nfutil　version 1.02

Copyright 1995-2007, Foota Software (Noriyuki Futatsugi)

nfutil を使用した簡単な実行例をいくつか挙げておきます。ここに挙げた以外にも、任意の結合を PDB データで作成してそれを内部座標系データに反映させるなど、オプションを組み合わせることで様々な使い方ができます。

nfutil getdun

Amber CRD ファイルおよび TOP ファイルから指定した原子間の距離、角度、二面角を計算してファイルに出力します。

test.crd, test.top から、parmfile で指定した原子間の距離、角度、二面角の計算結果を 50 ステップ刻みに test.dat に出力する。ステップ数は NTWX と同値。

```
nfutil getdun –s 50 –p parmfile -r test.top -i test.crd -o test.dat –f SHOWSTEP DETAIL
```

test.crd, test.top から、parmfile で指定した原子間の距離、角度、二面角の計算結果を 5 個の分子構造ごとに test.dat に出力する。

```
nfutil getdun –k 5 -r test.top –p parfile -i test.crd -o test.dat
```

test01(Amber CRD ファイル), test02(Amber TOP ファイル)から、parmfile で指定した原子間の距離、角度、二面角の計算結果を test.dat に出力する。

```
nfutil getdun –p parfile -rt test01 TOP -it test02 CRD -o test.dat
```

Gaussian 出力ファイル test.log から、10 番目と 11 番目の原子間の距離および 15, 16, 17 番目の原子間の角度を標準出力に出力する。

```
nfutil getdun –m 10 11 –m 15 16 17 -i test.log
```

nfutil midmol

指定した構造データの中心とそれから一番近い・遠い原子およびその距離を求めます。

test.pdb の座標中心を求める。
```
nfutil midmol test.pdb
```

test.pdb の重心を求める。
```
nfutil midmol –b test.pdb
```

nfutil getsolv

指定した範囲内にある溶媒だけを構造データに出力します。

test.pdb 中の 120 番目の原子を中心に半径 12Å内の水分子だけを残して、output.pdb に書き出し。
```
nfutil getsolv -a 120 -r 12 -i test.pdb -o output.pdb
```

test.top および test.rst 中の 120 番目の原子を中心に半径 12Å内の水分子だけを残して、output.pdb に書き出し。
```
nfutil getsolv -a 120 -r 12 -i test.top test.rst -o output.pdb
```

test.pdb 中の GTP 分子から 8.5Å内の水分子だけを残して、output.pdb に書き出し。
```
nfutil getsolv -b GTP -r 8.5 -i test.pdb -o output.pdb
```

test.pdb 中の GTP 分子から 10Å内に存在するもっとも近い 10 個の水分子だけを残して、output.pdb に書き出し。
```
nfutil getsolv -b GTP –n 10 -i test.pdb -o output.pdb
```

test.pdb 中の 80 番目の原子、GTP 分子、MG 原子から 10Å内の水分子だけを残して、output.pdb に書き出し。
```
nfutil getsolv -a 80 -b GTP MG -r 10 -i test.pdb -o output.pdb
```

test.pdb 中の 200 番目の原子から 12Å内のメタノール分子(MOH)だけを残して、output.pdb に書き出し。
```
nfutil getsolv -a 200 -r 12 -x MOH -i test.pdb -o output.pdb
```

test.pdb 中の水分子をすべて取り除き、output.pdb に書き出し。
```
nfutil getsolv -i test.pdb -o output.pdb
```

test.pdb 中の溶質と溶質から 10Å内の水分子を output.pdb に書き出し。
```
nfutil getsolv –m -i test.pdb -o output.pdb
```

nfutil convert

さまざまな分子構造データの変換を行います。

test.top および test.rst から test.pdb を作成。
```
nfutil convert -i test.top test.rst -o test.pdb
```

test.top および test.crd の先頭の構造から test.pdb を作成。
```
nfutil convert -i test.top test.crd -o test.pdb
```

test.top および test.crd の最後の構造から test.pdb を作成。
```
nfutil convert -m -1 -i test.top test.crd -o test.pdb
```

test.top および test.crd の 50 番目の構造から test.pdb を作成。
```
nfutil convert -m 50 -i test.top test.crd -o test.pdb
```

test.log(Gaussian 出力ファイル)の最後の構造から test.pdb を作成。
```
nfutil convert -i test.log -o test.pdb
```

test.prep(Amber prep ファイル)から test.pdb を作成。
```
nfutil convert -i test.prep -o test.pdb
```

test.pdb から test.com(Gaussian 入力ファイル)を作成。
```
nfutil convert -i test.pdb -o test.com
```

test.pdb から test.com(Gaussian 入力ファイル)を作成。原子名に番号を付加しない。
```
nfutil convert –f NO_ATOMNUM -i test.pdb -o test.com
```

test.pdb から test.com(Gaussian 入力ファイル)を内部座標系で作成。
```
nfutil convert -f INT -i test.pdb -o test.com
```

test.pdb から結合情報を付加して test.mol2 を作成。
```
nfutil convert –c -i test.pdb -o test.mol2
```

prmcrd および prmtop から test(PDB ファイル)を作成。
```
nfutil convert -it prmtop TOP prmcrd RST -ot test PDB
```

test.top および test.crd の構造データを 20 ステップごとに抜き出し、test0000.pdb, test0001.pdb, test0002.pdb…のように複数の PDB ファイルを作成。
```
nfutil convert –a –s 20 -i test.top test.crd -o test.pdb
```

test.pdb から結合情報を付加せずに test.mol2 を作成。
```
nfutil convert -i test.pdb -o test.mol2 –f NO_CONNECT
```

test.pdb から原子タイプ・結合タイプ情報を付加せずに test.mol2 を作成。
```
nfutil convert -i test.pdb -o test.mol2 –f NO_TYPE
```

test.pdb から結合情報を付加して GOLD 用の test.mol2 を作成。
```
nfutil convert –c -i test.pdb -o test.mol2 –f GOLD NO_MERGE
```

test1.pdb を参照ファイルとして、test2.pdb に対して最小二乗法による重ね合わせを行い、test3.pdb に出力する。
```
nfutil convert –r test1.pdb -i test2.pdb -o test3.pdb
```

test1.pdb を参照ファイルとして、test2.pdb に対して重原子のみの最小二乗法による重ね合わせを行い、test3.pdb に出力する。
```
nfutil convert –r test1.pdb -i test2.pdb -o test3.pdb –f FIT_HEAVY
```

test1.pdb に対して重心を座標中心に移動し、test2.pdb に出力する。
```
nfutil convert –r test1.pdb -o test2.pdb
```

test1.pdb を参照ファイルとして、test2.pdb 内の 10～25 番の原子に対して最小二乗法による重ね合わせを行い、test3.pdb に出力する。
```
nfutil convert –r test1.pdb –ra 10-25 -i test2.pdb -o test3.pdb
```

test1.pdb を参照ファイルとして、test2.pdb 内の主鎖の原子に対して最小二乗法による重ね合わせを行い、test3.pdb に出力する。

```
nfutil convert –r test1.pdb –ra N,CA,C -i test2.pdb -o test3.pdb
```

nfutil nextstep

振動解析の結果から IRC 計算における初期構造を決定します。

test.log(Gaussian 出力ファイル)から test.com(Gaussian 入力ファイル)を作成。

```
nfutil nextstep -i test.log -o test.com
```

test.log から結合情報を付加して内部座標系で test.com を作成。

```
nfutil nextstep –c –f INT -i test.log -o test.com
```

nfutil ircdist

IRC 計算で得られた各構造間の IRC 距離を求めます。

test_ts.log, test_irc01.log, test_irc02.log, test_opt.log の 4 つのファイルについて IRC 距離を求める。IRC 計算データについては最初の構造を無視する。

```
nfutil ircdist -s -il test_ts.log –ii test_irc01.log test_irc02.log –il test_opt.log
```

test_ts.log, test_irc01.log, test_irc02.log, test_opt.log の 4 つのファイルについて IRC 距離を求める。IRC 計算データについては最初の構造を無視し、-1234.56kcal/mol をそれぞれの構造エネルギーから差し引く。詳細情報を出力する。

```
nfutil ircdist -sl –m –1234.56 -il test_ts.log –ii test_irc01.log test_irc02.log –il test_opt.log
```

nfutil prepfit

PREP 情報を PDB データ中のターゲットに適合させます。

input.prep を input.pdb の残基 MOL に適合させ、output.pdb に出力する。

```
nfutil prepfit –t MOL –p input.prep -i input.pdb -o output.pdb
```

input.prep を input.pdb の残基 MOL に適合させ、output.pdb に出力する。原子の並び順を逆にして適合判定させる。

```
nfutil prepfit –r –t MOL –p input.prep -i input.pdb -o output.pdb
```

input.prep を input.pdb の残基 MOL に適合させ、output.pdb に出力する。原子の並び順を結合順にする。最初の原子の番号を 10 とする。

```
nfutil prepfit –a 10 –t MOL –p input.prep -i input.pdb -o output.pdb
```

input.prep を input.pdb の残基 MOL に適合させ、output.pdb に出力する。原子の並び順を結合順にし(最初の原子はデフォルトの 1 番目の原子)、逆順にする。

```
nfutil prepfit –ar –t MOL –p input.prep -i input.pdb -o output.pdb
```

input.prep を input.pdb の残基 MOL に適合させ、結合情報を付加して output.pdb に出力する。

```
nfutil prepfit –t MOL –c –p input.prep -i input.pdb -o output.pdb
```

input.prep(残基名 MOL)を input.pdb の残基 MOL に適合させ、output.pdb に出力する。

```
nfutil prepfit –p input.prep -i input.pdb -o output.pdb
```

input.prep(残基名 MOL)を input.pdb の残基 MOL に適合させ、output.pdb に出力する。ただし、残基 MOL が不完全な構造であった場合は適合させない。

```
nfutil prepfit –d –p input.prep -i input.pdb -o output.pdb
```

input.prep(残基名 MOL)を input.pdb の残基 MOL に適合させ、output.pdb に出力する。出力の原子の並びは input.pdb のままにする。

```
nfutil prepfit –x –p input.prep -i input.pdb -o output.pdb
```

input.prep(残基名 MOL)を input.pdb の残基 MOL に適合させ、input.pdb の結合情報を保持したまま output.pdb に出力する。出力の原子の並びは input.pdb のままにする。

```
nfutil prepfit –xr –p input.prep -i input.pdb -o output.pdb
```

input.prep を input.pdb の 500 番と 501 番の残基に適合させ、output.pdb に出力する。

```
nfutil prepfit –t 500 501 –p input.prep -i input.pdb -o output.pdb
```

nfutil pbsaprep

PREP 情報から MM/PBSA 用パラメータを作成します。

atmtypenumbers データを作成するため、test1.prep と test2.prep を入力の PREP ファイルに指定し、パラメータを標準出力に出力する。

```
nfutil pbsaprep -a -i test1.prep test2.prep
```

atmtypenumbers データを作成するため、test1.prep と test2.prep を入力の PREP ファイルに指定し、atmtypenumbers をリファレンスファイルとして test.atm にパラメータを出力する。

```
nfutil pbsaprep -a -i test1.prep test2.prep -r atmtypenumbers -o test.atm
```

電荷データを作成するため、test1.prep と test2.prep を入力の PREP ファイルに指定し、my_amber94_delphi.crg をリファレンスファイルとして test.crg にパラメータを出力する。

```
nfutil pbsaprep -c -i test1.prep test2.prep -r my_amber94_delphi.crg -o test.crg
```

PARSE データを作成するため、test1.prep と test2.prep を入力の PREP ファイルに指定し、my_parse_delphi.siz をリファレンスファイルとして test.parse にパラメータを出力する。

```
nfutil pbsaprep -p -i test1.prep test2.prep -r my_parse_delphi.siz -o test.parse
```

nfutil conf

ペプチド情報のコンフォメーション情報(φ，ψなど)を得ます。

test.pdb から(φ,ψ)情報を標準出力に出力する。

```
nfutil conf –i test.pdb
```

test.crd, test.top から (φ,ψ)情報を得て、test.conf に一行ずつ出力する。

```
nfutil conf –w –r test.top –i test.crd –o test.conf
```

test.crd, test.top から分子構造５つ毎に(φ , ψ)情報を得て、test.conf にタイトルを入れずに一行ずつ出力する。
nfutil conf –wn –k 5 –r test.top –i test.crd –o test.conf

nfutil charge

分子全体の電荷を求めます。

test.pdb の電荷を求める。
nfutil charge –i test.pdb

test.crd, test.top から電荷を求め、各原子の内訳を表示する。
nfutil conf –d -i test.top test.crd