# 深度学习

# AlphaFold简介

AlphaFold是由DeepMind公司历时5年打造的基于深度学习方法预测蛋白质结构的算法，2018年在全球蛋白质结构预测比赛 (CASP13) 中获得第一名成绩。2020年，AlphaFold的升级版本AlphaFold2在CASP14比赛上获得第一名的成绩，大幅度领先第二名，预测所得的蛋白质结构误差可达原子水平1。2024年，DeepMind团队在Nature上发文表明AlphaFold2的升级版AlphaFold3可以预测蛋白质与其它分子的结合情况，包括蛋白质、核酸或药物小分子等。但因利益关系，至今未像AlphaFold2那样开源整个代码2。

## AlphaFold

## AlphaFold2

## AlphaFold3

1. 运所需磁盘空间至少为8 TB；
2. 是否为多GPU （两个H100）？
3. 提交运行任务，是否需要排队？
4. 连接时间是是否有限制？
5. 是否支持docker？

**参考文献**

1 Jumper, J. *et al.* Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold. *Nature* **596**, 583-589 (2021). <https://doi.org:10.1038/s41586-021-03819-2>

2 Abramson, J. *et al.* Accurate structure prediction of biomolecular interactions with AlphaFold 3. *Nature* (2024). <https://doi.org:10.1038/s41586-024-07487-w>