

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] [--gmx COMMAND_GMX] -mc CENTER_MASK [-ms STRIP_MASK] [--cpptraj COMMAND_CPPTRAJ] [-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)

- -0
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)
 - --gmx COMMAND_GMX
gmx コマンドパス (Default: 自動検出)
- 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
 - --cpptraj COMMAND_CPPTRAJ
cpptraj コマンドパス (Default: 自動検出)

動作要件

- Python3
 - numpy
 - parmed
 - termcolor

License

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

Authors

- Tatsuya Ohyama

ChangeLog

Ver. 19.1 (2022-01-24)

- 中間ファイル `mdout.mdp` が残るバグを修正した。

Ver. 19.0 (2021-12-06)

- `-ms` オプションを指定した際に構造が崩れる致命的なバグを修正した。

Ver. 18.0 (2021-10-27)

- `cpptraj` と `gmx` コマンドを指定できるようにした。
- `.xtc` 出力時に構造がおかしくなる致命的なバグを修正した。

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。