

mcgen kasutajajuhend

Heiki Kasemägi, Endel Soolo, Alvo Aabloo

ja
Josh Thomas

June 1, 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 | 9 |
| 5.1 | <i>mcgen</i> käsurida | 9 |
| 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 | Kaugmõjuinteraktsioonid: <i>vdw.ini</i> | 25 |
| 5.7 | Üldised sisendparameetrid: <i>params.ini</i> | 26 |
| 5.8 | Juhuarvude generaator: <i>randome.sed</i> | 28 |

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 kommertsprogrammidelle. 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 Teie 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 märgest 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 märgest autoriõigusest ja märgest garantii puudumise kohta (või märgest 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 objektкодina 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 objektкодina 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 objektкодi 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 objektкодiga.

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. *unit*i 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

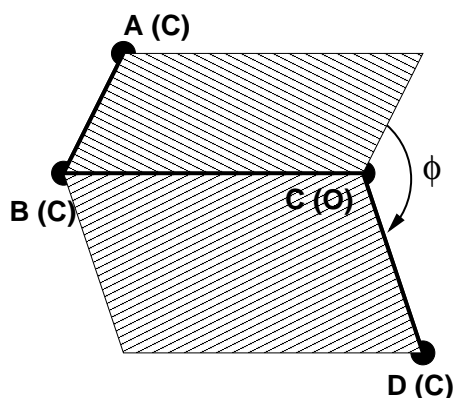
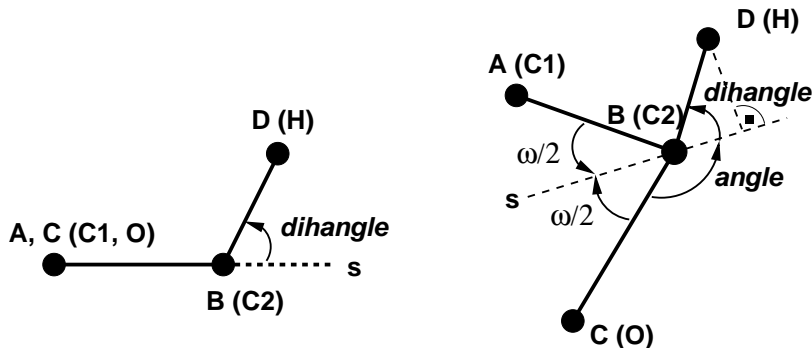


Figure 2: Programmi struktuur



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

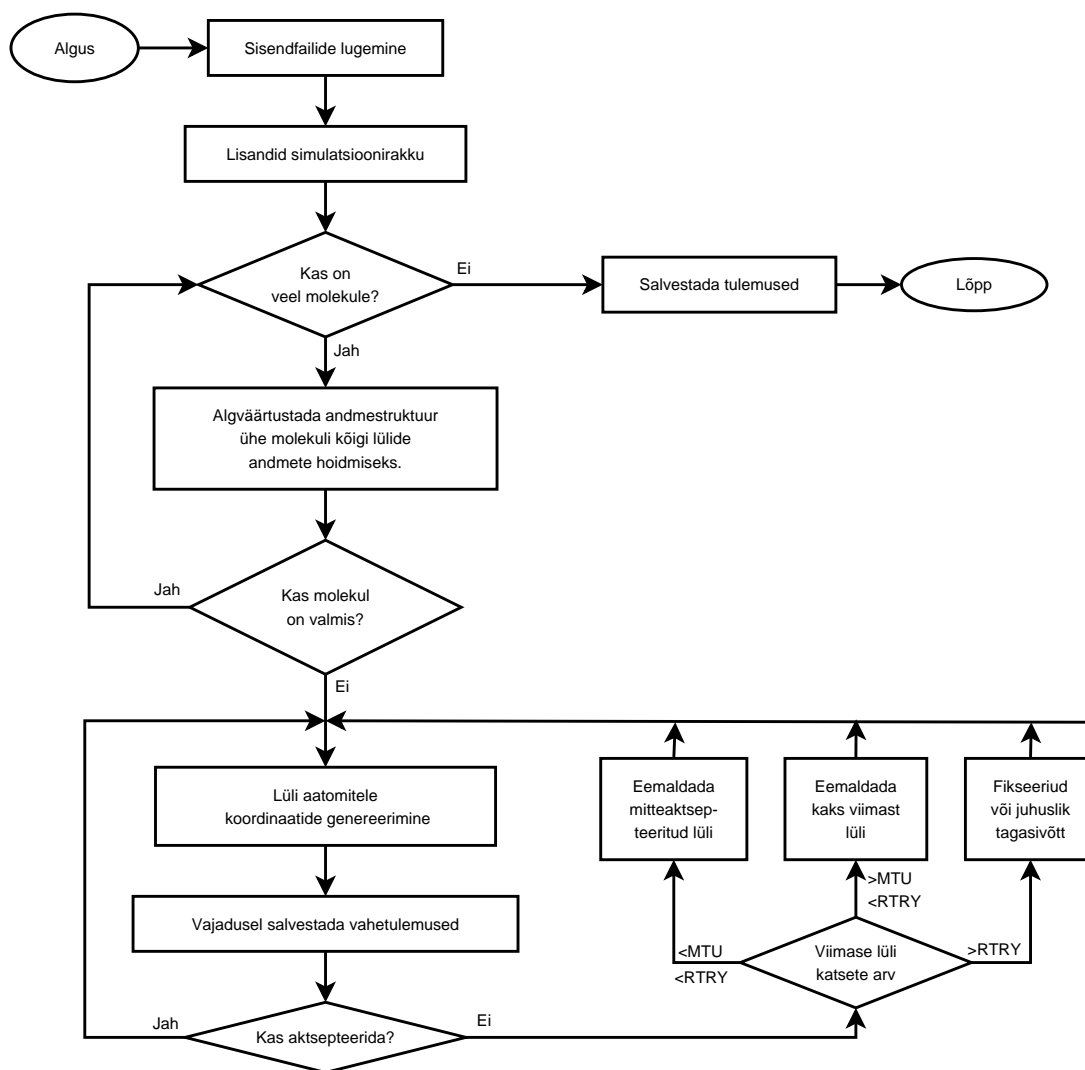
Et ülalkirjedatud meetodil ei leita mitte kõige madalama energiaga konfiguratsioon, vaid esimene lokaalne miinimum, siis teatud tingimustel võib genereerimine joosta ummikusse, s.t. isegi peale suurt proovimiste arvu ei suudeta vajalik hulk *unit*'eid ära genereerida. Sellise olukorra leevendamiseks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

4 Programmi struktuur

4.1 Programmi üldine struktuur

Programmi üldine struktuur on skemaatiliselt joonisel 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 DEFSFILENAME          defs file name
# -p, --params-file PARAMSFILENAME      params file name
# -r, --randome-file RANDEFILNAME       randome file name
# -u, --units-file UNITSFILENAME        units file name
# -c, --chains-file CHAINSFILENAME      chains file name
# -f, --field-file FIELDFILENAME        field file name
# -v, --vdw-file VDWFILENAME            vdw file name
# -x, --xyz-file XYZFILENAME            xyz input file name
# -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 DUMPFILNAME        dump file name to be restored
#
# -h, --help                            display this help and exit
# -V, --version                          output version information and exit
```

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

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. Muututjätüübid 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 uult realt 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 |
| | $blind_1 \dots blind_{blindnr}$ | integer | nimekiri aatomitüüpidest, mis käesolevat tüüpi aatomite suhtes on pimedad ehk mille jaoks käesolevat tüüpi aatomid on nähtamatud. Kui sellel real kirjeldatud tüüpi aatomi genereerimisel jääb ette mõni nimekirjas toodud tüüpi aatom, siis visatakse ettejäanud aatom lihtsalt minema. |
| CONSTRAINTS | | string | kauguste sektsioon |
| | nr | 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 |

Table 1: (...jätkub...)

| Võtmesõna | Muutuja | Tüüp | Selgitus |
|----------------|----------------|---------|--|
| | tolerance | double | lubatud kõikumine kraadides |
| DIHEDRALS | | string | dihedraalsidemete sektsioon |
| DIH | nr | integer | eri tüüpi sidemete arv |
| | | string | sideme kirje |
| | id | integer | kirje järjekorranumber |
| | atom1type | integer | esimese aatomi tüübi indeks ATOMS-sektsioonis |
| | atom2type | integer | teise aatomi tüübi indeks ATOMS-sektsioonis |
| | atom3type | integer | kolmanda aatomi tüübi indeks ATOMS-sektsioonis |
| | atom4type | integer | neljanda aatomi tüübi indeks ATOMS-sektsioonis |
| | name | char[4] | sideme nimetus |
| | forcenr | integer | parameetrite arv |
| | force[1] | double | esimene parameeter |
| | ... | | |
| | force[forcenr] | double | forcenr-is parameeter |
| CONSTDIHEDRALS | | string | dihedraalnurkade sektsioon |
| CDIH | nr | integer | eri tüüpi nurkade arv |
| | | 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* käsuraalt. Faili formaat on fikseeritud. Kommentaarirea ees peab olema '#'. Muutujatel puudub fikseeritud formaat. Muutujatüübid on string, char[n], integer ja double.

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

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

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

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

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

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

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 | |
| $\geq +3$ | lubamatu väärtus | mitte ükski aatom |

kirjeplokk algab võtmesõna ja plokis olevate kirjete arvuga.

BEGINUNITS-seksioonis 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 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 seksioon |
| UNIT | nr | integer | algusunitite kirjelduste arv |
| | | string | uniti kirjelduse algus |
| | id | integer | uniti järjekorranumber antud seksioonis |
| | 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 |

Table 3: (...jätkub...)

| Võtmesõna | Muutuja | Tüüp | Selgitus |
|------------|---------|---------|--|
| | 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 |
| REPEATUITS | | 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 |
| | 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 alamsektsioon |
| | 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 | | string | ristunitite sektsioon |
| | nr | integer | ristunitite kirjelduste arv |
| UNIT | | string | uniti kirjeldus |
| | id | integer | uniti indeks antud sektsioonis |
| | atomnr | integer | aatomite arv unitis |
| BACKBONE | | string | <i>backbone</i> -aatomite alamsektsioon |
| | atomnr | integer | <i>backbone</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 |

Table 3: (...jätkub...)

| Võtmesõna | Muutuja | Tüüp | Selgitus |
|-----------|---------|---------|--|
| HYDROGENS | 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 | hydrogen-aatomite alamseksioon |
| | atomnr | integer | hydrogen-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 |
| ATOM | 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 | lõpu-unitite sektsioon |
| | nr | integer | lõpu-unitite kirjelduste arv |
| | | string | uniti kirjeldus |
| | id | integer | uniti indeks antud sektsioonis |
| | atomnr | integer | aatomite arv unitis |
| | | string | aatomi kirje |
| | id | integer | aatomi index |
| UNIT | 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 | faili lõpp |
| | | | |
| CLOSE | | | |

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

Iga molekulitüübi kohta on üks *CHAINS* sektsioon. See määrab ära molekuli osi kirjeldavate *CHAIN* sektsioonide

arvu ja korduste arvu, mitu niisugust molekuli genereerida.

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

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

NB: *CONNECT2CROSS* ei kirjelda kõrvalahela ühendamist ristunitiga. Seda funktsiooni täidab uues, kõrvalahela jaoks mõeldud *CHAIN*-seksioonis *CONNECTFIRST*-kirje, mida peab olema 1 iga võimaliku ristuniti tüübi jaoks. *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.

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

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

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

Faili lõputähis on *CLOSE*.

chains.ini kirjeldus on tabelis 4.

Table 4: *chains.ini* struktuur

| Võtmesõna | Muutuja | Tüüp | Selgitus |
|---------------------------|--------------|---------|--|
| STRUCTURE | chaintypesnr | integer | erinevate molekulitüüpide ehk <i>CHAINS</i> -kirjete arv |
| CHAINS | levelnr | string | faili algus |
| | chainnr | integer | ahelatasemete arv |
| | chainnr | integer | ahelakirjete arv |
| | multiplenr | integer | seda tüüpi genereeritavate molekulide arv |
| unittype==begin CHAIN | | | ahela antud osa unitid on <i>BEGINUNITS</i> -tüüpi |
| | chainid | string | ahelakirje |
| | chainid | integer | ahela indeks |
| | levelid | integer | tasemeindeks |
| | unitnr | integer | genereeritavate unitite arv |
| | unittype | string | unitite tüüp |
| | unitid | integer | uniti indeks antud tüübiklassis |
| unittype==repeat CHAIN | | | ahela antud osa unitid on <i>REPEATUNITS</i> -tüüpi |
| | chainid | string | ahelakirje |
| | chainid | integer | ahela indeks |
| | levelid | integer | tesemeindeks |
| | unitnr | integer | genereeritavate unitite arv |
| | unittype | string | unitite tüüp |
| | unitid | integer | uniti indeks antud tüübiklassis |
| | cfnr | integer | järgnevate <i>CONNECTFIRST</i> -kirjete arv |

Table 4: (...jätkub...)

| Võtmesõna | Muutuja | Tüüp | Selgitus |
|----------------|-----------------------------|---------|---|
| CONNECTFIRST | id | string | esimese uniti genereerimiseks vajalikud parameetrid |
| | typeid | integer | kirje indeks |
| | constid | integer | selle uniti tüübiindeks, mille külge ahel pannakse |
| | cangid | integer | kauguse tüüp |
| | cdihid | integer | nurga tüüp |
| | chain1id | integer | dihedraali tüüp |
| | unit1id | integer | esimese aatomi ahela indeks |
| | atom1id | integer | esimese aatomi uniti suhtline indeks |
| | chain2id | integer | esimese aatomi indeks |
| | unit2id | integer | teise aatomi ahela indeks |
| | atom2id | integer | teise aatomi uniti suhtline indeks |
| | chain3id | integer | teise aatomi indeks |
| | unit3id | integer | kolmanda aatomi ahela indeks |
| | atom3id | 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 |
| | repeat | integer | lisatavate kõrvalahelate arv |
| CONNECTCROSS | 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 |
| CONNECT2CROSS | 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 |
| | | string | ahela jätku ühendamine ristunitiga |
| | id | integer | ühenduse indeks |
| | 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 |
| | 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>ENDUNITITS</i> -tüüpi |
| CHAIN | | string | ahelakirje |

Table 4: (...jätkub...)

| Võtmesõna | Muutuja | Tüüp | Selgitus |
|--------------|--------------|---------|---|
| CONNECTFIRST | chainid | integer | ahela indeks |
| | levelid | integer | tasemeindeks |
| | unitnr | integer | genereeritavate unitite arv |
| | unittyp | string | unitite tüüp |
| | unitid | integer | uniti indeks antud tüübiklassis |
| | cfnr | integer | järgnevate <i>CONNECTFIRST</i> -kirjete arv |
| | surefinish | integer | selle katsete arvu ületamisel loobutakse energia kontrollist. Väärtus 0 tähendab piiramatut arvu. |
| | | 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 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 |
| GEOMCONSTRNR | geomconstrnr | integer | erinevate geomeetriliste piirangute arv. järgneb 'geomconstrnr' näidatud arv piirangute kirjeldusi. Iga piirangut kirjeldab üks GEOM-kirje. |
| GEOM | gmtype | integer | geomeetrilise piirangu tüübi kood. |
| | gmpar1 | double | esimene piiranguparameeter |
| | gmpar2 | double | teine piiranguparameeter |
| | gmpar3 | double | kolmas piiranguparameeter |
| | gmpar4 | double | neljas piiranguparameeter |
| | gmpar5 | double | viies piiranguparameeter |
| | gmpar6 | double | kuues piiranguparameeter |
| | gmpar7 | double | seitsmes piiranguparameeter |
| CHAINS | | | Vajadusel järgmine molekul |
| : | | | |
| GEOM | | | |
| CLOSE | | string | faili lõpp |

gmtype - geomeetrilise piirangu tüübid:

0 - piirangud puuduvad

1 - keelusfääriline piirang: määratud sfääri sisse ahelat ei genereerita. gmpar1 – sfääri keskpunkti x -koordinaat, gmpar2 – sfääri keskpunkti y -koordinaat, gmpar3 – sfääri keskpunkti z -koordinaat, gmpar4 – keelusfääri raadius.

11 - sfääriline piirang: ahel on sfääri sees. gmpar1 – sfääri keskpunkti x -koordinaat, gmpar2 – sfääri keskpunkti y -koordinaat, gmpar3 – sfääri keskpunkti z -koordinaat, gmpar4 – sfääri raadius.

2 – x -kiht: määratud kihist väljapoole ahelat ei genereerita. gmpar1 – vähim lubatud x -koordinaat, gmpar2 – suurim lubatud x -koordinaat.

12 – määratud x -kihi sisse ahelat ei genereerita. gmpar1 – vähim keelatud x -koordinaat, gmpar2 – suurim keelatud x -koordinaat.

3 – y -kiht: määratud kihist väljapoole ahelat ei genereerita. gmpar1 – vähim lubatud y -koordinaat, gmpar2 – suurim lubatud y -koordinaat.

- 13 – määratud y -kihi sisse ahelat ei genereerita. gmpar1 – vähim keelatud y -koordinaat, gmpar2 – suurim keelatud y -koordinaat.
- 4 – z -kiht: määratud kihist väljapoole ahelat ei genereerita. gmpar1 – vähim lubatud z -koordinaat, gmpar2 – suurim lubatud z -koordinaat.
- 14 – määratud z -kihi sisse ahelat ei genereerita. gmpar1 – vähim keelatud z -koordinaat, gmpar2 – suurim keelatud z -koordinaat.
- 5 – risttahukas: ahel on risttahuka sees. gmpar1 – vähim lubatud x -koordinaat, gmpar2 – suurim lubatud x -koordinaat. gmpar3 – vähim lubatud y -koordinaat, gmpar4 – suurim lubatud y -koordinaat. gmpar5 – vähim lubatud z -koordinaat, gmpar6 – suurim lubatud z -koordinaat.
- 15 – keeluristtahukas: ahel on väljaspool risttahukat. gmpar1 – vähim keelatud x -koordinaat, gmpar2 – suurim keelatud x -koordinaat. gmpar3 – vähim keelatud y -koordinaat, gmpar4 – suurim keelatud y -koordinaat. gmpar5 – vähim keelatud z -koordinaat, gmpar6 – suurim keelatud z -koordinaat.
- 9 - kasutaja defineeritud piirang.

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 energeetilisi 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 *unittype*==*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 |
| unittype==begin | | | |
| FIELD | | string | jõuväljakirje |
| | fieldid | integer | kirjeindeks |
| | levelid | integer | tasmeindeks |
| | unittype | unitite tüüp | |
| INEXCLUDE | | string | unitit sees ja samatüübiliste unitite vahel olevad kauguse arvutamise erandid |
| | 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 |
| 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 |
| | | string | unitit sees ja samatüübiliste unitite vahel olevad nurgasidemed |
| 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 |
| | | string | unitit sees ja samatüübiliste unitite vahel olevad 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 |
| | | string | unitit sees ja samatüübiliste unitite vahel olevad dihedraalsidemed |
| | nr | integer | järgnevate <i>DIH</i> -kirjete arv |

Table 5: (...jätkub...)

| Võtmesõna | Muutuja | Tüüp | Selgitus |
|-----------------|----------|--------------|--|
| | 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>INxxxx</i> -kirjeplokkide arv |
| | cunr | integer | <i>INxxxx</i> -kirjeplokkidele järgnevate <i>Cxxxx</i> -kirjeplokkide arv |
| INEXCLUDE | | string | unitit sees ja samatüübiliste unitite vahel olevad kauguse arvutamise erandid |
| | 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 |
| 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 |

Table 5: (...jätkub...)

| Võtmesõna | Muutuja | Tüüp | Selgitus |
|-------------|-----------|---------|--|
| CFEXCLUDE | 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 |
| EXC | nr | integer | kauguse arvutamise erandid eelmis(t)e ahela(te)ga järgnevate <i>EXC</i> -kirjete arv |
| | id | integer | erandi indeks |
| CFBONDS | 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 |
| | nr | integer | sidemed eelmis(t)e ahela(te)ga järgnevate <i>BOND</i> -kirjete arv |
| | connectid | integer | <i>CONNECT</i> -kirje indeks |
| 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 |
| CFANGLES | nr | integer | nurgasidemed eelmis(t)e ahela(te)ga järgnevate <i>ANG</i> -kirjete arv |
| | connectid | integer | <i>CONNECT</i> -kirje indeks |
| 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 |
| CFDIHEDRALS | chain3id | integer | kolmanda aatomi ahela indeks |
| | unit3id | integer | kolmanda aatomi uniti suhteline indeks |
| | atom3id | integer | kolmanda aatomi indeks |
| | nr | integer | dihedraalsidemed eelmis(t)e ahela(te)ga järgnevate <i>DIH</i> -kirjete arv |
| | connectid | integer | <i>CONNECT</i> -kirje indeks |
| 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 |
| | unit3id | integer | kolmanda aatomi uniti suhteline indeks |
| | atom3id | integer | kolmanda aatomi indeks |

Table 5: (...jätkub...)

| Võtmesõna | Muutuja | Tüüp | Selgitus |
|-----------|-------------|---------|---|
| CCEXCLUDE | chain4id | integer | neljanda aatomi ahela indeks |
| | unit4id | integer | neljanda aatomi uniti suhteline indeks |
| | atom4id | integer | neljanda aatomi indeks |
| | | string | erandid ristuniti sees ning unitiga, mille külge ristunit ühendatakse |
| 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 |
| CCBONDS | | string | sidemed ristuniti sees ning unitiga, mille külge ristunit ühendatakse |
| | nr | integer | järgnevate <i>BOND</i> -kirjete arv |
| BOND | 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 |
| | | 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 |
| | 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 |
| DIH | 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 |

Table 5: (...jätkub...)

| Võttesõna | Muutuja | Tüüp | Selgitus |
|---------------|-------------|---------|---|
| C2CEXCLUDE | 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 |
| 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 |
| C2CBONDS | 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 |
| | crosstypeid | integer | ühendatava ristuniti tüübiindeks |
| 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 |
| C2CANGLES | chain2id | integer | teise aatomi ahela indeks |
| | unit2id | integer | teise aatomi uniti suhteline indeks |
| | atom2id | integer | teise aatomi indeks |
| | | string | nurgasidemed ristunitiga ahela jätkamisel |
| | nr | integer | järgnevate <i>ANG</i> -kirjete arv |
| ANG | 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 |
| C2CDIHEDRALS | 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 |
| | | string | dihedraalsidemed ristunitiga ahela jätkamisel |
| | nr | integer | järgnevate <i>DIH</i> -kirjete arv |
| | crosstypeid | integer | ühendatava ristuniti tüübiindeks |
| C2DIHEDRALS | 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 |
| C2DIHEDRALS | 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 |
| C2DIHEDRALS | atom3id | integer | kolmanda aatomi indeks |
| | chain4id | integer | neljanda aatomi ahela indeks |
| | unit4id | integer | neljanda aatomi uniti suhteline indeks |
| | atom4id | integer | neljanda aatomi indeks |
| unittype==end | | | |
| FIELD | | string | jõuväljakirje |

Table 5: (...jätkub...)

| Võttesõna | Muutuja | Tüüp | Selgitus |
|-------------|-----------|--------------|---|
| INEXCLUDE | fieldid | integer | kirjeindeks |
| | levelid | integer | tasmeindeks |
| | unitttype | unitite tüüp | |
| | cfnr | integer | järgnevate <i>INxxxx</i> -kirjeplokkide arv |
| EXC | | string | unitit sees ja samatüübiliste unitite vahel olevad kauguse arvutamise erandid |
| | nr | integer | järgnevate <i>EXC</i> -kirjete arv |
| | id | integer | erandi indeks |
| | chain1id | integer | esimese aatomi ahela indeks |
| | unit1id | integer | esimese aatomi uniti suhteline indeks |
| | atom1id | integer | esimese aatomi indeks |
| | chain2id | integer | teise aatomi ahela indeks |
| | unit2id | integer | teise aatomi uniti suhteline indeks |
| INBONDS | atom2id | integer | teise aatomi indeks |
| | | string | unitit sees ja ahela alguse ühendamiseks vajalikud sidemed |
| BOND | nr | integer | järgnevate <i>BOND</i> -kirjete arv |
| | id | integer | sideme indeks |
| | typeid | integer | sideme tüübiindeks |
| | chain1id | integer | esimese aatomi ahela indeks |
| | unit1id | integer | esimese aatomi uniti suhteline indeks |
| | atom1id | integer | esimese aatomi indeks |
| | chain2id | integer | teise aatomi ahela indeks |
| | unit2id | integer | teise aatomi uniti suhteline indeks |
| 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 |
| | atom2id | integer | teise aatomi indeks |
| | chain3id | integer | kolmanda aatomi ahela indeks |
| INDIHEDRALS | unit3id | integer | kolmanda aatomi uniti suhteline indeks |
| | atom3id | integer | kolmanda aatomi indeks |
| | | string | unitit sees ja ahela alguse ühendamiseks vajalikud dihedraalsidemed |
| 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 |
| CFEXCLUDE | atom4id | integer | neljanda aatomi indeks |
| | | string | kauguse arvutamise erandid eelmis(t)e ahela(te)ga |

Table 5: (...jätkub...)

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

5.6 Kaugmõjuinteraksioonid: *vdw.ini*

vdw.ini sisaldab ahelas esinevate kaugmõjuinteraksioonide kirjeldusi. Kaugmõjuinteraksioonides 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 |
| | ... | | |
| | potparam[argnr] | double | <i>argnr.</i> potentsiaaliparameeter |

5.7 Üldised sisendparameetrid: *params.ini*

params.ini sisaldab ahela genereerimiseks vajalikke abiparameetreid. Faili nimi pole fikseeritud ja see tuleb sisestada **mcgen** käsurealt võtmege *-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
NUMMAINFIRST 0
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 - standardised 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 löikekaugus

fikseeritud võtmesõna : double : double

CUTTOFFDIST - kaugmõjuinteraktsioonide löikekaugus

CUTOFFSTEP - kaugmõjuinteraktsioonide lõikesamm

RANDOME RANDVAL RANDSTART [FIXED] - tagasivõtu parameetrid

fikseeritud võtmesõna : long : long : string

RANDVAL - tagasivõetavate *uniti*te maksimaalne arv

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

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

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

fikseeritud võtmesõna : 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

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

NUMMAINFIRST NUMMAINFIRST - *uniti*te arv, mis genereeritakse peale crossunitit põhiahelast enne kõrvalahela genereerimist

fikseeritud võtmesõna : long : integer

NUMMAINFIRST - *unit*ite arv, mis genereeritakse peale crossunitit põhiahelast enne kõrvalahela genereerimist

CLOSE - faili lõpp

fikseeritud võtmesõna

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.