

C2110 Operační systém UNIX a základy programování

1. lekce

Začínáme

Petr Kulhánek

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, změna hesla, desktopová prostředí

Zaměření předmětu

- **Motivace**
- **Probíhané okruhy**

Motivace - superpočítání

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

Stav v roce 2016

- 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, **139. místo 06/2018**)
- anselm (cca 3000 CPU jader, 15TB RAM)

O strojový čas se žádá formou grantových soutěží.

Lokální výpočetní klastry LCC

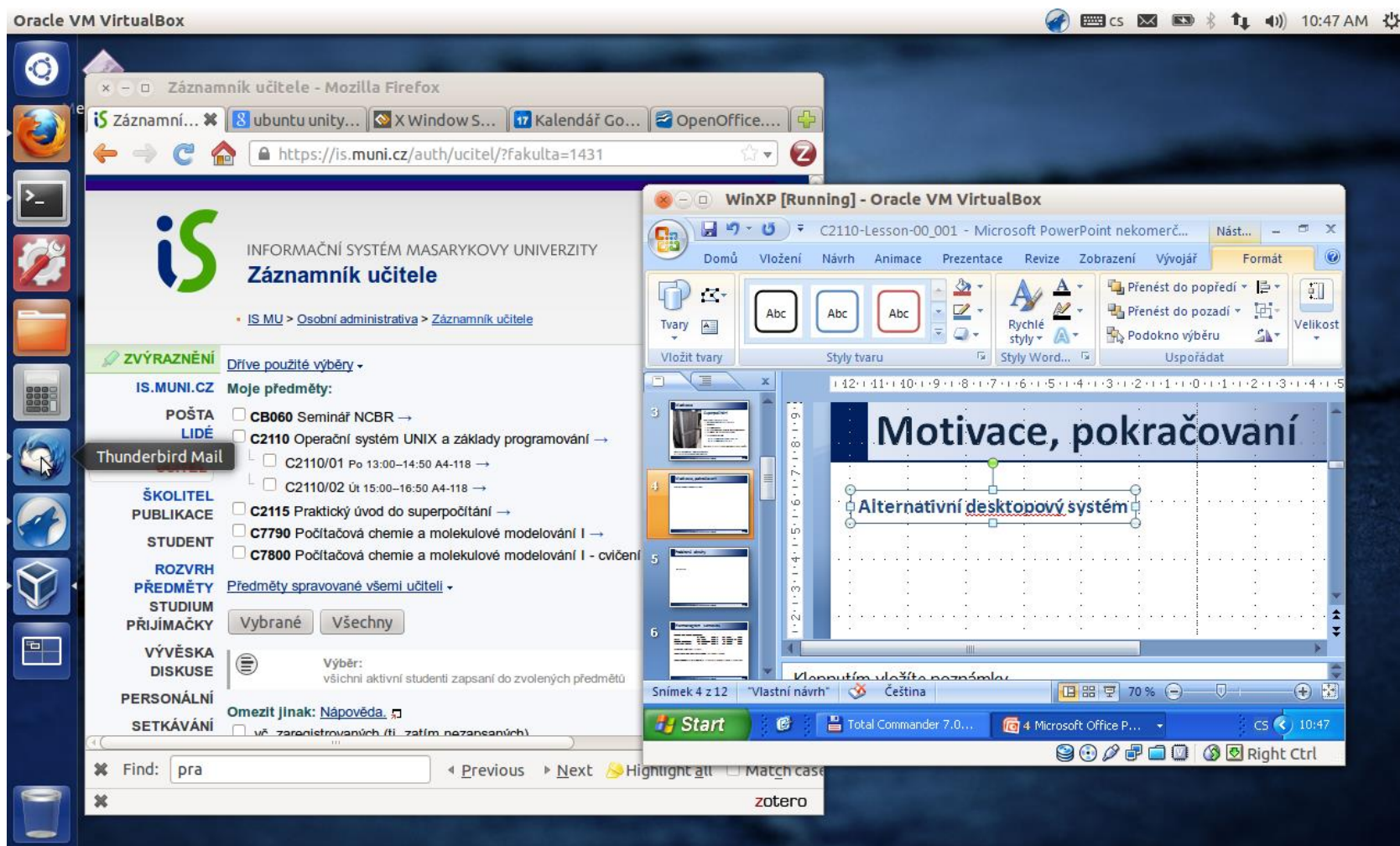
- LCC – laboratoř výpočetní chemie

Navazující předmět (podzimní semestr – bloková výuka):

C2115 Praktický úvod do superpočítání



Motivace - desktopový systém



Výhody: zadarmo, flexibilní a rozšiřitelný, možnost skriptování

Probírané okruhy

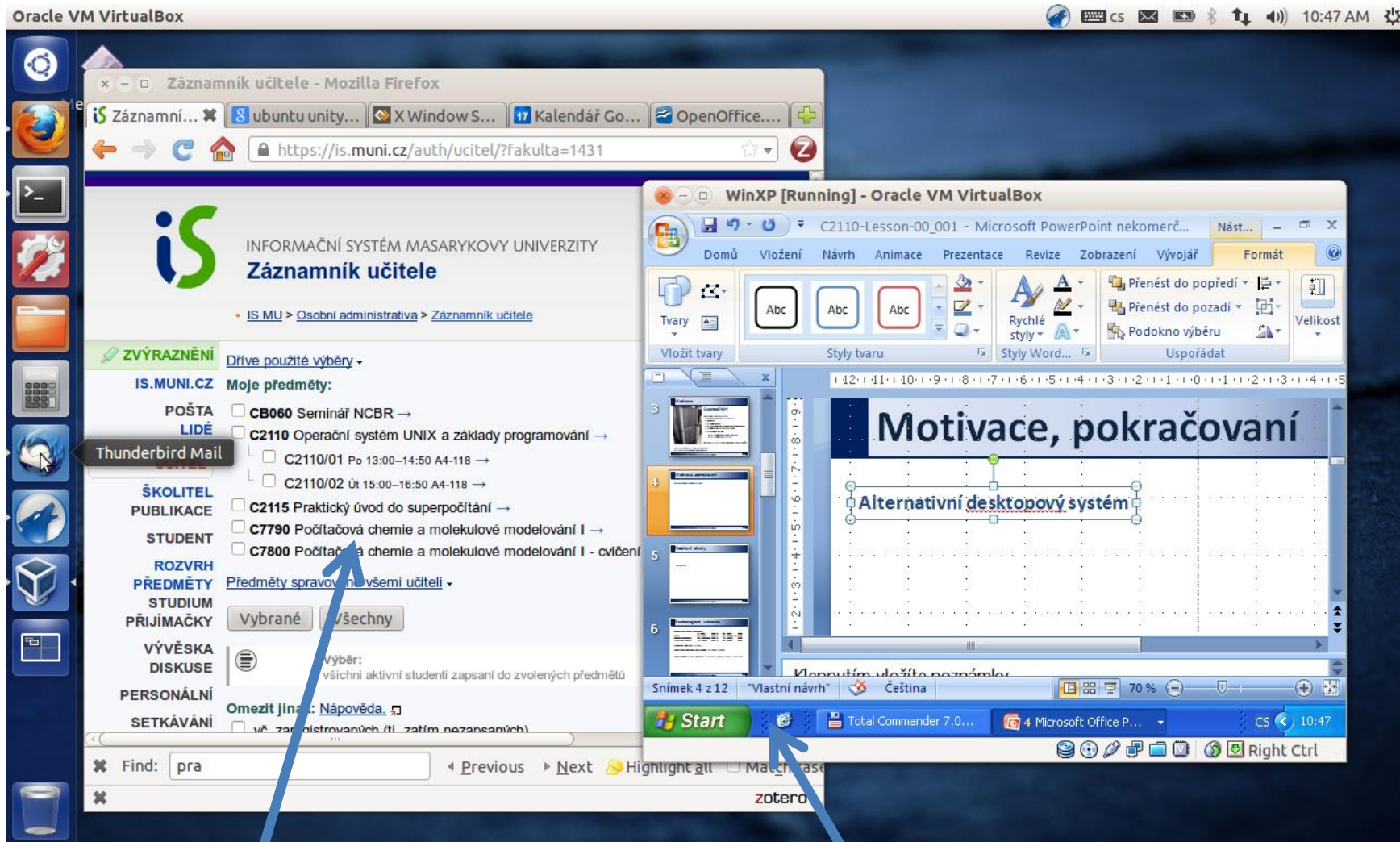
- **Základní práce s OS**
- **Virtualizace**
- **Práce s příkazovou řádkou**
- **Skriptování v jazyce**

bash

gnuplot

awk

Virtualizace



Hostitel: Ubuntu

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  
.....  
.....
```

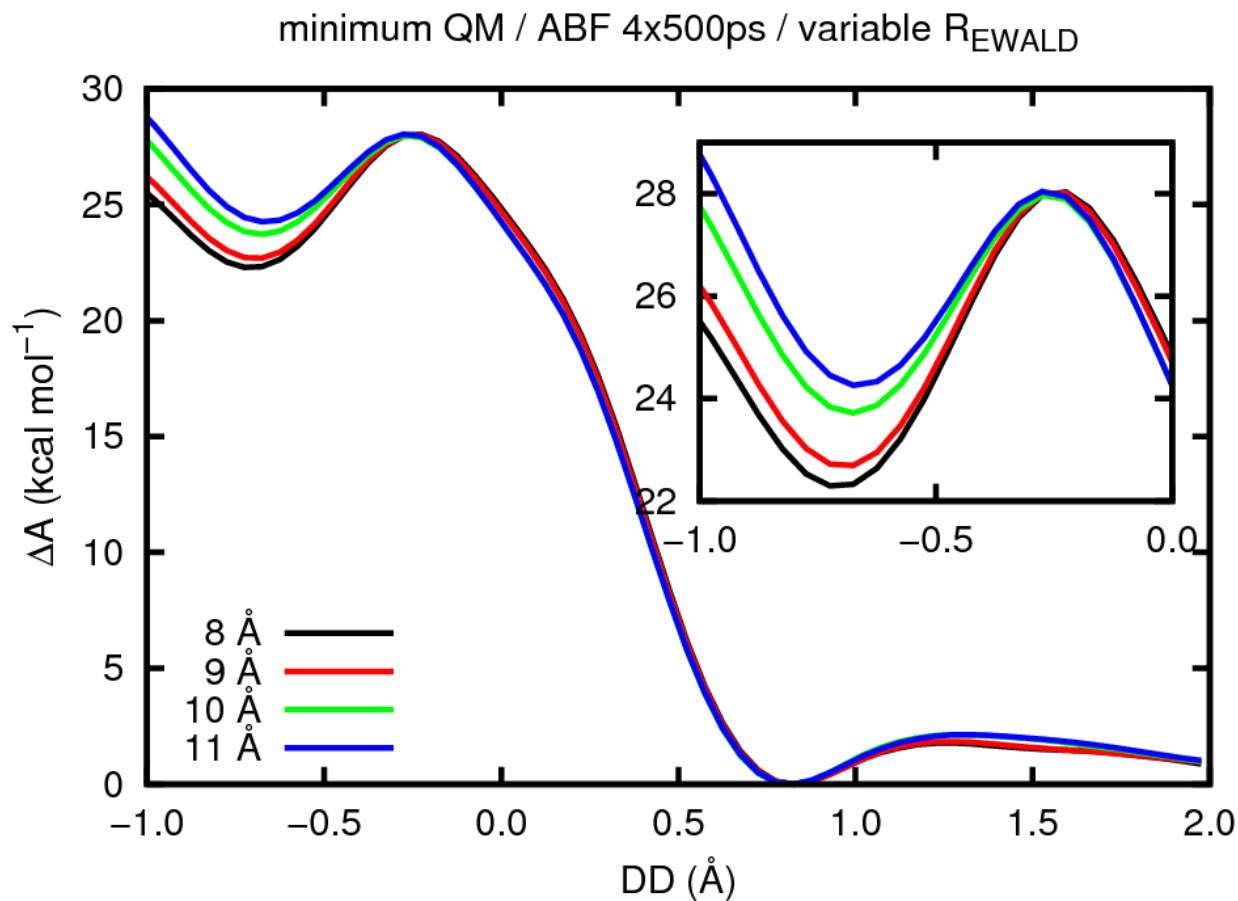
Snadná extrakce dat pomocí jazyka AWK.
(výstupy výpočetních programů)

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

Data: /home/kulhanek/Documents/C2110/Lesson01/dat/rst.out

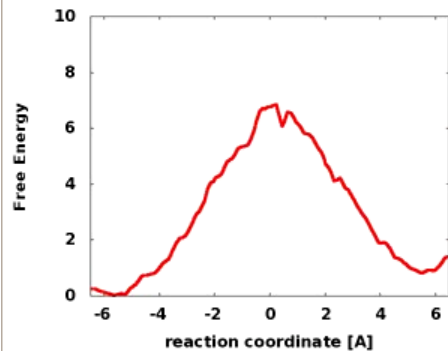
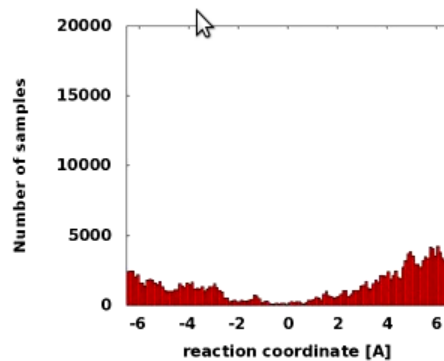
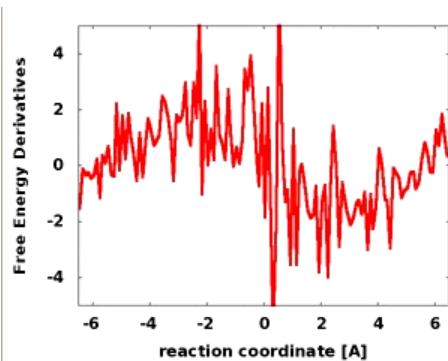
```
$ grep TIME rst.out | awk '{ print $6, $9 }'  
$ awk '/TIME/{ print $6, $9 }' rst.out
```


Vizualizace výsledků

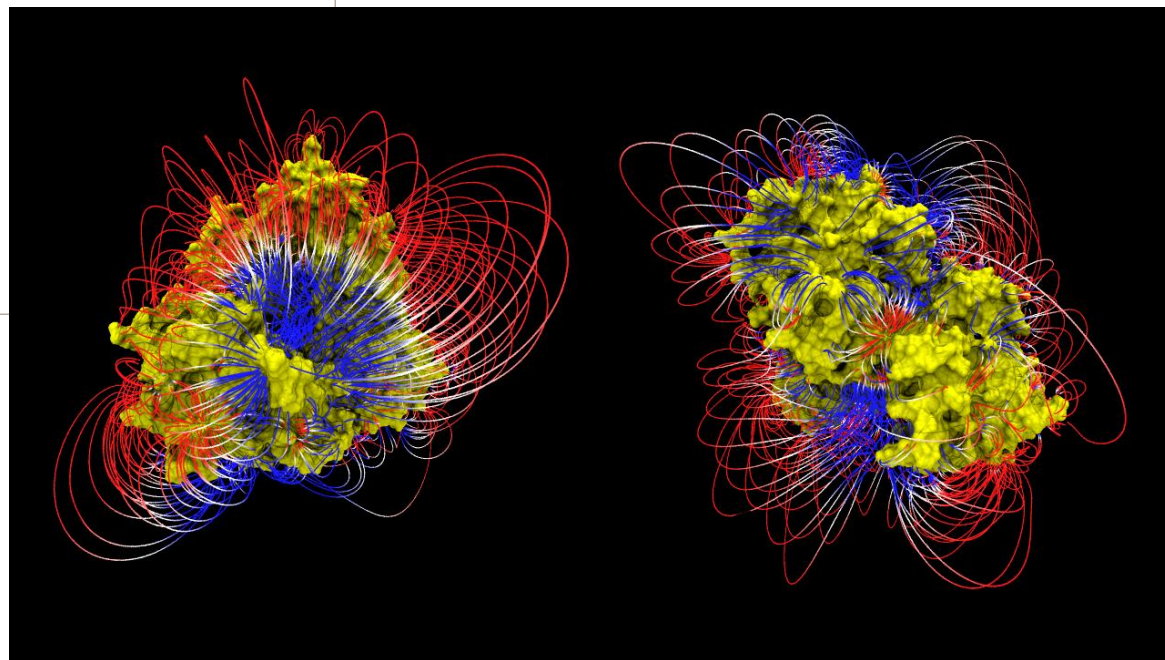


Zobrazování extrahovaných dat ve formě grafů (gnuplot).

Automatizace



Ukázat video



ABF: Petr Kulhánek

Data: /home/kulhanek/Documents/C2110/Lesson01/video

BsoBI: Ivo Kabelka

Organizace výuky

- Harmonogram, forma výuky
- Hodnocení znalostí, zakončení předmětu

Harmonogram, forma výuky

Výuka: 17. září 2018 - 17. prosince 2017
Zkouškové období: 2. ledna 2019 - 12. února 2019

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, přístupné 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)

Nebo pouze jedna neomluvená absence dle studijního řádu.

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 můžete používat počítač, můžete použít skripty z cvičení či z domácích úloh. Nesmíte však spolupracovat s jinými lidmi (Facebook, mobil, apod.).

Navazující předmět **C2115 Praktický úvod do superpočítání**
bloková výuka 28.1. – 1.2. 2019

Klaster WOLF

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

Učebna 1.18



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

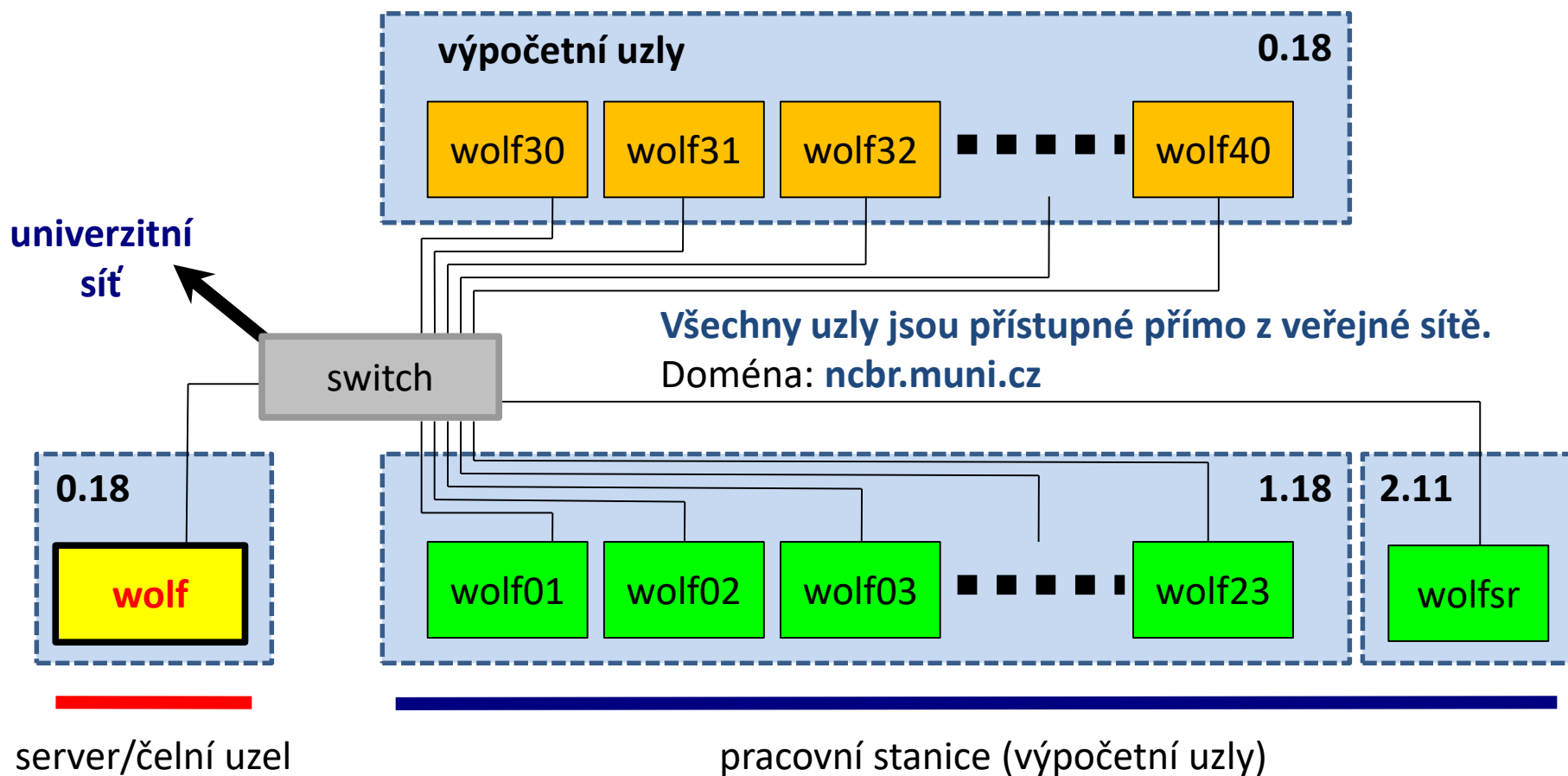
Bezpečnost práce!

Základní informace:

<https://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 16.04 (Xenial) 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

Závazná jsou pravidla užívání počítačové sítě Masarykovy univerzity:

https://is.muni.cz/auth/do/mu/Uredni_deska/Predpisy_MU/Masarykova_univerzita/Smernice_MU/SM10-17/

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

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**
- **Změna hesla**
- **Desktopová prostředí**

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

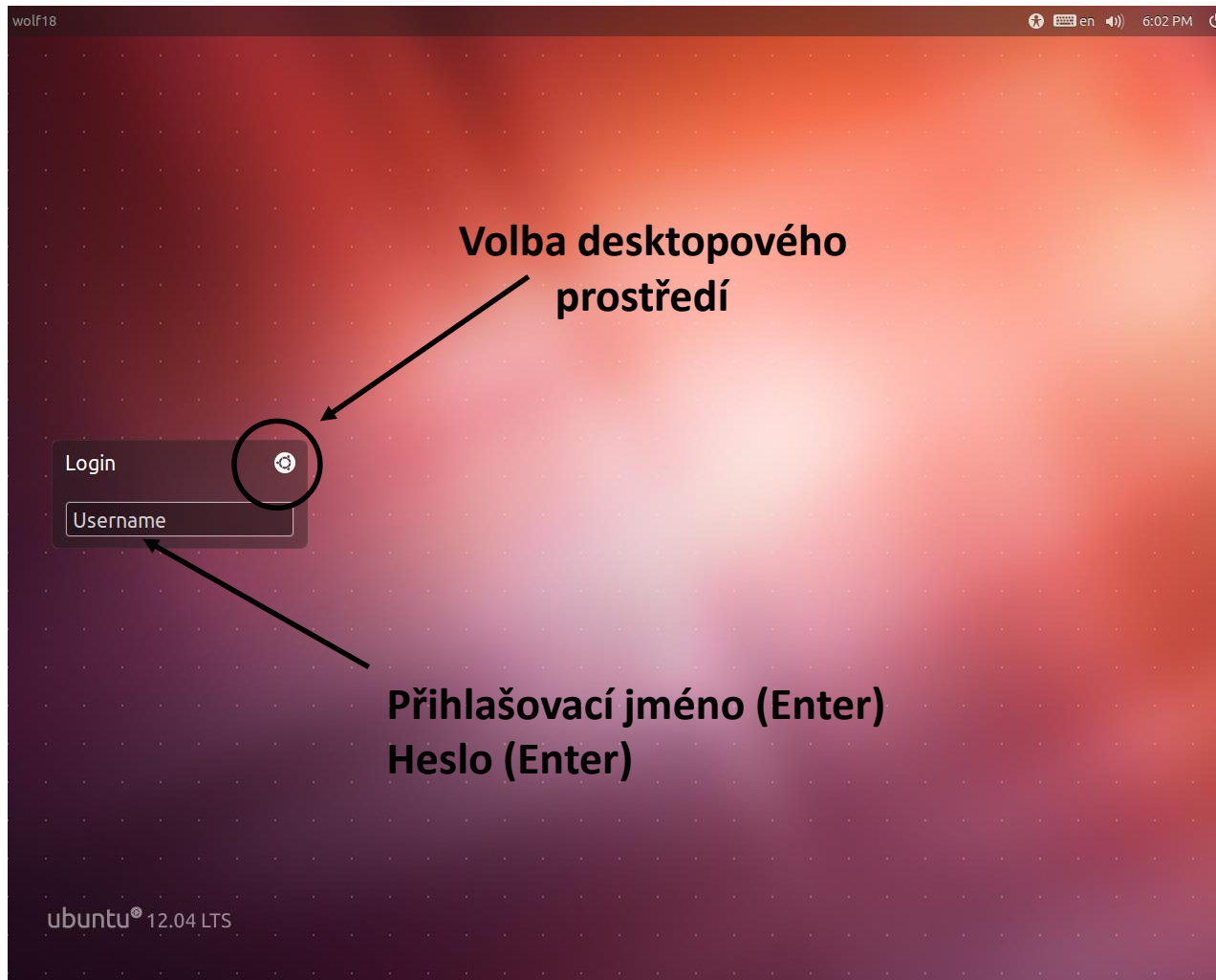
Textový terminál (F1-F6):

- 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

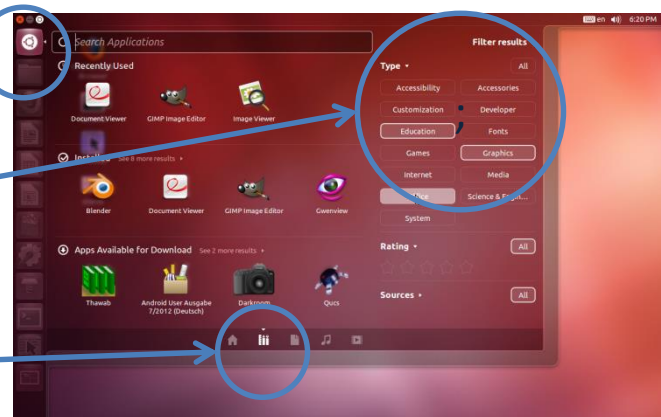
1. Přihlaste se do desktopového prostředí Unity (volba Ubuntu v menu volby prostředí).
2. Přihlaste se do textového terminálu číslo 3.
3. Zadejte v něm příkaz **ls**. Odhadněte co příkaz dělá.
4. Odhlaste se z textového terminálu a vraťte se zpět do grafického terminálu.
5. Otevřete webový prohlížeč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

Cvičení

1. Spusťte program Gimp pomocí menu prostředí Unity. V programu nakreslete domeček jedním tahem. Vzniklé trojúhelníky vyplňte různými barvami.
2. Kde má aplikace Gimp menu?
3. Spusťte program Inkscape. V programu nakreslete vlajku české republiky. Zkuste odhadnout principiální rozdíl mezi programy Inkscape a Gimp.
4. Spusťte program LibreOffice. V tabulkovém kalkulátoru zobrazte průběh funkce sinus v rozsahu 0 až 360°.

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**

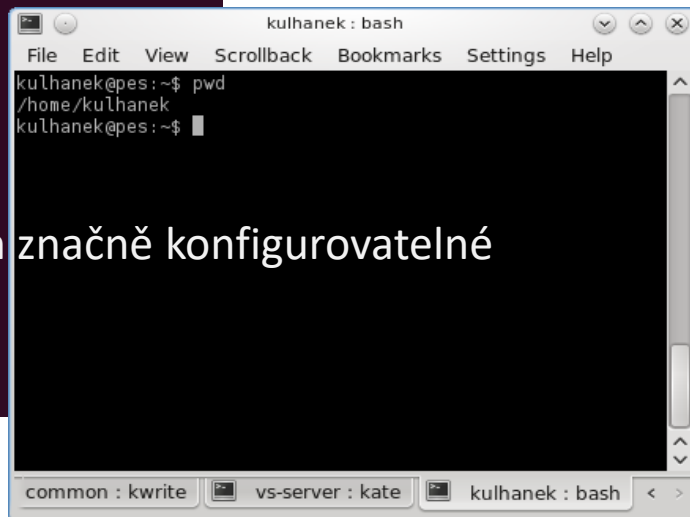
Výchozím adresářem je: **/home/username**

gnome-terminal

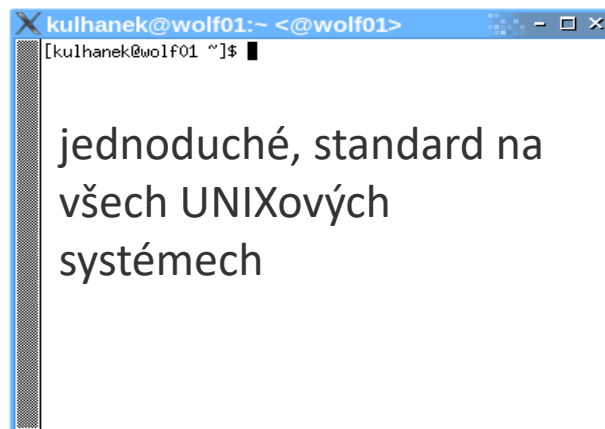


jednoduché, přitom značně konfigurovatelné

konsole



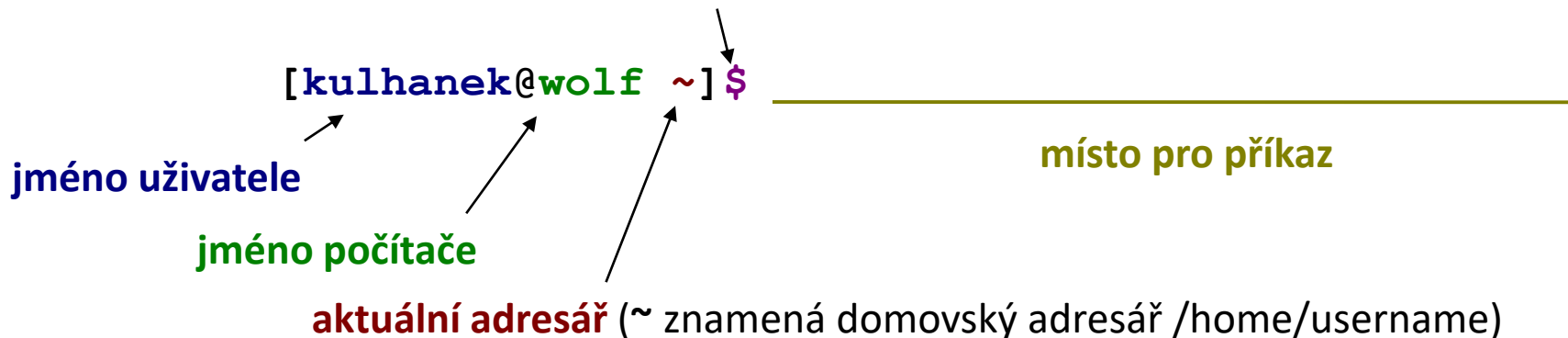
xterm



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 modulu:

`$ module versions vmd`

číslo verze se od jména modulu odděluje dvojtečkou

Dokumentace k modulu:

`$ module help vmd`

Aktivace modulu:

`$ module add vmd`

`$ module add vmd:1.9.0`

Spuštění aplikace z modulu vmd

`$ vmd`

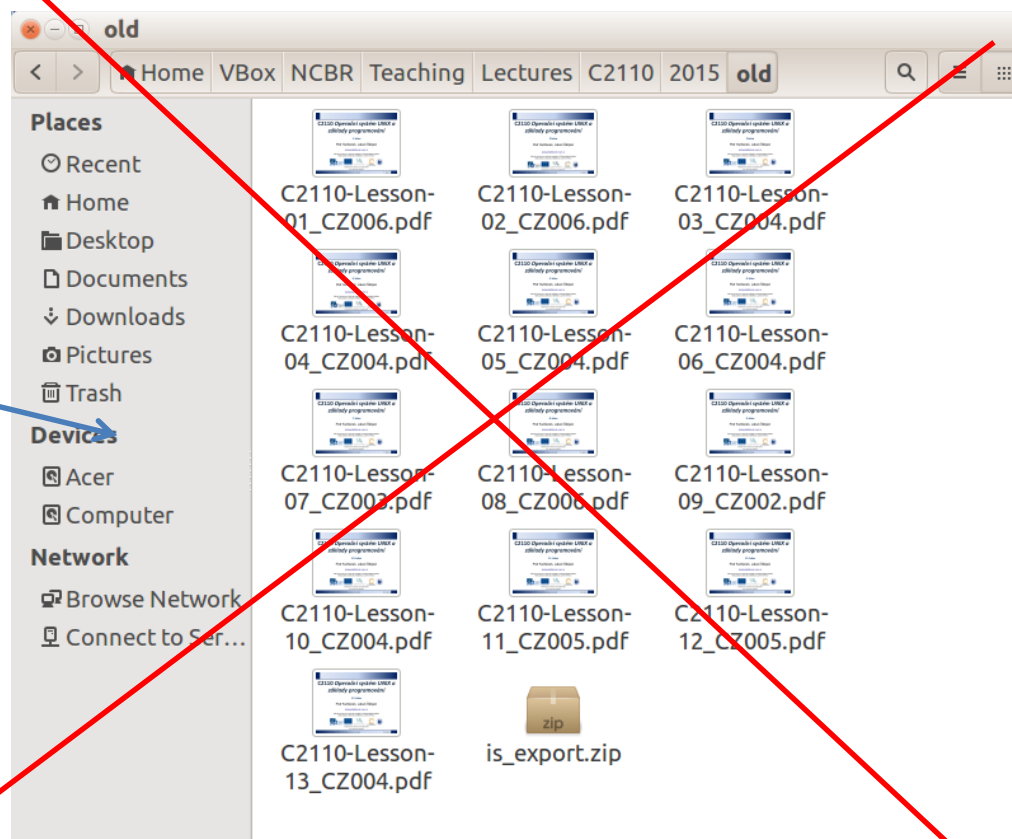
aktivuje výchozí verzi modulu

jméno modulu a aplikace nemusí být stejné

Cvičení

1. Otevřete terminál v grafickém rozhraní Unity.
2. Z terminálu spusťte program **Inkscape**. Do příkazové řádky napište „**inkscape**“ a zmáčkněte Enter.
3. Co se stane pokud napíšete „**Inkscape**“?
4. Zobrazte všechny dostupné moduly.
5. K čemu slouží modul **vmd**?
6. K čemu slouží modul **nemesis**?
7. Spusťte program **nemesis**. Do nového terminálu napište „**nemesis**“ a zmáčkněte Enter. Co se stane?
8. Aktivujte modul „**nemesis**“ a pokuste se program **nemesis** znovu spustit.
9. V programu namodelujte molekulu kyseliny octové a proveďte optimalizaci její geometrie.

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.

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**

Přehled lekcí

1. Začínáme
2. Linux jako víceuživatelský systém
3. Souborový systém
4. Procesy
5. Programy vs skripty, algoritmizace, bash
6. Linux aneb co se nevešlo do úvodu
7. Skriptování v jazyce bash
8. bash – řídicí struktury (podmínky, cykly)
9. bash – dokončení (skoro)
10. gnuplot, bash
11. awk
12. awk – pokračování
13. Kompilace programů ze zdrojových kódů

Průběžný test I

Průběžný test II

Změna hesla



Změna hesla

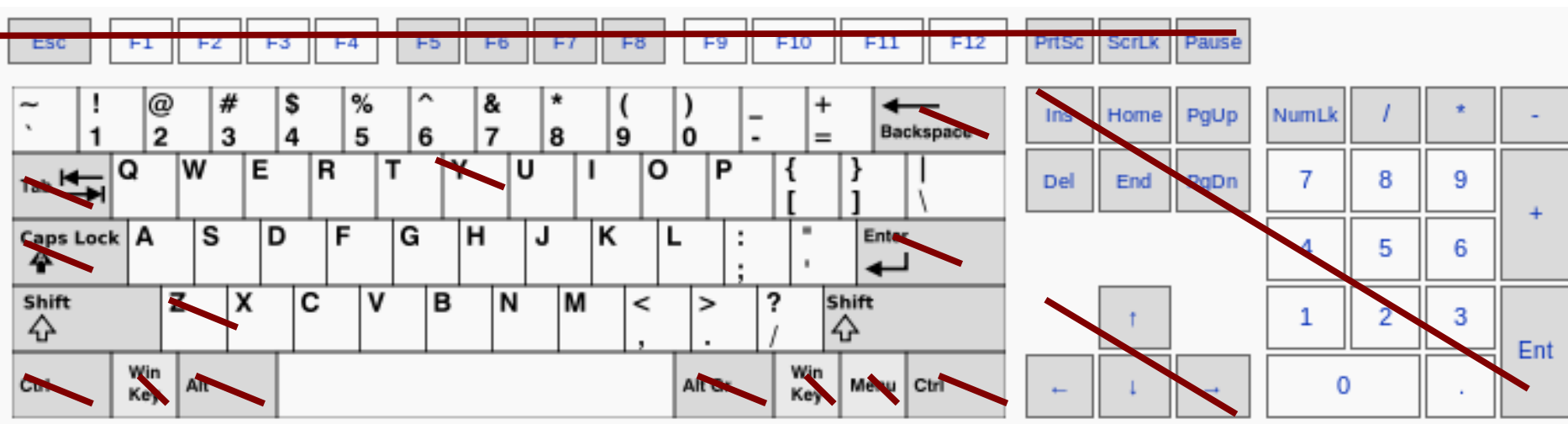
Standardním příkazem pro změnu hesla v prostředí linuxu je příkaz **passwd** (man passwd). Na klastru WOLF jej však není možné použít z důvodu využívání externího správce uživatelských účtů Perun (<https://perun.cesnet.cz>).

Pro změnu hesla (či reset hesla, pokud jste jej zapomněli) tak musíte použít správce eINFRA profilu, který naleznete na následujícím odkazu:

<https://einfra.cesnet.cz/a/user-profile/fed/>

Změna hesla

- 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.

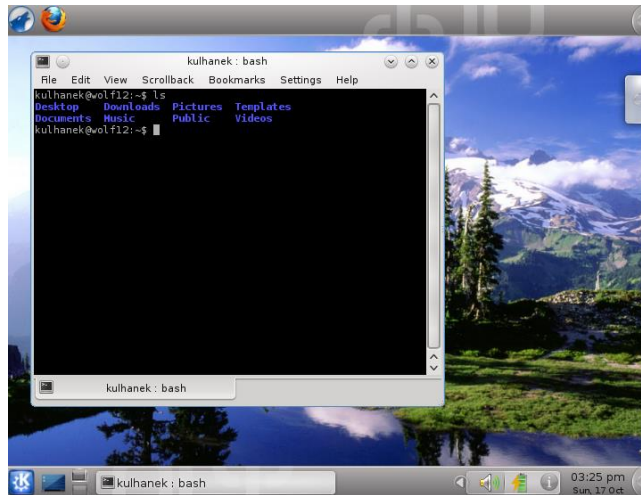


Výchozí klávesnice na klastru WOLF je anglická (EN).

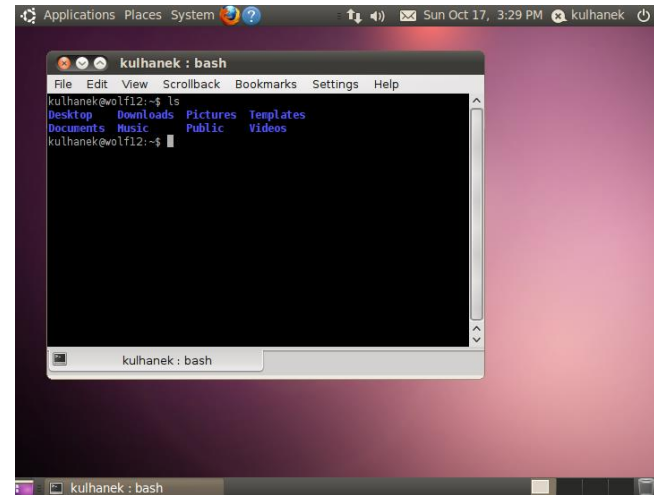
Desktopová prostředí



Desktopová prostředí



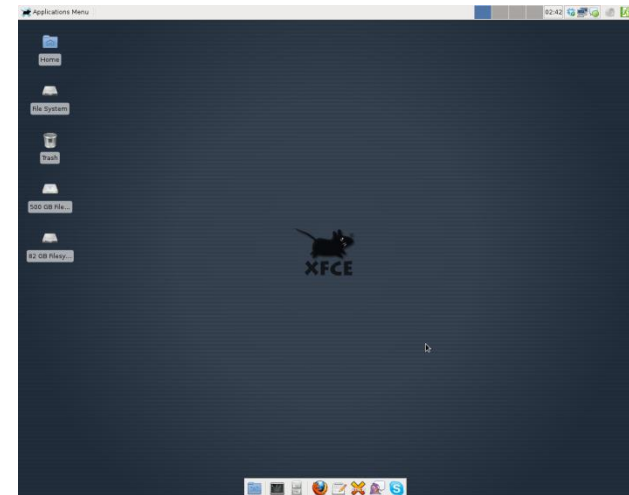
KDE



GNOME



Unity (v menu volba Ubuntu)



Xfce

Desktopové prostředí

Poznámky:

- V současné době (2018) jsou na klastru WOLF dostupné prostředí Unity a Gnome.
- Pro prostředí Unity bude v nadcházejících verzích Ubuntu nahrazeno prostředím Gnome.
- Na klastru WOLF se tak stane až při přechodu na Ubuntu 18.04 LTS (únor 2019).

K procvičení:

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 seznámete.
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

