研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： AI アプタマー創薬プロジェクト
2. 研究代表者名及び主たる共同研究者名（研究機関名・職名は研究参加期間終了時点）

研究代表者

浜田 道昭（早稲田大学理工学術院 教授）

主たる共同研究者

安達 健朗（(株) リボミック 部長）

高橋 理貴（東京大学医科学研究所 特任准教授）

齊藤 博英（京都大学 iPS 細胞研究所 教授）

亀田 倫史（産業技術総合研究所人工知能研究センター 上級主任研究員）

3. 事後評価結果

○評点：

A 優れている

○総合評価コメント：

本研究課題のビジョンは「次世代医薬品である RNA アプタマーの創成を効率化する AI アプタマー創薬を実現し、必要な薬へのアクセスを全ての人に可能にすることを旨とする。」ことである。創薬で5年という期間は短く、最終評価にはあと数年が必要であろう。その中で新規アルゴリズムの開発や HT-SELEX データの作成など基礎研究から、高い結合親和性と中和活性を持つ候補分子の創出に至るまで一貫性のある成果を達成した。特に、アプタマー配列ランキング手法 RaptRanker や、確率的生成モデル RaptGen は創薬特有の領域での高い AI 技術の活用を示した。著名な学会誌にも論文は採録されている。本研究はアプタマー医薬品開発において AI による開発効率の向上を示し、一部実証に成功した。また、研究成果のモデルを創薬現場で使用可能にする UI の開発も進んでいる。

チーム構成は情報科学と医化学・分子生物学で過不足なく構成されている。ビジョンのもとに目標を共有した緊密なチーム運営を評価したい。

創薬候補の構造を抽象化して、特定のターゲット分子に高い親和性と特異性を持つ創薬候補を生成するアプローチは、近年の創薬分野における AI 活用で大きく飛躍しようとしている。汎用 AI として注目を浴びている Transformer や Diffusion 基盤モデルが、当初の想定を超えた性能を発揮することがわかり、多くの分野で応用研究が進んでいる。本研究においても大きな成果を出せるかもしれないという期待を誘発する内容であった。現在主流でないアプタマー創薬への注目と投資が今後グローバルな研究コミュニティの活性化を如何に促すかが課題である。今後の展開と海外研究機関・企業との連携を期待したい。