

# 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
  - tqdm
  - termcolor

## License

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

## Authors

- Tatsuya Ohyama

## ChangeLog

- 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。