

抗原抗体結合予測AIの実験的妥当性と可視化解析



SATテクノロジー・ショーケース2026

■ はじめに

抗体可変部配列から抗原結合親和性を推定するAIは、創薬および病態解明の双方で探索効率を向上させる基盤技術である。近年、Transformer系モデルの登場により結合有無判定の高精度化が報告されているが、公開ベンチマーク外での汎化性能、評価指標の再現性、ならびにモデル内部の解釈性に関する知見は十分ではない。

■ 活動内容

本研究では、次世代抗体設計ツールの指針を得るため、SOTA級モデルであるAntiFormer [1] とLlamaAffinity [2] を外部データで再評価した。COVID-19患者やインフルエンザワクチン接種者のscBCR-seq/scRNA-seqデータを統合して検証セットを作成し、Accuracy、ROC-AUC、F1で分割再現とデータセット横断評価を実施した。さらに、最終層の隠れ状態ベクトルを用い、Gradient Input法およびIntegrated Gradients法により残基重要度を算出、上位寄与残基を可視化して機序理解を試みた。

結果として、AntiFormerは特定データセットで高性能を示したが、統合データセットでは精度が70%台に低下した。一方、LlamaAffinityは一貫して90%超の予測性能を維持し、入力抗体配列のどの残基が予測に寄与したかを定量的に提示できた。これらの知見は、抗体デザイン支援AIの開発や抗体レパートリー解析において、モデル信頼性向上と実験的検証との橋渡しに貢献すると期待される。解釈性・説明性を備えた高精度AIモデルを活用することで、抗体創薬や免疫学研究の効率化と新たな知見創出が加速する。

■ 関連情報等(特許関係、施設)

[1] Wang Q. et al. Briefings in Bioinformatics. (2024) doi: 10.1093/bib/bbae403

[2] Hossain D. et al. BioRxiv. (2025) doi: 10.1101/2025.05.28.653051

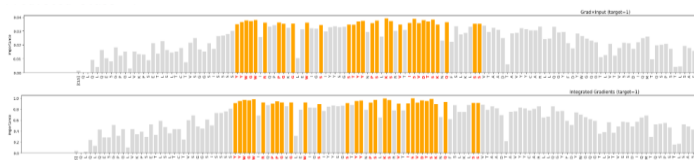


図:抗原結合に寄与する抗体配列部位の予測結果

代表発表者 **大槻 進(おつき すすむ)**
所 属 **MI-6株式会社**
問合せ先 **〒103-0024 東京都中央区日本橋小舟町8-13**
TEL: 050-5475-7701
otsuki@mi-6.co.jp

■キーワード: (1) 抗体設計
(2) 生成AI/機械学習
(3) 可視化・解釈性
■共同研究者: 林 卓人 MI-6株式会社