

課題名 (タイトル) :

## 化学反応ネットワークと摂動応答

利用者氏名 : ○ 岡田 崇

所属 : 望月理論生物学研究室

### 1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

生体内の細胞では無数の反応たちがネットワークを作っている(代謝系ネットワーク)。代謝系には非常に多くの種類の分子が関与しているために、そのダイナミクスを理解するには多自由度の力学系を扱う必要がある。

本課題の目的は、代謝系のシステムを記述する数理モデルを数値計算によって調べることで、代謝システムを理解することである。特に、ネットワーク構造とシステムの動態にどのような関係があるかを明らかにすることが本課題の主な目的である。

### 2. 具体的な利用内容、計算方法

細胞内のダイナミクスは決定論的ではなく揺らぎが大きいと考えられるため、システムの正確な理解には確率的な記述が必要になる。

そこで、無数の化学反応の集合を用意して、各反応が確率的に生じるような状況を考え、その確率過程を生成した。

### 3. 結果

各分子濃度の揺らぎがどのように時間発展するか、および分子間の揺らぎの相関が得られた。

### 4. まとめ

分子濃度の揺らぎには、ネットワーク構造と密接に関係する相関があることがわかった。

具体的には、揺らぎの大きさは定常状態において各反応がどの程度頻繁に起こっているかを表すフラックスという量と関係していることが確認できた。

### 5. 今後の計画・展望

代謝系のネットワークは、web 上で利用可能なデータベースとして KEGG や BioCyc などがあるが、

いずれのデータベースも未だ不完全であり、真の代謝系の動態の理解は得られていない状況である。

本課題で取り組んできた、システムの動態とネットワーク構造との関係を調べることは、未知のネットワーク構造を明らかにする有力な方法であると期待できるので、今後も継続していきたい。

これまでの研究でネットワーク構造と揺らぎに密接な関係があることはわかってきたが、解析的な手法と組み合わせてより厳密な議論・結論を得られないか調べていくことが特に重要である。

また、代謝系のシステムは数学の制御・最適化の分野と深く関係する特徴を示すことが示唆されている。これは、生物が長い進化の歴史のなかで獲得されたものことから考えると自然なことであるが、具体的にどのようにして(あるいはどの程度)、生物がこのような最適化・制御の機構を実現しているかは興味深い問題であり、ネットワーク構造と制御の関係を明らかにしていきたい。