo:

$$\Gamma_{ji}(R) = \langle \varphi_j | R | \varphi_i \rangle,\tag{2.11}$$



o elemento de matriz da representação matricial  $\Gamma(R)$ .

Se fizermos uma transformação de base no espaço  $L_n$  das representações, as matrizes  $\Gamma(R)$  também irão se transformar do seguinte modo:

$$\Gamma'(R) = C\Gamma(R)C^{-1}, \quad (2.12)$$

onde  $C$  é a matriz que faz esta transformação. A representação dada por  $\Gamma'(R)$  é dita ser equivalente por uma transformação à representação  $\Gamma(R)$ . Onde a representação equivalente  $\Gamma'(R)$  preserva a dimensão da representação  $\Gamma(R)$ .

Sabemos que em matrizes o traço se conserva sob transformações de similaridade, este fato nos faz crer que é possível determinar uma quantidade ou medida que seja característico de uma dada representação matricial de um grupo. Estas transformações são dadas por (2.13).

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\Gamma'(R)) &= \sum_i \Gamma'_{ii}(R) = \sum_{ikl} C_{ik} \Gamma_{kl}(R) C_{li}^{-1} = \\ \sum_{kl} \delta_{kl} \Gamma_{kl}(R) &= \sum_k \Gamma_{kk}(R) = \text{Tr}(\Gamma(R)). \end{aligned} \quad (2.13)$$

O traço de uma representação matricial de um dado grupo é chamado de *character*, denotado por:

$$\chi(R) = \text{Tr}(\Gamma(R)). \quad (2.14)$$

É um interessante exercício verificar que as representações que são equivalentes possuem o mesmo *character*. No caso dos grupos os *caracteres* se encontram em uma tabela. A tab.(2.1) é a tabela de caracteres do grupo  $O$ .

Note que as colunas e as linhas são ortogonais entre si por um produto escalar simples. A primeira coluna determina a dimensão de cada representação. Por exemplo, a tab.(2.1) diz que o grupo  $O$  admite 2 representações tridimensionais, e que os traços das matrizes nessas representações são dados por 3, 1, -1, 0, 1 e 3, -1, -1, 0, 1.

1	1	1	1	1
1	-1	1	1	-1
2	0	0	-1	0
3	1	-1	0	-1
3	-1	-1	0	1

Tabela 2.1: Tabela de caracteres do grupo  $O$ .

Se considerarmos dois elementos conjugados,  $R$  e  $S$ , isto é,  $S = URU^{-1}$ , então  $\Gamma(S) = \Gamma(U)\Gamma(R)\Gamma^{-1}(U)$ , de modo que teremos  $\chi(S) = \chi(R)$ . O que quer dizer que os elementos pertencentes a uma mesma classe conjugada tem o mesmo caracter.

**Teorema 2.2.1** *A igualdade dos caracteres é a condição necessária e suficiente para duas representações serem equivalentes.*

Rotulando as classes de um grupo  $G$  por  $K_1, K_2, \dots, K_n$ , a representação será descrita pelo conjunto de *caracteres*  $\chi_1, \chi_2, \dots, \chi_\nu$ , sendo  $\nu$  o número de classes de  $G$ . Como visto anteriormente podemos ter várias representações distintas, basta olhar a tabela, de modo a denotarmos por  $\chi_n^{(\mu)}$  o *caracter* da  $n$ -ésima classe da representação  $\mu$ . Assim cada representação tem um conjunto de caracteres os quais podem ser considerados vetores de componentes  $\chi_1^{(\mu)}, \chi_2^{(\mu)}, \dots, \chi_\nu^{(\mu)}$  no espaço  $\nu$  - dimensional.

Caso seja possível encontrar uma transformação de base nas quais todas as matrizes  $\Gamma(R)$  da representação fiquem na forma de diagonal por blocos, ou seja:

$$\Gamma(R) = \begin{pmatrix} \Gamma^{(1)}(R) & 0 \\ 0 & \Gamma^{(2)}(R) \end{pmatrix}, \quad (2.15)$$

onde  $\Gamma^{(1)}(R)$  é uma matriz  $m \times m$  e  $\Gamma^{(2)}(R)$  é uma matriz  $(n-m) \times (n-m)$ , então dizemos que esta representação é redutível, de tal maneira que cada matriz  $\Gamma^{(n)}(R)$  é uma dessas representações e a dimensão da matriz nos dá a dimensão da representação. O produto das matrizes da forma (2.15) tem sempre a mesma forma, isto é fácil de perceber, pois as matrizes da representação são diagonais, de modo que podemos tratar  $\Gamma^{(1)}(R)$  e  $\Gamma^{(2)}(R)$  separadamente como mostrado em (2.16).

$$\begin{aligned}\Gamma^{(1)}(RS) &= \Gamma^{(1)}(R)\Gamma^{(1)}(S), \\ \Gamma^{(2)}(RS) &= \Gamma^{(2)}(R)\Gamma^{(2)}(S),\end{aligned}\tag{2.16}$$

nos dando assim duas representações, de dimensões distintas  $m$  e  $(n-m)$ , respectivamente. O conceito de soma direta está associado ao número de representações que está dentro de uma representação redutível, no nosso caso a representação  $\Gamma(R)$  foi decomposta em uma soma direta de  $\Gamma^{(1)}(R)$  e  $\Gamma^{(2)}(R)$ :

$$\Gamma(R) = \Gamma^{(1)}(R) \oplus \Gamma^{(2)}(R).\tag{2.17}$$

Dado um vetor  $\mathbf{x}$  no espaço  $m$  - dimensional da representação  $\Gamma^{(1)}(R)$ , a aplicação da matriz  $\Gamma(R)$  neste vetor se dá:

$$\begin{pmatrix} \Gamma^{(1)}(R) & 0 \\ 0 & \Gamma^{(2)}(R) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{x} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Gamma^{(1)}(R)\mathbf{x} \\ 0 \end{pmatrix},\tag{2.18}$$

o que significa que o subespaço  $m$  - dimensional é invariante sob as transformações do grupo. O mesmo ocorre para um dado vetor  $\mathbf{y}$   $(n-m)$  - dimensional

$$\begin{pmatrix} \Gamma^{(1)}(R) & 0 \\ 0 & \Gamma^{(2)}(R) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ \mathbf{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \Gamma^{(2)}(R)\mathbf{y} \end{pmatrix},\tag{2.19}$$

seguinto que o subespaço  $(n-m)$  - dimensional é invariante perante a transformação.

Nestes termos podemos definir redutibilidade como: *se no espaço das representações  $L_n$  podemos encontrar subespaços invariantes sob a ação do grupo, então  $L_n$  é dito ser redutível, podendo ser escrito na soma direta de seus subespaços invariantes.* Como foi mostrado anteriormente;

$$L_n = L^{(1)} \oplus L^{(2)}.\tag{2.20}$$

Caso existam outros subespaços invariantes dentro de um subespaço  $L^{(1)}$  ou  $L^{(2)}$ , dizemos que  $\Gamma^{(1)}(R)$  ou  $\Gamma^{(2)}(R)$  ainda é redutível, do contrário dizemos que  $\Gamma^{(1)}(R)$  ou  $\Gamma^{(2)}(R)$  é uma representação irredutível, de modo  $L^{(1)}$  e  $L^{(2)}$  são um subespaços irredutíveis.

Se a matriz de uma representação puder ser escrita como:

$$\Gamma(R) = \begin{pmatrix} \Gamma^{(1)}(R) & & & \\ & \Gamma^{(2)}(R) & & \\ & & \ddots & \\ & & & \Gamma^{(n)}(R) \end{pmatrix}, \quad (2.21)$$

e sua soma direta é dada por:

$$\Gamma(R) = \Gamma^{(1)}(R) \oplus \Gamma^{(2)}(R) \oplus \dots \oplus \Gamma^{(n)}(R), \quad (2.22)$$

dizemos então que  $\Gamma(R)$  está na forma totalmente redutível. Para nós esse estudo é de extrema importância pois mostra como uma representação pode se decompor, é fácil de perceber que a decomposição da representação está diretamente associada a decomposição do grupo em seus subgrupos já que a representação é uma rotulação fiel do grupo.

Entre as representações irredutíveis de  $\Gamma^{(n)}(R)$  podem existir diversas representações equivalentes, de tal maneira que podemos escrever a soma direta como uma soma de representações com coeficientes a determinar,

$$\Gamma(R) = \alpha_1 \Gamma^{(1)}(R) \oplus \alpha_2 \Gamma^{(2)}(R) \oplus \dots \oplus \alpha_n \Gamma^{(n)}(R) = \sum_{n=1}^r \alpha_n \Gamma^{(n)}(R), \quad (2.23)$$

onde os coeficientes  $\alpha_n$  são inteiros positivos.

**Teorema 2.2.2** *O número de representações irredutíveis não equivalentes de um dado grupo é igual ao número de classes desse grupo.*

Se a representação é redutível o *character* é chamado de *character composto*  $\chi(R)$ , enquanto que o *character* de uma representação irredutível é chamado de *character simples*  $\chi^{(\nu)}(R)$ . De acordo com (2.23), o *character composto* é expresso em termos dos *caracteres simples*,

$$\chi_i(R) = \sum_{\nu=1}^r \alpha_\nu \chi_i^{(\nu)}(R). \quad (2.24)$$

De um modo geral a tabela de caracteres pode ser escrita como mostrado na tab.(2.2).

	$g_1 K_1$	$g_2 K_2$	...	$g_i K_i$	...	$g_k K_k$
$\Gamma^{(1)}$	$\chi_1^{(1)}$	$\chi_2^{(2)}$	...	$\chi_i^{(1)}$	...	$\chi_k^{(1)}$
$\Gamma^{(2)}$	$\chi_1^{(2)}$	...	...	...	...	$\vdots$
$\vdots$	$\vdots$					$\vdots$
$\Gamma^{(\mu)}$	$\chi_1^{(\mu)}$	...	...	$\chi_i^{(\mu)}$	...	$\chi_k^{(\mu)}$
$\vdots$	$\vdots$					$\vdots$
$\Gamma^{(k)}$	$\chi_1^{(k)}$	$\chi_2^{(k)}$	...	$\chi_i^{(k)}$	...	$\chi_k^{(k)}$

Tabela 2.2: Tabela de caracteres - geral.

Um conceito complementar é o de representação unitária.

Definição 2.2.1 *Representação Unitária.* Dado no espaço vetorial das representações o produto escalar  $\langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle$ , sobre o qual os operadores de uma representação do grupo  $G$  são operadores unitários,

$$\langle U\mathbf{x} | U\mathbf{y} \rangle = \langle \mathbf{x} | U^\dagger U | \mathbf{y} \rangle = \langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle, \quad (2.25)$$

isto é,

$$U^\dagger = U^{-1}, \quad (2.26)$$

caso as matrizes da representação sejam unitárias, então:

$$\Gamma^\dagger(R) = \Gamma^{-1}(R), \quad (2.27)$$

é chamada de representação unitária, e que de acordo com (2.25) preserva a métrica do espaço.

## 2.3 Grupos Contínuos

Nesta seção abordaremos os conceitos de grupos contínuos com ênfase no grupo  $Sp(6)$  e suas propriedades, estes conceitos são encontrados em qualquer livro de teoria de grupo, [15, 18] e servem como uma base maior para aos interessados nos aspectos matemáticos relacionados ao modelo algébrico.

Um grupo é dito ser contínuo se os elementos que fazem parte deste grupo variam de forma contínua. O conjunto das transformações

$$x' = ax + b, \quad (2.28)$$

forma um grupo, onde os dois parâmetros  $a$  e  $b$  variam continuamente  $-\infty$  até  $+\infty$ , e nós dizemos que o grupo dado por (2.28) é um *grupo de dois parâmetros contínuos*. Todas as definições e teoremas citados anteriormente para grupos finitos são válidas para o caso dos grupos contínuos, existe porém dificuldades em determinar representações de alguns desses grupos, assim como extrair as informações necessárias para a aplicação em física.

Existem grupos que podem ter um número finito de elementos mas que estes elementos que variam de forma contínua, então dizemos que este grupo é um *grupo contínuo finito*. O intervalo de variação do parâmetro é não definido e pode ser de  $-\infty$  até  $+\infty$  ou qualquer domínio finito, neste caso o grupo é dito *fechado*.

Para um *grupo de  $r$ -parâmetro*, como o grupo dado pela equação (2.28), a continuidade é expressada em termos das distâncias do espaço dos parâmetros.

*Exemplo 2.3.1* Dado dois elementos  $R(a)$  e  $R(a')$  estes dois elementos são ditos como próximos se

$$\left[ \sum_1^r (a_i - a'_i)^2 \right]^{1/2}$$

é pequeno.

Os pré-requisitos para que os elementos  $R(a)$  formem um grupo são os mesmos que para um grupo finito. Primeiro deve existir uma série de parâmetros  $a^0$  tal que:

$$R(a)R(a^0) = R(a^0)R(a) = R(a), \quad (2.29)$$

para todo e qualquer  $a$ . O elemento  $R(a^0)$  é chamado de identidade. Dado um elemento qualquer  $a$  podemos sempre encontrar um elemento  $\bar{a}$  tal que:

$$R(a)R(\bar{a}) = R(\bar{a})R(a) = R(a^0), \quad (2.30)$$

onde  $R(\bar{a})$  é o inverso de  $R(a)$ , dado por:

$$R(\bar{a}) = [R(a)]^{-1}. \quad (2.31)$$

O produto de dois elementos do grupo permanece no grupo:

$$R(a)R(b) = R(c), \quad (2.32)$$

$c$  é um conjunto de parâmetros do grupo. É fácil de perceber que  $c$  depende do conjunto de parâmetros  $a$  e  $b$ , de maneira que

$$c = \Phi(a, b). \quad (2.33)$$

A equação (2.33) mostra uma transformação, onde a função  $\Phi(a, b)$  é a responsável por esta transformação. Vamos considerar as transformações do tipo  $x' = x + a + b$ , é possível encontrar um  $c$  que varie de forma contínua, como por exemplo  $a + b = c$ , como  $a$  e  $b$  são contínuos, a variação a soma destes também é um parâmetro contínuo. Com isto em mente podemos escrever qualquer *Grupo de Transformações de Lie de Parâmetro  $r$*  como sendo o grupo das transformações dado por:

$$x'_i = f_i(x_1, x_2, \dots, x_n; a_1, a_2, \dots, a_n), \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

ou simbolicamente,

$$x' = f(x; a), \quad (2.34)$$

onde as funções  $f_i$  são analíticas no parâmetro  $a$ . Este grupo é um grupo de Lie que obedece as propriedades e definições listadas anteriormente.

Exemplos de grupos de Lie, segundo ref.[9].

I )  $x' = ax, a \neq 0$  :

Elemento Identidade -  $a = 1$ .

Elemento Inverso -  $\bar{a} = \frac{1}{a}$ .

Produto -  $c = ba$ .

Este é o grupo abeliano de um parâmetro;  $c$  é uma função analítica de  $a$  e  $b$ .

II )  $x' = a_1x + a_2, a_1 \neq 0$  :

Elemento Identidade -  $a_1 = 1, a_2 = 0$ .

Elemento Inverso -  $\bar{a}_1 = \frac{1}{a_1}, a_2 = \frac{-a_2}{a_1}$ .

Produto -  $c_1 = b_1a_1, c_2 = b_2 + b_1a_2$ .

Este é o grupo de dois parâmetros e é não-abeliano.

III ) Grupo Linear em duas dimensões,  $GL(2)$ :

$$x' = a_1x + a_2y ; y' = a_3x + a_4y.$$

$$\begin{vmatrix} a_1 & a_2 \\ a_3 & a_4 \end{vmatrix} \neq 0.$$

Se nós considerarmos  $x, y$  como componentes de um vetor  $r$ , a transformação pode ser escrita em notação matricial:

$$r' = Ar, \quad \begin{bmatrix} x' \\ y' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 \\ a_3 & a_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}.$$

O grupo linear em duas dimensões é isomórfico ao grupo de matrizes  $2 \times 2$ , com a multiplicação das matrizes como lei de combinação:

$$\text{Elemento Identidade - } A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = 1.$$



Elemento Inverso -  $A = A^{-1}$ .

Produto -  $C = BA$ .

O grupo linear em duas dimensões é um grupo de quatro parâmetros e é não-abeliano.

IV ) Grupo Linear em  $n$  dimensões,  $GL(n)$ :

$$x' = \sum_j a_{ij}x_j; \quad i = 1, \dots, n, \quad |a_{ij}| \neq 0,$$

ou, na notação matricial,

$$r' = Ar, \quad \det A \neq 0.$$

O número de parâmetros é  $n^2$ . Como os parâmetros podem variar em um intervalo de forma infinita o grupo  $GL(n)$  é dito não fechado.

V ) Grupo Linear Especial em duas dimensões,  $SL(2)$ :

Este grupo é obtido da mesma maneira que o  $GL(2)$ , com a restrição que o determinante da transformação seja igual a unidade;

$$a_1a_4 - a_2a_3 = 1.$$

Esta restrição mostra uma relação funcional entre os parâmetros. As propriedades do grupo são mantidas desde que a transformação com a unidade como determinante tenha o inverso com o mesmo valor, e o produto de duas transformações levem a uma transformação de determinante 1.

VI ) Grupo Linear Especial em  $n$  dimensões,  $SL(n)$ : mesma regra que o  $GL(n)$  com a restrição de que o  $\det(A) = 1$  e onde o número de parâmetros essenciais é  $n^2 - 1$ .

VII ) Grupo Ortogonal em duas dimensões,  $O(2)$ : é o grupo onde consideramos as transformações dado por ( III ) onde  $x^2 + y^2$  fica invariante:

$$\begin{aligned} (x')^2 + (y')^2 &= (a_1x + a_2y)^2 + (a_3x + a_4y)^2 = x^2 + y^2, \\ a_1^2 + a_3^2 &= 1, \quad a_2^2 + a_4^2 = 1, \quad a_1a_2 + a_3a_4 = 0. \end{aligned}$$

É fácil de perceber que este é o grupo de rotações em torno do eixo z, e pode ser escrito como:

$$\begin{aligned}x' &= x \cos(\phi) - y \sin(\phi), \\y' &= x \sin(\phi) + y \cos(\phi),\end{aligned}$$

com  $0 \leq \phi \leq 2\pi$ , onde  $\phi$  é o ângulo de rotação em torno do eixo z. O grupo é abeliano onde o ângulo resultante entre duas transformações é a soma dos ângulos das transformações individuais.

VIII ) Grupo Unitário em n dimensões,  $U(n)$ :

$$r' = rA \quad AA^\dagger = 1.$$

As matrizes das transformações devem ser unitárias. O número de parâmetros essenciais é  $n^2$ . A condição de que as matrizes sejam unitárias implica que  $\sum_j |a_{ij}|^2 = 1$ , nós vemos que  $|a_{ij}|^2 \leq 1$  para todo  $i$  e  $j$ , onde os números  $a_{ij}$  são os parâmetros que formam as matrizes A.

Esses exemplos são ilustrativos, afim de facilitar a compreensão dos grupos de Lie, já que o  $Sp(6)$  é o objeto de estudo desta tese. Existem grupos de Lie que atuam no espaço complexo, estes grupos são chamados de *Grupos Complexos de Lie*, e tem a estrutura idêntica a dos grupos listados anteriormente, só que atuando no espaço complexo. Qualquer grupo complexo de dimensão n pode ser considerado como um grupo de Lie real de dimensão  $2n$ . As matrizes que definem estes grupos podem ser matrizes complexas, desde que obedecem as regras daquele grupo.

Aqui interpretamos os grupos de Lie da forma mais simples possível sem levar em consideração a visão topológica de grupos, neste caso as estruturas são definidas da mesma maneira, usando conceitos matemáticos mais elaborados. Ainda temos interesse nos grupos, particularmente todo grupo de Lie possui uma álgebra com operações e relações de comutação bem definidas correspondente, na próxima seção abordaremos este tema.

No caso do grupo  $Sp(6)$ , a sua estrutura é a mesma do  $GL(n)$ , com a condição de invariância na forma bilinear, no caso de dois pontos quaisquer  $x$  e  $\xi$ , ou seja,

$$x_1\xi_2 - x_2\xi_1 + x_3\xi_4 - x_4\xi_3 = const.,$$

com essa condição nos obtemos o grupo linear. Este é um isomorfismo, por isso definimos o grupo  $GL(n)$  como principal, tal que o grupo  $Sp(2n)$  é um grupo isomorfo a este.

IX ) Grupo simplético em  $n$  dimensões,  $Sp(n)$ : é o conjunto de todas as transformações lineares  $a$  sobre as quais as formas bilineares não degeneradas de “anti-simetria” são invariantes. Em outras palavras, a forma bilinear não degenerada dada por:

$$\{\mathbf{xy}\} = g_{ik}x_iy_k \quad (g_{ik} = -g_{ki}), \quad (2.35)$$

e o “produto anti-simétrico” dos vetores  $\mathbf{x}$  e  $\mathbf{y}$ , são inalterados pelas transformações de  $\mathbf{a}$  do  $Sp(n)$ . A matriz  $\mathbf{G} = (g_{ik})$  da equação (2.35) é anti-simétrica. Tomando o determinante das matrizes anti-simétricas, nós encontramos que  $\mathbf{G} = (-1)^n \det(\mathbf{G})$ . Se  $n$  é ímpar,  $\det \mathbf{G} = 0$ , e a forma bilinear (2.35) é degenerada.

A base de coordenadas em um espaço  $n$ -dimensional pode ser sempre selecionada como um produto anti-simétrico, dado por (2.35), nos dando uma forma canônica simples como resultado. Dado um vetor arbitrário  $e_1$  não-nulo em um espaço  $n$ -dimensional, desde que o “produto anti-simétrico” é não degenerado, nós podemos achar um vetor  $y$  tal que  $\{e_1y\} \neq 0$ . Multiplicando  $y$  por um fator, nós obtemos um vetor  $e'_1$  para o qual  $\{e_1e'_1\} = 1$ . Usando isso para os dois vetores,

$$\{e_1e_1\} = 0, \quad \{e'_1e'_1\} = 0, \quad \{e_1e'_1\} = 1. \quad (2.36)$$

Os vetores  $e_1$  e  $e'_1$  são LI: Se  $\lambda e_1 + \mu e'_1 = 0$ , nós encontramos, pelo produto “anti-simétrico” com  $e_1$  e  $e'_1$  que,  $\lambda = \mu = 0$ . Os vetores  $z$  do  $R^n$  que satisfazem as duas equações lineares independentes

$$\{e_1 z\} = 0, \quad \{e'_1 z\} = 0, \quad (2.37)$$

formam um  $(n - 2)$  - dimensional subespaço linear do  $R^n$ . Cada vetor  $x$  do  $R^n$  pode ser escrito como

$$\mathbf{x} = x_1 e_1 + x'_1 e'_1 + z, \quad (2.38)$$

onde  $z$  satisfaz (2.37). De fato usando (2.36) e (2.37), nós temos

$$x_1 = \{\mathbf{x} e'_1\}, \quad x'_1 = -\{\mathbf{x} e_1\}. \quad (2.39)$$

Podemos repetir o argumento para subespaços de dimensão  $(n-2)$ . Por indução podemos definir uma base de vetores  $e_1, \dots, e_\nu, e_{\nu'}, \dots, e_{2\nu'}$  ( $n = 2\nu$ ) tal que

$$\{e_\alpha e_\beta\} = \{e_{\alpha'} e_{\beta'}\} = 0, \quad \{e_\alpha e_{\beta'}\} = \{e_{\alpha'} e_\beta\} = \delta_{\alpha\beta}. \quad (2.40)$$

Os componentes do vetor  $\mathbf{x}$  nesta base são  $x_\alpha, x_{\alpha'}$  ( $\alpha = 1, \dots, \nu$ ). Fazendo o “anti-produto” (2.35) na base (2.40) nós encontramos

$$\{\mathbf{x} \mathbf{y}\} = (x_1 y_{1'} - y_1 x_{1'}) + (x_2 y_{2'} - y_2 x_{2'}) + \dots + (x_\nu y_{\nu'} - y_\nu x_{\nu'}), \quad (2.41)$$

ou,

$$\{\mathbf{x} \mathbf{y}\} = \epsilon_{ij} x_i y_j; \quad \epsilon_{ij} = \begin{array}{l} 1 \text{ for } i = \alpha, \quad j = \alpha', \\ -1 \text{ for } i = \alpha', \quad j = \alpha, \\ 0 \text{ do contrário.} \end{array} \quad (2.42)$$

Qualitativamente as representações irredutíveis do  $Sp(n)$  são dadas pela tabela 4. Note que a dimensão da representação  $(2, 1, 0)$  é 64, o que nos dá o número de arranjos possíveis

de 4 bases (ACGU) 3 a 3, no código genético padrão. Esta peculiaridade, entre outras, torna a relação entre código genético e matemática possível. Os pesos das representações são dadas por  $(\sigma_1 \dots \sigma_\nu)$ , de tal maneira que  $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_\nu \geq 0$ .

A dimensão de cada representação irredutível é dada por  $N(\sigma)$ , e está definida por (2.43).

$$N(\sigma) = \prod_{i=1}^{\nu} \frac{\sigma_i + \nu - i + 1}{\nu - i + 1} \times \prod_{k>i}^{\nu} \frac{(\sigma_i - \sigma_k + k - i)(\sigma_i + \sigma_k + 2\nu + 2 - i - k)}{(k - i)(2\nu + 2 - i - k)}. \quad (2.43)$$

Na tab.(2.3)  $r$  representa o rank do tensor, ou seja, o número de decomposições das matrizes na forma diagonal por blocos de uma dada representação, por exemplo, a representação (210) tem rank 3. Esta representação admite no máximo matrizes de dimensão  $3 \times 3$  como representação, é impossível encontrar representações de dimensões maiores que 3 no caso do  $Sp(6)$ .

Agora temos que entender como a partir de um peso máximo é possível gerar a cadeia de quebra de simetria, para isso, vamos entrar no conceito de álgebras de Lie, estudando também o caso particular da álgebra  $sp(6)$ , de uma forma mais qualitativa.

## 2.4 Álgebras de Lie

A cada grupo de Lie temos uma álgebra de Lie associada, no caso particular do grupo  $Sp(6)$  temos a álgebra  $C_3$  ou  $sp(6)$  associada. As relações entre os elementos do grupo e seus elementos equivalentes na álgebra são iguais.

As álgebras são definidas perante comutações de seus elementos.

**Definição 2.4.1** *Álgebra de Lie.* Dado um espaço vetorial de dimensão finita sobre o campo  $K$  dos números complexos ou reais. O espaço vetorial  $L$  é chamado de álgebra de Lie sobre  $K$  se existir uma regra de composição  $(X, Y) \rightarrow [X, Y]$  em  $L$  que satisfaça os seguintes axiomas:

- Lineridade -  $[\alpha X + \beta Y, Z] = \alpha[X, Z] + \beta[Y, Z]$  para  $\alpha, \beta \in K$ .

$n = 4$			$n = 6$			$n = 8$		
$r$	$(\sigma_1\sigma_2)$	$N(\sigma)$	$r$	$(\sigma_1\sigma_2\sigma_3)$	$N(\sigma)$	$r$	$(\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4)$	$N(\sigma)$
0	(00)	1	0	(000)	1	0	(0000)	1
1	(10)	4	1	(100)	6	1	(1000)	8
2	(20)	10	2	(200)	21	2	(2000)	36
	(11)	5		(110)	14		(1100)	27
3	(21)	16	3	(210)	64	3	(2100)	160
4	(22)	14		(111)	14		(1110)	48
			4	(220)	90	4	(2200)	308
				(211)	70		(2110)	315
			5	(221)	126		(1111)	42
			6	(222)	84	5	(2210)	792
							(2111)	288
						6	(2220)	825
							(2211)	792
						7	(2221)	1056
						8	(2222)	594

Tabela 2.3: Representações Irredutíveis do  $Sp(n)$ .

- Antisimetria -  $[X, Y] = -[Y, X]$  para todo  $X, Y \in L$ .
- Identidade de Jacobi -  $[X, [Y, Z]] + [Y, [Z, X]] + [Z, [X, Y]] = 0 \forall X, Y, Z \in L$ .

Note que a operação de comutação é em geral não-associativa. Se  $K$  é um campo de números reais(complexos), então  $L$  é chamada de álgebra de Lie real(complexa). Como no conceito de grupo temos que a álgebra de Lie é comutativa ou abeliana se para qualquer elemento  $X, Y, Z \in L$  nós temos  $[X, Y] = 0$ .

Dado dois subconjunto de vetores  $M$  e  $N$  de uma determinada álgebra de Lie  $L$  e denotamos por  $[M, N]$  uma superfície linear de todos os vetores da forma  $[X, Y], X \in M, Y \in N$ . Se  $M$  e  $N$  são subespaços lineares de uma álgebra  $L$ , então as relações abaixo são válidas,

$$\begin{aligned}
[M_1 + M_2, N] &\subset [M_1, N] + [M_2, N], \\
[M, N] &= [N, M], \\
[L, [M, N]] &\subset [M, [N, L]] + [N, [L, M]].
\end{aligned} \tag{2.44}$$

Essas relações podem ser verificadas usando os axiomas anteriormente citados. Um subespaço  $N$  de uma álgebra  $L$  é uma subálgebra, se  $[N, N] \subset N$ , e um *ideal*, se  $[L, N] \subset N$ . Note que em um dado um elemento da subálgebra, qualquer relação de comutação permanece neste subespaço  $N$ , no segundo caso qualquer elemento da subálgebra  $N$  permanece nesta mesmo que sejam feitas relações de comutação com a álgebra em que esta está contida.

A noção de base no conceito de álgebra, de um modo geral, é fundamental. Dado  $e_1, \dots, e_n$  ser uma base no nosso espaço vetorial  $L$ , devido a linearidade o comutador  $Z = [X, Y]$  quando expressado em termos das coordenadas, isto é  $X = x^i e_i$ , toma a forma

$$z^i = [X, Y]^i = c_{jk}^i x^j y^k, \quad i, j, k = 1, 2, \dots, n, \tag{2.45}$$

com  $[e_j, e_i] = c_{jk}^i e_i$ , por convenção os índices repetidos indicam somatório. Os números  $c_{jk}^i$  são chamados de *constantes de estrutura*, e  $n$  é a dimensão da álgebra de Lie  $L$ . Devido a anti-simetria e a identidade de Jacobi, as constantes de estrutura  $c_{jk}^i$  satisfazem as condições:

$$c_{jk}^i = -c_{kj}^i, \tag{2.46}$$

$$c_{is}^p c_{jk}^s + c_{js}^p c_{ki}^s + c_{ks}^p c_{ij}^s = 0. \tag{2.47}$$

A existência de subálgebras e *ideais* assim como as regras de multiplicação entre seus elementos causam restrições nas constantes de estrutura. Se  $e_1, e_2, \dots, e_k$  são os elementos da base da subálgebra, então as constantes de estrutura devem satisfazer as relações

$$c_{ij}^s = 0 \quad \text{para } i, j \geq k, s \geq k, \quad (2.48)$$

e, se são elementos de um *ideal* então:

$$c_{ij}^s = 0 \quad \text{para } i \leq k, s \geq k \text{ e um } j \text{ arbitrário.} \quad (2.49)$$

As constantes de estrutura podem variar pois dependem da álgebra que as definem, assim como de seus tensores. O conceito de tensores posteriormente será mostrado.

*Exemplo 2.4.1* Dado  $L$  como o conjunto das matrizes de traço nulo  $2 \times 2$ . Note que  $L$  é de dimensão real 3. Vamos tomar como base

$$e_1 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{bmatrix}, \quad e_2 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad e_3 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{bmatrix},$$

e definimos o comutador  $[X, Y]$  em  $L$  como segue

$$[X, Y] = XY - YX, \quad X, Y \in L. \quad (2.50)$$

Este comutador satisfaz também os axiomas, que definem uma álgebra, anteriormente citados. Usando (2.50) nós achamos que  $e_i$  satisfaz a seguinte relação de comutação

$$[e_i, e_k] = \varepsilon_{ikl} e_l, \quad i, k, l = 1, 2, 3,$$

onde  $\varepsilon_{ikl}$  é o tensor totalmente anti-simétrico no  $\mathbb{R}^3$ . Os elementos de  $L$  são combinações lineares de  $e_i$  com coeficientes reais. As matrizes  $\sigma_k = 2ie_k$  são chamadas matrizes de Pauli e satisfazem  $[\sigma_i, \sigma_k] = 2i\varepsilon_{ikl} e_l$ . Estas matrizes são largamente usadas em física mais especificamente em mecânica quântica.

Logo  $L$  é uma álgebra de Lie tridimensional, real com as seguintes constantes de estrutura



$$C_{ikl} = \varepsilon_{ikl}.$$

A álgebra então definida é denotado pelo símbolo  $su(2)$  ou  $o(3)$ .

As estruturas das álgebras de Lie são idênticas as estruturas usadas em mecânica quântica, como vimos anteriormente. Essas relações, produzidas por uma determinada álgebra, atuam em auto-espacos nos dando autovalores como resultado. Esse autovalores são chamados de pesos. O pesos são de fundamental importância para o nosso estudo, posteriormente mostraremos o cálculo de alguns dos pesos para o caso da álgebra associada ao grupo  $Sp(6)$ .

*Exemplo 2.4.2* Dado  $L$  como o espaço vetorial formado pelo conjunto das matrizes reais  $n \times n$   $\{x_{ik}\}$ ,  $i, k = 1, 2, \dots, n$ , sobre o campo  $R$  dos números reais. Este espaço vetorial é definido pela multiplicação dada por (2.50) e logicamente também é uma álgebra de Lie real. Esta álgebra é denotada pelo símbolo  $gl(n, R)$ , e está associada ao grupo de Lie de mesmo nome.

Nós podemos introduzir uma base chamada de base de Weyl na álgebra  $gl(n, R)$ . Tomando como elementos de base  $e_{ij}$ ,  $i, j = 1, 2, \dots, n$ , e as matrizes  $n \times n$  da forma

$$(e_{ij})_{lk} = \delta_{il}\delta_{jk}, \quad (2.51)$$

onde deve satisfazer as seguintes relações de comutação

$$[e_{ij}, e_{kl}] = \delta_{jk}e_{il} - \delta_{il}e_{kj}, \quad i, j, k, l = 1, 2, \dots, n. \quad (2.52)$$

A partir daí podemos determinar as constantes de estrutura como

$$C_{sm,kr}^{ij} = \delta_s^i \delta_{km} \delta_r^j - \delta_k^i \delta_{rs} \delta_m^j. \quad (2.53)$$

No nosso caso o interesse é o estudo da álgebra associada ao  $Sp(6)$ , esta álgebra é a  $C_3$ , também podemos chamá-la de  $sp(6)$  com o índice  $s$  minúsculo. A dimensão da álgebra  $C_n$  é dada por:

$$n(2n + 1). \quad (2.54)$$

Note que para o caso do  $Sp(6)$ ,  $n = 3$ , a dimensão da álgebra é 21, que corresponde ao número de aminoácidos(20) mais o Código de Terminação, existentes no código genético padrão. Mas para cada aminoácido e o código de terminação temos um número de combinações possíveis das bases que os formam, este número é 64, que é a dimensão do grupo que esta associado ao  $C_3$ , o  $Sp(6)$ . Essas possibilidades são ditadas pelos pesos de uma dada representação, no caso do  $Sp(6)$  a representação que nos dá a dimensão 64 é a (210), como visto anteriormente na tabela (2.3). O estudo dos pesos e das raízes de uma álgebra são de fundamental importância para determinarmos as relações matemáticas com o código genético. Para isso temos que entender o que é uma *subálgebra de Cartan*.

Dado um espaço vetorial  $V$ . Um subespaço  $W \subset V$  é chamado de invariante sobre um conjunto de transformações lineares  $T$  do espaço vetorial  $V$  se para cada  $\tau \in T$  teremos  $\tau W \subset W$ . O conjunto das transformações lineares  $T$  é chamado de *semi-simples* se o complemento de cada subespaço invariante de  $V$  com respeito a  $T$  também for um subespaço invariante.

**Definição 2.4.2** *Subálgebra de Cartan.* Uma subálgebra  $H$  de uma álgebra semi-simples  $L$  é chamada de subálgebra de Cartan se:

- 1 -  $H$  é uma subálgebra maximal comutativa em  $L$ .
- 2 - Para um arbitrário  $X \in H$  a transformação  $adX$  do espaço  $L$  é semi-simples. Onde  $adX$  é dado por

$$adX(Y) \equiv [X, Y] \quad X, Y \in H. \quad (2.55)$$

Dado  $\alpha$  como uma função linear de um espaço vetorial complexo  $H \subset L$  onde  $H$  é uma subálgebra de Cartan de  $L$ . Denotamos por  $L^\alpha$  o subespaço linear definido pela condição

$$L^\alpha \equiv \{Y \in L : [X, Y] = \alpha(X)Y \text{ para todo } X \in H\}. \quad (2.56)$$

Se este conjunto  $L^\alpha \neq \{0\}$  então  $\alpha$  é chamado de raiz e  $L^\alpha$  o espaço das raízes. O nome raiz vem do fato que  $[X, Y] = \alpha Y$  é uma equação de autovalor, e os  $\alpha$ 's são as soluções das equações seculares  $\det[X^i C_{ij}^k - \alpha \delta_j^k] = 0$  em um dado sistema de coordenadas.

Para determinar um sistemas de raízes de uma dada álgebra, por exemplo  $sl(n, C)$ , devemos escolher uma base qualquer como base da subálgebra de Cartan  $H$ , tomemos então

$$H_i = e_{ii} - e_{i+1, i+1}, \quad i = 1, 2, \dots, n-1, \quad (2.57)$$

por exemplo  $H_1$ , para  $n = 4$ , é da forma

$$H_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Note que o  $Tr(H_i) = 0$ . Depois determinamos a forma explícita do sistema de raízes  $\Delta$ . Usando a equação de autovalores  $(X, H_\alpha) = \alpha(X)$  para todo  $X \in H$  nós temos

$$\alpha_{ik}(X) = (X, H_{\alpha_{ik}})$$

para um arbitrário  $X = A_{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n} \in H$ , onde os  $A_{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n} = \sum_{i=1}^n \lambda_i e_{ii}$ , com isso podemos determinar o vetor  $H_{\alpha_{ik}} \in H$  representando ele na forma

$$H_{\alpha_{ik}} = \sum_{s=1}^n \mu_s e_{ss}, \quad \sum_{s=1}^n \mu_s = 0. \quad (2.58)$$

Nós temos então

$$\alpha_{ik}(A_{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n}) = (A_{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n}, A_{\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n}) = \lambda_i - \lambda_k.$$

Usando  $(X, Y)_{sl(n, C)} = 2n Tr(X \cdot Y)$ , onde  $X, Y \in sl(n, C)$  e a relação  $A_{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n} = \sum_{i=1}^n \lambda_i e_{ii}$  teremos por outro lado

$$(A_{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n}, A_{\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n}) = 2n \text{Tr}(A_{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n} \cdot A_{\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n}) = 2n \sum_{s=1}^n \lambda_s \mu_s.$$

Como a equação

$$2n \sum_{s=1}^n \lambda_s \mu_s = \lambda_i - \lambda_k \quad (2.59)$$

deve ser satisfeita para um arbitrário  $\lambda_s, s = 1, 2, \dots, n$ , contanto que  $\sum_{s=1}^n \lambda_s = 0$ . Isto acontece em (2.59) se e somente se

$$\mu_s = \begin{cases} \frac{1}{2n}, & s = i \\ -\frac{1}{2n}, & s = k \\ 0, & s \neq i, k \end{cases}. \quad (2.60)$$

Usando as equações (2.59) e (2.60), teremos que os vetores  $H_{\alpha_{ik}} \in H$  correspondentes as raízes  $\alpha_{ik}$  são dados por

$$H_{\alpha_{ik}} = \frac{1}{2n}(e_{ii} - e_{kk}), \quad i, k = 1, 2, \dots, n, \quad i \neq k. \quad (2.61)$$

Se nós fizermos

$$\widetilde{H}_i = \frac{1}{2n} e_{ii}, \quad (2.62)$$

então o sistema de raízes  $\Delta$  para o  $sl(n, C)$  é dado por:

$$\Delta(sl(n, C)) = \{\widetilde{H}_i - \widetilde{H}_k, \quad i, k = 1, 2, \dots, n, \quad i \neq k\}. \quad (2.63)$$

Com isto fechamos o estudo das raízes. O interesse agora se volta para os pesos da representação (210) do  $Sp(6)$ . No modelo algébrico para o código génético [1] a cadeia

gerada pela quebra da irredutibilidade pelos subgrupos maximais é dada por (3.1) em cada etapa temos uma relação de simetrias associadas, como vimos na tabela 4. As relações para o modelo algébrico são descritas abaixo:

$$\begin{aligned}
 Sp(6) &\rightarrow [\Upsilon_1, \Upsilon_2, \Upsilon_3], \\
 Sp(4) \times SU(2) &\rightarrow [\sigma_1, \sigma_2], L_3, \\
 SU(2) \times SU(2) \times SU(2) &\rightarrow L_1, L_2, L_3, \\
 U(1) \times U(1) \times U(1) &\rightarrow M_1, M_2, M_3.
 \end{aligned} \tag{2.64}$$

Estas simetrias com visto na tabela 4 são representadas por números, estes chamados de pesos da representação. A álgebra associada ao grupo  $Sp(6)$  tem 21 operadores onde as relações estão definias em qualquer livro de teoria de grupos.

A subálgebra de cartan que está contida na álgebra associada ao grupo  $Sp(6)$  contém 3 geradores. A idéia é construir vetores com o números que representam os grupos e seus subgrupos. Usando o aoutovetor:

$$|i\rangle = \left| \begin{array}{ccc} \Upsilon_1 & \Upsilon_2 & \Upsilon_3 \\ & \sigma_1 & \sigma_2 \\ L_1 & L_2 & L_2 \\ M_1 & M_2 & M_3 \end{array} \right\rangle \quad i = 1, 2, \dots, 64. \quad , \tag{2.65}$$

como o vetor da representação. A representação (210) tem dimensão 64, portanto conseguimos através dessa representação construir os 64 vetores, usando a subálgebra de Cartan, que tem 3 geradores, note que 3 é o rank da álgebra  $sp(6)$  e note que para cada vetor teremos 3 operadores da subálgebra de Cartan atuando

$$\begin{aligned}
H_1 \cdot |1\rangle &= \lambda_1^1 |1\rangle, \\
H_2 \cdot |1\rangle &= \lambda_2^1 |1\rangle, \\
H_3 \cdot |1\rangle &= \lambda_3^1 |1\rangle, \\
&\vdots, \\
H_1 \cdot |64\rangle &= \lambda_1^{64} |64\rangle, \\
H_2 \cdot |64\rangle &= \lambda_2^{64} |64\rangle, \\
H_3 \cdot |64\rangle &= \lambda_3^{64} |64\rangle.
\end{aligned} \tag{2.66}$$

O que temos então são trincas de autovalores  $(\lambda_1^1, \lambda_2^1, \lambda_3^1), \dots, (\lambda_1^{64}, \lambda_2^{64}, \lambda_3^{64})$  nos dando 64 vetores no espaço tridimensional. O objeto gerado por estes vetores é chamado de *grupo de Weyl* da representação (210) do  $Sp(6)$ .

Aqui o grupo de *Weyl* do  $Sp(6)$  coincide com o grupo de simetria  $O_h$  ou seja, um grupo de 48 elementos que deixa um octaedro invariante, inclusive levando-se em consideração a inversão pura. A construção do nosso mapa se fará em torno dessa simetria,  $O_h$ . Posteriormente descreveremos o objeto resultante da composição das trincas de autovalores. Este sendo nosso principal objeto de estudo.

## Capítulo 3

# Código Genético e Teoria de Grupos

Grande parte da informação biológica contida em cada ser vivo é encontrada em uma molécula em forma de dupla hélice e se encontra armazenada em um longo polímero chamado DNA (ácido desoxiribonucléico). Por sua vez a sua unidade de composição básica é chamada de nucleotídeo que aparece em 4 formas distintas: A, T, C e G. A evolução da vida depende da produção de proteínas pelas células que depende das informações contidas no DNA encontrados em seus núcleos, nas células eucariotas. Nesse processo acontece a participação de um segundo polímero que é constituído pelos nucleotídeos A, C, G e U. Esta macromolécula tem a função de transcrever e traduzir essas informações afim de iniciar o processo de síntese de proteína. Este segundo polímero é o RNA (ácido ribonucléico).

A importância do DNA está em dar as informações corretas ao RNA para que o processo de síntese ocorra sem que haja erros. Um erro neste caso significaria por exemplo, a interrupção da vida. No processo de síntese temos três tipos de RNA presentes:

- mRNA - RNA mensageiro,
- tRNA - RNA de transferência,
- rRNA - RNA ribossômico,

A síntese de proteínas se dá em um estágio: *tradução*. Na figura (3.1) temos esquematicamente como é feito o processo de síntese de proteína. Os componentes básicos para a formação das proteínas são os aminoácidos. A informação para a construção de um aminoácido específico para a produção de uma proteína está contida no DNA que é transcrita afim

de iniciar o processo de síntese. Essa informação está contida na seqüência de nucleotídeos no DNA. Essa “leitura” é feita em triplete, cada triplete representa um aminoácido que participará do processo de síntese. Os aminoácidos são especificados por combinações de 3 bases chamadas de códon.

O número de combinações possíveis é dado pela possibilidade de escolha de uma das quatro bases em cada posição, sendo 3 posições possíveis, o número de combinações é 64. Note que essas 64 combinações resultam em apenas 20 aminoácidos e três códigos de terminação, o que acarreta uma alta degenerescência ao código genético. É interessante observar que o aminoácido é determinado pela posição dessas bases e em alguns casos somente a posição das duas bases iniciais, [17].

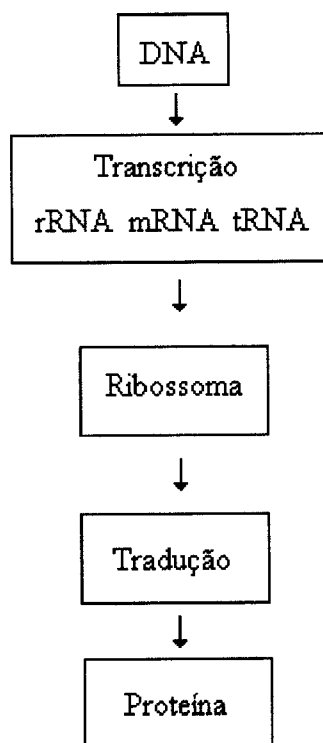


Figura 3.1: Esquema do processo de síntese de proteínas.

O processo de tradução é mediado pelo RNA mensageiro que contém uma cópia da seqüência de nucleótidos contida no DNA. Esta informação é levada ao ribossoma onde a síntese de proteína se realiza. Cada códon ou seja, cada triplete de nucleotídeos, do



mRNA define uma instrução única e universal para a inclusão de um aminoácido na proteína, conforme a figura (3.2). Hoje sabemos que a universalidade do código genético é violada em vários códigos mitocondriais e nucleares [19], mas mesmo assim a grande maioria das espécies utilizam o código padrão em seus processos biológicos.

A seqüência de códons que é responsável pela informação a qual é passada às organelas responsáveis pela produção dos aminoácidos no código genético padrão nos dando 20 aminoácidos e um sinal de terminação codificam os seguinte aminoácidos: Fenilalanina (Phe), Leucina (Leu), Isoleucina (Ile), Metionina (Met), Valina (Val), Serina (Ser), Prolina (Pro), Treonina (Thr), Alanina (Ala), Tirosina (Tyr), Histidina (His), Glutamina (Glu), Aspargina (Asn), Lisina (Lys), Ácido Aspártico (Asp), Ácido Glutâmico (Glu), Cisteina (Cys), Triptofano (Trp), Arginina (Arg), Serina (Ser), Glicina (Gly) e o sinal de terminação (Term). Na figura (3.2) listamos os 20 aminoácidos e os 64 códons correspondentes à suas codificações assim como os 3 códons responsáveis pela codificação do sinal de terminação. A degenerescência chega a 6 códons para os aminoácidos Ser, Leu e Arg.

<i>Degenerescência</i>	<i>Códons</i>	<i>Aminoácidos</i>
6	<i>CGC, CGU, CGA, CCG, AGA, AGG UUA, UUG, CUU, CUC, CUA, CUG AGU, AGC, UCU, UCC, UCA, UCG</i>	<i>Arg Leu Ser</i>
4	<i>(GCU, GCC, GCA, GCG), (GGU, GGC, GGA, GGG) (CCU, CCC, CCA, CCG), (GUU, GUC, GUA, GUG) ACU, ACC, ACA, ACG</i>	<i>(Ala), (Gly) (Pro), (Val) Thr</i>
3	<i>UAA, UGA, UAG AUU, AUA, AUC</i>	<i>Term Ile</i>
2	<i>(UUC, UUU), (GAU, GAC), (GAA, GAG) (AAU, AAC), (AAA, AAG), (UGU, UGC) (UAU, UAC), (CAU, CAC), (CAA, CAG)</i>	<i>(Phe), (Asp), (Glu) (Asn), (Lys), (Cys) (Tyr), (Gln), (His)</i>
1	<i>UGG AUG</i>	<i>Trp Met</i>

Figura 3.2: Aminoácidos e códons responsáveis por sua codificação e seu número total de códons por aminoácido.

A degenerescência do código genético foi o ponto de partida para a elaboração do modelo

algébrico[1, 2]. Aqui degenerescência corresponde ao seguinte fato mais de um códon é responsável pela informação que codifica um único aminoácido.

Como é conhecido em ciência, degenerescência significa invariância e invariância implica em simetria. Desta maneira é natural investigarmos se simetrias relacionadas ao processo de síntese de proteínas forma selecionadas na evolução. Podemos imaginar que no começo da vida todos os aminoácidos e o código de terminação se encontravam em uma “única mistura”, os 64 códons eram um único objeto biológico que evoluiu através de “quebras sucessivas de simetria” para o que conhecemos hoje como código genético.

O objetivo então era procurar na matemática, mais especificamente em Teoria de Grupos, um grupo que possuísse propriedades que fossem compatíveis com as degenerescências observadas no código. Esta busca foi feita por Hornos *et. al.* [1, 2], chegando ao grupo de simetria  $Sp(6)$  como o grupo que melhor explicava a simetria do código genético padrão.

Partindo das idéias de quebra de simetria e evolução foi proposto um esquema evolutivo para o código genético padrão. Esta cadeia foi baseada na quebra da álgebra  $Sp(6)$  em suas subálgebras dando uma idéia de evolução temporal para o processo de quebra de simetria. O resultado desta análise e a cadeia de quebra de simetria que foi a seguinte:

$$\begin{aligned} sp(6) &\supset sp(4) \oplus su(2) \supset su(2) \oplus su(2) \oplus su(2) \supset & (3.1) \\ su(2) \oplus o(2) \oplus su(2) &\supset su(2) \oplus o(2) \oplus so(2). \end{aligned}$$

Esta cadeia foi uma sugestão para explicar a degenerescência do código genético padrão, onde em cada estágio da quebra é possível rotular um ou mais aminoácidos com os pesos de cada estágio da quebra de simetria até termos todos os 20 aminoácidos e o código de terminação. Olhando para os grupos que formam a cadeia no modelo algébrico podemos construir uma “árvore de ramificação” que na verdade é um gráfico de evolução temporal dos aminoácidos. O resultado é mostrado na figura (3.3).

Propostas de como esta evolução já são conhecidas na literatura e uma delas [20] demonstrou que em um estágio de evolução temporal os aminoácidos eram em um total de 14, formando assim um código ancestral. Notemos que no estágio C do processo evolutivo dado

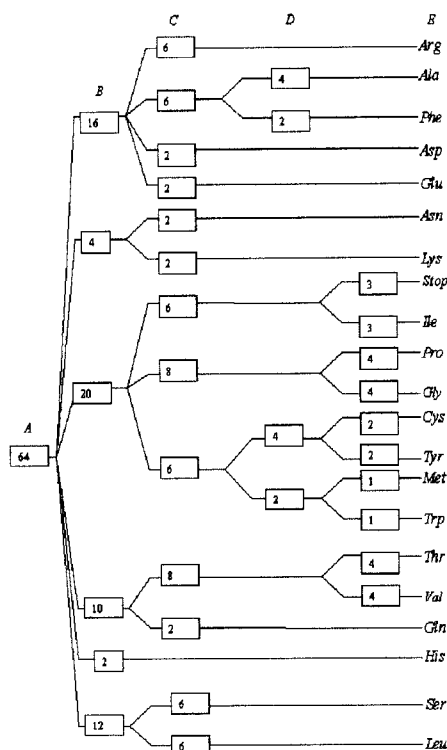


Figura 3.3: Cadeia de ramificação da representação  $(2, 1, 0)$  do  $Sp(6)$ , sentido evolutivo ao código genético. Uma estrutura primordial é “quebrada” em subestruturas.

pela figura (3.3) temos 14 subespaços ou seja, como esses subespaços representam aminoácidos ao fim da cadeia de simetria é mais do que natural que em etágios anteriores estes 14 subespaços representem aminoácidos em um estágio de evolução anterior ao que se conhece antes. Aqui devemos ter um cuidado especial com a palavra evolução, neste caso específico evolução não significa maior adaptabilidade ao meio e sim o processo de diferenciação dos códons em saltos como visto na figura (3.3) proposta pelo modelo algébrico.

A análise de várias teorias sobre a evolução dos códons mostram que estas tem um consenso no que diz respeito à evolução do código triplete [21]. Todas estas teorias apresentam vários fatores que são levados em consideração para essa análise. Estas teorias tem um consenso que diz que todos os códons derivam de códons mais novos cronologicamente falando. A cadeia de ramificação dado pela figura (3.3) é mais uma proposta onde um único aminoácido é “ancestral” de todos demais.

### 3.1 Aminoácidos e Pesos

Agora vamos discutir como é feita a relação dos códons com os vetores e pesos da representação  $(2, 1, 0)$  da álgebra  $sp(6)$  mostrado na figura (3.4). Não só podemos relacioná-los como também podemos levar em consideração as degenerescências que são bem representadas no modelo algébrico. A degenerescência vetorial é entendida como vetores de diferentes representações são iguais, ou seja estão sobre a mesma reta um exemplo é o vetor  $(0, 0, 1)$  que pode ser encontrado na representação de dimensão 20, 4 e 2 distingüidas a partir da etapa B do processo de evolução via quebra de simetria.

A primeira coluna exhibe o grupo ancestral e o peso máximo de sua representação de dimensão 64. Na terceira aparecem as 6 representações da álgebra  $sp(4) \oplus su(2)$  contidas em  $sp(6)$ .

$sp(6)$	$dim$	$sp(4) \oplus su(2)$	$dim$	$su(2) \oplus su(2) \oplus su(2)$	$dim$	$su(2) \oplus o(2) \oplus su(2)$	$dim$	$su(2) \oplus o(2) \oplus so(2)$	$dim$				
$(2, 1, 0)$	64	$(2, 0) - 1$	20	$1 - 1 - 1$	8	$1 - (+1) - 1$	8	$1 - (+1) - (+1)$	4				
								$1 - (+1) - (-1)$	4				
				$2 - 0 - 1$	6	$2 - 0 - 1$	6	$2 - 0 - (+1)$	3				
								$2 - 0 - (-1)$	3				
				$0 - 2 - 1$	6	$0 - (+2) - 1$	4	$0 - (+2) - (+1)$	2				
								$0 - (+2) - (-1)$	2				
						$0 - 0 - 1$	2	$0 - 0 - (+1)$	1				
								$0 - 0 - (-1)$	1				
								$2 - (+1) - 0$	6				
		$(1, 1) - 0$	16			$2 - 1 - 0$	6	$2 - (+1) - 0$	6	$1 - (+2) - 0$	4		
						$1 - 2 - 0$	6	$1 - (+2) - 0$	4	$1 - 0 - 0$	2		
								$1 - 0 - 0$	2	$1 - 0 - 0$	2		
								$0 - 1 - 0$	2	$0 - (+1) - 0$	2		
								$1 - 0 - 2$	6	$1 - 0 - 2$	6	$1 - 0 - (+1)$	2
										$1 - 0 - (-1)$	2		
		$(1, 0) - 2$	12							$1 - 0 - 0$	2		
										$0 - (+1) - 2$	6		
										$0 - (+1) - (+2)$	2		
										$0 - (+1) - (-2)$	2		
		$(0, 1) - 1$	10			$1 - 1 - 1$	8	$1 - (+1) - 1$	8	$0 - (+1) - 0$	2		
										$1 - (+1) - (+2)$	4		
								$0 - 0 - 1$	2	$1 - (+1) - (-2)$	4		
		$(1, 0) - 0$	4							$0 - 0 - (+1)$	1		
										$0 - 0 - (-1)$	1		
						$1 - 0 - 0$	2	$1 - 0 - 0$	2				
						$0 - 1 - 0$	2	$0 - (+1) - 0$	2				
$(0, 0) - 1$	2			$0 - 0 - 1$	2	$0 - 0 - 1$	2	$0 - 0 - (+1)$	1				
								$0 - 0 - (-1)$	1				

Figura 3.4: Processo de quebra de simetria da álgebra  $sp(6)$  em suas subálgebras. As dimensões se relacionam de 1 para 1 com a degenerescência do código.

O primeiro par ordenado, nessa coluna, representa o peso máximo da álgebra  $sp(4)$  enquanto que o segundo está associada ao  $su(2)$  e concide com duas vezes o número quântico de momento angular. O número de representações de uma álgebra em outra, seus pesos máximos e suas dimensões, conhecidos como regras de ramificação listados nessa tabela, foram obtidos da compilação de Mackey e Patera [25]. Observe que as dimensões são exibidas na quarta coluna da mesma tabela. Esse primeiro passo corresponde a primeira quebra de simetria. As colunas 5 e 6 contêm informação de mesma natureza para a quebra espontânea de  $sp(4) \oplus su(2)$  em  $su(2) \oplus su(2) \oplus su(2)$  enquanto que as colunas 7 e 8 reproduzem a redução de  $su(2) \oplus su(2) \oplus su(2)$  a  $su(2) \oplus o(2) \oplus su(2)$ . Finalmente vemos a quebra de  $su(2) \oplus o(2) \oplus su(2)$  para  $su(2) \oplus o(2) \oplus so(2)$  representada nas duas colunas finais. Como já mencionamos a partir da segunda quebra as regras de ramificação são trivialmente obtidas uma vez que só estão envolvidos exemplares do grupo de rotações. As representações envoltas na ultima coluna da tabela correspondem a termos de “freezing”, isto é interrupções no processo de quebra espontânea nessessárias para a obtenção do código padrão. Como veremos adiante alguns desses aspectos serão produzidos tambem pela evolução do sistema dinâmico.

primeira posição	segunda posição				terceira posição
	U	C	A	G	
U	UUU Phe	UCU Ser	UAU Tyr	UGU Cys	U
	UUC Phe	UCC Ser	UAC Tyr	UGC Cys	C
	UUA Leu	UCA Ser	UAA Stop	UGA Stop	A
	UUG Leu	UCG Ser	UAG Stop	UGG Trp	G
C	CUU Leu	CCU Pro	CAU His	CGU Arg	U
	CUC Leu	CCC Pro	CAC His	CGC Arg	C
	CUA Leu	CCA Pro	CAA Gln	CGA Arg	A
	CUG Leu	CCG Pro	CAG Gln	CGG Arg	G
A	AUU Ile	ACU Thr	AAU Asn	AGU Ser	U
	AUC Ile	ACC Thr	AAC Asn	AGC Ser	C
	AUA Ile	ACA Thr	AAA Lys	AGA Arg	G
	AUG Met	ACG Thr	AAG Lys	AGG Arg	A
G	GUU Val	GCU Ala	GAU Asp	GGU Gly	U
	GUC Val	GCC Ala	GAC Asp	GGC Gly	C
	GUA Val	GCA Ala	GAA Glu	GGA Gly	G
	GUG Val	GCG Ala	GAG Glu	GGG Gly	A

Figura 3.5: Códon e seus aminoácidos conforme a mudança de posição das bases.

Como é característico de todo modelo baseado em simetrias, a teoria fornece apenas o arcabouço estrutural ou a “arena ” para o processo sob investigação. No presente caso, obtemos das regras de ramificação apenas as degenerescências em cada passo e não a correspondência entre códons e aminoácidos e os vetores da representação. Em alguns casos essa identificação é trivial. Por exemplo no caso do Trp e Met que não são degenerados a tabela anterior dada pela figura (3.4) nos dá somente duas possibilidades de etiquetamento. Ambos necessariamente estão na representação  $(2, 0) - (1)$  da álgebra  $sp(4) \times su(2)$ . Prosseguindo vemos que somente existem duas possibilidades de etiquetamento para o triptofano e a metionina. Em situação semelhante estão os códons de terminação e da isoleucina. Já para os dubletos temos grande liberdade. A verificação deste etiquetamento será um dos pontos importantes desse trabalho. Veremos que o sistema dinâmico diferencia os códons em um processo de evolução similar ao proposto pelo modelo algébrico. A ratificação do modelo algébrico só é possível a partir da construção de um sistema dinâmico que preserve as propriedades de simetria relacionadas com o modelo. Para tanto usaremos a simetria resultante quando os vetores da representação dados na figura (3.4) são colocados em um espaço  $\mathfrak{R}^3$ , verificaremos que este objeto, conhecido como grupo de *Weyl* do grupo  $Sp(6)$  preserva a simetria do grupo  $O_h$ , grupo este com 48 elementos.

O problema do etiquetamento foi resolvido alguns anos após a formulação do modelo[23]. Foi possível reduzir em muito a liberdade na identificação compatibilizando aspectos matemáticos do modelo e fatos biológicos. Adotaremos aqui esse etiquetamento. Finalizamos esta seção listando na tabela (3.1) os números associados a cada um dos códons.

Essa rotulação mostrada na tabela (3.1) é um ponto importante do modelo algébrico. Através dela é possível determinar famílias de aminoácidos que pertencem à um ancestral comum por exemplo, vemos que os aminoácidos Thr, Val e Gln se encontram na etapa B dado pela figura (3.3) em uma mesma representação. A proposta do modelo é que se esses aminoácidos se encontravam em uma mesma representação significa que estes fazem parte então de um ancestral comum que sofreu mudanças no decorrer do tempo e por gerou esses aminoácidos separadamente.

Podemos então ver por análise da figura (3.3) as seguintes famílias começando a partir

Aminoácido	Códon	Peso	Aminoácido	Códon	Peso
Arg	CGU	$(-2, 1, 0)$	Thr	ACU	$(-1, 1, 1)$
	CGC	$(2, 1, 0)$		ACC	$(1, 1, 1)$
	CGA	$(-2, -1, 0)$		ACG	$(1, -1, 1)$
	CGG	$(2, -1, 0)$		ACA	$(-1, -1, 1)$
	AGA	$(0, 1, 0)$	Val	GUU	$(-1, 1, -1)$
	AGG	$(0, -1, 0)$		GUC	$(1, 1, -1)$
Leu	UUA	$(0, 1, 0)$		GUG	$(1, -1, -1)$
	UUG	$(0, -1, 0)$		GUA	$(-1, -1, -1)$
	CUU	$(0, 1, 2)$	Ile	AUU	$(-2, 0, 1)$
	CUC	$(0, -1, 2)$		AUA	$(0, 0, 1)$
	CUA	$(0, 1, -2)$		AUC	$(2, 0, 1)$
	CUG	$(0, -1, -2)$	Term	UAA	$(-2, 0, -1)$
Ser	AGU	$(-1, 0, 0)$		UGA	$(0, 0, -1)$
	AGC	$(1, 0, 0)$		UAG	$(2, 0, 1)$
	UCU	$(-1, 0, 2)$	Phe	UUU	$(-1, 0, 0)$
	UCC	$(1, 0, 2)$		UUC	$(1, 0, 0)$
	UCA	$(-1, 0, -2)$	Asp	GAU	$(-1, 0, 0)$
	UCG	$(1, 0, -2)$		GAC	$(1, 0, 0)$
Ala	GCU	$(-1, 2, 0)$	Glu	GAA	$(0, 1, 0)$
	GCC	$(1, 2, 0)$		GAG	$(0, -1, 0)$
	GCA	$(-1, -2, 0)$	Asn	AAU	$(-1, 0, 0)$
	GCG	$(1, -2, 0)$		AAC	$(1, 0, 0)$
Pro	CCU	$(-1, 1, 1)$	Lys	AAA	$(0, 1, 0)$
	CCC	$(1, 1, 1)$		AAG	$(0, -1, 0)$
	CCG	$(1, -1, 1)$	Gln	CAA	$(0, 0, 1)$
	CCA	$(-1, -1, 1)$		CAG	$(0, 0, -1)$
Gly	GGU	$(-1, 1, -1)$	His	CAU	$(0, 0, 1)$
	GGC	$(1, 1, -1)$		CAC	$(0, 0, -1)$
	GGA	$(-1, -1, -1)$	Cys	UGU	$(0, 2, -1)$
	GGG	$(1, -1, -1)$		UGC	$(0, -2, -1)$
Tyr	UAU	$(0, 2, 1)$	Met	AUG	$(0, 0, -1)$
	UAC	$(0, -2, 1)$	Trp	UGG	$(0, 0, 1)$

Tabela 3.1: Rotulação dos códons conforme os pesos da representação.

da etapa B:

- ▶ família 1: Arg, Ala, Phe, Asp, Glu;
- ▶ família 2: Asn e Lys;
- ▶ família 3: Term, Ile, Pro, Gly, Cys, Tyr, Met e Trp;
- ▶ família 4: Thr, Val e Gln;
- ▶ família 5: His;

▶ família 6: Ser e Leu. A verificação dessa proposta consiste em um problema formidável a ser verificado em conjunto com os especialistas da área de evolução. A fase posterior será a de análise das simetrias finitas correlacionadas com o modelo aglébrico. Da mesma maneira que temos uma cadeia de quebra de simetria através da álgebra  $sp(6)$  teremos também uma cadeia de quebra de simetria através dos grupos finitos que representam essa álgebra em um espaço tridimensional.

## 3.2 Quebra de Simetria no Diagrama de Pesos

O diagrama de pesos ou seja, a representação tridimensional correspondente a representação dos códons para a álgebra simplética  $Sp(6)$  é mostrado na figura (3.6). Esta figura foi construída a partir das coordenadas de cada códon contida na tabela (3.1). As esferas representam os códons e somente foram desenhadas para uma melhor visualização.

Este diagrama consiste em um octaedro truncado externo e um octaedro regular interno essa figura externa é conhecida também como dodecaedro rômico[24]. A degenerescência do diagrama pode ser vista pelo acúmulo de 4 esferas nos vértices do octaedro interno e pelos pares no centro do hexágonos<sup>1</sup>. Ela não tem conexão com a degenerescência do código, é uma característica da representação diagramática dos pesos.

Se notarmos a simetria da figura (3.6) veremos que esta é invariante ou seja, não muda de posição ao executarmos operações de simetria específicas como por exemplo rotações de  $90^0$

---

<sup>1</sup>Na parte superior aparentemente aparecem 4 esferas mas, duas são do hexágono frontal e duas do hexágono situado atrás, essa dificuldade em visualizar essas degenerescência é gerada perspectiva.



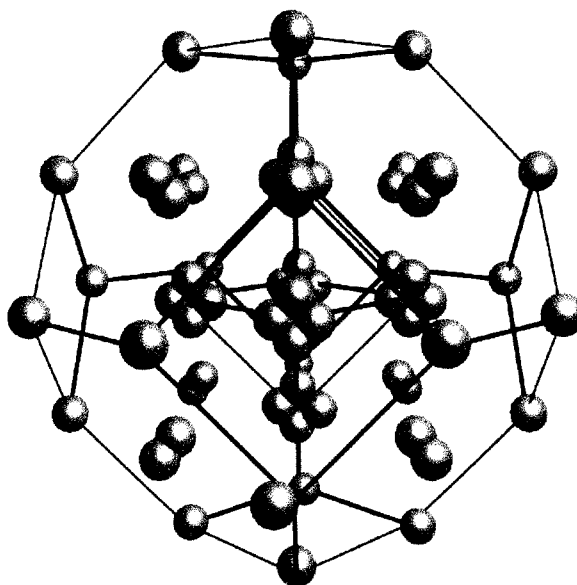


Figura 3.6: Diagrama de pesos da representação  $(2,1,0)$  do  $Sp(6)$ , simetria total.

em torno do eixo  $z$ . O conjunto de todas as operações possíveis neste objeto forma o grupo de simetria  $O_h$  e as operações de simetria que deixam o diagrama invariante são listadas abaixo como subgrupo do grupo  $S_6$  de permutações.

$\{e\}$  - identidade.

$\{[24][56]\}, \{[13][56]\}, \{[13][24]\}$  - rotações em torno dos eixos  $x$ ,  $y$  e  $z$  de  $180^\circ$ .

$\{[164][235]\}, \{[126][345]\}, \{[154][236]\}, \{[125][346]\}, \{[146][253]\}, \{[162][354]\},$

$\{[145][263]\}, \{[152][364]\}$  - rotações de  $120^\circ$  nas faces.

$\{[12][34][56]\}, \{[14][23][56]\}, \{[16][35][24]\}, \{[15][36][24]\}, \{[13][26][45]\}, \{[13][25][46]\}$  - rotações

nas arestas de  $90^\circ$ .

$\{[2645]\}, \{[1536]\}, \{[1234]\}, \{[2546]\}, \{[1635]\}, \{[1432]\}$  - rotações nos eixos  $x$ ,  $y$  e  $z$  de  $90^\circ$ .

$\{[13][24][56]\}$  - inversão e  $\{[13]\}, \{[24]\}, \{[56]\}$  - reflexões.

$\{[126345]\}, \{[152364]\}, \{[125346]\}, \{[162354]\}, \{[154362]\}, \{[146325]\},$

$\{[164352]\}, \{[145326]\}$  - operações compostas.

$\{[14][23]\}, \{[12][34]\}, \{[15][36]\}, \{[16][35]\}, \{[25][46]\}, \{[26][45]\}$  - reflexões.

$\{[2645][13]\}, \{[1536][24]\}, \{[1234][56]\}, \{[2546][13]\}, \{[1635][24]\}, \{[1432][56]\}$  - operações com-

postas.

A conexão entre as permutações e as operações de simetria podem ser entendidas com o

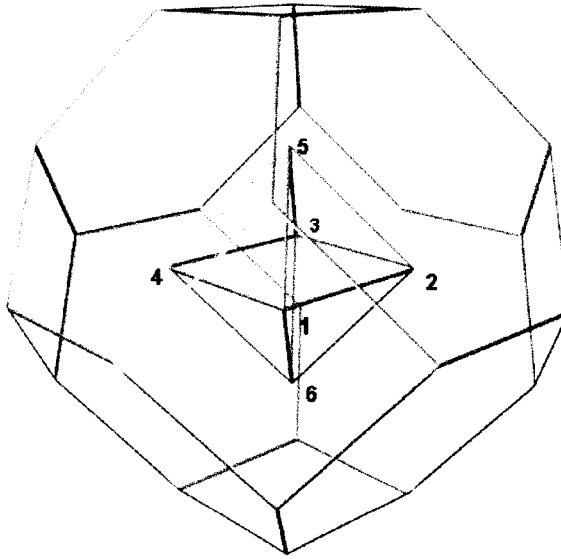


Figura 3.7: Conexão entre a simetria octaédrica via permutação do índices 1,2,3,4,5 e 6 no diagrama.

auxílio da figura (3.7). Nesta os vértices do octaedro são rotulados pelos índices 1, 2, 3, 4, 5 e 6. As permutações agem nesses índices, na forma de rotações ou reflexões. Por exemplo, a permutação  $[12][34]$  é uma rotação de  $90^\circ$  em torno do reta que liga os pontos 5 e 6. Reta essa que representa o eixo  $z$  do espaço. O mesmo ocorre para as retas que ligam os índices 1 e 3 e 2 e 4 que representam os eixos  $x$  e  $y$  respectivamente. Todas as operações de simetria possíveis que o deixam esse objeto invariante formam o grupo octaédrico com suas 48 transformações. Essas operações de simetria conectam os 64 códon, mostrados na figura (3.6), indistinguíveis antes da primeira quebra de simetria o que corresponde a etapa A na figura (3.3). Biologicamente falando o modelo sugere que todos os aminoácidos fazem parte de um ancestral comum.

A figura (3.8) mostra o diagrama após a primeira quebra de simetria. Podemos observar que 6 famílias de códon são selecionadas correspondendo a cada uma das representações contidas na álgebra  $sp(4) \oplus su(2)$ . Essas 6 famílias correspondem a etapa (B) na figura (3.3). Em azul vemos os códon para a Ser e Leu que se agrupam na representação  $(1, 0) - 2$  de dimensão 12. Em verde aparecem os códon correspondentes ao Term, Ile, Pro, Val, Cys, Tyr, Met e Trp que se encontram na representação  $(2, 0) - 1$  de dimensão 20. Em lilás vemos

a representação  $(0, 1) - 1$  de dimensão 10. Esta contém os códons para Thr, Gly e Gln. Já em vermelho estão os 16 códons que correspondem aos aminoácidos Arg, Ala, Phe, Asp e Glu, encontrados na representação  $(1, 1) - 0$ . Os 4 códons da Asn e Lys, representação  $(1, 0) - 0$  são mostrados em marrom. Em branco aparecem os códons do aminoácidos His. Essa quebra de simetria reduz as 48 operações de simetria a 16. As operações remanescentes são listadas a seguir.

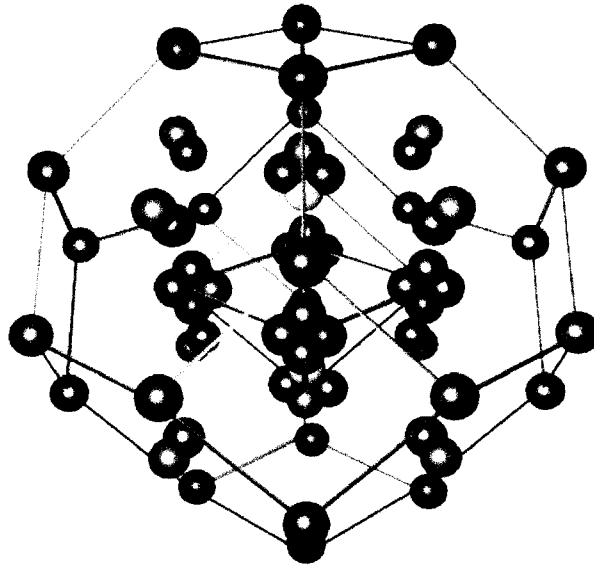


Figura 3.8: Primeira quebra de simetria.

$\{e\}$  - identidade.

$\{[24][56]\}, \{[13][56]\}, \{[13][24]\}$  - rotações em torno dos eixos x, y e z de  $180^\circ$ .

$\{[12][34][56]\}, \{[14][23][56]\}$  - rotações nas arestas de  $90^\circ$ .

$\{[1234]\}, \{[1432]\}$  - rotações nos eixos x, y e z de  $90^\circ$ .

$\{[13][24][56]\}$  - inversão e  $\{[14][23]\}, \{[12][34]\}$  - reflexões.

$\{[13]\}, \{[24]\}, \{[56]\}$  - planos de reflexão.

$\{[1234][56]\}, \{[1432][56]\}$  - operações compostas.

Observa-se que as rotações de  $120^\circ$  em torno do centro dos hexágonos se perdem nesta etapa. O grupo sobrevivente é o grupo  $Z_2 \times D_4$  configurando a início da cadeia de quebra dada por (3.2).

$$Oh \supset Z_2 \times D_4 \supset \dots \quad (3.2)$$

O diagrama na segunda quebra é dado pela figura (3.9). O que corresponde à etapa(C) na figura (3.3). Neste caso teremos 14 famílias de códon representados por 14 esferas de diferentes cores<sup>2</sup>.

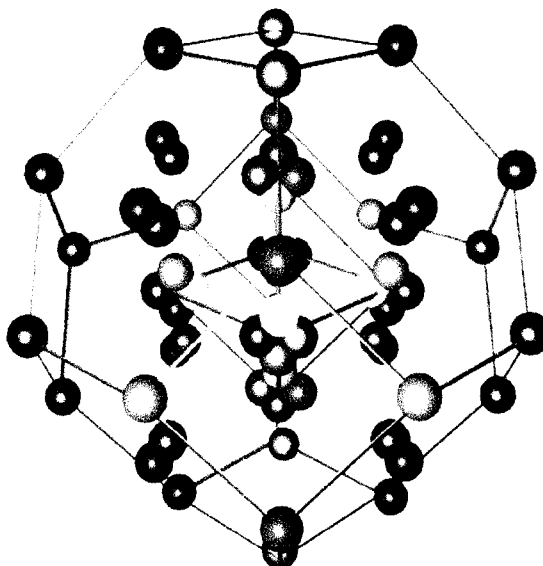


Figura 3.9: Segunda quebra de simetria.

As operações de simetria sobreviventes são:

{e} - identidade.

{[24][56]}, {[13][56]}, {[13][24]} - rotações em torno dos eixos x, y e z de  $180^\circ$ .

{[13][24][56]} - inversão e {[13]}, {[24]}, {[56]} - planos de reflexão.

Esta segunda quebra reduz um grupo de 16 operações de simetria para um grupo de 8 operações de simetria, a cadeia de quebra fica então dada por (3.3).

<sup>2</sup>Aqui existe uma dificuldade em observar as diferentes cores. Isso acontece por limitações no esquema de cores gerado pelo computador.

$$Oh \supset (Z_2)_1 \times D_4 \supset (Z_2)_1 \times (Z_2)_2 \times (Z_2)_3 \supset \dots \quad (3.3)$$

A terceira quebra de simetria que corresponde à redução da álgebra  $su(2) \oplus su(2) \oplus su(2)$  para  $su(2) \oplus so(2) \oplus su(2)$  e em nada altera a simetria anterior. A cadeia então fica;

$$Oh \supset Z_2 \times D_4 \supset (Z_2)_1 \times (Z_2)_2 \times (Z_2)_3 \supset (Z_2)_1 \times (Z_2)_2 \times (Z_2)_3 \supset \dots \quad (3.4)$$

A última quebra de simetria, correspondente à etapa (E) na figura (3.3) mostra a simetria de *Klein* preservada. Após esta quebra de simetria as operações de simetria que restam e que deixam o diagrama de pesos da álgebra  $sp(6)$  invariante são, segundo a figura (3.10), mostrados a seguir.

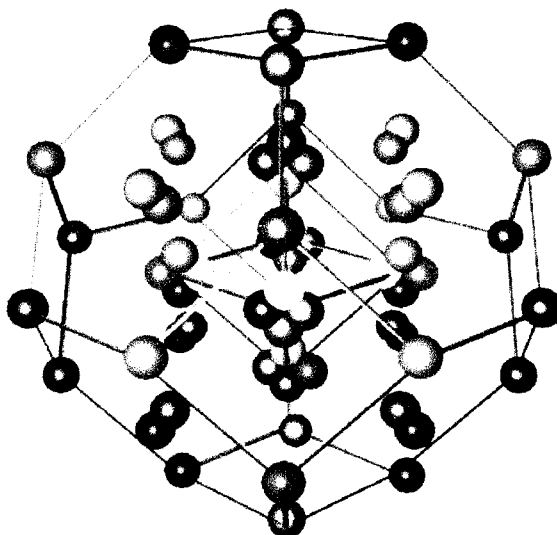


Figura 3.10: Quarta quebra de simetria.

{e} - identidade.

{[13][24]} - reflexões relativas aos planos  $x = 0$  e  $y = 0$  respectivamente.

{[13]}, {[24]} - Note que este grupo tem a seguinte propriedade:

$$[13][24] \otimes [13][24] = e; [13] \otimes [13] = e; [24] \otimes [24] = e.$$

Todo elemento quadrado resulta na identidade, isto caracteriza o grupo de *Klein*. As 8 operações de simetria da etapa anterior se reduzem à 4. A cadeia final de quebra de simetria fica na forma

$$\begin{aligned} Oh &\supset Z_2 \times D_4 \supset (Z_2)_1 \times (Z_2)_2 \times (Z_2)_3 \supset (Z_2)_1 \times (Z_2)_2 \times (Z_2)_3 & (3.5) \\ &\supset K. \end{aligned}$$

A configuração final do código genético é mostrada na figura (3.10).

### 3.3 Aminoácidos e Código de Terminação - Diagrama de Pesos do $sp(6)$

Nesta seção ilustraremos como se arrajam os códons no digrama de pesos e as correspondentes simetrias. Para isso vamos analisar cada plano horizontal do diagrama de pesos na figura (3.10). Posteriormente veremos como o sistema, dinâmico que na verdade é uma aplicação da forma  $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ , que é iterada com uma condição inicial  $(x_0, y_0, z_0)$  atua nessa etapa final da quebra de simetria. Cada ponto define um aminoácido e cada ponto definirá uma condição inicial que será mudada via ação dessa dinâmica levando um aminoácido A em um aminoácido B, veremos que essa ação não só preserva os aminoácidos como ratifica em grande parte os resultados obtidos no modelo algébrico. Para tanto devemos saber quais são as posições dos códons no diagrama já que este objeto e suas simetrias são o objeto central de nosso estudo.

Na figura (3.11) mostramos um corte em  $z = 0$  da figura (3.10)<sup>3</sup> para ilustração da simetria de *Klein*. A correspondência entre os pontos e os aminoácidos é: 1 - Ala (GCU); 2 - Ala (GCC); 3 - Arg (CGC); 4 - Arg (CGG); 5 - Ala (GCG); 6 - Ala (GCA); 7 - Arg (CGA);

<sup>3</sup>As cores aqui podem diferir devido à limitações dos softwares utilizados e às perspectivas empregadas na figura.

8 - Arg (CGU); 9 - Glu (GAA), Arg (AGA), Lys (AAA), Leu (UAA); 10 - Phe (UUC), Asp (GAC), Asn (AAC), Ser (AGC); 11 - Glu (GAG), Arg (AGG), Lys (AAG), Leu (UUG); 12 - Phe (UUU), Asp (GAU), Asn (AAU) e Ser (AGU).

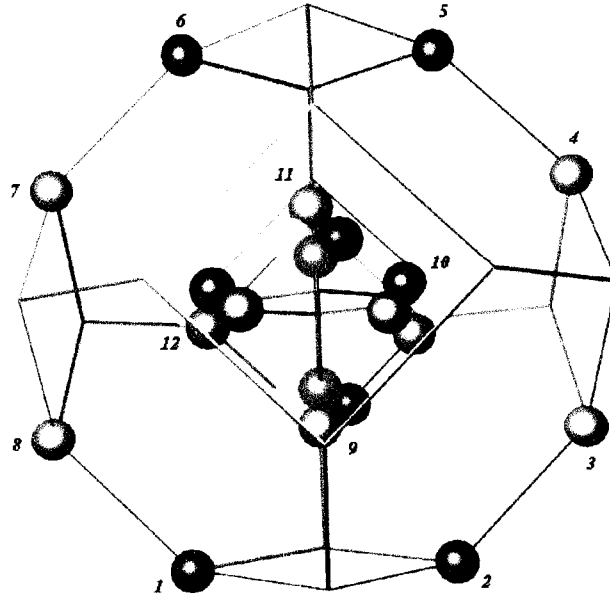


Figura 3.11: Plano  $z = 0$  do diagrama de Weyl.

O diagrama é claramente invariante a reflexões em torno dos planos ortogonais  $x = 0$  e  $y = 0$ . As esferas são numeradas e correspondem aos códons listados a seguir. Podemos ver essas invariâncias claramente se fizermos a seguinte operação  $12 \leftrightarrow 10, 6 \leftrightarrow 5, 7 \leftrightarrow 4, 8 \leftrightarrow 3$  e  $1 \leftrightarrow 2$  essas operações correspondem a reflexão em torno do eixo  $y$  que contém as esferas vermelho claro, azul escuro, bege e marrom. A outra invariância pode ser vista pelas operações  $8 \leftrightarrow 7, 1 \leftrightarrow 6, 2 \leftrightarrow 5, 3 \leftrightarrow 4$  e  $9 \leftrightarrow 11$  correspondendo à reflexão em torno do eixo  $x$ . A figura (3.12) reproduz essencialmente a mesma informação mas exibe com maior clareza a simetria dos códons.

A reflexão em torno do eixo  $x = 0$  pode ser implementada com as transformações  $U \leftrightarrow C$  e  $A \leftrightarrow G$  na terceira base que aparece no diagrama. A primeira é uma simetria exata do código genético mas a segunda não é integralmente preservada pelo código. Ela é violada pelos singletos e tripletos, que não estão no plano  $x = 0$ .

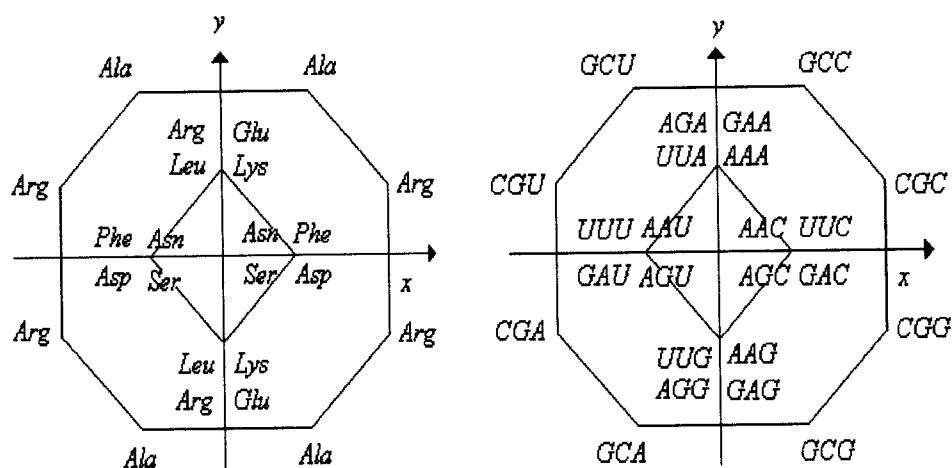


Figura 3.12: Aminoácidos e seus respectivos códons para  $z = 0$ .

A reflexão em torno de  $y = 0$  é implementada pela transformação de A em G no octaedro interno, que já comentamos, e pelas transformações U em A e C em G que só são preservadas pelos quartetos. *Vemos assim que a simetria de Klein não decorre apenas da invariância de U por C na terceira base mas envolve o conjunto das regularidades do código.*

Na figura (3.13) mostramos o plano  $z = -1$  com a equivalência entre os pontos e os códons mostrada na lista que segue. Em todas as figuras é possível fazer uma análise análoga à análise feita na figura (3.11) e facilmente podemos perceber as simetrias preservadas plano a plano. Todas essas simetrias reunidas nos dão como resultado a simetria de *Klein*.

As cores atestam a simetria detalhada na figura (3.14). A situação é totalmente análoga a discutida para o plano  $z = 0$ . A relação entre os aminoácidos, códons e os pontos descritos na figura (3.13) é a seguinte: 1 - Cys (UGC); 2 - Gly (GGG), Val (GUG); 3 - Term (UAG); 4 - Gly (GGC), Val (GUC); 5 - Cys (UGU); 6 - Gly (GGU), Val (GUU); 7 - Term (UAA); 8 - Gly (GGA), Val (GUA); 9 - Met (AUG), Term (UGA), Gln (CAC) e His (CAG).

O plano  $z = 1$  é descrito pelas figuras (3.15) e (3.16). A representação dos pontos nos aminoácidos e seus códons se faz: 1 - Tyr (UAC); 2 - Pro (CCG), Thr (ACG); 3 - Ile (AUC), 4 - Pro (CCC), Thr (ACC); 5 - Tyr (UAU); 6 - Pro (CCU), Thr (ACU); 7 - Ile (AUU); 8 - Pro (CCA), Thr (ACA); 9 - Trp (UGG), Ile (AUA), Gln (CAU) e His (CAA).



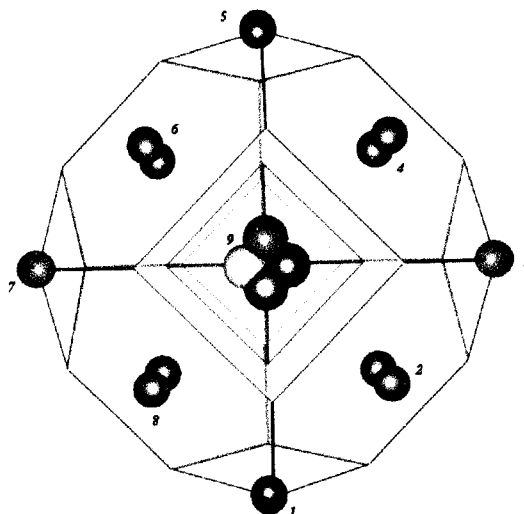


Figura 3.13: Plano  $z = -1$  do diagrama de Weyl.

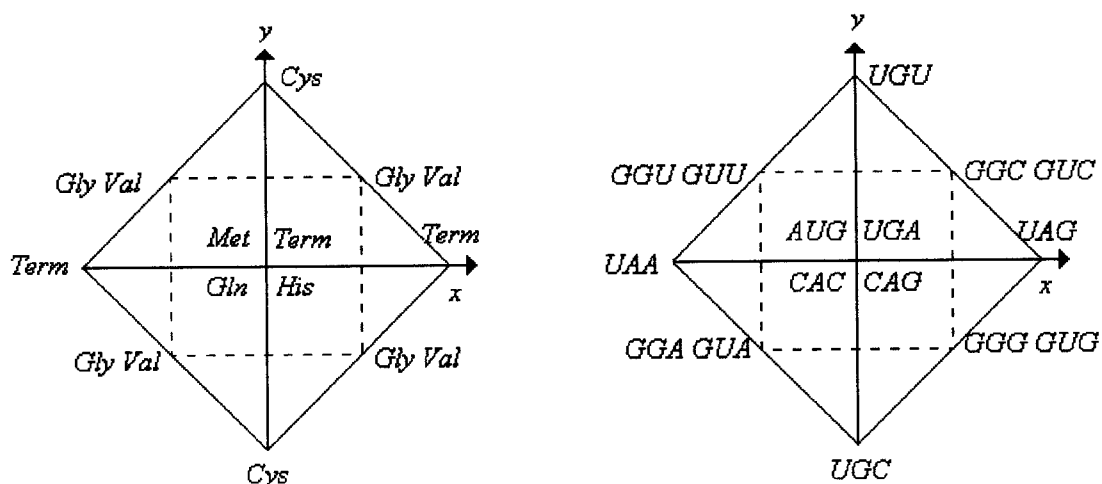


Figura 3.14: Aminoácidos e seus respectivos códons para  $z = -1$ .

Note que nos planos  $z = 1$  e  $z = -1$  a simetria é quebrada pelos pois todos os aminoácidos no plano  $z = 1$  são diferentes dos aminoácidos no plano  $z = -1$  exceção dos códons que codificam os aminoácidos Gln e His.

O plano  $z = 2$  que é idêntico ao plano  $z = -2$  é mostrado nas figuras (3.17),(3.18) e (3.19).

Os aminoácidos que se encontram nestes planos e nos respectivos pontos são no plano  $z = 2$ : 1 - Leu (CUU); 2 - Ser (UCC); 3 - Leu (CUC); 4 - Ser (UCU). Já no plano  $z = -2$

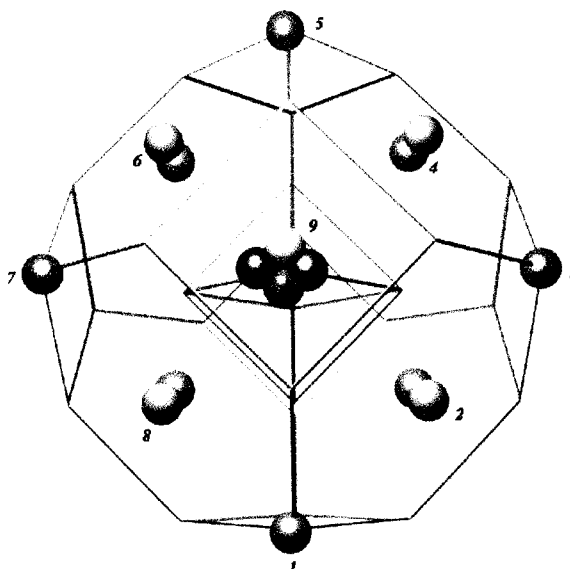


Figura 3.15: Plano  $z = 1$  do diagrama de Weyl.

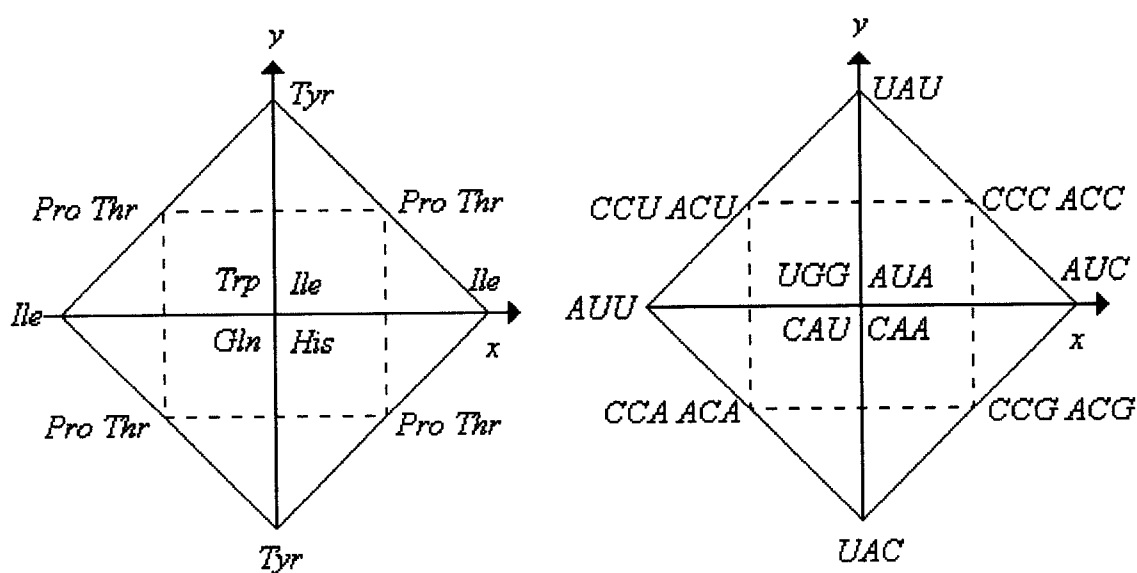


Figura 3.16: Aminoácidos e seus respectivos códons para  $z = 1$ ,

temos os mesmos aminoácidos mas diferentes códons que codificam estes aminoácidos, são eles: 1 - Leu (CUA); 2 - Ser (UCG); 3 - Leu (CUG), 4 - Ser (UCA).

Como vimos, o arranjo dos códons preserva a simetria de reflexão nos planos  $x = 0$  e  $y = 0$ . Não obstante a simetria de reflexão na plano  $z = 0$  é violada. no último estágio da quebra de simetria. Esse fato é particularmente evidente no octaedro interno com a

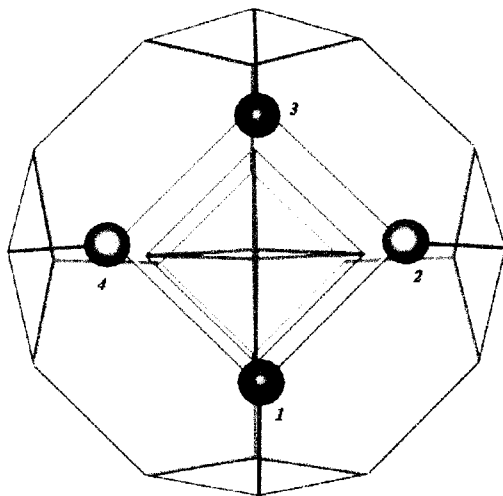


Figura 3.17: Plano  $z= 2$  do diagrama de Weyl.

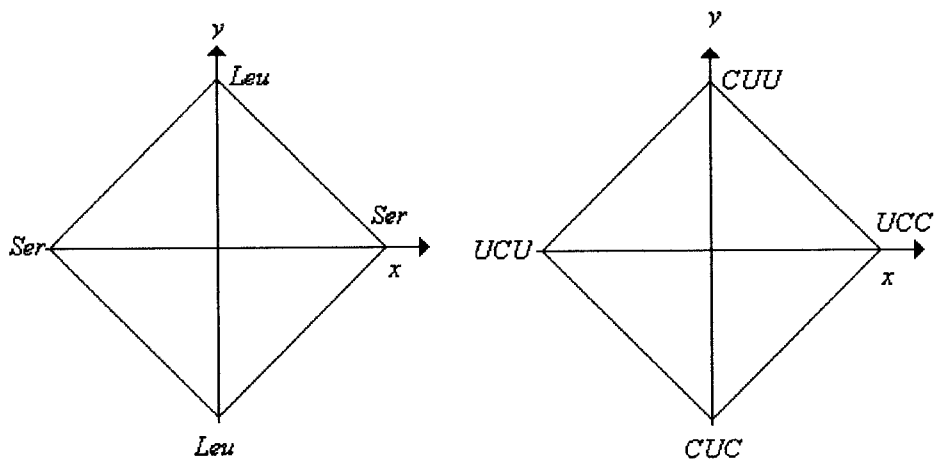


Figura 3.18: Aminoácidos e seus respectivos códonos para  $z = 2$ .

separação do Trp e Met. É notável que essa simetria seja restaurada em muitos códigos excepcionais[11]. Esta análise mostrou que os códigos que não preservam a simetria de *Klein* são ditos pelos especialistas como não estáveis ou anômalos e àqueles que preservam são ditos estáveis[19]. As mudanças propostas pelos especialistas nos códigos não padrão tendem a restaurar a simetria de *Klein* perdida por uma mudança de um códon de um aminoácido A para um códon de um aminoácido B.

A organização do códonos no espaço dos pesos que decorre do modelo simplético tem mérito

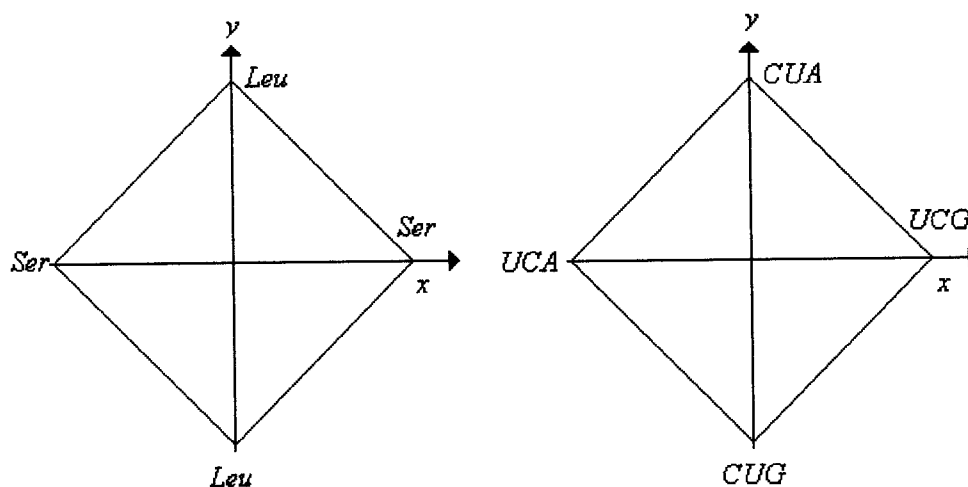


Figura 3.19: Aminoácidos e seus respectivos códons para  $z = -2$ .

de exibir essa nova simetria, descrita pelo grupo de *Klein*, que não aparece na descrição usual do código genético em termos de tabelas. A simetria a muito conhecida da invariância da terceira base pela troca de U por C não implica na simetria de *Klein*, que é mais abrangente.

O estudo das simetrias finitas relacionadas ao modelo é de suma importância para este trabalho. A construção de uma dinâmica depende diretamente da simetria inicial, do grupo  $O_h$ , e através de um processo de quebra de simetria semelhante esta dinâmica produz simetrias de menor grau. A quebra de simetria dinâmica parte do único grupo de simetria ancestral sem levar em consideração quebras posteriores sendo este o ponto forte do sistema dinâmico. Se olharmos a figura (2.3) vemos que o número de possibilidades de quebra ou seja, de diminuição do grupo de simetria  $O_h$  em grupos de menor simetria é muito grande e a quebra de simetria proposta pelo modelo algébrico é única e dada pela equação (3.5). O sistema dinâmico que tem como simetria inicial a simetria  $O_h$  pode reproduzir qualquer cadeia mostrada na figura (2.3) mas veremos que isto não ocorre. Apesar de um grande número de possibilidades de quebra de simetria a quebra reproduzida via o modelo dinâmico é similar a quebra de simetria ou “evolução” proposta pelo modelo algébrico ratificando seus resultados.

# Capítulo 4

## Construção de Mapas com Simetria

O estudo das simetrias finitas relacionadas com o código genético assim como o estudo da quebra de simetria finita neste modelo é o ponto de partida para a construção de um sistema dinâmico que possua as mesmas propriedades de simetria. Esses sistemas e sua construção podem ser vistos em algumas bibliografias[7, 12, 13]. O princípio básico de construção é usar a representação matricial do grupo, discutida no capítulo 2, e supor um “função” (mapa) que obedeça a determinadas propriedades de simetria que serão discutidas aqui. A partir da variação dos parâmetros que controlam a forma da dinâmica nessa aplicação, no nosso caso do  $\mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ , é possível gerar uma cadeia de figuras, chamadas de “atratores”, que preservam determinadas propriedades de simetria. A análise das simetrias preservadas e sua comparação com as simetrias preservadas no modelo algébrico é um dos pontos importantes do presente trabalho.

Neste capítulo mostraremos como se dá a construção de mapas equivariantes sob a ação de um determinado grupo de simetria. Mais especificamente trabalharemos com o grupo  $O_h$ , como foi dito anteriormente, já que este representa a simetria principal do grupo de Weyl associado ao grupo  $Sp(6)$  relacionando com o modelo algébrico para o código genético. O grupo  $O_h$  possui 3 geradores e 48 elementos admitindo duas representações de 1, 2 e 3 dimensões[14].

As matrizes da representação em 3 dimensões ou seja, matrizes  $3 \times 3$  são mostradas a seguir assim como às simetrias que estas correspondem. Como o grupo tem 48 elementos esse

também deve ser o número de matrizes da representação mais ainda, todas as 48 matrizes deixam o espaço de códon dado pela figura (3.8) invariante sob sua ação. Essa invariância é responsável pela associação do grupo de Weyl do  $Sp(6)$  ao grupo  $O_h$ . A seguir apresentaremos as permutações e suas representação matricial separando-as por classes. Note que as classes neste caso são separadas pela natureza das operações de simetria.

$$\text{e - identidade} \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Classe  $C_2^{\text{eixo}}$ , rotações de  $\pi$  em torno dos eixos  $x, y$  e  $z$ ,

$$(24)(56) \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$(13)(56) \quad \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$(13)(24) \quad \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Classe  $C_3$ , rotações de  $2\pi/3$  em torno dos eixos centrais dos hexágonos externos do octaedro truncado,

$$(164)(235) \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$(126)(345) \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$(154)(236) \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$(125)(346) \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$(146)(253) \quad \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$(152)(364) \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$(162)(354) \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$(145)(263) \quad \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Classe  $C_2^{x,y,z}$ , rotações de  $\pi$  nos eixos que cortam as arestas do octaedro,

$$(12)(34)(56) \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$(14)(23)(56) \quad \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$(16)(35)(24) \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$(15)(36)(24) \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$(13)(26)(45) \quad \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$(13)(25)(46) \quad \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Classe  $C_4$ , rotações de  $\pi/2$  em torno dos eixos que cortam e dos eixos principais do octaedro,

$$(2645) \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$(1536) \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$(1234) \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$



$$(2546) \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$(1635) \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$(1432) \quad \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Note que a inversão pura não foi colocada, a mesma corresponde a permutação (13)(24)(56), onde sua matriz é dada por;

$$(13)(24)(56) \quad \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Multiplicando a matriz correspondente à inversão por todas às matrizes que correspondem as permutações listadas anteriormente temos como resultado o grupo de simetria  $O_h$  com 48 elementos. Para a construção do mapa equivariante sob a ação do grupo  $O_h$  bastam os geradores do grupo já que toda permutação pode ser escrita como uma multiplicação dos geradores, tanto como permutação como na forma matricial pois a representação é fiel em todas as suas operações ao grupo que esta representa.

## 4.1 Construção do Equivariantes

Agora dada a representação matricial do grupo  $O_h$  resta construir a família de funções que obedecem as propriedades de simetria desejada e assim proporcionar um estudo da dinâmica resultante sob a variação do parâmetro de quebra  $\lambda$ . As funções equivariantes são determinadas a partir da seguinte definição matemática, [7, 27]:

Definição 4.1.1 *Equivariância.* Dada uma função  $f(r): M \rightarrow M$  e dado  $\Gamma$  ser um grupo finito e  $g$  sendo um gerador do grupo então, uma função  $f$  é dita equivariante se;

$$f(g \bullet r) = g \bullet f(r). \quad (4.1)$$

Assim como na construção dos mapas em 2 [7, 12, 13] dimensões aqui, partiremos que a função é um vetor  $f(r)$  dado por uma matriz onde a coluna são as componentes  $x, y, z$  do mapa:

$$\begin{pmatrix} f_x(x, y, z) \\ f_x(x, y, z) \\ f_x(x, y, z) \end{pmatrix} = F, \quad (4.2)$$

e a ação do gerador segundo a definição 4.1.1 é dada por,

$$g \bullet \begin{pmatrix} f_x(x, y, z) \\ f_x(x, y, z) \\ f_x(x, y, z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_x(g \bullet (x, y, z)) \\ f_x(g \bullet (x, y, z)) \\ f_x(g \bullet (x, y, z)) \end{pmatrix}. \quad (4.3)$$

Os nossos geradores são;

$$(1234) \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (4.4)$$

$$(16)(35)(24) \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.5)$$

Note que a partir destas duas matrizes é possível gerar as outras 24 matrizes listadas anteriormente, os elementos (1234) e (16)(35)(24) geram o grupo  $O$  que pode ser visto na figura (2.3) como um subgrupo do grupo  $O_h$ . Com a ação da permutação (13)(24)(56), que corresponde a inversão dada pela matriz

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

geramos o grupo  $O_h$ . Vamos supor funções polinomiais que dependem de coordenadas  $x, y, z$  mais gerais, dadas por:

$$f_x(x, y, z) = x^\alpha y^\beta z^\gamma . \quad (4.7)$$

onde  $\alpha, \beta, \gamma$  são números inteiros que terão sua relação determinada pela definição 4.1.1. Fazendo a aplicação dos geradores “por fora” da função, teremos uma permutação de posição e sinal desses:

$$g \bullet \begin{pmatrix} f_x(x, y, z) \\ f_x(x, y, z) \\ f_x(x, y, z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} f_x(x, y, z) \\ f_x(x, y, z) \\ f_x(x, y, z) \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} f_x(x, y, z) \\ f_x(x, y, z) \\ f_x(x, y, z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_y(x, y, z) \\ -f_x(x, y, z) \\ f_z(x, y, z) \end{pmatrix}. \quad (4.8)$$

ainda temos em relação a este gerador, a seguinte operação (princípio da equivariância, definição 4.1.1);

$$\begin{pmatrix} f_x(g \bullet (x, y, z)) \\ f_y(g \bullet (x, y, z)) \\ f_z(g \bullet (x, y, z)) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_x(y, -x, z) \\ f_y(y, -x, z) \\ f_z(y, -x, z) \end{pmatrix}. \quad (4.9)$$

Igualando as equações (4.8) e (4.9) temos então:

$$\begin{pmatrix} f_y(x, y, z) \\ -f_x(x, y, z) \\ f_z(x, y, z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_x(y, -x, z) \\ f_y(y, -x, z) \\ f_z(y, -x, z) \end{pmatrix}, \quad (4.10)$$

o que nos dá como resultado,

$$\begin{pmatrix} f_x(x, y, z) \\ f_y(x, y, z) \\ f_z(x, y, z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x^\alpha y^\beta z^\gamma \\ (-1)^\beta x^\alpha y^\beta z^\gamma \\ x^{2\sigma} y^{2\sigma} z^\gamma \end{pmatrix}. \quad (4.11)$$

Fazendo a atuação do segundo gerador, temos;

$$g \bullet \begin{pmatrix} f_x(x, y, z) \\ f_x(x, y, z) \\ f_x(x, y, z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} f_x(x, y, z) \\ f_x(x, y, z) \\ f_x(x, y, z) \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} f_x(x, y, z) \\ f_x(x, y, z) \\ f_x(x, y, z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_z(x, y, z) \\ -f_y(x, y, z) \\ f_x(x, y, z) \end{pmatrix} \quad (4.12)$$

fazendo da mesma maneira anterior;

$$\begin{pmatrix} f_x(g \bullet (x, y, z)) \\ f_x(g \bullet (x, y, z)) \\ f_x(g \bullet (x, y, z)) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_x(z, -y, x) \\ f_x(z, -y, x) \\ f_x(z, -y, x) \end{pmatrix}. \quad (4.13)$$

Igualando as equações (4.12) e (4.13), teremos como resultado final, analisando os expoentes;

$$\begin{pmatrix} f_x(x, y, z) \\ f_y(x, y, z) \\ f_z(x, y, z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x^{2\rho+1} y^{2\sigma} z^{2\sigma} \\ x^{2\sigma} y^{2\rho+1} z^{2\sigma} \\ x^{2\sigma} y^{2\sigma} z^{2\rho+1} \end{pmatrix}. \quad (4.14)$$

Aqui determinamos uma relação dos expoentes  $\alpha, \beta, \gamma$  de uma forma diagonal onde  $2\rho + 1 = \text{ímpar}$  e  $2\sigma = \text{par}$ , esta é a função equivariante mais geral, e é possível gerar através deste mapa a simetria do objeto estudado na figura do atrator. O atrator pode ser entendido aqui como o caminho percorrido por um ponto inicial  $(x_0, y_0, z_0)$  no  $\mathfrak{R}^3$ , onde a trajetória desses pontos é determinada pela ação da função construída sob a definição 4.1.1 e tem como principal característica a preservação da simetria do grupo  $O_h$ . Veremos que assim como as funções os atratores também preservam a estrutura de simetria do grupo.

Uma forma mais geral do nosso mapa que também pode ser definido como um difeomorfismo equivariante[27], pode ser escrita como uma soma de diferentes expoentes onde a combinação é feita com parâmetros multiplicativos  $\chi_{\rho\sigma}(r)$ . Podemos notar que os expoentes podem ser quaisquer, o que nos dá um grupo de funções descritas por (4.15).

$$F_{\rho\sigma} = \begin{pmatrix} \sum \chi_{\rho\sigma}(r) \cdot x^{2\rho+1} y^{2\sigma} z^{2\sigma} \\ \sum \chi_{\rho\sigma}(r) \cdot x^{2\sigma} y^{2\rho+1} z^{2\sigma} \\ \sum \chi_{\rho\sigma}(r) \cdot x^{2\sigma} y^{2\sigma} z^{2\rho+1} \end{pmatrix}. \quad (4.15)$$

Podemos ainda escrever esta soma em função do vetor  $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ . Para a primeira análise da dinâmica vamos tomar os três primeiros termos do mapa (4.15). Como resultado e fazendo a simplificação  $1/r$  em cada termo teremos a expressão do mapa dado por (4.16).

$$F_{00} = \lambda_{00} \begin{pmatrix} x/r \\ y/r \\ z/r \end{pmatrix}; F_{10} = \lambda_{10} \begin{pmatrix} x^3/r^3 \\ y^3/r^3 \\ z^3/r^3 \end{pmatrix}; F_{01} = \lambda_{01} \begin{pmatrix} xy^2z^2/r^5 \\ x^2yz^2/r^5 \\ x^2y^2z/r^5 \end{pmatrix}. \quad (4.16)$$

Reescrevendo tudo em coordenadas esféricas, e adequando os parâmetros em cada termo temos que o nosso mapa ficará da forma dada pela equação (4.17), onde as coordenadas  $\theta$  e  $\varphi$  variam de forma contínua no intervalo dado por uma esfera, ou seja,  $0 \leq \theta \leq \pi$  e  $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ .

$$F = \lambda_{00} \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \varphi \\ \sin \theta \sin \varphi \\ \cos \theta \end{pmatrix} + \lambda_{10} \begin{pmatrix} (\sin \theta \cos \varphi)^3 \\ (\sin \theta \sin \varphi)^3 \\ (\cos \theta)^3 \end{pmatrix} + \lambda_{01} \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \varphi (\sin \theta \sin \varphi)^2 (\cos \theta)^2 \\ \sin \theta \sin \varphi (\sin \theta \cos \varphi)^2 (\cos \theta)^2 \\ \cos \theta (\sin \theta \sin \varphi)^2 (\sin \theta \cos \varphi)^2 \end{pmatrix}. \quad (4.17)$$

Através deste mapa é possível gerar um conjunto de atratores ou seja, figuras no espaço que possuem as mesmas propriedades de simetria da função que o origina. Estes são gerados através de iteração simples o que significa que o ponto posterior é calculado através da função  $F$  no ponto anterior. Vamos notar que o conjunto de ponto gerados tem como principal característica a preservação da simetria octaédrica. A quebra espontânea de simetria ocorre com a produção dos termos invariantes, e sua composição com os termos equivariantes de forma a reescrever o mapa em função de um único parâmetro com o intuito de determinar através das iterações do nosso sistema dinâmico as bifurcações ou quebras de simetrias que estes venham a possuir devido às suas propriedades de simetrias obtidas através da sua construção. Para tal abrimos mão de um teorema [7]

**Teorema 4.2.1** *Todo mapa pode ser escrito como uma combinação dos termos invariantes e dos termos equivariantes,*

$$f = \sum_{i,j} P_i(\text{invariantes}) \Psi_j(\text{equivariantes}). \quad (4.18)$$

Onde a definição de invariância será posteriormente exibida. Através desta composição espera-se observar esta quebra de simetria já que a análise da influência do parâmetro sobre

a quebra de simetria ou “evolução do código” se torna clara do ponto de vista matemático. Como estamos trabalhando no espaço real os nossos pontos fixos devem permanecer neste espaço. Esta é uma condição de convergência da dinâmica.

A seguir temos alguns exemplos de atratores com simetria octaédrica geradas pela iteração destes mapas, para diferentes valores dos parâmetros  $\chi_{00}, \chi_{10}, \chi_{01}$ . Cada figura é gerada para um dado valor dos três parâmetros. É observável que a cada conjunto de valores dos parâmetros temos uma diferente simetria octaédrica produzida. Como tomamos aqui três conjuntos de valores para  $\chi_{00}, \chi_{10}, \chi_{01}$  produziremos então 3 atratores distintos.

Estes são três exemplos que foram gerados a partir da função  $F$ , anteriormente definida, os atratores são gerados a partir de iteração simples:

$$x_{t+1} = f(x_t), \quad (4.19)$$

este fato, da discretização do tempo, caracteriza nosso sistema como um sistema dinâmico discreto.

Note que no nosso caso as iterações são do tipo;

$$\begin{aligned} x_{t+1} &= f_x(x_t, y_t, z_t), \\ y_{t+1} &= f_y(x_t, y_t, z_t), \\ z_{t+1} &= f_z(x_t, y_t, z_t). \end{aligned} \quad (4.20)$$

ou seja, um ponto posterior  $(x_{t+1}, y_{t+1}, z_{t+1})$  é calculado através do valor da função no ponto anterior, como já havíamos dito.

A simplificação do mapa depende dos termos invariantes sob a ação do grupo o que é imprescindível para estudar a dinâmica no que diz respeito às suas sub-simetrias. A seguir mostraremos a definição de invariância assim como os polinômios invariantes sob a ação do grupo  $O_h$  e posteriormente faremos o estudo das quebras de simetria nesse sistema com o intuito de estabelecer uma relação com o modelo algébrico para o código genético já que esta é a dinâmica que contém a simetria finita que o representa.

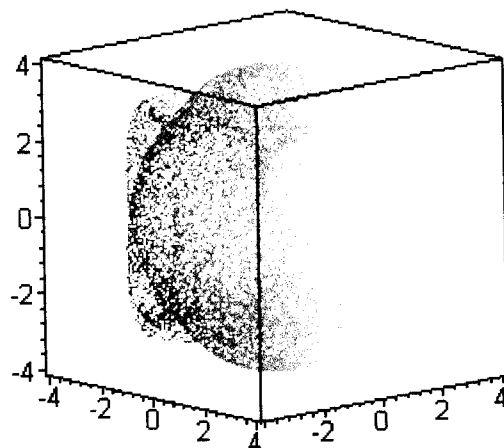


Figura 4.1: Simetria Octaédrica - Atrator I.

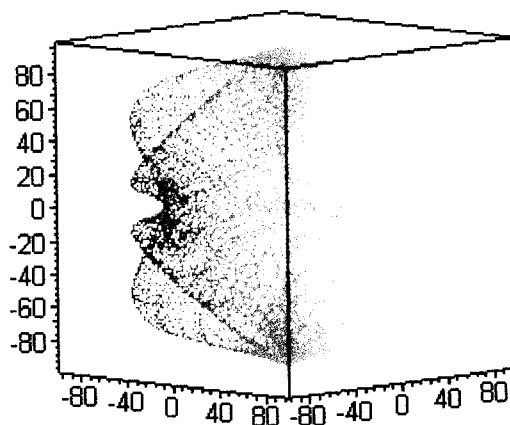


Figura 4.2: Simetria Octaédrica - Atrator II.



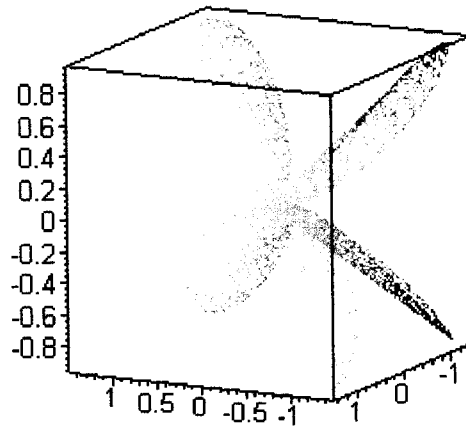


Figura 4.3: Simetria Octaédrica - Atrator III.

## 4.2 Construção dos Invariantes

Agora nossa preocupação é deixar o nosso mapa na mesma forma que a proposta em [8]. Através dessa forma podemos analisar as bifurcações (quebras) com a dependência de um único parâmetro e não de um conjunto de parâmetros tornando mais fácil o estudo da dinâmica e suas relações com as simetrias e sub-simetrias embutidas nesse mapa. As sub-simetrias serão vistas como subgrupos de simetria conforme a definição 2.1.8 apresentada no capítulo 2.

O primeiro passo para esta fase é a determinação das funções invariantes que compõem a nossa função equivariante, de forma a deixar funções que só dependam dos invariantes de forma explícita, montando assim uma dinâmica onde as relações entre os parâmetros que controlam as bifurcações e os parâmetros que nos determinam somente diferentes formas para uma mesma simetria, como visto nas figuras (4.1), (4.2) e (4.3), sejam definidas. Analisando os mapas construídos em [7, 8, 12, 13] para sistemas bidimensionais, nos mostram que estes mapas podem ser escritos como uma dependência explícita de uma função que depende exclusivamente de funções ditas invariantes e um parâmetro chamado de parâmetro de bifurcação designado pela letra grega  $\lambda$ . Estas funções são:

$$\begin{aligned} p(u, v, \lambda), \\ q(u, v, \lambda), \end{aligned} \quad (4.21)$$

onde  $u, v$  são funções invariantes e  $\lambda$  é o parâmetro que “regula” a dinâmica. Note que as funções  $u$  e  $v$  são da forma:

$$\begin{aligned} u &= \bar{z}z, \\ v &= \frac{(z^m + \bar{z}^m)}{2}, \end{aligned} \quad (4.22)$$

que são funções invariantes perante a ação do grupo  $D_m$ , [7, 27].

Definição 4.2.1 *Invariância.* Uma função  $f$  é dita invariante se dado um grupo finito  $\Gamma$  e um elemento  $\gamma \in \Gamma$ , então:

$$\gamma f(r) = f(\gamma r) = f(r). \quad (4.23)$$

para todo e qualquer  $\gamma \in \Gamma$ . Comparando esta definição com a definição 4.1.1 vemos que a invariância é mais abrangente em termos de simetria do que a equivariância. Nossa função é da forma  $\Phi : R^3 \rightarrow R^3$  onde a forma mais geral é:

$$\Phi = \sum_{\alpha, \beta, \eta} \Phi_{\alpha, \beta, \eta} x^\alpha y^\beta z^\eta. \quad (4.24)$$

Aqui começamos da mesma maneira que começamos quando determinamos as funções equivariantes sob ação do grupo  $O_h$ . Usando as representações matricias do grupo em questão, e fazendo a atuação dessas matrizes, no caso as 24 matrizes, na função e impondo a condição de invariância temos as seguintes conclusões:

I ) Não existe série ímpar;

$\alpha \neq \text{ímpar}, \beta \neq \text{ímpar}$  e  $\eta \neq \text{ímpar}$ .

II ) É possível representar a função invariante como função de 3 invariantes principais, dados por;

$$\begin{aligned}
P &= x^2 y^2 z^2 \\
Q &= x^2 y^2 + x^2 z^2 + y^2 z^2 \\
R &= x^2 + y^2 + z^2
\end{aligned} \tag{4.25}$$

Qualquer função invariante é uma combinação dessas três funções. Podemos escrever uma função invariante absolutamente geral como sendo;

$$\begin{aligned}
\Phi^{KLM} &= x^{2K} y^{2L} z^{2M} + x^{2L} y^{2M} z^{2K} + x^{2M} y^{2K} z^{2L} + x^{2L} y^{2K} z^{2M} \\
&\quad + x^{2K} y^{2M} z^{2L} + x^{2M} y^{2L} z^{2K}
\end{aligned} \tag{4.26}$$

para  $K \leq L \leq M$ , note que esta forma pode ser escrita como;

$$\begin{aligned}
\Phi^{KLM} &= (x^2 y^2 z^2)^K (y^{2(L-K)} z^{2(M-K)} + x^{2(L-K)} y^{2(M-K)} + \\
&\quad x^{2(M-K)} z^{2(L-K)} + x^{2(L-K)} z^{2(M-K)} + \\
&\quad y^{2(M-K)} z^{2(L-K)} + x^{2(M-K)} y^{2(L-K)}).
\end{aligned} \tag{4.27}$$

ou ainda

$$\Phi^{KLM} = P^K I(0, L - K, M - K). \tag{4.28}$$

mas;

$$\begin{aligned}
I^{00M'} &= 2(z^{2M'} + y^{2M'} + x^{2M'}), \\
I^{001} &= 2R, \\
I^{002} &= 2(z^4 + y^4 + x^4) = 2(R^2 - 2Q), \\
I^{003} &= 2(z^6 + y^6 + x^6) = 2(R^2 - 3RQ + 3P).
\end{aligned} \tag{4.29}$$

Temos com isto uma relação de recorrência da forma;

$$I^{00M'} = I^{00(M'-1)}R - I^{00(M'-2)}Q + I^{00(M'-3)}P. \quad (4.30)$$

para  $M' \geq 3$ . Note que conseguimos escrever a função como só dependendo dos invariantes principais, estes possuindo um expoente máximo em cada variável do nosso mapa. Os termos cruzados são ainda dependentes dos invariantes principais  $P, Q$  e  $R$ , como mostrado a seguir;

$$\begin{aligned} & (x^2 + y^2 + z^2)(x^4 + y^4 + z^4) - (x^6 + y^6 + z^6) \\ &= x^2y^4 + x^2z^4 + y^2x^4 + y^2z^4 + z^2x^4 + z^2y^4. \end{aligned} \quad (4.31)$$

reescrevendo-o;

$$\begin{aligned} & (x^{2A} + y^{2A} + z^{2A})(x^{4B} + y^{4B} + z^{4B}) - (x^{6(A+B)} + y^{6(A+B)} + z^{6(A+B)}), \\ & I^{00A}I^{00B} - I^{00(A+B)}. \end{aligned} \quad (4.32)$$

Nossa função invariante fica;

$$\begin{aligned} \Phi &= P^k(I^{00m} + I^{0AB})\frac{1}{2}, \\ \Phi &= P^k(I^{00m} + (I^{00A}I^{00B} - I^{00(A+B)})) \end{aligned} \quad (4.33)$$

E as funções  $I^{00\lambda}$  são dadas pela tabela abaixo.

$$\left( \begin{array}{cc} \frac{I}{2} & m - k = \lambda \\ R & 1 \\ R^2 - 2Q & 2 \\ R^3 - 3RQ + 3P & 3 \\ R^4 - 4QR^2 + 4PR + 2Q^2 & 4 \\ \vdots & \vdots \\ I^{00(\lambda-1)}R - I^{00(\lambda-2)}Q + PI^{00(\lambda-3)} & \lambda \end{array} \right) \quad (4.34)$$

Toda função pode ser escrita como combinação dos invariantes determinados anteriormente. Nosso objetivo é escrever de forma simples nossa função equivariante, que é dada pela equação (4.15), na forma proposta em [8, 12], o que facilita o estudo da dinâmica, pois saberemos como o parâmetro age na função, tal como uma separação dos invariantes puros, já que estes não interferem na simetria do problema. Fazendo uma comparação com a função proposta por [7, 8, 12, 13], é possível notar as semelhanças entre os mapas. Vamos estudar o caso do  $D_4$  com o objetivo de comparação e por possuir um interesse específico neste grupo que posteriormente será explicado.

O mapa do grupo  $D_4$ , definido por [8, 12], é da forma:

$$\begin{aligned} f_x(x, y, \lambda) &= \alpha(x^3 + y^2x) + \beta(x^5 - 6x^3y^2 + y^4x) + \lambda x + \gamma(x^3 - 3y^2x) \\ f_y(x, y, \lambda) &= \alpha(y^3 + x^2y) + \beta(y^5 - 6y^3x^2 + x^4y) + \lambda y + \gamma(y^3 - 3x^2y) \end{aligned} \quad (4.35)$$

onde  $f_x(x, y, \lambda)$  é a parte real da função e  $f_y(x, y, \lambda)$  é a parte imaginária da função. As matrizes que definem o grupo  $D_4$  e as operações de simetria relacionadas são:

$$\begin{aligned} \text{identidade} & \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \\ (24)(56) & \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \\ (1432) & \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \\ (13)(24) & \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \\ (1234) & \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \\ (14)(23)(56) & \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

$$(13)(56) \quad \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$(12)(34)(56) \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Note que as matrizes correspondem aos elementos do grupo octaédrico tirando a última linha e a última coluna da matriz tridimensional. Os invariantes puros são dados por:

$$u = x^2 + y^2, \quad (4.36)$$

$$v = x^4 - 6x^2y^2 + y^4.$$

Agora o interesse é mostrar a relação entre os mapas, agora que se conhece os invariantes. Note que temos uma relação entre os invariantes do grupo  $O$  e do grupo  $D_4$ :

$$u_o = x^2 + y^2 + z^2, \quad (4.37)$$

$$v_o = x^2y^2 + x^2z^2 + y^2z^2,$$

$$s_o = x^2y^2z^2.$$

Os invariantes tridimensionais são todos da forma anterior, assim como os invariantes do grupo  $D_4$  são formas de invariantes bidimensionais e qualquer outro invariante bidimensional é de forma semelhante. A relação entre estes invariantes é facilmente percebido quando se faz  $z = 0$  na equação (4.37):

$$u_o(z = 0) = x^2 + y^2, \quad (4.38)$$

$$v_o(z = 0) = x^2y^2,$$

$$s_o(z = 0) = 0.$$

mas,

$$v_o(z = 0) = (u^2 - v). \quad (4.39)$$

Os invariantes construídos a partir das definições e da representação matricial se apresentam da mesma maneira que a forma proposta em [8, 12], mostrando uma coerência na sua construção com relação ao que existe nos trabalhos já publicados para o caso de mapas bidimensionais. Comparando os mapas do grupo  $D_4$  e do grupo  $O_h$ , fazendo uma relação em  $z = 1$ , dado respectivamente por (4.35), e nosso mapa dado pela equação (4.15), vamos expandir os termos e compará-los, só que no nosso caso  $z = 1$ , determinando assim uma correlação entre os mapas.

No nosso caso o mapa é tridimensional e dado por;

$$\begin{aligned} f_x(x, y, z; \chi_{ij}) &= \chi_{00}x + \chi_{10}x^3 + \chi_{01}xy^2z^2 + \chi_{11}x^3y^2z^2 + \chi_{20}xy^4z^4 + \chi_{20}x^5, \quad (4.40) \\ f_y(x, y, z; \chi_{ij}) &= \chi_{00}y + \chi_{10}y^3 + \chi_{01}yx^2z^2 + \chi_{11}y^3x^2z^2 + \chi_{20}yx^4z^4 + \chi_{20}y^5, \\ f_z(x, y, z; \chi_{ij}) &= \chi_{00}z + \chi_{10}z^3 + \chi_{01}zy^2x^2 + \chi_{11}z^3y^2x^2 + \chi_{20}zy^4x^4 + \chi_{20}z^5. \end{aligned}$$

Note que para  $z = 1$  resta,

$$\begin{aligned} f_x(x, y, z = 1; \chi_{ij}) &= \chi_{00}x + \chi_{10}x^3 + \chi_{01}xy^2 + \chi_{11}x^3y^2 + \chi_{20}xy^4 + \chi_{20}x^5, \quad (4.41) \\ f_y(x, y, z = 1; \chi_{ij}) &= \chi_{00}y + \chi_{10}y^3 + \chi_{01}yx^2 + \chi_{11}y^3x^2 + \chi_{20}yx^4 + \chi_{20}y^5, \\ f_z(x, y, z = 1; \chi_{ij}) &= \chi_{00} + \chi_{10} + \chi_{01}y^2x^2 + \chi_{11}y^2x^2 + \chi_{20}y^4x^4 + \chi_{20}. \end{aligned}$$

A relação entre os parâmetros a fim de obtermos o mesmo resultado mostrado em (4.35) está descrito na tabela (4.1), onde na primeira coluna temos as variáveis determinadas pela nossa construção e sua relação com as variáveis determinadas através da construção proposta por [8, 12] aqui mostrada no mapa (4.35), na segunda coluna.

A componente  $z$  do nosso mapa só depende de funções invariantes em  $x$  e  $y$  logo não influenciam a dinâmica. O que temos aqui é uma generalização de mapas equivariante com simetria, assim como é possível construir um mapa do grupo  $D_4$ , é possível construir, a

$\chi_{00} =$	$\lambda$
$\chi_{10} =$	$\gamma$
$\chi_{01} =$	$(\alpha - 3\beta)$
$\chi_{11} =$	$-6\beta$
$\chi_{20} =$	$\beta$
$\chi_{20} =$	$\beta$

Tabela 4.1: Relação dos parâmetros.

partir do ajuste dos parâmetros, um mapa com qualquer simetria que pertença a cadeia de ramificação do grupo  $O_h$  mostrada na figura (2.3). Este resultado é de fundamental importância para o estudo de dinâmica com simetria, pois temos o conjunto completo de mapas que podem reproduzir uma dada simetria, seja ela qual for. Este resultado condiz com a referência [26].

Usando os invariantes puros dados pelos termos  $P, Q$  e  $R$  da equação (4.25) e usando o mapa dado pela equação (4.15) podemos determinar quais os principais polinômios que são responsáveis pela conservação da simetria e, escrevendo a partir desses polinômios o mapa mais geral com base nas funções invariantes e nos polinômios que chamaremos de “compostos”.

Esses polinômios são obtidos através de grande algebrismo usando como base as funções invariantes determinadas anteriormente. Analisando como um exemplo do modo construção do mapa, o caso específico  $m = 3$  para o mapa proposto em [8, 12] vemos a dependência dos invariantes e de funções mistas como mostradas a seguir:

$$f(z, \lambda) = p(u, v, \lambda)z + q(u, v, \lambda)\bar{z}^2, \quad (4.42)$$

sabemos que  $p, q$  são funções que dependem dos invariantes e  $z = x + iy$ . Reescrevendo o mapa e separando a parte real da parte imaginária teremos como resultado



$$\begin{aligned} f_x(\text{real}) &= p(x - x^2) + qy^2, \\ f_y(\text{imaginária}) &= py + 2qxy. \end{aligned} \tag{4.43}$$

As funções que queremos determinar, para o caso do mapa com simetria  $O_h$ , são as funções que estão sendo multiplicadas pelos invariantes  $p$  e  $q$ . A determinação dessas funções compostas é o ponto final para o estudo das bifurcações, já que se determina a forma mais geral do mapa e como esse se relaciona com os parâmetros de quebra.

### 4.3 Mapa: Forma Geral

Com a determinação dos invariantes o próximo passo é determinar a forma final do mapa e sua dependência com o parâmetro  $\lambda$ , que será responsável pela quebra de simetria através de sua variação. A dinâmica que representa essa simetria pode assumir um conjunto de subsimetrias qualquer mas veremos que de forma surpreendente o conjunto das subsimetrias (subgrupos) serão equivalentes àquelas vistas no modelo algébrico para o código genético, demonstrando assim uma coerência matemática do modelo algébrico já que seu sistema dinâmico reproduz as mesmas subsimetrias.

Usando os invariantes (4.25) podemos supor um conjunto de funções compostas que possam reproduzir qualquer polinômio que preserve a invariância do mapa. Como ponto de partida vamos tomar como funções as seguintes dadas por (4.44) e (4.45).

$$\begin{aligned} a_1 &= (x^2 - y^2 - z^2), \\ a_2 &= (y^2 - x^2 - z^2), \\ a_3 &= (z^2 - x^2 - y^2), \end{aligned} \tag{4.44}$$

e também;

$$\begin{aligned}
w_1 &= (y^2 z^2 - x^2 y^2 - z^2 x^2), \\
w_2 &= (x^2 z^2 - x^2 y^2 - z^2 y^2), \\
w_3 &= (x^2 y^2 - z^2 x^2 - z^2 y^2).
\end{aligned} \tag{4.45}$$

Note que todas as funções são pares. É possível, a partir desses polinômios compostos, gerar qualquer conjunto de polinômios. Vamos tomar os exemplos onde o sinal da coordenada  $x$  é positivo e os pares  $x^n y^n$  e  $x^n z^n$  têm o sinal negativo,

$$\begin{aligned}
x^4 - y^4 - z^4, \\
x^6 - y^6 - z^6, \\
x^8 - y^8 - z^8, \\
y^4 z^4 - x^4 y^4 - x^4 z^4, \\
y^6 z^6 - x^6 y^6 - x^6 z^6.
\end{aligned} \tag{4.46}$$

Para reproduzir estes polinômios podemos fazer uso dos invariantes  $P, Q$  e  $R$  e das funções compostas como mostrado em (4.47).

$$\begin{aligned}
(a_1 R + w_1 + Q) &= x^4 - y^4 - z^4, \\
(a_1(R^2 - Q) + w_1 R + RQ - P) &= x^6 - y^6 - z^6, \\
(a_1(R^3 - 2QR + P) + w_1(R^2 - Q) - Q^2 + R^2 Q - RP) &= x^8 - y^8 - z^8, \\
(a_1 P + w_1 Q + PR) &= y^4 z^4 - x^4 y^4 - x^4 z^4, \\
(a_1 P Q + w_1(Q^2 - RP) + PQR - P^2) &= y^6 z^6 - x^6 y^6 - x^6 z^6.
\end{aligned} \tag{4.47}$$

Note que através dos polinômios  $a_1$  e  $w_1$  obteremos o conjunto de funções dado por (4.46), esses polinômios se relacionam com a coordenada  $x$  e seu sinal. Para o caso de  $a_1$  termos o sinal de  $x$  positivo, em  $w_1$  o sinal que multiplica a coordenada  $x$  é negativa. Isso nos faz acreditar que estes dois primeiros polinômios estão relacionados com a componente  $x$  do

mapa equivariante. Note que trocando  $a_1 \rightarrow a_2$  e  $w_1 \rightarrow w_2$  teremos o resultado dado por (4.48).

$$\begin{aligned}
 & y^4 - x^4 - z^4, \\
 & y^6 - x^6 - z^6, \\
 & y^8 - x^8 - z^8, \\
 & x^4 z^4 - x^4 y^4 - y^4 z^4, \\
 & x^6 z^6 - x^6 y^6 - y^6 z^6.
 \end{aligned} \tag{4.48}$$

O mesmo ocorre com a mudança  $a_1 \rightarrow a_3$  e  $w_1 \rightarrow w_3$ , essa substituição leva coordenada  $x \rightarrow z$  em (4.46). O importante é que em todos os casos para gerar um determinado polinômio temos a seguinte relação:

$$\begin{aligned}
 & u(\text{função dos invariantes}) \times \text{função composta} + \\
 & v(\text{função dos invariantes}) \times \text{função composta} + \\
 & s(\text{função dos invariantes}).
 \end{aligned} \tag{4.49}$$

O que nos leva a crer que para cada componente do mapa teremos a mesma estrutura. Note ainda que as funções  $u$ ,  $v$  e  $s$  podem ser quaisquer funções que dependam exclusivamente dos invariantes. Mas a função composta que está sendo multiplicada pela função invariante genérica é única, para isso basta olhar o resultado (4.47), que nos mostra claramente que é possível determinarmos qualquer polinômio quadrático através da soma de termos lineares nas funções compostas e polinômios de diferentes ordens nos invariantes.

Com este intuito podemos supor que a forma geral do nosso mapa é dado por (4.50). Onde  $u(P, Q, R; \lambda)$ ,  $v(P, Q, R; \lambda)$  e  $s(P, Q, R; \lambda)$  são funções dos termos invariantes puros e de um parâmetro qualquer  $\lambda$ . Posteriormente veremos que o parâmetro  $\lambda$  será, como uma conseqüência da dinâmica, o responsável pelas bifurcações.

$$F = \begin{pmatrix} f_x = x[u(P, Q, R; \lambda) + v(P, Q, R; \lambda)(x^2 - y^2 - z^2) \\ \quad + s(P, Q, R; \lambda)(y^2 z^2 - x^2 y^2 - z^2 x^2)] \\ f_y = y[u(P, Q, R; \lambda) + v(P, Q, R; \lambda)(y^2 - x^2 - z^2) \\ \quad + s(P, Q, R; \lambda)(x^2 z^2 - x^2 y^2 - z^2 x^2)] \\ f_z = y[u(P, Q, R; \lambda) + v(P, Q, R; \lambda)(z^2 - x^2 - y^2) \\ \quad + s(P, Q, R; \lambda)(x^2 y^2 - z^2 y^2 - z^2 x^2)] \end{pmatrix}. \quad (4.50)$$

A partir do mapa (4.15) é possível gerar a forma anterior. Esta forma apesar de diferir da forma proposta pela referência [26] obedece ao mesmo princípio de equivariância. Os termos

$$(x^2 - y^2 - z^2) + (y^2 z^2 - x^2 y^2 - z^2 x^2), (y^2 - x^2 - z^2) + \\ (x^2 z^2 - x^2 y^2 - z^2 x^2) \text{ e } (z^2 - x^2 - y^2) + (x^2 y^2 - z^2 y^2 - z^2 x^2),$$

podem ser reescritos de tal maneira que:

$$(x^2 - y^2 - z^2) + (y^2 z^2 - x^2 y^2 - z^2 x^2) = \textit{invariante} + 2x^2 + 2y^2 z^2,$$

assumindo assim a forma proposta por [26]. As etapas de construção foram cumpridas e seu estudo assim como a interpretação das simetrias e subsimetrias embutidas na dinâmica pode ser iniciada. Como o intuito da tese é abranger ao máximo, dentro das possibilidades das quais uma tese de doutoramento se apresenta, o assunto abordado ainda estudaremos algumas relações matemáticas dessa dinâmica a fim de deixar este documento o mais completo possível.

Os termos lineares  $x$ ,  $y$  e  $z$  que estão no início das componentes  $f_x$ ,  $f_y$  e  $f_z$  vem do termo linear do mapa (4.15):

$$F_{\rho\sigma} = \begin{pmatrix} \sum \chi_{\rho\sigma}(r) x^{2\rho+1} y^{2\sigma} z^{2\sigma} \\ \sum \chi_{\rho\sigma}(r) x^{2\sigma} y^{2\rho+1} z^{2\sigma} \\ \sum \chi_{\rho\sigma}(r) x^{2\sigma} y^{2\sigma} z^{2\rho+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{x} \sum \chi_{\rho\sigma}(r) x^{2\rho} y^{2\sigma} z^{2\sigma} \\ \underline{y} \sum \chi_{\rho\sigma}(r) x^{2\sigma} y^{2\rho} z^{2\sigma} \\ \underline{z} \sum \chi_{\rho\sigma}(r) x^{2\sigma} y^{2\sigma} z^{2\rho} \end{pmatrix}. \quad (4.51)$$

O somatório restante possui termos quadráticos em  $x, y$  e  $z$ . Como resultado teremos a construção proposta anteriormente, onde as funções compostas são dadas por (4.44) e (4.45). Esta análise tornou possível retirar do somatório (4.15) as funções compostas, nos restando somente uma combinação de invariantes. Também podemos notar a dependência quadrática das coordenadas quando o termo linear é explicitado.

$$\begin{pmatrix} \sum \chi_{\rho\sigma}(r)x^{2\rho}y^{2\sigma}z^{2\sigma} \\ \sum \chi_{\rho\sigma}(r)x^{2\sigma}y^{2\rho}z^{2\sigma} \\ \sum \chi_{\rho\sigma}(r)x^{2\sigma}y^{2\sigma}z^{2\rho} \end{pmatrix}. \quad (4.52)$$

Note que os parâmetros  $\chi_{\rho\sigma}(r)$  são funções que dependem das coordenadas. Através dessa construção foi possível determinar que a função  $\chi_{\rho\sigma}(r)$  é dependente não só das coordenadas, mas com o vínculo de dependerem dos invariantes e de um parâmetro aleatório  $\lambda$ . Como consequência temos que o somatório se reduz a expressão dado por (4.49). Onde o somatório é um conjunto de combinações das funções compostas com as funções invariantes.

Por fim temos o mapa na forma final e mais geral dado por (4.50), que claramente obedece a condição de equivariância. Como um exemplo da conservação do princípio de equivariância do mapa (4.50) vamos estudar o caso da atuação de dois elementos do grupo  $Oh$ . O primeiro é a reflexão total  $x \rightarrow -x, y \rightarrow -y$  e  $z \rightarrow -z$ . Fazendo esta transformação usando a definição de equivariância 4.1.1 teremos

$$\begin{aligned} -f_x(x, y, z; \lambda) &= f_x(-x, -y, -z; \lambda), \\ -f_y(x, y, z; \lambda) &= f_y(-x, -y, -z; \lambda), \\ -f_z(x, y, z; \lambda) &= f_z(-x, -y, -z; \lambda), \end{aligned} \quad (4.53)$$

a única dependência linear do mapa está em cada coordenada associada a cada componente do mapa, o que claramente satisfaz a igualdade (4.53). Vamos estudar agora a permutação em torno do eixo  $z$ , essa permutação faz a seguinte substituição das coordenadas  $x \rightarrow y$  e  $y \rightarrow -x$ . Usando a definição 4.1.1 deveremos ter a igualdade (4.54) satisfeita.

$$\begin{aligned}
f_y(x, y, z; \lambda) &= f_x(x \rightarrow y, y \rightarrow -x, z; \lambda), \\
-f_x(x, y, z; \lambda) &= f_y(x \rightarrow y, y \rightarrow -x, z; \lambda), \\
f_z(x, y, z; \lambda) &= f_x(x \rightarrow y, y \rightarrow -x, z; \lambda).
\end{aligned} \tag{4.54}$$

Analisando o lado direito da igualdade termos como resultado:

$$\begin{aligned}
f_y(x, y, z; \lambda) &= y[u + v(y^2 - x^2 - z^2) + s(x^2z^2 - x^2y^2 - z^2y^2)], \\
-f_x(x, y, z; \lambda) &= -x[u + v(x^2 - y^2 - z^2) + s(y^2z^2 - x^2y^2 - z^2x^2)], \\
f_z(x, y, z; \lambda) &= z[u + v(z^2 - y^2 - x^2) + s(y^2x^2 - x^2z^2 - z^2y^2)].
\end{aligned}$$

As funções  $u, v$  e  $s$  só dependem dos invariantes sob a ação dos geradores do grupo  $Oh$  não sofrendo alteração alguma quando um elemento qualquer do grupo  $Oh$  age sobre estas. Observado agora o lado esquerdo da igualdade (4.54) teremos o seguinte resultado

$$\begin{aligned}
f_x(x \rightarrow y, y \rightarrow -x, z; \lambda) &= y[u + v(y^2 - x^2 - z^2) + s(x^2z^2 - x^2y^2 - z^2y^2)], \\
f_y(x \rightarrow y, y \rightarrow -x, z; \lambda) &= -x[u + v(x^2 - y^2 - z^2) + s(y^2z^2 - x^2y^2 - z^2x^2)], \\
f_z(x \rightarrow y, y \rightarrow -x, z; \lambda) &= z[u + v(z^2 - y^2 - x^2) + s(y^2x^2 - x^2z^2 - z^2y^2)],
\end{aligned}$$

satisfazendo assim a igualdade (4.54). O mesmo ocorre para qualquer elemento de simetria do grupo  $O_h$  agindo no mapa.

## 4.4 Estudo das Bifurcações

A partir do mapa dado por (4.50) é possível determinarmos, através de uma função genérica dos invariantes e do parâmetro  $\lambda$ , a dinâmica e suas bifurcações. A palavra bifurcação neste caso significa quebra ou diminuição de simetria em uma subsimetria. As subsimetrias possíveis que geram diferentes cadeias de quebra são mostradas na figura (2.3), mostrando que uma dinâmica que possui como principal simetria a simetria  $O_h$  pode gerar um intervalo

enorme de possibilidades de quebra, veremos que isso não acontecerá, mais ainda a possibilidade de quebra de simetria via a função é única e segue o mesmo padrão de quebra de simetria finita resultante do modelo algébrico.

Podemos propôr para isso um caso particular do mapa, similar ao que foi proposto por [8, 12] que se mostra suficiente para o estudo da dinâmica. Tomando como valor para as funções invariantes em (4.50) os valores:

$$\begin{aligned} u(P, Q, R, \lambda) &= \delta P + \sigma Q + \lambda, \\ v(P, Q, R, \lambda) &= \varphi, \\ s(P, Q, R, \lambda) &= v(P, Q, R, \lambda). \end{aligned} \tag{4.55}$$

Esta proposta para os invariantes (4.55) é, do ponto de vista matemático, a mais simples. A função invariante tem uma dependência linear com seus componentes  $\delta P, \sigma Q$  que são os invariantes construídos na seção anterior. Como ponto inicial vamos tomar os valores das constantes  $\delta = 1, \sigma = -0.7, \varphi = -0.8$  e o parâmetro  $\lambda = -1.440$ . Através desse conjunto de valores podemos dar início ao estudo da dinâmica. O mapa (4.50), após as substituições, fica na forma (4.56).

$$F = \begin{pmatrix} f_x = x[\delta P + \sigma Q + \lambda + \varphi\{(x^2 - y^2 - z^2) + (y^2 z^2 - x^2 y^2 - z^2 x^2)\}] \\ f_y = y[\delta P + \sigma Q + \lambda + \varphi\{(y^2 - x^2 - z^2) + (x^2 z^2 - x^2 y^2 - z^2 y^2)\}] \\ f_z = z[\delta P + \sigma Q + \lambda + \varphi\{(z^2 - x^2 - y^2) + (x^2 y^2 - z^2 y^2 - z^2 x^2)\}] \end{pmatrix}. \tag{4.56}$$

**Definição 5.2.1** *Pontos Fixos.* Dada uma dinâmica discreta descrita pelo mapa  $f : M \rightarrow N$  [27]. Este possui um ponto fixo se:

$$f_{t+1}(r_0) = f_t(r_0). \tag{4.57}$$

então  $r_0$  é dito ser um ponto fixo da dinâmica.

A importância do cálculo dos pontos fixos de uma dinâmica dessa natureza se faz necessário pois a dinâmica quando propagada é encapsulada em uma região na qual os limites são determinados por estes pontos. De uma forma geral, o conjunto de pontos fixos pode ser

determinado eliminando o termo linear em  $x, y, z$  na equação (4.56) e igualando-a a unidade. Assim teremos as equações (4.58), (4.59) e (4.60).

$$1 = \delta P + \sigma Q + \lambda + \varphi\{(x^2 - y^2 - z^2) + (y^2 z^2 - x^2 y^2 - z^2 x^2)\}, \quad (4.58)$$

$$1 = \delta P + \sigma Q + \lambda + \varphi\{(y^2 - x^2 - z^2) + (x^2 z^2 - x^2 y^2 - z^2 x^2)\}, \quad (4.59)$$

$$1 = \delta P + \sigma Q + \lambda + \varphi\{(z^2 - x^2 - y^2) + (x^2 y^2 - z^2 y^2 - z^2 x^2)\}. \quad (4.60)$$

Fazendo (4.58)-(4.59), (4.58)-(4.60) determinamos as relações entre as coordenadas nos pontos fixos, dados por (4.61) e (4.62).

$$(x^2 - y^2)(z^2 - 1) = 0, \quad (4.61)$$

$$(x^2 - z^2)(y^2 - 1) = 0. \quad (4.62)$$

Logo os pontos fixos são da forma  $(r_0^2, r_0^2, r_0^2)$  e  $(a_0, 1, 1)$  e suas permutações de sinal e posição. O valor dos pontos fixos pode ser calculado substituindo os valores determinados na equação (4.60). Nos dando como resultado os dois conjuntos de pontos dados por (4.63) e (4.66) correspondendo aos pontos  $(r_0^2, r_0^2, r_0^2)$  e  $(a_0, 1, 1)$  respectivamente.

$$r_0^2 = \frac{3}{2} \left( \frac{-(3\varphi - 9\delta) \pm \sqrt{(3\varphi - 9\delta)^2 - 36(\varphi - 3\sigma)(1 - \lambda)}}{(\varphi - 3\sigma)} \right), \quad (4.63)$$

que simplificando fica na forma

$$r_0^2 = -\frac{9\varphi - 3\delta - \sqrt{(\varphi^2 - 6\varphi\delta + 9\delta^2 - 4\varphi + 4\varphi\lambda + 12\sigma - 12\sigma\lambda)}}{2(\varphi - 3\sigma)}. \quad (4.64)$$



Expandindo em séries, em  $\lambda$ , temos o seguinte resultado:

$$\begin{aligned}
 r_0^2 = & \left( \frac{9\varphi - 3\delta - \sqrt{(\varphi^2 - 6\varphi\delta + 9\delta^2 - 4\varphi + 12\sigma)}}{2(\varphi - 3\sigma)} \right) + \\
 & \frac{9}{4\sqrt{(\varphi^2 - 6\varphi\delta + 9\delta^2 - 4\varphi + 12\sigma)}} \frac{4\varphi - 12\sigma}{\varphi - 3\sigma} \lambda + \\
 & \left( \frac{9}{16 \left( \sqrt{(\varphi^2 - 6\varphi\delta + 9\delta^2 - 4\varphi + 12\sigma)} \right)^3} \frac{(4\varphi - 12\sigma)^2}{\varphi - 3\sigma} \right) \lambda^2 + \dots
 \end{aligned} \tag{4.65}$$

Onde podemos ver a dependência explícita com o parâmetro de bifurcação. Fazendo os mesmos passos para o caso  $(a_0, 1, 1)$  teremos o seguinte resultado.

$$a_0 = \pm \sqrt{\frac{2\delta + \lambda - 1 - \varphi + \sigma}{\varphi - \delta - 2\sigma}}. \tag{4.66}$$

$$\begin{aligned}
 a_0 = & \sqrt{\left( \frac{2\delta - 1 - \varphi + \sigma}{\varphi - \delta - 2\sigma} \right)} + \frac{1}{2} \frac{\sqrt{\left( \frac{2\delta - 1 - \varphi + \sigma}{\varphi - \delta - 2\sigma} \right)}}{2\delta - 1 - \varphi + \sigma} \lambda + \\
 & \left( \frac{1}{8} \frac{\sqrt{\left( \frac{2\delta - 1 - \varphi + \sigma}{\varphi - \delta - 2\sigma} \right)}}{(2\delta - 1 - \varphi + \sigma)^2} \right) \lambda^2 + \frac{1}{16} \frac{\sqrt{\left( \frac{2\delta - 1 - \varphi + \sigma}{\varphi - \delta - 2\sigma} \right)}}{(2\delta - 1 - \varphi + \sigma)^3} \lambda^3 + \dots
 \end{aligned} \tag{4.67}$$

Para o nosso primeiro conjunto de valores das constantes temos 3 pontos fixos que sob a ação do grupo  $O_h$  geram 40 pontos. Alguns deles são:

$$\{[0,975935179, -0.975935179, -0.975935179], [0.9219544451, -1,1],$$

$$[-1.403790387, 1.403790387, 1.403790387], \dots\}, \text{ em um total de quarenta vetores do tipo}$$

$[x, y, z]$ .

Ainda existem os pontos fixos da forma  $(0, 0, q_1)$ ,  $(0, w_1, w_2)$  e suas permutações e o ponto  $(0, w, w)$  e suas permutações. Esses pontos não nos interessam para o estudo global da dinâmica pois se encontram nos espaços  $R$  e  $R^2$  respectivamente, gerando dinâmicas através

da iteração do mapa, de mesmas dimensões restringido muito o problema em sua riqueza matemática.

Todos os pontos fixos estão no espaço real. O conjunto de parâmetros do mapa (4.56) é determinado pela estabilidade desses pontos assim como pelo seu valor. Os pontos fixos dependem de uma raiz quadrada como mostrado em (4.63) e (4.66) caso esta seja real esse conjunto pode levar a um atrator e esse pode ser estável do contrário, não existe simetria já que a nossa aplicação é no  $R^3$ .

Como dito anteriormente os pontos fixos geram um espaço onde a dinâmica se localizará. Este espaço deve ter propriedades de simetria assim como a da dinâmica naquele valor do parâmetro de bifurcação.

Temos que para os valores dos parâmetros dados por  $\delta = 1, \sigma = -0.7, \varphi = -0.8$  e  $\lambda = -1.440$ , o espaço gerado pelos vetores dos pontos fixos é dado pela figura (4.4). Esse conjunto de pontos é invariante sob a ação do grupo  $O_h$ .

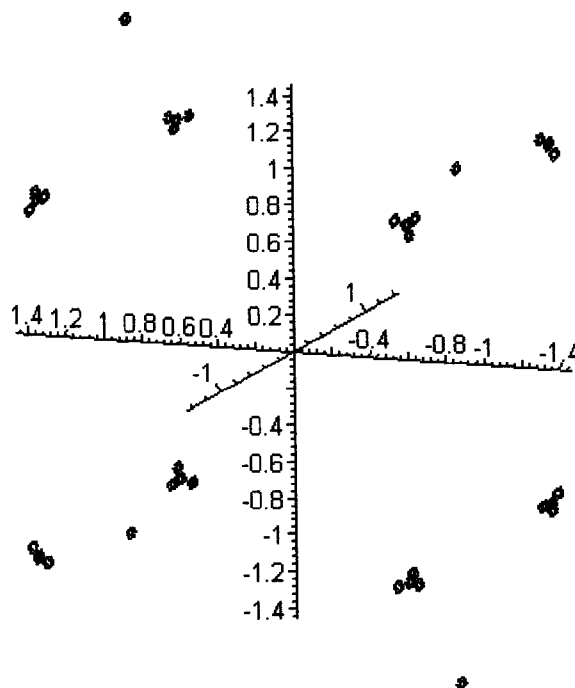


Figura 4.4: Conjunto dos pontos fixos para  $\delta = 1, \sigma = -0.7, \varphi = -0.8$  e  $\lambda = -1.440$ .

Este conjunto de pontos está localizado de tal maneira a obedecer a simetria octaédrica. Tomando os planos  $z = 0$  e  $x = 0$  podemos visualizar melhor a preservação das simetrias. Para o plano  $z = 0$  teremos a figura (4.5) como resultado.

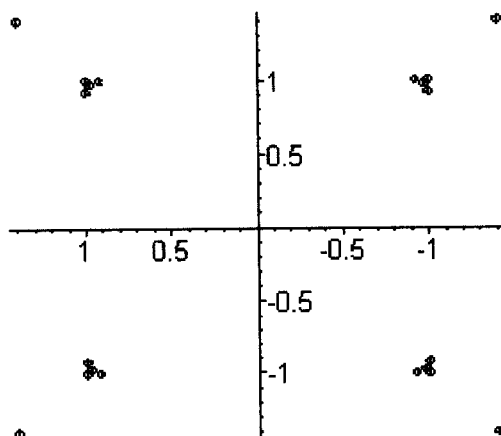


Figura 4.5: Corte  $z = 0$  no conjunto de pontos fixos para  $\lambda = -1.440$ .

Na análise dos pontos fixos foi omitido o ponto trivial  $[0, 0, 0]$ . Podemos ver na figura (4.5) que temos a formação de uma simetria do tipo quadrado preservado no plano  $xy$ . No plano  $x = 0$  temos a mesma simetria como projeção, figura (4.6).

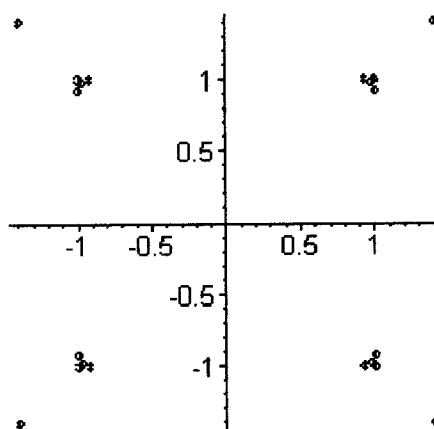


Figura 4.6: Corte  $x = 0$  no conjunto de pontos fixos para  $\lambda = -1,440$ .

Podemos ver que em ambos os casos figura (4.5) e figura (4.6) temos uma simetria do tipo cúbica preservada. Essa simetria possui um número maior de operações mas contém

ainda a simetria octaédrica como uma sub-simetria. Através da iteração simples dada por (??) podemos gerar nosso atrator. A figura (4.7) é o resultado da iteração.

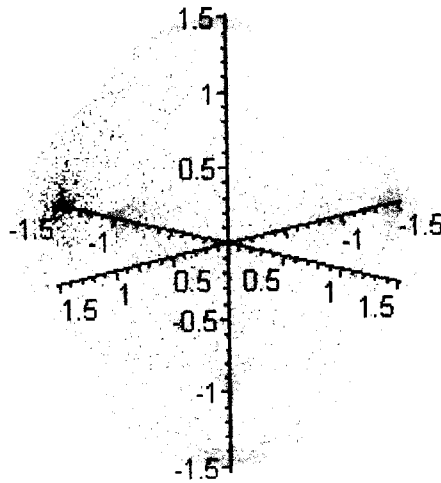


Figura 4.7: Atrator em  $\delta = 1, \sigma = -0.7, \varphi = -0.8$  e  $\lambda = -1.440$ .

A dinâmica nos dá como resultado um atrator com simetria octaédrica mais as reflexões preservadas para a condição inicial de  $x = -0.567; y = -0.4292$  e  $z = 0.672$ .

Podemos estudar a influência do parâmetro  $\lambda$  através de sua variação dado este conjunto de parâmetros  $\delta, \sigma$  e  $\varphi$  fixos e partindo da mesma condição inicial. O estudo da influência do parâmetro nas bifurcações pode ser feito análogo ao estudo feito no caso do mapa logístico[28]. Como resultado temos a figura (4.8) para a componente  $f_x$ .

O eixo  $x$  representa diferentes valores do parâmetro  $\lambda$ , que é iterado 10000 vezes, nos dando um conjunto de valores em  $f_x$ (eixo  $y$ ). É possível determinar os intervalos onde as bifurcações ocorrem. Estes intervalos são aqueles em que os pontos se distribuem uniformemente ao longo de um conjunto de valores de  $f_x$  para um determinado valor de  $\lambda$ . As outras componentes também nos dão como resultado os mesmos intervalos, isso é de se esperar pois, as componentes não são independentes. Um exemplo é a componente  $f_z$  dada pela figura (4.9).

Os intervalos de continuidade são os mesmos note que em  $-1.370 \lesssim \lambda \lesssim -1.375$  nos dois casos temos uma dinâmica não determinada. O resultado dessa dinâmica não determinada é uma não simetria ou uma invariância sob a ação da identidade. Estes intervalos são

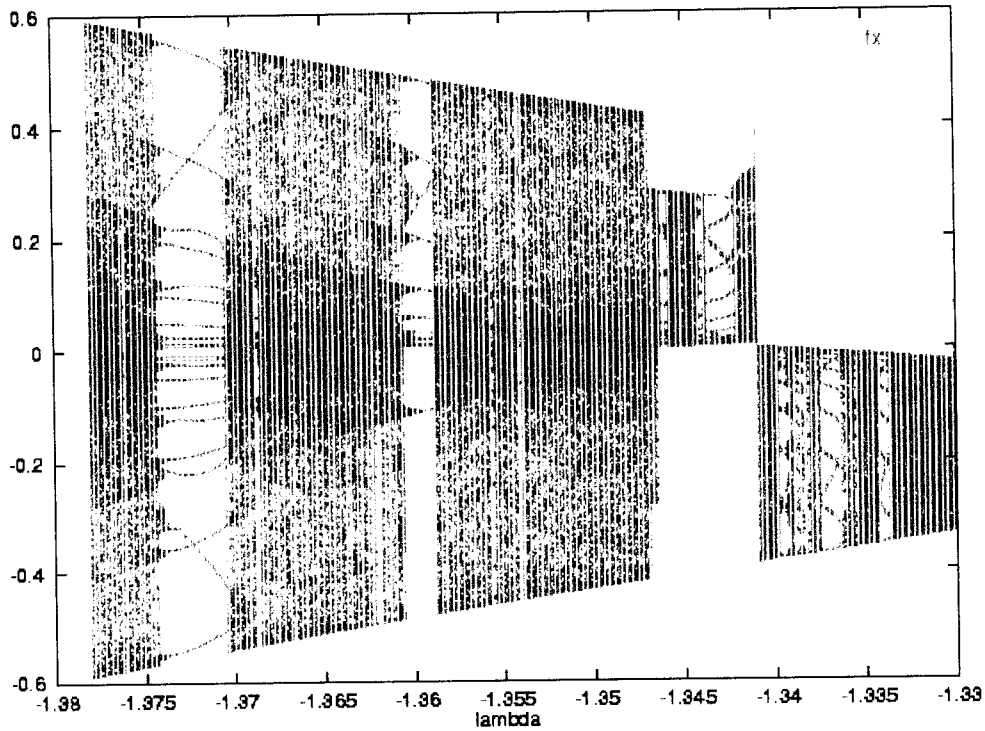


Figura 4.8: Bifurcações sob a variação do parâmetro  $\lambda$ — componente  $f_x$ .

descartados para o estudo da dinâmica.

Com os intervalos definidos podemos estudar um conjunto de pontos fixos para um valor de  $\lambda$  diferente. Tomando  $\lambda = -1.400$  teremos um conjunto com 3 pontos fixos que são da forma  $[1, 1, 0.8660254038]$  e suas permutações de sinal e posição,  $\{[1.414213562, 1.414213562, 1.414213562], [0.9607689228, 0.9607689228, 0.9607689228]$  e seus negativos. Os sinais são gerados a partir da ação do grupo de simetria do atrator para esse dado valor de  $\lambda$ . No espaço o arranjo promovido por este conjunto de pontos é mostrado nas figuras (4.10) e (4.11) em cortes para  $x = 0$  e  $z = 0$ .

Note que existem pontos no plano, onde a projeção é a bissetriz do ângulo entre os eixos  $xy$ , que não preservam a simetria cúbica. A projeção em  $x = 0$  na figura (4.10) nos mostra melhor este resultado. Fazendo também a projeção em  $z = 0$  podemos ver também a quebra da simetria, figura (4.11).

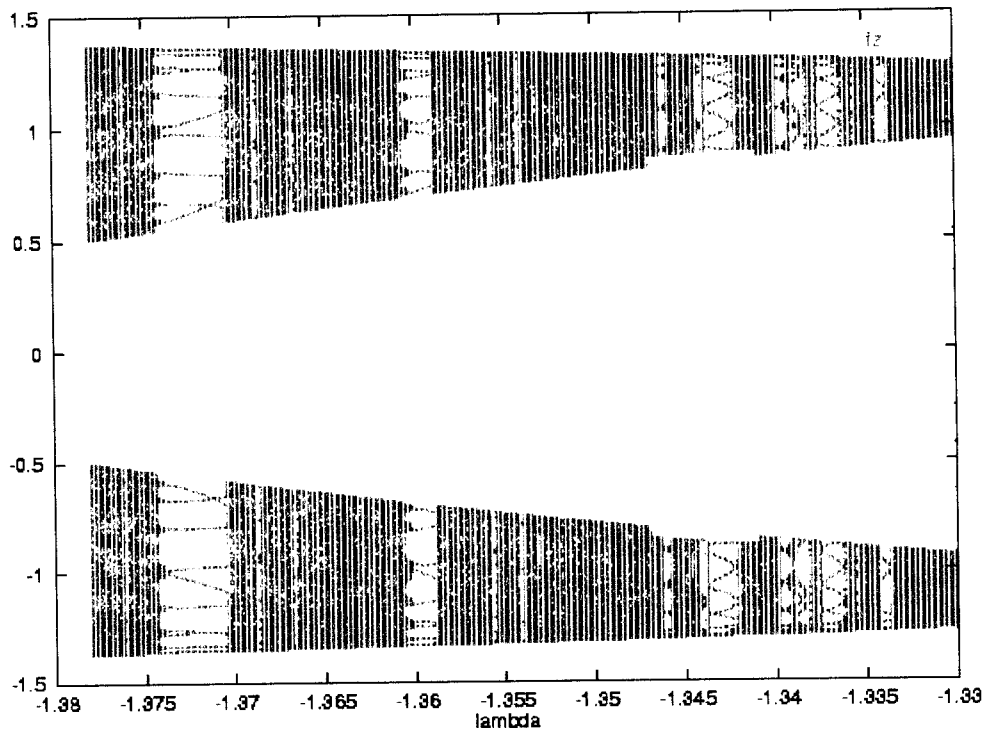


Figura 4.9: Bifurcações sob a variação do parâmetro  $\lambda$ — componente  $f_z$ .

O atrator gerado neste caso é mostrado na figura (4.12). Em  $\lambda = -1.400$  vemos que a dinâmica se concentra no plano  $xz$  nos dando um atrator com uma simetria do grupo  $D_4$ . O grupo tem 8 operações de simetria; o atrator (4.12) é invariante perante qualquer operação de simetria desse grupo.

Com a variação do parâmetro já é possível perceber um decréscimo de simetria com o aumento do parâmetro  $\lambda$ . Este ponto é fundamental para os nossos objetivos. O parâmetro influencia nas simetrias da dinâmica, e pode ser interpretado como um tipo de variável temporal sob o aspecto de evolução do código genético.

Note que através das duas simetrias proporcionadas pela variação do parâmetro  $\lambda$  temos o início da formação de uma cadeia de subgrupos do grupo  $Oh$  onde o primeiro subgrupo da cadeia é o  $D_4$ . A cadeia com a variação do parâmetro assume a forma (4.68).

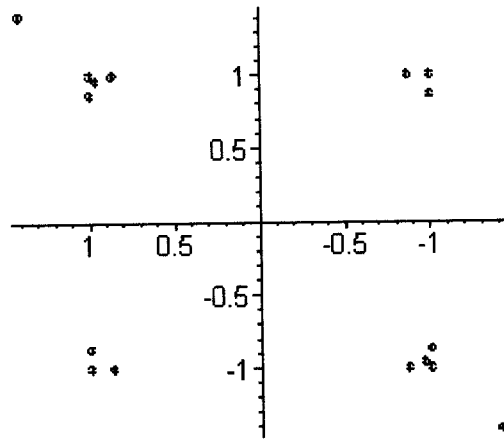


Figura 4.10: Corte  $x = 0$  no conjunto de pontos fixos para  $\lambda = -1.400$ .

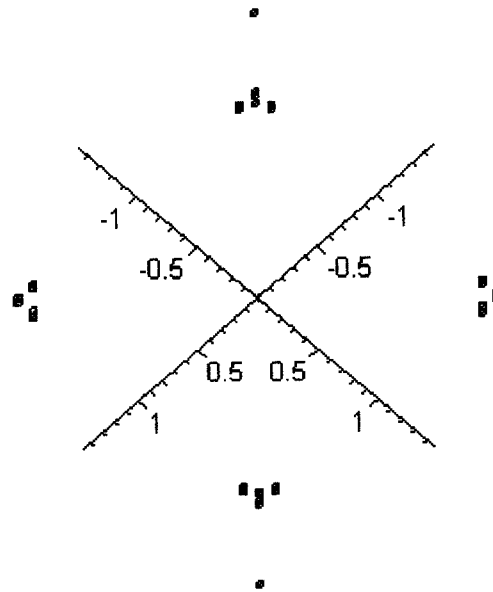


Figura 4.11: Corte  $z = 0$  no conjunto de pontos fixos para  $\lambda = -1.400$ .

$$Oh \sim O \times Z_2 \supset D_4 \supset \dots \quad (4.68)$$

O parâmetro proporciona uma cadeia de ramificação, ainda mais, a dinâmica está associada ao grupo de Weyl do  $Sp(6)$  representação simplética que está associado ao modelo algébrico para o código genético [1, 2].

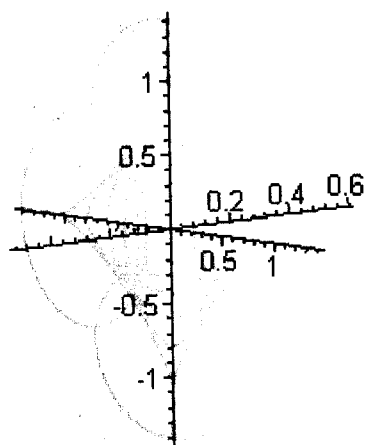


Figura 4.12: Atrator em  $\delta = 1, \sigma = -0.7, \varphi = -0.8$  e  $\lambda = -1.400$ .

As bifurcações determinam os intervalos em que simetrias não estarão presentes na dinâmica. Para o valor  $\lambda = -1.354$  teremos uma dinâmica com uma nova simetria preservada. Neste valor de  $\lambda$  os pontos fixos são dados por:  $\{[1, 1, 0.7968688725]$ , e suas permutações de sinal e posição  $[0.9440155652, 0.9440155652, 0.9440155652]$ ,  $[1.425451345, 1.425451345, 1.425451345]$  e suas permutações de sinal, em um total de 40 pontos fixos pois nesse caso a simetria determina um número maior de liberdade para estes pontos. Apesar de termos o mesmo número de pontos fixos do que no caso descrito pela figura (4.4), inclusive no que diz respeito ao arranjo espacial, a dinâmica apresenta uma diferente simetria. Esta simetria, consequência da dinâmica, é dada pela figura (4.13).

Este atrator preserva a simetria do grupo de *Klein*, ou seja, quatro operações de simetria que quadradas resultam na identidade. As operações são dadas por: duas rotações de  $180^\circ$  uma em torno de cada eixo ( $x$  e  $y$ ), uma reflexão em  $z$  e a identidade. As permutações que formam o grupo de *Klein* são dadas por -  $\{e\}, \{[13][24]\}, \{[13]\}, \{[24]\}$ . Este atrator vem a somar a cadeia de quebra de simetria dinâmica nos dando como resultado

$$Oh \sim O \times Z_2 \supset D_4 \supset K \dots, \tag{4.69}$$

onde  $K$  é o grupo de *Klein* definido anteriormente. Note que a quebra de simetria dado por (4.69) é a mesma, desde que seja desconsiderado o grupo  $Z_2$  na primeira quebra dada por



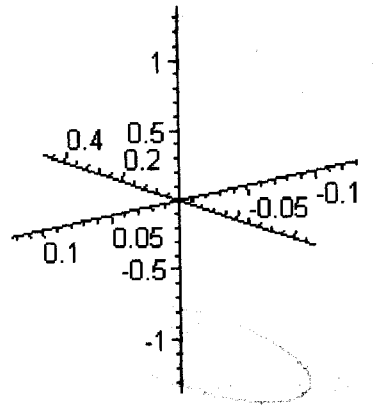


Figura 4.13: Atrator em  $\delta = 1, \sigma = -0.7, \varphi = -0.8$  e  $\lambda = -1.354$ .

(3.5). Lembrando que a dinâmica escolhe um caminho dito “natural” com a única imposição de preservação da simetria octaédrica no topo da cadeia.

Até aqui a análise da quebra de simetria bastaria para uma interpretação do modelo algébrico. Mas com a contínua variação do parâmetro determinamos outra subsimetria. Para  $\lambda = -1.332$  teremos outra simetria, menor, preservada na dinâmica. O número de pontos fixos para este valor do parâmetro é o mesmo que para o caso dado pelas figuras (4.7) e (4.13). Eles são da forma:  $\{[1, 1, 0.7615773106]$ , suas permutações de sinal e posição e  $[0.9362255918, 0.9362255918, 0.9362255918]$ ,  $[1.430579800, 1.430579800, 1.430579800]$  e suas permutações de sinal em um total de 40 também devido ao grau de liberdade proporcionado pela simetria. Note que no caso  $D_4$  o atrator poderá sofrer duas operações de simetria o que restringe o número de possibilidades de reflexões dos pontos fixos.

Este fato também ocorre para  $\lambda = -1.354$  onde a simetria preservada é a mesma que para  $\lambda = -1.440$ , mas a posição dos pontos diferem. Diferença esta que influencia na dinâmica de forma significativa. Isto se dá devido a sensibilidade do mapa sob qualquer alteração dos valores responsáveis pela dinâmica. A diferença entre as posições para os casos  $\lambda = -1.440$  e  $\lambda = -1.354$  é calculada e mostrada na tabela (4.2).

As diferenças entre os pontos fixos no caso de  $\lambda = -1.332$  em relação aos valores para  $\lambda = -1.440$  são mostrados pela tabela (4.3).

Essas diferenças apesar de sutis tem grande influência na dinâmica, tendo em vista a sua

$\lambda = -1.440$	$\lambda = -1.354$	Diferença
0.9219544451	0.7968688725	0.1250855726
0.9759351790	0.9440155652	0.0319196138
1.403790387	1.425451345	-0.021660958

Tabela 4.2: Diferença entre pontos fixos para  $\lambda = -1,440$  e  $\lambda = -1,354$ .

$\lambda = -1.440$	$\lambda = -1.332$	Diferença
0.9219544451	0.7615773106	0.1603771345
0.9759351790	0.9362255918	0.0397095872
1.403790387	1.430579800	-0.026789413

Tabela 4.3: Diferença entre pontos fixos para  $\lambda = -1,440$  e  $\lambda = -1,332$ .

não linearidade por isso é interessante a sua observação. Como resultado dessa diferença de valores temos uma nova simetria preservada em  $\lambda = -1.332$ . O atrator (4.14) nos mostra o resultado da iteração do mapa (4.50) para este valor do parâmetro.

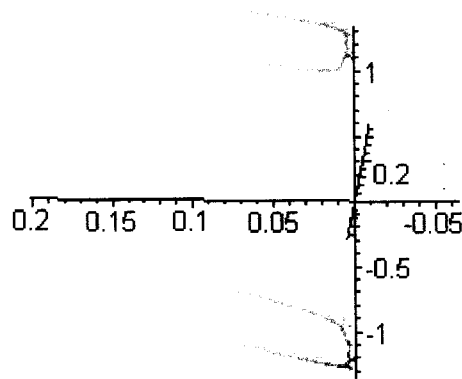


Figura 4.14: Atrator em  $\delta = 1, \sigma = -0.7, \varphi = -0.8$  e  $\lambda = -1.332$ .

Note que existe preservada a simetria de reflexão em torno do eixo que corta a bissetriz do ângulo no plano  $xy$ . Esta simetria é chamada de  $Z_2$  ou simetria quiral.

Em todos os casos a condição inicial e o número de iterações permanecem fixos. Como resultado temos a cadeia de quebra de simetria total desta dinâmica dada por (4.70).

$$Oh \sim O \times Z_2 \supset D_4 \supset K \supset Z_2. \quad (4.70)$$

A dinâmica a partir deste ponto ou conserva esta simetria ( $Z_2$ ) ou perde completamente a simetria nos dando como resultado um conjunto de pontos sem qualquer arranjo espacial simétrico. Por fim temos que para qualquer outro valor de  $\lambda > -1.332$  o atrator perde completamente a simetria nos dando a cadeia

$$Oh \sim O \times Z_2 \supset D_4 \supset K \supset Z_2 \supset e \quad (4.71)$$

Os atratores correspondem a diferentes estágios no esquema de evolução proposto pela figura (3.3). Note que na etapa A temos a simetria total do grupo de *Weyl*, atrator (4.7), na etapa B temos uma diminuição da simetria para uma simetria do tipo  $Z_2 \times D_4$ , que não foi reproduzida integralmente no processo de quebra dinâmica através da análise dos atratores, que no segundo estágio apresentou a simetria  $D_4$  como subsimetria para o valor de  $\lambda = -1.354$ .

Após rotularmos os aminoácidos teremos que nas etapas C e D a simetria preservada será a simetria do grupo de  $(Z_2)_1 \times (Z_2)_2 \times (Z_2)_3$  e a dinâmica correspondente mostrada através do atrator (4.14), neste caso o atrator produzido representa um dos grupos do tipo  $Z_2$ , os outros são facilmente obtidos através da reflexão desse primeiro. Através do modelo no fim da cadeia temos o grupo de *Klein* preservado, descrito pelo atrator (4.13).

A dinâmica ainda evolui para um grupo de menor simetria o grupo *Quiral* ou  $Z_2$ . A simetria de *Klein* é quebrada e levada ao grupo de simetria  $Z_2$  que é preservada em alguns códigos não-padrão [11]. Apesar de não reproduzir integralmente a cadeia proposta pelo modelo algébrico [1, 2] a dinâmica mostra que as simetrias que aparecem no modelo são possíveis pois estas são observadas via sua representação equivariante dada pelo mapa (4.56) no processo de quebra dinâmica de simetria.

A consistência entre as simetrias produzidas pela iteração do mapa para diferentes valores de  $\lambda$  e as simetrias finitas propostas pelo modelo algébrico descritas no capítulo 3 deste

presente trabalho é surpreendente. Não obstante, podemos verificar que os padrões de quebra de simetria são os mesmos. Os subgrupos gerados por um modelo são idênticos em ambas as propostas.

## 4.5 Natureza das Bifurcações

Como um estudo complementar do nosso mapa faremos uma breve, mas importante discussão sobre a natureza dos pontos fixos para cada valor de  $\lambda$ , e a partir desse resultado podemos analisar os tipos de pontos fixos e seu significado para a dinâmica. Através da referência [28] podemos classificar os pontos fixos através dos autovalores da matriz *Jacobiana*, que em 3 dimensões pode ser escrita na forma (4.72).

$$J = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_x}{\partial x} & \frac{\partial f_x}{\partial y} & \frac{\partial f_x}{\partial z} \\ \frac{\partial f_y}{\partial x} & \frac{\partial f_y}{\partial y} & \frac{\partial f_y}{\partial z} \\ \frac{\partial f_z}{\partial x} & \frac{\partial f_z}{\partial y} & \frac{\partial f_z}{\partial z} \end{pmatrix}. \quad (4.72)$$

Onde os elementos  $f_x$ ,  $f_y$  e  $f_z$  são as componentes do mapa. A derivadas nos dão o resultado mostrado em (4.73) e (4.74), substituindo os valores de  $\delta$ ,  $\sigma$  e  $\varphi$  estipulados pelos atratores (4.7), (4.12), (4.13) e (4.14), anteriormente mostrados.

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_x}{\partial x} &= 3x^2 + y^2 + z^2 - 0.7(3x^2y^2 + 3x^2z^2 + y^2z^2) + \lambda - & (4.73) \\ & 0.8(3x^2 - y^2 - z^2 + y^2z^2 - 3x^2y^2 - 3x^2z^2), \\ \frac{\partial f_y}{\partial y} &= x^2 + 3y^2 + z^2 - 0.7(3x^2y^2 + x^2z^2 + 3y^2z^2) + \lambda - \\ & 0.8(3y^2 - x^2 - z^2 + x^2z^2 - 3x^2y^2 - 3y^2z^2), \\ \frac{\partial f_z}{\partial z} &= x^2 + y^2 + 3z^2 - 0.7(x^2y^2 + 3x^2z^2 + 3y^2z^2) + \lambda - \\ & 0.8(3z^2 - y^2 - x^2 + x^2y^2 - 3x^2z^2 - 3y^2z^2), \end{aligned}$$

e os termos não diagonais dados por (4.74).

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_x}{\partial y} &= 2yx - 0.7(2yx^3 + 2yz^2x) - 0.8(-2yx + 2yz^2x - 2yx^3), \\ &\vdots \\ \frac{\partial f_z}{\partial y} &= 2yz - 0.7(2yz^3 + 2yx^2z) - 0.8(-2yz + 2yx^2z - 2yz^3). \end{aligned} \quad (4.74)$$

Note que o parâmetro de bifurcação  $\lambda$  influencia somente os elementos da diagonal. No cálculo do autovalores é de extrema importância esta influência. A dinâmica, como vimos anteriormente, depende exclusivamente da variação do parâmetro. Os autovalores da matriz (4.72) são calculados através da fórmula (4.75) dada por

$$\det(J - I\eta) = 0, \quad (4.75)$$

onde  $I$  é a matriz identidade e  $\eta$  são os autovalores. Os autovalores são calculados para cada conjunto de pontos fixos e para cada valor de  $\lambda$  correspondente a esse conjunto. Através dos autovalores é possível determinar a natureza da dinâmica, referência [28].

**Teorema 6.1.1** *Seja um mapa  $n$ -dimensional e sejam  $\lambda_i$  da linearização de um mapa  $\vec{F}(\vec{r})$  próximo do seu ponto fixo  $\vec{r}_0^*$ , ou seja, os  $\lambda_i$  são autovalores da matriz*

$$M = \left[ \frac{\partial \vec{F}(\vec{r})}{\partial \vec{r}} \right]_{\vec{r}=\vec{r}_0^*}.$$

*A estabilidade do ponto fixo é dada por: (a) Se  $|\lambda_i| < 1, \forall i$ , então  $\vec{r}_0^*$  é estável; (b) Se  $|\lambda_i| > 1$ , para pelo menos um  $i$ , então  $\vec{r}_0^*$  é instável, sendo: (1) um ponto de sela hiperbólico se  $|\lambda_i| > 1$  para alguns autovalores e  $|\lambda_i| < 1$  para outros; (2) um fonte se  $|\lambda_i| > 1, \forall i$ .*

Com este teorema é possível determinar a natureza dos pontos fixos e por consequência a natureza da dinâmica. Para o caso do atrator (4.7) em  $\lambda = -1.440$  teremos que os autovalores para cada ponto fixo será dado pela tab.(4.4). Nas duas primeiras colunas temos os pontos fixos do tipo  $(\mu, \mu, \mu)$  dados pelos valores 0.975935179 e 1.403790387 e na última coluna temos o ponto fixo do tipo (1; 1; 0, 9219544451). As posições e os sinais do ponto fixo não alteram o resultado do autovalor. para os dois primeiros casos. Já no

terceiro caso em que temos o ponto do tipo  $(1; 1; 0, 9219544451)$ , o sinal não altera o resultado mas a permutação do ponto altera o valor dos autovalores de forma pouco significativa. O caso aqui estudado na quarta coluna da tabela (4.4) é para o ponto fixo do tipo  $(0,9219544451, 1, 1)$ . No caso em que o ponto fixo é do tipo  $(1, 0,9219544451, 1)$  os autovalores são  $(3,581462547, 0,5199999960, 1,118537456)$  note que acontece uma permutação nas posições dos pontos e uma pequena alteração dos valores. No último caso  $(1, 1, 0,9219544451)$  os autovalores serão  $(3,565098764, 0,5199999960, 1,134901239)$ .

Ponto Fixo	0,975935179	1,403790387	0,9219544451
Autovalores	0,8550736820	-4,216768632	1,126848334
	0,8550736820	7,120784314	3,573151669
	3,521384000	7,120784314	0,5199999960

Tabela 4.4: Autovalores da Matriz (4.75) em  $\lambda = -1,440$ .

Nos casos em que os pontos fixos se alteram em valor com a permutação do ponto fixo em nada influencia na dinâmica. O ponto importante é que a alteração é muito pequena não provocando consequências inesperadas nas bifurcações.

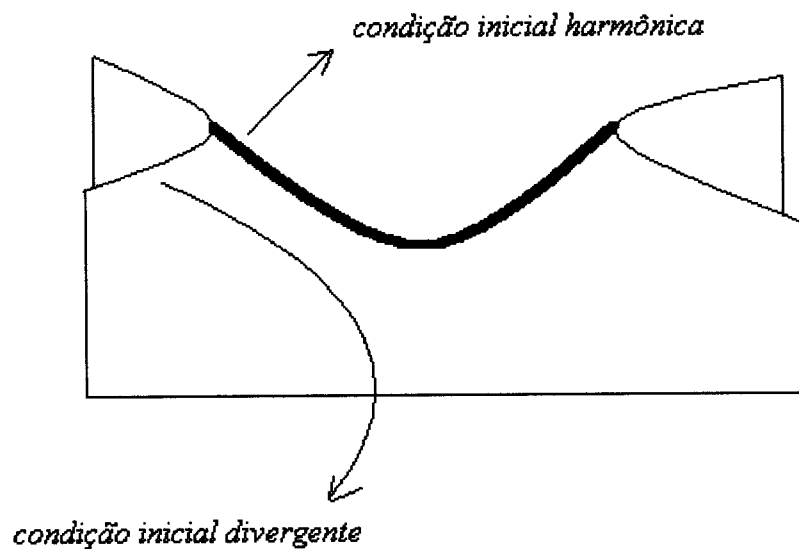


Figura 4.15: Esquema de órbita harmônica para o ponto fixo hiperbólico.

Podemos notar que em todos os casos temos pontos fixos do tipo hiperbólico. Estes

pontos apresentam uma natureza muito peculiar. Dado uma condição inicial a dinâmica pode ou não permanecer em uma “órbita harmônica”. Esquemáticamente falando podemos entender isso observando a figura (4.15). Na parte mais escura da nossa sela temos que a condição inicial fica em uma dinâmica harmônica, saindo dessa região a condição inicial se torna divergente.

Aqui foi feita uma análise global nos proporcionando a relação entre as simetria produzidas pela variação do parâmetro de bifurcação nos mapas dados pelas figuras (4.7), (4.12), (4.13), 4.14, com as figuras de quebra de simetria no modelo algébrico para o código genético [1, 2], dadas por (3.6), (3.8), (3.9), (3.10), em uma relação um para um, com exceção da segunda quebra de simetria no modelo algébrico,  $D_4 \times Z_2$ . Esta quebra pode ser produzida através da composição de atratores de simetrias distintas no caso, um atrator de simetria  $D_4$  mais um atrator de simetria  $Z_2$ . Estes resultados mostram coerência entre a quebra de simetria proposta pelo modelo e a quebra de simetria dinâmica já que esta segunda escolhe um único caminho. Notem que o modelo dinâmico ratifica os resultados obtidos no modelo algébrico tornando-o melhor em seus aspectos matemáticos. Esses resultados também vêm a confirmar que a quebra de simetria no modelo algébrico, determinada pelo grupo  $Sp(6)$ , é única já que os outros grupos de simetria que admitem representações de dimensão 64 não possuem o mesmo grupo de Weyl do  $Sp(6)$  tornando qualquer outra dinâmica para um diferente grupo sem significado para o estudo evolutivo.

O ponto mais importante do presente trabalho é como se dá a ação do nosso mapa nos códons e se essa ação pode nos dizer algo a respeito do modelo ou até mesmo a respeito de conceitos biológicos já pré-estabelecidos e conhecidos na literatura dando uma maior sustentação ao modelo algébrico. E tentar extrair algum caráter preditivo através da análise da relação dos códons pela ação da dinâmica.

# Capítulo 5

## A ação no Espaço dos Códonos

Nos capítulos anteriores as relações entre as quebras de simetria finita e via o sistema dinâmico foram discutidas, como resultado obtivemos no sistema dinâmico o mesmo padrão de quebra de simetria proposta pelo modelo algébrico para o código genético. Este fato é de extrema importância já que as possibilidades de quebra de simetria partindo do grupo  $O_h$  como principal simetria são inúmeras.

O nosso interesse se volta agora para a relação entre os aminoácidos e os pesos, tabela (3.1). A proposta de rotulação dos aminoácidos segundo os pesos da representação é um ponto importante a ser verificado. Além do mais essa rotulação, feita basicamente de acordo com as degenerescências do código é única ou existem outras possibilidades?, se não é única a simetria final de *Klein* continuará a ser preservada?.

Neste capítulo estudaremos a ação do difeomorfismo octaédrico, discutido no capítulo anterior, no espaço dos códonos focalizando a preservação da simetria sob a variação dos parâmetros e a mudança de posição dos códonos via essa ação. Agora queremos saber o que ocorre com o códon, rotulado da forma que foi proposta pelo modelo algébrico em relação ao seu peso, quando por exemplo, é colocada a condição inicial  $(1, 0, 0)$  referente aos códonos AGC, UUC, GAC, AAC para a iteração do mapa. Qual será o ponto que a dinâmica levará quando essa condição inicial é colocada.

Este estudo foi feito usando o mapa iterado com a condição inicial  $x_0, y_0$  e  $z_0$  nos pontos em que os códonos se encontram na figura (3.10) dada pela tabela (3.1) ou seja, a coordenada



do vetor que representa o códon é a condição inicial para a iteração do mapa com os valores das constantes fixos. Essa propagação é feita para cada valor de  $\lambda$  onde a bifurcação produziu alguma simetria.

Queremos observar como a dinâmica modifica a posição dos códons e se eles se relacionam através de famílias como no caso contínuo onde temos uma agregação em representações em cada passo do processo de quebra espontânea de simetria. Essa agregação pode ser vista por exemplo, na etapa B da figura (3.3) temos 6 famílias distintas de aminoácidos dados pelas representações de dimensão 16, 4, 20, 10, 2 e 12. Elas são subsequentemente quebradas a fim de distinguir os aminoácidos dentro de uma mesma representação. Podemos ver que os aminoácidos Arg, Ala, Phe, Asp e Glu fazem parte da representação 16 na etapa B da quebra de simetria mostrada pela figura (3.3) e são distingüidos posteriormente, como visto na figura (5.1), separadamente.

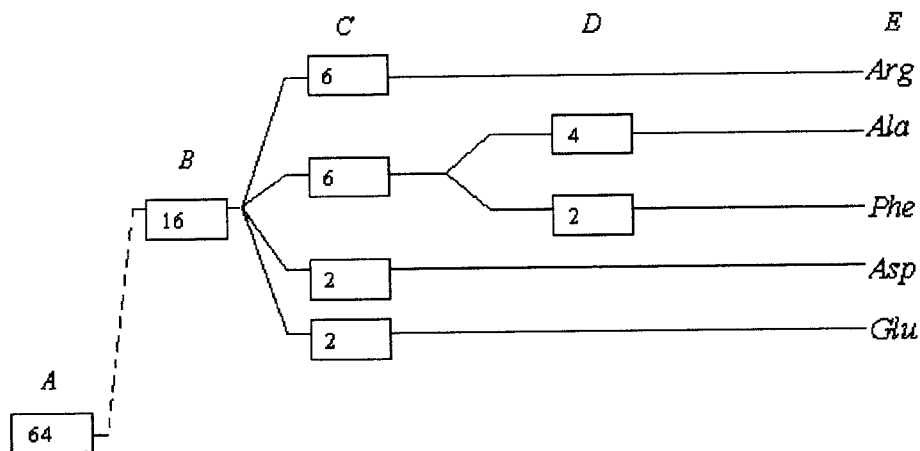


Figura 5.1: Quebra da representação de dimensão 16 - Um aminoácido primordial dá origem a 4 aminoácidos que são “quebrados” nos 5 aminoácidos contemporâneos.

Resta saber se a dinâmica ou mapa de iteração manterá essa rotulação invariante ou se, as mudanças sofridas via o sistema dinâmico mudam a posição e preservam a simetria de Klein ao fim da cadeia ou ainda, se o sistema dinâmico muda a rotulação e muda a simetria finita ao fim da cadeia devido à essa nova rotulação.

## 5.1 As condições iniciais

Anteriormente produzimos as simetrias via variação do parâmetro de bifurcação com um condição inicial fixa dada por  $(-0.5670, -0.4292, 0.6720)$ . As simetrias foram produzidas sob a variação de um parâmetro que chamamos de parâmetro de bifurcação denotado por  $\lambda$ . Esse estudo nos resultou em simetrias iguais às simetrias vistas no modelo algébrico e determinou os valores de  $\lambda$  para a obtenção dessas simetrias. A cada valor de  $\lambda$  e para a condição inicial  $(-0.5670, -0.4292, 0.6720)$  obtivemos um conjunto de simetrias formando uma cadeia de quebra dinâmica sob a variação desse parâmetro, cadeia esta dada pela equação (4.71). A condição inicial me dá a posição do primeiro ponto que será iterado. Essa condição determina inclusive, se a dinâmica é estável, como vimos no estudo da natureza das bifurcações. Sua alteração pode implicar em uma alteração da dinâmica mas as simetrias para os valores poderão ser mantidas.

No caso agora estudado a condição inicial para a iterar o mapa (4.56) é dada de acordo com a posição do códon no diagrama de *Weyl* tabela (3.1). Para isso, foi feita uma normalização desses vetores dividindo todas as coordenadas do vetor por  $\frac{1}{4}$  para fins computacionais. Por exemplo, o aminoácido Arg está na posição  $(2, 1, 0)$  do diagrama de *Weyl*, a condição inicial para estudar a sua dinâmica será  $(0.5, 0.25, 0)$  e assim sucessivamente com todos os outros 63 vetores. Essa análise mostrou que os códons se dividem primeiramente em dois grupos: os que são atraídos para pontos do tipo fixo quiral ou seja, a posição deles oscila entre  $(x_1, y_1, z_1) \leftrightarrow (-x_1, -y_1, -z_1)$  onde  $(x_1, y_1, z_1)$  é a posição do códon, e os que permanecem em um órbita com simetria determinada pelo parâmetro de bifurcação  $\lambda$ .

## 5.2 Regiões de Atração: Simetria Quiral

Códons com coordenadas paralelas aos pontos fixos são atraídos para regiões constituídas de apenas dois pontos: o ponto inicial, com uma modificação na norma por questões computacionais e seu inverso também modificado. Assim, por exemplo, a condição inicial  $(1/4, 1/4, 1/4)$  quando iterada ou seja, quando calculamos o valor da função dada por (4.56)

neste ponto temos que este oscila entre os pontos  $(0.347, 0.347, 0.347)$  e  $(-0.347, -0.347, -0.347)$ . Denotaremos por  $R_{(1,1,1)}$  essa região de atração invariante sob a ação da simetria quiral. Analogamente temos que as regiões  $R_{(1,-1,1)}$ ,  $R_{(-1,1,1)}$  e  $R_{(-1,-1,1)}$  são definidas de forma inteiramente equivalente. Esses pontos e seus inversos, formam um cubo cujo os vértices estão no centro do octaedro truncado da figura (3.6). Ele pode ser facilmente reconhecido pela dupla degenerescência que aparece na figura. A iteração conecta vértices opostos por inversão nesse cubo. Essa conexão é feita da seguinte maneira é mostrada nas tabelas (5.1) e (5.2).

Peso - Peso Conectado	Códon	Códon Conectado
$(1, 1, 1) \leftrightarrow (-1, -1, -1)$	CCC, ACC	GGA, GUA
$(-1, 1, 1) \leftrightarrow (1, -1, -1)$	CCU, ACU	GGG, GUG
$(1, -1, 1) \leftrightarrow (-1, 1, -1)$	CCG, ACG	GGU, GUU
$(-1, -1, 1) \leftrightarrow (1, 1, -1)$	CCA, ACA	GGC, GUC

Tabela 5.1: Conexão entre os códons via ação da dinâmica no ponto  $(1, 1, 1)$  e suas permutações de sinal e posição.

Peso - Peso Conectado	Códon	Códon - Conectado
$(1, 0, 0) \leftrightarrow (-1, 0, 0)$	AGC, UUC, GAC, AAC	AGU, UUU, GAU, AAU
$(0, 1, 0) \leftrightarrow (0, -1, 0)$	AGA, UUA, GAA, AAA	AGG, UUG, GAG, AAG
$(0, 0, 1) \leftrightarrow (0, 0, -1)$	AUA, CAA, CAU, UGG	UGA, CAG, CAC, AUG

Tabela 5.2: Conexão entre os códons via ação da dinâmica no ponto  $(1, 0, 0)$  e suas permutações de sinal e posição.

Nas tabelas existem conexões entre códons de diferentes aminoácidos por exemplo, a tabela (5.1) conecta os códons do aminoácido Pro (CCC) e Thr (ACC) nos códons responsáveis pela codificação dos aminoácidos Val (GUA) e Gly (GGG). Note que a possibilidade desta troca em nada altera a simetria de *Klein* ao fim da cadeia de quebra proposta pelo modelo algébrico.

Com a condição inicial  $(0, 0, 1/4)$ , que também é paralela a um ponto fixo, somos levados a um par de pontos da forma  $(0, 0, \alpha)$  e  $(0, 0, -\alpha)$ , definindo a região denotada por  $R_{(0,0,1)}$ .

As regiões  $R_{(0,1,0)}$  e  $R_{(1,0,0)}$  são definidas de forma análoga. A oscilação da dinâmica em torno de um ponto com simetria quiral, neste caso, também não altera a simetria de Klein. Note que na tabela (5.2) o aminoácido Met (AUG) é levado no aminoácido Trp (UGG). Esta troca é uma troca possível na rotulação proposta pelo modelo algébrico e a simetria de *Klein* é preservada por esta troca. O mesmo ocorre com o códon responsável pela codificação da Ile (AUA) que pode ser trocado com o códon responsável pelo sinal de terminação Term (UGA). Essa troca também deve ser feita nos dois outros códons da Ile com os dois outros códons do sinal de terminação a fim de preservar a simetria de *Klein*.

### 5.3 Regiões de Atração com Simetria Diedral

O outro grupo de aminoácidos se encontram em pontos que geram órbitas (“atratores”) que ao serem analisados provirão a idéia de evolução similar a proposta pelo modelo algébrico. Para  $\lambda = -1.440$  e  $\lambda = -1.400$  observamos que, dada a condição inicial  $(0, 1/2, /14)$ , o sistema é atraído para a região descrito pela figura (5.2). Observe as simetrias por rotações de  $90^\circ$ ,  $180^\circ$  e  $270^\circ$  bem como a reflexão em torno da bissetriz. Essas operações geram o grupo diedral  $D_4$ .

As condições iniciais do tipo  $(0, \pm 1/2, \pm 1/4)$  e  $(0, \pm 1/4, \pm 1/2)$  para este valor de  $\lambda$  são atraídas para a mesma região que denotaremos de  $R_{(0,2,1)}$ . Esses pontos correspondem aos códons e seus respectivos aminoácidos mostrados na tabela (5.3). Esse conjunto de pontos que gera um mesmo atrator e que designam os aminoácidos nos dá uma idéia de família.

Podemos interpretar que esses códons listados na tabela (5.3) faziam parte de uma mesma família de um “ente” único em um estágio primordial da evolução.

Vemos aqui um problema dois dos códons do aminoácido Leu não participam desse conjunto de pontos tendo em vista que estes dois códons estão nos pontos  $(0, 1, 0)$  e  $(0, -1, 0)$  que se encontram no sistema de simetrias descrito na seção anterior. Salvo esse problema, o fato dos códons dos aminoácidos Tyr e Cys fazerem parte de um mesmo ancestral já havia sido proposto pelo modelo algébrico. Isso pode ser observado a partir da etapa B na figura (3.3) onde a representação de dimensão 4 surge de pois da primeira quebra. Representação

Peso	Códon	Aminoácido
(0, 1, 2)	CUU	Leu
(0, -1, 2)	CUC	Leu
(0, 1, -2)	CUA	Leu
(0, -1, -2)	CUG	Leu
(0, 2, 1)	UAU	Tyr
(0, -2, 1)	UAC	Tyr
(0, 2, -1)	UGU	Cys
(0, -2, -1)	UGC	Cys

Tabela 5.3: Códonos que pertencem à uma mesma órbita: condição inicial do tipo  $(0, \pm 1, \pm 2)$  e  $(0, \pm 2, \pm 1)$  gerando o mesmo atrator.

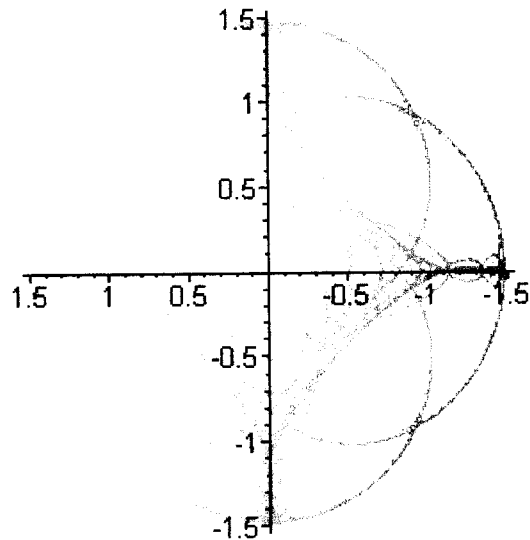


Figura 5.2: Órbita para  $\lambda = -1.440$  com a condição inicial no ponto do tipo  $(0, \pm 2, \pm 1)$  e  $(0, \pm 1, \pm 2)$ .

essa que contém os códonos dos aminoácidos Cys e Tyr. O mesmo comportamento produz as regiões de atração  $R_{(2,1,0)}$  e  $R_{(2,0,1)}$  definidas de maneira equivalente onde os atratores se encontram nos planos  $xy$  e  $xz$  respectivamente.

A região de atração sofre uma mudança ou quebra de simetria para  $\lambda = -1.354$  como

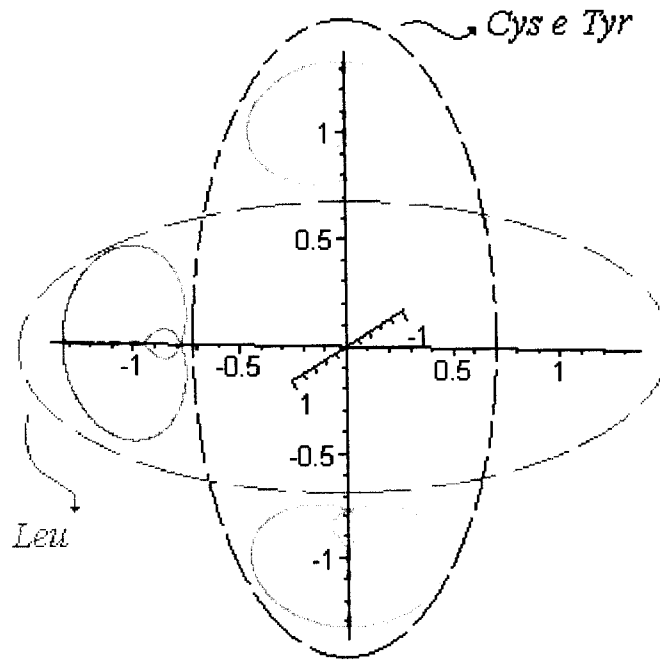


Figura 5.3: Representação das órbitas geradas pelos códons como condição inicial dos aminoácidos Cys, Tyr e Leu para  $\lambda = -1.354$ .

foi visto anteriormente no estudo das simetrias sob a variação do parâmetro  $\lambda$  e está representada na figura (5.3). As duas curvas fechadas circundadas pela linha tracejada em preto representam uma única região de atração correspondente a condição inicial  $(0, \pm 1/2, \pm 1/4)$ . Curiosamente a diminuição da simetria, para a simetria de *Klein*, preserva aminoácidos que foram rotulados como de uma mesma família ancestral no modelo algébrico para o código genético. Neste caso os códons da Cys e Tyr se matêm unidos em uma dinâmica representada pelo atrator dentro da linha tracejada em preto. Se analisarmos a figura (3.3) vemos que estes dois aminoácidos estão em um mesmo ramo na evolução proposta pelo modelo algébrico e o sistema dinâmico que representa esse sistema mantém este padrão.

A outra região, similar e ortogonal a essa circundada em vermelho, corresponde às condições iniciais  $(0, \pm 1/4, \pm 1/2)$ . Essas regiões são também invariantes sob a ação do grupo de *Klein*. Anteriormente tínhamos os aminoácidos da Leu, Cys e Tyr unidos em um único grupo ancestral, para  $\lambda = -1.440$  e  $\lambda = -1.400$ , agora para  $\lambda = -1.354$  a simetria é diminuída e os quatro códons da Leu se separam formando um único grupo, mostrado pelo

atrator envolto da linha tracejada em vermelho na figura (5.3).

A separação do atrator da pela figura (5.2) que mantinha os códons CUU, CUC, CUA, CUG do aminoácido Leu, UAU, UAC do aminoácido Tyr e UGU, UGC do aminoácido Cys se separa em dois atratores distintos cada um gerado por um conjunto de condições iniciais  $(0, \pm 1/4, \pm 1/2)$  e  $(0, \pm 1/2, \pm 1/4)$  que são responsáveis pela rotulação da Leu formando um único atrator e pelas rotulações da Cys e Tyr formando um segundo atrator, ambos descritos na figura (5.3).

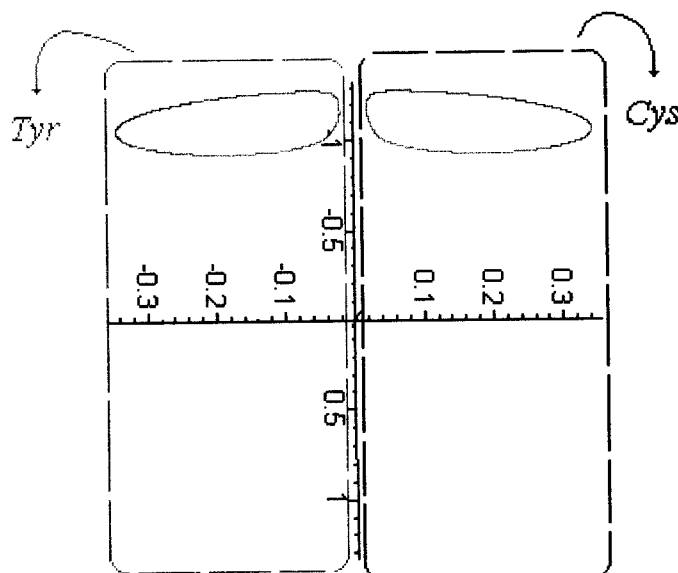


Figura 5.4: Quebra final com o grupo  $Z_2$  como simetria preservada. Separação dos aminoácidos Cys e Tyr em grupos de atratores distintos.

Temos também, como estudado anteriormente, uma bifurcação com simetria para  $\lambda = -1.332$  que pode ser vista na figura (5.4). A região circundada em preto contém um atrator que corresponde a condição inicial  $(0, \pm 1/2, 1/4)$ . A outra região, análoga, corresponde a condição  $(0, \pm 1/2, -1/4)$ . A simetria de *Klein* foi dinamicamente reduzida à simetria quiral  $Z_2$ . As condições iniciais  $(0, \pm 1/2, 1/4)$  e  $(0, \pm 1/2, -1/4)$  correspondem às posições dos códons da Cys e Tyr que surpreendentemente são separados em dois grupos de atratores distintos pela dinâmica. Este resultado pode ser interpretado como uma separação temporal desses aminoácidos que pertenciam à um único “ente” químico que por processos que

desconhecemos se separaram e atingiram as propriedades químicas que os designam.

A dinâmica mais uma vez seguiu o mesmo caminho proposto pelo modelo algébrico, notemos que a única restrição deste sistema foi que o mesmo estivesse relacionado à simetria octaédrica sob a forma de um princípio de equivariância. As quebras posteriores e as relações determinadas entre os códons **em nada** foram restringidas, os resultados são uma conseqüência natural da dinâmica. Poderíamos ter um atrator final que misturasse um códon da Cys com um códon da Tyr, mas isto não ocorreu, como vimos. Mais ainda, a separação seguiu os mesmo padrões que foram propostos pelo modelo anterior.

## 5.4 Sistema Dinâmico e o Modelo Algébrico

De uma forma geral a dinâmica muda os códons de posição que de forma suprendente leva um códon em um outro códon de um mesmo aminoácido ou então, leva um códon em um outro de um diferente aminoácido porém preserva a simetria de *Klein*.

A relação entre os códons pela ação da dinâmica é dada da seguinte maneira. O códon CCC da Pro tem coordenadas  $(1, 1, 1)$  no diagrama de pesos enquanto que o códon GGA da Gly corresponde ao peso  $(-1, -1, -1)$  no mesmo diagrama. Esses códons são levados para a mesma região de atração para todo valor de  $\lambda$ . Da mesma forma, uma vez que a degenerescência no diagrama não é levada em consideração pelo sistema dinâmico que a representa, vão estar na mesma região  $R_{(1,1,1)}$  os códons ACC da Thr e GUA da Val. Essa situação é descrita abaixo:

$$\begin{array}{ll}
 R_{(1,1,1)} \Rightarrow \text{Pro e Gly, Thr e Val} & R_{(1,-1,1)} \Rightarrow \text{Pro e Gly, Thr e Val} \\
 R_{(-1,1,1)} \Rightarrow \text{Pro e Gly, Thr e Val} & R_{(-1,-1,1)} \Rightarrow \text{Pro e Gly, Thr e Val} \\
 R_{(0,0,1)} \Rightarrow \text{Trp e Met, Ile e Term, Gln, His} & R_{(0,1,0)} \Rightarrow \text{Glu, Arg, Lys, Leu} \\
 R_{(1,0,0)} \Rightarrow \text{Phe, Asp, Asn, Ser} & R_{(0,2,1)} \Rightarrow \text{Cys e Tyr, Leu} \\
 R_{(2,0,1)} \Rightarrow \text{Term e Ile, Ser} & R_{(2,1,0)} \Rightarrow \text{Ala, Arg}
 \end{array}$$

A mesma identificação de códons antípodas(opostos pelo vértice) da Pro com a Gly e da Thr com a Val ocorrerá nas outras regiões, como visto anteriormente. A inspeção da árvore dada pela figura (3.3), mostra que a separação entre a Gly e a Pro bem como, a Val e o Thr,



ocorreram na última etapa da quebra espontânea de simetria. Desta maneira interpretamos a iteração como tentativas seletivas da evolução obtendo o código genético ancestral via uma predição dinâmica.

A mesma forma de pareamento antípoda é observada para os códons Trp e Met, Ile e Term, bem como os pares de códons da Gln e His mostrados anteriormente. Mais uma vez observamos da figura (3.3) que o Trp e a Met assim como, a Ile (AUA) e o código de terminação (UGA) estão pareados na mesma fase. O pareamento dos códons correpondentes do mesmo aminoácido que ocorre nas regiões  $R_{(0,0,1)}$ ,  $R_{(0,1,0)}$  e  $R_{(1,0,0)}$  não trazem nenhum fato novo e se adaptam perfeitamente ao modelo algébrico.

A análise das regiões de atração diedrais mostra a identificação dos códons da Cys, Tyr e Leu em um mesmo grupo. Os códons da Cys e Tyr também estão identificados como advindos de um ancestral comum antes da última quebra de simetria no modelo simplético, figura (3.3). Esse fato também ocorre com os códons da Ile e Term. A identificação dos códons da Ala e Arg somente ocorreram antes da segunda quebra e a Leu e Ser somente se identificaram nos primórdios. Essas são as previsões do modelo dinâmico.

A evolução do parâmetro de bifurcação  $\lambda$  provoca a separação dos códons da Cys e Tyr com os códons da Leu, os códons do Term e Ile com os da Ser e a Ala é separada da Arg em  $\lambda = -1.354$ . Posteriormente, quando  $\lambda = -1.332$ , são separados os códons da Cys e Tyr, Term e Ile. Os aminoácidos de degenerescência 6 não têm sua dinâmica bem representada no modelo. A razão, já apresentada na introdução, é que o modelo de dinâmica é no espaço dos pesos e não no espaço carregador da representação irredutível do grupo simplético que levaria em conta toda a degenerescência. O fato de trabalharmos com uma representação tridimensional de um objeto de 64 dimensões traz sérias restrições ao problema, sendo este o ponto fraco deste trabalho. Apesar dessa restrição todos os resultados e as simetrias observadas serviram de uma forma ímpar para ratificar o modelo algébrico e colocar de uma forma mais clara a idéia de aminoácidos primordiais, já há muito tempo defendida por vários grupos de especialistas na área.

## 5.5 Conclusões

Nessa tese mostramos uma forma de construção de um sistema dinâmico equivariante sob a ação do grupo octaédrico no espaço tridimensional. Invariantes e equivariantes foram construídos em sua forma polinomial a partir das matrizes da representação do grupo de simetria  $O_h$  e impondo a equivariância sobre esses polinômios. A iteração de uma forma específica do difeomorfismo exibiu bifurcações com simetria a a partir da variação dos parâmetros de controle do mapa equivariante sob a ação do grupo  $O_h$ . Tais bifurcações reproduziram uma quebra de simetria similar, no que diz respeito aos subgrupos que dela participam, à quebra de simetria proposta pelo modelo algébrico quando este é representado pelo seu grupo de *Weyl*, o qual possui uma simetria finita invariante sob a ação do grupo  $O_h$ . É notável que tais bifurcações apresentem os mesmo padrões de simetria tendo em vista que as possibilidades de quebra ou redução de simetria a fim de produzir uma cadeia de quebra eram inúmeras. Estas possibilidades podem ser vistas na figura (2.3). A cadeia de quebra dinâmica comparada à cadeia de quebra finita relacionada ao modelo algébrico ratifica os resultados propostos anteriormente reforçando a idéia de que as propriedades de simetrias intrínsecas da natureza seguem um único padrão, descrito no caso, pelos dois resultados.

A iteração foi interpretada como uma otimização seletiva no processo evolutivo de códons no contexto do modelo algébrico. Como resultado vários aspectos descritos pela quebra espontânea de simetria do grupo finito que representa o grupo  $Sp(6)$  em sua representação de dimensão 64 foram reproduzidos dinamicamente pela variação do parâmetro de bifurcação, ratificando assim em grande parte as idéias do modelo algébrico.

A ação da dinâmica sobre os códons resultou no fato mais importante deste trabalho. Vimos que códons de um mesmo aminoácido estão contidos em um mesmo grupo de simetria. É surpreendente que códons de aminoácidos distintos estejam em famílias, que são iguais às famílias propostas pelo modelo algébrico, que são “quebradas” em subfamílias nos resultando em uma rotulação similar à rotulação proposta anteriormente. Esse resultado ratifica não só o modelo como resolve, em grande parte, o problema da rotulação dos códons com os pesos. Podemos observar um número razoável de arranjos dos códons segundo suas degenerescências

com os pesos da representação. Não obstante, tal rotulação seguia padrões bem estabelecidos pela matemática envolvida no modelo. Além do mais, o sistema dinâmico que se conecta ao modelo, com a única restrição de reconhecer a simetria octaedral como ponto de partida para a sua evolução, reproduz as famílias de forma análoga às famílias propostas pelo modelo algébrico. Com exceção dos aminoácidos de degenerescência 6, todos os outros aminoácidos formaram as mesmas famílias que são designadas por diferentes representações e mostradas na figura (3.3).

Todos os resultados vieram a confirmar e ratificar em grande parte a idéia de que os códons faziam parte de um ancestral comum que no decorrer do tempo foi ganhando complexidade e gerando subfamílias e assim sucessivamente até formação que se conhece hoje e que se tem como padrão.

A aplicação de sistemas dinâmicos tanto para explicar modelos já conhecidos como para gerar modelos próprios está em sua juventude e nos proporciona uma poderosa ferramenta matemática para diversas áreas de estudo em ciência.

# Bibliografia

- [1] J. E. M. Hornos e Y. M. M. Hornos [1993] “Algebraic Model for The Evolution of Genetic Code ”, *Physical Review Letters* vol.71, n 26.
- [2] J. E. M. Hornos, Y. M. M. Hornos e M. Forger [1999] “Symmetry and Symmetry Breaking: An Algebraic Approach to The Genetic Code”, *International Journal of Modern Physics B*, vol. 13, n. 23, 2795 - 2885.
- [3] L. Braggion e J. E. M. Hornos [1998] “Procura por Simetrias de Lie na Evolução do Código Genético ”, *Dissertação de Mestrado*, IFSC-USP.
- [4] M. S. Barbosa e J. E. M. Hornos [1996] “Construção da Representação Simplética para o Modelo Algébrico do Código Genético ”, *Dissertação de Mestrado*, IFSC -USP.
- [5] J. B. Marion e S. T. Thornton [1995] “Classical Dynamics of Particles and Systems”, 4th edition, Saunders College Publishing, New York, USA.
- [6] M. Golubitsky e I. N. Stewart [1985] “Hopf bifurcation in the presence of symmetry”, *Arch. Rat. Mech. Anal.* 87, 107-165.
- [7] M. Golubitsky, M. D. Schaeffer e I. Stewart [1988] “Singularities and Group in Bifurcation Theory” Vol. II, Springer, Berlin.
- [8] P. Chossat e M. Golubitsky [1998] “Symmetry-Increasing Bifurcation of Chaotic Attractors ”, *Physica D* 32, 423 - 436.
- [9] P. J. Aston [1998] “A chaotic Hopf bifurcation in coupled maps”, *Physica D* 118, 199-220.

- [10] M. Magini e J. E. M. Hornos [1999] “Análise de Simetria nos Grupos do Tipo  $D_m$  Usando Conceitos de Sistemas Dinâmicos ”, *Dissertação de Mestrado*, IFSC - USP.
- [11] J. E. M. Hornos, L. Braggion, M. Magini e M. Forger [2002] “Symmetry Preservation in the Evolution of the Genetic Code”, Submetido, aguardando decisão.
- [12] P. Chossat e M. Golubitsky [1988] “Iterates Maps with Symmetry ”, *SIAM J. MATH. ANAL.*, VOL. 19, n. 6, 1259 - 1270.
- [13] E. Barany, M. Dellnitz e M. Golubitsky [1993] “Detecting the Symmetry of Attractors ”, *Physica D* 67, 66 - 78.
- [14] Jin-Quan Chen [1987] “Group Representation Theory for Physicists ”, World Scientific, USA.
- [15] M. Hammermesh [1989] “Group Theory and It’s Application to Physical Problems ”, *Dover Books*, New York.
- [16] J. P. D ’Incao e J. E. M. Hornos [1997] “Funções de Onda para o Atómo de Lítio no formalismo Hiperesférico ”, *Dissertação de Mestrado*, IFSC - USP.
- [17] F. H. C. Crick [1991] “Codon-Anticodon Pairing: The Wobble Hypothesis ”, *J. Mol. Biol.* 19, 548 - 555.
- [18] A. O. Barut e R. Raczka [1986] “Theory of Group Representations and Applications ”, *World Scientific Publishing*, Singapore.
- [19] S. Osawa [1995] “Evolution of the Genetic Code ”, *Oxford University Press*, New York, USA.
- [20] T. H. Jukes [1973] “Possibilities for the evolution of the genetic code from a preceding form”, *Nature* 246, 22-26
- [21] E. N. Trifonov [2000] “Concensus temporal order of amino acids and of the evolution of the triplet code”, *GENE* 261, 139 - 151.

- [22] Prieur B. [1993] "Auto-Organisation et Evolution des Premiers Systèmes Moléculaires", *Doctorat Thesis, Spécialité:Pharmacologia-Universite Paris.*
- [23] M. Forger, Y. M. M. Hornos and J. E. M. Hornos [1997]. "Global aspects in the algebraic approach to the genetic code ", *Physical Review E* vol.56, n 6, 7078 - 7082.
- [24] H. Weyl [1997] "Simetria", *EDUSP*, Tradução:Victor Baranauskas, São Paulo, Brasil.
- [25] W. G. McKay e J. Patera [1981] "Tables of Dimensions, Indices, and Braching Rules for Representations of Simple Lie Algebras", *MARCEL DEKKER, INC., New York.*
- [26] I. Melbourne [1986] " A singularity theory analysis of bifurcation problems with octahedral symmetry", *Dynamics and Stability of Systems* vol. 1, n. 4, 293 - 321.
- [27] D. K. Arrowsmith e C. M. Place [1991] "An Introduction to Dynamical Systems", *Cambridge University Press*, Australia, cap. 1-2.
- [28] Fielder-Ferrara e Cintra do Prado [1994] " Caos: Uma Introdução", *Editora Edgard Blücher LTDA.*, São Paulo, Brasil.