

myPresto 4.204

- *BindMol* -

USER MANUAL

Version 1.0

Copyright (C) 2006-2011 National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)

Copyright (C) 2006-2011 Biomedical Information Research Center (BIRC)

本ドキュメントについて

本ドキュメントは、「*myPresto 4.204* USER MANUAL」の別冊です。コピーライト、プログラム使用許諾条件、著者および引用文献については、「*myPresto 4.204* USER MANUAL」の記述に準じます。

謝辞

本ソフトウェアの研究開発は、新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)、及び、経済産業省(METI)の援助によって行われました。ここに感謝の意を記します。

本ソフトウェアは、故・京極好正博士の推進する研究プロジェクトで開発されました。

目次

1	はじめに.....	5
1.1	システムの概要.....	5
1.2	システムの構成.....	6
2	使用方法.....	7
2.1	BindMol システム(make_2nd_compound.sh).....	7
2.1.1	実行方法.....	7
2.1.2	出力ファイル.....	7
2.1.3	エラーメッセージ.....	8
2.1.4	ディレクトリ構成.....	9
3	インストールとサンプル実行.....	10
3.1	インストール.....	10
3.2	サンプル実行.....	11

(余白)

引用文献について

本ソフトウェアの使用時には、以下の文献を引用してください。

BindMol について

Yoshifumi Fukunishi. Prediction of positions of active compounds makes it possible to increase activity in fragment-based drug development. *Pharmaceuticals*. 2011, 4, 758-769.

1 はじめに

1.1 システムの概要

BindMol システムは、母核構造と側鎖構造のデータファイル (mol2 形式) から、新規の仮想分子構造のデータファイル (mol2 形式) を生成するシステムです。本システムは、次の2つの処理部分から構成されています。

(1) 母核・側鎖構造合成部

母核構造および側鎖構造のデータファイル (mol2 形式) から合成対象の末端分子を検出して分子を合成し、合成後の分子のデータファイル (mol2 形式) を作成します。

(2) 分子情報作成部

合成した分子の原子に電荷を割り当て、構造を安定させた座標での分子のデータファイル (mol2 形式) を作成します。

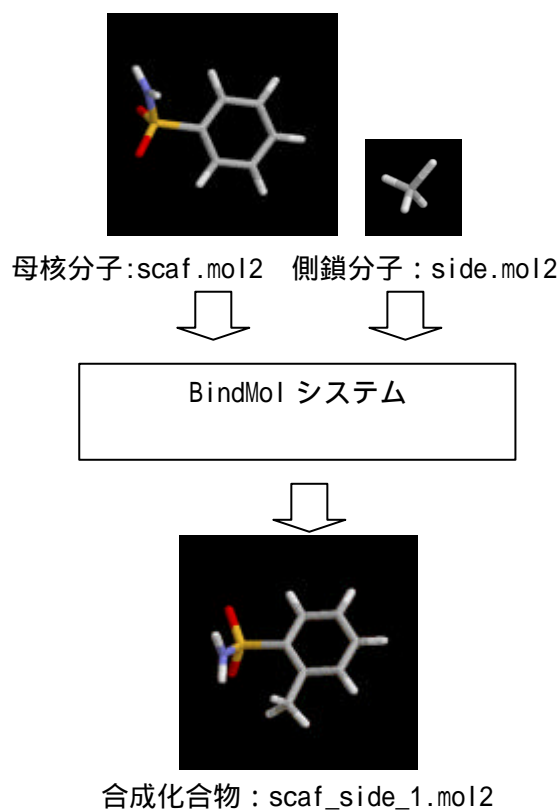


図 1.1. BindMol システムの概要

1.2 システムの構成

本システムは、母核・側鎖構造合成部、分子情報作成部の2つの処理部分で構成されます。以下に本システムの構成を示します。

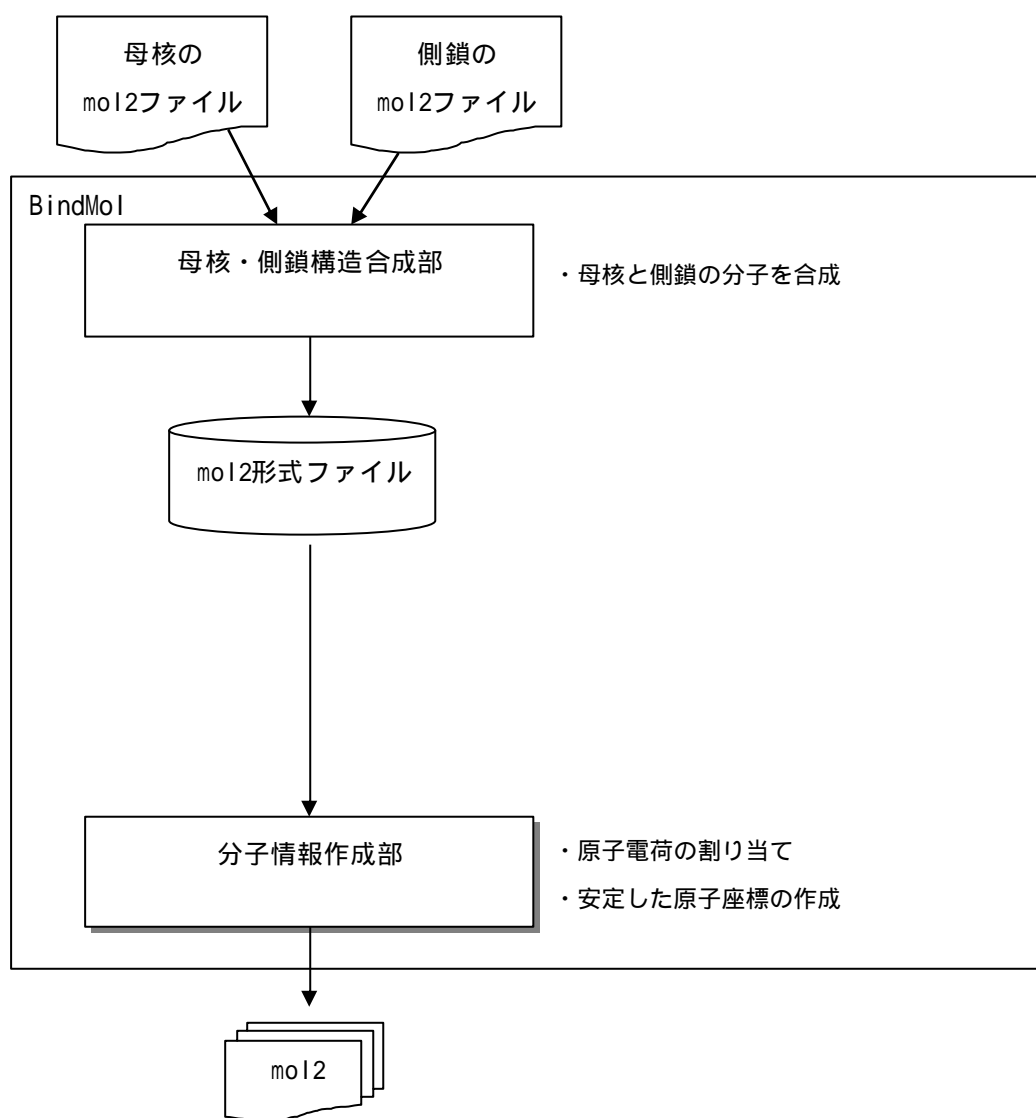


図 1.2 . システム構成

2 使用方法

2.1 BindMol システム (make_2nd_compound.sh)

母核と側鎖の化合物 mol2 ファイルを入力し、合成した分子を出力します。

2.1.1 実行方法

make_2nd_compound.sh は以下のコマンドラインで実行します。

母核と側鎖の mol2 ファイル名はファイルパスで指定して下さい。

```
make_2nd_compound.sh 母核 mol2 ファイル名 側鎖 mol2 ファイル名  
[-seed 整数値(乱数の種)] [-random | -all] [-multi-mol2 , -M]
```

(引数)

母核 mol2 ファイル名

側鎖 mol2 ファイル名

(オプション)

-seed 整数値(乱数の種) : 乱数の種

-random | -all : 化合物合成実行オプション

-random : 置換候補原子 1 箇所での化合物合成実行

-all : 全置換候補原子での化合物合成実行

-multi-mol2 , -M : 合成化合物データファイルの出力形式

入力 mol2 ファイルで原子の名称が "X", "R", "Y" の原子は結合対象の原子として採用されます。

2.1.2 出力ファイル

出力の合成分子のファイル名は、母核 mol2 ファイル名と側鎖 mol2 ファイル名から下記の情報を組み合わせた名称 ("xxxx_yyyy_n_m.mol2") となります。

(1) 母核名 mol2 ファイル名 : "xxxx.mol2"

(2) 側鎖 mol2 ファイル名 : "yyyy.mol2"

(3) 合成順序の ID : n

(4) 母核の置換原子 ID : m

"-multi-mol2" 指定時には、"xxxx_yyyy_multi.mol2" がファイル名となり、ファイル内での分子の名称として、"xxxx_yyyy_n_m" が設定されます。

2.1.3 エラーメッセージ

make_2nd_compound.sh ではエラー発生時に下記のエラーメッセージを出力します。

以下の#1～6のエラー発生時はメッセージ出力後に処理を中断し、#7では該当化合物の合成のみを中断し、次の化合物の作成を続行します。

表 2.1.3 エラーメッセージ一覧

#	メッセージ	メッセージ内容
1	usage: make_2nd_compound.sh FILE1 FILE2 [OPTION].. FILE1 : scaffold mol2 file FILE2 : side chain mol2 file OPTION [-seed NUMBER] : random seed [-all -random] : mode for create molecule [-multi-mol2,-M] : output file type (multi- mol2)	make_2nd_compound.sh の使用方法 (出力条件は次の3つ 引数の数が2つ未満の場合 入力 mol2 ファイルが3つ以上指定された場合)
2	Error!: ファイル名 not found!	引数で指定した mol2 ファイルが存在しない
3	Error!: the random seed is invalid! please input integral value larger than 0.	乱数の種が不正である。 0より大きい整数値を入力すること。
4	Error!: 結果ディレクトリパス cannot create!	結果出力ディレクトリが作成できない
5	Error! : 結果ディレクトリパス is permission denied!	結果出力ディレクトリパスに書き込み権限がない
6	Error! : TPLL_DB_PATH ディレクトリ not found!	環境変数 TPLL_DB_PATH の設定ディレクトリが存在しない
7	合成化合物 mol2 ファイル名 failed!! (失敗プログラム名)	合成化合物の作成に失敗した

2.1.4 ディレクトリ構成

本システムは図 2.1.4 のように 4 つのディレクトリと 7 つのサブディレクトリで構成されます。

二次化合物システム環境ディレクトリ

bin/	スクリプト/ロードモジュールディレクトリ
input/	入力設定ファイルディレクトリ
sample/	サンプルデータディレクトリ
scaf/	母核データディレクトリ
side-chain/	側鎖データディレクトリ
src/	ソースプログラム配置ディレクトリ
BindMol/	分子合成プログラムファイルディレクトリ
Hgene/	電荷計算プログラムファイルディレクトリ
tplgeneL/	トポロジー生成プログラムファイルディレクトリ
cosgene/	構造安定化プログラムファイルディレクトリ
tpl2mol2/	mol2 変換プログラムファイルディレクトリ

図 2.1.4 ディレクトリ構成

3 インストールとサンプル実行

3.1 インストール

以下の手順で二次化合物合成システムのインストールを行ってください。

(1) 圧縮ファイル「2nd_compound.tar.gz」の解凍

本システムをインストールするディレクトリで 2nd_compound.tar.gz の解凍コマンドを実行します。

解凍後に 2nd_compound ディレクトリが作成され、その中に以下 4 つのディレクトリが作成されます。

- ・ bin 実行ファイルディレクトリ
- ・ input 入力設定ファイルディレクトリ
- ・ sample 動作確認用入力ファイルディレクトリ
- ・ src ソースプログラムファイルディレクトリ

(2) サブプログラムのコンパイル

サブプログラムのコンパイルをするため、2nd_compound/src/で make コマンドを実行します。

実行後に、2nd_compound/bin/ディレクトリに以下の実行ファイルが作成されます。

- ・ BindMol 分子合成プログラムの実行ファイル
- ・ Hgene 電荷計算プログラムの実行ファイル
- ・ tplgeneL トポロジー生成プログラムの実行ファイル
- ・ cosgene 構造安定化プログラム
- ・ tpl2mol2 mol2 変換プログラム

また、2nd_compound/input/に以下のシンボリックリンクが作成されます。

- ・ DB tplgeneL で使用するデータベース

3.2 サンプル実行

sample ディレクトリでは化合物合成のサンプル実行が行えます。

以下、母核と側鎖から 7 個の合成化合物を生成した際の実行条件、コマンドと実行ログを示します。

(1) 実行条件

母核ファイル名 : 2nd_compound/sample/scaf/1cx2z+1.mol2

側鎖ファイル名 : 2nd_compound/sample/side-chain/S1.mol2

乱数の種指定オプション : 指定なし(デフォルト値 : 1)

実行オプション : all

実行ディレクトリ : 2nd_compound/sample/

(2) コマンドと実行ログ

```
[sample]$ ../bin/make_2nd_compound.sh scaf/1cx2z+1.mol2 side-chain/S1.mol2 -all
*****
*                                                                    *
*          make 2nd compound script                                  *
*          ver.4.204 2011/08/01                                     *
*                                                                    *
*****

MOL2_FILE1      : scaf/1cx2z+1.mol2
MOL2_FILE2      : side-chain/S1.mol2
RANDOM_SEED      : 1
EXEC_MODE       : ALL
TPLL_DB_PATH    : /usr/local/insilico/bin/./input/DB

==== make 2nd compound start ====
1cx2z+1_S1_1_13.mol2 created.
1cx2z+1_S1_2_11.mol2 created.
1cx2z+1_S1_3_12.mol2 created.
1cx2z+1_S1_4_17.mol2 created.
1cx2z+1_S1_5_14.mol2 created.
1cx2z+1_S1_6_15.mol2 created.
1cx2z+1_S1_7_16.mol2 created.

SUCCESS        : 7
ERROR          : 0

==== make 2nd compound finished! ====
[sample]$
```

図 3.2 サンプル実行ログ

myPresto 4.204
- BindMol -