

論文内容の要旨

博士論文題目 グラフ畳み込みニューラルネットワークを用いた、疾患標的への結合特異性の高い化合物の網羅的探索手法の開発
(Comprehensive Exploration of Disease Target-specific Ligands using Graph Convolution Neural Network)

氏名 宮崎 優

(論文内容の要旨)

本論文では、タンパク質のリガンド探索にグラフ畳み込みニューラルネットワークを活用し、副作用となる活性を最小にし、疾患標的への結合特異性の高い化合物を網羅的に探索する方法を開発した。の有用性について検討した。この方法を活用し、アルツハイマー病の治療標BACE1への活性を最大にするとともに、副作用を最小化することに成功した。さらに、分類器の特徴抽出層を経て得られた化合物の特徴ベクトルを評価することで、標的タンパク質への特異的結合性の構造的要因を考察した。また、天然化合物ライブラリ(KNApSAcKCore Database)を対象として、本手法を用いてBACE1リガンドの候補化合物の探索にも成功した。

氏名	宮崎 優
----	------

(論文審査結果の要旨)

2021年7月15日に開催した公聴会の結果を参考に、2021年8月27日に本博士論文の審査を実施した。本博士論文は、本学位申請者が、独立した研究者として研究活動を続けていくために必要な素養を備えていることを示すものである。本論文は、博士(理学)の学位論文としての価値があるものと認める。