C2110
Operační systém UNIX a základy programování

1. lekce

Petr Kulhánek

kulhanek@chemi.muni.cz

Národní centrum pro výzkum biomolekul, Přírodovědecká fakulta
Masarykova univerzita, Kotlářská 2, CZ-61137 Brno

Obsah

- **Přihlašování**
  místní přihlášení, změna hesla
- **Programové vybavení**
  systémové aplikace, přehled, vědeckotechnické aplikace, vmd

Přihlašování

- Místní přihlášení
- Změna hesla

Místní přihlášení

Místní terminály:

- šest **textových terminálů** (F1 ... F6)
- jeden **grafický terminál** (F7, F8, ...)
- přepínání pomocí kláves **Ctrl+Alt+F1 ... Ctrl+Alt+F7**

Přihlášení:

- nutno zadat **přihlašovací jméno** (login) a **heslo** (password)

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

Operační systém Linux je velmi flexibilní a umožňuje i jiné způsoby míst-ního přihlášení, např. pomocí identifikačních karet či kryptografických klíčů. Více lze nalézt v nápovědě systému PAM (Pluggable Authentication Modules).

$ man 8 pam

Místní přihlášení

Textový terminál (F1-F6):

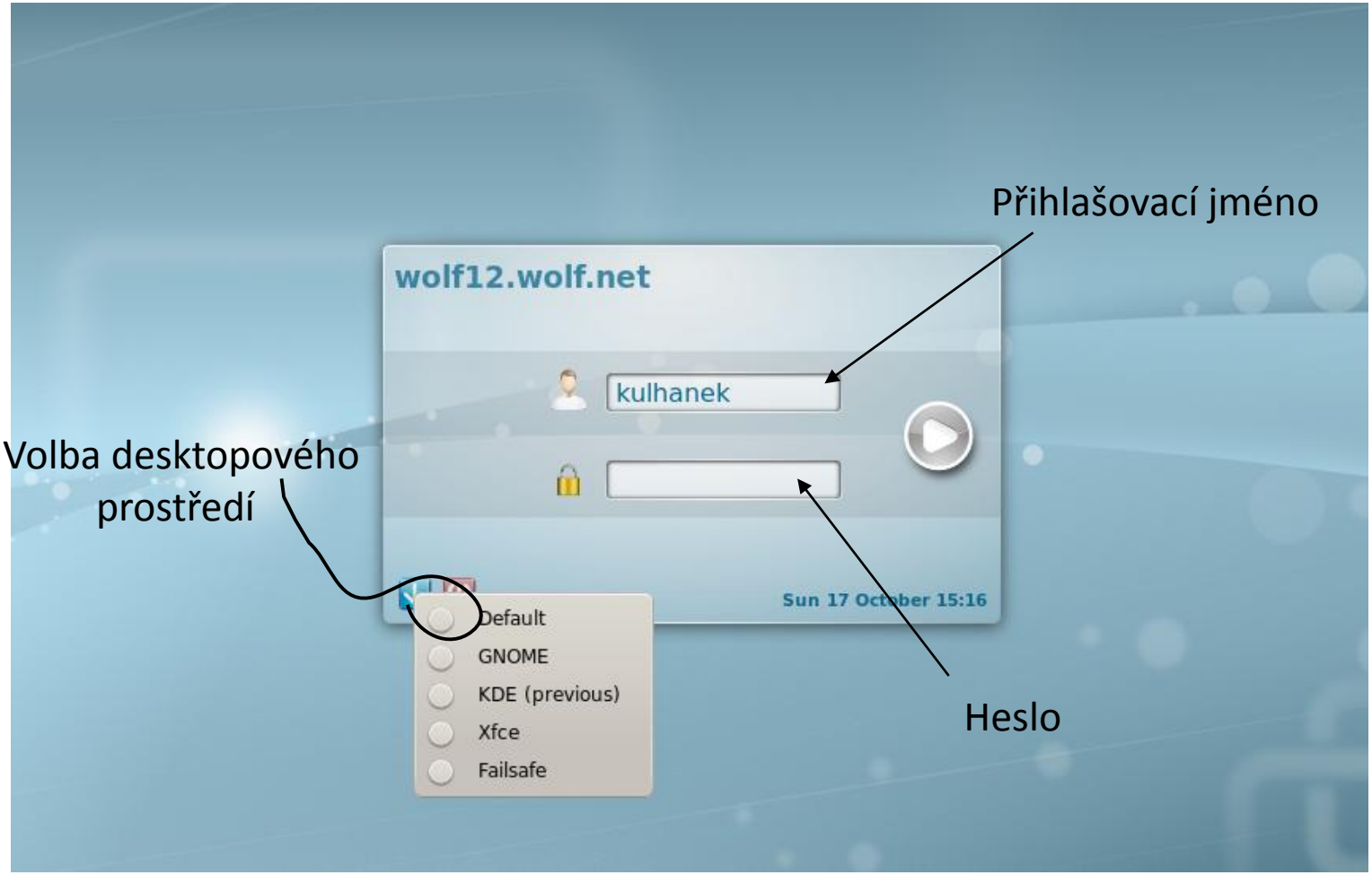
- zpřístupňuje příkazovou řádku (CLI – command line interface)
- výchozím adresářem je **/home/vas_login**
- grafické aplikace (X11) lze spouštět jen s **exportem displeje** na vzdálený grafický terminál
- odhlášení příkazem **exit**

Grafický terminál (F7):

- spouští X11 server a v něm okenního správce (KDE, GNOME, atd.)
- okenního správce (WM – window manager) **lze zvolit před** vlastním přihlášením
- umožňuje přímé spouštění grafických programů (GUI – graphical user interface)
- příkazová řádka je dostupná pomocí speciálních aplikací
  - xterm
  - **konsole**
- odhlášení **pomocí nabídky v menu** okenního správce

Místní přihlášení

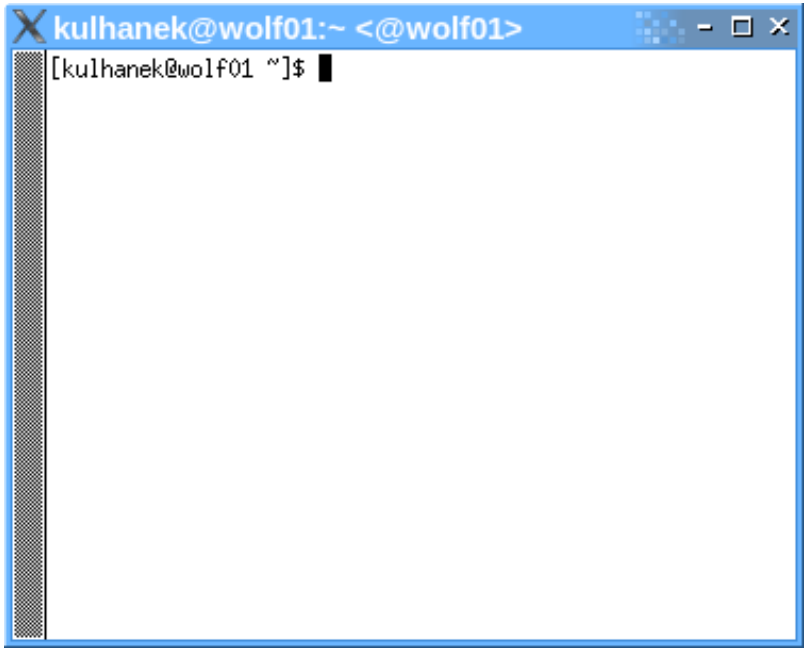
Grafický terminál (F7):



Terminály

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

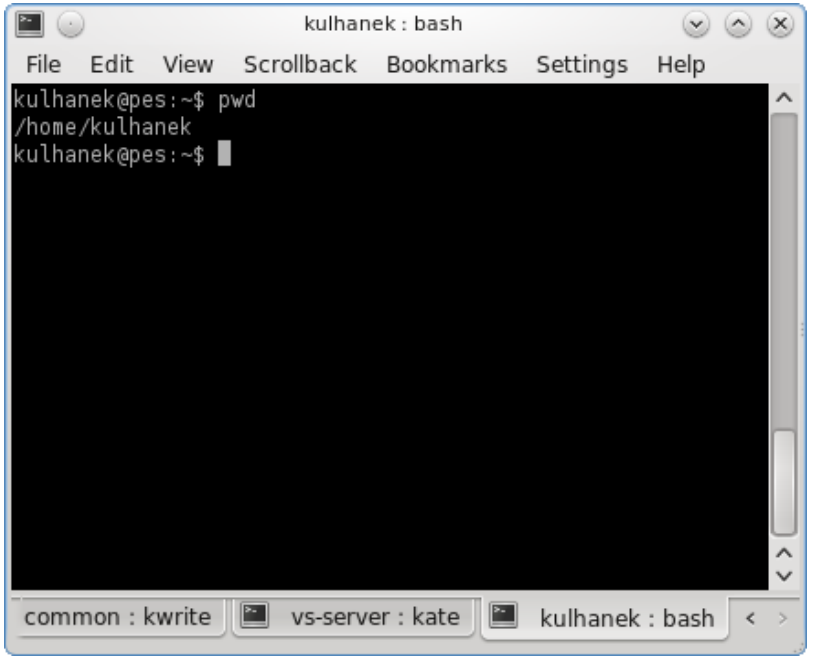
xterm



jednoduché, standard na všech UNIXových systémech

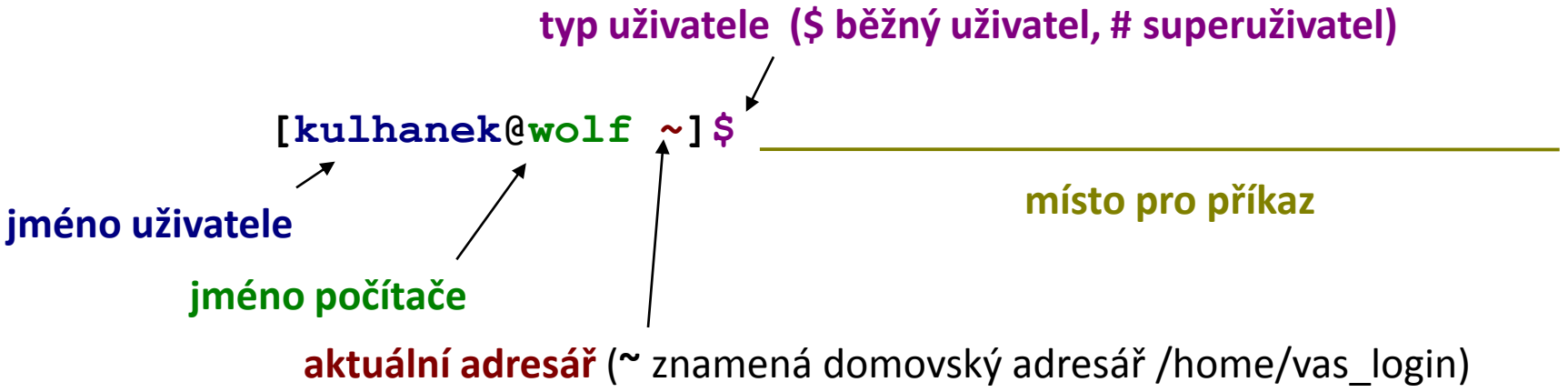
Výchozím adresářem je: **/home/vas_login**

konsole



jednoduché přitom značně konfigurovatelné, dostupné v prostředí KDE

Příkazová řádka



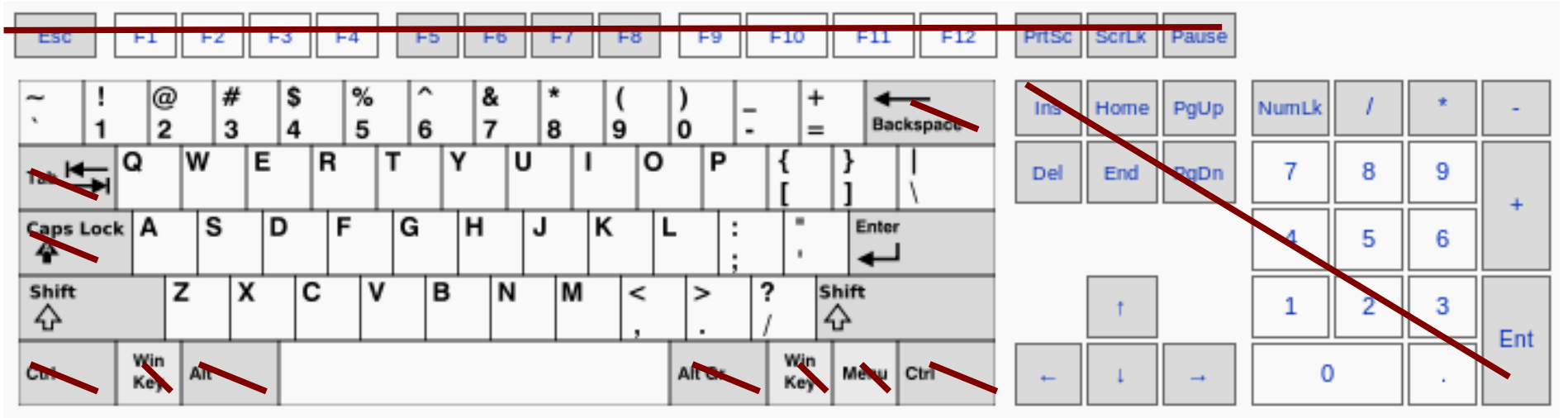
Příkaz se vykoná zmáčknutím klávesy **Enter**.

Historie: pomocí kurzorových šipek nahoru a dolů lze procházet seznamem již zadaných příkazů. Příkaz z historie lze znovu použít nebo upravit a upravený použít.

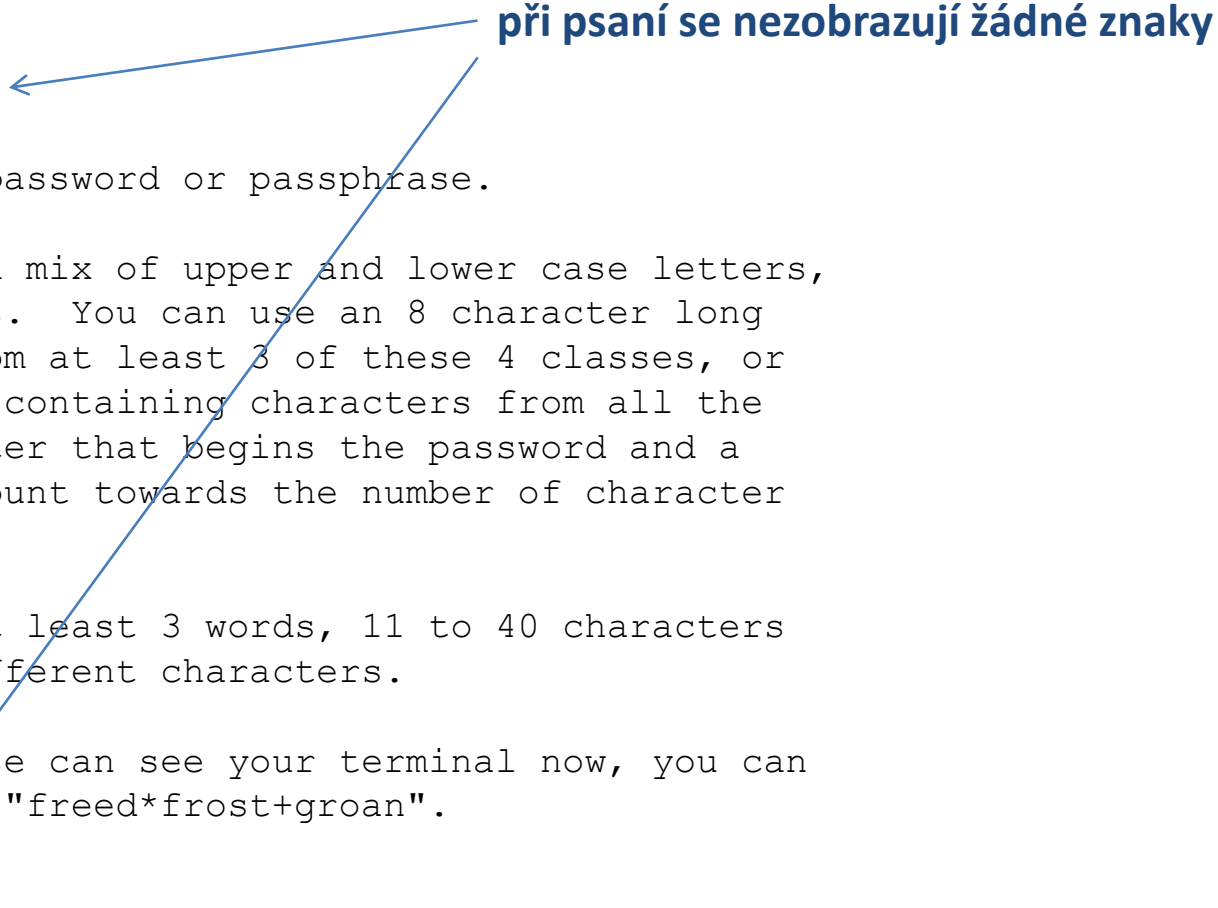
Automatické doplňování: zmáčknutím klávesy Tab (tabulátor) se interpret příkazové řádky snaží dokončit rozepsané slovo. Doplňují se jména příkazů, cesty a jména souborů ...

Změna hesla, příkaz passwd

- Heslo se mění po přihlášení do systému z příkazové řádky pomocí příkazu **passwd**.
- Po jeho spuštění jste dotázaní na **současné platné heslo** a poté na **heslo nové**. Nové heslo se je nutné zadat dvakrát, aby se omezily možné překlepy.
- Změna se projeví na **všech počítačích** klastru WOLF.
- 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.



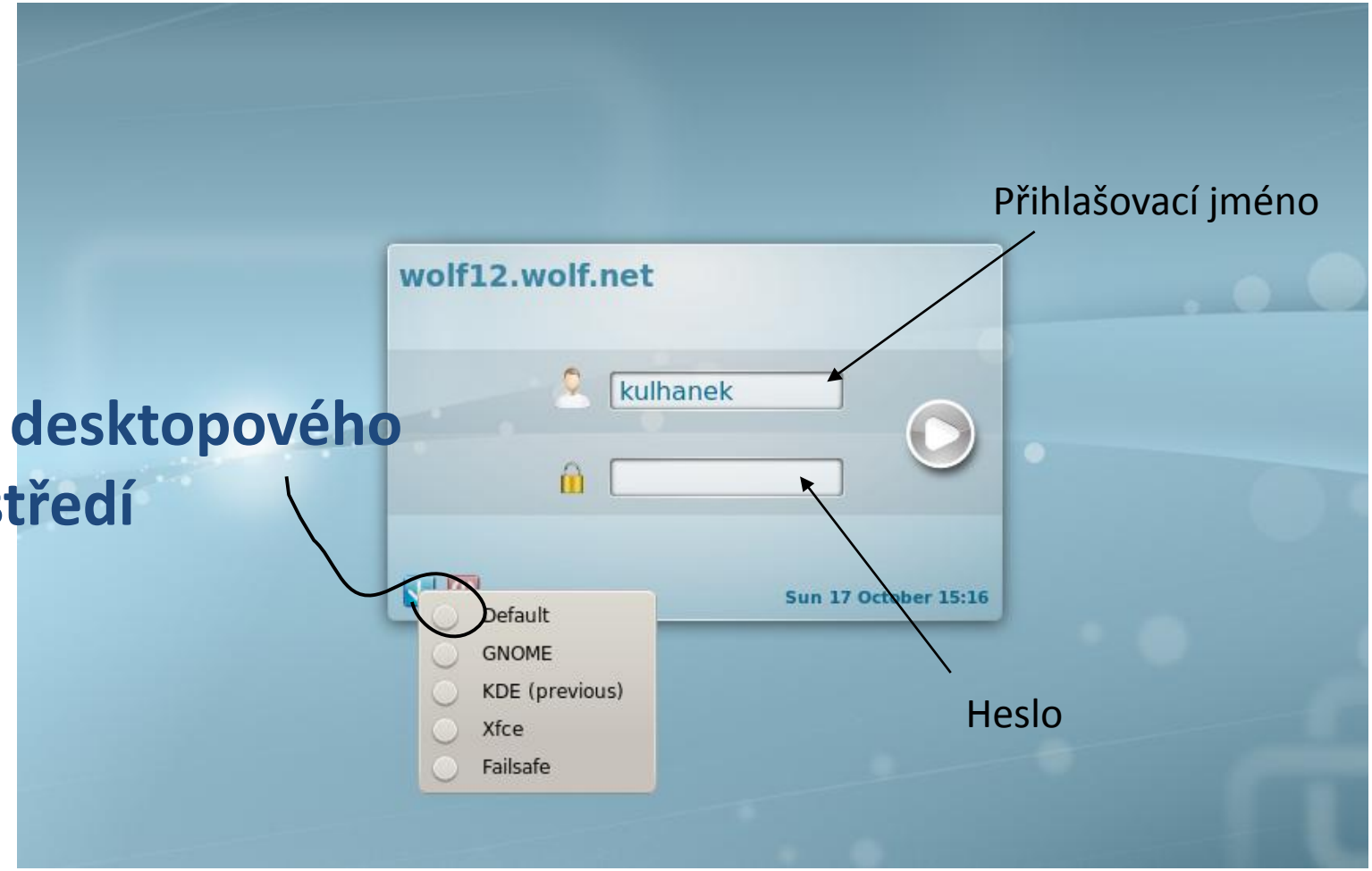
Změna hesla - passwd




```
kulhanek@wolf:~$ passwd
Enter login(LDAP) password:

You can now choose the new password or passphrase.

A valid password should be a mix of upper and lower case letters,
digits, and other characters.  You can use an 8 character long
password with characters from at least 3 of these 4 classes, or
a 7 character long password containing characters from all the
classes.  An upper case letter that begins the password and a
digit that ends it do not count towards the number of character
classes used.

A passphrase should be of at least 3 words, 11 to 40 characters
long, and contain enough different characters.

Alternatively, if no one else can see your terminal now, you can
pick this as your password: "freed*frost+groan".

Enter new password:
Re-type new password:
LDAP password information changed for kulhanek
passwd: password updated successfully
kulhanek@wolf:~$
```

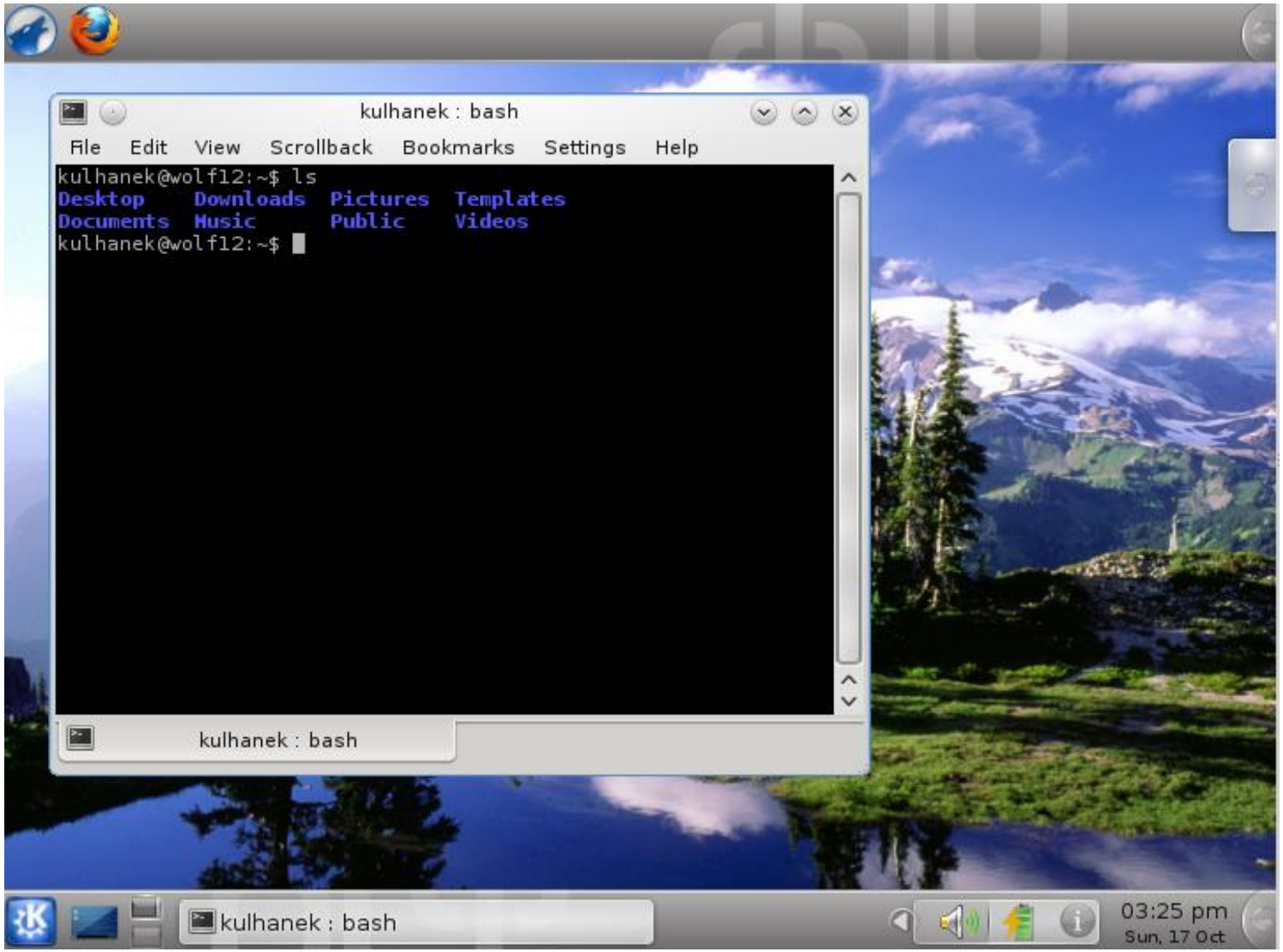
Desktopová prostředí

Grafický terminál (F7):



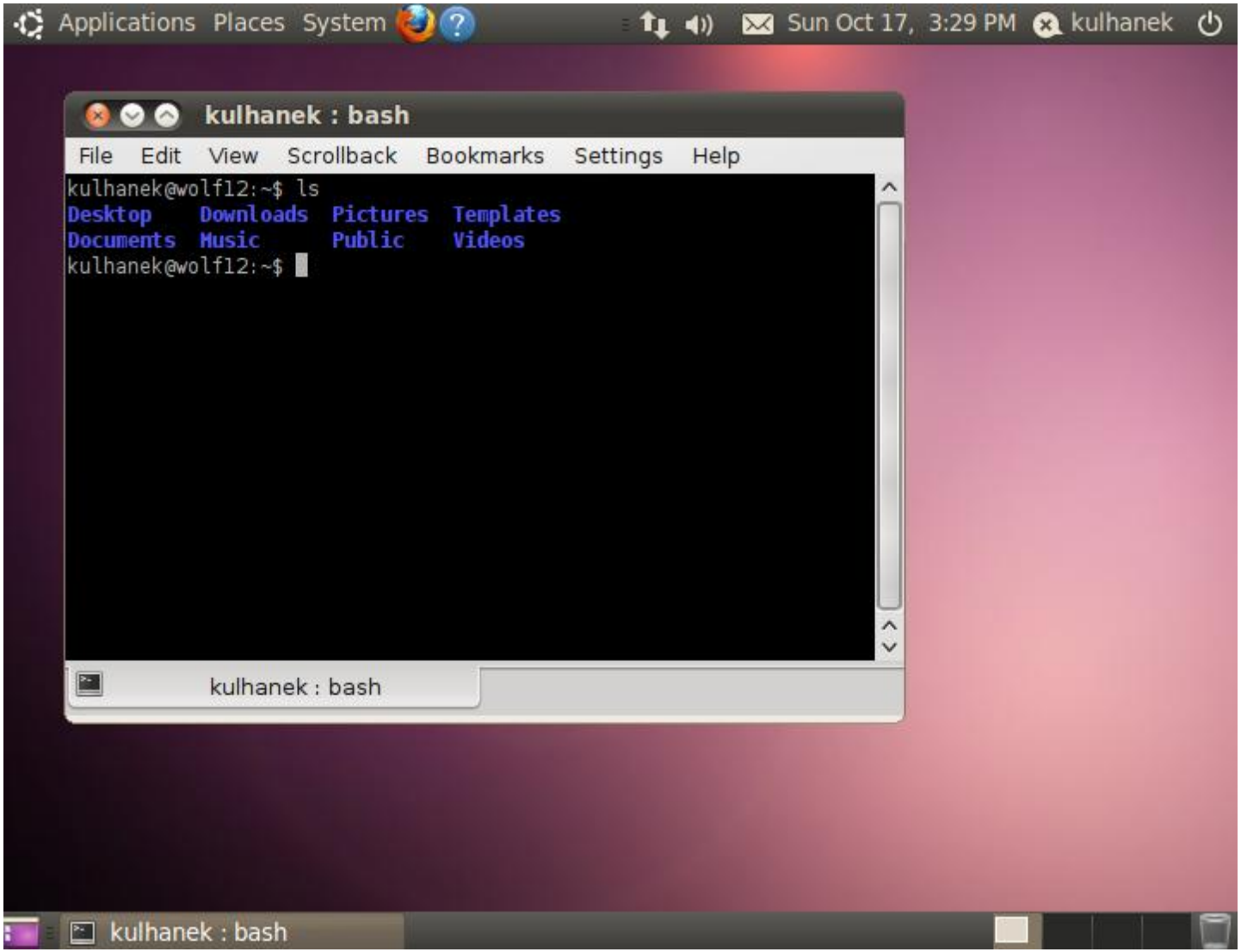
KDE

kde.org


kulhanek : bash
File Edit View Scrollback Bookmarks Settings Help
kulhanek@wolf12:~$ ls
Desktop Downloads Pictures Templates
Documents Music Public Videos
kulhanek@wolf12:~$
kulhanek : bash
kulhanek : bash
03:25 pm
Sun, 17 Oct

GNOME

gnome.org

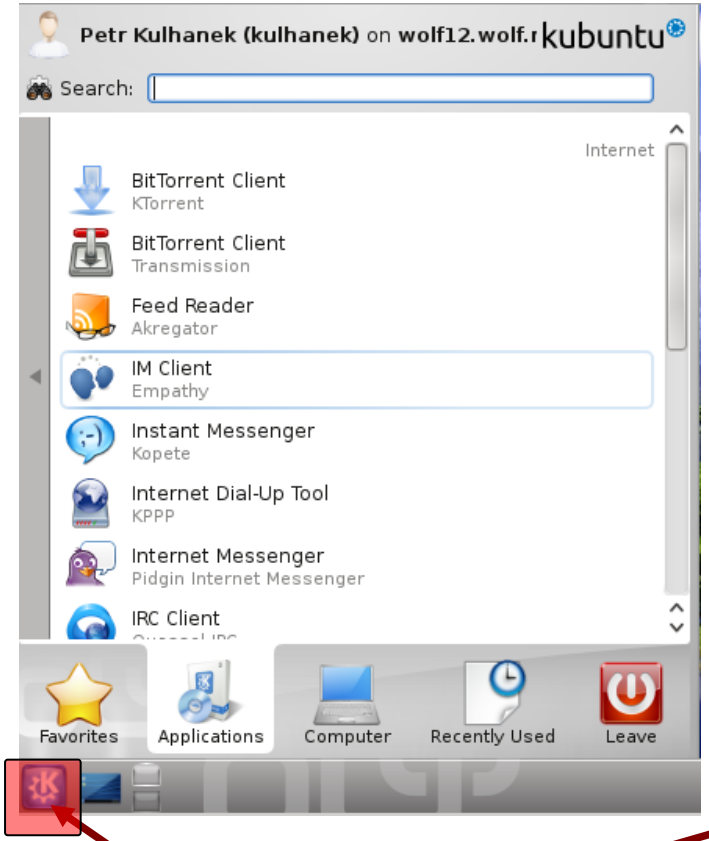


Programové vybavení

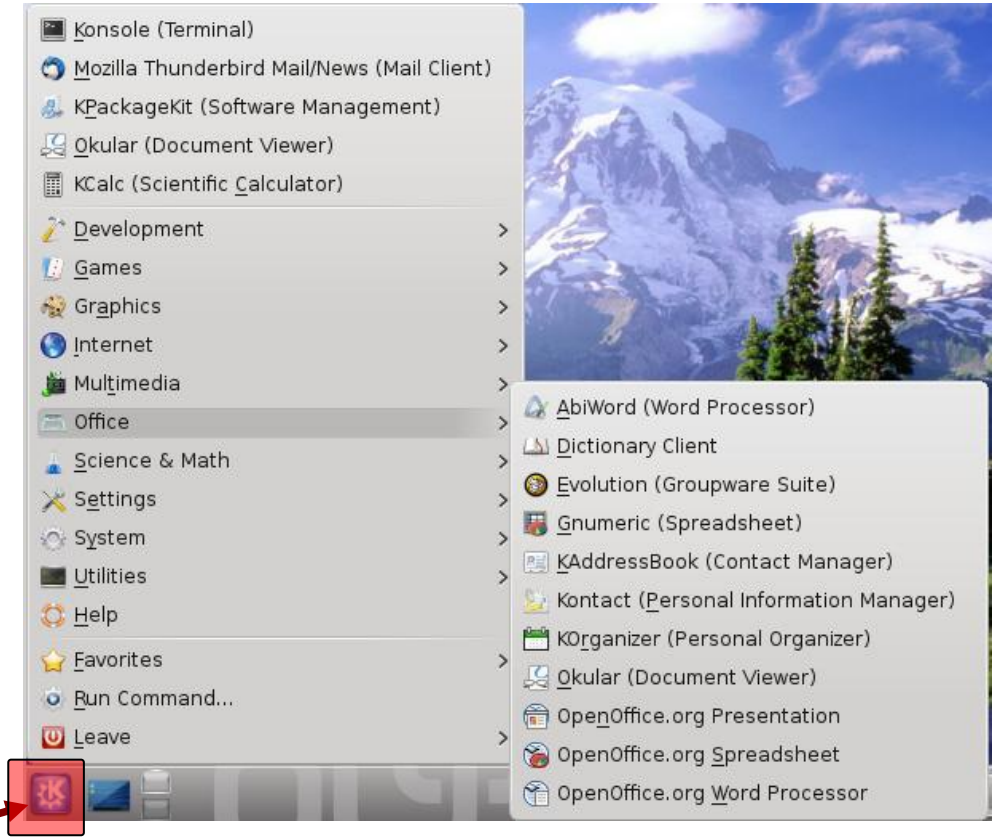
- Standardní aplikace
- Přehled standardních aplikací
- Vědecko-technické aplikace
- Program VMD

Standardní aplikace

KDE menu - “Kickoff” styl



KDE menu - Klasický styl



Aplikace dostupné v menu okenního manažeru.
Aplikace lze spouštět i z příkazové řádky.

Přepínání stylu v kontextové nabídce (pravé tlačítko myši nad ikonou “K”)

Standardní aplikace

Firefox	webový prohlížeč
OpenOffice/LibreOffice	textový editor (Writer) tabulkový kalkulátor (Calc) prezentace (Impress)
Gimp	editor rastrové grafiky
Inkscape	editor vektorové grafiky
Okular	prohlížeč PDF dokumentů

Navazující předmět (jarní semestr):
C2150 Zpracování informací a vizualizace v chemii

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
```

Přehled dostupných verzí aplikace:

```
$ module versions vmd
```

Aktivace aplikace:

```
$ module add vmd
```

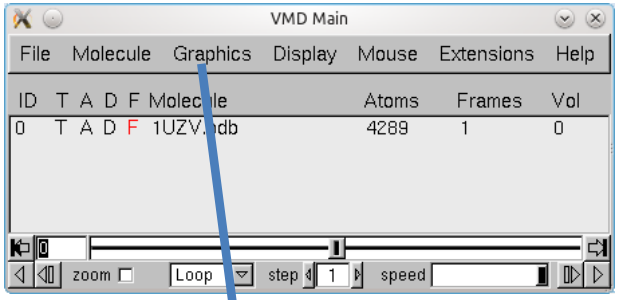
Spuštění aplikace z modulu vmd

```
$ vmd
```

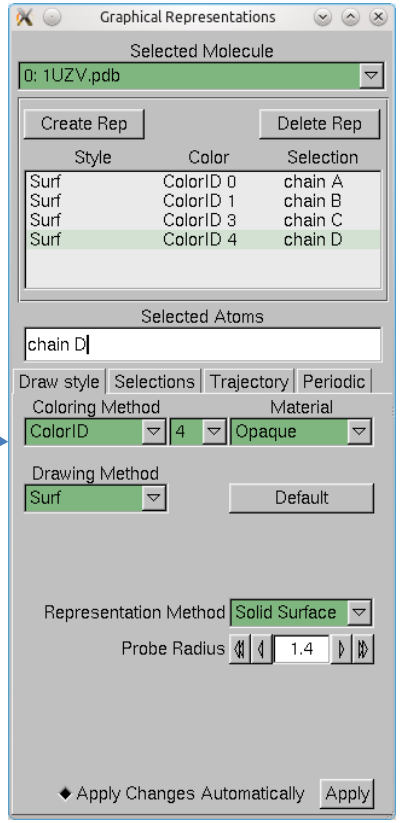
Program VMD

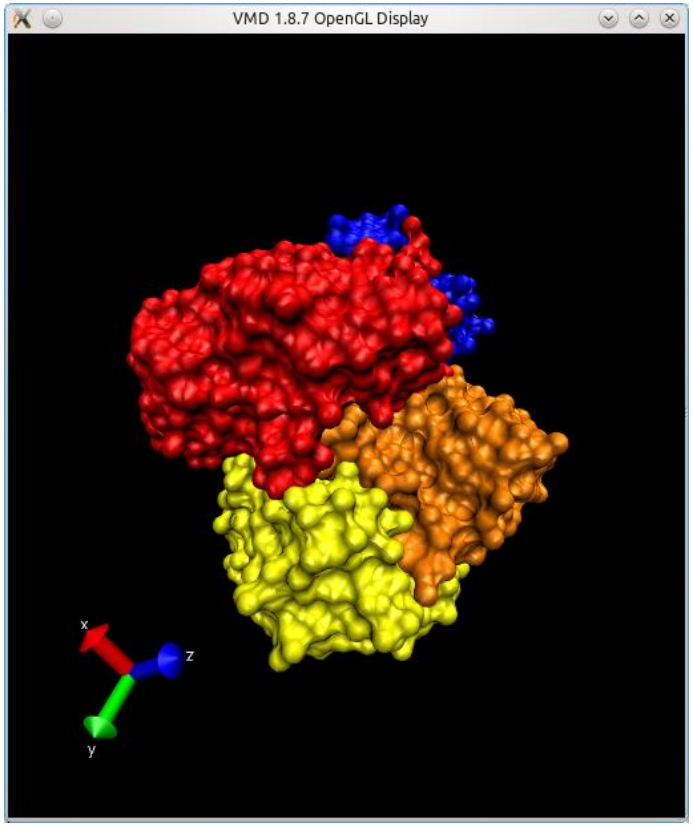
http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/

Program slouží k vizualizaci (bio)molekul a k analýze výsledků molekulárně dynamických simulací. Program je volně dostupný (vyžaduje registraci) a je dostupný i pro operační systém MS Windows.

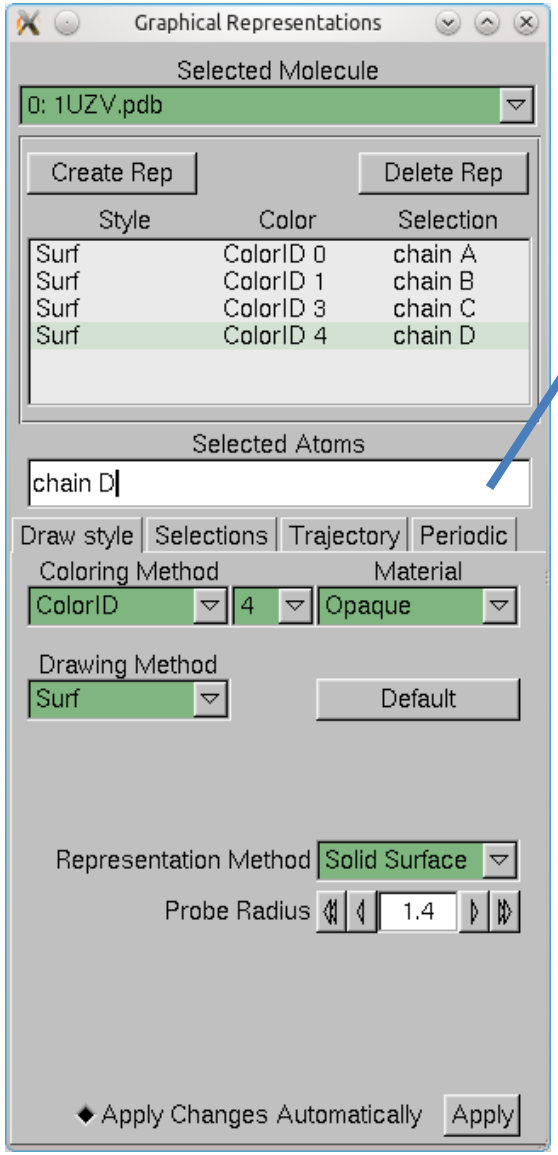


Representation





Program VMD



Selekce (volba) části molekuly:

protein	– zvolí všechny aminokyseliny
water	– zvolí všechny molekuly vody
chain X	– zvolí řetězec X
resname X	– zvolí residuum s názvem X
resid X	– zvolí residuum s číslem X

Příklady:

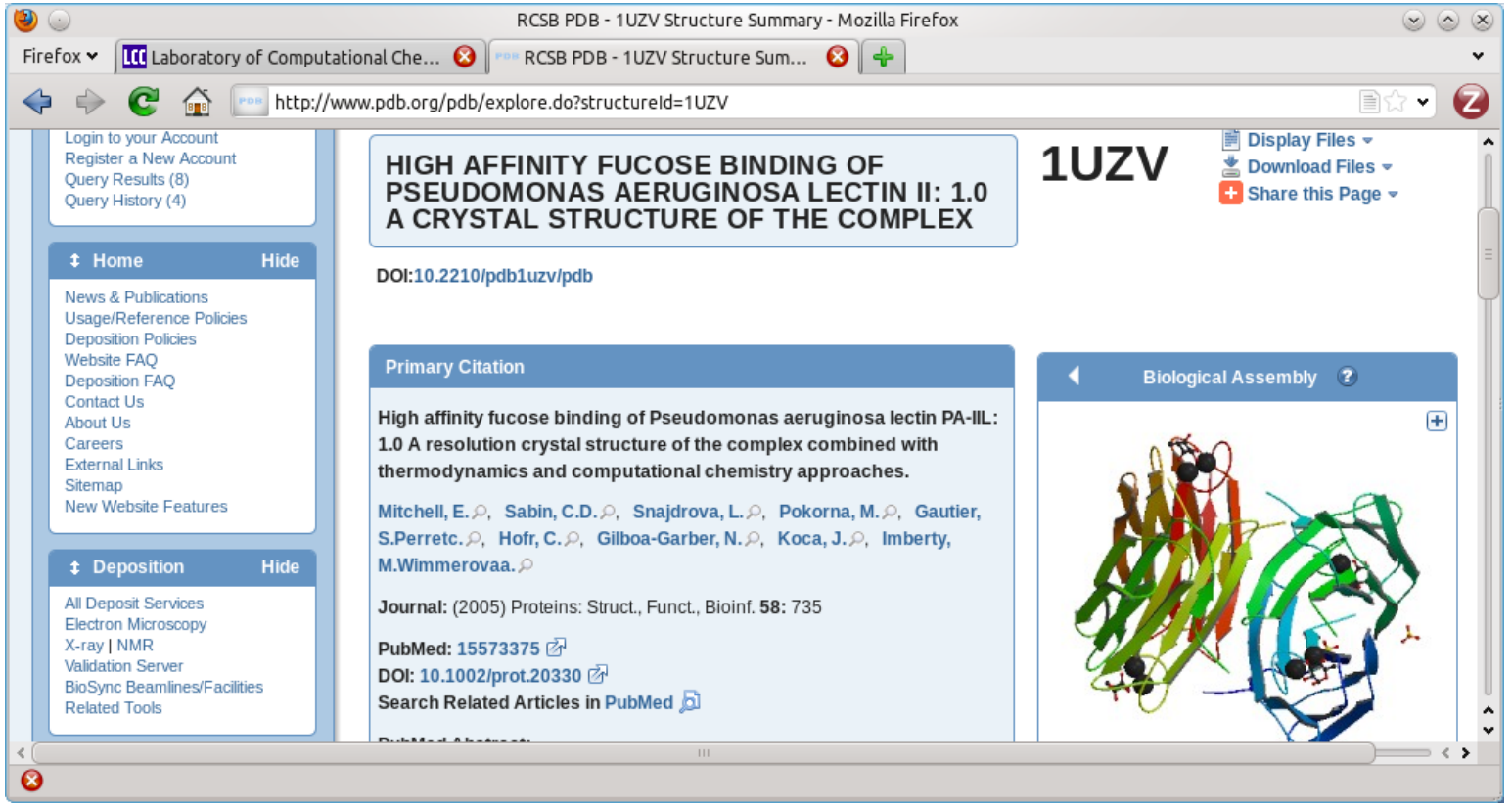
chain A
chain A B C
resname ASP GLU
resid 1
resid 1 to 100

Bližší informace:

C2150 Zpracování informací a vizualizace v chemii

PDB Databáze

www.pdb.org



Obsahuje struktury biomolekul určené metodami rentgenové strukturní analýzy, nukleární magnetické rezonance, teoretické modely.

Cvičení

PDB:

- Najděte protein s PDB kódem 1UZV

VMD:

- Zobrazte strukturu 1UZV
- Zvýrazněte jednotlivé monomerní jednotky komplexu (surf)
- Zobrazte sekundární strukturu komplexu (NewCartoon, Color: Secondary Structure). Který strukturní element ve struktuře převládá?
- Zobrazte navázaný ligand (resname FUC). Kolik ligandů je v komplexu obsaženo?
- Zobrazte vápenaté ionty (resname CA). Kolik iontů je v komplexu obsaženo?