

Phone2SAS

version 1.0, April 2023

Description and Usage

The “phone2sas.py” computes the distance distribution function, $P(r)$, and the small-angle scattering, $I(q)$, for a given 3D data in polygon file format (.ply). (1) The 3D data file and (2) D_{\max} , which is the maximum length of the SAS object (see also Methods in the original paper), are mandatory. D_{\max} should be custom-tuned to scale the 3D-scanned model to the molecular size. The current version of phone2sas.py supports python3 and requires pre-installation of Numpy (<https://numpy.org>) and Open3D (<http://www.open3d.org>). The operation was tested using python3.7, Numpy 1.21.6, and Open3D 0.14.1.

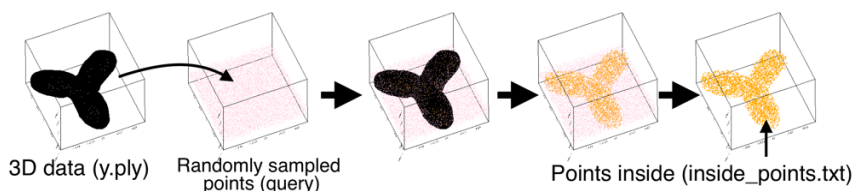
Example 1. Executing phone2sas.py using your computer

The following is an example of the usage of phone2sas.py for the example 3D data (y.ply). By using the shell on your computer (e.g., “terminal” on macOS, “command prompt” on Windows, and “bash” on Linux), type

```
python3 phone2sas.py y.ply --dmax 160.0
```

“--dmax 160.0” defines 160.0 Å for D_{\max} , the maximum length of the SAS object. The number of Monte Carlo sampling can be modified using “--rp” option (default: 10000): e.g., “--rp 30000.” “python3 phone2sas.py -h” would be helpful.

phone2sas.py generates $P(r)$, $I(q)$, and Kratky ($q^2I(q)$) data files named 'pr.txt', 'iq.txt', and 'kratky.txt', respectively, where the column 1 is r or q . The points' coordinates inside the object are stored as 'inside_points.txt', which can be visualized using a 3D graphing software.



Example 2. Executing phone2sas.py using Google Colaboratory

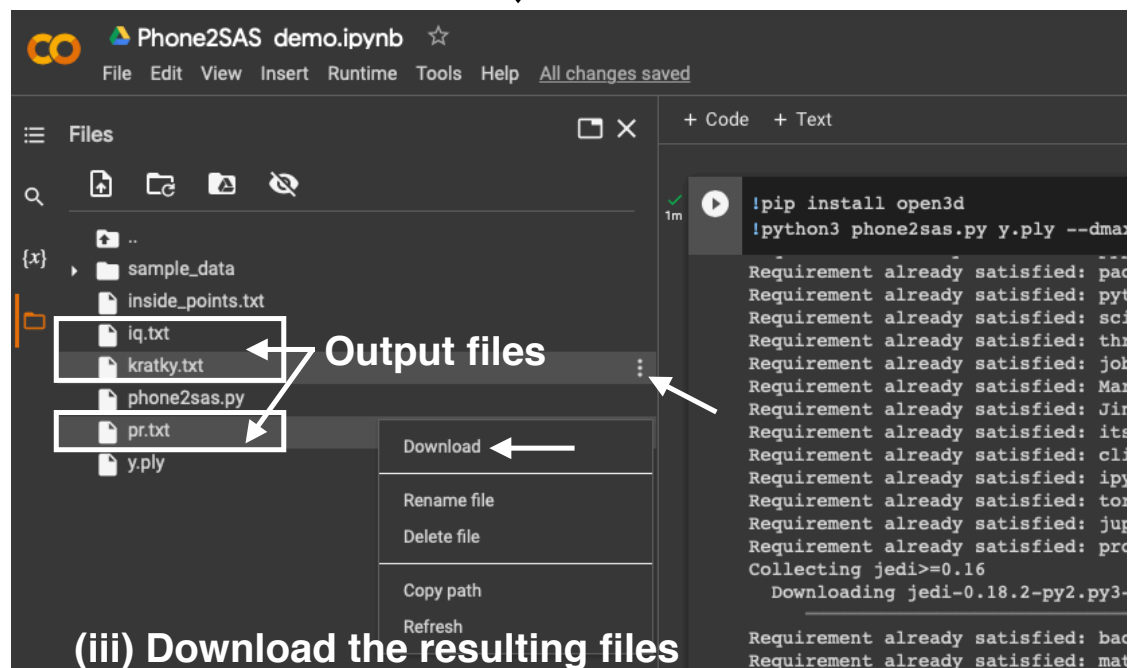
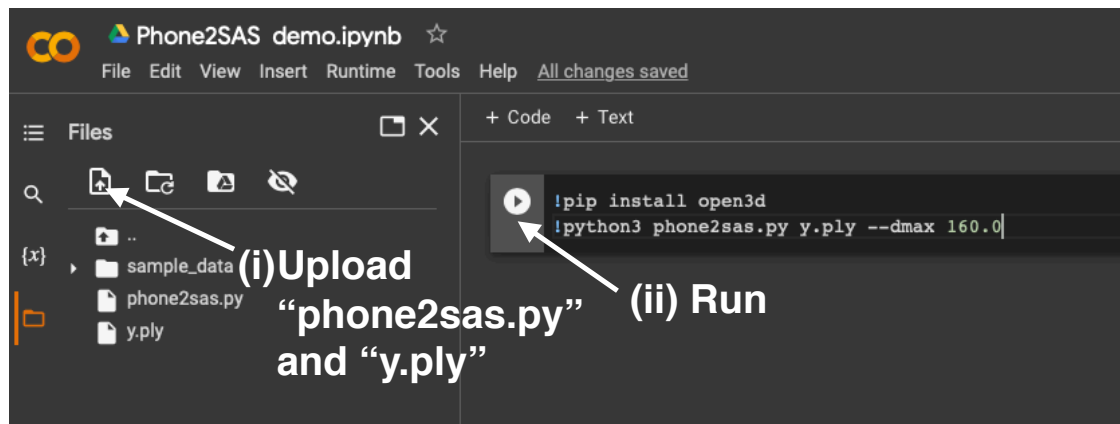
An alternative and easier way to execute phone2sas.py is to use the Python environment prepared by Google Colaboratory (<https://colab.research.google.com>) via a web browser. For example,

- (i) upload “phone2sas.py” and “y.ply”
- (ii) run the following:

```
!pip install open3d
```

```
!python3 phone2sas.py y.ply --dmax 160.0
```

(iii) Download the resulting files ('pr.txt', 'iq.txt', and 'kratky.txt'; see also **Example 1**)



Please send feedback to this address:

h_imamura@nagahama-i-bio.ac.jp

or

nawynos@yahoo.co.jp

Phone2SAS version 1.0

“phone2sas.py”は、任意の3Dデータ（拡張子.ply）から距離分布関数 $P(r)$ と小角散乱 $I(q)$ を計算するプログラムです。3Dデータの用意と最大長（ D_{\max} ）の設定が必須です。 D_{\max} は3Dモデルのサイズを分子サイズにスケーリングするために設定します。phone2sas.pyの現バージョンはpython3で動作します。Numpy (<https://numpy.org>)とOpen3D (<http://www.open3d.org>)が予めインストールされている必要があります。python3.7, Numpy 1.21.6, Open3D 0.14.1の組み合わせで動作確認がされています。

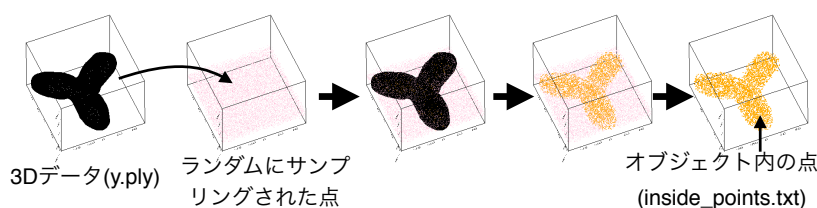
実行例 1. ローカルのコンピュータ上でphone2sas.pyを実行する

サンプル3Dデータ(y.ply)での実行例を示します。コンピュータのシェル(macOSの「ターミナル」、Windowsの「コマンドプロンプト」、Linuxの「bash」など)上で

```
python3 phone2sas.py y.ply --dmax 160.0
```

と入力します。“--dmax 160.0”は D_{\max} を160.0 Åに設定することを意味します。Monte Carloサンプリング数は“--rp”オプションで変更することができます(デフォルトは10000)。例えば，“--rp 30000”とします。サンプリング数が多い方が精度は上がりますが、計算時間は長くなります。これらのヘルプは“python3 phone2sas.py -h”でも参照できます。

phone2sas.pyを実行すると、 $P(r)$, $I(q)$, Kratky ($q^2 I(q)$)のデータファイルが生成されます。それぞれ'pr.txt', 'iq.txt', 'kratky.txt'と名前が付けられています。'pr.txt'の1列目は r , 'iq.txt'と'kratky.txt'の1列目は q です。3Dオブジェクト内のランダムな点群の座標は'inside_points.txt'に保存されており、適当な3Dグラフソフトで描画することができます。



実行例 2. Google Colaboratory上でphone2sas.pyを実行する

Google Colaboratory (<https://colab.research.google.com>)のPython環境を利用すれば、Webブラウザ上で簡単にphon2sas.pyを実行することができます。例えば

- (i) “phone2sas.py”と“y.ply”（サンプル3Dデータ）をアップロードする
- (ii) 下記を実行する（冒頭の“!”は必要）

```
!pip install open3d
```

```
!python3 phone2sas.py y.ply --dmax 160.0
```

(iii) 実行結果のファイル('pr.txt', 'iq.txt', and 'kratky.txt'; 実行例 1の説明参照)をダウンロードする

