

wtune

概要

水分子を溶質からの特定の距離、および特定の数で切り出すプログラム

使用方法

```
$ wtune.py [-h] [-V] -i INPUT_FILE -o OUTPUT_FILE (-d  
DISTANCE | -n NUMBER) [-ms MASK_SOLUTE] [-mv  
MASK_SOLVENT] [-S SEPARATE_MODE] [-O]
```

- optional arguments:
 - **-h, --help**
ヘルプメッセージを表示して終了する。
- View mode:
 - **-V, --view**
全原子と水分子数を表示して終了する。
- Strip mode:
 - **-i INPUT_FILE, --input INPUT_FILE**
.pdb ファイル (Input)

- ***-o OUTPUT_FILE, --output OUTPUT_FILE***
pdb ファイル (Output)
- ***-d DISTANCE, --distance DISTANCE***
溶質からの距離
- ***-n NUMBER, --number NUMBER***
水分子数
- ***-ms MASK_SOLUTE, --mask_solute MASK_SOLUTE***
溶質分子の Ambermask
- ***-mv MASK_SOLVENT, --mask_solvent MASK_SOLVENT***
溶媒分子の Ambermask
- ***-S SEPARATE_MODE, --separate SEPARATE_MODE***
溶媒分子を原子、残基、分子レベルで削除する
(Default: Residue)
- ***-0***
プロンプトを出さずに上書きする (Default: False)。

動作要件

- Python3
 - numpy
 - scipy
 - tqdm

License

This software is released under the MIT License, see LICENSE.

Authors

- Tatsuya Ohyama

ChangeLog

Ver. 4.7 (2021-07-14)

- 公開した。
- PEP8 スタイルにした。