

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

2021 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

本年度は、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を進めた。情報幾何学を基礎とする理論を構築し、平衡化学反応系の幾何学理論とその応用範囲を大きく拡張した。また、免疫受容体シーケンスデータからウイルス感染の有無を低サンプルでも安定して推定可能な機械学習手法の構築し、サイトメガロウイルス感染データでその性質を調べると同時に、小規模サンプル数の HIV 感染データなどにより手法の有効性を確かめた。並行して、時系列データなどから遺伝子制御構造を推定する新しい情報学的方法論の開発を進めた。加えて、理論や情報学的手法の検証に用いられる免疫実験系を複数検討し、多種の化学物質を機械学習的パターン認識で認識しうる新規センサー系の開発と実証を進めた。

§ 2. 研究実施体制

(1) 小林グループ(東京大学)

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(慶應義塾大学)

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(理化学研究所)

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(東京大学)

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) “Forward and Backward Bellman Equations Improve the Efficiency of the EM Algorithm for DEC-POMDP”, *Entropy*, vol. 23, No. 5, 551, 2021.
- 2) “Acceleration of evolutionary processes by learning and extended Fisher’s fundamental theorem”, *Phys. Rev. Res*, vol. 4, 013069, 2022.
- 3) “Optimal sensing and control of run-and-tumble chemotaxis”, *Phys. Rev. Res*, vol. 4, 013120, 2022.
- 4) “Detection of polyamines by an extended gate-type organic transistor functionalized with a carboxylate attached 1,3,4-thiadiazole derivative”, *Journal of Materials Chemistry C*, vol. 9, No. 35, pp. 11690–11697, 2021

- 5) “Multi-Oxyanion Detection by an Organic Field-Effect Transistor with Pattern Recognition Techniques and Its Application to Quantitative Phosphate Sensing in Human Blood Serum”, ACS Applied Materials & Interfaces, vol. 14, No. 20, pp. 22903-22911, 2022