

Bod tání modelu NaCl

1/21
pch04

Úkol:

Stanovte bod tání modelu NaCl metodou zonální tavby (slab geometry)

Model:

Lennard-Jones + náboje¹

Postup:

- připravte nanokrystalek $2 \times 2 \times 2$ (Na_4Cl_4)
- replikujte tento motiv $3 \times 3 \times 3$ krát a simulujte krystal v periodických okrajových podmínkách
- stanovte hustotu a radiální distribuční funkce krystalu
- roztavte a stanovte hustotu a radiální distribuční funkce taveniny
- replikujte krystal $1 \times 1 \times 3$ krát a roztavte polovinu boxu
- simulujte za dané teploty a sledujte, zda krystal narůstá či se taví

¹In Suk Jung and Thomas E. Cheatham, III; *J. Phys. Chem. B* **112**, 9020-9041 (2008)



Evropský sociální fond
„PRAHA & EU: Investujeme do vaší budoucnosti“
Inovace v předmetu Počítačová chemie je podporována projektem CHEM-RIE (Inovace bakalářského studijního programu Chemie – moderní vzdělávací podpoře použítím notebooků – CZ.2.17/3.1.00/32/48) v rámci Operačního programu PRAHA – ADAPTABILITA.

* Mám vlastní účet na klastru

6/21
pch04

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

- Použijte instalaci, která je pod uživatelem `guest`. Nastavení prostředí (lze umístit např. do vašeho `.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`.

Počítačový klastr

2/21
pch04

- Několik výkonných počítačů připojených k jednomu serveru
- Často GPU (Graphic Processing Unit) nebo GPGPU (General Purpose GPU = výpočetní)
- Dávkový (frontový) systém zpracování jobů
- Linux:

 - základní ovládání pomocí CLI (command-line interface, příkazový řádek)
 - grafika pomocí X11 (X window system, od r. 1987 zpětně kompatibilní)

- Připojení z uživatelského počítače (např. Windows):
 - terminál (pro vzdálené spouštění příkazů a skriptů)
 - X11 server (zobrazující grafiku zpracovanou na vzdáleném klientu)

403-a324-01.vscht.cz (Argon) → → →



Test připojení

7/21
pch04

Základním způsobem práce pod Unixem/Linuxem je **příkazový řádek**, což je vstup interpretu příkazů (`shellu`): napíšete příkaz a stisknete `Enter`.

- Začátek řádku (např. `guest@403-a324-01:~$`) se nazývá **prompt**.
- Celé okno s promptem a výstupem se nazývá **terminál**.
- Pokud chcete předchozí příkaz opravit a spustit znovu, použijte kurzorovou šipku nahoru a opravte.

Jako test, že připojení je v pořádku, zkuste:

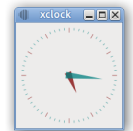
`guest@403-a324-01:~$ xclock`
Zobrazí se hodiny. Hodiny zrušte buď myší `x`, nebo stiskem `Ctrl-C` v okně terminálu.

zábavnější je `xeyes`

Nevidíte hodiny???

- Nejsou ikonizované? Hleďte dole na liště.
- Restartujte PuTTY + Xming / MobaXterm
- Restartujte Windows...
- Zkuste jinou metodu (PuTTY + Xming / MobaXterm)

`Ctrl-C` je přerušení.
Copy je `Ctrl-Shift-C`.



Připojení na vzdálený počítač metoda 1 – MobaXterm

3/21
pch04

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

MobaXterm v sobě zahrnuje terminál i X-server.

- Na disku „scratch“ (S:) najdete složku `/PocChem/Connect/` a spustíte `MobaXterm_Personal_22.1.exe` případně najdete na webu a stáhnete „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)

není instalován v počítačových učebnách

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

* Start: pro ty, kdo mají vlastní účet na klastru

8/21
pch04

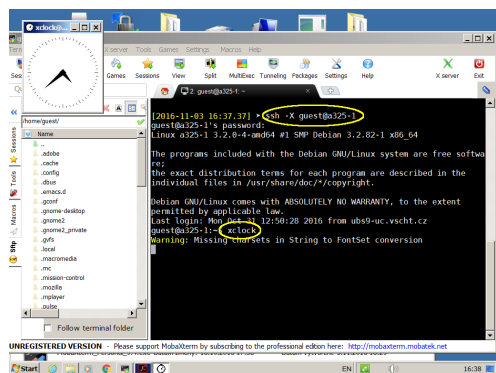
Založte si složku a rozbalte data:

```
mkdir vase_slozka
cd vase_slozka
unzip /home/guest/A.zip
```

- Pak musíte nastavit prostředí:
Pokud používáte `bash` (většina): `source env.sh`
Pokud používáte `tcsh`: `source env.tcsh`
Pokud nevíte, jaký shell máte: `ps x`

Připojení na vzdálený počítač metoda 1 – MobaXterm

4/21
pch04



Midnight Commander

9/21
pch04

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` přejdete na panel, který má nahoře vlnovku (`~`). Základní ovládání:

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

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

²Vlnovka značí domovskou složku uživatele, zde `~ = /home/guest`

Připojení na vzdálený počítač metoda 2: PuTTY + Xming

5/21
pch04

Spolehlivější než MobaXterm

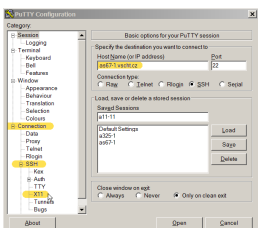
Terminál s příkazovým řádkem (PuTTY)

- 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: (sdělím)

X server pro zobrazení grafiky (Xming)

- Windows Start → hledat → `xming` a spustíte 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

PuTTY a Xming jsou instalovány v některých počítačových učebnách



Start: guest

10/21
pch04

Skript je sada příkazů v interpretovaném programovacím jazyce.

Simulační cvičení je připraveno ve formě skriptů v jazyce `bash` (stejný, jaký interpretuje příkazy vašeho shellu). Konvenční koncovka skriptu je `.sh`, často je označen hvězdičkou `*`, což značí spustitelnost. Skripty budete postupně spouštět, např. z prostředí Midnight Commanderu.

- **Nastavení prostředí uživatele:** Spusťte skript `A.sh` z Midnight Commanderu nebo příkazem:
`guest@403-a324-01:~/VY$./A.sh`
Protože jste všichni jeden uživatel `guest`, musíte pracovat každý ve **vlastní složce**. Skript se vás proto zeptá na jméno složky, kterou založí a do které zkopíruje potřebné soubory. V této složce budete dále pracovat.
- Po skončení skriptu `A.sh` najdete svou složku a přejděte do ní. Objeví se sada skriptů:
`A01-Na4Cl4.sh`
`A02-repl.sh`
:

Hack: Je-li spojení na vzdálený počítač příliš pomalé, proveďte příkaz (před startem Midnight Commanderu):
`guest@403-a324-01:~/VY$ export SIZE=3`
Animace molekul se zmenší (default `SIZE=5`).

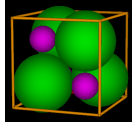
A01-Na4Cl4.sh (nanokrystalek)

11/21
pch04

- **Úkol:** Hustota modelu NaCl je 2.1 g cm^{-3} , $M(\text{NaCl}) = 58.4 \text{ g mol}^{-1}$. Vypočítejte velikost hrany L krychličky obsahující Na_4Cl_4 , převedte na Å.
- Spustíte skript **A01-Na4Cl4.sh** a vložte vypočtené číslo do programu. Prohlédněte si vytvořený krystalek.

Návod pro show:

- kontextový návod: stiskni **tláčítko** pravým tlačítkem myši
- kliknutí označuje molekuly (nebudete potřebovat)
- tažení rotuje a pohybuje konfiguraci:
 - levé tlačítko: rotace okolo x, y
 - prostřední tlačítko: přesun
 - pravé tlačítko: rotace okolo z
- kolečko myši = zoom



Start trajektorie (až budete nějakou mít): **||>**

Pokud se budete nudit: **NFF** nebo **ZBUF** + **one frame + render**

A06-melt-ini.sh tavení krystalu

16/21
pch04

Teplota je nastavena na 1900 K.

Opět sledujte, zda je systém v rovnováze.

A07-melt-sim.sh simulace taveniny

Simulace zrelaxované taveniny bude provedena dávkově na klastru.

A08-melt-view.sh prohlížení výsledků

Podobné jako v případě krystalu.

(Body A06–A08 můžete přeskočit a pokračovat bodem A09.)

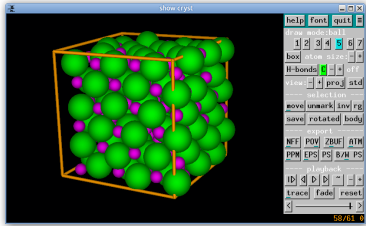
A02-repl.sh (příprava krystalku $\text{Na}_{108}\text{Cl}_{108}$)

12/21
pch04

V dalším kroku pomnožíme krystalek $3 \times$ v každém směru a necháme chvíli simulovat za teploty 300 K a tlaku 1 atm.

Zařídí to skript **A02-repl.sh**.

K tomu je potřeba jednak definice silového pole (připraví se sama), jednak definiční soubor simulace. Pro zvýšení uměleckého dojmu si ho můžete prohlédnout na následující stránce.



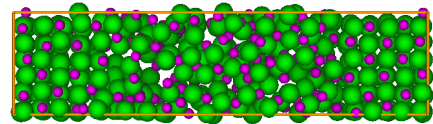
A09-zone-ini.sh Příprava zonální tavby

17/21
pch04

- Krystal připravený v bodech A03 až A05 bude zreplikován třikrát ve směru osy z . Výsledný krystal bude ještě trochu protažen ve směru z .
- Bude zapnut speciální typ termostatu, který bude prostředek krystalu zahřívát a „konce“ (jsou periodicky spojeny) chladit. Tím dostaneme vrstvu ve směru osy z krystalu a vrstvu taveniny (tzv. „slab geometry“).
- Velikost boxu ve směrech x a y je konstantní a dána průměrnou hodnotou ze simulace krychlového krystalu.

Tento krok je opět spuštěn dávkově.

Trik: strukturu lépe uvidíte, pokud použijete rovnoběžné promítání (tláčítka **proj**) a menší koule (view: **-**)



cryst300.def – definiční soubor první simulace

13/21
pch04

```
n=108 ! pomocna promenna
N[0]=n N[1]=n ! pocet Na+ a Cl-
rho=2050 ! referencni hustota [kg/m3]
cutoff=8.607 ! elst cutoff (pro Ewaldovu sumaci) [AA]
LJcutoff=cutoff ! Lennard-Jones cutoff [AA]
rdf.grid=20 ! mereni struktury (rad. distr. f.) [1/AA]
el.epsk=2 el.epsr=0.4 ! presnost vypoctu elst. sil [K/AA]
el.diff=0.3 ! omezi urcita varovani o presnosti
noint=30 h=0.1/noint ! pocet kroku/cyklu a delka kroku [ps]
no=100 ! pocet cyklu
dt.plb=1 ! jak casto se bude zapisovat "playback" [ps]

thermostat="Andersen" ! nahodne stouchance (Maxwell-Boltzmann)
T=300 ! teplota [K] (bude zmeneno)
tau.T=1 ! casova konstanta termostatu [ps]
P=101325 ! tlak [Pa]
bulkm modulus=2e13/(T+300) ! odhad modulu pruznosti (pro barostat)
tau.P=2 ! konstanta barostatu [ps]
init="start" ! start z predch. konfigur.; nove mereni a zaznam
! TOHLE BUDE SMAZANO PO PRVNIM KROKU:
load.n[0]=3 ! pomnoziti 3x ve smeru x
load.n[1]=3 ! pomnoziti 3x ve smeru y
load.n[2]=3 ! pomnoziti 3x ve smeru z
; ! konec dat
```

A10-zone-sim.sh Zonální tavba

18/21
pch04

Konfigurace z předchozího kroku bude simulována za konstantní teploty a konstantního tlaku ve směru osy z . Ve směrech x, y se velikost simulační buňky nemění.

Simulace bude spuštěna na některém z klientů klastru.

A11-zone-show.sh prohlížení trajektorie

Trajektorii zapisovanou běžící simulací je možné prohlížet.

Sledujte, zda krystal taje nebo narůstá.

Po zavření programu show budete dotázáni, zda přerušit simulaci.

A03-cr-ini.sh (počáteční relaxace)

14/21
pch04

Skript se vás zeptá na teplotu, kterou dostanete od vyučujícího. Vhodný interval teplot je 1200–1400 K. Stejná teplota pak bude použita i v kroku A09.

Na grafech veličin v závislosti na čase vidíme, zda máme systém zrelaxovaný do rovnováhy.

Zobrazeny jsou závislosti teploty, potenciální energie a hustoty na čase.

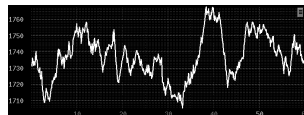
Všechny grafy zrušíte nejrychleji pomocí **kill all**

Pokud grafy stále vykazují trend, nutno tento krok opakovat.

Na dotaz „Opakovat míchání s `init="append" (A/N) ?`“ odpovídáme buď **a** **[Enter]** nebo **A** **[Enter]** nebo **n** **[Enter]** nebo **N** **[Enter]**.

Jak je zvykem ve světě unixu, velké **A** znamená default, tedy jen **[Enter]** znamená také ano.

Nejpomaleji konverguje hustota; pokud se mění jen o $\pm 10 \text{ kg m}^{-3}$, je to OK.



A12-prubeh.sh Průběh tavby

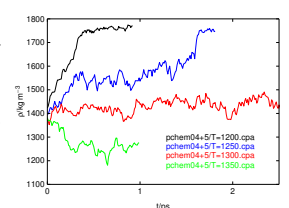
19/21
pch04

- Zobrazí se graf závislosti hustoty na čase pro všechny studenty na stejném počítači (po skončení simulací – musí existovat soubory `T=* .cpa`).

- Popis křivek dostanete kliknutím pravým tlačítkem myši.
- Výsledky pro čtyři teploty vidíte vpravo \Rightarrow bod tání JC modelu NaCl = 1300(25) K.³

- Přesnější výsledek z větších simulací a s extrapolací $N \rightarrow \infty$ je 1287(3) K.³

³V závorce je odhad standardní chyby.



Po provedení všech cvičení: úklid

- Smažte svou složku pomocí **[F8]**
- **Pečlivě zkontrolujte, zda nemažete složku někoho jiného!**
- Vyskočte z Midnight Commanderu (**F10**) a shellu (exit **[Enter]**)

A04-cr-sim.sh simulace v rovnováze

15/21
pch04

Spustíme simulaci s vytvořeným krystalem ještě jednou a budeme měřit.

Protože simulace bude delší, bude spuštěna nikoliv na serveru, ale dávkově na některém z klientů klastru (neplatí pro a325-1).

A05-cr-view.sh prohlížení výsledků

- 1=show (video trajektorie)
- 2=konvergenční profily (veličiny v závislosti na čase)
- 3=radiální distribuční funkce (kliknutím do grafu pravou myší si zobrazíte význam barev)
- 4=kumulativní distribuční funkce (running coordination number) = počet sousedů daného iontu do dané vzdálenosti (kliknutím do grafu pravou myší si zobrazíte význam barev)

Dodatek: Linux command prompt survival kit

20/21
pch04

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
přerušeni 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 <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> =podrobné)
.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