

## 正誤表・更新情報

本書中に訂正・更新箇所等がございました。お手数をお掛けしますが、下記ご参照頂けますようお願い申し上げます（2022年1月28日）

### ■第1版 第1刷（2022年2月1日発行）の更新箇所

頁	場所	修正前	修正後	補足	掲載
「いま知りたい!!」コーナー					
434	表	表の内容を更新致します		※1をご参照下さい	22/01/28

#### 図表

※1 更新前

表 AlphaFoldおよび派生ツールの一覧

	利用形態	特徴	ライセンス	商用利用
AlphaFold <sup>3)</sup> (本家版)	ローカル インストール	ローカルで予測が実行できる	Apache License 2.0 *学習済みモデルパラメータは CC BY-NC 4.0	事実上不可*1
AlphaFold Colab 版 <sup>4)</sup>	Colaboratory	配列を入力するだけで予測できる 配列DBが簡易版	Apache License 2.0	事実上不可*1
ColabFold <sup>7)</sup>	Colaboratory	配列を入力するだけで予測できる AlphaFold本家版に近い予測性能	MIT License	事実上不可*1
ColabFold batch (localcolabfold) <sup>7)</sup>	ローカル インストール	ColabFoldをローカル環境で実行できる	MIT License	事実上不可*1
OpenFold <sup>8)</sup>	ローカル インストール	AlphaFoldのPyTorchライブラリによる 再実装。予測モデルの学習も可能	Apache License 2.0	可*2
AlphaFold DB <sup>5)</sup>	データベース	AlphaFoldで予測した結果の立体構造80 万件超を収録	CC BY 4.0	可

\*1 AlphaFold, AlphaFold Colab版, ColabFold, ColabFold batch (localcolabfold) については、ソースコード自体は商用利用可能なオープンソースライセンスとなっているが、これらのコードが参照するDeepMindの学習済みモデルパラメータは商用利用を禁止するCC BY-NC 4.0ライセンスで公開されているものである。現在のところ、このDeepMindの学習済みモデルパラメータの利用を回避する手段がないため、商用利用は事実上不可能な状態である。また、参照データベースの1つであるPDB70データベースはCC BY-NC-SA 4.0ライセンスで公開されているため、商用利用の際はPDB70データベースを外すか、PDB70データベースに相当するものを自身で生成する必要がある（PDB70はPDBに対して最大70%の配列一致度となるようなクラスタリングを行ったもの）。

\*2 OpenFoldについては、現在のところDeepMindの学習済みモデルパラメータを利用した検証しか行われておらず、独自の学習済みモデルパラメータは公開されていない。そのため、「自分で学習を実行すれば」商用利用が可能という状況である。ただし、OpenFoldの作者の1人であるMohammed AlQuraishiは、Twitterで「学習を実行中であり近日に新しいモデルパラメータを公開する」と投稿している<sup>9)</sup>。

更新後

表 AlphaFoldおよび派生ツールの一覧

	利用形態	特徴	ライセンス	商用利用
AlphaFold <sup>3)</sup> (本家版)	ローカル インストール	ローカルで予測が実行できる	Apache License 2.0 *学習済みモデルパラメータは CC BY- <del>NC</del> <b>NG</b> 4.0	可*1
AlphaFold Colab 版 <sup>4)</sup>	Colaboratory	配列を入力するだけで予測できる 配列DBが簡易版	Apache License 2.0	可*1
ColabFold <sup>7)</sup>	Colaboratory	配列を入力するだけで予測できる AlphaFold本家版に近い予測性能	MIT License	可*1
ColabFold batch (localcolabfold) <sup>7)</sup>	ローカル インストール	ColabFoldをローカル環境で実行できる	MIT License	可*1
OpenFold <sup>8)</sup>	ローカル インストール	AlphaFoldのPyTorchライブラリによる 再実装。予測モデルの学習も可能	Apache License 2.0	可*2
AlphaFold DB <sup>5)</sup>	データベース	AlphaFoldで予測した結果の立体構造80 万件超を収録	CC BY 4.0	可

\*1 2022年1月19日に学習済みモデルパラメータのライセンスがCC BY 4.0に変更され、2022年1月20日にPDB70のライセンスがCC BY 4.0に変更されたことで、AlphaFoldおよび派生ツールの完全な商用利用が可能となった。

\*2 OpenFoldについては、現在のところDeepMindの学習済みモデルパラメータを利用した検証しか行われておらず、独自の学習済みモデルパラメータは公開されていない。そのため、「自分で学習を実行すれば」商用利用が可能という状況である。ただし、OpenFoldの作者の1人であるMohammed AlQuraishiは、Twitterで「学習を実行中であり近日に新しいモデルパラメータを公開する」と投稿している<sup>9)</sup>。