

Simulação Computacional de Líquidos

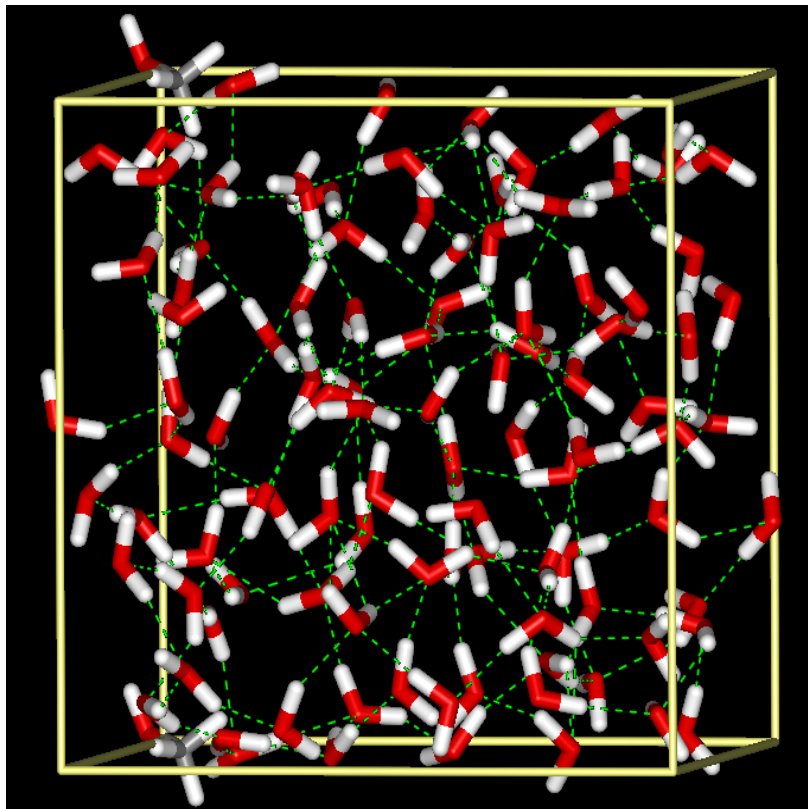
Profa. Kaline Coutinho

kaline@if.usp.br

Instituto de Física da USP

Aula 9: Apresentação do programa DICE:

- Arquivos de entrada (input);
- Arquivos de saída (output);
- Análise de propriedades.



DICE é um programa de licença livre que pode ser baixado do site: <http://portal.if.usp.br/dice/>

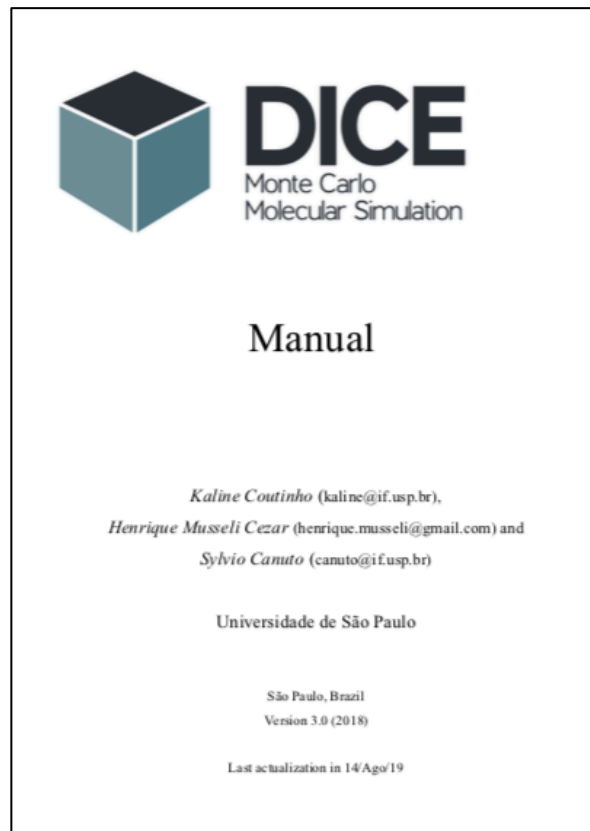
Foi desenvolvido para realizar simulação molecular de líquidos, gases e interfaces sólido-líquido e gás-líquido, com foco em sistemas soluto-solvente. O programa é escrito em Fortran, suporta multithreading com OpenMP e possui diversos algoritmos implementados para amostrar com eficiência configurações de sistemas moleculares em equilíbrio termodinâmico, para moléculas rígidas, flexíveis e semiflexíveis.

A 1a. versão surgiu no início de 1990 para simulação de moléculas rígidas nos ensembles NVT ou NPT com a interação molecular descrita pelos potenciais de Lennard-Jones e Coulomb, e a 1a. publicação foi para o benzeno líquido¹. Desde então, o código foi atualizado continuamente. Tem sido amplamente utilizado para estudar diferentes problemas de efeito de solvente.

Citar como:

“DICE: A Monte Carlo Code for Molecular Simulation Including the Configurational Bias Monte Carlo Method”, Henrique M. Cezar, Sylvio Canuto, and Kaline Coutinho, J. Chem. Inf. Model. (2020) 60, 3472–3488
<https://dx.doi.org/10.1021/acs.jcim.0c00077>

[1] Coutinho, K.; Canuto, S. J. Mol. Struct.: THEOCHEM (1993) 287, 99–106.



Estrutura do DICE:

1) Aplicabilidade

Realiza simulações de sistemas moleculares com método Monte Carlo utilizando modelo de moléculas rígidas e/ou flexíveis.

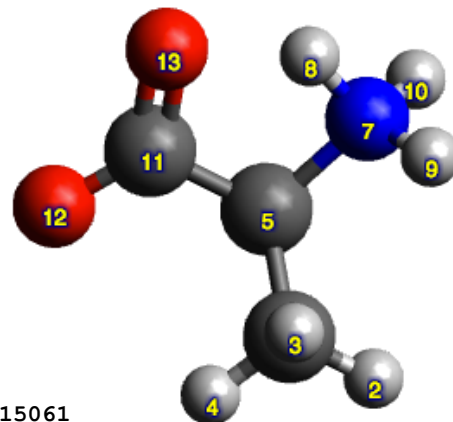
2) Arquivos de entrada: 2 (se moléculas rígidas e +1 se flexível)

(i) **input.txt** (com informações da molécula: ngr, na, x, y, z, q, ϵ , σ)

```
* zw-ala-w.txt
2
13 Alanine OPLS (JACS,106,6638 (1984)) OPT(B3LYP/aug-cc-pVDZ) q eps sig
1 6 1.217948 1.324993 -0.357693 0.000 0.160 3.910
2 1 2.254410 1.482231 -0.034464 0.000 0.000 0.000
2 1 1.199253 1.120647 -1.435086 0.000 0.000 0.000
2 1 0.647290 2.246372 -0.184761 0.000 0.000 0.000
3 6 0.537507 0.201201 0.416250 0.210 0.080 3.800
4 1 0.614838 0.382701 1.507637 0.000 0.000 0.000
5 7 1.206764 -1.148440 0.137610 -0.300 0.170 3.250
6 1 0.364796 -1.625830 -0.219675 0.330 0.000 0.000
7 1 1.963672 -1.093835 -0.575377 0.330 0.000 0.000
8 1 1.592248 -1.621623 0.999648 0.330 0.000 0.000
9 6 -0.892430 -0.013894 0.041205 0.700 0.105 3.750
10 8 -1.651423 0.945664 0.214655 -0.800 0.210 2.960
11 8 -1.131328 -1.186337 -0.417126 -0.800 0.210 2.960
3 TIP3P (JCP 79, 926 (1983))
1 8 0.00000 0.117176 0.000000 -0.8340 0.1521 3.15061
2 1 0.75695 -0.468706 0.000000 0.4170 0.0000 0.00000
2 1 -0.75695 -0.468706 0.000000 0.4170 0.0000 0.00000
$end
```

Atenção com a numeração dos grupos

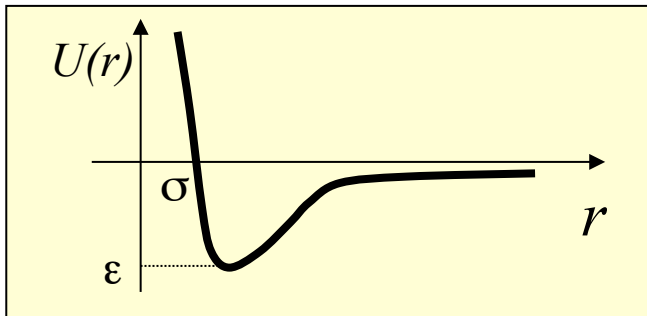
Soluto (zw-alanina)



Solvente (água)

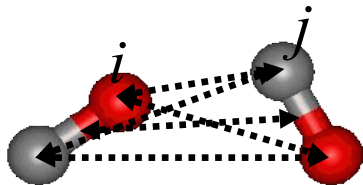
Potencial implementad no DICE para moléculas rígidas

$$u_{\text{nb}} = \sum_i \sum_j f_{ij}^{\text{Q}} \frac{q_i q_j e^2}{r_{ij}} + f_{ij}^{\text{LJ}} 4\epsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right]$$



$$f_{ij}^{\text{Q}} = f_{ij}^{\text{LJ}} = 1$$

para interações entre moléculas diferentes. Estes valores só serão diferente de 1 nas interações intramoleculares: 1-4.



$$\epsilon_{ij} = \sqrt{\epsilon_i \epsilon_j}$$

$$\sigma_{ij} = \sqrt{\sigma_i \sigma_j} \quad \text{ou} \quad \sigma_{ij} = \frac{\sigma_i + \sigma_j}{2}$$

Arquivo: *.txt

(ii) [input.in](#) (arquivos padrão, com informações da simulação: termalização/equilíbrio). Exemplos de arquivos para simulação de moléculas **rígidas em solução aquosa**.

[zw-ala-w.ter](#)

```
title = Simulation of ZW-alanine + 1000 H2O - NPT - thermalization
ljname = zw-ala-w.txt
outname = sim-zwala-w
dielectric = 80.0
electrostatics = reaction-field-born
init = yes
coolstep = 150
nmol = 1 1000
dens = 1.0
temp = 298.15
press = 1.0
accum = no
vstep = 20000
nstep = 5
iprint = 1
isave = 100
irdf = 0
iratio = 10
seed = 65
upbuf = 50
ncores = 2
$end
```

[zw-ala-w.in](#)

```
ncores = 8
title = Simulation of alanine + 1000 H2O - NPT - equilibrium
ljname = ala-w.txt
outname = sim-zwala-w
dielectric = 80.0
electrostatics = reaction-field-born
init = no
accum = no
vstep = 40000
nstep = 5
iprint = 1
isave = 100
irdf = 5
iratio = 50
seed = 1234
upbuf = 50
ncores = 2
$end
```

3) Execução:

\$ dice4 < zw-ala-w.ter > zw-ala-w.ter.out

\$ dice4 < zw-ala-w.in > zw-ala-w.in.out

4) Arquivos de saída:

*.avr (médias das propriedades acumuladas),

*.dat (última configuração),

*.e12, *.e22 (evolução das componentes da energia de interação),

.gr. (função de distribuição radial de pares),

*.prb (percentagem média de visitação de cada molécula),

*.res (arquivo para re-start),

.xyz. (evolução das configurações, ou seja “trajetórias”)

Antes de iniciar as simulações é importante conferir/reparametrizar alguns pontos importante do campo de força:

1. A distribuição de cargas atômicas do soluto devem ser geradas por cálculos quânticos (QM).
 - A sugestão dos campos de força: HF/6-31G* Pop=ChelpG ou Pop=MK.
 - A sugestão no nosso grupo: MP2 ou B3LYP/aug-cc-pVDZ ou cc-pVDZ Pop=ChelpG ou Pop=MK depois realizar outro cálculo com modelo contínuo do solvente água SCRF=(PCM). Comparar as cargas e verificar se existe ou não grande polarização (>30%). Realizar o último cálculo com o solvente específico e usar estas cargas polarizadas na simulação.

Etapas de análise:

1) Conferir dados de entrada no arquivo padrão de saída: [output.out](#)

```
Opening file #####imidz.txt##### ...
Closing file #####imidz.txt##### ...
Generating the initial configuration randomly
Lx= 31.0803967 Ly= 31.0803967 Lz= 31.0803967
20% of the initial config. was generated
40% of the initial config. was generated
60% of the initial config. was generated
80% of the initial config. was generated
100% of the initial config. was generated

Simulation of imidazole + 1000 H2O NPT - thermalization
Geometry and potential file name :imidz.txt
Output file name                 :imidz
Initial configuration             : randomly
Cooling steps                    : 150
Cubic box of length              : 31.0804
Cutoff radius, Rc (Angstrom)    : 15.5402
Number of molecules               : 1001
Temperature (Kelvin)             : 298.1500
Pressure (atm)                   : 1.0000
Density (g/cm**3)                : 1.0000
Seed of the random generator     : 65
All molecules                     : MOVING
All boundary conditions          : Molecular Periodic
    NPT ensemble
Number of volume moves (vstep)   : 10000
Number of mol.moves in each vstep: 5
Total number of MC steps         : 50000
Acceptance ratio of new config.  : 0.50
Frequency of energy print        : 1
Frequency of configuration print  : 100
Frequency of RDF calculation     : 0
Frequency of accept. ratio update: 10
Freq.of vol. accept. ratio update: 50
```

Especial atenção as linhas marcadas em vermelho.

Ver se a carga total da molécula e o dipole estão adequados.

```
Molecules used in this simulation
Atomic type X Y Z Charge Epson Sigma Rvdw
  1 molecules of type 1 :
  1 C -0.0396 0.0548 0.0000 0.2483 0.0800 3.5000
  2 N -1.1764 0.8061 0.0000 -0.1669 0.1700 3.2500
  1 C -0.8036 2.1259 0.0000 -0.2622 0.0800 3.5000
  1 C 0.5733 2.1066 0.0000 0.2196 0.0800 3.5000
  3 N 1.0414 0.8161 0.0000 -0.6449 0.1700 3.2500
  4 H -0.0577 -1.0217 0.0000 0.0729 0.0500 2.5000
  5 H -2.1192 0.4548 0.0000 0.3104 0.0000 0.0000
  4 H -1.5210 2.9269 0.0000 0.1773 0.0500 2.5000
  4 H 1.2438 2.9486 0.0000 0.0455 0.0500 2.5000
Total charge 0.0000
Dipole -4.9182 -0.1068 0.0000 Total Dipole 4.9194 (Debye)
Total Mass 68.1 (a.u.)
1000 molecules of type 2 :
  1 O 0.0000 0.0000 0.0000 -0.8476 0.1550 3.1650
  2 H 0.5774 0.8165 0.0000 0.4238 0.0000 0.0000
  2 H 0.5774 -0.8165 0.0000 0.4238 0.0000 0.0000
Total charge 0.0000
Dipole 2.3512 0.0000 0.0000 Total Dipole 2.3512 (Debye)
Total Mass 18.0 (a.u.)

RDFs that will NOT be calculated

Long-Range Correction (LJ) added in the energy, <U/N>
between molecules type 2 and 1: -0.00007 (kcal/mol)
between molecules type 2 and 2: -0.01158 (kcal/mol)
Total LRC(LJ) per molecule : -0.01165 (kcal/mol)

Energies that will be calculated, see files
type 1 with type 2 : imdz.e12
type 2 with type 2 : imdz.e22

Start cooling process, U/N U1 = 19825.805 65545.250 (kcal/mol)
Step U/N U1
  1 9424.097 34651.660
  2 4161.162 34651.316
  3 2104.191 9333.889
```

```

147      -10.671      -12.496
148      -10.682      -12.502
149      -10.692      -12.399
150      -10.704      -12.407
End cooling process,      U/N U1 =      -10.704      -12.407 (kcal/
mol)

```

Starts the Markovian Process

NMOVE	RATIO	Hc/N	U_1	Density	
1	0.3716	-10.5902	-12.8523	1.0000	#NPT
2	0.3457	-10.4920	-12.3425	1.0000	#NPT
3	0.3586	-10.4288	-12.3389	1.0000	#NPT
4	0.3337	-10.3681	-12.6824	1.0000	#NPT
5	0.3936	-10.3071	-13.0193	1.0000	#NPT
6	0.4246	-10.2603	-12.2866	0.9979	#NPT
7	0.3836	-10.2261	-13.0863	0.9979	#NPT
8	0.3876	-10.2022	-13.0876	0.9979	#NPT
9	0.4026	-10.1660	-13.3281	0.9979	#NPT
10	0.3956	-10.1394	-12.6357	0.9979	#NPT
11	0.4226	-10.1253	-12.1705	0.9979	#NPT
.					
49999	0.4915	-11.4235	-17.5724	1.0254	#NPT
50000	0.5115	-11.4177	-17.5772	1.0254	#NPT

Averages

```

Potential Energy      <U/N> = -11.3137074
Potential Energy of mol. 1 <U1> = -17.588686
Potential Solute-solvent <Uxs> = -35.177372
Potential Solvent-solvent <Uss> = -11289.8438
Conformational Enthalpy <Hc/N> = -11.3132744
Solvent-solvent Enthalpy <Hc_ss>= -11289.4102

```

Ver se após o processo de resfriamento o sistema tem energia (ou entalpia) por molécula, U/N (ou H/N), e energia (ou entalpia) do soluto, U1 (ou H1), negativos ou próximo.

Verificar a energia de interação soluto-solvente média, <Uxs>.

Standart Deviation

```
sqrt(<(U/N)^2> - <U/N>^2)      = 0.152988344
sqrt(<(U1)^2> - <U1>^2)        = 1.94687712
sqrt(<(Uxs)^2> - <Uxs>^2)      = 3.89375424
sqrt(<(Uss)^2> - <Uss>^2)      = 153.141327
sqrt(<(Hc/N)^2> - <Hc/N>^2))   = 0.15299131
sqrt(<(Hc_ss)^2> - <Hc_ss>^2)  = 153.144302
sqrt(<V^2>-<V>^2)             = 292.46106
sqrt(<Dens^2>-<Dens>^2)       = 0.0098404102
sqrt(<Hc V>-<Hc><V>)         = 176.882141
```

Properties

```
Volume      <V>                (A**3)      = 29790.7031
Density     <Dens>              (g/cm**3)   = 1.00790679
Total Enthalpy <H/N>            (kcal/mol)  = -9.53779125
Thermal expansion ap           (1/K)       = 0.00930593628
Isothermal compressibility bt  (1/atm)     = 7.07256768E-05
Molar specific heat cp         (kcal/mol K)= 0.138736457
See more in file: imdz.avr
```

RANDOM SAMPLING INFORMATION

```
Attempts to move solute : 0.9954
Maximum attempts to move: 1.0131
Minimum attempts to move: 0.9874
See more informations in file: imdz.prb
```

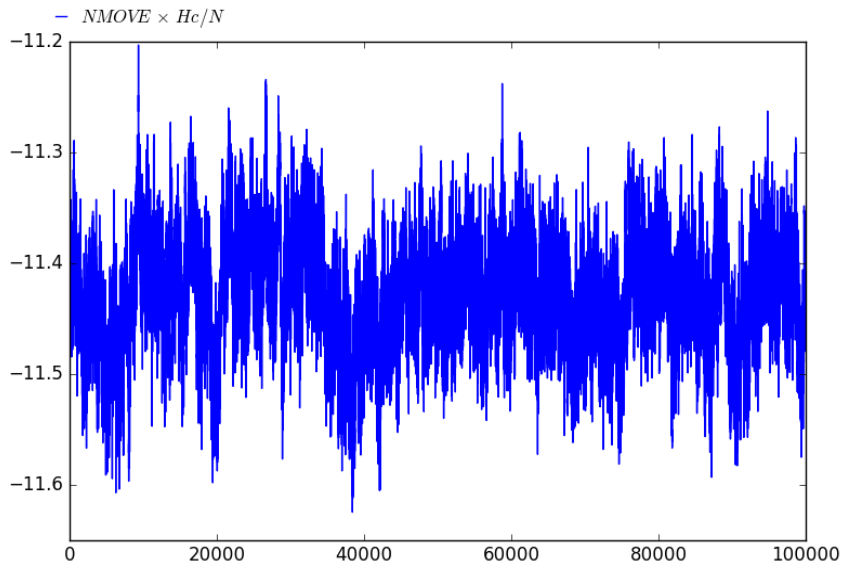
End of the Markovian Process

End of simulation

Verificar a densidade média, <Dens>.

Verificar se a simulação acabou sem mensagem de erro.

2) Graficar grandezas importantes: `imdz.in.out`

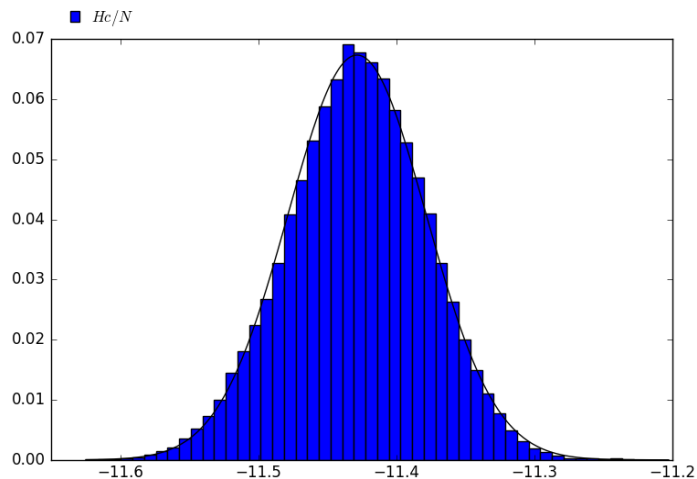


Verificar se a propriedade
satisfaz uma distribuição
gaussiana.

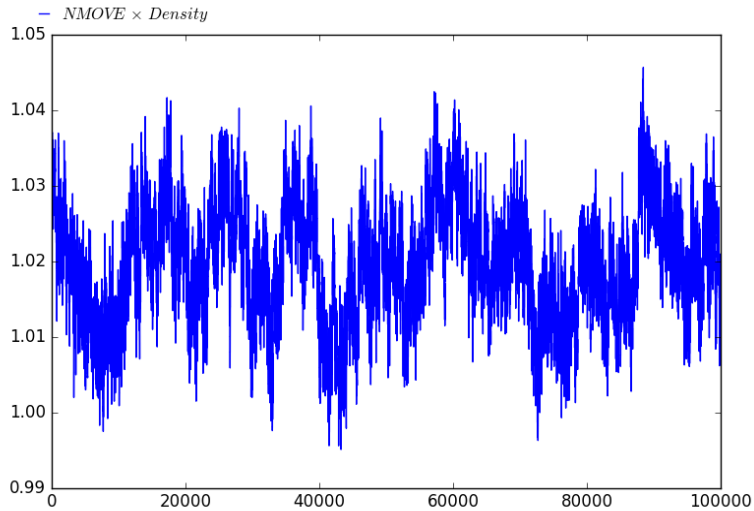
Evolução da entalpia

Estes gráficos podem ser visualizados
com a interface gráfica:

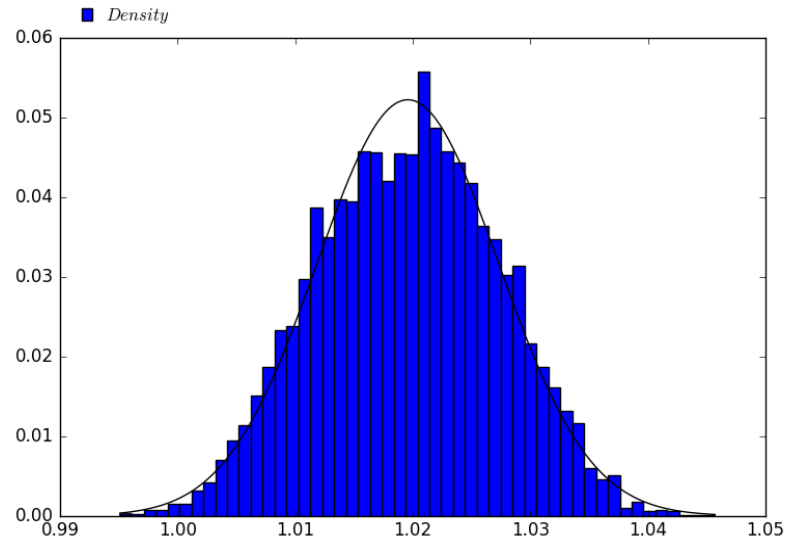
```
python $path/dicewin.py
```



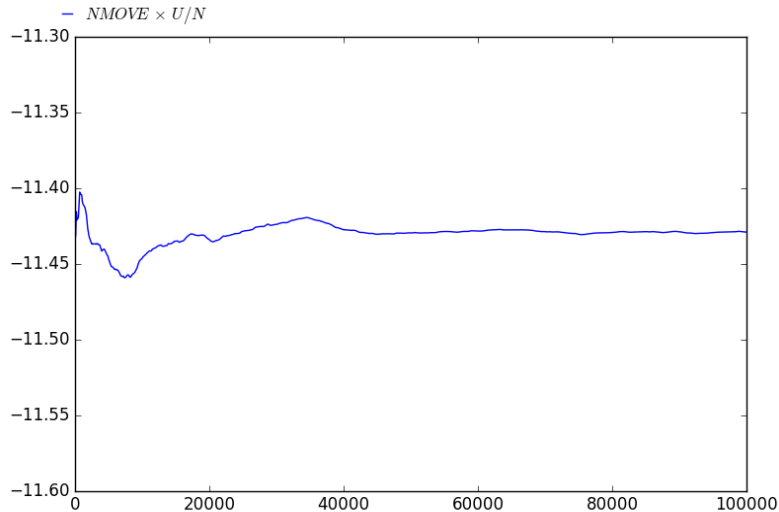
imdz.in.out



Evolução da densidade
(não precisa ser gaussiana)

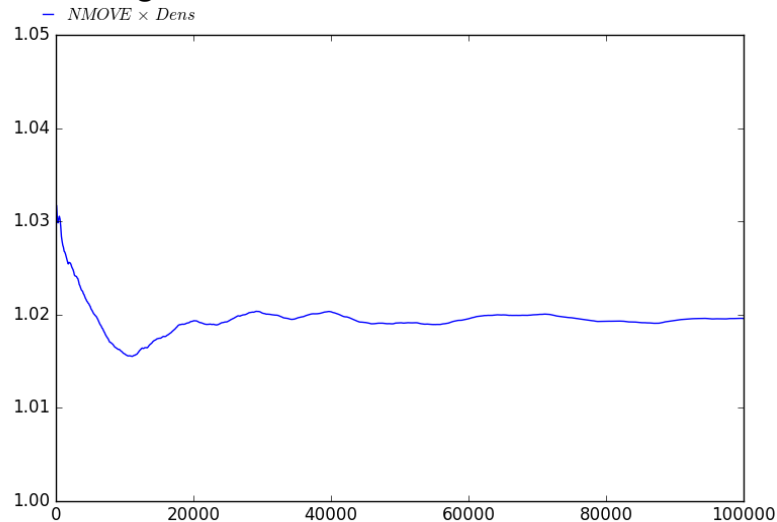


3) Graficar grandezas importantes: `imdz.avr`

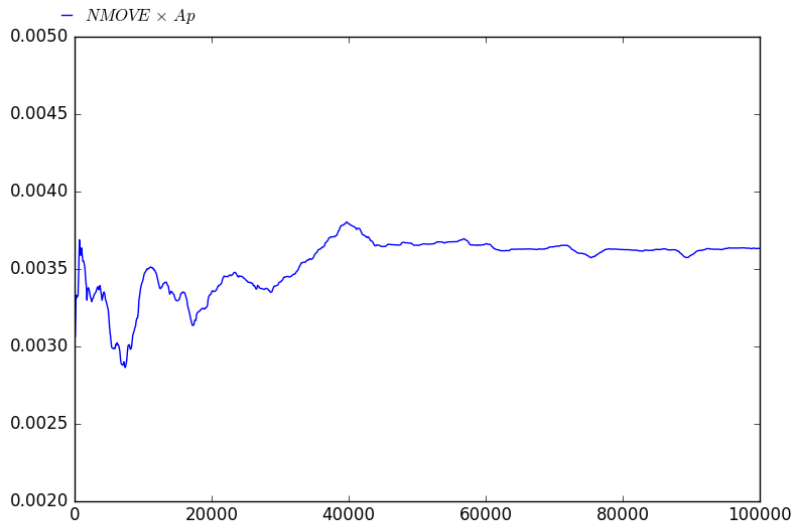


Cuidado com a escala. Pois nenhum propriedade apresenta convergência numa escala muito muito pequena.

Evolução da média acumulada da energia potencial e da densidade, ou seja, em cada ciclo MC, NMOVE, o valor apresentado é a média até ponto. 40 mil ciclos parecem ser suficientes para ter as médias destas propriedades convergidas.

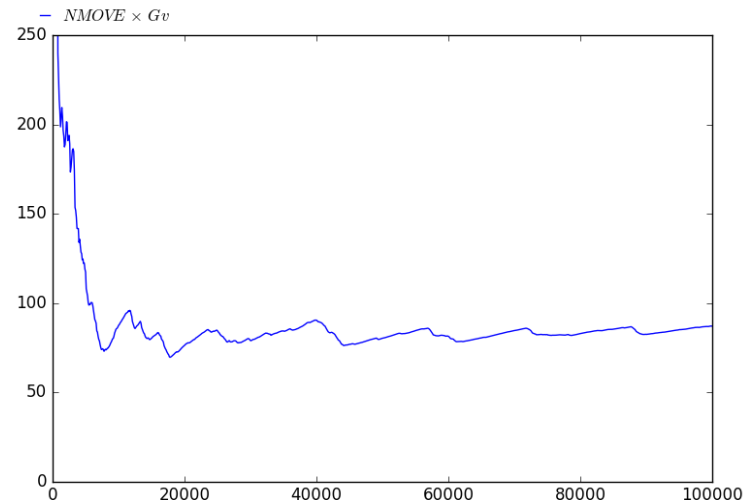


imdz.avr



Para estas propriedades a convergência parecer ter sido atingida após 50 mil ciclos. Destes gráficos é possível estimar a variância do valor médio.

Se tiver interesse em propriedades termodinâmicas analisar a evolução da média acumulada. Exemplo: coefs. de expansão térmica (A_p) e pressão térmica (G_v)



Simulação Computacional de Líquidos

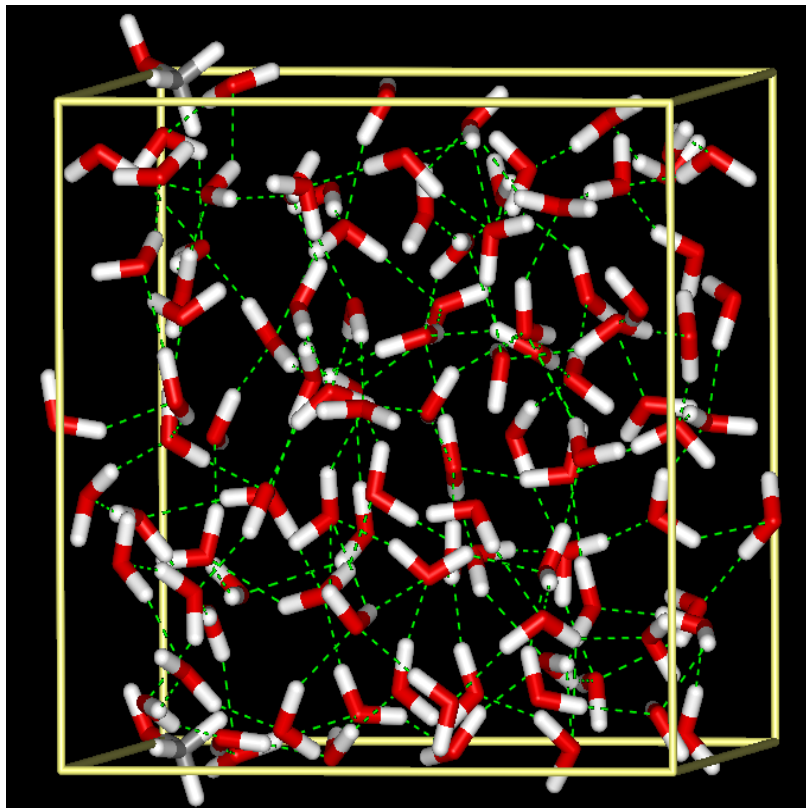
Profa. Kaline Coutinho

kaline@if.usp.br

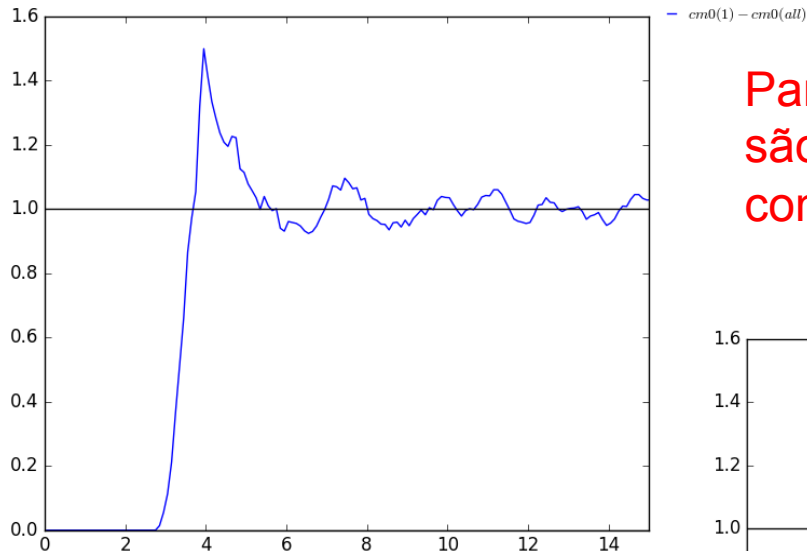
Instituto de Física da USP

Aula 10: Análise de propriedades estruturais com o programa ORDER:

- Camadas de solvatação, e
- Ligações de hidrogênio.

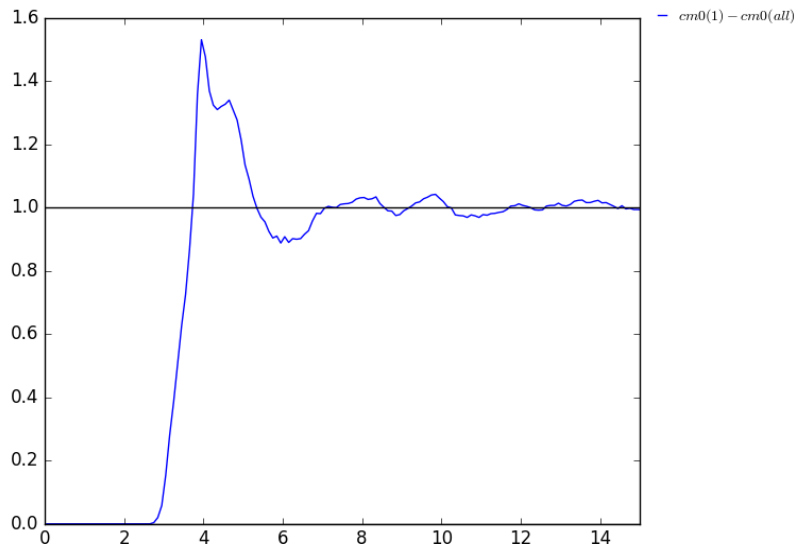


4) Graficar grandezas importantes: imdz.gr

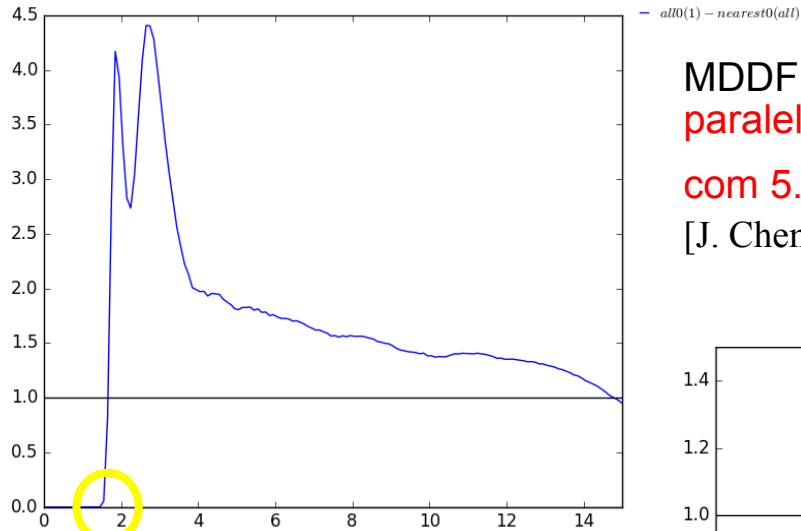


RDF(CM-CM) acumuladas com 5 mil configurações e 20 mil configurações.

Para obter uma RDF de qualidade são necessários pelo menos 35 mil configurações.

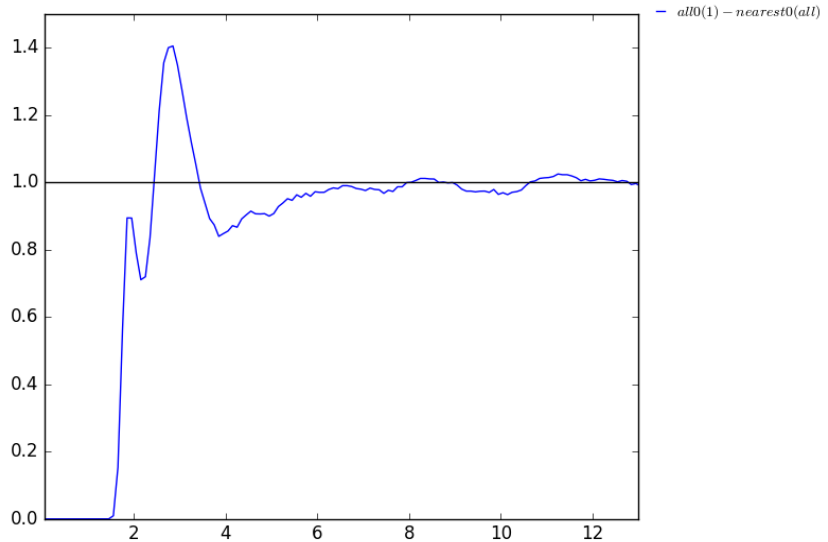


imdz.gr

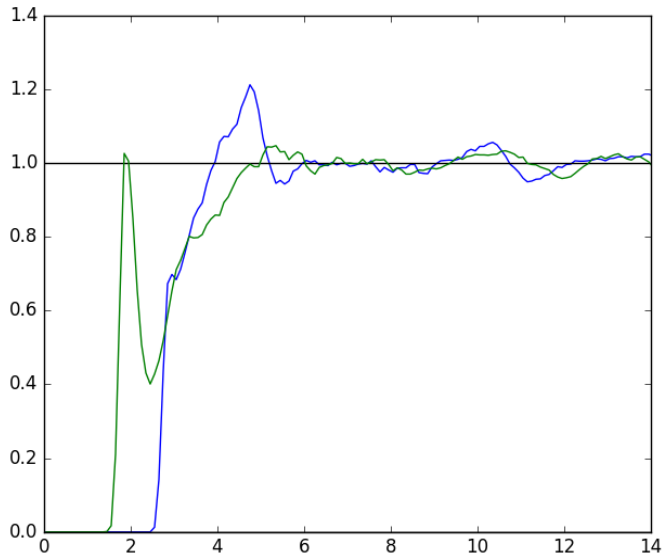


MDDF com normalização esférica e paralelogrâmica considerando o imidazol com 5.5x4.5x3.5

[J. Chem. Phys. 126 (2007) 34507].

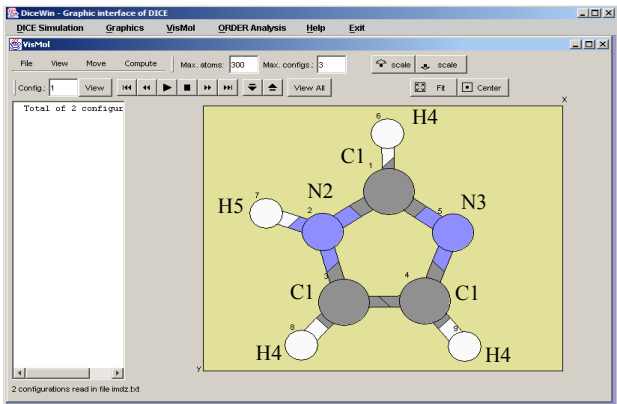
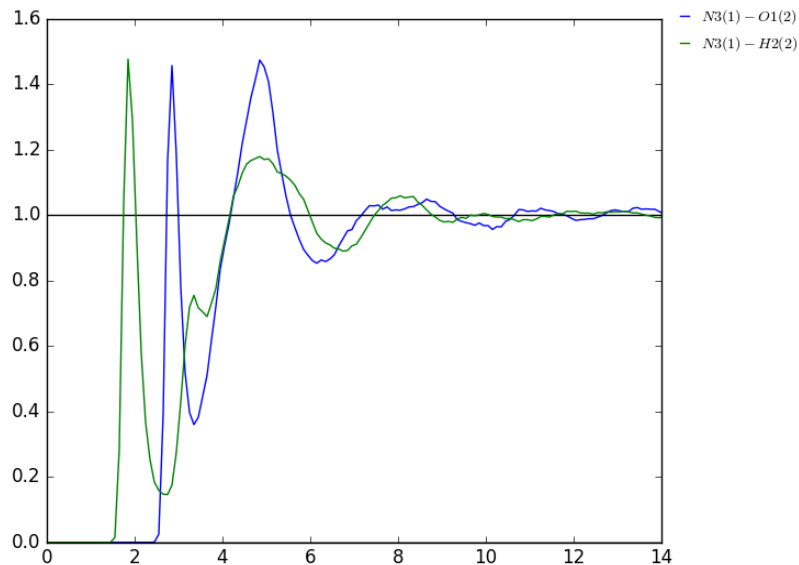


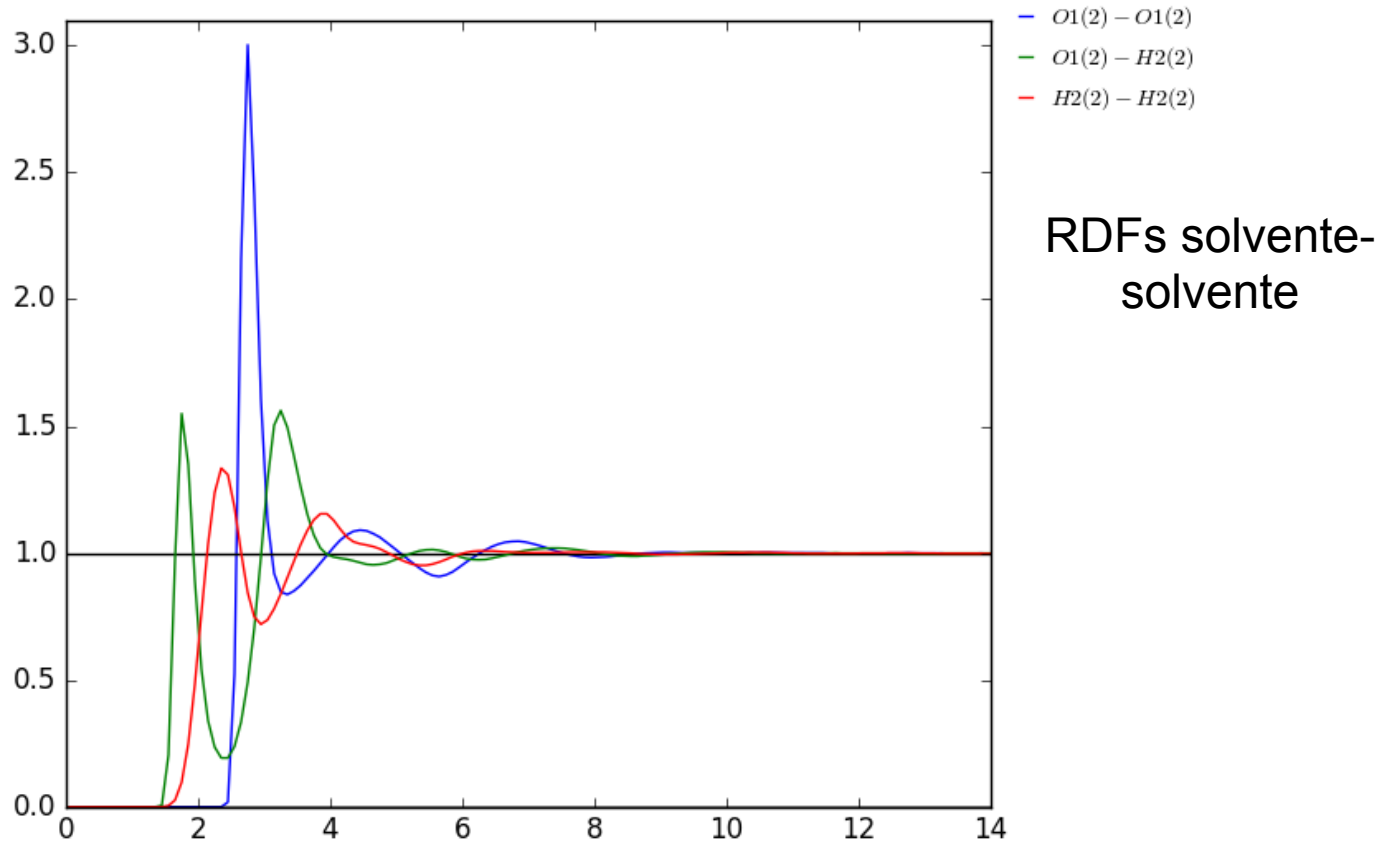
Cuidado com o menor valor!
Deve ser um valor razoável para distâncias intermoleculares.



Ligações de hidrogênio

Analisar as RDF(N2-O) e RDF(H5-O) para o imidazol como doador e RDF(N3-O) e RDF(N3-H) como





Programa auxiliar: ORDER

1) Aplicabilidade:

- Calcula RDFs, energias de pares, distâncias, etc.
- Separa configurações num intervalo,
- Separa parte das configurações como: soluto+Hbonds, soluto+camadas, soluto+mais próximo, etc

2) Arquivos de entrada: 3

`input.txt` (com informações da molécula)

`output.xyz.*` (com configurações)

`input.in` (arquivo padrão, com informações da análise)

`top.txt` (informações para QM)

Exemplo para calcular energia de interação entre pares na configuração inicial.

`order.in`

```
ljname = imdz.txt
inname = imdz0.xyz
nmol = 1 1000
dens = 0.00
cm = -1
freeze = 6 1 2
flexible = no
irdf = no
molprint = 501 0
printconfig = no
printformat = 3
topfile = top.txt
printdummy = no
printinterval = 1
angle = no
hbond = no
$end
```

3) Execução:

`order < order.in > order.out`

4) Arquivos de saída: 3 ou mais

*.dst (com informações de energias, distâncias, etc)

all.xyz. (com as configurações selecionadas juntas)

*_g.gjf (arquivos de entrada para QM)

*_g-pc.gjf (arquivos de entrada para QM com ASEC. Só é gerado se “freeze = a1 a2 a3” e “nmol = 1 n” onde a1= número do átomo do soluto que será alinhado no eixo x, a2= número do átomo que será colocado na origem e a3= número do átomo que será colocado no plano xy; n= número de moléculas como cargas pontuais)

*.hbd (com informações das ligações de hidrogênio soluto-solvente. Só é gerado se “hbond = yes”)

*ss.hbd (com informações das ligações de hidrogênio solvente-solvente. Só é gerado se “hbondsolv = yes”)

*.eij (com informações de energias soluto-solvente)

.or (arquivos de intermediários para QM)

?????.xyz (com cada configuração selecionada separadamente. Só é gerado se “printconfig = yes”)

.gr (com as funções RDFs. Só é gerado se “irdf = yes”)

imdz0.dst

No	Mol	Rcm	Energy	Rmin(1)	i	j	Rmin(2)	i	j
1	949	2.35545	535.32593	0.91797	7	1	1.381535	1	1
1	993	1.81654	*****	1.16171	7	8	1.812762	7	1
1	504	4.08455	13.76248	1.16725	1	1	2.087215	1	8
1	886	3.60446	29.06610	1.17830	1	1	1.959147	1	8
1	408	3.23503	502.83502	1.37900	1	1	1.810182	1	1
1	33	4.08239	9.42725	1.48231	1	1	2.441798	1	1
1	187	2.92327	*****	1.69579	7	8	2.380640	7	1
1	438	3.26800	-0.13453	1.92220	1	1	2.297140	7	1
1	24	4.39133	4.63077	1.98301	1	1	3.167940	1	1
1	851	3.95793	-3.39751	2.23315	1	1	2.820863	1	8
1	894	4.20383	-0.37269	2.27080	1	1	3.591394	1	1
1	247	2.59681	41.28605	2.28360	1	1	2.369153	6	1
1	194	3.90768	2.19573	2.45705	1	8	2.569758	1	1
1	45	5.18127	-0.46258	2.66156	1	1	4.521725	6	1
1	695	5.61629	0.57343	2.79550	1	1	3.463471	1	1
1	954	4.35676	1.02412	2.84324	1	1	3.251176	1	1
1	211	4.98605	0.24996	2.89439	1	1	3.441900	1	1
1	836	3.53520	2.53516	2.91334	1	1	3.032954	1	1
1	587	5.28588	1.19934	3.04035	1	1	3.608984	1	1
1	546	4.88308	-1.69893	3.04316	1	1	3.104172	1	1
1	450	15.58547	-0.02020	13.17481	1	1	14.117420	1	8
1	361	13.45169	-0.06609	13.17912	7	1	13.209211	6	1
1	556	16.04598	-0.00220	13.18746	1	1	13.693802	1	1
1	502	16.12781	-0.03404	13.19378	1	1	14.138206	1	1
1	197	15.10841	0.00863	13.21771	1	1	13.753456	1	1
1	537	14.42677	0.10786	13.22397	7	8	13.285145	1	8
1	968	15.62071	-0.01337	13.23412	1	1	14.501088	1	1
1	520	15.00999	-0.01478	13.26096	1	8	13.564475	1	1
1	937	14.53488	0.02215	13.26640	1	8	13.494378	1	1
1	985	15.49316	0.00603	13.28657	1	1	14.468156	1	1

Exemplo para calcular energia de interação entre pares na configuração inicial.

**** se referem a energias maiores que 999.99999 kcal/mol.

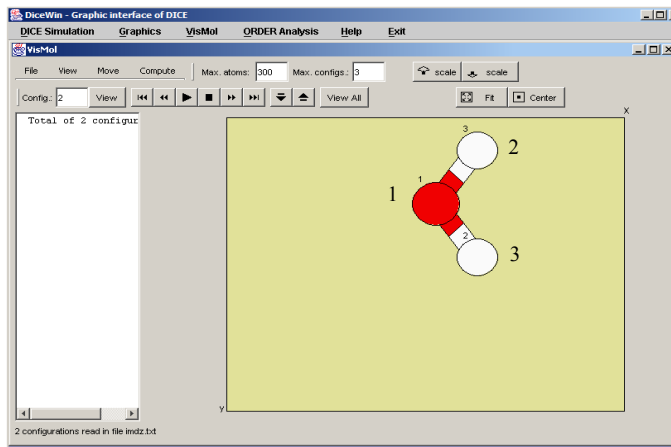
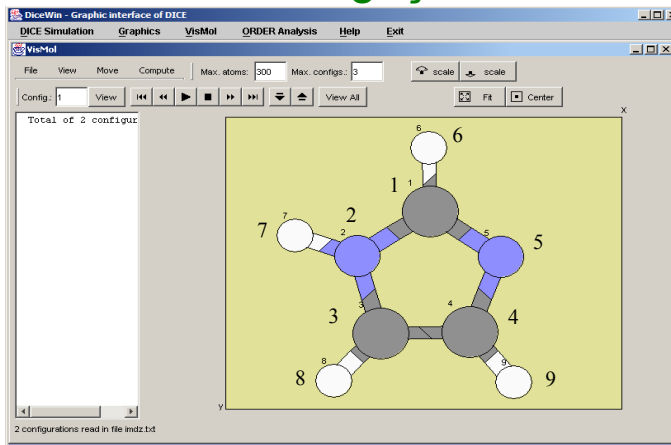
Moléculas muito próximas podem ter energia positiva de interação, ou seja, estão tão próximas que são repulsivas.

Moléculas muito distantes a energia de interação deve ir para zero.

order.in

```
ljname = imdz.txt
iname = imdz.xyz.2
nmol = 1 1000
dens = 0.00
cm = -1
freeze = 6 1 2
irdf = no
molprint = 0 0
printconfig = no
printformat = 3
printdummy = no
printinterval = 1
angle = no
hbond = yes
hbondcriteria = 3.8 40.00 -0.01
soluteacceptor = 2
2 5
solventdonor = 2
2 1
3 1
solventacceptor = 1
1
solutedonor = 1
7 2
$end
```

Exemplo para análise das ligações de hidrogênio



critério padrão

3.5Å, 35°, $E_{\text{interação}}$ Negativa

order.out

```
read lname= imdz.txt
Opening file:####imdz.txt####
read inname= imdz.xyz.2
read nmol= 1 1000
read dens= .000000
read cm= -1 (minimum distance)
read irdf= no
read molprint= 0 0
read printconfig= no
read printformat= 3 (GAUSSIAN)
read printdummy= no
read printinterval= 1
irdf = no (Will not calculate the RDFcm-
cm and MDDF)
Opening file:####imdz.txt####
read freeze= 6 1 2
read angle= no
read hbond= yes
read hbondcriteria= 3.80000 40.0000
-1.000000E-02
read soluteacceptor= 2
  N 2
  N 5
read solventdonor= 2
  H 2 O 1
  H 3 O 1
read solventacceptor= 1
  O 1
read solutedonor= 1
  H 7 N 2
```

RDFs that will NOT be calculated

```
Opening file:####imdz.xyz.2####
Analysing configuration 1 L = 30.7640 30.7640 30.7640
Warning 2: The molecule 3 form HB with more than one atom
1( 5 - 1 2 ) 3 3.4861 31.66 -3.6139 3.4115 2.6867
Only 6 molecules were printed in file: imdz00001.or
Analysing configuration 2 L = 30.7989 30.7989 30.7989
Warning 2: The molecule 2 form HB with more than one atom
2( 5 - 1 3 ) 2 3.6566 36.12 -2.2420 3.2903 2.9092
Only 5 molecules were printed in file: imdz00002.or
Analysing configuration 3 L = 30.7378 30.7378 30.7378
Warning 2: The molecule 2 form HB with more than one atom
3( 5 - 1 3 ) 2 3.6993 36.70 -1.2462 3.1221 2.9584
.
Analysing configuration 994 L = 30.8625 30.8625 30.8625
Warning 3: In configuration 994 The molecule 9 does not pass in
the angular and energetic criteria: 3.34315 40.0348 -2.88629
.
Analysing configuration 1000 L = 30.9542 30.9542 30.9542
Only 4 molecules were printed in file: imdz01000.or

1000 configurations were analyzed

Over 1000 configuration, there are 162 Hbonds in the acceptor atom
N 2 of the solvent. ( .16 in average)
Over 1000 configuration, there are 2209 Hbonds in the acceptor atom
N 5 of the solvent. ( 2.21 in average)
Over 1000 configuration, there are 1086 Hbonds in the donor group
( N 2, H 7) of the solvent. ( 1.09 in average)
```

imdz.hbd

#	Criteria	3.800	40.000	-.001								
#	No	Hbond	Mol	R_OO	Th_OOH	Energy	Rcm	R_OH	Dip_A	Dip_B	Dip_AB	Th_dip
1	(2 - 1 3)		2	3.5194	33.07	-.2941	3.3821	2.7363	4.9194	2.3512	3.6729	134.58
1	(2 - 1 2)		3	3.5290	39.85	-3.6139	3.4115	2.8347	4.9194	2.3512	4.5155	113.81
1	(5 - 1 2)		4	2.9470	22.86	-3.1075	3.6630	2.0625	4.9194	2.3512	6.9313	37.65
1	(5 - 1 2)		6	2.7861	2.62	-6.7056	3.7159	1.7877	4.9194	2.3512	6.7997	44.48
1	(5 - 1 3)		7	3.3255	39.75	-1.3757	3.7883	2.6354	4.9194	2.3512	7.0257	31.93
1	(1 - 2 7)		9	2.7712	21.56	-5.6534	3.8728	1.8723	4.9194	2.3513	6.9130	38.68
2	(2 - 1 3)		2	3.4754	26.68	-2.2420	3.2903	2.6206	4.9194	2.3513	4.7558	107.90
2	(5 - 1 2)		5	2.7927	9.46	-6.1966	3.5264	1.8138	4.9194	2.3512	7.1116	25.69
2	(5 - 1 2)		8	2.8711	7.43	-6.9137	3.9086	1.8839	4.9194	2.3512	6.4330	59.75
2	(1 - 2 7)		13	3.3185	33.09	-.6809	4.3390	2.5357	4.9194	2.3512	6.7645	46.14
2	(1 - 2 7)		14	3.3597	33.80	-3.5284	4.3612	2.5850	4.9194	2.3512	5.3235	93.44
3	(2 - 1 3)		2	3.1917	29.96	-1.2462	3.1221	2.3783	4.9194	2.3513	4.5778	112.29
3	(5 - 1 2)		4	2.7287	14.21	-5.2093	3.6050	1.7763	4.9194	2.3512	6.7110	48.57
3	(5 - 1 2)		6	2.8523	36.13	-5.6350	3.9184	2.1280	4.9194	2.3512	7.2009	16.98
3	(1 - 2 7)		14	3.4853	26.40	-3.0331	4.5490	2.6225	4.9194	2.3513	6.1530	69.42
4	(5 - 1 3)		2	3.6121	20.05	-4.0468	3.1175	2.6946	4.9194	2.3513	3.6068	136.28
4	(5 - 1 2)		5	2.9070	3.49	-6.9747	3.7767	1.9098	4.9194	2.3512	6.5767	54.23
4	(5 - 1 2)		6	2.7923	20.77	-6.6576	3.8283	1.8909	4.9194	2.3512	7.2677	3.48
4	(1 - 2 7)		13	3.2555	25.28	-3.8290	4.3348	2.3847	4.9194	2.3512	6.4936	57.47
5	(2 - 1 3)		2	3.0808	28.78	-3.2435	3.1013	2.2562	4.9194	2.3512	3.8893	129.14