



Click.mAb.

多智能体AI抗体设计平台 企业级解决方案

一键点击，实现特定表位抗体从头设计
生成式AI，助力每一个抗体发现项目

- ✓ 前沿生成式算法
- ✓ 自然语言交互
- ✓ 多智能体协同
- ✓ 多人在线协作

目录

01 核心算法能力

抗体研发迈向精准设计，AI算法突破关键瓶颈	P3
特定表位抗体从头设计	P4
亲和力成熟	P8
抗体人源化	P9
纳米抗体人源化	P10

02 多智能体协作

AI工具使用痛点	P11
智能交互与多智能体协作	P12

03 项目级管理

真实研发项目痛点	P13
项目级管理，助力团队协作	P14



附录：报告示例

抗体从头设计	P15-18	亲和力成熟	P19-22
单抗人源化	P23-28	纳米抗体人源化	P29-31

抗体研发迈向精准设计，AI算法突破关键瓶颈

从困难表位到工程优化，以核心算法能力覆盖研发全链路。

研发挑战

抗体研发迈向精准设计，仍需突破关键瓶颈

困难表位难突破

传统方法倾向命中免疫优势区域，针对隐蔽、保守等困难表位，往往难以获得有效抗体。

抗体优化周期长

人源化、亲和力成熟、可开发性优化依赖多轮试错，耗时耗力。

研发效率难提升

周期长、淘汰率高、关键节点风险集中——单靠经验筛选，已难满足行业提速需求。

解决方案

SCENARIO ALPHA

锁定目标表位 实现可控抗体设计

01/ 特定表位抗体从头设计 / *DE NOVO DESIGN*

无需动物免疫，直接针对特定表位从头生成全新抗体，真正实现从功能需求出发的“指哪打哪”式理性设计。

02/ 抗原表位预测 / *EPITOPE PREDICTION*

已经获得多条抗体binder时，可以对抗体提前进行基于表位的筛选，选择最有可能具备目标功能的抗体，减少进入后续功能实验验证的抗体数量，降低成本，缩短时间

SCENARIO BETA

高效完成工程优化 极致缩短研发周期

03/ 亲和力成熟 / *AFFINITY MATURATION*

AI预测的抗原抗体复合物结构，分析残基空间协同关系，识别协同突变位点，通过“1+1>2”的策略，在小规模文库中提升亲和力。

04/ 单抗人源化 / *ANTIBODY HUMANIZATION*

依托大规模人源框架库和 AI 结构预测，从更广的序列空间中匹配最优框架区，精准保持 CDR-框架相互作用，无需回复突变，人源化程度更高、周期更短。

05/ 纳米抗体人源化 / *NANOBODY HUMANIZATION*

针对纳米抗体独特框架结构定制人源化策略，平衡人源度与稳定性，保留小分子量优势。

特定表位抗体从头设计

无需动物免疫，直接针对特定表位从头生成全新抗体，真正实现从功能需求出发的"指哪打哪"式理性设计

计算流程

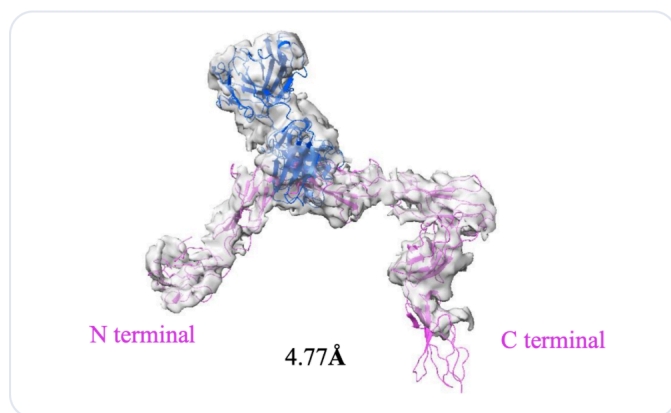


核心技术优势

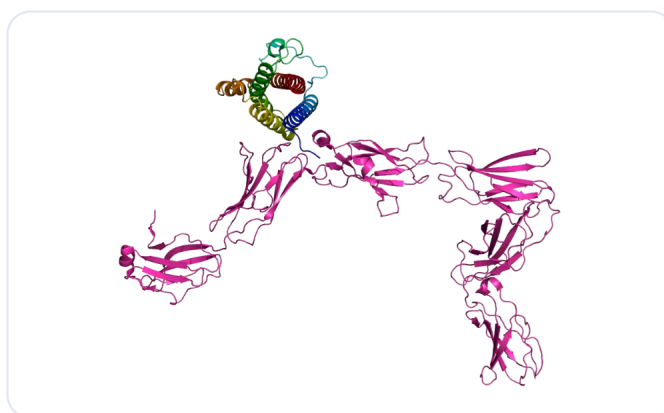
- 结构约束的框架筛选**
 基于目标表位的空间特征筛选候选框架区，为后续从头设计提供更合适的起始骨架。
- 生成式AI design CDRH3**
 基于生成模型从头设计CDRH3，突破传统模板库与已有 binder 优化路径的限制，拓展候选序列空间。
- 多维评分与筛选**
 结合模型预测与结构相关特征，对候选序列进行排序和筛选，提高首轮候选输出质量。
- 全链路可追溯报告**
 输出候选序列、评分排序与设计报告，支持团队评审、结果复盘与后续实验决策。

应用案例

案例1: 针对高难度功能性表位开展从头设计，获得 7 条经 BLI 验证的阳性抗体，KD 达 10E-7 至 10E-9 M；其中 2 条可阻断天然配体结合，并在细胞层面观察到 STAT-3 磷酸化抑制活性，冷冻电镜进一步验证了 P211858 的准确表位



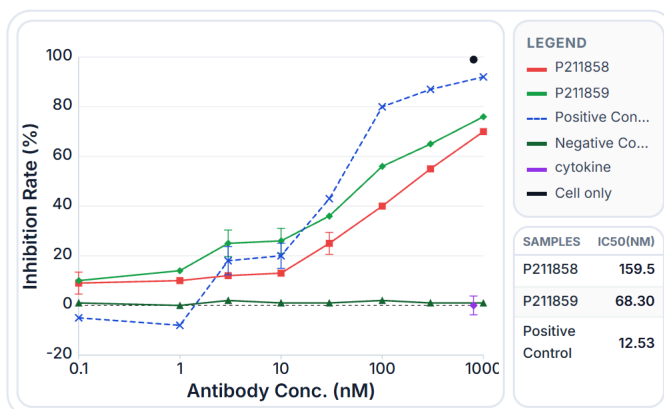
冷冻电镜表位验证



表位预测结果

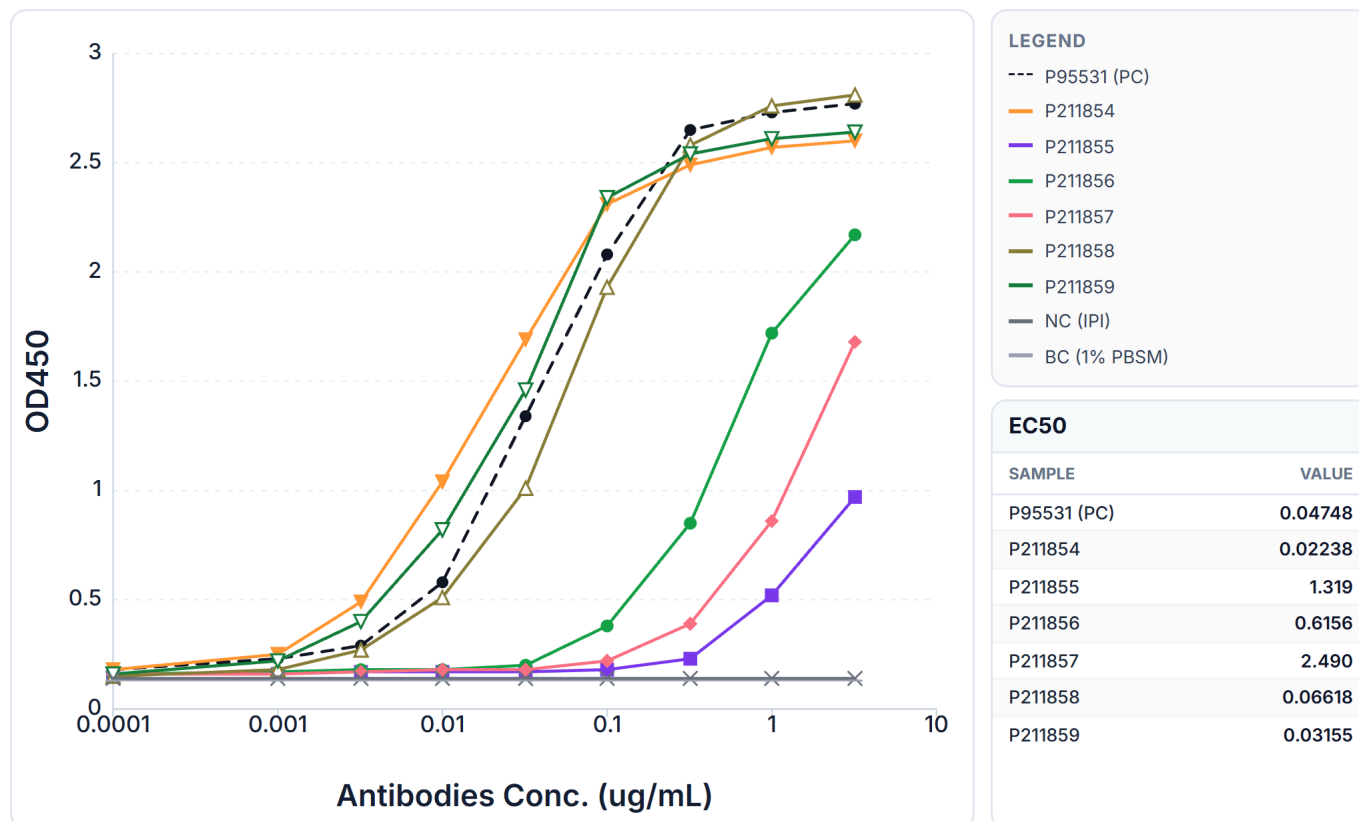
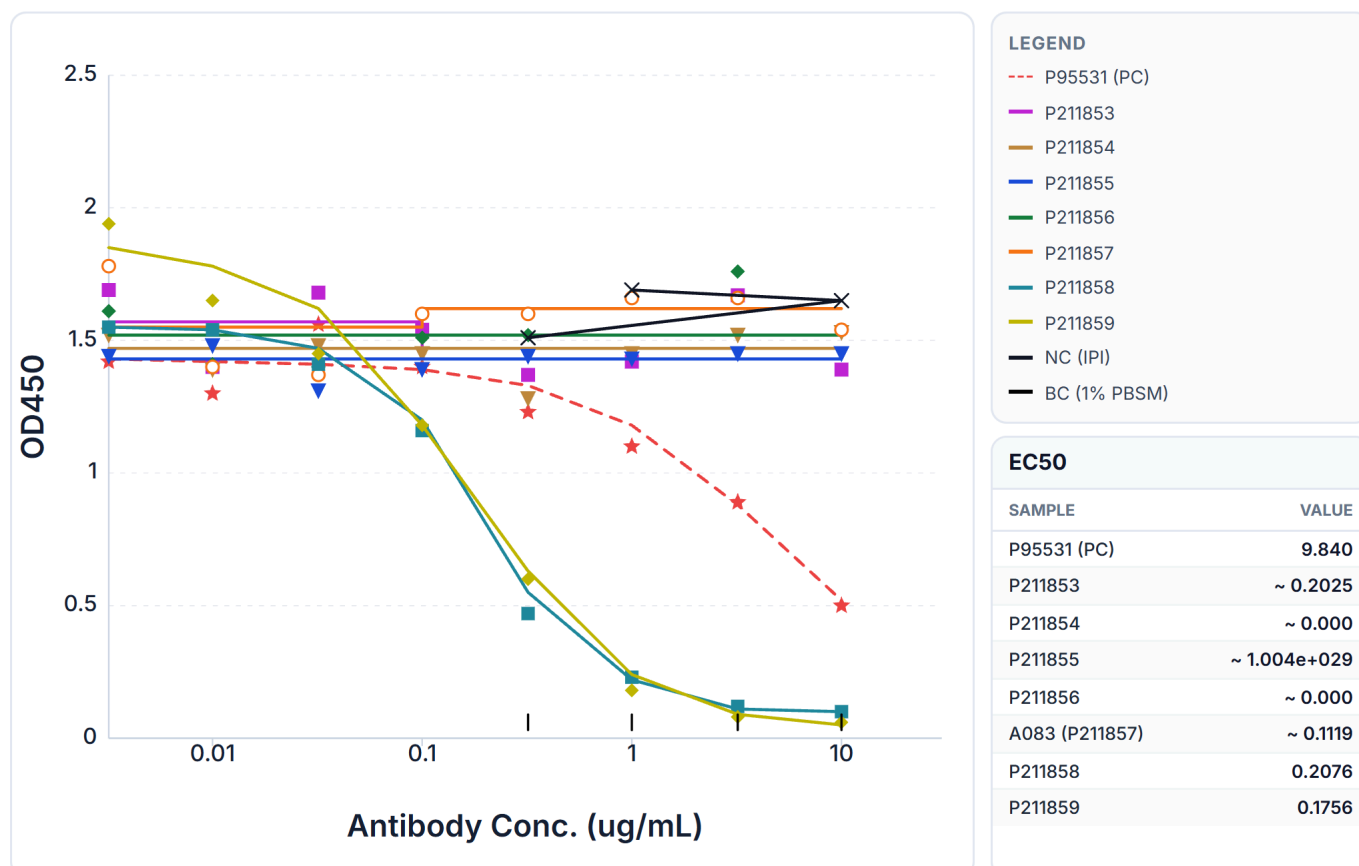
ANTIBODY	KD (M)	KA (1/MS)	KD (1/S)
P95531	7.10E-07	2.01E+04	1.43E-02
P211853	1.03E-07	1.39E+04	1.43E-03
P211854	7.60E-09	8.50E+04	6.46E-04
P211855	9.62E-08	9.14E+03	8.79E-04
P211856	7.04E-08	9.20E+03	6.48E-04
P211857	9.35E-08	9.46E+03	8.84E-04
P211858	5.87E-09	9.68E+04	5.68E-04
P211859	3.97E-09	1.70E+05	6.75E-04

BLI 亲和力测定结果



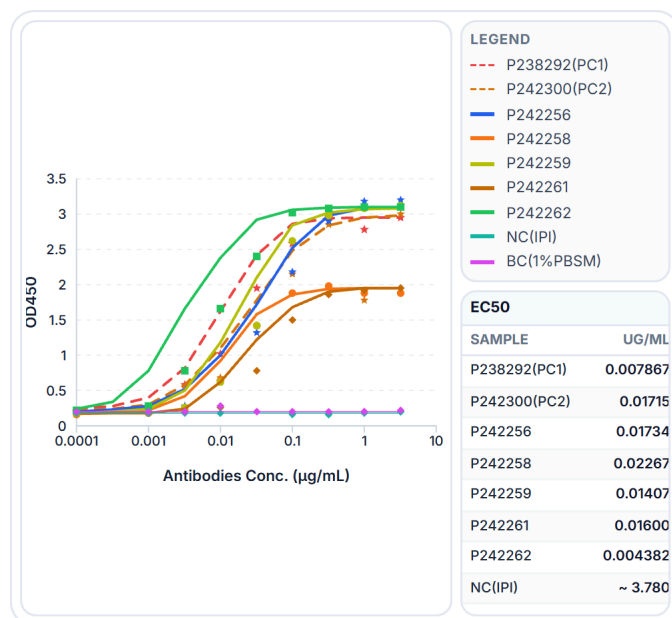
STAT-3 磷酸化抑制活性

DE NOVO DESIGN
案例1: 获得2条具有配体阻断活性的抗体

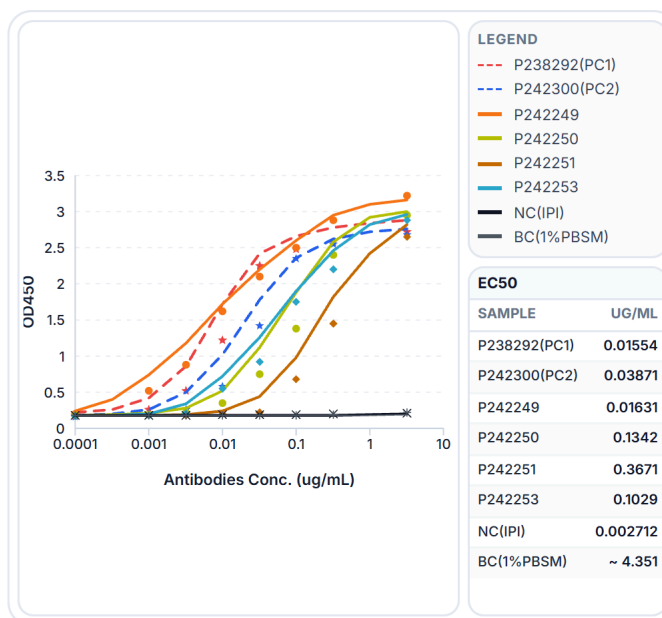
BINDING ASSAY

BLOCKING ASSAY


DE NOVO DESIGN

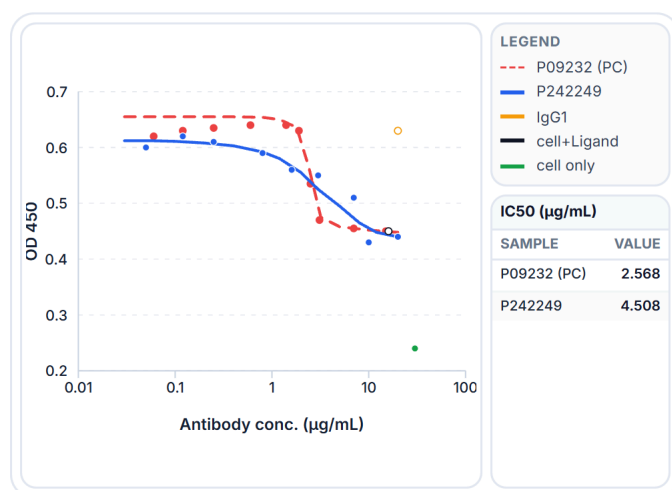
案例2: 获得11条BLI测定KD=10E-6 ~ 10E-8 M的抗体，其中一条抗体与阳参抗体的细胞功能活性相当



Binding Assay



Binding Assay



磷酸化抑制检测(SUN-16)

ANTIBODY NO.	KD (M)	KA (1/MS)	KD (1/S)
P238292 (PC1)	1.37E-07	2.40E+05	3.28E-02
P242300 (PC2)	2.64E-09	1.13E+06	2.98E-03
P242249	4.63E-06	1.94E+04	9.01E-02
P242250	7.40E-06	1.14E+04	8.41E-02
P242251	6.38E-06	9.52E+03	6.08E-02
P242253	2.90E-06	4.67E+04	1.36E-01
P242256	1.10E-04	5.86E+03	6.42E-01
P242258	4.75E-06	3.73E+04	1.77E-01
P242259	3.38E-07	3.11E+05	1.05E-01
P242261	1.13E-04	3.46E+03	3.91E-01
P242262	1.91E-08	1.05E+06	2.00E-02
P246176	9.48E-07	2.68E+05	2.54E-01
P246184	1.99E-06	7.40E+04	1.47E-01

BLI 亲和力测定结果

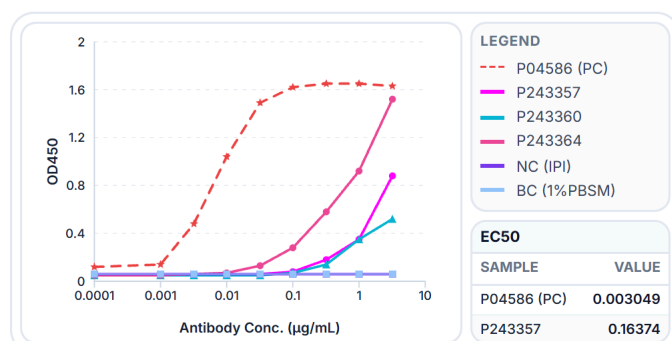
案例3: 获得4条BLI测定KD=10E-7 ~ 10E-8 M的抗体，其中3条抗体具备抑制功能，均不存在浓度依赖效应

ANTIBODY NO.	KD (M)	KA (1/MS)	KD (1/S)
P04586 (PC)	1.47E-12	2.61E+05	3.83E-07
P243357	1.82E-08	4.13E+04	7.52E-04
P243360	2.31E-07	1.60E+03	3.70E-04

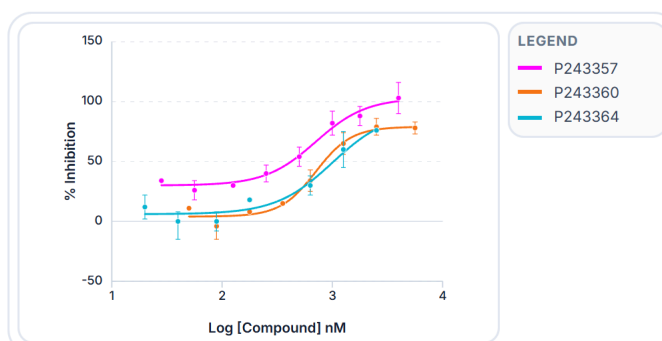
BLI 亲和力测定结果 (1)

ANTIBODY NO.	KD (M)	KA (1/MS)	KD (1/S)
P243364	2.10E-08	5.27E+03	1.11E-04
P246188	1.46E-07	2.25E+03	3.29E-04

BLI 亲和力测定结果 (2)



Binding Assay



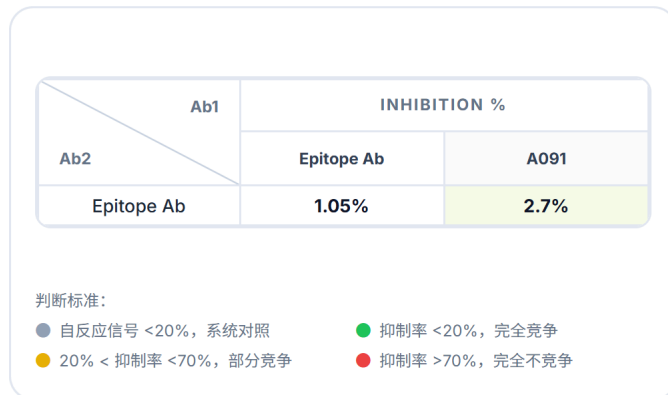
Enzyme Assay

DE NOVO DESIGN

案例4: ADC靶点AI从头设计抗体，初筛获得3条有结合活性的AI设计抗体，AI设计的抗体A091与指定表位抗体竞争，表位符合预期，与BM抗体重组表达的表达量、纯度、及内吞活性IC50相当

ANTIBODY NO.	KD (M)	KA (1/MS)	KDIS (1/S)
BM抗体	8.16E-10	3.37E+05	2.75E-04
A011	5.35E-08	3.24E+05	1.73E-02

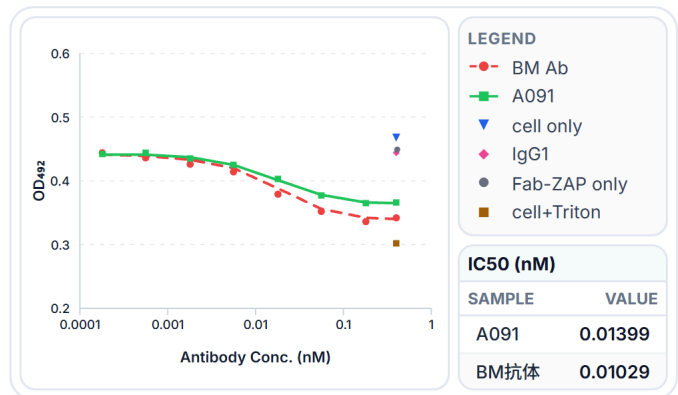
BLI 亲和力初筛 (1)



表位归类 — A091 与指定表位竞争

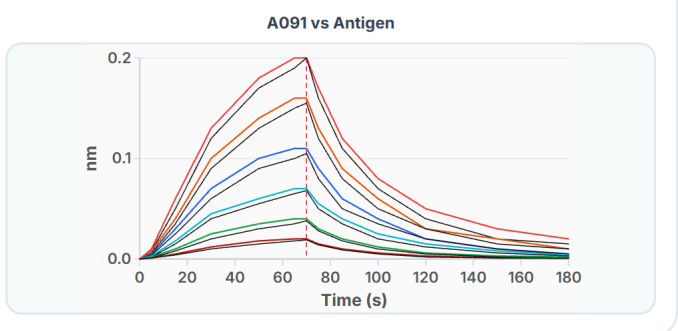
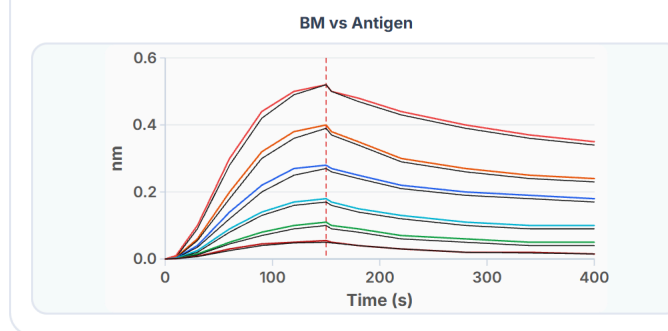
ANTIBODY NO.	KD (M)	KA (1/MS)	KDIS (1/S)
A091	1.31E-08	7.61E+05	1.00E-02
A098	9.74E-07	1.11E+04	1.08E-02

BLI 亲和力初筛 (2)



内吞活性检测 (NCI-N87, Fab-ZAP)

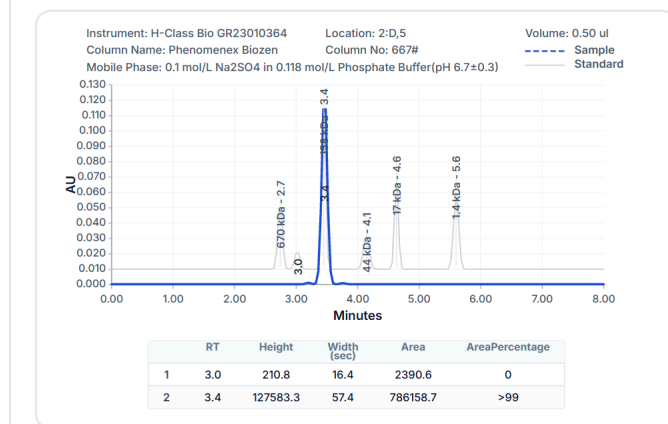
ANTIBODY NO.	KD (M)	KA (1/MS)	KDIS (1/S)	FULL R ²
BM抗体	2.44E-09	1.82E+05	4.44E-04	0.99
A091	2.40E-08	6.08E+05	1.46E-02	0.98



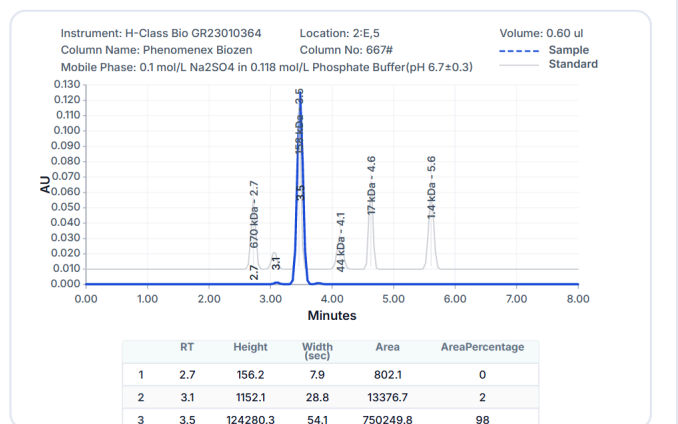
BLI 动力学拟合

抗体名称	CONC. (MG/ML)	CE-SDS (%)	SEC-HPLC (%)	TOTAL (MG)
BM抗体	4.69	>95	98	3.28
A091	5.48	>95	>99	3.84

Sample name: BM 抗体



Sample name: A091



亲和力成熟

AI预测的抗原抗体复合物结构，分析残基空间协同关系，识别协同突变位点，通过“1+1>2”的策略，在小规模文库中提升亲和力。

计算流程

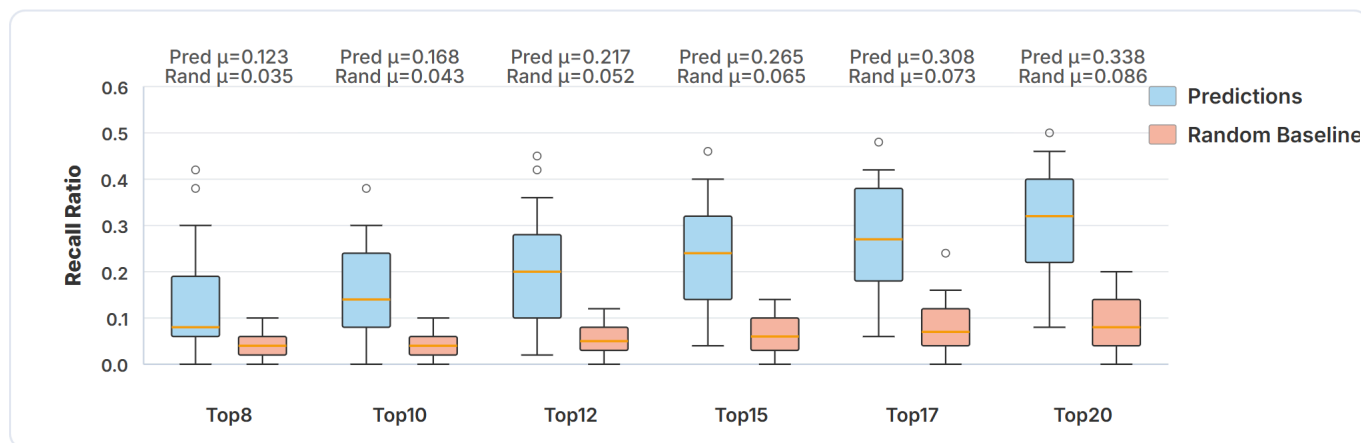


核心技术优势

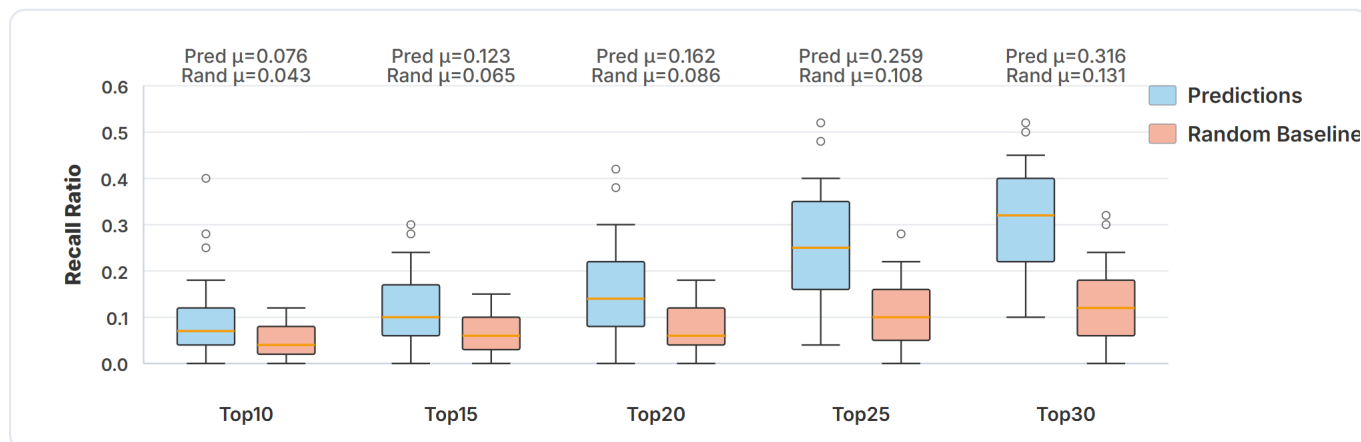
- 多模型融合突变评估**
 结合蛋白语言模型、逆折叠模型与复合物结构分析，从序列进化、结构接触和残基兼容性等多个维度评估候选突变。
- 结构驱动的亲和力优化**
 基于 AI 预测的抗原-抗体复合物三维结构，识别可能提升结合能力的关键位点，而非依赖经验或大规模随机扫描。
- 协同突变挖掘与智能排序**
 通过超参数优化与空间协同分析，发现可能具有“1+1>2”效果的突变组合，并对候选位点进行优先级排序。
- 紧凑型子库自动设计**
 围绕 FWR/CDR 优选突变自动生成多个紧凑型子库，减少无效实验，并输出结构、评分和风险注释等综合报告。

应用案例

案例：收集专利里的亲和力成熟抗体和抗原信息，并进行位点验证，位点命中率远大于随机突变



SAPROT API — Position Recall Comparison



ESMIF API — Position Recall Comparison

抗体人源化

依托大规模人源框架库和 AI 结构预测，从更广的序列空间中匹配最优框架区，精准保持 CDR-框架相互作用，无需回复突变，人源化程度更高、周期更短。

计算流程

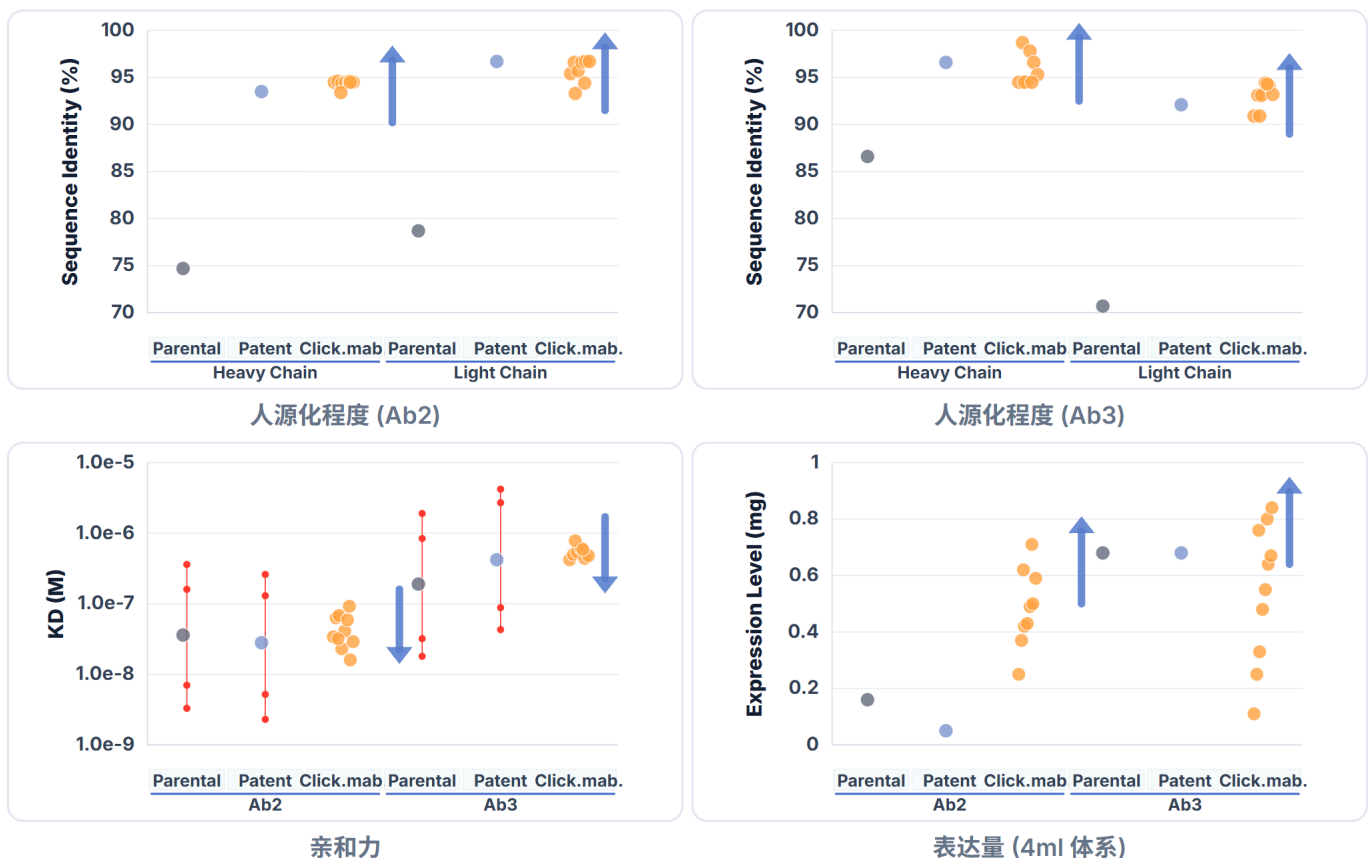


核心技术优势

- 智能框架区匹配**
 突破传统相似框架限制，结合结构兼容性在更大人源框架空间中筛选更适合支撑母本 CDR 的候选框架。
- 结构驱动的亲和力保持设计**
 基于 AI 预测的抗体三维结构，评估 CDR 与框架区相互作用，提升人源化后维持亲和力的成功率。
- 无需回复突变**
 基于结构兼容性与人源框架智能筛选，无需回复突变即可获得高质量候选抗体。
- 多维候选筛选与推荐**
 结合人源化程度、稳定性及预测生物物理特性对候选序列进行评分、聚类与筛选，输出更优推荐方案。

应用案例

案例：某北美客户选取20个人工人源化项目开展盲测，平台自动生成400条高度人源化序列，选择人工/AI设计差异最大项目中进行湿实验验证。结果表明，高度人源化并未牺牲亲和力



纳米抗体人源化

依托 AI 高精度结构预测与逐步回复突变设计，从结构层面综合评估关键残基作用，尽可能保持亲和力并提升人源化程度，推荐序列更精准、实验成本更低、开发周期更短。

计算流程



核心技术优势

✓ 专用框架筛选

面向单域抗体人源化需求，从人源 Germline 框架中智能筛选更适合支撑 VHH CDR 的候选框架。

✓ 递进式关键残基回复设计

围绕框架-CDR 界面、Vernier 区、核心结构残基等关键位点，逐步优化回复突变，平衡功能保持与高人源性。

✓ 特有位点优化

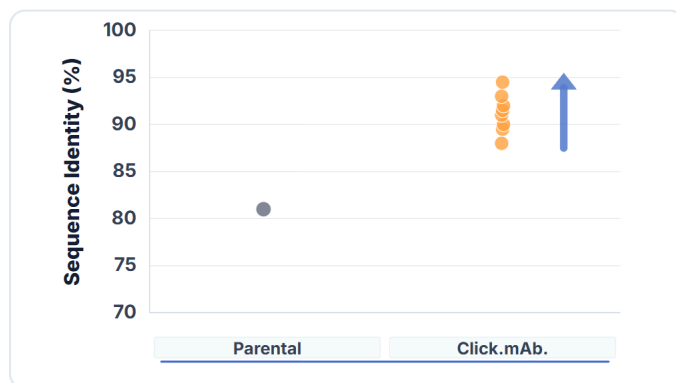
重点考虑 VHH 特有框架区残基、DELoop 及关键结构位点对构象、表达和稳定性的影响。

✓ 多维风险与性质评估

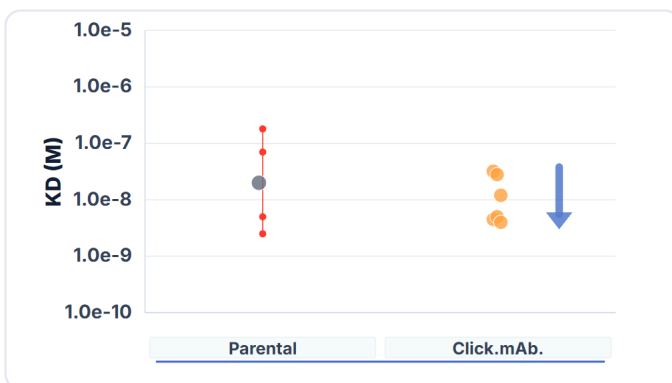
结合人源化程度、结构稳定性、理化性质和风险位点等多维指标，对候选序列进行评分与推荐。

应用案例

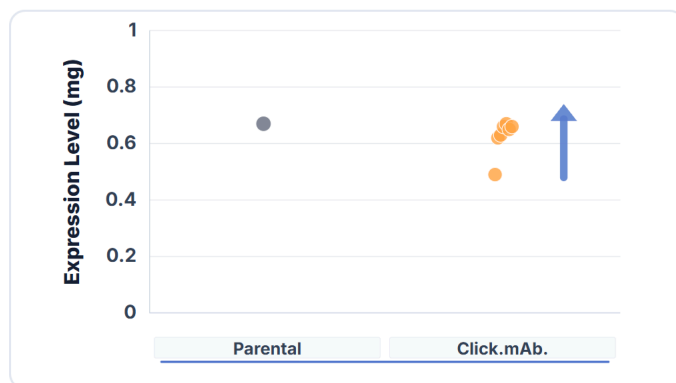
案例：平台为纳米抗体项目推荐 7 条人源化序列，人源化程度达到 89%–94%；其中 4 条人源化抗体亲和力进一步提升，80% 以上的序列表达量与母本相当，纯度均超过 90%，证明 VHH 人源化可以兼顾活性、表达和可开发性



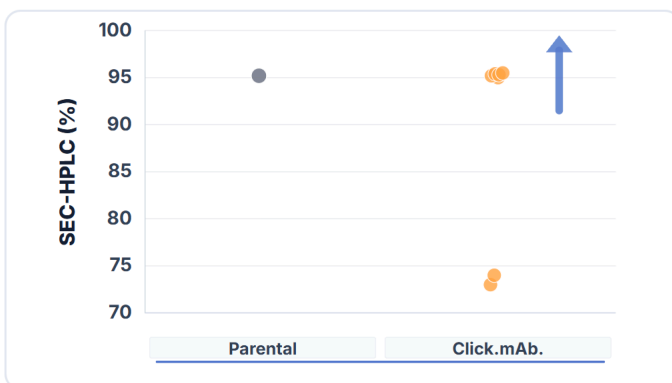
人源化程度



亲和力



表达量



纯度

CHALLENGES

AI抗体设计快速发展，高效合理使用成为了新挑战

抗体研发已步入高复杂度、多技术协同的系统工程时代。AI 工具爆发式增长，但真正高效地将科学意图转化为计算结果，仍面临重重障碍。

工具与复杂度爆炸

TOOL EXPLOSION

工具快速增长 复杂度持续攀升

从结构预测、表位分析到亲和力成熟、人源化改造，每个环节都有大量独立工具。研究者需要在碎片化的工具链中反复跳转、手动衔接。



工具繁多

从头设计、结构预测、风险评估等数十种工具散落各处，缺乏统一入口



上千种参数组合

每个工具都有独立的参数体系，不同组合对结果影响巨大，科学家难以全面掌握



流程编排困难

从优化到从头设计，不同任务需要截然不同的工具组合与串联逻辑

使用门槛高

HIGH BARRIER

多领域知识交叉 学习成本极高

高效使用 AI 工具需要同时具备结构生物学、抗体工程、计算生物学等多学科背景，单一领域专家难以独立驾驭整个流程。



多领域知识

结构生物学、抗体工程、药理毒理、CMC 开发——知识壁垒层层叠加



学习成本极高

每个工具都有独立界面和操作逻辑，新人上手周期长，团队培训成本高



意图转化困难

科学家的研究意图需要手动翻译为工具操作，从科学问题到计算任务之间存在鸿沟



计算资源门槛

复杂模型需要强大算力支撑，环境配置与资源调度增加额外负担

核心矛盾

科学意图与项目需求

研究者关注生物学问题与临床目标



工具操作与计算执行

工具要求编程技能、参数配置与流程编排

科学家需要一个能够理解研究意图、自主规划执行的 AI 科研伙伴

智能交互与多智能体协作

无需学习复杂工具链，用自然语言驱动专业能力。多智能体协同工作，核心算法与轻量工具按需调度，让研究者专注于科学判断。

自然语言交互

NATURAL LANGUAGE

用对话代替操作 零门槛驱动 AI

研究人员通过自然语言描述研发需求，平台自动解析意图、选择算法、编排流程并输出结果。无需编程或手动配置参数。

"基于PD-L1导致免疫逃逸的表位设计抗体"



"已确认目标：围绕 PD-L1 免疫逃逸功能表位进行抗体设计。
准备执行：① 确认 PD-L1 UniProt 序列 → ② 获取 PD-L1 / PD-1 复合物结构 → ③ 锁定关键互作残基与功能表位 → ④ 基于表位进行从头设计..."

多智能体协作

MULTI-AGENT SYSTEM

四大专业助手 自主协同决策

每个智能助手都具备独立专业能力，由协同引擎统一调度，在同一轮对话中完成协作。



抗体设计助手

理解需求、调用工具、输出报告，为研究人员提供专业建议与支持。



可视化助手

3D结构、风险位点、设计报告，将计算结果直观展示。



风险评估助手

人源性、聚集性、化学稳定性等成药性风险多维评估。



下一步建议助手

基于当前数据给出下一步建议与路径优先级。

智能调用架构

SMART ORCHESTRATION

核心计算流程 + 轻量工具调用

平台将复杂算法流程与轻量工具统一封装，智能助手根据任务需求自动编排调用链路。

自然语言输入



多智能体协同



核心计算流程

特定表位抗体从头设计 表位预测
单抗人源化 纳米抗体人源化
亲和力成熟

轻量工具集

信息查询 序列编号 风险评估
多序列对比 理化性质计算等

真实研发项目涉及工具、协作与决策

真实的抗体研发项目远不止于完成一次或几次计算。从策略探索、数据整合到团队协作、经验传承，每个环节都对工具提出了更高要求。

计算设计只是起点

BEYOND COMPUTATION

计算只是第一步 项目管理才是全貌

输入抗原/抗体序列/结构等信息，经过计算设计输出生成结果——但这仅仅是一个研发项目的起点。围绕计算结果，还需要路径决策、数据汇聚、团队共识与经验沉淀。



现实中的困境



多路径探索

同一靶点常需并行多条设计路径，但各路径的参数、中间结果散落在不同工具和文件中，无法统一管理和横向对比，决策只能靠人工汇总。



多源异构数据

计算预测、实验测定、文献调研、外部数据库——数据散落在不同系统中，格式各异，关联分析基本靠手动拼接，极易出错或遗漏关键信息。



团队共享与共识

计算、实验、工程各看各的数据，缺乏统一的项目上下文，团队成员对进展和依据的认知经常不同步，沟通成本居高不下。



经验沉淀与传递

哪条路径走通了、哪些参数有效、关键决策为何这么做——这些经验大多留在个人记忆里，人员变动后项目知识随之流失，后续团队只能从零摸索。

合理的工具与项目整合有助于提升研发效率与质量

然而现有 AI 工具大多聚焦单次计算任务，缺乏对多路径管理、多源数据整合、团队协作和经验传承的系统性支持

PROJECT-LEVEL COLLABORATION

项目级管理，助力团队协作

让算法能力与组织管理深度融合，从个人工具升级为团队级研发基础设施，实现研发资产的持续沉淀与复用。

多路径并行

PARALLEL PIPELINES

多路线并行推进 决策依据随时回溯



设计路线自动归档

同一项目下可同时推进多条设计路线，所有分支自动归档，历史决策依据一目了然，随时可回溯、可对比。

个人探索 → 团队讨论

EXPLORE → DISCUSS

串联独立验证 与协同推进



AI 助手全程随行

无论是个人探索还是团队评审，AI 助手在每个环节随时待命，提供序列分析、文献检索与方案推荐等即时支持。

知识自动沉淀

KNOWLEDGE ACCUMULATION

经验不随人走 沉淀为团队资产



项目知识库自动汇聚

项目资料、计算结果与讨论记录自动汇入项目知识库，团队基于同一份信息开展判断与决策，杜绝信息孤岛。



可复盘·可追溯·可交接

项目全过程可复盘、可追溯、可交接。研发经验不再沉淀在个人手中，而能真正转化为可持续复用的团队资产。

项目级协作能力一览



多路径并行

分支归档·指标对比



先探索后讨论

个人验证·团队评审



知识自动沉淀

统一知识库·零流失



AI 全程随行

每个环节·随时待命

从头设计报告示例

靶点特定表位的抗体从头设计报告

报告内容摘要

	解释	内容总结
表位patch确认	确认用于抗体生成的表位结构	您选择了4H1S-A_0作为抗体设计的表位patch。
表位patch匹配V-Gene确认	利用AI模型找出结合给定表位patch概率较高的抗体序列用于抗体生成	共选择24条模板抗体序列用于抗体生成，对应于10个germlinetype。
抗体生成	基于给定表位信息先搜索与之匹配的模板抗体，之后基于内部抗体语言模型和亲和力预测模型生成和进化抗体序列，最终通过聚类的方式获取到不同量级的抗体序列	完成不同数量级抗体序列的生成，对于100万量级文库，共生成950090条抗体序列。
生成抗体总结	对生成的抗体进行分析，得出对生成抗体的概况	总结不同文库生成的抗体序列总数量，并总结最大文库所对应的不同germlinetype和CDRH3长度抗体的数量以及氨基酸分布情况，同时提供不同文库大小的生成抗体序列信息和模板抗体序列信息的下载链接。

表位patch确认

根据您提供的信息，我们最终确认您希望抗体靶向结合的抗原表位patch:4H1S-A_0为我们最终选择用于表位预测的patch，该patch的详细信息如下：

patch	残基编号与残基类型
4H1S-A_0	100E;103H;104F;105M;106N;107A;108L;109R;110Y;166V;240V;245N;246T;247F;253P;254P;255S;278V;279Q;27W;280A;281Y;282A;283F;284G;285K;286Y;287L;288G;289Y;28E;290L;291K;29L;305G;306N;307P;308I;309L;30T;310L;311N;312S;313S;314I;315P;316E;317D;318P;319S;31I;320I;321K;324I;32L;33H;34T;35N;36D;37V;38H;39S;40R;41L;42E;43Q;55S;57C;58M;59G;60G;61V;62A;63R;64L;65F;66T;67K;68V;69Q;70Q;71I;72R;73R;74A;75E;76P;77N;78V;79L;80L;81L;82D

表位patch匹配V-Gene确认

通过内部AI模型进行预测和判断，该表位与如下germlinetype的模板抗体更加容易匹配，即更有可能成功设计结合该表位的抗体，其中每一个germlinetype可能对应多种类型的抗体序列，这些抗体序列的V-Gene部分将会用来进行抗体CDRH3序列的生成，为了降低可开发性风险这些用于生成抗体序列的模板抗体的germlinetype均来自于临床阶段抗体使用过的germlinetype。

germlinetype
IGHV3-20
IGHV3-21

从头设计报告示例

germline类型
IGHV3-23
IGHV3-48
IGHV3-49
IGHV3-53
IGHV3-66
IGHV4-34
IGHV4-39
IGHV4-4

抗体生成

基于给定的模板抗体序列，利用内部抗体语言模型生成抗体序列，并利用内部亲和力预测模型进行排序，随后利用进化算法对备选抗体序列进行进化筛选和过滤，最后基于亲和力预测模型打分和聚类方法获取到不同量级的抗体序列。

本次生成我们分别对CDRH3长度为8, 10, 12, 14, 16五个长度进行抗体CDRH3的生成。

在抗体生成之后，针对生成的CDRH3进行风险位点分析，去除含有较高风险的CDRH3序列。

生成抗体总结

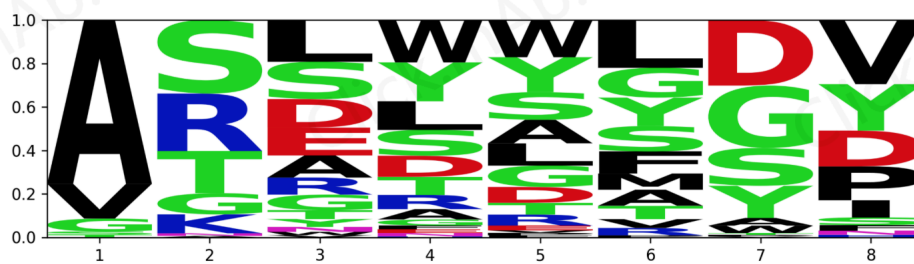
通过AI模型生成和判断最后得到950090条抗体序列，为进一步了解生成的抗体，对不同germline类型的不同CDRH3长度的抗体序列数量分布和氨基酸分布情况的统计信息如下

生成抗体序列数量分布

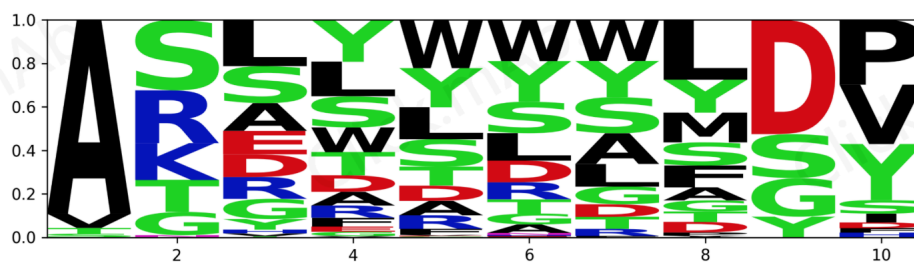
germline类型	CDRH3Len = 8	CDRH3Len = 10	CDRH3Len = 12	CDRH3Len = 14	CDRH3Len = 16
IGHV3-20	6363	27689	46954	55305	27616
IGHV3-21	1620	3611	11948	13842	6944
IGHV3-23	6157	26106	45621	55555	27388
IGHV3-48	6251	22483	46554	54719	27769
IGHV3-49	1587	6904	12142	13888	6944
IGHV3-53	1412	6895	12122	13888	6944
IGHV3-66	2576	11254	22885	27734	13881
IGHV4-34	2920	13546	24272	27710	13879
IGHV4-39	6368	17963	44268	54643	27298
IGHV4-4	1516	1943	11385	13884	6944

CDRH3Len = 8 氨基酸残基分布

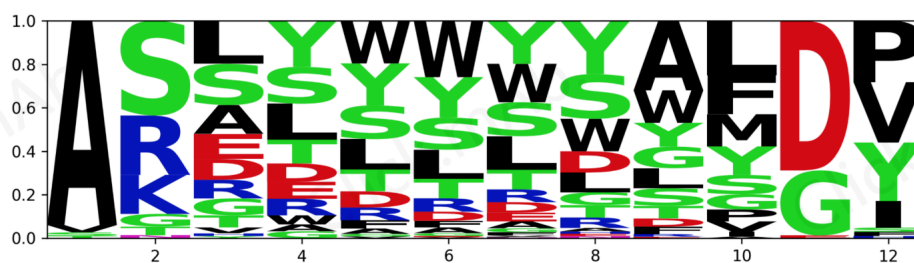
从头设计报告示例



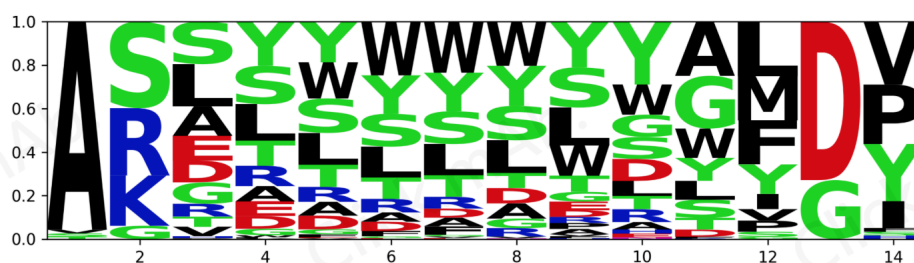
CDRH3Len = 10 氨基酸残基分布



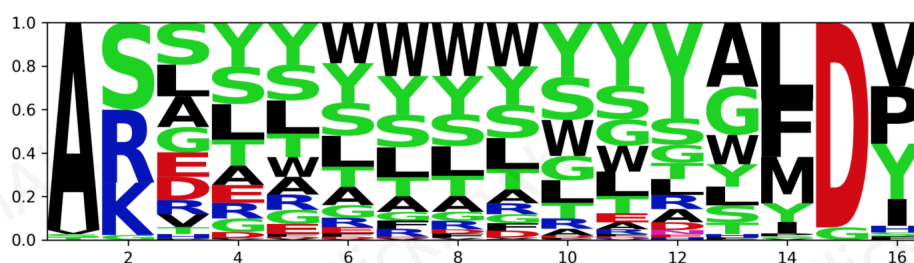
CDRH3Len = 12 氨基酸残基分布



CDRH3Len = 14 氨基酸残基分布



CDRH3Len = 16 氨基酸残基分布



从头设计报告示例

生成抗体序列信息下载

[生成抗体序列信息下载\(100万\)](#)

[生成抗体序列信息下载\(20万\)](#)

[生成抗体序列信息下载\(1万\)](#)

- 注：
 - 表格中含有序列的名称(ID列), CDRH3序列(CDRH3列), CDRH3长度(CDRH3Len列)。
 - 表格中所有的重链共用同一个人源轻链序列, 序列为:
EIVLTQSPATLSLSPGERATLSCRASQSVSSYLAWYQKPKGQAPRLLIYDASNRATGIPARFSGSGSGTDFLTLSSEPE
DFAVYYCQQRSNWPPTFGQGKVEIK。
 - 表格中所有的重链序列的FWR4序列均相同, 序列为: WGQGLVTVSS。

生成抗体对应germline序列信息下载

[germline序列信息下载](#)

- 注：
 - 表格中含有germlineHseq列, 其中的序列信息为抗体序列中CDRH3之前的germline序列信息,可用于后续的抗体文库构建。
 - 在demo实例中, germline文件中的CDR1/2的序列信息将被隐藏, 同时部分CDRH3残基也将会被隐藏。

报告总结

经过抗体从头设计流程, 我们确认了10个germline类型, 其中包含24个模板抗体, 这些模板抗体对目标表位patch的结合概率较高, 随后对每一个模板抗体进行CDRH3长度为8, 10, 12, 14, 16的抗体生成, 生成了1万, 20万, 100万量级的抗体序列文库, 其中100万抗体序列的文库中包含950090个抗体序列, 20万量级的抗体序列文库中包含194465个抗体序列, 1万量级的抗体序列文库中包含9595个抗体序列。您可以根据需要选择不同量级的文库进行建库筛选。请注意, 库容量越大表现筛选的成功率越高。

接下来您可基于germline序列, CDRH3序列以及FWR4序列进行抗体序列文库的构建和筛选用于获取结合目标表位的抗体序列。

亲和力成熟报告示例

抗体亲和力成熟设计报告

1. 报告概述

本报告旨在为用户提供的抗体信息提供全面的亲和力成熟设计方案。我们首先对输入的抗体序列进行了系统性分析，包括其Germline、CDR（互补决定区）序列分析，以及风险位点分析。随后，我们整合了 **基于序列（Sequence-based）** 和 **基于结构（Structure-based）** 的计算设计方法，获取抗体中有更高可能性提高抗体亲和力的位点信息，并基于这些位点信息和抗体内部相互作用残基对的信息设计多个子库以实现最大程度覆盖突变位点的同时考虑尽可能多的抗体内部相互作用。报告的核心部分优先展示了推荐的核心突变位点，并提供了结构文件和文库可视化图以辅助决策。完整的突变数据以表格和CSV文件形式提供，旨在为后续的实验验证提供清晰、可靠的数据支持。

2. 用户输入分析

2.1. 抗体基本信息

以下是根据您输入的序列或结构分析得出的抗体基本信息。

信息类型	内容
抗体重链序列	QVQLKESGPGLVAPSQSLSITCTVSGFSLASYGVHWVRQPPGKGLEWLGVIWTGGSTNYNSALMSRLSINR DNSKSKVFLKLNLSLQTDDTAIYYCARDRGYGGGFAYWGQGLVTV(序列长度: 117)
抗体轻链序列	DIQMTQSPASLSASVGETVTITCRASENIYSYLAWYQHKQKSPQLLVYNAKSLAEGVPSRFGSGSGTQFSL KINSLQPEDFGSYQCQHHYGPWTFFGGTKLE(序列长度: 105)
输入结构文件	PDB1
重链 CDRs	CDR1: VSGFSLASYGVH, CDR2: WLGVIWTGGSTN, CDR3: ARDRGYGGGFAY
轻链 CDRs	CDR1: RASENIYSYLA, CDR2: LLVYNAKSLA, CDR3: QHHYGPWT
物种来源	mouse
轻链 Germline	IGKV12-44*01
重链 Germline	IGHV2-9*02

2.2. 风险位点分析

为了确保抗体的成药性，我们对抗体序列中潜在的化学不稳定位点（如脱酰胺、氧化等）进行了预测。这些位点可能是在生产或储存过程中影响抗体的均一性和活性。

亲和力成熟报告示例

链	序列	风险残基数
H	QVQLKESGPGLVAPSQSL SITCTVSGFSLASYGVHWVRQPPGKGLEWLGVIW TGGSTINYNLSA LMSRLSINRDN SKSQVFLKLNLSLQTD DDTAIYYC ARDRGYGYGGFAYWGQGT LTVV	High: 0, Medium: 1, Low: 1
L	DIQMTQSPASLSASVGETVTITCRASENIYSYLAWYQHKQKSPQLLVYNAKSLAEGVPSRFS GSGSGTQFSLKINS LQPEDFGSYQC QHHYGT PWT FGGGTKLE	High: 0, Medium: 2, Low: 0

3. 推荐突变位点与可视化

我们结合了基于序列和基于结构两种方法，对指定的抗体进行了亲和力成熟设计。以下是综合评估后推荐的核心突变位点：

抗体链	突变位点	突变区域
H	28S, 30A, 31S	CDR1
H	50V, 52W, 53T, 54G, 55G, 56S, 58N	CDR2
H	100G, 101Y, 102G, 107A	CDR3
L	24R, 25A, 27E, 30Y, 33L, 34A	CDR1
L	48V, 52K, 53S	CDR2
L	90H, 92Y, 93G	CDR3

列表头说明:

- **抗体链:** 指明该突变位点所在的链类型。
- **突变位点:** 显示该区域内的突变位置和原始氨基酸，同一区域的多个位点用逗号分隔，例如"33Y, 35F"表示 FWR1区域的两个推荐突变位点。
- **突变区域:** 显示突变位点位于抗体的哪个功能区域（FWR1-4为框架区子区域，CDR1-3为互补决定区）。

3.1. 预测结构与文库可视化

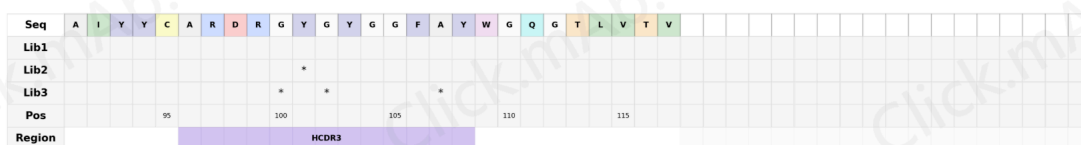
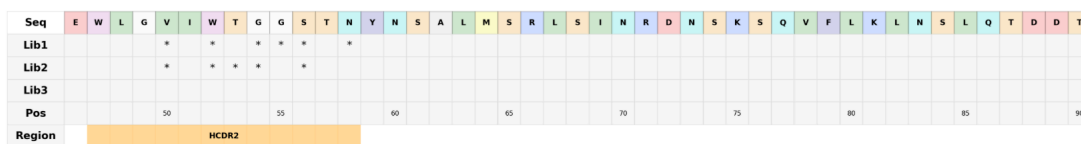
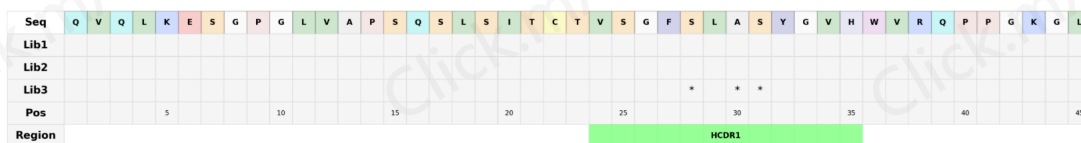
为了更好地理解突变位点在三维空间中的位置和作用，我们提供了抗体部分结构文件，并对推荐的每一个推荐子文库进行了可视化展示。

[点击此处下载抗体结构PSE文件](#)

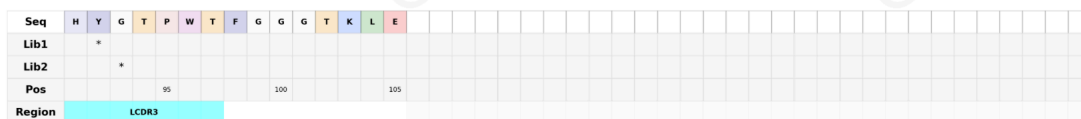
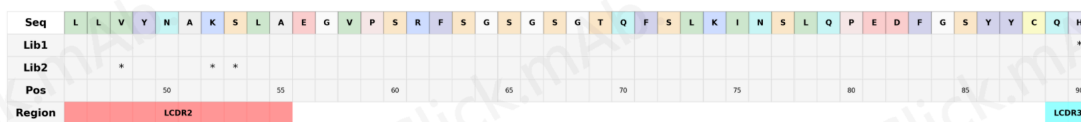
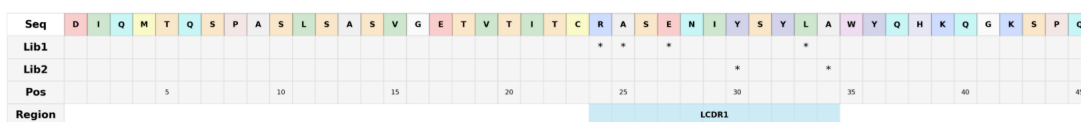
序列区域可视化图:

亲和力成熟报告示例

重链子库突变位置分布图:



轻链子库突变位置分布图:



图片说明:

- **Lib行**: 图像左侧以Lib开头的行名表示子库的ID, 比如Lib1表示第一个子库
- **Pos行**: 图像左侧的Pos行对应的是氨基酸残基的数字索引 (仅显示5的倍数)
- **Region行**: 图像左侧的Region行对应的高亮区域表明不同CDR对应的索引区域
- **"*"符号**: 图像中的"*"符号表示在对应的子库中, 该位置推荐进行组合突变

4. 详细突变结果与数据下载

下表列出了设计的子库、包含的突变位点以及综合评分。您也可以下载包含这些信息的CSV文件进行后续分析。

4.1. 突变文库设计详情

抗体链	子库ID	突变位点	突变残基数	引物分布区域数量	相互作用数	分数
Heavy	H1	50V, 52W, 54G, 55G, 56S, 58N	6	2	6	14.800

亲和力成熟报告示例

抗体链	子库ID	突变位点	突变残基数	引物分布区域数量	相互作用数	分数
Heavy	H2	50V, 52W, 53T, 54G, 56S, 101Y	6	2	4	11.800
Heavy	H3	28S, 30A, 31S, 100G, 102G, 107A	6	2	3	10.300
Light	L1	24R, 25A, 27E, 33L, 90H, 92Y	6	2	4	11.800
Light	L2	30Y, 34A, 48V, 52K, 53S, 93G	6	3	0	5.600

列表头说明:

- **抗体链:** 突变所在链类型 (Heavy=重链, Light=轻链)
- **子库ID:** 子库编号 (H1=重链第1库, L1=轻链第1库)
- **突变位点:** 位点及野生型氨基酸 (如28S, 30A, 31S表示对应位置的氨基酸)
- **突变残基数:** 该子库包含的突变位点数量
- **引物分布区域数量:** 引物设计需要覆盖的区域数量
- **相互作用数:** 该子库涉及的抗体内部相互作用数量
- **分数:** 基于残基数、相互作用数、引物区域的综合评分 (分数越高越好)

4.2. 数据下载

[点击此处下载所有突变结果CSV文件 \(Antibody_Analysis_results.csv\)](#)

5. 报告总结

本报告为母本抗体提供了一套系统的亲和力成熟设计方案。

- **输入分析:** 我们确认了抗体的基本信息, 鉴定出6个CDR区域, 并标记了潜在的风险位点。
- **突变设计:** 基于序列和结构模型, 我们筛选出了一系列高潜力的突变位点, 并提供了预测结构文件与文库分布可视化图, 以辅助决策。
- **结果交付:** 报告提供了核心突变位点、完整的突变建议列表及可下载的CSV文件, 方便进行后续分析和实验设计。

根据综合评估, 我们一共选择了 26 个位点, 设计了 5 个文库, 其中重链子库 3 个, 轻链子库 2 个。这些设计总共涵盖了 17 个抗体-抗原相互作用, 其中重链涉及 13 个相互作用, 轻链涉及 4 个相互作用。

我们建议结合上述计算设计结果与您的湿实验平台, 构建突变文库进行筛选, 以最高效地获得亲和力显著提升的候选抗体分子。

单抗人源化报告示例

抗体人源化计算报告

报告概述

- 本报告展示了母本序列的分析结果，包括所属种类、germline、所属germline的最高序列一致性和CDR序列。
- 在本次抗体人源化流程中，经过人源化计算并通过不同方式的聚类，共获取到“20条”和“100条”两组人源化抗体。
- 由于篇幅有限，本报告仅详细展示“20条”这组人源化抗体的分析结果。另一组“100条”人源化抗体会通过文件的方式提供下载查看。
- “20条”这组人源化抗体的分析结果包括人源化抗体与母本抗体的轻重链序列比对、轻重链所属germline、与IMGT germline的最高序列一致性即人源化程度和风险位点分析结果。
- 人源化后的VH序列与germline的序列一致性最高可达到97%。
- 人源化后的VL序列与germline的序列一致性最高可达到94%。

输入抗体分析

AbName	Test1
VH_Fv	EIQLQQTGPELVQPGASVKISCKASGYSFTDYIMVWVKQSHGKGLEWIGNINPYHGRTAYNLKFKGKAT LTVDKSSSTAFMQLNSLISEDYSAFYCVRKGYVEGGGLDYWGQGTSVIVS
VH_species	mouse
VH_germline	IGHV1-39*02
VH_germline_identity	89% (mouse)
HCDR1	ASGYSFTDYIMV
HCDR2	WIGNINPYHGRTA
HCDR3	VRKGYVEGGGLDY
VL_Fv	DIVLTQFPGSLAVSLGQRATISCKASQRVDYDGVSYMNWYQQKPGQPPKLLINAASDLESGIPARFSGT GSGTDFTLNIHPVEEEDAATYYCQSNYDPWTFGGGKLEIKRA
VL_species	mouse
VL_germline	IGKV3-4*01
VL_germline_identity	91% (mouse)
LCDR1	KASQRVDYDGVSYMN
LCDR2	LLINAASDLE
LCDR3	QQSNYDPWT

单抗人源化报告示例

抗体人源化结果

重链人源化前后序列比对

region	FWRH1													CDRH1													FWRH2													CDRH2													FWRH3																	
site	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	55	56	57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70
Test1	E	I	Q	L	Q	T	G	P	E	L	V	Q	P	G	A	S	V	K	I	S	C	K	A	S	G	Y	S	F	T	D	Y	I	M	V	W	V	K	S	H	G	K	L	E	W	I	G	N	I	N	P	Y	H	G	R	T	A	Y	N	L	K	F	G	K	A	T	L				
Humanization1	Q	V	Q	L	V	Q	S	G	A	E	V	K	P	G	S	V	K	V	S	C	K	A	S	G	Y	S	F	T	D	Y	I	M	V	W	V	R	Q	A	P	G	Q	L	E	W	I	G	N	I	N	P	Y	H	G	R	T	A	Y	A	Q	K	F	Q	G	R	V	T	I			
Humanization2	Q	V	Q	L	V	Q	S	G	A	E	V	K	P	G	S	V	K	V	S	C	K	A	S	G	Y	S	F	T	D	Y	I	M	V	W	V	R	Q	A	P	G	Q	L	E	W	I	G	N	I	N	P	Y	H	G	R	T	A	Y	A	D	S	V	K	G	R	F	T	I			
Humanization3	Q	I	T	L	K	E	S	G	P	T	L	V	K	P	T	Q	T	L	T	C	T	A	S	G	Y	S	F	T	D	Y	I	M	V	W	V	R	Q	A	P	G	K	A	L	E	W	I	G	N	I	N	P	Y	H	G	R	T	A	Y	S	P	S	L	K	S	R	L	T	I		
Humanization4	E	V	Q	L	V	Q	S	G	A	E	V	K	P	G	S	V	K	V	S	C	K	A	S	G	Y	S	F	T	D	Y	I	M	V	W	V	R	Q	A	P	G	Q	L	E	W	I	G	N	I	N	P	Y	H	G	R	T	A	Y	A	D	S	V	K	G	R	F	T	I			
Humanization5	E	V	Q	L	V	Q	S	G	A	E	V	K	P	G	S	V	K	V	S	C	K	A	S	G	Y	S	F	T	D	Y	I	M	V	W	V	R	Q	A	T	G	K	L	E	W	I	G	N	I	N	P	Y	H	G	R	T	A	Y	P	G	S	V	K	G	R	F	T	I			
Humanization6	Q	V	Q	L	V	Q	S	G	A	E	V	K	P	G	S	V	K	V	S	C	K	A	S	G	Y	S	F	T	D	Y	I	M	V	W	V	R	Q	A	P	G	Q	L	E	W	I	G	N	I	N	P	Y	H	G	R	T	A	Y	A	Q	K	F	Q	G	R	V	T	I			
Humanization7	E	V	Q	L	V	Q	S	G	A	E	V	K	P	G	S	V	K	V	S	C	K	A	S	G	Y	S	F	T	D	Y	I	M	V	W	V	R	Q	A	P	G	K	L	E	W	I	G	N	I	N	P	Y	H	G	R	T	A	Y	A	D	S	V	K	G	R	F	T	I			
Humanization8	Q	M	L	V	Q	S	G	A	E	V	K	P	G	S	V	K	V	S	C	K	A	S	G	Y	S	F	T	D	Y	I	M	V	W	V	R	Q	A	P	G	Q	R	L	E	W	I	G	N	I	N	P	Y	H	G	R	T	A	Y	A	Q	K	F	Q	E	R	V	T	I			
Humanization9	Q	V	Q	L	V	Q	S	G	A	E	V	K	P	G	S	V	K	V	S	C	K	A	S	G	Y	S	F	T	D	Y	I	M	V	W	V	R	Q	A	P	G	Q	L	E	W	I	G	N	I	N	P	Y	H	G	R	T	A	Y	A	Q	K	F	Q	G	R	V	T	I			
Humanization10	E	V	Q	L	V	Q	S	G	A	E	V	K	P	G	S	V	K	V	S	C	K	A	S	G	Y	S	F	T	D	Y	I	M	V	W	V	R	Q	A	P	G	K	L	E	W	I	G	N	I	N	P	Y	H	G	R	T	A	Y	A	D	S	V	K	G	R	F	T	I			
Humanization11	Q	V	Q	L	V	Q	S	G	A	E	V	K	P	G	S	V	K	V	S	C	K	A	S	G	Y	S	F	T	D	Y	I	M	V	W	V	R	Q	A	P	G	Q	R	L	E	W	I	G	N	I	N	P	Y	H	G	R	T	A	Y	S	Q	K	F	Q	G	R	V	T	I		
Humanization12	E	V	Q	L	V	Q	S	G	A	E	V	K	P	G	S	V	K	V	S	C	K	A	S	G	Y	S	F	T	D	Y	I	M	V	W	V	R	Q	A	P	G	K	L	V	I	G	N	I	N	P	Y	H	G	R	T	A	Y	A	D	S	V	K	G	R	F	T	I				
Humanization13	E	V	Q	L	V	Q	S	G	A	E	V	K	P	G	S	V	K	V	S	C	K	A	S	G	Y	S	F	T	D	Y	I	M	V	W	V	R	Q	A	P	G	K	L	V	I	G	N	I	N	P	Y	H	G	R	T	A	Y	A	D	S	V	K	G	R	F	T	I				
Humanization14	E	V	Q	L	V	Q	S	G	A	E	V	K	P	G	S	V	K	V	S	C	K	A	S	G	Y	S	F	T	D	Y	I	M	V	W	V	R	Q	A	P	G	K	L	V	I	G	N	I	N	P	Y	H	G	R	T	A	Y	A	D	S	V	K	G	R	F	T	I				
Humanization15	E	V	Q	L	V	Q	S	G	A	E	V	K	P	G	S	V	K	V	S	C	K	A	S	G	Y	S	F	T	D	Y	I	M	V	W	V	R	Q	A	P	G	K	L	E	W	I	G	N	I	N	P	Y	H	G	R	T	A	Y	A	D	S	V	K	G	R	F	T	I			
Humanization16	Q	V	L	Q	Q	W	G	A	L	L	K	P	S	E	T	L	S	L	T	C	A	S	G	Y	S	F	T	D	Y	I	M	V	W	V	R	Q	A	P	G	K	L	E	W	I	G	N	I	N	P	Y	H	G	R	T	A	Y	A	D	S	V	L	K	S	R	V	T	I			
Humanization17	Q	V	L	Q	Q	W	G	A	L	L	K	P	S	E	T	L	S	L	T	C	A	S	G	Y	S	F	T	D	Y	I	M	V	W	V	R	Q	A	P	G	K	L	E	W	I	G	N	I	N	P	Y	H	G	R	T	A	Y	A	N	P	S	L	K	S	R	V	T	I			
Humanization18	Q	V	L	Q	Q	W	G	A	L	L	K	P	S	E	T	L	S	L	T	C	A	S	G	Y	S	F	T	D	Y	I	M	V	W	V	R	Q	A	P	G	K	L	E	W	I	G	N	I	N	P	Y	H	G	R	T	A	Y	A	N	P	S	L	K	S	R	V	T	I			
Humanization19	Q	I	T	L	K	E	S	G	P	T	L	V	K	P	T	Q	T	L	T	C	T	A	S	G	Y	S	F	T	D	Y	I	M	V	W	V	R	Q	A	P	G	K	A	L	E	W	I	G	N	I	N	P	Y	H	G	R	T	A	Y	S	P	S	L	K	S	R	L	T	I		
Humanization20	Q	I	T	L	K	E	S	G	P	T	L	V	K	P	T	Q	T	L	T	C	T	A	S	G	Y	S	F	T	D	Y	I	M	V	W	V	R	Q	A	P	G	K	L	E	W	I	G	N	I	N	P	Y	H	G	R	T	A	Y	S	P	S	L	K	S	R	L	T	I			

region	FWRH3													CDRH3													FWRH4																							
site	70	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83A	83B	83C	83D	84	85	86	87	88	89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	A	B	C	101	102	103	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113
Test1	T	V	D	K	S	S	T	A	F	M	Q	L	N	S	L	I	S	E	D	S	A	V	F	C	V	R	K	G	Y	V	E	G	G	L	D	Y	W	G	Q	G	T	S	V	I	V	S	-			
Humanization1	T	A	E	S	T	S	T	A	Y	E	L	S	S	L	R	S	E	D	T	A	V	Y	C	V	R	K	G	Y	V	E	G	G	L	D	Y	W	G	Q	G	T	T	V	T	V	S	S				
Humanization2	S	R	D	N	A	K	N	S	L	Y	L	Q	M	N	S	L	R	A	E	D	T	A	V	Y	C	V	R	K	G	Y	V	E	G	G	L	D	Y	W	G	Q	G	T	T	V	T	V	S	S		
Humanization3	T	K	D	T	S	K	N	Q	V	L	T	M	T	N	M	P	V	D	T	A	T	Y	C	V	R	K	G	Y	V	E	G	G	L	D	Y	W	G	Q	G	T	T	V	T	V	S	S				
Humanization4	S	R	D	N	A	K	N	S	L	Y	L	Q	M	N	S	L	R	A	E	D	T	A	V	Y	C	V	R	K	G	Y	V	E	G	G	L	D	Y	W	G	Q	G	T	T	V	T	V	S	S		
Humanization5	S	R	E	N	A	K	N	S	L	Y	L	Q	M	N	S	L	R	A	E	D	T	A	V	Y	C	V	R	K	G	Y	V	E	G	G	L	D	Y	W	G	Q	G	T	T	V	T	V	S	S		
Humanization6	T	A	E	S	T	S	T	A	Y	E	L	S	S	L	R	S	E	D	T	A	V	Y	C	V	R	K	G	Y	V	E	G	G	L	D	Y	W	G	Q	G	T	T	V	T	V	S	S				
Humanization7	S	R	D	N	A	K	N	S	L	Y	L	Q	M	N	S	L	R	A	E	D	T	A	V	Y	C	V	R	K	G	Y	V	E	G	G	L	D	Y	W	G	Q	G	T	T	V	T	V	S	S		
Humanization8	T	R	D	M	S	T	S	T	A	Y	E	L	S	S	L	R	S	E	D	T	A	V	Y	C	V	R	K	G	Y	V	E	G	G	L	D	Y	W	G	Q	G	T	T	V	T	V	S	S			
Humanization9	T	R	D	T	S	T	S	T	V	Y	E	L	S	S	L	R	S	E	D	T	A	V	Y	C	V	R	K	G	Y	V	E	G	G	L	D	Y	W	G	Q	G	T	T	V	T	V	S	S			
Humanization10	S	R	D	N	A	K	N	S	L	Y	L	Q	M	N	S	L	R	A	E	D	T	A	V	Y	C	V	R	K	G	Y	V	E	G	G	L	D	Y	W	G	Q	G	T	T	V	T	V	S	S		
Humanization11	T	R	D	T	S	T	S	T	A	Y	E	L	S	S	L	R	S	E	D	T	A	V	Y	C	V	R	K	G	Y	V	E	G	G	L	D	Y	W	G	Q	G	T	T	V	T	V	S	S			
Humanization12	S	R	D	N	A	K	N	T	L	Y	L	Q	M	N	S	L	R	A	E	D	T	A	V	Y	C	V	R	K	G	Y	V	E	G	G	L	D	Y	W	G	Q	G	T	T	V	T	V	S	S		
Humanization13	S	R	D	N	A	K	N	T	L</																																									

单抗人源化报告示例

人源化后抗体序列

列表中每一行人源化抗体轻链和重链序列已经是最优配对，不建议随机配对。通常HumanizedAbNumber的序号越小，此人源化抗体越优，比如Humanization1优于Humanization2。

HumanizedAbNumber	Hseq	Lseq	VH-Germline	VL-Germline	VH-Identity	VL-Identity
Humanization1	QVQLVQSGAEVKKPGSSVKVSCK ASGYSFTDYIMVWVRQAPGQGLE WIGNINPYHGRTAYAQKFGGRVTI TADESTSTAYMELSSLRSEDAVYYC VRKGYVEGGGLDYWGQGTTVTVS S	NIQMTQSPSAMSASVGDRTIT CKASQRVDYDGVSYMNWFQQ KPGKVPKLLINAASDLESGVPSR FSGSGSGTEFTLTISLQPEDFAT YYCQSQSNYDPWTFGQGTKLEIK	IGH V1- 69* 01	IGKV 1- 17*0 3	95 %	91 %
Humanization2	QVQLVESGGGLVKPGGSLRLSCAA SGYSFTDYIMVWVRQAPGKGLEWI GNINPYHGRTAYADSVKGRFTISR NAKNSLYLQMNSLRAEDAVYYCV RKGYVEGGGLDYWGQGTTVTVSS	EIVMTQTPLSLITPGEQASISCK ASQRVDYDGVSYMNWFLQKA RPVSTLLINAASDLESGVPDRFS GSGSGTDFTLKISRVEAEDFGVY YCQSQSNYDPWTFGQGTKLEIK	IGH V3- 11* 01	IGKV 2D- 26*0 1	95 %	91 %
Humanization3	QITLKESGPTLVKPTQLTLTCTASG YSFTDYIMVWVRQPPGKALEWIGN INPYHGRTAYSPSLKSRITITKDTSK NQVLTMTNMDPVDATAYYCVRK GYVEGGGLDYWGQGTTVTVSS	EIVMTQSPATLSLSPGERATLSCK ASQRVDYDGVSYMNWYQQK GQAPRLLINAASDLETGIPARFS GSGSGTDFTLTISLQPEDFAVYY CQSQSNYDPWTFGQGTKLEIK	IGH V2- 5*0 1	IGKV 3/OR 2- 268* 01	93 %	92 %
Humanization4	EVQLVESGGGLVQPGRSLRLSCAA SGYSFTDYIMVWVRQAPGKGLEW IGNINPYHGRTAYADSVKGRFTISR DNAKNSLYLQMNSLRAEDTALYYC VRKGYVEGGGLDYWGQGTTVTVS S	DIVMTQSPDSLAVSLGERATINC KASQRVDYDGVSYMNWYQQK PGQPPKLLINAASDLESGVPDRF SGSGSGTDFTLTISLQAEDVAV YYCQSQSNYDPWTFGQGTKLEIK	IGH V3- 9*0 1	IGKV 4- 1*01	96 %	93 %
Humanization5	EVQLVESGGGLVQPGRSLRLSCAA SGYSFTDYIMVWVRQATGKGLEWI GNINPYHGRTAYPGSVKGRFTISRE NAKNSLYLQMNSLRAGDTAVYYC VRKGYVEGGGLDYWGQGTTVTVS S	DIQMTQSPSSLSASVGDRTITC KASQRVDYDGVSYMNWYQQK PEKAPKLLINAASDLESGVPSRF SGSGSGTDFTLTISLQPEDFATY YCQSQSNYDPWTFGQGTKLEIK	IGH V3- 13* 01	IGKV 1- 39*0 1	95 %	93 %
Humanization6	QVQLVQSGAEVKKPGSSVKVSCK ASGYSFTDYIMVWVRQAPGQGLE WIGNINPYHGRTAYAQKFGGRVTI TADESTSTAYMELSSLRSEDAVYYC VRKGYVEGGGLDYWGQGTTVTVS S	DIVMTQTPLSLVTPGQPASISC KASQRVDYDGVSYMNWYLQK PGQPPQLLINAASDLESGVPDR FSGSGSGTDFTLKISRVEAEDVG VYYCQSQSNYDPWTFGQGTKLEI K	IGH V1- 69* 01	IGKV 2D- 29*0 1	95 %	92 %
Humanization7	EVQLVESGGGLVQPGRSLRLSCAA SGYSFTDYIMVWVRQAPGKGLEW IGNINPYHGRTAYADSVKGRFTISR DNAKNSLYLQMNSLRAEDAVYY CVRKGYVEGGGLDYWGQGTTVTV SS	DIVMTQTPLSLPVTGPEPASISC KASQRVDYDGVSYMNWYLQK PGQSPQLLINAASDLESGVPDR FSGSGSGTDFTLKISRVEAEDVG VYYCQSQSNYDPWTFGQGTKLEI K	IGH V3- 48* 01	IGKV 2- 40*0 1	95 %	91 %
Humanization8	QMQLVQSGPEVKKPGTSVKVSCK ASGYSFTDYIMVWVRQARGQRLE WIGNINPYHGRTAYAQKFRQERTIT RDMSTSTAYMELSSLRSEDAVYYC	AIQMTQSPSSLSASVGDRTITC KASQRVDYDGVSYMNWYQQK PGKAPKLLINAASDLESGVPSRF SGSGSGTDFTLTISLQPEDFATY YCQSQSNYDPWTFGQGTKLEIK	IGH V1- 58* 01	IGKV 1- 13*0 2	97 %	93 %

单抗人源化报告示例

Humanize dAb Number	Hseq	Lseq	VH-Germline	VL-Germline	VH-Identity	VL-Identity
Humanization17	QVQLQESGPGLVKPSSETLSLTCTAS GYSFTDYIMVWIRQPPGKGLEWIG NINPYHGR TAYNPSLKSRTISVDT SKNQFSLKLSVTAADTAVYYCVRK GYVEGGGLDYWGQGT TTVVSS	DIQMTQSPSSLSASVGDRTITC KASQRVDYDGVSYMNWYQQK PGKAPKLLINAASDLESGVPSRF SGSGSGTEFTLTISLQPEDFATY YCQSQSNYDPWTFGQGTKLEIK	IGH V4- 38- 2*0 1	IGKV 1- 39*0 1	95 %	93 %
Humanization18	QVQLQESGPGLVKPSQTLTCTAS GYSFTDYIMVWIRQPPGKGLEWIG NINPYHGR TAYNPSLKSRTISVDT SKNQFSLKLSVTAADTAVYYCVRK GYVEGGGLDYWGQGT TTVVSS	DIQMTQSPSSLSASVGDRTITC KASQRVDYDGVSYMNWYQQK PGKVPKLLINAASDLESGVPSRF SGSGSGTDFTLTISLQPEDVATY YCQSQSNYDPWTFGQGTKLEIK	IGH V4- 30- 2*0 7	IGKV 1- 27*0 1	95 %	93 %
Humanization19	QITLKESGPTLVKPTQTLTCTASG YSFTDYIMVWIRQPPGKALEWIGN INPYHGR TAYSPSLKSRITITKDTSK NQVLTMTNMDPVDATATY C VRK GYVEGGGLDYWGQGT TTVVSS	DVVMQSPSLPVTLGQPASISC KASQRVDYDGVSYMNWFQQR PGQSPRLLINAASDLESGVPDRF SGSGSGTDFTLKISRVEAEDVGV YVCQSQSNYDPWTFGQGTKLEIK	IGH V2- 5*0 1	IGKV 2- 30*0 1	93 %	92 %
Humanization20	QLQLQESGSLVKPSQTLTCTAAS GYSFTDYIMVWIRQPPGKGLEWIG NINPYHGR TAYNPSLKSRTISVDR SKNQFSLKLSVTAADTAVYYCVRK GYVEGGGLDYWGQGT TTVVSS	DIQMTQSPSSLSASVGDRTITC KASQRVDYDGVSYMNWYQQK PGKAPKLLINAASDLESGVPSRF SGSGSGTEFTLTISLQPEDFATY YCQSQSNYDPWTFGQGTKLEIK	IGH V4- 30- 2*0 1	IGKV 1- 39*0 1	95 %	93 %

人源化抗体的风险位点

Humanize dAb Number	Chain	Sequence	Risk Summary
Humanization1	Hseq	QVQLVQSGAEVKKPGSSVKVCSKASGYSFTDYIMVWVRQAPGQGLEWIGNI NPYHGR TAYAQKFOGRVTITADESTSTAYMELSSLRSEDTAVYYCVRKGYVEGG GLDYWGQGT TTVVSS	High: 0, Medium: 1, Low: 0
Humanization1	Lseq	NIQMTQSPSAMSASVGDRTITCKASQRVDYDGVSYMNWFQKPGKVPKL LINAASDLESGVPSRFSGSGSGTEFTLTISLQPEDFATY C QQSQSNYDPWTFGQ GTKLEIK	High: 2, Medium: 2, Low: 1
Humanization2	Hseq	QVQLVESGGGLVPGGSLRLSCAASGYSFTDYIMVWIRQAPGKGLEWIGNI NPYHGR TAYADSVKGRFTISRDNAKNSLYLQMNSLRAEDTAVYYCVRKGYVEGG GLDYWGQGT TTVVSS	High: 0, Medium: 1, Low: 0
Humanization2	Lseq	EIVMTQTPLSLITPGEQASISCKASQRVDYDGVSYMNWFLQKARPVSTLLIN AASDLESGVPDRFSGSGSGTDFTLKISRVEAEDFGVY C QQSQSNYDPWTFGQ TKLEIK	High: 2, Medium: 2, Low: 1
Humanization3	Hseq	QITLKESGPTLVKPTQTLTCTASGYSFTDYIMVWIRQPPGKALEWIGNI NPYHGR TAYSPSLKSRITITKDTSKNQVLTMTNMDPVDATATY C VRKGYVEGGGLD YWGQGT TTVVSS	High: 0, Medium: 1, Low: 0
Humanization3	Lseq	EIVMTQSPATLSLSPGERATLSCKASQRVDYDGVSYMNWYQQKPGQAPRLLI NAASDLETGIPARFSGSGSGTDFTLTISLQPEDFAVYY C QQSQSNYDPWTFGQ TKLEIK	High: 2, Medium: 2, Low: 1
Humanization4	Hseq	EVQLVESGGGLVQPGSRSLRLSCAASGYSFTDYIMVWVRQAPGKGLEWIGNI NPYHGR TAYADSVKGRFTISRDNAKNSLYLQMNSLRAEDTALYYCVRKGYVEGG GLDYWGQGT TTVVSS	High: 0, Medium: 1, Low: 0

单抗人源化报告示例

Humanize dAbNumber	Chain	Sequence	Risk Summary
Humanization20	Hseq	QLQLQESGSLVKPSQTLSTCAASGYSETDYIMVWIRQPPGKGLEWIGNINP YHGRTAYNPSLKSRTISVDRSKNQFSLKLSVTAADTAVYYCVRKGYVEGGGL DYWGQGTTVTVSS	High: 0, Medium: 1, Low: 0
Humanization20	Lseq	DIQMTQSPSSLSASVGDRTITCKASQQRVDYDGVSYMNWYQQKPGKAPKLL INAASDLESVPSRFSGSGSGTEFTLTISSLQPEDFATYYCQQSNYDPWTFGQG TKLEIK	High: 2, Medium: 2, Low: 1

抗体人源化结果文件如下，请点击下载查看

[“20条”人源化抗体对应的人源化分析文件](#)

[“100条”人源化抗体对应的人源化分析文件](#)

人源化分析文件的表头名词	名词解释说明
HumanizedAbNumber	人源化抗体的编号
Hseq	重链序列
Lseq	轻链序列
IMGT-VHGermline	基于IMGT数据库分析抗体重链序列所属germline
IMGT-VLGermline	基于IMGT数据库分析抗体轻链序列所属germline
IMGT-VHIdentity	人源化抗体重链与IMGT数据库中最接近的germline的序列一致性即人源化抗体重链人源化程度
IMGT-VLIdentity	人源化抗体轻链与IMGT数据库中最接近的germline的序列一致性即人源化抗体轻链人源化程度

[“20条”人源化抗体对应的风险位点详细信息文件](#)

[“100条”人源化抗体对应的风险位点详细信息文件](#)

风险位点详细信息文件的表头名词	名词解释说明
HumanizedAbNumber	人源化抗体的编号
Chain	轻链或重链
Name	风险位点类型名称
Motif	风险位点的氨基酸序列
Positions	风险位点氨基酸序列的 IMGT 编号
Regions	风险位点所处的区域
Severity	风险位点对抗体影响的严重性
Germline presence	该风险位点是否在对应的 germline 基因中已经出现
Therapeutic presence	该风险位点出现在 INN 批准或正在临床实验的抗体中的百分比

报告总结

单抗人源化报告示例

1. 我们提供了“20条”和“100条”两组人源化抗体序列，这是按照不同的聚类标准聚类并打分得到的。
2. “20条”和“100条”两组人源化抗体序列均有轻重链所属germline、与IMGT germline的最高序列一致性即人源化程度和风险位点分析结果，可通过下载文件查看。
3. 如果您需要湿实验检测20条及以内的抗体，请从“20条”这一组中选择；如果需要湿实验检测超过20条的抗体，请从“100条”这一组中选择。

纳米抗体人源化报告示例

抗体人源化计算报告

报告概述

- 本报告展示了母本序列的分析结果，包括所属物种、germline、所属germline的最高序列一致性和CDR序列。
- 在本次抗体人源化流程中，经过人源化计算并通过不同方式的聚类，共获取到“6条人源化抗体。
- 人源化抗体的分析结果包括人源化抗体与母本抗体的序列比对、所属germline、与IMGT-FWR的最高序列一致性即人源化程度和风险位点分析结果。
- 人源化后抗体序列与germline的FWR序列一致性最高可达到93%。

输入抗体分析

AbName	VHH
Fv	QVKLQESGGGLVQPGGSLRLSCASSVPIFAITVMGWYRQAPGKQRELVAGIKRSGDTNYADSVKGRFTISR DDAKNTVFLQMNSLTTEDTAVYYCNAQILSWMGGTDYWGQGTQVTVSS
species	human
germline	IGHV3-64*04
germline_i dentity	81% (human)
CDR1	VPIFAITV
CDR2	IKRSGDT
CDR3	NAQILSWMGGTDY

抗体人源化结果

重链人源化前后序列比对

region	FWRH1	CDRH1	FWRH2	CDRH2	FWRH3
site	1-10	11-26	27-43	44-56	57-70
VHH	QVKLQESGG - GLVQP GGS LRLSCASSVPIF - - - AITVMGWYRQAPGKQRELVAGIKRS - - - GDTNYADS				
humVHH-1	QVQLVESGG - GLVKP GGS LRLSCASSVPIF - - - AITVMGWYRQAPGKQRELVAGIKRS - - - GDTNYADS				
humVHH-2	QVQLVESGG - GLVKP GGS LRLSCASSVPIF - - - AITVMGWYRQAPGKQRELVAGIKRS - - - GDTNYADS				
humVHH-3	QVQLVESGG - GLVKP GGS LRLSCASSVPIF - - - AITVMGWYRQAPGKQRELVAGIKRS - - - GDTNYADS				
humVHH-4	QVQLVESGG - GLVKP GGS LRLSCASSVPIF - - - AITVMGWYRQAPGKQRELVAGIKRS - - - GDTNYADS				
humVHH-5	QVQLVESGG - GLVKP GGS LRLSCASSVPIF - - - AITVMGWYRQAPGKQRELVAGIKRS - - - GDTNYADS				
humVHH-6	QVQLVESGG - GLVKP GGS LRLSCASSVPIF - - - AITVMGWYRQAPGKQRELVAGIKRS - - - GDTNYADS				

region	FWRH3	CDRH3	FWRH4
site	71-87	88-104	105-128
VHH	VK - GRFTISRDDAKNTVFLQMNSLTTEDTAVYYCNAQILSWMGGTDYWGQGTQVTVSS		
humVHH-1	VK - GRFTISRDNAKNSLYLQMNSLRAEDTAVYYCNAQILSWMGGTDYWGQGTQVTVSS		
humVHH-2	VK - GRFTISRDNAKNSLYLQMNSLRAEDTAVYYCNAQILSWMGGTDYWGQGTQVTVSS		
humVHH-3	VK - GRFTISRDNAKNSLYLQMNSLRAEDTAVYYCNAQILSWMGGTDYWGQGTQVTVSS		
humVHH-4	VK - GRFTISRDDAKNSVYLQMNSLRAEDTAVYYCNAQILSWMGGTDYWGQGTQVTVSS		
humVHH-5	VK - GRFTISRDDAKNSVYLQMNSLRAEDTAVYYCNAQILSWMGGTDYWGQGTQVTVSS		
humVHH-6	VK - GRFTISRDDAKNTVFLQMNSLRAEDTAVYYCNAQILSWMGGTDYWGQGTQVTVSS		

人源化后抗体序列

Humanized VHHNumber	Sequence	Germline	IMGT-FWR-Identity
humVHH-1	QVQLVESGGGLVKPGGSLRLSCASSVPIFAITVMGWYRQAPGKQRELVAGIKR SGDTNYADSVKGRFTISRDNAKNSLYLQMNSLRAEDTAVYYCNAQILSWMG GTDYWGQGTQVTVSS	93	%

纳米抗体人源化报告示例

Humanized VHHNumber	Sequence	Germline	IMGT-FWR-Identity
humVHH-2	QVQLVESGGGLVKPGGSLRLSCASSVPIFAITVMGWIRQAPGKQRELVAGIKR SGDTNYADSVKGRFTISRDNAKNSLYLQMNSLRAEDTAVYYCNAQILSWMG GTDYWGQGT TTVVSS	92	%
humVHH-3	QVQLVESGGGLVKPGGSLRLSCASSVPIFAITVMGWYRQAPGKQRELVAGIKR SGDTNYADSVKGRFTISRDNAKNSLYLQMNSLRAEDTAVYYCNAQILSWMG GTDYWGQGT TTVVSS	91	%
humVHH-4	QVQLVESGGGLVKPGGSLRLSCASSVPIFAITVMGWYRQAPGKQRELVAGIKR SGDTNYADSVKGRFTISRDDAKNSVFLQMNSLRAEDTAVYYCNAQILSWMG GTDYWGQGT TTVVSS	89	%
humVHH-5	QVQLVESGGGLVKPGGSLRLSCASSVPIFAITVMGWYRQAPGKQRELVAGIKR SGDTNYADSVKGRFTISRDDAKNSVFLQMNSLRAEDTAVYYCNAQILSWMG GTDYWGQGT TTVVSS	88	%
humVHH-6	QVQLVESGGGLVKPGGSLRLSCASSVPIFAITVMGWYRQAPGKQRELVAGIKR SGDTNYADSVKGRFTISRDDAKNTVFLQMNSLRAEDTAVYYCNAQILSWMG GTDYWGQGT TTVVSS	87	%

人源化抗体的风险位点

Humanized VHHNumber	Chain	Sequence	Risk Summary
humVHH-1	VH H	QVQLVESGGGLVKPGGSLRLSCASSVPIFAITVMGWYRQAPGKLELVAGIKR <u>SGDT</u> NYADSVKGRFTISRDNAKNSLYLQMNSLRAEDTAVYYC <u>NAQILSWMG</u> <u>GTDYWGQGT TTVVSS</u>	High: 1, Medium: 3, Low: 1
humVHH-2	VH H	QVQLVESGGGLVKPGGSLRLSCASSVPIFAITVMGWIRQAPGKQRELVAGIKR <u>SGDT</u> NYADSVKGRFTISRDNAKNSLYLQMNSLRAEDTAVYYC <u>NAQILSWMG</u> <u>GTDYWGQGT TTVVSS</u>	High: 1, Medium: 3, Low: 1
humVHH-3	VH H	QVQLVESGGGLVKPGGSLRLSCASSVPIFAITVMGWYRQAPGKQRELVAGIK <u>RSGDT</u> NYADSVKGRFTISRDNAKNSLYLQMNSLRAEDTAVYYC <u>NAQILSWM</u> <u>GGTDYWGQGT TTVVSS</u>	High: 1, Medium: 3, Low: 1
humVHH-4	VH H	QVQLVESGGGLVKPGGSLRLSCASSVPIFAITVMGWYRQAPGKQRELVAGIK <u>RSGDT</u> NYADSVKGRFTISRDDAKNSVFLQMNSLRAEDTAVYYC <u>NAQILSWM</u> <u>GGTDYWGQGT TTVVSS</u>	High: 1, Medium: 3, Low: 1
humVHH-5	VH H	QVQLVESGGGLVKPGGSLRLSCASSVPIFAITVMGWYRQAPGKQRELVAGIK <u>RSGDT</u> NYADSVKGRFTISRDDAKNSVFLQMNSLRAEDTAVYYC <u>NAQILSWM</u> <u>GGTDYWGQGT TTVVSS</u>	High: 1, Medium: 3, Low: 1
humVHH-6	VH H	QVQLVESGGGLVKPGGSLRLSCASSVPIFAITVMGWYRQAPGKQRELVAGIK <u>RSGDT</u> NYADSVKGRFTISRDDAKNTVFLQMNSLRAEDTAVYYC <u>NAQILSWM</u> <u>GGTDYWGQGT TTVVSS</u>	High: 1, Medium: 3, Low: 1

抗体人源化结果文件如下，请点击下载查看

[人源化抗体对应的人源化分析文件](#)

纳米抗体人源化报告示例

人源化分析文件的表头名词	名词解释说明
HumanizedVHHNumber	人源化抗体的编号
Sequence	纳米抗体序列
Germline	基于IMGT数据库分析抗体重链序列所属germline
IMGT-FWR-Identity	人源化抗体与IMGT数据库中最接近的germline的FWR序列一致性，即人源化抗体重链人源化程度

人源化抗体对应的风险位点详细信息的文件

风险位点详细信息文件的表头名词	名词解释说明
HumanizedAbNumber	人源化抗体的编号
Chain	链类型
Name	风险位点类型名称
Motif	风险位点的氨基酸序列
Positions	风险位点氨基酸序列的 IMGT 编号
Regions	风险位点所处的区域
Severity	风险位点对抗体影响的严重性
Germline presence	该风险位点是否在对应的 germline 基因中已经出现
Therapeutic presence	该风险位点出现在 INN 批准或正在临床实验的抗体中的百分比

报告总结

1. 通过人源化流程，我们已经获取到6条人源化抗体序列
2. 人源化抗体序列均有germline、与IMGT germline的最高序列一致性即人源化程度和风险位点分析结果，可通过下载文件查看。



立即开启下一代 AI 驱动抗体研发之旅



合作咨询

扫码或邮件联系我们，获取一体化解决方案。

✉ bd@clickmab.com

🌐 www.clickmab.com