

## 求める技術

### 共同開発により取り組む課題

長期的な基盤技術の開発を目指す、直近では「飲食品中の制御対象物質 Z の含有量を増やす製造プロセスの開発手法」に取り組みたい。

#### ◆前提

・飲食品の製造原料となる植物中で、物質 Z は植物生育の過程で  $A \rightarrow M1 \rightarrow M2 \rightarrow M3 \rightarrow \dots \rightarrow Mn \rightarrow Z$  の代謝経路を経て生成する。なお、M1~Mn は中間体である。

・一方、上記原料植物の Z に構造に近い最終中間体 Mn は、 $Mn \rightarrow S1 \rightarrow S2 \rightarrow S3 \rightarrow \dots \rightarrow Sx \rightarrow Z$  の反応経路を経て Z に変換され、製造プロセスで利用されている。

・既に製造プロセスで利用している反応経路 ( $Mn \rightarrow S1 \rightarrow S2 \rightarrow S3 \rightarrow \dots \rightarrow Sx \rightarrow Z$ ) の他にも、制御対象物質 Z に変換する未知の代謝経路・反応経路を発見できれば、製造プロセスの改良・新発明に重要なヒントとなる。例えば、Mn のさらに前段階の成分である M1~Mn-1 のいずれかから 制御対象物質 Z に変換する未知の代謝経路・反応経路 の発見を考えている。

・そのような未知の代謝経路・反応経路は、既存の製造プロセス中で意図せずに利用している可能性があるが、明らかにはなっていない。蓄積されたデータの解析によって、中間体から Z に至る新たな経路を見い出したい。そして、見い出した代謝経路・生成経路を利用し、Z の含有量を最大化したい。

#### ◆求める提案

・以下の要件を満たす、制御対象物質 Z の飲食品中の含有量を増やす製造プロセスの開発手法についての、開発方針の提案。ただし、詳細はサントリーとの議論により決定するので、まずは協業の意思と基本的な考え方についてご提案をお示し頂きたい。

- 中間体から制御対象物質 Z の代謝経路・反応経路を見い出せること
- 情報科学、計算科学を取り入れた手法であること（実験的検討を含んでも良い）
- 制御対象物質 Z の生成には、植物中の共存物質が影響しているため、これらの影響も考慮できること

#### ◆想定するアプローチ例

- ・計算化学による、中間体 Mn から Z への反応シミュレーション
- ・依頼主が蓄積した過去のデータ（運転パラメータや生成物データ）の統計解析による、Z 生成のための未知の経路候補の推定
- ・その他の情報科学・計算科学的手法
- ・上記の組み合わせ

◆検討対象となる具体的なプロセスの例

- ・加熱・乾燥・冷却・凍結
- ・粉碎・攪拌
- ・酵素処理・発酵
- ・添加物の添加

◆用いることができる情報科学・計算科学アプローチ

- ・化学反応シミュレーション（第一原理計算）
- ・分子動力学
- ・統計学的アプローチ
- ・その他のあらゆる方法

◆利用することができるデータ

- ・公知のデータ
  - 科学論文等
    - ・飲食品の製造原料の栽培に関する科学的知見
  - 制御対象とする物質の化学構造や結晶構造
- ・サントリー社内に蓄積されたデータ
  - サンプル個体情報
    - ・飲食品の製造原料の栽培条件や性状、物性、含有物質等
    - ・中間品や飲食品の製品測定データ
  - 加工プロセス情報
    - ・装置運転条件
    - ・加工実績データ
  - サンプル中に存在する共存物質、夾雑物についての知見やデータ

技術の目標水準

化学、食品、バイオテクノロジー、植物、医薬品、ものづくりのいずれかの分野に関わる計算科学・情報科学の経験があれば望ましい

