

# 科学技術の潮流

(160)

JST 研究開発戦略センター

## AIで構造推定

アミノ酸配列からたんぱく質の立体構造を推定する人工知能(AI)プログラム「AlphaFold2 (AlphaFold 2、英ディープマインド)」は、2021年7月に公開されるやいなや、生命科学や創薬に関する研究者に衝撃を与えた。

たんぱく質は、さまざまな分子と複雑に相互作用をし、生体内で多様な役割を担う。たんぱく質の立体構造を解明すると、相互作用の予測が可能となる。従来、たんぱく質の

研究者であっても気軽に立体構造の推定が可能となり、生命現象の理解や創薬などの加速が期待される。

## 革新の原動力に

研究者が、試行錯誤を経てようやく解明に至ったが、現時点では改良すべき点多く、発展途上の段階だ。例えば、AF2はPDBという国際的なデータベースの情報元として注目を集めるた

研究者であっても気軽に立体構造の推定が可能となり、生命現象の理解や創薬などの加速が期待される。

また、固定した立体構造をとらず揺れ動くたんぱく質、生体内の状態に応じて複数の立体構造をとるたんぱく質、一つのアミノ酸の変化で立体構造が変化する変異たんぱく質など、世界中の多くの研究者がAF2に注目し、改良に向けた試行錯誤が続きられている。これに近い状況として、2013年に登場したゲノム編集技術(CRISPR)が注目を集めるた

SPR/Cas)が思い起こされる。当初は問題点が山積みであったが、日本を含む世界中の研究者が改良に取り組んだ結果、研究者が日常的に使用する実験ツールとなった。さらに、エピソード、生命科学や創薬に革新をもたらす原動力となるであろう。

# AF2、生命科学・創薬加速



科学技術振興機構(JST)研究開発戦略センター 辻 真博  
フェロー(ライフサイエンス・臨床医学ユニット)

東京大学農学部卒。ライフサイエンスおよびメディカル関連の基礎研究(生命科学、生命工学、疾患科学)、医療技術開発(医薬品、再生医療・細胞医療・遺伝子治療、モタリティー全般)、医療データ、研究環境整備などさまざまなテーマを対象に調査・提言を実施。

**アルファフォールド2**  
(英ディープマインド)

【教師データ】  
**Protein Data Bank**  
(世界的なたんぱく質立体構造情報データベース)

機械学習

**AlphaFold2**  
(アルファフォールド2)

- ★アミノ酸配列からたんぱく質立体構造を予測する画期的プログラム
- ★新たな生命現象の発見、創薬シーズの探索・評価などへの期待

AF2の改良、新技術開発が進むことで、生命科学や創薬に革新をもたらす原動力となるであろう。