

# C7800

# Počítačová chemie a molekulové modelování I - cvičení

Petr Kulhánek, Jakub Štěpán

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

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

# Obsah

## ➤ **Klastr WOLF**

- Učebna 1.18, struktura, pravidla používání, správci

## ➤ **První přihlášení**

- Desktopová prostředí, standardní aplikace, textové editory, terminály, vědeckotechnické aplikace

## ➤ **Změna hesla**

- Příkaz passwd

## ➤ **Vzdálené přihlašování**

- Příkaz ssh
- Autorizace pomocí klíčů

## ➤ **Linux v kostce**

- Souborový systém, přehled příkazů

# Klaster WOLF

---

- **Učebna 1.18**
- **Struktura**
- **Pravidla používání**
- **Správci**

# Učebna 1.18



- Učebna s 23 PC
- 3D vizualizace
- Uspořádání do výpočetního klastru

**Bezpečnost práce!**

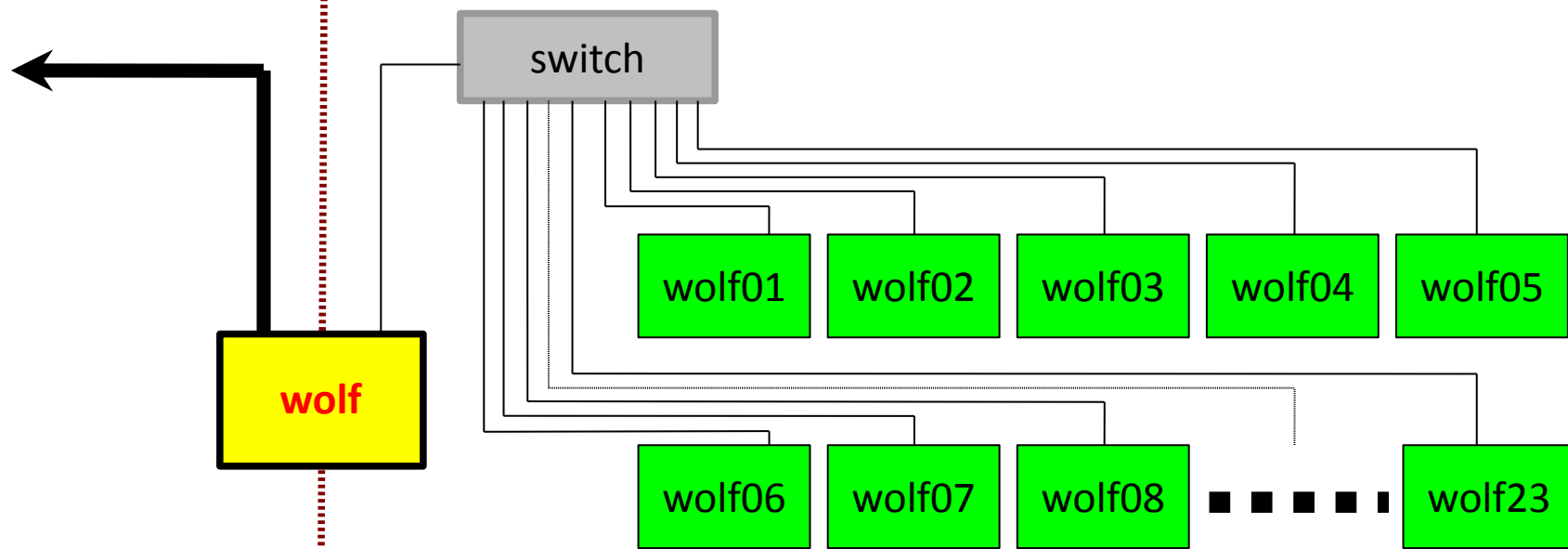
Učebna je volně přístupná studentům, kteří jsou členové LCC skupiny a dále studentům, kterým v daném semestru v učebně probíhá výuka.

# Struktura klastru WOLF

univerzitní síť  
**wolf.ncbr.muni.cz**

místní síť  
**wolf.wolf.inet**

veřejně nedostupná doména:  
**wolf.inet**



server

pracovní stanice (výpočetní uzly)

Operační systém: **Ubuntu 12.04 (Precise) LTS**

<http://www.ubuntu.com/>

# Pravidla používání

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

**Klastr 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/rect/normy/smernicerektora/Smernice\\_MU\\_9-2013.pdf](https://is.muni.cz/auth/do/rect/normy/smernicerektora/Smernice_MU_9-2013.pdf)

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

# Správci klastru – řešení problému

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](mailto:support@lcc.ncbr.muni.cz)**

Ve zprávě uveďte

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

## **Hlavní správce klastru WOLF:**

Jakub Štěpán

Správa účtů, hardware, systému a systémových aplikací

## **Správce aplikací pro vědecko-technické výpočty (moduly):**

Petr Kulháněk

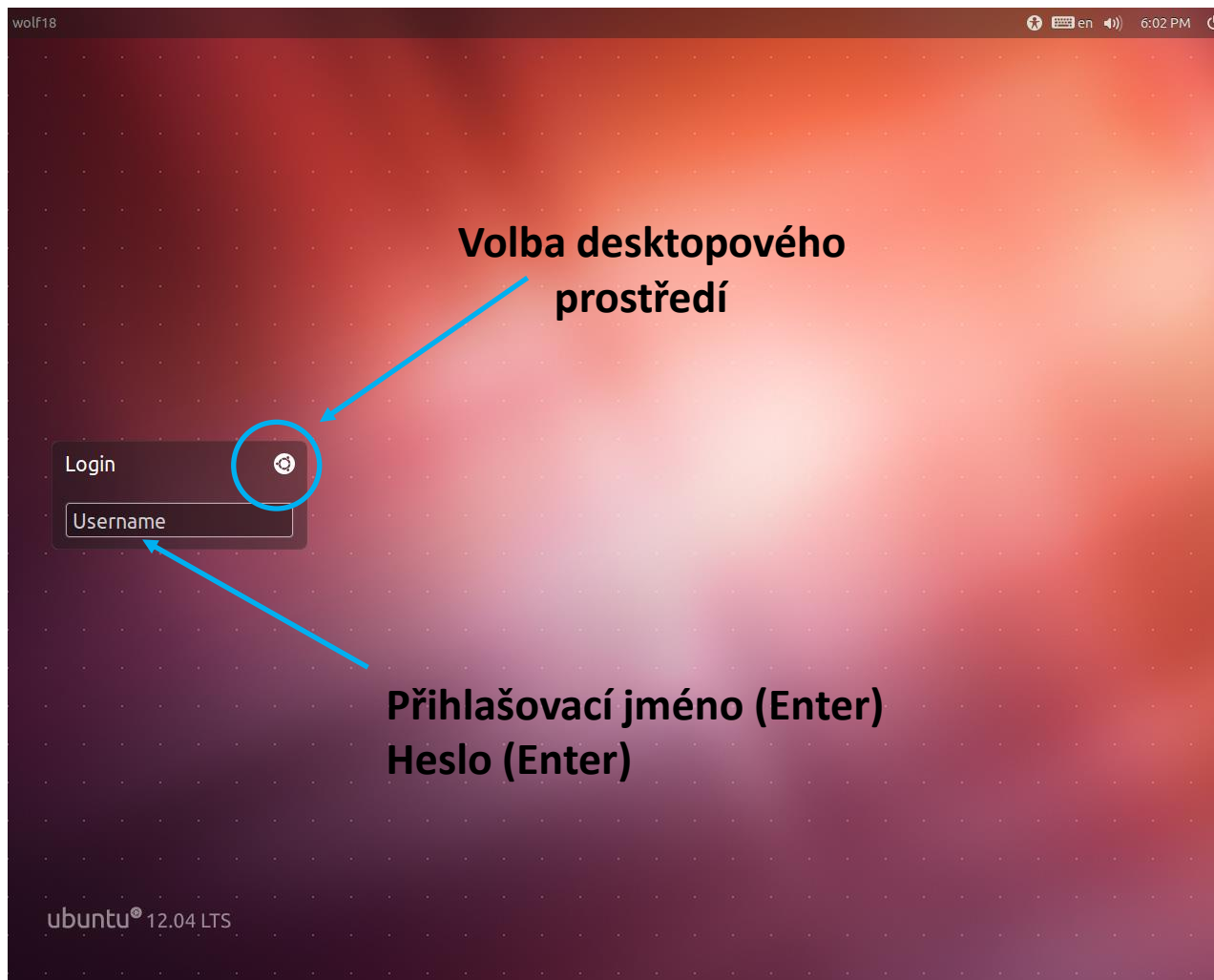
# První přihlášení

---

- **Desktopová prostředí**
- **Standardní aplikace**
- **Textové editory**
- **Terminály**
- **Vědecko-technické aplikace**



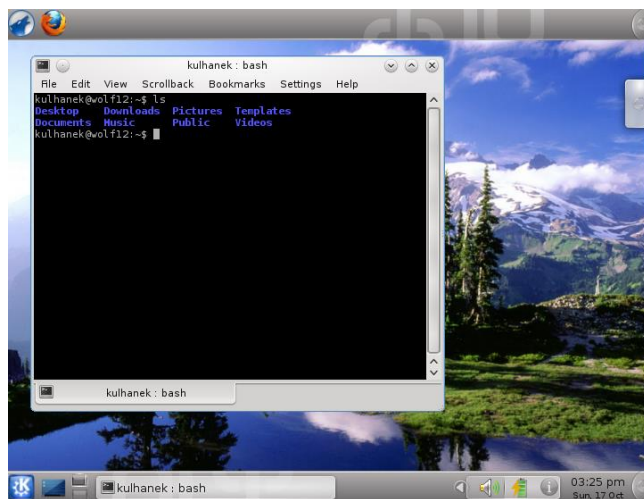
# Přihlášení – LightDM X manager



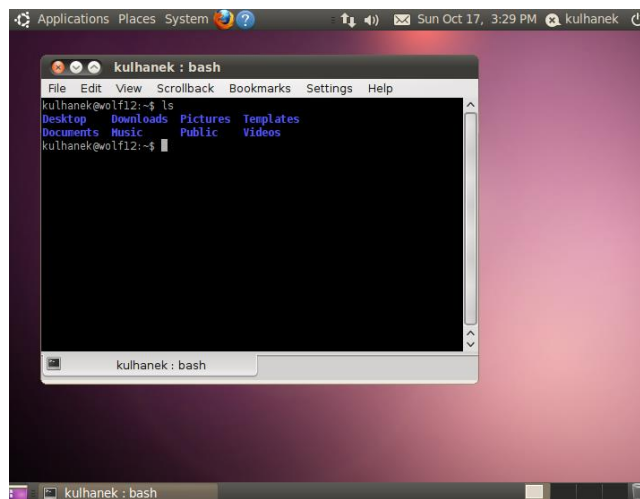
Výchozí klávesnice je anglická (**EN**).

Při použití numerické části klávesnice zkontrolujte, zdali je aktivován **NumLock**.

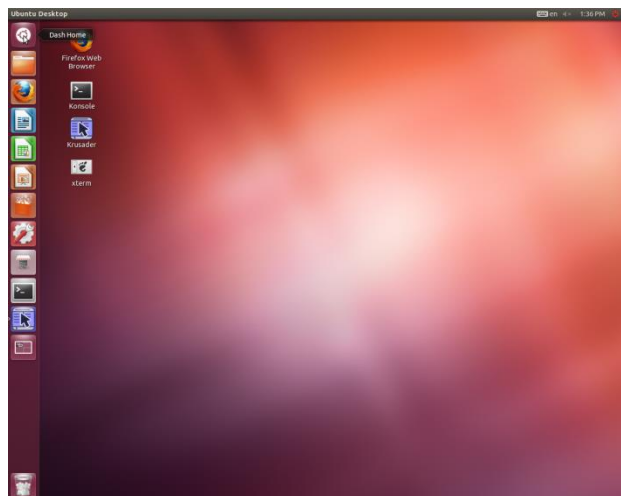
# Desktopová prostředí



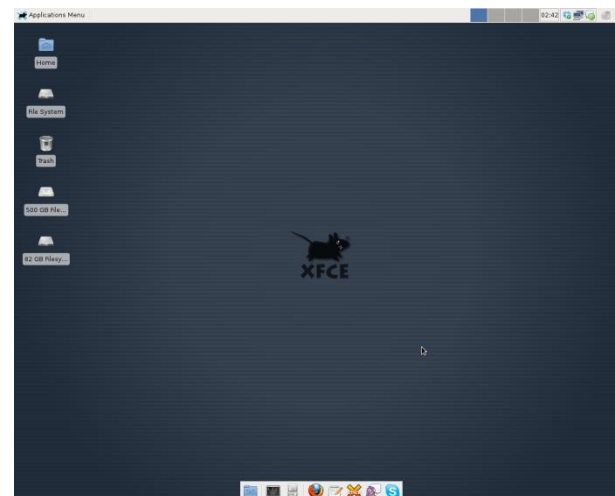
**KDE**



**GNOME**



**Unity (v menu volba Ubuntu)**



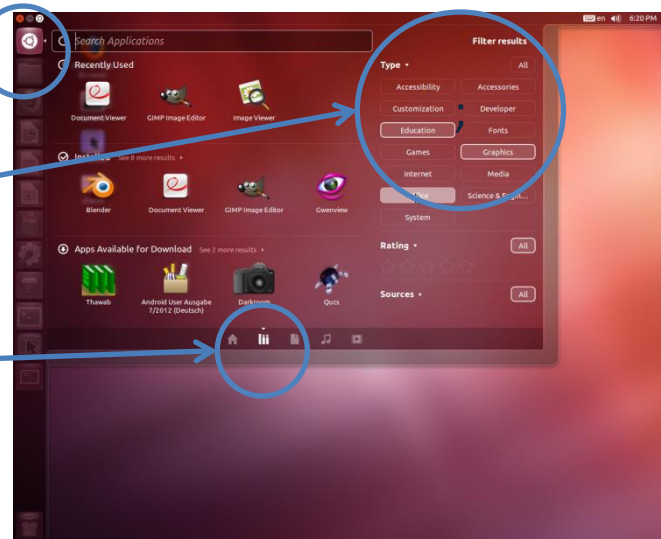
**Xfce**

# Standardní aplikace

Hlavní menu

Filtrování výsledků

Podskupina menu



Firefox

webový prohlížeč

OpenOffice/LibreOffice

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

Gimp

editor rastrové grafiky

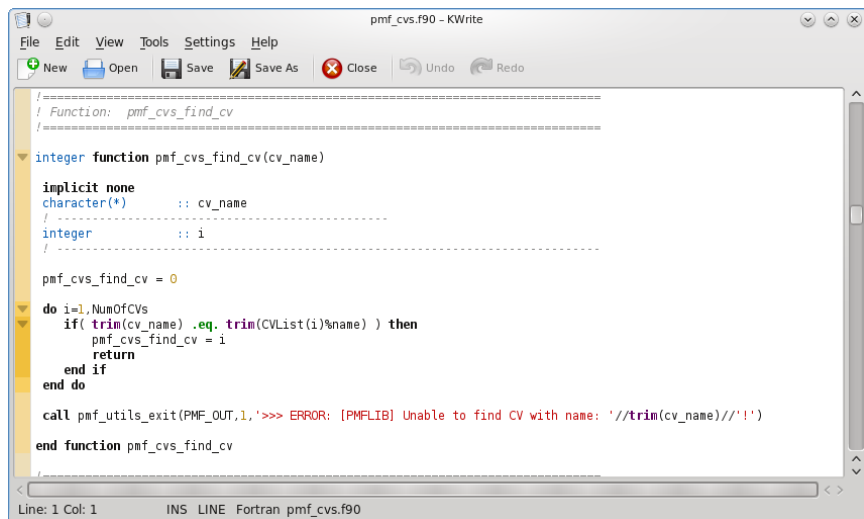
Inkscape

editor vektorové grafiky

Okular

prohlížeč PDF dokumentů

# Textové editory



The screenshot shows the kwrite text editor window titled "pmf\_cvs.f90 - KWrite". The code is Fortran and defines a function `pmf_cvs_find_cv` that searches for a specific CV name in a list. The code includes comments, variable declarations, and a loop that checks each CV name. An error message is printed if the CV is not found.

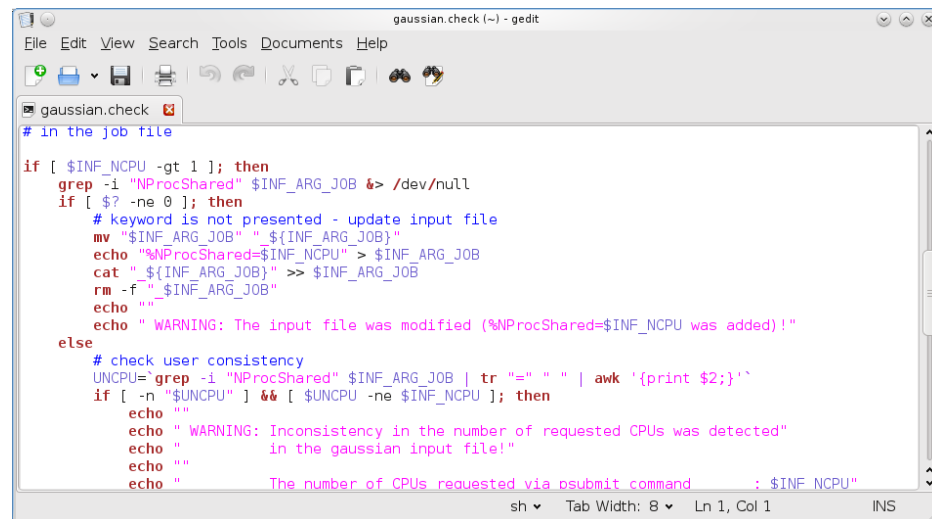
```
! Function: pmf_cvs_find_cv
!-----
integer function pmf_cvs_find_cv(cv_name)
implicit none
character(*) :: cv_name
!-----
integer :: i

pmf_cvs_find_cv = 0

do i=1,NumOfCVs
  if( trim(cv_name) .eq. trim(CVList(i)%name) ) then
    pmf_cvs_find_cv = i
    return
  end if
end do

call pmf_utils_exit(PMF_OUT,1,'>>> ERROR: [PMFLIB] Unable to find CV with name: '//trim(cv_name)//'!')
end function pmf_cvs_find_cv
```

kwrite

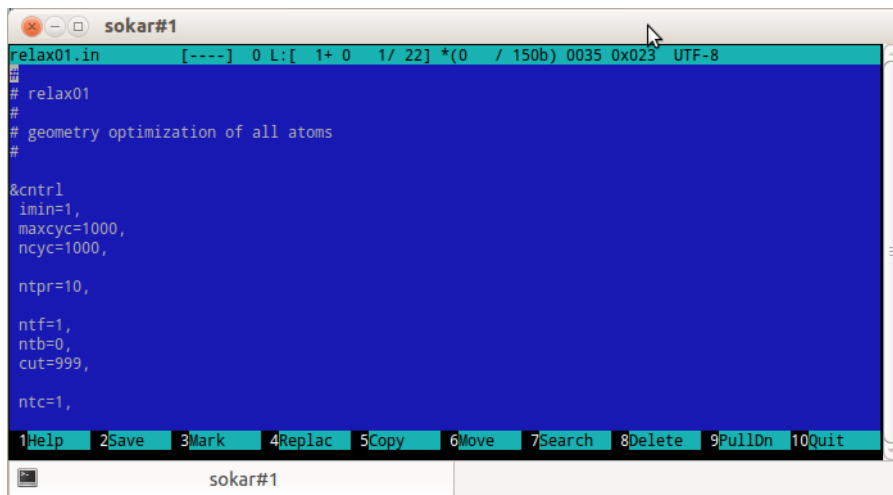


The screenshot shows the gedit text editor window titled "gaussian.check (-) - gedit". The code is a shell script that checks for the presence of the keyword `NPProcShared` in a Gaussian input file. It updates the file if the keyword is missing and checks for consistency in the number of requested CPUs.

```
# in the job file

if [ $INF_NCPU -gt 1 ]; then
  grep -i "NPProcShared" $INF_ARG_JOB &> /dev/null
  if [ $? -ne 0 ]; then
    # keyword is not presented - update input file
    mv "$INF_ARG_JOB" "${INF_ARG_JOB}"
    echo "%NPProcShared=$INF_NCPU" > $INF_ARG_JOB
    cat "$INF_ARG_JOB" >> $INF_ARG_JOB
    rm -f "$INF_ARG_JOB"
    echo ""
    echo " WARNING: The input file was modified (%NPProcShared=$INF_NCPU was added)!"
  else
    # check user consistency
    UNCPU=$(grep -i "NPProcShared" $INF_ARG_JOB | tr "=" " " | awk '{print $2;}')
    if [ -n "$UNCPU" ] && [ $UNCPU -ne $INF_NCPU ]; then
      echo ""
      echo " WARNING: Inconsistency in the number of requested CPUs was detected"
      echo "           in the gaussian input file!"
      echo ""
      echo "           The number of CPUs requested via psubmit command      : $INF_NCPU"
    fi
  fi
fi
```

gedit



The screenshot shows the Midnight Commander text editor window titled "sokar#1". The code is a Gaussian input file for a geometry optimization. It includes keywords like `relax01`, `&cntrl`, `imin=1`, `maxcyc=1000`, `ncyc=1000`, `ntpr=10`, `ntf=1`, `ntb=0`, `cut=999`, and `ntc=1`. A menu bar at the bottom shows various editing actions.

```
relax01.in [----] 0 L: [ 1+ 0 1/ 22] *(0 / 150b) 0035 0x023 UTF-8
# relax01
#
# geometry optimization of all atoms
#
&cntrl
imin=1,
maxcyc=1000,
ncyc=1000,

ntpr=10,

ntf=1,
ntb=0,
cut=999,

ntc=1,

1|help 2|save 3|mark 4|Replac 5|Copy 6|move 7|Search 8|Delete 9|PullDn 10|Quit
```

Midnight commander  
(příkaz mc)  
vestavěný editor (F4)

# Terminály

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

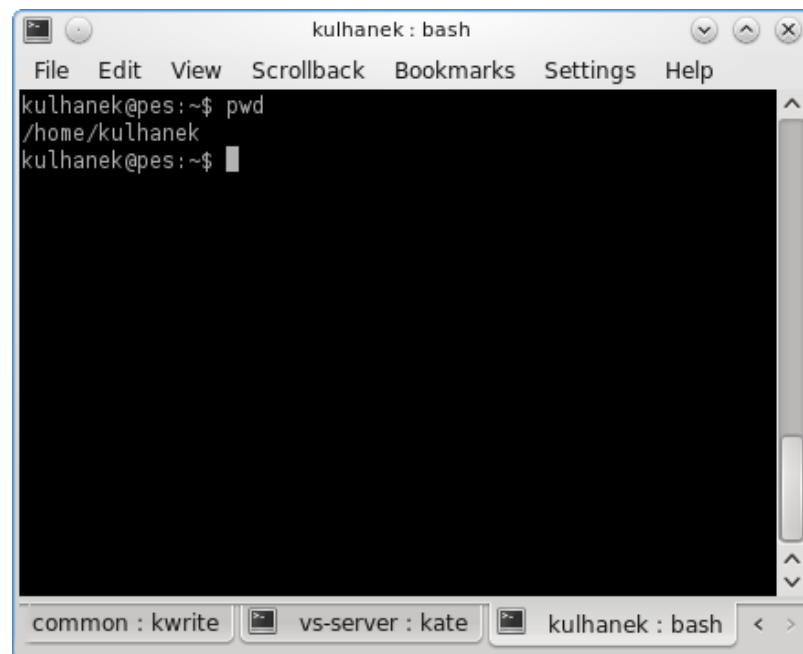
## xterm



jednoduché, standard na všech UNIXových systémech

Výchozím adresářem je: **/home/vas\_login**

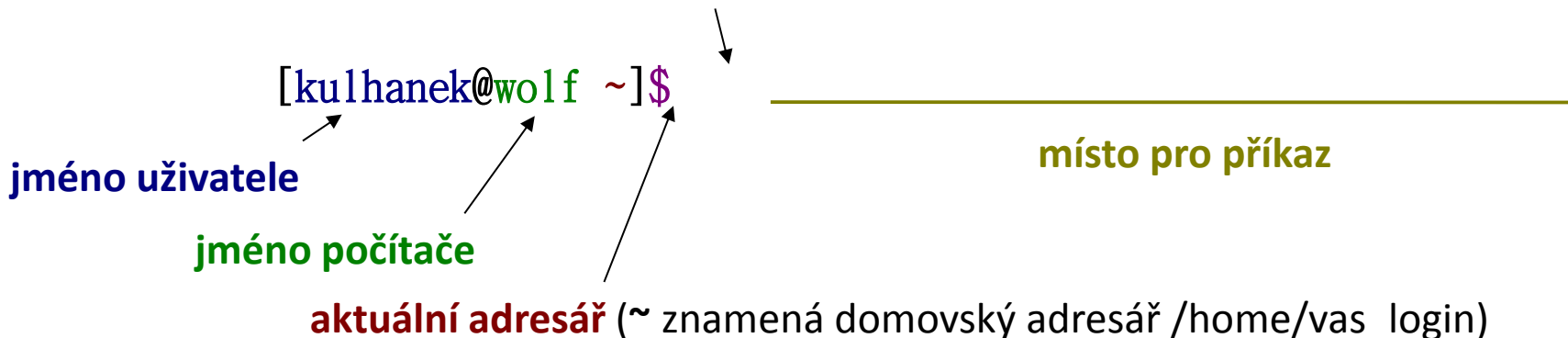
## konsole



jednoduché přitom značně konfigurovatelné

# 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 myši.

# 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`

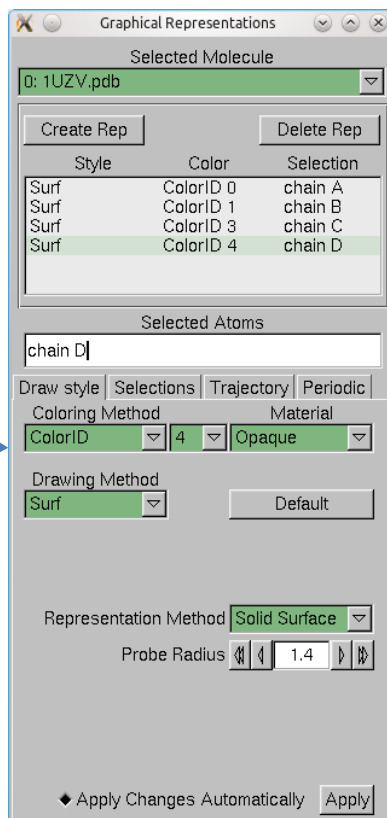
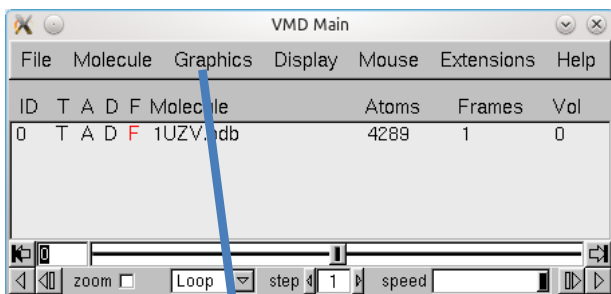
**Spuštění aplikace z modulu vmd**

`$ vmd`

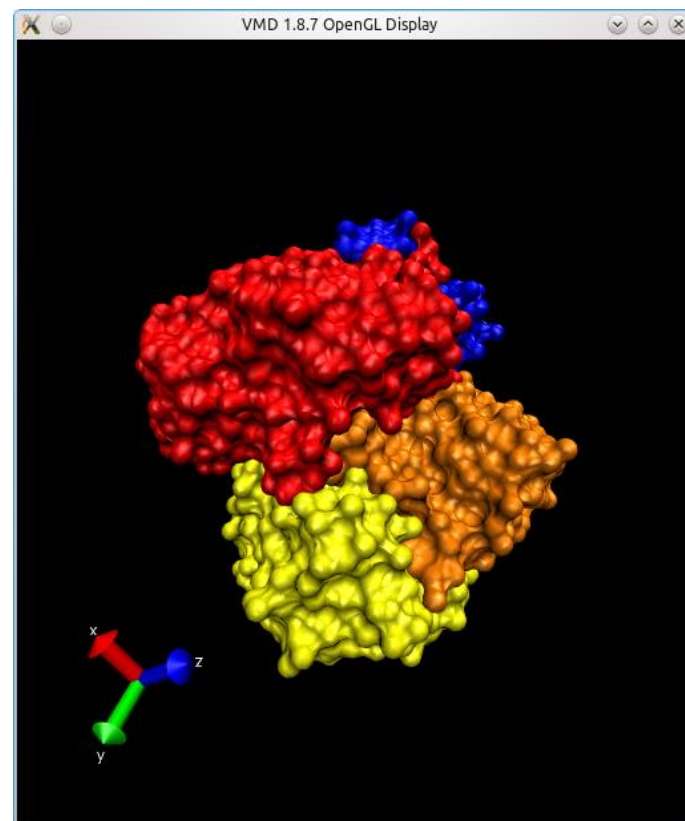
# Program VMD

<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.

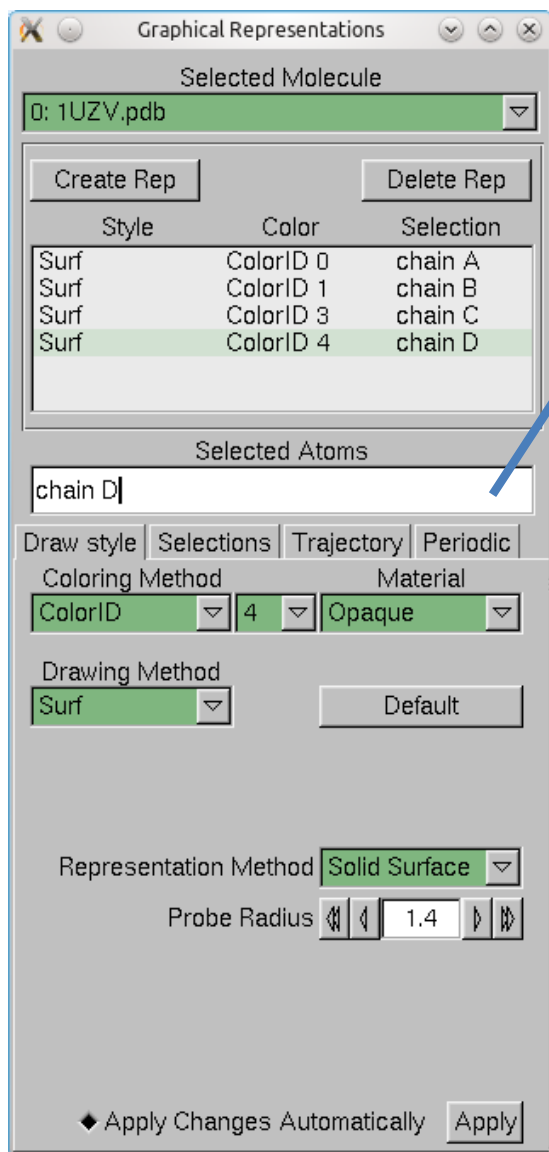


Representation





# Program VMD



## Selekcce (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

# Cvičení

1. Přihlaste se do desktopového prostředí Unity (volba Ubuntu v menu volby prostředí). Přihlašovací jméno je **guestXX**, kde XX je číslo vašeho počítače ve formátu 01 – 23. Přihlašovací heslo vám sdělí vyučující.
2. Vyzkoušejte systémové aplikace (Gimp, Libre Office Writer, Inkscape)
3. Vyzkoušejte se přihlásit do jiných desktopových prostředí (Xfce, Gnome, KDE) a najděte v nich aplikační menu a zkuste spustit některé aplikace.
4. Otevřete terminál. Aktivujte modul **vmd** a poté spusťte program **vmd**. Do programu načtěte strukturu proteinu uloženou v PDB souboru **/home/kulhanek/Documents/2013/C7800\_MM\_cv/1DC1.pdb**

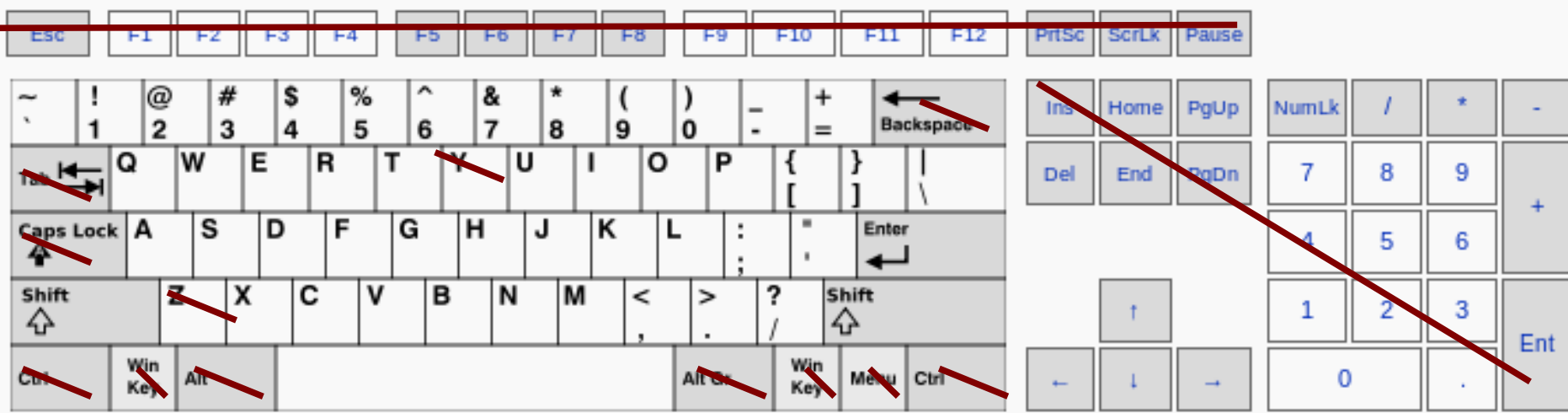
# Změna hesla

---

➤ Příkaz passwd

# Změna hesla, příkaz passwd

- Heslo se mění po přihlášení do systému z příkazové řádky pomocí příkazu **passwd**.
- Po jeho spuštění jste dotázáni 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.



Výchozí klávesnice je anglická (EN).

# Tvar hesla

Platné heslo by mělo být kombinací malých a velkých písmen, číslic a dalších znaků. Můžete použít 8 znaků dlouhé heslo se znaky z alespoň 3 z těchto 4 kategorií, nebo 7 znaků dlouhé heslo obsahující znaky ze všech tříd. Velké písmeno, kterým heslo začíná a čísla, kterými končí se nezapočítávají do počtu znaků použitých tříd.

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.

# Změna hesla - passwd

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

You can now choose the new password or passphrase.

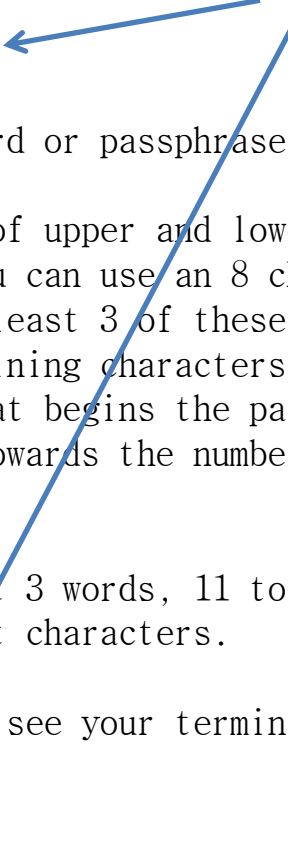
A valid password should be a mix of upper and lower case letters, digits, and other characters. You can use an 8 character long password with characters from at least 3 of these 4 classes, or a 7 character long password containing characters from all the classes. An upper case letter that begins the 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:

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

**při psaní hesel se nezobrazují  
žádné znaky**



# Cvičení

1. Odhlaste se z aktivního sezení.
2. Přihlaste se vaším přiděleným přihlašovacím jménem a dočasným heslem.
3. Otevřete terminál.
4. Změňte heslo příkazem **passwd**.
5. Odhlaste se.
6. Přihlaste se vaším přiděleným přihlašovacím jménem a vámi změněným heslem.

# Vzdálené přihlašování

---

- Příkaz ssh
- Autorizace pomocí ssh klíčů



# Vzdálené přihlášení

Existuje několik možností vzdáleného přihlášení (rsh, XDMCP, apod.) avšak nejpoužívanějším a **nejbezpečnějším** je použití příkazu **ssh** (secure shell).

## Syntaxe:

```
$ ssh [user@]hostname [command] [] - možno vynechat
```

jméno uživatele;  
pokud není uvedeno, použije se  
jméno přihlášeného uživatele

jméno počítače

příkaz, který se má vykonat;  
pokud není uveden, zpřístupní se  
příkazová řádka

## Příklady použití:

```
$ ssh wolf.wolf.inet
```

## Ukončení přihlášení:

```
$ exit
```

# Přihlašování bez hesla v rámci klastru

## 1. Vytvoření dvojice veřejného a soukromého klíče:

```
[kulhanek@wolf01 ~]$ cd .ssh
[kulhanek@wolf01 .ssh]$ ssh-keygen
Generating public/private rsa key pair.
Enter file in which to save the key (/home/kulhanek/.ssh/id_rsa):
Enter passphrase (empty for no passphrase):
Enter same passphrase again:
Your identification has been saved in /home/kulhanek/.ssh/id_rsa.
Your public key has been saved in /home/kulhanek/.ssh/id_rsa.pub.
The key fingerprint is:
e9:07:0b:fc:17:23:b3:c5:1a:8a:0c:1a:98:8f:fe:28 kulhanek@wolf01.wolf.inet
```

Nic se nezadává!



## 2. Vložení veřejného klíče do seznamu autorizovaných klíčů:

```
[kulhanek@wolf01 .ssh]$ cat id_rsa.pub >> authorized_keys
```

### Výhody:

- nemusí se neustále zadávat heslo
- bezpečnější použití příkazů ssh a scp ve skriptech
- urychlení práce

### Nevýhody:

- v případě kompromitace jednoho počítače, jsou kompromitovány všechny počítače se vzájemně autorizovanými veřejnými klíči.

Podrobnější popis: man ssh

# Cvičení

1. Přihlaste se příkazem **ssh** na uzel **wolf.wolf.inet**
2. Příkazem **who** zjistěte, kdo je na uzlu přihlášen.
3. Odhlaste se příkazem **exit**.
4. Aktivujte si přihlašování bez hesla v rámci klastru WOLF.
5. Ověřte funkčnost přihlašování bez hesla. Přihlaste se na uzel **wolf.wolf.inet** pomocí příkazu **ssh**.

**Pro další cvičení je nutné mít aktivované přihlašování bez hesla v rámci klastru WOLF.**

# Linux v kostce

---

# Souborový systém

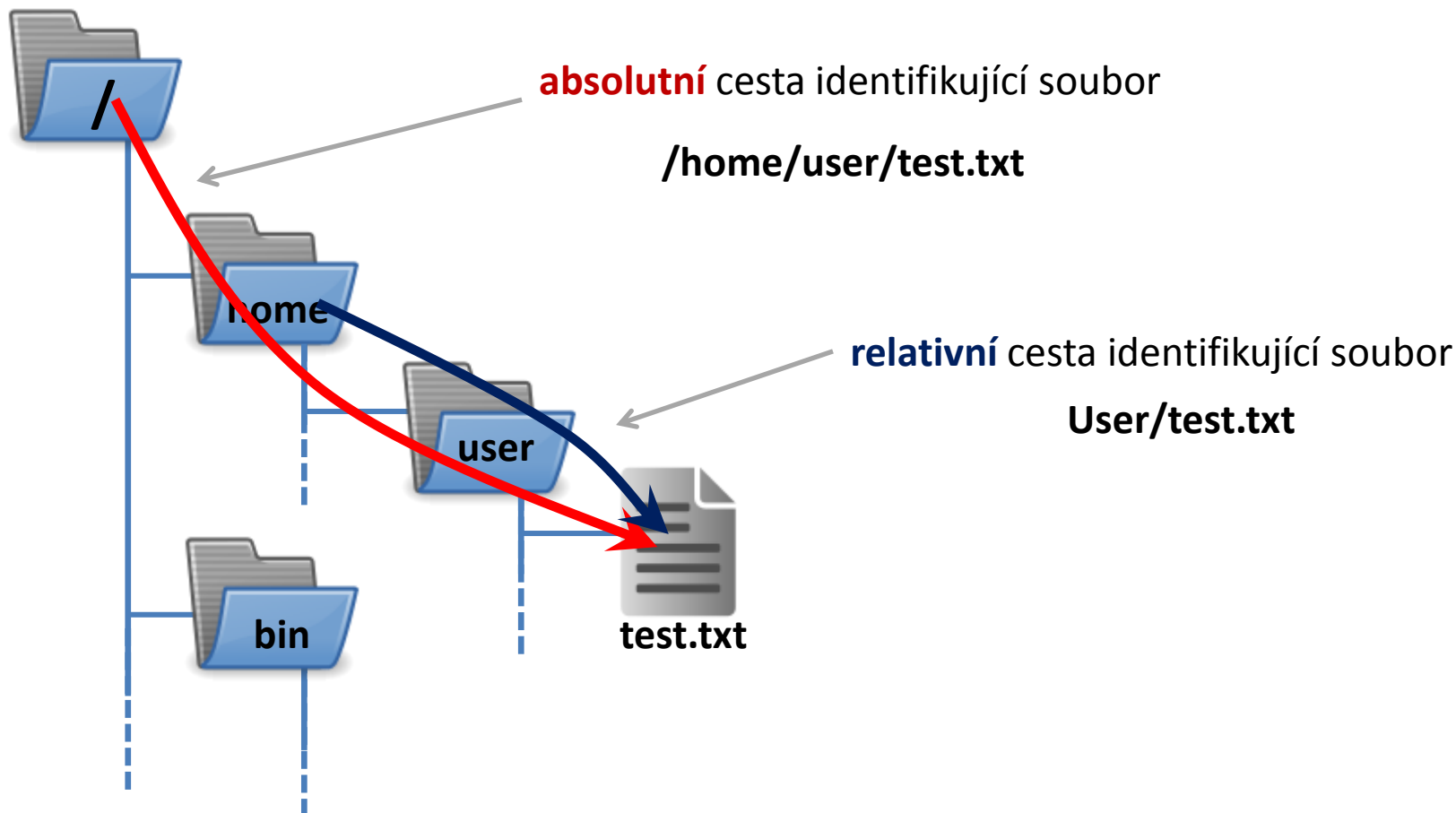
Vlastnost	Linux (ext2/ext3/ext4)	MS Windows (FAT32,NTFS)
Diskové oddíly (partitions)	Ne Diskové oddíly se připojují jako adresáře.	C:, D:, atd. Je však možné připojit I jako adresář (ntfs).
Jména	Rozlišuje malá a velká písmena (case sensitive).	Nerozlišuje malá a velká písmena (case insensitive).
Oddělování jmen	Lomítko	Zpětné lomítko
Přístupová práva	Ano POSIX	Ano (pouze NTFS) ACL
Zařízení (hardware)	Jako speciální soubory.	Ne

## Speciální jména adresářů:

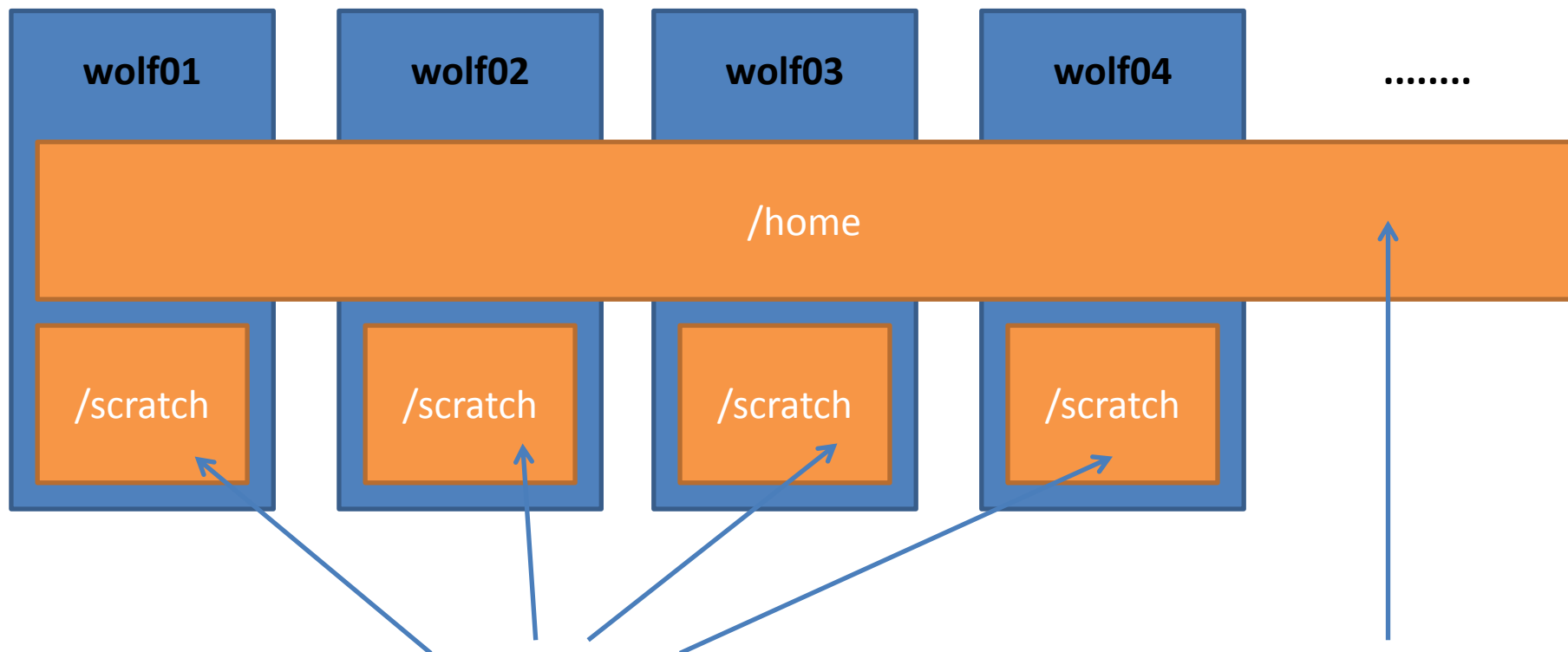
- . aktuální adresář (**tečka**)
- .. rodičovský adresář (**dvě tečky**)

# Identifikace adresářů a souborů

**Cesta** k adresáři nebo souboru může být uvedena jako **absolutní** nebo **relativní**. Jména adresářů a souborů se oddělují **lomítkem /**.



# Souborový systém na klastru WOLF



Rozdílný obsah na každém uzlu.

Data na svaku /scratch se **nezálohují** a mohou být **kdykoliv smazána** bez předchozího upozornění.

Kapacita **není omezena** kvótou na uživatele.

**Sdílený** obsah na všech uzlech klastru WOLF.

Data jsou **zálohována**. Kapacita na uživatele omezena na **1,5GB kvótou**.

# Nápověda příkazů, hledání příkazů

## *Navigace v textu nápovědy:*

- posun v textu po řádcích (kurzorové šipky nahoru a dolů nebo klávesy **j** a **k**)
- posun v textu po stránkách (**PgDn** a **PgUp** nebo klávesy **f** a **b**)
- vyhledávání ( **/hledaný\_text** , klávesa **n** pro další vyhledávání )
- zavření nápovědy (klávesa **q**)

## *On-line manuálové stránky ve formátu HTML:*

<http://linux.die.net/man/>

## **Užitečné příkazy:**

- **whatis**      vypíše krátký popis příkazu (z manuálové stránky)
- **apropos**    hledá příkazy obsahující v popisku v manuálu zadané klíčové slovo
- **info**        zobrazení info stránek příkazů (obdoba manuálových stránek)



# Spouštění příkazů a aplikací

## Příkazy a systémové aplikace

```
$ ls -l
```

zadááme pouze jméno příkazu nebo aplikace

```
$ cp soubor.txt soubor1.txt
```

příkaz

argumenty příkazu (mění chování příkazu nebo tvoří vstupní informace pro zpracování)

## Uživatelské programy a skripty

```
$ ./muj_script
```

jméno programu nebo skriptu udáváme včetně cesty (absolutní nebo relativní)

```
$ ~/bin/my_application
```

## Zrušení výpisu do terminálu

```
$ kwrite &> /dev/null
```

↙ přesměrování výstupu uvádíme na konec příkazu (za argumenty)

## Spouštění aplikací na pozadí

```
$ gimp &
```

↙ na konec (za argumenty a přesměrování) příkazu uvedeme ampersand

# Základní příkazy

## *Souborový systém:*

- pwd
- cd
- ls
- mkdir
- cp
- mv
- rm

vypíše cestu k aktuálnímu pracovnímu adresáři

změní aktuální pracovní adresář

vypíše obsah adresáře

vytvoří adresář

zkopíruje soubor či adresář

přesune soubor či adresář

odstraní soubor či adresář

## *Zjišťovací příkazy:*

- hostname
- whoami
- id
- w
- ps

vypíše jméno počítače

vypíše jméno přihlášeného uživatele

vypíše identifikační čísla uživatele

kdo je přihlášený a co dělá

vypíše běžící procesy

# Vytvoření adresářů

- **Vytvoření adresáře**

```
$ mkdir jmeno_adresare
```

- **Vytvoření vnořených adresářů**

```
$ mkdir -p jmeno_adresare1/jmeno_adresare2/jmeno_adresare3
```

# Kopírování

- Ke kopírování slouží příkaz **cp**

**\$ cp soubor1 soubor2**

vytvoří kopii souboru "soubor1" s názvem "soubor2"

**\$ cp soubor1 soubor2 soubor3 adresar1/**

kopíruje soubory "soubor1", "soubor2", "soubor3" do adresáře "adresar1"

**\$ cp -r adresar1 adresar2**

vytvoří kopii adresáře "adresar1" s názvem "adresar2"; pokud adresář "adresar2" již existuje, vytvoří kopii adresáře "adresar1" jako podadresář adresáře "adresar2"

**\$ cp -r soubor1 adresar2 soubor3 adresar1/**

kopíruje soubory "soubor1", "soubor3" a adresář "adresar2" do adresáře "adresar1"

# Přesouvání

- K přesouvání nebo přejmenování slouží příkaz **mv**

`$ mv soubor1 soubor2`

přejmenuje soubor "soubor1" na "soubor2"

`$ mv soubor1 soubor2 soubor3 adresar1/`

přesune soubory "soubor1", "soubor2", "soubor3" do adresáře "adresar1"

`$ mv adresar1 adresar2`

přejmenuje adresář "adresar1" na "adresar2"; pokud adresář "adresar2" již existuje, přesune adresář "adresar1" do adresáře "adresar2"

`$ mv soubor1 adresar2 soubor3 adresar1/`

přesune soubory "soubor1", "soubor3" a adresář "adresar2" do adresáře "adresar1"

- K mazání slouží příkaz **rm**

\$ rm soubor1

odstraní soubor "soubor1"

\$ rm -r adresar1

odstraní adresář "adresar1"