Input

index : int
elements : dict
newfile : file
filename : str
localdict : dict
template : str

---

modify() : void
new_input(localdict : dict,contents : readlines)
comparedicts(params : dict,atom : dict) : dict
inparser(contents : readlines) : dict
fetchparams(atomsdict : dict,contents : readlines) : dict
psplist(params : str_lines_of_input) : list_of_lists

optimize-main

filename : str
newAttr : Integer
template : str
newAttr : Integer

---

main()

AtomsParser
atoms1.outaaa

generator

best : tuple
grade : list
filename : str
temp : float
newAttr : Integer
olddict : dict
newAttr : Integer
dict : dict
out_file : file
ccfile : ccfile

---

generate(olddict : dict,filename : str,temp : float) : dict
dictChanger()
extracter(trait : str) : tuple
getDict() : dict
errorFunction()
__str__() : str

Gaussian_connector

---

runner(filename : str) : file