# 4分子对接使用说明：

本程序支持单受体多配体的虚拟筛选、单配体多受体的反向钓靶、多受体多配体的网络药理学靶点验证三种模式。

(1)按照要求选择四个路径，分别为配体(.pdbqt)所在位置(路径中的所有.pdbqt文件都会被认为是配体)、受体(.pdbqt)所在位置(路径中的所有.pdbqt文件都会被认为是受体)、配置文件(.txt)所在位置、结果输出位置。

注意:配置文件必须提前以受体名字命名以对应每个受体，因为受体不同，结合位点肯定不同。如受体为1r4l.pdbqt，其对应的配置文件应为1r4l.txt。配置文件内不要再写任何ligand=或receptor=有关的内容！只需要填写对接盒子中心位置和大小即可。配置文件可在步骤2自动生成。

软件会在后续结果分析中使用"-"区分文件对应的配体和受体，因此若配体或受体名称中含有"-"，将被自动转换为"\_"，若受体名称因此改变，请重新检查配置文件名称！

(2)虚拟筛选模式请在受体文件夹中只放入一个受体文件；反向钓靶模式请在配体文件夹中只放入一个配体文件；多配体多受体交叉对接正常操作即可。

(3)本程序可以自动进行第五步结果分析中的结合亲和力汇总和分割对接结果，按需勾选即可，若未正常完成分析，可在第五步重新分析。

(4)若进行大批量对接操作，本程序可以随时终止，想继续时只需保证之前的四个路径完全一致，并勾选“继续未完成的对接”即可。注意，终止程序请点击黑色命令行界面的×号关闭，而不是强制结束当前未响应的UI界面。

(5)本程序可以更改对接算法或打分函数，Vina1.2.3是Vina的最新版本，Vinardo是基于Vina改进的评分函数，QuickVina2在对接速度上有一定提升，QuickVina-W对于盲对接时有更好的空间搜索能力，Vina-GPU是使用GPU进行分子对接，可以极大加快对接速度(使用时务必参见菜单栏-关于-疑难解答正确使用)，可按需选择，不选即默认使用Vina1.1.2进行对接。

当选择“蛋白质-小分子半柔性对接通用方案”时，将为每个配体选择最适宜大小的对接盒子(4.5×配体的回转半径)，并将算法采样精度固定为16。根据本文献的研究结论，该方案在CASF-2016数据集上具有较高的重对接准确性，可使得对接结果的RMSD和结合亲和力打分误差均达到最低，且计算成本较低速度较快。当使用Vina对接时，建议选择本选项。