

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

Obsah

➤ Organizace výuky

harmonogram, zakončení předmětu

➤ Probírané okruhy

➤ Klastř WOLF

učebna 1.18, struktura klastř, pravidla používání, správci

➤ Prerekvizity

účty na klastř WOLF, reset/změna hesla

➤ GNOME desktop

učebna 1.18, struktura klastř, pravidla používání, správci

➤ Vzdálený přístup

vypínání klastř, vzdálené zapnutí pracovní stanice, vzdálená plocha

Organizace výuky

Harmonogram semestru

Výuka: 13. února 2023 – 22. května 2023

Zkouškové období: 23. května 2023 – 3. července 2023

Celkový počet odpřednášených 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**

Státní svátky: 10.4., 1.5., 8.5. -> poslední vyučovací hodina 22. 5. (15 týden)

Forma výuky, studijní materiály

Prezenční forma výuky

- Jedná se o cvičení, **povinná docházka**
- **Jsou povoleny dvě dopředu omluvené absence**
- Výuka probíhá v počítačové učebně 1.18/C04/UKB na počítačích s OS Ubuntu
- Lekce prokládané cvičeními řešenými v průběhu vyučovací hodiny s možností konzultace

Studijní materiály

Interaktivní osnova předmětu C2150

Způsob výuky



Prezenční výuka
(28 hodin)



Samostudium, domácí úlohy, příprava na
zkoušku (50 hodin)



Samostudium rozšiřující znalosti, které
nebudou vyžadovány pro složení zkoušky

Evidence docházky

Učebna 1.18/C04

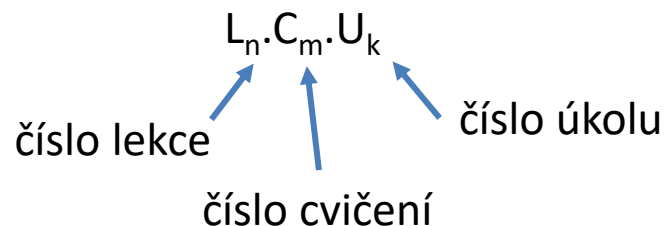


Snímač karet

Registrují se příchody \pm 30 minut od zahájení výuky.
Nestandardní situace (např. náhrada v jiné seminární skupině) se řeší domluvou.

Zakončení předmětu

- Z úloh řešených v hodinách se vypracovává stručný souhrn. 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.

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)

Klastr WOLF

Učebna 1.18



- Učebna s 23 PC
- Uspořádání do výpočetního klastru

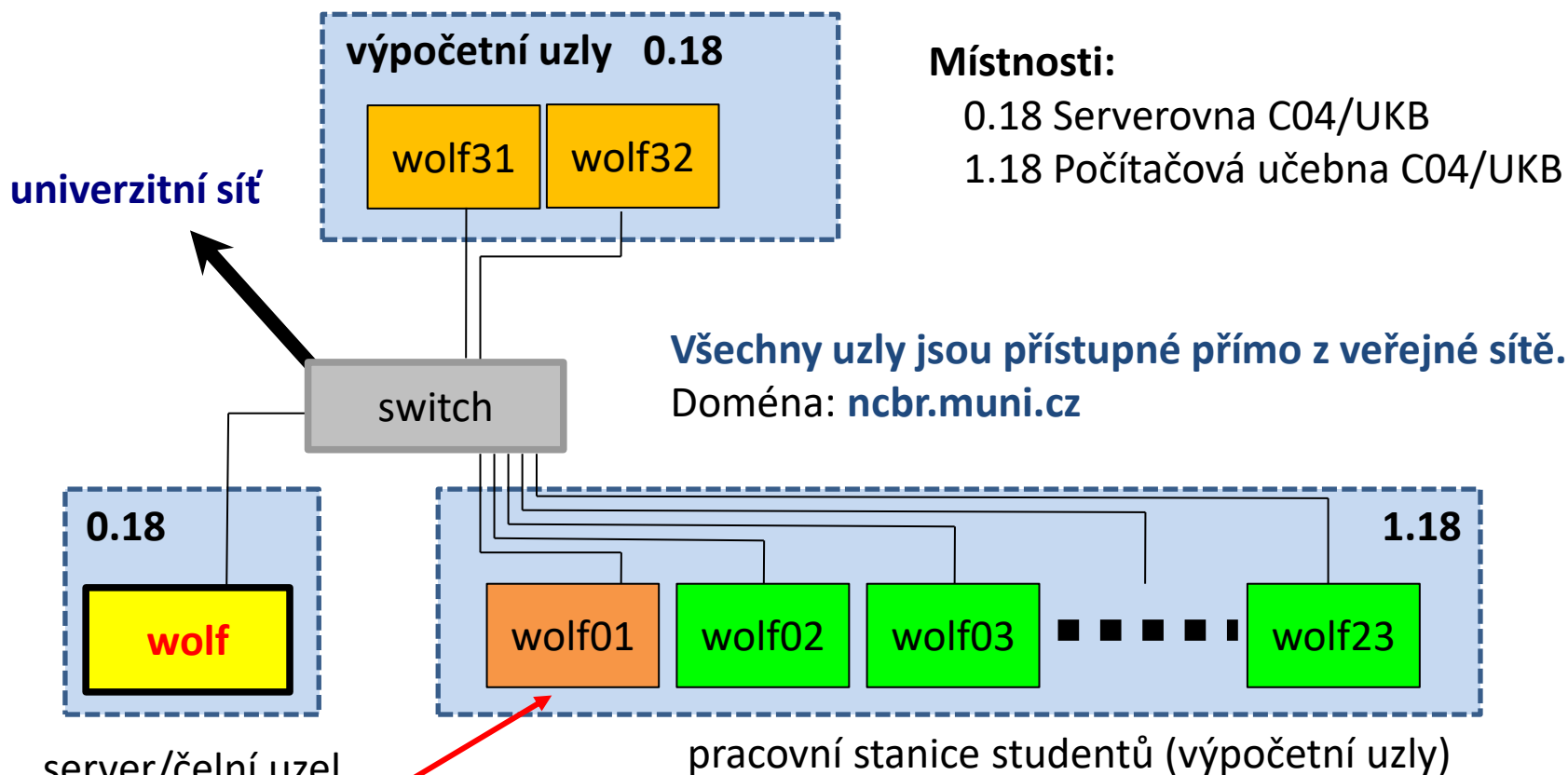
Bezpečnost práce!

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



Místnosti:

0.18 Serverovna C04/UKB

1.18 Počítačová učebna C04/UKB

Operační systém: Ubuntu 22.04 (Jammy) LTS
(<http://www.ubuntu.com/>)

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)

Prerekvizity

- e-INFRA účty
 - Založení účtu
 - Změna hesla, zapomenuté heslo

Žádost o účet (prerekvisity)

Přichystejte si vhodné přihlašovací jméno a heslo, které budete používat pro přístup na klastr WOLF. Přihlašovací jméno volte s vědomím, že se jedná zároveň o účet v národní **e-Infrastruktuře** (např. při registraci do MetaCentra budete používat stejné přihlašovací údaje). **Upozorňuji, že přihlašovací jméno není možné po registraci změnit. Heslo musí být silné.**

Podání žádosti o účet na klastru WOLF:

<https://wolf.ncbr.muni.cz> → Správa účtů



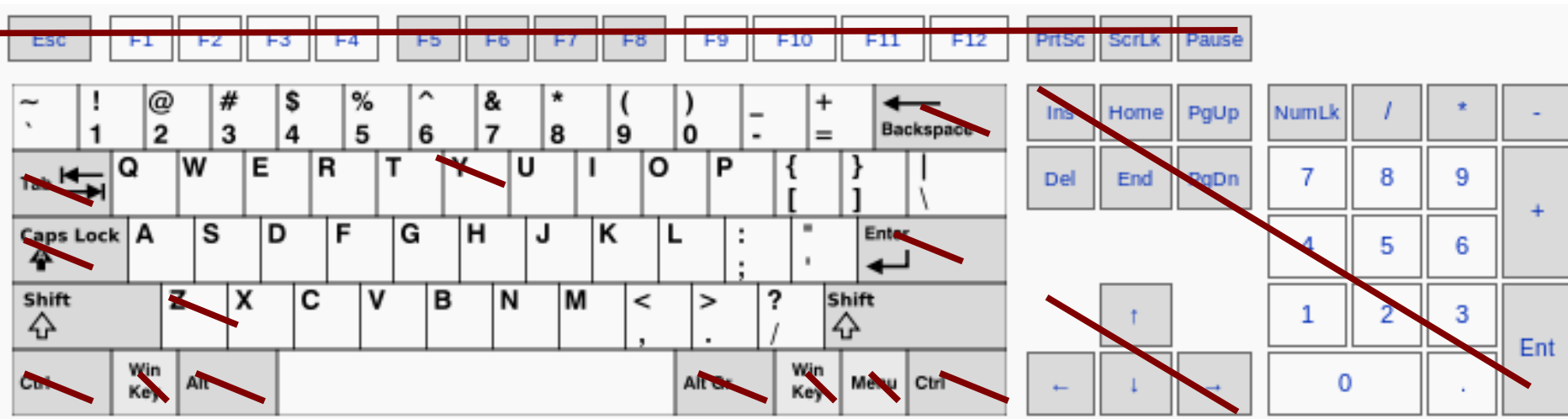
Přihláška do skupiny 'students 2022/2023'

Před vyplněním přihlášky bude ověřena vaše identita a status studenta. **K autentizaci zvolte Masarykova univerzita, Vaše identita bude poté ověřena vůči Informačnímu systému MU.** Samotná přihláška má DVĚ části. První část je formální registrace do virtuální organizace NCBR@MUNI. Druhá část pak registrace do skupiny 'students'.

K vytvoření účtu na klastru WOLF dojde zhruba do dvou hodin od schválení přihlášky správcem.

Volba hesla

- Heslo by mělo být dostatečně silné. Mělo by obsahovat kombinaci písmen (malých a velkých), číslic a speciálních znaků.
- Při zadávání hesla nepoužíváme numerickou část klávesnice, speciální klávesy a přemykače kromě klávesy Shift. Vyvarujete se tak problémům se zadáváním hesla na jiných počítačích.



Výchozí klávesnice na klastru WOLF je anglická (EN).

Změna hesla / Zapomenuté heslo

Standardním příkazem pro změnu hesla v prostředí linuxu je příkaz **passwd** (man passwd). Na klastru WOLF jej však není možné použít z důvodu využívání externího správce uživatelských účtů Perun (<https://perun.cesnet.cz>).

Pro změnu hesla (či reset hesla, pokud jste jej zapoměli) tak musíte použít správce e-INFRA profilu. Bližší informace naleznete zde:

<https://einfra.ncbr.muni.cz> -> e-INFRA profil

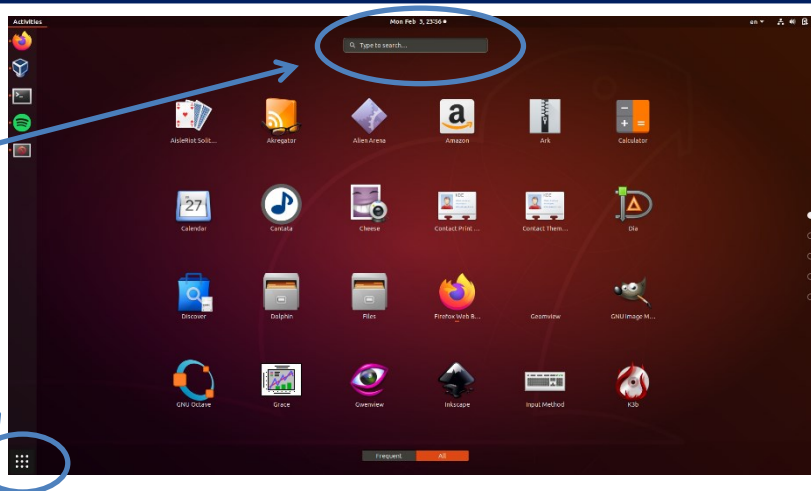
GNOME Desktop

grafické rozhraní

GNOME - Standardní aplikace

Vyhledávání

Hlavní menu



Firefox

firefox

webový prohlížeč

Chrome

google-chrome

webový prohlížeč

LibreOffice

libreoffice

textový editor (Writer), tabulkový kalkulátor (Calc), prezentace (Impress)

Gimp

gimp

editor rastrové grafiky

Inkscape

inkscape

editor vektorové grafiky

Okular

okular

prohlížeč PDF dokumentů

Evince

evince

prohlížeč PDF dokumentů

↑
jméno příkazu, který spouští aplikaci v příkazové řádce

Spuštění terminálu

The image shows two screenshots of the Ubuntu desktop environment. The top screenshot shows a terminal window titled 'Terminal' with the prompt 'kulhanekek@pes: ~' and a cursor. A yellow circle highlights the system tray in the top right corner, containing icons for network, volume, and power. A yellow arrow points from the text 'vyhledat aplikaci, např. "terminal"' to the search bar in the bottom screenshot. The bottom screenshot shows the 'Activities' overview with a search bar at the top and a grid of application icons. A green circle highlights the 'Activities' button (a 3x3 grid of dots) in the bottom left corner, with a green arrow pointing to the text 'Standardní aplikace'. A green arrow also points from the text 'Dock (běžící aplikace, často používané aplikace)' to the dock area on the left side of the desktop.

nastavení, odhlášení

vyhledat aplikaci, např. "terminal"

Dock
(běžící aplikace, často používané aplikace)

Standardní aplikace

Terminály

Příkazová řádka je přístupná přímo z textových terminálů. V grafickém prostředí X11 je nutné spustit vhodnou aplikaci emulující textový terminál:

- **gnome-terminal (Terminal)**
- **konsole (Konsole)**
- **xterm (XTerm)**

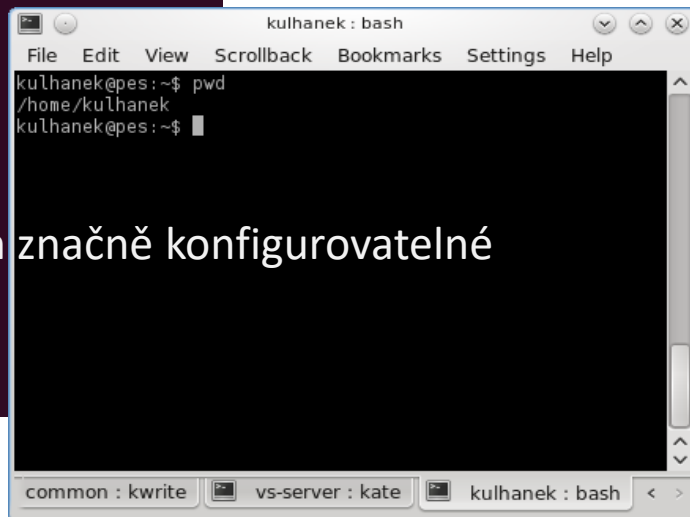
Výchozím adresářem je: **/home/username**

gnome-terminal

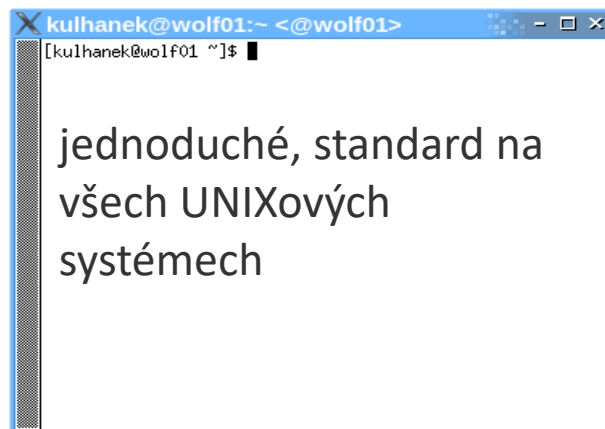


jednoduché, přitom značně konfigurovatelné

konsole



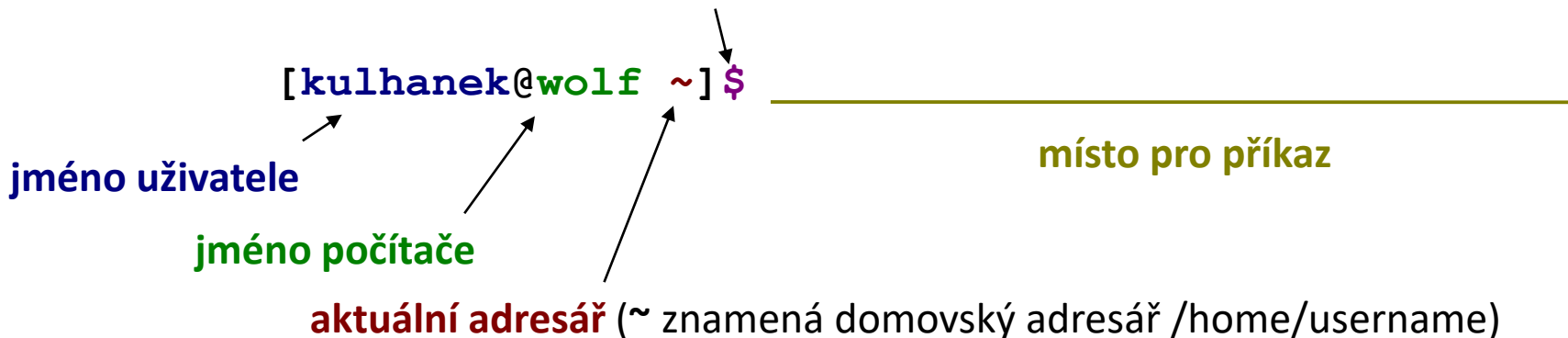
xterm



jednoduché, standard na všech UNIXových systémech

Příkazová řádka

Prompt - typ uživatele / výzvy (\$ běžný uživatel, # super uživatel, další možné %, >)



Příkaz se vykoná zmáčknutím klávesy **Enter**.

Historie: pomocí kurzorových šipek nahoru a dolů lze procházet seznamem již zadaných příkazů. Příkaz z historie lze znovu použít nebo upravit a upravený použít. Historie je přístupná i příkazem **history**.

Automatické doplňování: zmáčknutím klávesy Tab (tabulátor) se interpret příkazové řádky snaží dokončit rozepsané slovo. Doplňují se jména příkazů, cesty a jména souborů (pokud jeden stisk nic nevyvolá, existuje více možností doplnění, opakovaný stisk je zobrazí).

Kopírování textu: Ne pomocí Ctrl+C! Pro kopírování textu z terminálu stačí text označit, pro následné vložení stiskněte kolečko (prostřední tlačítko) myši.

Přizpůsobení rychlého přístupu

The image illustrates the process of customizing the dock in Ubuntu. It is divided into three main sections:

- Left Panel:** Shows the desktop environment with the dock on the left. A context menu is open over the terminal icon, with the option "Add to Favorites" circled in blue.
- Middle Panel:** Shows a LibreOffice Writer window. A context menu is open over the Amazon icon in the dock, with the option "Remove from Favorites" circled in blue.
- Right Panel:** Shows the system tray area. A yellow circle highlights the system tray icons, with a blue arrow pointing from the "Remove from Favorites" option in the middle panel to this area. The text "nastavení, odhlášení" (settings, logout) is written next to it.
- Bottom Panel:** Shows the "Settings" application window with the "Dock" section selected. The "Auto-hide the Dock" toggle is turned ON. The "Icon size" is set to 48, and the "Position on screen" is set to Left.

Vědecko-technické aplikace

Vědeckotechnické aplikace, které jsou instalovány v několika verzích (verze aplikace, typ kompilace, paralelní verze), jsou dostupné ve formě **modulů**. Před použitím aplikace je nutné příslušný modul aktivovat.

Přehled dostupných aplikací:

`$ module`

zadává se do příkazové řádky, text se píše bez znaku \$

Přehled dostupných verzí modulu:

`$ module versions pymol`

číslo verze se od jména modulu odděluje dvojtečkou

Dokumentace k modulu:

`$ module help pymol`

Aktivace modulu:

`$ module add pymol`

`$ module add pymol:2.2.0.0`

Spuštění aplikace z modulu pymol

`$ pymol`

aktivuje výchozí verzi modulu

jméno modulu a aplikace nemusí být stejné

Cvičení 1

1. Spustíte program **Gimp** pomocí menu prostředí GNOME. V programu nakreslete domeček jedním tahem. Vzniklé trojúhelníky vyplňte různými barvami.
2. Otevřete terminál (příkazovou řádku).
3. Co se stane pokud napíšete do terminálu **Gimp** a zmáčknete klávesu Enter?
4. Co se stane pokud napíšete do terminálu **gimp** a zmáčknete klávesu Enter?
5. Zobrazte všechny dostupné vědecko-technické softwarové moduly.
6. K čemu slouží modul **pymol**?
7. Zkuste spustit program **pymol** bez aktivace modulu. Co se stane?
8. Aktivujete module **pymol** a spustíte program **pymol**.
9. V programu otevřete PDB strukturu 2O8B (File > Get PDB).

Vzdálený přístup

- Vypínání/zapínání klastru
- Vzdálená plocha ve webovém prohlížeči
 - Ovládání - Odpojit vs Ukončit
- Jiný způsob vzdáleného přístupu

Vypínání/zapínání klastru

Pracovní stanice klastru WOLF se automaticky vypínají mimo dobu výuky. Možnost vypnutí se testuje každých 15 minut. **Vypínají se neobsazené stanice** a to nejdříve 45 minut od posledního zapnutí.

V případě potřeby je možné **pracovní stanici zapnout vzdáleně**. Slouží k tomu webová aplikace:

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

> Interní část > Vzdálený přístup

k přihlášení do interní části použijte přihlašovací údaje pro klastr WOLF

Výchozí stránka česky | English

Klastr WOLF - Interní část

Obsazení učebny Všechna sezení **Vzdálený přístup** Odhlásit

Neobsazene pracovní stanice klastru WOLF se automaticky vypínají v době mimo výuky. Abychom zachovali vzdálený přístup ke klastru, mohou si uživatelé stanice v případě potřeby zapínat vzdáleně. Tato služba zobrazuje aktuální stav klastru, umožňuje zapnout pracovní stanici, spustit na ní vzdálenou plochu a tu zobrazit ve webovém prohlížeči.

Počítač **wolf01** je určen pro vyučujícího a studenti by jej neměli používat.

wolf23 Zapnout	wolf22 Zapnout
wolf21 Zapnout	wolf20 Zapnout
wolf19 Zapnout	wolf18 Zapnout

Výchozí stránka česky | English

Klastr WOLF - Interní část

Obsazení učebny Všechna sezení **Vzdálený přístup** Odhlásit

Neobsazene pracovní stanice klastru WOLF se automaticky vypínají v době mimo výuky. Abychom zachovali vzdálený přístup ke klastru, mohou si uživatelé stanice v případě potřeby zapínat vzdáleně. Tato služba zobrazuje aktuální stav klastru, umožňuje zapnout pracovní stanici, spustit na ní vzdálenou plochu a tu zobrazit ve webovém prohlížeči.

Počítač **wolf01** je určen pro vyučujícího a studenti by jej neměli používat.

wolf23 Počítač se zapíná.	wolf22 Zapnout
wolf21 Zapnout	wolf20 Zapnout
wolf19 Zapnout	wolf18 Zapnout

Výchozí stránka česky | English

Klastr WOLF - Interní část

Obsazení učebny Všechna sezení **Vzdálený přístup** Odhlásit

Neobsazene pracovní stanice klastru WOLF se automaticky vypínají v době mimo výuky. Abychom zachovali vzdálený přístup ke klastru, mohou si uživatelé stanice v případě potřeby zapínat vzdáleně. Tato služba zobrazuje aktuální stav klastru, umožňuje zapnout pracovní stanici, spustit na ní vzdálenou plochu a tu zobrazit ve webovém prohlížeči.

Počítač **wolf01** je určen pro vyučujícího a studenti by jej neměli používat.

wolf23 Spustit vzdálenou plochu	wolf22 Zapnout
wolf21 Zapnout	wolf20 Zapnout
wolf19 Zapnout	wolf18 Zapnout

zapínání stanice trvá několik minut
(typicky 2-4 minuty)

Stanice zapínejte jen tehdy, když není volná žádná jiná již zapnutá.

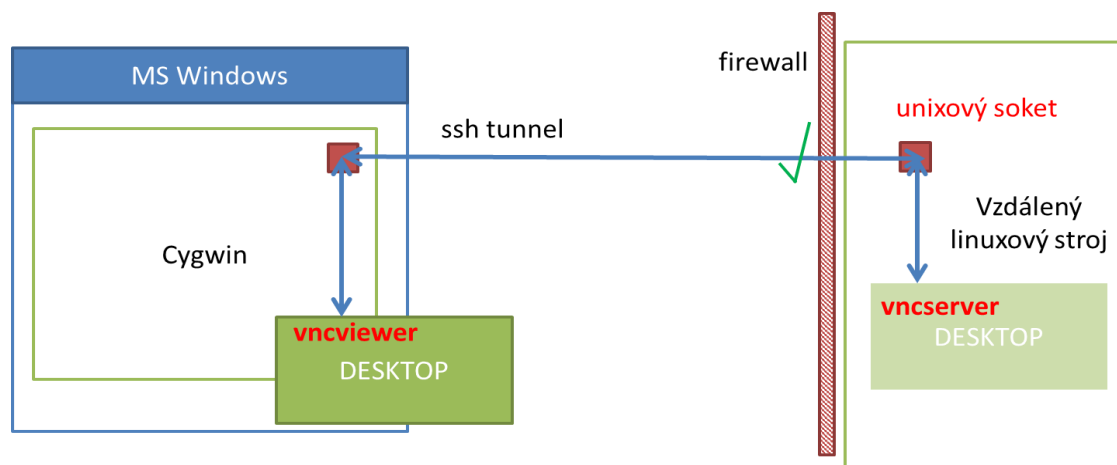
Vzdálený přístup na klastr WOLF

Na klastr WOLF je možné přistupovat vzdáleně:

- v příkazovém režimu (ssh, scp, Putty)
- v grafickém režimu
 - **vzdálená plocha z webového prohlížeče - doporučený přístup**
 - 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**.



Vzdálená plocha v prohlížeči

Nejsnadnějším vzdáleným přístupem k pracovním stanicím je použití vzdálené plochy ve webovém prohlížeči (RDSK). Vzdálenou plochu je možné spustit a otevřít z webová aplikace:

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

> Interní část > Vzdálený přístup

k přihlášení do interní části použijte přihlašovací údaje pro klastr WOLF

The image shows three sequential screenshots of a web browser displaying the 'Klastr WOLF - Interní část' interface. The first screenshot shows a grid of nodes (wolf19 to wolf23) with buttons for 'Zapnout' (Stop) and 'Spustit vzdálenou plochu' (Start remote desktop). The second screenshot shows the 'Spustit se RDSK.' (Start RDSK) button for wolf23. The third screenshot shows the 'Otevřít vzdálenou plochu' (Open remote desktop) button for wolf23. An orange arrow points from the 'Otevřít vzdálenou plochu' button to a terminal window in the bottom right, which displays the output of the 'site info' command, showing details about the host (wolf23.ncbr.muni.cz), including CPU, memory, and network information.

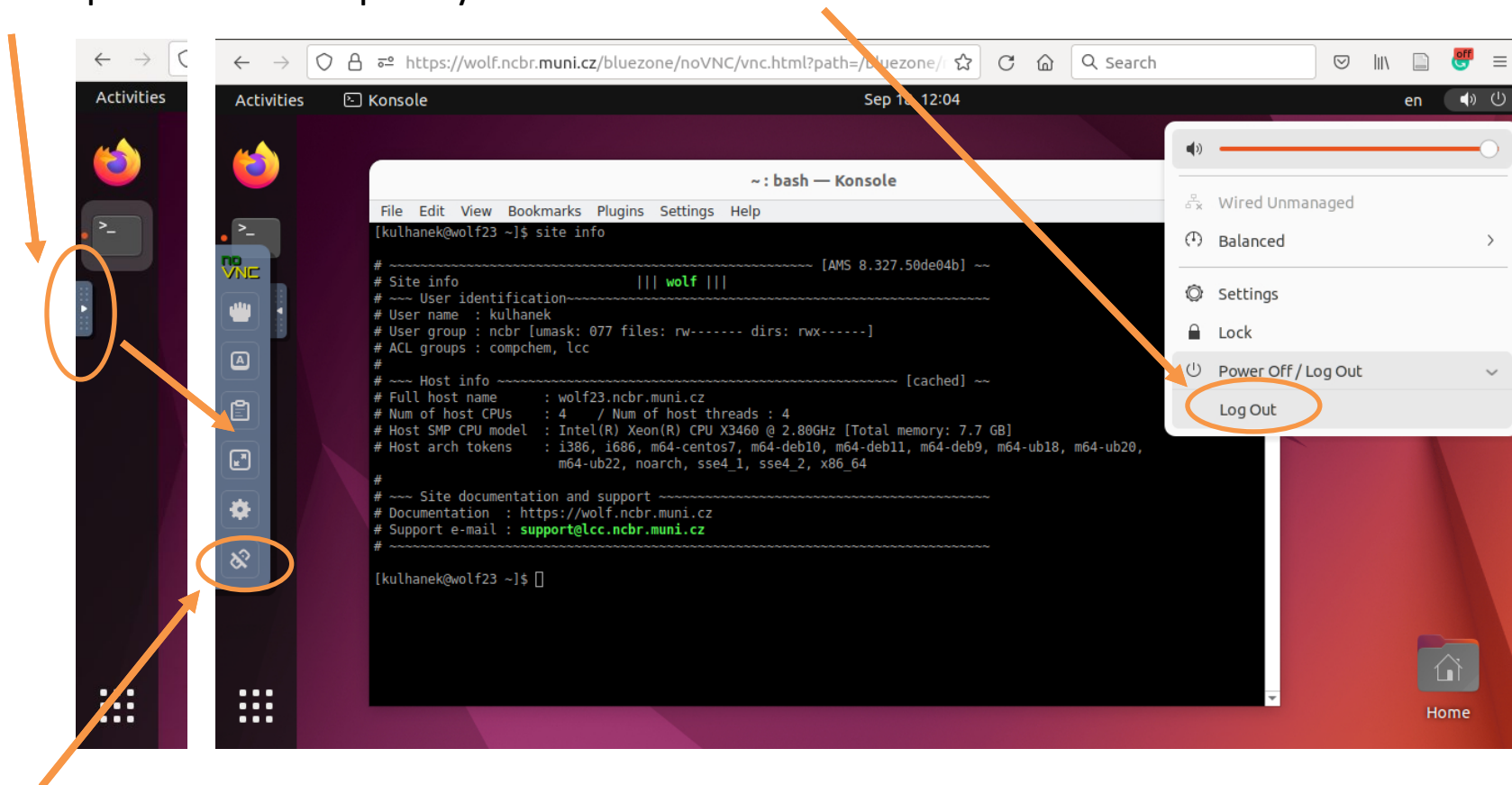
Počítač **wolf01** je určen pro vyučujícího a studenti by jej neměli používat.

spuštění vzdálené plochy by nemělo trvat déle než 1 minutu

RDSK - Odpojit vs Ukončit

Ukončit vzdálenou plochu (Log Out) - pracovní stanice se uvolní pro jiného uživatele

řídící panel vzdálené plochy



Odpojit vzdálenou plochu (Disconnect) - Po odpojení vzdálená plocha stále běží a blokuje pracovní stanici pro jiné uživatele. Vzdálenou plochu je možné znovu otevřít a to i z jiného prohlížeče či počítače.

Jiný způsob vzdáleného přístupu

Vzdálený přístup je možný z operačních systémů MS Windows, Linux, a MacOS. Postupy jsou uvedeny v samostatných prezentacích.

- Vzdálený terminálový přístup:
 - ssh, Putty
- Kopírování souborů
 - scp, WinSCP
- Vzdálená plocha
 - TigerVNC
- Export X11 displeje

Ukázka vzdálené plochy - TigerVNC

Spuštění VNC serveru, terminál je možné ukončit

```
[kulhanek@wolf04 ~]$ vncserver --fullgui
>>> TigerVNC server started successfully!
Logs: /home/kulhanek/.vnc/wolf04.ncbr.muni.cz:1.startlog /home/kulhanek/.vnc/wolf04:1.log
VNCID: kulhanek@wolf04.ncbr.muni.cz:1
[kulhanek@wolf04 ~]$
```

Spuštění VNC prohlížeče

```
Valid starting Expires Service principal
25.10.2020 21:13:7:00 26.10.2020 21:13:6:56 krbtgt/METARMETA
25.10.2020 21:13:8:40 26.10.2020 21:13:6:56 krbtgt/ICS.MUNI.CZ@META
25.10.2020 21:13:8:41 26.10.2020 21:13:6:56 host/wolf04.ncbr.muni.cz@ICS.MUNI.CZ

Petr kulhanek@DESKTOP-272HMB1 ~
$ vncviewer kulhanek@wolf04.ncbr.muni.cz:1

# VNCID: kulhanek@wolf04.ncbr.muni.cz:1
# > User: kulhanek
# > Host: wolf04.ncbr.muni.cz
# > Display: 1

# Testing connection to: kulhanek@wolf04.ncbr.muni.cz ... success
# Establishing a ssh tunnel to the vnc server machine ...
```

Vzdálená plocha Ubuntu GNOME desktop

gimp

MS Windows

Vzdálená plocha: VNC na uzlu wol04

Cvičení 2

1. Otevřete vzdálenou plochu z jiné pracovní stanice klastru WOLF (podle kapacitních možností - obsazenosti učebny).
2. Vzdálený přístup si vyzkoušejte z jiného počítače/tabletu (domácí úkol).