

trr2nc

概要

Gromacs のトラジェクトリファイルを Amber のトラジェクトリファイルに変換するプログラム

使用方法

```
$ trr2nc.py [-h] -s INPUT.tpr -x INPUT.<trr|xtc|gro> -o OUTPUT.<nc|mdcrd|xtc> -t INPUT.top -p OUTPUT.prmtop [-sc TEMP_DIR] [--separate-mol MOL_NAME [MOL_NAME ...]] [-b START_TIME] [-e END_TIME] [--offset OFFSET] [-mc CENTER_MASK] [-ms STRIP_MASK] [-O]
```

- Basic options:

- -h, --help
ヘルプメッセージを表示して終了する。
- -s INPUT.tpr
Gromacs の .tpr ファイル (Input)
- -x INPUT.<trr|xtc|gro>
Gromacs のトラジェクトリファイル (Input)
- -o OUTPUT.<nc|mdcrd|xtc>
Amber のトラジェクトリファイル (Output)
- -t INPUT.top
Gromacs のトポロジーファイル (Input)
- -p OUTPUT.prmtop
Amber のトポロジーファイル (Output)
- -sc TEMP_DIR
一時ファイルを置くためのディレクトリ (Default: カレントディレクトリ)
- --separate-mol MOL_NAME [MOL_NAME ...]
.top ファイル内の [molecules] の分子を 1 つずつ分割するための分子名 (周期境界条件対策)
- -O

プロンプトを出さずに上書きする。

- Gromacs option:
 - -b START_TIME
読み込み開始フレームインデックス (start from 0)
 - -e END_TIME
読み込み終了フレームインデックス (start from 0)
 - --offset OFFSET
出力するフレームの間隔 (Default: 1)
- cpptraj option:
 - -mc CENTER_MASK
トラジェクトリの中心に配置する原子群の Ambermask
 - -ms STRIP_MASK
トラジェクトリから削除する原子群の Ambermask

動作要件

- Python3
 - netCDF4
 - numpy
 - parmed
 - termcolor
 - tqdm

License

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

Authors

- Tatsuya Ohyama

ChangeLog

- Ver. 17.10 (2021-10-12)
 - AmberTools 17 以降のインストール環境で、.xtc ファイルの出力および中間ファイルとして .xtc ファイルを出力するようにした。
 - 使用モジュールを整理した。
- Ver. 17.9 (2021-07-14)
 - モジュール内のスタイルも PEP8 スタイルに変更した。

- Ver. 17.8 (2021-07-14)
 - PEP8 スタイルに変更した。
 - mercurial から git に変更した。
 - README.md を追加した。