

# ***C2110 Operační systém UNIX a základy programování***

**1. lekce**

**Začínáme**

**Petr Kulhánek**

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

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

- **Zaměření předmětu**
  - Motivace, probírané okruhy, praktické ukázky
- **Organizace výuky**
  - Harmonogram, forma výuky
  - Hodnocení znalostí, zakončení předmětu
- **Klastr WOLF**
  - Učebna 1.18, struktura, pravidla používání, správci
- **Začínáme**
  - Místní přihlášení, standardní aplikace, příkazová řádka, vědecko-technické aplikace, desktopová prostředí

# 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

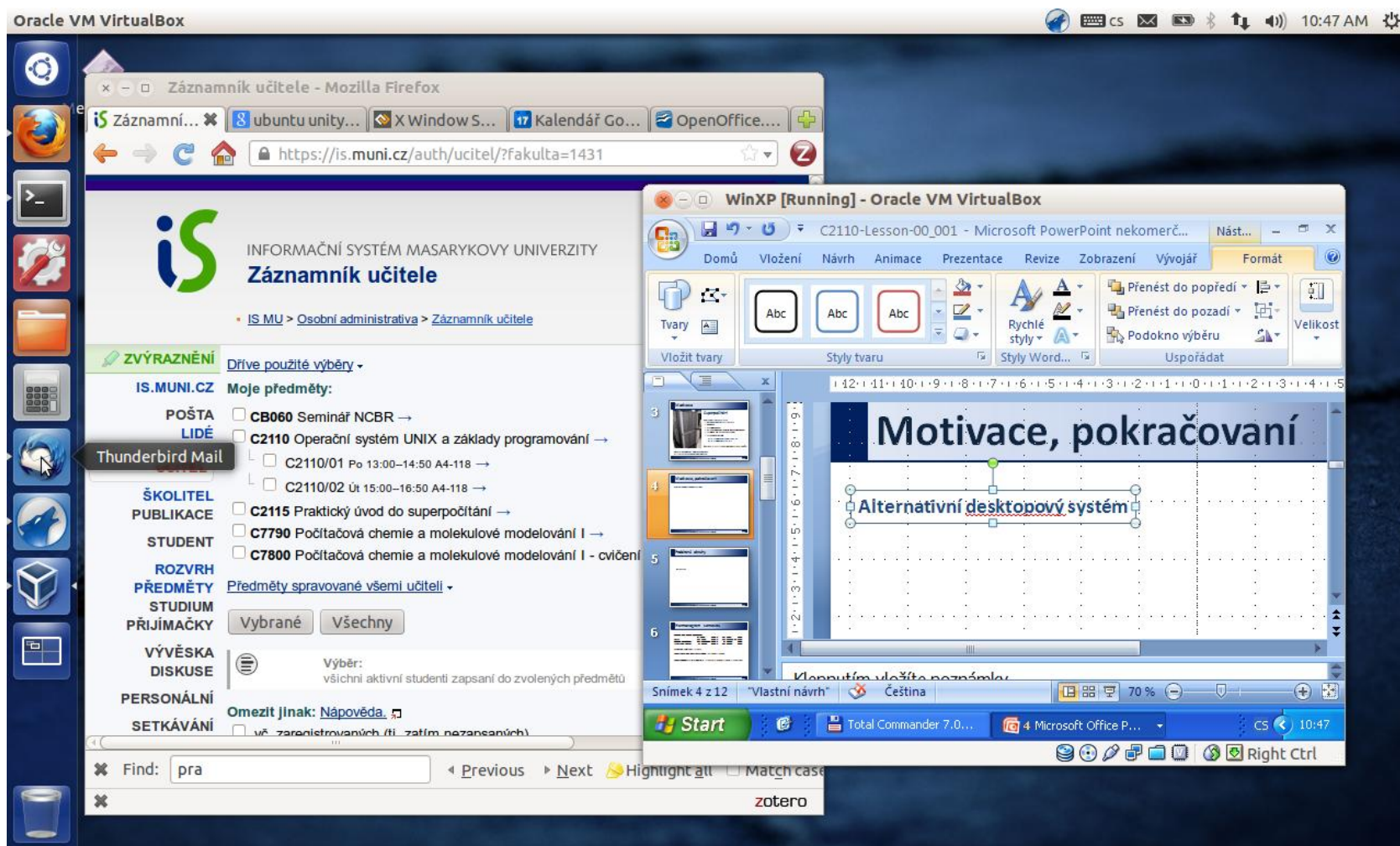
- LCC – laboratoř výpočetní chemie

## 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**

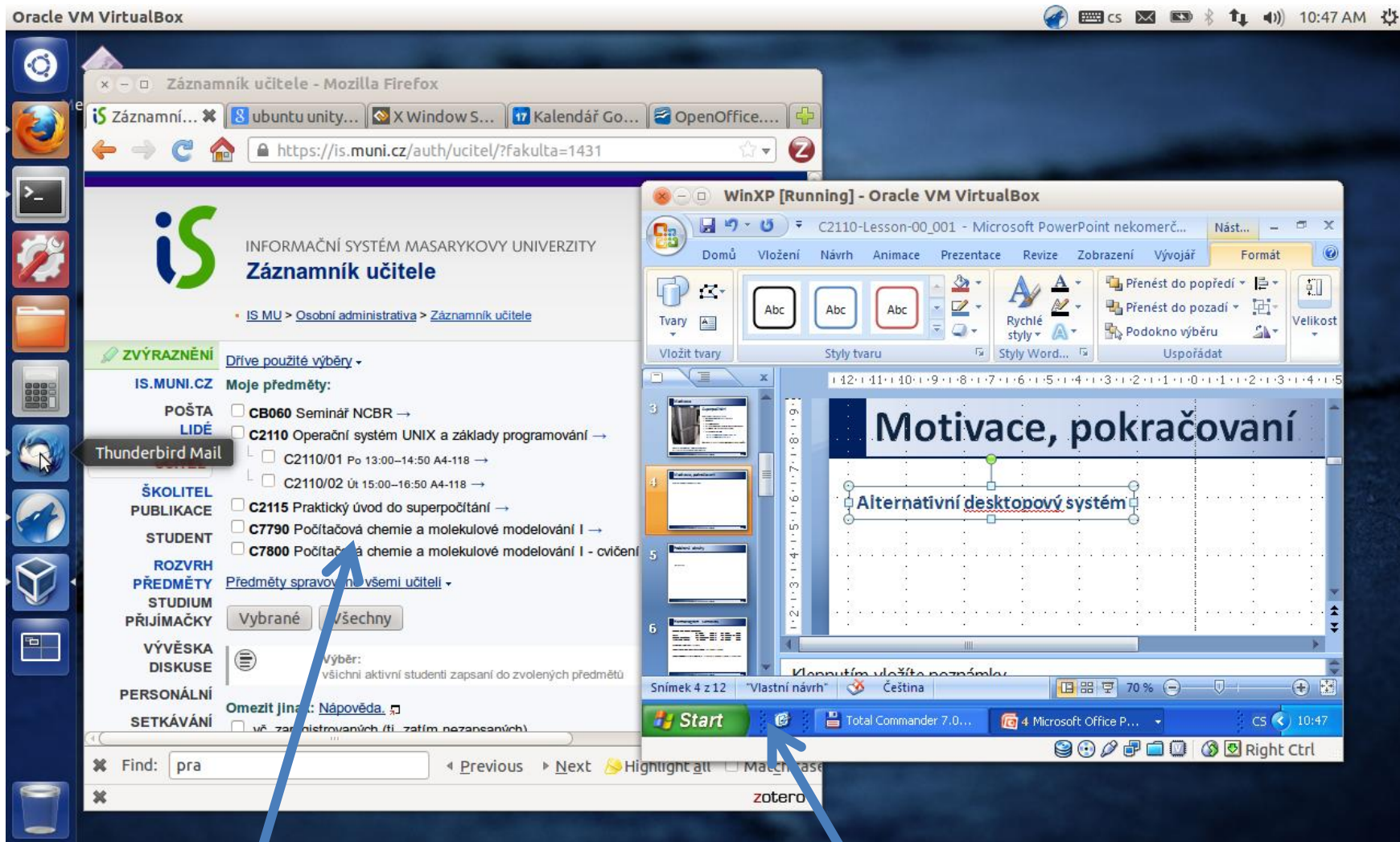
bash

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)

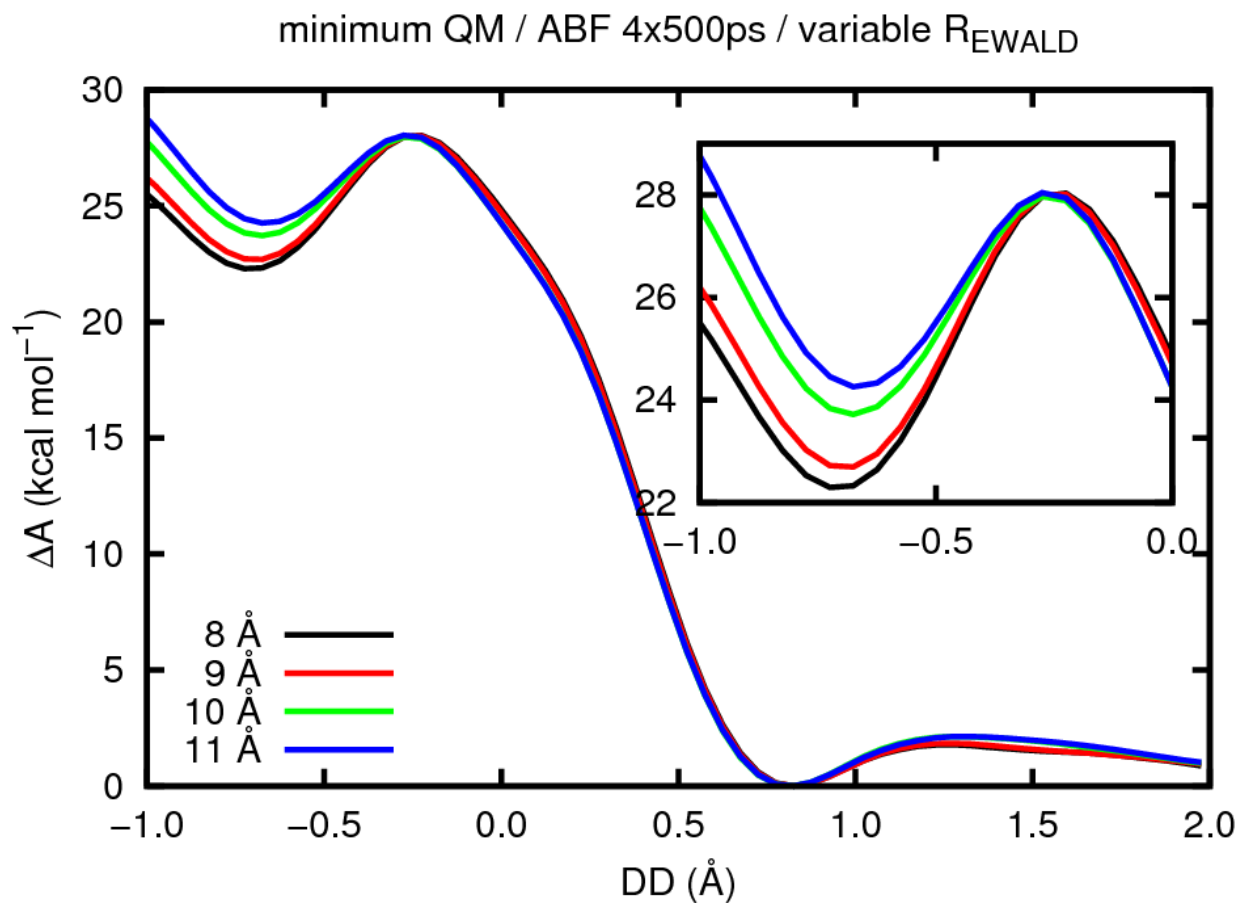
```
.....  
.....  
206.000  291.69  
.....  
.....
```

**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
```

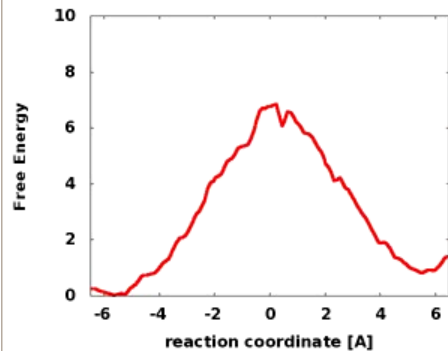
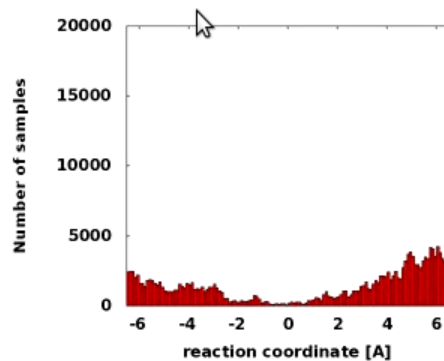
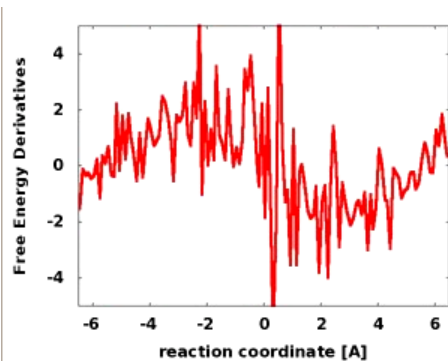


# Vizualizace výsledků

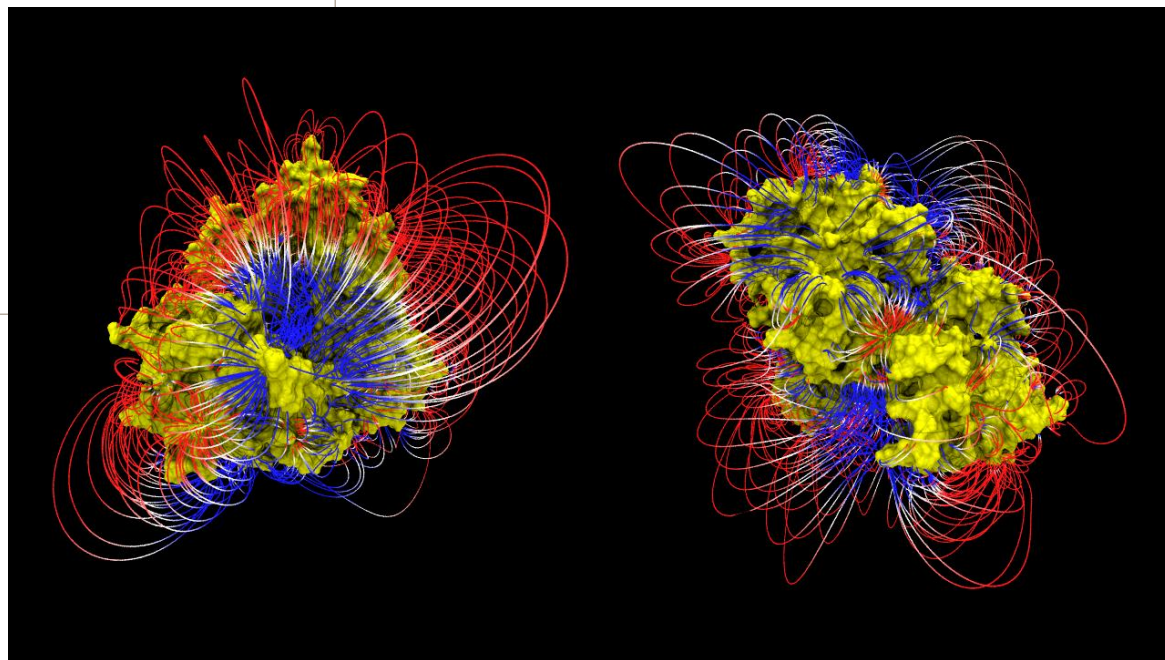


Zobrazování extrahovaných dat ve formě grafů (gnuplot).

# 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:** 19. září 2016 - 21. prosince 2016  
**Zkouškové období:** 2. ledna 2017 - 10. února 2017

**Zakončení:** kolokvium (2 kredity)

**Celkový počet odpřednášených hodin:** 13 x 2 hodiny = 26 hodin

**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: 26 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!**

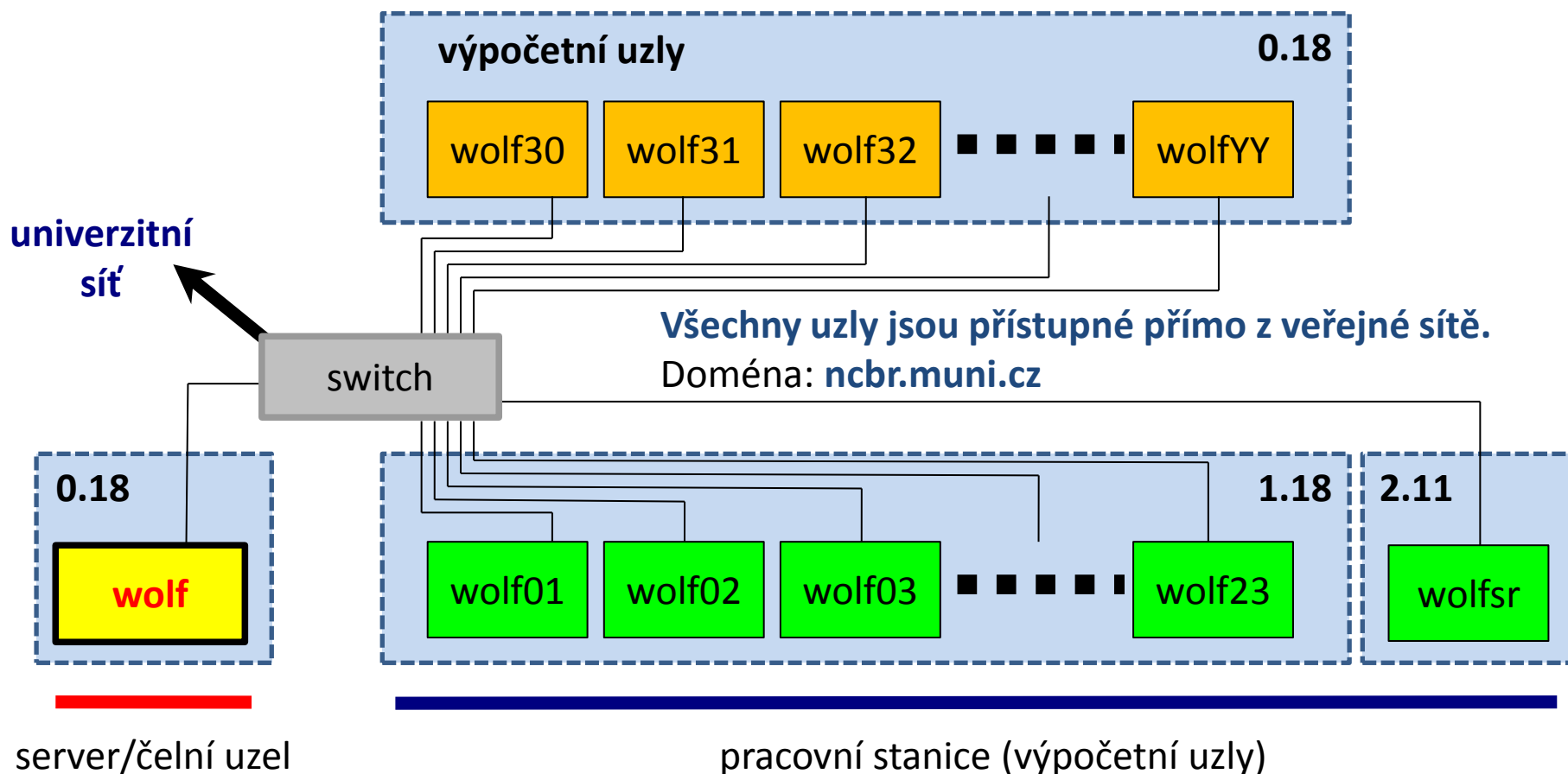
Základní informace:

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

Učebna je volně přístupná studentům, kteří pracují na projektech v NCBR, a dále studentům, kterým v daném semestru v učebně probíhá výuka.



# Struktura klastru WOLF



## Místnosti:

- 0.18 Serverovna A4/UKB
- 1.18 Počítačová učebna A4/UKB
- 2.11 Seminární místnost A4/UKB

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](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!**

# 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 – 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)

# 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

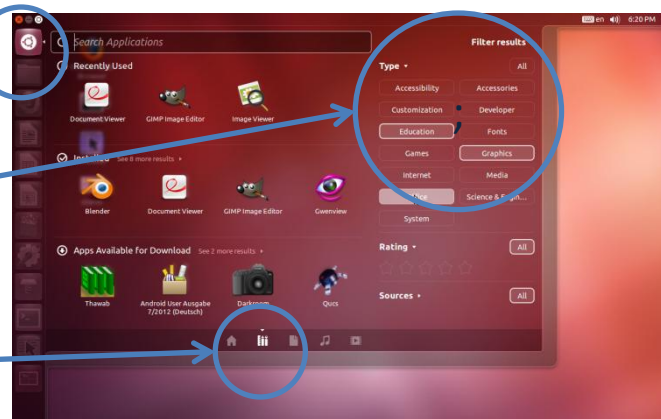
1. Přihlaste se do desktopového prostředí Unity (volba Ubuntu v menu volby prostředí).
2. Přihlaste se do textového terminálu číslo 3.
3. Zadejte v něm příkaz **ls**. Odhadněte co příkaz dělá.
4. Odhlaste se z textového terminálu a vraťte se zpět do grafického terminálu.
5. Otevřete webový prohlížeč 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**

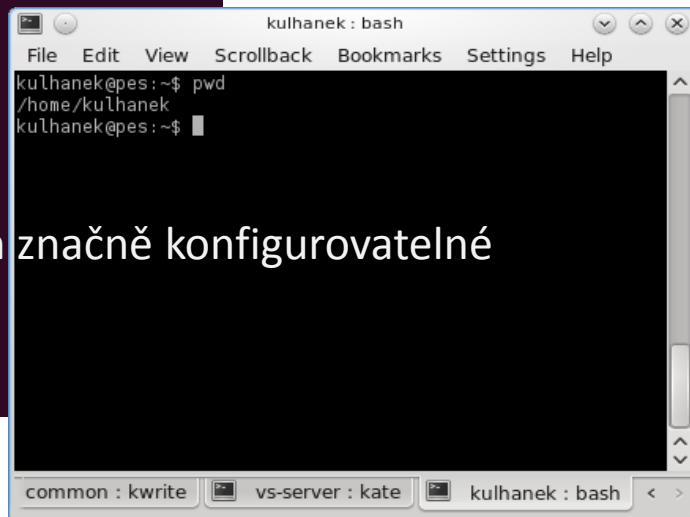
Výchozím adresářem je: **/home/username**

## gnome-terminal

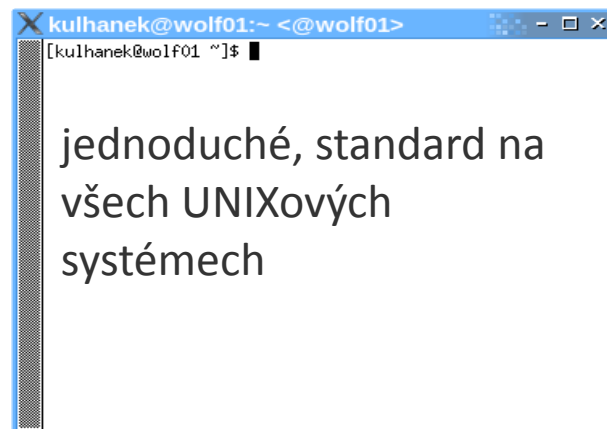


jednoduché, přitom značně konfigurovatelné

## konsole



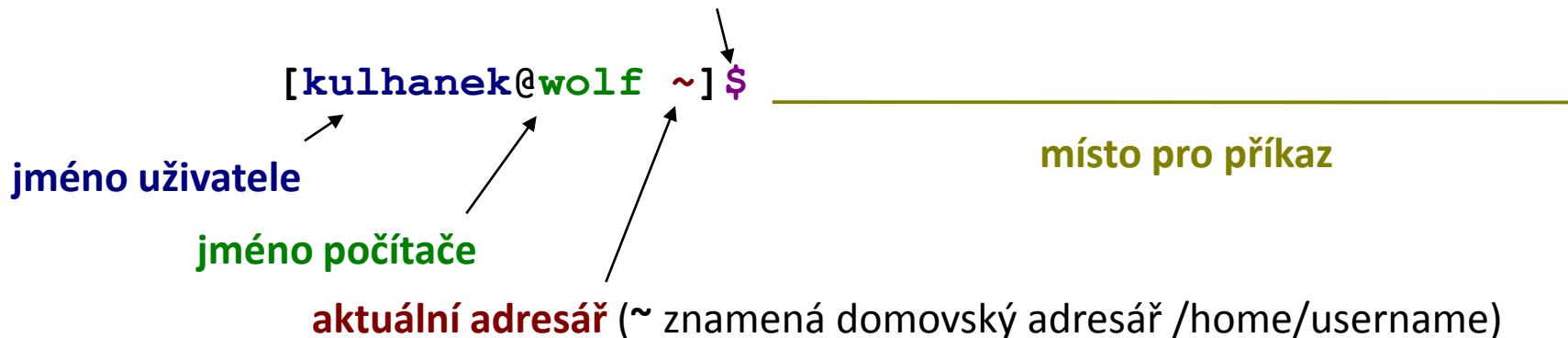
## xterm



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`

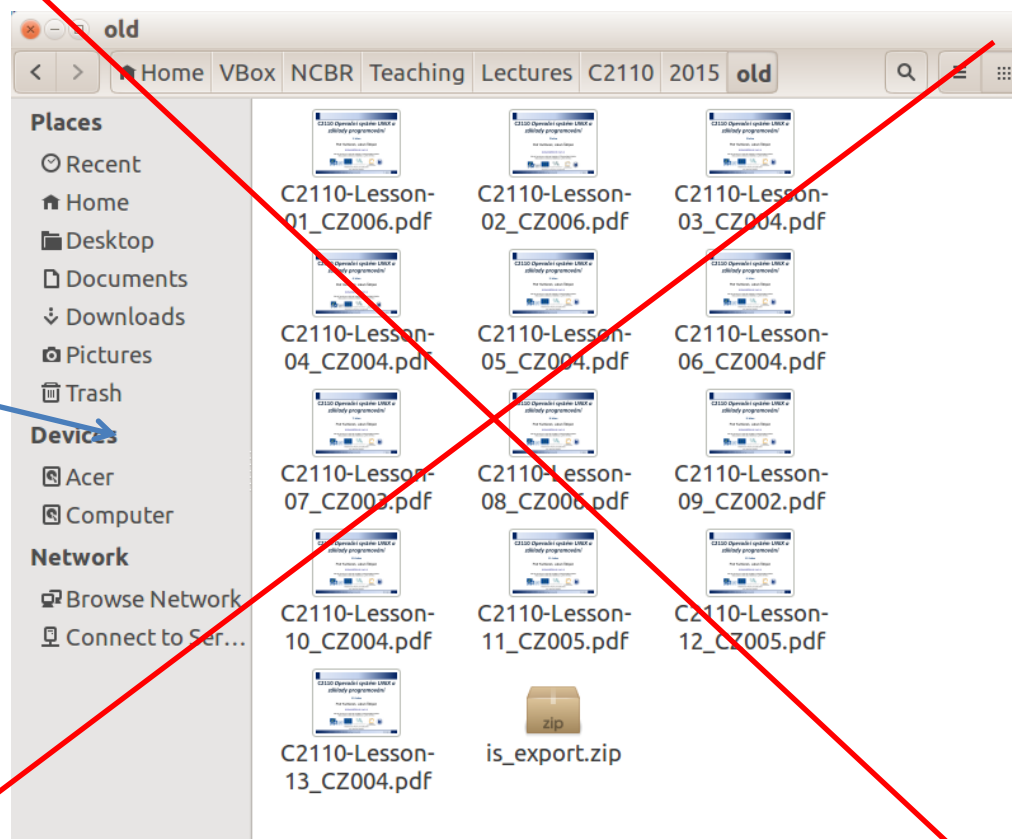
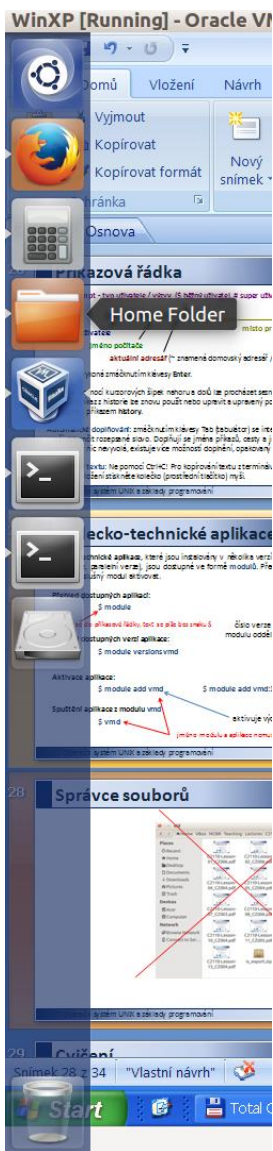
## Spuštění aplikace z modulu vmd

`$ 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

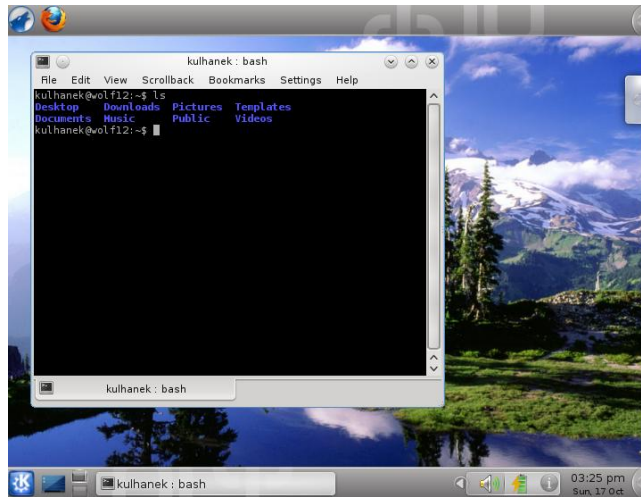
- Ubuntu je **moderní desktopové prostředí** (platí i pro jiné distribuce postavené na OS unixového typu)
- Ubuntu **obsahuje alternativy standardních aplikací** od kancelářských balíčků (Writer, Calc, Impress) přes programy pro vytváření vektorové (Inkscape) či rastrové (Gimp) grafiky až po programy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

# Desktopová prostředí

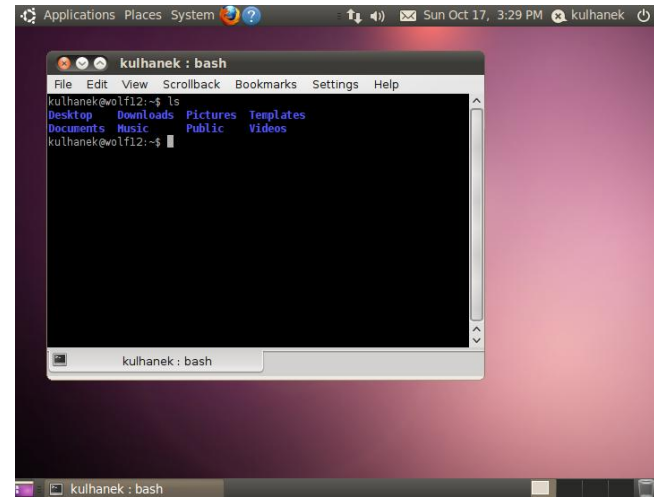
---



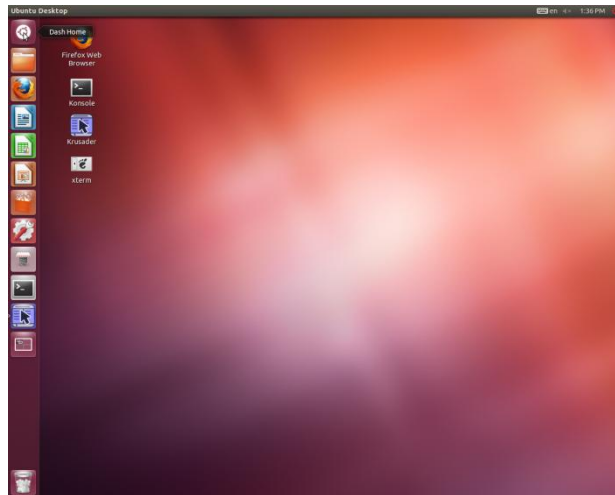
# Desktopová prostředí



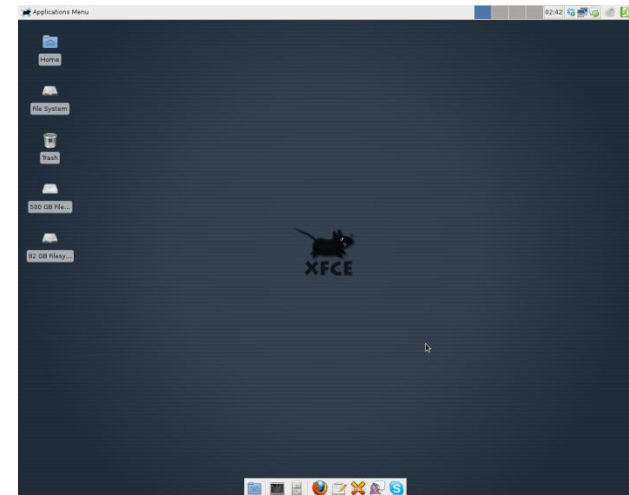
**KDE**



**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.

# Poděkování

**Na přípravě kurzu se podíleli:**

Zora Střelcová, Jakub Štěpán, Tomáš Trnka, Tomáš Bouchal, Pavel Janoš

