

浜田 道昭

早稲田大学 理工学術院
教授

人工知能技術を用いた革新的アプタマー創薬システムの開発

§ 1. 研究成果の概要

RNA アプタマー(以後、アプタマーと記載)とは、次世代新薬の要として期待されている物質であり、従来の医薬品にない数多くのメリットを有している。現状、アプタマーの取得する際には、実験者の経験・勘に頼る実験が試行錯誤的に実施され多大な時間・費用を要する。本研究は、人工知能技術などの情報技術を積極的に活用することにより RNA アプタマー創薬期間の短縮を目指すものである。この目的を達成するために、今年度は以下の研究成果を得た。

- 新手法 RaptRanker の高度化と応用
前年度から開発を進めていた、HT-SELEX 実験から得られる大量の配列情報から、部分構造と部分配列情報に基づき、高親和性アプタマーとその結合モチーフを抽出するための手法である RaptRanker の高度化(ソフトウェアの整備を含む)；
<https://github.com/hmdlab/RaptRanker>)を行った。手法の詳細はプレプリントとして公開を行った(<https://doi.org/10.1101/2019.12.31.890392>)。さらに、リボミック社で新たに取得された複数の HT-SELEX データに対して RaptRanker の適用を行った。
- アプタマーデザインの新手法の検討
新しいアプタマー配列をコンピュータでデザインするための複数の新規手法について考案および検討を行った(詳細は非開示)。
- 独自に取得した HT-SELEX データの一般公開
リボミック社で取得した HT-SELEX データの中で2件を一般公開した(DRA009383, DRA009384)。これらのデータは今後のアプタマー研究に活用されることが期待される。
- アプタマー創製技術の特性とウイルス様粒子の特性とを活かすことで、ウイルス結合アプタマー創製技術(VLP-SELEX 法)を構築した。本年度は、デングウイルスに対して中和活性が期待できる新たな候補分子の取得に成功した。

【代表的な原著論文】

特になし

§ 2. 研究実施体制

(1) 早稲田グループ

① 研究代表者: 浜田 道昭 (早稲田大学理工学術院 教授)

② 研究項目

- ・人工知能技術を用いたアプタマー創薬システムの構築

(2) リボミックグループ

① 主たる共同研究者: 青木 一晃 ((株)リボミック探索研究部 部長)

② 研究項目

- ・精製タンパク質に対するアプタマー実験データの提供と検証実験

(3) 東大医科研グループ

① 主たる共同研究者: 高橋 理貴 (東京大学医科学研究所 特任准教授)

② 研究項目

- ・膜タンパク質に対するアプタマーの実験データの提供と人工知能技術の有効性評価