

Jak zpracovat simulační cvičení v MACSIMUSu

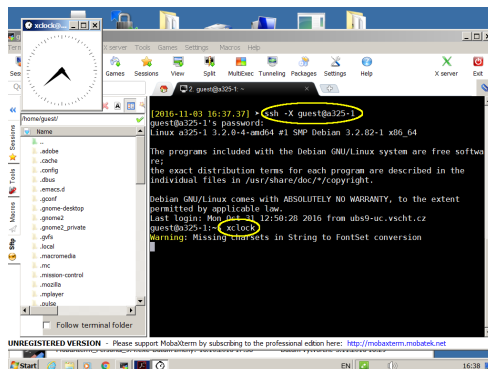
1/30
pch00

MACSIMUS nejlépe pracuje pod linuxem. Možnosti:

- **Budu pracovat na klastrech Ústavu fyzikální chemie:**
 - Budu sedět ve škole
 - Jako uživatel guest (heslo si pamatují z přednášek)
 - Budu pracovat z domova
 - Mám vlastní účet na klastru
- Budu pracovat na svém počítači, kde si instaluji MACSIMUS. Nejprve ale:
 - Instalují si linux (např. nějakou verzi **Ubuntu**) místo Windows (příjdu 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)
 - Použiji **Windows Subsystem for Linux (WSL)**, který je dostupný pro Windows 10 i 11, a X11 server, např. **Xming**
 - Použiji **WSLg** (jen Windows 11, obsahuje WSL + X11 server)
 - Použiji port **CygWin**

Připojení na vzdálený počítač metoda 1 – MobaXterm

6/30
pch00



Budu pracovat na klastrech Ústavu fyzikální chemie – úvod

2/30
pch00

Pro připojení ze vzdáleného počítače (např. školních Windows) k serveru klastru musíte mít:

- Terminál s příkazovým řádkem, na kterém běží interpret příkazů zvaný *shell*, typicky **bash**.
Pro Windows lze použít **MobaXterm** nebo **PuTTY**.
Příklad (smaž soubor jménem **blbost.txt**):
`guest@403-a324-01:~/VY$ rm blbost.txt`
Po napsání příkazu „rm blbost.txt“ se stiskne **Enter**. **VY** označuje vaši složku – viz dále.
- Volitelně: „grafická“ nastavení terminálu podobající se otevřené složce v GUI, např. **Midnight Commander mc**. Na klastrech je instalován, dostupná je asociace typů souborů pro MACSIMUS. 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. Je součástí MobaXtermu, pro připojení PuTTY lze použít **Xming**.
Příklad (zobraz hodiny, start ze shellu):
`guest@403-a324-01:~/VY$ xclock`

Připojení na vzdálený počítač metoda 2: PuTTY + Xming

7/30
pch00

Spolehlivější než MobaXterm

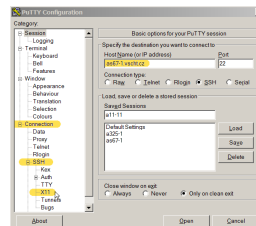
PuTTY a Xming jsou instalovány v některých počítačových učebnách

Terminál s příkazovým řádkem (PuTTY)

- Windows Start → hledat → **putty**, spustit nebo **S:PocChem/Connect/putty64bit.exe**
- Host name → **403-a324-01.vscht.cz** (nebo jiný počítač)
- Connection → SSH [→ Tunnels] → X11
- → [X] **Enable X11 forwarding** (nutné pro zobrazení grafiky)
- 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 spustět nebo **S:PocChem/Connect/Xming/XLaunch.exe** nebo **S:PocChem/Connect/Xming-6-9-0-31-setup.exe** a instalovat (např. na plochu)
- Případné dotazy potvrdit. Ve stavovém řádku se musí objevit ikona



Budu pracovat na klastrech Ústavu fyzikální chemie z domova

3/30
pch00

Pokud budete sedět ve škole, můžete tuto stránku přeskočit

- Přímé připojení z domova na klastru pomocí VPN vyžaduje speciální povolení, jehož vyřízení trvá několik dní. Budete-li mít zájem, ozvěte se včas.
- **VPN do školy** + připojit se na „virtuální učebnu“ (doporučuji „Classroom / Study EN“):
 - **Webové rozhraní:** <https://vdistudovna.vscht.cz/portal/webclient/index.html> (otestováno a doporučeno)
 - **Aplikace:** <https://vc.vscht.cz/software/virtualni-ucebna> (možná vám bude fungovat, ale já jsem měl problémy)

Po určité době nečinnosti vyžaduje okno znovupřihlášení pomocí **Ctrl-Alt-Del**, to získáte vysunutím „pacičky“ zleva a stiskem tlačítka nahore se třemi „okýnky“.
- Dále postupujeme jako z lokálního VŠCHT počítače (viz další stránky).

Poznámky:

- Máte-li kvalitní internet, je připojení snesitelně rychlé vč. grafiky.
- Pokud je zobrazení molekul (program **show**, viz dále) pomalé, můžete změnit zobrazení na „drátové“ stiskem **6** nebo v menu **7** nebo při startu takto:
`guest@403-a324-01:~/VY$ show -I'&' další parametry`

* Mám vlastní účet na klastru

8/30
pch00

Budu předpokládat, že používáte defaultní shell **bash**. Jsou dvě možnosti:

- Použiji instalaci, která je pod uživatelem **guest**.
Nastavení prostředí (lze umístit např. do vašeho **.bashrc** nebo **.profile**):
`guest@403-a324-01:~/VY$ source /home/guest/env.sh`
příkaz **source** (nebo jen **.**) načte soubor a nezapomene nastavení.
- Instalují si **MACSIMUS** sám/sama. Instalátor vám vysvětlí, co dělat, které balíčky předem instalovat, jak nastavit prostředí a provede test.

Pro cvičení „Zonální tavba NaCl“ a „Struktura vody okolo rozpuštěnce“ si zkopírují do své domovské složky soubory **/home/guest/A.zip** a **/home/guest/A.sh** a (rovněž ze své domovské složky) spustí skript **A.sh**.

Počítače k použití

4/30
pch00

PC klastry (dávkové spuštění delších výpočtů):

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

Počítače (přímý výpočet – po domluvě):

- **403-a325-05.vscht.cz** (Work, 4 procesory po 2 vláknech)
- **a325-1.vscht.cz** (Omikron, 2 procesory)
- **403-A325-16.vscht.cz** (Greta, 24 procesorů po 2 vláknech)

Přesun souborů mezi vaším počítačem a klastrem

9/30
pch00

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

Jste-li ve virtuální učebně, ukládejte na svůj disk (Z:) nebo na scratch (S:)

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
```

iOS ukončuje řádky CR

Připojení na vzdálený počítač metoda 1 – MobaXterm

5/30
pch00

Jednoduché, ale nedoporučuji pro mnoho lidí v učebně – grafy padají

není instalován v počítačových učebnách

MobaXterm v sobě zahrnuje terminál i X-server.

- Na disku „scratch“ (S:) najdete složku **/PocChem/Connect/** a spusťte **MobaXterm.Personal.22.1.exe**
případně najdete na webu a stáhněte „MobaXterm Home Edition – Portable“
- Rozbalte, spusťte, potvrďte vše
- Klikněte na **+ Start local terminal**
- V okně terminálu spusťte vybranou relaci, např. (Argon):
`[2021-11-11 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 (viz dále), ale vaše výsledky, jako křivky tuhnutí/tavení, nebudou snadno dostupné ostatním.
- Alternativně v některých verzích MobaXtermu se jméno počítače (**403-a324-01.vscht.cz**) a uživatel (guest) napíše do dialogu.
- Viz též dále metoda 2 = PuTTY + Xming (je instalované v některých počítačových učebnách)

Přesun dat z webu/Windows na klast

10/30
pch00

V návodu máte vstupní soubor, jak ho zkopírovat na klast?

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 pomocí utility **cat** z příkazového řádku takto:
`guest@403-a324-01:~/VY$ cat > SOUBOR`
Ctrl-Shift-V nebo prostřední tlačítko myši (připr. 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`

WSL I 11/30 pch00

Varování: Tento návod je neúplný, protože Windows nepoužívám.

Od Windows 10 je dostupný "Windows Subsystem for Linux", který si instalujete podle návodu. Zvolte si shell `bash`. Po otevření terminálu si aktualizujte systém a doinstalujte chybějící software takto (příkaz `cd` nastaví váš domovský linuxový adresář, `sudo` bude chtít heslo):

```
cd
sudo apt-get update && sudo apt-get upgrade
sudo apt autoremove
sudo apt-get install gcc libx11-dev libncurses-dev libncurses5
```

Vhodné změny v souboru `.bashrc` v domovském adresáři (pomocí příkazu `nano .bashrc` přidáte na konec, za `#` je komentář):

```
alias cp='cp -i' # ptá se před přepsáním souboru
alias mv='mv -i' # ptá se před přepsáním souboru
PATH="/home/$USER/macsimus/bin:$PATH" # přidá, kde hledat spustitelné soubory
export BLENDPATH="/home/$USER/macsimus/blend/data" # soubory s parametry
```

Poprvé načtete příkazem `source .bashrc`, příště se načte samo.

WSL II 12/30 pch00

Pro přesunování mezi souborovým systémem Windows doporučuji z vašeho domovského adresáře udělat link („zástupce“), například (disk C: → /mnt/c):

```
cd
ln -s /mnt/c/Users/Plocha
```

Nyní vidíte obsah vaší plochy jako složku `Plocha`. (Např.) pomocí Midnight Commander můžete přesouvat soubory. Ale silně nedoporučuji pracovat přímo v této složce!

Nyní stáhnete (ale nerobalíte/neeextrahujete) ve Windousech z webu ZIP s **MACSIMUSEM** na plochu. Z linuxu provedete (příklad):

```
unzip Plocha/macsimus-2022-10-27.zip
cd macsimus
./install.sh gcc
```

Až se vás instalátor zeptá, přeložte si vhodný exe-soubor, případně i jeho paralelní verzi (*P1, neplatí pro cookfree). Doporučuji též instalovat podporu pro Midnight Commander.


WSL III 13/30 pch00

Nyní zkuste napsat:

```
plot '[99:0:7]:sin(x):cos(x)'
```

Pokud se vám zobrazí elipsa, je vše v pořádku.

Pokud se hlásí něco jako "Command 'plot' not found", máte špatně `PATH` nebo neinstalované `libx11-dev` apod.

Pokud se hlásí něco jako "Can't open display:" nebo "XDisplay not found" (tj. máte WSL bez grafiky), instalujte si `Xming`. Případné dotazy potvrďte a spusťte. Ve stavovém řádku se musí objevit ikona . Pak napište

```
export DISPLAY=:0
plot '[99:0:7]:sin(x):cos(x)'
```

a opakujte. Pokud stále nic nevidíte, hledejte na spodním panelu, zda tam není schovaná nová ikona vypadající trochu jako X.

Midnight Commander 14/30 pch00

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

- nastartujete Midnight Commander příkazem `guest@403-a324-01:~$ mc`
- Z důvodu ostatních uživatelů může být obrazovka v nestandardní pozici. Pak pomocí `Tab` přejdete na panel, který má nahoře vlnovku (~)¹. Základní ovládání:

zobrazit výpisy na obrazovku/commander (přepínač)	Ctrl-O
spravít 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

Problémy... 15/30 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), napravíte 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 dvojným způsobem:

- Úplně spadne, pak zůstane ve složce soubor `SIMNAME.loc`. (`SIMNAME` je poslední argument `cook ... SIMNAME`). Smažte ho, ale jen pokud jste si jisti, že simulace skutečně neběží! Dvojitý start simulace se stejným `SIMNAME` = problémy.
- Ohlásí chybu, tu najdete jednak na konci souboru `SIMNAME.prt`, na klastru také v souboru `JMENO_JOBU.o123456` (kde 123456 je číslo jobu), v případě přímého spouštění i na obrazovce.

Přerušení běžící simulace (soubory se uzavřou):

```
guest@403-a324-01:~/VY$ touch SIMNAME.stp - může chvíli trvat.
```

Textové soubory 16/30 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 (silně doporučuji odškrtnout volbu „skrýt koncovku souborů známých typů“ v Průzkumníku Windows). 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 SPOUBOR` (stejný editor jako v Midnight commanderu)
- `guest@403-a324-01:~/VY$ nano SPOUBOR`

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.

Návod ke GUI programu blend (asi nebudete potřebovat) 17/30 pch00


`blend` je potřeba k úloze „Vibrace plátek grafenu“.

- 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: zoom
- menu on/off:  nebo `F10`

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

Prohlížení trajektorie – program show 18/30 pch00

Návod pro show:

- kliknutí pravým tlačítkem myši na `tlačítko` dá návod pro tlačítko, zrušte druhým kliknutím
- 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 či animovaného GIFu²). 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 `pnm2png`, `pnm2tjpg`.

²vyžaduje utilitu `convert` z ImageMagick

Obrazky molekul 19/30 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 nedratových 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 startem `show -bgFFFFFF` nebo změnou příkazu `b 1 1 1` na `b 1 1 1` v souboru `mojevoda.0000.nff`.




Animace 20/30 pch00

K exportu animovaného GIFu musíte mít instalovaný ImageMagick. Pokud není a máte přístup administrátora, na Ubuntu a pod. se instaluje takto:

```
guest@403-a324-01:~/VY$ sudo apt install imagemagick
```

K exportu stisknete `PPM` → `animated GIF`. Všechny obrazovky se nyní zapisují (ve formátu `.ppm` = Portable Pixel Map, P6). Chcete-li zaznamenat rotaci, než myš je lepší používat hot keys `X`, `X`, `Y`, `Y` a úhel nastavit pomocí `A`, `A`. Po stisku `End series` se vygenerovaná série `ppm` souborů zkonvertuje na animovaný GIF. Pro změnu parametrů pro ImageMagick použijte `show` option `-L` (viz manuál pro ImageMagick).

Zadání jobu dávkově – na klastrech 21/30 pch00

Doporučuji skript `jsub`

- Spustíte simulaci příkazem (příklad)
`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 CISLOJOB`
- Přerušení správně běžícího výpočtu `cook`:
 Midnight Commander: doubleclick `NPT.loc`
`guest@403-a324-01:~/VY$ touch NPT.stp`
- Paralelní výpočet – příklad (vyžaduje paralelní verzi, např. `cookewslcP1`):
`guest@403-a324-01:~/VY$ jsub -n MYJOB -q aq -p 3 cookP1 nacl NPT`
 kde `aq` = fronta (tato je na Argonu), `3` = počet vláken (běžně max. 4 pro malé úlohy)

Paralelizace 26/30 pch00

Platí pro nativní linux i WSL. Počet procesorů zjistíte příkazem:

```
cat /proc/cpuinfo
```

Místo příkazu `cookewslc` pak můžete použít

```
NSLOTS=(počet procesorů) cookewslcP1 (další argumenty)
```

Na klastru zadáváte úlohu do fronty. Pomocí skriptu `jsub` (zjednodušuje systémový skript `qsub` pro určité typy úloh):

```
jsub -p (počet procesorů) [ -n (jméno jobu) ] cookewslcP1 (další argumenty)
```

Zadání více výpočtů na vašem počítači nebo 403-a325-05 / a325-1 22/30 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.
- Přerušení správně běžícího výpočtu `cook`:
 Midnight Commander: doubleclick `NPT.loc`
`guest@403-a324-01:~/VY$ touch NPT.stp`

Instalace MACSIMUSU 27/30 pch00

- Máte-li **vlastní počítač s linuxem**, postupujte podle instrukcí zde, případně najdete MACSIMUS pomocí Google.
 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
`. .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`)

Zobrazení grafů 23/30 pch00

gnuplot – starý dobrý standard
 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, řádkově orientovaný, dobrý manuál. Umí i vzorce, 3D, ...

python
matlab
excel – pro vědecké grafy méně vhodný

Dodatek: Linux command prompt survival kit 28/30 pch00

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, nano SOUBOR
přerušení 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)

Zobrazení grafů – plot 24/30 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/ramečku v pt (1pt=0.35 mm)
f 2 2 5 # hustota popisu os, pacicky v pt
```

Z okna plot se vytvoří `plot.eps` stiskem `EPS` nebo `#`

Dodatek: typy MACSIMUS souborů a asociace aplikací v mc 29/30 pch00

- Asociovaná aplikace se spustí z Midnight Commanderu (`mc`) dvojklikem nebo `Enter`.
 Prohlížení souboru (smysl má pro ASCII) je `F3` s výjimkou `.rdf`
- Z příkazového řádku příkazem `start`, další pak `starts`.

typ	obsah	aplikace	Midnight Commander akce
.che	chem. vzorec	blend	editace, optimalizace s použitím silového pole, vibrační módy
.mol	mol. topologie	blend	editace, optimalizace s použitím silového pole
.plib	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 (<code>F3</code> =podrobně)
.rdf	párový histogram	rdfg+plot	zobrazí radiální distribuční funkce <code>F3</code> = kumulativní distr. f. (koordinátní číslo)
.g	RDF	plot	zobrazí radiální distribuční funkci
.cn	kumulativní RDF	plot	zobrazí (kumulativní) distribuční funkci
.def	parametry simulace	go	provede příkaz v 1. řádku souboru
.get	řízení simulace	go	provede příkaz v 1. řádku souboru
.loc	lock-file	stop.sh	přeruší simulaci (bez ztráty dat)

Verze 25/30 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. Přidan je kód pro tvorbu „slab geometry“ vč. povrchového napětí, hustotních profilů aj. Totožné s `cook` ze cvičení „zónální tabva“.

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

`cookceslc` – jako `cookewslc` ale elektrostatika je ošizená – 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 gravitací místo elektrostatiky (stejně náboje se přitahují)

Dodatek: typy MACSIMUS souborů a asociace aplikací v mc 30/30 pch00

Méně používané asociace:

typ	obsah	aplikace	Midnight Commander akce
.nff	data scény	ray	raytracer vyrenderuje a zobrazí scénu
.zbuf	z-buffer	stereo	stereoogram
.cpz	komprimovaný .cp	showcp+plot	zobrazí konvergenční profily
.cpa	ASCII obraz .cp	showcpa+plot	zobrazí vybrané sloupce
.atm	molekula	showatm+show	zobrazí

Formát `.atm` (vhodný např. pro Gaussian) je:

```
počet_atomů
prázdný řádek (příp. velikost boxu x y z)
Atom x y z
Atom x y z
...
Atom x y z
```

kde `Atom` = značka prvku nebo jeho atomové číslo a údaje jsou v Å