

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

2020年度 年次報告書
-----------------

小林 徹也

東京大学 生産技術研究所  
准教授

構造的・動力的制約を活用した多元混合化学情報の解読とその応用

## § 1. 研究成果の概要

生体における多元混合化学情報を理解するための基盤なる反応系の代数構造の包括的な理論構築に着手をした。

代数幾何からネットワーク理論まで個別の分野で発展してきた理論とその相互関係を整理し、それらを統一的に理解する筋道をつけた。また、細胞系の匂い感知や獲得免疫系の学習過程を情報理論・学習理論をもとにモデル化し定量データと対応づける研究を進めた。

一方、生体の神経系や免疫受容体、遺伝子制御系などを対象として、それぞれに典型的に見られるネットワーク構造や局所配列構造などを探索し、それらデータに見られる制約を活用したデータ解析技術の開発に着手をした。開発するデータ解析法の検証や応用にむけて、次世代シーケンスによる T 細胞免疫受容体の計測方法の検討、および人工レセプターのスクリーニングとそれを活用したセンサーシステムの開発を行った。

そして生命医科学の諸問題への機械学習の最新応用事例や、その背景となる数理を概説した特集号を編集・出版した。

## § 2. 研究実施体制

### (1) 小林グループ

① 研究代表者: 小林 徹也 (東京大学大学生産技術研究所 准教授)

② 研究項目

- ・項目1-A: 代数構造を持つ非線形動力学理論の構築と多元混合化学情報認識の理解
- ・項目1-B: 理論をデータ解析やシステム設計につなげる方法論の構築
- ・項目2-A: 多様な制約を考慮した嗅覚・免疫系のデータ駆動型予測とアルゴリズムの構築

### (2) 舟橋グループ

① 主たる共同研究者: 舟橋 啓 (慶應義塾大学理工学部 准教授)

② 研究項目

- ・項目1-B: 理論をデータ解析やシステム設計につなげる方法論の構築
- ・項目2-B: 多様な制約を考慮した遺伝子発現系のデータ駆動型予測とアルゴリズムの構築
- ・項目4-A: 生体情報処理の拘束に着想した新規機械学習アルゴリズムの構築

### (3) 秋山グループ

① 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)

② 研究項目

- ・項目3-A: 免疫誘発をラベルとした免疫抗原受容体のラベル付きデータセット構築
- ・項目3-B: 動物モデルを用いた介入実験による理論予測の実験的検証

(4) 南グループ

① 主たる共同研究者:南 豪 (東京大学生産技術研究所 准教授)

② 研究項目

- ・項目4-B:人工レセプターのスクリーニング
- ・項目4-C:同時多成分物質分析を可能とする有機 TFT センサーアレイの構築

【代表的な原著論文情報】

- 1) K. Nakamura and T. J. Kobayashi, Connection between the Bacterial Chemotactic Network and Optimal Filtering, *Phys. Rev. Lett.* vol. 126, 128102, (2021)
- 2) T. Kato and T. J. Kobayashi, Understanding adaptive immune system as reinforcement learning, *Phys. Rev. Research* 3, 013222, (2021)
- 3) 小林, 徹也, 杉村, 薫, 舟橋, 啓(編・著), 機械学習を生命科学に使う! : シークエンスや画像データをどう解析し、新たな生物学的発見につなげるか, *実験医学増刊* Vol.38 No.20. (2020)
- 4) T. Ishikawa, N. Akiyama, T.Akiyama, In Pursuit of Adult Progenitors of Thymic Epithelial Cells, *Front. Immunology*, vol. 25, 12:621824 (2021).
- 5) Y. Sasaki, X. Lyu, Q. Zhou, and T. Minami, Indicator Displacement Assay-based Chemosensor Arrays for Saccharides using Off-the-Shelf Materials toward Simultaneous On-site Detection on Paper, *Chem. Lett.* vol. 50, pp. 987-995 (2021)
- 6) 南 豪(著), “有機トランジスタ型化学センサの開発動向”, *ウェアラブル医療・ヘルスケア機器の技術と市場*, シーエムシー出版, 2020.