



UNIVERSIDAD DE CONCEPCIÓN
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MATEMÁTICA

DINÁMICAS HAMILTONIANAS EN REDES BOOLEANAS

Desarrollado por:
Arturo Antonio Zapata Cortés

Tesis presentada a la Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas de la
Universidad de Concepción para optar al título profesional de Ingeniero Civil
Matemático

Profesor Guía: Dr. Julio Bernardo Aracena Lucero

Enero 2022
Concepción, Chile

© 2022 Arturo Antonio Zapata Cortés

Se autoriza la reproducción total o parcial, con fines académicos, por cualquier medio o procedimiento, incluyendo la cita bibliográfica del documento.

DINÁMICAS HAMILTONIANAS EN REDES BOOLEANAS

Arturo Antonio Zapata Cortés

COMISIÓN EVALUADORA

- Dr. Julio Aracena Lucero [**Profesor Guía**]
Departamento de Ingeniería Matemática y Centro de Investigación en Ingeniería Matemática (CI²MA), Universidad de Concepción, Chile.
- Dra. Anahí Gajardo Schulz
Departamento de Ingeniería Matemática y Centro de Investigación en Ingeniería Matemática (CI²MA), Universidad de Concepción, Chile.
- Dr. Diego Maldonado Montiel
Departamento de Ingeniería Informática, Universidad Católica de la Santísima Concepción, Chile.
- Dr. Guillaume Theyssier
French National Center for Scientific Research and Mathematics Institute of Marseille from Aix-Marseille University, France.

27 de Enero del 2022

A mis seres queridos.

AGRADECIMIENTOS

Le doy gracias a mi madre Ana Isabel Cortés Cartes y mi padre Jaime Antonio Zapata Sepúlveda por apoyarme en todo momento, su preocupación y cariño. Agradecer a mis abuelos, mi hermano, mi madrina, mi familia y seres queridos por su apoyo incondicional.

A mis compañeros de carrera, que me apoyaron con su conocimiento y felicidad en cada curso en que coincidíamos, su simple presencia me alegraba los días.

A todos los profesores y profesoras que me formaron, todos fueron pilar para mi desarrollo y de cada uno aprendí algo nuevo para mi crecimiento como persona.

Mis agradecimientos al Dr. Julio Aracena, quien fue mi profesor en la carrera y guía de mi memoria de título, apoyándome en todo momento, confiando en mis habilidades y motivándome cuando las cosas fallaban.

A los miembros del proyecto ECOS-ANID, quienes me invitaron a participar en sus actividades, me compartieron sus conocimientos y me apoyaron para mejorar este trabajo. Agradecer a la Agencia Nacional de Investigación y Desarrollo ANID-Chile a través del Centro de Modelamiento Matemático CMM, proyecto BASAL FB170001 por su financiamiento parcial.

Nuevamente agradecer a mis seres queridos, tanto los que están hoy conmigo como los que ya se fueron. Sin ustedes, nada de esto podría haber sido realidad. Siempre estarán en mi memoria.

Índice general

AGRADECIMIENTOS	I
Índice de cuadros	II
Índice de figuras	II
1. Introducción	1
2. Definiciones y resultados previos	3
2.1. Conceptos de matemática discreta	3
2.1.1. Grafos y digrafos	3
2.1.2. Conexidad y conexidad fuerte	6
2.1.3. Funciones Booleanas	7
2.1.4. Métricas discretas	9
2.2. Redes dinámicas finitas	10
2.2.1. Conceptos básicos	10
2.3. Familias de redes dinámicas finitas	13
2.3.1. Redes conjuntivas y disyuntivas	14
2.3.2. Redes monótonas y regulatorias	15
3. Dinámicas Hamiltonianas	19
3.1. Dinámica de máxima altura	20
3.2. Dinámica ciclo Hamiltoniano	21
3.3. Dinámica Hamiltoniana intermedia	23
3.4. Intercambio entre dinámicas	25
4. Análisis del grado de entrada en vértices de $G(f)$	28
4.1. Lema de cardinalidad impar	28
4.2. Resultados obtenidos al caso de estudio	30
4.2.1. Caso máxima altura	30
4.2.2. Caso Hamiltoniana intermedia	32

5. Análisis de conexidad en $G(f)$	33
5.1. Caso Hamiltoniana intermedia	33
5.2. Caso máxima altura	34
5.3. Caso ciclo Hamiltoniano	35
6. Familia regulatoria de dinámica ciclo Hamiltoniano	37
6.1. Motivación	37
6.2. Construcción de la familia	40
7. Conclusiones	53
7.1. Trabajo futuro y problemas propuestos	54
Referencias	56
Apéndices	58
A. Demostración a preguntas propuestas	58
A1. Número de RDF distintas	58
A2. Biyectividad de la red implica balanceado	58
A3. Lema de comparabilidad	59
B. Códigos empleados	61
B1. Construcción de dinámicas en BNSimulator	61
B2. Construcción de redes a partir de la dinámica	62

Índice de cuadros

2.1. Tabla de verdad función h	9
2.2. Tabla de verdad función f	9
6.1. Dinámica definida por la red recursiva $f^{[3]}$	42
6.2. Dinámica definida por la red recursiva $f^{[4]}$	44

Índice de figuras

2.1. Ejemplo de grafos.	5
2.2. Ejemplo de digrafos.	5
2.3. Ejemplo de grafo conexo y digrafo no fuertemente conexo.	7
2.4. Grafo de iteración de f del ejemplo 2.5.	12
2.5. Grafo de interacción de f del ejemplo 2.5.	13
2.6. Grafo de interacción con signos de f del ejemplo 2.5.	17
2.7. Grafo de interacción con signos de f junto a su dinámica del ejemplo 2.8.	18
3.1. Esquema de una dinámica de máxima altura.	20
3.2. Grafo de interacción con signos de f con dinámica de máxima altura del ejemplo 3.1.	21
3.3. Dinámica de máxima altura de f del ejemplo 3.1.	21
3.4. Esquema de un ciclo Hamiltoniano.	22
3.5. Grafo de interacción con signos de f dinámica ciclo Hamiltoniano del ejemplo 3.2.	22
3.6. Dinámica ciclo Hamiltoniano de f del ejemplo 3.2.	23
3.7. Esquema de una dinámica Hamiltoniana intermedia, $i \in \{2, \dots, 2^n - 1\}$	23
3.8. Grafo de interacción con signos de f del ejemplo 3.3.	24
3.9. Dinámica Hamiltoniana intermedia de f del ejemplo 3.3.	24
3.10. Dinámica de máxima altura a construir en el ejemplo 3.5.	27
3.11. Grafo de interacción con signos de \tilde{f} dinámica de máxima altura presentada en la figura 3.10.	27
6.1. Grafo de interacción con signos de $f^{[2]}$ y su dinámica.	41
6.2. Dinámica de h red auxiliar.	42
6.3. Dinámica ciclo Hamiltoniano de $f^{[3]}$	43

Capítulo 1

Introducción

Las redes Booleanas con n componentes son un sistema dinámico discreto dado por la iteración sucesiva de una función $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^n$. Estas son de gran importancia para el modelamiento de sistemas complejos tales como modelos de opinión e influencia social (Grabisch M., Rusinowska A., 2013; Jackson, M.O., 2008; Goles E., Tchunte M., 1982; Poljak S., Sura M., 1982), modelamiento de procesos ecológicos (Han Y., Kristensen N., Buckley Y., Maple D., West J., McDonald-Madden E., 2020), redes neuronales (Goles E., 1985; Goles E., Martínez S., 1991; Mac Culloch W.S., Pitts W.S., 1943; Hopfield J., 1982) o modelos biológicos/genéticos (de Jong H., 2002; Kauffman, S.A., 1969; Thomas R., 1973; Thomas R., Kaufman M., 2001), entre otros.

Si bien parte de estos procesos no son discretos, el uso de estas redes permite simplificar un sistema real para la obtención de relaciones y comportamientos del sistema mediante la estructura del grafo de interacción y su dinámica. En esta línea, gran parte de los estudios han sido realizados a procesos particulares y concentrándose en la interacción entre las variables para la inferencia de propiedades de la dinámica, tales como atractores puntuales, cíclicos, periodicidad o cotas en su altura. Lo anterior justificado por la menor complejidad de estudiar un digrafo de n componentes por sobre su dinámica de cantidad exponencial de configuraciones.

Ahora, no se identificaron trabajos específicos en analizar el sentido inverso,

proponiendo una dinámica particular y analizar la existencia de condiciones en la interacción de la red, es por ello que, en este trabajo se tratará este tema en base a redes con dinámicas Hamiltonianas para la inferencia de propiedades que estos puedan implicar, tanto en redes Booleanas en general como en familias particulares de estas.

Las dinámicas Hamiltonianas son todas aquellas dinámicas que poseen un camino Hamiltoniano y, entre las familia de redes Booleanas están las redes regulatorias, siendo estas de gran importancia debido a que predominan en procesos biológicos y modelos genéticos de estudio (Aracena, J., 2001, 2006; Mendoza, L., Alvarez-Buylla, E., 1998; Sánchez, L., Thieffry, D., 2001), expresando un comportamiento entre variables de activación e inhibición en la red.

Para el logro de este estudio, en el Capítulo 2 se realizará un breve repaso de contenidos, definiciones y propiedades básicas de temas necesarios para el desarrollo de los siguientes temas. En el Capítulo 3 se procederá a definir y ejemplificar las tres posibles dinámicas Hamiltonianas que puede modelar una red Booleana y con la finalidad de identificar tal comportamiento y alguna de sus propiedades.

Ya con los resultados y dinámica de estudio presentada, el Capítulo 4 se establecerá como primera pregunta si estas dinámicas imponen condiciones en el grado de interacción entre las variables y la existencia de un vértice que depende de todos los elementos de la red. En el Capítulo 5 se analizará de manera general el grafo de interacción en base a su conexidad inducida por su dinámica para el caso general de redes Booleanas y, el Capítulo 6 se profundizará en redes regulatorias probando la existencia de una dinámica mediante la creación de una familia regulatoria. Finalmente, en el Capítulo Conclusiones se discuten los principales resultados obtenidos en este trabajo y se presentan unas ideas para trabajos futuros.

Capítulo 2

Definiciones y resultados previos

Con la finalidad de introducir a los términos utilizados en esta tesis, el presente capítulo tiene por objetivo definir los contenidos a utilizar para entender el desarrollo de los próximos capítulos, estableciendo la notación a manipular, conceptos y definiciones de redes dinámicas finitas junto a un establecimiento general de expresiones de matemática discreta.

2.1. Conceptos de matemática discreta

Como ya se mencionó, nuestro análisis está enfocado al estudio del grafo de interacción dado una cierta dinámica particular de la red, es por ello que en esta sección se definirán conceptos relacionados a grafos y digrafos junto a la notación para cada caso.

2.1.1. Grafos y digrafos

Definición 2.1. *Un grafo G (o grafo no dirigido) es un par ordenado (V, E) , donde $V \neq \emptyset$ denota un conjunto finito de vértices o nodos y $E \subseteq \{x \in \mathcal{P}(V) : |x| = 2\}$ un conjunto de pares no ordenados de V llamados aristas.*

Definición 2.2. *Un digrafo G o grafo dirigido es un par ordenado (V, A) , donde $V \neq \emptyset$ denota un conjunto finito de vértices o nodos y $A \subseteq V \times V$ un conjunto de*

pares ordenados de V llamados arcos.

En adelante, precisaremos al grafo que se esté mencionando mediante la notación $V(G)$, $E(G)$ y $A(G)$ como el conjunto de vértices, aristas y arcos de G respectivamente. Además, cuando no exista confusión denotaremos la arista $\{u, v\} = uv = vu \in E(G)$, $u, v \in V(G)$, esto debido a que en grafos no importa el orden en que se defina la arista, es por ello que las siguientes definiciones difieren en grafos y digrafos.

Definición 2.3. *Sea $G = (V, E)$ y $u, v \in V(G)$, estos son adyacentes si $uv \in E(G)$ y definiremos la vecindad de v por:*

$$N_G(v) := \{u \in V(G) : uv \in E(G)\}$$

Además, definiremos el grado de v como $d_G(v) := |N_G(v)|$. De manera análoga para digrafos definiremos la vecindad de entrada y salida, respectivamente, por:

$$N_G^-(v) := \{u \in V(G) : (u, v) \in A(G)\}$$

$$N_G^+(v) := \{u \in V(G) : (v, u) \in A(G)\}$$

Y, el grado de entrada y salida de v como $d^+(v) = |N^+(v)|$ y $d^-(v) = |N^-(v)|$, respectivamente.

En particular, la vecindad y su grado de entrada serán de gran importancia debido a que esto se definirá posteriormente como la dependencia de una función f_v definida sobre el vértice v con dependencia del valor en los vértices $u \in N^-(v)$.

Definición 2.4. *Sea $G = (V, E)$ un grafo, se dirá que $G' = (V', E')$ es subgrafo de G si $V' \subseteq V$ y $E' \subseteq E$. De manera análoga, $G = (V, A)$ un digrafo se dirá que $G' = (V', A')$ es subgrafo de G si $V' \subseteq V$ y $A' \subseteq A$. En ambos casos, se denotará por $G' \subseteq G$.*

Definición 2.5. *Sea G un grafo o digrafo tal que $G' \subseteq G$, entonces:*

- *Si $V(G) = V(G')$ entonces se dirá que G' es un subgrafo recubridor de G .*
- *Si $V(G) \neq V(G')$, se dirá que G' es un subgrafo propio de G .*
- *Si $E(G') = \{uv \in E(G) : u, v \in V(G')\}$ o $A(G') = \{(u, v) \in A(G) : u, v \in V(G')\}$ entonces se dirá que G' es un subgrafo inducido de G .*

$V(G')$ }, según sea el caso, se dirá que G' es un subgrafo inducido por $V(G')$ y se denotará por $G' = G[V(G')]$.

Ejemplo 2.1. De la figura 2.1 notemos que G_1 es un subgrafo recubridor de G_2 y la vecindad del vértice 4 es $N_{G_1}(4) = N_{G_2}(4) = \{2, 3, 5\}$.

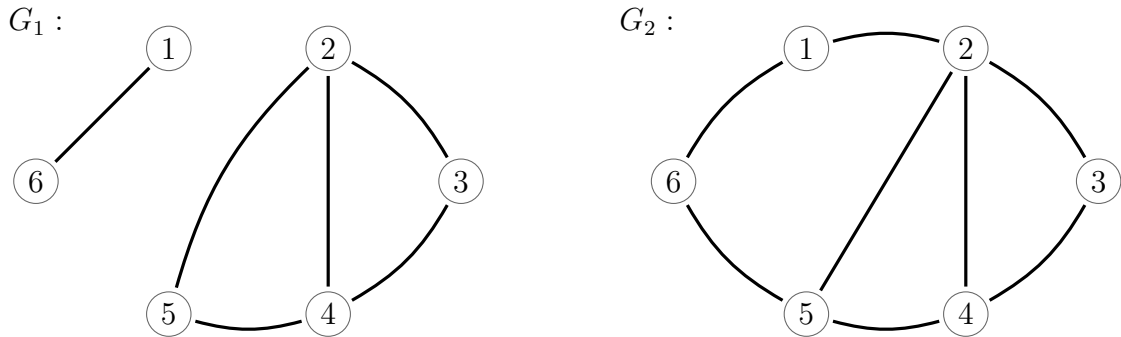


Figura 2.1: Ejemplo de grafos.

De la figura 2.2 notemos que G_4 es un subgrafo propio de G_3 , con $G_4 = G[\{1, 3, 4, 5, 6\}]$ y la vecindad de entrada y salida del vértice 1 en ambos casos es $N_{G_1}^-(1) = N_{G_2}^-(1) = \{4, 6\}$ y $N_{G_1}^+(1) = N_{G_2}^+(1) = \{6\}$, respectivamente.

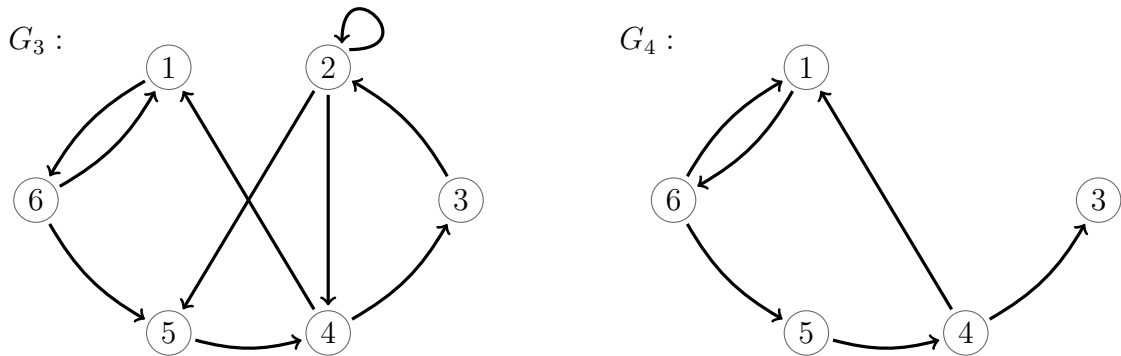


Figura 2.2: Ejemplo de digrafos.

Definición 2.6. Sea G un grafo o digrafo de n vértices, se define:

- Un recorrido entre v_{i_1} y v_{i_j} es una secuencia ordenada de vértices $\{v_{i_k}\}_{k=1}^j$ de G tal que $\forall k = 1, \dots, j-1$, $v_{i_k}v_{i_{k+1}} \in E(G)$ en el caso de un grafo y $(v_{i_k}, v_{i_{k+1}}) \in A(G)$ en el caso de un digrafo.

- *Un camino entre v_{i_1} y v_{i_j} es un recorrido entre v_{i_1} y v_{i_j} tal que este no repite vértices.*
- *Un circuito es un recorrido entre v_{i_1} y el mismo vértice.*
- *Un ciclo es un circuito que sólo repite un vértice.*
- *El largo de un recorrido R es la cantidad de aristas o arcos, según sea el caso, definidos en el recorrido. Además, el largo de un recorrido lo denotaremos por $l(R) = |E(R)|$ o $l(R) = |A(R)|$, donde $E(R), A(R)$ corresponde a las aristas y arcos inducidos por los vértices del recorrido, respectivamente.*

2.1.2. Conexidad y conexidad fuerte

Ya con las primeras nociones de grafos y digrafos es necesario comprender ciertas propiedades en su estructura, siendo la conexidad y conexidad fuerte temas importantes a definir.

Definición 2.7. *Sea G un grafo o digrafo, este se dirá trivial si $|V| = 1$ y $E(G) = \emptyset$ o $A(G) = \emptyset$, según corresponda.*

Definición 2.8. *Sea $G = (V, E)$ un grafo, se dirá que G es conexo si este es trivial o, para todo par de vértices de G existe un camino que los une. En caso contrario, se dirá que G es desconexo.*

Definición 2.9. *Sea $G = (V, A)$ un digrafo, se dirá que G es conexo si el grafo fundamental $G_F = (V_F, E_F)$ definido por $V_F = V$ y $ab \in E_F \Leftrightarrow (a, b) \in A \vee (b, a) \in A$, con $a \neq b$, es un grafo conexo.*

Definición 2.10. *Sea $G = (V, A)$ un digrafo, se dirá que G es fuertemente conexo si este es trivial o, para todo par de vértices u, v de G existe un camino de u a v y viceversa.*

Definición 2.11. *Sea $G = (V, A)$ un digrafo, se dirá que el digrafo es completo si posee todos sus arcos, incluyendo las bucles.*

Ejemplo 2.2. *De la figura 2.3 notamos que G_1 es un grafo conexo y G_2 un digrafo no fuertemente conexo debido a que no existe camino del vértice 4 al vértice 5. Además,*

note que $(G_2)_F = G_1$ y por consiguiente G_2 es conexo pero no fuertemente conexo.

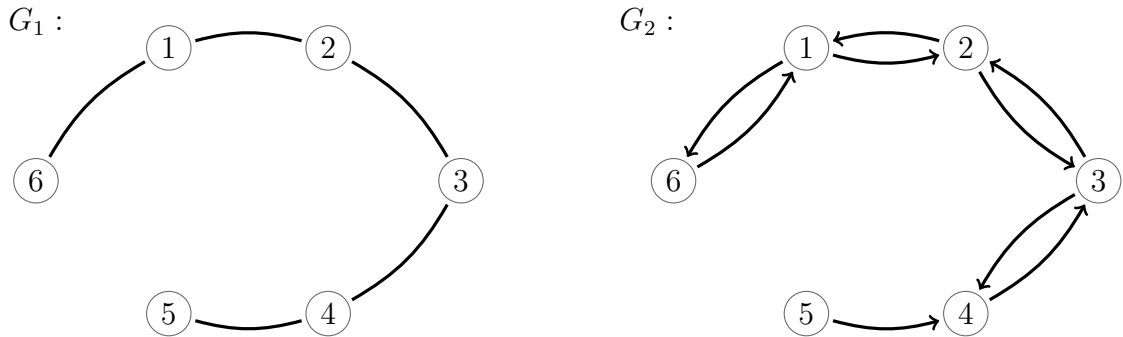


Figura 2.3: Ejemplo de grafo conexo y digrafo no fuertemente conexo.

2.1.3. Funciones Booleanas

Otro punto a definir son las funciones Booleanas debido a su interés en las redes que se componen de estas funciones. Es por ello que se procederá a estipular los términos básicos de estas funciones y la lógica proposicional detrás de ellas.

Definición 2.12. Una función $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}$ se dirá una función Booleana f de n variables. Además, se define de esta las siguientes expresiones:

- Una literal de f es cualquier variable, tanto negada como no, que aparezca en la expresión de f .
- Una cláusula de f es un conjunto de literales conectados por un mismo conector. Si el conector es \vee se dirá cláusula disyuntiva y si el conector es \wedge se dirá cláusula conjuntiva.
- Se dirá que f está escrito en su forma normal conjuntiva (cnf-fórmula) si su expresión es un conjunto de cláusulas disyuntivas unidas por el conector \wedge . De manera análoga, f está escrito en su forma normal disyuntiva (dnf-fórmula) si su expresión es un conjunto de cláusulas conjuntivas unidas por el conector \vee .

Definición 2.13. Sea $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}$ una función Booleana, se define $T(f)$ y $F(f)$ como el conjunto de configuraciones positivas y negativas de f , respectivamente,

es decir:

$$T(f) = \{x \in \{0, 1\}^n : f(x) = 1\}$$

$$F(f) = \{x \in \{0, 1\}^n : f(x) = 0\}$$

Además, si $x \in T(f)$ diremos que esta es una configuración positiva o configuración negativa en caso contrario.

Definición 2.14. Sea $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}$ una función Booleana, se dirá que la función es balanceada si $|T(f)| = |F(f)| = 2^{n-1}$.

Note que toda función Booleana puede ser interpretada como una fórmula lógica asociando el valor 0 y 1 a los valores Falso y Verdadero, respectivamente, logrando interpretar esta función como la presencia o ausencia de cierta característica o sustancia a modelar. De lo anterior, se tiene que cualquier función Booleana $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}$ puede ser escrita como una expresión de variables x_1, x_2, \dots, x_n y de la composición de conectivas lógicas \wedge (conjunción), \vee (disyunción) y negación representada por una línea sobre la variable \bar{x}_i .

Ejemplo 2.3. Algunos ejemplos de funciones Booleanas son:

- $f_1(x_1, x_2, x_3) = (x_2 \wedge \bar{x}_3) \vee (x_1 \wedge \bar{x}_2 \wedge \bar{x}_3) \vee x_3$
- $f_2(x_1, x_2, x_3) = \bar{x}_1 \wedge (x_1 \vee x_2 \vee x_3)$
- $f_3(x_1, x_2, x_3) = x_1 \wedge x_2 \wedge x_3$
- $f_4(x_1, x_2, x_3) = x_3 \wedge (\bar{x}_2 \vee (x_1 \wedge \bar{x}_3))$

A partir de la definición 2.12 se desprende que f_1 es una dnf-fórmula, f_2 es una cnf-fórmula y f_3 es tanto una cnf-fórmula como dnf-fórmula, ya que, esta puede ser vista como múltiples cláusulas disyuntivas o una única cláusula conjuntiva. Además, note que $f_2(x_1, x_2, x_3) = (\bar{x}_1 \wedge x_2) \vee (\bar{x}_1 \wedge x_3)$ y $f_4(x_1, x_2, x_3) = x_3 \wedge \bar{x}_2$, motivando el siguiente resultado conocido.

Teorema 2.1. Toda función Booleana puede ser escrita como una cnf-fórmula o una dnf-fórmula.

2.1.4. Métricas discretas

Como último término de matemática discreta a recordar, mencionaremos una métrica discreta con el objetivo de comparar las configuraciones que nos retornen las redes Booleanas e identificar propiedades que estos definan.

Definición 2.15. *Se define la métrica de Hamming $d_H : \{0, 1\}^n \times \{0, 1\}^n \rightarrow \mathbb{N}_0$ como: $\forall x, y \in \{0, 1\}^n, d_H(x, y) = |\Delta(x, y)|$, donde $\Delta(x, y) := \{i \in \{1, \dots, n\} : x_i \neq y_i\}$.*

Ejemplo 2.4. *Sea el operador binario \oplus definido por $h(x_1, x_2) = x_1 \oplus x_2 = (x_1 \wedge \bar{x}_2) \vee (\bar{x}_1 \wedge x_2)$ descrito por la tabla de verdad del cuadro 2.1.*

x	$x_1 \wedge \bar{x}_2$	$\bar{x}_1 \wedge x_2$	$x_1 \oplus x_2$
00	0	0	0
01	1	0	1
10	0	1	1
11	0	0	0

Cuadro 2.1: Tabla de verdad función h .

El cual es también denominado suma módulo dos. Sea $f(x) = f(x_1, x_2, x_3) = x_1 \oplus x_2 \oplus x_3$, por definición, f puede ser reescrito por $f(x) = (x_1 \wedge x_2 \wedge x_3) \vee (\bar{x}_1 \wedge \bar{x}_2 \wedge x_3) \vee (\bar{x}_1 \wedge x_2 \wedge \bar{x}_3) \vee (x_1 \wedge \bar{x}_2 \wedge \bar{x}_3)$ de tabla de verdad descrita por el cuadro 2.2.

x	$x_1 \wedge x_2 \wedge x_3$	$\bar{x}_1 \wedge \bar{x}_2 \wedge x_3$	$\bar{x}_1 \wedge x_2 \wedge \bar{x}_3$	$x_1 \wedge \bar{x}_2 \wedge \bar{x}_3$	$x_1 \oplus x_2 \oplus x_3$
000	0	0	0	0	0
001	0	1	0	0	1
010	0	0	1	0	1
011	0	0	0	0	0
100	0	0	0	1	1
101	0	0	0	0	0
110	0	0	0	0	0
111	1	0	0	0	1

Cuadro 2.2: Tabla de verdad función f .

Notemos que f es una función Booleana balanceada, escrita por su dnf-fórmula y de conjunto de configuraciones positiva y negativa de f :

$$T(f) = \{001, 010, 100, 111\} \quad F(f) = \{000, 011, 101, 110\}$$

Por otro lado, note que $d_H(000, 001) = d_H(000, 010) = d_H(000, 100) = 1$ y $d_H(111, 001) = d_H(111, 010) = d_H(111, 100) = 2$.

2.2. Redes dinámicas finitas

Con la primera sección de matemática discreta establecida, esto nos aportará con las expresiones básicas para definir qué es una red dinámica finita y el caso particular que abordaremos, características del digrafo que la define, el digrafo que genera y la terminología asociada en cada caso.

2.2.1. Conceptos básicos

Definición 2.16. *Una red dinámica finita (RDF) de $n \in \mathbb{N}$ elementos y $q \in \mathbb{N}$ estados, es definida como una función:*

$$f : \llbracket q \rrbracket^n \rightarrow \llbracket q \rrbracket^n$$

$$x = (x_1, x_2, \dots, x_n) \mapsto f(x) = (f_1(x), f_2(x), \dots, f_n(x))$$

Donde $\llbracket q \rrbracket := \{0, 1, 2, \dots, q - 1\}$ y las funciones $f_i : \llbracket q \rrbracket^n \rightarrow \llbracket q \rrbracket$ se denominarán *funciones de activación local*.

Como ya se mencionó previamente, estamos interesados en redes definidas a partir de funciones Booleanas, es por ello que en la presente tesis se trabajará con RDF dado $q = 2$ y que denominaremos **redes Booleanas**. Las redes Booleanas fueron inicialmente definidas por Kauffman para el modelamiento matemático de la dinámica de redes reguladoras de genes (Kauffman, S.A., 1969, 1993; Glass, L., Kauffman, S.A., 1973), modelando la red de interacciones entre ADN, ARN, proteínas y otras moléculas asociadas para la expresión e inhibición de estos a partir de los valores binarios que este define, teniendo 2^n estados posibles y siendo de gran interés el estudio de configuraciones atractoras que estabilicen o mantengan periódico el comportamiento biológico finito. Estas redes son parte de las herramientas utilizadas en el modelamiento de estos procesos (de Jong H., 2002) y como se menciona en capítulos introductorios a otros procesos de interés.

A continuación, definiremos el grafo asociado a la dinámica junto a sus configuraciones

particulares tales como atractores y el grafo de interacción asociados a una red Booleana f .

Definición 2.17. *Se define el grafo de iteración $G_I(f)$ de la red Booleana $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^n$ como el digrafo definido por:*

$$G_I(f) := (V = \{0, 1\}^n, A = \{(x, f(x)) : x \in V\})$$

Además, en adelante nos referiremos a $G_I(f)$ como la dinámica de la red Booleana f .

Definición 2.18. *Sea $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^n$ una red Booleana y $x \in \{0, 1\}^n$. Se define:*

- *La configuración x es un jardín del Edén si $f^{-1}(\{x\}) = \emptyset$.*
- *La configuración x es un punto fijo si $f(x) = x$.*
- *La configuración x es un punto periódico si $\exists k \in \mathbb{N} : f^k(x) = x$. En caso contrario, x es transiente.*
- *Un ciclo límite es un ciclo de $G_I(f)$ de largo al menos dos.*
- *El periodo de f y que denotaremos por $p(f)$ es el mínimo común múltiplo de todos los largos de sus ciclos límite.*
- *La altura de f y que denotaremos por $h(f)$ es el menor $k \in \mathbb{N}$ tal que $\forall x \in \{0, 1\}^n, f^k(x)$ es un punto periódico. De lo anterior, se desprende que $f^{h(f)+p(f)} = f^{h(f)}$.*

Ejemplo 2.5. *Sea $f : \{0, 1\}^3 \rightarrow \{0, 1\}^3$ la red Booleana descrita por las siguientes funciones de activación local:*

$$f_1(x_1, x_2, x_3) = (x_1 \vee x_3) \wedge (\bar{x}_1 \vee \bar{x}_2 \vee \bar{x}_3)$$

$$f_2(x_1, x_2, x_3) = (x_1 \wedge x_3) \vee (x_2 \wedge \bar{x}_1)$$

$$f_3(x_1, x_2, x_3) = (x_2 \wedge x_3) \vee (x_2 \wedge \bar{x}_1) \vee (x_3 \wedge \bar{x}_1)$$

En este caso, $V(G_I(f)) = \{0, 1\}^3$ y por consiguiente el conjunto de arcos viene de evaluar todo $x \in \{0, 1\}^3$ en $f = (f_1, f_2, f_3)$. Así, la dinámica de la red Booleana f

queda definida por la figura 2.4.

$G_I(f) :$

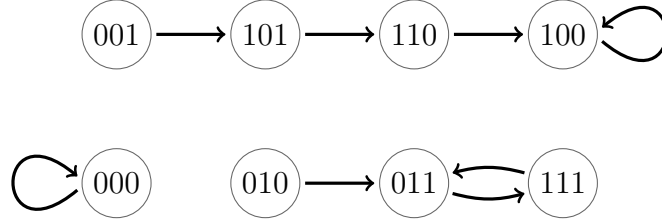


Figura 2.4: Grafo de iteración de f del ejemplo 2.5.

Del grafo podemos identificar que las configuraciones $\{001, 010\}$ son jardín del Edén, $\{100, 000\}$ son puntos fijos, $[011, 111]$ define un ciclo límite de largo dos, $\{100, 000, 011, 111\}$ son puntos periódicos y $\{001, 010, 101, 110\}$ son configuraciones transientes. Además, el periodo y altura de la red son $p(f) = 2$ y $h(f) = 3$, respectivamente.

Definición 2.19. Se denota la configuración unitaria $e_i = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0) \in \{0, 1\}^n$ con la i -ésima entrada no nula, $E_i = \vec{1} \oplus e_i \in \{0, 1\}^n$ y $\vec{0}, \vec{1} \in \{0, 1\}^n$ como las configuraciones con sólo entradas 0 y sólo entradas 1, respectivamente.

Definición 2.20. Se dirá que la función Booleana $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}$ depende de la variable x_i o de la entrada i si $\exists x \in \{0, 1\}^n$ tal que:

$$f(x_1, \dots, x_i = 0, \dots, x_n) \neq f(x_1, \dots, x_i = 1, \dots, x_n)$$

En otras palabras, $f(x) \neq f(x \oplus e_i)$.

La definición anterior es de gran importancia para establecer el grafo de interacción, especificando la dependencia de la función de activación local respecto al valor que tomen las variables.

Definición 2.21. Se define el grafo de interacción de una red Booleana f como el

digrafo $G(f)$ dado por:

$$V(G(f)) = \{1, \dots, n\}$$

$$A(G(f)) = \{(i, j) \in V(G(f)) \times V(G(f)) : f_j \text{ depende de la variable } x_i\}$$

Ejemplo 2.6. A partir del ejemplo 2.5 notemos que $\forall i = 1, 2, 3, \exists x \in \{0, 1\}^3$ tal que $f(x) \neq f(x \oplus e_i)$, así, el grafo de interacción de f es el digrafo completo que se presenta en la figura 2.5.

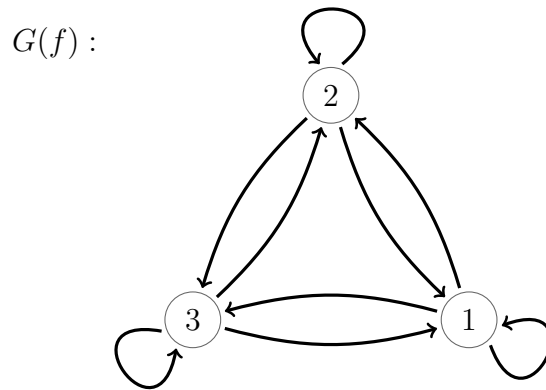


Figura 2.5: Grafo de interacción de f del ejemplo 2.5.

2.3. Familias de redes dinámicas finitas

Una pregunta natural es cuántas RDF distintas existen, la que tiene como respuesta q^{nq^n} (véase Anexo A1), lo cual, es dependiente de n para el caso de redes Booleanas, obteniendo una gran cantidad de RDF para valores de n relativamente pequeños. Es por ello que un primer paso es analizarlas en base a las familias que estos generen y obtener características en torno a éstas. En línea de lo anterior, procederemos a definir cuatro familias de importancia para este trabajo y su posterior análisis.

2.3.1. Redes conjuntivas y disyuntivas

Definición 2.22. Una red Booleana se dirá conjuntiva o red AND si cada una de sus funciones de activación local $f_i : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}$ es del tipo:

$$f_i(x) = AND(x_{j_1}, x_{j_2}, \dots, x_{j_k}) = x_{j_1} \wedge x_{j_2} \wedge \dots \wedge x_{j_k}$$

En cambio, una red Booleana se dirá disyuntiva o red OR si cada una de sus funciones de activación local $f_i : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}$ es del tipo:

$$f_i(x) = OR(x_{j_1}, x_{j_2}, \dots, x_{j_k}) = x_{j_1} \vee x_{j_2} \vee \dots \vee x_{j_k}$$

Actualmente existen múltiples documentos analizando esta familia, demostrando la existencia de puntos fijos, ciclos límites y su largo a partir del índice de ciclicidad y cotas para la altura de estas redes, todo esto mediante el análisis del grafo de interacción que genera la red. Para profundizar aquello se recomienda ver (Gadouleau, 2021) y sus referencias para mayor información de estas familias.

En este trabajo no nos detendremos en profundizar esta familia y estableceremos ciertos aportes que nos permitirán dar a entender por qué esta familia no nos es de utilidad en nuestros objetivos debido a que no logran modelar los comportamientos deseados, requiriendo de una familia más sofisticada y que generalice ciertos resultados. A continuación, presentaremos tales proposiciones conocidas que se analizarán en capítulos posteriores.

Teorema 2.2. Sea $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}$ una red conjuntiva (red disyuntiva) con $G(f)$ fuertemente conexo no trivial. Entonces $\vec{0}, \vec{1} \in \{0, 1\}^n$ son los únicos puntos fijos de f .

Teorema 2.3 (Salam Jarrah A., Laubenbacher R., Veliz-Cuba A. (2010)). Sea $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}$ una red conjuntiva (red disyuntiva) con $G(f)$ no trivial. Entonces $h(f) \leq 2n^2 - 3n + 2$.

2.3.2. Redes monótonas y regulatorias

Para establecer estas redes es necesario definir las funciones monótonas y unate junto al aporte en la dinámica que le dará propiedades importantes para nuestro análisis.

Definición 2.23. *Se dirá que $x \leq y$, $x, y \in \{0, 1\}^n$, si $\forall i = 1, \dots, n$ se cumple que $x_i \leq y_i$. Con lo anterior, una función Booleana $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}$ se dirá monótona si $\forall x, y \in \{0, 1\}^n, x \leq y, f(x) \leq f(y)$,*

Definición 2.24. *Una función Booleana $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}$ se dirá creciente en la entrada i si $\forall x \in \{0, 1\}^n$:*

$$f(x_1, \dots, x_i = 0, \dots, x_n) \leq f(x_1, \dots, x_i = 1, \dots, x_n)$$

De manera análoga, se dirá que f es decreciente en la entrada i si $\forall x \in \{0, 1\}^n$:

$$f(x_1, \dots, x_i = 0, \dots, x_n) \geq f(x_1, \dots, x_i = 1, \dots, x_n)$$

Así, si f es creciente o decreciente en cada una de sus entradas $i \in \{1, \dots, n\}$ diremos que f es unate.

Note que si f es unate implica que al modificar la componente i induce en el valor de la función sólo un comportamiento creciente o decreciente, según sea el caso, relacionándose con el comportamiento inhibitor o de activación de la variable en la función. En cambio, las funciones monótonas expresan comportamientos únicamente de activación o crecimiento, estableciendo propiedades en sus bases de atracción y delimita tales candidatos. A continuación, presentaremos aquellos resultados y una caracterización de gran utilidad debido a su simplicidad en la identificación de estas funciones y, del mismo modo que las redes conjuntivas y disyuntivas, propiedades que nos delimitarán el análisis al grupo más general, todos estos extraídos de (Anthony, 2001).

Teorema 2.4. *Una función Booleana $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}$ no constante es unate si y solo si puede ser escrita en una dnf-fórmula o cnf-fórmula sin la presencia de una variable negada y no negada simultáneamente. De manera particular, f es monótona si y solo si puede ser escrita en una dnf-fórmula o cnf-fórmula sin la presencia de*

variables negadas.

Definición 2.25. Una red Booleana $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^n$ es regulatoria (RBR) si todas sus funciones de activación local son unate. De manera análoga, f es una red monótona si todas sus funciones de activación local son monótonas.

Así, si la red f es regulatoria podemos asegurar que dada una función de actualización local, toda variable de ésta debe actuar de manera creciente o decreciente, identificándose con un arco y una etiqueta que defina su comportamiento en el grafo de interacción. Esto es de gran importancia puesto que induce un etiquetaje en los arcos del grafo de interacción $G(f)$ mediante la siguiente función signo.

Definición 2.26. Sea $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^n$ una RBR, su grafo de interacción $G(f)$ induce una función signo $\sigma_f : A(G(f)) \rightarrow \{+1, -1\}$ definida por:

$$\sigma_f(i, j) = \begin{cases} +1 & \text{si } f_j \text{ es creciente en la entrada } i \\ -1 & \text{en caso contrario} \end{cases}$$

Donde $(G(f), \sigma_f)$ lo llamaremos grafo de interacción con signos y lo denotaremos en el grafo por arcos de color verde si $\sigma_f(i, j) = +1$ y rojo si no. Además, podemos generalizar lo anterior para el caso en que la red no sea regulatoria a partir de $\sigma_f : A(G(f)) \rightarrow \{+1, -1, 0\}$ mediante la siguiente forma:

$$\sigma_f(i, j) = \begin{cases} +1 & \text{si } f_j \text{ es creciente en la entrada } i \\ -1 & \text{si } f_j \text{ es decreciente en la entrada } i \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

En donde el caso $\sigma_f(i, j) = 0$ lo denotaremos en el grafo por arcos de color café e indica un comportamiento creciente y decreciente respecto a distintos valores de $x \in \{0, 1\}^n$. Esta de más mencionar que manipularemos la segunda forma de definir la función signo debido a que nuestro análisis posee tanto un aspecto general de redes Booleanas como de familias de redes Booleanas signadas.

Ejemplo 2.7. Del ejemplo 2.4 sabemos que $h(x_1, x_2) = (x_1 \wedge x_2) \vee (\bar{x}_1 \wedge \bar{x}_2)$ establece un comportamiento creciente y decreciente en cada una de sus variables, en efecto,

$h(0,0) = 0 < h(0,1) = 1$ indica que h es creciente respecto a 2 y $h(1,0) = 1 > h(1,1) = 0$ indica que h es decreciente respecto a 2, lo cual es análogo para el vértice 1.

Por otro lado, del ejemplo 2.5 y dada la red que define se puede construir el grafo de interacción f junto a su función signo definida en la figura 2.6.

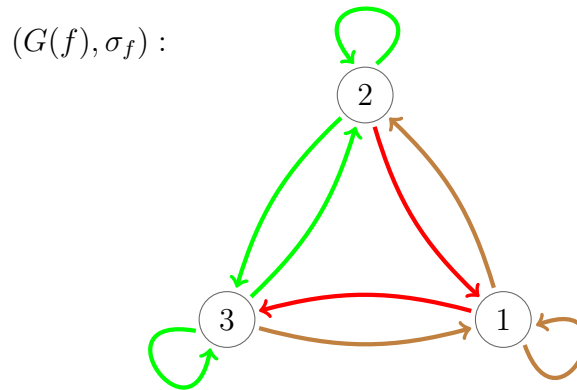


Figura 2.6: Grafo de interacción con signos de f del ejemplo 2.5.

Lo cual puede ser identificado mediante las funciones de activación local reducidas en su mínima expresión y escrita en su dnf-fórmula o cnf-fórmula a partir de la presencia de variables negadas y/o no negadas.

$$f_1(\vec{x}) = (x_1 \vee x_3) \wedge (\bar{x}_1 \vee \bar{x}_2 \vee \bar{x}_3)$$

$$f_2(\vec{x}) = (x_1 \wedge x_3) \vee (x_2 \wedge \bar{x}_1)$$

$$f_3(\vec{x}) = (x_2 \wedge x_3) \vee (x_2 \wedge \bar{x}_1) \vee (x_3 \wedge \bar{x}_1)$$

Notemos que f_1, f_2 no son unate y f_3 si es unate debido a que no posee variables negadas y no negadas simultáneamente.

De manera análoga a lo realizado en redes AND u OR, presentaremos los resultados conocidos más importantes para nuestro trabajo posterior con la finalidad de enmarcar el comportamiento logrado por las redes monótonas y discriminar con nuestras dinámicas particulares.

Teorema 2.5. *Toda red monótona $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^n$ posee al menos un punto fijo.*

Teorema 2.6. *Sea $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^n$ una red monótona tal que todas sus funciones de activación local son no constante. Entonces $\vec{0}, \vec{1} \in \{0, 1\}^n$ son puntos fijos de f .*

Para mayor información de estas familias o referente a los resultados presentados se recomienda el libro (Anthony, 2001) de donde fueron extraídos y se profundizan estos junto a otros temas.

Ejemplo 2.8. *Sea $f : \{0, 1\}^2 \rightarrow \{0, 1\}^2$ la red descrita por las funciones de activación local $f_1(x_1, x_2) = x_2$, $f_2(x_1, x_2) = x_1$ y, su grafo de interacción con signos e iteración presentados en la figura 2.7.*

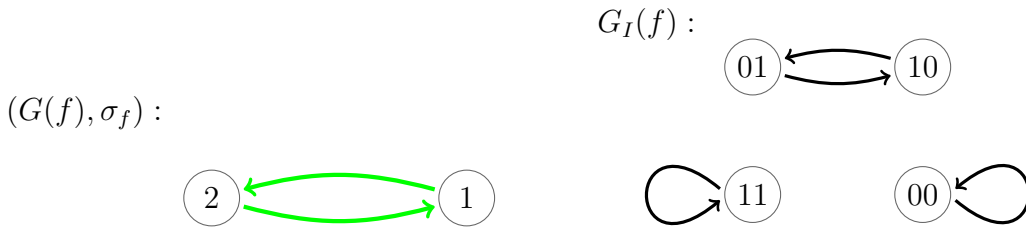


Figura 2.7: Grafo de interacción con signos de f junto a su dinámica del ejemplo 2.8.

Note que f_1, f_2 están escritos tanto como una *dnf*-fórmula como *cnf*-fórmula por ser una única variable y cada una de estas posee sólo variables no negadas. Así, ambas funciones de activación local son monótonas y, en el caso general, también es regulatoria.

Del teorema 2.5 sabemos que este posee al menos un punto fijo y al ser f_1, f_2 no constante, del teorema 2.6 sabemos además que $(0, 0), (1, 1) \in \{0, 1\}^2$ son puntos fijos de la red.

Capítulo 3

Dinámicas Hamiltonianas

Como se mencionó en los primeros apartados, gran parte del análisis realizado en el estado del arte apuntan a describir y predecir comportamientos a partir del grafo de interacción hacia el grafo de iteración respecto a puntos fijos, ciclos límite, alturas y comportamientos específicos del estudio. En nuestro caso, el objetivo es en base a una dinámica particular extraer información relevante asociada al grafo de interacción que la define y, por consiguiente, a las redes que describen estas dinámicas.

Así, el siguiente capítulo tiene como misión presentar y definir estas dinámicas particulares y establecer nociones iniciales de cómo estas son y que grafos de interacción generan en base a ejemplos aplicados. En primer lugar, definamos el comportamiento buscado en estas trayectorias y tema en común entre ellas.

Definición 3.1. *Sea $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^n$ una red Booleana, diremos que f posee una dinámica Hamiltoniana si posee una trayectoria (o camino) Hamiltoniano en su grafo de iteración $G_I(f)$. En otras palabras, existe una configuración $y \in \{0, 1\}^n$ que alcanza todas las configuraciones restantes. Es decir,*

$$\exists y \in \{0, 1\}^n, \forall x \in \{0, 1\}^n \setminus \{y\}, \exists k_x \in \mathbb{N} : f^{k_x}(y) = x$$

Destacar que este tipo de dinámicas comprenden un comportamiento extremo frente a la altura que estos pueden definir, el número de puntos periódicos y complejidad de

identificación mediante métodos exploratorios debido a que en el peor de los casos requerirá pasar por todas las configuraciones antes de encontrar su base de atracción.

3.1. Dinámica de máxima altura

El primer caso a tratar es el de máxima altura presentado en la figura 3.1. Note que en este caso existe un único punto periódico (punto fijo) y el resto corresponde a configuraciones transientes ordenadas de manera de maximizar la altura.

Definición 3.2. Sea $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^n$ una red Booleana, diremos que f describe una dinámica de máxima altura si esta posee una dinámica Hamiltoniana y posee un único punto fijo. De manera equivalente, $h(f) = 2^n - 1$.

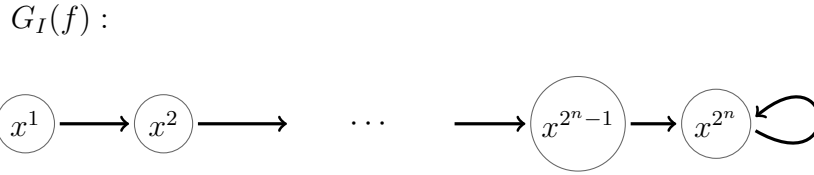


Figura 3.1: Esquema de una dinámica de máxima altura.

Ejemplo 3.1. Sea $f : \{0, 1\}^3 \rightarrow \{0, 1\}^3$ descrito por las funciones de activación local dadas a continuación.

$$f_1(x_1, x_2, x_3) = (x_1 \wedge x_2) \vee (x_1 \wedge x_3)$$

$$f_2(x_1, x_2, x_3) = (x_1 \wedge \bar{x}_3) \vee (x_2 \wedge \bar{x}_3)$$

$$f_3(x_1, x_2, x_3) = x_2$$

Note que de la figura 3.1 la red describe una dinámica de máxima altura y cada función de activación local no posee variables negadas y no negadas simultáneamente, por lo cual, f_1, f_2, f_3 son unate y por consiguiente f es regulatoria. De la figura 3.2 notamos que $G(f)$ es fuertemente conexo y $d^-(1) = d^-(2) = 3$ grado de entrada máximo.

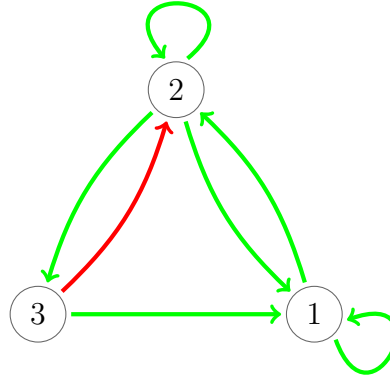
$(G(f), \sigma_f) :$ 

Figura 3.2: Grafo de interacción con signos de f con dinámica de máxima altura del ejemplo 3.1.

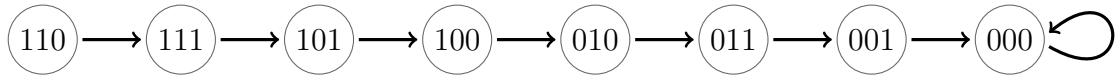
 $G_I(f) :$ 

Figura 3.3: Dinámica de máxima altura de f del ejemplo 3.1.

3.2. Dinámica ciclo Hamiltoniano

El segundo caso a tratar es el ciclo Hamiltoniano esquematizado en la figura 3.4, en donde todas las configuraciones son puntos periódicos y estas redes se caracterizan por ser biyectivas e implicando que todas sus funciones de activación local f_i son balanceadas, es decir, $|T(f_i)| = |F(f_i)|$ (véase Anexo A2).

Definición 3.3. Sea $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^n$ una red Booleana, diremos que f describe un ciclo Hamiltoniano si esta posee una dinámica Hamiltoniana y esta no posee jardín del Edén. De manera equivalente, $p(f) = 2^n$.

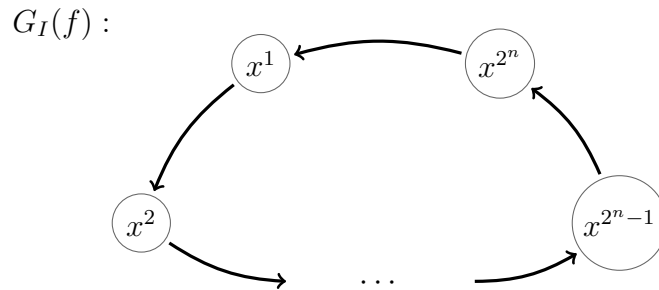


Figura 3.4: Esquema de un ciclo Hamiltoniano.

Ejemplo 3.2. Sea $f : \{0, 1\}^3 \rightarrow \{0, 1\}^3$ descrito por las funciones de activación local descritas a continuación.

$$f_1(x_1, x_2, x_3) = \bar{x}_1$$

$$f_2(x_1, x_2, x_3) = (x_1 \wedge x_2) \vee (\bar{x}_1 \wedge \bar{x}_2)$$

$$f_3(x_1, x_2, x_3) = (x_3 \wedge x_1) \vee (x_2 \wedge x_3) \vee (\bar{x}_1 \wedge \bar{x}_2 \wedge \bar{x}_3)$$

Note que f_1 es unate pero f_2, f_3 no lo son. De la figura 3.5 notamos que $G(f)$ no es fuertemente conexo debido a que no existen caminos de los vértices 2 y 3 al vértice 1, sin embargo, este si es conexo.

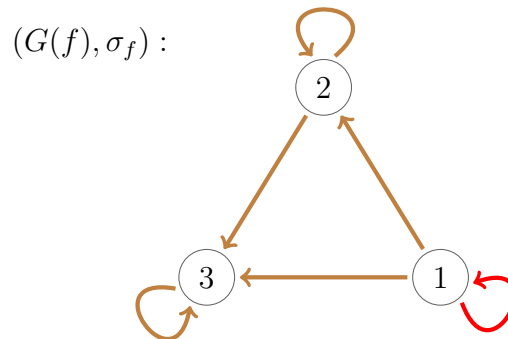


Figura 3.5: Grafo de interacción con signos de f dinámico ciclo Hamiltoniano del ejemplo 3.2.

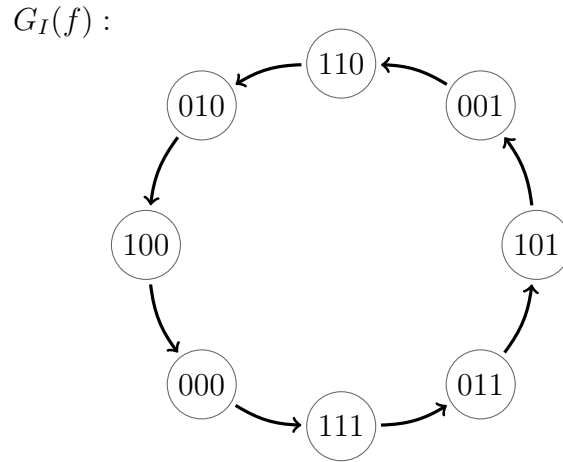


Figura 3.6: Dinámica ciclo Hamiltoniano de f del ejemplo 3.2.

3.3. Dinámica Hamiltoniana intermedia

Como tercer caso de interés se tienen las dinámicas Hamiltonianas intermedias esquematizado en la figura 3.7, las cuales poseen más de una configuración periódica y transiente. Además, en capítulos posteriores probaremos que las dinámicas de máxima altura y Hamiltoniana intermedia no son balanceadas, es decir, tienen al menos una función de activación local no balanceada, lo cual nos proporcionará ciertas propiedades.

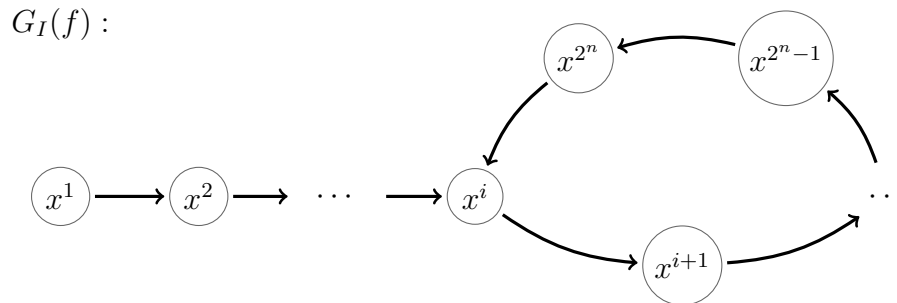


Figura 3.7: Esquema de una dinámica Hamiltoniana intermedia, $i \in \{2, \dots, 2^n - 1\}$.

Definición 3.4. Sea $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^n$ una red Booleana, diremos que f describe una dinámica Hamiltoniana intermedia si esta posee una trayectoria Hamiltoniana y su periodo $p(f) \in [2, 2^n)$.

Ejemplo 3.3. Sea $f : \{0, 1\}^3 \rightarrow \{0, 1\}^3$ la red de dinámica Hamiltoniana intermedia descrita por las funciones de activación local presentadas a continuación.

$$f_1(x_1, x_2, x_3) = \bar{x}_1$$

$$f_2(x_1, x_2, x_3) = (x_1 \wedge x_2) \vee (\bar{x}_1 \wedge \bar{x}_2)$$

$$f_3(x_1, x_2, x_3) = (x_1 \wedge x_3) \vee (x_2 \wedge x_3)$$

Note que f_1, f_3 son unate pero f_2 no lo es. De la figura 3.8 notamos que $G(f)$ tampoco es fuertemente conexo debido a que no existen caminos de los vértices 2 y 3 al vértice 1, sin embargo, este sí es conexo.

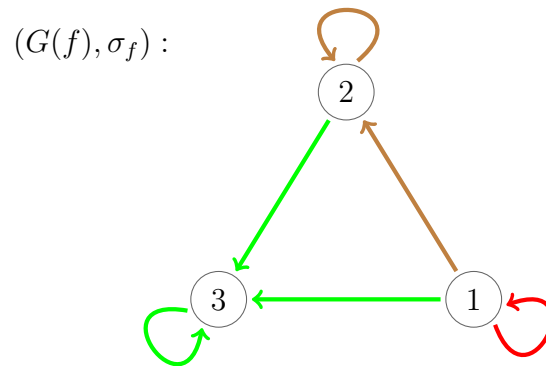


Figura 3.8: Grafo de interacción con signos de f del ejemplo 3.3.

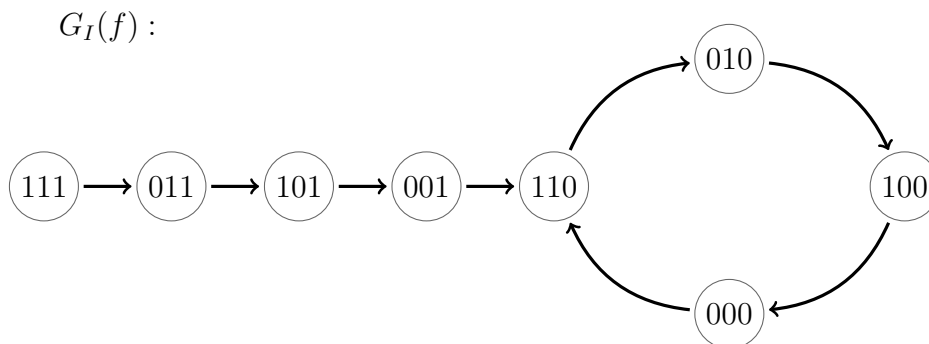


Figura 3.9: Dinámica Hamiltoniana intermedia de f del ejemplo 3.3.

Note que los grafos de interacción $G(f)$ propuestos en las figuras 3.5 y 3.8 difieren únicamente en su función signo y sus funciones de activación local f_1, f_2 están definidas de manera análoga, obteniendo trayectorias Hamiltonianas distintas pero que difieren en un único arco en su dinámica. Lo anterior nos motiva a construir estas dinámicas a partir de una ya conocida y pasar a otras dinámicas únicamente cambiando un arco particular y siendo esto explicado en la siguiente sección.

3.4. Intercambio entre dinámicas

Suponga que conoce una red que describe una dinámica de máxima altura descrita en la figura 3.1, note que la bucle es el único arco que determina el tipo de trayectoria Hamiltoniana que se observa, ya que, de poder cambiar la bucle por el arco (x^{2^n}, x^1) este definiría una dinámica ciclo Hamiltoniano y, de cambiarla por el arco (x^{2^n}, x^i) , $i = 2, \dots, 2^n - 1$, este definiría una dinámica Hamiltoniana intermedia.

Lo anterior puede ser realizado a partir de la red conocida y editando las funciones de activación local que difieran en su valor cambiado componente a componente. A continuación, presentaremos una definición previa para el teorema que asegura que tal cambio es posible.

Definición 3.5. Sea $u \in \{0, 1\}^n$, se define $c_u, d_u : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}$ como las cláusulas conjuntiva y disyuntiva, respectivamente, inducidas por u y dadas por:

$$c_u(x) := \bigwedge_{i:u_i=1} x_i \wedge \bigwedge_{i:u_i=0} \bar{x}_i \quad d_u(x) := \bigvee_{i:u_i=0} x_i \vee \bigvee_{i:u_i=1} \bar{x}_i$$

Note que la cláusula conjuntiva c_u definida toma el valor uno si y solo si $x = u$ y, para la cláusula disyuntiva d_u esta toma el valor cero si y solo si $x = u$.

Teorema 3.1. Sea $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^n$ una red Booleana con $n \geq 2$. Además, sea $u, v, w \in \{0, 1\}^n$ tal que $w \neq v$ y $(u, v) \in A(G_I(f))$, entonces $\exists \tilde{f} : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^n$ red Booleana construida a partir de f tal que su dinámica $G_I(\tilde{f})$ viene de cambiar el arco (u, v) por el arco (u, w) en $G_I(f)$.

Demostración. Definamos $\tilde{f} = (\tilde{f}_i)_{i \in V(G(f))}$ red Booleana por:

$$\tilde{f}_i(x) = \begin{cases} f_i(x) \oplus c_u(x) & i \in \Delta(v, w) \\ f_i(x) & i \notin \Delta(v, w) \end{cases}$$

Notemos que si $x \neq u$ este caso se reduce a $\tilde{f}_i(x) = f_i(x)$ para todo $i \in V(G(f))$, en cambio, si $x = u$ e $i \notin \Delta(v, w)$ se obtiene que $\tilde{f}_i(u) = f_i(u) = v_i = w_i$ y si $i \in \Delta(v, w)$ notamos que $\tilde{f}_i(u) = f_i(u) + 1 = \bar{v}_i = w_i$, lo cual prueba que $\tilde{f}(u) = w$ y por lo tanto \tilde{f} describe la dinámica deseada. ■

Ejemplo 3.4. Sea f la red que describe la dinámica Hamiltoniana intermedia de la figura 3.9 y calculemos la red que describe la dinámica ciclo Hamiltoniano de la figura 3.6. Luego, deseamos cambiar el arco $(000, 110)$ por el arco $(000, 111)$ y la red que describe un ciclo Hamiltoniano buscado $\tilde{f} = (\tilde{f}_i)_{i \in V(G(f))}$ está definido por:

$$\tilde{f}_i = \begin{cases} f_i \oplus c_u & i \in \Delta(110, 111) \\ f_i & i \notin \Delta(110, 111) \end{cases}$$

Donde $\Delta(110, 111) = \{3\}$ y $u = (0, 0, 0)$. Así, $\tilde{f}_1 = f_1$, $\tilde{f}_2 = f_2$ y $\tilde{f}_3 = f_3 \oplus c_{(0,0,0)} = f_3 \vee c_{(0,0,0)}$, lo cual es cierto debido a que f_3 es cero al evaluarlo en el único valor positivo de $c_{(0,0,0)}$ en la suma módulo dos. Por lo tanto, este coincide con la red definida en el ejemplo 3.2 y que define la dinámica deseada.

Ejemplo 3.5. Sea f la misma red que describe la dinámica Hamiltoniana intermedia de la figura 3.9 y calculemos la red que describe la dinámica de máxima altura de la figura 3.10. Para ello, debemos cambiar el arco $(000, 110)$ por la bucle $(000, 000)$, así, la red de máxima altura $\tilde{f} = (\tilde{f}_i)_{i \in V(G(f))}$ definida por:

$$\tilde{f}_i = \begin{cases} f_i \oplus c_u & i \in \Delta(000, 110) \\ f_i & i \notin \Delta(000, 110) \end{cases}$$

Donde $\Delta(000, 110) = \{1, 2\}$ y $u = (0, 0, 0)$. Luego, $\tilde{f}_3 = f_3$, $\tilde{f}_1 = f_1 \oplus c_{(0,0,0)} = f_1 \wedge d_{(0,0,0)}$ y $\tilde{f}_2 = f_2 \oplus c_{(0,0,0)} = f_2 \wedge d_{(0,0,0)}$, lo cual es cierto debido a que f_1, f_2 es

uno al evaluarlo en el único valor positivo de $c_{(0,0,0)}$ en la suma módulo dos, debiendo retornar un valor cero y que se obtiene al agregar la cláusula disyuntiva que retorna tal valor en la configuración $(0,0,0)$. Por lo tanto, la red que define la dinámica deseada retorna el grafo de interacción con signos presentado en la figura 3.11.

$G_I(\tilde{f}) :$

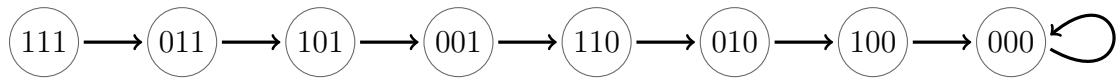


Figura 3.10: Dinámica de máxima altura a construir en el ejemplo 3.5.

$(G(\tilde{f}), \sigma_{\tilde{f}}) :$

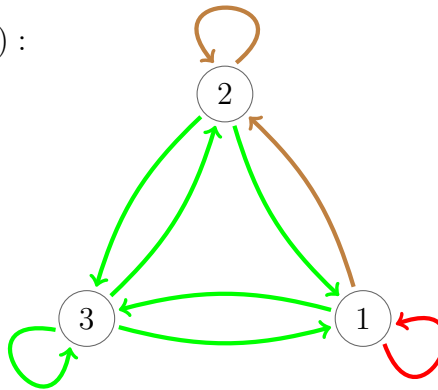


Figura 3.11: Grafo de interacción con signos de \tilde{f} dinámica de máxima altura presentada en la figura 3.10.

Note que, al igual que en el ejemplo 3.1, el grafo de interacción resultante de una red de máxima altura es fuertemente conexo y posee vértices con el grado de entrada máximo, lo cual, veremos en capítulos posteriores que siempre se cumple.

Capítulo 4

Análisis del grado de entrada en vértices de $G(f)$

Con los capítulos anteriores ya definidos, podemos comenzar con nuestro estudio referente a la dinámica y resultados que implica tal comportamiento en la red. Así, como primera pregunta, es de gran interés establecer si los vértices del grafo de interacción pueden tener grado de entrada acotado y modelar tal comportamiento. Esto es importante para el entendimiento de la dinámica y la dependencia o no del valor de una variable en función del sistema completo.

Para ello, procederemos a establecer un resultado general en dinámicas Booleanas establecido como el lema de cardinalidad impar, el cual, es de carácter suficiente para la prueba de un vértice de grado de entrada máximo, siendo este resultado de gran importancia debido a que dinámicas Hamiltonianas no balanceadas permite su uso, prueba e identificación de tal vértice.

4.1. Lema de cardinalidad impar

En el estudio de condiciones para la existencia de redes regulatorias con dinámicas Hamiltonianas, se obtuvo un resultado ajeno a tal necesidad y de gran importancia debido a su generalidad en aplicaciones a cualquier dinámica Booleana. Este resultado establece que funciones de activación local dependientes de una cantidad $k < n$ de

variables no permite obtener una cantidad impar de configuraciones positivas $T(f_i)$ o negativas $F(f_i)$. Este resultado es de gran importancia para la resolución de nuestra pregunta inicial del capítulo, que denominaremos **Lema de cardinalidad impar** y se presenta a continuación.

Lema 4.1. *Sea $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^n$ una red Booleana con $n \geq 2$ y sea $i \in V(G(f))$ tal que $|T(f_i)|$ es impar, entonces $d^-(i) = n$.*

Demostración. Sea $i \in V(G(f))$ tal que $|T(f_i)|$ es una cantidad impar y, por el absurdo, supongamos que $d^-(i) = k < n$. Sin pérdida de generalidad, podemos suponer que f_i depende de las k primeras variables x_i , $i \in S = \{1, 2, \dots, k\}$. Luego, como f_i no depende de las últimas $n - k$ variables, podemos fijarlas al valor cero y definir la función $f_i|_S(x) = f_i(x, 0, \dots, 0)$, $\forall x \in \{0, 1\}^k$, el cual, tendrá como conjunto de configuraciones positivas $T(f_i|_S) = \{x^1, x^2, \dots, x^d\} \subseteq \{0, 1\}^k$, $d \in \mathbb{N}$, no vacío por ser $|T(f_i)| \neq 0$.

Por lo tanto, como $\forall x \in T(f_i|_S)$, $\forall y \in \{0, 1\}^{n-k}$, $f_i(x, y) = f_i|_S(x) = 1$ y f_i depende de las primeras k variables, la cardinalidad del conjunto de configuraciones positivas está dado por $|T(f_i)| = |T(f_i|_S)| |\{0, 1\}^{n-k}| = d \cdot 2^{n-k}$ cantidad par, contradiciendo nuestro supuesto y probando que $d^-(i) = n$.

■

Note que la condición del lema anterior es suficiente pero no necesaria para que el grado de entrada de un vértice sea no acotado, sin embargo, la presencia de al menos uno de estos vértices nos asegura la conexidad del grafo $G(f)$ e implica la existencia de una función de activación local dependiente de todas las variables. Además, note que $|T(f_i)| + |F(f_i)| = 2^n$, por lo cual, este resultado y los posteriores pueden ser vistos identificando $|T(f_i)|$ o $|F(f_i)|$ impar.

Por otro lado, note que este resultado no puede ser aplicado a trayectorias ciclo Hamiltoniano debido a que estas son balanceadas, implicando que $\forall i \in V(G(f))$, $|T(f_i)| = |F(f_i)| = 2^{n-1}$ cantidad par. Sin embargo, para aquellas dinámicas no balanceadas que posean al menos un vértice que cumpla la hipótesis se tendrá el siguiente corolario.

Corolario 4.1.1. *Sea $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^n$ una red Booleana con $n \geq 2$ y sea $i \in V(G(f))$ tal que $|T(f_i)|$ es impar, entonces $G(f)$ es conexo. Además, si $\forall i \in V(G(f))$ se tiene que $|T(f_i)|$ es impar, entonces $G(f)$ es el grafo completo.*

Ejemplo 4.1. *De la dinámica definida por la figura 2.5 del ejemplo 2.4, podemos identificar que $T(f_1) = \{001, 101, 110, 100, 011\}$, $T(f_2) = \{101, 010, 011, 111\}$ y $T(f_3) = \{001, 010, 011, 111\}$, lo cual, mediante el lema 4.1 nos indica que el vértice 1 de $G(f)$ posee grado de entrada máximo y este digrafo es conexo, todo esto sin conocer la red que la define.*

Ahora, de la figura 2.5 sabemos que la dinámica es definida a partir de $G(f)$ digrafo completo, lo cual, verifica que el lema 4.1 es sólo una condición suficiente para la existencia de este vértice debido a que en este ejemplo los vértices 2 y 3 son de grado de entrada máximo pero $T(f_2)$ y $T(f_3)$ son de cardinalidad par, permitiendo existir otros vértices de máximo grado de entrada que no cumplen necesariamente la hipótesis del lema 4.1.

4.2. Resultados obtenidos al caso de estudio

Para aplicar el lema 4.1 a nuestro caso de estudio, es necesario probar que existe al menos un vértice i en $G(f)$ que satisface que $|T(f_i)|$ es impar. Ahora, sabemos que la dinámica ciclo Hamiltoniano es balanceada y por consiguiente $\forall i \in V(G(f))$, $|T(f_i)| = |F(f_i)| = 2^{n-1}$ cantidad par, lo cual, no permite aplicar el lema. Sin embargo, la dinámica Hamiltoniana intermedia y máxima altura no son balanceadas y puede existir un i en $G(f)$ que satisfaga la hipótesis del lema 4.1, es por ello que nos centraremos en analizar la existencia de tales vértices en las dinámicas Hamiltonianas no balanceadas en estudio.

4.2.1. Caso máxima altura

El siguiente resultado prueba la existencia de tal vértice en la dinámica de máxima altura y la relación que tiene la presencia de un punto fijo y un jardín del Edén en la presencia de tal vértice, pudiendo identificarlo en aquellas componentes en que difieren estas configuraciones.

Lema 4.2. *Sea $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^n$ una red Booleana con $n \geq 2$ y tal que $G_I(f)$ es de máxima altura. Entonces, se tiene que existe al menos un $i \in V(G(f))$ tal que $d^-(i) = n$.*

Demostración. Sea f como se describe en el enunciado y, por el absurdo, supongamos que para todo $i \in V(G(f))$ se tiene que $|T(f_i)|$ es par. Notemos que existen 2^{n-1} configuraciones con valor uno en su componente i y denotando las configuraciones x^e, \hat{x} como el jardín del Edén y punto fijo, respectivamente.

Sea $i \in \Delta(x^e, \hat{x})$ y supongamos que $x_i^e = 1$, esto implica que existen $2^{n-1} - 1$ configuraciones transientes $y^j \in \{0, 1\}^n : f_i(y^j) = 1, j = 1, \dots, 2^{n-1} - 1$, implicando que $|T(f_i)| = 2^{n-1} - 1$ cantidad impar. Análogamente, si $x_i^e = 0$ existen $2^{n-1} + 1$ configuraciones $y^j \in \{0, 1\}^n : f_i(y^j) = 1, j = 1, \dots, 2^{n-1} + 1$, esto debido a que existen 2^{n-1} configuraciones transientes positivas y se le añade el punto fijo puesto que $\hat{x}_i = 1$, implicando que $|T(f_i)| = 2^{n-1} + 1$ cantidad impar.

Lo anterior, desprende que si $|T(f_i)|$ es par se debe tener que $x_i^e = \hat{x}_i$, lo cual, es contradictorio debido a que esto se debe cumplir para todo $i \in V(G(f))$, contradiciendo que $G_I(f)$ es de máxima altura y probando que existe al menos un $i \in V(G(f))$ tal que $|T(f_i)|$ es impar y, del lema 4,1 se prueba lo deseado. ■

De la demostración de este lema se desprende el siguiente resultado.

Corolario 4.2.1. *Sea $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^n$ una red Booleana con $n \geq 2$ tal que $G_I(f)$ es de máxima altura y \hat{x}, x^e corresponden al punto fijo y jardín del Edén respectivamente. Entonces, si $x_i^e \neq \hat{x}_i$ se tiene que $d^-(i) = n$. Además, si $d_H(x^e, \hat{x}) = n$ entonces $G(f)$ es el grafo completo.*

Ejemplo 4.2. *De la dinámica de máxima altura de la figura 3.3 del ejemplo 3.1 se desprende que $|T(f_1)| = |T(f_2)| = 3$ y $|T(f_3)| = 4$, lo cual coincide con las componentes $i \in \Delta(110, 000)$ con grado máximo de entrada. De manera análoga pero a la dinámica presentada en la figura 3.10 del ejemplo 3.5, tenemos que $d_H(111, 000) = n$ y probando que $G(f)$ es el grafo completo sin conocer referente a la red que define la dinámica.*

4.2.2. Caso Hamiltoniana intermedia

De manera análoga al de máxima altura, en el caso Hamiltoniano intermedio también se puede probar la existencia de un vértice que satisface la hipótesis del lema 4.1 y en particular se ve afectada su presencia a partir de la diferencia entre la configuración jardín del Edén y la primera configuración periódica alcanzada por los transientes.

Lema 4.3. *Sea $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^n$ una red Booleana con $n \geq 2$ y tal que $G_I(f)$ es una dinámica Hamiltoniana intermedia. Entonces, existe al menos un $i \in V(G(f))$ tal que $d^-(i) = n$.*

Demostración. Sea f descrito del enunciado y, por el absurdo, supongamos que para todo $i \in V(G(f))$ se tiene que $|T(f_i)|$ es par. Denotando x^e como el jardín del Edén y $x^{int} := f^{h(f)}(x^e)$, sea $i \in \Delta(x^e, x^{int})$. De manera análoga a la demostración del lema 4.2 se verifica que si $x_i^e = 1$ se tiene que $|T(f_i)| = 2^{n-1} - 1$ y, si $x_i^e = 0$ se tiene que $|T(f_i)| = 2^{n-1} + 1$.

Lo anterior implica que $\hat{x} = x^{int}$, contradiciendo nuestro supuesto y probando que existe al menos un $i \in V(G(f))$ tal que $d^-(i) = n$ a partir del del lema 4,1.

■

Corolario 4.3.1. *Sea $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^n$ una red Booleana con $n \geq 2$ tal que $G_I(f)$ es una dinámica Hamiltoniana intermedia, si x^e es el jardín del Edén y x^{int} es la única configuración en $G_I(f)$ de grado de entrada dos o, de manera equivalente, $x^{int} := f^{h(f)}(x^e)$, entonces, si $x_i^e \neq x_i^{int}$ se tiene que $d^-(i) = n$. Además, si $d_H(x^e, x^{int}) = n$ entonces $G(f)$ es el digrafo completo.*

Ejemplo 4.3. *De la dinámica Hamiltoniana intermedia de la figura 3.9 del ejemplo 3.3 se tiene que $|T(f_1)| = |T(f_2)| = 4$ y $|T(f_3)| = 3$, lo cual coincide con el único vértice con grado máximo de entrada, coincide con la componente en que difiere el jardín del Edén con la primera configuración alcanzada por los transientes y corroborando que $G(f)$ es conexo.*

Capítulo 5

Análisis de conexidad en $G(f)$

A partir del capítulo anterior, establecimos condiciones suficientes para asegurar que las dinámicas de máxima altura y Hamiltoniana intermedia definen al digrafo $G(f)$ como conexo debido a la existencia de un vértice de grado de entrada máximo y, en casos particulares, este es el grafo completo. Sin embargo, esto puede ser profundizado mediante un análisis directo en su conexidad a partir de las restricciones que induce la dinámica.

Así, el presente capítulo busca condensar los resultados obtenidos en el grafo de interacción asumiendo una dinámica Hamiltoniana particular.

5.1. Caso Hamiltoniana intermedia

Como primer resultado extraído del capítulo anterior y que en el caso general se alcanza, es el hecho que $G(f)$ es conexo para redes Hamiltonianas intermedias y, del ejemplo 3.3 sabemos que esto es alcanzado en redes Booleanas. Luego, el siguiente resultado no debe ser extraño debido al análisis previo.

Teorema 5.1. *Sea $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^n$ una red Booleana que describe una dinámica Hamiltoniana intermedia, entonces $G(f)$ es conexo.*

5.2. Caso máxima altura

Por otro lado, todos los ejemplos presentados de dinámicas de máxima altura son fuertemente conexos, lo cual, no es coincidencia. Para probar que $G(f)$ es fuertemente conexo en esta dinámica debemos definir lo que es una red inducida, esto para el análisis de componentes fuertemente conexas de $G(f)$ y la contradicción de existir estas componentes.

Definición 5.1. Sea $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^n$, $n \geq 2$, red Booleana tal que G^1 es una componente fuente de G . Se define la red Booleana inducida por los vértices $S := V(G^1)$ como $f|_S = (\tilde{f}_i)_{i \in S}$, donde $\forall i \in S$, $\forall x \in \{0, 1\}^{|S|}$, $\tilde{f}_i(x) = f_i(\tilde{x})$, donde $\tilde{x} \in \{0, 1\}^n$ está definido por:

$$\tilde{x} = \begin{cases} x_i & i \in S \\ 0 & \text{en caso contrario.} \end{cases}$$

A continuación, se presenta uno de los resultados que describe la complejidad en la red para describir una dinámica de máxima altura, requiriendo que todas las variables estén interconectadas para la presencia de tal dinámica. La demostración, a modo general, establece una contradicción de la existencia de componentes conexas en $G(f)$ debido a que estas definen por sí solas una altura máxima de 2^k , donde $k < n$ corresponde al número de vértices de la componente.

Teorema 5.2. Sea $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^n$ una red Booleana con $n \geq 2$ y tal que esta describe una dinámica de máxima altura. Entonces $G(f)$ es fuertemente conexo.

Demostración. Por el absurdo, supongamos que el grafo $G(f)$ no es fuertemente conexo y por consiguiente existe al menos una componente fuente. Sea G^1 una componente fuertemente conexa fuente de G , donde $S := V(G^1)$ es un subconjunto propio de V y sin pérdida de generalidad supondremos que $S = \{1, 2, \dots, k\}$.

Notemos que G^1 no posee arcos de entrada de vértices de $V \setminus S$ y por lo tanto sus funciones de actualización local $(f_s)_{s \in S}$ dependen únicamente de variables en S . Sea $f|_S : \{0, 1\}^k \rightarrow \{0, 1\}^k$ la red Booleana inducida por los vértices S , como la altura máxima de $f|_S$ está acotada por la altura máxima alcanzable por los vértices S ,

$h(f|_S) \leq 2^k - 1$ y por lo tanto existe una configuración $x = x|_S, x|_{V \setminus S} \in \{0, 1\}^n$ e índices $i, j \in \{0, 1, \dots, 2^k\}, i < j$, tales que $f|_S^i(x) = f|_S^j(x)$ y se tiene que $f|_S$ es $j - i$ periódica.

Por otro lado, sea $x^e \in \{0, 1\}^n$ jardín del Edén de $G_I(f)$, como $Im(f|_S) = \{0, 1\}^k$ debe existir un $j \in \{1, \dots, 2^n - 1\}$ tal que $f^j(x^e) = x^e|_S, \overline{x^e}|_{V \setminus S}$, así, $i = 0$ y $j - i > 1$ implica que $f|_S$ posee un ciclo límite y por consiguiente este no se estabiliza, lo cual desprende que $j - i = 1$ y obteniendo que $f|_S$ es una función constante, contradiciendo que $G_I(f)$ es de máxima altura. ■

A partir de este resultado podemos asegurar que f red de máxima altura no puede ser una red AND u OR debido a que del teorema 2.2 implicaría la existencia de dos puntos fijos, lo cual, contradice la dinámica deseada. Además, para $n \geq 6$ se tiene que $2n^2 - 3n + 2 < h(f) = 2^n - 1$, lo cual también contradice la altura máxima definida por redes AND u OR dada por la cota del teorema 2.3.

De manera similar, esta dinámica no puede ser descrita por redes monótonas puesto que si $G(f)$ es fuertemente conexo, cada función de activación local es no constante e implica que posee al menos dos puntos fijos, implicando que estas redes no pueden describir dinámicas de máxima altura por el teorema 2.6 ni de ciclo Hamiltoniano e intermedia por el teorema 2.5.

5.3. Caso ciclo Hamiltoniano

Si bien el lema 4.1 no nos aporta información referente a la dinámica ciclo Hamiltoniano, podemos probar que para el caso general es necesario que el grafo de interacción sea al menos conexo, coincidiendo con el ejemplo 3.2 que presenta $G(f)$ conexo. Además, en el siguiente capítulo profundizaremos en esta dinámica probando la existencia en una familia particular y propiedades de interés.

Teorema 5.3. *Sea $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^n$ una red Booleana, $n \geq 2$ y tal que $G_I(f)$ describe un ciclo Hamiltoniano. Entonces $G(f)$ es conexo.*

Demostración. Por el absurdo, supongamos que $G(f)$ posee $k \geq 2$ componentes conexas, así, existe $S_j \subset V(G(f))$ tal que $G^j := G[S_j]$ es una componente conexa de $G(f)$, $j = 1, 2, \dots, k$. Luego, como $G_I(f)$ es un ciclo de largo 2^n se tiene que no existe configuración $x \in \{0, 1\}^n : f|_{S_j}(x) = x|_{S_j}$ o contradeciría que f es 2^n periódico debido a que se estabiliza, así, como $Im(f|_{S_j}) = \{0, 1\}^{|S_j|}$ y $f|_{S_j}$ no depende de variables S_i , $i \neq j$, se desprende que $f|_{S_j}$ es $2^{|S_j|}$ periódico. Definamos $d \in \mathbb{N}$ como:

$$d = mcm\{2^{|S_i|} : i = 1, 2, \dots, k\} = \max_{i=1,2,\dots,k} 2^{|S_i|}$$

Luego, como d es una potencia de dos existen constantes de la forma $2^{a_j} \in \mathbb{N}$ tales que $2^{a_j} \cdot 2^{|S_j|} = d$ y, debido a que $f|_{S_j}$ es $2^{|S_j|}$ periódico se desprende:

$$f^d(x) = ((f|_{S_j})^d(x))_{j=1}^k = ((f|_{S_j})^{2^{a_j} \cdot 2^{|S_j|}}(x))_{j=1}^k = ((f|_{S_j})^{2^{|S_j|}}(x))_{j=1}^k = x$$

Lo cual implica que f es $d < 2^n$ periódico y contradiciendo que $G_I(f)$ sea un ciclo de largo 2^n . ■

Corolario 5.3.1. *Dadas las hipótesis del teorema anterior y $S \subseteq V(G(f))$ tal que $G[S]$ es una componente fuente de $G(f)$, entonces $f|_S$ es $2^{|S|}$ periódica.*

Demostración. Se desprende de la demostración del teorema 5,3. ■

Capítulo 6

Familia regulatoria de dinámica ciclo Hamiltoniano

Con el objetivo de probar la existencia de dinámicas ciclo Hamiltoniano descrita por redes regulatorias, el presente capítulo tiene por objetivo presentar indicios en la caracterización de estas redes, su existencia a partir de una familia de redes regulatorias con esta dinámica y resultados importantes para trabajos posteriores.

6.1. Motivación

Como se mencionó para la dinámica de máxima altura y ciclo Hamiltoniano, las redes AND u OR no son suficientes por si sola para definir estas dinámicas Hamiltonianas. Como caso base para la construcción de una familia ciclo Hamiltoniana, veremos que si $n = 2$ esta puede definirse de manera única en el grafo de interacción a partir de las redes AND-NOT u OR-NOT, la cual, generaliza las redes AND u OR mediante la presencia de variables negadas en la red.

En primer lugar, note que las funciones de activación local constante no permiten construir dinámicas Hamiltonianas por lo que nos limitaremos a funciones no constantes. Además, podemos inferir que toda dinámica ciclo Hamiltoniano con $n = 2$ y descrita por una red regulatoria debe poseer sus funciones de activación local con exactamente una variable, esto debido a que la dinámica ciclo Hamiltoniano es

balanceada y las redes *AND* u *OR* no lo son. Así, del teorema 5.3 que establece a $G(f)$ como conexo, se prueba en la siguiente proposición que el grafo de interacción con signos que describe un ciclo Hamiltoniano, dado el caso particular $n = 2$, es único. Para ello, procederemos a definir el signo de un ciclo en el grafo de interacción con signos.

Definición 6.1. *Sea $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^n$ una red Booleana regulatoria y $(G(f), \sigma_f)$ su grafo de interacción con signos.*

- *El signo de un ciclo C de $(G(f), \sigma_f)$ y que denotaremos por $\sigma_f(C)$, es igual al producto de los signos de los arcos de C .*
- *Un ciclo C de $G(f)$ se dirá positivo si $\sigma_f(C) = +1$ y negativo si $\sigma_f(C) = -1$.*

Proposición 6.1. *Dado $f : \{0, 1\}^2 \rightarrow \{0, 1\}^2$ una red Booleana regulatoria tal que $G_I(f)$ es una dinámica ciclo Hamiltoniano, entonces $(G(f), \sigma_f)$ es un ciclo negativo sin bucles.*

Demostración. Debido a que $Im(f) = \{0, 1\}^2$, para cada f_i deben existir dos configuraciones $y^{1,i}, y^{2,i} \in \{0, 1\}^2$ tales que $f_i(y^{1,i}) = f_i(y^{2,i}) = 1$ e implicando que cada f_i debe depender de sólo una variable. Además, notemos que puede haber a lo más una bucle o $G(f)$ no sería conexo.

Supongamos que existe una bucle, es decir, $f_1(x) = f_1(x_1)$ y $f_2(x) = f_2(x_1)$. De la dinámica de f sabemos que $f_1(x) = \bar{x}_1$ o existiría un punto fijo, ya que, el vértice 1 define una componente fuente que se estabiliza en la primera iteración. Notemos que si $f_2(x) = x_1$ se tiene que $C : [01, 10]$ es un ciclo límite de f y $C : [01, 10]$ es un ciclo límite para el caso $f_2(x) = \bar{x}_1$, lo cual, es contradictorio con nuestra dinámica. Por lo tanto, $G(f)$ no posee bucles ni tampoco un ciclo positivo en $(G(f), \sigma_f)$ puesto que del teorema 2.2 tendría dos puntos fijos, probándose que el grafo de interacción con signos $(G(f), \sigma_f)$ con dinámica ciclo Hamiltoniano con $n = 2$ es un ciclo negativo.

■

Una característica interesante vista en etapas experimentales en redes regulatorias con tal dinámica es la distancia entre configuraciones y su negada, que es igual a 2^{n-1} y que invita a futuros trabajos probar tal propiedad. En este trabajo se probó tal

característica para $n \leq 3$ y se utilizó como primer indicio para la construcción de la familia a definir.

Proposición 6.2. *Sea $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^n$ una red Booleana regulatoria con $n \leq 3$ y tal que $G_I(f)$ es un ciclo de largo 2^n . Entonces $x \in T(f_i) \Leftrightarrow \bar{x} \in F(f_i)$, $\forall x \in \{0, 1\}^n$, $\forall i \in V(G(f))$, es decir, $f(x) = \overline{f(\bar{x})}$.*

Demostración. Dado que el caso $n = 2$ es abordado por la proposición 6.1, analicemos el caso $n = 3$. Por el absurdo, supongamos que $f_i(y) = f_i(\bar{y})$ y procedamos a realizar un análisis por casos. Si $f_i(y) = f_i(\bar{y}) = 1$, la función de activación local f_i puede ser escrita a partir de sus configuraciones positivas de la siguiente manera.

$$\forall x \in \{0, 1\}^3, f_i(x) = \bigvee_{z \in T(f_i)} c_z(x)$$

Pero, $y, \bar{y} \in T(f_i)$ y al ser f regulatoria se debe tener que las cláusulas $c_y, c_{\bar{y}}$ no comparten variables. Pero, si suponemos lo anterior y la red posee sólo 3 variables, una de las cláusulas debe depender de una única variable para que la otra dependa de las variables restantes. Supongamos que c_y depende de una variable, esto es contradictorio ya que esta aporta $2^{n-1} = 4$ configuraciones positivas y tal que $c_y(\bar{y}) = 0$, implicando que $|T(f_i)| > 2^{n-1}$ e implicando que f_i no es balanceada. Lo anterior contradice nuestra dinámica y se prueba lo deseado.

De manera análoga, si $f_i(y) = f_i(\bar{y}) = 0$ se analizan las configuraciones negativas de f_i y se llega a la contradicción que esta no es balanceada.

■

Luego, con la finalidad de entender por qué esta propiedad es importante para que f sea regulatoria se procedió a indagar para $n \geq 2$ las implicancias que este aportaba en la trayectoria, obteniendo el siguiente resultado que indica la relación que las configuraciones deben tener con $T(f_i)$ y su negado, $i \in V(G(f))$.

Proposición 6.3. *Sea $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^n$ una red Booleana con $n \geq 2$ y tal que $G_I(f)$ es un ciclo de largo 2^n , entonces las siguientes proposiciones son equivalentes:*

- *Para todo $x \in \{0, 1\}^n$, $f(x) = \overline{f(\bar{x})}$*

- Para todo $x \in \{0, 1\}^n$, $f^{2^{n-1}}(x) = \bar{x}$.

Demostración. Supongamos que se cumple el primer punto y probemos el segundo. Sea $x \in \{0, 1\}^n$ arbitrario y definamos las trayectorias dinámicas (u órbitas): $x^1 = x, x^2, \dots, x^{2^{n-1}}$ y $y^1 = \bar{x}, y^2, \dots, y^{2^{n-1}}$. Debido a que $f_j(x) \neq f_j(\bar{x}), \forall j \in V(G(f))$, se tiene que $x^2 = \bar{y}^2$ y que además $x^2, y^2 \neq x$ o se tendría un ciclo límite de largo dos. Así, de manera iterativa, como $f_j(x^i) \neq f_j(y^i), \forall j \in V(G(f))$ e $i = 1, 2, \dots, 2^{n-1} - 1$, se tiene que $x^i = \bar{y}^i$ y que además $x^i, y^i \neq x$ u otra configuración anterior a la i -ésima o formaría un ciclo límite de largo menor a 2^n .

Por lo tanto, como estas trayectorias no poseen configuraciones en común, esto implica que $f(x^{2^{n-1}}) = \bar{x}$ y $f(y^{2^{n-1}}) = x$ y se prueba lo deseado.

Ahora, supongamos que se cumple el segundo punto y probemos el primero. Por el absurdo, supongamos que $\exists i \in V(G(f)), \exists y \in \{0, 1\}^n : y, \bar{y} \in T(f_i)$, así, de lo anterior y junto a que $f^{2^{n-1}}(\bar{y}) = y$ se tiene que $f_i(f^{2^{n-1}}(\bar{y})) = f_i(y)$. Pero,

$$f^{2^{n-1}}(f(\bar{y})) = \overline{f(\bar{y})} \Rightarrow f(f^{2^{n-1}}(\bar{y})) = \overline{f(\bar{y})} \Rightarrow f(y) = \overline{f(\bar{y})}$$

Lo cual es una contradicción puesto que la última igualdad es componente a componente y, dado que $y, \bar{y} \in T(f_i)$ se tiene que $f_i(y) = f_i(\bar{y}) = 1$, contradiciendo nuestro supuesto y se obtiene lo deseado. ■

6.2. Construcción de la familia

Con la finalidad de probar la existencia de estas redes regulatorias que describen un ciclo Hamiltoniano procederemos a realizar una construcción recursiva a partir de la red con $n = 2$ conocida y construyéndose a partir de la distancia entre configuraciones y su negación de exactamente 2^{n-1} . Para ello, la definiremos formalmente para luego presentarla de manera gráfica mediante un ejemplo.

Definición 6.2. Sea $f^{[2]} : \{0, 1\}^2 \rightarrow \{0, 1\}^2$ una red Booleana regulatoria tal que $G_I(f)$ es un ciclo Hamiltoniano. Se construye de manera recursiva $f^{[n]} : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^n$,

$n > 2$, la red Booleana definida como:

$$\begin{aligned} f_i^{[n]}(x) &= (f_i^{[n-1]}(x) \wedge d_{\bar{z}}(x)) \vee c_z(x) & \forall i \in \{1, 2, \dots, n-1\} \\ f_n^{[n]}(x) &= (x_n \wedge d_{\bar{z}}(x)) \vee c_z(x) \end{aligned}$$

Donde $z \in \{0, 1\}^n$ satisface que $f_i^{[n-1]}(z_1, \dots, z_{n-1}) = \vec{0}$ y $z_n = 0$.

Ejemplo 6.1. Sea el grafo de interacción presentado en la figura 6.1, note que este induce sus funciones de activación local $f_1^{[2]}(x_1, x_2) = \bar{x}_2$, $f_2^{[2]}(x_1, x_2) = x_1$ y en particular su dinámica, también presentada en la figura 6.1 y que se justifica por la proposición 6.1.

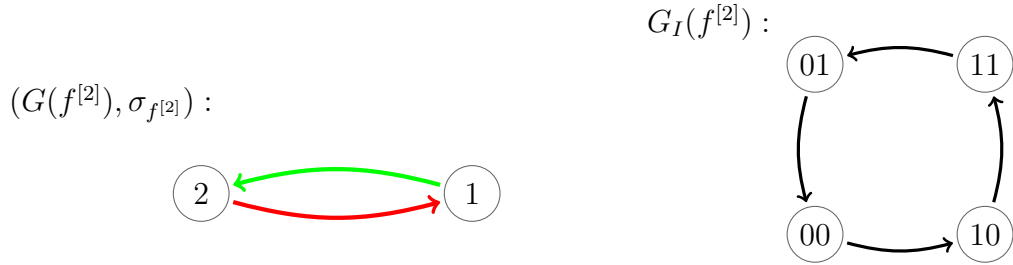


Figura 6.1: Grafo de interacción con signos de $f^{[2]}$ y su dinámica.

Podemos identificar de la definición de la construcción que $z = (0, 1, 0) \in \{0, 1\}^3$, donde $f^{[2]}(z_1, z_2) = (0, 0)$ y $z_3 = 0$. Así, $f^{[3]}$ queda definido por:

$$\begin{aligned} f_1^{[3]}(x_1, x_2, x_3) &= (\bar{x}_2 \wedge (\bar{x}_1 \vee x_2 \vee \bar{x}_3)) \vee (\bar{x}_1 \wedge x_2 \wedge \bar{x}_3) \\ &= (\bar{x}_1 \wedge \bar{x}_2) \vee (\bar{x}_1 \wedge \bar{x}_3) \vee (\bar{x}_2 \wedge \bar{x}_3) \\ f_2^{[3]}(x_1, x_2, x_3) &= (x_1 \wedge (\bar{x}_1 \vee x_2 \vee \bar{x}_3)) \vee (\bar{x}_1 \wedge x_2 \wedge \bar{x}_3) \\ &= (x_1 \wedge x_2) \vee (x_1 \wedge \bar{x}_3) \vee (x_2 \wedge \bar{x}_3) \\ f_3^{[3]}(x_1, x_2, x_3) &= (x_3 \wedge (\bar{x}_1 \vee x_2 \vee \bar{x}_3)) \vee (\bar{x}_1 \wedge x_2 \wedge \bar{x}_3) \\ &= (\bar{x}_1 \wedge x_2) \vee (\bar{x}_1 \wedge x_3) \vee (x_2 \wedge x_3) \end{aligned}$$

La cual retorna una red regulatoria de dinámica ciclo Hamiltoniano C^3 : $[x^1, x^2, \dots, x^8, x^1]$, de configuraciones definidas en el cuadro 6.1. A partir del presente ejemplo se puede entender por qué se describe la familia de manera recursiva

x^i	$z_1 z_2$	z_3
x^1	00	0
x^2	10	0
x^3	11	0
x^4	01	0
x^5	11	1
x^6	01	1
x^7	00	1
x^8	10	1

Cuadro 6.1: Dinámica definida por la red recursiva $f^{[3]}$.

y a partir de cláusulas conjuntivas y disyuntivas. Para ello, sea la red auxiliar $h : \{0, 1\}^3 \rightarrow \{0, 1\}^3$ con $h = (f_1^{[2]}, f_2^{[2]}, x_3) = (\bar{x}_2, x_1, x_3)$, de periodicidad cuatro y que en particular su dinámica posee dos ciclos límite presentados en la figura 6.2.

$G_I(h) :$

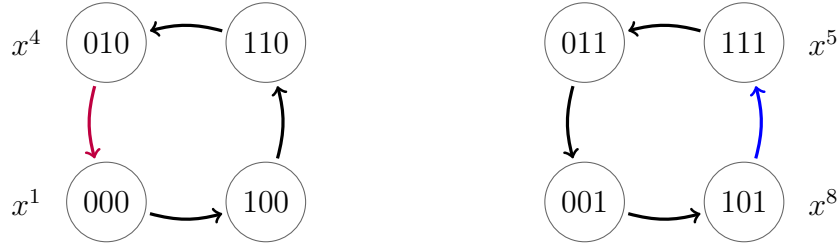


Figura 6.2: Dinámica de h red auxiliar.

Notemos que parte de la dinámica deseada está descrita en $G_I(h)$ debido a que basta cambiar los arcos (x^8, x^5) y (x^4, x^1) por los arcos (x^8, x^1) y (x^4, x^5) , respectivamente. Esto se ve reflejado en la figura 6.3 a partir de dos nuevos arcos definidos por las cláusulas añadidas.

Ahora, formalmente esta familia es obtenida a partir del teorema 3.1, en donde se desarrolla el operador binario suma módulo dos. En efecto, note que para cambiar el arco (x^8, x^5) de la dinámica de h por el arco (x^8, x^1) a partir del teorema 3.1 debemos definir:

$$\tilde{h}_i = \begin{cases} h_i \oplus c_u & i \in \Delta(x^1, x^5) \\ h_i & i \notin \Delta(x^1, x^5) \end{cases}$$

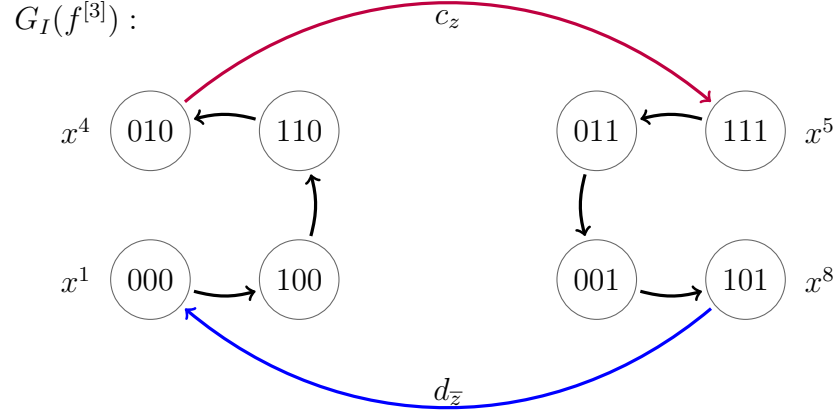


Figura 6.3: Dinámica ciclo Hamiltoniano de $f^{[3]}$.

De donde $\Delta(x^1, x^5) = \{1, 2, 3\}$ y $u = \bar{z}$. Luego, todas las funciones de activación local se reducen a $\tilde{h}_i = h_i \oplus c_{\bar{z}}(x) = h_i(x) \wedge d_{\bar{z}}, \forall i \in \Delta(x^1, x^5)$, lo cual se justifica de manera análoga a lo presentado en el ejemplo 3.5. Del mismo modo, el arco (x^4, x^1) puede ser cambiado por el arco (x^4, x^5) a partir del teorema 3.1 como:

$$\hat{h}_i = \begin{cases} \tilde{h}_i \oplus c_u & i \in \Delta(x^1, x^5) \\ \tilde{h}_i & i \notin \Delta(x^1, x^5) \end{cases}$$

Donde $u = z$, reduciendo todas sus funciones de activación local a $\hat{h}_i = \tilde{h}_i \oplus c_u = (h_i \wedge d_{\bar{z}}) \vee c_z$ debido al mismo argumento presentado en el ejemplo 3.4.

Ejemplo 6.2. Suponga que desea calcular $f^{[4]}$, del ejemplo 6.1 conocemos $f^{[3]}$ y por lo tanto basta aplicar la definición recursiva.

Además, la dinámica puede ser construida conociendo la dinámica del anterior, mediante el establecimiento de $x_n^i = 0, i = 1, \dots, 2^{n-1}, x_n^i = 1, i = 2^{n-1} + 1, \dots, 2^n$ y comenzando con la configuración nula de $f^{[3]}$ en las primeras $n - 1$ componentes, añadiendo las configuraciones que van a continuación de esta y, tras establecer las 2^3 configuraciones añadir la configuración con sólo unos en su entrada, correspondiendo a la configuración x^9 del cuadro 6.2, y repetir las configuraciones de $f^{[3]}$ que le siguen a esta configuración. De esta forma $f^{[4]}(z) = x^9$ y $f^{[4]}(\bar{z}) = x^1$, lo cual corresponde a los arcos modificados en la dinámica original, reciclando gran parte de la dinámica de

x^i	$z_1 z_2 z_3$	z_3
x^1	000	0
x^2	100	0
x^3	110	0
x^4	010	0
x^5	111	0
x^6	011	0
x^7	001	0
x^8	101	0
x^9	111	1
x^{10}	011	1
x^{11}	001	1
x^{12}	101	1
x^{13}	000	1
x^{14}	100	1
x^{15}	110	1
x^{16}	010	1

Cuadro 6.2: Dinámica definida por la red recursiva $f^{[4]}$.

$f^{[3]}$ y generando una nueva dinámica ciclo Hamiltoniano.

Además, la red $f^{[4]}$ generada recursivamente de $f^{[3]}$ se define por las funciones de activación local reducidas dadas a continuación:

$$\begin{aligned}
 f_1^{[4]}(x) &= (\bar{x}_1 \wedge \bar{x}_2) \vee (\bar{x}_2 \wedge \bar{x}_3) \vee (\bar{x}_2 \wedge \bar{x}_4) \vee (\bar{x}_1 \wedge \bar{x}_3 \wedge \bar{x}_4) \\
 f_2^{[4]}(x) &= (x_1 \wedge x_2) \vee (x_1 \wedge \bar{x}_3) \vee (x_1 \wedge \bar{x}_4) \vee (x_2 \wedge \bar{x}_3 \wedge \bar{x}_4) \\
 f_3^{[4]}(x) &= (\bar{x}_1 \wedge x_3) \vee (x_2 \wedge x_3) \vee (x_3 \wedge \bar{x}_4) \vee (\bar{x}_1 \wedge x_2 \wedge \bar{x}_4) \\
 f_4^{[4]}(x) &= (x_1 \wedge x_4) \vee (\bar{x}_2 \wedge x_4) \vee (x_3 \wedge x_4) \vee (x_1 \wedge \bar{x}_2 \wedge x_3)
 \end{aligned}$$

Si bien estos ejemplos aportan las nociones básicas de por qué se construyó de esta forma la red recursiva, es necesario formalizar estas ideas y probar que define una dinámica ciclo Hamiltoniano y se satisface para toda red $f^{[n]}$, $n \geq 3$. Por lo tanto, se presenta el siguiente teorema que afirma la dinámica que posee esta familia.

Teorema 6.1. *Sea $f^{[n]} : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^n$, $n \geq 2$, una red Booleana descrita por la construcción previamente definida. Entonces, $G_I(f^{[n]})$ es un ciclo Hamiltoniano.*

Demostración. Mediante inducción en n ,

- Caso base: Si $n = 2$ por definición $f^{[2]}$ es una red Booleana que describe la dinámica deseada.
- Hipótesis de inducción: Sea $n = k$ y supongamos que $f^{[k]}$ describe la dinámica deseada.
- Paso inductivo: Sea $n = k + 1$ y $f^{[n]}$ red construida a partir de $f^{[n-1]}$ red que, por hipótesis de inducción, esta describe la dinámica ciclo Hamiltoniano. Como esta describe tal dinámica sabemos que $f^{[n-1]}$ es biyectiva y por lo tanto existe un único $z \in \{0, 1\}^n$ tal que $f^{[n-1]}(z_1, \dots, z_k) = \vec{1}$ y tal que $z_n = 0$. Por definición, sabemos que:

$$\begin{aligned} f_i^{[n]}(z) &= (f_i^{[n-1]}(z) \wedge d_{\bar{z}}(z)) \vee c_z(z) = (0 \wedge 1) \vee 1 = 1 & \forall i \in \{1, 2, \dots, n-1\} \\ f_n^{[n]}(z) &= (z_n \wedge d_{\bar{z}}(z)) \vee c_z(z) = (0 \wedge 1) \vee 1 = 1 \\ f_i^{[n]}(\bar{z}) &= (f_i^{[n-1]}(\bar{z}) \wedge d_{\bar{z}}(\bar{z})) \vee c_z(\bar{z}) = (f_i^{[n-1]}(\bar{z}) \wedge 0) \vee 0 = 0 & \forall i \in \{1, 2, \dots, n-1\} \\ f_n^{[n]}(\bar{z}) &= (\bar{z}_n \wedge d_{\bar{z}}(\bar{z})) \vee c_z(\bar{z}) = (0 \wedge 0) \vee 0 = 0 \end{aligned}$$

Por lo tanto, $f^{[n]}(z) = \vec{1}$ y $f^{[n]}(\bar{z}) = \vec{0}$. Además, dado $x \neq z, \bar{z} \in \{0, 1\}^n$ se cumple:

$$\begin{aligned} f_i^{[n]}(x) &= (f_i^{[n-1]}(x) \wedge d_{\bar{z}}(x)) \vee c_z(x) & \forall i \in \{1, 2, \dots, n-1\} \\ &= (f_i^{[n-1]}(x) \wedge 1) \vee 0 = f_i^{[n-1]}(x) \\ f_n^{[n]}(x) &= (x_n \wedge d_{\bar{z}}(x)) \vee c_z(x) \\ &= (x_n \wedge 1) \vee 0 = x_n \end{aligned}$$

Definamos las trayectorias $P_1 : u^1, u^2, \dots, u^{2^k-1}$ y $P_2 : v^1, v^2, \dots, v^{2^k-1}$ dadas por $\forall j \in \{2, \dots, 2^k - 1\}$:

$$u^1 := \vec{1} \quad u^j = f^{[n]}(u^{j-1}) \quad v^1 := \vec{0} \quad v^j = f^{[n]}(v^{j-1})$$

Por construcción sabemos que $z \neq \vec{0}$ y $\bar{z} \neq \vec{1}$, así, como $f_n^{[n]}(u^1) = u_n^1$ esto implica que $u_n^1 = u_n^2 = \dots = u_n^{2^k-1} = 1$, $v_n^1 = v_n^2 = \dots = v_n^{2^k-1} = 0$ y como $f_i^{[n]}(u^1) = f_i^{[n-1]}(u_1^1, \dots, u_{n-1}^1)$ cada u^j, v^j difieren de otras configuraciones en su trayectoria debido a que $f^{[n-1]}$ es una dinámica hamiltoniana de periodo 2^k . En síntesis, las trayectorias

no coinciden en ninguna configuración debido a que difieren en la componente n y estas trayectorias no repiten configuraciones debido a que difieren dos a dos en las primeras $n - 1$ componentes.

Así, como $f^{[n-1]}$ es 2^k periódica se tiene que $f^{[n-1]}(u^{2^k-1}) = (z_1, \dots, z_{n-1})$ y $f^{[n-1]}(v^{2^k-1}) = (\bar{z}_1, \dots, \bar{z}_{n-1})$, lo cual implica que $C : z, P_1, \bar{z}, P_2, z$ describe un ciclo límite de largo 2^n y se prueba lo deseado. ■

Del teorema anterior sabemos que la familia construida describe una dinámica ciclo Hamiltoniano dado cualquier $n \geq 3$ y de la sección 3.4 esta familia puede ser modificada para generar otras dinámicas Hamiltonianas. Como segundo resultado, probaremos que $f^{[n]}$ es en particular descrito por redes regulatorias y que a continuación procederemos a probar.

Teorema 6.2. *Sea $f^{[n]} : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^n$, $n \geq 2$, la red Booleana descrita por la construcción previamente definida. Entonces, $f^{[n]}$ es una red Booleana regulatoria.*

Demostración. Mediante inducción en n ,

- Caso base: Si $n = 2$ se tiene por definición que $f^{[2]} \in \text{RBR}$. Si $n = 3$ entonces $f^{[3]}$ está definido como:

$$\begin{aligned} f_i^{[3]}(x) &= (f_i^{[2]}(x) \wedge d_{\bar{z}}(x)) \vee c_z(x) & \forall i \in \{1, 2\} \\ f_3^{[3]}(x) &= (x_3 \wedge d_{\bar{z}}(x)) \vee c_z(x) \end{aligned}$$

Donde $z \in \{0, 1\}^3$ satisface que $f_i^{[2]}(z_1, z_2) = \vec{0}$ y $z_3 = 0$. Ahora, como $z_3 = 0$ se tiene que $d_{\bar{z}}, c_z$ dependen negativamente de la variable x_3 y por consiguiente $f_3^{[3]}$ debe ser reducible o no sería unate. En efecto, sea $z' = (z_1, z_2, \bar{z}_3)$ y $g^{[3]} : \{0, 1\}^3 \rightarrow \{0, 1\}^3$ definida por $g_i^{[3]}(x) = f_i^{[2]}(x) \wedge d_{\bar{z}}(x)$ para $i = 1, 2$ y $g_3^{[3]}(x) = x_3 \wedge d_{\bar{z}}(x)$, entonces

$$g_3^{[3]}(z') = \bar{z}_3 \wedge d_{\bar{z}}(z') = 1 \wedge 1 = 1$$

Así, como $g_3^{[3]}(z') = 1$ entonces $g_3^{[3]}(x) = g_3^{[3]}(x) \vee c_{(z_1, z_2, \bar{z}_3)}(x)$ y al reemplazar en $f_3^{[3]}$

nos permite reducir c_z debido a que no depende de la tercera variable. Es decir,

$$\begin{aligned} f_3^{[3]}(x) &= g_3^{[3]}(x) \vee c_z(x) \\ &= g_3^{[3]}(x) \vee c_{(z_1, z_2, \bar{z}_3)}(x) \vee c_z(x) \\ &= g_3^{[3]}(x) \vee c_{(z_1, z_2)}(x) \end{aligned}$$

Así, como $g_3^{[3]}(x) = 0$ si $x_3 = 0$ entonces $g_3^{[3]}(x)$ toma valores positivos si y sólo si $x_3 = 1$ y $d_{(\bar{z}_1, \bar{z}_2)}(x) = 1$. Por lo tanto, se tiene que $f_3^{[3]}$ es unate debido a que puede ser escrito de la siguiente manera:

$$f_3^{[3]}(x) = (x_3 \wedge d_{(\bar{z}_1)}(x)) \vee (x_3 \wedge d_{(\bar{z}_2)}(x)) \vee c_{(z_1, z_2)}(x)$$

Veamos que $f_i^{[3]}$, $i = 1, 2$, es también unate. Como $f^{[2]}$ es regulatoria y describe una dinámica ciclo Hamiltoniano entonces $G(f^{[2]})$ es un ciclo negativo y $f^{[2]} = (d_{(z_2)}, d_{(z_1)})$ debido a que $f^{[2]}(z) = \vec{0}$. Notemos que $g_i^{[3]}$ y c_z no coinciden con tener en ambas variables negadas o no negadas, por lo cual estas deben poder ser reducidas. Para ello, notemos que:

$$\begin{aligned} g_1^{[3]}(z_1, \bar{z}_2, z_3) &= d_{(z_2)}(z_1, \bar{z}_2, z_3) \wedge d_{\bar{z}}(z_1, \bar{z}_2, z_3) = 1 \wedge 1 = 1 \\ g_2^{[3]}(\bar{z}_1, z_2, z_3) &= d_{(z_1)}(\bar{z}_1, z_2, z_3) \wedge d_{\bar{z}}(\bar{z}_1, z_2, z_3) = 1 \wedge 1 = 1 \end{aligned}$$

Por lo tanto, c_z no depende de la componente uno y dos en $f_2^{[3]}$ y $f_1^{[3]}$, respectivamente. Finalmente, como $g_1^{[3]}(x) = 0$ si $d_{(z_2)}(x) = 0$ entonces $g_1^{[3]}(x)$ toma valores positivos si y sólo si $x_2 = \bar{z}_2$ y $d_{(z_1, z_3)}(x) = 1$, así, se tiene que $f_i^{[3]}$, $i = 1, 2$, es unate debido a que puede ser escrito de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} f_1^{[3]}(x) &= (d_{(z_2)}(x) \wedge d_{\bar{z}}(x)) \vee c_{(z_1, z_3)}(x) \\ &= (d_{(z_2)}(x) \wedge d_{(\bar{z}_1)}(x)) \vee (d_{(z_2)}(x) \wedge d_{(\bar{z}_3)}(x)) \vee c_{(z_1, z_3)}(x) \\ f_2^{[3]}(x) &= (d_{(z_1)}(x) \wedge d_{\bar{z}}(x)) \vee c_{(z_2, z_3)}(x) \\ &= (d_{(z_1)}(x) \wedge d_{(\bar{z}_2)}(x)) \vee (d_{(z_1)}(x) \wedge d_{(\bar{z}_3)}(x)) \vee c_{(z_2, z_3)}(x) \end{aligned}$$

En conclusión, $f^{[3]}$ es regulatoria.

- Hipótesis de inducción: Sea $n = k \geq 3$ y supongamos que $f^{[k]}$ es una red regulatoria.
- Paso inductivo: Sea $n = k + 1$ y por construcción sabemos que $f^{[k+1]}$ se construye a partir de $f^{[k]}$ como:

$$\begin{aligned} f_i^{[k+1]}(x) &= (f_i^{[k]}(x) \wedge d_{\bar{z}}(x)) \vee c_z(x) & \forall i \in \{1, 2, \dots, k\} \\ f_{k+1}^{[k+1]}(x) &= (x_{k+1} \wedge d_{\bar{z}}(x)) \vee c_z(x) \end{aligned}$$

En primer lugar, veamos que $f_{k+1}^{[k+1]}$ es unate. Veamos que $g_{k+1}^{[k+1]}$ puede ser reescrito como:

$$g_{k+1}^{[k+1]}(x) = x_{k+1} \wedge d_{\bar{z}}(x) = \bigvee_{i=1}^{k+1} (x_{k+1} \wedge d_{(\bar{z}_i)}(x)) = \bigvee_{i=1}^k (x_{k+1} \wedge d_{(\bar{z}_i)}(x))$$

Donde $x_{k+1} \wedge d_{(\bar{z}_{k+1})}(x) = 0$ debido a que $z_{k+1} = 0$. Luego, basta probar que c_z no depende de la variable $k + 1$ y por lo tanto puede ser reducida. Para ello basta probar que $g_{k+1}^{[k+1]}(z') = 1$, donde $z' = (z_1, \dots, z_k, \bar{z}_{k+1})$. En efecto,

$$g_{k+1}^{[k+1]}(z') = \bar{z}_{k+1} \wedge d_{\bar{z}}(z') = 1 \wedge 1 = 1$$

Por lo tanto, $f_{k+1}^{[k+1]}$ puede ser escrito en su dnf-fórmula sin variables negadas y no negadas simultáneamente y probando que $f_{k+1}^{[k+1]}$ es unate. Sea $f_i^{[k]}$, $i = 1, 2, \dots, k$, escrita por su dnf-fórmula, luego, $g_i^{[k+1]}(x) = 1$ mediante dos formas posibles.

El primer caso es si existe al menos una cláusula c_{vj} de $f_i^{[k]}$ tal que $c_{vj}(x) = 1$, $j \in I$, y existe un literal en $d_{\bar{z}}$ tal que este sea uno por ser una cláusula disyuntiva, literal que debe en ambas cláusulas negado o no negado simultáneamente. El segundo caso ocurre debido a que $f_i^{[k]}$ no depende de la variable $k + 1$, por lo tanto, si la variable $k + 1$ de la cláusula $d_{\bar{z}}$ es uno entonces es suficiente que exista una cláusula c_{vj} de $f_i^{[k]}$ tal que $c_{vj}(x) = 1$. Definamos los conjuntos de índices $I', I'' \subseteq I$ como:

$$\begin{aligned} I' &= \{j \in I : c_{vj} \text{ comparte un literal negado o no negado simultáneamente con } d_{\bar{z}}\} \\ I'' &= \{j \in I : c_{vj} \text{ no comparte ningún literal negado o no negado simultáneamente con } d_{\bar{z}}\} \end{aligned}$$

De lo anterior, $g_i^{[k+1]}$ puede ser escrito de la siguiente manera:

$$g_i^{[k+1]}(x) = f_i^{[k]}(x) \wedge d_{\bar{z}}(x) = \left(\bigvee_{j \in I'} c_{vj}(x) \right) \vee \left(\bigvee_{j \in I''} (c_{vj}(x) \wedge d_{\bar{z}_{k+1}}(x)) \right)$$

Por lo tanto, para probar que $f_i^{[k+1]}$ es unate basta probar que c_z puede ser reducido y no depender de las variables x_j , $j \in I''$, así, podemos probar que $g_i^{[k+1]}(z \oplus e_j) = 1$ para toda componente $j \in I''$. En efecto, supongamos que $g_i^{[k+1]}(z \oplus e_j) = 0$ para algún $j \in I''$ e implicando que $f_i^{[k+1]}(z \oplus e_j) = 0$ debido a que la cláusula conjuntiva retorna un valor cero. Como $f_i^{[k+1]}$ satisface que $(f_i^{[k+1]})^{2^{k-1}}(x) = \bar{x}$ entonces, del lema 6,3 y la proposición 6.3 se tiene que $f_i^{[k+1]}(\bar{z} \oplus e_j) = 1$ y por consiguiente $g_i^{[k+1]}(\bar{z} \oplus e_j) = 1$. Pero,

$$g_i^{[k+1]}(\bar{z} \oplus e_j) = \left(\bigvee_{s \in I'} c_{vs}(\bar{z} \oplus e_j) \right) \vee \left(\bigvee_{s \in I''} (c_{vs}(\bar{z} \oplus e_j) \wedge d_{\bar{z}_{k+1}}(\bar{z} \oplus e_j)) \right) = 0$$

Esto debido a que el primer paréntesis contiene las cláusulas conjuntivas con al menos una variable en común con c_z , implicando que tal variable recibe el valor de la negación de z y retornando cero a todas las cláusulas, en cambio, para el segundo paréntesis es debido a que $(\bar{z} \oplus e_j)_{k+1} = \bar{z}_{k+1}$ y la cláusula $d_{\bar{z}_{k+1}}(\bar{z} \oplus e_j) = 0$. Por lo tanto, del mismo principio podemos suponer que $g_i^{[k+1]}(z \oplus v) = 0$ para cualquier $v \in \{0, 1\}^{k+1}$ suma módulo dos de la forma $v = \bigoplus_{j \in D \subseteq I''} e_j$, obteniendo la misma contradicción debido a que

el primer paréntesis sigue sin coincidir con las componentes en I' y $d_{\bar{z}_{k+1}}(\bar{z} \oplus v) = 0$, lo cual prueba que c_z no depende de los índices $j \in I''$ y probando que $f_i^{[k+1]}$ es unate.

Por lo tanto, como cada función local $f_i^{[k+1]}$, $i = 1, 2, \dots, k+1$, es unate se prueba entonces que $f^{[k+1]}$ es regulatoria. ■

Como ya se indicó, este resultado prueba la existencia de redes regulatorias con una dinámica ciclo Hamiltoniano, siendo esto de gran interés debido a que estas redes se restringen a variables con comportamientos de activación o inhibición, pero no los dos al mismo tiempo y de gran importancia para, por ejemplo, procesos biológicos.

Sin embargo, al estar restringidas a sólomente comportamientos de activación e inhibición, se vio en la práctica una mayor cantidad de arcos para la expresión de tal dinámica. En particular, se identificó que $G(f)$ era el grafo completo sin poder ser demostrado debido a que no se posee una caracterización para estas redes regulatorias con dinámica Hamiltoniana.

Ahora, se logró probar que dado una red Booleana de dinámica ciclo Hamiltoniano tal que sus configuraciones y su negada están a distancia 2^{n-1} , se prueba que $G(f)$ es el grafo completo. De lo anterior, podemos probar que la familia $f^{[n]}$ satisface esta hipótesis y probar que $G(f^{[n]})$, $n \geq 3$, es siempre el grafo completo.

Lema 6.3. *Sea $f^{[n]} : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^n$, $n \geq 2$, una red Booleana descrita por la construcción definida, entonces $(f^{[n]})^{2^{n-1}}(x) = \bar{x}$, $\forall x \in \{0, 1\}^n$.*

Demostración. Mediante inducción en n ,

- Caso base: Si $n = 2$ sabemos que $G(f)$ describe un ciclo negativo, luego, $f_1^{[2]}(\vec{1}) \neq f_2^{[2]}(\vec{1})$ y del mismo modo $f_1^{[2]}(\vec{0}) \neq f_2^{[2]}(\vec{0})$, lo cual implica que las configuraciones $\vec{0}, \vec{1}$ están a distancia 2 y se prueba lo deseado.
- Hipótesis de inducción: Sea $n = k$ y supongamos que para todo $x \in \{0, 1\}^n$ se cumple que $(f^{[n]})^{2^{n-1}}(x) = \bar{x}$.
- Paso inductivo: Sea $n = k + 1$, debido a que por construcción $(f^{[n]})^{2^{n-1}}(z) = \bar{z}$ entonces también se cumple para $\vec{0}, \vec{1} \in \{0, 1\}^n$. Ahora, si $x \neq z, \bar{z} \in \{0, 1\}^n$ se tiene que $f_i^{[n]}(x) = \overline{f_i^{[n-1]}(x)}$, $\forall i \in \{1, 2, \dots, n-1\}$, así, de hipótesis de inducción se tiene que $f^{[n]}(\vec{1}) = \overline{f^{[n]}(\vec{0})}$ y en particular $(f^{[n]})^j(\vec{1}) = \overline{(f^{[n]})^j(\vec{0})}$, $\forall j \in \{1, 2, \dots, 2^n - 1\}$, lo cual prueba lo deseado. ■

Finalmente, se presenta el teorema antes mencionado que nos permite concluir que la familia $f^{[n]}$, $n \geq 3$, satisface que todas sus funciones de activación local dependen de todas las variables.

Teorema 6.4. *Sea $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^n$ una red Booleana con $n \geq 3$ y tal que $G_I(f)$ es un ciclo Hamiltoniano. Si para todo $x \in \{0, 1\}^n$, $f^{2^{n-1}}(x) = \bar{x}$, entonces $G(f)$ es*

el digrafo completo.

Demostración. Sea $i \in V(G(f))$ arbitrario y por el absurdo supongamos que dado $j \in V(G(f))$ también arbitrario, el arco (j, i) no está en $G(f)$. Sea $a, b \in \{0, 1\}$ y definamos:

$$X^{ij}(a, b) := \{x \in \{0, 1\}^n : x_j = a \text{ y } f_i(x) = b\}$$

Notemos que, la hipótesis de que todo $x \in \{0, 1\}^n$, $f^{2^{n-1}}(x) = \bar{x}$ es equivalente a que todo $i \in V(G(f))$, $x \in T(f_i)$ si y solo si $\bar{x} \notin T(f_i)$, lo cual implica que $|X^{ij}(1, 0)| = |X^{ij}(0, 1)|$, $|X^{ij}(0, 0)| = |X^{ij}(1, 1)|$ y junto a que $f_i(x + e_j) = f_i(x)$, para todo $x \in \{0, 1\}^n$, se desprende que:

$$|X^{ij}(1, 0)| = |X^{ij}(0, 1)| = |X^{ij}(1, 1)| = |X^{ij}(0, 0)| = 2^{n-2}$$

Ahora, como $G_I(f)$ es un ciclo de largo 2^n y para todo $x \in \{0, 1\}^n$, $f^{2^{n-1}}(x) = \bar{x}$ entonces es suficiente definir $\{x^k\}_{k=0}^{2^{n-1}}$, $x^k = f^k(\vec{1})$, debido a que las configuraciones faltantes satisfacen que $f^{2^{n-1}}(x^k) = \overline{x^k}$.

Sin pérdida de generalidad, supongamos que $\vec{1} \in X^{ij}(1, 1)$ y por consiguiente $\vec{0} \in X^{ij}(0, 0)$. Por otro lado, definamos $L = \{x \in \{0, 1\}^n : x \in X^{ij}(1, 0) \cup X^{ij}(0, 1) \text{ y } x \in \{x^k\}_{k=0}^{2^{n-1}}\}$ y notemos que $x \in L$ si y solo si $\bar{x} \notin L$ debido a que $f^{2^{n-1}}(x) = \bar{x}$ y por lo tanto $|L| = 2^{n-2}$. Supongamos que el conjunto L no posee igual cantidad de configuraciones $u \in X^{ij}(1, 0)$ y $v \in X^{ij}(0, 1)$, luego, como la unión de estos es un número par se tiene que estos difieren en al menos dos unidades. Pero, esto es contradictorio debido a que $G_I(f)$ es un ciclo de largo 2^n y al tener más configuraciones que retornan $f_i(u) = 0$, por ejemplo, implica que no existen suficientes configuraciones $x \in L$ tal que $x_j = 1$ debido a que las configuraciones tales que $f_i(v) = 1$ difieren en dos unidades y el resto pertenece a $X^{ij}(1, 1) \cup X^{ij}(0, 0)$. De lo anterior, se desprende que existe igual cantidad de configuraciones $x \in L$ en $X^{ij}(1, 0)$ y $X^{ij}(0, 1)$.

Finalmente, como L posee igual cantidad de cambios de valor en la componente i , se tiene que $f_i^{2^{n-1}}(\vec{1}) = 1$, lo cual es contradictorio puesto que $f^{2^{n-1}}(\vec{1}) = \vec{1} = \vec{0}$, contradiciendo nuestro supuesto y probando que el arco (j, i) está en $G(f)$.



Corolario 6.4.1. *Sea $f^{[n]} : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^n$, $n \geq 3$, una red Booleana descrita por la construcción definida, entonces $G(f^{[n]})$ es el digrafo completo.*

Capítulo 7

Conclusiones

De capítulos introductorios presentamos a las redes Booleanas como capaces de modelar múltiples procesos y con un gran estudio de su interacción hacia su dinámica. Sin embargo, nuestro objetivo fue estudiar la red y sus características bajo una dinámica Hamiltoniana y condiciones necesarias para presentar tales dinámicas. De lo anterior, se obtuvieron importantes resultados en redes Booleanas como la condición necesaria de un grafo de interacción fuertemente conexo para obtener una dinámica de máxima altura. En cambio, para dinámicas ciclo Hamiltoniano e intermedia sólo se requiere que el grafo de interacción sea conexo.

De manera más particular, probamos que cualquier dinámica Hamiltoniana con altura distinta de cero requiere de al menos una función de activación local con dependencia de todas las variables. Esto es importante debido a que prueba la existencia y necesidad de al menos una variable que defina su valor siguiente en función del sistema completo.

Por último, se analizaron distintas familias de redes Booleanas con grafos signados para ver su capacidad de describir dinámicas Hamiltonianas, llevándonos a que una familia candidata son las regulatorias debido a que esta no impone restricciones en su base de atracción o cotas en su altura, como es el caso de las redes conjuntivas o disyuntivas. Para ello, se construyó la red $f^{[n]}$ que describe un ciclo Hamiltoniano y es además regulatoria, probando la existencia de este tipo de redes con dinámica ciclo Hamiltoniano y al mismo tiempo establecer conjeturas para la caracterización

de éstas.

7.1. Trabajo futuro y problemas propuestos

Entre las problemáticas generadas por este trabajo, se puede estudiar proposiciones semejantes al lema 4.1 que nos permitan asegurar la existencia de vértices con grado de entrada no acotado en la dinámica ciclo Hamiltoniano y profundizar en su propiedad de ser balanceada, para la obtención de información relevante para su caracterización. En general, profundizar en caracterizaciones para cualquier tipo de dinámica Hamiltoniana es de gran importancia para asegurar propiedades y ver condiciones tanto necesarias como suficientes para el intercambio entre dinámicas regulatorias que la definan.

Además, se puede analizar otros comportamientos dinámicos que aseguren la existencia de un vértice de grado de entrada no acotado y en el estudio de dinámicas obtenidas a partir de redes biyectivas con el cambio de uno o más arcos. Por otro lado, también se puede analizar las dinámicas de redes con grafo de interacción con grado de entrada acotado en todos sus vértices, lo que podría aportarnos en restricciones o implicar características en la dinámica y sus bases de atracción.

De manera análoga a lo realizado en la construcción de la familia $f^{[n]}$, se puede profundizar en familias de máxima altura y Hamiltoniana intermedia para la existencia de redes regulatorias que definan tales dinámicas.

De todo lo anterior, debido al poco desarrollo en el problema inverso de caracterizar la interacción de la red en base a la dinámica, es de gran importancia estudiar estos resultados en el caso general de redes dinámicas finitas dado $q > 2$, siendo esto de gran importancia para procesos con más estados y complejidad asociada.

Finalmente, se presenta una conjetura vista en los ejemplos realizados, la cual se presenta para el aporte de trabajos futuros.

Conjetura 7.1. *Sea $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^n$ una red Booleana tal que $G_I(f)$ es un ciclo Hamiltoniano, entonces, f es regulatoria si y solo si satisface las siguientes propiedades:*

- *Para toda configuración $x \in \{0, 1\}^n$, $f^{2^{n-1}}(x) = \bar{x}$.*
- *Para todo $i \in V(G(f))$ y todo $x \in T(f_i)$, existe un $y \in T(f_i)$ tal que $d_H(x, y) = 1$.*

Note que el segundo punto de la conjetura es una condición necesaria para que toda red de dinámica arbitraria sea regulatoria y, de no cumplirse para algún $i \in V(G(f))$, nos aporta que tal vértice es de grado de entrada no acotado (véase anexo A3).

Si bien este resultado aporta en el conocimiento de la dinámica en términos teóricos, es de gran importancia el desarrollo de esta idea debido a que caracteriza todas las posibles dinámicas ciclo Hamiltoniano expresables por una red regulatoria, delimitando el área de aplicación.

En particular, de probar que toda red regulatoria con dinámica ciclo Hamiltoniano que implique sólo el primer punto, se tendrá la unicidad del digrafo de interacción de tal red, esto por el teorema 6.4 y desprendiendo la siguiente conjetura vista en el desarrollo de la memoria.

Conjetura 7.2. *Dado $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^n$ red Booleana regulatoria tal que $G_I(f)$ es un ciclo Hamiltoniano, entonces $G(f)$ es el digrafo completo.*

Bibliografía

- Anthony, M. (2001). *Discrete mathematics of neural networks*. SIAM Monographs on discrete mathematics and applications.
- Aracena, J. (2001). *Modelos matemáticos discretos asociados a los sistemas biológicos. Aplicación a las redes de regulación génica*. PhD thesis, U. Chile & UJF, Santiago, Chile, & Grenoble, France.
- Aracena, J. (2006). *Regulatory network for cell shape changes during Drosophila ventral furrow formation*. J. Theor. Biol. 239.
- de Jong H. (2002). *Modeling and simulation of genetic regulatory systems: a literature review*. J. Comput. Biol. 9.
- Gadouleau, M. (2021). Dynamical properties of disjunctive boolean networks.
- Glass, L., Kauffman, S.A. (1973). *The logical analysis of continuous, non-linear biochemical control networks*. J. Theor. Biol. 39.
- Goles E. (1985). *Dynamics of positive automata networks*. Theoret. Comput. Sci. 41.
- Goles E., Martínez S. (1991). *Dynamical Behavior and Applications*. Kluwer Academic Publishers.
- Goles E., Tchuente M. (1982). *Iterative behaviour of generalized majority functions*. Math. Social Sci. 4.
- Grabisch M., Rusinowska A. (2013). *A model of influence based on aggregation functions*. Mathematical Social Sciences, 66.
- Han Y., Kristensen N., Buckley Y., Maple D., West J., McDonald-Madden E. (2020). *Predicting the ecosystem-wide impacts of eradication with limited information using a qualitative modelling approach.*, volume 430. Ecological Modelling.
- Hopfield J. (1982). *Neural networks and physical systems with emergent collective computational abilities*. Proc. Natl. Acad. Sci. USA 79.
- Jackson, M.O. (2008). *Social and Economic Networks*. Princeton University Press.

- Kauffman, S.A. (1969). *Metabolic stability and epigenesis in randomly constructed genetics nets*. J. Theor. Biol. 22.
- Kauffman, S.A. (1993). *The Origins of Order, Self-Organization and Selection in Evolution*. Oxford University Press, London.
- Mac Culloch W.S., Pitts W.S. (1943). *A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity*. Bull. Math. Biophys. 5.
- Mendoza, L., Alvarez-Buylla, E. (1998). *Dynamics of the genetic regulatory network for Arabidopsis Thaliana flower morphogenesis*. J. Theor. Biol. 193.
- Poljak S., Sura M. (1982). *On periodical behaviour in societies with symmetric influences*. Combinatorica 3.
- Salam Jarrah A., Laubenbacher R., Veliz-Cuba A. (2010). *The dynamics of conjunctive and disjunctive Boolean network models*. Bull. Math. Biol. 72.
- Sánchez, L., Thieffry, D. (2001). *A logical analysis of the Drosophila Gap-gene system*. J. Theor. Biol. 211.
- Thomas R. (1973). *Boolean formalization of genetic control circuits*. J. Theoret. Biol. 42(3).
- Thomas R., Kaufman M. (2001). *Multistationarity, the basis of cell differentiation and memory. II. Logical analysis of regulatory networks in terms of feedback circuits, Chaos. Interdiscip. J. Nonlinear Sci.* 11(1).

Apéndice A

Demostración a preguntas propuestas

A1. Número de RDF distintas

Proposición A.1. *Dado $n, q \in \mathbb{N}$, ¿cuántas RDF $f : \llbracket q \rrbracket^n \rightarrow \llbracket q \rrbracket^n$ distintas existen?*

Respuesta: Existen q^{nq^n} RDF distintas entre si, en efecto, sea $\llbracket q \rrbracket^n := \{x^1, x^2, \dots, x^{q^n}\}$, notemos que, para decir que dos RDF son distintas $f \neq f'$ debe existir una configuración $x^i, i \in \{1, \dots, q^n\}$ tal que $f(x^i) \neq f'(x^i)$. Así, cada RDF f está en correspondencia uno a uno con el vector $\vec{u}_f := (f(x^1), f(x^2), \dots, f(x^{q^n})) \in (\llbracket q \rrbracket^n)^{q^n}$ y por lo tanto el número de RDF distintas está dado por:

$$|(\llbracket q \rrbracket^n)^{q^n}| = (q^n)^{q^n} = q^{nq^n}$$

A2. Biyectividad de la red implica balanceado

Proposición A.2. *Sea $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^n$ red Booleana tal que $f = (f_1, \dots, f_n)$. Si f es biyectiva, entonces todas las funciones de activación local f_i son balanceadas.*

Respuesta: La proposición es verdadera, si f es biyectiva, se tiene:

$$Im(f) = \{f(x) : x \in \{0, 1\}^n\} = \{0, 1\}^n$$

Además, al ser f inyectiva se tiene que $\forall x \in \{0, 1\}^n, \exists! y \in \{0, 1\}^n: y = f(x)$, lo cual es equivalente a que $x = f^{-1}(y)$ e implicando que $\forall i = 1, \dots, n$:

$$\begin{aligned} |f_i^{-1}(0)| &= |\{x \in \{0, 1\}^n : f_i(x) = 0\}| = |\{f^{-1}(y) : (y \in \{0, 1\}^n : y_i = 0)\}| \\ &= |\{y \in \{0, 1\}^n : y_i = 0\}| = 2^{n-1} \end{aligned}$$

Utilizando la inyectividad de manera análoga se prueba que $\forall i = 1, \dots, n, |f_i^{-1}(1)| = 2^{n-1}$ y se prueba que cada función de activación local es balanceada. Note que la proposición inversa no es verdadera, por contraejemplo, sea $f: \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^n$ descrito por $\forall x \in \{0, 1\}^n$,

$$f(x) = \begin{cases} \vec{0} & \text{si } x_1 = 0 \\ \vec{1} & \text{si } x_1 = 1 \end{cases}$$

Note que $|f_i^{-1}(0)| = |f_i^{-1}(1)| = 2^{n-1}$ balanceadas, sin embargo, f no es biyectiva para $n \geq 2$.

A3. Lema de comparabilidad

Lema A.1. *Sea $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^n$, $n \geq 2$, red Booleana con funciones de activación local no constantes. Si $\exists y \in T(f_i) : \forall z \neq y \in T(f_i), d_H(y, z) > 1$ entonces $d^-(i) = n$.*

Demostración. Supongamos que $\exists y \in T(f_i) : \forall z \neq y \in T(f_i), d_H(y, z) > 1$. Si $|T(f_i)| = 1$ entonces $f_i(x) = c_y(x)$ cláusula que depende de todas las variables, en cambio, si $|T(f_i)| > 1$, supongamos que $f_i(x) = f_i(x) \vee c_y(x)$ no depende de la variable x_j , $j \in V(G(f))$ arbitrario, implicando que la cláusula inducida por y en f_i puede ser reducida y no depender de x_j . Pero, para ello es necesario que $\exists y' \in T(f_i) : y' = y \oplus e_j$, lo cual, es contradictorio debido a que $d_H(y, y') = 1$. Por consiguiente se tiene que $f_i(x) = f_i(x) \vee c_y(x)$ no permite reducir la cláusula c_y e implicando que $d^-(i) = n$. ■

Teorema A.2. *Sea $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}^n$, $n \geq 2$, red Booleana con funciones de*

activación local no constantes. Si $\exists y \in T(f_i) : \forall z \neq y \in T(f_i), d_H(y, z) > 1$ y $|T(f_i)| > 1$, entonces f no es regulatoria.

Demostración. Supongamos que $\exists y \in T(f_i) : \forall z \neq y \in T(f_i), d_H(y, z) > 1$ y sea $f_i(x) = g_i(x) \vee c_y(x)$, $g_i \neq f_i$, función con al menos dos cláusulas y tal que c_y no es reducible por la demostración del lema A.1.

Sin pérdida de generalidad podemos suponer que g_i está escrita en su dnf-fórmula y, por el absurdo, supongamos que f_i no posee variables negadas y no negadas simultáneamente. Pero, esto implicaría que g_i depende de $k \leq n$ variables negadas y no negadas de c_y , lo cual, es contradictorio debido a que $g_i(y) = 0$ puesto que g_i y f_i difieren en la configuración $y \in T(f_i)$, contradiciendo nuestro supuesto y probando que f no es regulatoria.

■

Apéndice B

Códigos empleados

B1. Construcción de dinámicas en BNSimulator

Para la realización de la etapa experimental de las dinámicas y sus redes, se procedió a trabajar con el programa BNSimulator v1.0, desarrollado por: Lilian Salinas, Rodrigo Bravo, Luis Cabrera. Estos códigos pueden ser leídos en un archivo .bn o aplicar de manera manual al programa. A continuación, se presentan los códigos de los ejemplos realizados.

```
1 x1 = (x1 & !x3) | (x3 & !x1) | (x3 & !x2)
2 x2 = (x1 & x3) | (x2 & !x1)
3 x3 = (x2 & x3) | (x2 & !x1) | (x3 & !x1)
```

Código B.1: Código del ejemplo 2.5.

```
1 x1 = (x1 & !x2 & x3) | (x1 & x2 & !x3) | (x1 & x2 & x3)
2 x2 = (!x1 & x2 & !x3) | (x1 & !x2 & !x3) | (x1 & x2 & !x3)
3 x3 = x2
```

Código B.2: Código del ejemplo 3.1.

```
1 x1 = !x1
2 x2 = (x2 & x1) | (!x1 & !x2)
3 x3 = (x3 & x1) | (x3 & x2) | (!x1 & !x2 & !x3)
```

Código B.3: Código del ejemplo 3.2.

```

1 x1 = !x1
2 x2 = (x2 & x1) | (!x1 & !x2)
3 x3 = (x3 & x1) | (x2 & x3)

```

Código B.4: Código del ejemplo 3.3.

```

1 x1 = !x1 ^ (!x1 & !x2 & !x3)
2 x2 = ((x2 & x1) | (!x1 & !x2)) ^ (!x1 & !x2 & !x3)
3 x3 = (x3 & x1) | (x2 & x3)

```

Código B.5: Código del ejemplo 3.5.

```

1 x1 = !x2
2 x2 = x1

```

Código B.6: Código del ejemplo 6.1 figura 6.1.

```

1 x1 = (!x2 & (!x1 | x2 | !x3)) | (!x1 & x2 & !x3)
2 x2 = (x1 & (!x1 | x2 | !x3)) | (!x1 & x2 & !x3)
3 x3 = (x3 & (!x1 | x2 | !x3)) | (!x1 & x2 & !x3)

```

Código B.7: Código del ejemplo 6.1 figura 6.3.

```

1 x1 = (((!x2 & (!x1 | !x3)) | (!x1 & !x3)) & (x1 | !x2 | x3 | !x4)) |
      (x1 & !x2 & x3 & !x4)
2 x2 = (((x1 & (x2 | !x3)) | (x2 & !x3)) & (x1 | !x2 | x3 | !x4)) | (
      x1 & !x2 & x3 & !x4)
3 x3 = (((x3 & (!x1 | x2)) | (!x1 & x2)) & (x1 | !x2 | x3 | !x4)) | (
      x1 & !x2 & x3 & !x4)
4 x4 = (x4 & (x1 | !x2 | x3 | !x4)) | (x1 & !x2 & x3 & !x4)

```

Código B.8: Código del ejemplo 6.2.

B2. Construcción de redes a partir de la dinámica

Se utilizó la librería `sympy` para el trabajo de cadenas y en particular la función `SOPform` que realiza cálculos de funciones Booleanas a partir de las variables implicadas y las configuraciones positivas de la función.

```

1 from sympy.logic import SOPform
2 from sympy import symbols

```

Código B.9: Librerías utilizadas.

```

1 def variables(n):
2     variab = []
3     for i in range(n):
4         variab.append('x{}'.format(i+1))
5     return variab

```

Código B.10: Función que define las variables.

```

1 def mint(j,D):
2     P = []
3     for i in range(len(D)-1):
4         if D[i+1][j-1] == 1:
5             P.append(D[i])
6     return P

```

Código B.11: Función que define las configuraciones positivas.

```

1 def alocal(D):
2     n = len(D[1])
3     var = variables(n)
4     for j in range(n):
5         s = SOPform(var, mint(j+1,D))
6         limp =str(s).replace('~','!')
7         print('f_{count}(x) = {restr}'.format(count=j+1,restr=limp))

```

Código B.12: Función que retorna la red.

Con la finalidad de explicar el funcionamiento de la función *alocal* se presentan los ejemplos 3.1, 3.2 y 3.3, respectivamente, todos del Capítulo 3: Dinámicas Hamiltonianas, ingresando la dinámica a conocer su red y el retorno de esta.

```

1 D = [[1,1,0],[1,1,1],[1,0,1],[1,0,0],
2       [0,1,0],[0,1,1],[0,0,1],[0,0,0],
3       [0,0,0]] #Se repite la configuracion punto fijo
4 alocal(D)     #Maxima altura

```

Código B.13: Ejemplo construcción de red de máxima altura.


```

1 f_1(x) = (x1 & x2) | (x1 & x3)
2 f_2(x) = (x1 & !x3) | (x2 & !x3)
3 f_3(x) = x2

```

Código B.14: Retorno de la red de máxima altura.

```

1 D = [[1,1,0],[0,1,0],[1,0,0],[0,0,0],
2      [1,1,1],[0,1,1],[1,0,1],[0,0,1],
3      [1,1,0]] #Se repite la configuracion inicial
4 alocal(D)     #Ciclo Hamiltoniano

```

Código B.15: Ejemplo construcción de la red de dinámica ciclo Hamiltoniano.

```

1 f_1(x) = !x1
2 f_2(x) = (x1 & x2) | (!x1 & !x2)
3 f_3(x) = (x1 & x3) | (x2 & x3) | (!x1 & !x2 & !x3)

```

Código B.16: Retorno de la red de dinámica ciclo Hamiltoniano.

```

1 D = [[1,1,1],[0,1,1],[1,0,1],[0,0,1],
2      [1,1,0],[0,1,0],[1,0,0],[0,0,0],
3      [1,1,0]] #Se repite la primera configuracion periodica
4              #alcanzada por los transientes
5 alocal(D)     #Dinamica Hamiltoniana intermedia

```

Código B.17: Ejemplo construcción de la red Hamiltoniana intermedia.

```

1 f_1(x) = !x1
2 f_2(x) = (x1 & x2) | (!x1 & !x2)
3 f_3(x) = (x1 & x3) | (x2 & x3)

```

Código B.18: Retorno de la red Hamiltoniana intermedia.

Además, se presenta un ejemplo aplicado de la función *SOPform*, construyendo la función a partir de las configuraciones positivas de este. Para ello, se utilizó el cuadro 2.2 del ejemplo 2.4.

```

1 D_3 = [[0,0,1],[0,1,0],[1,0,0],[1,1,1]]
2 var = variables(3)
3 s = SOPform(var,D_3)
4 str(s).replace('~','!')

```

Código B.19: Ejemplo construcción de la función del ejemplo 2.4.

```
1 '(x1 & x2 & x3) | (x1 & !x2 & !x3) | (x2 & !x1 & !x3) | (x3 & !x1 & !x2)'
```

Código B.20: Retorno de la función *SOPform*.

Notar que todos estos ejemplos fueron desarrollados con la finalidad de ser directamente ocupados en el programa BNsimulator, debiendo reemplazar signos en la salida para su lectura.