
AlphaFold 3来了

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/27060.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

AlphaFold 3来了。5月8日出版的《自然》报道了AlphaFold 3能以较高准确率预测蛋白质与其他生物分子相互作用的结构。AlphaFold 3是该人工智能模型的最新迭代，准确率比之前的专用工具显著提升，该模型由谷歌DeepMind和Isomorphic Labs的团队研发。

这一最新模型能够预测包含蛋白质数据银行（Protein Data Bank）内几乎所有分子类型的复合物的结构。这种用计算机解析蛋白质与其他分子复杂相互作用的能力，将拓展研究人员对生物过程的理解，并有望推动药物研发。

AlphaFold首次于2020年问世，它和迭代版AlphaFold 2能够根据蛋白质的氨基酸（蛋白质的基本成分）序列预测其3D结构。之后的AlphaFold-Multimer推动了对蛋白质-蛋白质复合物的预测。不过，由于不同类型蛋白质的相互作用差异太大，因此用单一深度学习模型预测复合物的范围一直很难。

在新的研究中，DeepMind的John Jumper和同事报告说，在AlphaFold 2模型的深度学习架构和训练系统的大幅提升下，如今可以对一个统一框架内大量生物分子系统的结构进行更准确的预测。

AlphaFold 3能预测蛋白质与其他蛋白质、核酸、小分子、离子、修饰蛋白质残基的复合物，以及抗体-抗原相互作用。预测准确性显著超过当前预测工具，包括AlphaFold-Multimer。

同时，研究人员也指出了一些局限性，比如约4.4%的结构会出现不正确的手性（一种对称特性）。他们补充道，模拟准确率的进一步提升需要生成一个很大的预测集并对预测结构进行排序，而这会产生额外的计算成本。（来源：中国科学报 赵熙熙）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41586-024-07487-w>

作者：John Jumper 来源：《自然》

更多科学进展请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://iikx.com)转发