Q：蛋白質摺疊問題

1972年的諾貝爾化學獎得主Christian Anfinsen曾提出一個假設：理論上從一個蛋白質的氨基酸序列就能判斷其結構。然而，該假設最大的挑戰在於要進入3D結構之前，蛋白質的折疊方式將是個天文數字，若要利用蠻力運算，估計有10^300種可能性，所耗費的時間可能比已知的宇宙生命還久。

Ａ：人工智慧的DeepMind，兩年前以AlphaFold奪下蛋白質結構預測關鍵評估。

AlphaFold直接從結構著手，不使用已知的蛋白質作為樣本，他利用兩種深度神經網路的方法來建構完整蛋白質結構的預測，得以預測氨基酸對之間的距離，以及連結這些氨基酸之化學鍵之間的角度。

AlphaFold是以含有17萬種蛋白質架構的蛋白質資料銀行數據，再加上內含未知架構之蛋白質序列的各種大型資料庫來進行訓練，以128個TPUv3核心（約等於100~200個GPU）執行數周。

且在2020年的攝氏中，AlphaFold2的準確度中位數達到92.4，就算在最難的自由建模類別的蛋白質項目，中位數準確度仍然達到87。

引用來源：<https://www.ithome.com.tw/news/141398>