COMBINATOIRE DES ATTRACTEURS DE CIRCUITS D'AUTOMATES BOOLÉENS

Mathilde Noual

Résumé. — Dans le cadre de l'informatique théorique et de la biologie, les réseaux d'automates booléens sont souvent vus comme des modèles de réseaux de régulation génétique. Ici, nous présentons des résultats concernant la dynamique de réseaux d'automates booléens dont la structure sous-jacente est un circuit appelé *circuit d'automates booléens*. Ces réseaux particuliers sont connus pour jouer un rôle clé dans la dynamique asymptotique d'un réseau de régulation. Notre travail se concentre sur leur nombre d'attracteurs (comportements dynamiques asymptotiques distincts) dans le cas d'un mode d'itération bloc-séquentiel quelconque des automates.

1. Introduction

Depuis que Thomas [**3**] introduisit les premiers modèles à la fin des années soixante, de nombreux travaux ont été publiés dans le domaine des réseaux de régulation, tous motivés principalement par le besoin de comprendre mieux certains comportements dynamiques émergents des réseaux qui ne peuvent être expliqués par une simple analyse des interactions locales s'effectuant entre leurs éléments. Dans la lignée de certains des auteurs de ces travaux, nous avons choisi de nous concentrer sur les modèles de réseaux de régulation discrets que sont les réseaux d'automates booléens. Plus précisément, nous nous sommes intéressés à des réseaux d'automates booléens dont la structure sous-jacente est un circuit et qui sont connus [**4**] pour être des motifs jouant un rôle central dans la dynamique asymptotique des réseaux dans lesquels on les retrouve. Outre les sous-motifs importants que peut contenir un réseau d'automates booléens, parmi ses caractéristiques pouvant avoir un impact significatif sur sa dynamique, on trouve le mode d'itération de ses automates, *i.e.,* l'ordre dans lequel les états de ses automates sont mis à jour à chaque étape de temps. En focalisant notre attention sur des réseaux dont la structure est simple, à savoir les circuits d'automates booléens, nous avons pu effectuer une analyse combinatoire de leur dynamique pour tous les modes d'itération bloc-séquentiels, *i.e.,* pour tous les modes d'itération déterministes et invariants dans le temps tels qu'à chaque étape de temps tous les automates voient leur état être mis à jour exactement une fois. Nous avons ainsi déterminé le nombre exact d'attracteurs d'une période donnée et au total d'un circuit d'automates booléens de taille arbitraire. La section 3 traite le cas du mode d'itération parallèle et la section 4 celui des autres modes d'itération bloc-séquentiels.

2. Définitions

Un **circuit** de taille n est un graphe dirigé noté ici $\mathbb{C}_n = (V, A)$. L'ensemble de ses sommets $V = \{0, \ldots, n-1\}$ est vu comme l'ensemble des éléments de $\mathbb{Z}/n\mathbb{Z}$ de sorte que si i et j sont deux sommets, $i+j$ désigne le sommet $i+j \mod n$. L'ensemble des arcs du circuit est $A = \{(i, i+1) \mid i \in \mathbb{Z}/n\mathbb{Z}\}$. Un réseau d'automates booléens associé à un circuit de taille n, ou, plus simplement, un **circuit d'automates booléens** de taille n est un couple $R_n = (\mathbb{C}_n, F)$ où $\mathbb{C}_n = (V, A)$ est un circuit de taille n dont les sommets sont assimilés aux automates du réseau R_n et $F : \{0,1\}^n \to \{0,1\}^n$ est la **fonction globale de transition** du réseau R_n. Par abus de langage, on parlera de l'**état** (global) de R_n pour désigner le vecteur booléen $x = (x_0 \ldots x_{n-1}) \in \{0,1\}^n$ dont le coefficient x_i correspond à l'état du sommet (ou automate) i de $\mathbb{C}_n$. Soit $\mathtt{id}$ la fonction d'identité booléene ($\forall a \in \{0,1\},\ \mathtt{id}(a) = a$) et neg la fonction de négation booléene ($\forall a \in \{0,1\},\ neg(a) = \neg a = 1 - a$). La fonction F est définie par l'ensemble des n **fonctions locales de transition** $\{f_i \in \{\mathtt{id}, neg\} \mid i \in \mathbb{Z}/n\mathbb{Z}\}$. Ici, nous nous intéressons principalement au mode de mise à jour (ou mode d'itération) parallèle. Les fonctions locales de transition sont donc appliquées simultanément : soit $x = (x_0 \ldots x_{n-1}) \in \{0,1\}^n$ un état global de R_n à une certaine date $t \in \mathbb{N}$ du temps discrétisé, alors l'état global de R_n à la date $t+1$ est : $F(x) = (f_0(x_{n-1}), \ldots, f_i(x_{i-1}), \ldots, f_{n-1}(x_{n-2}))$.

On dit qu'un arc $(i, i+1)$ est **positif** (*resp.* **négatif**) quand $f_{i+1} = \mathtt{id}$ (*resp.* $f_{i+1} = neg$). Le réseau R_n et le circuit $\mathbb{C}_n = (V, A)$ associé sont dits *positifs* (*resp. négatifs*) quand le nombre d'arcs négatifs de A est pair (*resp.* impair).

Comme l'ensemble $\{0,1\}^n$ des états globaux d'un réseau R_n de taille finie est fini, chacun de ses états $x \in \{0,1\}^n$ vérifie nécessairement $\exists t, p \in \mathbb{N},\ F^{t+p}(x) = F^t(x)$. On appelle **attracteur** ou **cycle limite** de R_n un ensemble d'états de la forme $\{F^{t+k}(x) \mid k \in \mathbb{N} \text{ et } \exists p \in \mathbb{N},\ F^{t+p}(x) = F^t(x)\}$. La période de cet attracteur est le plus petit entier p vérifiant $\forall k \in \mathbb{N}$, $F^{t+k+p}(x) = F^{t+k}(x)$. Les états appartenant à un attracteur de période 1 sont appelés des **points fixes**. Le nombre d'attracteurs de période p de R_n est noté $\mathtt{A}_p(R_n)$.

3. Dynamique de circuits d'automates booléens mis à jour en parallèle

Dans l'étude que nous résumons ici, deux quantités nous ont intéressées : le nombre d'attracteurs de période p d'un circuit d'automates booléens mis à jour en parallèle ($\mathtt{A}_p(R_n)$) et le nombre *total* de ses attracteurs ($\sum_p \mathtt{A}_p(R_n)$). Nous avons tout d'abord remarqué et prouvé en prolongeant un résultat de Goles *et* *al.* **[1]** que : *(i)* tout état d'un tel réseau appartient nécéssairement à un attracteur et, *(ii)* les périodes des attracteurs sont les entiers p divisant la taille n du circuit, dans le cas d'un circuit positif, ou divisant $2n$ sans diviser n (*i.e.,* p est un diviseur pair de $2n$ tel qu'il existe un entier impair q vérifiant $2n = q \times p$) dans le cas d'un circuit négatif de taille n. De plus, le nombre d'attracteurs de chaque période pour un circuit d'automates booléens donné, soit positif, soit négatif, ne dépend pas du nombre (à condition qu'il soit soit pair soit impair) d'arcs négatifs dans le circuit associé ni de leur répartition le long de celui-ci. Autrement dit, si $R_n = (\mathbb{C}_n, F)$ et $R'_n = (\mathbb{C}'_n, H)$ sont deux circuits d'automates booléens de taille n et de même signe, alors $\forall p \in \mathbb{N}$, $\mathtt{A}_p(R_n) = \mathtt{A}_p(R'_n)$. Ainsi, on note $\mathtt{A}^+_p = \mathtt{A}_p(R_p)$ pour tout circuit d'automates booléens *positif* R_p de taille p et $\mathtt{A}^-_{2p} = \mathtt{A}_{2p}(R_p)$ pour tout circuit d'automates booléens *négatif* R_p de taille p. En comparant le comportement dynamique de circuits d'automates booléens de tailles différentes mais de même signe, on obtient le lemme suivant :

***Lemme 3.1.* —** *Soit R_n un circuit d'automates booléens de taille n. Si R_n est positif, alors, pour tout diviseur p de n, $\mathtt{A}_p(R_n) = \mathtt{A}^+_p$. Si R_n est négatif, alors, pour tout diviseur p de $n = p \times q$ où q est impair, $\mathtt{A}_{2p}(R_n) = \mathtt{A}^-_{2p}$.*

Ainsi, nous en déduisons notre résultat principal concernant le comportement dynamique de circuits d'automates booléens mis à jour en parallèle :

***Théorème 3.2.* —** *Soit $\mathtt{A}^+_n$ (resp. $\mathtt{A}^-_n$) le nombre d'attracteurs de période p d'un circuit d'automates booléens positif (resp. négatif) dont la taille n est un multiple de p (resp. dont la taille n vérifie $2 \cdot n = p \cdot q$ où $q \in \mathbb{N}$ est impair). Soit $\mathtt{T}^+_n$ (resp. $\mathtt{T}^-_n$) le nombre total d'attracteurs distincts d'un circuit d'automates booléens positif (resp. négatif). Alors, $\forall n \in \mathbb{N}$,*

(i) $2^n = \sum_{p|n} \mathtt{A}^+_p \times p$

(ii) $\mathtt{A}^+_n = \frac{1}{n} \cdot \sum_{p|n} \mu(\frac{n}{p}) \cdot 2^p$

(iii) $\mathtt{T}^+_n = \frac{1}{n} \cdot \sum_{p|n} \psi(\frac{n}{p}) \cdot 2^p$

(iv) $2^n = \sum_{\text{odd } q|n} \mathtt{A}^-_{2n/q} \times 2n/q$

(v) $\mathtt{A}^-_{2n} = \frac{1}{2n} \cdot \sum_{\text{odd } q|n} \mu(q) \cdot 2^{n/q}$

(vi) $\mathtt{T}^-_n = \frac{1}{2n} \cdot \sum_{\text{odd } p|n} \psi(\frac{n}{p}) \cdot 2^p$

où μ est la fonction de Möbius et ψ est l'indicatrice d'Euler.

Les suites d'entiers $(\mathtt{A}^+_n)_{n\in\mathbb{N}}$, $(\mathtt{T}^+_n)_{n\in\mathbb{N}}$, $(\mathtt{A}^-_{2n})_{n\in\mathbb{N}}$ et $(\mathtt{T}^-_n)_{n\in\mathbb{N}}$ mentionnées dans le théorème 3.2 sont en réalité déjà connues **[6]** mais dans le cadre de problèmes combinatoires differents de celui qui nous intéresse. Par exemple, les trois premières de ces suites suites sont intimement liées aux colliers de perles et aux mots de Lyndon **[7]** et les suites $(\mathtt{T}^+_n)_{n\in\mathbb{N}}$ et $(\mathtt{T}^-_n)_{n\in\mathbb{N}}$ comptent toutes deux le nombre de sequences distinctes produites par des *machines à registres binaires décalantes*[1]. Nous avons étudié les isomorphismes existant entre ces différents problèmes pour en tirer de nouvelles manières de formaliser la combinatoire de la dynamique de circuits d'automates booléens. En particulier, compter le nombre d'attracteurs d'un circuit d'automates

[1]En anglais : "binary shift register machines".

booléens $\mathbb{C}_n$ en parallèle peut être vu comme un problème de comptage du nombre d'orbites des éléments de l'ensemble $\mathbb{F}_2^n$ sous l'action du groupe cyclique d'ordre n engendré par la permutation $\pi = (1, \ldots, n)$.

4. Modes d'itération bloc-séquentiels quelconques

Soit $\mathbb{C}_n = (V, A)$ un circuit d'automates booléens. Un mode d'itération bloc-séquentiel quelconque est une fonction $s : V \to \{1, \ldots, n\}$ qui donne une date de mise à jour à chaque sommet $i \in V$ au sein d'une étape de temps, *i.e.*, entre la date t et la date $t + 1$, un sommet i est mis à jour à la date $t + 1/s(i)$. On définit $inv(s) = \{(i, i+1) \mid s(i) < s(i+1)\}$ **l'ensemble des inversions** de s et le nouvel ensemble d'arcs suivant : $A^s = \{(i, j) \mid s(j) \leq s(i) \text{ et } \forall i < k \leq j,\ (k, k+1) \in inv(s)\}$. Pour obtenir un résultat similaire au théorème 3.2 dans le cas d'un mode d'itération bloc-séquentiel quelconque, nous avons montré qu'itérer un circuit $\mathbb{C}_n$ avec un mode d'itération s revient, en termes de combinatoire, à itérer en parallèle le circuit plus petit dont l'ensemble des arcs est A^s. Nous avons ainsi constaté que les modes d'itération bloc-séquentiels qui ont le même ensemble d'inversions induisent une même dynamique et qu'au contraire deux modes d'itération n'ayant pas le même ensemble d'inversions n'induisent pas la même dynamique.

5. Conclusion

En ce qui concerne la dynamique des circuits d'automates booléens itérés suivant des modes d'itération bloc-séquentiels quelconques, la plupart des problèmes combinatoires a donc été traitée. Une question importante reste toutefois en suspens. Elle concerne la taille des ensembles de modes d'itération induisant un même comportement dynamique. Un autre problème qui découle naturellement du travail présenté ici est celui de la relation existant entre la dynamique d'un réseau ayant une structure quelconque et celle d'un circuit d'automates booléens. Résoudre ces deux problèmes nous permettrait par exemple d'expliquer pourquoi, d'après les résultats simulatoires présentés dans sa thèse **[2]**, A. Elena trouve que les réseaux qui n'ont que des points fixes et aucun cycle limite de période plus grande que 1 quelque soit le mode d'itération sont les plus nombreux.

Références

[1] Goles, E. and Fogelman-Soulie, F. and Weisbuch, G. *Specific roles of different Boolean mappings in random networks* , Bulletin of Mathematical Biology, 1982

[2] Elena, A. *Robustesse des réseaux d'automates booléens à seuil aux modes d'itération. Application à la modélisation des réseaux de régulation génétique*, Thèse à l'Université Joseph Fourier, Grenoble, 2009

[3] Thomas, R. *Boolean formalisation of genetic control circuits*, Journal of Theoretical Biology, 1973

[4] Thomas, R. *On the relation between the logical structure of systems and their ability to generate multiple steady states or sustained oscillations*, Springer Series in Synergetics, 1981

[5] Vasiga, T. and Shallit, J. *On the iteration of certain quadratic maps over GF(p)*, Discrete Mathematics, 2004

[6] N. J. A. Sloane *The On-Line Encyclopedia of Integer Sequences*, http ://www.research.att.com/ njas/sequences/

[7] C. Reutenauer, *Mots circulaires et polynômes irréductibles*, Annales des Sciences Mathématiques du Québec, *vol.* 12, pp. 275-285, 1988

Mathilde Noual

Laboratoire d'Informatique du Parallélisme (UM 16), École normale supérieure de Lyon, 69007 Lyon, France, IXXI, Institut rhône-alpin des systèmes complexes, 69007 Lyon, France.

E-mail : `Mathilde.Noual@ens-lyon.fr`