**Wignerovské vzorkování**

Wignerovské vzorkování se provádí tak, že rozběhneme N-krát FMS pro jeden krok. Výsledkem je output FMS.out, ze kterého pak následně vytáhneme polohy a rychlosti. Ukázkovou simulaci pro peroxid vodíku a všechny inputy lze najít na as67-1 v následující složce:

/home/svobodan/PETR/FMS.sampling

1. NEJPRVE:
2. Optimalizace geometrie

*h2o2.3w.mp2opt.com*

1. Výpočet frekvencí molprem (jde to i s M10)

*h2o2.3w.mp2freq.com.out*

1. Na první řádku outputu z výpočtu frekvencí se přidá počet atomů a počet frekvencí
2. Použijeme program mp2freq na vygenerování souboru Frequencies.dat

*/home/oncakm/mp2freq < h2o2.3w.mp2freq.com.out > Frequencies.dat*

1. Vytvoříme soubor Geometry.dat podle vzoru (v bohrech)
2. VZORKOVÁNÍ

V základním adresáři jsou následující soubory:

* sample
* h2o2.3w.mp2freq.com.out
* rand2
* random
* zpracuj.sampling
* a adresář TEMPLATE

V adresáři *TEMPLATE:*

* nitrate.com
* Geometry.dat
* Frequencies.dat
* Control.dat
* runFMS\*

Skript *sample* spustí simulaci. Nejprve vytvoří adresář SAMPLING a v něm pak budou složky SAMPLE.1 až SAMPLE.N. Do každého SAMPLE.i se vždy překopírují soubory z TEMPLATE a spustí se tam jeden krok simulace. Nejdůležitější výsledky pak budou v FMS.out.

Soubor *zpracuj.sampling* vytahá ze všech FMS.out geometrie a hybnosti. Geometrie převede na angstromy, s hybnostmi nic nedělá. Pokud jsou třeba rychlosti místo hybnosti, je třeba skript trochu upravit