

1. Инициализация

- 1.1. Создание log-файла. Если существует, то запись в конец.
- 1.2. Считывание границ расстояний связей
- 1.3. Считывание имен белков

2. Обработка белков

- 2.1. Считывание SQR-файла (имена аминокислот)
- 2.2. Считывание PDB-файла (координаты атомов)
- 2.3. Считывание RES- файла (минимумы и максимумы информационной энтропии)
- 2.4. Присвоение каждой аминокислоте своего информационного типа
 - 2.4.1. В радиусе 2 аминокислот всем кислотам присваиваются соответствующие типы
 - 2.4.2. Если типов оказалось несколько у одной кислоты, учитываются все
 - 2.4.3. Всем кислотам, у которых не оказалось ни одного типа, присваивается тип *U*
- 2.5. Считывание ELI-файла (границы деревьев)
 - 2.5.1. В строчку записаны номера остатков начала следующего дерева (отсчет от единицы)
 - 2.5.1.1. Если в файле записан только "0", то у белка одно дерево на весь белок
- 2.6. Формирование всех возможных пар аминокислот внутри дерева (и между, если деревьев больше одного)
 - 2.6.1. Для каждой пары кислот проверяется возможность контакта путем выяснения наименьшего расстояния между атомами кислот (поатомное сравнение)
 - 2.6.1.1. Если контакт есть, запись контакта между всеми возможными парами информационных типов контактирующих аминокислот, с указанием кислоты минимума/максимума энтропии
- 2.7. Формирование и запись файлов контактов
 - 2.7.1. Две папки
 - 2.7.1.1. [Имя белка] in/out [{границы расстояний, в которых считается контакт}]
 - 2.7.1.2. Файлы в них однотипны
 - 2.7.1.2.1. Один файл контактов вне зависимости от информационного типа
 - 2.7.1.2.2. Файлы формата matrix_all_[Type 1]_[Type 2]_[Parent 1]_[Parent 2]
 - 2.7.1.2.2.1. Type – информационный тип контактирующей кислоты
 - 2.7.1.2.2.2. Parent – соответствующий минимум/максимум энтропии

3. Формат лога

3.1. Сессия

- 3.1.1. Границы связи
- 3.1.2. Сколько белков
- 3.1.3. Белки
 - 3.1.3.1. Список аминокислот
 - 3.1.3.1.1. [Номер]([имя]): [типы кислоты] ([имя кислоты максимума-минимума, соотв. Этому типу])
 - 3.1.3.2. Деревья
 - 3.1.3.2.1. [Номер]: [начало] [конец]
 - 3.1.3.2.1.1. Начало и конец от единицы
 - 3.1.3.3. Контакты
 - 3.1.3.3.1. Out – между деревьями (если деревьев больше одного)
 - 3.1.3.3.2. In – внутри деревьев
 - 3.1.3.3.2.1. #[номер контакта (между и внутри дерева различны)]: ([AA1], [AA2] {контактирующие аминокислоты, номер от единицы}) name[AA1] [AA2]{однобуквенные коды соотв. кислот} dist = [расстояние между CA-атомами, округленное вниз]