

---

---

# *myPresto 5.0*

- *sievgene\_MVO* -

USER MANUAL

2018/1/11

Copyright (C) 2006-2018 Next Generation Natural Product Chemistry (N<sup>2</sup>PC)

---

## 本ドキュメントについて

本ドキュメントは、「*myPresto 5.0* 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 5.0* 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、国立研究開発法人日本医療研究開発機構 (AMED) 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・京極好正博士の始められた研究の中で開発されました。

---

## 目次

|                                     |    |
|-------------------------------------|----|
| 1. sievgene-MD-MV0 法の概要 .....       | 4  |
| 2. MD-MV0 法導入版 sievgene の使用方法 ..... | 5  |
| 3. インストール方法.....                    | 9  |
| 3. 1. インストール方法.....                 | 9  |
| 3. 2. テストプログラムの実行.....              | 9  |
| 4. サンプルの実行方法.....                   | 10 |

---

## 1. sievgene-MD-MVO 法の概要

既知化合物の立体構造に対してドッキング対象の化合物が類似しているかを評価するため、タンパク質-化合物ドッキングプログラム sievgene に対し、化合物同士の重なり具合を評価する MD-MVO 法を組み込みました。

MD-MVO 法導入版 sievgene(sievgene\_MVO)での化合物の総スコアは、sievgene のスコアと MD-MVO 法のスコアの和とします。

化合物のスコア =  $(1-c) * (\text{sievgene のスコア}) + c * (\text{MD-MVO 法のスコア})$

ここで、 $c$  は、0~1 の範囲のパラメータで、制御ファイルで指定可能です。

また、MD-MVO の計算では、蛋白質から化合物に働く力も、相互作用(グリッドポテンシャル)の力と、MD-MVO の力の和とします。

タンパク質から化合物に働く力 =  $(1-c) * (\text{グリッドポテンシャルの力}) + c * (\text{MD-MVO 法の力})$

---

## 2. MD-MVO 法導入版 sievgene の使用方法

MD-MVO 法導入版 sievgene (sievgene\_MVO) を使用する際の利用手順を以下に示します。

MD-MVO 法を使用するため、sievgene\_MVO の制御ファイルでの MD-MVO 計算指定と MD-MVO 指定ファイルでの計算パラメータを設定して下さい。

### (1) 制御ファイルの指定方法

制御ファイルに下記の情報を設定することで、sievgene\_MVO の MD-MVO 法機能を有効とする。

#### (1-1) INPUT フェーズ

INPUT フェーズで MD-MVO 法の重みづけファイルと MVO 計算の対象分子のファイル名を指定する。

| 項番 | 項目                | キーワード         | 値   | 内容  |
|----|-------------------|---------------|-----|---|
| #1 | MVO の重みづけ<br>ファイル | <u>SETMVO</u> | 選択型 | ファイルの読み込みと形式<br>( <u>NORE</u>   <u>FORM</u> ) |
| #2 |                   | <u>NAMEMV</u> | 文字型 | ファイル名 ("")                                    |

#### (1-2) DOCK フェーズ

DOCK フェーズで MD-MVO 法のスコアをドッキングスコアに加算する際の係数を指定する。

| 項番 | 項目        | キーワード         | 値   | 内容                |
|----|-----------|---------------|-----|-------------------|
| #1 | MVO スコア係数 | <u>WETMVO</u> | 実数型 | MVO へのスコア係数 (0.0) |

#### (1-3) MIN フェーズ

MIN フェーズで MVO 計算のパラメータを指定する。

D-MVO ではクエリー側 (参照) 分子は移動しないため、位置拘束情報を指定する必要はない。

| 項番 | 項目        | キーワード         | 値   | 内容                              |
|----|-----------|---------------|-----|---------------------------------|
| #1 | MVO 計算フラグ | <u>USEMVO</u> | 選択型 | MVO 計算フラグ<br>( <u>NO</u>   YES) |
| #2 | 系間静電係数    | <u>MVOZVA</u> | 実数型 | 系間の静電相互作用係数 (1.0)               |
| #3 | 系内静電係数    | <u>MVOCVA</u> | 実数型 | 系内の静電エネルギー係数<br>(1.0)           |
| #4 | MVO 静電係数  | <u>MVOQVA</u> | 実数型 | MVO 対象分子間静電係数 (0.2)             |

---

(2) MD-MVO 法指定ファイル

INPUT フェーズの NAMEMV オプションで指定されたファイルから参照分子に対する MVO の係数を読み込む(\*1)。

書式 :

MVO 法での参照分子に対する計算指定は、以下の行で構成される。

```
[MVO 係数先頭行 [MVO 係数指定行.. ] ]
```

MVO 係数先頭行は以下のように記述する。

```
MD-MVO> WEIGHT
```

MVO 係数指定行は以下のように記述する。

```
先頭チェーン番号 最終チェーン番号 先頭残基番号 最終残基番号 原子名 残基名  
係数 [リスト出力]
```

※上記の項目は以下の値で構成される。

リスト出力 ::= "YES" | "NO" (デフォルトは NO)

原子名指定、残基名指定 ::= 英数字の文字列で "\*" はワイルドカードを示す

例)

```
MD-MVO>WEIGHT
```

```
1 1 1 1 N1 * 1.0 YES  
1 1 1 1 O* * 1.0 YES  
1 1 1 1 H* * 0.5 YES
```

(\*2) sievgene\_MVO の MVO 法設定ファイルは、MD-MVO 法設定ファイルと以下の点で指定形式が異なる。

- ・重みづけの対象はクエリー側原子のみで、1 チェインが仮定される。
- ・"MD-MVO>"行での FIX, OPT 指定は指定できないこととする。  
(使用法の誤りとみなし、エラーメッセージを出力して処理を中断する)

---

(3) ログ出力

MD-MVO 適用時は下記のログを出力する。

(3-1) sievgene\_MVO のバージョン表示

タイトルに MVO 適用版である旨を出力する。

```
*****
*
*          sievgene (15/04/29)          *
*
*  molprof / AIST Aomi 2-3-26, Koto-ku, *
*          Tokyo 135-0064 JAPAN         *
*          JAPAN                        *
*
*          v4.307.1 : Apr 29 2015      *
*          for docking pose + MVO      *
*
*
*****
```

(3-2) MVO の入力ファイル表示

INPUT フェーズのログに MVO 法指定ファイルの読み込み指定とファイル名を出力する。

```
INFORMATION> INPUT
  1) PROTEIN DATA
  :
  5) MVO DATA
     FORMAT           :ascii
     NAME             :comp_F0.mvo
```

(3-3) MVO 法の係数表示

DOCK フェーズのログに MVO 法のスコアの重みを出力する。

```
INFORMATION> DOCK
  1) DOCKING
  :
  2) SCORE COEFFICIENT
     2-1) VAN DER WAALS WEIGHT          : 1.000000
     2-2) DIELECTRIC WEIGHT             : 3.200000
     2-3) A. S. A WEIGHT                 : 1.000000
     2-4) HYDROGEN-BOND WEIGHT           : 1.200000
     2-5) INSIDE POCKET DISTANCE (A)    : 6.000000
     2-6) MVO SCORE WEIGHT               : 0.9900000
```

---

(3-4) MVO 計算パラメータの表示

MIN フェーズの計算パラメータ表示で MVO 計算の係数をログに表示する。

```
PARAMETERS FOR MINIMIZATION
:
10) MAXIMUM VOLUME OVERLAP
   Z PARAMETER : 1.0000000000000000
   C PARAMETER : 1.0000000000000000
   Q PARAMETER : 0.2000000000000000
   GENERATE CONFORMER F
```

(3-5) MVO 法指定ファイルの読み込み内容

MVO 法指定ファイルから入力した参照分子の MVO の係数をログに表示する。

```
INFORMATION> INPUT MVO FILE

MVO INFORMATION

MVO SCALING FACTOR OF EACH ATOMS
1  1  REF  H   1  0.5000
2  1  REF  C   1  1.0000
3  1  REF  H   1  0.5000
4  1  REF  O   1  1.0000
```

MVO 法指定ファイルを読み込まない場合は下記のログを表示し、原子ごとの MVO の係数は 1.0 を仮定し、参照分子の座標はリガンドの mol2 ファイルの座標を仮定する。

```
INFORMATION> MVO ASSUME ORIGINAL LIGAND TO REFERENCE MOLECULE
```



---

### 3. インストール方法

#### 3. 1. インストール方法

sievgene\_MV0yymmdd.tar.gz を、ユーザーが書き込み可能なディレクトリに配置してから、以下のコマンドを実行してください。(yymmdd には年月日を示す数字が入ります。)インストールには、GNU の FORTRAN コンパイラ (gfortran) もしくは、Intel の FORTRAN コンパイラ (ifort) が必要です

```
% tar -xzvf sievgene_MV0yymmdd.tar.gz
% cd sievgene_MV0yymmdd
```

次のコマンドは、どちらか一方を実行します。

```
% bin/install.sh          (GNU のコンパイラを使用する場合)
% bin/install.sh intel    (Intel のコンパイラを使用する場合)
```

#### 3. 2. テストプログラムの実行

次のコマンドで sievgene\_MV0 のテストプログラムを実行できます。

```
% bin/test_sievgene_MV0.sh
```

このコマンドを実行すると、サンプルデータを使ったテスト計算を開始します。このコマンドを実行することにより、sievgene\_MV0 が適切に動作することを確認することができます。

---

#### 4. サンプルの実行方法

sievgene\_MV0 は、以下のように、制御ファイルをプログラムにリダイレクションで渡して実行します。(実行前は、sievgene\_MV0yymmdd/にいることを想定しています。)

```
% cd sample  
% ../bin/sievgene_MV0 < sample.inp
```

既知化合物とドッキング対象化合物の原子の平均二乗距離 (RMSD) が近いほど、元のドッキングポーズを再現していることとなります。

-以上-