

未来社会創造事業（探索加速型）
「次世代情報社会の実現」領域
終了報告書（探索研究）

令和4年度採択研究開発代表者

[研究開発代表者名:藤田 大士]

[京都大学 高等研究院・准教授]

[研究開発課題名:分子～個体ワイドな包括的生理シグナル情報収集]

実施期間：令和4年10月1日～令和7年3月31日

§1. 研究実施体制

(1)「大規模な分子↔細胞データ取得のための基盤整備」グループ(京都大学)

① 研究開発代表者:藤田 大士 (京都大学高等研究院、准教授)

② 研究項目

- ・ 分子スケールのデータ収集解析基盤の開発
- ・ 生化学実験(細胞実験)のトイデータ収集
- ・ 生化学実験(細胞実験)の継続的データ収集法の確立
- ・ 生化学実験(構造解析)の継続的データ収集・解析法の確立
- ・ 生化学実験の実験設計およびデータ解析基盤案の確立

(2)「薬剤応答の基礎データ収集」グループ(東北大学・筑波大学)

① 主たる共同研究者:井上 飛鳥 (東北大学薬学研究科、教授)

主たる共同研究者:斉藤 毅 (東北大学国際統合睡眠医科学研究機構、准教授)

② 研究項目

- ・ (1)班の生化学実験の立ち上げの支援および指導
- ・ 各種薬物投与時の基礎データ収集

(3)「情報解析・実験デザイン」グループ(統計数理研究所・京都大学・東京大学)

① 主たる共同研究者:梅谷 信行 (東京大学大学院情報理工学系研究科、准教授)

主たる共同研究者:水野 忠快 (東京大学大学院薬学系研究科、助教)

主たる共同研究者:池田 思朗 (統計数理研究所、教授)

主たる共同研究者:鹿島 久嗣 (京都大学大学院情報学研究科、教授)

② 研究項目

- ・ (1)班の生化学実験の実験デザイン
- ・ (1)班の生化学実験の初期データの解析
- ・ 高効率の生化学実験アルゴリズムを作成

§2. 研究開発成果の概要

本研究開発課題は、従来の手法では捉えきれなかった「弱くコンビナトリアルな相互作用」の解明と応用を目的としている。この目的を達成するため、情報学の視点から分子生物学の基礎理論と実験系の再構築に取り組んだ。主な成果として、分子の遭遇確率や頻度に基づく新たな確率論的分子理論を構築し、平衡状態が局所的な分子環境の変化により調整可能であることを示した。この理論により、従来のモル濃度に基づくアプローチでは説明困難だった現象の理解が進んだ。また、ナノ構造を利用した高感度相互作用検出系を開発し、従来法と比較して二桁以上の感度向上を達成した。この技術により、これまで検出が困難だった解離定数が 10^{-3} M 以上の弱い相互作用の観測に成功し、生体内での微細な相互作用の解析が可能となった。さらに、情報理論に基づく新概念実験アルゴリズムを開発し、複数成分が同時に関わる系のスクリーニングを大幅に効率化した。この方法により、従来法よりも少ない実験回数で多成分の相互作用データを取得することが可能となり、複雑な生体システムの解析に新たな道を開いた。これらの理論と技術を創薬研究に応用し、細胞接着に関わる重要なタンパク質の機能を調節する新規分子を発見した。この分子は特定の疾患治療薬としての可能性が示唆され、現在、臨床応用に向けた準備を進めている。加えて、本研究で開発した手法を用いて、従来は解析が困難だった

複雑なシグナル伝達経路の解明にも成功し、生命現象の理解を深めることができた。これらの成果は、生命科学の基礎研究に新たな視点をもたらすだけでなく、創薬研究や診断技術の開発にも革新的な方法論を提供する可能性がある。

【代表的な原著論文情報】

なし