

「異種由来酵素反応機構情報の利用妥当性検証」

慶應義塾大学大学院 政策・メディア研究科 修士課程二年
学籍番号：80232045 鈴木良介

E-CELL プロジェクトは近年隆盛を遂げている細胞シミュレーション研究の好例であり、同プロジェクトでは、代謝シミュレーションをはじめとした様々なモデリングが行われている。

本研究の目的は E-CELL プロジェクトにおいて、代謝シミュレーションを行う際に問題となる未知データを推定により補完することである。今回は特に推定対象を酵素反応機構とした。つまり、対象生物の酵素反応についての情報が十分に得られない状況下でモデリングを試みるときに、異なる生物種由来の酵素反応機構情報を利用することが妥当であるかを検証することが本研究の目的なのである。

本研究の目的を達成するために検証したのは「進化的に同祖関係にある遺伝子について、その配列の類似度が一定以上に高い場合、それによりコードされる酵素の反応機構は同一である」という仮説である。この仮説の真偽の検証は、反応機構が同一である酵素群と非同一である酵素群について各群の配列類似度の平均を求め、その比較を行うことにより実現した。反応機構同一酵素群と非同一酵素群の間に、類似度についての有意な差が認められた上で、同一酵素群の方がより高い類似度平均値を示せば、仮説が正しいことが示されたといえるのである。

これらの作業は、既存の公開されているデータベースから比較可能なデータセットを作成し、それらに対して解析を行うことによって進められる。第一に、データセットを収集するためのプログラム Smith を開発し、データセットの作成を行った。その結果、解析可能な 37 のデータセットを得ることができた。第二に、それらのデータセットに対して Mann-Whitney 検定を実行した。結果、酵素反応機構が同一群と非同一群の二群間において配列類似度に有意な差（有意確率 = 0.05）があることが示された。また、同一酵素群における配列類似度平均は非同一酵素群における平均値よりも高い値を示した。これらの結果より仮説は支持され、一定以上の配列類似度を示すとき、異種由来酵素反応機構情報を利用することは妥当であるということが示された。