

mcgen kasutajajuhend

Heiki Kasemägi, Endel Soolo, Alvo Aabloo
ja
Josh Thomas

February 9, 2005

Contents

1	<i>mcgen</i>	3
2	Disclaimer	3
3	Tööpõhimõte	3
4	Programmi struktuur	4
4.1	Programmi üldine struktuur	4
4.2	Sisendfailide lugemine	4
4.3	Genereeritava struktuuri koostamine sisendinfo põhjal	5
5	Sisend	6
5.1	<i>mcgen</i> käsurida	6
5.2	Tüübikirjeldused: <i>defs.ini</i>	7
5.3	<i>uniti</i> kirjeldus: <i>units.ini</i>	9
5.4	Ahelate struktuur: <i>chains.ini</i>	12
5.5	Jõuväli: <i>field.ini</i>	16
5.6	Kaugmõju interaktsioonid: <i>vdw.ini</i>	23
5.7	Üldised sisendparameetrid: <i>params.ini</i>	24
5.8	Juhuarvude generaator: <i>randome.sed</i>	25
6	Väljund	26
6.1	Logifail: <i>mcgen.log</i>	26
6.2	XYZ: <i>mcgen.xyz</i>	26
6.3	DLPOLY CONFIG: <i>mcgen.CONFIG</i>	26
6.4	DLPOLY FIELD: <i>mcgen.FIELD</i>	27
7	Muudatuste tegemine	27
7.1	Dihedraalfunktsiooni lisamine	27
7.2	Kaugmõju energiafunktsiooni lisamine	27

1 mcgen

mcgen on Metropolis Monte Carlo algoritmil põhinev programm polümeeriahelate juhuslike konfiguratsioonide genereerimiseks. Programmi autoriteks on Heiki Kasemägi, Endel Soolo, Alvo Aabloo ja Josh Thomas. **mcgen** eelkäijateks ja eeskujuks on Mattias Klintenbergi samal algoritmil põhinev C-s kirjutatud programm ja Heiki Kasemägi, Andi Hektori, Mattias Klintenbergi, Alvo Aabloo ja Josh Thomase poolt kirjutatud programm *mcpoly*. **mcgen** on *mcpoly* põhjalik edasiarendus: täielikult on muutunud programmi sisend-väljund; ahelate genereerimise tehnikat on täiustatud ja edasiarendatud nt. kõrvalahelate lisamise näol. Programmi arendatakse Tartu ja Uppsala Ülikoolide koostöös. Programmi arendamisele on finantsiliselt kaasa aidanud Nordic Energy Research (NEFP), Kami Research Foundation (KFS) ja Eesti Teadusfond (ETF).

mcgen ei kuulu hetkel ühegi senise üldiselt teadaoleva litsentsi alla; litsentsina ja programmi kasutustingimustena tuleb vaadelda käesolevas dokumendis toodud tingimusi. Programmi on saadaval autorite käest. Teadaolevalt pole programmile hinda kehtestatud. Koodi võib vabalt muudatusi teha, aga need muudatused tuleb saata tagasi autoritele. Programmi edasine levitamine ilma autorite nõusolekuta on keelatud. Programmi, programmi koodi või selle osade kommertskasutamine on ilma autorite kirjaliku nõusolekuta keelatud.

mcgen eesmärk on pakkuda akadeemiliks uurimistööks odavamat alternatiivi analoogsetele kommertsprogrammidele. Kasutajal on otsene juurdepääs koodile ja võimaluse teha muudatusi ning lisada uusi omadusi vastavalt oma vajadustele. Sellised muudatused programmi koodi on igati teretulnud eeldusel, et need lisatud/muudetud kood järgib programmis kasutatavat üldist programmeerimisstiili ja et kõik muudatused oleksid nõuetekohaselt dokumenteeritud.

2 Disclaimer

Ükski **mcgen** autoritest ei garanteeri, et programm ei sisalda vigu. Samuti ei võta autorid endale mingit vastutust programmi kasutamisel tekkida võivate tark- ja riistvarakahjustuste eest. **mcgen** kasutamine ilma tasuta kehtib vaid akadeemilise uurimisöö kohta. Kommertskasutamine on võimalik alles pärast läbirääkimisi autoritega. Kasutajatel pole lubatud levitada programmi kolmandatele osapooltele.

3 Tööpõhimõte

mcgen 's kasutatakse polümeeriahela genereerimiseks Monte Carlo meetodit. Keskne juurdelisatav üksus on *unit*, mis koosneb 1...N aatomist. *uniti* iga juurdelisatava aatomi jaoks on vaja teada järgmisi parameetreid:

- kaugus eelmisest aatomist;
- nurk kahe viimase aatomiga;
- dihedraalnurk kolme viimase aatomiga;
- kolme viimase aatomi koordiaadid.

Kaugus, nurk ja dihedraalnurk võivad olla fikseeritud, aga neid saab ka juhuslikult etteantud piirides genereerida. Üldjuhul on soovitatav lasta vähemasti dihedraalnurk programmil juhuarvude põhjal genereerida.

Juurdelisatava *uniti* aatomite genereerimisel kontrollitakse esmalt, et genereeritud aatom ei sattuks mõnele teisele aatomile liiga lähedale või isegi kattuks sellega. Kui midagi sellist juhtub, genereeritakse kohe uued koordiaadid ja teostatakse järjekordne kontroll kuni uus aatom on piisavalt kaugel teistest aatomitest.

Kui *uniti* kõik aatomid on geomeetriliselt genereeritud, siis rakendub Monte Carlo meetod, mis seisneb lühidalt alljärgnevas:

1. arvutatakse saadud uue konfiguratsiooni koguennergia E ;
2. saadud koguennergia lahutatakse eelmise konfiguratsiooni koguennergiast E_0 : $\Delta E = E - E_0$;
3. kui uue konfiguratsiooni energia on madalam eelmise konfiguratsiooni energiast, s.t. $\Delta E \leq 0$, siis aksepteeritakse saadud konfiguratsioon koheselt ja see saab uue konfiguratsiooni aluseks;

4. kui saadud konfiguratsiooni energia on suurem eelmise konfiguratsiooni energiast, s.t. $\Delta E > 0$, siis võrreldakse Boltzmanni faktoriga $\exp(-\Delta E/kT)$ (k - Boltzmanni konstant, T - simulatsiooni temperatuur Kelvinites) juhusliku arvuga vahemikus $0 \dots 1$:

- kui Boltzmanni faktor on suurem sellest juhuarvust, siis aktsepteeritakse uut konfiguratsiooni, aktsepteeritavuse tingimuseks on $\text{rand}(0,1) \leq \exp(-\Delta E/kT)$;
- kui Boltzmanni faktor on väiksem sellest juhuarvust, siis uut konfiguratsiooni ei aktsepteerita ja alustatakse uuesti *uniti* genereerimist eelmise konfiguratsiooni alusel.

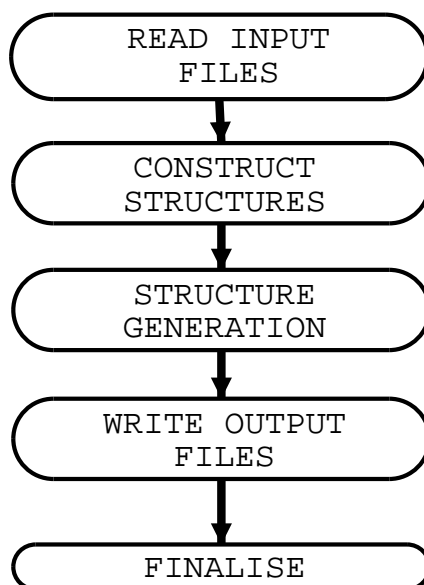
Et ülalkirjedatud meetodil ei leita mitte kõige madalama energiaga konfiguratsioon, vaid esimene lokaalne miinimum, siis teatud tingimustel võib genereerimine joosta ummikusse, s.t. isegi peale suurt proovimiste arvu ei suudeta vajalik hulk *unit*'eid ära genereerida. Sellise olukorra leevendamiseks rakendatakse tagasivõtmise mehhanismi, mille puhul peale fikseeritud proovide arvu hüljatakse etteantud vahemikus juhuslik arv viimaseid *unit*'eid ja alustatakse uuesti genereerimist.

4 Programmi struktuur

4.1 Programmi üldine struktuur

Programmi üldine struktuur on skemaatiliselt joonisel 1.

Figure 1: Programmi struktuur



4.2 Sisendfailide lugemine

Sisendfailide lugemine on skemaatiliselt joonisel 2.

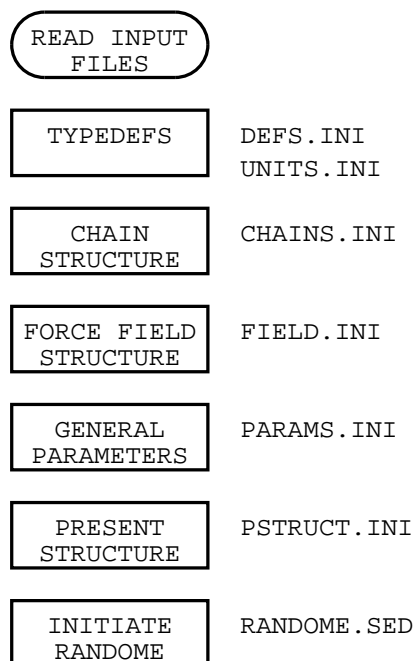
TYPEDEFS-seksioonis loetakse *defs.ini* ja *units.ini* sisendfailidest info aatomite, sidemete, kauguste, nurkade, unitite jne. kohta. Antud info säilitatakse mälus ühekordselt ja on mõeldud kasutamiseks andmebaasina hilisema genereerimise käigus. Iga objekt, mis genereerimise käigus luuakse ja mille struktuur on andmebaasis olemas, saab endale identifikaatori, mis viitab kirjele andmebaasis. Selle abil saab objekti kohta lisainfot, vältides vajadust anda iga loodava objektiga kaasa sedasama korduvat infot ja vähendades kasutatava mälu hulka. *defs.ini* sisendfaili detailne kirjeldus on peatükis 5.2 ja *units.ini* sisendfaili detailne kirjeldus – peatükis 5.3. Antud sisendfailid on üksteise suhtes hierarhilised, s.t. *units.ini* kasutab juba *defs.ini*-s olevat infot.

CHAIN STRUCTURE-seksioonis loetakse *chains.ini* sisendfailist genereeritava süsteemi struktuur: ahelad, nende arv, järjekord, koostis jne. *chains.ini* sisendfail on *TYPEDEFS*-seksioonis loetud sisendfailide suhtes hierarhiline,

kasutades neis olevat infot. *chains.ini* sisendfaili detailne kirjeldus on peatükis 5.4.

FORCE FIELD STRUCTURE-seksioonis loetakse kasutatava jõuvälja parameetrid ja struktuur. *field.ini* sisendfail kasutab *defs.ini* isendfailis olevaid definitsioone. *field.ini* sisendfaili detailne kirjeldus on peatükis 5.5.

Figure 2: Sisendfailide lugemine



4.3 Genereeritava struktuuri koostamine sisendinfo põhjal

Sisendfailides *defs.ini*, *units.ini* ja *chains.ini* põhjal koostatakse hierarhiline genereeritava süsteemi struktuur (vt. joonist 3. *defs.ini* põhjal koostatakse aatomitüüpide, sidemepikkuste, sidemete, nurgasidemete, nurkade, dihedraalsidemete ja dihedraalnurkade (ehk kokkuvõtvalt elementide) andmebaasid. Igal elemendil on vastavas andmebaasis oma indeks, mis antakse kaasa genereerimisel loodavale uuele objektile (aatom, unit jne.). Andmebaasid peavad sisaldama kõiki genereerimisel kasutatavate erinevate elementide definitsioone.

Elementide andmebaas sisaldab:

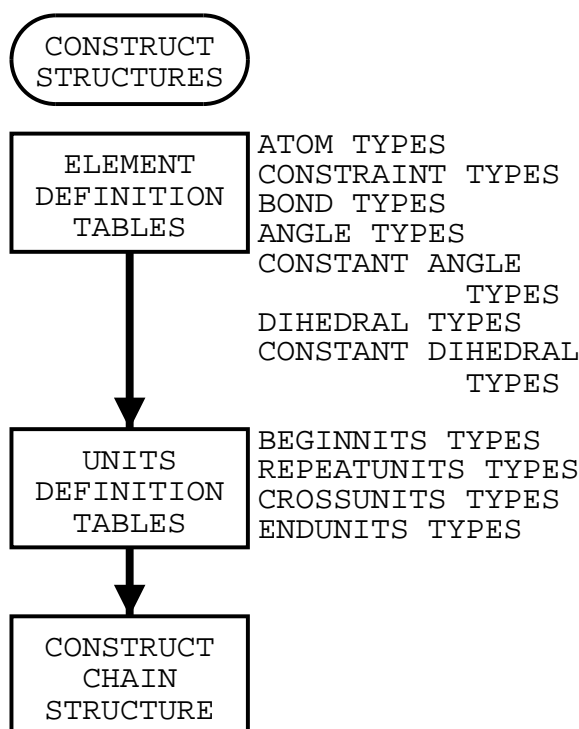
- aatomi tüübigirjeldust - aatomi nimetus, mass, laeng, raadius;
- sidemepikkuste kirjeldust - kahe aatomi vaheline kaugus ja selle lubatud kõikumine;
- sidemete tüübigirjeldust - kahe aatomi vahel oleva sideme tüüp ja sidemes kasutatavate parameetrite väärtused;
- nurgasidemete tüübigirjeldust - kolme aatomi vahel oleva nurgasideme tüüp ja sidemes kasutatavate parameetrite väärtused;
- nurkade tüübigirjeldust - kolme aatomi vahel olev nurk ja selle lubatud kõikumine;
- dihedraalsidemete tüübigirjeldust - nelja aatomi vahel oleva dihedraalsideme tüüp ja sidemes kasutatavate parameetrite väärtused;
- dihedraalnurkade tüübigirjeldust - nelja aatomi vahel oleva dihedraalnurga väärtus.

units.ini põhjal koostatakse kõikvõimalike struktuuris esinevate unitite andmebaas. Siin refereeritakse juba indeksi kaudu elementide andmebaasi. Unit on defineeritud kui omavahel sidemetega seotatud (loogiline) aatomite kogum, mis struktuurile juurde lisatakse, kasutades peatükis 3 kirjeldatud Monte Carlo meetodit. Unitide suurus võib alata ühest aatomist ja olla teoreetiliselt piiramatult. Iseärsuste ja asukoha järgi genereeritavas struktuuris on unitid jaotatud nelja kategooriasse:

- BEGINUNITS - üks unit, millega ahel algab; teoreetiliselt võiks neid igas ahelas olla vaid 1; antud unititüüpi kuuluvaid aatomeid saab esitada kahel viisil: kas otse aatomite xyz-koordinaate esitades või lastes aatomid genereerida aatomid juhuslikult juhuslikku kohta simulatsiooniboksis, arvestades aatomite jaoks etteantud vahekaugusi ja nurki;
- REPEATUNITS - unititüüp, mida genereeritakse üksteise järel etteantud arv kordi; selle uniti sees jaotuvad aatomid *backbone*- ja *hydrogen*-aatomteks, millel on tavaliselt tehniliselt erinev aatomi lisamise meetod; *backbone*-aatomid moodustavad antud unititüübi ja kordumisel kogu ahelaosa selgroo, nende aatomitega on seotud ahela võimalikud hargnemised ja *hydrogen*-tüüpi kõrvalaatomid; *hydrogen*-aatom on seotud vaid ühe kindla *backbone*-aatomi ja mitte ühegi teise aatomiga, neid aatomeid saab asendada ahela hargnemisel kõrvalahela *backbone*-aatomiga;
- CROSSUNITS - see on unititüüp, mida kasutatakse hargnemispunktide kirjeldamiseks repeatunititest koosneva ahela sees; teoreetiliselt võik selle struktuur olla sarnane repeatunitiga enne ja pärast hargnemiskohta koos kõrvalahela genereerimiseks vajalike aatomite asendamisega kõrvalahela omadega; analoogselt repeatunititega on aatomid ajagatud *backbone*- ja *hydrogen*-aatomiteks;
- ENDUNITS - üks unit, millega ahel lõpetatakse; tüüpide arv sõltub erinevate ahelatüüpide arvust ja struktuurist; kõik aatomid on unitis ühte tüüpi.

Genereeritav süsteem on hierarhiline: genereeritavad ahelad on üksteise suhtes erineva tähtsusega. Kõige kõrgemal ehk 0-tasemel on peaahelat moodustavad ahelad.

Figure 3: Genereeritava struktuuri koostamine



5 Sisend

5.1 mcgen käsuriida

mcgen käsurea kirjelduse saab lihtsalt programmi nime sisestamisega käsurealt:

```

$ ./mcgen
#EE> ./mcgen: missing command line arguments
#==> try './mcgen --help' for more information

```

This indicates that more command line arguments are needed to run the program:

```
./mcgen --help
# Mandatory arguments to long options are mandatory for short options too.
# -d, --defs-file DEFSFILENAME      defs file name
# -p, --params-file PARAMSFILENAME  params file name
# -r, --randome-file RANDEFILNAME   randome file name
# -u, --units-file UNITSFILENAME    units file name
# -c, --chains-file CHAINSFILENAME  chains file name
# -f, --field-file FIELDFILENAME    field file name
# -v, --vdw-file VDWFILENAME        vdw file name
# -x, --xyz-file XYZFILENAME        xyz input file name
#      --verbose                    verbose output
# -e, --restore-file DUMPFILNAME    dump file name to be restored
#
# -h, --help                        display this help and exit
# -V, --version                     output version information and exit
```

Käsurea argumendid on põhiliselt mõeldud sisendfailide asukohtade sisestamiseks. Kehtivad nii lühikesed kui ka pikad argumendid. Seejuures on lühikesele või pikale argumendinimele kohustuslik valik kohustuslik ka pikale või lühikesele argumendinimele.

Versioniinfo annab teada järgmist:

```
$ ./mcgen -V
# Version: mcgen-00.00.08-040829 by cipo@ut.ee
#
# Copyright (C) 2003-2004 Heiki Kasem\ "agi, Endel Soolo
# This is free software; see the source for copying conditions. There is NO
# warranty; not even for MERCHANTABILITY or FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE.
```

5.2 Tüübikirjeldused: *defs.ini*

defs.ini sisaldab kõigi genereerimisel kasutatavate aatomi-, sideme-, kauguse-, nurga- jm. tüüpide kirjeldusi. Faili nimi pole fikseeritud ja see tuleb sisestada **mcgen** käsurealt. Faili formaat on fikseeritud. Kommentaarireala ees peab olema '#'. Muutujatel puudub fikseeritud formaat. Muututjatiübid on string, char[n], integer ja double.

id-väärtuste nummeratsioon algab '1'-st. *atomXid* (X = 1, 2, 3, 4) väärtus '-1' tähendab, et aatomi tüüp pole oluline. Kui *CONSTRAINTS* ja *CANG* sektsioonides väärtus > 0.0 ja *tolerance* > 0.0, siis on väärtuse kõikumine lubatud, kui väärtus > 0.0 ja *tolerance* == 0.0, siis kõikumine pole lubatud, muutuja väärtus peab olema täpne. *CONSTDHEDRALS* sektsioonis tähendab muutuja väärtus '0.0' täielikku juhuväärtuse genereerimist.

Fail on jagatud sektsioonideks. Iga sektsioon algab võtmesõna ja järgnevate kirjade arvuga. Iga kirje algab uuel real võtmesõnaga, millele järgnevad samal real väärtused, nagu kirjeldab järgnev tabel 1.

Table 1: *defs.ini* struktuur

Võtmesõna	Muutuja	Tüüp	Selgitus
DEFINITIONS		string	faili algus
ATOMS		string	aatomite definitsioonide sektsioon
	nr	integer	eri tüüpi aatomite arv
ATOM		string	aatomi kirje
	id	integer	kirje indeks
	label	char[4]	aatomi nimetus
	mass	double	aatomi mass
	charge	double	aatomi laeng
	radius	double	aatomi raadius
	blindnr	integer, ≥ 0	pimedate aatomite arv

Table 1: (...jätkub...)

Võtmesõna	Muutuja	Tüüp	Selgitus
	$blind_1 \dots blind_{blindnr}$	integer	nimekiri aatomitüüpidest, mis käesolevat tüüpi aatomite suhtes on pimedad ehk mille jaoks käesolevat tüüpi aatomid on nähtamatud. Kui sellel real kirjeldatud tüüpi aatomi genereerimisel jääb ette mõni nimekirjas toodud tüüpi aatom, siis visatakse ettejäädud aatom lihtsalt minema.
CONSTRAINTS		string	kauguste sektsioon
CONST	nr	integer	eri tüüpi kauguste arv
		string	kauguse kirje
	id	integer	kirje indeks
	atom1type	integer	esimese aatomi tüübi indeks ATOMS-sektsioonis
	atom2type	integer	teise aatomi tüübi indeks ATOMS-sektsioonis
	length	double	kaugus ängströmid
	tolerance	double	lubatud kõikumine ängströmid
BONDS		string	keemiliste sidemete sektsioon
BOND	nr	integer	eri tüüpi sidemete arv
		string	sideme kirje
	id	integer	kirje järjekorranumber
	atom1type	integer	esimese aatomi tüübi indeks ATOMS-sektsioonis
	atom2type	integer	teise aatomi tüübi indeks ATOMS-sektsioonis
	name	char[4]	sideme nimetus
	forcenr	integer	parameetrite arv
	force[1]	double	esimene parameeter
	...		
	force[forcenr]	double	forcenr-is parameeter
ANGLES		string	nurgasidemete sektsioon
ANG	nr	integer	eri tüüpi sidemete arv
		string	nurgasideme kirje
	atom1type	integer	esimese aatomi tüübi indeks ATOMS-sektsioonis
	atom2type	integer	teise aatomi tüübi indeks ATOMS-sektsioonis
	atom3type	integer	kolmanda aatomi tüübi indeks ATOMS-sektsioonis
	name	char[4]	sideme nimetus
	forcenr	integer	parameetrite arv
	force[1]	double	esimene parameeter
	...		
	force[forcenr]	double	forcenr-is parameeter
CONSTANGLES		string	nurkade sektsioon
CANG	nr	integer	eri tüüpi nurkade arv
		string	nurga kirje
	atom1type	integer	esimese aatomi tüübi indeks ATOMS-sektsioonis
	atom2type	integer	teise aatomi tüübi indeks ATOMS-sektsioonis
	atom3type	integer	kolmanda aatomi tüübi indeks ATOMS-sektsioonis
	angle	double	nurga väärtus kraadides
	tolerance	double	lubatud kõikumine kraadides
DIHEDRALS		string	dihedraalsidemete sektsioon
DIH	nr	integer	eri tüüpi sidemete arv
		string	sideme kirje
	id	integer	kirje järjekorranumber
	atom1type	integer	esimese aatomi tüübi indeks ATOMS-sektsioonis
	atom2type	integer	teise aatomi tüübi indeks ATOMS-sektsioonis
	atom3type	integer	kolmanda aatomi tüübi indeks ATOMS-sektsioonis
	atom4type	integer	neljanda aatomi tüübi indeks ATOMS-sektsioonis
	name	char[4]	sideme nimetus
	forcenr	integer	parameetrite arv

Table 1: (...jätkub...)

Võtmesõna	Muutuja	Tüüp	Selgitus
	force[1]	double	esimene parameeter
	...		
	force[forcenr]	double	forcenr-is parameeter
CONSTDIHEDRALS		string	dihedraalnurkade sektsioon
	nr	integer	eri tüüpi nurkade arv
CDIH		string	dihedraalnurga kirje
	id	integer	kirje järjekorranumber
	atom1type	integer	esimese aatomi tüübi indeks ATOMS-sektsioonis
	atom2type	integer	teise aatomi tüübi indeks ATOMS-sektsioonis
	atom3type	integer	kolmanda aatomi tüübi indeks ATOMS-sektsioonis
	atom4type	integer	neljanda aatomi tüübi indeks ATOMS-sektsioonis
	angle	double	dihedraalnurk
CLOSE		string	faili lõpp

5.3 uniti kirjeldus: units.ini

units.ini sisaldab juurdelisatavate unitite kirjeldusi: aatomid, nurgad, kaugused jne. Faili nimi pole fikseeritud ja see tuleb sisestada *mcgen* käsurealt. Faili formaat on fikseeritud. Kommentaarirea ees peab olema '#'. Muutujatel puudub fikseeritud formaat. Muutujatüübid on string, char[n], integer ja double.

Kõik kirjetes vajalikud tüübiindeksid saadakse *defs.ini* failist. Aatomkirjetes esinev muutuja *method* omab kahte väärtust:

back - aatomi genereerimiseks kasutatakse kolme [järjestikkust] *backbone*-aatomit; aatom seostatakse viimasega neist kolmest;

hydro - aatomi genereerimiseks kasutatakse kolme [järjestikkust] *backbone*-aatomit; aatom seostatakse neist keskmisega.

id-väärtuste numeratsioon algab üldjuhul '1'-st.

unitXid (X = 1, 2, 3) viitab unitile, milles asuvat aatomit kasutatakse käesoleva aatomi genereerimisel mõõtmaks tema suhtes sideme pikkust, nurka või dihedraalnurka. Viitamine on suhteline ja toimub jooksva uniti suhtes.

unitid	tähendus	lubatud aatomid
0	jooksev unit	käesolevast väiksema järjekorranumbriga aatomid
-1	jooksvale unitile vahetult eelnev unit	kõik aatomid
-2	üle-eelmine unit	
-3	üle-üle-eelmine unit	
+1	jooksvale unitile vahetult järgnev unit, mis ei moodusta kõrvalahelat	ainult esimene aatom
+2	eritähendus: esimene unit jooksva uniti (jooksev unit peab olema crossunit) külge kinnituvas kõrvalahelas	
≥+3	lubamatu väärtus	mitte ükski aatom

Table 2: Erinevate unitid väärtuste tähendused

Negatiivse indeksiga unitid on jooksva uniti genereerimise ajaks täielikult genereeritud, seega nendest võib kasutada kõiki aatomeid.

Positiivse indeksiga unitid ei ole veel genereeritud, kuid vajadusel genereeritakse jooksva uniti aatomite vahepeal ette ära järgmise uniti või kõrvalahela algusuniti esimene aatom. Positiivse suhtelise indeksiga unititest tohib kasutada ainult esimest aatomit. Niimoodi ühe aatomi ette genereerimine on võimalik ainult juhul, kui ette genereeritava aatomi asukoha kirjeldamiseks vajalikud aatomid on juba genereeritud.

Unitite järjekord molekulis on määratud *chain.ini* failis.

Fail on jagatud sektsioonideks. Iga sektsioon algab võtmesõna ja sektsioonis olevate kirjeplokkide arvuga. Iga kirjeplokk algab võtmesõna ja plokis olevate kirjete arvuga.

BEGINUNITS-sektsioonis lisandub võtmeõnale ja kirjete arvule aatomite genereerimise meetod, millest sõltub kirje struktuur:

coords - kirjes esitatakse aatomi koordinaadid XYZ-koordinaadistikus;

random - kirjes esitatakse parameetrid aatomite genereerimiseks juhuslikku kohta juhuslikus suunas, kuid kirjetega määratud järjekorras ning üksteisevaheliste kauguste ja nurkadega.

REPEATUNITS- ja *CROSSUNITS*-sektsioonides on *UNIT*-kirjeplokkides aatomite kirjed jaotatud alamplokkideks *BACKBONE* ja *HYDROGENS*, et eraldada loogiliselt ahela selgroogu moodustavaid aatomeid neist aatomeist, mis on sidemetega selgrooaatomitega seotud, kuid millel endal rohkem sidemeid pole. Erandiks on siin aatomid, mille külge kinnituvad kõrvalahelad.

units.ini täpsem kirjeldus on toodud tabelis 3.

Table 3: *units.ini* struktuur

Võtmesõna	Muutuja	Tüüp	Selgitus
UNITS		string	faili algus
BEGINUNITS		string	algusunitite sektsioon
UNIT	nr	integer	algusunitite kirjelduste arv
		string	uniti kirjelduse algus
	id	integer	uniti järjekorranumber antud sektsioonis
	atomnr	integer	aatomite arv unitis
	genmeth	string	genereerimise meetod:
genmeth==coords			aatomid esitakse xyz-koordinaatidena
ATOM		string	aatomi kirje
	id	integer	aatomi indeks uniti kirjelduses
	type	integer	aatomi tüüp
	xcoord	double	x-coordinate
	ycoord	double	y-coordinate
	zcoord	double	z-coordinate
genmeth==random			aatomid genereeritakse juhuslikult
ATOM		string	aatomi kirje
	id	integer	aatomi indeks uniti kirjelduses
	type	integer	aatomi tüüp
	constid	integer	kauguse tüüp
	cangid	integer	nurga tüüp
	cdihid	integer	dihedraali tüüp
	method	string	genereerimise meetod:
	unit1id	integer	esimese aatomi uniti suhteline indeks
	atom1id	integer	esimese aatomi indeks
	unit2id	integer	teise aatomi uniti suhteline indeks
	atom2id	integer	teise aatomi indeks
	unit3id	integer	kolmanda aatomi uniti suhteline indeks
	atom3id	integer	kolmanda aatomi indeks
REPEATUNITS		string	korduvunitite sektsioon
	nr	integer	korduvunitite kirjelduste arv
UNIT		string	uniti kirjeldus
	id	integer	uniti index antud sektsioonis
	atomnr	integer	aatomite arv unitis: <i>backbone+hydrogens</i>
BACKBONE		string	<i>backbone</i> -aatomite alamsektsioon
	atomnr	integer	<i>backbone</i> -aatomite arv
ATOM		string	aatomi kirje

Table 3: (...jätkub...)

Võttesõna	Muutuja	Tüüp	Selgitus
HYDROGENS	id	integer	aatomi index
	type	integer	aatomi tüüp
	constid	integer	kauguse tüüp
	cangid	integer	nurga tüüp
	cdihid	integer	dihedraalnurga tüüp
	method	string	genereerimise meetod
	unit1id	integer	esimese aatomi uniti suhteline indeks
	atom1id	integer	esimese aatomi indeks
	unit2id	integer	teise aatomi uniti suhteline indeks
	atom2id	integer	teise aatomi indeks
	unit3id	integer	kolmanda aatomi uniti suhteline indeks
	atom3id	integer	kolmanda aatomi indeks
		string	<i>hydrogen</i> -aatomite alamsektsoon
	atomnr	integer	<i>hydrogen</i> -aatomite arv
		string	aatomi kirje
ATOM	id	integer	aatomi index
	type	integer	aatomi tüüp
	constid	integer	kauguse tüüp
	cangid	integer	nurga tüüp
	cdihid	integer	dihedraalnurga tüüp
	method	string	genereerimise meetod
	unit1id	integer	esimese aatomi uniti suhteline indeks
	atom1id	integer	esimese aatomi indeks
	unit2id	integer	teise aatomi uniti suhteline indeks
	atom2id	integer	teise aatomi indeks
	unit3id	integer	kolmanda aatomi uniti suhteline indeks
	atom3id	integer	kolmanda aatomi indeks
CROSSUNITS		string	ristunitite sektsioon
UNIT	nr	integer	ristunitite kirjelduste arv
		string	uniti kirjeldus
BACKBONE	id	integer	uniti indeks antud sektsioonis
	atomnr	integer	aatomite arv unitis
		string	<i>backbone</i> -aatomite alamsektsoon
ATOM	atomnr	integer	<i>backbone</i> -aatomite arv
		string	aatomi kirje
	id	integer	aatomi index
	type	integer	aatomi tüüp
	constid	integer	kauguse tüüp
	cangid	integer	nurga tüüp
	cdihid	integer	dihedraalnurga tüüp
	method	string	genereerimise meetod
	unit1id	integer	esimese aatomi uniti suhteline indeks
	atom1id	integer	esimese aatomi indeks
	unit2id	integer	teise aatomi uniti suhteline indeks
	atom2id	integer	teise aatomi indeks
	unit3id	integer	kolmanda aatomi uniti suhteline indeks
	atom3id	integer	kolmanda aatomi indeks
HYDROGENS		string	<i>hydrogen</i> -aatomite alamsektsoon
ATOM	atomnr	integer	<i>hydrogen</i> -aatomite arv
		string	aatomi kirje
	id	integer	aatomi index
	type	integer	aatomi tüüp
	constid	integer	kauguse tüüp
	cangid	integer	nurga tüüp
	cdihid	integer	dihedraalnurga tüüp
	method	string	genereerimise meetod

Table 3: (...jätkub...)

Võtmesõna	Muutuja	Tüüp	Selgitus
	unit1id	integer	esimese aatomi uniti suhteline indeks
	atom1id	integer	esimese aatomi indeks
	unit2id	integer	teise aatomi uniti suhteline indeks
	atom2id	integer	teise aatomi indeks
	unit3id	integer	kolmanda aatomi uniti suhteline indeks
	atom3id	integer	kolmanda aatomi indeks
ENDUNITS		string	lõpu-unitite sektsioon
	nr	integer	lõpu-unitite kirjelduste arv
UNIT		string	uniti kirjeldus
	id	integer	uniti indeks antud sektsioonis
	atomnr	integer	aatomite arv unitis
ATOM		string	aatomi kirje
	id	integer	aatomi indeks
	type	integer	aatomi tüüp
	constid	integer	kauguse tüüp
	cangid	integer	nurga tüüp
	cdihid	integer	dihedraalnurga tüüp
	method	string	genereerimise meetod
	unit1id	integer	esimese aatomi uniti suhteline indeks
	atom1id	integer	esimese aatomi indeks
	unit2id	integer	teise aatomi uniti suhteline indeks
	atom2id	integer	teise aatomi indeks
	unit3id	integer	kolmanda aatomi uniti suhteline indeks
	atom3id	integer	kolmanda aatomi indeks
CLOSE		string	faili lõpp

5.4 Ahelate struktuur: *chains.ini*

chains.ini sisaldab genereeritava struktuuri kirjeldust: unitite ja neist moodustatavate ahelate järgnevus, tihedus, determineeritus jne. Faili nimi pole fikseeritud ja see tuleb sisestada **mcgen** käsurealt. Faili formaat on fikseeritud. Kommentaarireaa ees peab olema '#'. Muutujatel puudub fikseeritud formaat. Muutujatüübid on string, char[n], integer ja double.

Kõik kirjetes vajalikud tüübiindeksid saadakse *defs.ini* failist. *CHAIN*-kirjes algavad *chainid*-, *levelid*-, *unitid*-muutjate väärtused '1'-st.

Fail on jagatud sektsioonideks. Esimene sektsioon, *STRUCTURE*, esineb ainult ühe korra ja määrab erinevat tüüpi molekulide arvu.

Iga molekulitüübi kohta on üks *CHAINS* sektsioon. See määrab ära molekuli osi kirjeldavate *CHAIN* sektsioonide arvu ja korduste arvu, mitu niisugust molekuli genereerida.

Järgneb määratud arv *CHAIN* kirjeid. Seejuures esimene, *CHAIN unittype==begin* esineb vaid ühe korra, sest igal genereeritaval struktuuril saab olla vaid üks algusunit.

Tavaline ahelakirje (*unittype==repeat* korral) koosneb esmalt alguskirjest *CHAIN*, millele järgneb *CONNECT-FIRST*-kirje. See kirje sisaldab infot järgneva ahelaosa ühendamiseks eelnenud ahelaosaga. Sellele kirjele järgneb *CROSSES*-kirje, mis sisaldab infot võimalike kõrvalahelate kohta lisatavas ahelaosas: võimalikud ristunitite tüübid, mille seast võib valida, kõrvalahelate lisamise algoritmi ja arvu jne. Kui *crossnr* > 0, siis peab järgnevaid kirjepaare olema *crossnr* tükki. *CONNECTCROSS* ja *CONNECT2CROSS* käivad paaris sama tüüpi hargnemise kohta. *CONNECTCROSS* kirjeldab, kuidas tuleb ristunit ühendada eelneva ahelaga, *CONNECT2CROSS* aga kirjeldab, kuidas tuleb pärast katkestust ahelat jätkates see ristunitiga ühendada.

NB: *CONNECT2CROSS* ei kirjelda kõrvalahela ühendamist ristunitiga. Seda funktsiooni täidab uues, kõrvalahela

jaoks mõeldud *CHAIN*-seksioonis *CONNECTFIRST*-kirje, mida peab olema 1 iga võimaliku ristuniti tüübi jaoks. *crossstype*-muutuja väärtus peab olema sama, mis võimaliku ristuniti tüüp, mille külge ahel tuleks ühendada.

Kui *unitttype==end*, siis puuduvad ahela seksioonist *CONNECTCROSS*- ja *CONNECT2CROSS*-kirjed.

Peale *CHAIN* seksioone tulevad *GEOMCONSTRNR* seksioonid, üks iga korra kohta, kui seda molekuli genereeritakse.

GEOMCONSTRNR seksioonide sees on *GEOM* kirjed, mis määravad antud molekulile geomeetrilised piirangud. Igale molekuli eksemplarile antakse geomeetrilised piirangud ette iseseisvalt.

Seejärel tuleb vajadusel järgmine *CHAINS* seksioon, mis kirjeldab teistsugust molekuli, ja kaasnevad *CHAIN* ning *GEOMCONSTRNR* seksioonid. Korrata kuni molekulitüüpe jätkub.

Faili lõputähis on *CLOSE*.

chains.ini kirjeldus on tabelis 4.

Table 4: *chains.ini* struktuur

Võtmesõna	Muutuja	Tüüp	Selgitus
STRUCTURE	chaintypesnr	integer	erinevate molekulitüüpide ehk <i>CHAINS</i> -kirjete arv
CHAINS		string	faili algus
	levelnr	integer	ahelatasemete arv
	chainnr	integer	ahelakirjete arv
	multiplenr	integer	seda tüüpi genereeritavate molekulide arv
unitttype==begin			ahela antud osa unitid on <i>BEGINUNITS</i> -tüüpi
CHAIN		string	ahelakirje
	chainid	integer	ahela indeks
	levelid	integer	tasemeindeks
	unitnr	integer	genereeritavate unitite arv
	unitttype	string	unitite tüüp
	unitid	integer	uniti indeks antud tüübiklassis
unitttype==repeat			ahela antud osa unitid on <i>REPEATUNITS</i> -tüüpi
CHAIN		string	ahelakirje
	chainid	integer	ahela indeks
	levelid	integer	tesemeindeks
	unitnr	integer	genereeritavate unitite arv
	unitttype	string	unitite tüüp
	unitid	integer	uniti indeks antud tüübiklassis
	cfnr	integer	järgnevate <i>CONNECTFIRST</i> -kirjete arv
CONNECTFIRST		string	esimese uniti genereerimiseks vajalikud parameetrid
	id	integer	kirje index
	typeid	integer	selle uniti tüübiindeks, mille külge ahel pannakse
	constid	integer	kauguse tüüp
	cangid	integer	nurga tüüp
	cdihid	integer	dihedraali tüüp
	chain1id	integer	esimese aatomi ahela indeks
	unit1id	integer	esimese aatomi uniti suhtline indeks
	atom1id	integer	esimese aatomi indeks
	chain2id	integer	teise aatomi ahela indeks
	unit2id	integer	teise aatomi uniti suhtline indeks
	atom2id	integer	teise aatomi indeks
	chain3id	integer	kolmanda aatomi ahela indeks
	unit3id	integer	kolmanda aatomi uniti suhtline indeks
	atom3id	integer	kolmanda aatomi indeks
CROSSES		string	<i>CROSSUNITITS</i> -ite valimine

Table 4: (...jätkub...)

Võtmesõna	Muutuja	Tüüp	Selgitus
CONNECTCROSS	crossnr	integer	valitavate <i>CROSSUNITITS</i> -ite tüüpide arv
	crosstype[1]	integer	esimene <i>CROSSUNITS</i> -i tüüp
	...		
	crosstype[<i>crossnr</i>]	integer	<i>crosstype</i> -s <i>CROSSUNITS</i> -ite tüüp
	repeat	integer	lisatavate kõrvalahelate arv
	spacing	integer	lisatavate kõrvalahelate kaugus üksteisest (ühik: unit)
	tolerance	integer	lisatava kõrvalahela lubatud nihe (ühik: unit)
		string	ristuniti ühendamise; jäetakse ära, kui <i>crossnr</i> == 0
	id	integer	ristühenduse indeks
	crosstypeid	integer	ühendatava <i>CROSSUNITS</i> tüüp
	constid	integer	kauguse tüüp
	cangid	integer	nurga tüüp
	cdihid	integer	dihedraali tüüp
	chain1id	integer	esimese aatomi ahela indeks
	unit1id	integer	esimese aatomi uniti suhtline indeks
	atom1id	integer	esimese aatomi indeks
	chain2id	integer	teise aatomi ahela indeks
	unit2id	integer	teise aatomi uniti suhtline indeks
	atom2id	integer	teise aatomi indeks
	chain3id	integer	kolmanda aatomi ahela indeks
CONNECT2CROSS	unit3id	integer	kolmanda aatomi uniti suhtline indeks
	atom3id	integer	kolmanda aatomi indeks
		string	ahela jätku ühendamine ristunitiga
	id	integer	ühenduse index
	crosstypeid	integer	<i>CROSSUNITS</i> -i tüüp, mille külge ühendatakse
	constid	integer	kauguse tüüp
	cangid	integer	nurga tüüp
	cdihid	integer	dihedraali tüüp
	chain1id	integer	esimese aatomi ahela indeks
	unit1id	integer	esimese aatomi uniti suhtline indeks
	atom1id	integer	esimese aatomi indeks
	chain2id	integer	teise aatomi ahela indeks
	unit2id	integer	teise aatomi uniti suhtline indeks
	atom2id	integer	teise aatomi indeks
	chain3id	integer	kolmanda aatomi ahela indeks
	unit3id	integer	kolmanda aatomi uniti suhtline indeks
	atom3id	integer	kolmanda aatomi indeks
CONNECTFIRST	unitttype==end		ahela antud osa unitid on <i>ENDUNITS</i> -tüüpi
	CHAIN	string	ahelakirje
	chainid	integer	ahela indeks
	levelid	integer	tasemeindeks
	unitnr	integer	genereeritavate unitite arv
	unitttype	string	unitite tüüp
	unitid	integer	uniti indeks antud tüübiklassis
	cfnr	integer	järgnevate <i>CONNECTFIRST</i> -kirjete arv
		string	enduniti ühendamiseks vajalikud parameetrid
	id	integer	kirje index
	typeid	integer	selle uniti tüübiindeks, mille külge ahel pannakse
	constid	integer	kauguse tüüp
	cangid	integer	nurga tüüp
	cdihid	integer	dihedraali tüüp
	chain1id	integer	esimese aatomi ahela indeks
	unit1id	integer	esimese aatomi uniti suhtline indeks
	atom1id	integer	esimese aatomi indeks
	chain2id	integer	teise aatomi ahela indeks

Table 4: (...jätkub...)

Võtmesõna	Muutuja	Tüüp	Selgitus
	unit2id	integer	teise aatomi uniti suhtline indeks
	atom2id	integer	teise aatomi indeks
	chain3id	integer	kolmanda aatomi ahela indeks
	unit3id	integer	kolmanda aatomi uniti suhtline indeks
	atom3id	integer	kolmanda aatomi indeks
GEOMCONSTRNR	geomconstrnr	integer	erinevate geomeetriliste piirangute arv. järgneb 'geomconstrnr' näidatud arv piirangute kirjeldusi. Iga piirangut kirjeldab üks GEOM-kirje.
GEOM	gmtype	integer	geomeetrilise piirangu tüübi kood.
	gmpar1	double	esimene piiranguparameeter
	gmpar2	double	teine piiranguparameeter
	gmpar3	double	kolmas piiranguparameeter
	gmpar4	double	neljas piiranguparameeter
	gmpar5	double	viies piiranguparameeter
	gmpar6	double	kuues piiranguparameeter
	gmpar7	double	seitsmes piiranguparameeter
CHAINS			Vajadusel järgmine molekul
:			
GEOM			
CLOSE		string	faili lõpp

gmtype - geomeetrilise piirangu tüübid:

- 0 - piirangud puuduvad
- 1 - keelusfääriline piirang: määratud sfääri sisse ahelat ei genereerita. gmpar1 – sfääri keskpunkti x -koordinaat, gmpar2 – sfääri keskpunkti y -koordinaat, gmpar3 – sfääri keskpunkti z -koordinaat, gmpar4 – keelusfääri raadius.
- 11 - sfääriline piirang: ahel on sfääri sees. gmpar1 – sfääri keskpunkti x -koordinaat, gmpar2 – sfääri keskpunkti y -koordinaat, gmpar3 – sfääri keskpunkti z -koordinaat, gmpar4 – sfääri raadius.
- 2 – x -kiht: määratud kihist väljapoole ahelat ei genereerita. gmpar1 – vähim lubatud x -koordinaat, gmpar2 – suurim lubatud x -koordinaat.
- 12 – määratud x -kihi sisse ahelat ei genereerita. gmpar1 – vähim keelatud x -koordinaat, gmpar2 – suurim keelatud x -koordinaat.
- 3 – y -kiht: määratud kihist väljapoole ahelat ei genereerita. gmpar1 – vähim lubatud y -koordinaat, gmpar2 – suurim lubatud y -koordinaat.
- 13 – määratud y -kihi sisse ahelat ei genereerita. gmpar1 – vähim keelatud y -koordinaat, gmpar2 – suurim keelatud y -koordinaat.
- 4 – z -kiht: määratud kihist väljapoole ahelat ei genereerita. gmpar1 – vähim lubatud z -koordinaat, gmpar2 – suurim lubatud z -koordinaat.
- 14 – määratud z -kihi sisse ahelat ei genereerita. gmpar1 – vähim keelatud z -koordinaat, gmpar2 – suurim keelatud z -koordinaat.
- 5 – risttahukas: ahel on risttahuka sees. gmpar1 – vähim lubatud x -koordinaat, gmpar2 – suurim lubatud x -koordinaat. gmpar3 – vähim lubatud y -koordinaat, gmpar4 – suurim lubatud y -koordinaat. gmpar5 – vähim lubatud z -koordinaat, gmpar6 – suurim lubatud z -koordinaat.
- 15 – keeluristtahukas: ahel on väljaspool risttahukat. gmpar1 – vähim keelatud x -koordinaat, gmpar2 – suurim keelatud x -koordinaat. gmpar3 – vähim keelatud y -koordinaat, gmpar4 – suurim keelatud y -koordinaat. gmpar5 – vähim keelatud z -koordinaat, gmpar6 – suurim keelatud z -koordinaat.
- 9 - kasutaja defineeritud piirang.

Ülejäanud parameetrid GMPAR*, mille tähendust pole siin näidatud, peavad olema '0.0'.

5.5 Jõuväli: *field.ini*

field.ini fail sisaldab genereeritava struktuuri jõuvälja kirjeldust, et genereerimise käigus struktuuri energiat arvutada. Faili nimi pole fikseeritud ja see tuleb sisestada **mcgen** käsurealt. Faili formaat on fikseeritud. Kommentaarirea ees peab olema '#'. Muutujatel puudub fikseeritud formaat. Muutujatüübid on string, char[n], integer ja double.

Kõik kirjetes vajalikud tüübiindeksid saadakse *defs.ini*, *chains.ini*- ja *units.ini*-failidest. *id*-väärtused algavad '1'-st.

chainXid ($X = 1, 2, 3, 4$) väärtus on ahela indeks vastavalt *chains.ini*-failile. Kui *chainXid* == 0, siis on tegemist jooksva ahelaga. Selle muutuja väärtus ei saa olla negatiivne.

unitXid väärtus on suhteline, märkides jooksvat unitit '0' korral, eelmist või eelmisi uniteid '-1, -2,...' korral ning järgmist või järgmisi uniteid nullist suuremate positiivsete väärtuste korral.

atomXid väärtus on aatomi indeks vastava uniti kirjelduses *units.ini* failis.

Fail on jagatud seksioonideks ja järgib oma struktuurilt *chains.ini*-faili. Tegelikult ei saa faili mõistlikul viisil enne *chains.ini*-faili loomist koostada.

Fail on jagatud seksioonideks lisatavate unitite tüübi järgi. Kui uniti tüübiks on *BEGINUNITS*, siis koosneb *FIELD*-kirje plokk vaid sidemetest, mis kirjeldavad aatomitevahelisi energetilisi lähimõjuseoseid vaid ühe uniti piires. Selliste sidemeplokkide tähisteks siin ja edaspidi on *INxxxx*, kus *xxxx* = *EXCLUDE*, *BONDS*, *ANGLES* või *DIHEDRALS*.

Kui uniti tüübiks on *REPEATUNITS*, siis lisanduvad *FIELD*-kirjesse muutujad *cfnr* ja *cunr*. Esimene neist väljendab *CFxxxx* kirjeplokkide arvu vastavalt *chains.ini* kirjeldatud võimalikele ühendusviisidele. Teine muutuja väljendab võimalike ristunitite arvu vastavalt *chains.ini*-failile. *INxxxx*-kirjete plokkide võib olla rohkem kui üks vastavalt *chains.ini* failile. Lisaks seostele unitite sees ja samatüübilistele unititele sisaldavad *INxxxx*-plokkid kirjeid ahela ühenduskohtade jaoks.

INxxxx-plokkidele järgnevad *CFxxxx*-plokkid, mis kirjeldavad seoseid vastavalt *CONNECTFIRST*-kirjetele *chains.ini*-failis. *CFxxxx*-plokkidele järgnevad *CCxxxx*-plokkid, mis kirjeldavad seoseid vastavalt *CONNECTCROSS*-kirjetele *chains.ini*-failis. *CCxxxx*-kirjetele järgnevad *C2Cxxxx*-kirjed, mis kirjeldavad seoseid vastavalt *CONNECT2CROSS*-kirjetele *chains.ini*-failis.

Kui *unittyp*==*end*, siis sisaldab *FIELD*-kirjete plokk *INxxxx*-kirje(te) ja *CFxxxx*-kirje(te) plokk(e)i ja *FIELD*-kirje ei sisalda *cunr*-muutujat.

field.ini kirjeldus on tabelis 5.

Table 5: *field.ini* struktuur

Võtmesõna	Muutuja	Tüüp	Selgitus
FIELDS		string	faili algus
	fieldnr	integer	<i>FIELD</i> -kirjete arv
	levelnr	integer	tasemete arv
unittyp==begin			
FIELD		string	jõuväljakirje
	fieldid	integer	kirjeindeks
	levelid	integer	tasmeindeks
	unittyp	unitite tüüp	
INEXCLUDE		string	unitit sees ja samatüübiliste unitite vahel olevad
			kauguse arvutamise erandid
	nr	integer	järgnevate <i>EXC</i> -kirjete arv

Table 5: (...jätkub...)

Võtmesõna	Muutuja	Tüüp	Selgitus
EXC	id	integer	erandi indeks
	chain1id	integer	esimese aatomi ahela indeks
	unit1id	integer	esimese aatomi uniti suhteline indeks
	atom1id	integer	esimese aatomi indeks
	chain2id	integer	teise aatomi ahela indeks
	unit2id	integer	teise aatomi uniti suhteline indeks
	atom2id	integer	teise aatomi indeks
INBONDS		string	unitit sees ja samatüübiliste unitite vahel olevad sidemed
BOND	nr	integer	järgnevate <i>BOND</i> -kirjete arv
	id	integer	sideme indeks
	typeid	integer	sideme tüübiindeks
	chain1id	integer	esimese aatomi ahela indeks
	unit1id	integer	esimese aatomi uniti suhteline indeks
	atom1id	integer	esimese aatomi indeks
	chain2id	integer	teise aatomi ahela indeks
	unit2id	integer	teise aatomi uniti suhteline indeks
INANGLES	atom2id	integer	teise aatomi indeks
		string	unitit sees ja samatüübiliste unitite vahel olevad nurgasidemed
ANG	nr	integer	järgnevate <i>ANG</i> -kirjete arv
	id	integer	sideme indeks
	typeid	integer	sideme tüübiindeks
	chain1id	integer	esimese aatomi ahela indeks
	unit1id	integer	esimese aatomi uniti suhteline indeks
	atom1id	integer	esimese aatomi indeks
	chain2id	integer	teise aatomi ahela indeks
	unit2id	integer	teise aatomi uniti suhteline indeks
	atom2id	integer	teise aatomi indeks
	chain3id	integer	kolmanda aatomi ahela indeks
	unit3id	integer	kolmanda aatomi uniti suhteline indeks
	atom3id	integer	kolmanda aatomi indeks
INDIHEDRALS		string	unitit sees ja samatüübiliste unitite vahel olevad dihedraalsidemed
DIH	nr	integer	järgnevate <i>DIH</i> -kirjete arv
	id	integer	sideme indeks
	typeid	integer	sideme tüübiindeks
	chain1id	integer	esimese aatomi ahela indeks
	unit1id	integer	esimese aatomi uniti suhteline indeks
	atom1id	integer	esimese aatomi indeks
	chain2id	integer	teise aatomi ahela indeks
	unit2id	integer	teise aatomi uniti suhteline indeks
	atom2id	integer	teise aatomi indeks
	chain3id	integer	kolmanda aatomi ahela indeks
	unit3id	integer	kolmanda aatomi uniti suhteline indeks
	atom3id	integer	kolmanda aatomi indeks
	chain4id	integer	neljanda aatomi ahela indeks
	unit4id	integer	neljanda aatomi uniti suhteline indeks
	atom4id	integer	neljanda aatomi indeks
unittype==repeat			
FIELD		string	jõuväljakirje
	fieldid	integer	kirjeindeks
	levelid	integer	tasmeindeks
	unitttype	unitite tüüp	
	cfnr	integer	järgnevate <i>INxxxx</i> -kirjeplokkide arv
	cunr	integer	<i>INxxxx</i> -kirjeplokkidele järgnevate <i>Cxxxx</i> -kirjeplokkide arv

Table 5: (...jätkub...)

Võtmesõna	Muutuja	Tüüp	Selgitus
INEXCLUDE		string	unitit sees ja samatüübiliste unitite vahel olevad kauguse arvutamise erandid
EXC	nr	integer	järgnevate <i>EXC</i> -kirjete arv
	id	integer	erandi indeks
	chain1id	integer	esimese aatomi ahela indeks
	unit1id	integer	esimese aatomi uniti suhteline indeks
	atom1id	integer	esimese aatomi indeks
	chain2id	integer	teise aatomi ahela indeks
	unit2id	integer	teise aatomi uniti suhteline indeks
INBONDS	atom2id	integer	teise aatomi indeks
		string	unitit sees ja ahela alguse ühendamiseks vajalikud sidemed
BOND	nr	integer	järgnevate <i>BOND</i> -kirjete arv
	id	integer	sideme indeks
	typeid	integer	sideme tüübiindeks
	chain1id	integer	esimese aatomi ahela indeks
	unit1id	integer	esimese aatomi uniti suhteline indeks
	atom1id	integer	esimese aatomi indeks
	chain2id	integer	teise aatomi ahela indeks
	unit2id	integer	teise aatomi uniti suhteline indeks
	atom2id	integer	teise aatomi indeks
INANGLES		string	unitit sees ja ahela alguse ühendamiseks vajalikud nurgasidemed
ANG	nr	integer	järgnevate <i>ANG</i> -kirjete arv
	id	integer	sideme indeks
	typeid	integer	sideme tüübiindeks
	chain1id	integer	esimese aatomi ahela indeks
	unit1id	integer	esimese aatomi uniti suhteline indeks
	atom1id	integer	esimese aatomi indeks
	chain2id	integer	teise aatomi ahela indeks
	unit2id	integer	teise aatomi uniti suhteline indeks
	atom2id	integer	teise aatomi indeks
	chain3id	integer	kolmanda aatomi ahela indeks
	unit3id	integer	kolmanda aatomi uniti suhteline indeks
	atom3id	integer	kolmanda aatomi indeks
INDIHEDRALS		string	unitit sees ja ahela alguse ühendamiseks vajalikud dihedraalsidemed
DIH	nr	integer	järgnevate <i>DIH</i> -kirjete arv
	id	integer	sideme indeks
	typeid	integer	sideme tüübiindeks
	chain1id	integer	esimese aatomi ahela indeks
	unit1id	integer	esimese aatomi uniti suhteline indeks
	atom1id	integer	esimese aatomi indeks
	chain2id	integer	teise aatomi ahela indeks
	unit2id	integer	teise aatomi uniti suhteline indeks
	atom2id	integer	teise aatomi indeks
	chain3id	integer	kolmanda aatomi ahela indeks
	unit3id	integer	kolmanda aatomi uniti suhteline indeks
	atom3id	integer	kolmanda aatomi indeks
	chain4id	integer	neljanda aatomi ahela indeks
	unit4id	integer	neljanda aatomi uniti suhteline indeks
	atom4id	integer	neljanda aatomi indeks
CFEXCLUDE		string	kauguse arvutamise erandid eelmis(t)e ahela(te)ga
EXC	nr	integer	järgnevate <i>EXC</i> -kirjete arv
	id	integer	erandi indeks
	chain1id	integer	esimese aatomi ahela indeks
	unit1id	integer	esimese aatomi uniti suhteline indeks

Table 5: (...jätkub...)

Võttesõna	Muutuja	Tüüp	Selgitus
CFBONDS	atom1id	integer	esimese aatomi indeks
	chain2id	integer	teise aatomi ahela indeks
	unit2id	integer	teise aatomi uniti suhteline indeks
	atom2id	integer	teise aatomi indeks
	nr	string	sidemed eelmis(t)e ahela(te)ga
BOND	connectid	integer	järgnevate <i>BOND</i> -kirjete arv
	id	integer	<i>CONNECT</i> -kirje indeks
	typeid	integer	sideme indeks
	chain1id	integer	sideme tüübiindeks
	unit1id	integer	esimese aatomi ahela indeks
CFANGLES	atom1id	integer	esimese aatomi uniti suhteline indeks
	chain2id	integer	esimese aatomi indeks
	unit2id	integer	teise aatomi ahela indeks
	atom2id	integer	teise aatomi uniti suhteline indeks
	nr	integer	teise aatomi indeks
ANG	connectid	string	nurgasidemed eelmis(t)e ahela(te)ga
	id	integer	järgnevate <i>ANG</i> -kirjete arv
	typeid	integer	<i>CONNECT</i> -kirje indeks
	chain1id	integer	sideme indeks
	unit1id	integer	sideme tüübiindeks
CFDIHEDRALS	chain2id	integer	esimese aatomi ahela indeks
	unit2id	integer	esimese aatomi uniti suhteline indeks
	atom2id	integer	esimese aatomi indeks
	chain3id	integer	teise aatomi ahela indeks
	unit3id	integer	teise aatomi uniti suhteline indeks
DIH	atom3id	integer	teise aatomi indeks
	connectid	string	kolmanda aatomi ahela indeks
	id	integer	kolmanda aatomi uniti suhteline indeks
	typeid	integer	kolmanda aatomi indeks
	chain1id	integer	dihedraalsidemed eelmis(t)e ahela(te)ga
CCEXCLUDE	chain2id	integer	järgnevate <i>DIH</i> -kirjete arv
	unit2id	integer	<i>CONNECT</i> -kirje indeks
	atom2id	integer	sideme indeks
	chain3id	integer	sideme tüübiindeks
	unit3id	integer	esimese aatomi ahela indeks
EXC	atom3id	integer	esimese aatomi uniti suhteline indeks
	chain4id	integer	esimese aatomi indeks
	unit4id	integer	teise aatomi ahela indeks
	atom4id	integer	teise aatomi uniti suhteline indeks
	nr	string	teise aatomi indeks

Table 5: (...jätkub...)

Võtmesõna	Muutuja	Tüüp	Selgitus
CCBONDS		string	sidemed ristuniti sees ning unitiga, mille külge ristunit ühendatakse
BOND	nr	integer	järgnevate <i>BOND</i> -kirjete arv
	crosstypeid	integer	ühendatava ristuniti tüübiindeks
	id	integer	sideme indeks
	typeid	integer	sideme tüübiindeks
	chain1id	integer	esimese aatomi ahela indeks
	unit1id	integer	esimese aatomi uniti suhteline indeks
	atom1id	integer	esimese aatomi indeks
	chain2id	integer	teise aatomi ahela indeks
	unit2id	integer	teise aatomi uniti suhteline indeks
CCANGLES	atom2id	integer	teise aatomi indeks
		string	nurgasidemed ristunitit sees ning unitiga, mille külge ristunit ühendatakse
	nr	integer	järgnevate <i>ANG</i> -kirjete arv
	crosstypeid	integer	ühendatava ristuniti tüübiindeks
	id	integer	sideme indeks
	typeid	integer	sideme tüübiindeks
	chain1id	integer	esimese aatomi ahela indeks
	unit1id	integer	esimese aatomi uniti suhteline indeks
	atom1id	integer	esimese aatomi indeks
ANG	chain2id	integer	teise aatomi ahela indeks
	unit2id	integer	teise aatomi uniti suhteline indeks
	atom2id	integer	teise aatomi indeks
	chain3id	integer	kolmanda aatomi ahela indeks
	unit3id	integer	kolmanda aatomi uniti suhteline indeks
	atom3id	integer	kolmanda aatomi indeks
		string	dihedraalsidemed ristunitit sees ning unitiga, mille külge ristunit ühendatakse
	nr	integer	järgnevate <i>DIH</i> -kirjete arv
	crosstypeid	integer	ühendatava ristuniti tüübiindeks
CCDIHEDRALS	id	integer	sideme indeks
	typeid	integer	sideme tüübiindeks
	chain1id	integer	esimese aatomi ahela indeks
	unit1id	integer	esimese aatomi uniti suhteline indeks
	atom1id	integer	esimese aatomi indeks
	chain2id	integer	teise aatomi ahela indeks
	unit2id	integer	teise aatomi uniti suhteline indeks
	atom2id	integer	teise aatomi indeks
	chain3id	integer	kolmanda aatomi ahela indeks
DIH	unit3id	integer	kolmanda aatomi uniti suhteline indeks
	atom3id	integer	kolmanda aatomi indeks
	chain4id	integer	neljanda aatomi ahela indeks
	unit4id	integer	neljanda aatomi uniti suhteline indeks
	atom4id	integer	neljanda aatomi indeks
		string	erandid ristunitiga ahela jätkamisel
	nr	integer	järgnevate <i>BOND</i> -kirjete arv
	nr	integer	järgnevate <i>EXC</i> -kirjete arv
	id	integer	erandi indeks
C2CEXCLUDE	chain1id	integer	esimese aatomi ahela indeks
	unit1id	integer	esimese aatomi uniti suhteline indeks
	atom1id	integer	esimese aatomi indeks
	chain2id	integer	teise aatomi ahela indeks
	unit2id	integer	teise aatomi uniti suhteline indeks
	atom2id	integer	teise aatomi indeks
		string	sidemed ristunitiga ahela jätkamisel
	nr	integer	järgnevate <i>BOND</i> -kirjete arv
	nr	integer	järgnevate <i>EXC</i> -kirjete arv
EXC	id	integer	erandi indeks
	chain1id	integer	esimese aatomi ahela indeks
	unit1id	integer	esimese aatomi uniti suhteline indeks
	atom1id	integer	esimese aatomi indeks
	chain2id	integer	teise aatomi ahela indeks
	unit2id	integer	teise aatomi uniti suhteline indeks
	atom2id	integer	teise aatomi indeks
		string	sidemed ristunitiga ahela jätkamisel
	nr	integer	järgnevate <i>BOND</i> -kirjete arv
C2CBONDS		string	sidemed ristunitiga ahela jätkamisel

Table 5: (...jätkub...)

Võtmesõna	Muutuja	Tüüp	Selgitus
BOND	nr	integer	järgnevate <i>BOND</i> -kirjete arv
	crosstypeid	integer	ühendatava ristuniti tüübiindeks
	id	integer	sideme indeks
	typeid	integer	sideme tüübiindeks
	chain1id	integer	esimese aatomi ahela indeks
	unit1id	integer	esimese aatomi uniti suhteline indeks
	atom1id	integer	esimese aatomi indeks
	chain2id	integer	teise aatomi ahela indeks
	unit2id	integer	teise aatomi uniti suhteline indeks
C2CANGLES	atom2id	integer	teise aatomi indeks
		string	nurgasidemed ristunitiga ahela jätkamisel
ANG	nr	integer	järgnevate <i>ANG</i> -kirjete arv
	crosstypeid	integer	ühendatava ristuniti tüübiindeks
	id	integer	sideme indeks
	typeid	integer	sideme tüübiindeks
	chain1id	integer	esimese aatomi ahela indeks
	unit1id	integer	esimese aatomi uniti suhteline indeks
	atom1id	integer	esimese aatomi indeks
	chain2id	integer	teise aatomi ahela indeks
	unit2id	integer	teise aatomi uniti suhteline indeks
C2CDIHEDRALS	atom2id	integer	teise aatomi indeks
	chain3id	integer	kolmanda aatomi ahela indeks
DIH	unit3id	integer	kolmanda aatomi uniti suhteline indeks
	atom3id	integer	kolmanda aatomi indeks
		string	dihedraalsidemed ristunitiga ahela jätkamisel
	nr	integer	järgnevate <i>DIH</i> -kirjete arv
	crosstypeid	integer	ühendatava ristuniti tüübiindeks
	id	integer	sideme indeks
	typeid	integer	sideme tüübiindeks
	chain1id	integer	esimese aatomi ahela indeks
	unit1id	integer	esimese aatomi uniti suhteline indeks
	atom1id	integer	esimese aatomi indeks
	chain2id	integer	teise aatomi ahela indeks
	unit2id	integer	teise aatomi uniti suhteline indeks
	atom2id	integer	teise aatomi indeks
	chain3id	integer	kolmanda aatomi ahela indeks
	unit3id	integer	kolmanda aatomi uniti suhteline indeks
	atom3id	integer	kolmanda aatomi indeks
	chain4id	integer	neljanda aatomi ahela indeks
	unit4id	integer	neljanda aatomi uniti suhteline indeks
	atom4id	integer	neljanda aatomi indeks
<hr/>			
unitttype==end FIELD		string	jõuväljakirje
	fieldid	integer	kirjeindeks
	levelid	integer	tasmeindeks
	unitttype	unitite tüüp	
INEXCLUDE	cfnr	integer	järgnevate <i>INxxxx</i> -kirjeplokkide arv
		string	unitit sees ja samatüübiliste unitite vahel olevad kauguse arvutamise erandid
EXC	nr	integer	järgnevate <i>EXC</i> -kirjete arv
	id	integer	erandi indeks
	chain1id	integer	esimese aatomi ahela indeks
	unit1id	integer	esimese aatomi uniti suhteline indeks
	atom1id	integer	esimese aatomi indeks
	chain2id	integer	teise aatomi ahela indeks
	unit2id	integer	teise aatomi uniti suhteline indeks

Table 5: (...jätkub...)

Võtmesõna	Muutuja	Tüüp	Selgitus
INBONDS	atom2id	integer	teise aatomi indeks
		string	unitit sees ja ahela alguse ühendamiseks vajalikud sidemed
BOND	nr	integer	järgnevate <i>BOND</i> -kirjete arv
	id	integer	sideme indeks
	typeid	integer	sideme tüübiindeks
	chain1id	integer	esimese aatomi ahela indeks
	unit1id	integer	esimese aatomi uniti suhteline indeks
	atom1id	integer	esimese aatomi indeks
	chain2id	integer	teise aatomi ahela indeks
	unit2id	integer	teise aatomi uniti suhteline indeks
	atom2id	integer	teise aatomi indeks
INANGLES		string	unitit sees ja ahela alguse ühendamiseks vajalikud nurgasidemed
	nr	integer	järgnevate <i>ANG</i> -kirjete arv
ANG	id	integer	sideme indeks
	typeid	integer	sideme tüübiindeks
	chain1id	integer	esimese aatomi ahela indeks
	unit1id	integer	esimese aatomi uniti suhteline indeks
	atom1id	integer	esimese aatomi indeks
	chain2id	integer	teise aatomi ahela indeks
	unit2id	integer	teise aatomi uniti suhteline indeks
	atom2id	integer	teise aatomi indeks
	chain3id	integer	kolmanda aatomi ahela indeks
INDIHEDRALS	unit3id	integer	kolmanda aatomi uniti suhteline indeks
	atom3id	integer	kolmanda aatomi indeks
		string	unitit sees ja ahela alguse ühendamiseks vajalikud dihedraalsidemed
	nr	integer	järgnevate <i>DIH</i> -kirjete arv
DIH	id	integer	sideme indeks
	typeid	integer	sideme tüübiindeks
	chain1id	integer	esimese aatomi ahela indeks
	unit1id	integer	esimese aatomi uniti suhteline indeks
	atom1id	integer	esimese aatomi indeks
	chain2id	integer	teise aatomi ahela indeks
	unit2id	integer	teise aatomi uniti suhteline indeks
	atom2id	integer	teise aatomi indeks
	chain3id	integer	kolmanda aatomi ahela indeks
CFEXCLUDE	unit3id	integer	kolmanda aatomi uniti suhteline indeks
	atom3id	integer	kolmanda aatomi indeks
	chain4id	integer	neljanda aatomi ahela indeks
	unit4id	integer	neljanda aatomi uniti suhteline indeks
	atom4id	integer	neljanda aatomi indeks
		string	kauguse arvutamise erandid eelmsis(t)e ahela(te)ga
	nr	integer	järgnevate <i>EXC</i> -kirjete arv
EXC	id	integer	erandi indeks
	chain1id	integer	esimese aatomi ahela indeks
	unit1id	integer	esimese aatomi uniti suhteline indeks
	atom1id	integer	esimese aatomi indeks
	chain2id	integer	teise aatomi ahela indeks
	unit2id	integer	teise aatomi uniti suhteline indeks
	atom2id	integer	teise aatomi indeks
		string	sidemed eelmsis(t)e ahela(te)ga
	nr	integer	järgnevate <i>BOND</i> -kirjete arv
BOND	connectid	integer	<i>CONNECT</i> -kirje indeks
	id	integer	sideme indeks
	typeid	integer	sideme tüübiindeks

Table 5: (...jätkub...)

Võtmesõna	Muutuja	Tüüp	Selgitus
CFANGLES	chain1id	integer	esimese aatomi ahela indeks
	unit1id	integer	esimese aatomi uniti suhteline indeks
	atom1id	integer	esimese aatomi indeks
	chain2id	integer	teise aatomi ahela indeks
	unit2id	integer	teise aatomi uniti suhteline indeks
	atom2id	integer	teise aatomi indeks
ANG	nr	string	nurgasidemed eelmis(t)e ahela(te)ga
	connectid	integer	järgnevate <i>ANG</i> -kirjete arv
	id	integer	<i>CONNECT</i> -kirje indeks
	typeid	integer	sideme indeks
	chain1id	integer	sideme tüübiindeks
	chain1id	integer	esimese aatomi ahela indeks
CFDIHEDRALS	unit1id	integer	esimese aatomi uniti suhteline indeks
	atom1id	integer	esimese aatomi indeks
	chain2id	integer	teise aatomi ahela indeks
	unit2id	integer	teise aatomi uniti suhteline indeks
	atom2id	integer	teise aatomi indeks
	chain3id	integer	kolmanda aatomi ahela indeks
DIH	unit3id	integer	kolmanda aatomi uniti suhteline indeks
	atom3id	integer	kolmanda aatomi indeks
	nr	string	dihedraalsidemed eelmis(t)e ahela(te)ga
	connectid	integer	järgnevate <i>DIH</i> -kirjete arv
	id	integer	<i>CONNECT</i> -kirje indeks
	typeid	integer	sideme indeks
	chain1id	integer	sideme tüübiindeks
	chain1id	integer	esimese aatomi ahela indeks
	unit1id	integer	esimese aatomi uniti suhteline indeks
	atom1id	integer	esimese aatomi indeks
	chain2id	integer	teise aatomi ahela indeks
	unit2id	integer	teise aatomi uniti suhteline indeks
	atom2id	integer	teise aatomi indeks
	chain3id	integer	kolmanda aatomi ahela indeks
	unit3id	integer	kolmanda aatomi uniti suhteline indeks
	atom3id	integer	kolmanda aatomi indeks
	chain4id	integer	neljanda aatomi ahela indeks
	unit4id	integer	neljanda aatomi uniti suhteline indeks
	atom4id	integer	neljanda aatomi indeks
CLOSE		string	faili lõpp

5.6 Kaugmõju interaktsioonid: *vdw.ini*

vdw.ini sisaldab ahelas esinevate käugmõjuinteraktsioonide kirjeldusi. Kaugmõjuinteraktsioonides osalevad aatomid, mis pole üksteisega seotud keemilise-, nurga- või dihedraalsidemega. Faili nimi pole fikseeritud ja see tuleb sisestada *mcgen* käsurealt.

Faili struktuur

VDW <järgnevate kirjete arv *n*>

<aatom1> <aatom2> <potkey> <*m*> <*p*₁> ... <*p*_{*m*}>

⋮ (*n* − 1) analoogset kirjet ⋮

CLOSE

m on potentsiaaliparameetrite arv. Üldjuhul on *m* väärtus *potkey* valikuga üheselt määratud.

*p*₁ ... *p*_{*m*} on potentsiaaliparameetrid. Tähtendus sõltub kasutatavast energiafunktsioonist, mille määrab *potkey* väärtus.

5.7 Üldised sisendparameetrid: *params.ini*

params.ini sisaldab ahela genereerimiseks vajalikke abiparameetreid. Faili nimi pole fikseeritud ja see tuleb sisetada **mcgen** käsurealt võtmega *-p. params.ini* faili loeb klass PARAMS. Üks *params.ini* näide on toodud allpool:

```
Amorphous poly(ethylene oxide)
CELL1 20.0 0.0 0.0
CELL2 0.0 20.0 0.0
CELL3 0.0 0.0 20.0
IMCON 1
MAXEN 1000000
MAXTRY 10000000000
MAXTRYUNIT 500
TEMPERATURE 300
CUTOFF 10.0 0.0001
RANDOME 2 10000
DUMP_TIME 1000
HISTORY_TIME 10000
CLOSE
```

Faili formaat on fikseeritud. Võtmesõnad peavad olema suurtähtedega. Tühje ridasid ei tohi võtmesõnade vahel esineda. Muutujatel puudub fikseeritud formaat. Muutujatüübid on char[8], integer, long ja double.

header - ahela nimetus

char[80]

CELL1 CELL[0] CELL[1] CELL[2] - ühikraku maatriksi esimene rida

fikseeritud võtmesõna : double : double : double

CELL[0] - ühikraku maatriksi esimese rea esimene element

CELL[1] - ühikraku maatriksi esimese rea teine element

CELL[2] - ühikraku maatriksi esimese rea kolmas element

CELL2 CELL[3] CELL[4] CELL[5] - ühikraku maatriksi teine rida

fikseeritud võtmesõna : double : double : double

CELL[3] - ühikraku maatriksi teise rea esimene element

CELL[4] - ühikraku maatriksi teise rea teine element

CELL[5] - ühikraku maatriksi teise rea kolmas element

CELL3 CELL[6] CELL[7] CELL[8] - ühikraku maatriksi kolmas rida

fikseeritud võtmesõna : double : double : double

CELL[6] - ühikraku maatriksi kolmanda rea esimene element

CELL[7] - ühikraku maatriksi kolmanda rea teine element

CELL[8] - ühikraku maatriksi kolmanda rea kolmas element

IMCON IMCON - kujutise tüüp

fikseeritud võtmesõna : integer

IMCON=0 - ääritingimused puuduvad

IMCON=1 - standardsed kuubilised ääritingimused

IMCON=2 - ortorombilised ääritingimused

IMCON=3 - 'parallelepiped' ääritingimused

IMCON=4 - lõigatud oktaheedrilised ääritingimused

IMCON=5 - rombilised dodekaheedrilised ääritingimused

IMCON=6 - x-y parallelogramm-ääritingimused; z-suunas perioodilisus puudub

MAXEN MAXEN - ahela maksimaalne energia

fikseeritud võtmesõna : long

MAXTRY MAXTRY - proovide arv ahela kohta

fikseeritud võtmesõna : long

MAXTRYUNIT MAXTRYUNIT - proovide arv ühe *uniti* kohta

fikseeritud võtmesõna : long

TEMPERATURE TEMPERATURE - simulatsiooni temperatuur Kelvini skaalas

fikseeritud võtmesõna : double

CUTOFF CUTOFFDIST CUTOFFSTEP - kaugmõjuinteraktsioonide löikekaugus

fikseeritud võtmesõna : double : double

CUTOFFDIST - kaugmõjuinteraktsioonide löikekaugus

CUTOFFSTEP - kaugmõjuinteraktsioonide löikesamm

RANDOME RANDVAL RANDSTART - tagasivõtu parameetrid

fikseeritud võtmesõna : long : long

RANDVAL - tagasivõetavate *uniti*te maksimaalne arv

RANDSTART - proovide arv *uniti* kohta, millest alates rakendatakse tagasivõtmist

DUMP_TIME DUMP_TIME - simulatsiooni backupi sagedus *uniti* lisamise katsete järgi

fikseeritud võtmesõna : long : long

DUMP_TIME - *uniti* lisamise katsete arv, mille järel salvestatakse genereeritava süsteemie parameetrid faili *mcgen.dump*, milles oleva info lausel saab simulatsiooni pärast katkestust jätkata

HISTORY_TIME HISTORY_TIME - aatomite koordinaatide väljaprintimise sagedus *mcgen.history* faili *uniti* lisamise katsete järgi

fikseeritud võtmesõna : long : long

HISTORY_TIME - *uniti* lisamise katsete arv, mille järel salvestatakse kõik simulatsiooniboksis enne genereerimist olnud ja sinna antud hetkeks genereeritud aatomid faili *mcgen.history* snapshotina, mis on põhimõtteliselt xyz-formaadis

CLOSE - faili lõpp

fikseeritud võtmesõna

so far so good...do not care about the rest at the moment

5.8 Juhuarvude generaator: *randome.sed*

randome.sed fail sisaldab kahte iduarvu juhuarvude generaatori jaoks. Faili nimi pole fikseeritud ja tuleb sisestada *mcgen* käsurealt. Seda faili loeb klass RNDM. Üks *randome.sed* faili näide on alljärgnev"

```
732858166 521611455
```

Faili formaat on fikseeritud. Muutujatel pole fikseeritud formaati. Muutujate tüübiks on long.

```
seed1 seed2
```

```
long : long
```

```
seed1 - esimene iduarv juhuarvude generaatorile
```

```
seed2 - teine iduarv juhuarvude generaatorile
```

mcgen avab selle faili ja loeb juhuarvude generaatori iduarve ühe korra simulatsiooni jooksul. Simulatsiooni lõpul kirjutatakse iduarvude hetkeväärtused *randome.sed* faili.

6 Väljund

6.1 Logifail: *mcgen.log*

mcgen.log sisaldab infot genereerimise kulgemise kohta. Genereerimise jooksul on faili võimalik online jälgimine 'tail -f mcgen.log' käsuga (*nix süsteemides).

mcgen.log sisaldab alguses alljärgneva üldise info parameetrite kohta:

- programmi versioon
- programmi autorid ja kontaktaadressid
- genereeritavate *unit*ite arv
- aatomite arv *unit*is
- ühikraku maatriks
- kujutistüüp
- geomeetriliste piirangute arv ja nende tüübid, kui piiranguid esineb
- simulatsiooni temperatuur
- kaugmõjuinteraktsioonide löikekaugus ja –samm
- tagasivõtu parameetrid
- esialgsed iduarvud juhuarvude generaatorile
- väljundfailide nimed

Seejärel järgneb N (N on määramatu arv ja sõltb konkreetsest situatsioonist) arv kirjeid *unit*ite staatuse kohta. Iga kirje sisaldab jooksva *unit*i numbrit (nummeratsioon algab '0'-st); genereerimise staatuse ja järgmise genereeritava *unit*i numbrit, s.t. kas asutakse genereerima järgmist *unit*it või minnakse mingil põhjusel 1 . . . n sammu tagasi; ka tuuakse ära tehtud proovide arv jooksva *unit*i jaoks ja proovide koguarv. Eduka genereerimise korral sisaldab kirje veel keemiliste, nurga- ja dihedraalsidemete ning kaugmõju interaktsioonide energia nii jooksva *unit*i jaoks kui ka summaarselt; uue konfiguratsiooni energia erinevuse eelnevaga ja koguenergia.

Generatsiooni lõppedes korratakse sama infot parameetrite kohta, mis faili alguseski, vaid iduarvude jaoks esitatakse hetkeväärtused, mis kirjutatakse ka *randome.sed* faili. Kõige lõpus on energiatega lõppväärtused ja väljundfailide nimed.

6.2 XYZ: *mcgen.xyz*

mcgen.xyz sisaldab genereeritud aatomite koordinaate xyz-formaadis:

- aatomite arv
- päis
- aatomi_nimetus x y z
- ...
- aatomi_nimetus x y z

Fail on loetav programmidega 'rasmol' ja 'molmol'.

6.3 DLPOLY CONFIG: *mcgen.CONFIG*

mcgen.CONFIG sisaldab genereeritud aatomite koordinaate DLPOLY CONFIG-formaadis.

6.4 DLPOLY FIELD: *mcgen.FIELD*

mcgen.FIELD sisaldab genereeritud ahelale vastava jõuvälja parameetreid DLPOLY FIELD-formaadis. Fail pole koheselt DLPOLY sisendina kasutatav, sest vajab muudatusi vastavalt juhtnõõridele, muudele tingimustele või vähemasti nende juhtnõõride kustutamist.

7 Muudatuste tegemine

7.1 Dihedraalfunktsiooni lisamine

Dihedraalnurga energiat arvutab klassi CHAIN meetod `torsion_energy`:

```
double CHAIN::torsion\_energy(int \_potkey, double tau, double a0,  
double a1, double a2, double a3, double a4, double a5, double a6)
```

int _potkey on energiafunktsiooni indeks; *double tau* on dihedraalnurk. *double a0 ... double a6* on sisendid dihedraalfunktsiooni parameetrite jaoks. Meetodi sees toimub õige funktsiooni valik if-lausega *_potkey* järgi. Seejärel tuleb klassi FIELD konstruktoris suurendada konstanti *NDIHKEYS* ühe võrra ja kopeerida dihedraalfunktsiooni lühinimi (kuni 4 sümbolit) massiivi *dihkeysname*, nt.:

```
strcpy(dihkeysname[1], "sylv\0");
```

Lõpetusks tuleb klassi COORDS meetodi `retr_dihfieldstr` lisada FIELD-faili jaoks uue potentsiaali vastava formaadi ja parameetrite arvuga string.

7.2 Kaugmõju energiafunktsiooni lisamine

Kaugmõju energiat arvutab klassi CHAIN meetod `vdw_energy`:

```
double CHAIN::vdw_energy(double ln1, int indx, double b1, double b2,  
double b3, double b4, double b5)
```

double ln1 on aatomite vahekaugus; *int indx* on energiafunktsiooni indeks. *double b1 ... double b5* on sisendid energiafunktsiooni parameetritele. Meetodi sees toimub õige funktsiooni valik if-lausega *indx* järgi. Seejärel tulen suurendada konstanti *POTNR* klassi VDW header-faili *vdw.h* alguses ning lisada potentsiaali nimetus (kuni 4 sümbolit) klassi VDW konstruktoris massiivi *potname*, nt.:

```
strcpy(potname[1], "dibu\0");
```