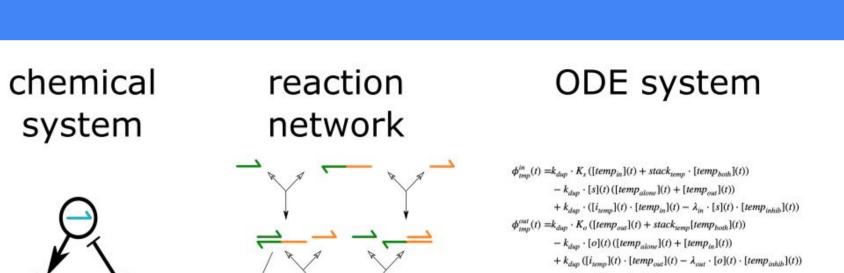
# 化学反応ネットワーク設計ツールの拡張

吉田瑠華、オベル加藤ナタナエルお茶の水女子大学



## 研究背景

- ・近年最適化アルゴリズムを使った化学反応ネットワークの最適化が多く行われている。
- -PEN toolboxは、任意の化学反応ネットワークを作るためのフレームワークである。(Montage et al., 2011)
- •PP(Predator-Prey)システムは、PENの拡張として、捕食(predation)というモジュールを追加した。(Fujii & Rondelez, 2013)
- ・先行研究として、PEN toolboxのシムレーション(Aubert et al., 2014)や、PENとPPシステムを使った数理モデルの構築 (Aubert-Kato, Cazenille, 2020)があるが、両方を使ったシミュレーションのライブラリはまだなかった。



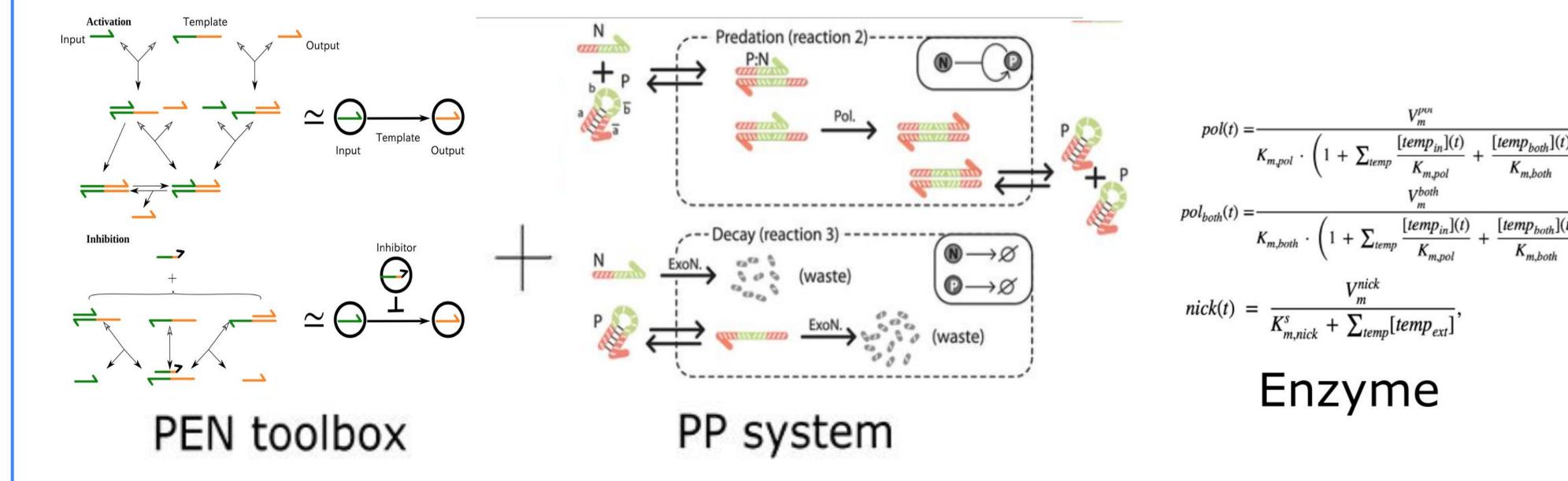
automated translation

#### 目的

- ・本研究ではPEN toolboxに加えてPredator Prey System(PP)も使用できる化学反応ネットワーク設計・シミュレーションシステムを実装した。
- ・検証する化学反応ネットワークとしてOligator(Montagne et al., 2011)と Bistable Switch(Fauste-Gay et al., 2022)を選択した。

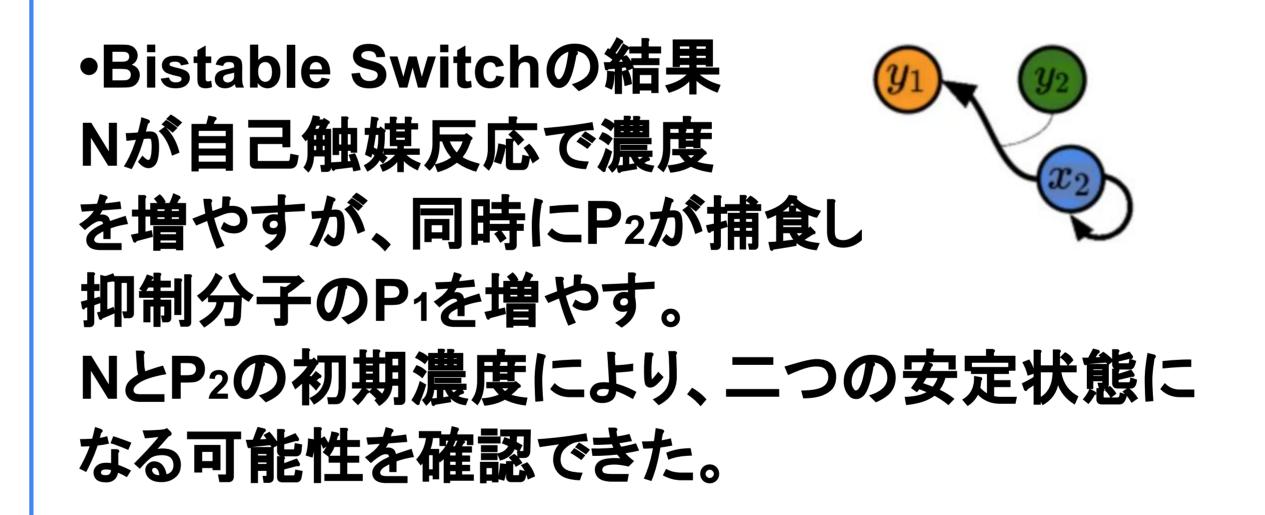
## 方法

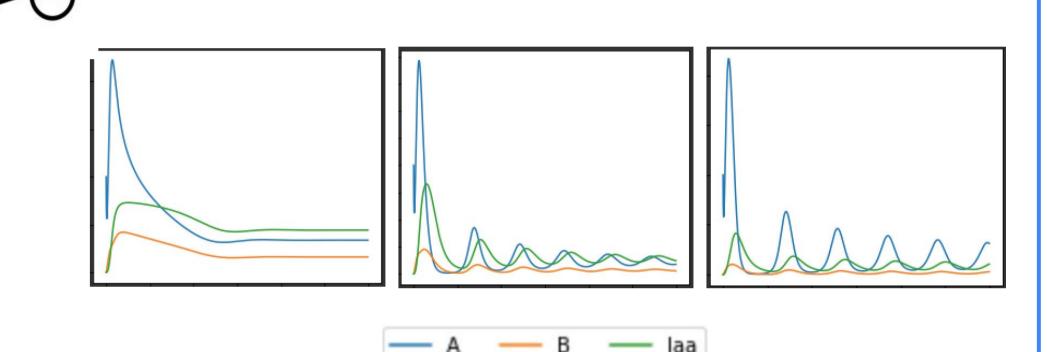
•PPシステムやPEN toolboxに基づく抽象的な化学反応ネットワークを入力として受け取り、自動的に常微分方程式に組み込み、中間反応体を含めた全ての反応を自動的にシミュレーションさせた。

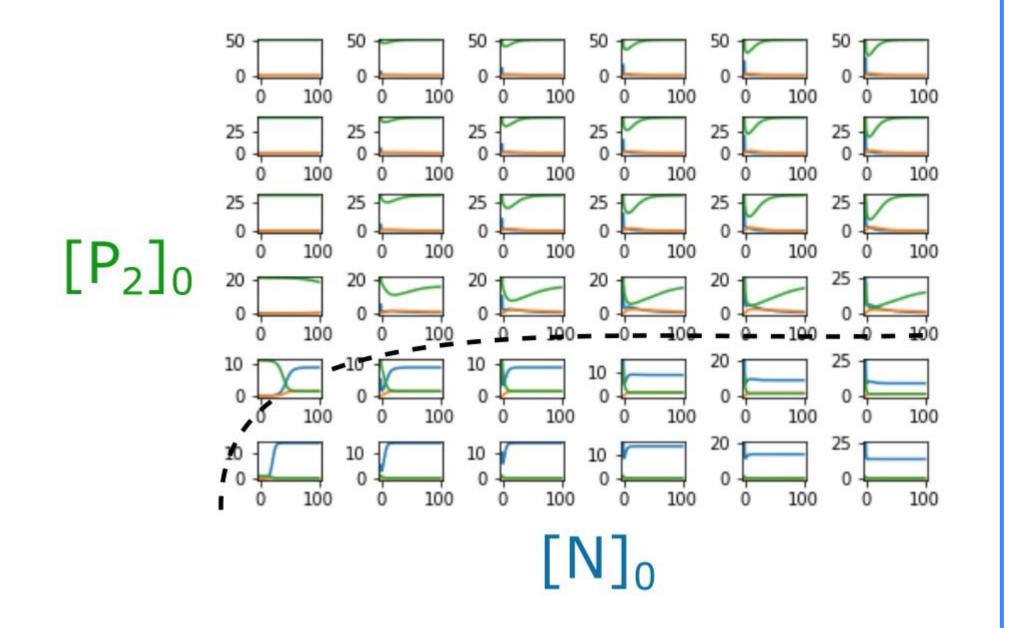


## •Oligatorの結果

1つの分子(青)が自己触媒反応で濃度を増やして、もう1つの分子(オレンジ)を増やす。また、オレンジが抑制分子を増やして、青の触媒反応を抑制する。参考文献と同じく、テンプレート分子の濃度により、安定性、減衰振動、振動を確認できた。







## まとめ・今後

- ・本研究ではPEN toolboxに加えてPredator Prey System(PP)も使用できる化学反応ネットワーク設計・シミュレーションシステムを実装した。
- ・今回参考にしたOligatorとBistable Switchの論文の結果と本研究の振る舞いは似てるがパラメーターが異なるため、更なる改善が必要
- ・現在は手作業で化学反応ネットワークを入力しているが、今後、自動変換関数を開発する。

Montagne, K., et al. (2011). Programming an in vitro DNA oscillator using a molecular networking strategy. Molecular systems biology, 7(1), Fujii, T., & Rondelez, Y. (2013). Predator–prey molecular ecosystems. ACS nano, 7(1)

Aubert, N., et al. (2014). Computer-assisted design for scaling up systems based on DNA reaction networks. J R Soc. Interface, 11(93)

Aubert-Kato, N., & Cazenille, L. (2020). Designing dynamical molecular systems with the PEN Toolbox. NGC, 38(2) Fauste-Gay, A., et al. (2022). Toggling Between Two Limit Cycles in a Molecular Ecosystem. NGC, 40(2)

結果