

2023 年度年次報告書

数学・数理科学と情報科学の連携・融合による情報活用基盤の創出と社会課題解決に向けた展開

2020 年度採択研究代表者

小林 徹也

東京大学 生産技術研究所
教授

構造的・動力学的制約を活用した多元混合化学情報の解釈とその応用

主たる共同研究者:

秋山 泰身 (理化学研究所 生命医科学研究センター チームリーダー)

舟橋 啓 (慶應義塾大学 理工学部 教授)

南 豪 (東京大学 生産技術研究所 准教授)

研究成果の概要

本年度、数理グループは前年度に発展させた反応系の代数・幾何構造の理論を、一般化勾配流および情報幾何学の概念を軸に更に数理的に整理・体系化し、その一般論を発表した¹⁾。この理論は反応系のみならず多細胞動態、生態系などグラフ・ハイパーグラフ上の非線形動態として表せる多様な現象を包含する一般性の高いものである。その理論を反応系の収束速度評価や細胞の発生動態の解析²⁾、そして化学反応や細胞動態の制御理論などへ応用する研究も進めた。並行して、情報グループとの共同で開発を進めていた、分子構造から嗅覚知覚を優れた精度で予測する深層学習モデル(Mol-PECO)を発表した³⁾。

情報グループは、生体神経ネットワークに豊富に含まれる部分構造を反映させる様に学習器の重みを初期化する手法を検討し、既存の初期化手法と比較して Add, Sort, Copy などのタスクにおいて優れた長期記憶を達成することを確認した。

生物グループは、胸腺上皮細胞の遺伝子発現に対する障害の影響を検討し、半致死量の放射線を照射後にシングルセル遺伝子発現を計測することで、その影響が照射後も長期に持続することを明らかにした。この影響の詳細は数理グループでさらに解析を進めている。また、自己免疫疾患症状に相関する TCR レパトア配列を抽出や、胸腺上皮細胞で特異的にオートファジーを誘導し自己免疫疾患の発症を促す因子を同定した⁴⁾。

工学グループは、複数の認識点を合目的に導入することができる高分子をセンサープラットフォームに採用し、異なる応答濃度を示すレセプターを設計し、病理診断において重要なマーカーとなる構造多様性を持つオキソアニオン類に対する原理実証を進めた⁵⁾。また、交差応答性を示す人工レセプターの設計をさらに発展させ、多元混合情報からなる風味を可視化するための化学センサーの開発を進めた。

【代表的な原著論文情報】

- 1) Tetsuya J. Kobayashi, Dimitri Loutchko, Atsushi Kamimura, Shuhei A. Horiguchi & Yuki Sughiyama, "Information geometry of dynamics on graphs and hypergraphs", Information Geometry, (2023) <https://doi.org/10.1007/s41884-023-00125-w>
- 2) Shuhei A. Horiguchi and Tetsuya J. Kobayashi, "Cellular gradient flow structure linking single-cell-level rules and population-level dynamics", Phys. Rev. Research 5, L022052 (2023)
- 3) Mengji Zhang, Yusuke Hiki, Akira Funahashi, and Tetsuya J. Kobayashi, "Mol-PECO: a deep learning model to predict human olfactory perception from molecular structures," npj Systems Biology and Applications to appear.
- 4) Takakura Y, Machida M, Terada N, Katsumi Y, Kawamura S, Horie K, Miyauchi M, Ishikawa T, Akiyama N, Seki T, Miyao T, Hayama M, Endo R, Ishii H, Maruyama Y, Hagiwara N, Kobayashi TJ, Yamaguchi N, Takano H, Akiyama T*, Yamaguchi N., Mitochondrial protein C15ORF48 is a stress-independent inducer of autophagy that regulates oxidative stress and autoimmunity. Nature Communications. 15: 953 (2024)
- 5) Yui Sasaki, Kohei Ohshiro, Kiyosumi Okabe, Xiaojun Lyu, Kazuhiko Tsuchiya, Akira Matsumoto, Shin-ya Takizawa, Tsuyoshi Minami, Zn(II)-Dipicolylamine-Attached Amphiphilic

Polythiophene for Quantitative Pattern Recognition of Oxyanions in Mixtures, Chemistry an Asian Journal, 18, e202300372 (2023)