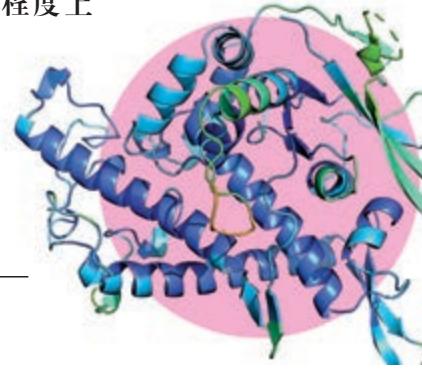


# AI預測蛋白結構 助抗擊新冠

## 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。這意味着該款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。



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。為解剖這一過程，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

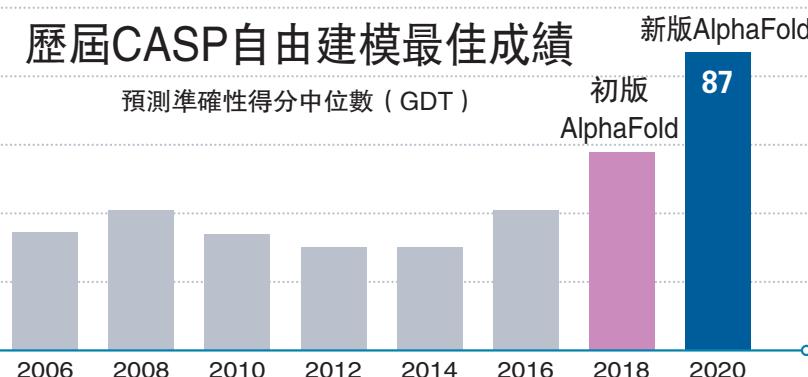
是全局距離測試（GDT）得分，範圍從0至100。新版AlphaFold總體得分中位數高達92.4，意味着預測平均誤差僅為0.16納米，相當於一個原子的直徑。在測試給出的近100個蛋白靶點中，該系統對三分之二靶點給出的預測結構，與通過傳統實驗手段得到的相差無幾。即便是在難度最高的自由建模分類中，該系統得分中位數也高達87，刷新2018年初版創下的近60分的紀錄。在AlphaFold問世之前，各種方式的準確性得分中位數從未超過50。但DeepMind公司承認系統仍有很多預測不準的情況，需要繼續改進。



### 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



新版AlphaFold

初版

AlphaFold

### 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

▲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工作站工作 美聯社

## 抗疫花錢多成效差 英貪短期經濟誤國

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%。

11月30日，英國大學生接受新冠病毒檢測 法新社

## 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2萬隻雞鴨染疫死亡，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

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，當地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。



▲韓國出現禽流感疫情，大量家禽遭撲殺 網絡圖片

