

代謝ネットワークを原子ネットワークとみる考え方とそのポテンシャルについて

Atom network view of metabolic networks and its potential

太田潤¹

Jun Ohta¹

(¹岡山大学)

(¹Okayama Univ.)

e-mail: jo25@md.okayama-u.ac.jp

代謝をネットワークとして考えることは Barabasi らのグループ[1]、Wagner and Fell [2] による報告以降、大きく浸透した[3,4]。ネットワークは、複数の点が、線によってつながれてできており、点に相当するものをノード、点をつなぐ線のことをエッジという。従来、代謝ネットワークは、代謝産物をノード、酵素反応をエッジとして、あるいは、酵素反応をエッジ、代謝産物をノードとして解析されてきた。代謝産物をノードとする解析の一部には、原子の移動を考慮に入れたものもある[4]。発表者は、Octave/Matlab 上で原子の移動を解析する系を開発する過程で、代謝産物間の原子の対応関係(酵素反応によるつながり)と、代謝産物内の原子の結合(化学結合によるつながり)が、同じ形式で表現でき、発表者が **connectivity matrix** と呼ぶ形式上に、両方を記述できることに気づいた[5,6]。このことをきっかけとして、代謝ネットワークを原子ネットワークとしてみる考え方に至った[7]。代謝ネットワークの原子ネットワーク構造には、代謝反応による原子の移動の情報と代謝産物の化学構造情報の両方が表現され、化学反応の **stoichiometry** の情報は、原子の移動の情報として保持される。原子ネットワーク構造は Pajek により可視化できる[8]。原子ネットワーク構造の考え方を基盤に据えることで、代謝産物の化学構造も含む、代謝ネットワーク構造の解析が可能になると考えている。現在、Heinrich らのグループが導入した **network expansion** の考え方[9]を原子ネットワークの考え方と組み合わせて原子ネットワークとしての仮想代謝ネットワークを生成し、実際の代謝ネットワークとの比較により、代謝ネットワークの構成原理を研究することを提案している[10]。本発表では、原子ネットワークの考え方を、その発展の経緯とポテンシャルを含めて紹介する。

Reference

- [1] Jeong H., Tombor B., Albert R., Oltvai Z.N., Barabasi A.L. (2000) *Nature*, 407(6804), 651-654
- [2] Wagner A. and Fell D.A. (2001) *Proc. Biol. Sci.*, 268(1478), 1803-1810
- [3] Ma H. and Zeng A.P. (2003) *Bioinformatics*, 19(2), 270-277
- [4] Arita M. (2004) *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, 101(6):1543-1547
- [5] Ohta J. (2004) *Proceedings for 5th International Conference on Systems Biology*, 141-141
- [6] Ohta J. (2006) *IEE Proc. Syst. Biol.*, 153(5), 372-374
- [7] 太田潤 (2006) 日本ソフトウェア科学会研究会資料 JWEIN2006 講演論文集, 44, 38-41
- [8] Ohta J. (2006) *GIW2006, Poster and Software demonstrations*, P146
- [9] Ebenhöf O., Handorf T. and Heinrich R. (2004) *Genome Inform.*, 15(1), 35-45
- [10] Ohta J. (2007) *The 7th International Workshop on Bioinformatics and Systems Biology*, P016