

# TSM

# *Modelování molekulárních struktur*

Cvičení I

Petr Kulhánek

[petr.kulhanek@ceitec.muni.cz](mailto:petr.kulhanek@ceitec.muni.cz)

CEITEC – Středoevropský technologický institut, Masarykova univerzita,  
Kamenice 5, 625 00 Brno

NCBR – Národní centrum pro výzkum biomolekul, Masarykova univerzita,  
Kotlářská 2, 611 37 Brno

- **Klastr WOLF**  
struktura, pravidla používání, správci
- **Přihlašování**  
místní přihlášení, změna hesla
- **Programové vybavení**  
systémové aplikace, přehled, vědeckotechnické aplikace
- **UNIX v kostce**  
souborový systém, základní příkazy

# Klaster WOLF

---

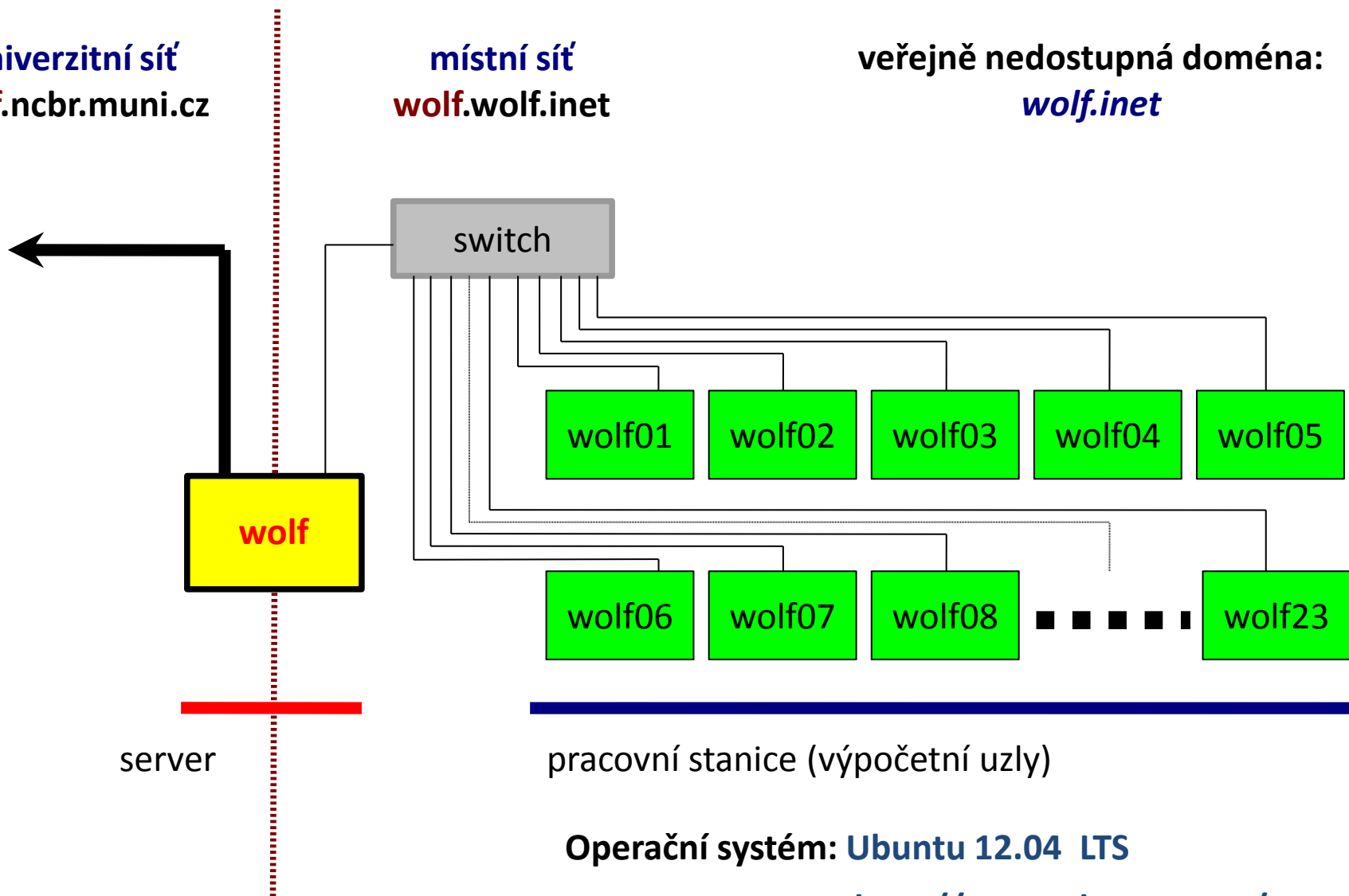
- **Struktura klastru**
- **Pravidla používání klastru**
- **Správci klastru**

# 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 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

## **Dodržují se pravidla užívání počítačové sítě Masarykovy univerzity:**

[https://is.muni.cz/auth/do/rect/normy/smernicerektora/Smernice\\_rektora\\_13-2005.pdf](https://is.muni.cz/auth/do/rect/normy/smernicerektora/Smernice_rektora_13-2005.pdf)

# Správci klastru

Než kontaktujete správce, prodiskutujte svůj problém s vaším kolegou, vyučujícím nebo školitelem.

## Hlavní správce klastru WOLF:

Jakub Štěpán ([xstepan3@chemi.muni.cz](mailto:xstepan3@chemi.muni.cz))

- › zakládání nových účtů
- › změna zapomenutých hesel
- › správa hardware
- › správa systému a systémových aplikací

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

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

# 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 místního 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):

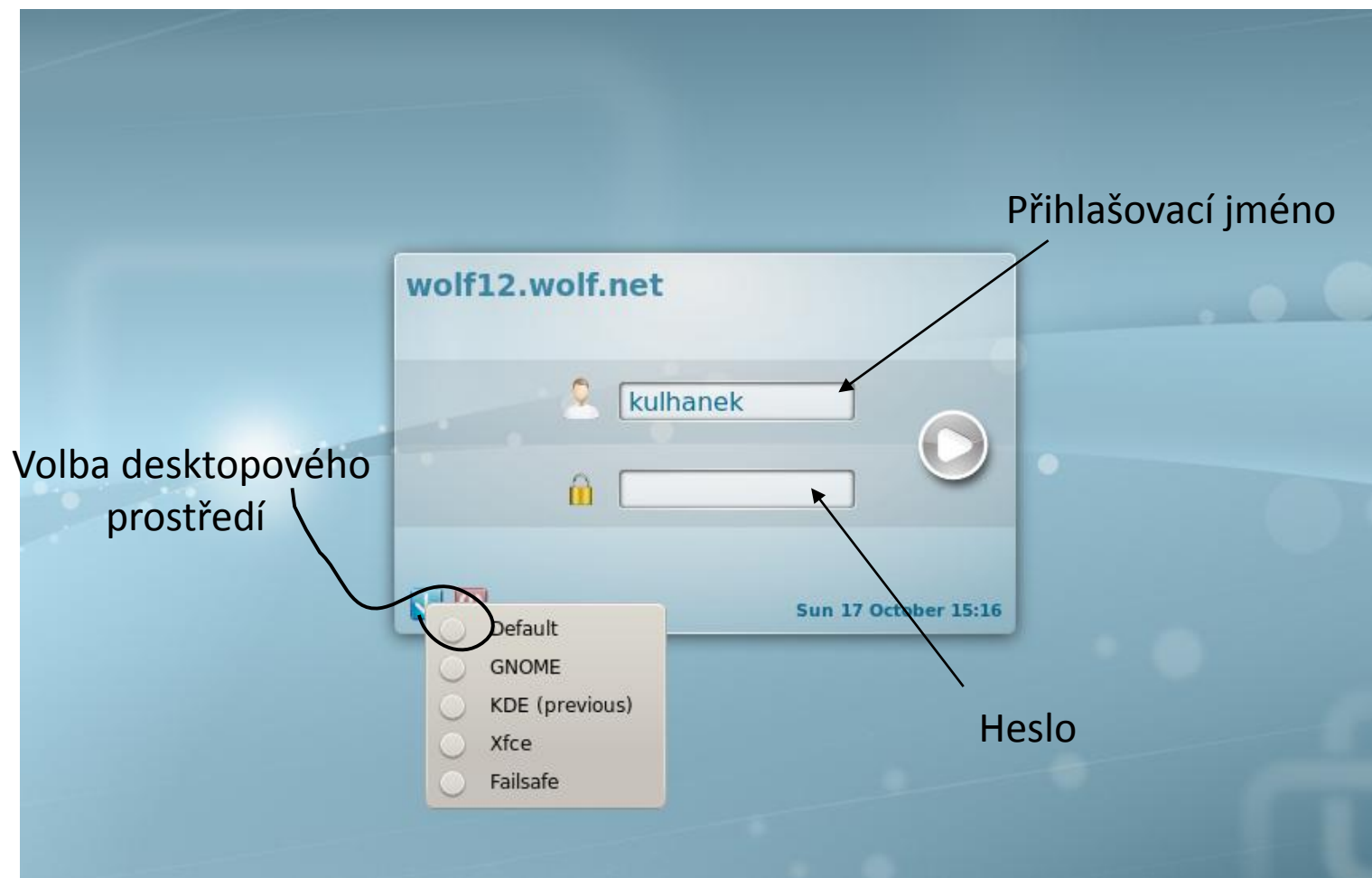
- zpřístupňuje příkazovou řádku (CLI – command line interface)
- výchozím adresářem je **/home/vas\_login**
- grafické aplikace (X11) lze spouštět jen s **exportem displeje** na vzdálený grafický terminál
- odhlášení příkazem **exit**

## 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.

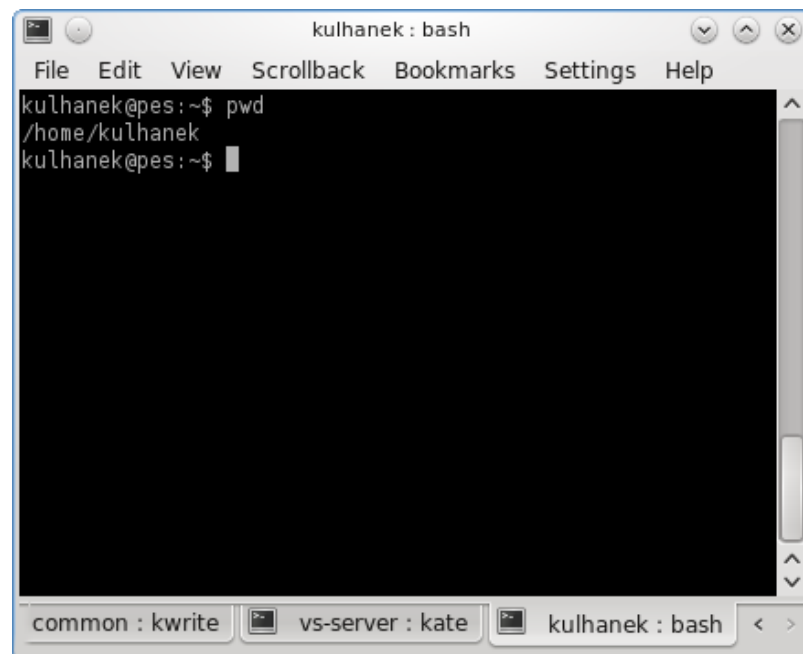
## xterm



jednoduché, standard na všech UNIXových systémech

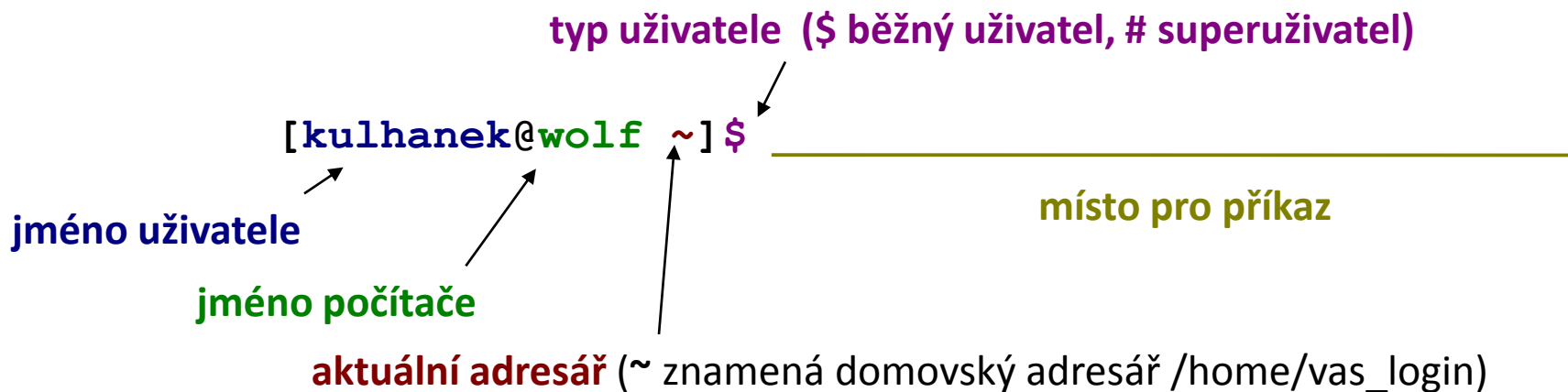
Výchozím adresářem je: **`/home/vas_login`**

## konsole



jednoduché přitom značně konfigurovatelné, dostupné v prostředí KDE

# Příkazová řádka



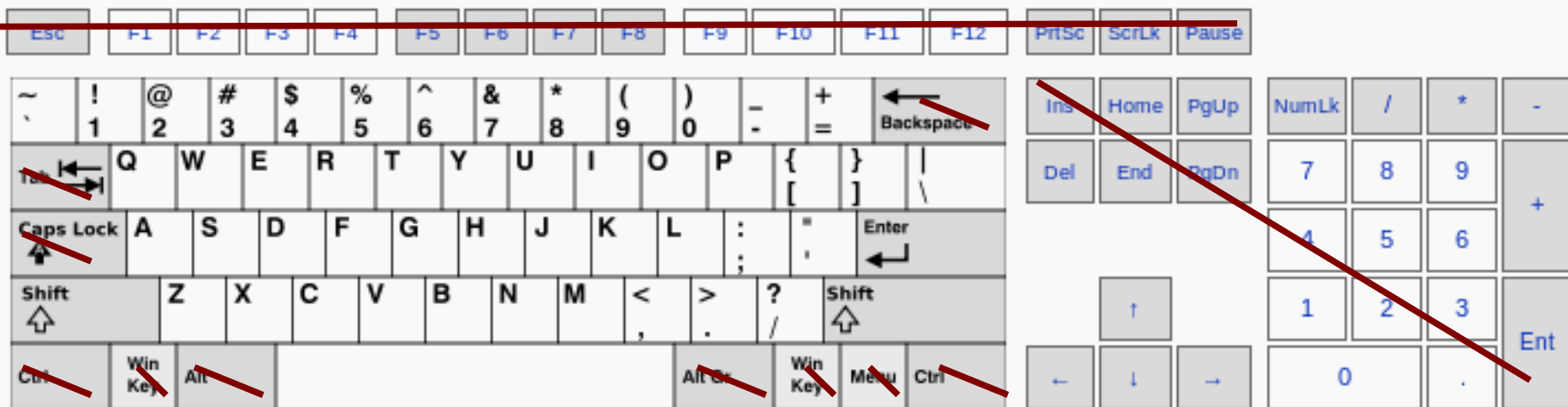
Příkaz se vykoná zmáčknutím klávesy **Enter**.

**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 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.



# 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
```

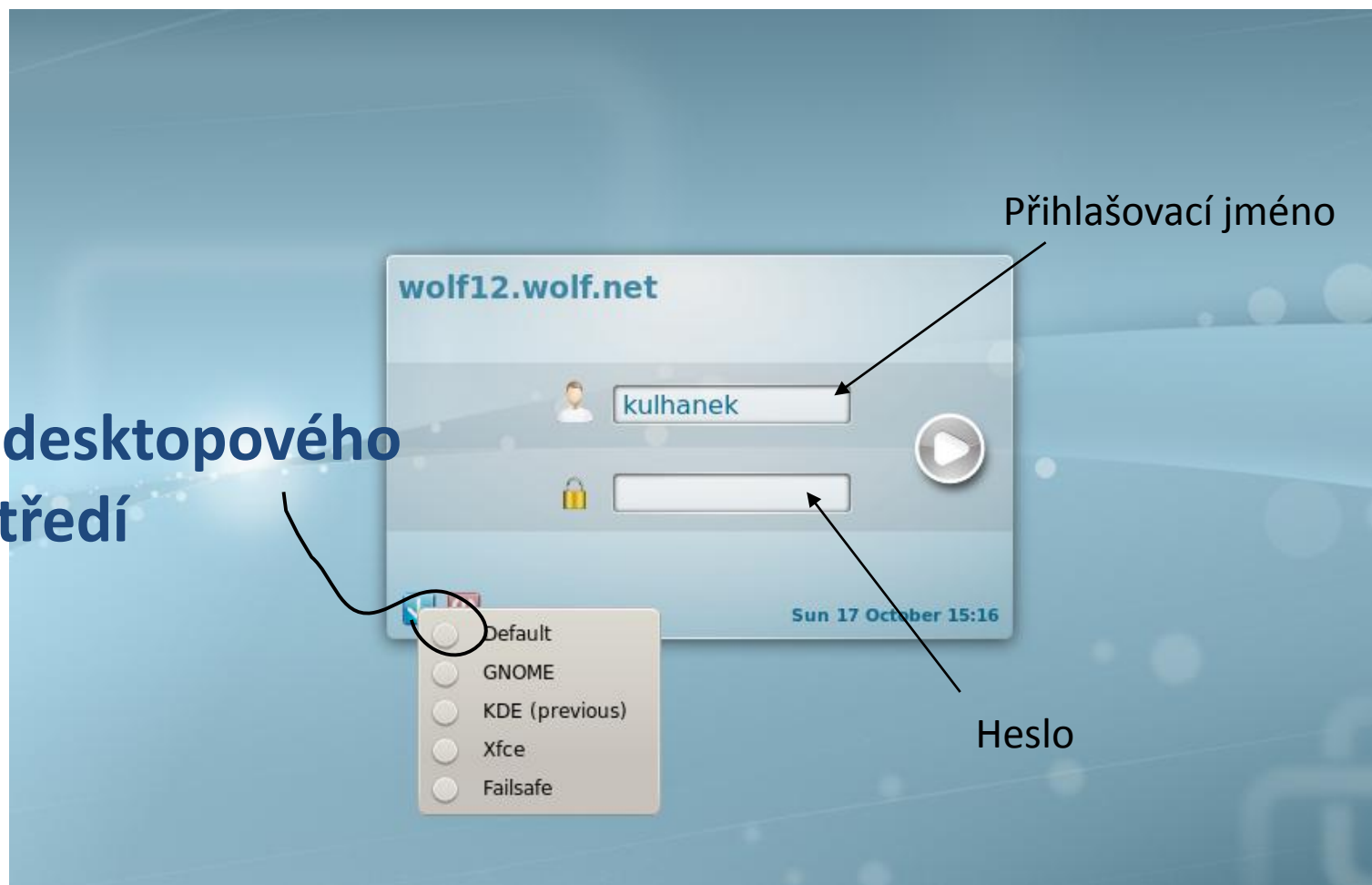
```
kulhanek@wolf:~$
```

při psaní se nezobrazují žádné znaky



# Desktopová prostředí

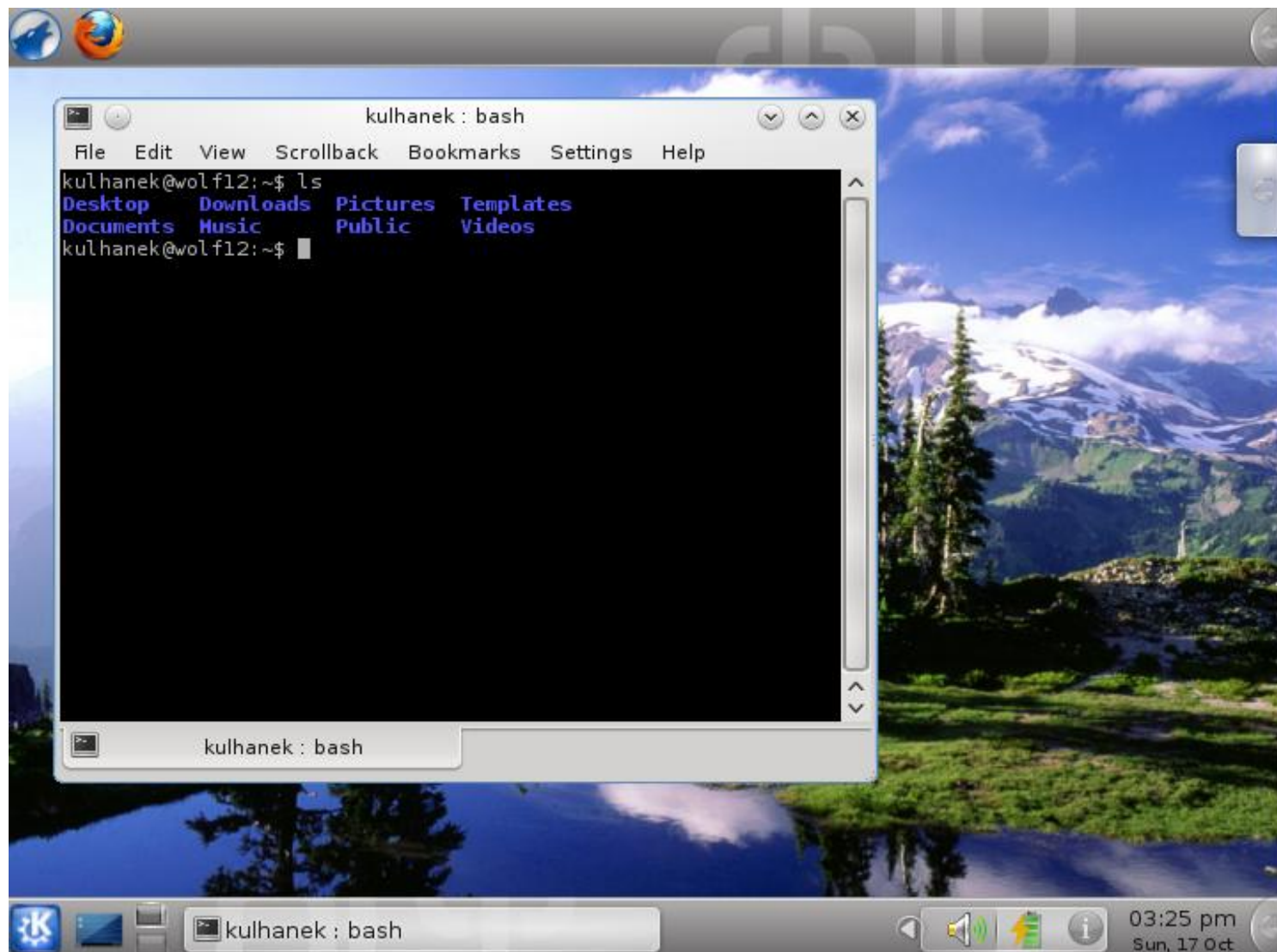
Grafický terminál (F7):



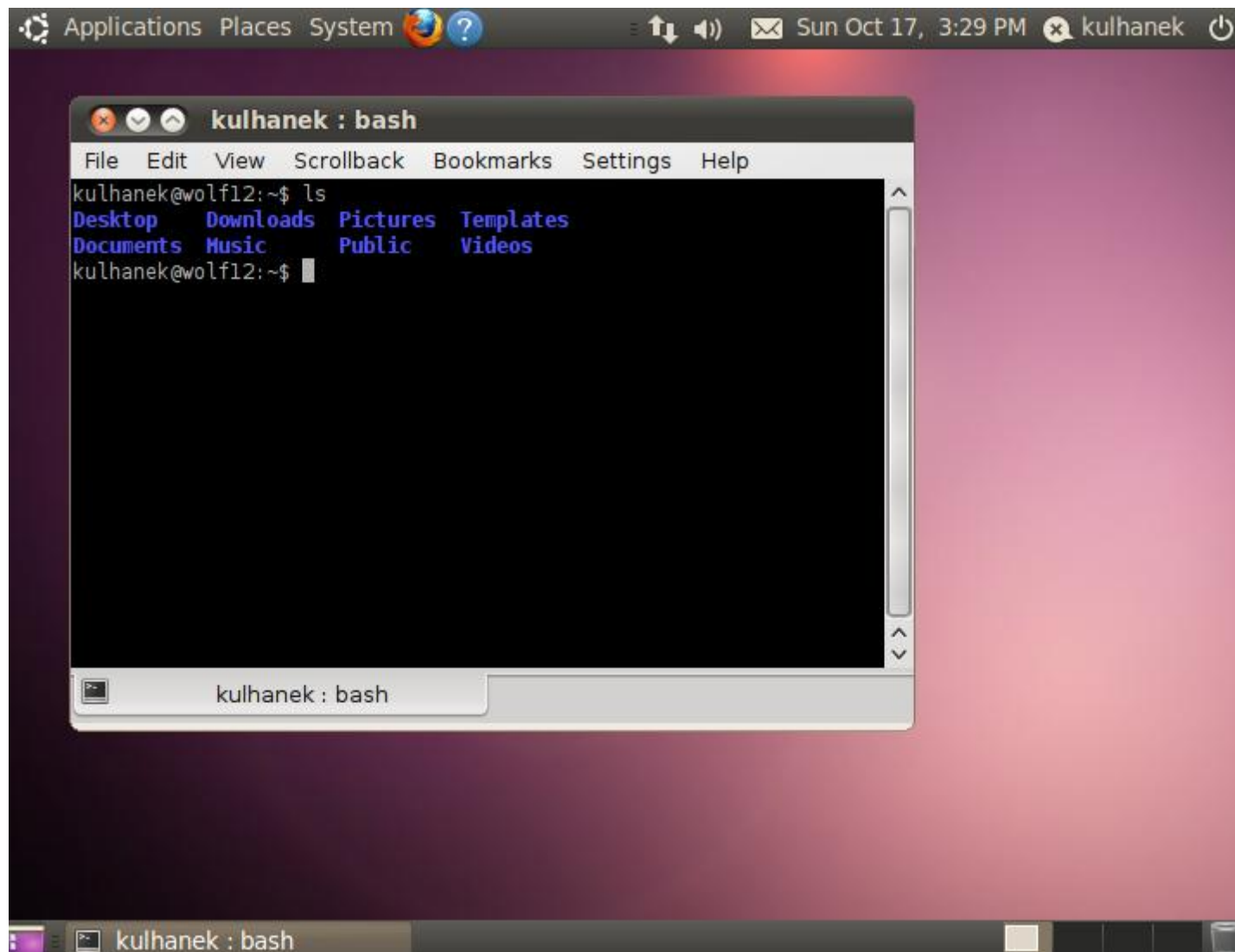
Volba desktopového  
prostředí

Přihlašovací jméno

Heslo







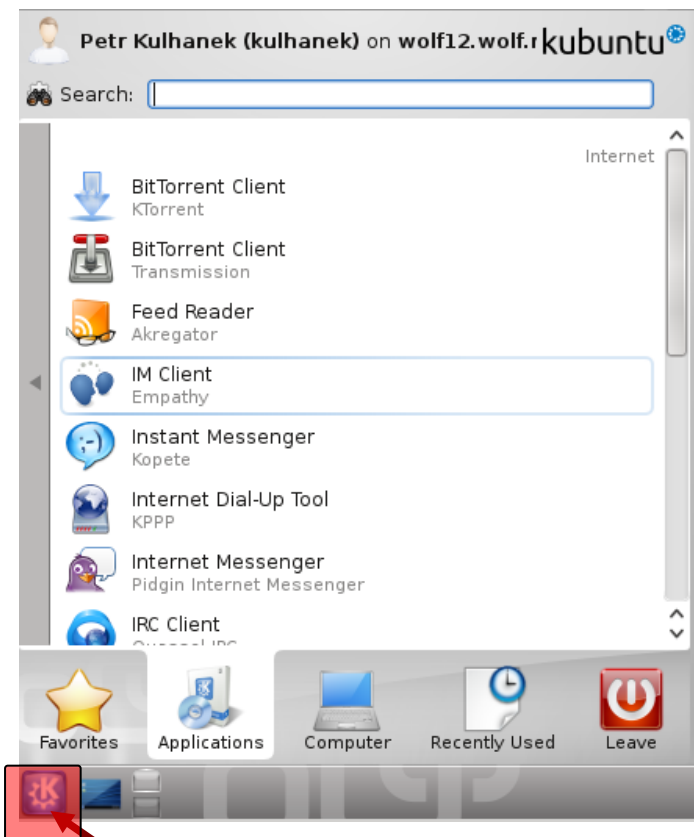
# Programové vybavení

---

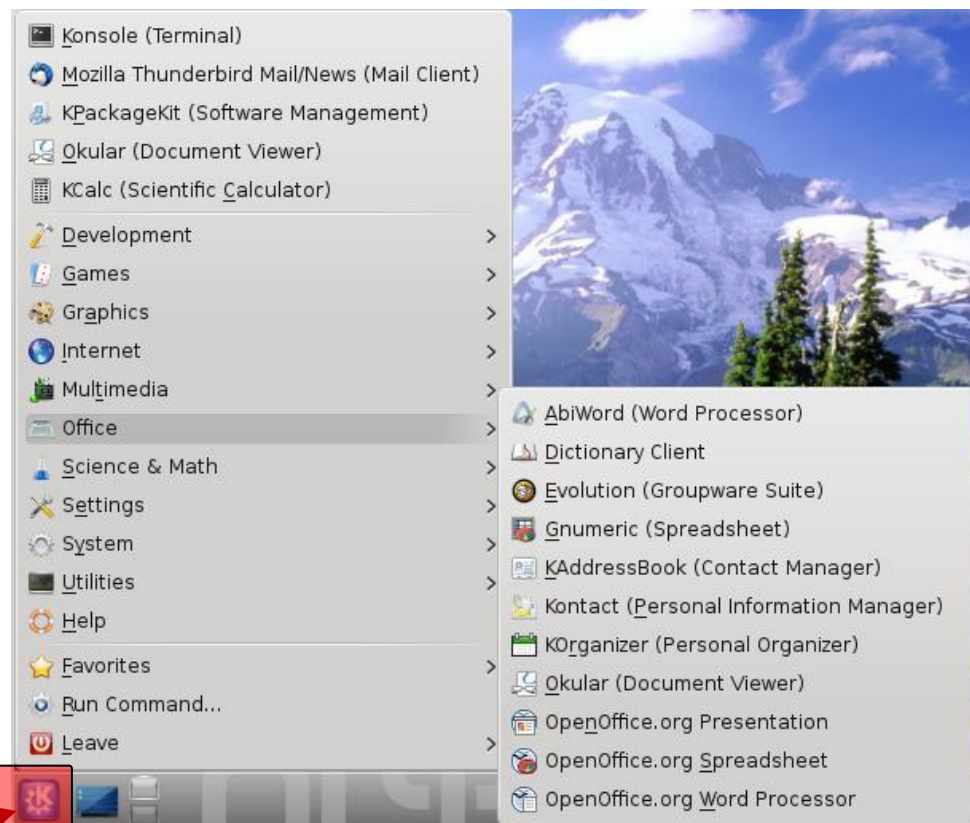
- **Systémové aplikace**
- **Přehled systémových aplikací**
- **Vědecko-technické aplikace**

# Systemové aplikace

## KDE menu - "Kickoff" styl



## KDE menu - Klasický styl



Aplikace dostupné v menu okenního manažera.  
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

# 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:**

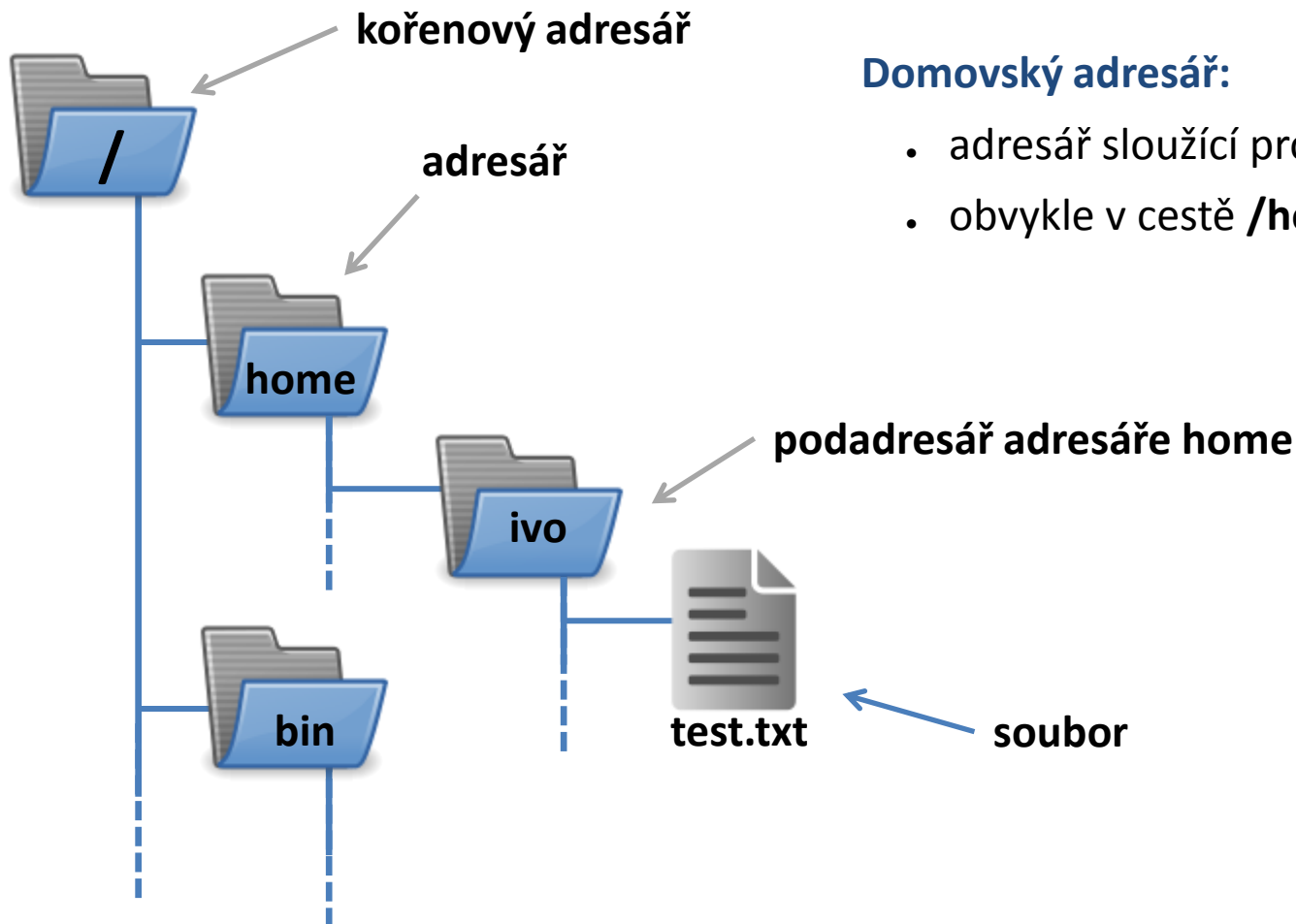
\$ **vmd**

# UNIX v kostce

---

# Struktura souborového systému

UNIX využívá **hierarchický** adresářový **souborový systém** složený z adresářů (složek) a souborů. Všechny adresáře a soubory leží v **jediném kořenovém adresáři (/)**.



## Domovský adresář:

- adresář sloužící pro **data a nastavení uživatele**
- obvykle v cestě **/home/jmeno\_uzivatele**

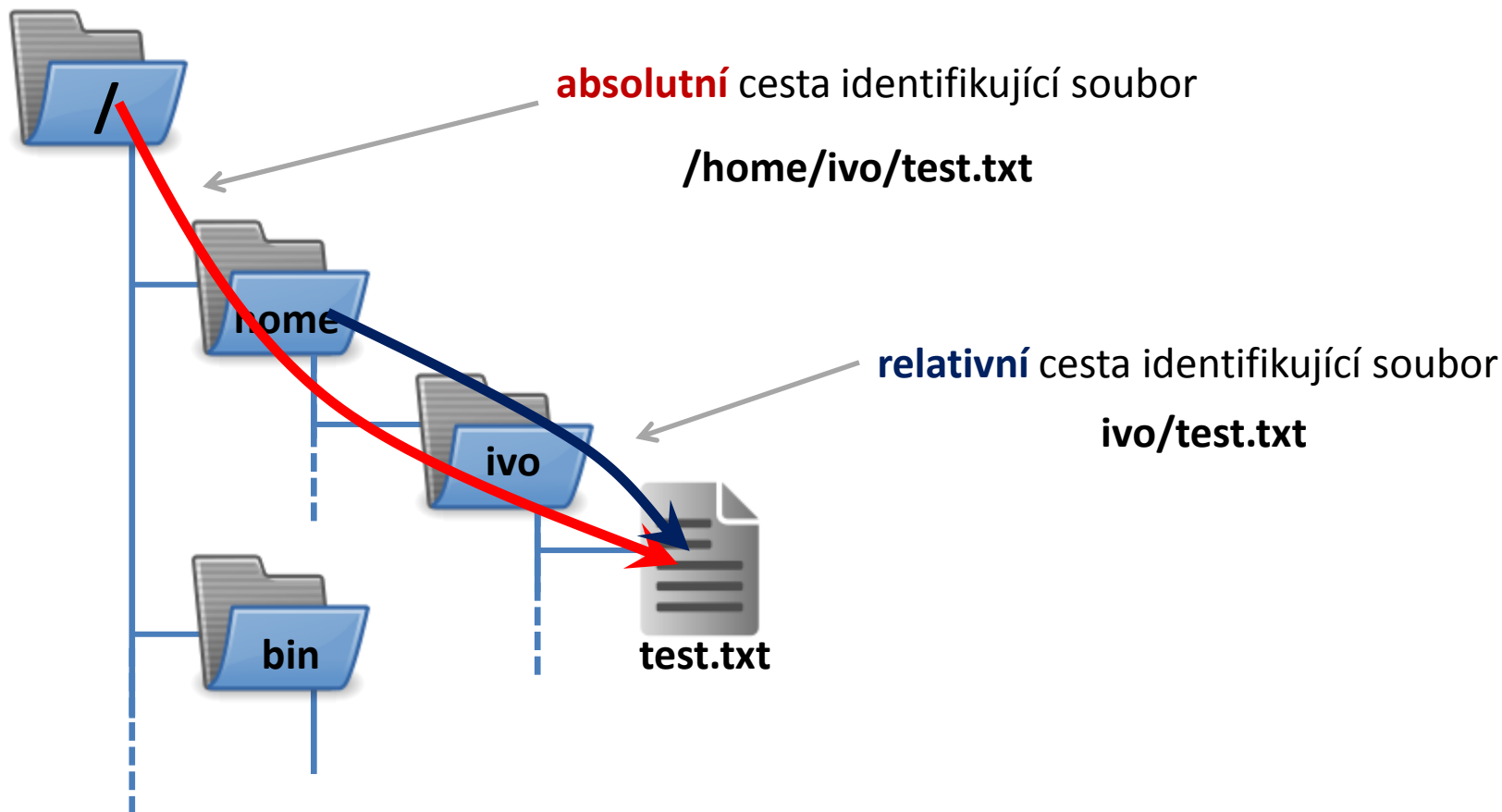
# Srovnání s MS Windows

<b>Vlastnost</b>	<b>Linux (ext2/ext3/ext4)</b>	<b>MS Windows (FAT32,NTFS)</b>
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



# Identifikace adresářů a souborů

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



# Typy cest

**Absolutní cesta** je vždy uvedena vzhledem ke kořenovému nebo k domovskému adresáři. Musí tedy začínat buď lomítkem / nebo tildou ~.

```
/home/kulhanek/Documents/domaci_ukol.txt
```

## Použití tildy:

~	domovský adresář přihlášeného uživatele
~ <b>user_name</b>	domovský adresář uživatele user_name

**Relativní cesta** je cesta uvedená k aktuálnímu/pracovnímu adresáři. (Absolutní cestu k pracovnímu adresáři lze získat příkazem **pwd**.)

```
../alois/Documents
```

## Speciální jména adresářů:

. ( <b>tečka</b> )	aktuální adresář
.. ( <b>dvě tečky</b> )	rodičovský (nadřazený) adresář

# Příklady cest

## Absolutní cesty:

`/home/kulhanek/Documents`

`/home/kulhanek/Documents/domaci_ukol.txt`

`~/Documents`

→

`/home/kulhanek/Documents`

`~alois/Documents`

→

`/home/alois/Documents`

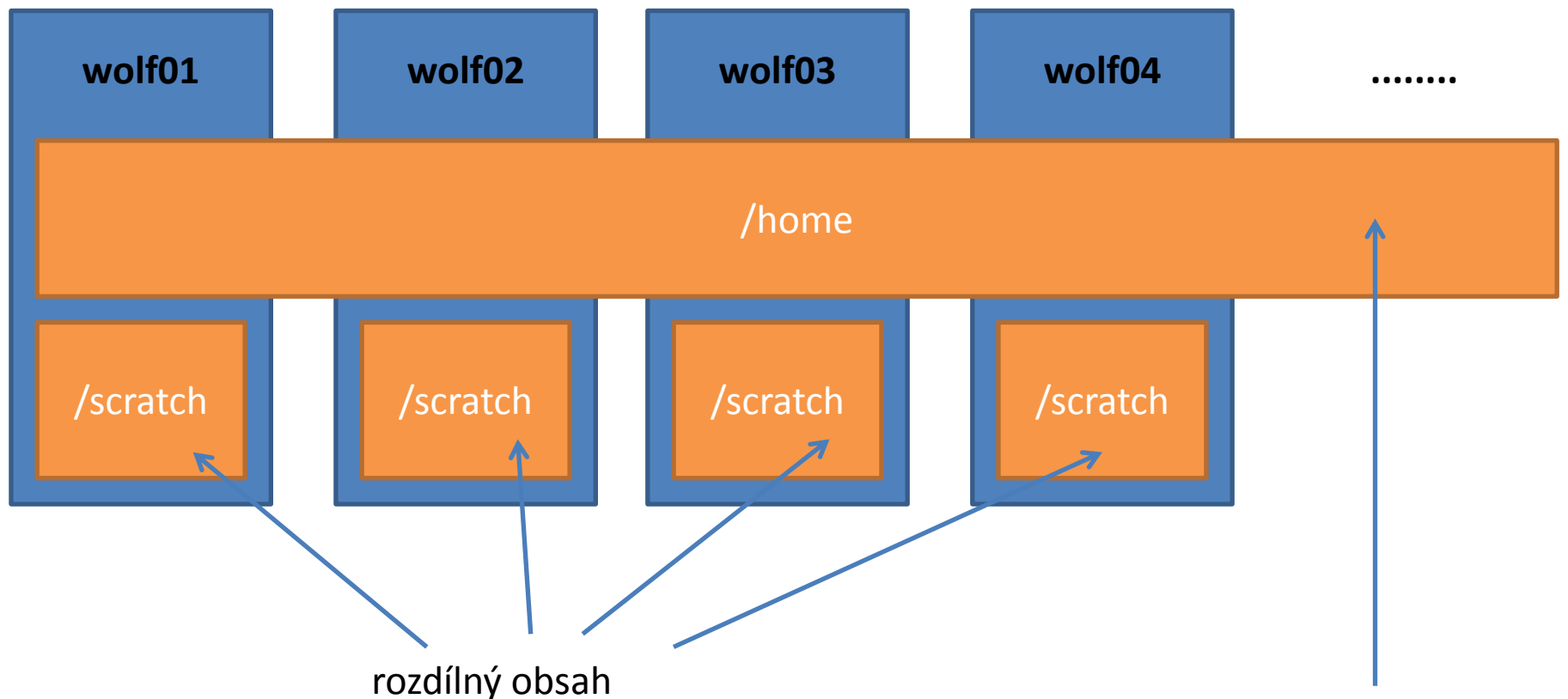
## Relativní cesty:

`Documents/domaci_ukol.txt`

`../alois/Documents`

`./muj_script`

# Souborový systém na klastru WOLF



data na svaku /scratch se **nezálohuji** a mohou být **kdykoliv smazána** bez předchozího upozornění

stejný obsah na všech uzlech klastru WOLF (data jsou zálohována)

# Příkazy - nápověda

## Manuálové stránky (aneb co dělat, když si nevím rady):

- `man` vypíše manuálovou stránku příkazu

```
$ man [section_number] topic
```

↑  
jméno příkazu, funkce, tématu, kapitoly apod.

## Dostupné sekce:

- *Section 1* user commands
- *Section 2* system calls
- *Section 3* library functions
- *Section 4* special files
- *Section 5* *file formats*
- *Section 6* games
- *Section 7* conventions and miscellany
- *Section 8* administration and privileged commands
- *Section L* math library functions
- *Section N* tcl functions

Číslo sekce je nutné udávat u témat se stejným jménem zařazených do různých sekcí.

`$ man 1 printf` manuálová stránka příkazu `printf`

`$ man 3 printf` manuálová stránka funkce `printf()` jazyka C

# Příkazy - nápověda

## *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/>

# 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