

## ARMプロジェクト

納豆菌の兄弟となる枯草菌の研究者の間では、納豆は一度凍らせてから食べるのが常識のようです（食べる前に解凍してください）。味に深みが出るそうで、そう聞いて食べると確かにおいしいです。うまみのもとグルタミン酸なので、納豆菌が凍えるときにその合成が促進されるのかもしれませんが。

代謝の研究とは、このように有用物質の生産量アップを目指す分野といえるでしょう。これは日常生活にも大きな影響を及ぼす分野です。バクテリアを用いた生合成は、食品に限らず医薬品や農業にも応用されています。

では、有用物質の合成量を計画的に増やすにはどうしたらよいでしょうか。ここではゲノムプロジェクトが大成功に終了し、遺伝子の機能が全てわかったと仮定します。まず、その物質がどうやって合成されるのか、その合成経路を全て知っておかねばならないでしょう。つまり、

遺伝子機能の集合 → 特定物質の全合成経路の列挙

ができることが第一段階です。

驚くことに、世の中で利用される代謝のデータベースやソフトウェアでは、このあたりまえの機能が実現できていません。なぜなら、それらのデータベースでは代謝中における物質構造の（原子レベルの）変化が記述されていないからです。このままでは、納豆を凍らせる生活から脱却できないかもしれません。

そこで筆者が作成したのがARM (Atomic Reconstruction of Metabolism) システムです。これは

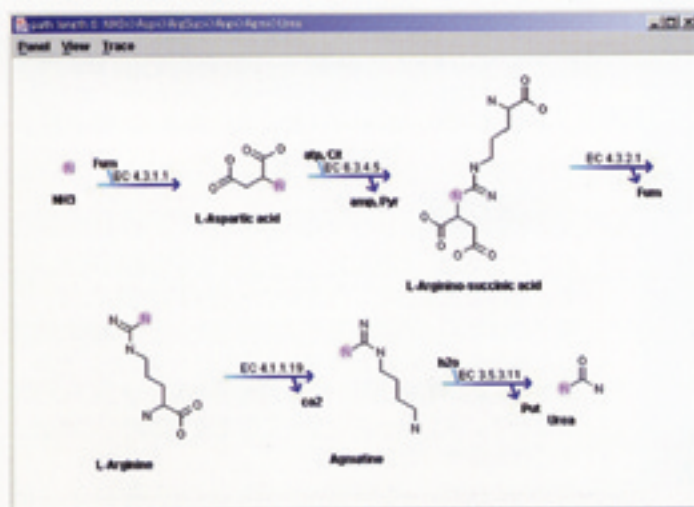


図1 酵素(ライゲース)における物質構造の変化。対応する部分が同じ色で示されています。色づけはソフトウェアが自動的におこないます。



有田正規  
(数理モデル・知識表現チーム、研究員)

CBRCの中でも研究内容が有田的と言われるが、自分では常識人だと信じ込んでいる。料理を作ることも食べることも好きで、好きな食べ物はもちろん納豆である。

物質の構造変化を原子レベルで記述した世界初のデータベースです。しかも、酵素反応式と各物質の構造データだけから、反応における構造変化の様子を自動的に計算する機能を備えています(図1)。これにより、物質変化を手で一つ一つ記述することなく、合成経路を列挙できるようになりました(図2)。

ただ、今のところARMでできることは、論理的に可能な全ての経路を列挙するだけです。

どの経路が生物学的に重要かという考慮はできていません。未知経路の予測と経路の優先順位付けが、これからの研究の目標です。更なる粘り強い研究を重ね、食品や医薬品の合成に貢献できるソフトウェア作りをしたいと考えています。

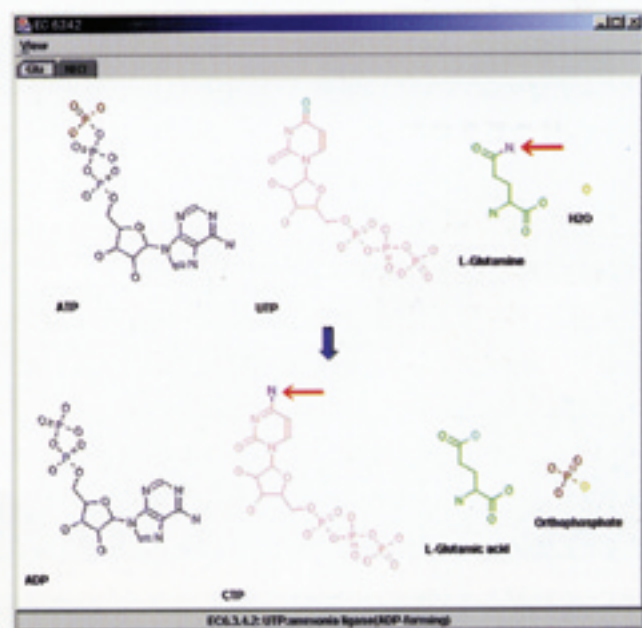


図2 アンモニアから尿素まで窒素の移動を追ってみた例。紫色にハイライトされているのが窒素原子です。(←部分)