**基于可开发性属性指导的抗体序列与结构协同设计扩散模型**

本项目代码使用扩散模型对抗体的6个CDR环进行有模板的设计。

**Property-guided design of antibodies**

配置文件位于 configs/test 文件夹中。要分别设计 6 个 CDR，请在脚本 design\_pdb.py上指定 config 为codesign\_single 模型。

**Property-unconditioned design**

无条件属性设计

python design\_pdb.py ./data/examples/7DK2\_AB\_C.pdb \

--config ./configs/test/codesign\_single.yml

**Guiding design: Property-aware prior**

对于 hydropathy-aware prior with b ，将选项 --prior\_b 指定为0.8：

python design\_pdb.py ./data/examples/7DK2\_AB\_C.pdb \

--config ./configs/test/codesign\_single.yml --prior\_b 0.8

**Guiding design: Sampling by property**

指导性设计：按属性抽样

要按属性（ddG、水疗法或两者）进行采样，请使用以下配置文件：

一个 CDR 的序列结构， 按 ddG 采样 ：codesign\_single\_ddg.yml

一个 CDR 的序列结构， 按水疗法采样: codesign\_single\_hydro.yml

一个 CDR 的序列结构， 通过 ddG 和水疗法采样: codesign\_single\_ddg\_and\_hydro.yml

此处的额外选项为：--sample\_step\_mode （“min”、“max” 或 “softmax”）、--sample\_step\_num （int） 和 --sample\_step\_period （int）。例如，要按 ddG 进行采样，请使用：

python design\_pdb.py ./data/examples/7DK2\_AB\_C.pdb \

--config ./configs/test/codesign\_single\_ddg.yml \

--sample\_step\_mode min --sample\_step\_num 20 --sample\_step\_period 1

**Evaluation 评估**

要计算评估指标：AAR、RMSD、Hydropathy Score 和 Predicted ddG（选项 --no\_energy 阻止计算 Rosetta ddG）对于所有样本，请使用：

python eval.py --no\_energy --root results/codesign\_single