

ProteinMPNN (2023/10/25 最新)

ウェブページ

<https://github.com/dauparas/ProteinMPNN>

バージョン

2023/10/25 時点での最新コード

導入メモ

ProteinMPNN 本体

```
$ git clone https://github.com/dauparas/ProteinMPNN.git 20231025
```

python 環境(miniforge)

```
$ sh Miniforge3-Linux-x86_64.sh
...
[... ] >>> /apl/ProteinMPNN/20231025/miniforge3
...
$ ./miniforge3/bin/conda shell.csh hook > conda_init.csh
$ ./miniforge3/bin/conda shell.bash hook > conda_init.sh
$ . conda_init.sh
$ conda install cudatoolkit=11.7.1 pytorch==1.13.1 torchvision==0.14.1 torchaudio==0.13.1 pytorch-cuda=11.7 -c pytorch -c nvidia
```

(2024/3/27 LigandMPNN のための追加)

```
$ conda install prody pyparsing==3.1.1
```

メモ

- [RFdiffusion のメモを参照](#)
- pyparsing 3.1.2 では LigandMPNN が動かない
 - <https://github.com/dauparas/LigandMPNN/issues/11>