



## 解密AlphaFold2，从蛋白从头折叠方法RaptorX谈起

王 晟

南方科技大学冷冻电镜中心

去年12月初，相信大家的朋友圈都被DeepMind的 AlphaFold2 ( AF2 ) 给刷屏了，因为AF2在具有“蛋白质奥林匹克竞赛”之称的第14届国际蛋白质结构预测大赛 ( CASP14 ) 上横扫全部参赛选手，以异常夸张的结构预测精度令世人震撼。DeepMind表示，AF2基本解决了蛋白折叠问题这个困扰人类50年之久的问题。《自然》杂志在随后的评论更是称AF2“将改变一切”。那么，AF2究竟是什么？它是如何一步步进化到如此高的精度的？有哪些底层逻辑是值得我们深入思考的？我将给出自己的见解，一切从第一代基于深度学习的蛋白从头折叠方法RaptorX谈起。