

Explaining DNA

Vincenzo Manca

Università di Verona

Giuseppe Scollo

Università di Catania

Catania-Mathesis, 1 Dicembre 2020

Perché il DNA è fatto così?

- Me ne occupo dal 1994 (Adleman, DNAC, > 10 pubblicazioni).
- Ogni sua caratteristica strutturale dipende dalla sua funzione:
- **1.** conservare informazione biologica in modo compatto;
- **2.** renderla accessibile (in lettura e trascrizione su richiesta);
- **3.** duplicarsi in modo efficiente → VITA

Vincenzo Manca

Infobiotics

The book presents topics in discrete biomathematics. Mathematics has been widely used in modeling biological phenomena. However, the molecular and discrete nature of basic life processes suggests that their logics follow principles that are intrinsically based on discrete and informational mechanisms. The ultimate reason of polymers, as key element of life, is directly based on the computational power of strings, and the intrinsic necessity of metabolism is related to the mathematical notion of multiset.

The switch of the two roots of bioinformatics suggests a change of perspective. In bioinformatics, the biologists ask computer scientists to assist them in processing biological data. Conversely, in infobiotics mathematicians and computer scientists investigate principles and theories yielding new interpretation keys of biological phenomena. Life is too important to be investigated by biologists alone, and though computers are essential to process data from biological laboratories, many fundamental questions about life can be appropriately answered by a perspicacious intervention of mathematicians, computer scientists, and physicists, who will complement the work of chemists, biochemists, biologists, and medical investigators.

The volume is organized in seven chapters. The first part is devoted to research topics (Discrete information and life, Strings and Genomes, Algorithms and Biorhythms, Life Strategies), the second one to mathematical backgrounds (Numbers and Measures, Languages and Grammars, Combinations and Chances).

ISSN 2194-7287

ISBN 978-3-642-36222-4



9 783642 362224

springer.com

Manca



Infobiotics

Vincenzo Manca

EMERGENCE,
COMPLEXITY
AND
COMPUTATION



Infobiotics

Information in Biotic Systems

 Springer

~3,8 GYA

- La vita nasce quando si realizzano biopolimeri informativi (stringhe, parole, *verba*)
- RNA, ribonucleotidi concatenati (entro membrane)
- Stringhe e multisemi biomolecolari
- Si stabilizza quando si passa al DNA

UN

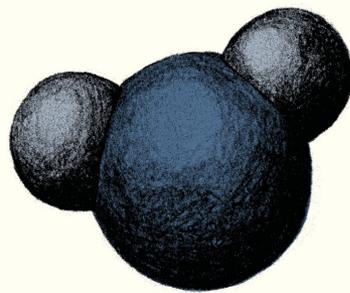
Vincenzo Manca
Marco Santagata

MERAVI
GLIOSO



ACCIDENTE

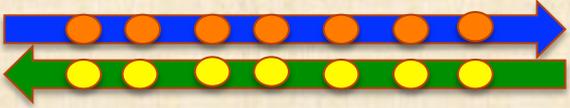
La nascita della vita



Disegni di
Guido Scarabottolo

MONDADORI

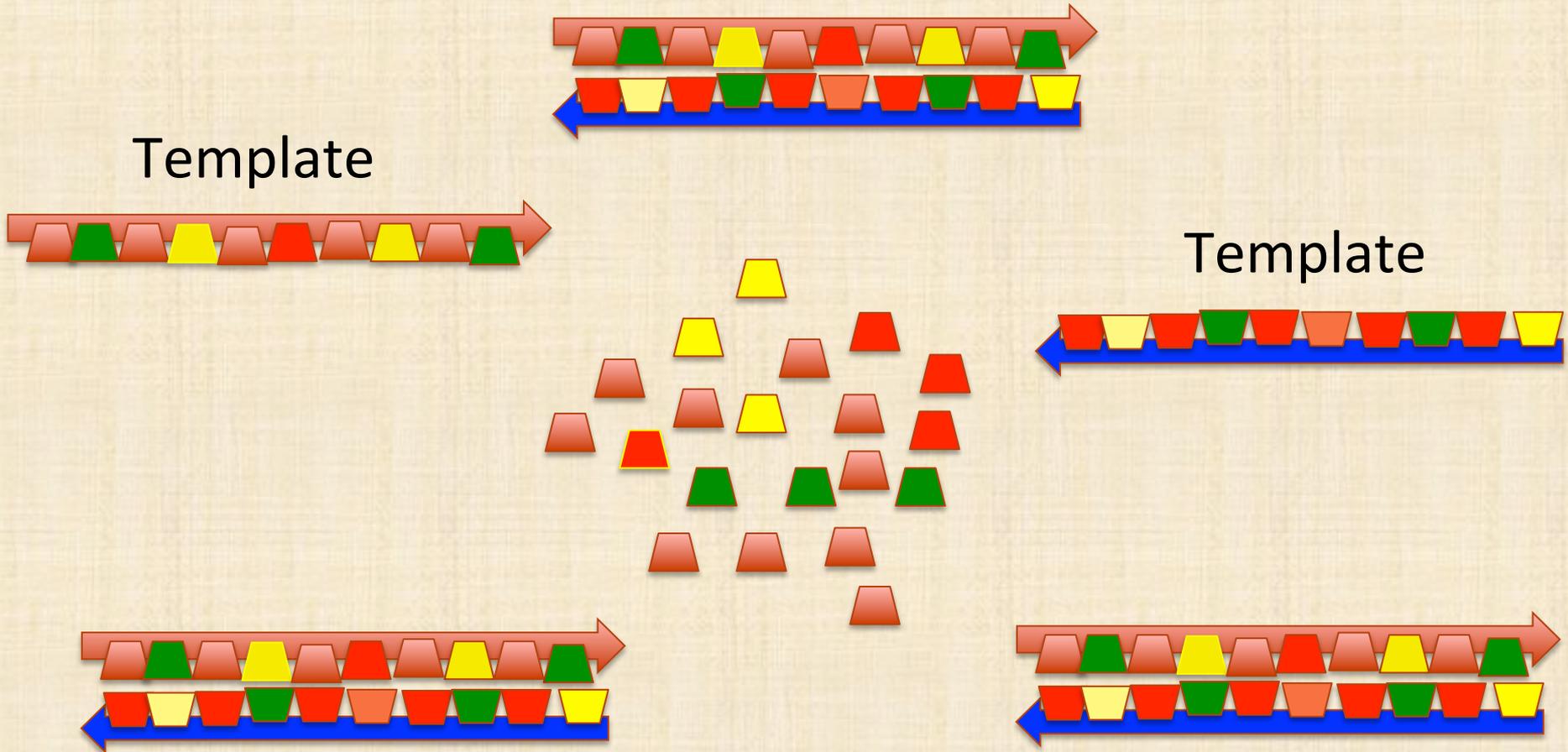
DNA

- Bilinearità
 - Complementarità
 - Antiparallelismo
- 
- The diagram illustrates a DNA double helix. It consists of two horizontal strands. The top strand is blue and has an arrow pointing to the right, indicating the 5' to 3' direction. The bottom strand is green and has an arrow pointing to the left, indicating the 3' to 5' direction. This demonstrates antiparallelism. Between the two strands, there are pairs of complementary base pairs: orange circles on the top strand are paired with yellow circles on the bottom strand, and vice versa. This illustrates the principle of complementarity.
- Duplicabilità efficiente (Template driven)
 - Avvolgimento compatto
 - Lettura integrata di porzioni non contigue
 - Bistabilità (Memorizzazione/Attivazione)

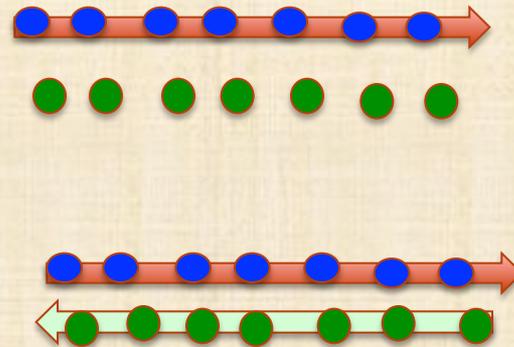
Algoritmi di duplicazione

Duplicazione bilineare

complessità sublineare



Primum : Appaiare
Deinde : Concatenare

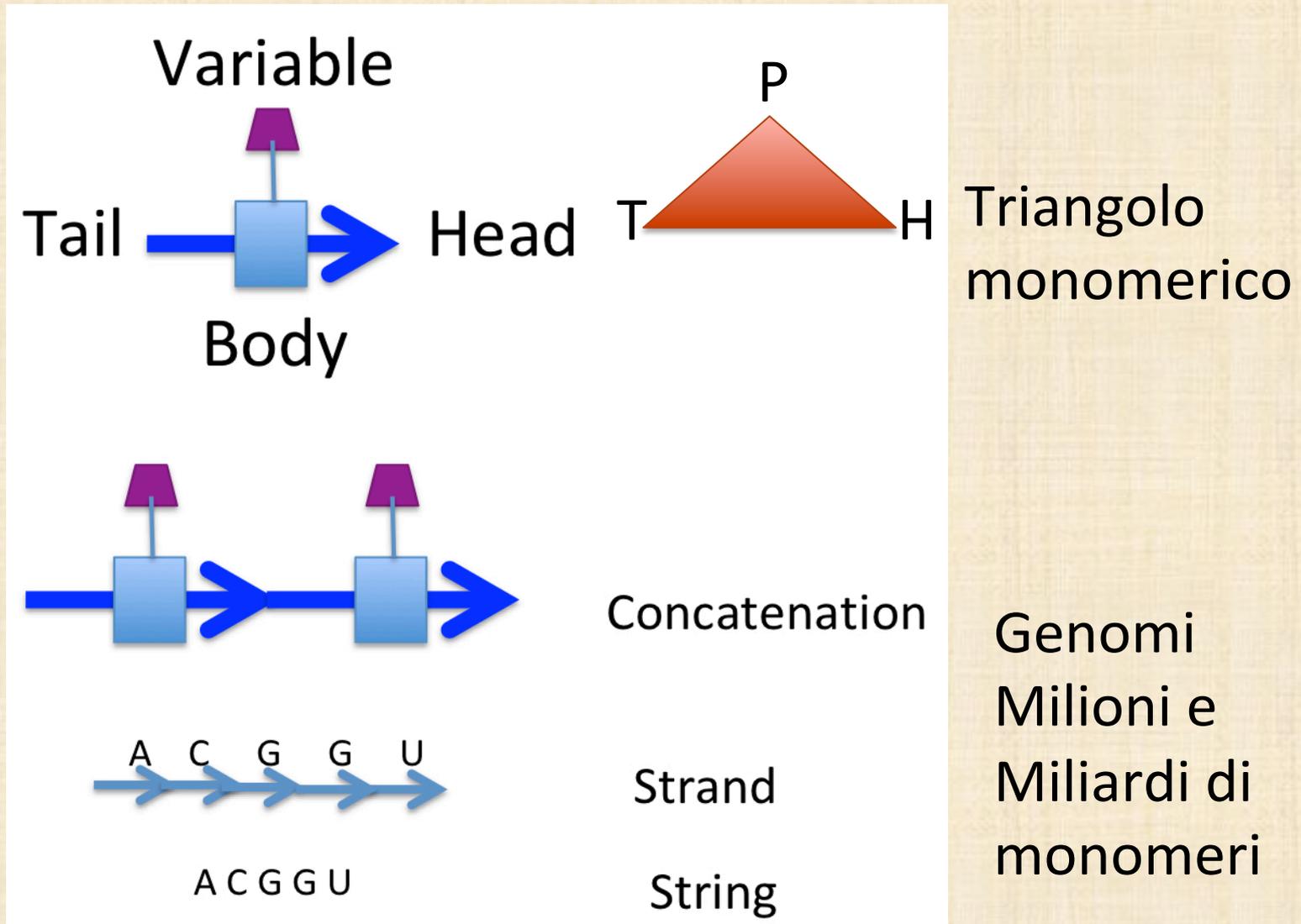


Meccanismo basilare, Proto-replicazione
precedente all'emergere di enzimi specifici:
Polimerasi, Ligasi, Elicasi, Topoisomerasi, ...

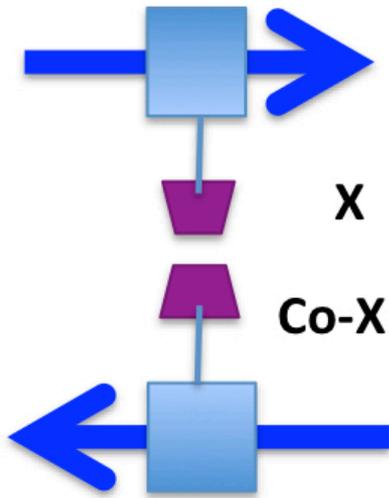
L'identificazione dei principi, sviluppata in ben oltre 10 anni di analisi, si è definita con il **modello astratto dei triangoli monomerici (2005)**, in cui concatenazione e appaiamento emergono nella loro essenzialità, astraendo da ogni altra caratteristica delle molecole monomeriche.

Tuttavia, la precisazione di alcuni principi (e dei loro rapporti) si è ottenuta durante la costruzione del modello geometrico a **stampa 3D** dei triangoli monomerici (appaiati e concatenati).

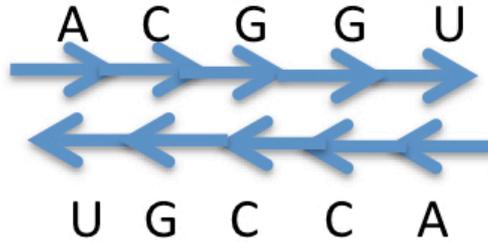
Monomeri e Polimeri Informativi



Appaiamento



Co-Co-X = X

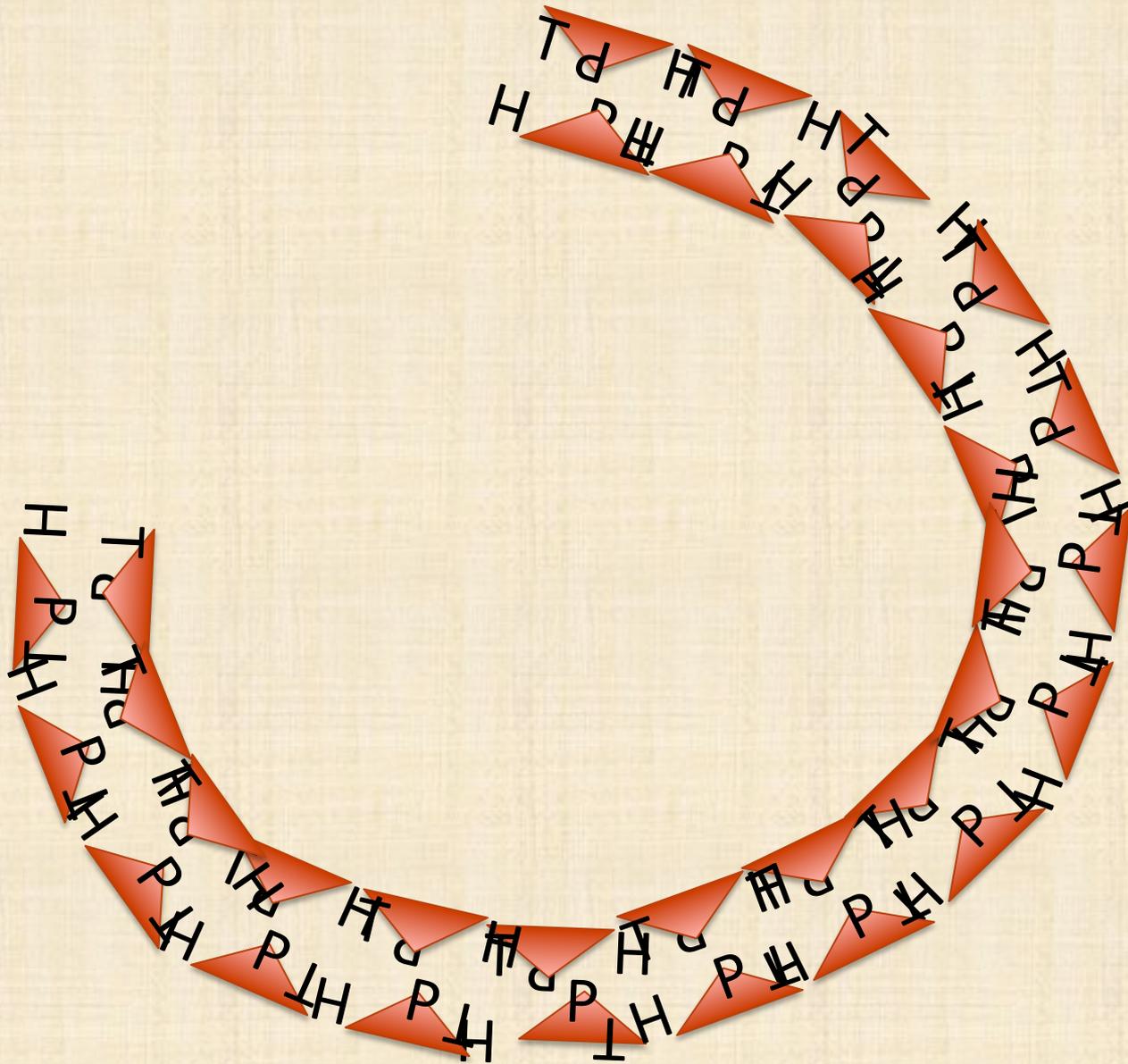


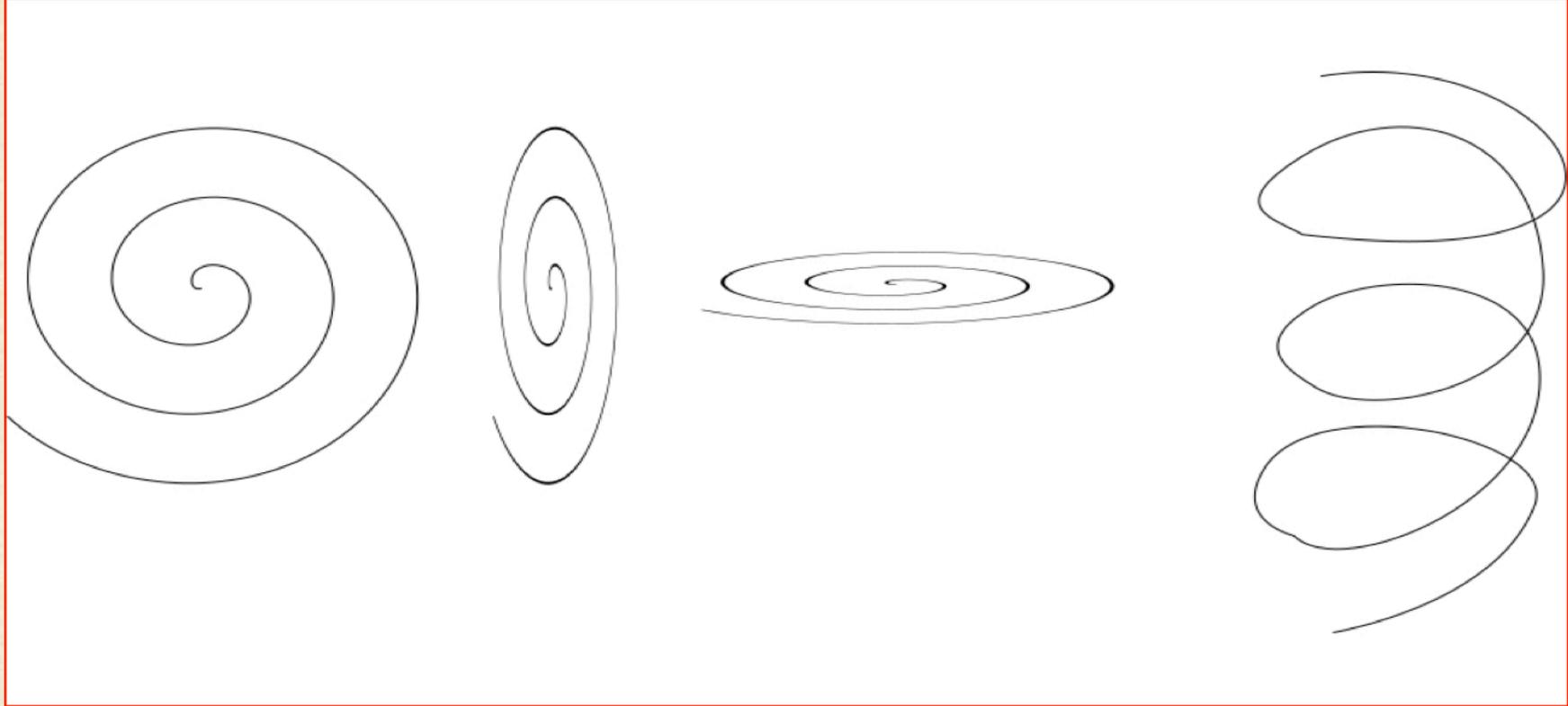
U = co-A

C = co-G

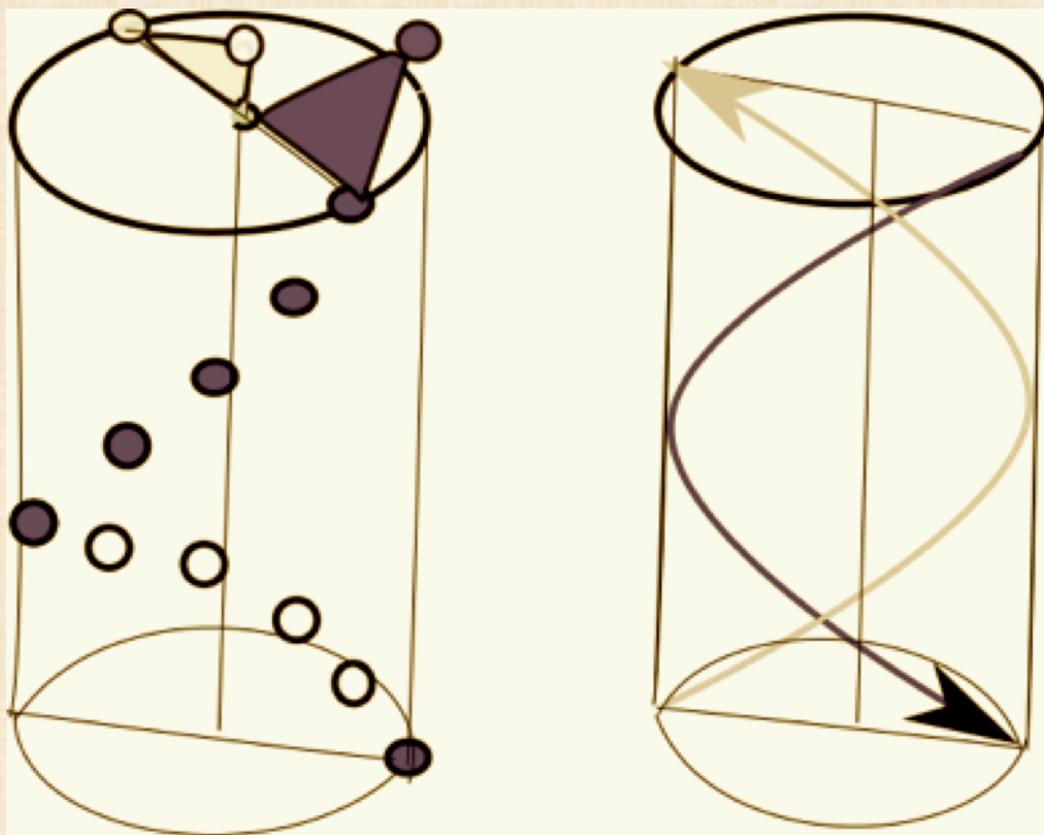
A = co-U

G = co-C

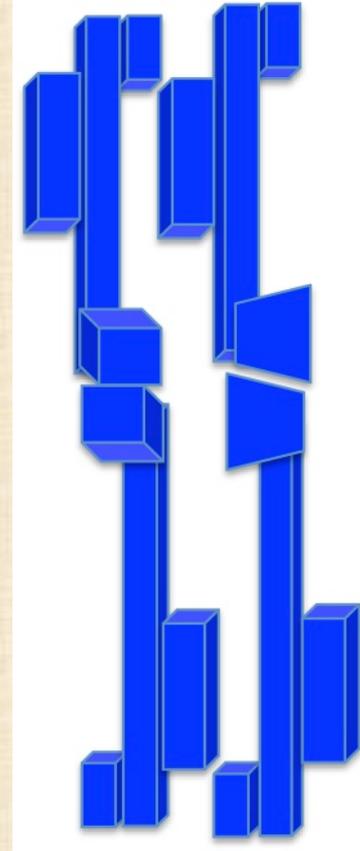
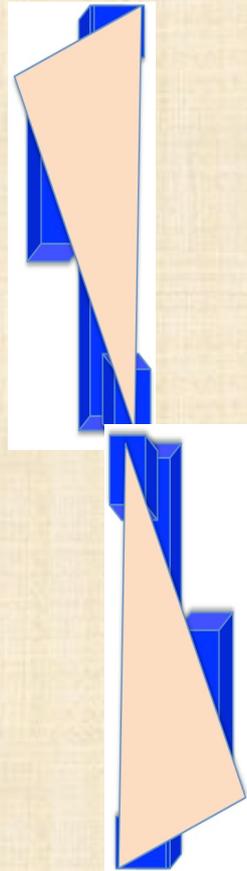




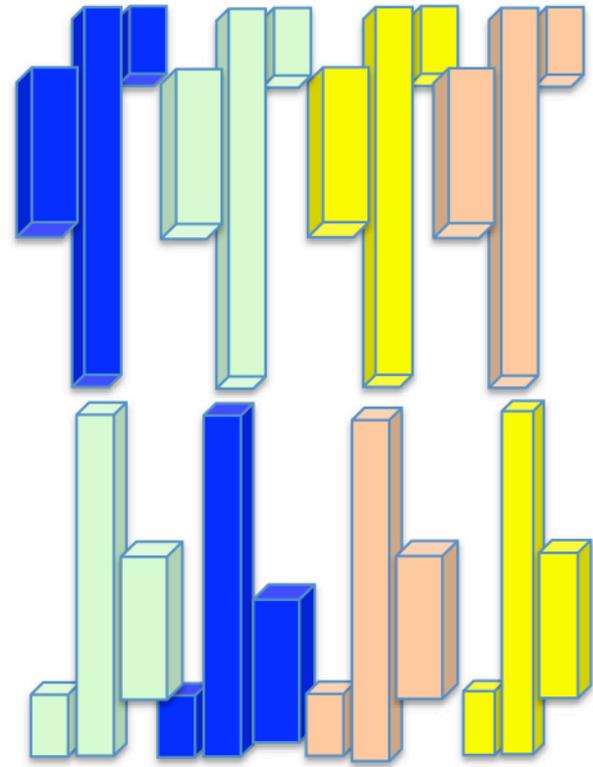
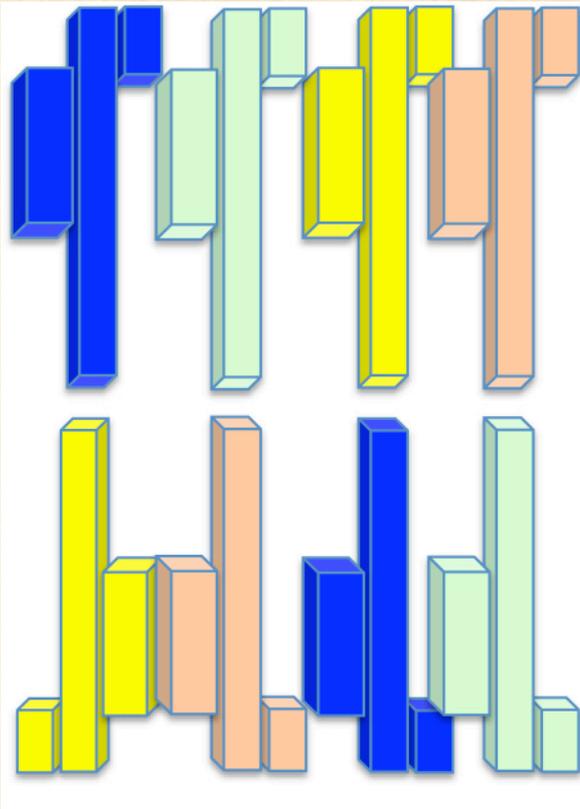




Appaiamenti corretti



Appaiamenti scorretti





DNA more geometrico demonstratum

Proposizione 1: Una doppia struttura lineare si duplica in tempo lineare (o sublineare) con duplicazione a stampo.

Proposizione 2: La duplicazione a stampo richiede un “appaiamento debole” dei filamenti (legami non covalenti).

Proposizione 3: L'appaiamento debole dei filamenti richiede la complementarità.

Proposizione 4: Una duplicazione a stampo richiede la chiralità dei monomeri.

Proposizione 5: Una distribuzione omogenea dei monomeri nei due filamenti richiede la loro omochiralità.

Proposizione 6: La lettura di stringhe costituite da porzioni non contigue di un filamento richiede la distinguibilità locale dei filamenti.

Proposizione 7: Filamenti appaiati di monomeri omochirali sono localmente distinguibili se i filamenti sono antiparalleli.

Proposizione 8: Un avvolgimento ad angoli di concatenazione costante deve avere forma elicoidale.

Proposizione 9: La determinazione di un verso preferenziale di lettura dell'elica richiede una asimmetria dei solchi.

Proposizione 10: Il DNA è bistabile: Archiviazione, Elaborazione. La bistabilità richiede legami di appaiamento deboli in fase di elaborazione e forti in fase di archiviazione.

Proposizione 11: La bistabilità si realizza con la forma a (doppia) elica, suscettibile di configurazione avvolta e distesa.

Proposizione 12: La bistabilità richiede che l'appaiamento sia interno al cilindro elicoidale.