

使用 MolAICal 计算配体和受体结合能力的 **vinardo** 打分函数

作者：Qifeng Bai (update 2020-09-02)

更多教程 (含英文教程) 请见如下:

MolAICal 官方主页: <https://molaical.github.io>

MolAICal 官方主页中国镜像: <https://molaical.gitee.io>

MolAICal 中文博客: <https://molaical.gitee.io/cntutorial.html>

1. 简介

打分函数可以用来评估药物分子和受体靶点的结合能力, **vinardo** 是基于 Autodock Vina 的打分函数重新训练的一种打分方式。关于打分函数 **vinardo** 的介绍, 可以阅读这两篇文献 (<https://doi.org/10.1093/bib/bbaa161> 和 <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0155183>)。在本教程中, 选择 Mpro 受体及其配体作为研究示例, 先使用 MolAICal 计算出 Mpro 蛋白的网格文件, 再根据 Mpro 的网格文件计算评估配体结合能力的打分函数 **vinardo**, 这个例子可以推广到其它蛋白质受体。

2. 工具和材料

2.1. 所需软件

MolAICal: <https://molaical.github.io> 或 <https://molaical.gitee.io>

2.2. 教程示例文件

所有需要的教程文件从以下下载

<https://gitee.com/molaical/tutorials/tree/master/008-vinardoScore>

3. 步骤

在计算配体的 **vinardo** 打分之前, 需要生成配体的网络文件

```
#> cd 008-vinardoScore
```

1) 创建一个名为“boxPar.dat”的文件, 第一行是受体方盒子中心的坐标, 第二行是受体方盒子的长度。如下所示:

```
-----  
-10.733 12.416 68.829  
30.0 30.0 30.0  
-----
```

2) 执行如下命令生成蛋白质的网格文件

```
#> molaical.exe -tool grid -i boxPar.dat -p mproNolig.pdb -n vinardoScore
```

其中“mproNolig.pdb”是不含配体的 Mpro 蛋白。这个命令将会生成名为“vinardoScore.dat”的文件。

3) 计算单个配体的 vinardo 分数

```
#> molaical.exe -tool vinardo -i ligands/lig_1.mol2 -g vinardoScore.dat -t vinardoscore
```

这个命令将输出配体结合能力的打分值：-6.21 kcal/mol

如果要批量计算多个配体的 vinardo 打分值，可以执行以下步骤：

```
#> cd 008-vinardoScore/ligands
```

1. 在 Linux 终端中输入命令“ls > ligandList.dat”，或在 Windows DOS 控制台中输入命令“dir /b > ligandList.dat”。打开生成的文件“ligandList.dat”并且删除无用的字符。例如，删除包含字符“ligandList.dat”的第一行内容。确保文件“ligandList.dat”只包含配体名称。

2. 执行如下命令：

```
#> molaical.exe -score vinardo -i ligands/ligandList.dat -o output.dat -g vinardoScore.dat
```

将会生成名为“output.dat”的文件，其中包含批量配体的打分函数值。