DrugBAN:   
Datasets:

BindingDB [1]、BioSNAP [2] 和 Human [3]。

datasets/bindingdb 和 datasets/biosnap: 域内random和跨域cluster。

datasets/human: 域内random 和 冷分割(cold splits to mitigate ligand bias)。

在 config.py 中提供了所有超参数的基本配置。对于不同的域内和跨域任务，可在相应的 configs/\*.yaml 文件中找到自定义任务配置。

1.使用vanilla DrugBAN进行域内实验，

${dataset} :bindingdb、biosnap 和 human。

${split\_task}: random，cold

--cfg "configs/DrugBAN.yaml" --data ${dataset} --split ${split\_task}

2. 使用 vanilla DrugBAN 进行跨域实验，

${dataset} : bindingdb， biosnap。

--cfg "configs/DrugBAN\_Non\_DA.yaml" --data ${dataset} --split "cluster"

3. 使用 CDAN DrugBAN 进行跨域实验，

${dataset} : bindingdb，也可以是 biosnap。

--cfg "configs/DrugBAN\_DA.yaml" --data ${dataset} --split "cluster"

dataFolder ： ./datasets/{args.data}

dataFolder： ./datasets/bindingdb/random