

C7790

Počítačová chemie a molekulové modelování I

C7800 Počítačová chemie a molekulové modelování I - cvičení

3. Klastř WOLF

Petr Kulhánek

kulhanek@chemi.muni.cz

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

Klaster WOLF

- Učebna 1.18
- Struktura
- Pravidla používání
- Správci

Sledujte aktuální informace v části „Účty“ na stránce:

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

O účty je možné požádat kdykoliv. Účty se prodlužují v období září-říjen.

Žádost se skládá ze dvou částí:

- přihláška do virtuální organizace NCBR@MUNI
- přihláška do skupiny „students“

Učebna 1.18



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

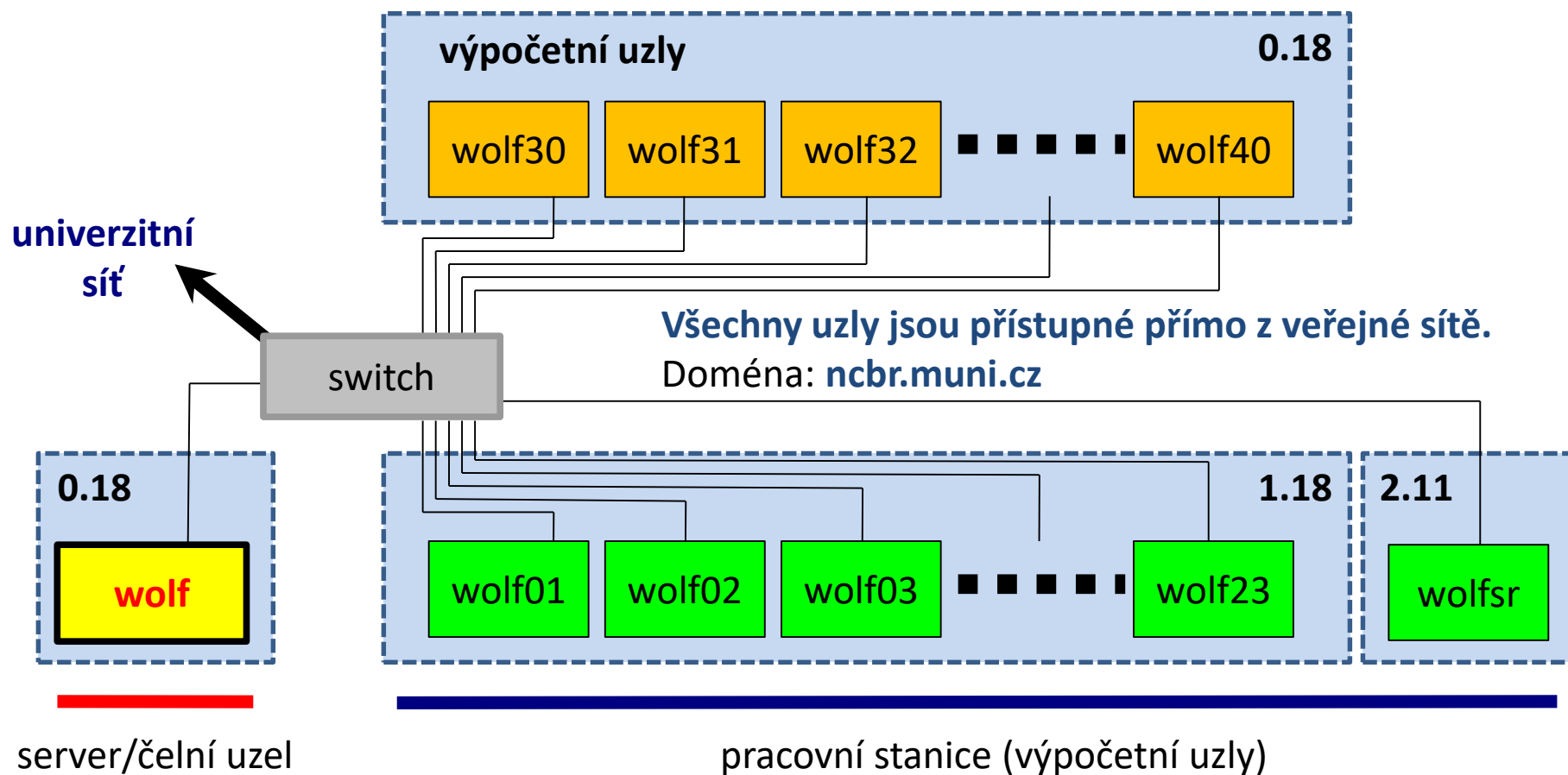
Bezpečnost práce!

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

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/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

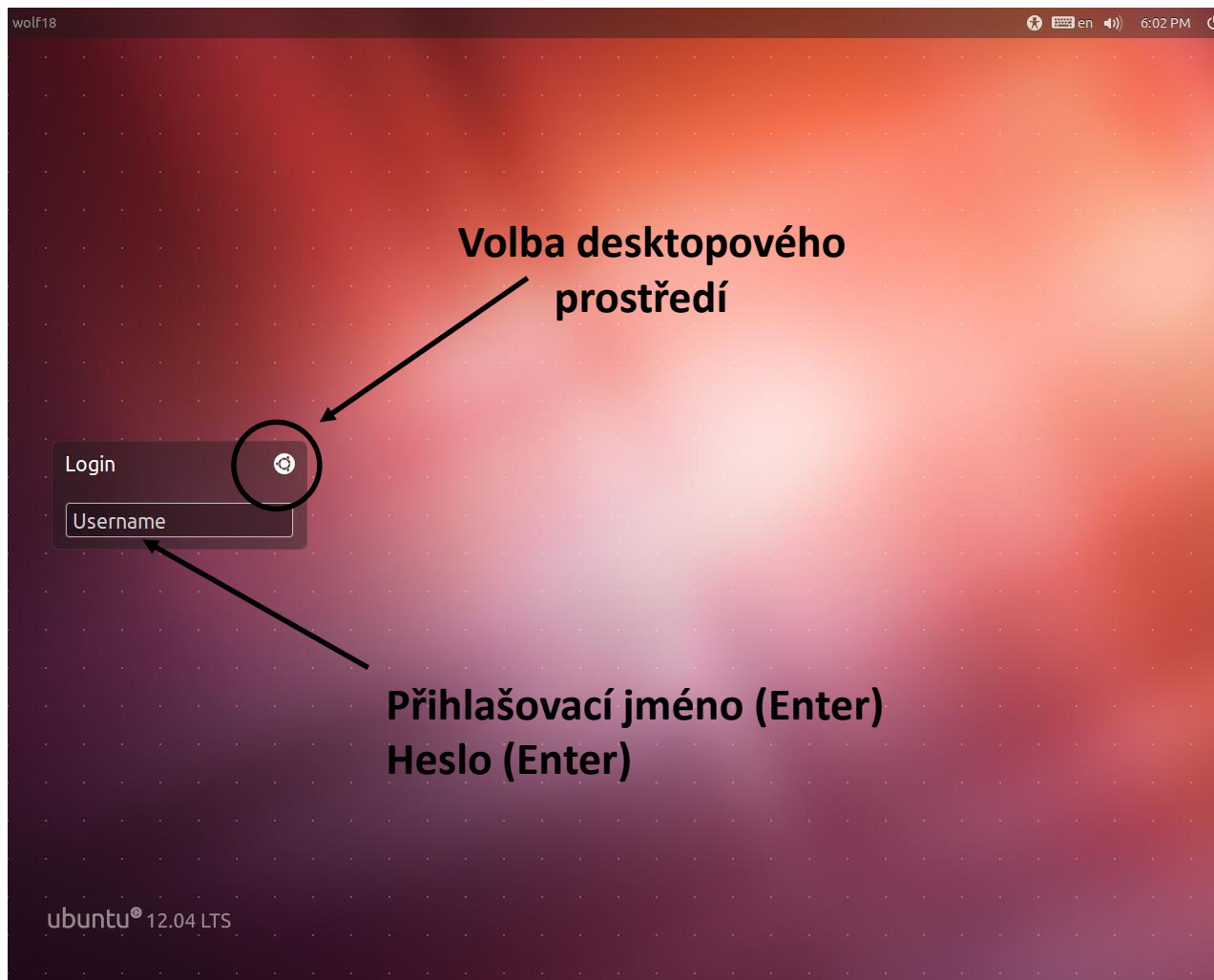
Ve zprávě uveďte

- 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**

Přihlášení – LightDM X manager



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

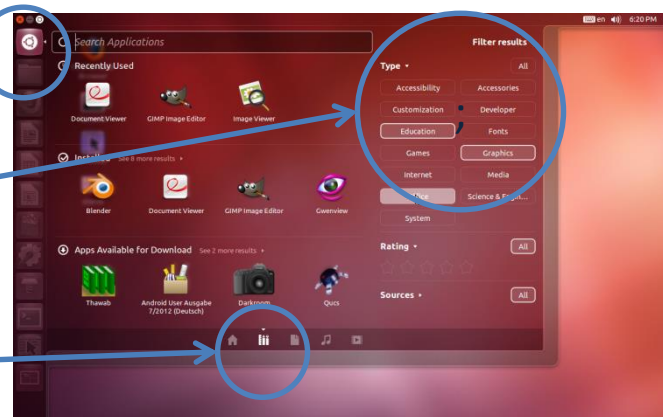
Při použití numerické části klávesnice zkontrolujte, zdali je aktivován **NumLock**.

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**

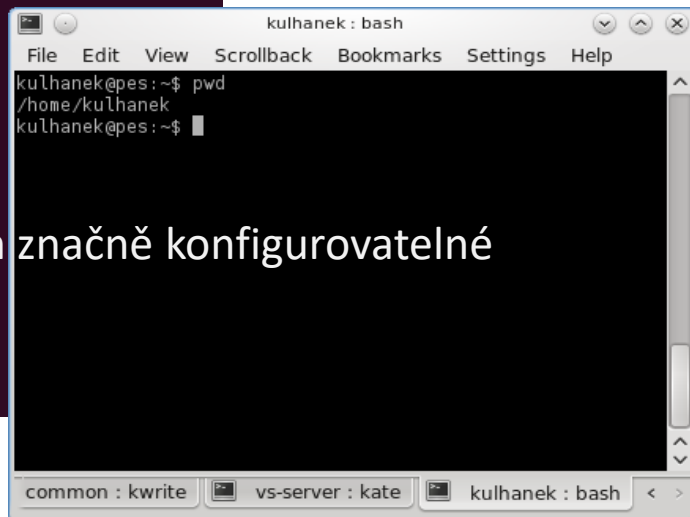
Výchozím adresářem je: **/home/username**

gnome-terminal

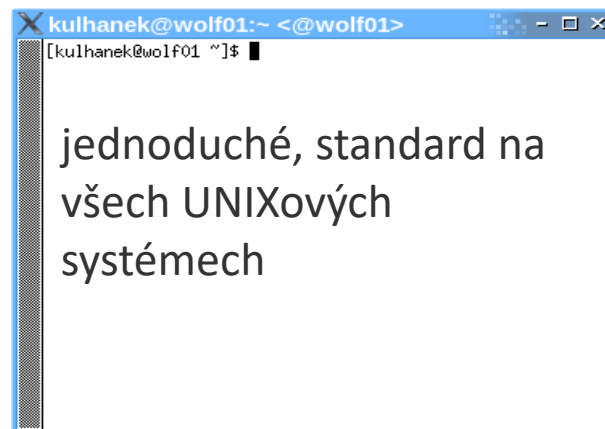


jednoduché, přitom značně konfigurovatelné

konsole



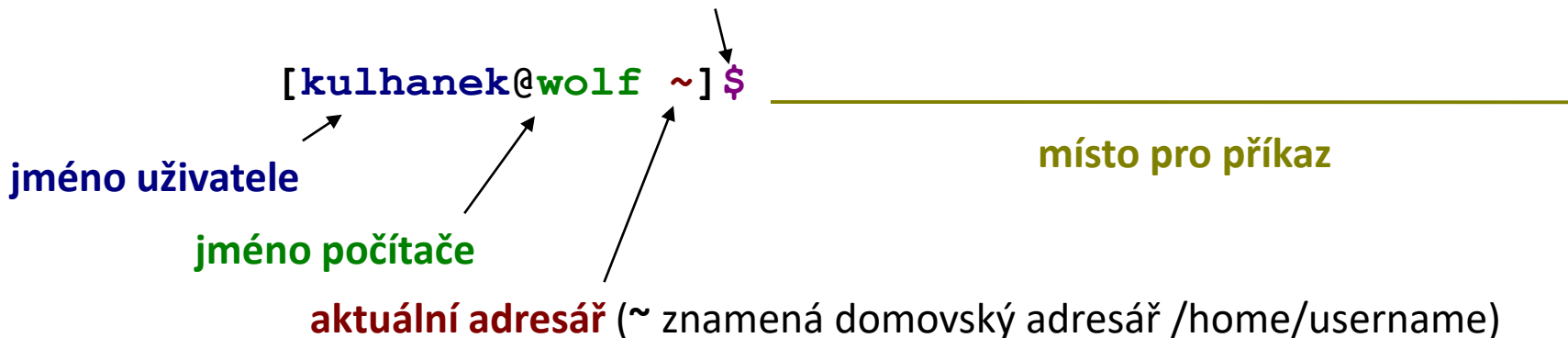
xterm



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 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

Změna hesla



Změna hesla

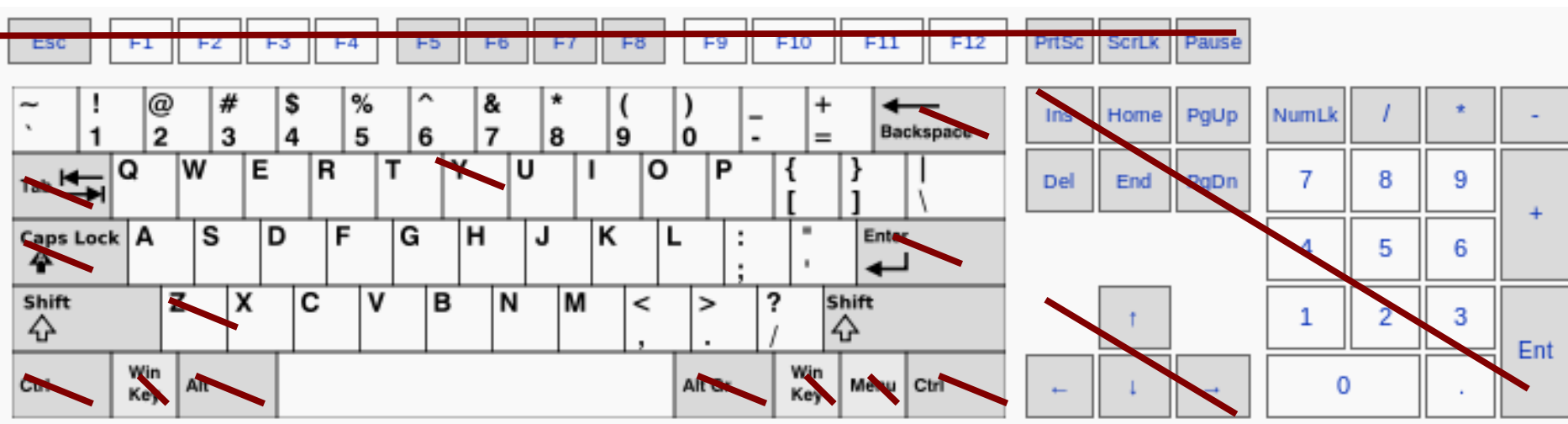
Standardním příkazem pro změnu hesla v prostředí linuxu je příkaz **passwd** (man passwd). Na klastru WOLF jej však není možné použít z důvodu využívání externího správce uživatelských účtů Perun (<https://perun.cesnet.cz>).

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).