

2023 年度年次報告書

データ駆動・AI 駆動を中心としたデジタルトランスフォーメーションによる生命科学研究の革新

2023 年度採択研究代表者

森 秀人

大阪大学 ヒューマン・メタバース疾患研究拠点

特任准教授

対話型 AI を用いた DNA 配列設計・合成の自動化

研究成果の概要

DNA 配列の設計や合成は、様々な生命科学実験において不可欠な共通のタスクである。しかし、その大部分は研究者らの手によって労働集約的に行われており、生命科学実験の高速化、再現性、透明性を妨げる要因となっている。本研究では、最近の対話型 AI システムを用いて、ユーザーの DNA 配列設計・合成を支援する AI エージェントを開発することで、DNA 配列合成が関わるあらゆる生命科学実験を加速する。

今年度は、代表者の森が以前に開発した DNA のクローニングプロセスを記述・シミュレーションを可能とする Python ライブラリ QUEEN の改良に取り組んだ。この改良では、QUEEN を GPT4 等の大規模言語モデル (LLM) に利用させることを念頭に、各種の関数等の記述の方法を、実際の実験プロセスを対応させた。これによって、DNA のクローニング実験のプロセスを把握している LLM であれば、自然な流れでコードを生成できるように配慮した。実際、改良版 QUEEN の利用方法を記載したインストラクションを、OpenAI 社の提供するカスタム chatbot の作成機能 (GPTs) に与えることで、QUEEN を利用可能な簡易的な chatbot を作成することができた。この chatbot は、自然言語で書かれた DNA クローニングプロトコルの記述を、QUEEN を利用して検証、シミュレーションし、目的の DNA 構築物の配列を有する正しい GenBank ファイル出力を生成した。今後は、ローカル LLM を利用して、ローカル環境でも動作可能な DNA 配列設計の支援ツールを開発する。また、こうした chatbot をベースに、ユーザーに、DNA クローニングプロトコルの修正や提案を行うことまで可能な、より実用的な AI エージェント開発にも取り組む予定である。