

論文内容の要旨

博士論文題目 グラフ構造に基づいたアルカロイド化合物の分類およびたいしゃ経路予測
氏名 江口 遼平

(論文内容の要旨)

二次代謝産物は、生物の成長、発生または生殖に直接関与しない一群の天然化合物として定義される。代謝経路の文脈における「二次的」という用語は、1891年に導入された。二次代謝産物の生物の生体内における機能は、害虫および病原体に対する防御反応、太陽光などの刺激に対する防衛反応などを含む進化過程において獲得された生体分子活性に関連する。そのため二次代謝物と化学構造および代謝経路との関連性を明らかにすることは、代謝産物の活動に重要な手がかりを与え、進化過程における二次代謝産物の機能獲得メカニズムの解釈につながる可能性がある。本研究では数ある二次代謝物のうち構造多様性が非常に高いアルカロイド化合物を研究対象としており、これらの生合成に関する情報を最新の学術文献から収集することで、アルカロイド化合物の経路情報の拡充を行った。現在、KNAPSAcK Core データベースで収集されているアルカロイド化合物種は、約1万件におよぶ。そのうち、代謝経路が解明されている代謝物は約600程度である。アルカロイド化合物の特徴は、窒素を含む多様な環構造にある。そこで、代謝経路既知のアルカロイド化合物と同一の環骨格構造と有するものは、約1万種のうち約3千種であり、残り約7千種のアルカロイド化合物については、代謝経路は未知であった。アルカロイド化合物の代謝経路としての特徴は、出発物質に、アミノ酸を用いることにある。そこで、経路情報と結びついたアルカロイド化合物の出発物質の予測をグラフ畳み込みネットワークを用いた学習モデルによる出発物質の予測を試みたところ、95%を越える良好な識別が可能となった。つまり、複雑な環骨格を有するアルカロイド化合物の中には、出発物質の構造特徴が含まれていると推測された。このことは、二次代謝物構造-代謝経路間の関係性を体系的に理解する重要な知見である。

氏 名	江口遼平
-----	------

(論文審査結果の要旨)

平成29年12月22日に開催した公聴会の結果を参考に、平成30年2月16日に本博士論文の審査を実施した。

以下に述べる通り、本博士論文は、本学位申請者が情報科学のデータサイエンス分野で研究開発活動が続けていくために必要十分な素養を備えていることを示すものである。

江口遼平は、アルカロイド化合物の出発物質の予測をグラフ畳み込みネットワークを用いた学習モデルによる出発物質の予測を試みた。その結果、非常に良好な識別が可能となった。つまり、複雑な環骨格を有するアルカロイド化合物の中には、出発物質の構造特徴が含まれていると推測された。

本論文は、情報科学とバイオインフォマティクスの境界領域をデータサイエンスによりつなぐメタボロミクスの発展に大きく貢献するものである。よって、本論文は、博士(工学)の学位論文として十分な価値があるものと認める。