

スーパーコンピュータがもたらす細胞シミュレーションの新時代

高橋 恒一

理化学研究所

計算システム生物学の究極的な目標は遺伝子情報に基づいた計算機上での細胞機能の再構築である。シミュレーションが実用的であるためには計算結果が定量的に評価可能でありかつ予測能力を持つ事が求められるが、これまでの試みでは代謝系などでは一定の予測能力を確保出来た一方で、遺伝子系および信号伝達系では細胞内の巨大分子混雑や微小環境などのいわゆる細胞環境の特異性により強く影響を受けるため、計算の精度が十分ではなかった。近年、計算手法面でのブレイクスルーや「京」などのスーパーコンピュータの出現を契機に、従来の電気回路様の反応ネットワークモデルから分子一つ一つの粒度で解像する1分子粒度モデルへの転換が進みつつあり、より予測能力の高まったシミュレーションの実現が期待されている。ヒト細胞の上皮成長因子応答経路のシミュレーションを中心に、計算手法やモデル構築、可視化手法を含め、一般的に議論する。