// Пример параметров для запуска pybinar.py

// exampleinput.txt /rfolder #

// Двойные слэши используются для комментариев, все символы за ними и до конца строки игнорируются

// Лишние пробелы и пустые строки игнорируются

// Блоки могут располагаться в случайном порядке, но внутри блока поля должны идти по заданному порядку

// Блок начинается с ключевого слова

//----------------------------------------------------------------

// Имя/путь входного файла с описанием структуры (параметры ячейки, координаты атомов)

Name:

teststruck.txt

//----------------------------------------------------------------

// Условия задачи

// 2 2 2 // трансляции

// 0// Номер генератора псевдослучайных величин для определения замещаемых атомов: 0 - Стандартный, 1 - Генератор 1 (найду позже), 2 - ..., в перспективе своя формула тоже возможна

// \_ // Параметр рандомизации - любая комбинация символов, либо "TIME", чтобы взять текущее время

// X > X1 1 // Перечисление правил вбрасывания (любое количество строк): "Атом для замены" > "внедряемый атом" количество внедрений

Сonditions:

2 2 2 // трансляции

0 // номер генератора

TIME // параметр рандомизации

Si > X1 1

Si > X1 10

//----------------------------------------------------------------

// Ограничения

// 20// ограничение по времени в мин. для итераций сл.вбрасываний. Также можно использовать формат чччч:мм:сс, т.е. 12:31:23

// 6.0// радиус 2-ой координационной сферы катиона(в ангстремах)!!! 6 Fe-O

// 3.0// радиус 1-ой координационной сферы(в ангстремах)!!!! 12 Fe Fe

// 0// направление хи-квадрат: 1-на возрастание, 0 - на убывание

// 0.1// граница хи-квадрат (stop если достигается эта величина)

Сonstraints:

20 // ограничение времени

6.0 // радиус сферы 2

3.0 // радиус сферы 1

0 // направление χ²

0.1 // ограничение χ² - stop

//----------------------------------------------------------------

// Параметры вывода

// 10.0// границы хи-квадрат( в % ), с кот. начинается выдача данных для GULP. либо ДВА числа через пробел (границы), либо ОДНО для задания отрезка с границами в этом числе и 0 или 100 в зависимости от направления хи-квадрат

// 1 // n, чтобы выводить каждую n-ую попадающую в границы хи-квадрат модификацию. Оставьте пустым, чтобы не выводить. Для каждого вывода будет создан свой набор файлов.

// 1 // печать координат всех размноженных атомов (0 - нет, 1 - да)

// 0 // печать координат всех катионов

// 0 // печать координат катионов, попавших в 2-ю координационную сферу катиона

// 0// печать координат катионов, попавших в 1-ю координационную сферу аниона

// 0 // печать анионов ( в строчку), попавших в 1-ю координационную сферу основного катиона

// 0 // печать катионов ( в строчку), попавших в 1-ю координационную сферу аниона

// 1// печать минимальных значений хи-квадрат

// 1// печать распределения вероятности

// 1// печать координат конфигурации катионов

// 1 // печать координат итоговой конфигурации

// 1 // печать данных для GULP

// 1 // график вероятностей для лучшего распределения и теоретического

Output:

10 // границы χ² для вывода %

100 // выводить каждый n-ый, попавший в границы

1 // печать координат всех размноженных атомов (0 - нет, 1 - да)

0 // печать координат всех катионов

0 // печать координат катионов, попавших в 2-ю координационную сферу катиона

0 // печать координат катионов, попавших в 1-ю координационную сферу аниона

0 // печать анионов ( в строчку), попавших в 1-ю координационную сферу основного катиона

0 // печать катионов ( в строчку), попавших в 1-ю координационную сферу аниона

1 // печать минимальных значений хи-квадрат

1 // печать распределения вероятности

1 // печать координат конфигурации катионов

1 // печать координат итоговой конфигурации

1 // печать данных для GULP

1 // график вероятностей для лучшего распределения и теоретического