

Jak zpracovat simulační cvičení v MACSIMUSU

1/22
pch00

MACSIMUS nejlépe pracuje pod linuxem. Možnosti:

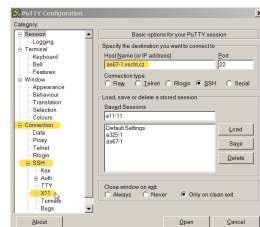
- Budu pracovat na klastrech Ústavu fyzikální chemie:
 - Jako uživatel guest – viz dále
 - Mám vlastní účet na klastru – viz též Instalace MACSIMUSU
- Chci pracovat na svém počítači – viz též Instalace MACSIMUSU
 - Instalují si linux (např. nějakou verzi **Ubuntu**) místo Windows (přijdu o Windows)
 - Instalují si linux pomocí dual-boot zároveň s Windows (vhodné pro geeks)
 - Instalují si linux ve virtuálním počítači pod Windows (náročnější na počítač)
 - Použijí Windows Subsystem for Linux (WSL), který je dostupný pro Windows 10 i 11, a vhodný X11 server (např. **Xming**)
 - Použijí WSLg (jen Windows 11, vhodné pro průkopníky)
 - Použijí port **CygWin**

Připojení na vzdálený počítač metoda 2: PuTTY + Xming


6/22
pch00

Terminál s příkazovým řádkem (PuTTY)

- Windows Start → hledat → **putty** a program spusťte.
- Host name → **403-a324-01.vscht.cz** (nebo jiný počítač)
- Connection → SSH [→ Tunneling] → X11
→ [X] Enable X11 forwarding
- zpět Session → Open
- Login as: guest **máte-li, použijte vlastní účet – viz dále**
- Password: (sdělim)



X server pro zobrazení grafiky (Xming)

- Windows Start → hledat → **xming** a spusťte
- Případné dotazy potvrďte. Ve stavovém řádku se musí objevit ikona 

PuTTY a Xming jsou instalovány v některých počítačových učebnách

Budu pracovat na klastrech Ústavu fyzikální chemie

2/22
pch00

Pro připojení ze **školních Windows** k serveru klastru musíte mít:

- Terminál s příkazovým řádkem, na kterém běží interpret příkazů zvaný **shell**. Vy budete používat **bash**.
Příklad (smaž soubor jménem **blbost.txt**):
`guest@403-a324-01:~/VY$ rm blbost.txt`
Po napsání příkazu se stiskne **[Enter]**
- Grafická nadstavba terminálu (volitelně, pro Windowsáře pohodlnější), můžete použít Midnight Commander **mc**. Spustí se takto:
`guest@403-a324-01:~/VY$ mc`
vyskočí se z něj stiskem **[F10]**.
Příklad (smaž soubor jménem **blbost.txt**):
kliknout (označit) soubor + kliknout **[delete]** nebo stisknout **[F8]**
- X server pro zobrazení grafiky. Grafika se počítá na vzdáleném počítači (klient), na vaši obrazovku (server) se pošle okno k zobrazení
Příklad (zobraz hodiny, start ze shellu):
`guest@403-a324-01:~/VY$ xclock`

Připojení **z domova** pomocí VPN vyžaduje speciální povolení, jehož vyřízení trvá několik dní. Budete-li mít zájem, ozvěte se včas.

Přesun souborů mezi vaším počítačem a klastrem

7/22
pch00

Je součástí MobaXtermu. Pokud by nefungoval, doporučuji "WinSCP". Pokud není ve škole instalovaný, hledejte v Googlu, zvolte "Portable executables", které nevyžadují instalaci.

Možná budete dále zpracovávat soubory následujících typů:

- .g = radiální distribuční funkce
- .cpa = ASCII image konvergenčního profilu
- .z = hustotní profil (ve směru z)

Všechny tyto soubory jsou textové s tím, že konce řádků jsou ukončeny LF, zatímco pod Windows se ukončují dvojicí CR LF. Starší Windows nemusí tyto soubory správně zobrazit. Pak pro konverzi do Windows použijte příkaz (na klastru):
`guest@403-a324-01:~/VY$ unix2dos JMENO_SOUBORU`

Počítače k použití

3/22
pch00

PC klastry (dávkové spouštění delších výpočtů):

- 403-a324-01.vscht.cz (Argon)
- 403-as67-01.vscht.cz (Neon)

Počítače (přímý výpočet – po domluvě):

- 403-a325-05.vscht.cz (2 procesory po 2 vláknech)
- a325-1.vscht.cz (2 procesory)

Přesun dat z webu/Windows na klastr

8/22
pch00

V návodu máte vstupní soubor, jak ho zkopírovat na klastr? Ve Windows označíme daný text a stiskneme **[Ctrl-C]** jako obvykle. V okně terminálu:

- **[Ctrl-Shift-V]**, to ale nefunguje uvnitř Midnight Commanderu.
- Právě nebo prostřední tlačítko myši (podle nastavení prostředí).
- Pokud jsou problémy uvnitř editoru, lze z příkazového řádku takto:
`guest@403-a324-01:~/VY$ cat > SOUBOR`
[Ctrl-Shift-V] nebo prostřední tlačítko myši (příp. pravé)
Není-li kurzor na začátku řádku, **[Enter] [Ctrl-D]**
Pokud soubor již existuje, odmítne se přepsat. Pak lze provést:
`guest@403-a324-01:~/VY$ cat >| SOUBOR`

Připojení na vzdálený počítač metoda 1 – MobaXterm

4/22
pch00

NEDOPORUČUJI: v případě většího množství uživatelů grafy někdy padají

MobaXterm v sobě zahrnuje terminál i X-server.

- Najděte na webu stáhněte "MobaXterm Home Edition – Portable"
není instalován v počítačových učebnách
- Rozbalte, spusťte, potvrďte vše
- Klikněte na **+ Start local terminal**
počítače:
403-a325-1 (2-3 lidi)
403-a325-05 (~5 lidí),
heslo má na konci navíc **xx**
403-a324-01 (ostatní)
- V okně terminálu spusťte vybranou relaci, např.:
`[2019-11-11 11:11.11] ssh -X guest@403-a324-01.vscht.cz`
Heslo řeknu na místě. Během psaní hesla se nic nezobrazuje!
Máte-li vlastní účet na klastru, můžete ho použít (ale vaše výsledky, jako křivky tuhnutí/tavení, nebudou snadno dostupné ostatním).
- Alternativně (resp. v některých verzích MobaXtermu) se jméno počítače (403-a324-01.vscht.cz) a uživatele (guest) napíše do dialogu
- Vzdálený přístup (VPN) z místa mimo školu byl zakázán a je možný pouze na výjimku. Pokud budete počítat úlohu na klastru, nutno požádat o povolení.
- Viz též dále metoda 2 = PuTTY + Xming (je instalované v některých počítačových učebnách)

Midnight Commander

9/22
pch00

Je nadstavba shellu podobná aplikaci Total Commander (Windows Commander) vhodná pro uživatele zvyklé na Windows.

- nastavíte Midnight Commander příkazem
`guest@403-a324-01:~$ mc`
- Z důvodu ostatních uživatelů může být obrazovka v nestandardní pozici. Pak pomocí **[Tab]** přejděte na panel, který má nahoře vlnovku (~). Základní ovládání:

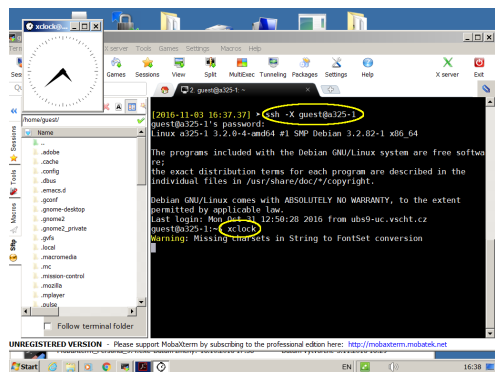
zobrazit výpisy na obrazovku/commander (přepínač)	Ctrl-O
spravit rozbitou obrazovku (po výstupu)	Ctrl-L
prohlížení souboru (může být předefinováno)	F3
editace textového souboru	F4
nový textový soubor + editace	Shift-F4
menu	F9
start asociované aplikace, změna složky	Enter, doubleclick
ukončit Midnight Commander	F10

- Simulační soubory jsou asociovány s aplikacemi (viz přílohy na konci)

¹Vlnovka značí domovskou složku uživatele, zde ~ = /home/guest

Připojení na vzdálený počítač metoda 1 – MobaXterm

5/22
pch00



Problémy...

10/22
pch00

- V Midnight Commanderu nefunguje posuvník.
 - Jste-li v Midnight Commanderu a na obrazovce je smet, stiskněte **[Ctrl-L]**
 - Nevíte-li, kde jste, pak **[Ctrl-O] [Ctrl-O]**
 - Pokud jste omylem stiskli **[Ctrl-S]** (stop výstupu na terminál), napравte to pomocí **[Ctrl-Q]**
 - Někdy pomůže **[Ctrl-C]** – přerušení
 - V nouzi **[Ctrl-Z]**, příkaz **jobs** a pak **kill %1** atd. podle počtu jobů
- Pokud simulace (cook*) zhavaruje, může se tak stát dvojím způsobem:
- Úplně spadne, pak zůstanete ve složce soubor **SIMNAME.loc**. (**SIMNAME** je poslední argument **cook ... SIMNAME**). Smažte ho, ale jen pokud jste si jisti, že simulace skutečně neběží! Dvojí start simulace se stejným **SIMNAME** = havárie obou simulací.
 - Ohlásí chybu, tu najdete jednak na konci **SIMNAME.prt**, jednak v souboru **JMENO_JOBU.o123456**, kde 123456 je číslo jobu.
- Přerušení běžící simulace (soubory se uzavřou):
`guest@403-a324-01:~/VY$ touch SIMNAME.stp` – může chvíli trvat.

Textové soubory

11/22
pch00

Textové soubory jsou složeny z písmen a řídicích znaků jako je CR a LF. V MACSIMUSU jsou to .def, .get (řídicí soubor simulace), .cpi, .che, .ble, .prt (výstupní protokol). Ve Windows se editují zpravidla aplikací Notepad (Poznámkový blok) a mají koncovku .txt, která často není vidět. Pod linuxem je nutno vždy psát koncovku souboru!

Úpravy textových souborů – Midnight Commander:

- úpravy stiskem **F4**
- nový soubor **Shift-F4**

Úpravy textových souborů – příkazový řádek, např.:

- `guest@403-a324-01:~/VY$ mcedit Soubor`
(stejný editor jako v Midnight commanderu)
- `guest@403-a324-01:~/VY$ nano Soubor`

Clipboard se ovládá **Ctrl-Shift-C** a **Ctrl-Shift-V**. Ve většině editorů (kromě `mcedit`) funguje (jiný) clipboard pomocí prostředního nebo pravého tlačítka myši (podle nastavení), z okna do okna lze pak snadno kopírovat označený text bez doteku klávesnice.

Zadání více výpočtů na vašem počítači nebo 403-a325-05 / a325-1

16/22
pch00

- Spustíte simulaci příkazem:
`guest@403-a324-01:~/VY$ cook nacl NPT`
`cook` simulační program
`nacl` první parametr pro `cook`: použije se `nacl.ble` a `nacl.def`
`NPT` druhý parametr pro `cook`: jméno simulace (vstupní data = `NPT.get`)
- Můžete spustit více běhů paralelně (podle počtu jader vašeho procesoru). Buď přerušíte aktivní výpočet pomocí **Ctrl-Z** a pak příkazem `bg` dáte do pozadí, nebo rovnou zadáte jako `guest@403-a324-01:~/VY$ cook nacl NPT &`
Můžete ovšem také nastartovat víc terminálů.
- Přerušeni správně běžícího výpočtu `cook`:
Midnight Commander: doubleclick `NPT.loc`
`guest@403-a324-01:~/VY$ touch NPT.stp`

Návod ke GUI programu blend (asi nebudete potřebovat)

12/22
pch00

Kliknutí pravým tlačítkem myši na **tlačítko** dá návod pro tlačítko, zrušte druhým kliknutím

- myš posun (drag):
levá = točit, prostřední (tj. kolečko) = posun, pravá = točit/velikost
- myš click:
levá = označit, prostřední = celá molekula po vazbách, pravá = odznačit
- myš kolečko: větší/menší

tlačítko	klávesnice	funkce
grid	<code>=</code>	mřížka (po 1 Å)
move	<code>m</code>	hýbe se celou molekulou / označenou částí
CG	<code>.</code>	optimalizace
rand	<code>.</code>	randomizace + optimalizace
finish	<code>.</code>	ulož a skonči (resp. pokračuj další molekulou)

Zobrazení grafů – gnuplot

17/22
pch00

Viz Google → "gnuplot manual", např.:

```
guest@403-a324-01:~/VY$ gnuplot
```

```
gnuplot> plot 'drop.cpa' using 0:1  
gnuplot> set terminal jpeg  
gnuplot> set output "pic.jpg"  
gnuplot> replot
```

Sofistikovaný a složitý, dobrý manuál.

Umí i vzorce, 3D, ...

Prohlížení trajektorie – program show

13/22
pch00

Návod pro `show`:

- Kontextový návod: stiskni **tlačítko** pravým tlačítkem myši
- kliknutí označuje molekuly (asi nebudete potřebovat)
- tažení rotuje a pohybuje konfiguraci:
 - levé tlačítko: rotace okolo x, y
 - prostřední tlačítko: přesun
 - pravé tlačítko: rotace okolo z
- kolečko myši = zoom
- menu on/off: `≡` nebo **F10**
- Start trajektorie: `||>`
- Z `show` získáte "printscreen" (kromě prostředků Windows) stiskem **PPM** nebo kláves **P+O** (lze získat i sérii pro případnou výrobu videa). Výsledek je ve formátu "portable pixel map" (raw .ppm, verze P6). Tento soubor lze načíst z Windows např. programem IrfanView, nebo přímo na místě převést pomocí `pnmtopng, pnmtogg`.

Zobrazení grafů – plot

18/22
pch00

Součástí MACSIMUSU – jednoduchý, bez manuálu. Příklad:

```
guest@403-a324-01:~/VY$ plot drop.cpa:0:1  
levá myš vybrat obdélník = zoom in, kolečko = zoom Y  
undo = u = zpět zoom, init = k = plná velikost  
PrtScr = @+M = printscreen (opačné barvy, ve formátu ppm)
```

Výstup ve formátu EPS: založte soubor `ps.def` podle příkladu:

```
s 12 # velikost fontu v pt  
w 10cm 10cm # velikost grafu (bez os) v cm  
x 1cm 2mm POPIS-OSY-X (recky=\ index/exponent = _)  
r 90 # rotace  
y 1cm 2mm POPIS-OSY-Y  
l X Y TEXT  
l X +DY $2-POPIS-CARY2  
t 1 1 # tloušťky car/ramecku v pt (1pt=0.35 mm)  
f 2 2 5 # hustota popisu os, pacicky v pt
```

Z okna plot se vytvorí `plot.eps` stiskem **EPS** nebo **#**

Obrázky molekul

14/22
pch00

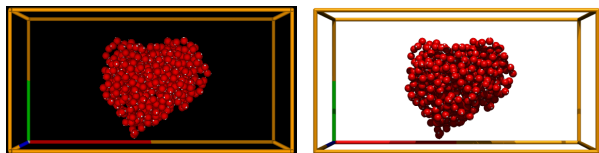
Pěkné obrázky získáte pomocí techniky "ray tracing", implementován je `ray`, Mark VandeWettering "reasonably intelligent raytracer". Z `show` získáte popis scény ve formátu `nff` stiskem **NFF** nebo kláves **N+O** – pouze v nedráťových režimech (prvních 5). Pak buď zvolte `one frame+render`

(`O`), nebo jen `one frame` (`O`), pak se renderuje z `mc` nebo příkazem:

```
guest@403-a324-01:~/VY$ ray -n mojevoda.0000
```

Opět se vytvoří obrázek ve formátu .ppm.

Bílé pozadí získáte stiskem `show -bgFFFFFF` nebo změnou příkazu `b 1 1 1` na `b 1 1 1` v souboru `mojevoda.0000.nff`.



Verze

19/22
pch00

K dispozici jsou následující verze MD programu, není-li řečeno jinak, všechny obsahují Lennard-Jonesův potenciál

`cookewslc` – verze s elektrostatickými interakcemi počítanými tzv. Ewaldovou sumací, tj. sčítáním přes „všechny“ periodické obrazy do nekonečna (matematickým trikem). Použita je "domain decomposition" simulační buňky na malé kvádrčky, metoda je vhodná pro středně velké až velké systémy. Přidán je kód pro tvorbu "slab geometry" vč. povrchového napětí, hustotních profilů aj. Totožné s `cook` ze cvičení „zonalní tavba“.

`cookewslcP1` – jako výše, paralelní verze, lze spustit na několika (2–4) procesorech, pro vaše úlohy asi max. 2

`cookceslc` – jako `cookewslc` ale elektrostatika je ořízená – useknutá (a vyhlazená). Mnohem rychlejší, ale pro některé úlohy nevhodné.

`cookceslcP1` – jako výše, paralelní verze

`cookfree` – verze s vakuovými (volnými) okrajovými podmínkami

`cookstars` – verze s WCALJ potenciálem, vakuovými okrajovými podmínkami a gravitační místo elektrostatiky (stejně náboje se přitahují)

Zadání jobu dávkově – na klastrech

15/22
pch00

Doporučuji skript `jsub`

- Spustíte simulaci příkazem
`guest@403-a324-01:~/VY$ jsub -n VASEJMENO cook nacl NPT`
`jsub` = skript nastavující prostředí a požadující spuštění na uzlu klastru
`-n VASEJMENO` jméno úlohy (zobrazuje se max. 10 znaků)
`cook` simulační program
`nacl` první parametr pro `cook`: použije se `nacl.ble` a `nacl.def`
`NPT` druhý parametr pro `cook`: jméno simulace (vstupní data = `NPT.get`)
- Kontrola jobu
`guest@403-a324-01:~/VY$ jstat`
- Zrušení jobu
`guest@403-a324-01:~/VY$ qdel CISL0JOBU`
- Přerušeni správně běžícího výpočtu `cook`:
Midnight Commander: doubleclick `NPT.loc`
`guest@403-a324-01:~/VY$ touch NPT.stp`

Instalace MACSIMUSU

20/22
pch00

- Máte-li **vlastní počítač s linuxem**, postupujte podle instrukcí zde, případně najdete MACSIMUS pomocí Googlu.
Důležitou součástí nastavení je instalace prostředí. Proveďte se přidáním následujících příkazů do souboru `.bashrc`:
`export BLENDPATH=/home/(uzivatel)/macsimus/blend/data`
`export PATH=/home/(uzivatel)/macsimus/bin:$PATH`
a (poprvé) provedením příkazu
`source .bashrc`
- Máte-li **vlastní účet na klastru**, neinstalujte, ale použijte ve výše uvedeném návodu `(uzivatel)=guest`
- Jste-li přihlášení jako `guest`, neinstalujte a nenastavujte, ale musíte pracovat ve vaší složce (v tomto návodu označeno jako `VY`)

odhlášení	exit
přehled nedávno zadaných příkazů	history
změna složky (adresáře)	cd SLOŽKA
— zpět	cd ..
výpis souborů ve složce	ls
— podrobně některých	ls -l a*.g
výpis obsahu (krátkého ASCII) souboru	cat SOUBOR
smazání souboru	rm SOUBOR
kopírování souboru (KAM=soubor n. složka)	cp SOUBOR KAM
přesun či přejmenování souboru	mv SOUBOR KAM
editace (nového nebo starého) souboru	mcedit SOUBOR
přerušování běžícího programu	Ctrl-C

- Nevidíte-li prompt, protože ho překryl text, stiskněte **Enter** (Midnight Commander: **Ctrl-O** **Ctrl-O**)
- **Ctrl-C** v terminálu není „Copy“, Copy-Paste je **Ctrl-Shift-C**, **Ctrl-Shift-V**
- Text v terminálu se po označení myší kopíruje prostředním (MobaXterm) nebo pravým (PuTTY) tlačítkem myši (nastavení lze změnit)

- Asociovaná aplikace se spustí z Midnight Commanderu dvojklikem nebo **Enter**. Další asociovaná aplikace (jiná funkce) pak **F3**.
- Z příkazového řádku příkazem **start**, další pak **starts**.

typ	obsah	aplikace	Midnight Commander akce
.che	chem. vzorec	blend	editace, optimalizace s použitím silového pole F3 = viz výše + normální vibrační módy
.mol	mol. topologie	blend	editace, optimalizace s použitím silového pole
.plb	trajektorie	show	prohlížeč trajektorie
.cp	konvergenční profil	showcp+plot	zobrazí konvergenční profily
.cfg	konfigurace	showcfg+plot	zobrazí konfiguraci
.sta	naměřená data	staprt	statistická analýza výsledků (F3 =podrobně)
.rdf	párový histogram	rdfg+plot	zobrazí radiální distribuční funkce F3 = kumulativní distr. f. (koordinační číslo)
.g	RDF	plot	zobrazí radiální distribuční funkce
.cn	kumulativní RDF	plot	zobrazí (kumulativní) distribuční funkce
.def	parametry simulace	go	provede příkaz v 1. řádku souboru
.get	řízení simulace	go	provede příkaz v 1. řádku souboru
.nff	data scény	ray	raytracer: renderuje a zobrazí scénu