研究テーマ AIによる薬用植物天然物生合成遺伝子探索

所属 和漢医薬学総合研究所

助教 Bader Zein Eddin
https://researchmap.jp/zeineddin

研究分野	バイオインフォマティクス・ゲノミクス・AI創薬
キーワード	AI・機械学習・植物代謝・生合成・RNA-seq・ゲノム解析

研究室URL：



研究の背景および目的

和漢薬に含まれる薬用植物は、アルカロイド・テルペノイドなど多様な有用天然物を産生するが、その生合成経路の多くは未解明である。従来の配列相同性検索では、高度に多様化した酵素を発見することができない（「ダーク代謝空間」問題）。本研究では、 AI 逆合成解析・対照学習ベースの酵素機能予測・ゲノムデータ統合を組み合わせた非相同性依存パイプラインを構築し、薬用植物の天然物生合成経路を系統的に解明するとともに、湿式実験検証に向けた高信頼候補遺伝子を自律的に絞り込むことを目的とする

■ 主な研究内容

1 AI 逆合成による経路予測

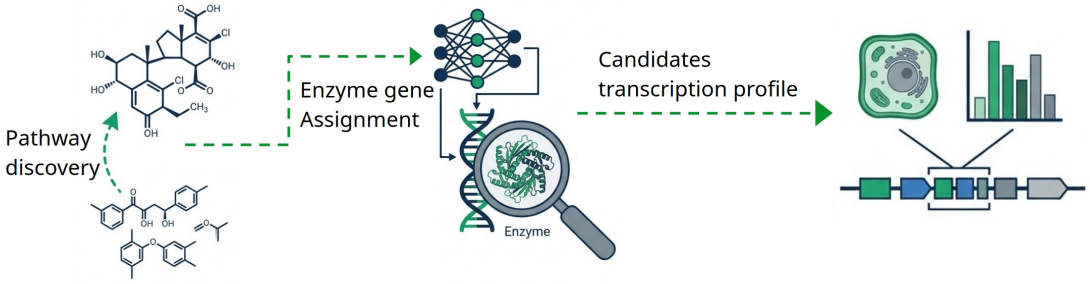
天然物の化学構造から出発し、生合成経路を AI で逆方向に再構築

2 対照学習による酵素機能予測

配列相同性に依存せず対照学習モデルで酵素機能を直接予測・同定

3 ゲノム統合と候補絞込み

ゲノム・エピゲノム・発現データを統合し湿式検証候補を優先化



期待される効果・応用分野

- 相同性に依存しない AI 酵素機能予測による「ダーク代謝空間」の解明
- 天然物生合成経路の逆合成 AI による自律的再構築と遺伝子同定
- ゲノム・エピゲノムデータ統合による湿式検証候補の高精度絞込み
- アルカロイド・テルペノイド・サポニン等の高価値化合物生産経路の発見

■ 共同研究・特許など

共同研究・技術移転について応相談。ゲノム・トランスクリプトーム解析の受託解析も可能。製薬・バイオ企業との連携を歓迎します。

富山大学研究者プロファイルPure URL：
https://u-toyama.elsevierpure.com/ja/persons/zein-eddin-bader/