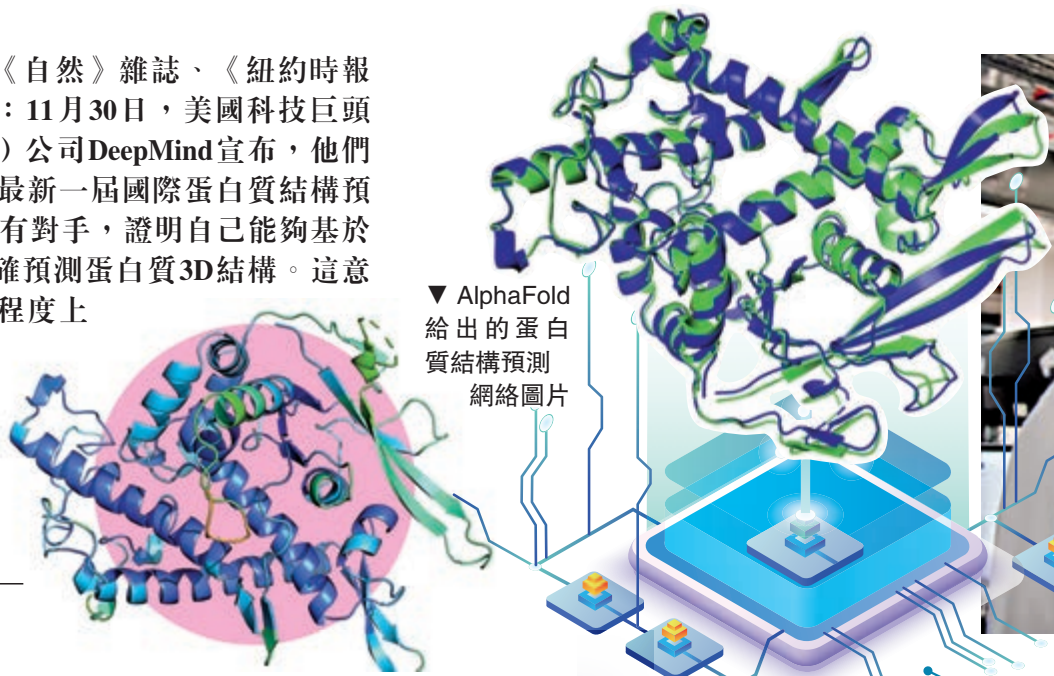


# AI預測蛋白結構 助抗擊新冠

## 破解半世紀難題 幾日完成數年工作

【大公報訊】綜合《自然》雜誌、《紐約時報》、《財富》雜誌報道：11月30日，美國科技巨頭谷歌旗下人工智能（AI）公司DeepMind宣布，他們研發的AlphaFold系統在最新一屆國際蛋白質結構預測競賽CASP14上擊敗所有對手，證明自己能夠基於氨基酸序列，快速、精確預測蛋白質3D結構。這意味著該款AI系統，很大程度上解決了困擾全球科學家近50年的蛋白質摺疊問題，將推動醫學進步。AlphaFold已被用於解析新冠病毒。



▼ AlphaFold給出的蛋白質結構預測網絡圖片

絕大多數生理機能都與蛋白質息息相關，而每個蛋白質因自身氨基酸鏈摺疊形成的獨特3D結構，決定其具體作用。如何破解這一結構，就是蛋白質摺疊問題。1972年，諾貝爾化學獎得主安芬森在獲獎感言中提出著名假設，即「蛋白質的氨基酸序列應完全決定其結構」，引領了科學界此後近50年的研究方向。

安芬森假設面臨的主要挑戰，是蛋白質形成最終結構前，可能有無數種摺疊方式。使用現有的X射線晶體學技術、低溫電子顯微鏡等解析蛋白質結構，需花費數月、數年甚至數十年時間。而最新版AlphaFold系統，只需提供氨基酸序列，就可在數日內得出高度精確的預測結構。CASP聯合創始人莫爾特教授表示，在很大程度上，蛋白質摺疊問題得到了解決。

### 成功預測新冠蛋白結構

AlphaFold在蛋白質摺疊問題上取得的突破，為生物學家打開了一扇新的大門。從胰島素如何控制血糖水平，到抗體如何對抗新冠病毒，都由相應蛋白質結構決定。包括癌症在內的幾乎所有疾病，都與細胞內蛋白質結構變化有關。因此，AlphaFold對蛋白質結構快速、精確的預測，將促進人類對細胞組成部分的理解，並對疾病預防和治療、新藥研發等帶來重大影響。

冠狀病毒的構成，包括可結合人體細胞受體的刺突糖蛋白、包裹病毒遺傳物質的包膜蛋白、膜蛋白、核衣殼蛋白等。解析這些蛋白的3D結構，

對了解新冠病毒致病機理及確定治療方案具有重要意義。3月起，DeepMind就陸續發布AlphaFold對一些新冠病毒蛋白的結構預測，包括此前未知的ORF3a蛋白。在CASP14比賽中，該系統又預測了另一個新冠病毒蛋白ORF8的結構。該系統對這兩個蛋白的預測均被證實相當準確。

### 平均誤差僅為0.16納米

在自然界，由氨基酸鏈組成的蛋白質，可自發摺疊成無數令人難以想像的形狀。為解析這一過程，DeepMind研究人員使用包含約17萬個蛋白質序列及其結構的公共數據庫，對AlphaFold算法進行訓練。2018年，初版AlphaFold參加CASP13並獲得優勝。今年，新版AlphaFold在CASP14擊敗來自全球的約100個團隊，使蛋白質結構預測達到前所未有的精確度。

CASP衡量預測準確性的主要指標是全局距離測試（GDT）得分，範圍從0至100。新版AlphaFold總體得分中位數高達92.4，意味着預測平均誤差僅為0.16納米，相當於一個原子的直徑。在測試給出的近100個蛋白靶點中，該系統對三分之二靶點給出的預測結構，與通過傳統實驗手段得到的相差無幾。即便是在難度最高的自由建模分類中，該系統得分中位數也高達87，刷新2018年初版創下的近60分的紀錄。在AlphaFold問世之前，各種方式的準確性得分中位數從未超過50。但DeepMind公司承認系統仍有很多預測不準的情況，需要繼續改進。

### 蛋白質結構預測演進史

- 上世紀50年代開始，科學家使用X射線晶體學技術確定蛋白質結構

- 1972年，諾貝爾化學獎得主安芬森在獲獎感言中提出著名假設：理論上來說，蛋白質的氨基酸序列應完全決定其結構。該假設成為此後50年科學家努力方向

- 1994年，國際蛋白質預測競賽（CASP）誕生，此後每兩年舉行一屆，檢驗最新技術和研究成果

- 2018年，初版AlphaFold在CASP13中取得優勝

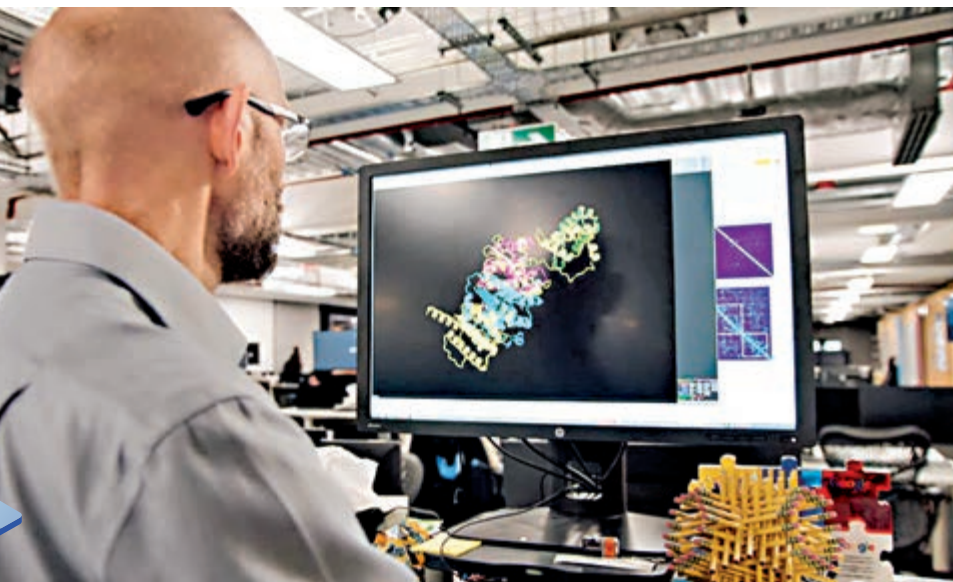
- 2020年，新版AlphaFold再創佳績，使蛋白質結構預測達到前所未有的精確度

來源：大公報整理

### 外國確診人數（部分）

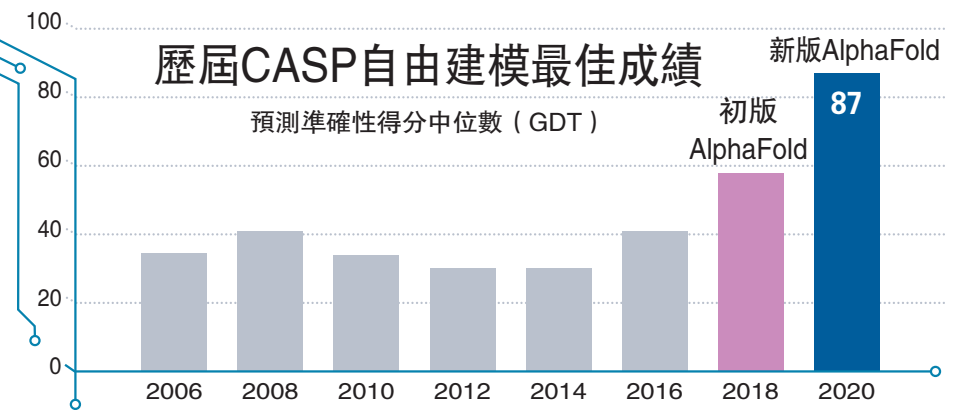
美國	1354.7萬	（26.8萬死）
印度	946.3萬	（13.8萬死）
巴西	633.6萬	（17.3萬死）
俄羅斯	230.2萬	（4.0萬死）
法國	227.5萬	（5.3萬死）
西班牙	164.8萬	（4.5萬死）
英國	163.4萬	（5.9萬死）
意大利	160.2萬	（5.6萬死）
阿根廷	142.5萬	（3.9萬死）
哥倫比亞	131.7萬	（3.7萬死）

來源：約翰霍普金斯大學



▲ AlphaFold可在數日內精準預測蛋白質結構

網絡圖片



## X光測新冠 AI較醫生快10倍

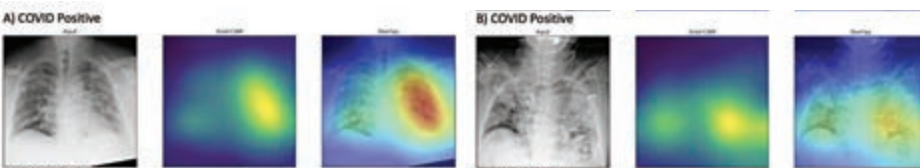
【大公報訊】據美國《科學日報》網站報道：美國西北大學研究人員近日開發出一項名為DeepCOVID-XR的新型人工智能（AI）平台，可透過分析人體肺部X光影像檢測新冠肺炎，不僅速度較胸肺科專科放射師快10倍，準確度也更高。

該AI平台利用卷積神經網絡建造，使用1.7萬張X光影像的大型臨床數據集進行訓練和測試。研究人員發現，相較於正常人，新冠患者的肺部X光影像會較模糊，並出現一些斑塊與陰影，且肺部膨脹時會充滿液體而非空氣。雖然現象與其他肺部疾病類似，但AI仍能分辨出新冠肺炎與其他疾病的差異。數據顯示，AI能在18分鐘內處理300組X光影

像，相較之下，5名經驗豐富的放射科醫師平均要花2.5至3個小時。AI準確度達82%，略高於5位醫生的76%至81%。

不過，並非所有新冠患者肺部都會顯現病狀，尤其是在感染早期。研究人員表示，AI可用作輔助手段，協助醫生更快、更早期找出疑似病患。研究論文11月底發表於期刊《放射學》，研究人員已將算法公開，其他人可繼續使用新數據對其進行訓練，希望未來能在臨床應用。

近年來，AI在醫療領域快速發展。例如針對癌症，AI不僅可協助進行疾病預防及早期篩查，有效降低發病率，在治療過程中也能協助確定最佳治療方案，將副作用和失敗率降到最低。



▲ AI可通過肺部X光影像篩查新冠患者

網絡圖片

## 美疫苗分配由州長決定

【大公報訊】綜合彭博社、美國哥倫比亞廣播公司報道：美國藥廠輝瑞（Pfizer）和莫德納（Moderna）早前均宣布，已就旗下新冠疫苗向美國食品和藥物管理局（FDA）申請緊急使用授權。美國副總統彭斯11月30日表示，疫苗分發工作最快可於12月第三周開始，意味當局將迅速批准第一批疫苗的緊急使用權。各州州長可自行決定優先使用疫苗的人群，聯邦政府將全力支持州政府的分配計劃。

根據華盛頓州州長英斯利辦公室電話紀錄，彭斯表示「強烈相信疫苗可於12月14日那一周開始分發」，而且各

州州長作為當地「最終裁決者」，對疫苗分配有最終決定權。12月1日，美國疾控中心顧問開會討論疫苗注射順序，初步規劃出的優先注射群體包括醫護人員、必要行業工作者、長者和有嚴重肥胖等病史者。

FDA局長哈恩雖未確認疫苗分發日期為12月14日，但他表示會在12月10日專家小組開完會後，迅速決定是否批准緊急使用授權。據報第一批輝瑞疫苗可能將於12月中旬分發，而莫德納疫苗預計將於12月22日啟用。

緬因州州長米爾斯對該州獲得的疫苗數量表示失望。她指出，緬因州只獲

得了可供應12500人的疫苗，「只是預期的三分之一」，情況令人憂慮。



▲ 11月28日，美國醫護人員在檢測站工作

美聯社

## 日韓現禽流感 撲殺數十萬雞鴨

【大公報訊】綜合韓聯社、日本放送協會報道：日韓多地近期接連出現禽流感疫情，當局緊急撲殺大量雞鴨。世界動物衛生組織（OIE）11月30日證實，韓國已通報全羅北道地區出現高致病性的H5N8禽流感，近2萬隻鴨染疫死亡，另有超過39萬隻雞鴨被撲殺。同日，日本宮崎縣亦出現H5型禽流感，是本月第4個出現疫情的縣。

OIE表示，根據韓國政府通報情況，全羅北道井邑市一間養鴨場，日前出現韓國境內今年首宗禽流感病例，約1.9萬隻鴨染疫死亡。該養鴨場被水庫及河川包圍，而且5公里外是候鳥棲息



▲ 韓國出現禽流感疫情，大量家禽遭撲殺

網絡圖片

育場周邊進行消毒。12月1日，韓國農業部通報，慶尚北道尚州市亦出現禽流感疑似病例。

日本宮崎縣11月30日確認，當日日向市東鄉町一間養雞場出現H5型禽流感，約60隻雞病亡。當局已對該養雞場內的4萬隻雞展開撲殺。11月5日起，香川縣、福岡縣與兵庫縣已陸續出現禽流感疫情。

禽流感一般在禽類間傳播，但H5N1、H7N9等亞型已被證實可感染人類，甚至致死。自10月中旬以來，包括法國、德國、英國、比利時在內的多個歐洲國家均出現禽流感疫情。



▲ 11月30日，英國大學生接受新冠病毒檢測

法新社

## 抗疫花錢多成效差 英貪短期經濟誤國

【大公報訊】據《金融時報》報道：英媒調查發現，英國政府在抗疫過程中財政開支高居G7國家第二位，僅次於加拿大，但成效不佳，經濟表現和死亡率均遠不如別國。專家批評，英國在疫情初期不願犧牲短期經濟救人命，結果令長期經濟受重創。

英國抗疫投入較其他G7國家高出80%，包括1270億英鎊公共服務花費、720億英鎊用於保就業等。然而，英國經濟遭受的打擊比他國嚴重90%，死亡人數亦高出60%。英國預算辦公室估算，英國經濟今年將萎縮11.3%，政府需要借貸3940億英鎊來填補稅收缺口，並需額外2800億英鎊公共開支用於抗疫。

經濟學家批評，英國犯下的錯誤，就是在春夏貪圖短期經濟效益任由病毒傳播，最終被迫封城賠上了長期經濟。經濟學家圖姆表示，英國政府的反應慢半拍，引發後續經濟衰退等一系列「中毒反應」。

報道也提到，英國政府開支驚人，部分是為了亡羊補牢。例如政府平時沒有準備充足的個人防護裝備，疫情擴散後才高價購入，導致納稅人多花了100億英鎊。

另據《衛報》11月30日報道，由於新冠疫情導致的經濟危機，英國今年貧困人口將增長近70萬人（包括12萬名兒童），貧困人口總數將超過1500萬，佔總人口的23%。