

# 計算生物学

## - 細胞内代謝制御機構の解析 -

知能情報学科 坂本直人

### 計算生物学とは？

- コンピュータの計算能力の驚異的進歩により、科学は、理論科学と実験科学に加え、計算科学により研究されるようになってきている。
- 計算科学は計算機実験により理論と実験結果を実証する。

理論物理学

理論化学

数理生物学

計算物理学

計算化学

計算生物学

実験物理学

実験化学

実験生物学

### 生物(生命をもつシステム)とは？

自己複製、代謝、突然変異の能力もつ組織体(システム)

## 細胞の代謝ネットワーク

細胞(生命をもつ最小のシステム:生物の構成単位)は代謝ネットワークにより生命を維持している。

### 代謝ネットワークとは？

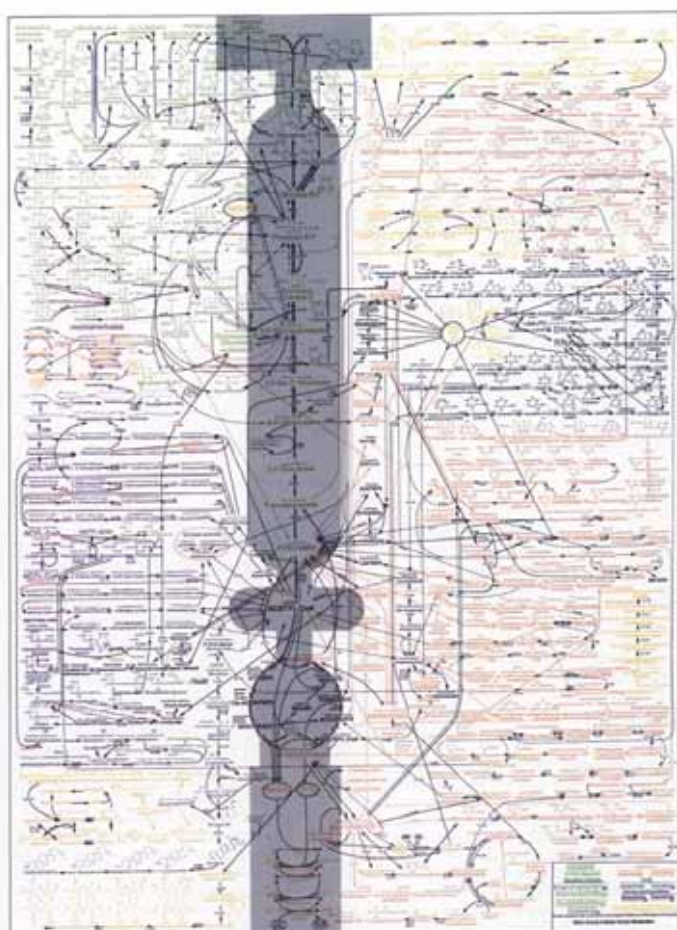


FIGURE 15-1. A map of the major metabolic pathways in a typical cell. The main pathways of glucose metabolism are shaded. [Designed by D. E. Nicholson. Published by BDH Ltd., Poole 2, Dorset, England.]

細胞内の全ての化学物質はそれぞれ固有の酵素反応により他の化学物質と関係づけられ、全ての酵素反応から代謝ネットワークが構成される。

細胞の代謝  
ネットワーク  
の例

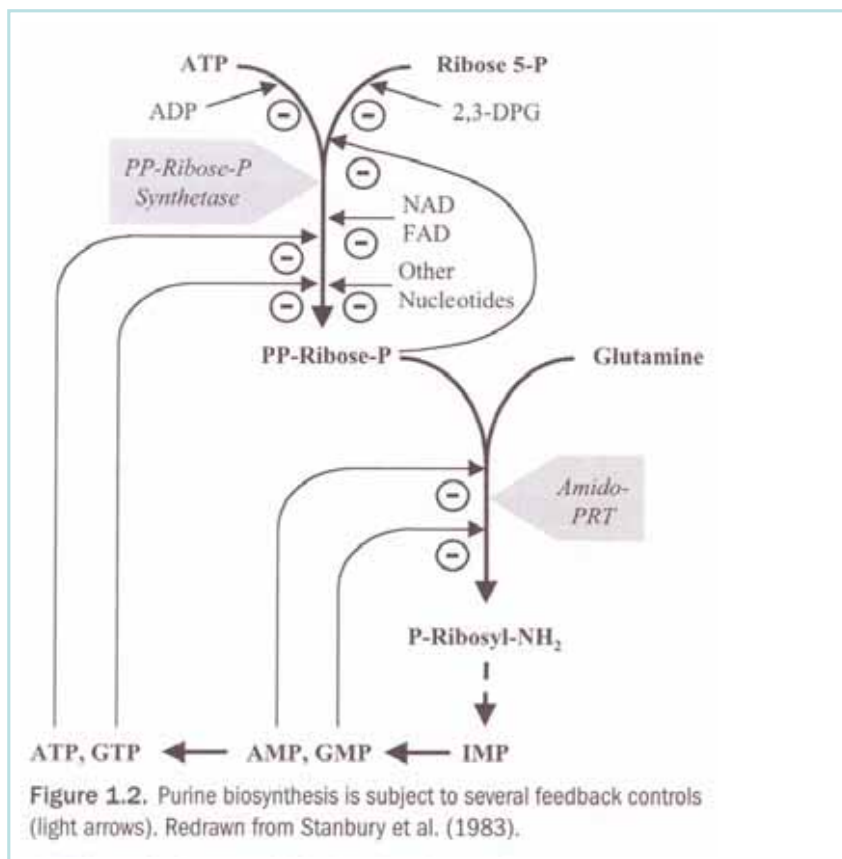
**[研究目標]** 細胞の生命現象を代謝ネットワークの機能として理解

## 細胞の情報処理の目的

細胞が生命を維持するため、細胞内代謝制御機構により情報処理が行われる。

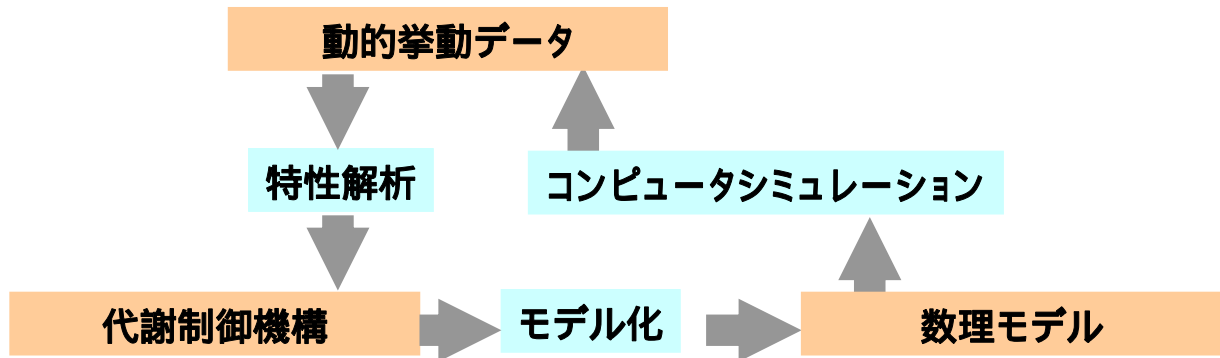
- 代謝ネットワークの生命現象の担い方の解明
- 代謝制御機構: 細胞の時々刻々の状態に応じて代謝ネットワークが最適に機能するように制御する機構 (状態情報から最適応答を出力する機構)

## 代謝経路 (代謝ネットワークの構成要素) の動特性と制御特性の解析



代謝経路の例

# シミュレーション解析



## ●代謝経路の数理モデルの作成

反応拡散系 (連続系)  
質量作用の法則 (反応速度式)  
フィードバック制御 (アロステリック阻害)  
非線形拡散方程式 (3次元空間)

- コンピュータシミュレーション
- 動特性と制御特性の解析

代謝制御機構の解明

細胞の生命現象を  
代謝ネットワークの機能として理解