

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 funkci 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



Evropský sociální fond

„Praha & EU: Investujeme do vaší budoucnosti“

Inovace předmětu Počítačová chemie je podporována projektem CHEMnote (Inovace bakalářského studijního programu Chemie – moderní vzdělávání podpořené použitím notebooků – CZ.2.17/3.1.00/33248) v rámci Operačního programu PRAHA – ADAPTABILITA.

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

- 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) → → → →



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:) najděte složku /PocChem/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:

Wolfram=403-a325-05 (~6 lidí)

Argon=403-a324-01 (ostatní)

The screenshot displays the MobaXterm interface. On the left, a file explorer shows the directory structure of the remote host, including folders like .adobe, .cache, .config, .dbus, .emacs.d, .gconf, .gnome-desktop, .gnome2, .gnome2_private, .gvfs, .local, .macromedia, .mc, .mission-control, .mozilla, .mplayer, and .pulse. A terminal window is open, showing the command `ssh -X guest@a325-1` being entered. The terminal output includes the password prompt, the system information for a Debian GNU/Linux system, and the execution of the `xclock` command. A warning message about missing charsets is also visible. The xclock window is open in the foreground, showing a clock face.

```
[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
```


UNREGISTERED VERSION - Please support MobaXterm by subscribing to the professional edition here: <http://mobaxterm.mobatek.net>

Spolehlivější než MobaXterm

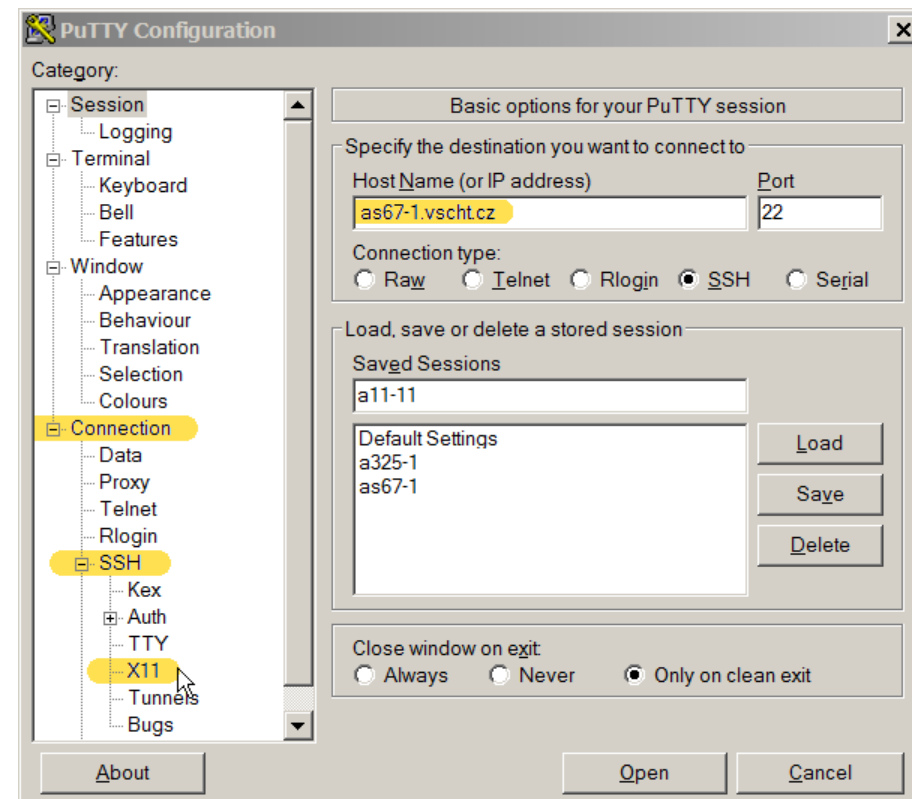
Terminál s příkazovým řádkem (PuTTY)

- 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
→ 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 spust'te 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



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.

- Instaluji 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 zkopíruji do své domovské složky soubory `/home/guest/A.zip` a `/home/guest/A.sh` a (rovněž ze své domovské složky) spustím skript `A.sh`.

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 znova, použijte kurzorovou šipku nahoru a opravte.

Jako test, že připojení je v pořádku, zkuste:

```
guest@403-a324-01:~$ xclock
```

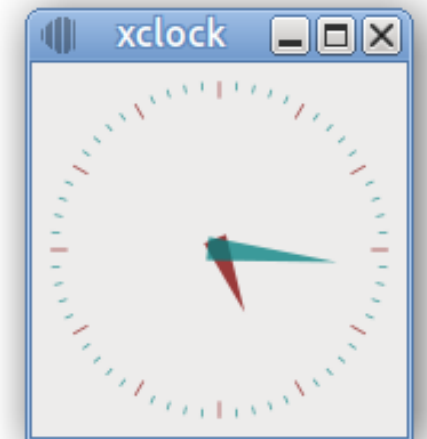
zábavnější je xeyes

Zobrazí se hodiny. Hodiny zrušte buď myší `×`, nebo stiskem `Ctrl-C` v okně terminálu.

Nevidíte hodiny???

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

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



* 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.csh`

Pokud nevíte, jaký shell máte: `ps x`

Je nastavba 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
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)

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

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 Commanderu.

● **Nastavení prostředí uživatele:** Spust'te 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** 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, proved'te příkaz (před startem Midnight Commanderu):

`guest@403-a324-01:~/VY$ export SIZE=3`

Animace molekul se zmenší (default SIZE=5).

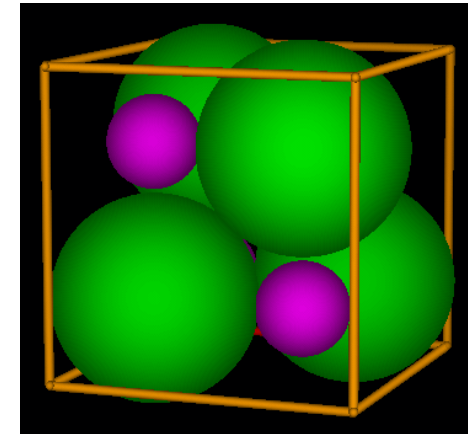
- **Úkol:** Hustota modelu NaCl je 2.1 g cm^{-3} , $M(\text{NaCl}) = 58.4 \text{ g mol}^{-1}$. Vypočtete velikost hrany L krychličky obsahující Na_4Cl_4 , převed'te na Å.
- Spust'te skript `A01-Na4Cl4.sh` a vložte vypočtené číslo do programu. Prohlédněte si vytvořený krystalek.

Návod pro show:

- kontextový návod: stiskni `tlačítko` pravým tlačítkem myši
- kliknutí označuje molekuly (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

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

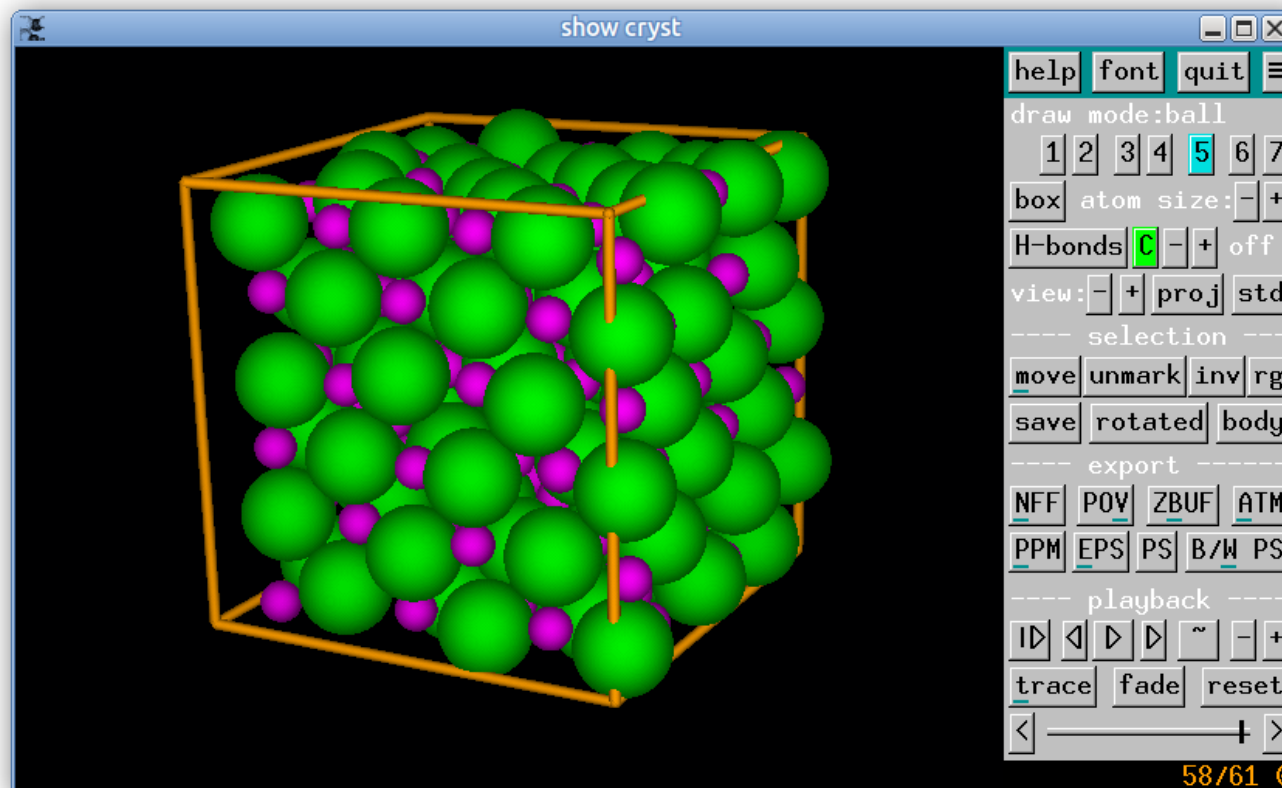
Pokud se budete nudit: `NFF` nebo `ZBUF` + `one frame + render`



V dalším kroku pomnožíme krystalek 3× 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.



```
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/cyklus 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     ! pomnozit 3x ve smeru x
load.n[1]=3     ! pomnozit 3x ve smeru y
load.n[2]=3     ! pomnozit 3x ve smeru z
;              ! konec dat
```

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.

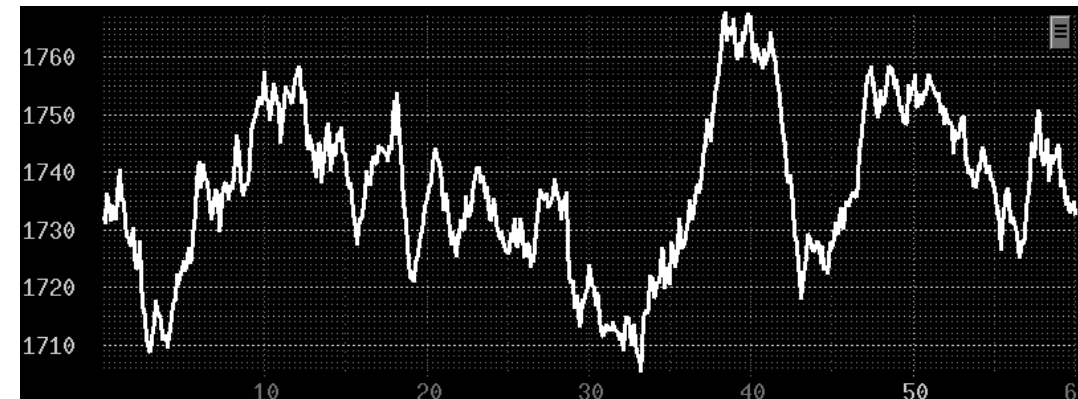
Všechny grafy zrušíte nejrychleji pomocí `kill all`

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.



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)

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**

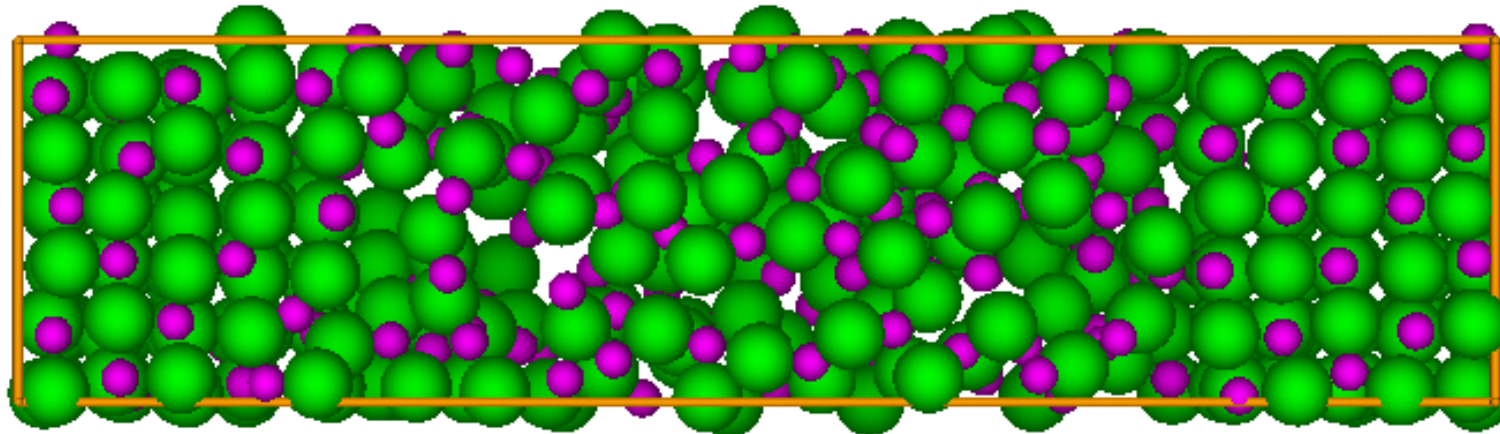
Podobné jako v případě krystalu.

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

- 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 zahřívat 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 konstatní a dána průměrnou hodnotou ze simulace krychlového krystalu.

Tento krok je opět spuštěn dávkově.

Trik: strukturu lépe uvidíte, pokud použijete rovnoběžné promítání (tlačítko) a menší koule (view:)



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**

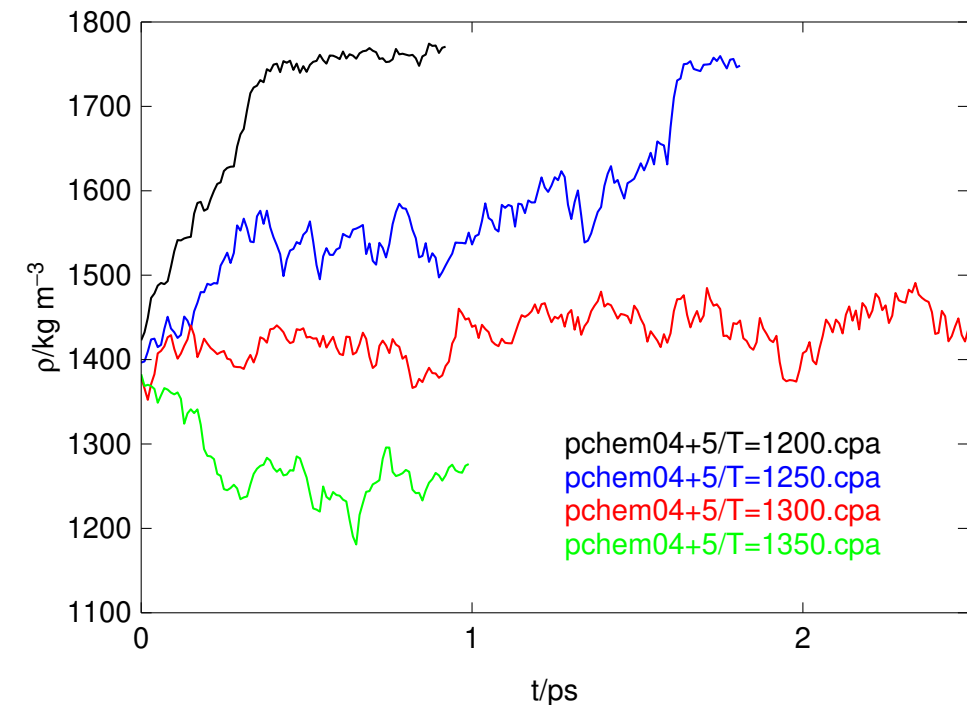
Trajektorii zapisovanou běžící simulací je možné prohlížet.

Sledujte, zda krystal taje nebo narůstá.

Po zavření programu show budete dotázáni, zda přerušit simulaci.

- Zobrazí se graf závislosti hustoty na čase pro všechny studenty na stejném počítači (po skončení simulací – musí existovat soubory `T=* .cpa`).
- Popis křivek dostaneš kliknutím pravým tlačítkem myši.
- Výsledky pro čtyři teploty vidíte vpravo ⇒ bod tání JC modelu NaCl = 1300(25) K.³
- Přesnější výsledek z větších simulací a s extrapolací $N \rightarrow \infty$ je 1287(3) K.^a

^aV 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`)

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 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