

# Úvod do skriptování

Petr Kulhánek

[kulhanek@chemi.muni.cz](mailto:kulhanek@chemi.muni.cz)

Národní centrum pro výzkum biomolekul, Masarykova univerzita, Kotlařská 2, CZ-61137 Brno

# Obsah

## ➤ Skripty

skripty versus programy, editory, spouštění

## ➤ GNUPlot

příkazy, terminály

## ➤ BASH

proměnné, řídicí struktury

## ➤ Praktický příklad

průběh výpočtu volné energie pomocí metadynamiky

# Skripty

---

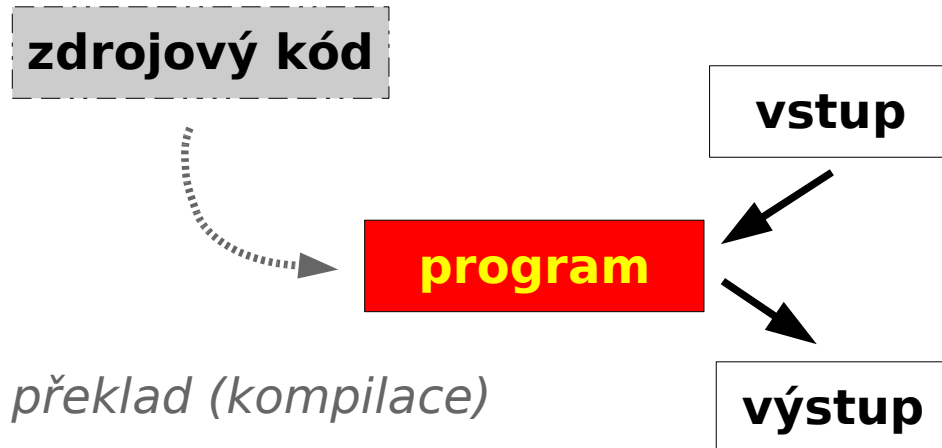
- **programy *versus* skripty**
- **jak psát skripty**
- **spouštění skriptů**

# Programy Skripty

**Program** je soubor strojových instrukcí zpracovávaných přímo procesorem. Program vzniká **překladem** zdrojového kódu programovacího jazyka.

## Překládané jazyky:

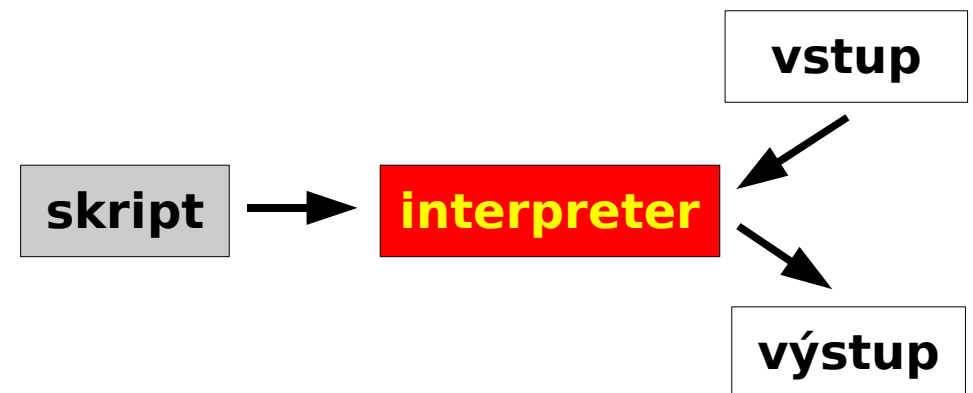
- **C/C++**
- **Fortran**



**Skript** je textový soubor obsahující příkazy a řídicí sekvence, které jsou vykonávány **interpretem** použitého **skriptovacího jazyka**.

## Skriptovací jazyky:

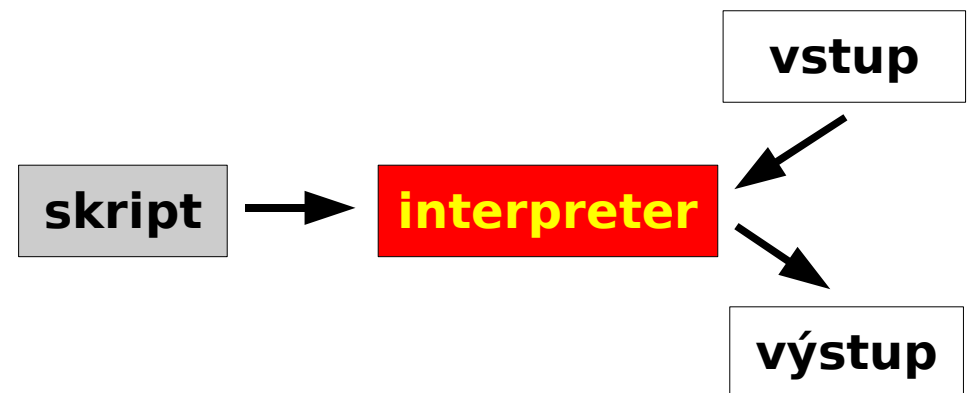
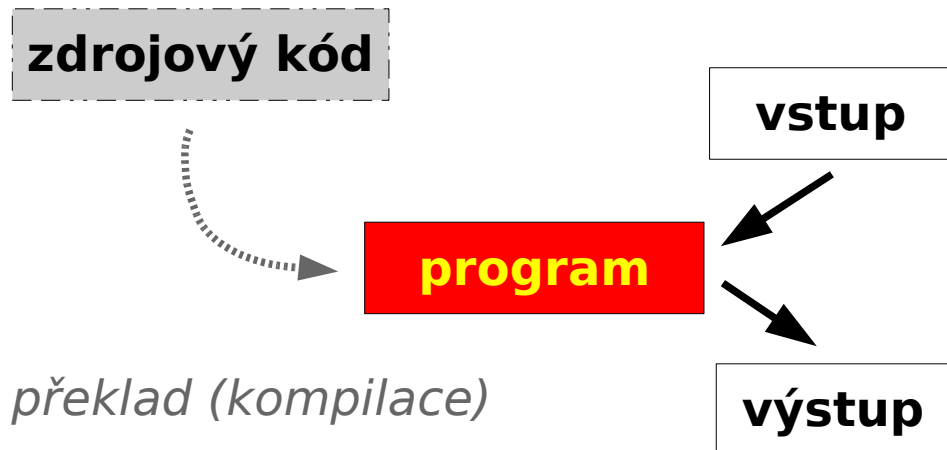
- **bash**
- **gnuplot**
- **awk**
- JavaScript
- PHP



# Programy Skripty

- **snadná optimalizace**
- **rychlé vykonávání**
- **nutnost rekompilace**
- **nelze vytvářet samospustitelný kód**

- **nevyžaduje rekompilaci**
- **vytváření samospustitelného kódu**
- **špatná optimalizovatelnost**
- **pomalejší vykonávání**





# Jak psát skripty

Jelikož jsou skripty textové soubory, lze použít libovolný textový editor umožňující uložení textu v čisté formě (bez formátovacích metadat).

## Textové editory:

- vi
- **kwrite**
- kate
- gedit

K psaní scriptů lze používat i specializované vyvojové prostředí - **IDE** (**I**ntegrated **D**evelopment **E**nviroment). IDE obsahuje kromě editoru i správce projektu, ladící nástroje (debugger) a další. Většinou dostupné pro komplexnější jazyky: *JavaScript, Python, PHP*, atd.

## Vývojové prostředí:

- kdevelop
- NetBeans
- Eclipse



# Spouštění skriptů

## 1) Nepřímé spouštění

Spouštíme interpreter jazyka a jako argument uvádíme jméno skriptu.

```
$ bash muj_skript_v_bashi
```

```
$ gnuplot muj_skript_v_gnuplotu
```

Skripty nemusí mít nastaven příznak x (executable).

## 2) Přímé spouštění

Spouštíme přímo skript (shell automaticky spustí interpreter).

```
$ ./muj_skript_v_bashi
```

```
$ ./muj_skript_v_gnuplotu
```

Skripty **musí** mít nastaven příznak x (**executable**) a interpreter (součást skriptu).

# Určení interpreteru

**Specifikace interpreteru (první řádek skriptu):**

**`#!/absolutní/cesta/k/interpreteru/skriptu`**

## Skript v bashi

```
#!/bin/bash  
  
echo "Toto je skript v bashi!"
```

## Skript v gnuplotu

```
#!/usr/bin/gnuplot  
  
set xrange[0:6]  
  
plot sin(x)  
  
pause -1
```

- Pokud není interpreter skriptu při jeho přímém spuštění uveden, použije se interpreter shellu.
- Interpreter uvedený ve skriptu se ignoruje při nepřímém spuštění.



# Přímé spouštění

Spouštíme přímo skript (shell automaticky spustí interpreter).

```
$ ./muj_skript
```



musí mít nastaven příznak **x** (executable)

```
$ chmod u+x muj_skript_v_gnuplotu
```

Cesta (relativní či absolutní) ke skriptu je uvedena. Systém spustí uvedený soubor.

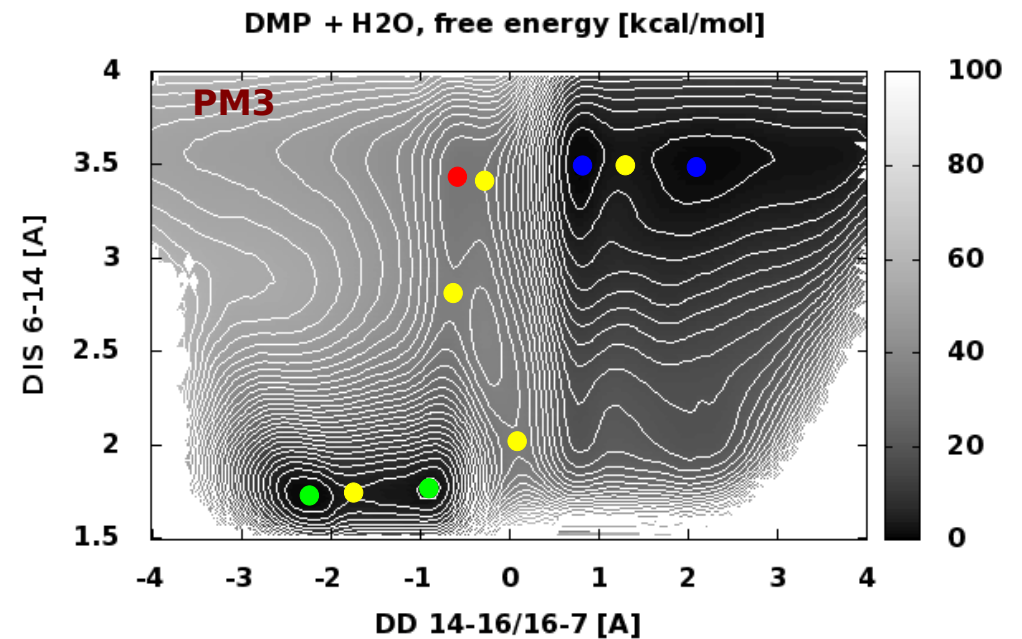
```
$ muj_skript
```

Cesta ke skriptu není uvedena. Shell hledá skript v adresářích určených systémovou proměnnou **PATH**.

# GNUPlot

- úvod, interaktivní mód
- základní příkazy
- typy terminálů

<http://www.gnuplot.info/>



**GNUPlot** slouží k vykreslování 2D a 3D grafů umožňující práci v interaktivním tak i skriptovacím režimu.

## Interaktivní mód

```
$ gnuplot
```

```
GNUPLOT  
Version 4.2 patchlevel 2  
last modified 31 Aug 2007  
System: Linux 2.6.24.5-laptop-2mnb
```


```
Copyright (C) 1986 - 1993, 1998, 2004, 2007  
Thomas Williams, Colin Kelley and many others
```

```
Type `help` to access the on-line reference manual.  
The gnuplot FAQ is available from http://www.gnuplot.info/faq/
```

```
Send bug reports and suggestions to <http://sourceforge.net/projects/gnuplot>
```

```
Terminal type set to 'x11'  
gnuplot>
```

  
 příkazová řádka gnuplotu



# GNUPlot - příkazy

**set title** "graph title"

nastaví název grafu

**set xrange**[min\_value:max\_value]

nastaví rozsah x-vé osy

**set yrange**[min\_value:max\_value]

nastaví rozsah y-vé osy

**set nokey**


nezobrazí legendu k datovým řadám

**plot** "file.dat" **using** x\_column\_id:y\_column\_id **with** lines **title** "data title"

zobrazí XY graf zobrazující data ze souboru file.dat

**pause -1**

čeká na zmáčknutí klávesy



# GNUPlot - terminály

**Terminál** určuje kam bude graf vykreslen.

**set term x11**

výstup je vykreslen do okna

**set term png** size 800,600

výstup je vykreslen jako obrázek ve formátu png

**set output** "output.png"

výstup bude uložen do souboru output.png

# BASH

---

- **úvod, interaktivní mód**
- **příkazy**
- **proměnné**
- **řídící struktury**

<http://www.gnu.org/software/bash/>

# Praktický příklad

---

- volná energie
- metadynamika
- znázornění průběhu výpočtu volné energie pomocí metadynamiky

# Volná energie

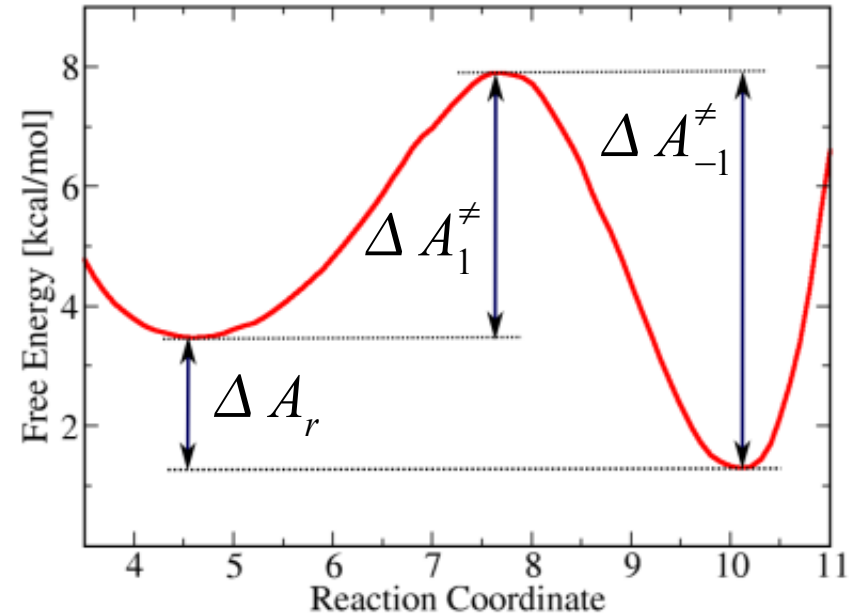
- termodynamická veličina
- stavová funkce ( $\Delta A$ ,  $\Delta G$ )
- určuje “užitečnou” práci

**NVT podmínky: Helmholtzova energie**

$$\Delta A = \Delta U - T \Delta S$$

**NVp podmínky: Gibbsova energie**

$$\Delta G = \Delta H - T \Delta S$$



**Volná energie je spjata s rovnovážnou a rychlostní konstantou:**

$$\Delta A_r = -RT \ln K = -RT \ln \frac{k_1}{k_{-1}}$$

$$k_1 = \kappa \frac{k_B T}{h} e^{-\frac{\Delta A_1^\ddagger}{RT}}$$



# Metadynamika

Povrh volné energie je zaplňován Gaussovými funkcemi.

**Pohybové rovnice (molekulová dynamika)**      **MTD časově závislý potenciál**

$$m_i \frac{\partial^2 x_i(t)}{\partial t^2} = - \frac{\partial V(\mathbf{x})}{\partial x_i}$$

$$V_h(\mathbf{s}, i) = \sum_{t=1}^i H_t \exp \left( - \frac{(\mathbf{s} - \mathbf{s}_t)^2}{2\sigma^2} \right)$$



**Pohybové rovnice metadynamiky (přímý přístup)**

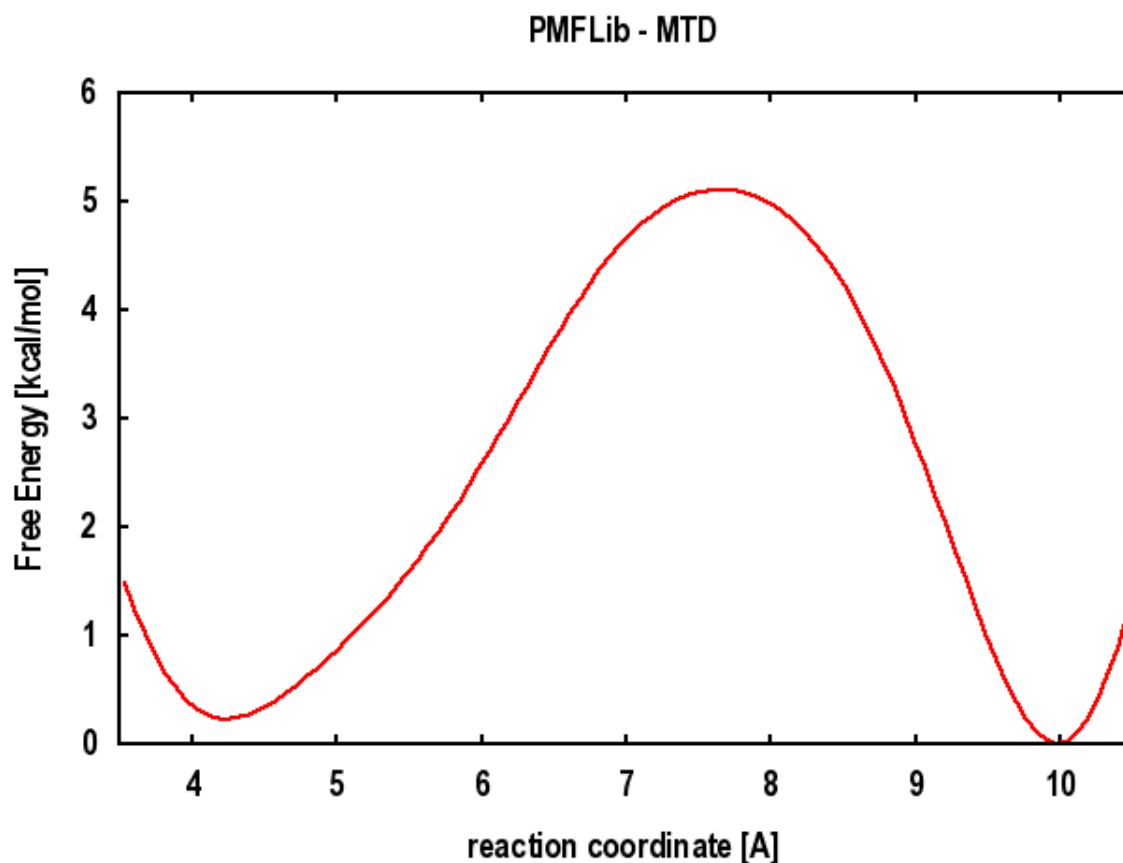
$$m_i \frac{\partial^2 x_i(t)}{\partial t^2} = - \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ V(\mathbf{x}) + V_h(\mathbf{x}, i) \right\}$$

**Časově závislý potenciál konverguje k volné energii**

$$A(\mathbf{s}) = \lim_{i \rightarrow \infty} - V_h(i, \mathbf{s})$$

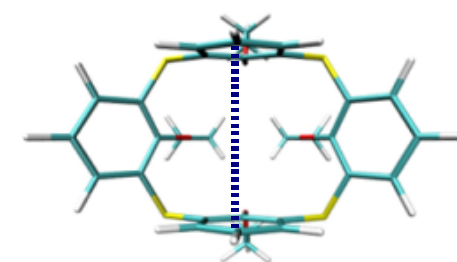
Laio, A.; Parrinello, M. *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **2002**, 99, 12562-12566.

# Tetraethoxycalix[4]aren



**example not fully converged**

výška 0.01 kcal/mol, šířka 0.5 Å  
MTD frekvence 500 fs  
1 ns dlouhá simulace  
300 K, vakuum, silové pole GAFF, časový krok 0.5 fs



**DIS** (vzdálenost)

# Stavební bloky

## 1) Výpočet odhadu volné energie z časově závislého MTD potenciálu

```
$ module add pmflib  
$ mtd-energy --time 100 _meta.rst _meta.energy
```

počet gaussiánů (parametr)

MTD potenciál (vstup)

odhad volné energie (výstup)

**\_meta.rst** obsahuje

## 2) Vykreslení grafu s odhadem volné energie

## 3) Skript v bashi, který bude postupně počítat odhad volné energie a vykreslovat její graf pro rostoucí počet gaussiánů

## 4) Vytvoření finální animace



# Stavební bloky, II

## 2) Vykreslení grafu s odhadem volné energie

```
plot '_meta.energy' using 1:2 with lines
```

## 3) Skript v bashi, který bude postupně počítat odhad volné energie a vykreslovat její graf pro rostoucí počet gaussiánů

```
for((T=10;T<1000;T+=10))  
do  
    ....  
done
```

## 4) Vytvoření finální animace

```
$ module add mplayer
```

**MEncoder tutorial:**

<http://www.cscs.ch/~mvalle/mencoder/mencoder.html>

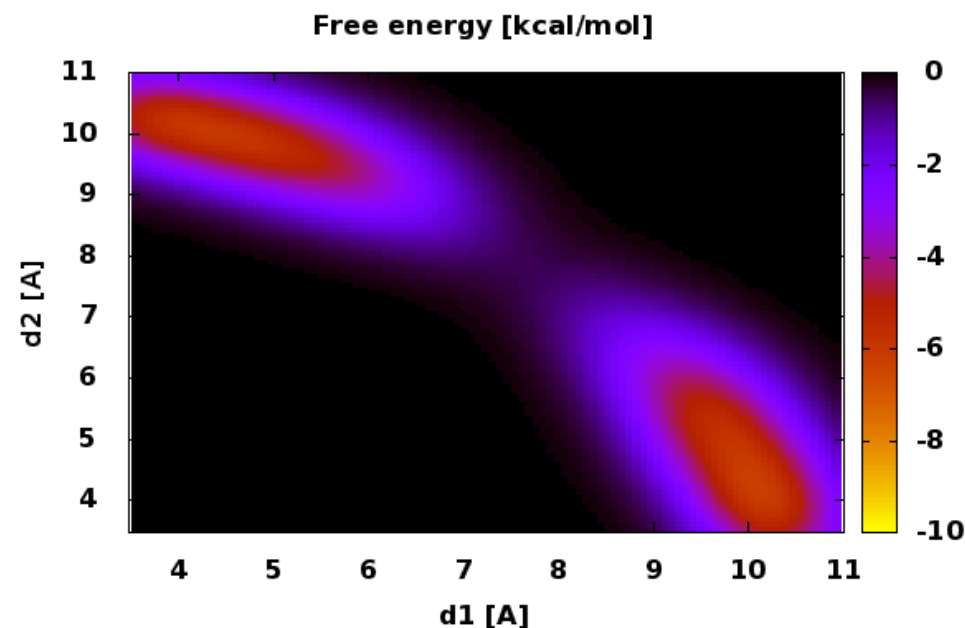
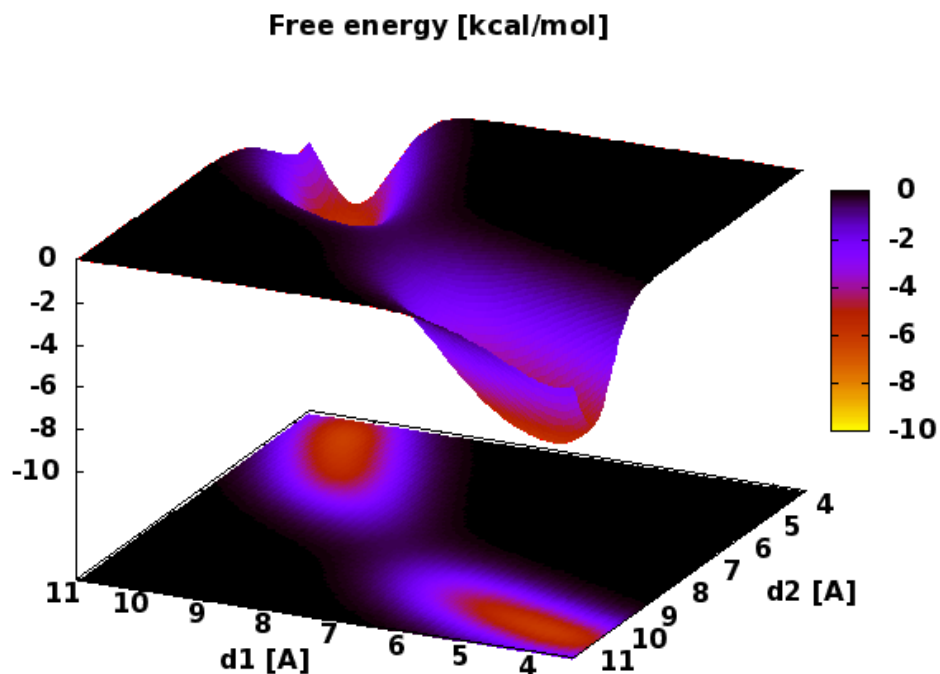
## 5) Přehrání animace

```
$ module add mplayer
```

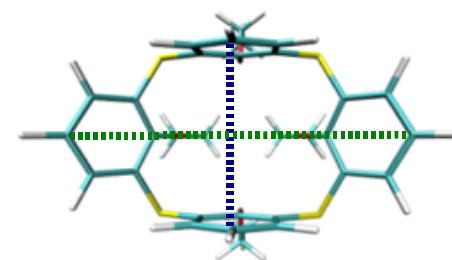
```
$ mplayer output.avi
```

# Tetraethoxycalix[4]aren

## Domácí úkol



výška 0.01 kcal/mol, šířka 0.5 x 0.5 Å  
MTD frekvence 500 fs  
2 ns dlouhá simulace  
300 K, vakuum, silové pole GAFF, časový krok 0.5 fs



2x DIS (vzdálenost)

# Literatura

---

- **zdroje užitečných informací**

## **GNUPlot**

*Domovská stránka:*

<http://www.gnuplot.info/>  
(dokumentace, tutoriály, zdrojové kódy)

## **BASH**

*Domovská stránka*

<http://www.gnu.org/software/bash/>  
(dokumentace, zdrojové kódy)

*Bash Guide for Beginners*

<http://tldp.org/guides.html#bbg>

*Advanced Bash-Scripting Guide*

<http://tldp.org/guides.html#abs>

*Bash očima Bohdana Milara*

<http://knihy.root.cz/kniha/bash-ocima-bohdana-milara/>

# Poděkování

---