

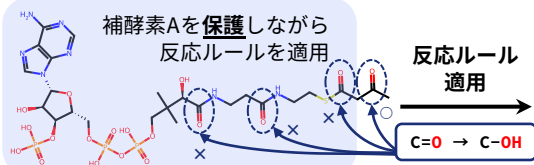
digzymeによる酵素インフォマティクスサービス

生合成経路探索

“生合成経路探索”では、目的化合物をバイオ生産するための生合成経路を探索します。経路に含まれる未知の酵素反応については、データベース中の 既知の酵素反応との類似度を計算し、実現可能性の高い生合成経路を選抜します。

化合物の局所構造に着目した反応ルールにより未知の酵素反応に対応

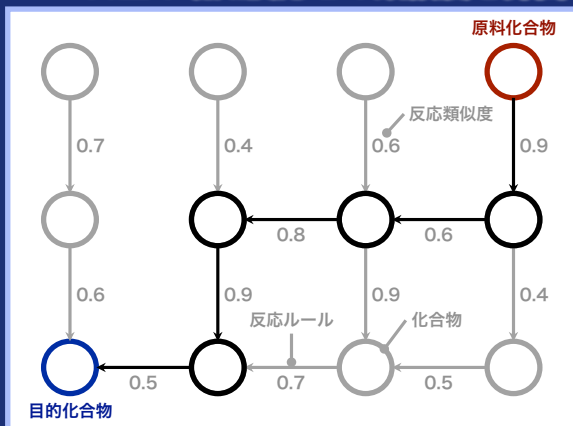
反応例：アルデヒド・ケトン還元



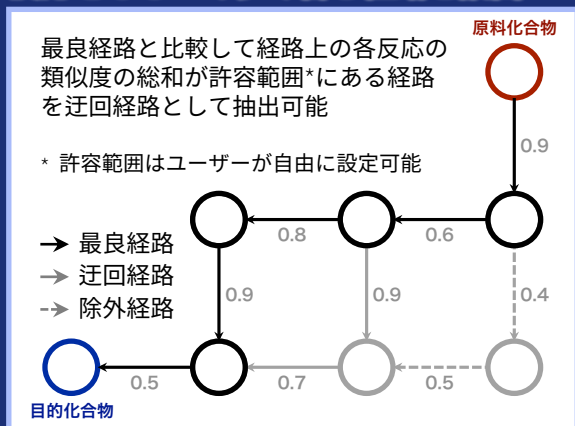
・積極的な未知反応創出に適している化合物の局所構造に着目した反応ルールを開発

・反応性を期待しない構造を保護することで無意味な反応を除外し、探索を効率化

創出された未知反応について、データベース上の既知反応との類似度を算出



ネットワーク拡張後、類似度の高い反応をなるべく多く含む経路を抽出



主な特徴

- ・ 局所構造のみに着目した反応ルールを用いることで、多数の候補反応を網羅
- ・ 反応性を期待しない構造を保護することで、無意味な反応を除き、探索を効率化
- ・ 既知反応に対する類似度を計算することで、実現可能性の高い生合成経路を選抜
- ・ 最短経路長に対する経路長の上限比率を指定することで、迂回経路探索にも対応
- ・ 順方向探索を用いることで、材料化合物から生合成可能な化合物群の列挙に対応