

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

● Instaluji si linux (např. nějakou verzi **Ubuntu**) místo Windows (přijdu o Windows)

● Instaluji si linux pomocí dual-boot zároveň s Windows (vhodné pro geeky)

● Instaluji 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 vhodný X11 server (např. **Xming**)

● Použiji WSLg (jen Windows 11, vhodné pro průkopníky)

● Použiji port **CygWin**

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.

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)

**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”

● Rozbalte, spusťte, potvrďte vše

● Klikněte na `+ Start local terminal`

● 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)

není instalován v počítačových učebnách

počítače:

403-a325-1 (2–3 lidí)

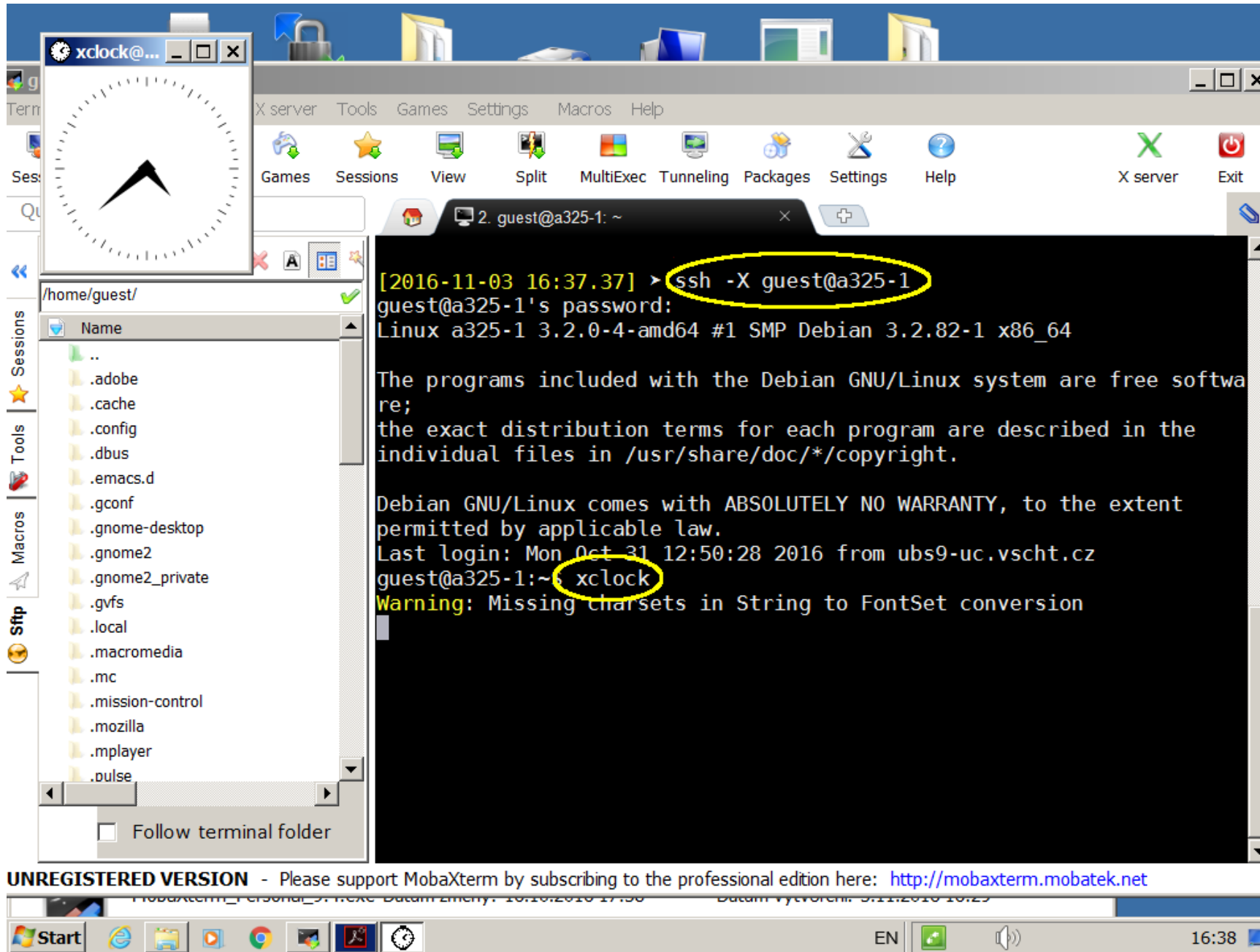
403-a325-05 (~5 lidí),

heslo má na konci navíc xx

403-a324-01 (ostatní)

# Připojení na vzdálený počítač metoda 1 – MobaXTerm

5/22  
pch00



The screenshot displays the MobaXTerm interface. On the left, a file explorer shows the local file system with a sidebar containing 'Sessions', 'Tools', 'Macros', and 'Sftp'. A window titled 'xclock@...' is open, showing a clock. The main terminal window shows a session with the following text:

```
[2016-11-03 16:37.37] > ssh -X guest@a325-1
guest@a325-1's password:
Linux a325-1 3.2.0-4-amd64 #1 SMP Debian 3.2.82-1 x86_64

The programs included with the Debian GNU/Linux system are free softwa
re;
the exact distribution terms for each program are described in the
individual files in /usr/share/doc/*/copyright.


Debian GNU/Linux comes with ABSOLUTELY NO WARRANTY, to the extent
permitted by applicable law.
Last login: Mon Oct 31 12:50:28 2016 from ubs9-uc.vscht.cz
guest@a325-1:~$ xclock
Warning: Missing charsets in String to FontSet conversion
```

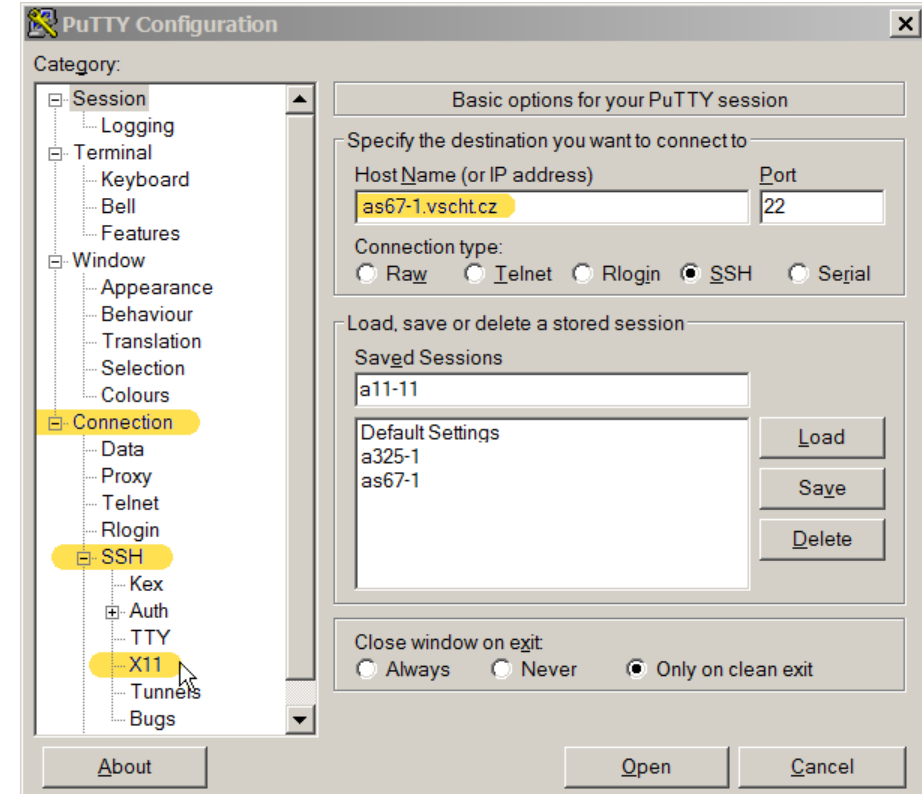
Yellow circles highlight the command `ssh -X guest@a325-1` and the command `xclock` in the terminal. At the bottom, a message reads: **UNREGISTERED VERSION** - Please support MobaXterm by subscribing to the professional edition here: <http://mobaxterm.mobatek.net>. The system tray at the bottom shows the Start button, taskbar icons, and the time 16:38.

## Terminál s příkazovým řádkem (PuTTY)

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

## X server pro zobrazení grafiky (Xming)

- Windows Start → hledat → `xming` a spustíte
- Případné dotazy potvrdit. Ve stavovém řádku se musí objevit ikona 



PuTTY a Xming jsou instalovány v některých počítačových učebnách

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
```

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.
- Pravé 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`



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

- nainstalujte 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 (~)<sup>1</sup>. 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)

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

- V Midnight Commanderu nefunguje posuvník.
- Jste-li v Midnight Commanderu a na obrazovce je smetí, 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` – přerušeni
- V nouzi `Ctrl-Z`, příkaz `jobs` a pak `kill %1` atd. podle počtu jobů

Pokud simulace (`cook*`) zhavaruje, může se tak stát dvojm 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` = havárie obou simulací.
- Ohlásí chybu, tu najdete jednak na konci `SIMNAME.prt`, jednak v souboru `JMENO_JOB.U.o123456`, kde 123456 je číslo jobu.

Přerušeni běžící simulace (soubory se uzavřou):

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

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 S0UB0R`  
(stejný editor jako v Midnight commanderu)

- `guest@403-a324-01:~/VY$ nano S0UB0R`

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.

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	=	mřížka (po 1 Å)
move	m	hýbe se celou molekulou / označenou částí
CG	,	optimalizace
rand	:	randomizace + optimalizace
finish	.	ulož a skonči (resp. pokračuj další molekulou)

## Návod pro show:

- Kontextový návod: stiskni **tlačítko** pravým tlačítkem myši
- kliknutí označuje molekuly (asi nebudete potřebovat)
- tažení rotuje a pohybuje konfigurací:
  - levé tlačítko: rotace okolo  $\hat{x}$ ,  $\hat{y}$
  - prostřední tlačítko: přesun
  - pravé tlačítko: rotace okolo  $\hat{z}$
- 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 série 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](#), [pnmtojpg](#).

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 neodrátových 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`.



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 CISL0J0BU
```

● Přerušování správně běžícího výpočtu `cook`:

Midnight Commander: doubleclick `NPT.loc`

```
guest@403-a324-01:~/VY$ touch NPT.stp
```

- Spust'te 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). Bud' 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`



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, ...

Součást 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 # tloustky car/ramecku 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 `#`

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 kvádríky, 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 „zonální 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 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)

- Máte-li **vlastní počítač s linuxem**, postupujte podle instrukcí [zde](#), případně najděte 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

```
..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
— <b>podrobně některých</b>	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
<b>přerušeni běžícího programu</b>	<b>Ctrl-C</b>

- 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 myši 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 <code>F3</code> = 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 ( <code>F3</code> =podrobně)
.rdf	párový histogram	rdfg+plot	zobrazí radiální distribuční funkce <code>F3</code> = kumulativní distr. f. (koordinační 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
.nff	data scény	ray	raytracer: renderuje a zobrazí scénu