

Título em Português: A cooperação na evolução pré-biótica

Título em Inglês: Cooperation in prebiotic evolution

Autor: Matheus Stefanini Mariano

Instituição: Universidade de São Paulo

Unidade: Instituto de Física de São Carlos

Orientador: Jose Fernando Fontanari

Área de Pesquisa / SubÁrea: Física Geral

Agência Financiadora: USP - Programa Unificado de Bolsas

A COOPERAÇÃO NA EVOLUÇÃO PRÉ-BIÓTICA

Matheus Stefanini Mariano

José Fernando Fontanari

Instituto de Física de São Carlos/Universidade de São Paulo

matheussmariano@usp.br

Objetivos

Objetiva-se estudar o modelo de quase-espécies [1], o qual explica a estabilidade da variabilidade genética em um contexto pré-biótico. Além disso, também é estudado o modelo de hiperciclos, o qual é fundamental para a compreensão do vínculo entre informação biológica e função biológica.

Métodos e Procedimentos

Realizou-se a modelagem matemática de um sistema de macromoléculas autorreplicantes em um contexto pré-biótico. Com a finalidade de compreender mais profundamente a dinâmica evolucionária das quase-espécies, criou-se um programa que simula a evolução de populações de sequências a partir da solução numérica das equações do modelo. Para isso, utilizou-se uma abordagem que simplifica a análise matemática empregada [2], de tal forma a tornar mais didática a visualização do que se está estudando.

Resultados

Como o próprio nome sugere, a evolução pré-biótica consiste no processo de evolução molecular que precedeu o surgimento da vida. Uma das principais teorias que explicam a evolução pré-biótica é conhecida como modelo de quase-espécies. Uma quase-espécie é um conjunto de sequências semelhantes, as quais podem ser de qualquer entidade sujeita ao processo evolucionário e portadora de

informação, submetidas a um processo contínuo de mutação e seleção natural.

Foram analisados quatro tipos de dinâmicas evolutivas através das simulações. Na primeira dinâmica, denominada relevo adaptativo de pico íngreme, observa-se dois regimes distintos: o regime de quase-espécie e o regime estocástico. No primeiro regime, macromoléculas mutantes coexistem de forma estável com uma sequência dominante. No segundo, a informação genética é totalmente perdida. Esses dois regimes são separados por uma probabilidade crítica de mutação (limiar de erro), indicando um limite para a complexidade das moléculas nas condições pré-bióticas, o que resulta em um problema teórico relacionado ao desenvolvimento da complexidade na Terra, o paradoxo de Eigen.

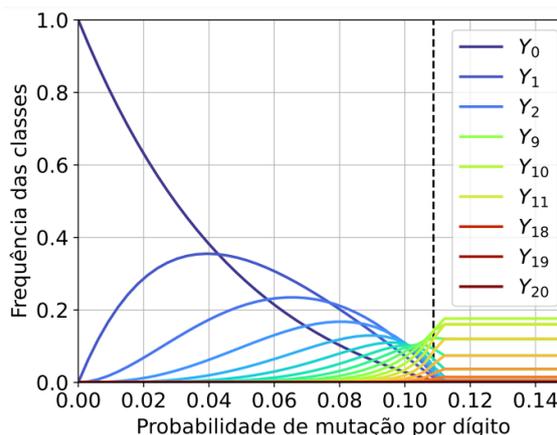


Figura 1: Regime de quase-espécies e regime estocástico separados pelo limiar de erro (tracejado) no caso do relevo adaptativo de pico íngreme

A segunda dinâmica estudada consiste em um relevo adaptativo de dois picos íngremes.

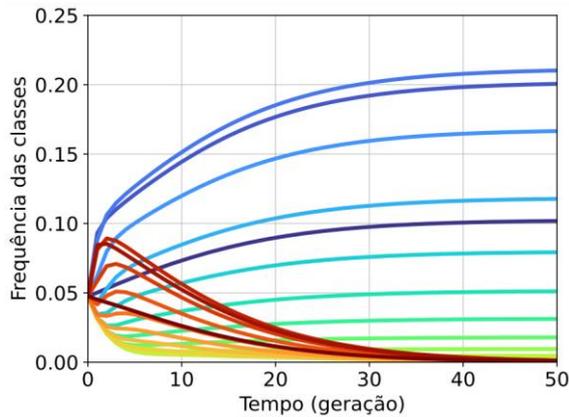


Figura 2: Competição entre duas quase-espécies no relevo adaptativo de dois picos íngremes

No terceiro tipo de dinâmica, analisou-se o relevo adaptativo de um pico suave.

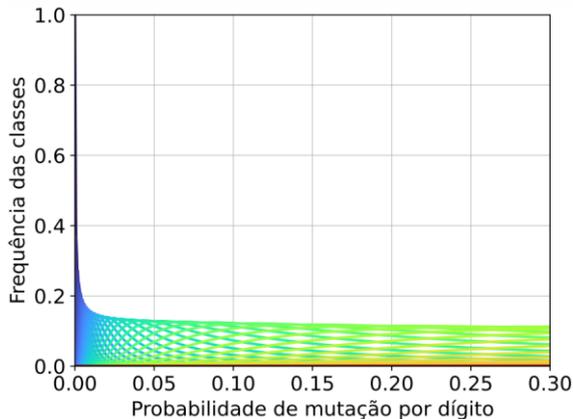


Figura 3: Desaparecimento da separação abrupta entre os regimes de quase-espécie e estocástico no relevo adaptativo de pico suave

Na última dinâmica, estudou-se o relevo adaptativo de pico íngreme e o de pico suave. Além disso, foi estudado o modelo de hiperciclos [3], o qual resolve o paradoxo de Eigen através de um mecanismo de catálise entre as moléculas da população. Estudou-se a competição entre replicadores malthusianos, replicadores hipercíclicos com replicação apenas enzimática e replicadores hipercíclicos com replicação enzimática e replicação malthusiana (completos). A partir dessas análises, concluiu-se que os replicadores hipercíclicos completos possuem uma vantagem seletiva em relação aos outros dois tipos de replicadores, pois podem se replicar mais tanto em altas frequências (replicação

enzimática) quanto em baixas frequências (replicação malthusiana).

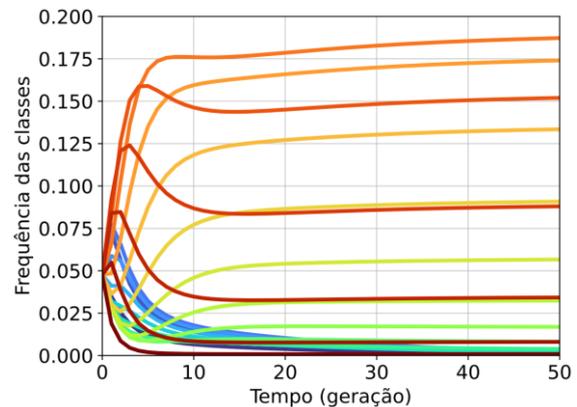


Figura 4: Competição entre uma quase-espécie no relevo adaptativo de pico íngreme (azulado) e outra no relevo adaptativo de pico suave (avermelhado)

Conclusões

Quanto menor a taxa de mutação, mais centrada em torno do pico do relevo adaptativo é a distribuição de sequências, o que caracteriza o regime de quase-espécies. Quanto maior a taxa de mutação, mais dispersa é a distribuição de sequências. Para uma taxa de mutação crítica (limiar de erro), essa dispersão é levada ao limite e a população caminha aleatoriamente pelo espaço de sequências, o que representa o regime estocástico. Conforme o número de parentes da sequência mestra aumenta, essa transição vai se tornando cada vez mais suave. Os hiperciclos resolvem o paradoxo de Eigen ao introduzir um elemento de cooperação entre as moléculas replicadoras e explicam a interação entre ácidos nucleicos e proteínas.

Referências Bibliográficas

- [1] EIGEN, M. Selforganization of matter and the evolution of biological macromolecules. *Die Naturwissenschaften*, v. 58, n. 10, p. 465–523, 1971.
- [2] SWETINA, J; SCHUSTER, P. Self-replication with errors. A model for polynucleotide replication. *Biophysical Chemistry*, v. 16, p. 329–345, 1982.
- [3] MICHOD, R. E. Population biology of the first replicators: On the origin of the genotype, phenotype and organism. *Integrative and Comparative Biology*, v. 23, n. 1, p. 5–14, 1983.

COOPERATION IN PREBIOTIC EVOLUTION

Matheus Stefanini Mariano

José Fernando Fontanari

Institute of Physics of São Carlos/University of São Paulo

matheussmariano@usp.br

Objectives

The aim is to study the quasi-species model [1], which explains the stability of genetic variability in a prebiotic context. In addition, the hypercycles model is also studied, which is fundamental for understanding the link between biological information and biological function.

Materials and Methods

Mathematical modeling of a system of self-replicating macromolecules in a prebiotic context was carried out. In order to understand more deeply the evolutionary dynamics of quasi-species, a program was created that simulates the evolution of populations of sequences from the numerical solution of the model equations. For this, an approach was used that simplifies the mathematical analysis employed [2], in such a way as to make the visualization of what is being studied more didactic.

Results

As the name suggests, prebiotic evolution is the process of molecular evolution that preceded the emergence of life. One of the main theories that explain evolution in a prebiotic context is known as the quasi-species model. A quasi-species is a set of similar sequences, which can be from any entity subject to the evolutionary process and carrier of information, subjected to a continuous process of mutation and natural selection.

Four types of evolutionary dynamics were analyzed through the simulations. In the first

dynamic, called steep peak adaptive landscape, two distinct regimes are observed: the quasi-species regime and the stochastic regime. In the first regime, mutant macromolecules stably coexist with a dominant sequence. In the second regime, genetic information is totally lost. These two regimes are separated by a critical mutation probability (error threshold), indicating a limit to the complexity of molecules under prebiotic conditions, which results in a theoretical problem related to the development of complexity on Earth, the Eigen paradox.

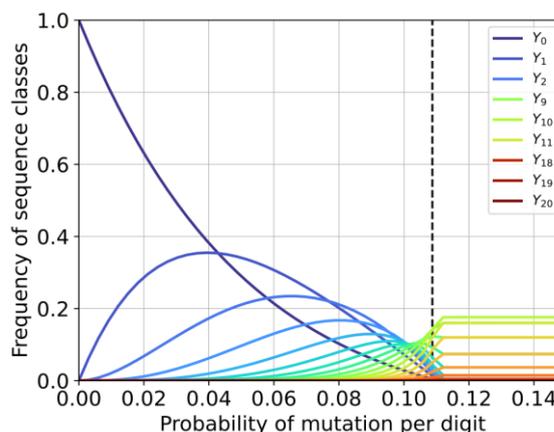


Figure 1: Quasi-species regime and stochastic regime separated by the error threshold (dashed) in the case of steep peak adaptive landscape

The second dynamic studied consists of an adaptive landscape of two steep peaks.

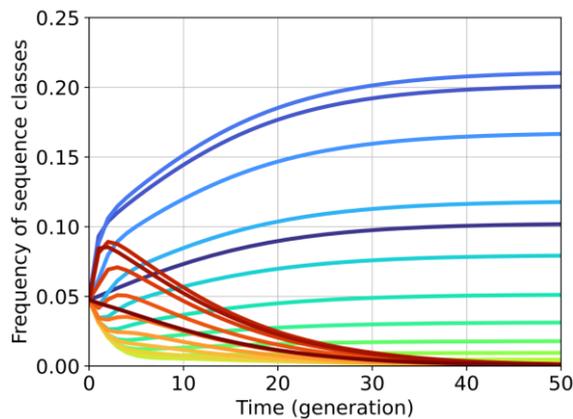


Figure 2: Competition between two quasi-species in the adaptive landscape of two steep peaks.

In the third type of dynamic, the adaptive landscape of a smooth peak was analyzed.

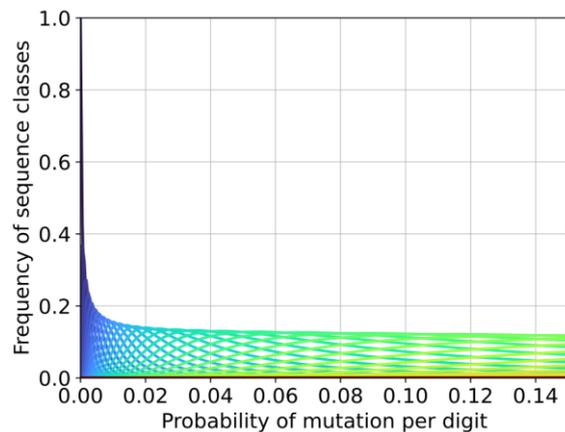


Figure 3: Disappearance of abrupt separation between quasi-species and stochastic regimes in soft peak adaptive landscape

In the last dynamic, the steep peak and soft peak adaptive landscape were studied. Furthermore, the hypercycles model [3] was studied, which solves the Eigen paradox through a mechanism of catalysis between the molecules of the population. The competition between malthusian replicators, hypercyclic replicators with enzyme-only replication and hypercyclic replicators with enzyme replication and malthusian replication (complete) was studied. From these analyses, it was concluded that complete hypercyclic replicators have a selective advantage over the other two types of replicators, as they can replicate more both at high frequencies (enzymatic replication) and at low frequencies (malthusian replication).

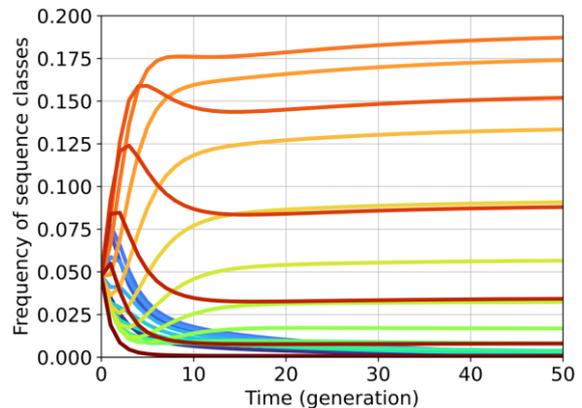


Figure 4: Competition between a quasi-species in the steep peak adaptive landscape (bluish) and another in the soft peak adaptive landscape (reddish)

Conclusions

The lower the mutation rate, the more centered around the peak of the adaptive landscape is the sequence distribution, which characterizes the quasi-species regime. The higher the mutation rate, the more dispersed the sequence distribution. For a critical mutation rate (error threshold), this dispersion is taken to the limit and the population walks randomly through the sequence space, which represents the stochastic regime. As the number of master-sequence relatives increases, this transition becomes smoother. Hypercycles resolve the Eigen paradox by introducing an element of cooperation between replicating molecules and explains the interaction between nucleic acids and proteins.

References

- [1] EIGEN, M. Selforganization of matter and the evolution of biological macromolecules. *Die Naturwissenschaften*, v. 58, n. 10, p. 465–523, 1971.
- [2] SWETINA, J; SCHUSTER, P. Self-replication with errors. A model for polynucleotide replication. *Biophysical Chemistry*, v. 16, p. 329–345, 1982.
- [3] MICHOD, R. E. Population biology of the first replicators: On the origin of the genotype, phenotype and organism. *Integrative and Comparative Biology*, v. 23, n. 1, p. 5–14, 1983.