

Zárójelentés a „Simulation studies on prebiotic evolution: Infrabiological differentiation in the metabolic replicator system” c. OTKA K100806 sz. pályázatról

A K100806-os számú OTKA-pályázat keretében nagyjából – a kutatási programban megfogalmazottaknak megfelelően – a korai evolúció felszínkötött replikátor közösség együttélési-feltételeinek részletes vizsgálatával és evolúciójával foglalkoztunk matematikai modellek és számítógépes szimulációk segítségével. Ebben a témakörben született 4 kutatási [2, 4, 6, 10] és 2 összefoglaló [8, 9] publikáció rangos nemzetközi folyóiratokban, valamint 3-3 nemzetközi konferencia előadás [11, 12, 13] illetve poszter [14, 15, 16]. A matematikai/szimulációs módszertan továbbá azt is lehetővé tette, hogy más, a fenti témához lazábban kapcsolódó problémákkal is foglalkozhassunk. Így született meg a támogatási időszak alatt az a hiánypótló elméleti könyv [1], mely az eredeti darwini szemléletmód alapján (újra) egyesíti az ökológiai és evolúciós alapelveket. A matematikai modellezés módszertana az a kapocs, mely néhány további – tematikailag egymástól eltérő – cikk megjelenését is lehetővé tette. Az egyikben gombák szomatikus fúziójának ökológiai és evolúciós hatásait vizsgáltuk [5], a másokban pedig a HIV vírus fehérjéinek proteolitikus hasítási modelljével a vírus érésének dinamikáját tártuk fel, elősegítve ezzel a vírus elleni hatékony gyógyszerek kifejlesztését [3]. A szomatikus fúziós modell némi logikai módosítással és jelentős átinterpretálással humán populációk csoport-dinamikájának, ill. ennek az együttműködésre gyakorolt evolúciós hatásának vizsgálatában is hasznosnak bizonyult [7]

A prebiotikus vizsgálataink új irányokban is kiterjesztettük, Dr. Szilágyi András és Hubai András bevonásával. A közös munkák, melyek a prebiotikus replikátorok kompartmentalizációjáról és a prebiotikus reakcióhálózatok modellezéséről szóltak, csak most kezdődtek, de nagyon biztatóak és az első publikációk hamarosan el is fognak készülni [17, 18].

In English:

Our K100806 NKFI (OTKA) project has resulted in 12 publications on the topics for which we applied for funding, 4 related publications based on the methods developed for this project but on different subjects, and 2 papers in preparation. The publications related to our focal topic of prebiotic ribozyme evolution on mineral surfaces are four research papers [2, 4, 6, 10], two reviews [8, 9], all of them published in international journals of high impact, three oral presentations [11, 12, 13] and three posters [14, 15, 16] presented at international conferences. During the project period we have co-authored a theoretical textbook [1] on ecological and evolutionary processes, relying on the mathematical and simulation methodologies used in the project. The book re-interprets ecological principles on Darwinian grounds and builds the foundations of a coherent theory of ecology. It is also the common methodology that connects 3 other publications to this project: one is on the ecological and evolutionary consequences of somatic fusion in fungi [5], the other is an extension of that model to human cooperation and group dynamics, with a slight logical modification and a thorough re-interpretation of the fungal model [7]. The third one is on the dynamics of HIV viral infections based on a proteolysis model of viral peptides, leading to proposals on a way to combat the infection [3]. The prebiotic studies have also been extended in new directions during the project period, with the help of two excellent researchers later included in the staff: András Szilágyi and András Hubai. The new directions include promising mechanisms to produce replicator compartmentalization and the explicit modelling of metabolic reaction networks. The first two corresponding publications [17, 18] are being prepared.

Könyv:

[1] L Pásztor, Z Botta-Dukát, G Magyar, T Czárán and G Meszéna: *Theory-based ecology. A Darwinian approach*. Oxford University Press UK 2016.

Cikkek

[2] B Könnyű, T Czárán: *Spatial aspects of prebiotic replicator coexistence and community stability in a surface-bound RNA world model*. BMC EVOLUTIONARY BIOLOGY 13: 204, 2013. doi: 10.1186/10.1186/1471-2148-13-204.

[3] B Könnyű, SK Sadiq, T Turányi, R Hirmondó, B Müller, H-G Kräusslich, PV Coveney, V Müller: *Gag-Pol processing during HIV-1 virion maturation: A Systems Biology approach*. PLOS COMPUTATIONAL BIOLOGY 9(6): e1003103, 2013. doi:10.1371/journal.pcbi.1003103.

[4] B Könnyű, T Czárán: *Phenotype/genotype sequence complementarity and prebiotic replicator coexistence in the Metabolically Coupled Replicator System*. BMC EVOLUTIONARY BIOLOGY 14: 234, 2014. doi:10.1186/s12862-014-0234-8.

[5] T Czárán, RF Hoekstra, D Aanen: *Selection against somatic parasitism can maintain allorecognition in fungi*. FUNGAL GENETICS AND BIOLOGY 73C:128-137. 2014. doi: 10.1016/j.fgb.2014.09.01.

[6] B Könnyű, T Czárán: *Template directed replication supports the maintenance of the Metabolically Coupled Replicator System*. ORIGINS OF LIFE AND EVOLUTION OF BIOSPHERE 45: 105-112, 2015. doi: 10.1007/s11084-015-9409-6.

[7] T Czárán and DK Aanen: *The early evolution of cooperation in humans. On cheating, group identity and group size*. BEHAVIOUR 153: 1247–1266, 2016, DOI 10.1163/1568539X-00003337

[8] T Czárán, B Könnyű, E Szathmáry: *Metabolically Coupled Replicator Systems: Overview of an RNA-world model concept of prebiotic evolution on mineral surfaces*. JOURNAL OF THEORETICAL BIOLOGY 381: 39-54, 2015. doi:10.1016/j.jtbi.2015.06.002

[9] Á Kun, A Szilágyi, B Könnyű, G Boza, I Zachar, E Szathmáry. *The dynamics of RNA world: insight and challenges*. ANNALS OF THE NEW YORK ACADEMY OF SCIENCE 1341: 75-95, 2015. doi: 10.1111/nyas.12700

[10] B Könnyű, A Szilágyi, T Czárán: *In silico ribozym evolution in a metabolically coupled RNA population*. BIOLOGY DIRECT 10: 30, 2015. doi: 10.1186/s13062-015-0049-6

Konferencia publikációk

[11] T Czárán: *Template cooperation on surface*. Lecture in Lake-Balaton Meeting on System Chemistry, Badacsony 8-12 May 2013.

[12] B Könnyű: *Evolution of genome size on surface*. Lecture in Lake-Balaton Meeting on System Chemistry, Badacsony 8-12 May 2013.

[13] B. Könnyű, T. Czárán: *Template directed replication supports the maintenance of the Metabolically Coupled Replicator System*. Poster in 2nd ISSOL – The International Astrobiology Society and Bioastronomy (IAU CSI) Joint International Conference 6-11 July, 2014, Nara, Japan.

[14] B Könnyű, K Ruiz-Mirazo, T Czárán, E Szathmáry: *The co-evolution of membranes, metabolism and membrane channels within prebiotic vesicle: reserch proposal*. Lecture in COST

Action Meeting on Emergence and Evolution of Complex Chemical Systems.21-22 November 2014, Pullach, Germany.

[15] B Könnyű, A Szilágyi, T Czárán: *In silico rybozym evolution in a metabolically coupled RNA population*. Poster in 7th WIVACE 2015: the Workshop on Artificial Life and Evolutionary Computation. 22. September – 25. September Bari. Italy. Conference publication p. 61

[16] B Könnyű, A Szilágyi, T Czárán: *In silico rybozym evolution in a metabolically coupled RNA population*. Poster in Czech Chemical Society Symposium Series 3 & CMST COST Action CM1304 Conference SysChem 8 – 12. May 2016 Valtice Chateau, Czech Republic. Conference publication p. 111.

Előkészületben

[17] C Kőrössy, B Könnyű, T Czárán: Limited surface-bound diffusion of monomers in simple reaction networks and the coexistence of metabolically coupled competing replicators. In prep.

[18] B Könnyű, A Szilágyi, T Czárán: Levels of multi-functionality and division of labour in the Metabolically Coupled RNA Community (In prep.).

Kelt: **Budapest, 2016. 12. 27.**

Czárán Tamás, Dsc