

# nfutil version 1.02

Copyright 1995-2007, Foota Software (Noriyuki Futatsugi)

分子動力学計算および分子軌道法計算のための解析ユーティリティプログラム

使い方:

```
nfutil [-hv] [-f file] analyzer-name [options...]
```

オプション:

```
-h          ヘルプ表示  
-v          バージョン表示  
-f file     パラメータファイルの設定 [nfutil_parm.dat]
```

解析ユーティリティ名のリスト (*analyzer-name*)

```
getdun      指定した原子の距離・角度・二面角を計算する。  
midmol      分子の中心を計算し、最も離れた原子および最も近い原子を求める。  
getsolv     任意の位置から指定した半径内の溶媒のみ取り出す。  
convert     複数の分子構造のフォーマットを相互に変換する。  
nextstep    振動解析から IRC 計算の初期構造を決定する。  
ircdist     IRC 計算で得られた各構造間の IRC 距離を求める。  
prepfite    PREP 情報を PDB データ中のターゲットに適合させる。  
pbsaprep    PREP 情報から MM/PBSA 用パラメータを作成する。  
conf        ペプチド結合のコンフォメーション情報を得る。  
charge      分子全体の電荷を求める。
```

環境変数 NFUTILPATH にパラメータファイルの置いてあるディレクトリを指定することができる。

例 1) UNIX(csh)

```
setenv NFUTILPATH /home/username/bin:/usr/local/bin
```

例 2) Windows

```
set NFUTILPATH=D:¥username¥bin;C:¥bin
```

パラメータファイルについて

空白行でパラメータの種類を区切る。#でコメント。

第 1 パラメータデータ: 結合長データ [原子種 原子種 結合長]

ただし、結合長データリストの先頭に[SCALE = 最大結合長比率(デフォルト: 1.15)]を記述する。また、[\* \* 結合長(デフォルト: 0.0)]で結合長の初期値を設定できる。

第2パラメータデータ: 半径パラメータ(atmtypenumbers) [番号 原子の特定]

第3パラメータデータ: PARSE パラメータ [原子種 半径]

## nfutil getdun

指定した原子の距離・角度・二面角を計算する。

使い方:

```
nfutil getdun [-hv] [-m <...>] [-n <N>] [-k <N>] [-s <N>] [-f <...>]
[-p parmfile] [-r reffile] [-rt reffile ref-type] -i datafile -it
datafile data-type [-o outfile]
```

オプション:

-h	ヘルプ表示
-v	バージョン表示
-m <...>	計算する原子の番号の指定
-n <number>	原子数の指定
-k <number>	構造データのスキップ数の指定 [1]
-s <number>	出力するステップ数の指定 (NTWX) [1]
-f <flags...>	フラグを指定
DETAIL	詳細情報を出力
SHOWSTEP	ステップ数を表示する
BOX	BOX パラメータを読み込み (Amber CRD/RST ファイル)
TAB	デリミタにタブを指定
-p parmfile	パラメータファイル (入力ファイル)
-r reffile	参照ファイル
-rt file type	参照ファイルおよびファイルタイプの指定
-i datafile	データファイル (入力ファイル)
-it file type	データファイルおよびファイルタイプの指定
-o outfile	出力ファイル (指定しなければ標準出力)

パラメータファイル(parmfile)のフォーマット

```
01 : [atom1] [atom2]
```

```

02 :      .
03 :      .
04 :      .
05 : [atom1] [atom2] [atom3]
06 : [atom1] [atom2] [atom3] [atom4]
07 : [atom1] : [atom1] ... [atomN]

```

```

01: distance between atom1 and atom2
05: atom1 - atom2 - atom3 angle
06: atom1 - atom2 - atom3 - atom4 dihedral
07: distances between atom1 and atom2..N

```

文字 # 以降は改行までコメントとなる。また、空行は無視される。

ファイルタイプ:

PDB file:	extension	PDB, ENT
	file-type	PDB, ENT
MOL2 file:	extension	MOL2
	file-type	MOL2
Amber CRD file:	extension	CRD
	file-type	CRD, AMBER_CRD
Amber RST file:	extension	RST
	file-type	RST, AMBER_RST
Amber TOP file:	extension	TOP
	file-type	TOP, AMBER_TOP
Amber PREP file:	extension	PREP
	file-type	PREP, AMBER_PREP
Gaussian input:	extension	COM
	file-type	COM, GAUSSIAN_IN
Gaussian output:	extension	LOG
	file-type	LOG, GAUSSIAN_OUT

## nfutil midmol

分子の中心を計算し、最も離れた原子および最も近い原子を求める。

使い方:

```
nfutil midmol [-hvb] PDB-file
```

オプション:

-h	ヘルプ表示
-v	バージョン表示
-b	重心を計算 (デフォルト: 座標中心を計算)

## nfutil getsolv

任意の位置から指定した半径内の溶媒のみ取り出す。

使い方:

```
nfutil getsolv [-hvm] [-a <...>] [-b <...>] [-r <radius>] [-n <number>]  
[-x <...>] [-f <...>] -i infile... -it infile infile-type... -o outfile
```

オプション:

-h	ヘルプ表示
-v	バージョン表示
-a <...>	溶媒分子抽出のための原子の番号を指定
-b <...>	溶媒分子抽出のための残基の番号または名前を指定
-r <radius>	指定した原子もしくは残基から溶媒分子を抽出するための半径を指定 [10.0]
-n <number>	指定した原子もしくは残基から-r で指定した半径内でもっとも近い <i>number</i> 個の原子を抽出 [指定なし]
-x <...>	抽出する溶媒分子を指定 [WAT HOH H2O]
-m	溶質原子を全て選択
-f <flags...>	フラグの指定
BOX	BOX パラメータを読み込み (Amber CRD/RST ファイル)
-i files...	入力ファイル
-it file type...	入力ファイルおよびファイルタイプの指定
-o file	出力 PDB ファイル

ファイルタイプ:

PDB file:	extension	PDB, ENT
	file-type	PDB, ENT
	target	first molecule
MOL2 file:	extension	MOL2
	file-type	MOL2
	target	first molecule
Amber CRD file:	extension	CRD
	file-type	CRD, AMBER_CRD
	target	first molecule
Amber RST file:	extension	RST
	file-type	RST, AMBER_RST
	target	first molecule
Amber TOP file:	extension	TOP
	file-type	TOP, AMBER_TOP
	target	first molecule
Amber PREP file:	extension	PREP
	file-type	PREP, AMBER_PREP
	target	first molecule
Gaussian input:	extension	COM
	file-type	COM, GAUSSIAN_IN
	target	first molecule
Gaussian output:	extension	LOG
	file-type	LOG, GAUSSIAN_OUT
	target	last molecule

## nfutil convert

複数の分子構造のフォーマットを相互に変換する。

使い方:

```
nfutil convert [-hvac] [-m <N>] [-n <N>] [-s <N>] [-f <...>] [-r
reffiles... -rt reffile reffile-type... -ra <...>] -i infile... -it
infile infile-type... -o outfile -ot outfile outfile-type
```

オプション:

-h		ヘルプ表示
-v		バージョン表示
-m <number>		任意の分子を選択 [0]
	0	デフォルト動作 (ファイルフォーマットに依存)
	1	最初の分子を選択
	N	N 番目の分子を選択
	-1	最後の分子を選択
-n <number>		原子数を指定
-s <number>		複数分子の場合、出力分子のステップ数を指定 [1]
-a		全ての分子を出力
-c		結合情報を作成
-f <flags...>		フラグを指定
	BOX	BOX パラメータを読み込み (Amber CRD/RST ファイル)
	BASE1	出力における初期添字を 1 に指定 (default: 0)
	STEP0	-s オプション指定時において、最初の分子を書き出し (デフォルト: 書き出さない)
	INT	内部座標系で出力
	NO_MERGE	入力ファイルから結合情報を継承しない
	USE_VAR	Gaussian 入力ファイルに変数を使用する
	NO_ATOMNUM	Gaussian 入力ファイルの原子名に番号を付けない
	STRICT	入力ファイル読み込みに厳密なフォーマットを適用する
	UPPER	出力ファイル内の文字列を大文字にする
	NO_CONNECT	結合情報を出力しない
	NO_TYPE	原子タイプ・結合タイプ情報を出力しない
	GOLD	GOLD 用の MOL2 フォーマットで出力する
	MOL2_NAME	MOL NAME フィールドにファイル名ではなく MOL2 名を書く
	FIT_ALL	最小二乗法の重ね合わせに原子をすべて選択する
	FIT_HEAVY	最小二乗法の重ね合わせに重原子のみ選択する
-r files...		最小二乗法による重ね合わせのための参照ファイル 入力ファイルが指定されない場合 (-i/-it オプションなし)、 分子の重心を座標中心に移動する
-rt file type...		参照ファイルおよびファイルタイプの指定
-ra <...>		最小二乗法の重ね合わせ時の原子を指定
	<N>   <N-N>	A) 原子番号<N>または<N-N>を選択
	_<N>   _<N-N>	B) 原子番号<N>または<N-N>を除外
	<A>   _<A>	C) 原子の名前<A>を選択または<A>を除外

A および B は積集合 (AND)  
 B および C は積集合 (AND)  
 A および C は和集合 (OR)  
 C の選択と除外は和集合 (OR)  
 A, B, C は和集合 (OR)

-i *files...*            入力ファイル  
 -it *file type ...*      入力ファイルおよびファイルタイプの指定  
 -o *file*                出力ファイル  
 -ot *file type*         出力ファイルおよびファイルタイプの指定

ファイルタイプ:

PDB file:	extension	PDB, ENT
	file-type	PDB, ENT
	target	first molecule (-m 1)
MOL2 file:	extension	MOL2
	file-type	MOL2
	target	first molecule (-m 1)
Amber CRD file:	extension	CRD
	file-type	CRD, AMBER_CRD
	target	first molecule (-m 1)
Amber RST file:	extension	RST
	file-type	RST, AMBER_RST
	target	first molecule (-m 1)
Amber TOP file:	extension	TOP
	file-type	TOP, AMBER_TOP
	target	first molecule (-m 1)
Amber PREP file:	extension	PREP
	file-type	PREP, AMBER_PREP
	target	first molecule (-m 1)
Gaussian input:	extension	COM
	file-type	COM, GAUSSIAN_IN
	target	first molecule (-m 1)
Gaussian output:	extension	LOG
	file-type	LOG, GAUSSIAN_OUT
	target	last molecule (-m -1)

## nfutil nextstep

振動解析から IRC 計算の初期構造を決定する。

使い方:

```
nfutil nextstep [-hv] [-q <FQ>] [-k <KM>] [-f <...>] -i infile {-o outfile  
| -ot outfile outfile-type}
```

オプション:

-h	ヘルプ表示
-v	バージョン表示
-q <FQ>	FQ 値 [900.0]
-k <KM>	KM 値 [0.1]
-c	結合情報を作成
-f <flags...>	フラグを指定
INT	内部座標系で出力
USE_VAR	Gaussian 入力ファイルに変数を使用する
-i <i>files...</i>	入力ファイル (振動解析による Gaussian 出力ファイル)
-o <i>file</i>	出力ファイル
-ot <i>file type</i>	出力ファイルおよびファイルタイプの指定

## nfutil ircdist

IRC 計算で得られた各構造間の IRC 距離を求める。

使い方:

```
nfutil ircdist [-hvslr] [-m <energy>] [-f <...>] {-ii | -ia | -if | -il}  
infile... {-iit | -iat | -ift | -ilt} infile infile-type...
```

オプション:

-h	ヘルプ表示
-v	バージョン表示
-s	IRC データファイルの最初の構造を出力しない
-l	詳細情報を出力



-r	IRC 距離を負の値として出力
-m <energy>	出力したエネルギー値から指定の数値を差し引く
-f <flags...>	フラグを指定
FIRST	第一のアルゴリズムを適用 (default)
SECOND	第二のアルゴリズムを適用
WHOLE	IRC 距離を初期構造間で出力 (default)
EACH	IRC 距離を各構造間で出力
ALL	IRC 距離を各構造間・初期構造間の両方を出力
NO_ENE	エネルギー値の出力をしない
-ii files...	入力ファイル (IRC 構造のみ)
-ia files...	入力ファイル (すべての構造)
-if files...	入力ファイル (最初の構造のみ)
-il files...	入力ファイル (最後の構造のみ)
-iit file type...	入力ファイルおよびファイルタイプの指定 (IRC 構造のみ)
-iat file type...	入力ファイルおよびファイルタイプの指定 (すべての構造)
-ift file type...	入力ファイルおよびファイルタイプの指定 (最初の構造のみ)
-ilt file type...	入力ファイルおよびファイルタイプの指定 (最後の構造のみ)

## nfutil prepfite

PREP 情報を PDB データ中のターゲットに適合させる。

使い方:

```
nfutil prepfite [-hvxcdb ] [-a [<N>]] [-t <...>] -p prep-file -i infile
-o outfile
```

オプション:

-h	ヘルプ表示
-v	バージョン表示
-t <...>	指定の残基番号もしくは残基名のデータと適合させる
-x	入力 PDB ファイル側の原子並びにする
-c	結合情報を作成
-b	入力 PDB ファイルの結合情報を保持
-d	不完全な分子構造を適合させない
-r	ターゲットを適合させるための原子の並びを逆順にする

<code>-a</code> [ <i>&lt;number&gt;</i> ]	ターゲットに適合させるための原子の並びを結合順にし、並びの最初の原子の番号を指定 [1]
<code>-p</code> <i>file</i>	入力 PREP ファイル
<code>-i</code> <i>file</i>	入力 PDB ファイル
<code>-o</code> <i>file</i>	出力 PDB ファイル

## nfutil pbsaprep

PREP 情報から MM/PBSA 用パラメータを作成する。

使い方:

```
nfutil pbsaprep [-hv] [-a | -c | -p] [-r ref-file] -p prep-files... [-o outfile]
```

オプション:

<code>-h</code>	ヘルプ表示
<code>-v</code>	バージョン表示
<code>-a</code>	半径データ ( <i>atmtypenumbers</i> ) を生成
<code>-c</code>	電荷データを生成
<code>-p</code>	PARSE データを生成
<code>-r</code> <i>file</i>	リファレンスファイル
<code>-i</code> <i>files...</i>	入力 PREP ファイル
<code>-o</code> <i>file</i>	出力ファイル

パラメータファイル(*nfutil\_parm.dat*)の第 2 パラメータデータにより、原子の特定を行う。

例: 10 (3C(O,\*,\*),3C(!H,!H,!H))

10 番に指定し、3 本の手を持つ c で、結合している原子は O と任意(\*)の 2 つの原子。もしくは、3 本の手を持つ c で、結合している原子は H 以外(!H)の任意の 3 つの原子。

## nfutil conf

ペプチド結合のコンフォメーション情報を得る。

使い方:

```
nfutil conf [-hvwn] [-k <N>] [-f <...>] [-r reffile] [-rt reffile  
ref-type] -i datafile -it datafile data-type [-o outfile]
```

オプション:

-h	ヘルプ表示
-v	バージョン表示
-w	出力データを一行に表示
-n	タイトルの非表示
-k <number>	構造データのスキップ数の指定 [1]
-f <flags...>	フラグを指定
DETAIL	詳細情報を出力
BOX	BOX パラメータを読み込み (Amber CRD/RST ファイル)
TAB	デリミタにタブを指定
-r <i>reffile</i>	参照ファイル
-rt <i>file type</i>	参照ファイルおよびファイルタイプの指定
-i <i>datafile</i>	データファイル (入力ファイル)
-it <i>file type</i>	データファイルおよびファイルタイプの指定
-o <i>outfile</i>	出力ファイル (指定しなければ標準出力)

ファイルタイプ:

PDB file:	extension	PDB, ENT
	file-type	PDB, ENT
MOL2 file:	extension	MOL2
	file-type	MOL2
Amber CRD file:	extension	CRD
	file-type	CRD, AMBER_CRD
Amber RST file:	extension	RST
	file-type	RST, AMBER_RST
Amber TOP file:	extension	TOP
	file-type	TOP, AMBER_TOP
Amber PREP file:	extension	PREP
	file-type	PREP, AMBER_PREP
Gaussian input:	extension	COM
	file-type	COM, GAUSSIAN_IN

Gaussian output:      extension      LOG  
                         file-type      LOG, GAUSSIAN\_OUT

## nfutil charge

分子全体の電荷を求める。

使い方:

```
nfutil charge [-hvd] [-f <...>] -i datafiles... -it datafiles  
data-types...
```

オプション:

-h                      ヘルプ表示  
-v                      バージョン表示  
-d                      総電荷の内訳の表示  
-f <flags...>         フラグを指定  
                      BOX                BOX パラメータを読み込み (Amber CRD/RST ファイル)  
-i datafiles...        データファイル (入力ファイル)  
-it files types...     データファイルおよびファイルタイプの指定

ファイルタイプ:

PDB file:              extension      PDB, ENT  
                         file-type      PDB, ENT  
MOL2 file:             extension      MOL2  
                         file-type      MOL2  
Amber CRD file:        extension      CRD  
                         file-type      CRD, AMBER\_CRD  
Amber RST file:        extension      RST  
                         file-type      RST, AMBER\_RST  
Amber TOP file:        extension      TOP  
                         file-type      TOP, AMBER\_TOP  
Amber PREP file:       extension      PREP  
                         file-type      PREP, AMBER\_PREP  
Gaussian input:        extension      COM  
                         file-type      COM, GAUSSIAN\_IN

Gaussian output:	extension	LOG
	file-type	LOG, GAUSSIAN_OUT