

mcgen kasutajajuhend

Heiki Kasemägi, Endel Soolo, Alvo Aabloo
ja
Josh Thomas

May 25, 2005

Contents

1	<i>mcgen</i>	3
2	Litsents	3
3	Tööpõhimõte	6
4	Programmi struktuur	8
4.1	Programmi üldine struktuur	8
5	Sisend	8
5.1	<i>mcgen</i> käsurida	8
5.2	Tüübikirjeldused: <i>defs.ini</i>	9
5.3	<i>uniti</i> kirjeldus: <i>units.ini</i>	11
5.4	Ahelate struktuur: <i>chains.ini</i>	14
5.5	Jõuväli: <i>field.ini</i>	18
5.6	Kaugmõju interaktsioonid: <i>vdw.ini</i>	25
5.7	Üldised sisendparameetrid: <i>params.ini</i>	26
5.8	Juhuarvude generaator: <i>randome.sed</i>	28
6	Väljund	28
6.1	Logifail: <i>mcgen.log</i>	28
6.2	XYZ: <i>mcgen.xyz</i>	29
6.3	DLPOLY CONFIG: <i>mcgen.CONFIG</i>	29
6.4	DLPOLY FIELD: <i>mcgen.FIELD</i>	29
7	Muudatuste tegemine	29
7.1	Dihedraalfunktsiooni lisamine	29
7.2	Kaugmõju energiafunktsiooni lisamine	29

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 eesmärk on pakkuda akadeemiliks uurimistööks odavamalt 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.

mcgen kuulub GNU Üldise Avaliku Litsentsi alla.

2 Litsents

GNU Üldine Avalik Litsents
Versioon number 2, juuni 1991

Autoriõigus (c) 1989, 1991 Free Software Foundation, Inc. 59 Temple Place, Suite 330, Boston, MA 02111-1307
USA

Igaüks võib käesolevast dokumendist valmistada koopiaid ning valmistatud koopiaid levitada tingimusel, et need koopiaid vastavad originaaldokumendile sõnasõnalt.

EESSÕNA

Enamik tarkvara litsentse on loodud selleks, et võtta Teilt õigus tarkvara jagada ja muuta. Vastukaaluks on GNU Üldine Avalik Litsents mõeldud selleks, et tagada Teile vabadus jagada ja muuta vaba tarkvara - kindlustada, et tarkvara oleks vaba kõigile selle kasutajatele. Käesolev Üldine Avalik Litsents kehtib enamiku Free Software Foundation'i tarkvara ja mistahes programmide kohta, mille autorid lubavad seda litsentsi kasutada. (Mõni Free Software Foundation'i tarkvara on vastavalt kaitstud GNU Üldise Avaliku Teegilitsentsiga). Ka Teie võite oma programmi suhtes käesoleva litsentsi tingimusi kehtestada.

Rääkides vabast tarkvarast peame silmas vabadust, mitte hinda. Üldised Avalikud Litsentsid on loodud selleks, et tagada Teile järgnevat: õigust levitada koopiaid vabast tarkvarast (soovi korral ka levitamise eest tasu võttes), tarkvara lähtetekstide kättesaadavust, õigust tarkvara muuta ning kasutada tarkvara osi uute vaba tarkvaratoodete loomisel ning kindlustada, et Te olete teadlik eelpoolnimetatud õigustest.

Teie õiguste tagamiseks on vaja rakendada mõningaid piiranguid, et keegi ei saaks Teilt neid õigusi ära võtta või nõuda Teile loobumist neist õigustest. Tarkvara muutmisel või selle koopiade levitamisel kätkevad need piirangud Teile jaoks teatud kohustusi. Näiteks levitades taolise programmi koopiaid, kas tasuta või levitamise eest tasu võttes, peate Te saajatele andma kõik need õigused, mis on ka Teil endal. Te peate kindlustama, et ka nemad saavad või võivad soovi korral saada lähteteksti. Et programmi saajad teaksid oma õigusi, peate neid teavitama käesoleva Litsentsi tingimustest.

Meie kaitseme Teie õigusi kaheastmeliselt

1. anname tarkvarale autoriõiguse ja
2. pakume Teile käesolevat litsentsi, mis annab Teile seadusliku õiguse kopeerida, levitada ja/või muuta tarkvara.

Samuti tahame nii iga autori kui ka meie endi kaitseks kindlustada, et igaüks mõistab, et vabal tarkvaral pole garantiid. Kui keegi tarkvara muudab ja edasi annab, peavad selle saajad teadma, et nende omanduses pole originaal vältimaks teiste poolt põhjustatud probleemide mõju originaali autori mainele.

Lõpuks, iga vaba programmi ähvardab pidevalt tarkvara patenteerimine. Me soovime vältida ohtu, kus vaba programmi levitajad omandavad individuaalse patendi litsentsi, muutes selle enda omandiõiguse objektiks. Sellise olukorra vältimiseks oleme selgitanud, et iga taoline patent tuleb litsenseerida kõigile vabaks kasutamiseks või üldse mitte litsenseerida.

Järgnevad kopeerimise, levitamise ja muutmise täpsed terminid ning tingimused.

Kopeerimise, levitamise ja muutmise terminid ja tingimused.

0. Käesolev litsents kehtib iga programmi või muu teose puhul, mis sisaldab autoriõiguse omaniku märke selle kohta, et antud programmi võib levitada vastavalt käesoleva Üldise Avaliku Litsentsi tingimustele. "Programm" on edaspidi ükskõik milline eelnevale tingimusele vastav programm või teos, "Programmil põhinev teos" tähendab kas Programmi või ükskõik millist autorikaitse all olevat programmil põhinevat teost; lahti seletatuna teost, mis sisaldab Programmi või selle osa, kas sõnasõnaliselt või muudetult ja/või tõlgituna teise keelde. (Siin ja edaspidi on tõlkimine kaasatud piiranguteta termini "muutmine" alla). Iga litsensiaat on edaspidi "Teie".

Litsents ei laiene muudele tegevustele kui kopeerimine, levitamine ja muutmine; need ei ole Litsentsiga kaetud. Programmi töötamise protsessil pole kitsendusi ja Programmi väljund on kaitstud vaid siis, kui selles sisaldub teos, mis põhineb Programmil (sõltumatuna sellest, et see on Programmi tööprotsessi poolt valmistatud). Kas see on tõene, sõltub sellest mida Programm teeb.

1. Teie võite kopeerida ja levitada sõnasõnalisi koopiaid Programmi lähtetekstist nii, nagu olete selle saanud, igas vormis, eeldusel, et Teie avaldate arusaadavalt ja sobivalt igal koopial vastava autoriõiguse märke ja garantii välistamise märke: hoiate puutumatuna kõik märged, mis viitavad käesolevale Litsentsile ja igasugusele garantii puudumisele ning annate kõigile Programmi saajatele käesoleva Litsentsi koopia Programmiga kaasa. Te võite võtta tasu koopia füüsilise kättetoimetamise akti eest ja võite oma valiku kohaselt pakkuda tasu eest omapoolset garantiikaitset.
2. Teie võite muuta Programmi koopiat või koopiaid või ükskõik millist selle osa, luues nii Programmil põhineva teose ning kopeerida ja levitada selliseid muudatusi või teoseid vastavalt punkti 1 tingimustele, eeldades, et Te täidate kõik järgnevad tingimused:
 - a) Te peate kaasama muudetud failile silmatorkavad märged, mis teatavad Teie poolt tehtud muudatused failides ja iga muudatuse kuupäeva.
 - b) Te peate andma kõigile kolmandatele osapooltele selle Litsentsi tingimuste kohaselt Litsentsi tervikuna igasugusele teosele, mida Te levitate või avalikustate, mis tervikuna või osaliselt sisaldab Programmi või põhineb Programmil või selle osal.
 - c) Kui muudetud Programm loeb normaalse tööprotsessi käigus käske interaktiivselt, peate Te tagama, et tavaliseks interaktiivseks kasutamiseks käivitamisel kõige tavapärasemal viisil kas trükitakse või kuvatakse märke, mis sisaldab vastatavat märget autoriõigusest ja märget garantii puudumise kohta (või märget Teie poolt pakutava garantii kohta) ning et kasutajad võivad Programmi käesolevate tingimuste kohaselt edasi levitada, teatades kasutajale, kuidas näha koopiat käesolevast Litsentsist. (Erand: Kui Programmi ise on interaktiivne, kuid tavapärase kasutamise protsessi käigus ei trüki sellist teadaannet, siis ei pea Teie Programmil põhinev teos vastavat teadaannet trükkima).

Need nõuded kehtivad muudetud teosele kui tervikule. Kui selgelt eristatavad osad teosest ei põhine Programmil ja neid võib põhjendatult lugeda iseseisvateks ja eraldiseisvateks teosteks, siis käesoleva Litsentsi ja selle tingimused ei laiene nimetatud osadele, kui Te levitate neid iseseisvate teostena. Kui Te levitate nimetatud osi kui osa tervikust, milleks on Programmil põhinev teos, siis terviku levitamine peab järgima käesoleva Litsentsi tingimusi, mille teistele litsensiaatidele antud õigused laienevad ülejäänud tervikule, seega igale üksikule osale, olenemata sellest, kes autor oli.

Seega pole käesoleva punkti eesmärk nõuda õigusi või vaidlustada Teie õigusi teosele, mille Te oled tervikuna loonud; pigem on eesmärk kasutada õigust suunata Programmil põhinevate teoste või ühisteoste

levitamist.

Lisaks, ainuüksi asjaolu, et teise teose, mis ei põhine Programmil, Programmiga (või Programmil põhineva teosega) ühtsesse levitamise- või säilitusvormi liitmine ei muuda nimetatud teost Litsentsi alla kuuluvaks.

3. Teie võite Programmi (või punkt 2 kohaselt Programmil põhinevat teost) kopeerida ja levitada objektkoodina või käivitataval kujul vastavalt punktide 1 ja 2 kohaselt eeldusel, et Te täidate vähemalt ühe järgnevatest nõuetest:
 - a) Lisate sellele täieliku vastava masinloetava lähteteksti, mida peab levitama vastavalt punktides 1 ja 2 toodud tingimustele, vormis, mida kasutatakse valdavalt tarkvara vahendustegevuses; või
 - b) Lisate sellele kirjaliku vormi, kehtivusega vähemalt kolm aastat, millega annad mistahes kolmandatele osapooltele tasu eest, mis ei ületa Teie poolt lähteteksti füüsilisel kujul levitamise hinda, täieliku masinloetava koopia vastavast lähtetekstist, mida levitatakse vastavalt punktides 1 ja 2 toodud tingimustele, vormis, mida kasutatakse valdavalt tarkvara vahendustegevuses; või
 - c) Lisate sellele informatsiooni, mille Teie saite ja mis puudutab vastava lähteteksti levitamise pakkumist. (See alternatiiv on lubatud vaid mitteärilisel levitamisel, kui Te oled saanud Programmi koos vastava pakkumisega objektkoodina või käivitatavas vormis vastavalt käesoleva punkti alapunktile b).

Teose lähteteksti all mõeldakse muudatuste tegemiseks eelistatumat teose vormi. Käivitatava teose täielik lähtetekst tähendab kogu lähteteksti tervikuna koos kõigi selles sisalduvate moodulitega, lisades ükskõik millised sellega seotud liidese definitsioonifailid ning skriptid, mida kasutatakse käivitatava teose kompileerimise ja paigaldamise kontrollimiseks. Erandina ei pea levitav lähtetekst sisaldama midagi, mida tavaliselt levitatakse kas lähteteksti või masinkoodi vormis) koos põhiliste operatsioonisüsteemi komponentidega (kompilaator, kernel ja nii edasi), millel käivitatava töö protsess toimub, välja arvatud kui nimetatud komponent ise lisandub käivitatavale.

Kui käivitatava vormi või objektkoodi levitamine toimub ligipääsu pakkumisega määratud kohas, siis ligipääsu pakkumine lähteteksti kopeerimiseks samast kohast loetakse võrdseks lähteteksti levitamise, kuigi kolmandad osapooled pole kohustatud kopeerima lähteteksti koos objektkoodiga.

4. Te ei tohi kopeerida, muuta, edasi litsenseerida või levitada Programmi välja arvatud juhul, kui seda lubab käesolev Litsents. Igasugune muu katse kopeerida, muuta, sublitsenseerida või levitada Programmi on õigustühine ja peatab automaatselt Teile käesoleva Litsentsiga antud õigused. Siiski, osapoolte, kes on saanud Teilt koopiaid või õigused käesoleva Litsentsi alusel, litsentsid ei kaota kehtivust nii kaua, kuni taolised osapooled täidavad täielikult kehtestatud tingimusi.
5. Teilt ei nõuta Litsentsi aktsepteerimist, kuna Te pole sellele alla kirjutanud. Kuid miski muu peale käesoleva Litsentsi ei anna Teile õigust muuta või levitada Programmi või Programmil põhinevat teost. Need tegevused on seadusega keelatud, kui Te ei aktsepteeri käesoleva Litsentsi tingimusi. Sellest tulenevalt Programmi (või igasugust Programmil põhinevat teost) muutes või levitades annate Teie märku nõustumisest Litsentsi terminite ja tingimustega Programmi või Programmil põhineva teose kopeerimisel, levitamisel või muutmisel.
6. Iga kord kui Te levitate Programmi (või ükskõik millist Programmil põhinevat teost), saab saaja automaatselt originaallitsentsiaarilt litsentsi kopeerida, levitada ja muuta Programmi vastavalt käesoleva Litsentsi terminitele ja tingimustele. Teie ei või kehtestada lisapiiranguid vastuvõtjale antud õiguste kasutamisele. Teie ei vastuta käesoleva Litsentsi täitmise eest kolmandate osapoolte poolt.
7. Kui kohtulahendi või väidetava patendiõiguse rikkumise tagajärjel või mõnel muul põhjusel (mis ei piirdu patendiga seotud küsimustega) on Teile pandud kohustusi, mis on vastuolus käesoleva Litsentsi tingimustega, siis ei vabasta need Teid käesoleva Litsentsi tingimuste täitmisest. Kui Te ei suuda levitada, samaaegselt täites käesoleva Litsentsi tingimusi ja teisi kohustusi, siis ei tohi Te Programmi üldse levitada. Näiteks kui patendilitsents ei luba Teil litsentsitasuta Programmi edasi levitada neile, kes on saanud Teilt või Teie kaudu Programmi koopia, siis ainus võimalus täita nimetatud patendilitsentsi ja käesoleva Litsentsi tingimusi on loobuda Programmi levitamisest.

Kui käesoleva punkti mõni osa osutub mingil asjaolul kehtetuks või mitterakendatavaks, siis käesoleva punkti ülejäänud osa loetakse rakendatavaks ja punkt tervikuna loetakse rakendatavaks ülejäänud tingimustel.

Käesoleva punkti eesmärk ei ole kellegi ajendamine patendi- või muude õiguste rikkumiseks või nende kehtivuse vaidlustamiseks; käesoleva punkti ainus eesmärk on vaba tarkvara levitamise süsteemi terviklikkuse kaitsmine, mida kasutavad avalike litsentside kasutajad. Paljud isikud on andnud suure panuse tarkvara laiale sektorile, mida levitatakse läbi nimetatud süsteemi usaldades järjekindlat süsteemi rakendumist; autor/annetaja on otsustaja, kas ta soovib tarkvara levitada mõne teise süsteemi kaudu ja litsensiaat ei saa seda valikut mõjutada.

Selle punkti eesmärk on täpselt selgitada, mida soovitakse käesoleva Litsentsi ülejäänud osaga saavutada.

8. Kui Programmi levitamist ja/või kasutamist piiratakse mõnedes riikides kas patentide või autoriõigusega, võib autoriõiguse omanik, kes on Programmi litsenseerinud, lisada kindla geograafilise piirangu, jättes nimekirjast välja mainitud riigid, et levitamine oleks lubatud vaid nimekirjas toodud riikides või riikide vahel. Nimetatud juhul Litsents liitub piiranguga, nagu see on ära toodud käesoleva Litsentsi põhiosas.
9. Free Software Foundation võib aegajalt välja anda ümbertöötatud ja/või uusi versioone Üldisest Avalikust Litsentsist. Need uued versioonid on käesoleva Litsentsi versiooniga sarnase sisuga, kuid võivad erineda detailides, osundades uusi probleeme või huviobjekte.

Igale versioonile antakse unikaalne versiooninumber. Kui programmis tuuakse ära selle kohta kehtiva käesoleva litsentsi versiooninumber ja lisatakse märge "kõik hilisemad versioonid", siis on teil võimalik valida, kas järgida selle või ükskõik millise hilisema Free Software Foundation'i poolt avaldatava versiooni tingimusi. Kui Programm ei täpsusta käesoleva litsentsi versiooninumbrit, on Teil võimalus valida ükskõik milline Free Software Foundation'i poolt avaldatud käesoleva Litsentsi versioon.

10. Kui Te soovite Programmi osi liita teiste vabade programmidega, mille levitamise tingimused on erinevad, siis kirjutage loa saamiseks autorile. Tarkvara puhul, mis on autoriõigusega kaitstud Free Software Foundation'i poolt, kontakteeruge Free Software Foundation'iga, mõnikord me teeme erandeid. Meie otsuse määravad kaks eesmärki: säilitada vaba staatus meie vaba tarkvara igasugustele derivaatidele ja edendada tarkvara jagamist ning taaskasutamist üldiselt.

GARANTII PUUDUMINE

11. KUNA PROGRAMM ON LITSENSEERITUD TASUTA, PUUDUB PROGRAMMIL IGASUGUNE GARANTII ULATUSENI, MIDA LUBAB RAKENDATAV SEADUS. KUI KIRJALIKULT POLE TEISITI SÄTESTATUD, SIIS AUTORIÕIGUSE OMANIKUD JA/VÕI MUUD OSAPOOLED PAKUVAD PROGRAMMI "NII, NAGU TA ON" ILMA IGASUGUSE VÄLJENDATUD VÕI OLETATAVA GARANTIITA, KAASA ARVATUD, KUID MITTE AINULT, KESKMISE/TAVALISE KVALITEEDI JA MINGILE KINDLALE EESMÄRGILE SOBIVUSE GARANTIITA. KOGU PROGRAMMI KVALITEEDI JA TOIMIMISE RISK LANGEB TEILE. KUI PROGRAMM ON PUUDULIK, KANNATE TEIE KÕIK TEENINDUSE, PARANDUSE VÕI TAASTAMISE KULUD.
12. MITTE MINGIL JUHUL, VÄLJA ARVATUD SIIS, KUI SEDA NÕUAB RAKENDATAV SEADUS VÕI KIRJALIKULT ON TEISITI KOKKU LEPITUD, POLE ÜKSKI AUTORIÕIGUSE OMANIK VÕI KOLMAS OSAPOOL, KES VÕIB MUUTA JA/VÕI LEVITADA PROGRAMMI VASTAVALT ÜLALPOOL TOODUD TINGIMUSTELE, TEIE EES VASTUTAV KAHJUSTUSTE EEST, KAASA ARVATUD IGASUGUSED ÜLDISED, SPETSIIFILISED, JUHUSLIKUD VÕI TAGAJÄRJEL TEKKINUD KAHJUD, MIS TULENEVAD KAS PROGRAMMI KASUTAMISEST VÕI VÕIMATUSEST PROGRAMMI KASUTADA (KAASA ARVATUD, KUID MITTE AINULT, TEIE VÕI KOLMANDATE OSAPOOLTE ANDMETE KADUMINE VÕI ANDMETE MUUTMINE VÕI PROGRAMMI VÕIMETUS TÖÖTADA KOOS MISTAHES TEISTE PROGRAMMIDEGA), ISEGI SIIS, KUI VALDAJAT VÕI MUUD OSAPOOLT ON TEAVITATUD SELLISTE KAHJUDE VÕIMALIKKUSEST.

3 Tööpõhimõte

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

- kaugus eelmisest aatomist ([CD]);

- nurk kahe viimase aatomiga ($\angle BCD$);
- dihedraalnurk kolme viimase aatomiga (ϕ);
- kolme viimase aatomi koordinaadid (A, B, C).

Figure 1: Dihedraalnurk

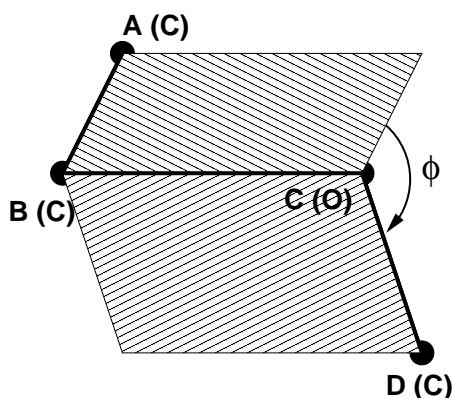
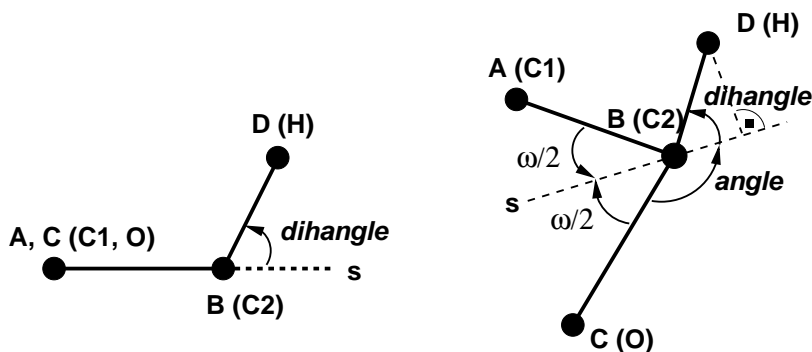


Figure 2: Programmi struktuur



Kaugus, nurk ja dihedraalnurk võivad olla fikseeritud, aga neid saab kahjuslikult etteantud piirides genereerida. Üldjuhul on soovitatav lasta vähemasti dihedraalnurk programil 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 koordinaadid 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 koguenergia E ;
2. saadud koguenergia lahutatakse eelmise konfiguratsiooni koguenergiast E_0 : $\Delta E = E - E_0$;
3. kui uue konfiguratsiooni energia on madalam eelmise konfiguratsiooni energiast, s.t. $\Delta E \leq 0$, siis aktsepteeritakse 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 faktorit $\exp(-\Delta E/kT)$ (k - Boltzmanni konstant, T - simulatsiooni temperatuur Kelvinites) juhusliku arvuga vahemikus 0. . . 1:

- kui Boltzmanni faktor on suurem sellest juhuarvust, siis aktsepeeritakse 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.

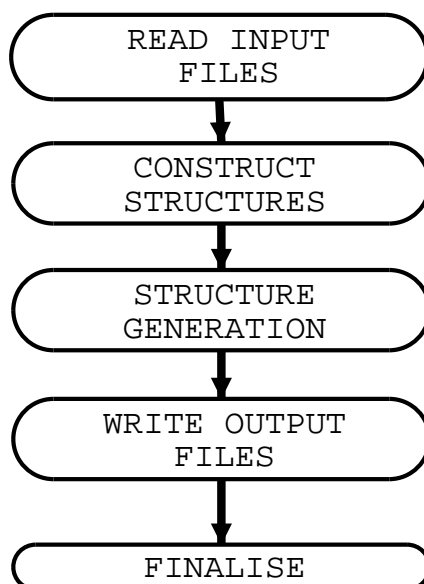
Et ülalkirjedatud meetodil ei leita mitte kõige madalama energiaga konfiguratsioon, vaid esimene lokaalne miinimum, siis teatud tingimustel võib genereerimine joosta ummikusse, s.t. isegi peale suurt proovimiste arvu ei suudeta vajalik hulk *unit*'eid ära genereerida. Sellise olukorra leevendamiseks 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 3.

Figure 3: Programmi struktuur



5 Sisend

5.1 mcgen käsurida

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 DEFSSFILENAME      defs file name
# -p, --params-file PARAMSFILENAME    params file name
# -r, --randome-file RANOMEFILENAME    randome file name
# -u, --units-file UNITSFILENAME       units file name

```



```
# -c, --chains-file CHAINFILENAME      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
# -F, --dlfield-file DLFIELDFILENAME   dlpoly field file name
# --verbose                           verbose output
# --verbose_energy                     verbose energy calculation
# --verbose_stat                       print statistics on what failed
# -e, --restore-file DUMPFILENAME      dump file name to be restored
#
# -h, --help                           display this help and exit
# -V, --version                         output version information and exit
```

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

Versiooniinfo annab teada järgmist:

```
$ ./mcgen -V
# Version: mcgen-00.00.21-050525 by cipo@ut.ee
#
# Copyright (C) 2003-2005 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. Kommentaarirea ees peab olema '#'. Muutujatel puudub fikseeritud formaat. Muutujatüübid 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 kirjete 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
	<i>blind</i> ₁ ... <i>blind</i> _{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

Table 1: (...jätkub...)

Võtmesõna	Muutuja	Tüüp	Selgitus
			genereerimisel jääb ette mõni nimekirjas toodud tüüpi aatom, siis visatakse ettejäänud aatom lihtsalt minema.
CONSTRAINTS	nr	string	kauguste sektsioon
		integer	eri tüüpi kauguste arv
CONST		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
	nr	integer	eri tüüpi sidemete arv
BOND		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
	nr	integer	eri tüüpi sidemete arv
ANG		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
	nr	integer	eri tüüpi nurkade arv
CANG		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
	nr	integer	eri tüüpi sidemete arv
DIH		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
	force[1]	double	esimene parameeter
	...		
	force[forcenr]	double	forcenr-is parameeter
CONSTDIHEDRALS		string	dihedraalnurkade sektsioon
	nr	integer	eri tüüpi nurkade arv

Table 1: (...jätkub...)

Võtmesõna	Muutuja	Tüüp	Selgitus
CDIH	id	string	dihedraalnurga kirje
		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 *unit*ite 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.

Table 2: Erinevate unitid väärtuste tähendused

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

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.

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 võtmesõnale 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
	nr	integer	algusunitite kirjelduste arv
UNIT		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
	id	integer	aatomi index

Table 3: (...jätkub...)

Võtmesõna	Muutuja	Tüüp	Selgitus
HYDROGENS	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 alamseksioon
	atomnr	integer	<i>hydrogen</i> -aatomite arv
ATOM		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
CROSSUNITS			
UNIT		string	ristunitite sektsioon
	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 alamseksioon
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			
ATOM		string	<i>hydrogen</i> -aatomite alamseksioon
	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
	unit1id	integer	esimese aatomi uniti suhteline indeks

Table 3: (...jätkub...)

Võtmesõna	Muutuja	Tüüp	Selgitus
	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*-sektsioonis *CONNECTFIRST*-kirje, mida peab olema 1 iga võimaliku ristuniti tüübi jaoks.

crosstype-muutuja väärtus peab olema sama, mis võimaliku ristuniti tüüp, mille külge ahel tuleks ühendada.

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

Peale *CHAIN* sektsioone tulevad *GEOMCONSTRNR* sektsioonid, üks iga korra kohta, kui seda molekuli genereeritakse.

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

Seejärel tuleb vajadusel järgmine *CHAINS* sektsioon, mis kirjeldab teistsugust molekuli, ja kaasnevad *CHAIN* ning *GEOMCONSTRNR* sektsioonid. 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	järgnevale <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
	crossnr	integer	valitavate <i>CROSSUNITITS</i> -ite tüüpide arv

Table 4: (...jätkub...)

Võtmesõna	Muutuja	Tüüp	Selgitus
CONNECTCROSS	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 ühendamine; 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
	unit3id	integer	kolmanda aatomi uniti suhtline indeks
CONNECT2CROSS	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
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 tüübi klassis
CONNECTFIRST	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
	unit2id	integer	teise aatomi uniti suhtline indeks

Table 4: (...jätkub...)

Võtmesõna	Muutuja	Tüüp	Selgitus
	atom2id	integer	teise aatomi indeks
	chain3id	integer	kolmanda aatomi ahela indeks
	unit3id	integer	kolmanda aatomi uniti suhteline 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	gmtree	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

gmtree - geomeetrilise piirangu tüübid:

- 0 - piirangud puuduvad
- 1 - keelustääriline piirang: määratud sfääri sisse ahelat ei genereerita. gmpar1 – sfääri keskpunkti x -koordinaat, gmpar2 – sfääri keskpunkti y -koordinaat, gmpar3 – sfääri keskpunkti z -koordinaat, gmpar4 – keelustääri 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.

Ülejäänud 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 sektsioonideks ja järgib oma struktuurilt *chains.ini*-faili. Tegelikult ei saa faili mõistlikul viisil enne *chains.ini*-faili loomist koostada.

Fail on jagatud sektsioonideks 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
unittpe==repeat			
FIELD		string	jõuväljakirje
	fieldid	integer	kirjeindeks
	levelid	integer	tasmeindeks
	unittpe	unitite tüüp	
	cfnr	integer	järgnevate <i>INxxx</i> -kirjeplokkide arv
	cunr	integer	<i>INxxx</i> -kirjeplokkidele järgnevate <i>Cxxx</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
	atom2id	integer	teise aatomi indeks
INBONDS		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
INANGLES	atom2id	integer	teise aatomi indeks
		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
INDIHEDRALS	atom2id	integer	teise aatomi indeks
	chain3id	integer	kolmanda aatomi ahela indeks
	unit3id	integer	kolmanda aatomi uniti suhteline indeks
	atom3id	integer	kolmanda aatomi indeks
		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
CFEXCLUDE	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
		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...)

Võtmesõna	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...)

Võttesõna	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...)

Võttesõna	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
		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
	atom1id	integer	esimese aatomi indeks
	chain2id	integer	teise aatomi ahela indeks
	unit2id	integer	teise aatomi uniti suhteline indeks
	atom2id	integer	teise aatomi indeks
CFBONDS		string	sidemed eelmis(t)e ahela(te)ga
BOND	nr	integer	järgnevate <i>BOND</i> -kirjete arv
	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
CFDIHEDRALS	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
	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 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
DIH	chain4id	integer	neljanda aatomi ahela indeks
	unit4id	integer	neljanda aatomi uniti suhteline indeks
	atom4id	integer	neljanda aatomi 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.

Table 6: *vdw.ini* struktuur

Võtmesõna	Muutuja	Tüüp	Selgitus
VDW		string	faili algus
	vdwnr	integer	järgnevate VDW-kirjete arv
	atom1	integer	esimese aatomi tüüp
	atom2	integer	teise aatomi tüüp
	vdwkey	string[4]	potentsiaali nimetus
	argnr	integer	järgnevate potentsiaaliparameetrite arv
	potparam[1]	double	esimene potentsiaaliparameeter
	...		

Table 6: (...jätkub...)

Võtmesõna	Muutuja	Tüüp	Selgitus
	potparam[argnr]	double	argnr. potentsiaaliparameeter

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
RANDOM 2 10000 #FIXED
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 - ääritingimuste 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 CUTTOFFDIST CUTOFFSTEP - kaugmõjuinteraktsioonide lõikekaugus

fikseeritud võtmesõna : double : double

CUTTOFFDIST - kaugmõjuinteraktsioonide lõikekaugus

CUTOFFSTEP - kaugmõjuinteraktsioonide lõikesamm

RANDOME RANDVAL RANDSTART [FIXED] - tagasivõtu parameetrid

fikseeritud võtmesõna : long : long : string

RANDVAL - tagasivõetavate *unitite* maksimaalne arv

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

FIXED - kui see võtmesõna esineb, siis võetakse tagasi fikseeritud *RANDVAL* arv *uniteid*; kui see puudub, siis juhuslik arv *uniteid* vahemikus 2. . *RANDVAL*

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 sisaldav 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 juhtnööridele, muudele tingimustele või vähemasti nende juhtnööride 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 tulene 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");
```