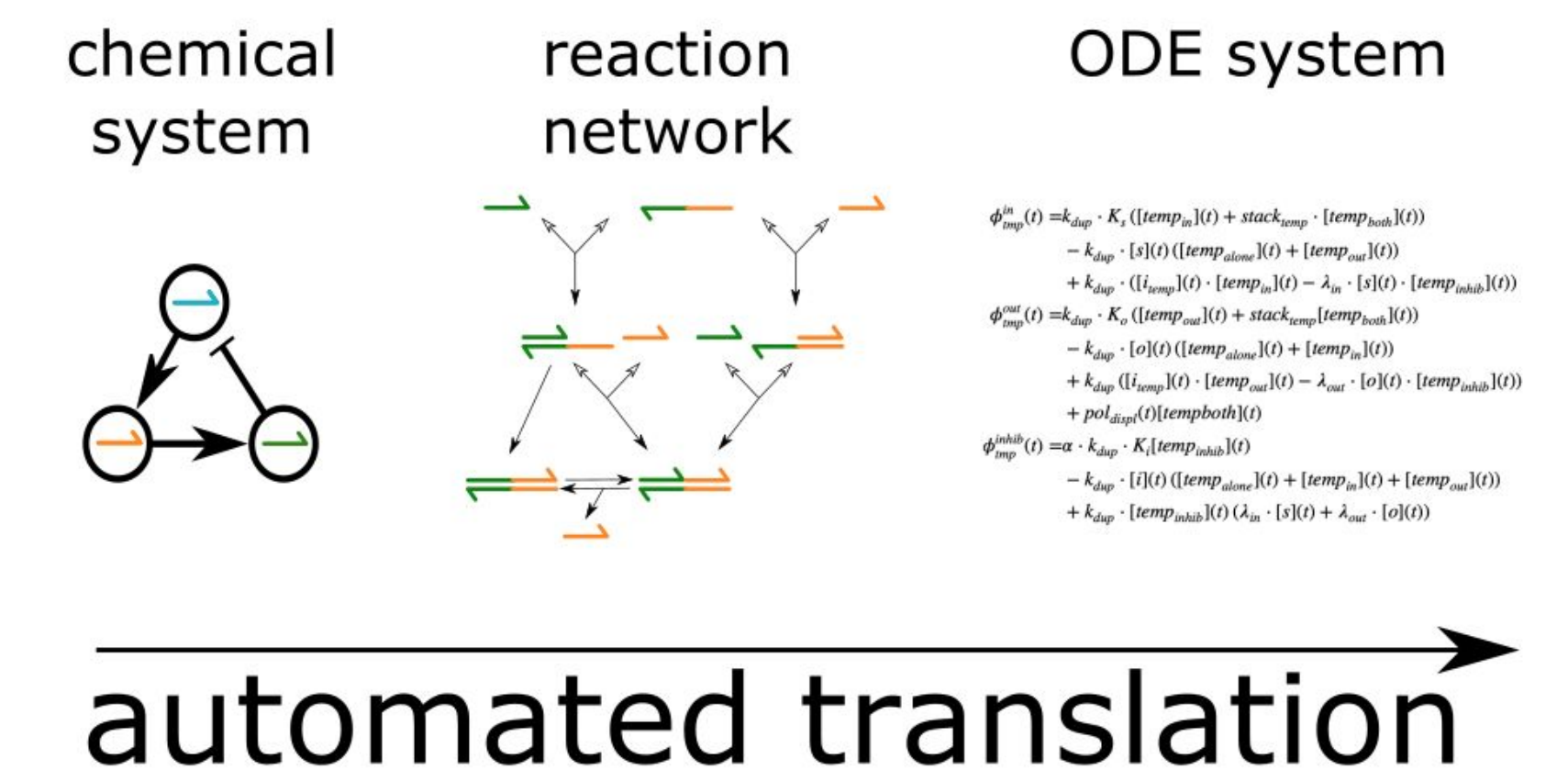


# 化学反応ネットワーク設計ツールの拡張

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。(Montagne 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のシミュレーション(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。

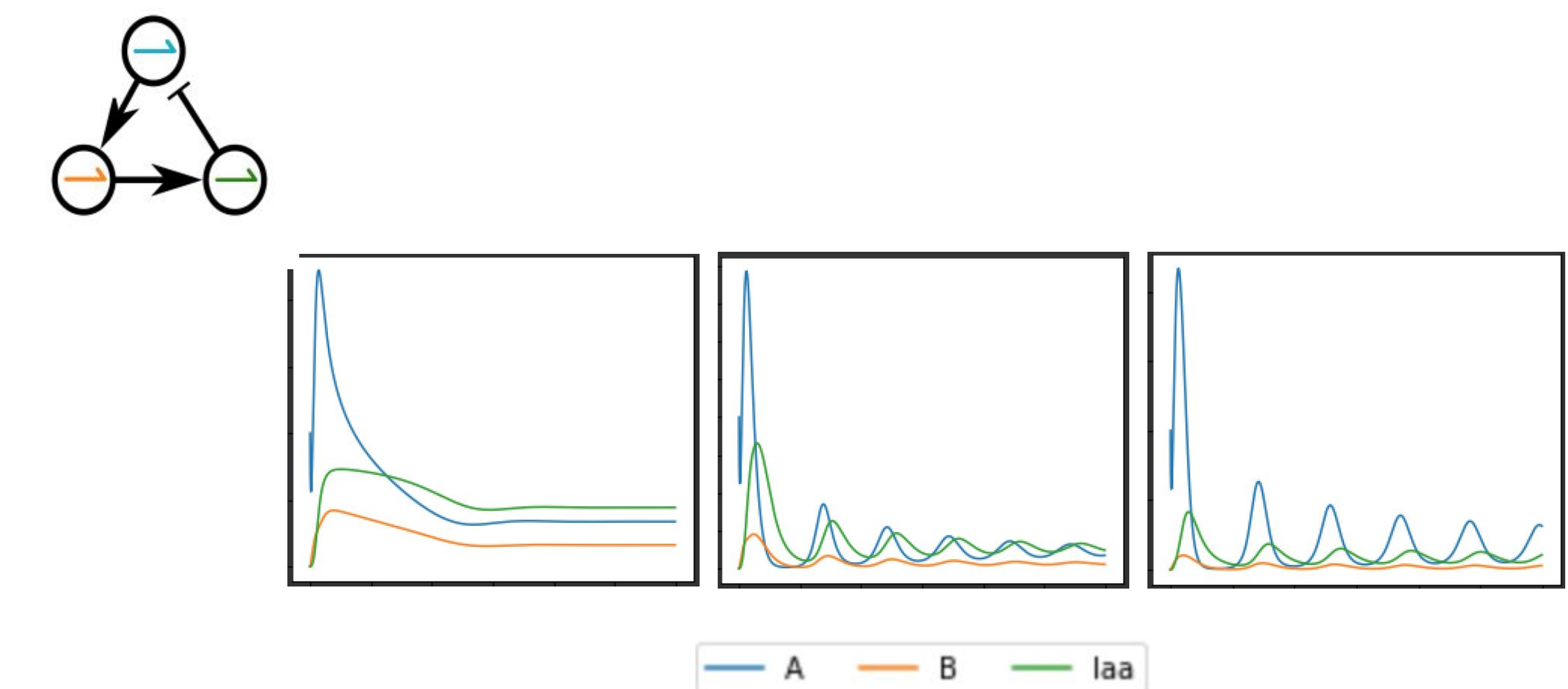


## 目的

- 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。

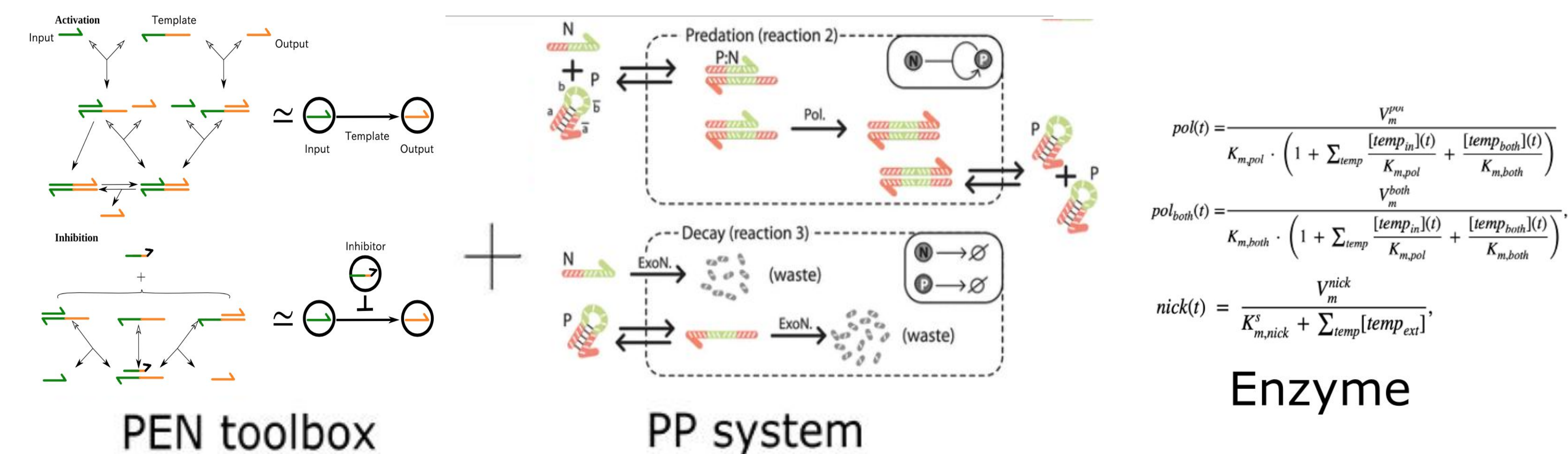
## 結果

- 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。

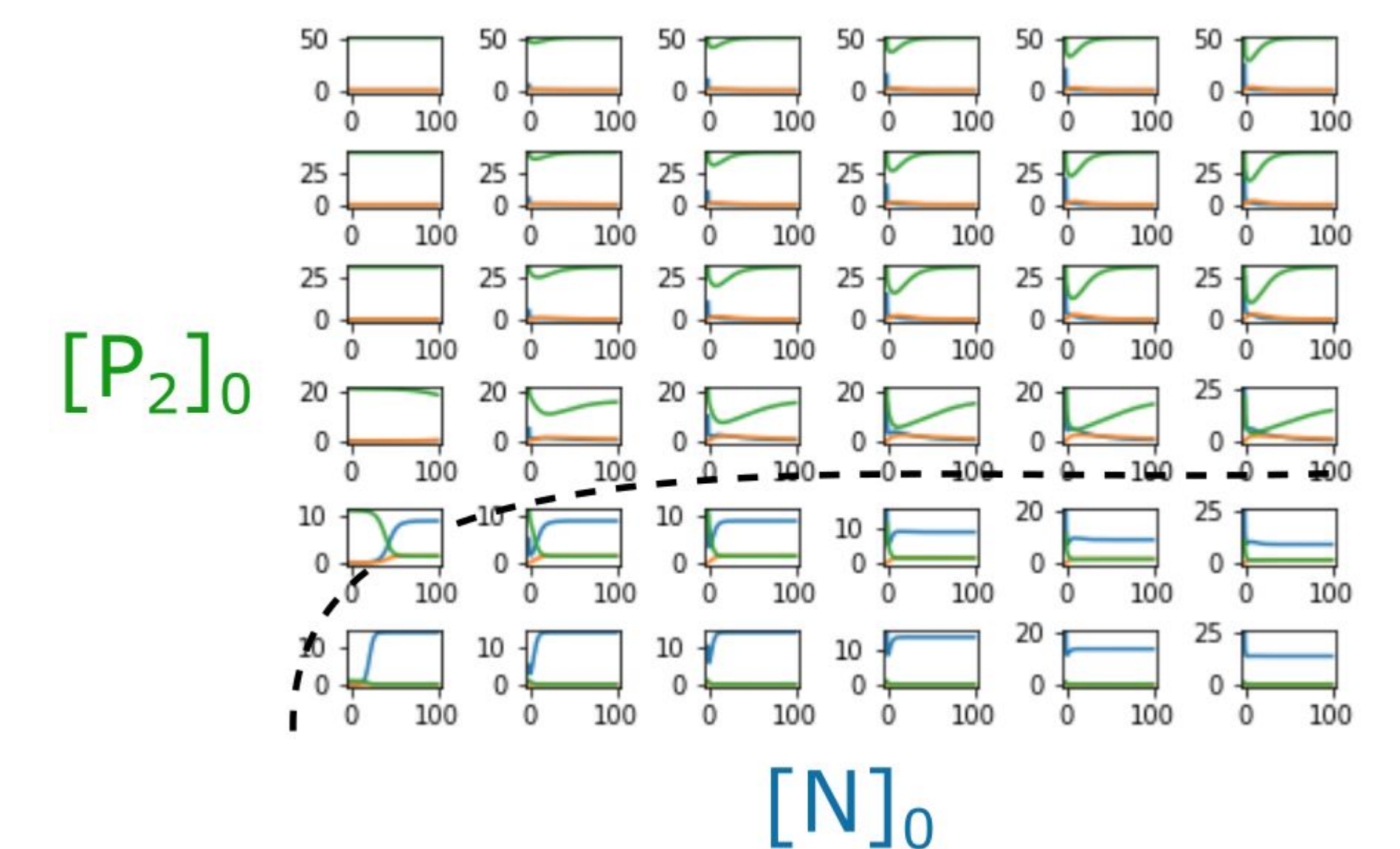
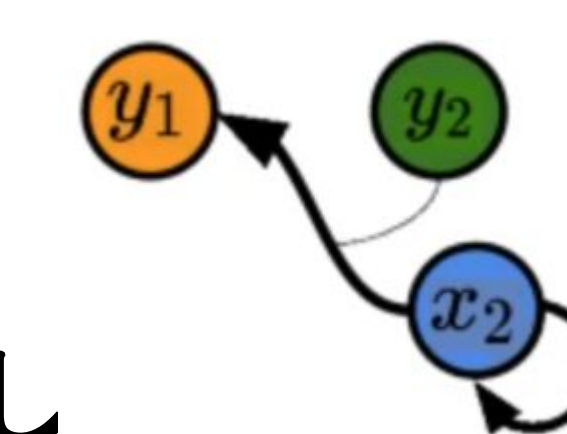


## 方法

- 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。



- Bistable Switchの結果  
Nが自己触媒反応で濃度を増やすが、同時にP<sub>2</sub>が捕食し抑制分子のP<sub>1</sub>を増やす。NとP<sub>2</sub>の初期濃度により、二つの安定状態になる可能性を確認できた。



## 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。