

C2150

Zpracování informací a vizualizace v chemii a biochemii

0. lekce (organizace)

Petr Kulhánek

kulhanek@chemi.muni.cz

Národní centrum pro výzkum biomolekul, Přírodovědecká fakulta,
Masarykova univerzita, Kamenice 5, CZ-62500 Brno

➤ Organizace výuky

harmonogram, zakončení předmětu

➤ Klastř WOLF

struktura, pravidla používání, správci, učebna 1.18, lokální a vzdálený přístup

➤ Prerekvizity

účty na klastřu WOLF

➤ Probírané okruhy

Organizace výuky

Harmonogram semestru

Výuka: 14. února 2022 – 20. května 2022

Zkouškové období: 23. května 2022 – 1. července 2022

Celkový počet přednášených hodin: 14 x 2 hodiny = 28 hodin

Zakončení: kolokvium (3 kredity)

Celková hodinová zátěž předmětu:

1 ECTS kredit -> 26 hodin studijní zátěže; 3 kredity -> 2x 26 hodin = **78 hodin studijní zátěže**

Prezenční forma výuky



Prezenční výuka:
28 hodin

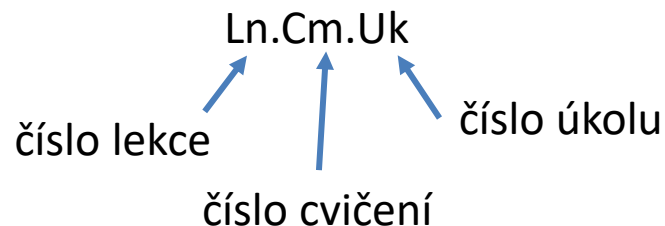


**Samostudium, domácí úlohy,
příprava na zkoušku:**
50 hodin

Účast na cvičení je povinná. Jsou povoleny dvě dopředu omluvené absence.

Zakončení předmětu

- Odevzdávají se vypracované úkoly řešené v hodinách cvičení ve formě stručného souhrnu. Souhrn bude obsahovat jméno, datum vypracování, čísla řešených úkolů a výsledek (typicky vytvořený obrázek nebo snímek vytvořeného materiálu).



- Dále se odevzdává závěrečný projekt, který je vhodné vypracovávat průběžně během semestru. Může se jednat o plakátové sdělení (poster) či prezentaci z vlastních nebo převzatých dat. Vytvořený materiál bude student prezentovat v poslední hodině cvičení.

Klastr WOLF

Učebna 1.18



- Učebna s 23 PC
- Uspořádání do výpočetního klastru

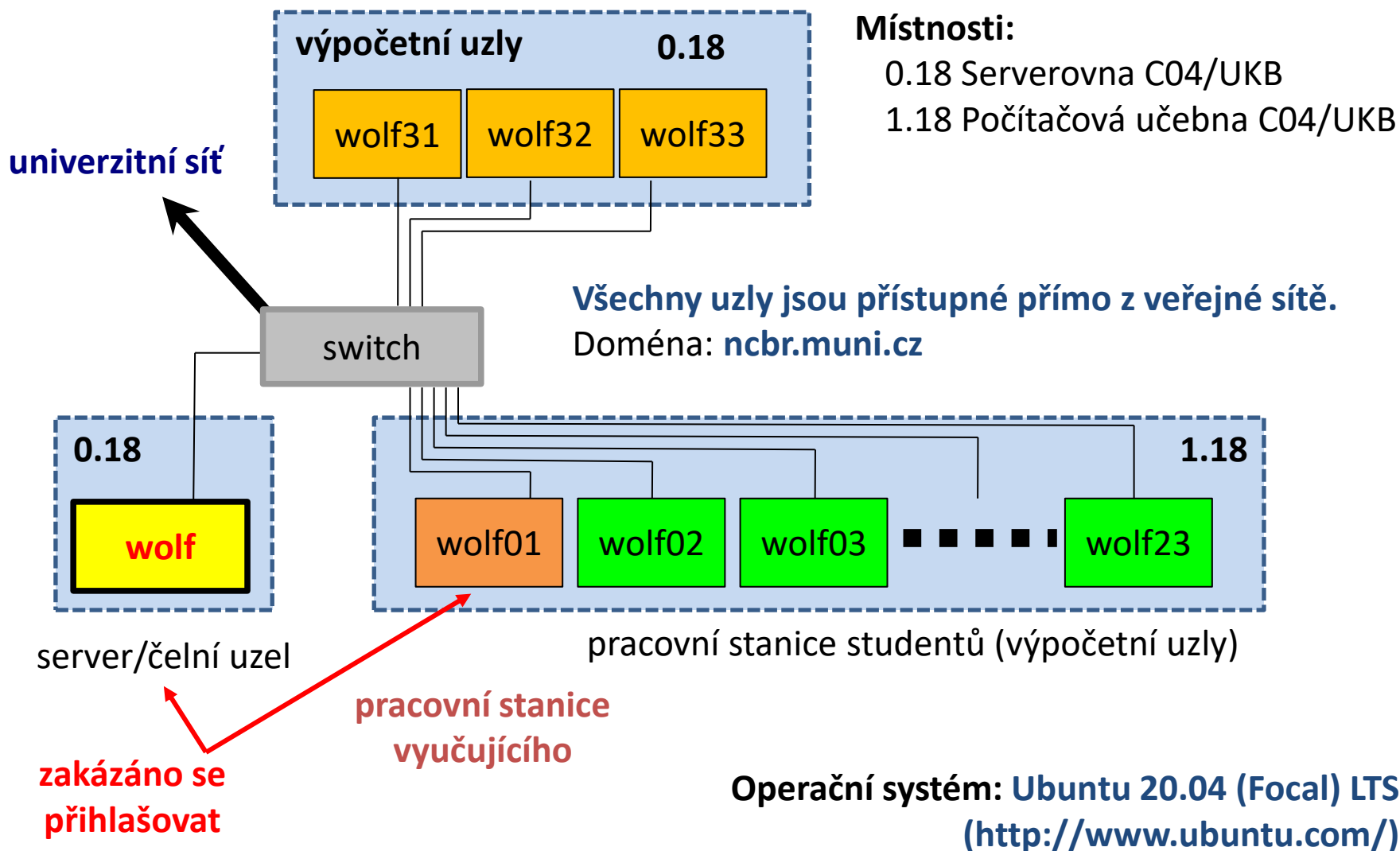
Bezpečnost práce!

Základní informace:

<https://wolf.ncbr.muni.cz>

Učebna je volně přístupná studentům, kteří pracují na projektech v NCBR, a dále studentům, kterým v daném semestru v učebně probíhá výuka.

Struktura klastru WOLF



Pravidla používání

Klaster WOLF je určen výhradně pro účely výuky či pro vědeckou práci v rámci Národního centra pro výzkum biomolekul.

Klaster WOLF je vysloveně zakázáno používat pro:

- stahování nelegálního obsahu (autorsky chráněná díla apod.)
- rozesílání virů, spamů, nevyžádané pošty a podobných materiálů
- prolomení ochrany jiných počítačů
- čtení, mazání či změnu nechráněného obsahu souborů jiných uživatelů

Závazná jsou pravidla užívání počítačové sítě Masarykovy univerzity:

https://is.muni.cz/auth/do/mu/Uredni_deska/Predpisy_MU/Masarykova_univerzita/Smernice_MU/SM10-17/

Přihlašovací jméno a heslo tvoří identitu uživatele a proto ji zásadně nesdělujeme třetím osobám, neukládáme či zasíláme (např. e-mailem) v nešifrované formě!

Pravidla používání

Na klastru WOLF je dále vysloveně zakázáno:

- spouštět úlohy na čelním uzlu (wolf.ncbr.muni.cz)
- spouštět úlohy kdekoliv v domovském adresáři (obzvláště datově náročné úlohy)
- spouštět úlohy na pracovních stanicích v průběhu výuky (pokud není povoleno vyučujícím)

Časově delší úlohy je nutné spouštět pomocí dávkového systému.
Bližší informace v C2115 Praktický úvod do superpočítání.

Správci klastru

Než kontaktujete správce, **konzultujte** svůj problém s vaším kolegou, vyučujícím nebo školitelem. Pokud problém nevyřešíte, **oznamte problém správcům** e-mailem na

support@lcc.ncbr.muni.cz

Ve zprávě uveďte

- Popis problému, název příkazu
- Jméno uživatele, stroje
- Kopie chybového výstupu (celý od zadání příkazu)

GNOME Desktop

nastavení, odhlášení

vyhledat aplikaci, např. "terminal"

Dock
(běžící aplikace, často používané aplikace)

Standardní aplikace

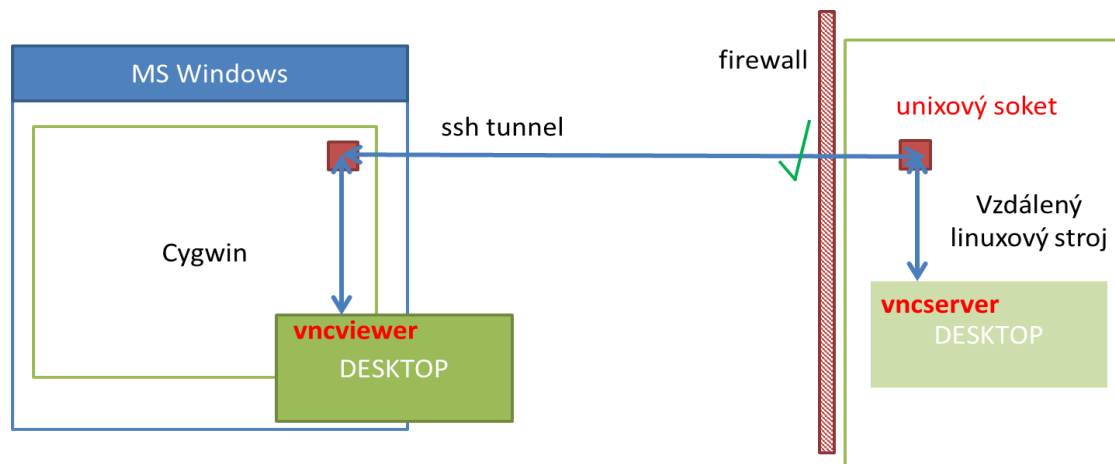
Vzdálený přístup na klastr WOLF

Na klastr WOLF je možné přistupovat vzdáleně:

- v příkazovém režimu (ssh, scp, Putty)
- v grafickém režimu
 - vzdálená plocha (zabezpečené VNC)
 - export X11 displeje

Návody pro přístup z MS Windows, macOS, či Linuxu jsou uvedeny v samostatných prezentacích.

Protože budeme převážně pracovat s **grafickými aplikacemi**, doporučuji zprovoznit vzdálený přístup pomocí **vzdálené plochy**.



Ukázka vzdálené plochy

The image shows a Windows desktop environment with several open windows. On the left, there are two terminal windows. The top terminal window shows the command `vncserver --fullgui` being executed, with output indicating that the TigerVNC server started successfully. The bottom terminal window shows the command `vncviewer kulhanek@wol04.ncbr.muni.cz:1` being executed, with output indicating a successful connection to the remote host. In the center, there is a window titled "Vzdálená plocha Ubuntu GNOME desktop" which displays a remote Ubuntu desktop. The desktop shows the GIMP application window with a red envelope icon drawn on a white canvas. The GIMP window title is "*[Untitled]-1.0 (RGB color, 1 layer) 640x400 - GIMP". The GIMP interface includes a menu bar (File, Edit, Select, View, Image, Layer, Colors, Tools, Filters, Windows, Help) and a toolbar on the right. The bottom taskbar of the Windows desktop shows several open applications, including Total Commander, C2110-CZ-MSWind..., Version tigervnc/1..., and wolf04:1 (kulhanek)....

Spuštění VNC serveru, terminál je možné ukončit

Spuštění VNC prohlížeče

Vzdálená plocha Ubuntu GNOME desktop

gimp

MS Windows

Vzdálená plocha: VNC na uzlu wol04

Prerekvizity

Prerekvizity - účty

➤ Účet na klastru WOLF

<https://wolf.ncbr.muni.cz>

- **založení účtu**
- reset hesla, prodlužování platnosti účtu
- obsazení učebny
- dokumentace

Probírané okruhy

➤ **Publikování vědecko-technických dat**

- Reporty/Protokoly/Souhrnné zprávy
- Prezentace
- Bakalářské/Diplomové/Disertační práce
- Články a publikační proces

➤ **Primární a sekundární data**

- Evidence a archivace dat, surová data
- Zpracovávání dat (obrázky, grafy, ...)

➤ **Prezentace 3D molekulárních struktur**

- VMD, Pymol, Chimera
- Blender
- 3D tisk

➤ **Vytváření 3D modelů molekulárních struktur**

- Nemesis
- Avogadro

➤ **Kompozice obrazových dat**

- Inkscape (vektorová grafika)
- GIMP (rastrová grafika)

➤ **Citace**

- Primární a sekundární literární zdroje
- Citační managery (Zotero, ...)

➤ **Prezentace 2D molekulárních struktur**

- ChemSketch
- Ketcher
- XDrawChem

➤ **Vytváření grafů**

- gnuplot
- matplotlib
- tabulkové kalkulátory

➤ **Sázení matematických rovnic**

- MS Office
- Libre Office
- LaTeX (overleaf)

➤ **Vytváření dokumentů**

- MS Office
- Libre Office
- LaTeX (overleaf)