

2021年12月20日  
三井情報株式会社

## 三井情報、産学連携を通じた共同研究で 機械学習を用いた蛋白質立体構造を評価する構造生物学 AI 技術を構築

三井情報株式会社(本社:東京都港区、代表取締役社長:浅野 謙吾、以下 三井情報)は、田辺三菱製薬株式会社、公立大学法人横浜市立大学、国立研究開発法人理化学研究所、国立大学法人京都大学と共に、機械学習を用いた新規の蛋白質結晶構造評価法QAEmap(Quality Assessment based on Electron density map:キューエーイーマップ)を確立しました。

蛋白質の立体構造はX線結晶構造解析あるいはクライオ電子顕微鏡によって原子分解能の構造決定がなされますが、データ分解能が構造決定の確度に大きな影響を与えます。蛋白質の立体構造は、薬剤候補化合物と標的蛋白質との結合様式を見る創薬研究や分子シミュレーション研究の基盤となるため、特に低分解能データからの構造決定は長年の課題となっています。本研究では、公共データベースに登録されている高分解能構造データを3D-CNN(\*1)と呼ばれる3次元情報を扱う方法で機械学習することにより、データ分解能に依存しない構造評価ができることを示しました。

本研究は、LINCコンソーシアム(\*2)の活動の一環として実施され、研究成果は『Scientific Reports』に論文掲載されました。<https://www.nature.com/articles/s41598-021-02948-y>

### ■研究成果のポイント

- 蛋白質の結晶構造をアミノ酸単位で機械学習した新規の構造決定支援ツールである。
- 低分解能構造解析で特に構造決定が難しいループ領域の構造決定に適用できる。
- 創薬研究現場での課題をアカデミア、IT企業、製薬会社が一体となって取り組んだ産学連携の成果である。

QAEmapは、蛋白質に結合する化合物の結合様式評価や近年創薬分野での利用が急速に広がっているクライオ電子顕微鏡を用いた蛋白質構造解析にも応用可能で、将来的には蛋白質構造を用いる創薬研究の加速化に貢献すると期待しています。

三井情報では今回の共同研究で確立した評価法のソフトウェア実装に取り組んでおり、来春以降の提供開始を予定しています。今後も三井情報は産学連携を通じて得た研究成果に自社のICT技術を組み合わせて、バイオサイエンスの発展に貢献していきます。

### (\*1) 3D-CNN:

畳み込みニューラルネットワークは画像の中から特徴パターンを見つける等、画像認識や音声、信号データにも利用されている。本手法では3次元のCNNをタンパク質の立体構造及び電子密度データをそのまま入力として深層学習するために用いている。

(\*2) LINCコンソーシアム: ライフインテリジェンスコンソーシアム(Life Intelligence Consortium; LINC) ([linc-ai.jp](http://linc-ai.jp)) ライフ系企業、IT企業、大学や研究機関など約70の企業・団体が参画し、医薬品開発などライフ系の課題解決やAI技術の開発に取り組む。2016年11月に発足し、2021年4月からは一般社団法人。

以上

## 【論文情報】

論文名: Machine learning to estimate the local quality of protein crystal structures

DOI: 10.1038/s41598-021-02948-y

URL: <https://www.nature.com/articles/s41598-021-02948-y>

執筆者名: Ikuko Miyaguchi, Miwa Sato, Akiko Kashima, Hiroyuki Nakagawa, Yuichi Kokabu, Biao Ma, Shigeyuki Matsumoto, Atsushi Tokuhisa, Masateru Ohta, Mitsunori Ikeguchi

## 【三井情報株式会社について】

三井情報株式会社(MKI)はキャッチコピー『ナレッジでつなぐ、未来をつくる』を掲げ、ICTを基軸とした事業戦略パートナーとしてお客様のIT戦略を共に創り、デジタルトランスフォーメーションを支援しています。半世紀にわたり培った技術や知見の結実である“KNOWLEDGE”を活かし、お客様と共に価値を創造する「価値創造企業」として絶え間ない挑戦を続けていきます。

ホームページ: <https://www.mki.co.jp/>

※三井情報、MKI及びロゴは三井情報株式会社の商標または登録商標です。

※本リリースに記載されているその他の社名・商品名は、各社の商標または登録商標です。

## 【報道関係者からのお問い合わせ先】

三井情報株式会社

広報・CSV推進室

TEL : 03-6376-1008 E-mail : [press-dg@mki.co.jp](mailto:press-dg@mki.co.jp)

## 【本論文に関するお問い合わせ先】

三井情報株式会社

バイオヘルスケア営業部営業室

TEL : 03-6376-1291 E-mail : [bio-eigyau-dg@mki.co.jp](mailto:bio-eigyau-dg@mki.co.jp)