

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> -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]
```

- optional arguments:

- **-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>**

- 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
 - pathlib
 - pickle
 - termcolor
 - tqdm

License

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

Authors

- Tatsuya Ohyama

ChangeLog

- 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。