

**創薬基盤推進研究事業 研究開発課題  
事後評価報告書**

研究開発課題名	機械学習による中分子医薬の多要素複合デザイン技術の開発
代表機関名	国立研究開発法人産業技術総合研究所
研究開発代表者名	齋藤 裕
全研究開発期間	令和元年度～令和3年度

**1. 研究開発成果**

事後報告書(下 URL)参照

<https://www.amed.go.jp/content/000101259.pdf>

**2. 総合評価**

・ 優れている

**【評価コメント】**

中分子ペプチド設計のために多数の要素を同時改善するデザイン技術の開発を着実にを行い、複数の物性値を同時予測するマルチタスク予測手法を構築し、検証まで達したことは評価できる。これによりデザインされた CD22 標的ペプチドおよび CD25 標的ペプチドは概ね予測通りの特性が得られ、デザイン技術が機能することが示された。

独創的な本多要素複合デザイン技術は応用範囲が広く、注目される成果が得られており、今後、実用化に向けて企業導出など積極的に進めることを望む。

以上