

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
読み込み開始時間 (ps) (start from 0)
 - -e END_TIME
読み込み終了時間 (ps) (start from 0)
 - -tu
時間の単位 (Default: ps)
 - -skip 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)
 - --multi
各フレーム毎に .pdb ファイルに出力する。

pdb_separator.py

トラジェクトリを .pdb ファイルに変換する際に誤って一つのファイルにまとめてしまった (--multi オプションを付け忘れた) 場合の救済プログラム

使用方法

```
$ pdb_separator.py [-h] -i INPUT.pdb -o OUTPUT.pdb [-0]
```

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

入力ファイル

- -o OUTPUT.pdb
出力ファイルの接頭辞
- -0
プロンプトを出さずに上書きする。

動作要件

- Python3
 - numpy
 - parmed
 - termcolor

License

This software is released under [the MIT License](#).

Authors

- Tatsuya Ohyama

ChangeLog

Ver. 19.3 (2022-01-25)

- pdb_separator.py を追加した。

Ver. 19.2 (2022-01-24)

- --multi オプションを追加した。

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。