

2S27 細胞のコンピュータシミュレーション：E-CELL プロジェクトの経過報告と将来展望
○富田勝、橋本健太、高橋恒一、松崎由理、柚木克之、三由文彦、斎藤裕介、
中山洋一

E-CELL は細胞の全体または一部の代謝活動をコンピュータ上で再構築するために開発した汎用のシミュレーションソフトウェアである。E-CELL は酵素反応や膜輸送、遺伝子発現などの化学反応を Reaction Rule として個々に定義するとそれらを疑似並列に実行し全体の振る舞いをシミュレートする。この E-CELL システムを用いて、我々は現在までに 127 個の遺伝子からなる仮想の「自活細胞モデル」を完成させた（参考記事 Science 284:5411 p80-81）。このバーチャル細胞は膜外からグルコースを取り込んでそれを解糖系によって分解しエネルギー（ATP）を生産する。また、細胞膜生成のためのリン脂質合成系をもち、脂肪酸とグリセロールを取り込んでホスホチジルグリセロールを合成しこれが細胞膜となる。遺伝子発現のための転写機構（RNA ポリメラーゼなど）および翻訳機構（リボソーム等）を持ち、遺伝子から蛋白質を合成する。現在はよりリアルなシミュレーションを目指して（1）ヒト赤血球（2）大腸菌化学走性（3）*lac* オペロンなどの遺伝子発現ネットワーク（4）ミトコンドリア細胞の詳細なモデリングを行っている。

赤血球細胞についてはベーシックなモデルが完成し、酵素活性を人工的に阻害することによって、先天性貧血の原因である G6PD 欠損症などの遺伝病における赤血球細胞の状態をコンピュータ上に再現することを試みている。また、これら E-CELL のシミュレーション結果をシステムティックに分析する数理解析法も開発している。E-CELL システムのソフトウェア（ベータバージョン）は 99 年 7 月からウェブ上で一般公開されている（<http://www.e-cell.org>）。

シミュレーション、細胞モデル、バイオインフォマティクス、生命情報科学