

課題名：
機械学習とベイズ推論の融合によるマルチオミクスデータ解析手法の開発

実施時期：2025/4/14 ~ 2026/3/21
所属機関名：愛知県がんセンター
代表者氏名：山口 類

成果概要：
既存のタンパク質コンフォメーション生成モデルを新規データへ適用するためのファインチューニング手法を開発した。
また、タンパク質の結合能予測において、マルチコンフォメーションを利用することで予測精度が向上することを、複数のモデルで確認した。

成果のポイント：
タンパク質のコンフォメーション生成モデルは複数提案されているが、特定のタンパク質ターゲットに適用するために、我々は、新たなファインチューニング手法を提案し、コンフォメーション生成における構造の破綻を抑制するとともに、検証データとの dissimilarity を小さくできることを確認した (Fig. 1)。さらに、タンパク質複合体の変異に伴う結合能変化予測において、従来手法では主に野生型複合体の単一構造を入力としていたのに対し、本研究ではマルチコンフォメーションを活用することで予測精度の向上に成功した。現在、これらの成果について論文投稿を準備している。またベイズ推論を統合した方法についても検討を進めた。

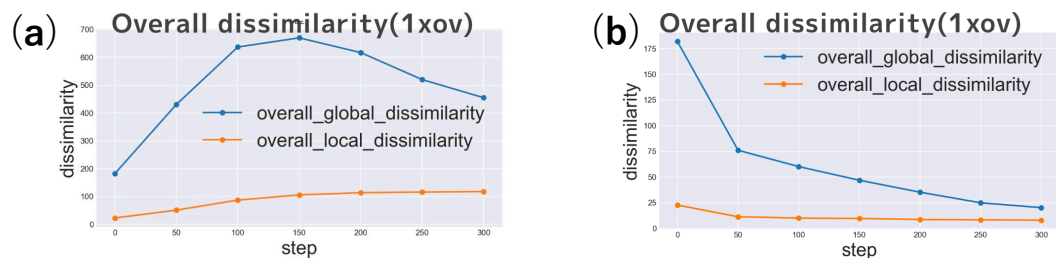


Fig 1. (a) ターゲットドメインのデータで通常ファインチューニングを行った場合の dissimilarity。 (b) 提案手法によるファインチューニングを行った場合の dissimilarity。

成果についてより詳細な情報を提供しているWebページ、発表論文などの情報：