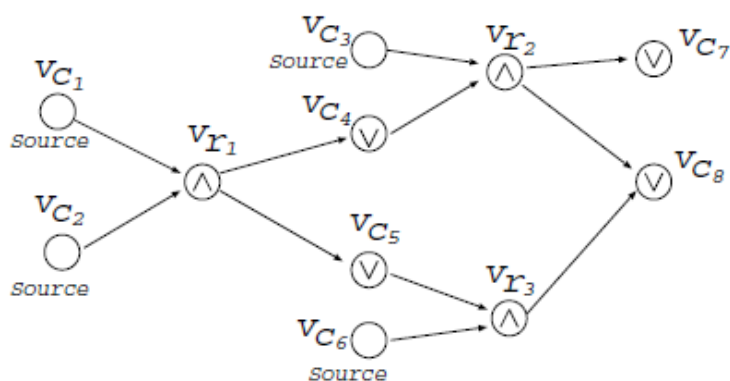


ブーリアンモデルによる生体ネットワークの統合的な数理モデル化と制御
Mathematical model and analysis of biological networks on Boolean model

京都大学化学研究所数理生物情報 田村 武幸

研究成果概要

細胞内には様々な化合物が存在し、互いに化学反応を繰り返すことにより生命活動が維持される。これらの化合物と反応の関係は代謝ネットワークにより表現される。この時、反応の触媒として機能するのが、遺伝子から作られた酵素と呼ばれるタンパク質である。代謝ネットワークも下図のようなブーリアンモデルで記述することが可能である。 v_r は反応、 v_c は化合物を表すノードである。例えば反応 r_1 は化合物 c_1 と c_2 から化合物 c_4 と c_5 を生成する。よって反応 r_1 が起こるための条件は $c_1 \wedge c_2$ と表せる。一方、化合物 c_8 は反応 r_2 と r_3 から生成されるので、化合物 c_8 の生成条件は $r_2 \vee r_3$ と表せる。このように代謝ネットワークは反応を $\wedge$ 、化合物を $\vee$ のノードで表現した否定を含まない二部グラフで表現できる。



ブーリアンモデルの代謝ネットワークにおいては各ノードに0か1が割り当てられる。化合物に1が割り当てられれば、その化合物は生成可能あるいは存在するということを意味し、0が割り当てられれば、その化合物は生成不可能あるいは存在しないということを意味する。一方で反応に1が割り当てられれば、その反応はおこることができることを意味し、0が割り当てられれば、その反応はおこることができないことを意味する。

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、微生物の代謝ネットワークにおいて、ホストネットワークの内部の反応を削除したり外部の反応を追加したりして、現在生成されてしまっている毒性化合物(不必要化合物)を生成不能にしたり、現在生成できていない必要化合物を生成できるようにする問題に対する高速アルゴリズムを開発・実装した。平成 27 年 9 月に東京で開催された GIW/InCoB2015 において成果を口頭発表した。