

## 单一来源采购专家论证意见表

项目名称	分子模拟软件 LIGANSCOUT 购买	使用单位	信息学院
供应商	广州市墨灵格信息科技有限公司	项目金额	15.5 万元

### 单一来源采购申请理由：

从蛋白-配体复合物结构识别药效团或者从几个已知活性的化合物出发训练药效团、并用药效团进行虚拟筛选、靶标预测是重要的药物发现技术。最新的药效团技术可以从分子动力学模拟轨迹提取快照的药效团、模拟相互作用的动态变化并进行虚拟筛选可以极大的提高基于药效团虚拟筛选的性能；将同一个靶标、不同结合模式的药效团合并进行虚拟筛选，以提高药效团虚拟筛选的精度也是目前药效团虚拟筛选技术的一个亮点，实现 Ensemble 药效团虚拟筛选。如何在虚拟筛选时实现多目标优化也是药物设计领域需要解决的重要问题：比如筛选出命中代表靶标 A、B、而不命中代表毒性的靶标 C、D 的化合物。

Ligandscout 药物设计软件可以全面解决上述问题，(1) 支持基于结构的药效团生成，提供 PDB 代码即可生成药效团；2) 支持基于配体的药效团识别，提供活性与非活性化合物即可训练药效团模型；3) 支持构象搜索、结构准备；4) 支持分子动力学模拟轨迹的读入、生成药效团，并可以进行药效团的叠合与比较；5) 支持布林运算，在虚拟筛选中使用 and、not、or 对药效团进行组合运算实现多目标虚拟筛选；6) 布林运算也可以用于 ensemble 虚拟筛选，将同一个蛋白的不同药效团用 or 组合，只要命中其中一个蛋白即视为命中；7) 除此之外，还支持数据库挖掘：从 ChEMBL 等数据库按靶标提取化合物，进行分析用于药效团训练与验证；8) 共价药效团元素 (Feature) 的识别；9) 支持配体-金属相互作用药效团元素与虚拟筛选，自动识别金属配位的空间取向；10) 虚拟筛选支持部分药效团元素匹配、可以限定哪些药效团元素要匹配、哪些不用；11) 包含分子对接计算功能实现指定结合位点对接、blind docking (整个蛋白漫游对接)；12) 包含结合位点预测；13) 包含多种蛋白-配体相互作用打分函数，用于 docking 结果的后处理：结合亲和力预测、基于形状的打分、药效团打分、结合焓计算；14) 结合位点的优化：仅配体优化、仅侧链优化、侧链与配体一起优化。15) 支持方法学验证：提供 ligand 与 decoy 数据库、绘制 ROC 曲线与 EF 计算；16) 同时支持命令行、图形界面与 KNIME 界面。

广州市墨灵格信息科技有限公司是 Ligandscout 软件在中国的独家总代理商，并负责该软件在中国地区的销售、技术服务、培训等工作，并能根据用户需要进行灵活、及时的跟踪服务。综上因素，特申请单一来源方式采购，请专家论证审批。

软件特点：① Ligandscout 支持多种格式的动力学模拟轨迹的读入、生成药效团，并可以进行药效团的叠合比较，是目前唯一一款支持此功能的软件。  
② 布林运算是目前其它药效团技术不具备的支持运算类型。  
 ③ Ligandscout 支持金属 Mg Zn Mn 后对计算界同类技术产品中最全面的。

申购人(签名):

孔德信

单位公章



年 月 日

专家组论证意见

申购理由合理, 同意单一来源申购

位灯国

2018年4月?日

专家签名(3人及单数以上)

姓名	所属单位	职称	联系电话
位灯国	理学院	教授	15927647528
宋云峰	动物科技学院	副教授	18672773622
高军	信息学院	教授	15927289568