

Jak zpracovat simulační cvičení v MACSIMUSu1/50pchlml

- MACSIMUS (též na VŠCHT serveru) nejlépe pracuje pod linuxem
- Všechny úlohy obsahují podrobný návod – stačí pouze základní znalosti příkazového řádku, viz Linux pro začátečníky dále
- Můžete pracovat na svém počítači. Výběr možností:
 - Na Windows 11 si instalují WSLg (doporučeno) nebo WSL (na Win 10) a Xming
 - Instalují si linux (např. nějakou verzi Ubuntu) místo svého OS, o který tak přijdou
 - Instalují si linux pomocí dual-boot zároveň s mým OS (vhodné pro geeky)
 - Instalují si linux ve virtuálním počítači pod Windows (lze i pro macOS, náročnější na počítač)
 - Pod Windows použijí port MinGW obdobné porty existují i pro macOS, jen s nimi nemám zkušenost
 - Pod Windows použijí port CygWin
- Můžete pracovat na počítačích Ústavu fyzikální chemie. Možnosti:
 - Budu sedět ve škole
 - Budu uživatel guest (o heslo si řeknu)
 - Budu pracovat z domova
 - Mám vlastní účet na klastru
- Instalace a základní návod pro MACSIMUS

Ovládání složek6/50pchlml

- Pokud jste na sdíleném účtu guest: vytvoření nové složky, nastavení jako pracovní a kontrola:
za JOSEFK dosadte vaše školní ID malými písmeny
guest@403-a324-01:~ \$ cd # tím se vrátím „domů“ (za „# “ je komentář)
guest@403-a324-01:~ \$ mkdir JOSEFK
guest@403-a324-01:~ \$ cd JOSEFK
guest@403-a324-01:~/JOSEFK \$ pwd
/home/guest/JOSEFK
- Zvláštní názvy:
Domovská složka = ~
Tato složka = .
Rodičovská složka = ..
guest@403-a324-01:~/JOSEFK \$ cd ..
guest@403-a324-01:~ \$ pwd
cd ~ se dá zkrátit na cd
- Vše začíná v „kořenovém adresáři“ (root), absolutní cesta (path):
guest@403-a324-01:~ \$ ls /
- Externí disky apod. jsou obvykle v /media/USER/ Nejsou tu “drives” jako A: B: ve Windows

zkuste příkazy:

```
cd  
ls  
ls .  
cd ..  
ls  
pwd  
ls /home  
cd
```

Příkazy lze oddělovat středníkem:
ls;ls -l

Úvod do Linuxu2/50pchlml

- Operační systém** (OS) je systémový software, který ovládá hardware počítače a softwarové zdroje a poskytuje služby počítačovým programům.
- Jádru** je centrální část operačního systému, která obecně řídí vše v systému. Je vždy (rezidentní) v paměti a stará se o interakci mezi hardwarem a softwarem.
- Aplikace** je software provádějící specifické funkce pro koncového uživatele či pro další aplikaci.

Příklady aplikací:
Systémové grafické prostředí
Shell (příkazový řádek)
Webový prohlížeč
Webová aplikace (např. hra)
Zoom / MS Teams
Souborový manažer (průzkumník souborů)
Zoom / MS Teams (samostatně)

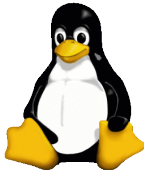
Applications

Kernel

CPU

Memory

Devices



Opičí hmaty v terminálu7/50pchlml

Ctrl-C	přerušení (lze programátorsky ovládat)
Ctrl-Shift-C	kopírovat do schránky (clipboard)
Ctrl-Shift-V	vložit (paste)
Ctrl-Shift-X	vyjmout (zkopírovat a smazat)
Ctrl-D	konec souboru (vkládaných dat)
Ctrl-Z	dej běžící aplikaci do pozadí (terminál se uvolní) zpět do popředí příkazem fg
Ctrl-S	zakaž výstup na terminál (může se stát omylem)
Ctrl-Q	povol výstup na terminál
Ctrl-R	interaktivní historie
Ctrl-I	= Tab, kontextové doplňování

Příklad:
guest@403-a324-01:~ \$ cd JOSEFK
guest@403-a324-01:~/JOSEFK \$ while true; do sleep 1; echo cheers; done
Zkuste Ctrl-S, Ctrl-Q, Ctrl-C

- Ve většině “oknových” aplikací fungují Ctrl-C, Ctrl-V, Ctrl-X jako obvykle.
- Na některých (vzdálených) terminálech to může být jinak.
- Lze také jen myší označit a kopírovat prostředním tlačítkem (na vzdálených terminálech může být prostřední tlačítko).

WindowsLinux3/50pchlml

- Proprietární, placený
- CP/M → DOS → Windows 3.1 → Windows 95 → Windows XP → Windows Vista → Windows 11
- Střední míra uživatelského přizpůsobení (nejmenší má iOS)
- Verze: „domácí“, „profesionální“, „server“
- Jeden systém distribuce softwaru
- Jedno grafické prostředí (window manager)
- Příkazový řádek: PowerShell, cmd; existují alternativy; registry
- Důraz na grafické prostředí
- Open source, zadarmo vč. spousty softwaru + proprietární drivers a aplikace
- PDP-7 → Unix → BSD Unix → (MINIX) → Linux (Linus Torvalds)
- Vysoká míra uživatelského přizpůsobení
- Distro: stovky pro různá použití a úroveň uživatele (obvyklejší skupiny distribucí jsou: Ubuntu, Debian, Arch, Mint, OpenSUSE, Fedora, Red Hat, Mandriva, Slackware, Gentoo...; jádro: Android, ChromeOS)
- Systémy distribuce softwaru: .deb, .rpm, snap...
- Grafická prostředí (window manager+): Gnome, GNOME 2, KDE, ...
- Příkazový řádek: bash, sh, csh, tcsh, ksh, zsh...
- Lze provozovat bez grafického prostředí vč. startu grafických aplikací (srov. DOS/Win3.1)
- Doporučená distribuce: Ubuntu Mate
- Doporučený shell: bash

Přehled základních příkazů8/50pchlml

exit	konec/odhlášení (někdy též Ctrl-D)
ls	vypíše obsah složky
ls -l *.pdf	vypíše detailně seznam přítomných PDF souborů
cd SLOŽKA	změna pracovní složky (change directory)
pwd	vypíše absolutní cestu k pracovní složce (print working directory)
mkdir SLOŽKA	vytvoří prázdnou složku (adresář)
rmdir SLOŽKA	smáže prázdnou složku
cp Soubor1 Soubor2	kopíruje soubor; existuje-li Soubor2, je přepsán
cp -i Soubor1 Soubor2	kopíruje soubor; existuje-li Soubor2, zeptá se, zda má přepsat
cp Soubor[y] KAM/	kopíruje soubor(y) do složky; / na konci je dobrý zvyk
cp -r COKOLIV KAM/	kopíruje vše (u složek i obsah) do složky
mv Soubor1 Soubor2	přejmenuje soubor (nebo složku)
mv COKOLIV KAM/	přesune soubory/složky
rm Soubor[y]	smáže soubor(y)
rm -i Soubor[y]	zeptá se, má-li smazat soubory
rm -r COKOLIV	smáže vše (i složky)

Příkazový řádek (terminál)4/50pchlml

Spuštění z grafického prostředí:

- Ctrl-Alt-T příp. Win-T
- Pravé tlačítko myši na plochu → Terminal, Open in Terminal...
- Najdeme na liště (panelu)
- Najdeme v menu → System Tools → MATE Terminal (dle distribuce)
- Ctrl-Alt-F1, Ctrl-Alt-F2, ... = bez grafického prostředí, normálně se nedoporučuje; Ctrl-Alt-F7 = zpět grafické prostředí

Spuštění terminálu z Windows na vzdáleném počítači:

- MobaXterm (má integrovanou grafiku, ale občas nezvládne víc otevřených grafických oken)
- PuTTY (příkazový řádek) + Xming (grafika) – existuje i pro Mac

Příkazy v terminálu píšeme za “prompt”. Ten může vypadat různě. jiri@403-a324-01:~ \$
Zde použijeme guest@403-a324-01:~/Videos \$, kde:
guest = uživatel, 403-a324-01 = jméno počítače, ~/Videos = pracovní složka
Napíšeme a odešleme pomocí Enter ~ = /home/guest

Další příkazy9/50pchlml

man PŘÍKAZ	návod k příkazu PŘÍKAZ
head Soubor	vypíše začátek souboru/ů na obrazovku, head -n3 jen 3 řádky
tail Soubor	vypíše konec souboru/ů na obrazovku, tail -n3 jen 3 řádky
ps	vypíše běžící programy (procesy), všechny: -e, bez terminálu: -x...
top	“task manager”: běžící procesy a alokace zdrojů, vypnout q
kill PID	pošle procesu signál Ctrl-C = „přeruš“ (lze ignorovat), PID viz ps / top
kill -9 PID	pošle procesu signál “vypni” (nelze ignorovat)
fgrep SLOVO	hledá SLOVO nebo jeho část (filtr)
grep SLOVO Soubor	hledá SLOVO v souboru/souborech
grep SLOVO	hledá tzv. regulární výraz (nedoporučeno pro začátečníky)
ssh USER@COMP	připojí vzdálené uživatele USER na počítač (jméno / IP adresa) COMP
ssh -X USER@COMP	... včetně grafiky (X11)

Příklad: (řádky souboru sim.def jména obsahující nastavení teploty ‘T=’)
guest@403-a324-01:~ \$ fgrep T= jmena.txt
nebo
guest@403-a324-01:~ \$ fgrep T= < jmena.txt

Základní příkazy5/50pchlml

- Kdo jsem?
guest@403-a324-01:~ \$ whoami
- Ve které složce jsem?
guest@403-a324-01:~ \$ pwd
- Co je v této složce?
guest@403-a324-01:~ \$ ls
guest@403-a324-01:~ \$ ls -l
- Který soubor jsem naposledy změnil/a?
guest@403-a324-01:~ \$ ls -rtl
- Jak se používá ls?
guest@403-a324-01:~ \$ man ls
- Co je ve složce („adresáři“, directory) sim?
guest@403-a324-01:~ \$ ls sim
nebo změním aktivní složku a pak se do ní podívám:
guest@403-a324-01:~ \$ cd sim
guest@403-a324-01:~/sim \$ ls
- Něco se stalo, na terminálu je zmatek: Ctrl-C
guest@403-a324-01:~ \$ reset
- Jsem líný psát znova příkazy: kurzorové šipky
guest@403-a324-01:~ \$ history
- tabulátor doplňuje dle kontextu, příklady:
guest@403-a324-01:~ \$ histTab
guest@403-a324-01:~ \$ ls DocTab
- Ve výpisu ls -l znamená:
(např.: drwxrwxr-x)
d=directory (1. znak) a pak po trojicích (user, group, all):
x: soubor lze spustit, složku otevřít
r: povoleno čtení
w: povolen zápis

Děláme chyby10/50pchlml

Pozor, ve výchozím nastavení se cp, mv, rm neptají a soubor je definitivně pryč!

Náprava:

- Používat koš – lze jen, jste-li v grafickém prostředí:
– v okénkovém prostředí (“Move to Trash”)
– příkaz trash-put z balíku trash-cli
- Vždy používat -i (= interaktivně = slušně se zeptá)
- Aliasovat cp na cp -i (resp. rm na rm -i nebo mv na mv -i).
To se provede příkazy alias cp ‘cp -i’ umístěnými v souboru ~/.bashrc, který se čte při startu terminálu. Původní příkazy jsou dostupné jako !rm, !mv, !cp.

Podobně > přepíše soubor bez varování

Náprava:
guest@403-a324-01:~ \$ set -o noclobber
Chceme-li soubor přepsat, použijeme >| místo >
guest@403-a324-01:~ \$ echo “Klotylda” >| jmena.txt

- Oboje je nastaveno pro uživatele guest na klastrech/počítačích.



Midnight Commander (mc)

21/50
pchlím

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

- nastartujete Midnight Commander příkazem `guest@403-a324-01:~$ mc`
- Na účtu `guest` může být obrazovka z důvodu činnosti ostatních v nestandardní pozici. Pak pomocí `Tab` přejdete na panel, který má nahoře vlnovku (~)². Základní ovládání:

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

- Soubory jsou asociovány s aplikacemi, a to i soubory simulačního balíku MACSIMUS

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

Budu pracovat na klastrech Ústavu fyzikální chemie – úvod

26/50
pchlím

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

- Terminál s příkazovým řádkem, na kterém běží interpret příkazů zvaný *shell*, typicky *bash*. Pro Windows lze použít *MobaXterm* nebo *PuTTY*. Pro macOS [viz zde](#).
- Volitelně: „grafická“ nadstavba terminálu podobající se otevřenému složce v GUI, např. *Midnight Commander*. Na klastrech je instalován, dostupná je asociace typů souborů pro MACSIMUS. Spustí se takto:
`guest@403-a324-01:~$ mc`
vyskočí se z něj stiskem `F10`.
- X server pro zobrazení grafiky. Je součástí MobaXtermu, pro připojení PuTTY lze použít *Xming*.
Příklad (zobraz hodiny):
`guest@403-a324-01:~$ xclock`

Grafika se počítá na vzdáleném počítači (klient), na vaší obrazovku (server) se pošle okno k zobrazení.

Midnight Commander: problémy

22/50
pchlím

- 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 smetl, 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

Budu pracovat na počítačích Ústavu fyzikální chemie z domova

27/50
pchlím

Pokud budete sedět ve škole, můžete tuto stránku přeskochit

- 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)
- 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 rychle vč. grafiky.
- Pokud je zobrazení molekul (program `show`, [viz dále](#)) pomalé, můžete změnit zobrazení na „drátové“ stiskem `[G]` nebo v menu `7` nebo při startu takto:
`guest@403-a324-01:~$ show -I'G'` další parametry

Budu pracovat na svém Windows počítači s WSL

23/50
pchlím

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*. Zvolíte si shell *bash*. Po otevření terminálu si aktualizujete systém a doinstalujete 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.

Počítače Ústavu fyzikální chemie k použití

28/50
pchlím

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](#) (4 procesory po 2 vláknech)
- [403-A325-16.vscht.cz](#) (Greta, 24 procesorů po 2 vláknech)

WSL

24/50
pchlím

Pro přesunování mezi souborovým systémem Windows doporučuji z vašeho linuxového domovského adresáře udělat link („zástupce“), například (disk C: → /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 *MACSIMUS*em na plochu. Z linuxu provedete (příklad):

```
unzip Plocha/macsimus-2022-10-27.zip
cd macsimus
./install.sh gcc
```

Více o instalaci

Připojení na vzdálený počítač metoda 1 – MobaXterm

29/50
pchlím

- Terminál + grafika (X-server) v jednom
- Nezvládne zobrazit několik grafů najednou (např. pro mnoho lidí v učebně)
- Na disku “scratch” (S:) najdete složku /pocitacova.chemie/Connect/ a spustíte *MobaXterm.Personal.22.1.exe*
Nebo 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 vám sdělím. Během psaní hesla se nic nezobrazuje!
Jako test spusťte hodiny: `guest@403-a324-01:~$ xclock`
Pokud se nezobrazí, mohou být ikonizované – hledejte dole na liště.
- 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)

pokud máte vlastní účet, použijte ho

WSL

25/50
pchlím

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.

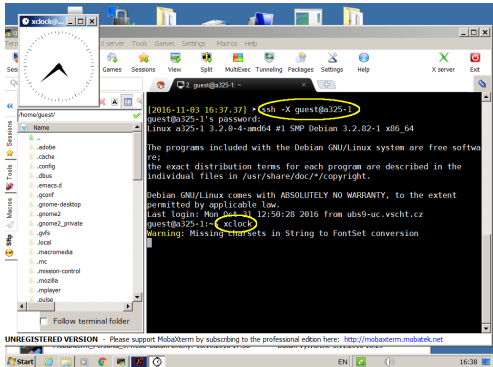
Pokud se hlásí něco jako “file ‘[99:0:7]:sin(x):cos(x)’ not found”, patrně máte špatně *PATH* a našel se jiný plot. Zkuste `/home/$USER/macsimus/bin/plot` a/nebo opravte *PATH*.

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

- `export DISPLAY=:0`
- Z PowerShellu převinštalovat: `wsl --update`
- Na starších Windows 10 nebo v případě přetrvávajících potíží zkuste externí X11 server *Xming*. Instalujte a případné dotazy potvrďte, spusťte. Ve stavovém řádku se musí objevit ikona .

Připojení na vzdálený počítač metoda 1 – MobaXterm

30/50
pchlím



Připojení na vzdálený počítač metoda 2: PuTTY + Xming

31/50
pchlím

Spolehlivější než MobaXterm, ale 2 kroky

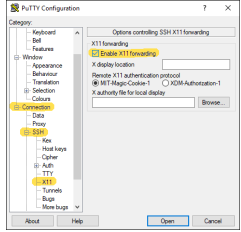
Terminál s příkazovým řádkem (PuTTY)

- Windows Start → hledat → **putty**, spustit nebo **S:pocitacova.chemie/Connect/putty64bit.exe**
- Host name → **403-a324-01.vschtl.cz** (nebo jiný počítač)
- Connection → **[+]** SSH [**→** Tunnels] → **X11**
→ **[v]** Enable X11 forwarding (**nutné pro zobrazení grafiky**)
- zpět Session → Open
- Login as: guest
- Password: (sdělím)

X server pro zobrazení grafiky (Xming)

- Windows Start → hledat → **xming** a spust'ťe 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



pokud máte vlastní účet, použijte ho

Spuštění simulace

36/50
pchlím

Typický příkaz, kterým se spouští simulace, je `guest@403-a324-01:~/sim $ cookewslc ff sim`

- ff.ble** je silové pole (vyrobené programem **blend** či získané jiným způsobem).
- Druhý parametr **sim** se vztahuje ke dvěma vstupním souborům: **sim.def** (chybí-li, hledá se **ff.def**). Typicky obsahuje počet molekul a další společné parametry. Soubor končí středníkem.
sim.get. Řídící soubor typicky obsahuje počet cyklů **no**, parametr **init** a další parametry. Po každém středníku se čtou další data a simulace se restartuje. Výsledné soubory jsou tvaru **sim.***.
Tyto soubory budete mít pro každou úlohu připraveny i s popisem použitých proměnných.
- Parametr **init** (výběr možnosti)
init="random" Nastřílí molekuly náhodně
init="slab" Vytvoří vrstvu (náhodně)
init="crystal" Molekuly v pravidelné mřížce
init="append" Přechte uložená **sim.cfg** a pokračuje, trajektorie a konvergenční profily se prodlouží, měření se restartuje
init="start" Přechte uložená **sim.cfg** a restartuje trajektorie, konvergenční profily i měření

Mám vlastní účet na klastru

32/50
pchlím

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:~ $ source /home/guest/env.sh`
příkaz **source** (nebo jen **.**) načte soubor a nezapomene nastavení.
- Instalují si **MACSIMUS** sám/sama. Stáhněte ZIP a rozbalíte:
`unzip macsimus-2022-10-27.zip`
`cd macsimus`
`./install.sh gcc`

Více o instalaci

Řízení simulací a problémy

37/50
pchlím

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 **JMENO_JOB.U.0123456** (kde 123456 je číslo jobu), v případě přímého spouštění i na obrazovce.

Přerušení běžící simulace (soubory se uzavřou):
[Ctrl-C] pokud běží přímo
`guest@403-a324-01:~/sim $ touch SIMNAME.stp` pokud běží v pozadí nebo na jiném počítači klastru – může chvíli trvat.

Přesun souborů mezi vaším počítačem a klastrem

33/50
pchlím

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 Windows nemusí tyto soubory správně zobrazit. Pak pro konverzi do Windows použijte příkaz (na klastru):
`guest@403-a324-01:~ $ unix2dos JMENO.SOUBORU`

iOS ukončuje řádky CR

Textové soubory

38/50
pchlím

Textové soubory jsou složené z písmen a řídicích znaků jako je CR a LF. Ve Windows se editují zpravidla aplikací Notepad (Poznámkový blok) a mají koncovku **.txt**, která často není vidět³. Pod linuxem je nutno vždy psát koncovku souboru!

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

- Úpravy textových souborů – Midnight Commander:
Úpravy stiskem **[F4]**
Nový soubor **[Shift-F4]**
- Dva jednoduché editory dostupné z příkazového řádku a běžící v terminálu:
`guest@403-a324-01:~/sim $ nano SOUBOR # doporučený pro začátečníky`
`guest@403-a324-01:~/sim $ 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** (řídicí soubor simulace), **.cpi**, **.che**, **.ble**, **.prt** (výstupní protokol) v **MACSIMUS**s jsou textové a lze je editovat.

³Silně doporučuji odškrtnout volbu „skrýt koncovku souborů známých typů“ v Průzkumníku Windows.

Přesun dat z webu/Windows na klastr

34/50
pchlím

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:~ $ 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:~ $ cat >| SOUBOR`

blend: molekulová mechanika (asi nebudete potřebovat)

39/50
pchlím

blend je potřeba k úloze „Vibrace plátků grafenu“.

- 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: 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)

Instalace MACSIMUSu

35/50
pchlím

- Máte-li vlastní počítač s linuxem, WSL, MinGW aj. nebo vlastní účet na klastru:
 - stáhněte si instalační archiv z **GitHubu** nebo ze **školního serveru**
 - rozbalte na vhodné místo (ZIP archiv obsahuje cestu **macsimus/**)
 - spust'ťte instalační skript:
`./install.sh gcc`
 - Důležitou součástí nastavení je instalace prostředí. Proveďte se přidáním následujících příkazů do souboru **.bashrc**:
`export BLENDPATH=/home/$USER/macsimus/blend/data`
`export PATH=/home/$USER/macsimus/bin:$PATH`
a (poprvé) provedením příkazu
`source .bashrc`
- Jste-li přihlášení jako **guest** na školním počítači s linuxem, neinstalujte, ale mu-site pracovat ve vaší složce (v tomto návodu označeno jako JOSEFK). Tu vytvoříte příkazem
`guest@403-a324-01:~ $ mkdir JOSEFK`
`guest@403-a324-01:~ $ cd JOSEFK`

show: prohlížení trajektorie

40/50
pchlím

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 konfiguraci:
 - levé tlačítko: rotace okolo **x**, **y**
 - prostřední tlačítko: přesun
 - pravé tlačítko: rotace okolo **z**
- kolečko myši = zoom
- menu on/off: nebo **[F10]**
- Start trajektorie: **[>]**
- Z **show** získáte "printscreen" (kromě PrintScreen) stiskem **[PIC]** nebo kláves **[P]+[O]** (lze získat i sérii pro případnou výrobu videa či animovaného GIFu⁴). 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 **pnmtojpg**, **pnmtojpeg**.

⁴vyžaduje utilitu **convert** z ImageMagick

show: obrázky molekul

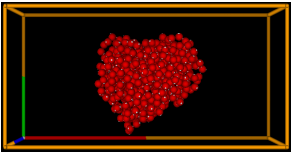
41/50
pchl

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 nedráťových 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:~/sim $ ray -n mojeveda.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 **mojeveda.0000.nff**.



cook: verze

46/50
pchl

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 kvádrčky, metoda je vhodná pro středně velké až velké systémy. Přidaný je kód pro tvorbu “slab geometry” vč. povrchového napětí, hustotních profilů aj. Totožné s **cook** ze cvičení „zonální tabba”.

cookewslcP1 – jako výše, paralelní verze, lze spustit na několika (obv. 2–8) procesorech, pro vaše úlohy asi max. 2 nebo 3

cookceslc – jako **cookewslc** ale elektrostatika je ořízená – 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)

show: animace

42/50
pchl

K exportu animované GIFu musíte mít instalovaný ImageMagick. Pokud není a máte přístup administrátora, na Ubuntu a pod. se instaluje takto:

```
guest@403-a324-01:~/sim $ sudo apt install imagemagick
```

K exportu stisknete **PIC** → **animated GIF**. Všechny obrázky se nyní zapisují (ve formátu .ppm = Portable Pixel Map, P6). Chcete-li zaznamenat rotaci, než myš je lepší používat hot keys **[X]**, **[Y]**, **[Y]** a úhel nastavit pomocí **[Z]**, **[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).

Paralelizace

47/50
pchl

Platí pro nativní linux i WSL. Počet procesorů zjistíte příkazem:

```
guest@403-a324-01:~/sim $ cat /proc/cpuinfo
```

Místo příkazu **cookewslc** pak můžete použít (příklad)

```
guest@403-a324-01:~/sim $ NSLOTS=3 cookewslcP1 ff sim
```

Na klastru zadáváte úlohu do fronty. Pomocí skriptu **jsub** (zjednodušuje systémový skript **qsub** pro určité typy úloh) zadáte počet požadovaných vláken pomocí parametru **-p**:

```
guest@403-a324-01:~/sim $ jsub -p 3 cookewslcP1 ff sim
```

Zadání jobu dávkově – na klastrech

43/50
pchl

Doporučuji skript **jsub**

- Spustíte simulaci příkazem (příklad)

```
guest@403-a324-01:~/sim $ 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:~/sim $ jstat
```
- Zrušení jobu

```
guest@403-a324-01:~/sim $ qdel CISLOJOB
```
- Přerušení správně běžícího výpočtu **cook**:
Midnight Commander: doubleclick **NPT.loc**

```
guest@403-a324-01:~/sim $ touch NPT.stp
```
- Paralelní výpočet – příklad (vyžaduje paralelní verzi, např. cookewslcP1):

```
guest@403-a324-01:~/sim $ 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)

Dodatek: Linux command prompt survival kit

48/50
pchl

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 myši kopíruje prostředním (MobaXterm) nebo pravým (PuTTY) tlačítkem myši (nastavení lze změnit)

Zadání více výpočtů na vašem počítači (též 403-a325-05 a Greta)

44/50
pchl

- Spustíte simulaci příkazem:

```
guest@403-a324-01:~/sim $ 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:~/sim $ cook nacl NPT &
```

Můžete ovšem také nastartovat víc terminálů.
- Přerušení správně běžícího výpočtu **cook**:
Midnight Commander: doubleclick **NPT.loc**

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

Dodatek: typy MACSIMUS souborů a asociace aplikací v mc

49/50
pchl

- 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	rdfig+plot	zobrazí radiální distribuční funkce
.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)

plot: grafy v MACSIMUSu

45/50
pchl

Součástí MACSIMUSu – jednoduché kreslení grafů. Návod dostanete spuštěním bez parametru. Příklad:

```
guest@403-a324-01:~/sim $ 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)

Lze i 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 # tloušťky car/ramecku v pt (1pt=0.35 mm)
f 2 2 5 # hustota popisu osy x, y, pacicky v pt
```

Z okna **plot** klikněte **EPS** nebo hotkey **[#]** nebo **F4**: vytvoří **plot.eps**

Další možnosti v linuxu:

- gnuplot
- xmgrace
- python (library matplotlib)
- MatLab
- Maple
- LibreOffice calc

Dodatek: typy MACSIMUS souborů a asociace aplikací v mc

50/50
pchl

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