

化合物配座生成ツール confgene の改良 詳細設計書

2018 年 2 月 5 日

Copyright (C) 2006-2018 Next Generation Natural Product Chemistry (N²PC)

1. 目的	3
2. 概要	4
4. 修正対象	6
5. 修正内容	7
5. 1. 修正点一覧	7
6. 新規手続きのモジュール仕様と既存手続きの変更点	8
6. 1. 既存手続きの変更点	8
6. 1. 1. mol2 ファイルの入力	8
6. 1. 3. mol2 ファイルの作成手続き ..エラー! ブックマークが定義されていません。	

1. 目的

化合物の配座生成ツール `confgene` で、空白行を含む `Sybyl mol2` ファイルが読み込めない問題があるので、空白行も含む任意の形式の `Sybyl mol2` ファイルが読み込めるように改良する。

2. 概要

化合物の配座生成ツール **confgene** は **mol2** ファイルを入力、検出した回転可能な二面角の角度を変更して原子座標を再構成することで、複数の配座を生成する機能を持っている。

現在の **confgene** の **mol2** ファイル入力処理では、**@<TRIPOS>BOND** 行には「結合 ID 原子 1 原子 2 結合次数」が存在することを前提としているため、空白行がある場合にはファイル入力エラーでプログラムが停止する。

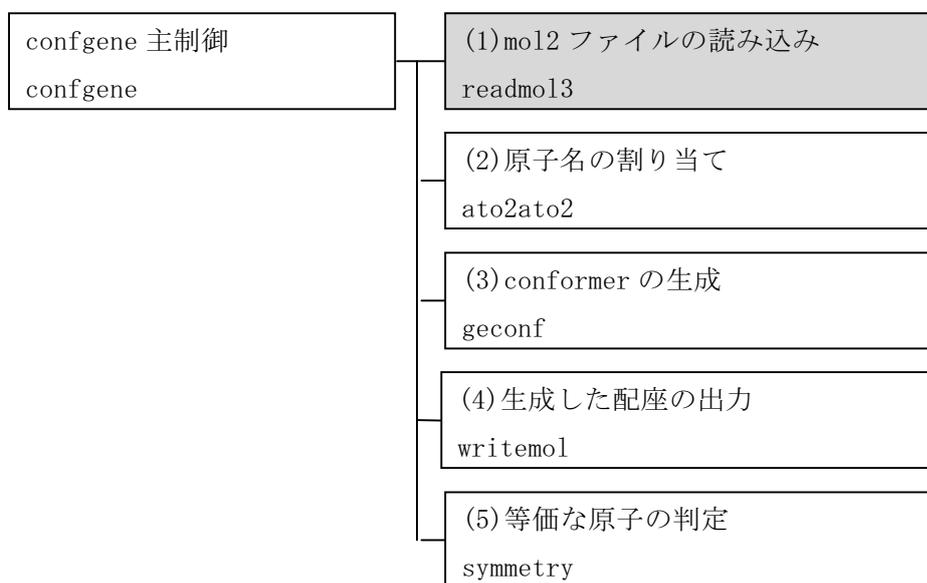
今回の **confgene** の改良では、**@<TRIPOS>BOND** 行の空白行のように想定されない行を入力した場合に、エラー回避を行う機能を追加する。

3. ユーザインタフェース

今回の configene の改良ではユーザインタフェースの変更はない。

4. 修正対象

confgene の改良では、confgene の mol2 ファイル入力手続き readmol3 に対して修正を行う。



5. 修正内容

5. 1. 修正点一覧

下記の表に修正モジュールの一覧を示す。

項番	モジュール名	内容	区分
1	readmol3	タンパク質の金属の検出	改造

6. 新規手続きのモジュール仕様と既存手続きの変更点

6. 1. 既存手続きの変更点

6. 1. 1. mol2 ファイルの入力

対象手続き：

```
subroutine readmol3
```

変更内容：

@<TRIPOS>BOND 行の読み込み処理中に空白行を読み込んだ場合、当該行には bond 情報がないと判定し、この行の解析をスキップする。

-以上-