

## Bod tání modelu NaCl

1/20  
pch04

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

**Model:**  
Lennard-Jones + náboje<sup>1</sup>

### Postup:

- připravte nanokrystalek  $2 \times 2 \times 2$  ( $\text{Na}_4\text{Cl}_4$ )
- 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

<sup>1</sup>In 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 podpora) – použití notebooků – CZ.2.17/3.1.00/33248) v rámci Operačního programu PRAHA – ADAPTABILITA.

## Test připojení

6/20  
pch04

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

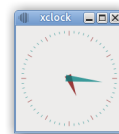
- Začátek řádku (např. `guest@403-a324-01:~$`) se nazývá **prompt**.
- Celé okno s promptem a výstupem se nazývá **terminál**.
- Pokud chcete předchodí příkaz opravit a spustit znovu, použijte kurzorovou šipku nahoru a opravte.

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 `yeyes`

### Nevidíte hodiny???

- Nejsou ikonizované? Hledejte dole na liště. [Ctrl-C] je přerušení.  
Copy je [Ctrl-Shift-C].
- Restartujte mobaxterm
- Restartujte Windows...
- Zkuste jinou metodu (PuTTY + Xming / MobaXterm)



## Počítačový klastř

2/20  
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 spuštění příkazů a skriptů)
  - X11 server (zobrazující grafiku zpracovanou na vzdáleném klientu)

403-a324-01.vscht.cz (Argon) → → →



## (Start: pro ty, kdo mají vlastní účet na klastř)

7/20  
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.csh`  
Pokud nevíte, jaký shell máte: `ps x`

## Připojení na vzdálený počítač metoda 1 – MobaXterm

3/20  
pch04

MobaXterm v sobě zahrnuje terminál i X-server.

není instalován v počítačových učebnách

- 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 klastř, 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 klastř, nutno požádat o povolení.
- Viz též dále metoda 2 = PuTTY + Xming (je instalované v některých počítačových učebnách)

počítače:  
403-a325-1 (2-3 lidi)  
403-a325-05 (~5 lidí),  
heslo má na konci navíc xx  
403-a324-01 (ostatní)

## Midnight Commander

8/20  
pch04

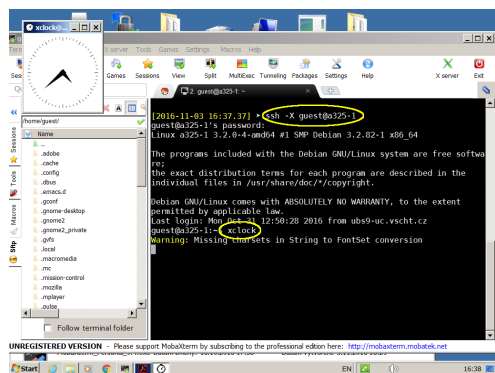
Je nadstavba shellu podobná aplikaci Total Commander (Windows Commander) vhodná pro uživatele zvyklé na Windows.

- 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 (~)². Základní ovládání:

zobrazit výpisy na obrazovku/commander (přepínač)	Ctrl-O
spravit rozbitou obrazovku (po výstupu)	Ctrl-L
prohlázení souboru (může být předdefinováno)	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)
- ²Vlnovka značí domovskou složku uživatele, zde ~ = /home/guest

## Připojení na vzdálený počítač metoda 1 – MobaXterm

4/20  
pch04



## Start: guest

9/20  
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 bash-skriptu je `.sh`, často je označen hvězdičkou `*`, což značí spustitelnost. Skripty budete postupně spouštět, např. z prostředí Midnight Commander.

- **Nastavení prostředí uživatele:** Spusťte skript `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` najděte svou složku a přejděte do ní. Objeví se sada skriptů:

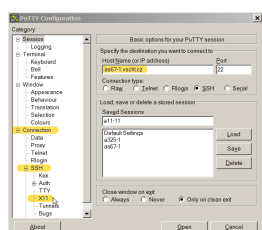
```
A01-Na4Cl4.sh
A02-repl.sh
:
```
- **Hack:** Je-li spojení na vzdálený počítač příliš pomalé, proveďte příkaz (před startem Midnight Commander):  
`guest@403-a324-01:~/VY$ export SIZE=3`  
Animace molekul se zmenší (default `SIZE=5`).

## Připojení na vzdálený počítač metoda 2: PuTTY + Xming

5/20  
pch04

### 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  
→  Enable X11 forwarding
- zpět Session → Open
- Login as: `guest` **máte-li, použijte vlastní účet**
- Password: (sdělim)



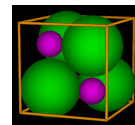
### X server pro zobrazení grafiky (Xming)

- Windows Start → hledat → `xming` a spusťte
- Případné dotazy potvrdit. Ve stavovém řádku se musí objevit ikona PuTTY a Xming jsou instalovány v některých počítačových učebnách

## A01-Na4Cl4.sh (nanokrystalek)

10/20  
pch04

- **Úkol:** Hustota modelu NaCl je  $2.1 \text{ g cm}^{-3}$ ,  $M(\text{NaCl}) = 58.4 \text{ g mol}^{-1}$ . Vypočítejte velikost hrany  $L$  krychličky obsahující  $\text{Na}_4\text{Cl}_4$ , převedte na Å.
- Spusťte skript `A01-Na4Cl4.sh` a vložte vypočtené číslo do programu. Prohlédněte si vytvořený krystalek.
- **Návod pro show:**
  - kontextový návod: stiskni **tláčitko** 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`

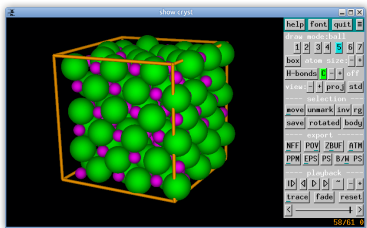
## A02-repl.sh (připrava krystalu Na<sub>108</sub>Cl<sub>108</sub>)

11/20  
pch04

V dalším kroku pomnožíme krystalek 3x 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.



## cryst300.def – definiční soubor první simulace

12/20  
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]
bulkmodulus=2e13/(T+300) ! odhad modulu pruznosti (pro barostat)
tau.P=2 ! konstanta barostatu [ps]
init="start" ! start z predch. konfig.; 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
;
```

## A03-cr-ini.sh (počáteční relaxace)

13/20  
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.

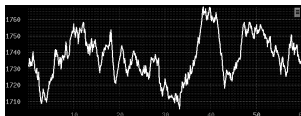
Zobrazeny jsou závislosti teploty, potenciální energie a hustoty na čase.

Všechny grafy zrušíte nejrychleji pomocí **kill all**

Pokud grafy stále vykazují trend, nutno tento krok opakovat.

Na dotaz „Opakovat michani 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.



## A04-cr-sim.sh simulace v rovnováze

14/20  
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 myš si zobrazíte význam barev)
- 4=kumulativní distribuční funkce (running coordination number) = počet sousedů daného iontu do dané vzdálenosti (kliknutím do grafu pravou myš si zobrazíte význam barev)

## A06-melt-ini.sh tavení krystalu

15/20  
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

Podobně jako v případě krystalu.

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

## A09-zone-ini.sh Příprava zonální tavby

16/20  
pch04

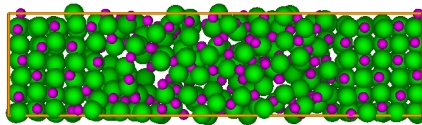
● Krystal připravený v bodech A03 až A05 bude zreplikován třikrát ve směru osy z. Výsledný krystal bude ještě trochu protažen ve směru z.

● Bude zapnut speciální typ termostatu, který bude prostředek krystalu zahřívát a „konce“ (jsou periodicky spojeni) 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 (tlačítko **proj**) a menší koule (view: **-**)



## A10-zone-sim.sh Zonální tavba

17/20  
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.

## A12-prubeh.sh Průběh tavby

18/20  
pch04

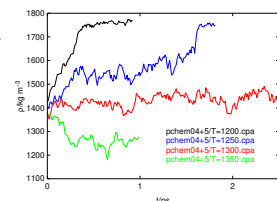
● Zobrazí se graf závislosti hustoty na čase pro všechny studenty na stejném počítači (po skončení simulací – musí existovat soubory **T=\*.cpa**).

● Popis křivek dostanete kliknutím pravým tlačítkem myši.

● Výsledky pro čtyři teploty vidíte vpravo ⇒ bod tání  $JC$  modulu  $NaCl = 1300(25) \text{ K}$ .

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

<sup>a</sup>V 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

14/20  
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 myš si zobrazíte význam barev)
- 4=kumulativní distribuční funkce (running coordination number) = počet sousedů daného iontu do dané vzdálenosti (kliknutím do grafu pravou myš si zobrazíte význam barev)

## Dodatek: Linux command prompt survival kit

19/20  
pch04

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)

## Dodatek: typy MACSIMUS souborů a asociace aplikací

20/20  
pch04

● 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
.mol	mol. topologie	blend	<b>F3</b> = viz výše + normální vibrační módy
.plb	trajektorie	show	editace, optimalizace s použitím silového pole
.cp	konvergenční profil	showcp+plot	prohlížeč trajektorie
.cfg	konfigurace	showcfg+plot	zobrazí konvergenční profily
.sta	naměřená data	staprt	zobrazí konfiguraci
.rdf	párový histogram	rdfg+plot	statistická analýza výsledků ( <b>F3</b> =podrobně)
.g	RDF	plot	zobrazí radiální distribuční funkce
.cn	kumulativní RDF	plot	zobrazí radiální distribuční funkce
.def	parametry simulace	go	zobrazí (kumulativní) distribuční funkci
.get	řízení simulace	go	provede příkaz v 1. řádce souboru
.nff	data scény	ray	provede příkaz v 1. řádce souboru
			raytracer: renderuje a zobrazí scénu