

## AlphaFold 2.2.0 (2022/3/11)

### ウェブページ(コード)

<https://github.com/deepmind/alphafold>

### バージョン

2.2.0 (2022/3/11; alphafold のパラメータも 2022/3/11 に取得。その他は 2.1.1 時のものを流用)

### 導入に関するメモ

- 2.1.1 時と同様の方法で導入しています
  - AlphaFold のパラメータのみ新規にダウンロードしています(download\_alphafold\_params.sh)

### 実行スクリプト更新

本体側の変更に合わせて実行スクリプトも更新しています。

[run\\_alphafold22x\\_rccs.sh](#)

- 本体とデータベースのデフォルト設定を更新
- 追加されたオプション
  - -g (再有効化)
    - GPU で構造緩和させるために必要なオプションです。GPU 数等の指定はありません。
  - -R
    - 指定すると、MSA ツールの実行をスキップし、既存のデータ(アウトプット置き場に存在しているもの)をそのまま使います。配列やデータベース、設定の変更を気にせずに既存データを使う点にはご注意ください。(run\_alphafold.py の --use\_precomputed\_msas=True に相当)
  - -s [seeds per model]
    - multimer モデル時、モデルあたりの seed を指定します。デフォルトは 5 です。(モデル数(通常 5)\*seed数(デフォルト 5)個の予測が行われます。run\_alphafold.py の --num\_multimer\_predictions\_per\_model=(seed数) に相当)
    - MSA 部分とは無関係のようです。
  - -S
    - 予測構造の緩和をスキップします。デフォルトでは構造緩和を行います。(run\_alphafold.py の --run\_relax=False に相当)

### メモ

- ディスク負荷が高い時に計算が非常に遅くなる点についてはこれまでと同様です...