



配布先: 文部科学記者会、科学記者会、名古屋教育記者会

報道の解禁日(日本時間)
(テレビ, ラジオ, インターネット) : 2024年7月2日(火) 午前9時
(新聞) : 2024年7月2日(火) 付夕刊

2024年7月1日

報道機関 各位

食品の機能性を機械学習で予測する手法を開発 ～5万種の成分と健康への作用を探索、疾病予防に活用～

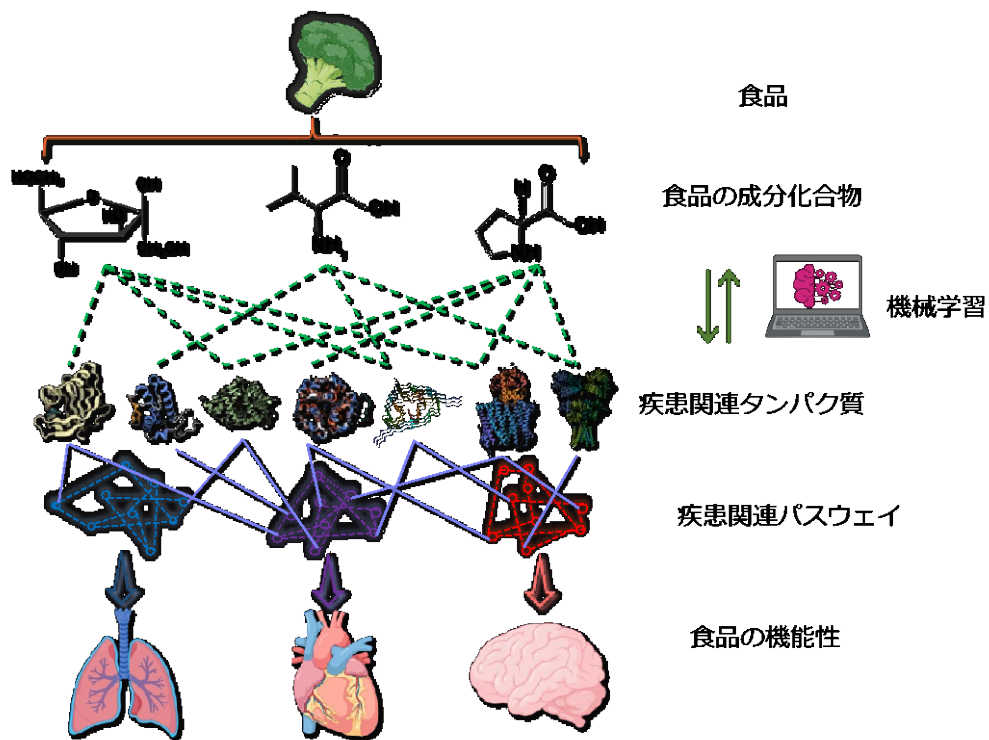
【本研究のポイント】

- ・生命医薬ビッグデータを用いて、食品の機能性を網羅的に予測する新しい機械学習^{注1)}手法を開発した。
- ・食品成分化合物が作用する生体分子群を機械学習で推定することで、様々な疾患に対する機能性のメカニズムを探索できる。
- ・提案手法は、疾病予防に対する食品の効率的な活用を促し、健康寿命の延伸へとつながることが期待される。

【研究概要】

名古屋大学大学院情報学研究科の山西 芳裕 教授、九州工業大学大学院情報工学府の三枝 奈々子 博士後期課程学生、同大学院情報工学府の柴田 友和 研究員は、ハウス食品グループ本社株式会社との共同研究により、生命医薬ビッグデータを用いて、食品の機能性を網羅的に予測する新しい機械学習手法を開発しました。約5万種類の食品成分化合物と約4800種類のヒトタンパク質^{注2)}の間の相互作用を探索し、疾患に関与するタンパク質群の制御を考慮するのが特徴です。この手法を用いて、876種類の食品が有する新しい機能性や、その作用メカニズムの推定に成功しました。本研究の提案手法は、疾病予防に対する食品の効率的な活用を促し、健康寿命の延伸へとつながることが期待されます。

本研究成果は、2024年7月2日午前9時(日本時間)付米国科学誌「Journal of Chemical Information and Modeling」で公開されます。



【研究背景と内容】

先進国では高齢化社会が進み、医療費の拡大が社会問題となっています。原因の一つには健康寿命と平均寿命の乖離があり、その解決には健康維持に対する日常的な取り組みが重要です。食品は日々摂取するものであり、また食品に含まれる成分化合物には生体を調整するものが数多くあります。このことから、食品を選択的に摂取することは、疾病予防さらには平均寿命延伸につながると考えられます。しかしながら、ほとんどの食品の健康効果やその作用メカニズムはよく分かっていません。

本研究で、生命医薬ビッグデータを用いて、食品の機能性を網羅的に予測する機械学習手法を開発しました(図1)。まず、食品成分化合物とヒトタンパク質の相互作用を、生命医薬ビッグデータを機械学習で解析することによって導きました(図1 Step1)。次に、食品成分の化合物の構造情報を用いて、食品が作用するタンパク質群を推定しました(図1 Step2)。最後に、疾患に関与するタンパク質群の制御を考慮することで、食品の機能性を予測しました(図1 Step3)。

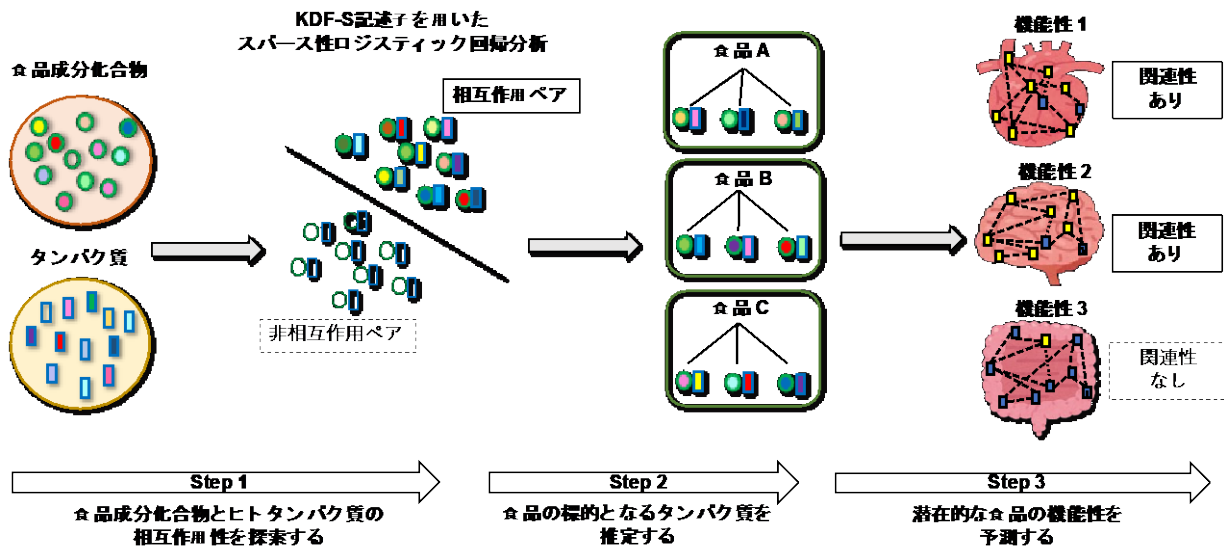


図 1:食品成分化合物とタンパク質の相互作用を機械学習により推論し、網羅的に食品機能性を予測する計算手法の概要

提案手法を 876 種類の食品に適用し、食品と健康との関連性を大規模に予測しました(図 2)。導き出された食品と機能性の組み合わせには、過去の実験的手法によって関連性が認められているものも多く含まれており、提案手法があらゆる食品の機能性について探索できることが確認されました。

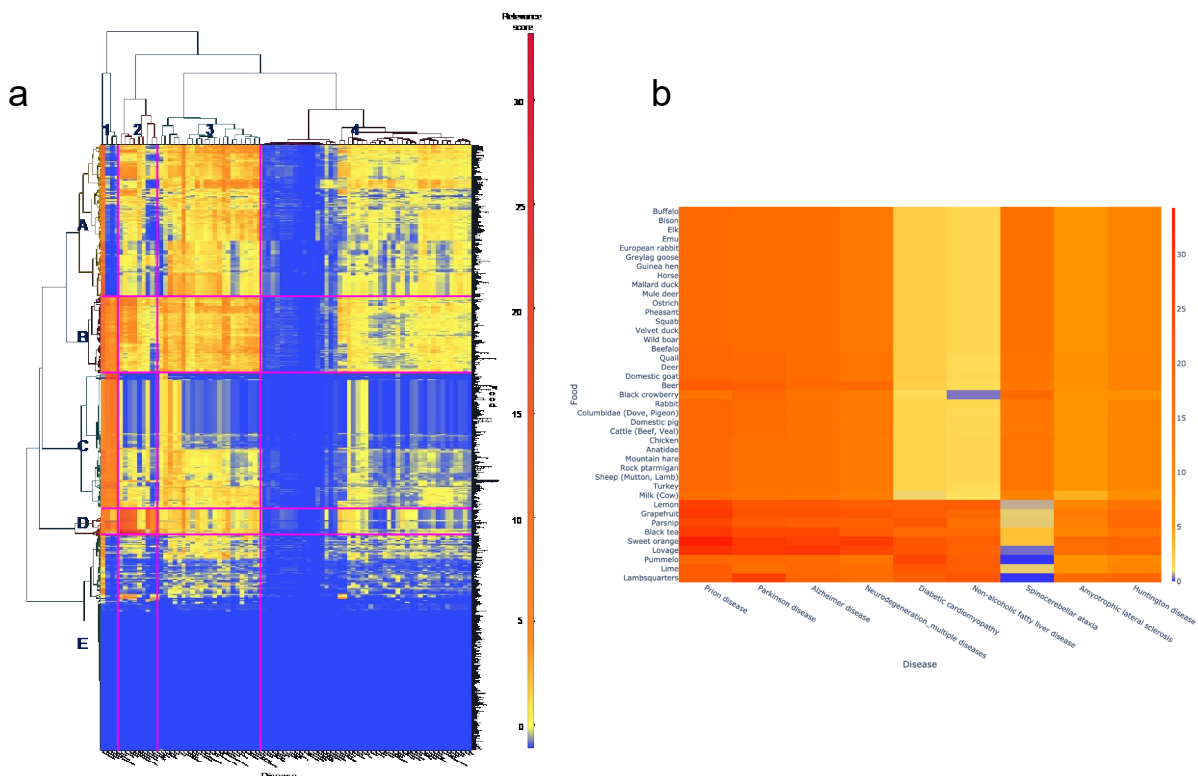


図 2:広範な食品と機能性の関連性解析

(a) 876 種類の食品と機能性の関連性を示す。横軸が関連すると予測された疾患、縦軸は食品、カラーバーは食品と疾患の関連性スコアを表す。関連性スコアをもとにクラスタリングを実施した結果、4×5 ブロックに分割された。(b) 2D ブロックの拡大図

食品には古くから知られている機能性があるにも関わらず、どのように生体内で作用しているか不明なものが非常に多く存在します。そこで、食品がどのようなメカニズムで機能するかを探索するため、食品成分化合物およびヒトタンパク質を介した食品機能性の階層的なネットワークを描きました。例えば、グレープフルーツは 34 種類の成分化合物から 14 のヒトタンパク質を介して 4 種類の疾患と関連していることが分かります(図 3)。

アルツハイマー病の重要な病理学的特徴の 1 つに老人斑の形成があり、老人斑形成に関わるはアミロイドβ^{注 3)}で主に構成されています。APP^{注 4)}とよばれるタンパク質はアミロイドβの形成に関わっており、今回フェルラ酸などが APP と相互作用すると予測されました。興味深いことに、過去の研究でアルツハイマー病モデルのマウスにフェルラ酸を投与することでアミロイドβの沈着が低減することが報告されており、それを反映する結果となりました。

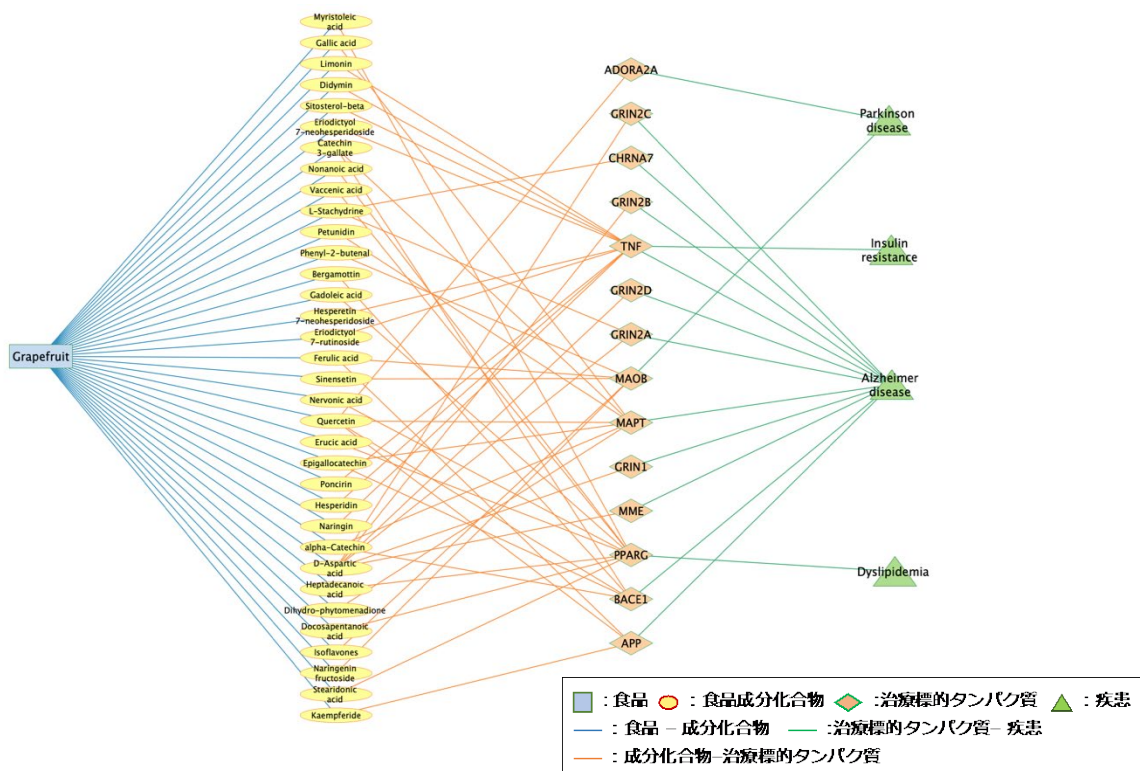


図 3: グレープフルーツが有する機能性の基礎となる推定作用メカニズム

青色の四角は食品、黄色の円は食品成分化合物、橙色の菱形は治療標的タンパク質、緑色の三角は疾患を示す。青色の線は食品と成分化合物との関連、橙色の線は予測された成分化合物とヒトタンパク質、緑色の線はヒトタンパク質と疾患との関係を示している。このネットワーク構造から、グレープフルーツに含まれる 34 種類の成分化合物が 14 種類のヒトタンパク質に相互作用し、4 種類の疾患に関連していることが推定される。

【成果の意義】

本研究では、広範な食品の潜在的な機能性を予測するために、生命医学ビッグデータを用いた機械学習手法を開発しました。本研究は、食品と機能性を網羅的にコンピュータ上で

予測した最初の研究であり、食品機能性についてこれまで知られていなかったメカニズムの解明につながる可能性や、疾病予防に対する食品の効率的な活用を促し健康寿命の延伸へとつながる可能性があります。提案手法は、疾病予防のための効果的な食事の選択や、食品化学研究の進展を促進することが期待されます。

本研究は、JSPS 科学研究費補助金・学術変革領域研究(B) 20H05797「シナジー効果を有する化合物群の AI による探索と設計」(研究代表者:山西芳裕)、JSPS 科学研究費補助金・基盤研究(A) 21H04915「医療ビッグデータから難治性疾患の創薬標的を予測する革新的 AI 手法の開発」(研究代表者:山西芳裕)、JPMJSP2154「JST 次世代研究者挑戦的研究プログラム」の支援を受け行われました。

【用語説明】

注1) 機械学習:

データからパターンを学習し、新しい予測や分類を自動化する情報技術である。AI を支える技術として活用されている。

注2) タンパク質

アミノ酸が多数結合した化合物で、ヒトの体を構成する非常に重要な要素である。このうち、病気の治療の際、薬剤などが標的とするタンパク質を疾患治療標的タンパク質と呼ぶ。

注3) アミロイドβ

脳で作られるタンパク質の1つである。アミロイドβが蓄積すると、認知機能の低下に関わると考えられている。

注4) APP

アミロイドβ前駆体タンパク質のこと。APP がβセクレターゼとγセクレターゼによって切断され、アミロイドβを産生する。

【論文情報】

雑誌名:「Journal of Chemical Information and Modeling」

論文タイトル: Revealing comprehensive food functionalities and mechanisms of action through machine learning

著者: Nanako Inoue (九州工業大学), Tomokazu Shibata (九州工業大学), Yusuke Tanaka (ハウス食品グループ本社), Hiromu Taguchi (ハウス食品グループ本社), Ryusuke Sawada (岡山大学), Kenshin Goto (九州工業大学), Shogo Momokita (九州工業大学), Morihiro Aoyagi (ハウス食品グループ本社), Takashi Hirao (ハウス食品グループ本社) and Yoshihiro Yamanishi (名古屋大学)

DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jcim.4c00061>