Summary of “Graph Theory and Analysis of Biological Data in Computational Biology

生物学や薬学の分野ではグラフ理論を用いた分析が行われている。グラフ理論によってデータから情報を引き出す生物学分野はいくつか存在し、バイオマーカーネットワークのモデル化、重要なバイオマーカーの調査、生物のネットワークにおけるモチーフや機能モジュールを特定、新規のバイオマーカーネットワークの発見の4つである。この分野における重要な進歩を可能な限り幅広く紹介する。

バイオマーカーネットワークのモデル化

転写制御ネットワーク、代謝ネットワーク、タンパク質相互作用ネットワークがバイオマーカーネットワークとして調査されてきた。最初の2つは有向グラフ、タンパク質相互作用ネットワークは無向グラフとして表される。

転写制御ネットワークは遺伝子間の上方、下方調節を向きのある枝で繋ぐことで表される。時間による動的な変化を表すことができないので、ネットワークをシミューレートする動的モデルの骨格として用いられる。

代謝ネットワークは多くの基質と代謝物と反応を支える要素が存在するため、非常に複雑なグラフになる。そこでハイパーグラフや重み付けグラフが用いられる。代謝ネットワークは多くのノードはわずかな枝しか持たない一方で、いくつかのノードのみ非常に多くの枝を持つモデルが適合することがわかった。また、代謝ネットワークは頑健性を有し、大きな変化が起きても同じように機能することがわかった。

タンパク質相互作用ネットワークは節がタンパク質、枝が相互作用を示す無向グラフで示される。近年ハイスループットによるデータ収集により、様々な生物におけるネットワークが構築されている。

バイオマーカーネットワークにおける中心性、重要性の測定

生物の機能は非常に複雑な相互作用の結果として表れるが、相互作用のネットワーク中の他から独立して機能する存在であるモジュールを認識することで、生物機構のコンピューター研究は前進した。生物のネットワークを用いて、進化をシミューレートする調査が行われていて、実験と合わせてますますモジュールへの理解が深まることが期待される。

生物のネットワークにおけるモチーフや機能モジュールの同定

生物のシステムをネットワークと見たとき、工学的システムと多くの共通点を見つけることができる。モジュールが存在し、繰り返し要素を含むことなどである。近年、3,4の節からなるサブグラフであるモチーフが繰り返し期待される以上の頻度で現れることが発見され、注目されている。さらなる研究が期待される。

バイオマーカーネットワークからの新規の経路の探求

既知のデータより、代謝回路などの生物のネットワークを推定して構築する試みが行われているが、困難が多い。しかしながら、生物のネットワークの推定が可能になれば、生物中の複雑なプロセスの解明や生体触媒を用いた合成経路のデザインに役立てるだろう。

バイオマーカーの相互作用に関する莫大なデータが利用可能になろうとしている。グラフ理論はこれらの情報を表現する直接的な方法であり、近年、複雑な生物のネットワークの理論化と分析に大きく貢献してきた。バイオインフォマティクスにおける生物ネットワークの分析は不可欠であり、興味深いものだ。