

mcgen kasutajajuhend

Heiki Kasemägi, Endel Soolo, Alvo Aabloo
and
Josh Thomas

December 2, 2003

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 | 4 |
| 5 | Sisend | 5 |
| 5.1 | <i>mcgen</i> käsurida | 5 |
| 5.2 | Tüübikirjeldused: <i>defs.ini</i> | 5 |
| 5.3 | <i>uniti</i> kirjeldus: <i>units.ini</i> | 7 |
| 5.4 | Ahelate struktuur: <i>chains.ini</i> | 10 |
| 5.5 | Jõuväli: <i>field.ini</i> | 12 |
| 5.6 | Üldised sisendparameetrid: <i>params.ini</i> | 17 |
| 5.7 | Kasutaja defineeritavad geomeetrilised piirangud: <i>userfunc.cpp</i> | 20 |
| 5.8 | Juhuarvude generaator: <i>randome.sed</i> | 21 |
| 6 | Väljund | 21 |
| 6.1 | Logifail: <i>mcgen.log</i> | 21 |
| 6.2 | XYZ: <i>mcgen.xyz</i> | 22 |
| 6.3 | DLPOLY CONFIG: <i>mcgen.CONFIG</i> | 22 |
| 6.4 | DLPOLY FIELD: <i>mcgen.FIELD</i> | 22 |
| 7 | Muudatuste tegemine | 22 |
| 7.1 | Dihedraalfunktsiooni lisamine | 22 |
| 7.2 | Kaugmõju energiafunktsiooni lisamine | 22 |

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. Programm 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 odavat 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 järjekorrel 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 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 faktorit $\exp(-\Delta E/kT)$ (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 *unit*i genereerimist eelmise konfiguratsiooni alusel.

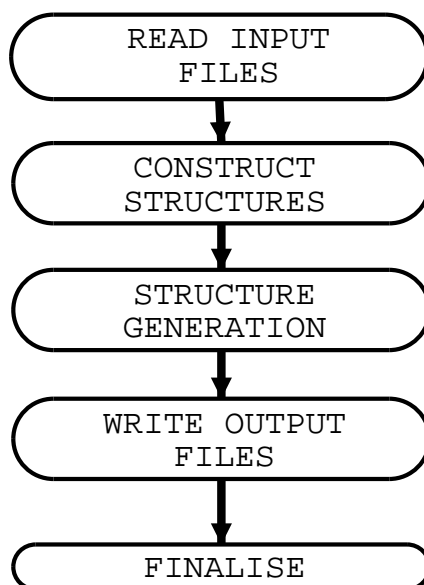
Et ülalkirjedatud meetodil ei leita mitte kõige madalama energiaga konfiguratsioon, vaid esimene lokaalne miinimum, siis teatud tingimustel võib genereerimine joosta ummikusse, s.t. isegi peale suurt proovimiste arvu ei suudeta vajalik hulk *unit*'eid ära genereerida. Sellise olukorra leevendamiseks 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. *defs.ini* sisendfaili detailne kirjeldus on seksioonis 5.2. *units.ini* sisendfaili detailen kirjeldus on seksioonis 5.3. *chains.ini* sisendfaili detailne kirjeldus on seksioonis 5.4.

4.3 Genereeritava struktuuri koostamine sisendinfo põhjal

Genereeritava struktuuri koostamine on skemaatiliselt joonisel 3.

Figure 2: Sisendfailide lugemine

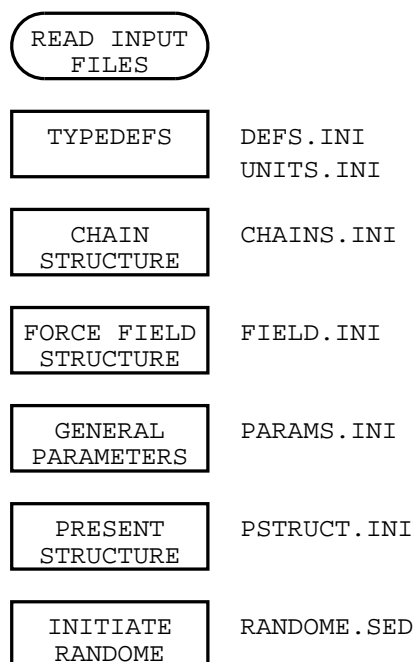
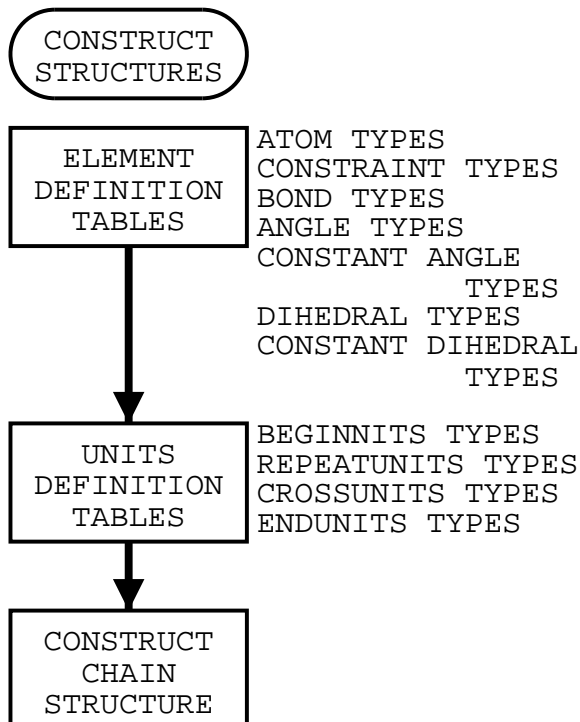


Figure 3: Genereeritava struktuuri koostamine



5 Sisend

5.1 mcgen käsuri

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. Kommentaarireas 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* seksioonides 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. *CONSTDIHEDRALS* seksioonis tähendab muutuja väärtus '0.0' täielikku juhuväärtuse genereerimist.

Fail on jagatud seksioonideks. Iga seksioon 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 seksioon |
| ATOM | nr | integer | eri tüüpi aatomite arv |
| | | string | aatomi kirje |
| | id | integer | kirje indeks |
| | label | char[4] | aatomi nimetus |
| | mass | double | aatomi mass |
| | charge | double | aatomi laeng |
| | radius | double | aatomi raadius |
| CONSTRAINTS | | string | kauguste seksioon |
| CONST | nr | integer | eri tüüpi kauguste arv |
| | | string | kauguse kirje |
| | id | integer | kirje indeks |
| | atom1type | integer | esimese aatomi tüübi indeks ATOMS-seksioonis |
| | atom2type | integer | teise aatomi tüübi indeks ATOMS-seksioonis |
| | length | double | kaugus ångströmides |
| | tolerance | double | lubatud kõikumine ångströmides |
| BONDS | | string | keemiliste sidemete seksioon |
| BOND | nr | integer | eri tüüpi sidemete arv |
| | | string | sideme kirje |
| | id | integer | kirje järjekorranumber |
| | atom1type | integer | esimese aatomi tüübi indeks ATOMS-seksioonis |
| | atom2type | integer | teise aatomi tüübi indeks ATOMS-seksioonis |
| | name | char[4] | sideme nimetus |
| | forcenr | integer | parameetrite arv |
| | force[1] | double | esimene parameeter |
| | ... | | |
| | force[forcenr] | double | forcenr-is parameeter |
| ANGLES | | string | nurgasidemete seksioon |
| ANG | nr | integer | eri tüüpi sidemete arv |
| | | string | nurgasideme kirje |
| | atom1type | integer | esimese aatomi tüübi indeks ATOMS-seksioonis |
| | atom2type | integer | teise aatomi tüübi indeks ATOMS-seksioonis |
| | atom3type | integer | kolmanda aatomi tüübi indeks ATOMS-seksioonis |
| | name | char[4] | sideme nimetus |
| | forcenr | integer | parameetrite arv |
| | force[1] | double | esimene parameeter |
| | ... | | |
| | force[forcenr] | double | forcenr-is parameeter |
| CONSTANGLES | | string | nurkade seksioon |
| CANG | nr | integer | eri tüüpi nurkade arv |
| | | string | nurga kirje |
| | atom1type | integer | esimese aatomi tüübi indeks ATOMS-seksioonis |
| | atom2type | integer | teise aatomi tüübi indeks ATOMS-seksioonis |

Table 1: (...jätkub...)

| Võtmesõna | Muutuja | Tüüp | Selgitus |
|---------------|----------------|---------|--|
| | 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 |
| CONSTDHEDRALS | | 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 *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 nummeratsioon algab '1'-st. *unitXid* ($X = 1, 2, 3$) väärtus '-1' tähendab, et vajalik aatom saadakse unititist, mis vastavalt *chain.ini*-s olevale infole peab olema valmisgenereeritud unit. Väärtus '+1' tähendab, et vajalik aatom saadakse unitist, mis vastavalt *chain.ini*-s olevale infole genereeritakse peale jooksvat unitit. Väärtus '0' tähendab jooksvat unitit.

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*-seksioonides 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 sidemid pole. Erandiks on siin aatomid, mille külge kinnituvad kõrvalahelad.

units.ini täpsem kirjeldus on toodud tabelis 2.

Table 2: *units.ini* struktuur

| Võtmesõna | Muutuja | Tüüp | Selgitus |
|-------------------------|---------|---------|--|
| UNITS | | string | faili algus |
| BEGINUNITS | | string | algusunitite seksioon |
| UNIT | nr | integer | algusunitite kirjelduste arv |
| | | string | uniti kirjelduse algus |
| genmeth==coords ATOM | id | integer | uniti järjekorranumber antud seksioonis |
| | atomnr | integer | aatomite arv unitis |
| | genmeth | string | genereerimise meetod: |
| | | | aatomid esitakse xyz-koordinaatidena |
| | | 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 ATOM | | | aatomid genereeritakse juhuslikult |
| | | 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 seksioon |
| UNIT | nr | integer | korduvunitite kirjelduste arv |
| | | string | uniti kirjeldus |
| BACKBONE | id | integer | uniti index antud seksioonis |
| | atomnr | integer | aatomite arv unitis: <i>backbone+hydrogens</i> |
| ATOM | | string | <i>backbone</i> -aatomite alamseksioon |
| | 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 |

Table 2: (...jätkub...)

| Võtmesõna | Muutuja | Tüüp | Selgitus |
|------------|---------|---------|--|
| HYDROGENS | atom3id | integer | kolmanda aatomi indeks |
| | | string | <i>hydrogen</i> -aatomite alamseksioon |
| 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 |
| | 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 |
| | id | integer | uniti indeks antud sektsioonis |
| BACKBONE | 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 | | string | <i>hydrogen</i> -aatomite alamseksioon |
| 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 |
| | 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 |
| UNIT | nr | integer | lõpu-unitite kirjelduste arv |
| | | string | uniti kirjeldus |
| | id | integer | uniti indeks antud sektsioonis |
| | atomnr | integer | aatomite arv unitis |

Table 2: (...jätkub...)

| Võtmesõna | Muutuja | Tüüp | Selgitus |
|-----------|---------|---------|--|
| 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. Kommentaarirea 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 seksioonideks. Neist esimesed kaks, *CHAINS* ja *CHAIN unittype==begin* korral, esinevad vaid ühe korra, sest *CHAINS* on faili alguskirje ja igal genereeritava 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. *crossnr*-muutuja väärtus peab olema sama, mis võimaliku ristuniti tüüp, mille külge ahel tuleks ühendada.

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

chains.ini kirjeldus on tablelis 3.

Table 3: *chains.ini* struktuur

| Võtmesõna | Muutuja | Tüüp | Selgitus |
|-----------------|---------|---------|--|
| CHAINS | | string | faili algus |
| | levelnr | integer | ahelatasemete arv |
| | chainnr | integer | ahelakirjete arv |
| unittype==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 |

Table 3: (...jätkub...)

| Võtmesõna | Muutuja | Tüüp | Selgitus |
|-------------------|-----------------------------|---------|---|
| | 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 |
| | crossnr | integer | valitavate <i>CROSSUNITITS</i> -ite tüüpide arv |
| | crosstype[1] | integer | esimene <i>CROSSUNITITS</i> -i tüüp |
| | ... | | |
| | crosstype[<i>crossnr</i>] | integer | <i>crosstype</i> -s <i>CROSSUNITITS</i> -ite tüüp |
| | tolerance | integer | lisatava kõrvalahela lubatud nihe |
| | repeat | integer | lisatavate kõrvalahelate arv |
| CONNECTCROSS | | string | ristuniti ühendamine; jäetakse ära, kui <i>crossnr</i> == 0 |
| | id | integer | ristühenduse indeks |
| | crosstypeid | integer | ühendatava <i>CROSSUNITITS</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 |
| | atom3id | integer | kolmanda aatomi indeks |
| CONNECT2CROSS | | string | ahela jätku ühendamine ristunitiga |
| | id | integer | ühenduse index |
| | crosstypeid | integer | <i>CROSSUNITITS</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 |

Table 3: (...jätkub...)

| Võtmesõna | Muutuja | Tüüp | Selgitus |
|---------------|----------|---------|--|
| | 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 |
| unittype==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 |
| | unittype | string | unitite tüüp |
| | unitid | integer | uniti indeks antud tüübi klassis |
| | cfnr | integer | järgnevate <i>CONNECTFIRST</i> -kirjete arv |
| CONNECTFIRST | | 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 |
| | atom2id | integer | teise aatomi indeks |
| | chain3id | integer | kolmanda aatomi ahela indeks |
| | unit3id | integer | kolmanda aatomi uniti suhtline indeks |
| | atom3id | integer | kolmanda aatomi indeks |
| CLOSE | | string | faili lõpp |

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 energeetilisi lähimõjuseoseid vaid ühe uniti piires. Selliste sidemeplokkide tähiseks siin ja edaspidi on *INxxxx*, kus *xxxx* = *BONDS*, *ANGLES* või *DIHEDRALS*.

Kui uniti tüübiks on *REPEATUNITS*, siis lisanduvad *FIELD*-kirjesse muutujad *cfnr* ja *cunr*. Esimene neist väljendab *INxxxx* 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 *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 vaid *INxxxx*-kirje(te) plokk(e)i ja *FIELD*-kirje ei sisalda *cunr*-muutujat.

field.ini kirjeldus on tabelis 4.

Table 4: *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 | |
| INBONDS | | string | unitit sees ja samatüübiliste unitite vahel olevad sidemed |
| | nr | integer | järgnevate <i>BOND</i> -kirjete arv |
| BOND | 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 samatüübiliste unitite vahel olevad 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 |
| | unit3id | integer | kolmanda aatomi uniti suhteline indeks |
| | atom3id | integer | kolmanda aatomi indeks |
| INDIHEDRALS | | string | unitit sees ja samatüübiliste unitite vahel olevad dihedraalsidemed |
| | nr | integer | järgnevate <i>DIH</i> -kirjete arv |
| DIH | id | integer | sideme indeks |

Table 4: (...jätkub...)

| Võttesõna | Muutuja | Tüüp | Selgitus |
|------------------|----------|--------------|---|
| | 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 |
| | unittype | unitite tüüp | |
| | cfnr | integer | järgnevate <i>INxxxx</i> -kirjeplokkide arv |
| | cunr | integer | <i>INxxxx</i> -kirjeplokkidele järgnevate <i>Cxxxx</i> -kirjeplokkide arv |
| INBONDS | | string | unitit sees ja ahela alguse ühendamiseks vajalikud sidemed |
| | nr | integer | järgnevate <i>BOND</i> -kirjete arv |
| BOND | | | |
| | 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 |
| | unit3id | integer | kolmanda aatomi uniti suhteline indeks |
| | atom3id | integer | kolmanda aatomi indeks |
| INDIHEDRALS | | 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 |

Table 4: (...jätkub...)

| Võtmesõna | Muutuja | Tüüp | Selgitus |
|-------------|-------------|---------|--|
| CCBONDS | 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 |
| BOND | | string | sidemed ristuniti sees ning unitiga, mille külge ristunit ühendatakse |
| | 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 |
| 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 |
| | atom2id | integer | teise aatomi indeks |
| CCDIHEDRALS | chain3id | integer | kolmanda aatomi ahela indeks |
| | unit3id | integer | kolmanda aatomi uniti suhteline indeks |
| | atom3id | integer | kolmanda aatomi indeks |
| | | string | dihedraalsidemed ristunitit sees ing unitiga, mille külge ristunit ühendatakse |
| | nr | integer | järgnevate <i>DIH</i> -kirjete arv |
| DIH | 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 |
| C2CBONDS | 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 |
| BOND | | string | sidemed ristunitiga ahela jätkamisel |
| | 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 |

Table 4: (...jätkub...)

| Võtmesõna | Muutuja | Tüüp | Selgitus |
|--------------|-------------|--------------|--|
| C2CANGLES | 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 ristunitiga ahela jätkamisel |
| | crosstypeid | integer | järgnevate <i>ANG</i> -kirjete arv |
| | id | integer | ühendatava ristuniti tüübiindeks |
| | typeid | integer | sideme indeks |
| | chain1id | integer | sideme tüübiindeks |
| C2CDIHEDRALS | 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 |
| DIH | 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 ristunitiga ahela jätkamisel |
| DIH | crosstypeid | integer | järgnevate <i>DIH</i> -kirjete arv |
| | id | integer | ühendatava ristuniti tüübiindeks |
| | typeid | integer | sideme indeks |
| | chain1id | integer | sideme tüübiindeks |
| | chain1id | integer | esimese aatomi ahela indeks |
| FIELD | 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 | 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 |
| BOND | atom4id | integer | neljanda aatomi indeks |
| | fieldid | string | jõuväljakirje |
| | levelid | integer | kirjeindeks |
| | unitttype | integer | tasmeindeks |
| | cfnr | unitite tüüp | |
| INANGLES | nr | integer | järgnevate <i>INxxxx</i> -kirjeplokkide arv |
| | id | string | unitit sees ja ahela alguse ühendamiseks vajalikud sidemed |
| | typeid | integer | järgnevate <i>BOND</i> -kirjete arv |
| | chain1id | integer | sideme indeks |
| | unit1id | integer | sideme tüübiindeks |
| ANG | atom1id | integer | sideme tüübiindeks |
| | chain2id | integer | esimese aatomi ahela indeks |
| | unit2id | integer | esimese aatomi uniti suhteline indeks |
| | atom2id | integer | esimese aatomi indeks |
| | chain2id | integer | teise aatomi ahela indeks |
| INANGLES | unit2id | integer | teise aatomi uniti suhteline indeks |
| | atom2id | integer | teise aatomi indeks |
| | nr | string | unitit sees ja ahela alguse ühendamiseks vajalikud |
| | id | integer | nurgasidemed |
| | nr | integer | järgnevate <i>ANG</i> -kirjete arv |
| ANG | id | integer | sideme indeks |

Table 4: (...jätkub...)

| Võtmesõna | Muutuja | Tüüp | Selgitus |
|-------------|----------|---------|---|
| INDIHEDRALS | 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 | | string | unitit sees ja ahela alguse ühendamiseks vajalikud dihedraalsidemed |
| | 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 |
| CLOSE | | string | faili lõpp |

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

5.6 Üldised sisendparameetrid: *params.ini*

params.ini sisaldab ahela genereerimiseks vajalikke abiparameetreid. Faili nimi pole fikseeritud ja see tuleb sisestada **mcgen** käsurealt. *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
B_LNG 1.3
MAXEN 1000000
MAXTRY 10000000000
MAXTRYUNIT 500
GEOMCONSTRNR 0
TEMPERATURE 300
CUTOFF 10.0 0.0001
RANDOM 2 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 oktaeedrilised ääritingimused

IMCON=5 - rombilised dodekaheedrilised ääritingimused

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

B_LNG B_LNG - keemilise sideme baaspikkus

fikseeritud võtmesõna : double

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

GEOMCONSTRNR GEOMCONSTRNR - erinevate geomeetriliste piirangute arv

fikseeritud võtmesõna : integer

Nüüd järgneb 'GEOMCONSTRNR' arv piirangute kirjeldusi. Igat piirangut kirjeldab alljärgnev kirje:

GEOM GMTYPE GMPAR1 GMPAR2 GMPAR3 GMPAR4 GMPAR5 GMPAR6 GMPAR7

fikseeritud võtmesõna : integer : double : double : double : double : double : double : double

GMTYPE - geomeetrilise piirangu tüüp; olemasolevad tüübid:

- 0 - piirangud puuduvad
- 1 - sfääriline piirang: määratud sfääri sisse ahelat ei genereerita
- 2 - kiht: määratud kihist väljapoole ahelat ei genereerita
- 9 - kasutaja defineeritud piirang

GMPAR1 - esimene piiranguparameeter

GMPAR2 - teine piiranguparameeter

GMPAR3 - kolmas piiranguparameeter

GMPAR4 - neljas piiranguparameeter

GMPAR5 - viies piiranguparameeter

GMPAR6 - kuues piiranguparameeter

GMPAR7 - seitsmes piiranguparameeter

Kui geomeetrilisi piiranguid pole, siis peab 'GEOMCONSTR' väärtus olema '0' ja peale seda võtmesõna ei tohi olla ühtegi 'GEOM' kirjet.

GMTYPE=1 on sfääriline piirang. GMPAR1, GMPAR2 ja GMPAR3 on selle sfääri keskpunkti x-, y- ja z-koordinaadid. Ahelat selle sfääri sisse ei genereerita. GMPAR4 on selle sfääri raadius. Teised parameetrid GMPAR* (*=5,6,7) peavad olema '0.0'.

GMTYPE=2 on teatud paksusega kiht xy-tasandil, mille sisse ahel genereeritakse. GMPAR1 on kihi alumise välis-tasandi z-koordinaat ja GMPAR2 on ülemise välis-tasandi z-koordinaat. Teised parameetrid GMPAR* (*=3,4,5,6,7) peavad olema '0.0'.

GMTYPE=9 on kasutaja defineeritud piirang. Piirangu kood peab olema funktsioonis

```
user_geom_constr(int imcon, double *unitcell, double x, double y, double z, double par1, double par2, double par3, double par4, double par5, double par6, double par7)
```

failis *userfunc.cpp*.

Sisend:

```
int imcon - kujutistüüp 'IMCON'
double *unitcell - ühikrakk 'CELL'
double x - jooksva aatomi x-koordinaat
double y - jooksva aatomi y-koordinaat
double z - jooksva aatomi z-koordinaat
double par1 - piiranguparameeter 'GMPAR1'
double par2 - piiranguparameeter 'GMPAR2'
double par3 - piiranguparameeter 'GMPAR3'
double par4 - piiranguparameeter 'GMPAR4'
double par5 - piiranguparameeter 'GMPAR5'
double par6 - piiranguparameeter 'GMPAR6'
double par7 - piiranguparameeter 'GMPAR7'
```

TEMPERATURE TEMPERATURE - simulatsiooni temperatuur Kelvini skaalas

fikseeritud võtmesõna : double

CUTOFF CUTOFFDIST CUTOFFSTEP - kaugmõjuinteraktsioonide lõikekaugus

fikseeritud võtmesõna : double : double

CUTOFFDIST - kaugmõjuinteraktsioonide lõikekaugus

CUTOFFSTEP - kaugmõjuinteraktsioonide lõikesamm

RANDOME RANDVAL RANDSTART - tagasivõtu parameetrid

fikseeritud võtmesõna : long : long

RANDVAL - tagasivõetavate *unit*ite maksimaalne arv

RANDSTART - proovide arv *unit*i kohta, millest alates rakendatakse tagasivõtmist

CLOSE - faili lõpp

fikseeritud võtmesõna

5.7 Kasutaja defineeritavad geomeetrilised piirangud: *userfunc.cpp*

userfunc.cpp fail sisaldab funktsiooni 'user_geom_constr' kasutaja poolt defineeritavate geomeetriliste piirangute jaoks. Faili nimi on fikseeritud. Täienduste kasutamiseks tuleb **mcgen** uuesti kompileerida. Seda funktsiooni kutsutakse välja klassis COORDS. Esialgne kasutaja defineeritud geomeetriliste piirangute funktsioon on failis *userfunc.cpp* alljärgnev:

```
#include <math.h>
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include "image.h"

int user_geom_constr(int imcon, double *unitcell, double x,\\
double y, double z, double par1, double par2, double par3,\\
double par4, double par5, double par6, double par7)
{
int tmp;
tmp=0;

return tmp;
};
```

userfunc.h sisaldab funktsiooni päist.

Funktsioon on kasutatav, kui 'GEOMCONSTR' muutuja failis *params.ini* on suurem kui '0' ja vähemalt ühe 'GEOM' kirje muutuja 'GMTYPE' on '9'.

Sisend:

int imcon - kujutistüüp 'IMCON'
double *unitcell - ühikrakk 'CELL'
double x - jooksva aatomi x-koordinaat
double y - jooksva aatomi y-koordinaat
double z - jooksva aatomi z-koordinaat
double par1 - piiranguparameeter 'GMPAR1'
double par2 - piiranguparameeter 'GMPAR2'
double par3 - piiranguparameeter 'GMPAR3'
double par4 - piiranguparameeter 'GMPAR4'
double par5 - piiranguparameeter 'GMPAR5'
double par6 - piiranguparameeter 'GMPAR6'
double par7 - piiranguparameeter 'GMPAR7'

Väljund:

int user_geom_constr - piirangu staatus
0 - piiranguid pole
1 - olemasolev piirang jooksva aatomi jaoks

Kui kasutaja tahab lisada rohkem kui ühe sisseehitatutest erineva geomeetrilise piirangu, siis peavad need kõik olema selles samas 'user_geom_constr' funktsioonis. Kasutaja defineeritud piirangutele saab *params.ini* faili kaudu edastada vaid 7 parameetrit. Ülejäänud parameetrid tuleb otse funktsiooni sisse kirjutada. Nende igakordne muutmine nõuab **mcgen** ümberkompileerimist.

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");
```