[Molecular dynamics parameters (.mdp options) - GROMACS 2024.3 documentation](https://manual.gromacs.org/current/user-guide/mdp-options.html" \l "output-control)

[GROMACS .mdp 选项翻译及笔记\_gromacs mdp文件-CSDN博客](https://blog.csdn.net/CocoCream/article/details/126116755)

压缩轨迹文件（xtc）

-世界玩家-:

跑完后做结构分析 就是看动画吗？还需要做什么样的分析

-世界玩家-:

哪些文件是必要的？因为我感觉1000ns的output文件会很大，有些文件是否可以不输出或者减少记录的频率？

Kevin:

先分析最简单的RMSD和RMSF

Kevin:

最大的文件是轨迹 只需要减少输出频率就好 不需要那么frequent的output

Kevin:

[链接]mkrun/Gromacs/standard/mdp at master · skblnw/mkrun · GitHub

Kevin:

可以参考我用的mdp

-世界玩家-:

好的

Kevin:

通常都直接不输出trr 只输出xtc

Kevin:

trr是双精度 还可能会有除了坐标以外例如速度等信息 大小是xtc的一倍

Kevin:

在一般分析下不需要