

2023 年度年次報告書

データ駆動・AI 駆動を中心としたデジタルトランスフォーメーションによる生命科学研究の革新

2021 年度採択研究代表者

木賀 大介

早稲田大学 理工学術院

教授

ありえた生体高分子ネットワークを創出する BioDOS の構築

主たる共同研究者:

宮崎 和光 (大学改革支援・学位授与機構 研究開発部 教授)

山村 雅幸 (東京工業大学 情報理工学院 教授)

研究成果の概要

本研究でのバイオ DX の主な対象である人工遺伝子回路の設計では、ルールベースを活用する論理推論 AI である Prolog により、過去に代表者が実装した人工遺伝子回路をルールにより記述することで、ルールの組みあわせとして人工遺伝子回路を自動設計している。ここで、新たに追加されたルールが既存のルールと論理推論 AI により組み合わせられることで、ルール数の増加以上に設計される回路の数が増加することに意義がある。本年度は実際に、このようなルールの追加により、新規目的に対する自動設計も可能であることを明らかにした。また、新規ルールの追加のために論文から情報を自動抽出する準備として機械学習に種々の改良を行い、その一つでは深層強化学習が有効であることを示した。

本研究でのバイオ DX の別の方向として、情報処理による研究の高度化がある。この目的に対応し、無細胞タンパク質転写翻訳系における反応条件の最適化を、本研究で購入した微量自動分注機を活かした機械学習によって行った。また、無細胞タンパク質転写翻訳系におけるリソース競合を解析し、この問題を解決する方策について論文を発表した¹⁾。また、生成 AI により、人工遺伝子回路の素子となる新規タンパク質を創出した。

本研究でのバイオ DX のもう一つの方向が、人間による生物実験操作では困難な点の自動化にある。上段落の反応条件最適化でも活用された自動分注機を用いて、細胞を緻密に固形培地上に配置することで、人工遺伝子回路によって規定される、遺伝子発現の空間パターンを形成することができた。

【代表的な原著論文情報】

- 1) Enomoto, T., Ohtake, K., Senda, N., Kiga, D. Correlation Between In Vitro and In Vivo Gene-Expression Strengths is Dependent on Bottleneck Process. *New Gener. Comput.* (2024).
<https://doi.org/10.1007/s00354-024-00259-0>