

# wtune

## 概要

溶媒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

### View mode

全原子と水分子数を表示して終了する。

```
$ wtune.py view [-h] -i INPUT.pdb
```

- -h, --help  
ヘルプメッセージを表示して終了する。
- -i INPUT.pdb  
.pdb ファイル (Input)

### Extract mode

溶媒分子を距離あるいは数で切り出す。

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

- -h, --help  
ヘルプメッセージを表示して終了する。
- -i INPUT.pdb  
.pdb ファイル (Input)
- -o OUTPUT\_FILE, --output OUTPUT\_FILE  
.pdb ファイル (Output)
- -d DISTANCE, --distance DISTANCE  
切り出す溶媒分子を溶質からの距離で指定
- -n NUMBER, --number NUMBER  
切り出す溶媒分子を溶質から近い順に分子数で指定
- -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 (Default: `:SOL,WAT,HOH`)
- `-S SEPARATE_MODE, --separate SEPARATE_MODE`  
切り出す対象モード (`atom` or `residue`) (Default: `residue`)
- `-O`  
プロンプトを出さずに上書き

## 動作要件

- Python3
  - numpy
  - scipy
  - parmed

## License

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

## Authors

- Tatsuya Ohyama

## ChangeLog

### Ver. 5.1 (2021-09-22)

- `-mv`, `-ms` で指定されていない原子が消えてしまうバグを修正した。

### Ver. 5.0 (2021-09-21)

- プログラム全体を書き直した。
  - 分子のトポロジーの処理を `native` の `parmed` に変更した。
  - 不要な独自モジュールを削除した。
  - `Number` モードが動作しないバグを修正した。
  - `View mode` と `Extract mode` をサブコマンド化した。

### Ver. 4.8 (2021-07-14)

- バージョン管理システムを `mercurial` から `git` へ変更した。

## **Ver. 4.7 (2021-07-14)**

- 公開した。
- PEP8 スタイルにした。