

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： タンパク質を制御するペプチドのデザイン AI

2. 個人研究者名

大上 雅史（東京工業大学情報理工学院 准教授）

3. 事後評価結果

本研究は、製薬などの観点からニーズが極めて大きいタンパク質相互作用を制御するペプチドを設計することを目標としている。ACT-X の研究過程で、研究分野をとりまく技術状況が大きく変化したこともあり、最新技術を適切に取り入れつつ必要な技術開発を柔軟に進めてきた。その結果、ニーズが大きい分野ということもあり、企業やタンパク質分野の著名な研究者との共同研究につながった。一方で、当初の目的であったタンパク質の相互作用を制御するペプチドを設計するという目標は変更となった。

論文出版も順調である。共同研究も多数展開しているが、初期段階にとどまっており、今後波及効果の大きい成果が出てくることを期待する。

（加速フェーズ）

上記の評価を受けて研究実施期間を1年間延長し、加速フェーズを実施した。

加速フェーズでは、これまでの AlphaFold のペプチド生成への応用の成果をもとに、関連 AI を結びつけ、創薬への幅広い適用を目指すための手法開発に取り組んだ。特に、ペプチド創薬において代謝安定性や細胞膜透過性の面から注目されている環状ペプチドの設計に注目し、AlphaFold の positional encoding を改変することで、標的タンパク質に結合する環状ペプチドを設計できることを示した。また、低分子化合物設計 AI の開発も行い、ペプチドから低分子への変換を AI によって行うため、グラフニューラルネットワークを用いた分子の解釈を高める実装技術を開発した。論文出版も順調である。共同研究も順調に展開しており、今後波及効果の大きい成果が出てくることを大いに期待する。