

悟空的南宋时代

coderD的自留地 合鬼

(防坑)Alphafold 非docker 安装指南

本指南适用于Linux系统。Alphafold官方也强调尽量使用Linux系统！官方提供了docker版安装步骤。

- Alphafold简介：
  - 强大的蛋白质结构预测。
  - 开源地址：<https://github.com/deepmind/alphafold>
  - 在线结构数据库：<https://alphafold.ebi.ac.uk/>
  - 在线版Alphafold：<https://colab.research.google.com/github/deepmind/alphafold/blob/main/notebooks/AlphaFold.ipynb>
  - 论文：<https://www.nature.com/articles/s41586-021-03819-2>
- 软硬件条件：
  - python版本：建议使用python3.8。
  - 建议使用conda创建python环境。

conda安装参见：<https://conda.io/projects/conda/en/latest/user-guide/install/index.html>

- 硬件条件（搭建本地预测服务器参考条件）：
  - 硬盘1T至2T以上，建议3T。

注1：Alphafold预测的准确度依赖于共进化信息的丰富度，所以要完整的预测或全提高准确度，就需要下载好几个数据库，下载的脚本在Alphafold包的script文件夹下。所以需要这么大的存储，在超算上这都不是事。但是，个人PC就有点大了！

注2：如果只是简单预测或测试，可以不用下载官方给出的全部数据库，准备1T足以，视所需数据库的大小。

- CPU: 8至12核以上。
- 内存:16G至48G以上。
- GPU:支持CUDA11（不用GPU会很费时间，尽量使用GPU加速。）
- 注：如果只是想在个人PC上简单测试，以上硬件条件可忽略。也可以使用在线版Alphafold进行预测。

- 安装步骤：
  - 第一步：从github下载Alphafold包。

git clone <https://github.com/deepmind/alphafold.git>
  - 第二步：进入alphafold文件夹，配置python环境。

pip install -r [requirements.txt](#)
  - 第三步：修改jaxlib版本。

使用官方的jaxlib会报错：AttributeError: module 'jaxlib.pocketfft' has no attribute 'pocketfft'

pip install --upgrade jax==0.2.14 jaxlib==0.1.69

- 第四步：安装openMM。

官方建议使用conda安装。参见：<https://openmm.org/>

建议使用openmm7.5.1版本，7.6.0会报错：ModuleNotFoundError: No module named 'simtk.openmm.app.internal'

- conda install -c conda-forge openmm=7.5.1
- 验证openmm：python -m simtk.testInstallation

- 直接执行python -m openmm.testInstallation 会报错找不到openmm
- 输出以下内容就说明安装好了。

OpenMM Version: 7.5.1 Git Revision:

There are 4 Platforms available:

1 Reference - Successfully computed forces 2 CPU - Successfully computed forces 3 CUDA - Successfully computed forces 4 OpenCL - Successfully computed forces

Median difference in forces between platforms:

Reference vs. CPU: Reference vs. CUDA: CPU vs. CUDA: Reference vs. OpenCL: CPU vs. OpenCL: CUDA vs. OpenCL:

All differences are within tolerance.

- 如果输出内容里出现：CUDA - Error computing forces with CUDA platform，原因在于cudatoolkit不对。首先使用 nvidia-smi 查看CUDA Version，然后使用 conda install -c conda-forge cudatoolkit= CUDA Version(对应的版本号)，就可以解决问题。当然没有cuda也能跑起来，只是费时间。

- 验证Alphafold：

2023年1月						
日	一	二	三	四	五	六
1	2	3	4	5	6	7
8	9	10	11	12	13	14
15	16	17	18	19	20	21
22	23	24	25	26	27	28
29	30	31	1	2	3	4
5	6	7	8	9	10	11

导航

博客园  
首页  
新随笔  
联系  
订阅 [RSS](#)  
管理

统计

随笔 - 31  
文章 - 0  
评论 - 3  
阅读 - 31209

公告

打赏GIVE A REWARD



关注我的公众号



昵称： 猪VIII戒的南宋时代  
园龄： 5年10个月  
粉丝： 0  
关注： 3  
[+加关注](#)

搜索

找找看

谷歌搜索

常用链接

我的随笔  
我的评论  
我的参与  
最新评论  
我的标签

我的标签

linux(7)  
科研(4)  
计算物理(3)  
生 活(2)  
Alphafold(2)  
蛋白质预测(2)  
量子化学(2)  
分子动力学模拟(2)  
amber(2)  
python pycharm(1)  
更多

随笔档案

2023年1月(2)  
2022年12月(2)  
2022年11月(1)  
2022年9月(1)  
2022年8月(2)  
2022年7月(1)  
2020年4月(1)  
2020年3月(1)  
2018年11月(1)  
2018年8月(1)  
2018年6月(1)  
2018年5月(1)  
2018年4月(7)  
2018年2月(1)  
2018年1月(1)  
更多

相册

coder(4)

阅读排行榜

- 进入alphafold，执行 python run\_alphafold\_test.py
- 出现以下内容，就说明安装好了。

```
[ RUN ] RunAlphafoldTest.test_end_to_end_no_relax I0814 21:46:41.874690 140372256589632
run_alphafold.py:161] Predicting test I0814 21:46:41.875205 140372256589632 run_alphafold.py:190]
Running model model1 on test I0814 21:46:41.875339 140372256589632 run_alphafold.py:202] Total
JAX model model1 on test predict time (includes compilation time, see --benchmark): 0.0s I0814
21:46:41.878139 140372256589632 run_alphafold.py:271] Final timings for test: {'features':
3.409385681152344e-05, 'process_features_model1': 3.838539123535156e-05,
'predict_and_compile_model1': 2.0742416381835938e-05} [ OK ]
RunAlphafoldTest.test_end_to_end_no_relax [ RUN ] RunAlphafoldTest.test_end_to_end_relax I0814
21:46:41.880331 140372256589632 run_alphafold.py:161] Predicting test I0814 21:46:41.880626
140372256589632 run_alphafold.py:190] Running model model1 on test I0814 21:46:41.880749
140372256589632 run_alphafold.py:202] Total JAX model model1 on test predict time (includes
compilation time, see --benchmark): 0.0s I0814 21:46:41.883405 140372256589632
run_alphafold.py:271] Final timings for test: {'features': 3.0994415283203125e-05,
'process_features_model1': 3.409385681152344e-05, 'predict_and_compile_model1':
1.6450881958007812e-05, 'relax_model1': 2.9087066650390625e-05}

[ OK ] RunAlphafoldTest.test_end_to_end_relax

Ran 2 tests in 0.011s

OK
```

- 后记：
  - 未完待续，后续Alphafold使用将继续更新。
  - 本文提到的一些软件可以通过下列连接获取。
    - minicoda:链接: <https://pan.baidu.com/s/1HOvUef7m0TffRdC-caUzVQ> 提取码: dwwc
    - Alphafold: 链接: <https://pan.baidu.com/s/1D0CXpumKFo21kJLd29xvNw> 提取码: ri6s
  - 转载请注明来源: <https://www.cnblogs.com/phyng/p/16587414.html>

标签: linux, 科研, Alphafold, python, 蛋白质预测

好文要顶

关注我

收藏该文



猪VIII戒的南宋时代  
粉丝 - 0 关注 - 3

+加关注

« 上一篇: LINUX下基于NVIDIA HPC SDK 的 VASP6.3.x编译安装报错整理  
» 下一篇: (防坑)Alphafold 非docker 安装指南(续0.1)

posted on 2022-08-15 10:36 猪VIII戒的南宋时代 阅读(294) 评论(1) 编辑 收藏 举报

0  
推荐

0  
反对

刷新评论 刷新页面 返回顶部

登录后才能查看或发表评论，立即 [登录](#) 或者 [逛逛](#) 博客园首页

【推荐】阿里云新人特惠，爆款云服务器2核4G低至0.46元/天  
【推荐】腾讯云云产品年终特惠，轻量应用服务器6.58元/月起



编辑推荐：

- 探究：初学者编程语言的选择
- Three.js 进阶之旅：新春特典 - Rabbit craft go
- C#11 新特性整理
- 如何更好的使用缓存，Redis 缓存的特殊用法
- 请求量突增一下，系统有效 QPS 为何下降很多？

阅读排行：

- Three.js 进阶之旅：新春特典-Rabbit craft go
- threeJs构建3D世界
- 工作这么多年，我总结的数据传输对象（DTO）的最佳实践
- Apache IoTDB C# SDK 介绍
- Quartz 使用教程

Powered by:  
博客园

Copyright © 2023 猪VIII戒的南宋时代  
Powered by .NET 7.0 on Kubernetes

- MySQL 连接超时：报错SQLSTATE[HY000] [2002] Connection timed out(11570)
- 解决linux下U盘变成只读模式(3609)
- thinkphp3.2.3使用ajax 的一些坑——使用AjaxReturn()后，直接返回null，模板文件不起作用(2264)
- linux系统下phpstudy里的mysql使用方法(2155)
- Flask 运行报错 HTTPStatus.BAD\_REQUEST This site can't provide a secure connection(1813)

评论排行榜

- ifort + mkl + impi （全套Intel）编译安装量子化学软件GAMESS 2022 R1版本(1)
- (防坑)Alphafold 非docker 安装指南(1)
- 关于thinkphp控制器引用model里的方法的一点收获(1)

推荐排行榜

- ATOM使用的一点心得与技巧——在一个窗口打开多个项目(1)

最新评论

- Re:ifort + mkl + impi （全套Intel）编译安装量子化学软件GAMESS 2022 R1版本

请问一下，配置 ./config后，如何编译？  
直接输入make ddi，结果提示要首先配置config

--星斗如盘

2. Re:(防坑)Alphafold 非docker 安装指南

狠高端~

--beautifulzzzz

3. Re:关于thinkphp控制器引用model里的方法的一点收获  
好好66666

--猪VIII戒的南宋时代