

intDesc-LP ver1.1

インストールマニュアル

理化学研究所
計算科学研究センター
HPC/AI 駆動型医薬プラットフォーム部門
2023 年 11 月 03 日

目次

1. intDesc-LP_ver1.1 パッケージ概要	3
1.1 intDesc-LP で扱われている相互作用の定義	3
2. インストール	4
2.1 稼働環境条件	4
2.2 インストール方法	4
2.3 インストールテスト	5

1. intDesc-LP_ver1.1 パッケージ概要

intDesc-LP プログラムアーカイブ(intDesc-LP_ver1.1.zip)には以下のファイルが含まれる。

```
<intDesc-LP_ver1.1>
├─ <install_test> (本マニュアル参照：2.3章)
│   ├── run_test.sh
│   └── data.zip
├─ <sample>
│   ├── 3aox_prep0.mol2 (ユーザーマニュアル参照：3.1章)
│   ├── ligand_select.yaml (ユーザーマニュアル参照：3.2章)
│   ├── vdw_radius.yaml (ユーザーマニュアル参照：3.3章)
│   ├── param.yaml (ユーザーマニュアル参照：3.4章)
│   └── priority.yaml (ユーザーマニュアル参照：3.5章)
├─ interaction.py (サブスクリプト)*
├─ interaction_descriptor.py (メインスクリプト)*
├─ mol2.py (サブスクリプト)*
├─ my_math.py (サブスクリプト)*
├─ group.yaml** (システムファイル)*
├─ water_definition.txt (ユーザーマニュアル参照：3.6章)
└─ requirements.txt (本マニュアル参照：2.1章)
```

*ユーザーによる編集を行わないファイルである。

**group.yaml は各相互作用とそのグループを一覧化したシステムファイルである。主にファイル出力時に参照されるもので、特にグループ名は「Interaction Sum list ファイル」のグループ名を表す。

1.1 intDesc-LP で扱われている相互作用の定義

現在投稿中の以下の論文のサプリメントを参照のこと。

Ohta, M. et al., “intDesc: Software for comprehensive and precise identification, visualization, and enumeration of ligand-protein interactions” (Submitted)

2. インストール

2.1 稼働環境条件

下記ソフトウェアで動作する。

- python 3 系 (3.8.5) ※1
- python ライブラリ
 - numpy (1.12.4) ※1
 - networkx (2.6.3) ※1
 - pyyaml (6.0) ※1
 - biopandas (0.2.9) ※1
 - mdanalysis (0.20.1) ※1

※1 開発時のバージョン

同梱の「requirements.txt」を使用し、必要なライブラリのインストールが可能。
実行コマンドは以下の通り。

```
pip install -r requirements.txt
```

※利用環境に応じて「pip3」コマンドを使用すること。

2.2 インストール方法

「intDesc-LP_ver1.1.zip」を任意のディレクトリに展開する。

アーカイブの展開コマンドは下記の通り。

```
unzip intDesc-LP_ver1.1.zip
```

2.3 インストールテスト

プログラム中の「install_test」を使用し、出力結果の再現性テストを行う。

【実施手順】

1. 「install_test」ディレクトリに移動
2. 以下コマンドを実行

```
bash run_test.sh
```

コマンド実行すると、テストが開始される。テスト完了後、出力ファイルごとに再現性がチェックされる。再現性が認められる場合は、下記のように「OK」と出力される。

```
L_IT009.pml: OK
L_IT009_dup.pml: OK
L_IT009_dup_interaction_count_list.csv: OK
L_IT009_dup_interaction_sum_list.csv: OK
L_IT009_dup_on14.pml: OK
L_IT009_dup_on14_interaction_count_list.csv: OK
...
```

再現性が認められない場合は、下記のように「FAILED」と出力される。

```
L_IT019.csv: OK
L_IT019.pml: OK
L_IT019.txt: FAILED
md5sum: WARNING: 1 computed checksum did NOT match
```