

# ボクセルを用いたDNAのシミュレーション精度分析

## Simulation accuracy analysis of DNA using voxels

佐藤七海<sup>1\*</sup> オベル加藤ナタナエル<sup>1</sup>  
Nanami Sato<sup>1</sup> Aubert Kato Nathanael<sup>1</sup>

<sup>1</sup> お茶の水女子大学 大学院 人間文化創成科学研究科 理学専攻 情報科学コース

<sup>1</sup> Department of Information Sciences, Ochanomizu University, Tokyo, Japan

**Abstract:** In recent years, DNA nanotechnology has progressed to the point of allowing computation as well as the production of complex structures at the nanoscale. Designing such systems relies on simulators, OxDNA[1] being one of the most popular. While OxDNA has accurate simulation results, it is computationally intensive. In this research, we aim to improve the execution speed by simplifying the model geometry by replacing individual bases with voxels, 3 dimensional pixels, while using a simpler computational model. Here, we investigate the accuracy of the simulation by using persistence length which is useful for examining how double-stranded DNA bends, a necessary step for checking structure creation. We obtained a 3 times speed-up over OxDNA while retaining results in the same order of magnitude. While additional improvements are necessary for an application to DNA computing, those results demonstrate the potential of our approach.

## 1 はじめに

近年におけるDNAナノテクノロジーの発展により、ナノスケールでの計算や、複雑な構造体の作製が可能となった。このようなシステムの設計はシミュレータに依存しており、代表的な例として、OxDNA[1]が挙げられる。OxDNAは、正確なシミュレーション結果を示すため、信頼度が高い一方、計算量が多いことが問題点として挙げられる。そこで、本研究では、より単純な計算モデルを用いるとともに、個々の塩基をボクセル(3次元の画素)に置き換えることで、モデルの形状を簡略化し、実行速度の向上を目指した。さらに、二本鎖DNAの曲がり具合を示し、作成したモデルの構造を確認する際に有効とされる持続長を用いることで、シミュレーションの精度を検討した。その結果、OxDNAと同程度の結果を維持したまま、3倍の高速化を達成した。さらなる改良が必要なものの、この結果は、本研究の手法が、DNAコンピューティングに応用できる可能性を示している。

## 2 ボクセルとVoxelyze

ボクセルとは、3次元構造をシミュレーションするための単位格子である。volumeとpixelを組合せた造語

\*連絡先：お茶の水女子大学 大学院 人間文化創成科学研究科 理学専攻 情報科学コース

〒112-8610 東京都文京区大塚 2-1-1  
E-mail: g1720517@is.ocha.ac.jp

で、医療分野やコンピュータゲーム、データの可視化などに用いられる。そのボクセルのシミュレータとして知られるのがVoxelyze[2]である。Voxelyzeは、Jonathan HillerとHod Lipsonによって開発されたソフトウェアであり、柔軟な素材から硬直な素材まで、幅広いモデルの静的または動的なシミュレーションに用いられる。したがって、変形を伴うDNAのシミュレーションに生かすことができると考え、本研究では、ボクセル及びVoxelyzeを用いた。

## 3 持続長

持続長とは、溶液中におけるポリマー鎖の硬直具合と、変形する際にかかるエネルギーを計算するのに有効な指標である。持続長が小さいほど、柔らかな素材で曲がり具合が大きい。持続長を $L_{ps}$ と表すと、実験結果から以下の式へ曲線近似を行うことで、最適な $a$ と $L_{ps}$ の値が求まる。

$$\langle n_k \cdot n_0 \rangle = a * \exp(-k/L_{ps}) \quad (1)$$

$\langle n_k \cdot n_0 \rangle$ は、らせんベクトル間の相関関係を表す。扱うベクトルは正規化するため、 $\langle n_k \cdot n_0 \rangle$ の値が1の場合は、塩基が直線状に並んでいることを表す。また、 $a$ の値が1に近ければ近いほど、曲線近似が正確であることを示す。

## 4 モデルの詳細

本研究では, Alexey Savelyev[3] らのモデルを参考に, 以下の3つの力を適用し, シミュレーションを行なった. ここでは, 数式は省略する. また, 二本鎖 DNA を想定しており, ボクセルの初期位置は, OxDNA と同様に設定した.

- bond forces …同一らせん上の隣り合う塩基 (ボクセル) 間に働く結合力.
- angle forces …同一らせん上の隣り合う塩基 (ボクセル) によって作り出される角度が生み出す結合力.
- fan forces …異なるらせん上の 11 個の塩基 (ボクセル) との間に働く結合力. 図 1 は, 合計  $N$  個のうち, 赤色で示した  $i$  番目の塩基との fan forces に関する塩基を青色で示している. すなわち,  $i$  番目の塩基は, 青い直線で結ばれた 11 個の塩基と関連し合う.

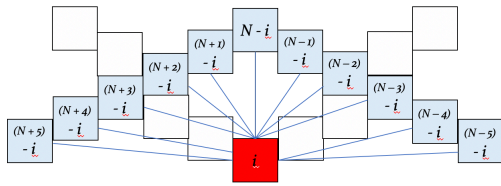


図 1: fan forces

## 5 結果

OxDNA では, 10000000000 ステップのシミュレーション後に, 持続長が 70.76 となることが確認されたが, 本研究では, より短いタイムステップでの結果を確認するため, 1000000 ステップでシミュレーションを行なった. また, oxDNA は MPI を用いたシミュレーションが可能だが, 今回は MPI を用いず, 並列処理計算を行わない状態でシミュレーションを行なった. oxDNA と比較した実行時間と, 曲線近似後に得られた式 1 中の  $a$  及び  $L_{ps}$  の値は, 表 1 の通りである.

表 1: 実行時間と持続長における曲線近似の結果

	実行時間	$a$	持続長
OxDNA	4068.38	0.89	529.03
Voxelyze	1289.15	0.77	510.37

表 1 より, 1000000 ステップのシミュレーションを行なった場合, oxDNA と比較し, 実行時間が 1/3 以下まで向上したと言える. また, 持続長を計算したところ, OxDNA を用いた場合は 529.03 であったのに対し, Voxelyze を用いた場合は 510.37 となり, ほぼ同様な値を得ることができた. しかし,  $a$  の値は, OxDNA を用いた場合は 0.89 であったのに対し, Voxelyze を用いた場合は 0.77 となり, OxDNA と比較すると曲線近似の精度が劣った. 原因として, シミュレーションに用いた 3 つの力 (第 4 節を参照) 以外に働く力を考慮できていないことが考えられる.

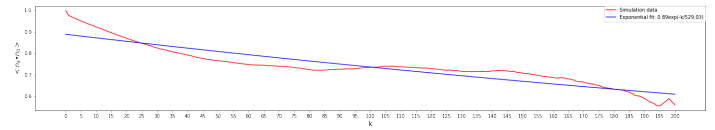


図 2: oxDNA を用いたシミュレーションによるドット積の結果

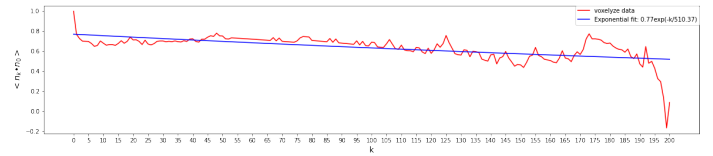


図 3: Voxelyze を用いたシミュレーションによるドット積の結果

## 6 まとめと今後の課題

本研究では, シンプルな計算モデルを用いつつ, 塩基をボクセルに置き換えることで, モデルの形状を簡略化し, DNA のシミュレーションにおける実行速度を向上させた. 今後は, シミュレーションの精度を向上させるとともに, OxDNA がなされてきたように, DNA コンピューティングへの応用を検討したい [4].

## 謝辞

本研究は, 令和 3 年度のお茶の水女子大学アバナー研究奨励金助成を受けたものです. 心から感謝いたします.

## 参考文献

- [1] Ouldridge, Thomas E and Louis, Ard A and Doye, Jonathan PK.: Structural, mechanical, and thermodynamic properties of a coarse-grained DNA model, *The Journal of chemical physics*, Vol. 134, No. 8, pp. 02B627 (2011)
- [2] Jonathan Hiller and Hod Lipson.: Dynamic simulation of soft multimaterial 3d-printed objects, *Soft robotics*, Vol. 1, No. 1, pp. 88–101 (2014)
- [3] Savelyev, Alexey, and Garegin A. Papoian.: Chemically accurate coarse graining of double-stranded DNA, *Proceedings of the National Academy of Sciences*, Vol. 107, No. 47, pp. 20340–20345 (2010)
- [4] Machinek, Robert RF and Ouldridge, Thomas E and Haley, Natalie EC and Bath, Jonathan and Turberfield, Andrew J.: Programmable energy landscapes for kinetic control of DNA strand displacement, *Nature communications*, Vol. 5, No. 1, pp. 1–9 (2014)