

UNEX 2.0

Краткий обзор основных изменений

Юрий В. Вишневский

Билефельдский Университет

2025

Переход UNEX 1.7 → 2.0

Начало работ: август 2023 года

Основные цели:

- гармонизация и упорядочивание синтаксиса,
- систематизация имеющегося функционала,
- подготовка инфраструктуры к новому функционалу.

Окончание работ: 14 апреля 2025 года

Синтаксис команд

Старый:

```
BASE=BASE,<BASE>,</BASE>  
ZMATRIX mol,FREEZM,<ZMAT>,</ZMAT>  
AMPLITUDES mol ELDIFF <AMPL> </AMPL>  
GF=mol,AUTO,0.048  
MBGLS=1-1,2
```

Новый синтаксис:

```
COMMAND: MODE [arg1,arg2, ...] [Keyword1=value1 Keyword2=value2a;value2b]
```

Например:

```
EDTERMS: READ mol <terms>,</terms> Format=unex
```

```
EDTERMS: CALC mol Method=md MDTrjFile=md.trj
```

```
MOLTHERMO: CALC mol Temperature=500.0
```

Согласованы имена режимов работы команды **PRINT**:

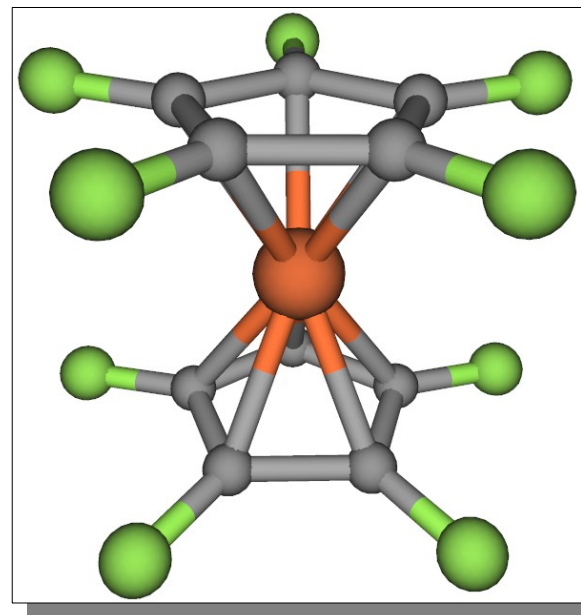
Например,
работа с декартовыми координатами атомов с помощью команды

```
MOLXYZ: READ mol <xyz>,</xyz> [Format=fmt]
```

Название режима для вывода декартовых координат:

```
PRINT: MOLXYZ mol [Format=fmt] [Dummy=bool]
```

Для быстрой визуализации положений атомов можно использовать новую версию UMV (UNEX Molecular Viewer), например:



Синтаксис для задания ключевых слов:

```
Keyword=value
```

Например:

```
<BASE>  
Molecules=anti;gauche  
EDRdfRMax=6.0  
LsqIterMax=10  
LsqEDTrmAmplSfRef=true  
LsqPrint=sensib  
</BASE>
```

Глобальные управляющие ключевые слова разделены на группы, отличающиеся префиксами. Некоторые из префиксов:

Rot — связаны с вращательными постоянными

Lsq — управление методом наименьших квадратов для уточнения мод. параметров.

ED — газовая электронография.

EDScatFac — факторы рассеивания в ГЭ.

EDBgr — фоновая интенсивность в ГЭ.

EDSec — секторная функция в ГЭ.

EDStd — работа со стандартом в ГЭ.

EDRdf — управление кривыми радиального распределения.

Math — настройки математических и численных функций.

Print — управление выводом данных.

Например:

```
PrintXYZPAS=true
```

```
LsqFuncRotConAlpha=1.0e-4
```

```
RotConDerPrmStep=1.0e-6
```

```
EDBgrSmoothReduced=true
```

Использование булевых значений для «вкл./выкл.» параметров.

Ранее в предыдущей версии UNEX:

```
PrintMainInertXYZ=1
```

Теперь:

```
PrintXYZPAS=true
```

Вычисление факторов рассеяния электронов:

EDSCATFAC: CALC mol Lambda=0.05

или

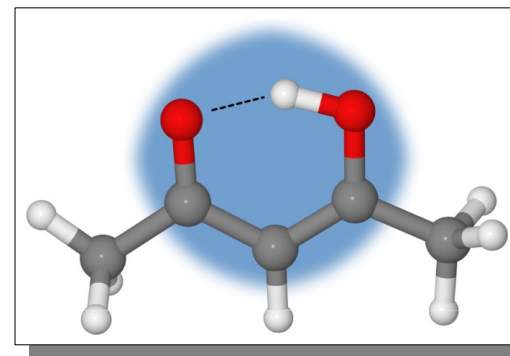
EDSCATFAC: CALC mol Voltage=60.0

Факторы рассеяния можно вычислять для больших энергий в МэВ диапазоне.

Для примера см. работу:

V. Scutelnic, D. Tikhonov, S. Marggi Poullain, E. Haugen, A. Attar, L. Barreau, K. Chang, A. Fidler, J. Gaynor, Y.-C. Lin, J. Yang, E. Champenois, X. Wang, X. Shen, D. Luo, F. Ji, S. Weathersby, Yu. Vishnevskiy, M. Schnell, T. Wolf, M.-F. Lin, S. Leone, Capturing ring opening in photoexcited enolic acetylacetone upon hydrogen bond dissociation by ultrafast electron diffraction, *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 2025, accepted. (Preprint: <https://doi.org/10.21203/rs.3.rs-3668215/v1>)

MeV-UED: 3700 kV



Новая система задания и идентификации ГЭ данных.

Было раньше:

```
INT=READ,<INT>,</INT>  
MINIMIZE=GEDSMS,1-2,2-1
```

```
<INT>
```

```
INT1 Lam=0.05 NtoP=500.0
```

```
1.0 2.345
```

```
1.1 3.456
```

```
.....
```

```
INT1 Lam=0.05 NtoP=500.0
```

```
1.0 2.345
```

```
1.1 3.456
```

```
.....
```

```
INT2 Lam=0.05 NtoP=250.0
```

```
10.0 2.345
```

```
10.2 3.456
```

```
.....
```

```
</INT>
```

Новая система идентификации ГЭ данных.

Теперь в UNEX 2:

```
EDDATA: READ <INT>,</INT>
LSQFUNC: MINIMIZE EDSMS ed2,ed2b

<INT>
Set=ed1  Data=s;iMolExp  Lambda=0.05  NtoD=500.0
1.0  2.345
1.1  3.456
.....
Set=ed2  Data=s;iMolExp  Lambda=0.05  NtoD=500.0
1.0  2.345
1.1  3.456
.....
Set=ed2b Data=s;iMolExp  Lambda=0.05  NtoD=250.0
10.0  2.345
10.2  3.456
.....
</INT>
```

Печать и визуализация ГЭ данных

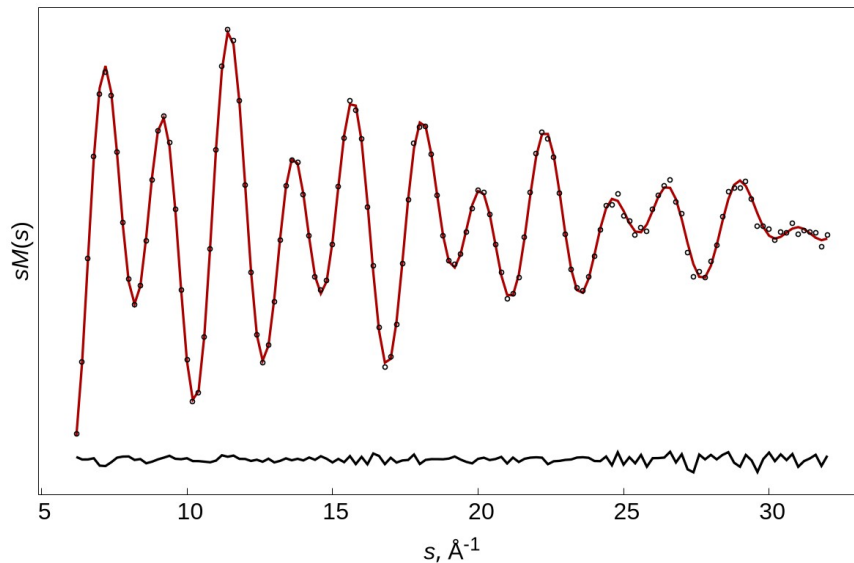
```
PRINT: EDDATA [ed1,ed2,...] Data=type
```

Например:

```
PRINT: EDDATA Data=iMolExp;iMolMod;iMolDif
```

Быстрая визуализация с помощью UintPlot:

```
$ uintplot --data mol,mmol,dmol --curves ed1 unex.log
```

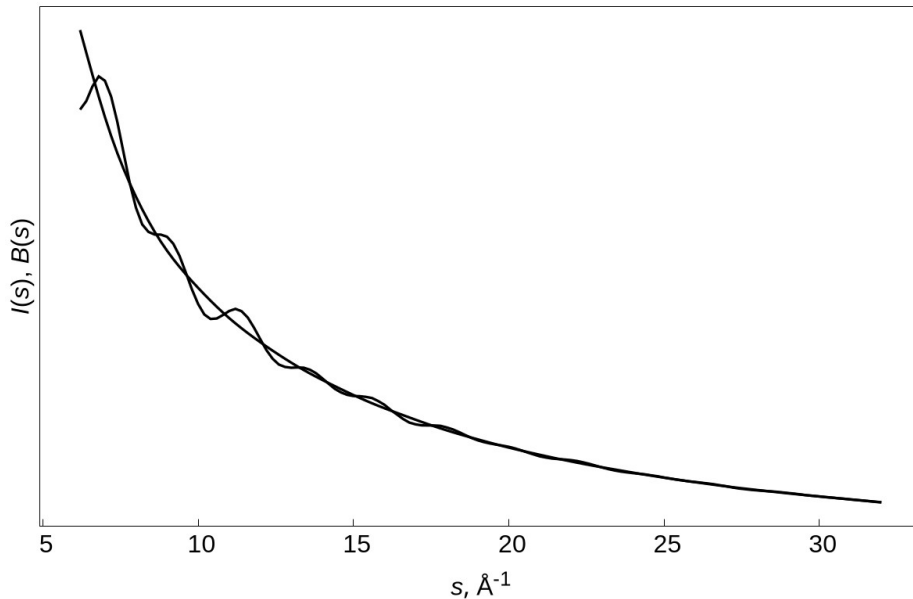


Еще пример:

```
PRINT: EDDATA ed1 Data=iTotExp;iBgr
```

Быстрая визуализация с помощью UintPlot:

```
$ uintplot --data tot,bgr --curves ed1 unex.log
```



Упразднена команда BGL.

Для работы с молекулярной интенсивностью теперь используется EDIMOL:

```
EDIMOL: GETEXP ed [Keywords]
```

Например, выделение экспериментальной $sM(s)$ с использованием кубического сплайна для сглаживания мультипликативного фона:

```
EDIMOL: GETEXP ed1 ItotModel=mbgr BgrSplNInflMax=3
```

В старых версиях UNEX было:

```
BGL=1-1 3
```

Для вычисления кривых радиального распределения

Было:

```
RDF=1-1[,2-1,...]
```

Стало:

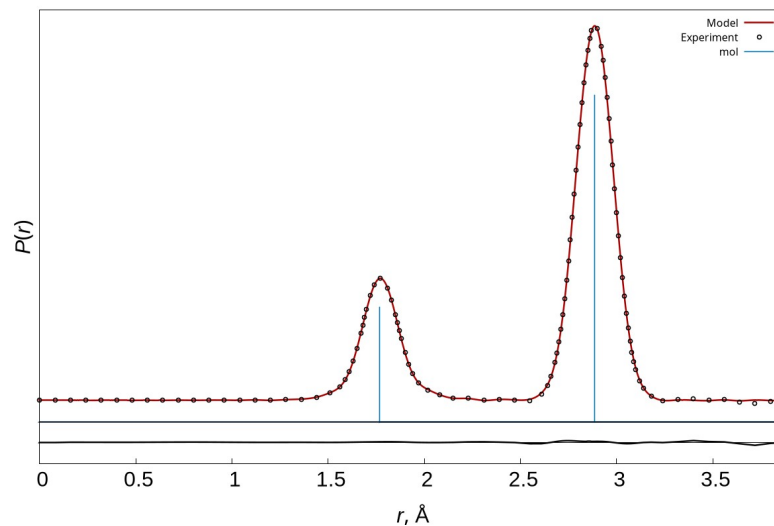
```
EDRDF: CALC ed1[,ed2,...]
```

Полезно для визуализации:

```
PRINT: EDTERMS mol Format=urdfplot
```

Быстрая визуализация
с помощью URDFPlot:

```
$ urdfplot unex.log
```

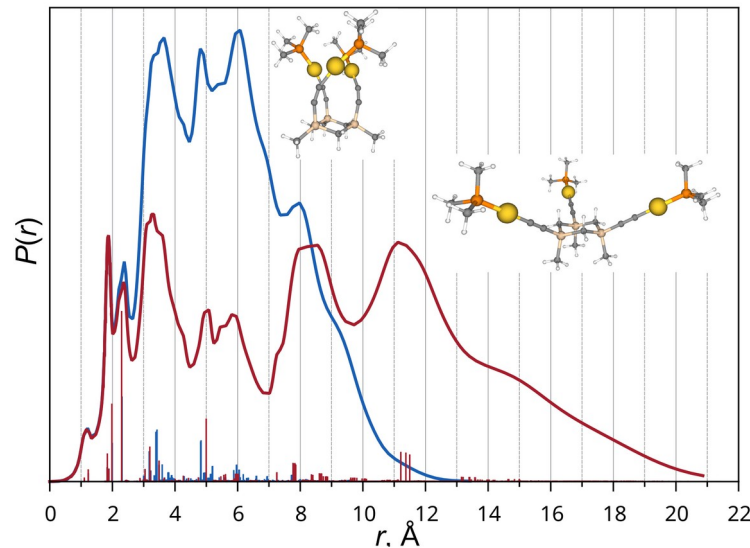
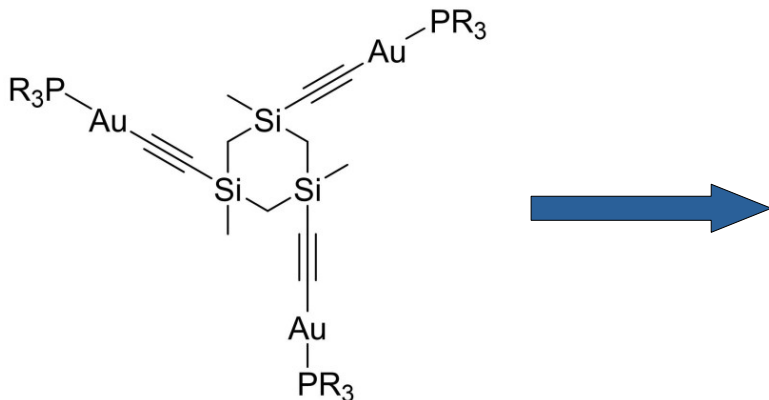


Симуляция кривых радиального распределения.

Очень полезна для проверки полезности ГЭ в решении конкретной научной проблемы.

```
BASE: READ <BASE>,</BASE>  
EDTERMS: READ mol <ampl>,</ampl> Format=unex  
EDSCATFAC: CALC mol Lambda=0.05  
EDRDF: CALC  
PRINT: EDTERMS mol Format=urdfplot  
STOP:
```

Пример:



P. Heinrichs, Y. V. Vishnevskiy, B. Neumann, H.-G. Stammler,
N. W. Mitzel, *Eur. J. Inorg. Chem.* 2024, 27, e202400151.

Новая команда для работы с МНК функционалами для уточнения модельных параметров:

```
LSQFUNC: mode functional(s) [data] [settings]
```

Самый важный режим — минимизация функционала:

```
LSQFUNC: MINIMIZE functional(s) [data] [settings]
```

Например:

```
LSQFUNC: MINIMIZE EDSMS ed1,ed2
```

В UNEX 2.0:

- улучшена сходимость минимизации,
- переработаны критерии сходимости,
- добавлены управляющие ключи для контроля и управления сходимостью.

Введен новый тип данных — «data sample» (рус. «выборка данных» или «набор данных»)

Используется для унифицированного хранения (больших) таблиц численных данных в памяти и на диске.

Генерируются (и сохраняются в файлы) в процедурах:

```
LSQFUNC: SCAN functional [data] [keywords]
```

```
LSQFUNC: RAND functional [data] [keywords]
```

```
LSQFUNC: MCMINIMIZE functional [data] [keywords]
```

```
DATASAMPLE: SIMULATE Model=mdl (Keywords) [Optional keywords]
```

Пример набора данных.

Команда:

```
LSQFUNC: SCAN EDSMS ed11,ed21 SurvGenDS=ds1
```

Файл:

```
Container: UNEX data sample
```

```
Name: ds1
```

```
Comment: LSQ functional surveying in scanning mode
```

```
Version: UNEX 2.0-157-gbec6f023
```

```
Date: Sat Apr 26 11:11:13 2025
```

```
Key: 0
```

```
Data types:
```

```
DEV-TotalF DEV-EDsMwRd SCN-ZmR-2
```

```
Values for at most 101 points:
```

```
5.09575794651908e-01 2.32763475755875e+01 1.76000000000000e+00
```

```
4.93354533892152e-01 2.29028748710953e+01 1.76020000000000e+00
```

```
4.77390496672992e-01 2.25292805489196e+01 1.76040000000000e+00
```

```
.....
```

Контрольная сумма

В конце выходного файла UNEX:

```
*****  
Mon Apr 28 20:34:19 2025  
Normal UNEX termination.  
Total CPU time: 63.00 seconds.  
Total real time: 0 days 0 hours 1 minutes 3 seconds  
Checksum: 579c08064391ed20744eb5797b55c8763dd823f2  
*****
```

Контрольная сумма полезна для проверки соответствия входного и выходного файлов.

Имея такую пару файлов можно запустить UNEX, получить свой выходной файл и сравнить его содержимое и контрольную сумму с таковыми из оригинального.

Сравниваем свой выходной файл с предъявленным для проверки последнего на соответствие входному файлу:

Контрольные суммы	Результаты расчетов	Интерпретация
Совпадают	Совпадают в пределах численной ошибки	Всё в порядке, соответствие.
Отличаются	Совпадают в пределах численной ошибки	Входной файл отличается от оригинала несущественно или результаты не зависят от содержимого входного файла.
Совпадают	Отличаются	Некорректные результаты из-за численно-неустойчивой модели или оригинальный выходной файл был модифицирован!
Отличаются	Отличаются	Входной файл не соответствует предъявленному выходному!

Источники информации о работе с UNEX

- Обновлено руководство пользователя UNEX. Важно: руководство обычно обновляется чаще чем сама программа. См. на сайте: <https://unex.vishnevskiy.group>
- Добавлены тестовые входные файлы. Важно: тесты ни в коем случае не предназначены для демонстрации оптимальных протоколов работы! Они созданы для проверки работоспособности программы и могут только служить примером использования синтаксиса и форматов входных данных.
- Составлена первая версия учебного пособия UNEX. В нем даны простые примеры уточнения параметров молекул по вращательным постоянным и ГЭ интенсивностям. Что еще добавить в первую очередь?