

AlphaFold の衝撃

Critical Assessment of protein Structure Prediction (CASP) は、世界規模で行われるタンパク質立体構造予測コンテストである。ここでは実験的に決定されたタンパク質の立体構造を伏せておき、アミノ酸配列を提示して、期限までに立体構造予測を行わせる。2020 年の CASP14 では、DeepMind 社 (Google の持ち株会社 Alphabet の子会社) の **AlphaFold** が 2 位以下を大きく引き離して優勝した。予測精度も非常に高く、CASP14 の会議では、代表の John Moult 教授に単量体タンパク質の立体構造予測は解決した、と言わしめたほどであった (米国・パデュー大学・木原大亮教授の Twitter より)。AlphaFold の論文 (Jumper et al., 2021) が 2021 年 7 月に Nature 誌で公表されると同時に、ソースコードが GitHub で公開された (<https://github.com/deepmind/alphafold>)。世界中で性能評価が行われ、X 線結晶構造解析法における位相決定法の 1 つである、分子置換法の鋳型として使用できたという報告もなされている。また既に、ヒトを含む代表的な生物種の全タンパク質の予測構造が European Bioinformatics Institute (EBI) を通じて公開されている (W4.7 参照)。例題 4.3 のキイロショウジョウバエのジヒドロ葉酸還元酵素の UniProtKB のエントリ (P17719) でも、立体構造として、AlphaFold の予測構造が表示されている。今後は、タンパク質の機能解析において、アミノ酸配列のみを見て実験をデザインすることはなくなるだろう。実験的に決定された立体構造が利用できない場合でも、AlphaFold による予測構造を見ながら実験をデザインすることになる。これはちょうど、ゲノムプロジェクト以降、ゲノム配列やアミノ酸配列を参照せずに生命科学の実験を行うことがなくなったように、科学史に残る大きな変革と言えるだろう。

参考文献

Jumper J, Evans R, Pritzel A., et al. (2021) *Nature* **596**: 583