

# Un modello geometrico del DNA in stampa 3D

Vincenzo Manca

Giuseppe Scollo

Università di Verona

Università di Catania

Dipartimento di Matematica e Informatica, Mathesis Catania, 1 Dicembre 2020

## Indice

1. Un modello geometrico del DNA in stampa 3D
2. Perché un modello geometrico del DNA in stampa 3D?
3. Prima risposta: le ragioni della vita
4. Progetto matematico: geometria solida costruttiva
5. Programmazione funzionale in OpenSCAD
6. Obiettivo e requisiti del progetto
7. Vincoli realizzativi sul progetto
8. Modelli e prototipi
9. Lavoro in corso
10. Parametri della geometria del modello
11. Dettagli matematici: teorema della bisettrice
12. Butterflies con ali appaiate e concatenabili
13. Connettori di appaiamento
14. Rappresentazione geometrica della complementarità
15. Modelli del DNA nelle mani dei bimbi
16. Modelli del DNA nelle teste degli adolescenti
17. Conclusioni?

Perché un modello geometrico del DNA in stampa 3D?

Le domande sono due:

- perché un modello geometrico, astratto del DNA?
- perché materializzare il modello in stampa 3D?

una risposta alla prima domanda, in breve:

*capire* perché il DNA è fatto com'è fatto

la risposta alla seconda domanda segue da quella alla prima e da una nota massima di Confucio:

... se faccio, capisco

chi insegna ne apprezza il corollario: se faccio fare, faccio capire

Prima risposta: le ragioni della vita

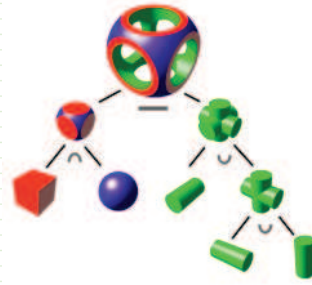
ce le spiega Vincenzo Manca:

## Explaining DNA

### CSG: algebra dei volumi, costruiti

- a partire da volumi elementari, detti *primitive* (parallelepipedo, cilindro, sfera ecc.)
- mediante operazioni booleane: unione, sottrazione, intersezione
- e trasformazioni: traslazione, rotazione, riflessione, ridimensionamento ecc.

**esempio** tratto da Wikipedia: Geometria solida costruttiva



albero CSG delle operazioni di costruzione di un solido

### Programmazione funzionale in OpenSCAD

concettualmente, la CSG è molto semplice, ma come si può usarla in pratica?

il software OpenSCAD interpreta un linguaggio matematico che è anche un linguaggio di programmazione di alto livello, basato sul concetto matematico di **funzione**

il manuale (in inglese) è di agevole consultazione dall'indice Cheat Sheet

la documentazione sul sito fornisce anche molte guide introduttive

l'interprete OpenSCAD fa essenzialmente due cose:

- **visualizza** il modello descritto, e permette manipolazioni della visualizzazione, senza modificare la descrizione: v. programma per l'esempio precedente
- **traduce** la descrizione funzionale del modello in **STL**, un linguaggio di livello intermedio che rappresenta come maglie (*mesh*) di triangoli le superfici che delimitano il volume descritto

il modello intermedio STL è poi traducibile nel codice di più basso livello **Gcode** da un software **slicer**, impostando i parametri che dipendono dalla macchina, dal materiale di stampa, dalla qualità di stampa desiderata ecc.

## Obiettivo e requisiti del progetto

**Obiettivo:** realizzare un modello concreto del DNA, adatto a finalità didattiche, basato solo su proprietà geometriche e informazionali del DNA

### Requisiti:

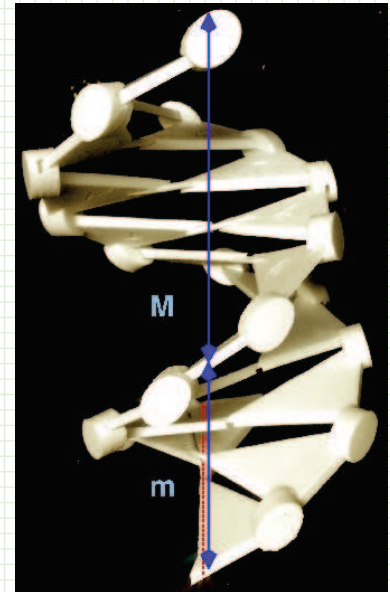
- componibilità
- scalabilità, fattore di scala globale
- parametricità, con valori dei parametri corrispondenti alla geometria reale del DNA, v. Barocci (2014)

componibilità → due tipi interdipendenti di modelli:

- visuali
- di stampa

componibilità ← scenari d'uso formativo:

molteplici esercizi di composizione, v. più avanti



1° prototipo di modello DNA in stampa 3D

## Vincoli realizzativi sul progetto

le risorse disponibili, macchina e materiali di stampa, impongono alcune limitazioni che influiscono sulla geometria del modello

macchina a estrusore singolo: non è disponibile l'estrusione di un supporto in materiale idrosolubile (e.g. PVA) a sostegno di parti sospese

→ angolo di sporgenza  $< 50^\circ$

materiali disponibili: sia rigidi che flessibili, per motivi diversi impongono di evitare parti troppo sottili, specialmente se sottoposte a sollecitazioni dall'uso prevedibile

- parti sottili fragili se il materiale è rigido
- parti sottili cedevoli se il materiale è flessibile

si deve tener conto di aspetti fisici dei materiali:

- nella geometria del modello: tolleranze degli incastri
- nell'impostazione dei parametri di stampa nello slicer, v. qui appresso

## Modelli e prototipi

una galleria in evoluzione:



prototipo in Kyotoflex+PLA

tre prototipi dallo stesso modello

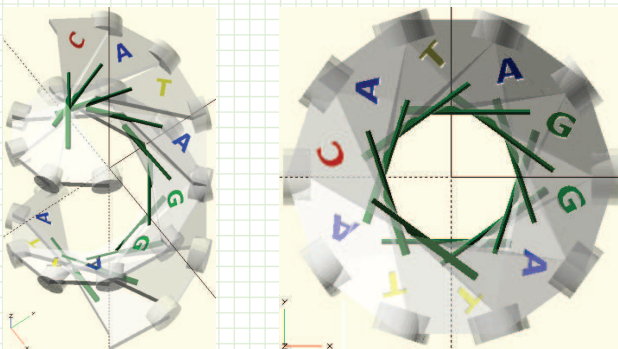
modello a colori, TPU

usabilità e durata dei componenti dipendono criticamente da fattori fisici:

- scelta dei materiali di stampa: rigidi vs. flessibili, bioplastici o meno
- ottimizzazione dei parametri di stampa, e.g. quota di riempimento dei volumi

## Lavoro in corso

esperimento: stampare a colori le etichette



modello CATAGGATTA con etichette a colori

prime stampe:



due coppie concatenate di monomeri appaiati

dopo le prime stampe mostrate, la macchina si è bloccata ...

- fenomeno frequente con i materiali flessibili e/o elastici
- specialmente se alimentano una macchina maltrattata

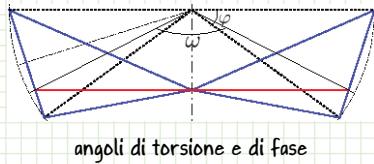
a ogni modo, la riparazione è in corso :)

## Parametri della geometria del modello

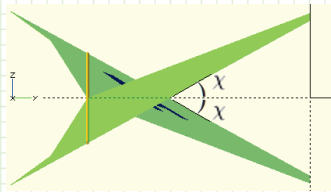
corrispondenza con misure note della geometria del DNA reale

fonti: Barocci (2014), Sinden (1994)

forme diverse di DNA, differenti nei valori dei parametri; misure della forma B, la più comune e più stabile, nella versione *textbook*:



- $r$ : raggio del cilindro di avvolgimento della doppia elica
- $\varphi$ : angolo di torsione:  $36^\circ$
- $\omega$ : angolo di fase:  $126^\circ$



angoli di ascesa e di inclinazione

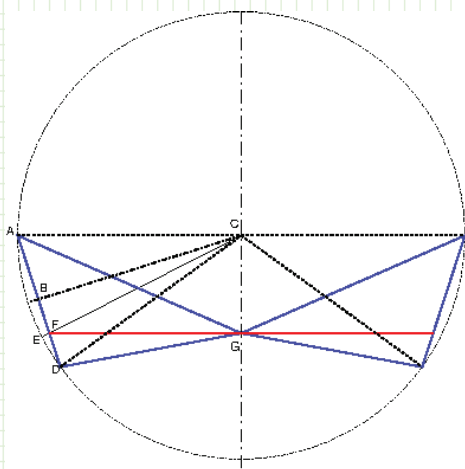
- $\chi$ : angolo di ascesa (di ogni monomero nella concatenazione):  $30^\circ$
- $\psi$ : angolo di inclinazione (dell'appaiamento):  $\sim -6^\circ$  (dipende dagli altri parametri)

## Dettagli matematici: teorema della bisettrice

Euclide, *Elementi*, Prop. VI.3

che ci azzecca qui?

calcolo dell'intercetta dell'asse di appaiamento sul lato di concatenazione dei triangoli



posizione del vertice di appaiamento G

$$|BF|/|FD| = |BC|/|CD| = \cos(\varphi/2)$$

ponendo  $h = |AB| = |BD|$ ,  $k = |BF|$ , si ha:

$$k/(h-k) = \cos(\varphi/2)$$

da cui ponendo  $f = |AF|/|AD|$  si deduce

$$f = (h+k)/2h = 1 - 1/2(1 + \cos(\varphi/2))$$

$$\text{e anche } |GC| = f r \sin(\varphi)$$

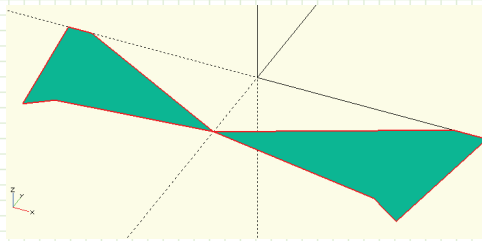
*esercizio*: un'espressione equivalente a questa è:

$$|GC| = r \cos(\varphi/2) \sin(3\varphi/4) / \cos(\varphi/4)$$

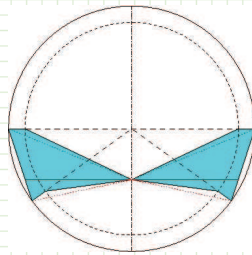
$$\text{esercizio: } |FG| = r(1 - f(1 - \cos(\varphi)))$$

## Butterflies con ali appaiate e concatenabili

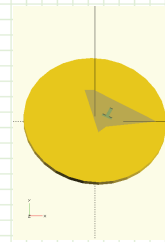
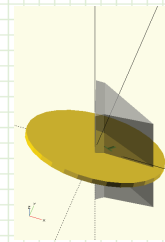
verso della concatenazione: da triangoli a pentagoni



butterfly 2D



progetto della proiezione 2D delle butterfly



costruzione CSG di un'ala di butterfly, con incisione di etichetta

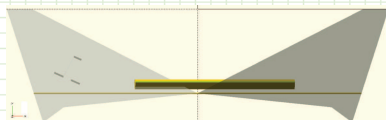
l'ordine di composizione delle rotazioni applicate al disco è importante

in questo caso è:  $R_y(\psi) \cdot R_x(\chi) \cdot R_z(\varphi/2)$

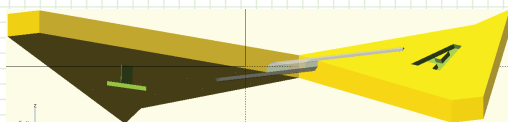
perché serve anche la rotazione del cilindro rispetto al suo asse (z)?

## Connettori di appaiamento

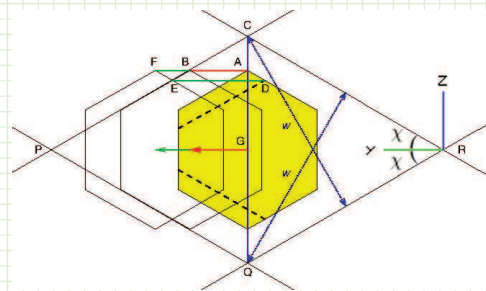
perforare le punte delle ali per conmetterle? No grazie... perché?



traslazione del connettore parallela all'asse di appaiamento

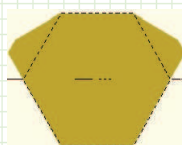


appaiamento con connettore traslato nel solco maggiore

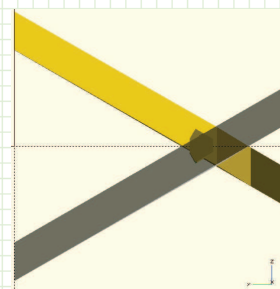


sezione per il calcolo della traslazione

un connettore a sezione esagonale regolare ha 6 simmetrie... troppe!



sezione del connettore estesa per l'unicità dell'inserimento



inserimento unico del connettore con sezione estesa

## Rappresentazione geometrica della complementarità

una caratteristica geometrica propria delle basi monomeriche del DNA ne limita le possibilità di appaiamento

le purine (G, A) hanno lunghezza radiale maggiore delle pirimidine (C, T)

inoltre, le masse molecolari dei quattro tipi di basi sono diverse

tuttavia, le somme delle coppie di basi (G,C), (A,T) differiscono di poco (~ 1%)

nel modello, le lunghezze delle scanalature per l'appaiamento nei quattro tipi di ali corrispondono all'ordine delle masse molecolari, con

$$\triangleright l_G > l_A > l_T > l_C, e$$

$$\triangleright l_G + l_C = l_A + l_T$$

pertanto, i connettori di appaiamento hanno tutti la stessa lunghezza

## Modelli del DNA nelle mani dei bimbi

un modello accattivante del DNA, facile da realizzare:

Origami DNA

però non si presta all'esecuzione di *operazioni* sul DNA, che stimolano l'attività creativa  
il modello non è *componibile*

esercizi di composizione, per difficoltà crescente:

- $\triangleright$  appaiamento di monomeri, o *butterfly assembly*
- $\triangleright$  concatenazione di monomeri in singola elica
- $\triangleright$  concatenazione di due o più butterfly
- $\triangleright$  duplicazione a stampo
- $\triangleright$  ricombinazione di DNA



al livello superiore dell'istruzione, questo lavoro si presta a molteplici attività

- il modello matematico può costituire un utile caso di studio nell'apprendimento di geometria dei solidi e trigonometria
  - v. per esempio gli esercizi qui proposti
- nella formazione informatica, l'acquisizione di competenze in un linguaggio di programmazione funzionale, di matematica costruttiva, può avviare la voga attuale per il "coding" verso una migliore consapevolezza di ciò che si fa
- in pratica, il programma sorgente del modello può essere impiegato per
  - *ispezione del codice* e studio della documentazione
  - *produzione degli artefatti* materiali in un laboratorio di stampa 3D
  - *meglio ancora, sperimentazione* di modifiche per esplorare geometrie diverse del modello e soluzioni alternative
- in un laboratorio di stampa 3D meritano attenzione anche le attività di scelta di materiali alternativi e di *ottimizzazione* dei parametri di stampa, da adattare a macchine diverse

Conclusioni?

work in progress!

domande?

la discussione è aperta