**Alphafold学习笔记**

1. **简介**

Alphafold是一款DeepMind开源的用于预测蛋白质、DNA、RNA、配体、离子等生物分子结构的工具。此外，最新的Alphafold3（[alphafoldserver.com](https://alphafoldserver.com/)）还可以对蛋白质和核酸的化学修饰进行建模。

1. **提交的任务要求**
   1. 每天最多运行20个作业
   2. 每个作业的总大小受到结构中“token”的限制（最大为5000）

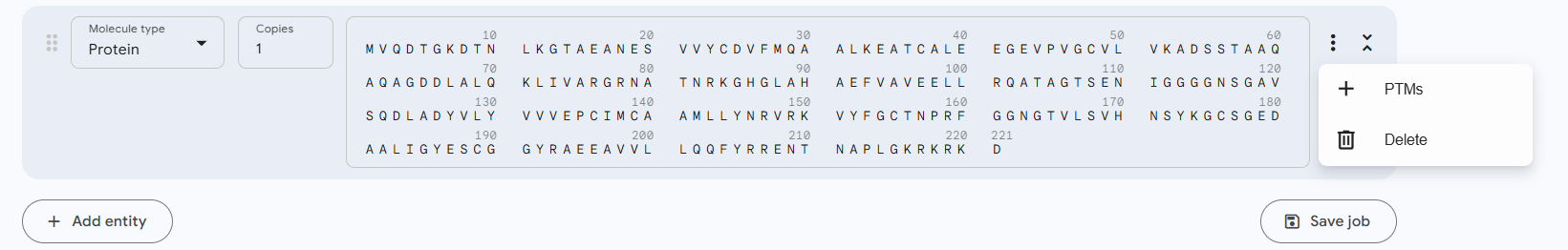
1个“token”标准：蛋白质——每个标准氨基酸残基；DNA/RNA——每个核苷酸残基；

配体——每个离子；修饰（不包括糖链）——每个修饰氨基酸残基或核苷酸的原子

具体查看：<https://alphafoldserver.com/faq>。

注意：每个蛋白质/核苷酸链必须**至少**包含**4个氨基酸或核苷酸**。

1. **提交步骤（以蛋白质序列为例）**
   1. **检查**是否有足够的**任务配额**，如果要运行的任务超出配额，可以先保存任务，待有配额后重新提交。
   2. **输入蛋白质序列**，可以选择添加蛋白翻译后修饰（post translational modifications，PTM）



* 1. 如果想添加其他类型的生物分子，可以点击“Add entity”。
  2. 添加完成后，点击“continue and preview job”。**修改**job name，选择**编辑或提交**任务。
  3. 任务提交完成后，等待一段时间便可查看运行结果。

1. 安装到服务器

参考网址：https://github.com/google-deepmind/alphafold（[镜像访问](https://gitcode.com/gh_mirrors/alp/alphafold/overview?utm_source=csdn_github_accelerator)）

1. 使用Alphafold2在线预测

若仅是预测个别蛋白质的结构，可以选择**谷歌的Colaboratory的在线版本**（[谷歌搜索Alphafold colab](https://colab.research.google.com/github/sokrypton/ColabFold/blob/main/AlphaFold2.ipynb)）。

具体流程可以参考https://blog.csdn.net/Eumenidus/article/details/123611569。