

C2110 Operační systém UNIX a základy programování

1. lekce

Začínáme

Petr Kulhánek, Jakub Štěpán

kulhanek@chemi.muni.cz

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

Obsah

➤ Zaměření předmětu

- Motivace, probírané okruhy, praktické ukázky

➤ Organizace výuky

- Harmonogram, forma výuky
- Hodnocení znalostí, zakončení předmětu

➤ Klastř WOLF

- Učebna 1.18, struktura, pravidla používání, správci

➤ Začínáme

- Místní přihlášení, standardní aplikace, příkazová řádka, vědecko-technické aplikace, desktopová prostředí, změna hesla (passwd)

Zaměření předmětu

- **Motivace**
- **Probíhané okruhy**

Motivace - superpočítání

MetaCentrum a CERIT-SC (<http://metavo.metacentrum.cz>)

- Národní gridová infrastruktura, OS Debian
- cca **11000 CPU** jader, **1100 TiB** diskové pole, **17 PiB** hierarchická úložiště

Účet může získat student libovolné vysoké školy ČR.

IT4Innovations (<http://it4i.cz>)

- Národní superpočítačové centrum, OS CentOS a Bullx
- salomon (cca 24192 CPU jader, 129TB RAM, Intel Xeon Phi MIC)
 - 40. nejvýkonnějším superpočítač na světě (TOP500)
- anselm (cca 3000 CPU jader, 15TB RAM)

O strojový čas se žádá formou grantových soutěží.

Lokální výpočetní klastry LCC

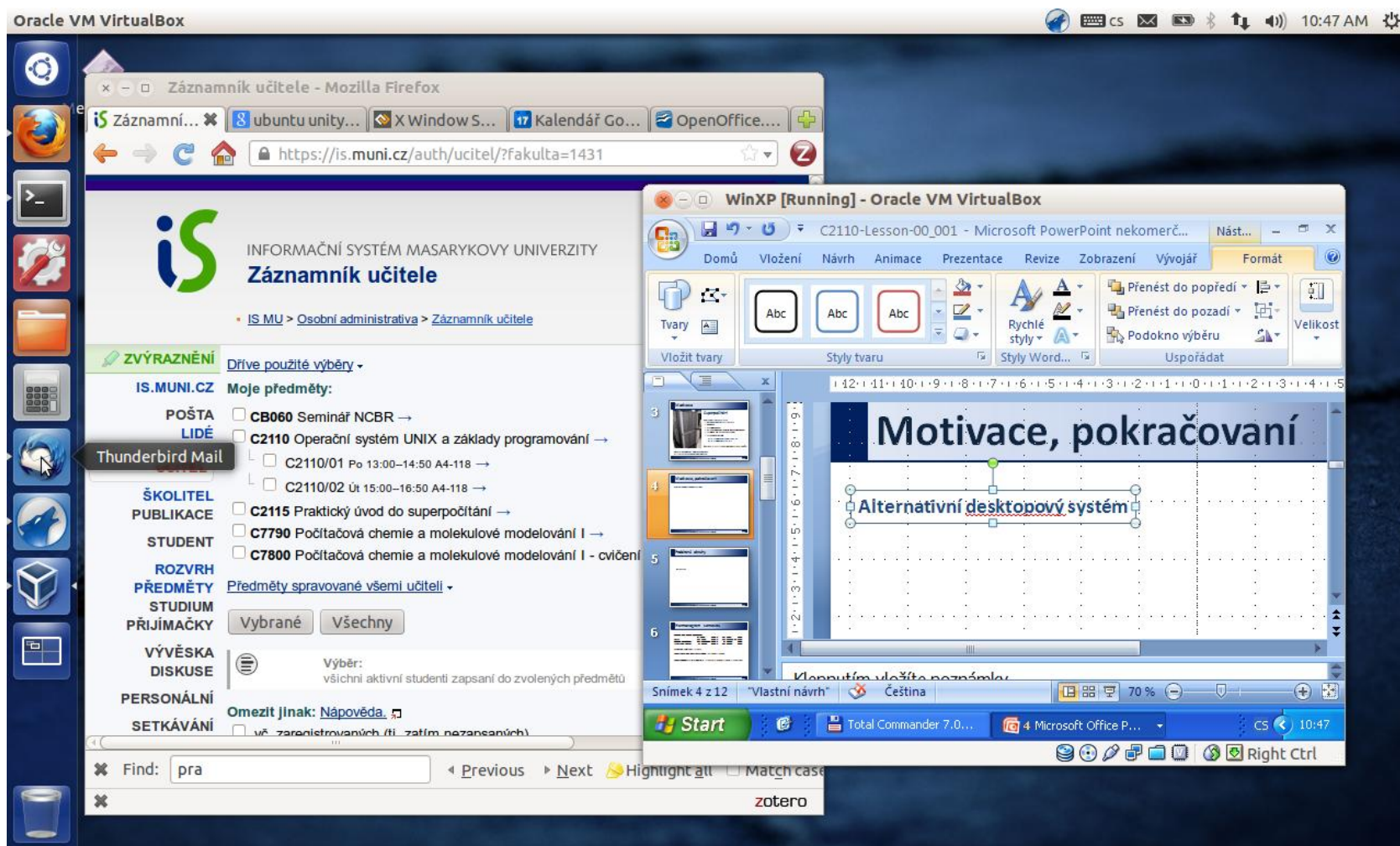
- LCC – laboratoř výpočetní chemie

Navazující předmět (podzimní semestr – bloková výuka):

C2115 Praktický úvod do superpočítání



Motivace - desktopový systém



Výhody: zadarmo, flexibilní a rozšiřitelný, možnost skriptování

Probírané okruhy

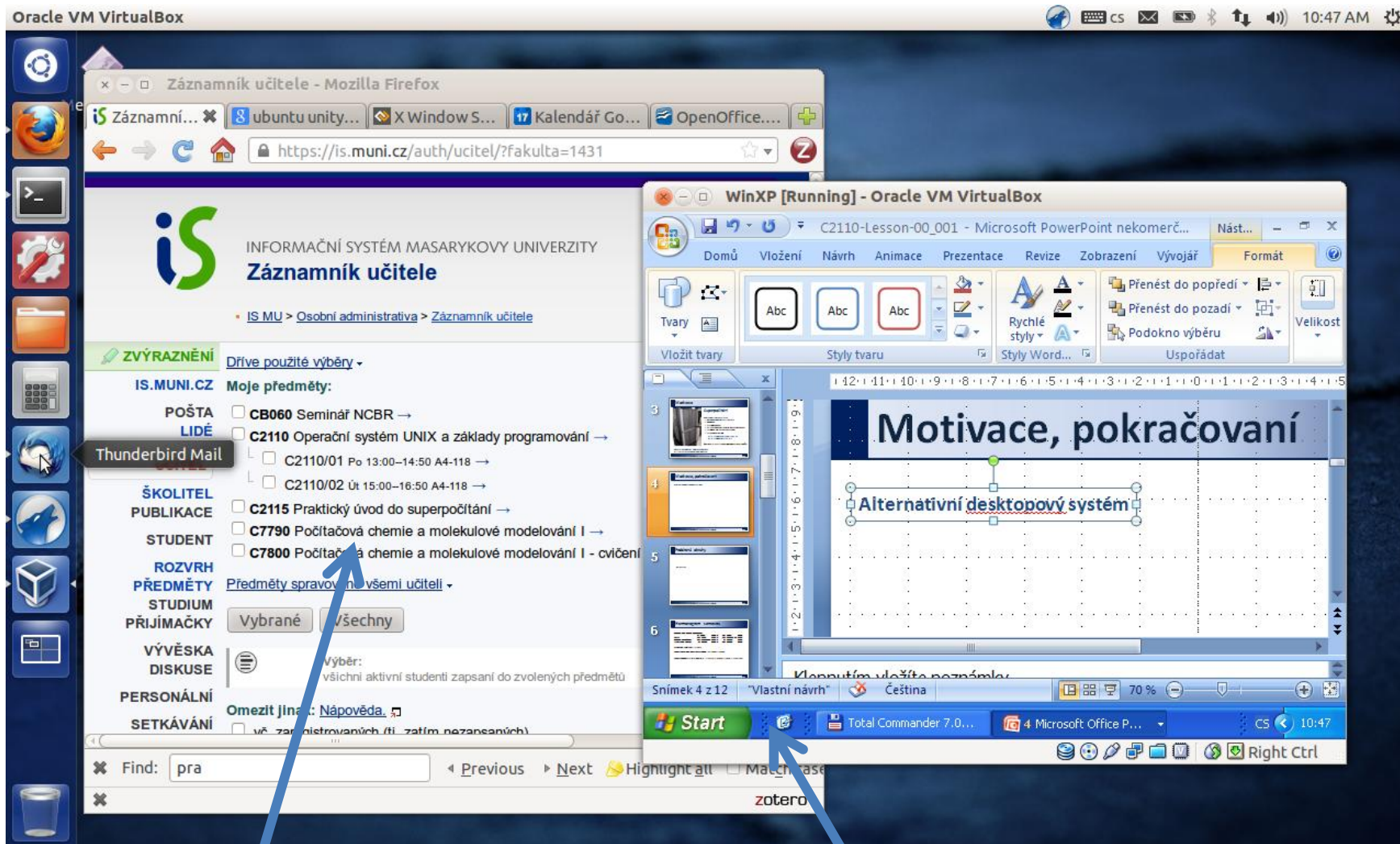
- **Základní práce s OS**
- **Virtualizace**
- **Práce s příkazovou řádkou**
- **Skriptování v jazyce**

bash

gnuplot

awk

Virtualizace



Hostitel: Ubuntu 12.04

Host: Windows XP (virtuální stroj)

Zpracování textových souborů

```
.....  
.....  
NSTEP =      6000    TIME (PS) =      206.000    TEMP (K) =      291.69    PRESS =      0.0  
Etot   =      160.8627    EKtot   =      18.5486    EPtot   =      142.3142  
BOND   =      7.2673    ANGLE  =      17.6964    DIHED   =      13.5633  
1-4 NB =      4.8403    1-4 EEL =      199.3739    VDWAALS =      1.5430  
EELEC  =     -101.9700    EHBOND =      0.0000    RESTRAINT =      0.0000  
.....  
.....
```

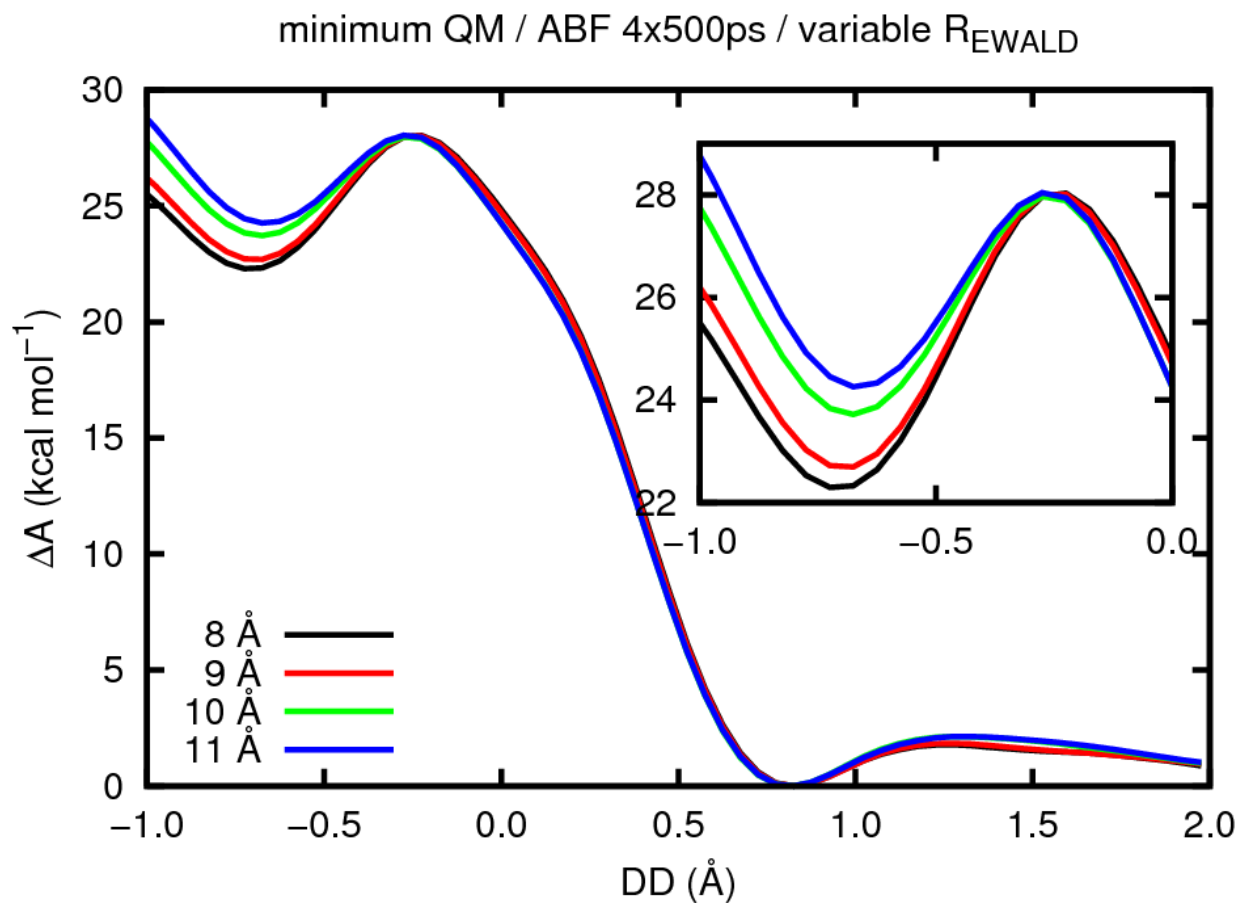
Snadná extrakce dat pomocí jazyka AWK.
(výstupy výpočetních programů)

```
.....  
.....  
206.000  291.69  
.....  
.....
```

Data: /home/kulhanek/Documents/2013/C2110_UNIX/data/rst.out

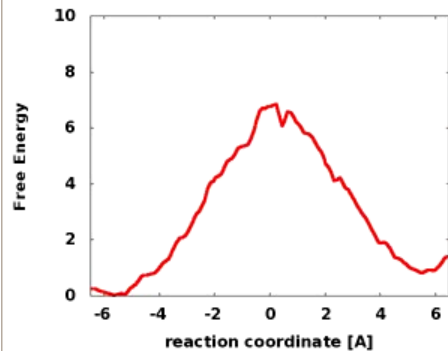
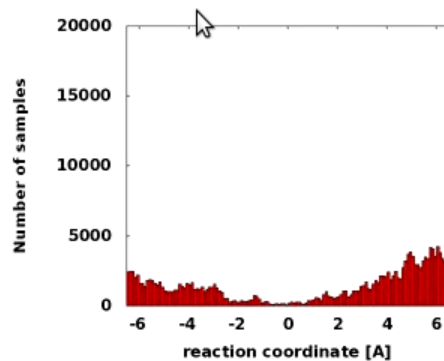
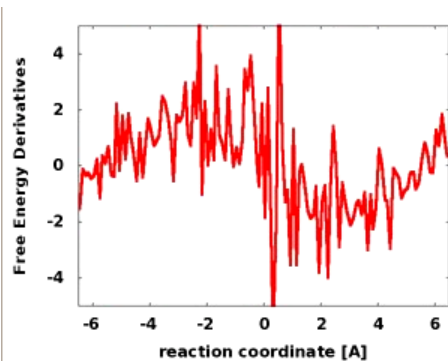
```
$ grep TIME rst.out | awk '{ print $6, $9 }'  
$ awk '/TIME/{ print $6, $9 }' rst.out
```


Vizualizace výsledků

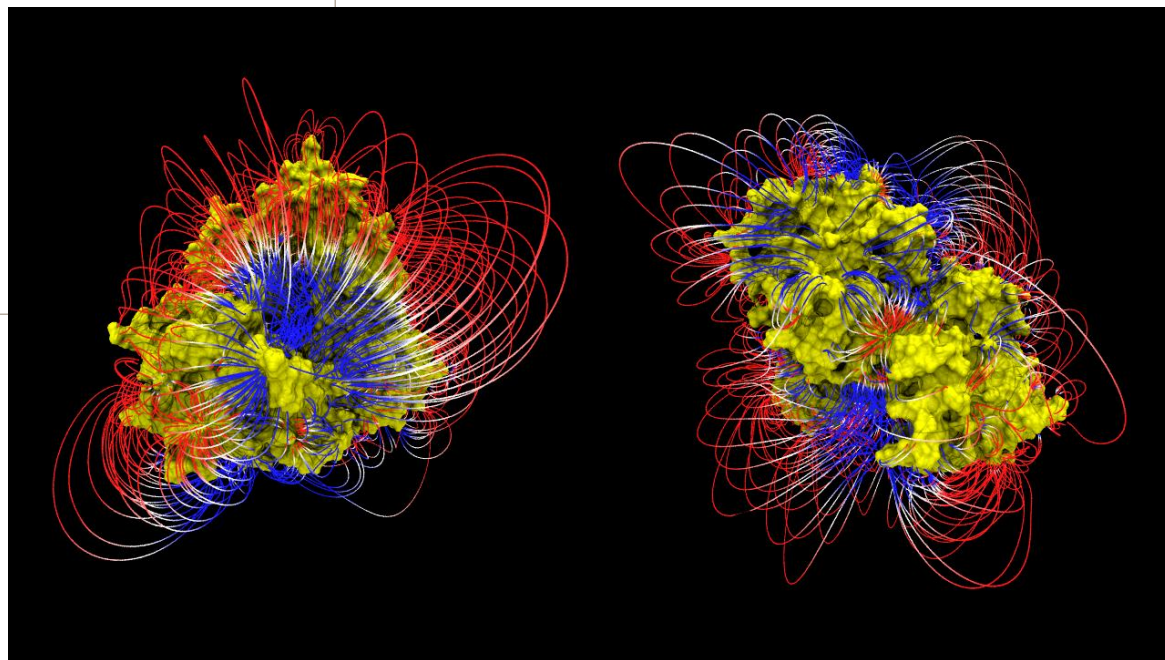


Zobrazování extrahovaných dat ve formě grafů (gnuplot).

Automatizace



Ukázat video



ABF: Petr Kulhánek

Data: /home/kulhanek/Documents/2013/C2110_UNIX/video

BsoBI: Ivo Kabelka

Organizace výuky

- Harmonogram, forma výuky
- Hodnocení znalostí, zakončení předmětu

Harmonogram, forma výuky

Výuka: 21. září 2015 - 18. prosince 2015
Zkouškové období: 4. ledna 2016 - 12. února 2016

Zakončení: kolokvium (2 kredity)

Celkový počet odpřednášených hodin: 12 x 2 hodiny = 24 hodin (-1 týden svátky)

Celková hodinová zátěž předmětu:

1 ECTS kredit -> 26 hodin studijní zátěže

2 kredity -> 2x 26 hodin = **52 hodin studijní zátěže**



Samostudium, domácí úlohy, příprava na zkoušku: 28 hodin

Dobrovolné procvičování:

odpovědníky 1x za 14 dnů, přístupný 2 týdny od zveřejnění
neomezený počet otevření a vyhodnocení
náhodně generovaná sada otázek

Povolené jsou dvě předem omluvené absence!
(buď e-mailem nebo přes informační systém)

Zakončení - hodnocení znalostí

Dva průběžné testy: (20 minut) 2x10 bodů

Zakončení :

- finální test (1 hodina) 50 bodů
- skript podle zadání (1 hodina) 30 bodů

=====

Celkem: 100 bodů

Prospěl : **>= 80 bodů**

Můžete používat veškeré studijní materiály, libovolné knihy a internet. Při psaní testu i vytváření skriptu bude smět používat počítač, můžete použít skripty z cvičení či z domácích úloh. Nesmíte však spolupracovat s jinými lidmi (facebook, mobil, apod).

Klaster WOLF

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

Učebna 1.18



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

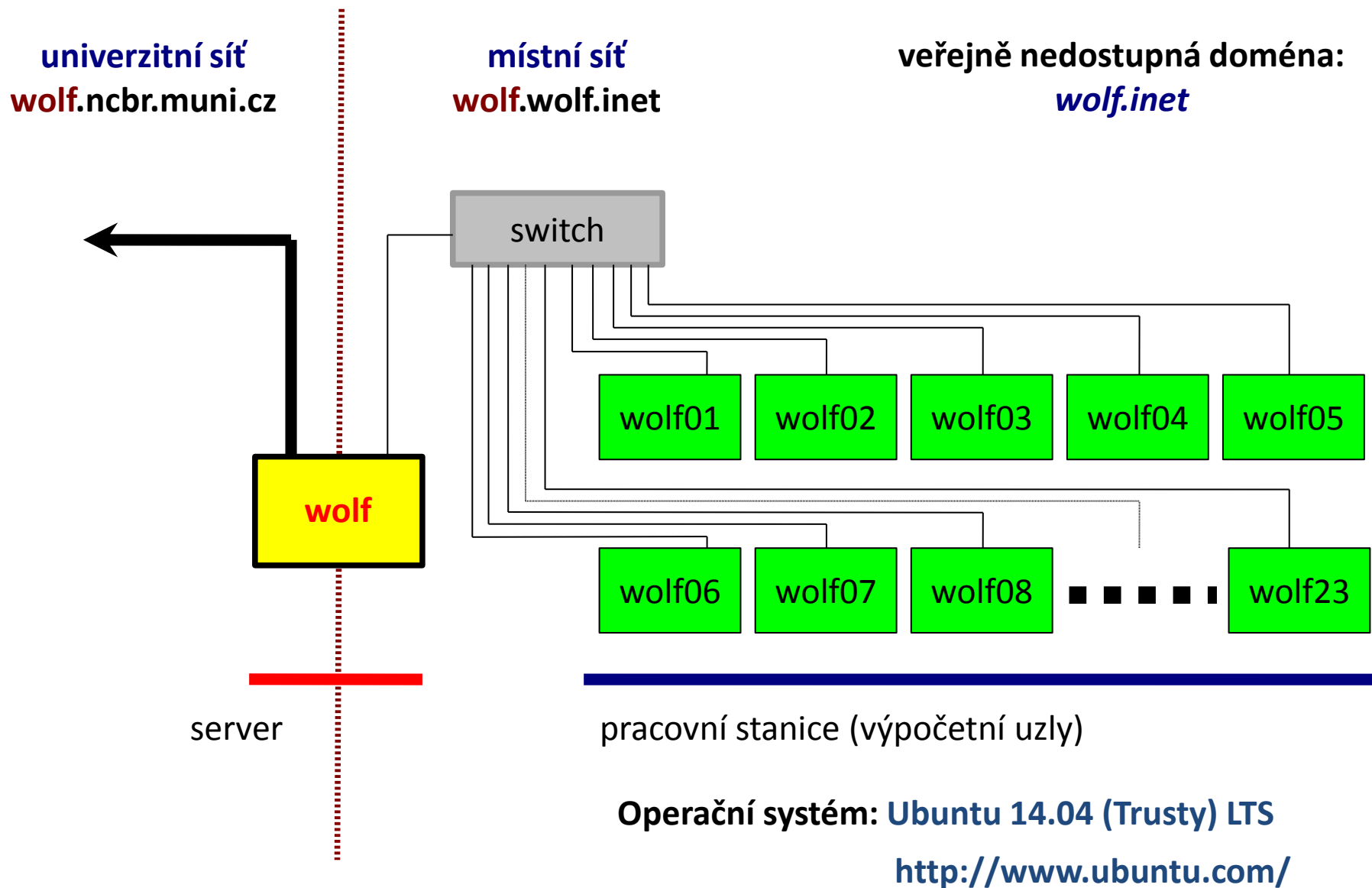
Bezpečnost práce!

Základní informace:

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

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

Struktura klastru WOLF



pracovní stanice (výpočetní uzly)

Operační systém: **Ubuntu 14.04 (Trusty) 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_6-2011.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

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):

Jakub Štěpán (Petr Kulhánek)

Začínáme

- **Místní přihlášení**
- **Standardní aplikace**
- **Příkazová řádka**
- **Vědecko-technické aplikace**
- **Desktopová prostředí**
- **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** (username) a **heslo** (password)

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

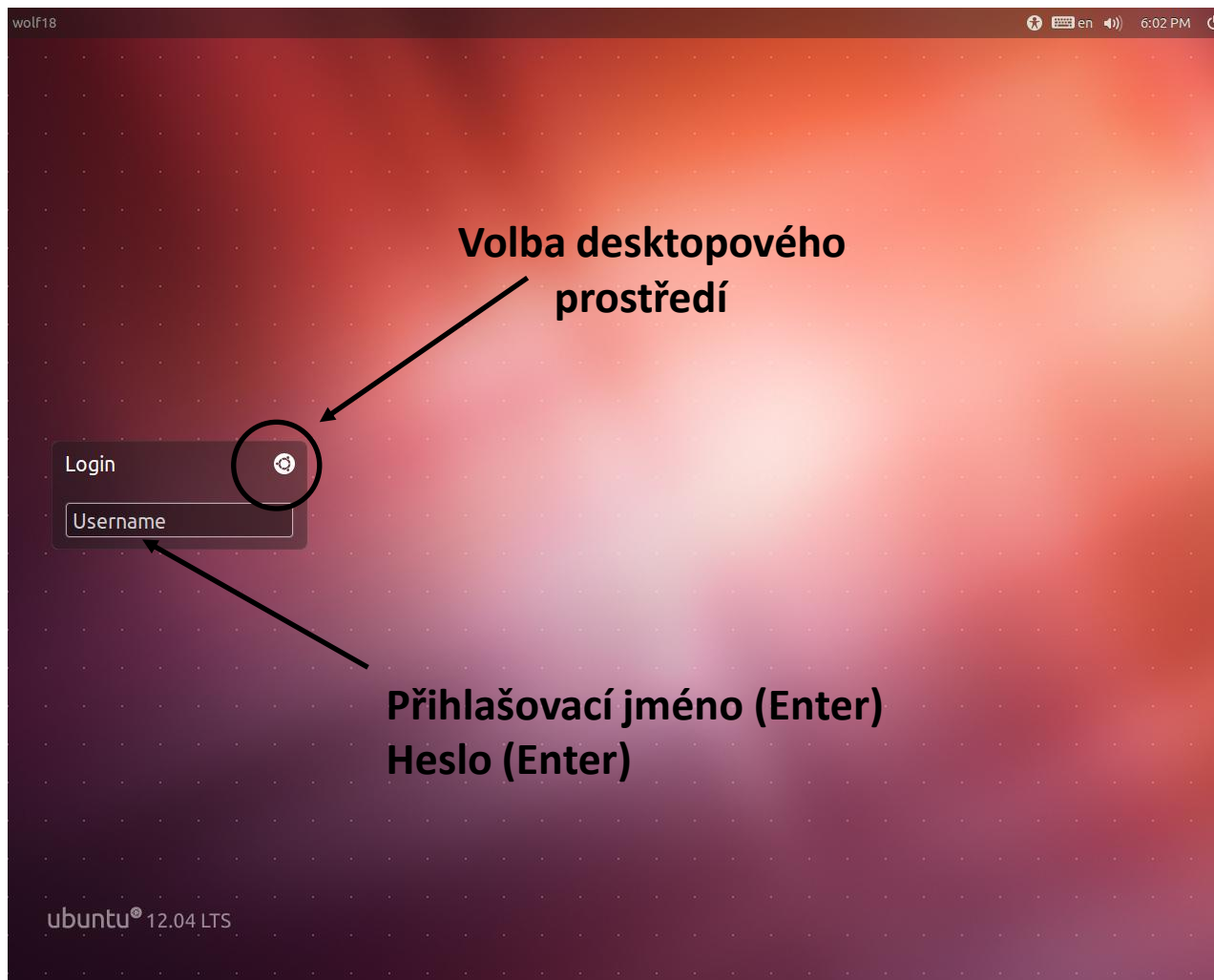
Textový terminál (F1-F6):

- zpřístupňuje příkazovou řádku (CLI – command line interface)
- výchozím adresářem je **/home/username** (domovský adresář)
- 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, Unity, GNOME, atd.)
- okenního správce (desktopové prostředí) **lze zvolit před** vlastním přihlášením
- umožňuje přímé spouštění grafických programů (GUI – graphical user interface)
- příkazová řádka je dostupná pomocí speciálních aplikací
 - xterm
 - **konsole**
 - **gnome-terminal**
- odhlášení **pomocí nabídky v menu** okenního správce

Přihlášení – LightDM X manager



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

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

Cvičení

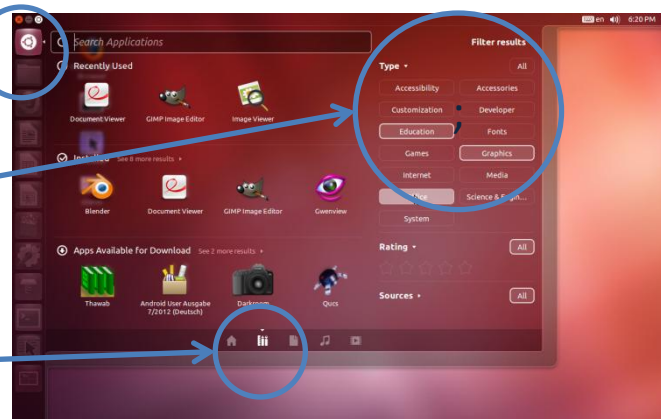
1. Přihlaste se do desktopového prostředí Unity (volba Ubuntu v menu volby prostředí).
2. Přihlaste se do textového terminálu číslo 3.
3. Zadejte v něm příkaz **ls**. Odhadněte co příkaz dělá.
4. Odhlaste se z textového terminálu a vraťte se zpět do grafického terminálu.
5. Otevřete webový prohlížeč a v něm portál klastru WOLF. Přihlaste se do vnitřní části. Zobrazte obsazení klastru.
6. Přihlaste se do ISu a otevřete si tuto prezentaci ze Studijních materiálů.

Standardní aplikace

Hlavní menu

Filtrování výsledků

Podskupina menu



Firefox

firefox

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



jméno příkazu, který spouští aplikaci

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**
- **xterm**

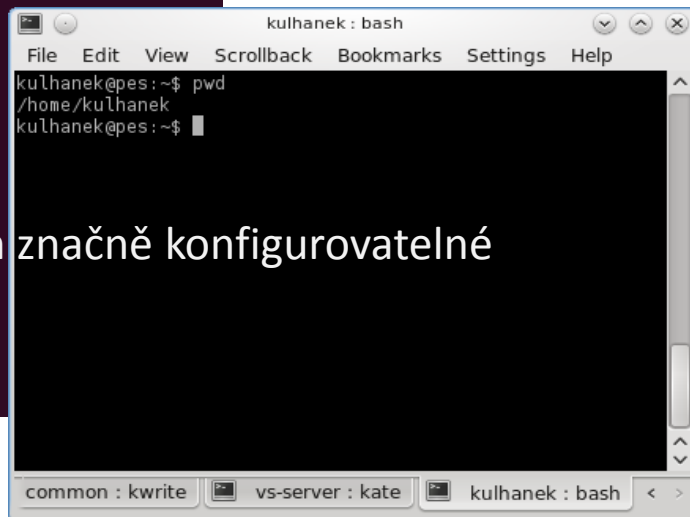
Výchozím adresářem je: **/home/username**

gnome-terminal

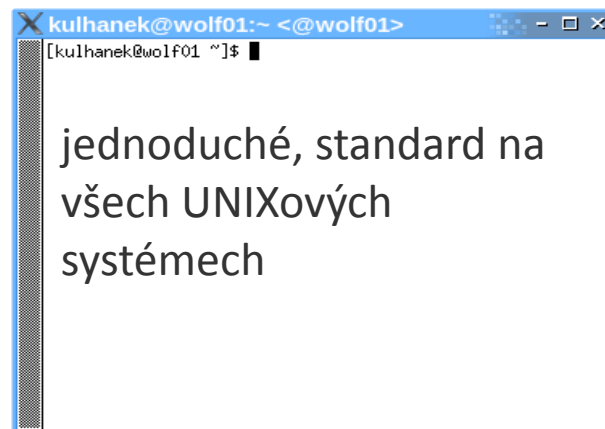


jednoduché, přitom značně konfigurovatelné

konsole



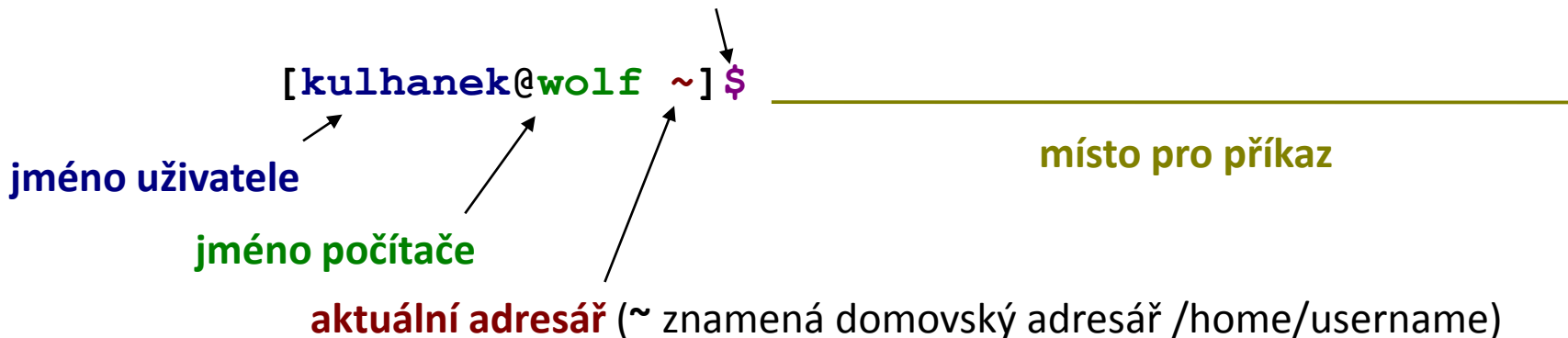
xterm



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.

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`

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

Přehled dostupných verzí aplikace:

`$ module versions vmd`

číslo verze se od jména modulu odděluje dvojtečkou

Aktivace aplikace:

`$ module add vmd`

`$ module add vmd:1.9.0`

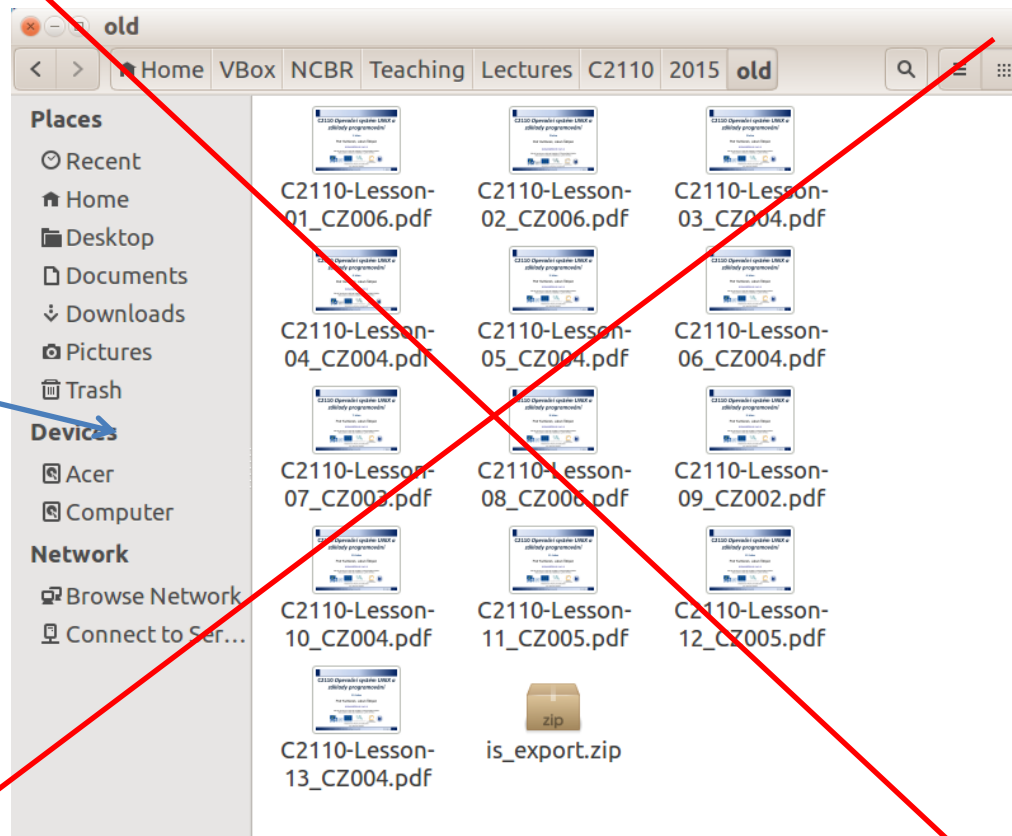
Spuštění aplikace z modulu vmd

`$ vmd`

aktivuje výchozí verzi modulu

jméno modulu a aplikace nemusí být obecně stejné

Správce souborů



!!!! nepoužívat !!!!

V superpočítačových centrech nejsou většinou grafické rozhraní dostupná.

Během cvičení, pokud není řečeno jinak, použijte výhradně příkazovou řádku.

Těžko na cvičišti – lehký na bojišti.

Cvičení

1. Spusťte program **Gimp** pomocí menu prostředí Unity. V programu nakreslete domeček jedním tahem. Vzniklé trojúhelníky vyplňte různými barvami.
2. Spusťte program **Inkscape** z příkazové řádky. V programu nakreslete vlajku české republiky. Zkuste odhadnout principiální rozdíl mezi oběma programy.
3. Spusťte program **nemesis** z modulu **nemesis**. V programu namodelujte molekulu kyseliny octové a proveďte optimalizaci její geometrie.
4. Spusťte program **LibreOffice**. V tabulkovém kalkulátoru zobrazte průběh funkce sinus v rozsahu 0 až 360°.

Více v C2150 Zpracování informací a vizualizace v chemii

Závěr

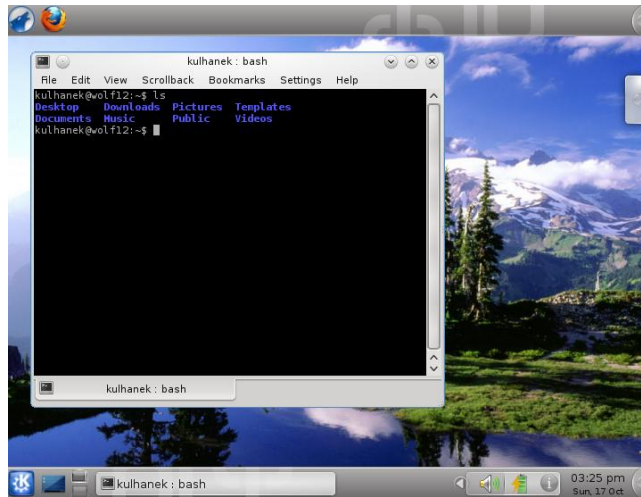
Závěr

- Ubuntu je **moderní desktopové prostředí** (platí i pro jiné distribuce postavené na OS unixového typu)
- Ubuntu **obsahuje alternativy standardních aplikací** od kancelářských balíčků (Writer, Calc, Impress) přes programy pro vytváření vektorové (Inkscape) či rastrové (Gimp) grafiky až po programy pro zobrazování webových stránek (Firefox)
- Má nativní podporu pro **práci s příkazovou řádkou**

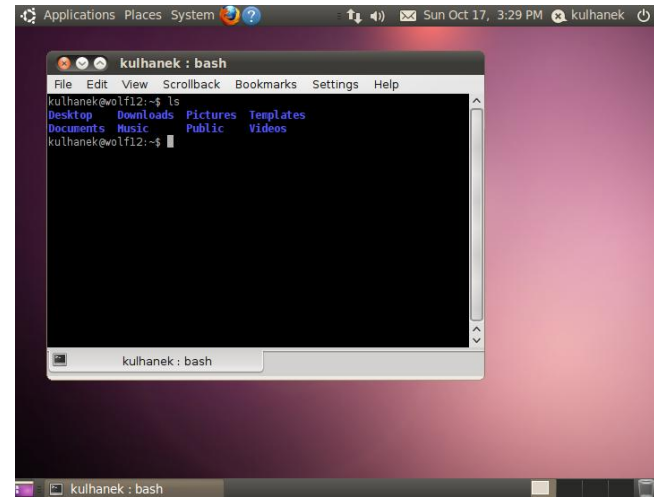
Desktopová prostředí



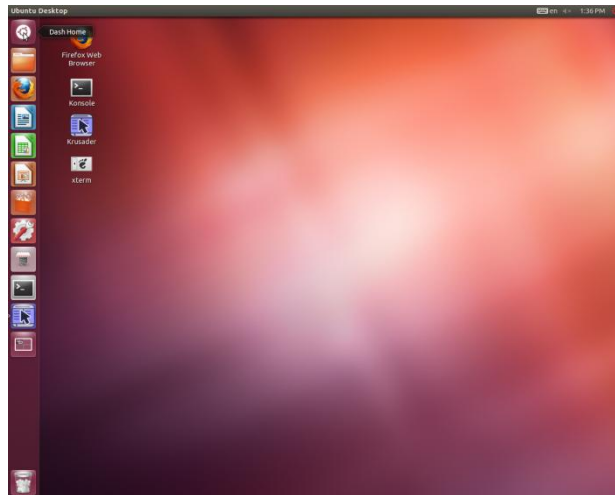
Desktopová prostředí



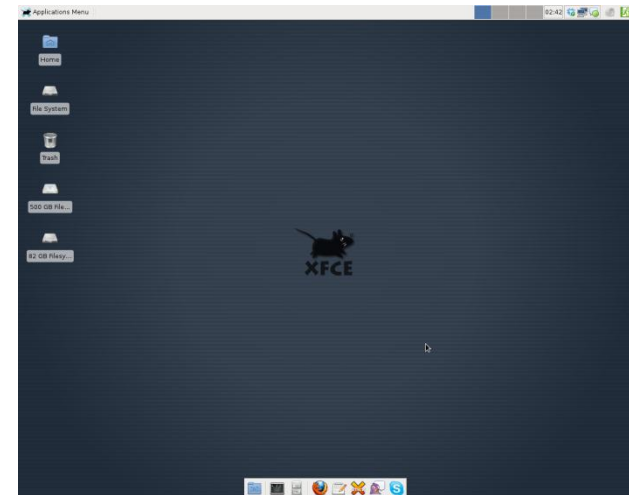
KDE



GNOME



Unity (v menu volba Ubuntu)



Xfce

Domácí úkol

1. Postupně se přihlaste do jednotlivých desktopových prostředí, které jsou dostupné na pracovních stanicích klastru WOLF.
2. V případě, že si vyberete pro práci jiné desktopové prostředí než Unity, se s ním dobře seznámte.
3. Nainstalujte si do používaného desktopového prostředí českou klávesnici, pokud jste ji navyklí používat.

Změna hesla

- Příkaz passwd
- Reset hesla



Změna/reset hesla

K změně hesla slouží příkaz **passwd**. Používá se tehdy pokud chcete heslo změnit z **preventivních důvodů** nebo kvůli jeho **kompromitaci**.

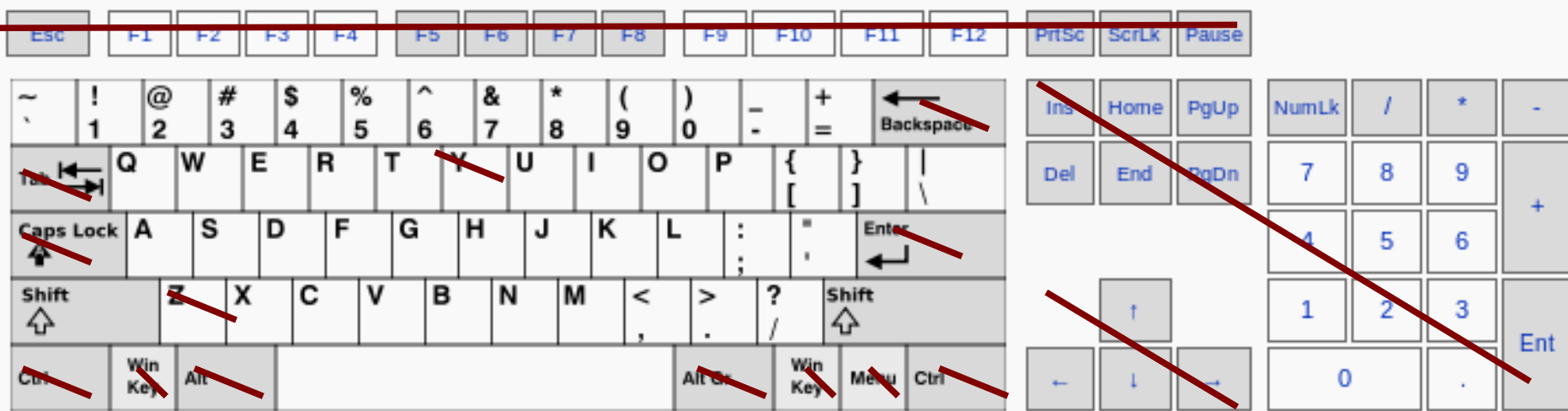
Pokud heslo zcela **zapomenete**, je možné požádat o jeho **reset** ve službě **Správa účtů** na portále: <http://wolf.ncbr.muni.cz>

Žádost vyžaduje schválení od správce NCBR účtů.

Úspěšná změna hesla či jeho reset se projeví na **všech počítačích** klastru WOLF včetně webového portálu.

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** (slouží jako ochrana před neautorizovanou změnou hesla) a poté na **heslo nové**. Nové heslo se je nutné zadat dvakrát, aby se omezily možné překlepy.
- 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:
```

**při psaní hesel se nezobrazují
žádné znaky**



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:~$
```

