

## 人工知能で科学の50年来の課題に挑戦

### ◆DeepMindのAlphaFoldが蛋白質立体構造予測の国際大会で圧勝

2020年11月、蛋白質立体構造予測の世界的な大会であるCASP14（Critical Assessment of Techniques for Protein Structure Prediction 14）の主催者は、「50年来の科学的挑戦に対する人工知能（AI）による解決策が、医学研究に革命を起こすかもしれない。」と発表した。時間の掛かる結晶構造解析などの実験を行わずに、コンピューターを用いて精度の高い蛋白質の立体構造を提供できる状況になれば、薬物設計など、医薬品の研究開発が大幅に加速されることになる。

CASPは94年に始まり、2年に1回開催されてきた国際大会である。世界各国から多くの研究チームが参加し、コンピューターを用いて、まだ、公開されていない蛋白質の立体構造を、アミノ酸配列の情報だけから、実験結果にどれだけ近く予測できるかを競ってきた。今回の第14回大会では、Google傘下のAI研究機関DeepMindのAlphaFoldが他のチームを圧倒して優勝した。DeepMindのAlphaFoldは2年前の第13回大会でも優勝しているが、今回は、約100種の蛋白質の立体構造に対し、実験結果からのズレが平均で0.16 nmと、極めて高精度の予測結果を与えた。その内、2/3の予測結果は実験結果とほぼ一致している。

### ◆植物成分などの複雑な有機化合物の化学合成経路をAIが提案

20年12月、ポーランド科学アカデミーなどの研究グループは、有機化学の知識とデータが拡充されれば、植物成分などの複雑な有機化合物の化学合成経路をAIにより立案することが原理的に可能であると発表した。コンピューターを用いた有機化合物の合成経路設計の研究は50年を超える歴史があり、既に、AIを用いたシステムが数多く発表されているが、多くは1ステップごとの立案に止まっていた。今回の研究は、より実用性の高い、多段階合成の立案の可能性を示した。コンピューターが提案した8～15ステップの合成経路に従い、実験的に3つの化合物が合成され、AIによる立案内容の有用性が示された。

どちらの事例も、50年以上、コンピューターを用いた解決が試みられた課題である。AIの発展により、長年の科学者の夢が実現されつつある。 【戸潤一孔】