# Jak zpracovat simulační cvičení v MACSIMUSu

MACSIMUS nejlépe pracuje pod linuxem. Možnosti:

- Budu pracovat na klastrech Ústavu fyzikální chemie:
  - Budu sedět ve škole
  - Budu pracovat z domova

- Budu uživatel guest (heslo si pamatuji z přednášek)
- Mám vlastní účet na klastru
- Budu pracovat na svém počítači, kde si instaluji MACSIMUS. Nejprve ale:
  - Instaluji si WSLg (doporučeno), resp. na starších Windows 10 WSL a Xming
  - 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 port CygWin (složité, asi méně náročné na zdroje)

# Budu pracovat na klastrech Ústavu fyzikální chemie – úvod

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

2/31

pch00

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

Volitelně: "grafická" nadstavba 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
```

# Budu pracovat na klastrech Ústavu fyzikální chemie z domova

Pokud budete sedět ve škole, můžete tuto stránku přeskočit

- 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 nahoře se třemi "okýnky".

Na klastr se lze připojit i přímo (bez protivného mezikroku virtuální učebny) z vašeho počítače jen pomocí VPN, ale to vyžaduje speciální povolení Výpočetního střediska. Budete-li mít zájem, ozvěte se včas, vyřízení trvá několik dní.

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 & nebo v menu 7 nebo při startu takto: guest@403-a324-01:~/VY\$ show -I'&' další parametry

# Počítače k použití

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

# Připojení na vzdálený počítač metoda 1 – MobaXterm



- Jednoduché, ale **nedoporučuji** pro mnoho lidí v učebně grafy padají
- MobaXterm v sobě zahrnuje terminál i X-server.
- Na disku "scratch" (S:) najděte složku /pocitacova\_chemie/Connect/ a spusťte MobaXterm\_Personal\_22.1.exe

případně najděte 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 uživatele (guest) napíše do dialogu.
- Viz též dále metoda 2 = PuTTY + XMing (je instalované v některých počítačových učebnách)

počítače: Argon=403-a324-01 Wolfram=403-a325-05 (~6 lidí) Neon=403-as67-01

#### Připojení na vzdálený počítač metoda 1 – MobaXterm





# Připojení na vzdálený počítač metoda 2: PuTTY + XMing

#### Spolehlivější než MobaXterm

#### Terminál s příkazovým řádkem (PuTTY)

- Windows Start  $\rightarrow$  hledat  $\rightarrow$  putty, spustit nebo S:pocitacova\_chemie/Connect/putty64bit.exe
- Host name  $\rightarrow$  403-a324-01.vscht.cz (nebo jiný počítač)
- Connection  $\rightarrow$  + SSH [ $\rightarrow$  Tunnels]  $\rightarrow$  X11  $\rightarrow$  v Enable X11 forwarding (nutné pro zobrazení grafiky)
- $\bigcirc$  zpět Session  $\rightarrow$  Open
- Login as: guest máte-li, použijte vlastní účet viz dále
- Password: (sdělím)

#### X server pro zobrazení grafiky (Xming)

Windows Start  $\rightarrow$  hledat  $\rightarrow$  xming a spust'te nebo S:pocitacova\_chemie/Connect/XLaunch.exe - Shortcut.lnk případně S:pocitacova\_chemie/Connect/Xming-6-9-0-31-setup.exe a instalovat (např. na plochu)

Dotazy potvrdit další, firewall zamítnout. Ve stavovém řádku se musí objevit ikona 🐼.

# PuTTY a Xming jsou instalovány v některých počítačových učebnách

Category:			
Keyboard     Bell     Features     Vindow     Appearance     Behaviour     Translation     Selection     Colours     Colours     Proxy     SSH     Kex     Host keys     Cipher     Auth     TTY     X11     Tunnels     Bugs     More bugs	<ul> <li>♦ Options controlling SSI</li> <li>× X11 forwarding</li> <li>✓ Enable × 11 forwarding</li> <li>× display location</li> <li>Remote × 11 authentication prot</li> <li>● MIT-Magic-Cookie-1</li> <li>&gt; × authority file for local display</li> </ul>	X11 forwarding	-1 :e

#### \* Mám vlastní účet na klastru

8/31 pch00

Budu předpokládat, že používáte výchozí 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.
- Instaluji si MACSIMUS sám/sama. Instalátor vám vysvětlí, co dělat, které balíčky předem instalovat, jak nastavit prostředí a provede test.

# Přesun souborů mezi vaším počítačem a klastrem

9/31 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 Windous nemusí tyto soubory správně zobrazit. Pak pro konverzi do Windows použijte příkaz (na klastru):

guest@403-a324-01:~/VY\$ unix2dos JMEN0\_SOUBORU

iOS ukončuje řádky CR

#### Přesun dat z webu/Windows na klastr

10/31 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.
- Pravé 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 > S0UB0R 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 >| S0UB0R

#### **WSL I**

Od Win 10 je dostupný "Windows Subsystem for Linux", který si instalujete podle návodu pro Win 11 a novější 10, případně WSL pro Win 10. Jako distribuci doporučuji Ubuntu. 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, které jste si zvolili při instalaci):

```
cd
sudo apt update && sudo apt upgrade
sudo apt autoremove
sudo apt install gcc libx11-dev libncurses-dev libncurses5
sudo apt install x11-apps
```

Chce-li systém doinstalovat další balíčky, potvrďte.

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

alias rm='rm -i' # ptá se před smazáním souboru 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**

Pro přesunování mezi souborovým systémem Windows doporučuji z vašeho domovského adresáře udělat link ("zástupce"), například (disk C:  $\rightarrow$  /mnt/c):

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

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

Nyní stáhnete (ale nerozbalíte/neextrahujete) ve Windows 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, přeložíte si vhodný exe-soubor, případně i jeho paralelní verzi (\*P1, neplatí pro cookfree). Doporučuji též instalovat podporu pro Midnight Commander.

#### WSL III

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 "file '[99:0:7]:sin(x):cos(x)' not found", patrně máte špatně PATH a našel se jiný plot. Zkuste /home/\$USER/macsimus/bin/plot a/nebo opravte PATH.

Pokud se hlásí něco jako "Can't open display:" nebo "XDisplay not found" (tj. máte WSL bez grafiky), zkuste:

```
export DISPLAY=:0
```

Z PowerShellu přeinstalovat: wsl --update

Na starších Windous 10 nebo v případě přetrvávajících potíží zkuste externí X11 server Xming. Instalujte a případné dotazy potvrďte, spusťte. Ve stavovém řádku se musí objevit ikona XX.

# **Midnight Commander (mc)**

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

- nastartujte 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:



Soubory jsou asociovány s aplikacemi, a to i soubory simulačního balíku MACSIMUS <sup>1</sup>Vlnovka značí domovskou složku uživatele, zde ~ = /home/guest

# **Midnight Commander: problémy**

- V některých distribucích je F10 zablokováno funkcí menu terminálu. Pak:
  - použijte Esc 0 (po sobě)
  - použijte příkaz exit
  - 🔵 změňte přiřazení F10 v nastavení terminálu
- V Midnight Commanderu nefunguje posuvník okna
- 🔵 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 = přerušení
- **V nouzi** Ctrl-Z, příkaz jobs a pak kill %1 atd. podle počtu jobů

#### **Problémy se simulacemi**

Pokud simulace (cook\*) zhavaruje, může se tak stát dvojím 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! Dvojí start simulace se stejným SIMNAME = problémy.
- Ohlásí chybu, tu najdete jednak na konci souboru SIMNAME.prt, na klastru také v souboru JMEN0\_JOBU.0123456 (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**

Textové soubory jsou složené z písmen a řídících znaků jako je CR a LF. Ve Windows se editují zpravidla aplikací Notepad (Poznámkový blok) a mají koncovku .txt, která často není vidět<sup>2</sup>. Pod linuxem je nutno vždy psát koncovku souboru!

Úpravy textových souborů – Midnight Commander: Úpravy stiskem F4 Nový soubor Shift-F4

```
Řádek se ukončuje:
linux: LF
Windows: CR LF
iOS: CR
```

Dva jednoduché editory dostupné z příkazového řádku a běžící v terminálu: guest@403-a324-01:~/VY\$ nano SOUBOR # doporučený pro začátečníky guest@403-a324-01:~/VY\$ mcedit SOUBOR # stejný editor jako v Midnight Commanderu Pozn.: ^ v návodu značí Ctrl-, M- značí Alt-

Clipboard se ovládá v okně terminálu pomocí Ctrl-Shift-C a Ctrl-Shift-V. Ve většině editorů (ne v 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.

Soubory .def, .get (řídící soubor simulace), .cpi, .che, .ble, .prt (výstupní protokol) v MACSIMUSs jsou textové a lze je editovat.

<sup>2</sup>Silně doporučuji odškrtnout volbu "skrýt koncovku souborů známých typů" v Průzkumníku Windows.

# Návod ke GUI programu blend (asi nebudete potřebovat)

blend je potřeba k úloze "Vibrace plátků grafenu".

🕒 kliknutí pravým tlačítkem myši na tlačítko dá návod pro tlačítko, zrušte druhým kliknutím

18/31

pch00

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	m	hýbe se celou molekulou / označenou částí	
CG	,	optimalizace (Conjugate Gradients)	
rand	:	randomizace + optimalizace	
finish	·	ulož a skonči (resp. pokračuj další molekulou)	

#### 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 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 či animovaného GIFu<sup>3</sup>). 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.

<sup>3</sup>vyžaduje utilitu convert z ImageMagick

# **Obrázky molekul**

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 nedrátových 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 -bgFFFFF nebo změnou příkazu b 1 1 1 na b 1 1 1 v souboru mojevoda.0000.nff.





#### Animace

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  $\rightarrow$  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  $\mathbf{x}$ ,  $\mathbf{X}$ ,  $\mathbf{y}$ ,  $\mathbf{Y}$  a úhel nastavit pomocí  $\mathbf{f}$ , \*. 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

22/31 pch00

Doporučuji skript jsub

Spusťte 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 CISL0J0BU
```

```
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)

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

23/31 pch00

Spusťte 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

# Zobrazení grafů

24/31 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 orieontovaný, dobrý manuál. Umí i vzorce, 3D, ...

#### python

#### matlab

**excel** – pro vědecké grafy méně vhodný

# Zobrazení grafů – plot

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
1 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 vytvori 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 kvádříky, 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 (stejné náboje se přitahují)

#### **Paralelizace**

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 (jméne jobu) ] cookewslcP1 (další argumenty)
```

Máte-li vlastní počítač s linuxem, postupujte podle instrukcí zde, případně najděte MACSIMUS pomocí Googlu.

28/31

pch00

Důležitou součástí nastavení je instalace prostředí. Provede 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 přihlášeni jako guest, neinstalujte a nenastavujte, ale musíte pracovat ve vaší složce (v tomto návodu označeno jako VY)

# **Dodatek: Linux command prompt survival kit**

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)

# Dodatek: typy MACSIMUS souborů a asociace aplikací v mc

- 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
.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 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)

Méně používané asociace:

typ	obsah	aplikace	Midnight Commander akce
.nff	data scény	ray	raytracer vyrenderuje a zobrazí scénu
.zbuf	z-buffer	stereo	stereogram
.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