Una sopa primitiva de ribozimas

Las aventuras de Leti, Yestin, Ceci, Flor y Meli entendiendo al ARN..

BIOMAT 2016

¿Es posible que en el caldo primitivo y prebiótico existieran moléculas de ARN capaces de almacenar información y competir por "reproducirse"?

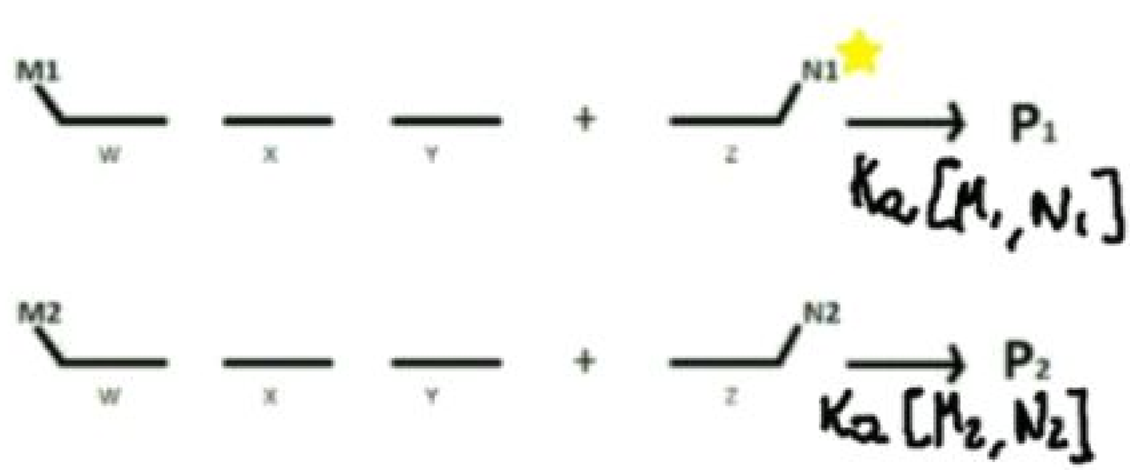
- Primero un poco de BIOLOGÍA...

El ARN tiene ésta pinta:

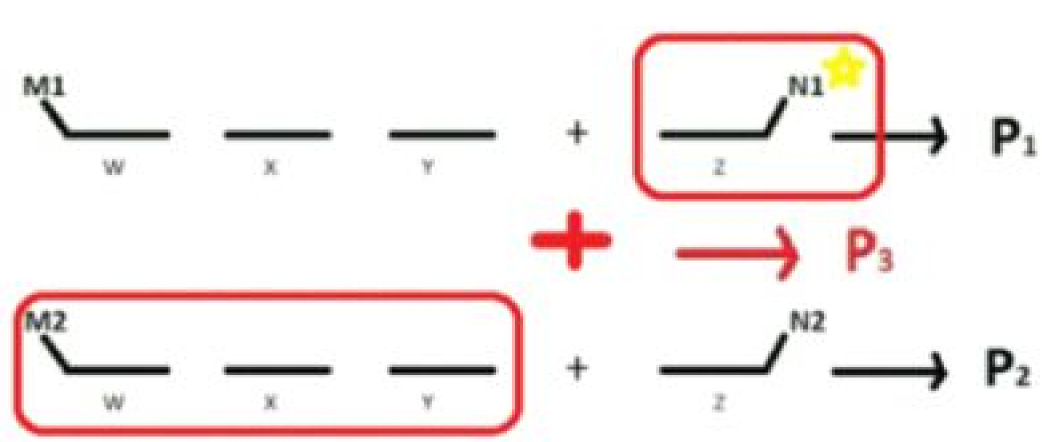
El ARN puede combinar sus NUCLEÓTIDOS con los de otra cadena. Pero algunos nucleótidos se "gustan" entre sí más que otros:
- A se gusta más con U
- C se gusta más con G

Estudiamos las velocidades a las que ocurre una reacción entre moléculas de ARN parecidas compitiendo por un mismo ARN

Reacción genérica en estudio:



Reacción en la COMPETENCIA:



En honor a un pobre becario...

Table 1. Rate constants, k_a (min^{-1}), for the 16 genotype variations of WXY.

Genotype	k_a (min^{-1})
CG	0.0415
AU	0.0319
UA	0.0197
GC	0.0125
GU	0.0091
AC	0.0069
UG	0.0049
UC	0.0038
UU	0.0022
CA	0.0020
CC	0.0016
GG	0.0006
GA	0.0005
AA	0.0004
CU	0.0004
AG	0.0001

Repasemos,

	$M_1 N_1$	$M_2 N_2$
$M_1 N_1^*$	$a = K_a[M_1 N_1]$	$b = K_a[M_2 N_1]$
$M_2 N_2^*$	$c = K_a[M_1 N_2]$	$d = K_a[M_2 N_2]$

$$\Rightarrow A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$$

con $M_i \, , N_i = \{ A, U, G, C \}$

A partir de la ecuación del replicador para una matriz de 2x2,

$$\dot{x} = x(1-x)\left[(a-b-c+d)x + b - d\right]$$

los equilibrios son:

$$x = 0 \quad , \quad x = 1$$

$$x^* = \frac{\beta}{\alpha+\beta} \quad , \quad \begin{cases} \alpha = a - c \\ \beta = d - b \end{cases}$$

Que suerte que tenemos todos los valores de los Ka!! :)

Estudiamos los siguientes casos:

CG + GA, GU + AA, AC + UU, UC +AA y AU + UC.

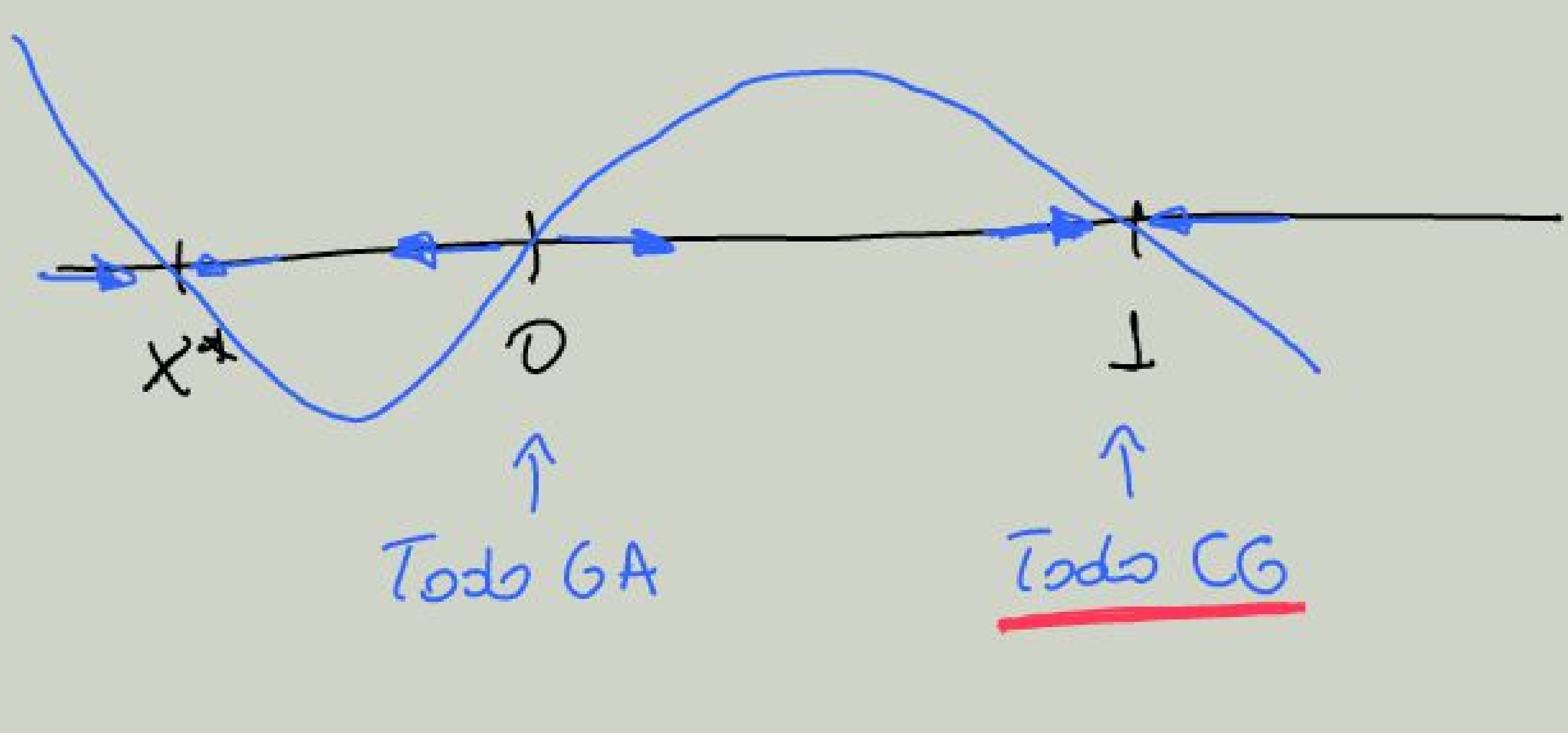
* CG + GA

	CG	GA
CG*	Ka(CG)	Ka(GG)
GA*	Ka[CA]	Ka[GA]

$$\rightarrow \mathbb{A} = \begin{pmatrix} 0.0415 & 0.0006 \\ 0.0020 & 0.0005 \end{pmatrix}$$

$$x^* = \frac{\beta}{\alpha+\beta} = \underline{-0.0025 < 0}$$

$\underline{\alpha + \beta > 0}$



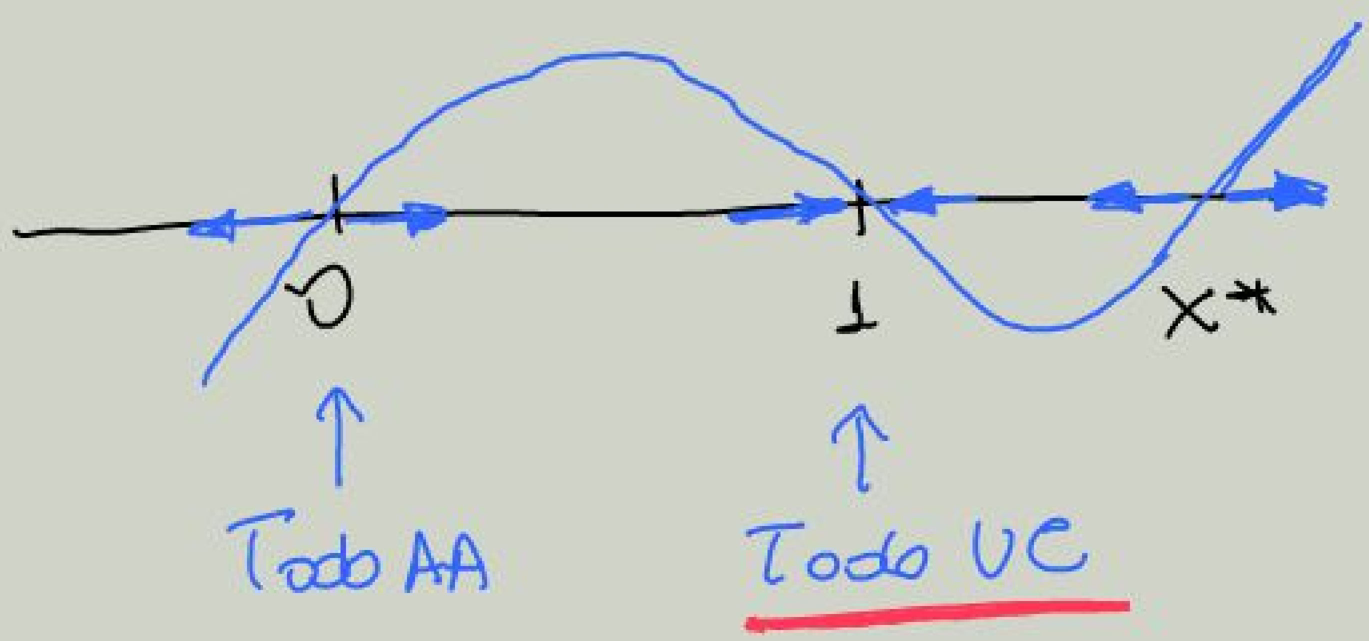
* GU + AA

	GU	AA
GU^{α}	$K_a[GU]$	$K_a[AU]$
AA^{α}	$K_a[GA]$	$K_a[AA]$

$$\rightarrow \mathbb{A} = \begin{pmatrix} 0.0091 & 0.0319 \\ 0.0005 & 0.0004 \end{pmatrix}$$

$$\underline{x^* \simeq 1.37 > 1}$$

$$\underline{\alpha + \beta < 0}$$



En estos dos casos se obvserva que x^* se encuentra afuera del intervalo (0,1)

Luego, solo una rección puede ser dominante.

Veamos un caso en que $X^* \in (0,1)$

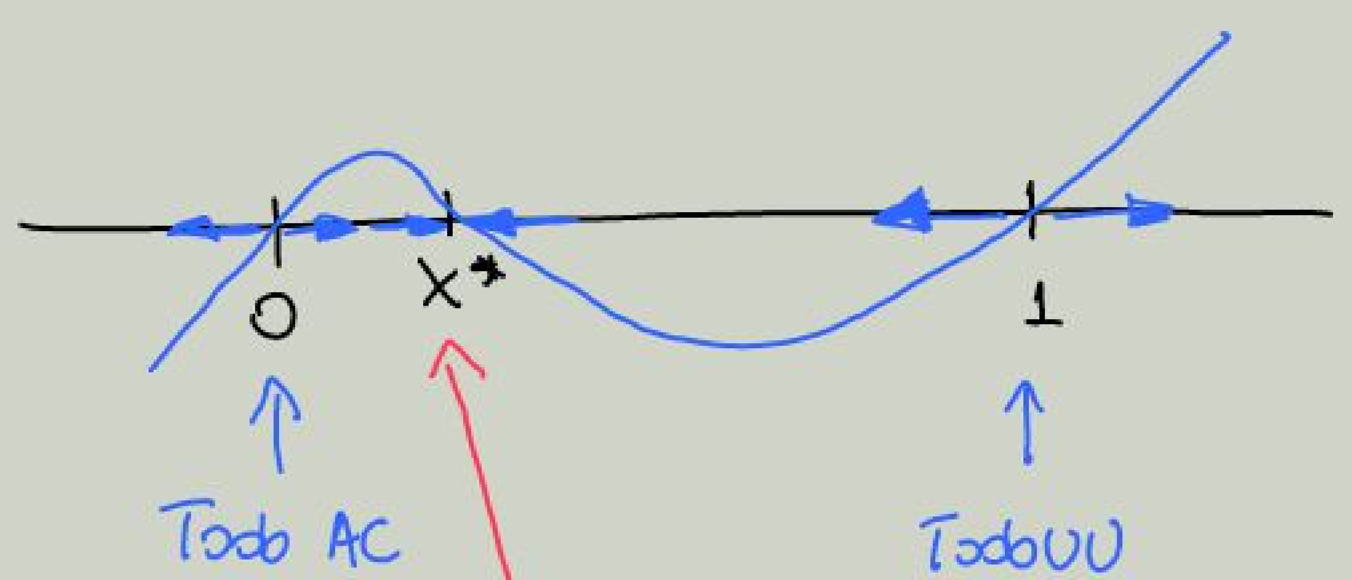
*** <u>AC + UU</u>**

	AC	UU
AC^*	$k_2[AC]$	$k_a[UC]$
UU^*	$k_a[AU]$	$k_2[UU]$

$$\Rightarrow A = \begin{pmatrix} 0.0069 & 0.0038 \\ 0.0319 & 0.0022 \end{pmatrix}$$

$$x^* = 0.06$$

$\alpha + \beta < 0$



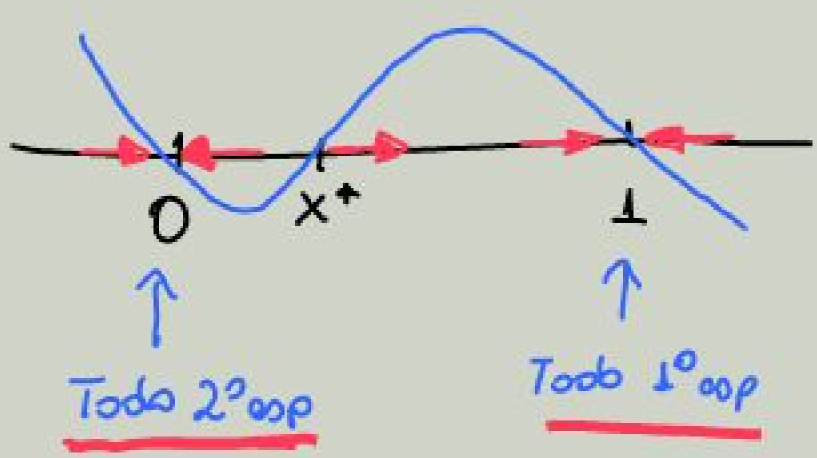
Relación dominante: $\begin{cases} \text{AC} & 94\% \\ \text{UU} & 6\% \end{cases}$

Agrupando por similitudes

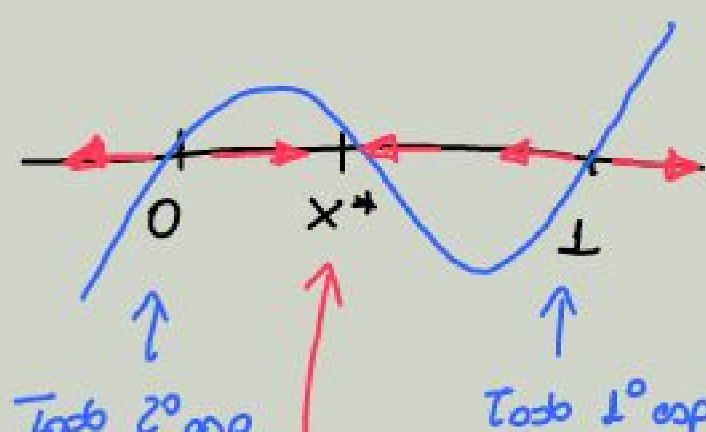
	$\alpha > \beta$	$\alpha < \beta$
$x^* \notin (0,1)$	CG+GA	GU+AA
$x^* \in (0,1)$	AU+UC [CG+GU]	AC+UU UC+AA

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$$

En rojo el valor mas grande



[2 Atractores]



Relación dominante

Mayor: $100 \cdot (1-x^*)\%$

Menor: $100x^*\%$

[1 atractor]

Extra!

x^* afuera de $(0,1)$

CG + GA

$$\begin{pmatrix} 0.0415 & 0.0006 \\ 0.0020 & 0.0005 \end{pmatrix}$$

$a>c>b>d$

$\alpha>\beta$ / $a>c$, $b>d$

GU + AA

$$\begin{pmatrix} 0.0091 & 0.0319 \\ 0.0005 & 0.0004 \end{pmatrix}$$

$a>b>c>d$

$\alpha<\beta$ / $a>c$, $b>d$

AC + UU

$$\begin{pmatrix} 0.0069 & 0.0038 \\ 0.0319 & 0.0022 \end{pmatrix}$$

$c>a>b>d$

$\alpha<\beta$ / $a<c$, $b>d$

UC + AA

$$\begin{pmatrix} 0.0038 & 0.0069 \\ 0.0197 & 0.0004 \end{pmatrix}$$

$c>b>a>d$

$\alpha<\beta$ / $a<c$, $b>d$

AU + UC

$$\begin{pmatrix} 0.0319 & 0.0022 \\ 0.0069 & 0.0038 \end{pmatrix}$$

$a>c>d>b$

$\alpha>\beta$ / $a>c$, $d>b$

Así encontramos los rdacores

Extra-Extra!!

CG + GU

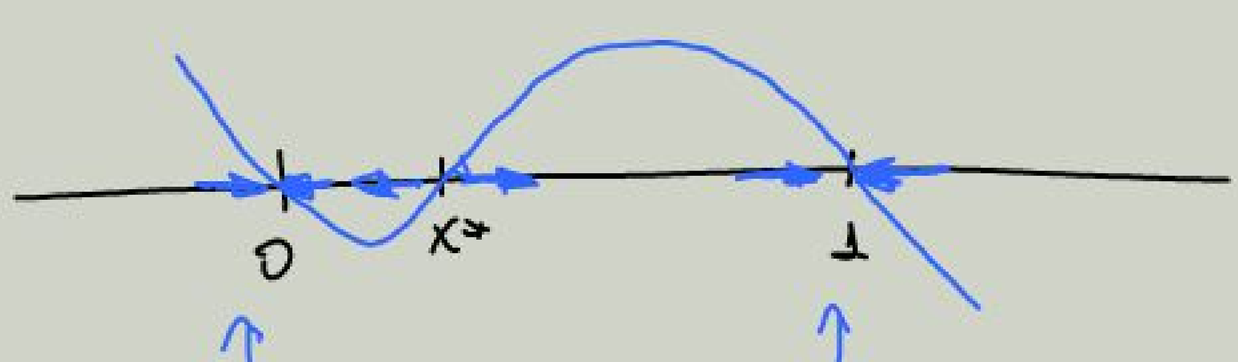
$$\begin{pmatrix} 0.0415 & 0.0006 \\ 0.0004 & 0.0091 \end{pmatrix}$$

$a>d>b>c$

$\alpha>\beta$ / $a>c$, $d>b$

$x^* = 0.171$

$\alpha+\beta>0$



Todo GU

Todo CG

Segundo caso: Se exploro el juego químico con tres genotipos **AA + UC + GU**

	AA	UC	GU
AA*	AA	UA	GA
UC*	AC	UC	GC
GU*	AU	UU	GU

$$\Rightarrow \quad A = \begin{pmatrix} 0.0004 & 0.0197 & 0.0005 \\ 0.0069 & 0.0058 & 0.0125 \\ 0.0319 & 0.0022 & 0.0091 \end{pmatrix}$$

De nuevo, $x_i = \dfrac{N_i}{N_{Tot}}$, $i = AA, UC, GU$

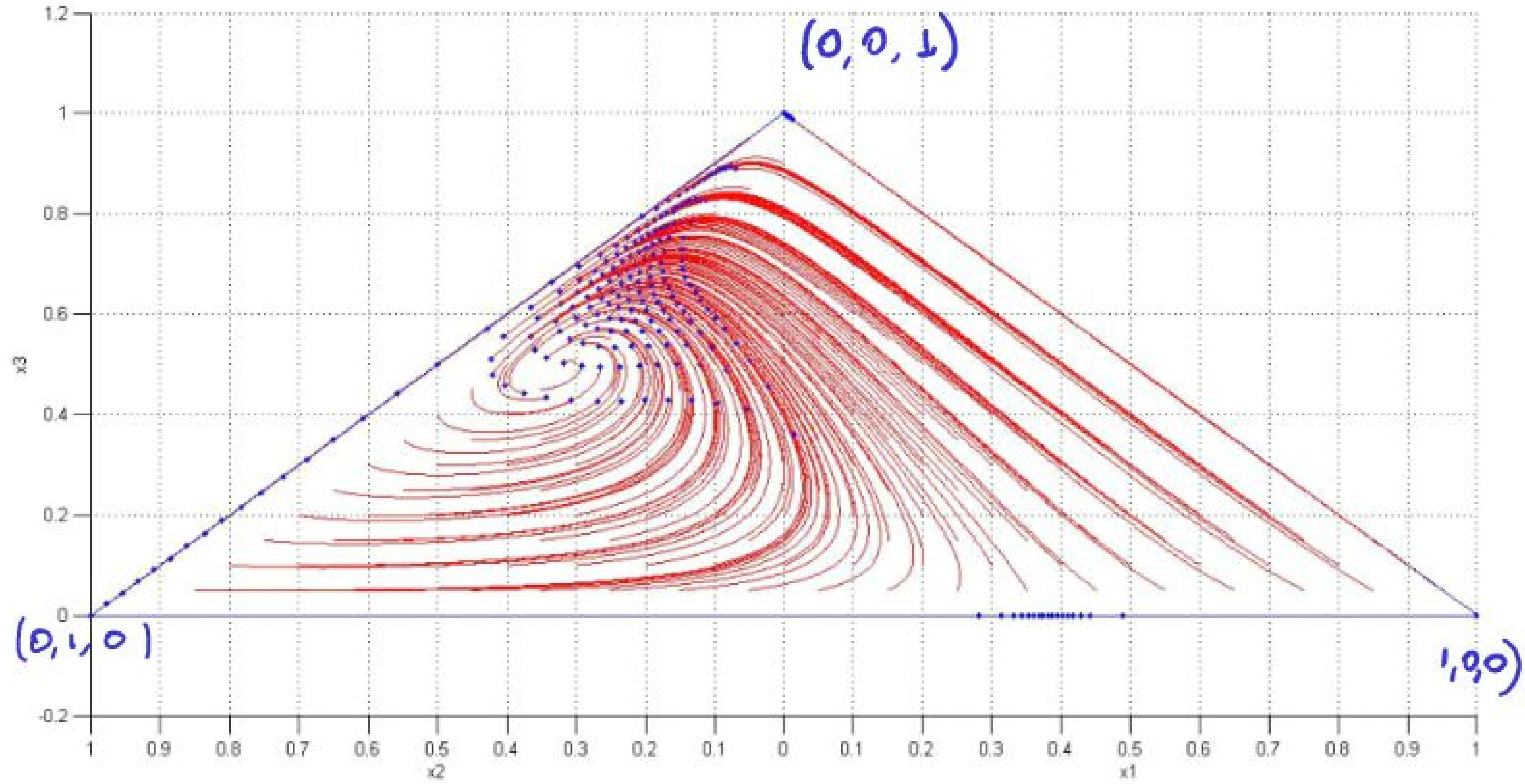
$N_{Tot} = \sum_i N_i$, con $\sum_i x_i = 1$

$f_i = \vec{\mathbb{1}}_i A \vec{x}$, $\langle f \rangle = \sum_i f_i x_i$

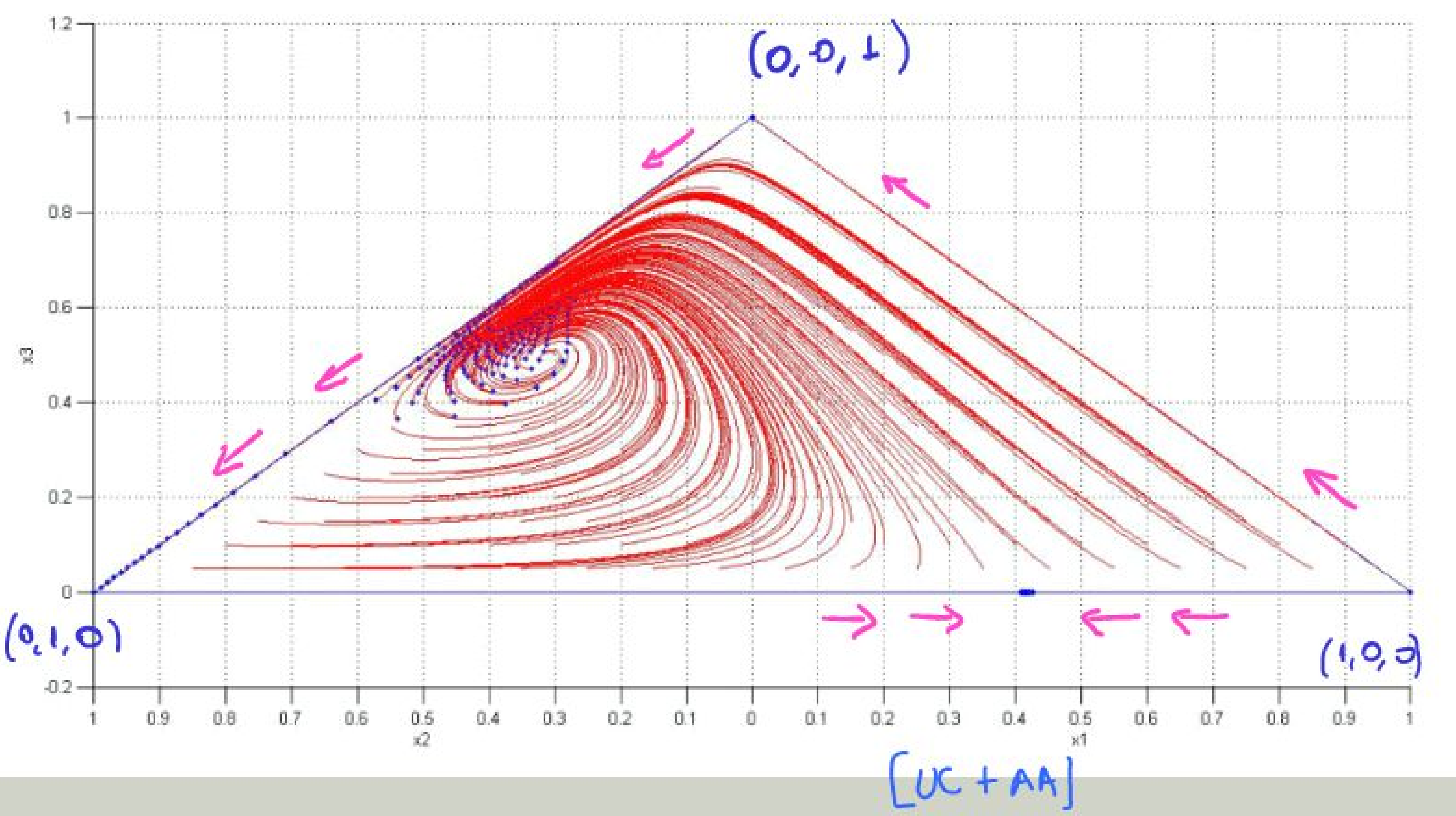
$\Rightarrow \dot{x}_i = x_i \left(f_i - \langle f \rangle \right)$ $\longrightarrow$ **Nos queda un sistema de 3 ecs. diferenciales!**

Graficamos numéricamente, observando la evolución del sistema para 500 y 1000 pasos.

500 iteraciones

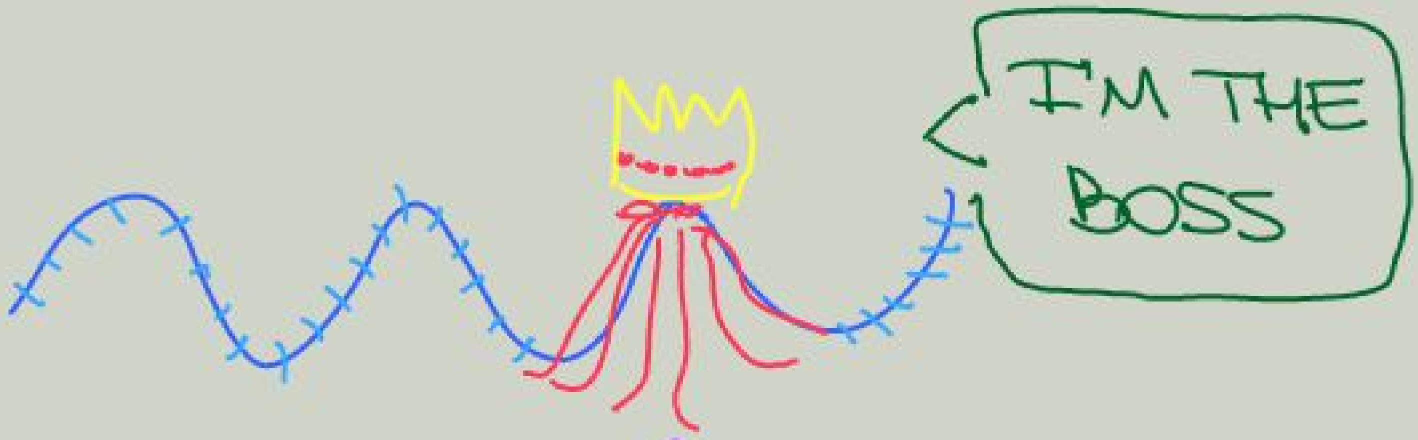


1000 iteraciones!



Fin

ABEJORRO VENÍ PARATE
DE MANOS LOGI



ARN REINANDO
LA SOPA PRIMITIVA

Y LA BIOMAT

ARN
RULZ

¡Muchas Gracias!