

## 研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 構造情報に基づいた in silico 酵素改変が先導するスマート代謝経路設計

2. 個人研究者名

二井手 哲平（大阪大学大学院情報科学研究科 助教）

3. 事後評価結果

本 ACT-X 研究では、当初、非標準アミノ酸やそこから派生するリード化合物の生合成に関与する酵素の設計と代謝工学に取り組んだが、その後、特定の酵素に研究対象を絞り、機械学習を利用した基質特異性の解析と改変や酵素の耐熱化に移行して一定の研究成果を挙げる事ができた。リンゴ酸酵素の学習モデルから補酵素特異性の改変に成功した例は機械学習の有効性を示すとともに、当該酵素の特性の理解を進めることができ、学術的な意義が認められる。耐熱化についても計算科学的手法の有効性が示されつつあり、こうしたアプローチがさらなる研究の発展を生むことを期待している。

一方で、今後は、他の方法論に対する優位性を明確に示していくことが求められる。継続的に研究を発展させ、将来的な理論の体系化に貢献されることを期待している。ACT-X を通して、論文成果のアウトリーチや異分野研究者とのコラボレーションも積極的に進めており、他の研究者との連携活動を継続して当該分野を活性化するとともに、世界をリードする研究を展開されることを期待している。