

2024 年度年次報告書

パンデミックに対してレジリエントな社会・技術基盤の構築

2022 年度採択研究代表者

清水 秀幸

東京科学大学 総合研究院 M&D データ科学センター
教授

微生物学と AI の統合知による次世代の感染症制圧

研究成果の概要

本研究課題は、薬剤耐性菌による感染症の世界的な脅威に対し、微生物学と人工知能 (AI) の知見を融合させることで、次世代の感染症制圧に貢献する技術基盤の開発を目指す。具体的には、抗菌活性を持つ低分子化合物および中分子ペプチドを迅速に同定・創製するための AI 技術開発に取り組んでいる。2024 年度においては、これら 2 つのアプローチに関する AI システムを開発し、それぞれの成果を学術論文としてプリプリントサーバーにて公開した。概略は次の通りである。

1) 新規抗生物質候補探索 AI「BaCNet」の開発

細菌のタンパク質と低分子化合物の間の結合の強さを、アミノ酸配列情報と化合物の構造情報のみから高精度に予測する AI システム「BaCNet」を開発した。BaCNet は、学習データに含まれていない未知の細菌種に対しても高い予測性能を維持することを確認した。このシステムを用いることで、既存の薬剤ライブラリや天然物ライブラリから、有望な新規抗生物質候補を効率的に探索することが可能である。さらに、発見された候補化合物の構造を AI によって最適化し、より高い抗菌活性が期待される新規化合物を創出する技術も開発した。

2) 新規抗菌ペプチド探索 AI「AMP-Atlas」の開発

アミノ酸配列情報のみを基に、抗菌活性を持つペプチド (AMP) を高精度に予測する AI システム「AMP-Atlas」を開発した。AMP-Atlas は、従来の予測手法を上回る性能を示し、ヒトの体内に存在する細菌 (常在細菌叢) のゲノム情報から、これまでに知られていなかった多数の新規 AMP 候補を発見することに成功した。発見された AMP 候補の多くは、既知の AMP が持つ典型的な構造的特徴を有しており、AMP-Atlas がアミノ酸配列から高次の特徴を捉えて予測を行っていることが示唆された。