No. 27　AI ×医療シリーズ

AlphaFold 活用事例

ソフトウェアのオープンソース化は，単なる普及促進にとどまらず，研究者による継続的な改良や多様な応用展開を通じて，当該分野における技術革新と知的進展の触媒として機能することが期待される．

タンパク質の立体構造予測ソフトウェアである AlphaFold（AF）は，その公開を契機に，創薬やバイオ医薬品の開発を視野に入れた実用的な構造予測プラットフォームへと変革を遂げつつある．

1.　AF で予測したタンパク質構造データベースの公開

2022 年 7 月，**グーグル社と欧州分子生物学研究所（EMBL）**のバイオインフォマティクス部門（EMBL-EBI）は AF で予測したタンパク質構造をデータベース化し「**AlphaFold Protein Structure Database（AlphaFold DB）**」として無償公開した [1, 2]．

初回リリース時（2021 年 7 月）には約 36 万件であった登録タンパク質構造（20 種モデル生物のプロテオームを網羅）は，1 年後（2022 年 7 月）には **2 億 1,400 万を超え**[1]，190 か国・100 万人超のユーザーに利用されている [3]（図 1）．

[1] EMBL-EBI によれば，予測された約 2 億 1,400 万件のうち約 35% は，実験的に決定された構造と同等の精度があると評価されており，さらに 45% は，多くの用途に十分な精度であると考えられている [4]．

2.　ポスト AlphaFold 2

（1）オープンソース化により生まれた関連ソフトウェア

AlphaFold 2（AF2）の構造推論部分の実装コードは GitHub[2] 上に公開され [6]，クラウド上での利用のみならず，誰でも自身の計算機上でその構造予測を再現できるようになった．

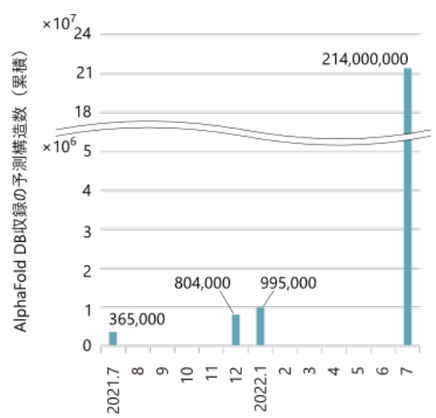

図 1　AlphaFold DB の収録タンパク質数（累積）
（文献 [5] を基に作成）

このオープンソース化は，研究コミュニティにおける AF2 の急速な普及を後押しした．実際，2022 年に実施された国際的なタンパク質立体構造予測評価実験（CASP15）では，開発元であるディープマインド社は参加しなかったものの，多くの研究チームが AF2 に独自の改良を加え，使用法にも工夫を凝らして参加したことから，AF2 ベースの手法が主流を占めたと報告されている [7]．

さらに，AF2 に着想を得た ColabFold や RoseTTAFold などの派生ソフトウェアも開発されている（表 1）．それらは，計算効率やユーザビリティを向上させたもの，多重配列アラインメント（MSA；進化の過程で保存されたアミノ酸配列領域を抽出する手法）を必要としない次世代モデルなど，多様な特徴を備える．以下に，代表例を紹介する．

[2] ソースコードの保存・管理・共有ができるクラウド型のバージョン管理サービス．プログラマー向けにソースコード共同開発を支援する機能を提供．

効率性やユーザビリティを高めた

ワシントン大・ベイカー研究室が開発した **RoseTTAFold** は，特に複雑なタンパク質複合体の構造予測に威力を発揮するとされる [8]．その特徴は，1 次元のアミノ酸配列，2 次元のアミノ酸間の距離・接触情報，3 次元の立体構造という 3 つの情報空間を連携させた「3 トラックニューラルネットワーク」によって，配列パターン，相互作用，空間構造を統合的に学習・予測することにある．さらに 2024 年，同研究室は生体分子（核酸，脂質など）や低分子化合物との相互作用も予測可能な **RoseTTAFold All-Atom** を開発した [9]．

表 1　主な AF2 関連ソフトウェア

発表時期	ソフトウェア名	開発元	特徴
2021.7	RoseTTAFold	ワシントン大	• タンパク質配列，アミノ酸間相互作用，3D構造を同時に考慮 • タンパク質間相互作用や複雑な複合体の構造予測も可能
	ColabFold	マックプランク研 ソウル大 ハーバード大	• Google Colab上で動作 • MMsegs2を採用し，MSAを高速生成 • 計算負荷を大幅軽減
2022. 8	OmegaFold	Helixon	• MSA不要のトランスフォーマーベース予測モデル • アミノ酸配列のみからタンパク質構造を予測
10	OpenFold	ハーバード大 コロンビア大 Meta AI 他	• AF2のオープンソース実装 • 計算効率，カスタマイズ柔軟性向上
11	ESMFold	Meta AI	• MSA不要（独自開発したタンパク質言語モデルESMを活用） • 超高速な構造予測，大規模ゲノム解析やデータスクリーニング向け • 6億超の予測結果を「ESMメタゲノムアトラス」に公開
2024.3	RoseTTAFold All-Atom	ワシントン大	• RoseTTAFold の拡張版 • タンパク質・核酸・小分子・脂質・共有結合修飾を含む複合体の構造予測が可能

独・**マックスプランク研**，**ソウル大**，**ハーバード大**のグループが開発した **ColabFold** は，相同性検索を **MMseqs2**[3] で行うことで MSA を高速生成し，計算負荷を大幅に軽減した．また，Google Colaboratory[4] との連携により，クラウド上の GPU などを活用して低コストで高速にタンパク質構造を予測できる [10]．

米・**パシフィック・ノースウエスト国立研究所**（**PNNL**）は，産業界と協同で AF2 のオープンソースを実装した **OpenFold**[5] を開発した．AF2 と同等の精度を維持しながら，計算効率とカスタマイズの柔軟性が向上している．2022 年 10 月には**ハーバード大のナジム・ブアッタ**，**コロンビア大のモハメッド・アルクライシ**らが OpenFold で 6 億以上の未分類タンパク質の構造的特徴を網羅的に解析するという大規模研究を実施した [11]．

[3] Many-against-Many sequence searching. **ミュンヘン工科大・マーティン・シュタイネッガー**（Martin Steinegger）が開発した膨大な数のタンパク質や核酸配列を高速かつ高感度に比較・検索するためのオープンソースのツールキット．PSI-BLAST（ポジション依存スコア行列を用いた反復型相同性検索ツール）よりも高速・高感度なタンパク質配列の検索ツールとして注目を集めた．現在の UniProt データベース（生物種横断的なタンパク質配列と機能注釈の総合データベース）における Uniref90（90％以上の配列同一性でタンパク質配列をまとめたクラスタデータ）は MMseqs2 を用いて構築されている．

[4] グーグル社が提供しているクラウドベースの教育・研究開発の環境．Python を使用したデータ分析，機械学習，ディープラーニングの開発・実行が可能．

MSA を用いない手法

近年の機械学習によるタンパク質構造予測の多くは，MSA から得られるタンパク質の進化情報を活用している．一方で，MSA を必要とせずアミノ酸の一次配列のみからタンパク質構造を予測するアプローチも提案されている．

その一例が，2022 年 8 月に**ヘリクソン US 社**（**Helixon US inc.**）が発表した **OmegaFold**．タンパク質言語モデル [5] を用い，MSA に依存しないアルゴリズムであるため，配列カバレッジが低く MSA の構築が困難なタンパク質にも有効と考えられる [12]．

2022 年 11 月，**Meta AI** の研究チームは **ESMFold** を発表した．これは，MSA ベースの従来手法と同等の精度を保ちながら，計算速度を大幅に向上させている．この高速性能を活かし，Meta はわずか 2 週間で環境サンプルから直接得られたゲノム情報（メタゲノム）に由来する，6 億 1,700 万種類以上のタンパク質構造を予測し，その結果を「**ESM メタゲノムアトラス**（**ESM Metagenomic Atlas**）」として公開した [13]．

この成果を支えたのが，同社が独自開発したタンパク質言語モデル「**Evolutionary Scale Modeling**（**ESM**）」である．ESM は，最大 150 億のパラメータを持ち，大規模な配列データからタンパク質の進化パターンを学習することで，一次配列から直接立体構造を推定できる．さらに ESMFold では，この言語モデルで初期生成した構造を，実験構造データに基づいてファインチューニングすることで，予測精度を原子レベルまで高めた．

[5] 各アミノ酸配列を「単語」と捉え，自然言語処理技術（分散表現，自己注意機構など）を応用して，タンパク質の構造や機能を文脈的に理解・予測する手法．

（2）AF2 を補完するモデル

タンパク質単体の立体構造予測には卓越した性能を誇る AF2 だが，タンパク質同士の相互作用や動的構造の予測に関しては，依然として克服すべき課題が残る．とりわけ苦手とされるのは，低分子や金属イオンなどの結合位置や構造変化を正確に予測する「リガンドの認識」，複数のタンパク質が結合して機能を発揮する際の相互配置を明らかにする「複合体の形成」，さらには，pH や温度，分子間相互作用などの条件変化に伴って構造がどのように変化するかを追跡する「構造ダイナミクス」などである [14]．

一方，CASP15（2022）では，「タンパク質と薬物・リガンドとの相互作用」「動的構造の予測」「多鎖複合体の構造予測」といった課題が新たに加わり，これは，タンパク質立体構造予測を創薬やバイオ医薬品の開発につなげていきたいという研究コミュニティの気運が反映された形となった [15]．

AlphaFold-Multimer と AlphaFill

こうしたニーズに対応するため，ディープマインド社は 2021 年 10 月，複数のタンパク質鎖間の相互作用を高精度に予測できる「**AlphaFold-Multimer**」を発表した [16]．さらに 2023 年 7 月には，リガンドや補因子（コファクター）を既知の構造データから補完して予測精度を向上させる「**AlphaFill**」[17] を公開した．

複合体の構造を予測する AlphaFold 3

2024 年，ディープマインド社と Isomorphic Labs[6] が発表した **AlphaFold 3**（**AF3**）は，タンパク質にとどまらず，DNA，RNA，小分子リガンド，イオンとの相互作用を高精度に予測できるモデルとして注目された [18]．特に，リガンドの結合メカニズムや結合強度の予測に優れた性能を示し，創薬プロセスでの利用に期待が寄せられている．

AF3 では，画像生成 AI で用いられる「**拡散モデル**[7]」[19] を取り込んだことによって多様なコンフォメーション（構造状態）を考慮した複雑な分子複合体の構造予測精度が向上した．

画像生成 AI における拡散モデルでは，まず，ピクセルで構成された画像に対して確率分布に基づいた操作により段階的にノイズ（この場合はランダムな色や輝度）を加え，ほぼ完全にランダムな状態に変換する

No. 27　AI ×医療シリーズ

AIphaFold 活用事例

「拡散過程」を経る．次に「逆拡散過程」においては，拡散過程で得られたノイズ付き画像を入力データとし，ノイズが一段除去された画像を出力データとして，段階的にノイズを除去しながら元の画像を再構築する手法を学習する．この学習によって，モデルはノイズのみの状態（初期状態）からリアルな画像を段階的に生成できるようになる．

一方，AF3 の拡散モデルは，画像ではなくタンパク質立体構造を生成対象とするため，「拡散過程」では，タンパク質を構成する原子分布に対し，確率的にノイズ（この場合はランダムな原子分布）を加えていく．「逆拡散過程」では，このノイズを一段ずつ除去しながら元の構造を再構築する方法を学習する．この学習後，初期状態（AF3 では単なるランダム状態ではなく，推測された構造）から，段階的にノイズを除去して分子構造を形成することが可能となる．最終的にはエネルギー的に安定な構造へと収束させる．

表 2 に 3 バージョンの主要 AI 技術と特徴をまとめた．AF は最先端の深層学習技術を導入しながら精度と予測範囲を向上させてきたことがわかる．

[6] ディープマインド社の親会社 Alphabet が 2021 年に設立．創薬応用を目的とした AI 研究開発企業．

[7] 2015 年に**スタンフォード大**の**ヤッシャ・ソウル - ディクススライン** (Sohl-Dickstein, Jascha) らが非平衡熱力学に基づいた最初の拡散モデル（Diffusion Model）を提案 [20]，2020 年には**カリフォルニア大バークレー校**の**ジョナサン・ホー**（Jonathan Ho）らがノイズ除去拡散確率モデル（Denoising Diffusion Probabilistic Model, DDPM）を発表するなど重要な発見が相次いだ．これらはテキストからの画像生成 AI に大幅な進展をもたらした．

3.　AF 活用事例

最近の論文から AF の活用事例を紹介する．

表 2　AF バージョン比較

バージョン	主要 AI 技術	予測範囲	応用分野
AF (2018)	アミノ酸間の距離マトリクスを「CNN（畳み込みネットワーク）」*1で学習し構造予測	単一タンパク質の基本構造	• タンパク質フォールディング研究 • 構造生物学
AF2 (2020)	「エボフォーマー」+「注意機構」により遠距離のアミノ酸同士の共進化情報を学習	単一タンパク質＋マルチマー（複合体）	• ワクチン開発 • 創薬デザイン • マルチマーの相互作用解析
AF3 (2024)	「拡散モデル」を導入して分子間相互作用の予測精度を向上	タンパク質-リガンド，DNA/RNA結合，翻訳後修飾	• RNAワクチン標的の解析 • 構造ベース創薬 • タンパク質-小分子/核酸相互作用の精密解析

*1 Convolutional Neural Network:「畳み込みフィルター」を用いて画像データから様々な特徴（画像のエッジ，テクスチャ，形状など）を際立たせる処理をすることで，人間の視覚のように画像や空間データに対して優れた認識を示す機械学習モデル．

（1）マラリアワクチン候補抗原の構造を予測

2022 年 7 月，**オックスフォード大**の**スミ・ビスバス**（Sumi Biswas）と**マシュー・ヒギンズ**（Matthew K. Higgins）らは「AF2 を用いて主要なマラリア原虫タンパク質 Pfs48/45 の構造を解析し，抗体が結合する可能性が高い部位を解明した」と報告した [21, 22]．

マラリア原虫が媒介蚊の中腸内で特異的に発現するタンパク質は，感染伝播阻止型マラリアワクチンの候補抗原となり得る．Pfs48/45 もその一つとして知られていた [23]．これまでのところ，Pfs48/45 が 3 つのドメインから構成されていることや，それらの境界（ドメイン境界）の理解は進んでいたが，各ドメインがどのように集まって全長 Pfs48/45 を形成するかはまだ明らかにされていなかった．特に N 末端ドメインは柔軟性が高く動的なので，従来の結晶構造解析では明瞭な電子密度マップが得られなかった．

研究グループは，AF2 で予測された Pfs48/45 の構造を実験的な電子密度マップと照合することで，N 末端および中央ドメインの構造的特徴と，それらに対する抗体の結合が推定される部位についての知見を得た（図 2）．この知見は，マラリアワクチン設計の新たな指針となる可能性がある．なお，Pfs48/45 ワクチンはオックスフォード大により 2024 年 1 月時点で P1b 試験が実施されている（NCT06549257; VAC099）．

（2）AF でフラビウイルスの進化を解き明かせ

フラビウイルス科（Flaviviridae）には，デング熱やジカ熱を引き起こすフラビウイルス属（Flavivirus）や，C 型肝炎ウイルス（HCV）を含むヘパシウイルス属（Hepacivirus）が含まれる．これらのウイルスの進化は，主に遺伝子配列やゲノム配列の比較に基づいて推定されてきた．しかし，特に他の生物の遺伝情報を取り込む RNA ウイルスの進化は非常に速い．一方で，それらがコードするタンパク質構造の進化は比較的ゆるやかであるため，配列レベルでは識別困難な進化的つながりを構造レベルで明らかにできる可能性がある．以前は全ファミリー間でタンパク質構造を比較することは現実的ではなかったが，AF や派生モデルの出現により実現可能になりつつある．

グラスゴー大と**シドニー大**を中心とした研究チーム（**東大医科研**の**スピロス・リトラス**（Spyros Lytras）も共著者の一人）は，フラビウイルス科の糖タンパク構造から進化的系統関係を明らかにするために AF2 モデル（ColabFold–AF2）と ESMFold を用いて，458 種のフラビウイルス種から 33,000 を超えるタンパク質の予測構造を生成した [24, 25]．

この研究により，C 型肝炎ウイルスの感染機構が既知のフラビウイルス属のウイルスとは異なる可能性が示唆された．例えば，ヘパシウイルス属やペギウイルス属（Pegivirus）に属するウイルスは，フラビウイルス属のウイルスよりも，むしろペスチウイルス属（Pestivirus）のウイルスと E1 および E2 糖タンパクの構造に相同性が認められた（図 3）．

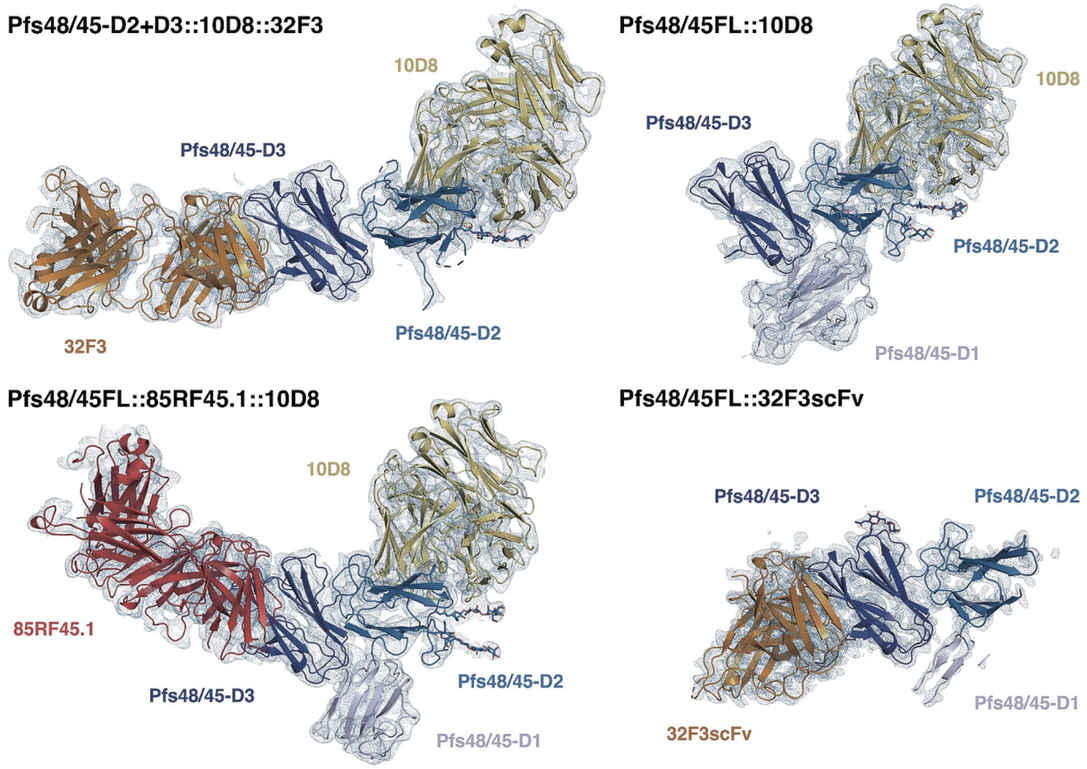

図 2　抗体 (85RF45.1, 32F3, 10D8) に結合した Pfs48/45 の構造
3 ドメインを異なる青色の濃淡で明示（■淡青 : N 末端ドメイン，■青 : 中央ドメイン，■濃青 : C 末端ドメイン）
抗体：10D8（■），85RF45.1（■），32F3 およびその scFv（■）（[22] Fig. 2 より引用 CC BY 4.0）

（3）SARS-CoV-2 スパイク変異体の構造解析

米・**チャップマン大**のグループは AF2 と MD シミュレーションを組み合わせて，SARS-CoV-2 オミクロン変異株（JN.1, KP.1, KP.2, KP.3）のスパイクタンパク質受容体結合ドメイン（RBD）と宿主受容体 ACE2 複合体の原子構造を予測，KP.2 および KP.3 系統が ACE2 へ結合能力を失わずに中和抗体を回避している可能性を示した [26]．

4.　創薬・ワクチン開発で本領を発揮するために

AF の登場によってタンパク質構造予測は飛躍的な進歩を遂げ，今後，創薬やワクチン開発においてその本領が発揮されることが期待される．

（1）「核酸・リガンド・イオンとの相互作用」「融合タンパク質の動態」

AF2 の弱点とされてきた「リガンド認識」「複合体形成」「構造ダイナミクス」に対応するため，関連ソフトウェアや AF3 など次世代モデルの開発が進んでいるが，当面の次のような課題が残されている．

まず，ウイルス粒子の多鎖複合体やリガンドと受容体の結合形態などの構造予測は依然として難易度が高い．特に，タンパク質と核酸，低分子リガンド，イオンとの相互作用を包括的に解析するためには，AF3 の性能をさらに高める必要がある．

次に，ウイルスの融合タンパク質に見られる構造変化に伴う抗原性エ

No. 27　AI ×医療シリーズ

AlphaFold 活用事例

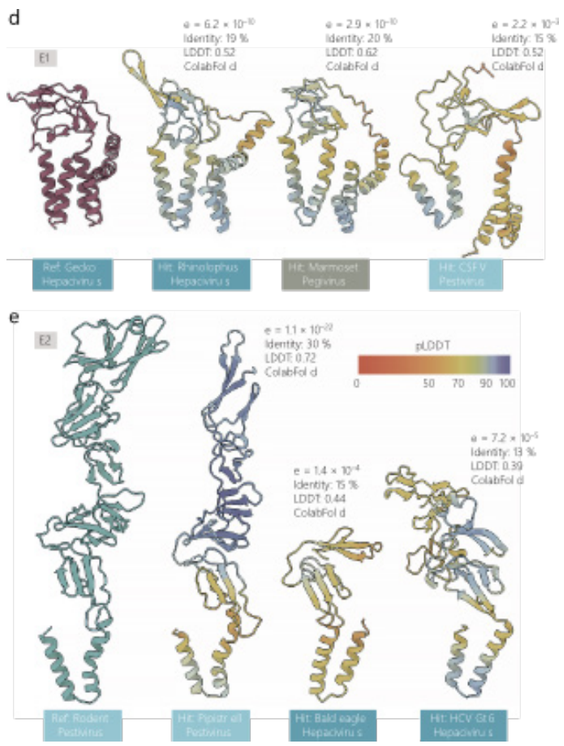

図 3　E1, E2 糖タンパク質の相同性（[25] Fig.2 より抜粋 CC BY 4.0）

ピトープの動態．AF が得意とする静的構造予測に加え，MD シミュレーション，実験的手法との統合によって，融合過程における構造遷移とそれに伴う抗原性の変化をより深く理解していきたい．

（2）周辺 AI 技術の革新を取り込む

周辺 AI 技術の革新も目覚ましい日進月歩だ．例えば，**ハーバード医科大**の**ニコール・タダニ**（Nicole Thadani）らは，パンデミック前のウイルスゲノム配列データや進化情報を基に SARS-CoV-2 の変異を予測した．上位スコア 10％にランクされた変異のうち 50％が，実際に 2023 年 5 月までにパンデミックで出現したことを示した [27]．

また，AI によるタンパク質設計の実装も進みつつある．例えば，**RFdiffusion**[28] のようなタンパク質生成 AI を用いて，インフルエンザのヘマグルチニンを標的としたバインダーや酵素活性部位の設計といった応用研究も始まっている [29]．

このように周辺技術を積極的に取り込みながら，タンパク質計算科学は今後もさらに発展を遂げていくことが期待できる．

コロナ禍の中，ウイルスタンパクの構造を予測

2020 年初頭．まさにコロナ禍のまっただ中，AF は SARS-CoV-2 を構成する 30 種類のタンパク質の中，形状が未知であった ORF3a の構造を予測した [24]．2020 年 6 月に**カリフォルニア大バークレー校**の分子神経生物学者**ステファン・ブロホーン**（Stephen Brohawn），**ダイアナ・ボウティスタ**（Diana M. Bautista）らはクライオ電子顕微鏡法によって明らかにした ORF3a の構造を報告 [30] し，図 4 に示すように両者はよく一致していた．

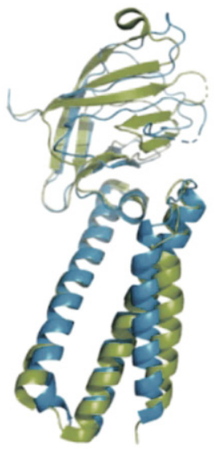

図 4　ORF3a の構造比較
青 : AF による構造
緑 : クライオ電子顕微鏡法による構造

5.　おわりに

タンパク質の立体構造を明らかにすることは，生物学的な機能や疾患メカニズムを解明するために不可欠である．X 線結晶構造解析法によるタンパク質構造解析，構造と機能の関係解明，タンパク質合成メカニズム，構造予測の計算モデル．こうした分野において多くのノーベル化学賞受賞者が輩出されてきたことは，タンパク質構造研究の意義の大きさを物語っている（表 3）．

「やがて，アミノ酸配列からあらゆるタンパク質の立体構造を予測することが可能になるだろう」．1972 年の受賞者クリスチャン・アンフィンセンは受賞スピーチの中でこう述べた．

それから半世紀，この「予言」を現実のものとしたのが，ジャンパーとハサビスである．

“AI will bring about a golden age of discovery in science.”

2024 年 12 月，ハサビスはノーベル賞授賞式のスピーチで「AI によって科学は新発見の黄金時代を迎えるかもしれない」と述べた．この新たな「予言」を現実にするのは次代の科学者たちだ．

表 3　タンパク質構造に関するノーベル化学賞受賞者

受賞年	受賞者		受賞理由
1946	ジェームズ・サムナー	米・コーネル大	酵素の単離・結晶化
	ジョン・ノースロップ	米・ロックフェラー研	諸酵素とウイルスタンパクの純粋調製
	ウェンデル・スタンリー	米・ロックフェラー研	
1958	フレデリック・サンガー	英・ケンブリッジ大	タンパク質のアミノ酸配列（1 次構造）を決定（サンガー法）
1962	ジョン・ケンドリュー	英・ケンブリッジ大	ミオグロビンの構造解析
	マックス・ペルツ	英・ケンブリッジ大	ヘモグロビンの構造解析
1972	クリスチャン・アンフィンセン	NIH（米・国立衛生研究所）	タンパク質の構造と機能
1982	アーロン・クルーグ	英・ケンブリッジ大	電子線結晶学の開発と核酸・タンパク質複合体の立体構造
1988	ヨハン・ダイゼンホーファー	独・マックスプランク研究所	膜タンパク質の構造決定
	ロベルト・フーバー	独・マックスプランク研究所	
	ハルムート・ミヒェル	独・マックスプランク研究所	
1997	ジョン・ウォーカー	英・MRC分子生物学研究所	ATP 合成酵素の構造決定
2002	クルト・ヴュートリッヒ	スイス連邦工科大	NMR 法
2003	ロデリック・マキノン	米・ロックフェラー大	イオンチャネルの構造決定
2006	ロジャー・コーンバーグ	米・スタンフォード大	RNA ポリメラーゼの構造決定
2009	ヴェンカトラマン・ラマクリシュナン	英・ケンブリッジ大	リボソームの構造と機能
	トーマス・スタイツ	米・イェール大	
	アダ・ヨナス	イスラエル・ワイツマン科学研究所	
2012	ブライアン・コビルカ	米・スタンフォード大	G タンパク質共役受容体（GPCR）の構造決定
2013	マーティン・カープラス	英・ケンブリッジ大	複雑な化学システムのマルチスケールモデル開発
	マイケル・レビット	米・スタンフォード大	
	アリー・ワーシェル	米・南カリフォルニア大	
2017	ジャック・デュボシェ	スイス・ローザンヌ大	溶液中の生体分子の高分解能構造決定のための クライオ電子顕微鏡の開発
	ヨアヒム・フランク	米・コロンビア大	
	リチャード・ヘンダーソン	英・ケンブリッジ大	
2024	デイヴィッド・ベイカー	米・ワシントン大	計算によるタンパク質設計
	デミス・ハサビス	Google DeepMind	タンパク質構造予測
	ジョン・ジャンパー	Google DeepMind	

References

[1] AlphaFold Protein Structure Database, https://alphafold.ebi.ac.uk/
[2] Varadi, M. et al., Nucleic Acids Res, 50, D1, pp. D439-D444, 2022
[3] Varadi, M. et al., Nucleic Acids Res, 52, D1, pp. D368-D375, 2024
[4] Callaway, E., Nature, 608, 7921, pp. 15-16, 2022
[5] Callaway, E., Nature, 611, 7935, pp. 211-212, 2022
[6] AlphaFold, https://github.com/google-deepmind/alphafold
[7] 寺師玄記 , 木原大亮 , 日本結晶学会誌 , 65, pp. 3-9, 2023
[8] Baek, M. et al., Science, 373, 6557, pp. 871-876, 2021
[9] Krishna, R. et al., Science, 384, 6693, p. eadl2528, 2024
[10] Mirdita, M. et al., Nat Methods, 19, 6, pp. 679-682, 2022
[11] Ahdritz, G. et al., Nat Methods, 21, 8, pp. 1514-1524, 2024
[12] Wu, R. et al., bioRxiv, p. 2022.2007.2021.500999, 2022
[13] Lin, Z. et al., Science, 379, 6637, pp. 1123-1130, 2023
[14] 服部素之 , 実験医学 , 41, 16, pp. 2569-2574, 2023
[15] Kryshtafovych, A. et al., Proteins, 91, 12, pp. 1539-1549, 2023
[16] Evans, R. et al., bioRxiv, p. 2021.2010.2004.463034, 2022
[17] Hekkelman, M.L. et al., Nat Methods, 20, 2, pp. 205-213, 2023
[18] Abramson, J. et al., Nature, 630, 8016, pp. 493-500, 2024
[19] Ho, J. et al., arXiv:2006.11239, 2020
[20] Sohl-Dickstein, J. et al., arXiv:1503.03585, 2015
[21] OXFORD, Our malaria vaccine work highlighted by AlphaFold, 2022, https://higginslab.web.ox.ac.uk/our-malaria-vaccine-work-highlighted-alphafold
[22] Ko, K.T. et al., Nat Commun, 13, 1, p. 5603, 2022
[23] van Dijk, M.R. et al., Cell, 104, 1, pp. 153-164, 2001
[24] Callaway, E., Where did viruses come from? AlphaFold and other AIs are finding answers, 2024, https://www.nature.com/articles/d41586-024-02970-w.pdf
[25] Mifsud, J.C.O. et al., Nature, 633, 8030, pp. 695-703, 2024
[26] Raisinghani, N. et al., Viruses, 16, 9, p. 1458, 2024
[27] Thadani, N.N. et al., Nature, 622, 7984, pp. 818-825, 2023
[28] Wang, J. et al., Cold Spring Harb Perspect Biol, 16, 7, 2024
[29] Watson, J.L. et al., Nature, 620, 7976, pp. 1089-1100, 2023
[30] Kern, D.M. et al., Nat Struct Mol Biol, 28, 7, pp. 573-582, 2021