

C2110 Operační systém UNIX a základy programování

1. lekce / modul 2

PS/2020 Distanční forma výuky: Rev2

Petr Kulhánek

kulhanek@chemi.muni.cz

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

Zaměření předmětu

- **Probírané okruhy**
- **Motivace**

Probírané okruhy

- **Základní práce s Linuxem (operační systém unixového typu)**
- **Práce s příkazovou řádkou**
- **Skriptování v jazyce**
 - bash
 - gnuplot
 - awk
- **Virtualizace**

K čemu jsou vhodné uvedené znalosti?

- Rostoucí množství dat vyžadujete efektivní, ideálně automatizované, zpracování včetně vizualizace hlavních výsledků.
- Návrh nových léčiv, materiálů a zařízení vyžaduje výpočetně náročné simulace. Simulace se provádějí v superpočítačových centrech, které využívají operační systémy unixového typu.

Superpočítání

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

Stav v roce 2016

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

Účet může získat student libovolné vysoké školy ČR.

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

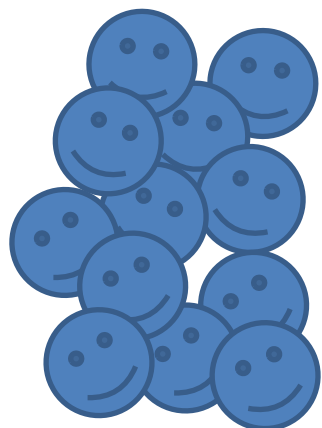
- Národní superpočítačové centrum, OS CentOS
- salomon (cca 24192 CPU jader, 129TB RAM, Intel Xeon Phi MIC)
 - 40. nejvýkonnějším superpočítač na světě v době uvedení do provozu (TOP500, **139. místo 06/2018**)
- anselm (cca 3000 CPU jader, 15TB RAM)

O strojový čas se žádá formou grantových soutěží.

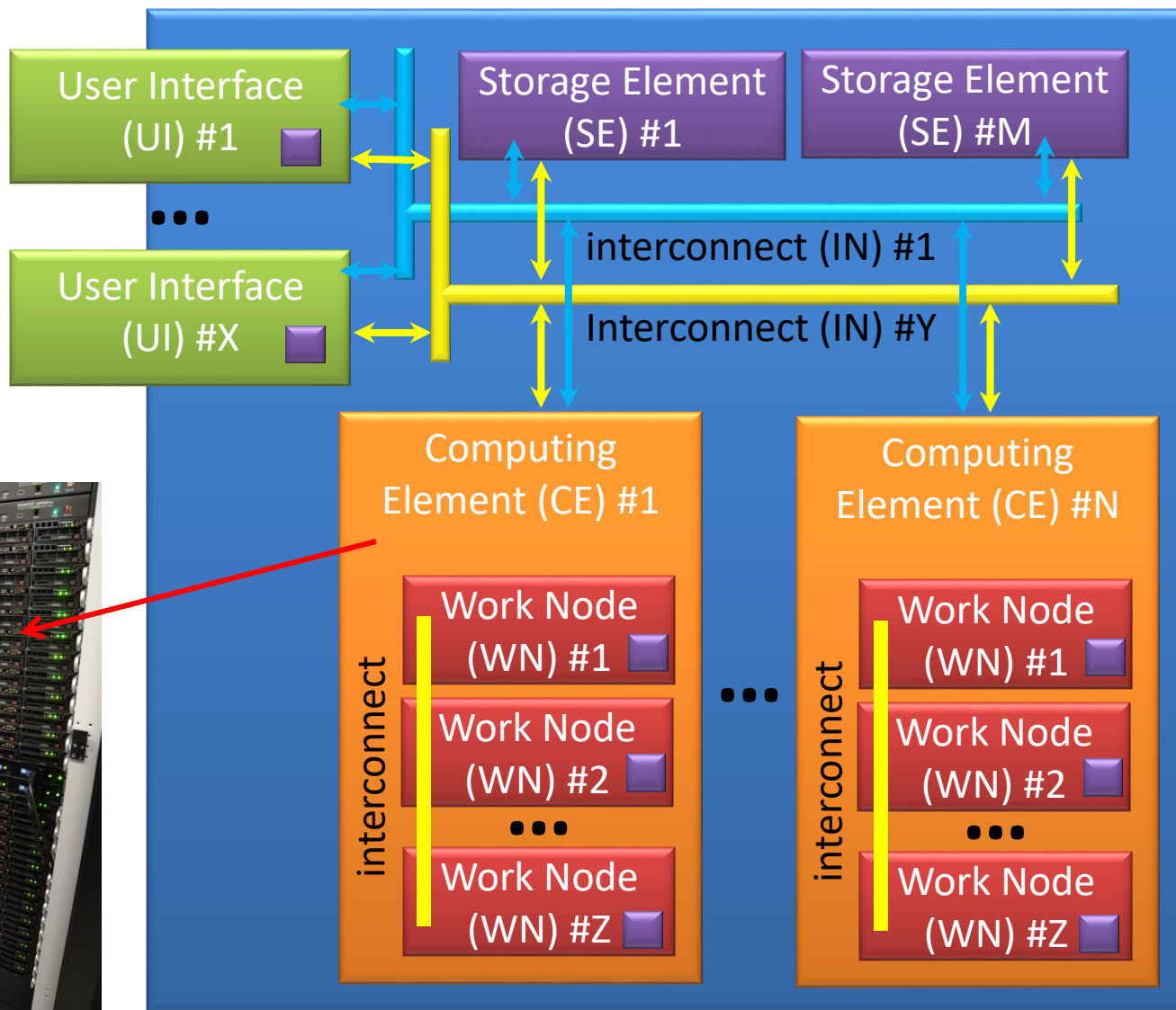
Lokální výpočetní klastry

- LCC – laboratoř výpočetní chemie

Superpočítače



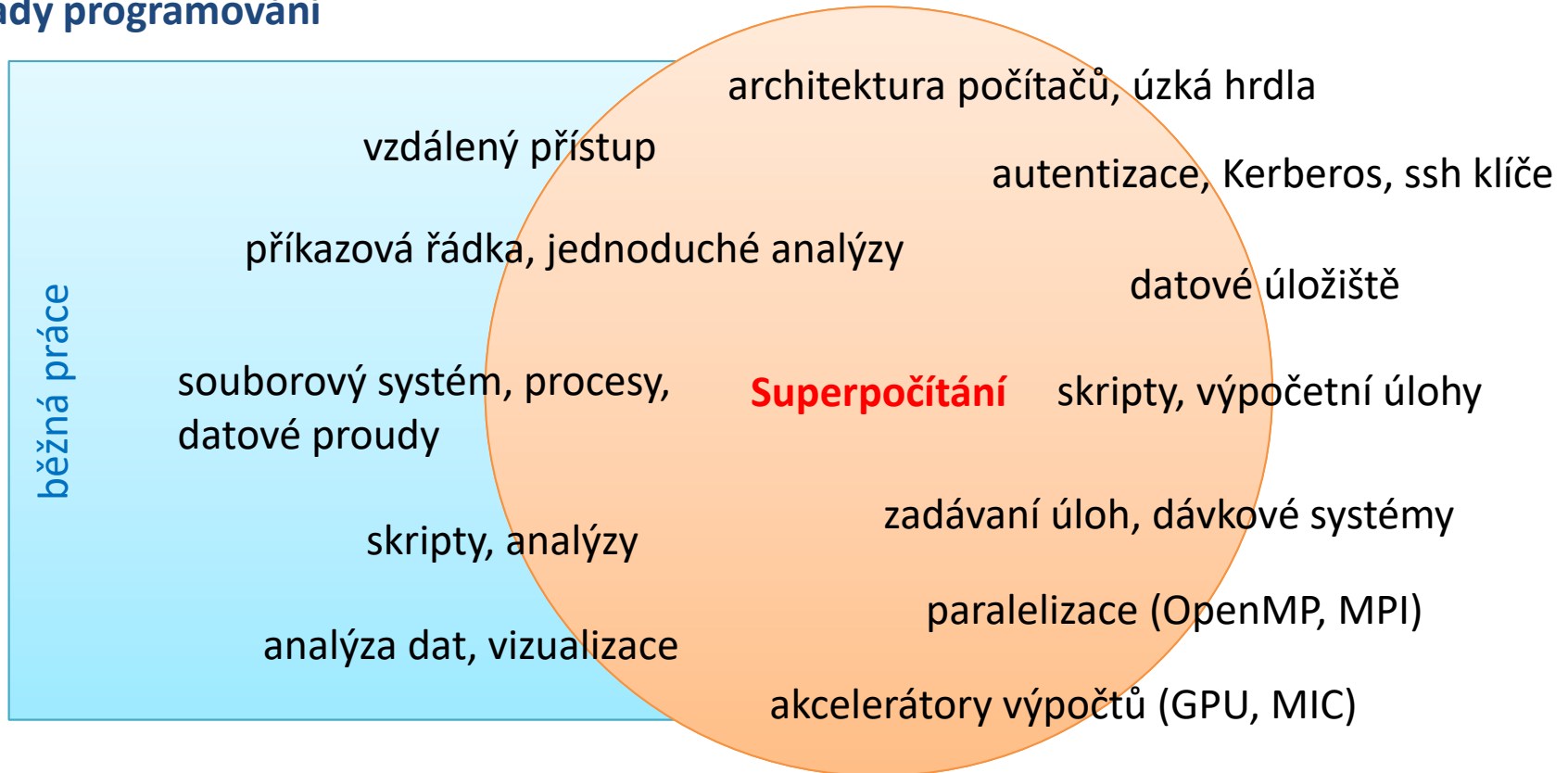
users



C2110 vs C2115

C2110 Operační systém UNIX a základy programování

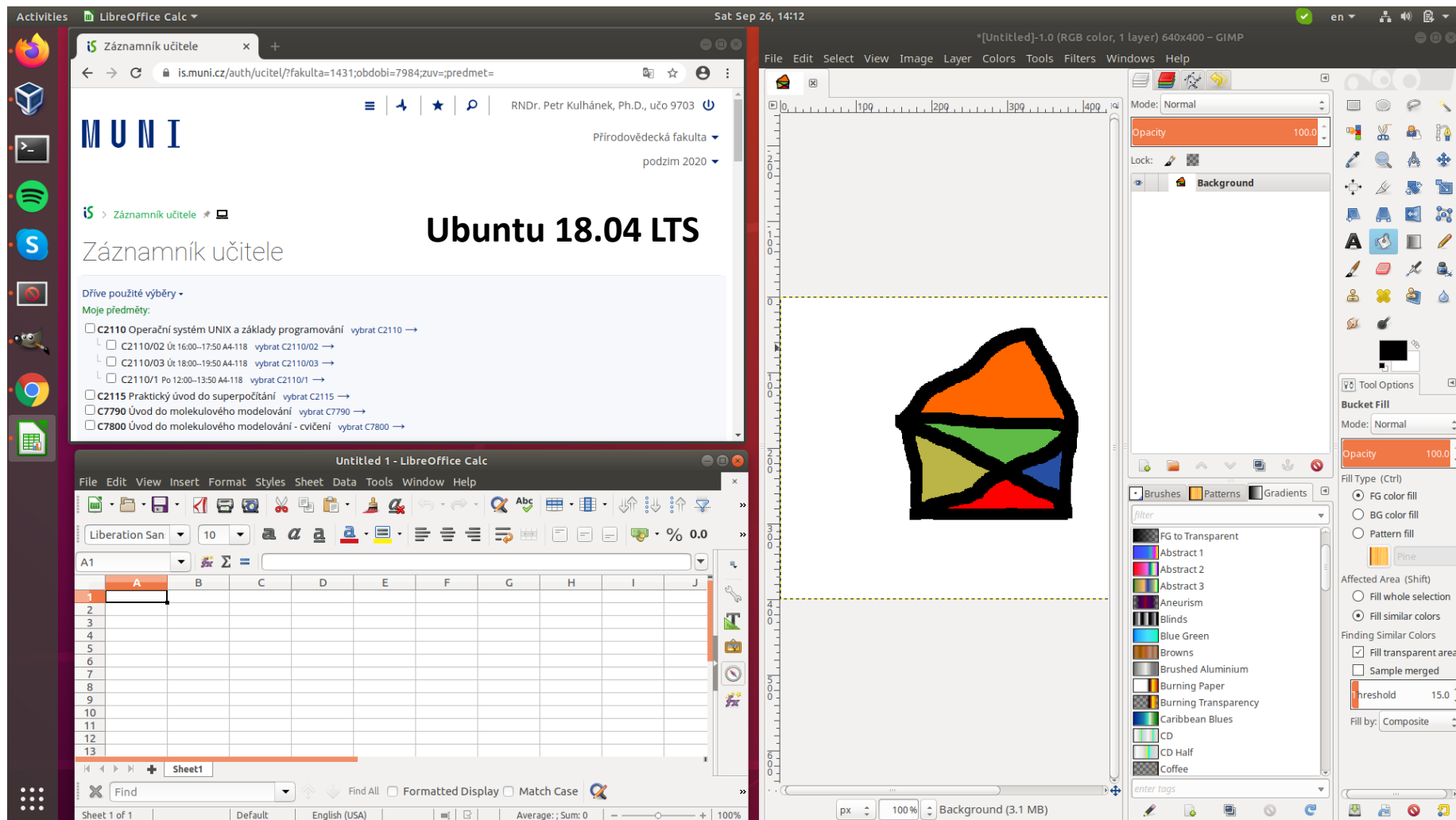
C2115 Praktický úvod do superpočítání



C2115 je navazující předmět na C2110

- podzimní semestr – bloková výuka (únor 2021)
- výjimky uděluji studentům, kteří mají souběžně zapsaný C2110

Linux - Desktopový systém



Výhody: zadarmo, flexibilní a rozšiřitelný, možnost skriptování

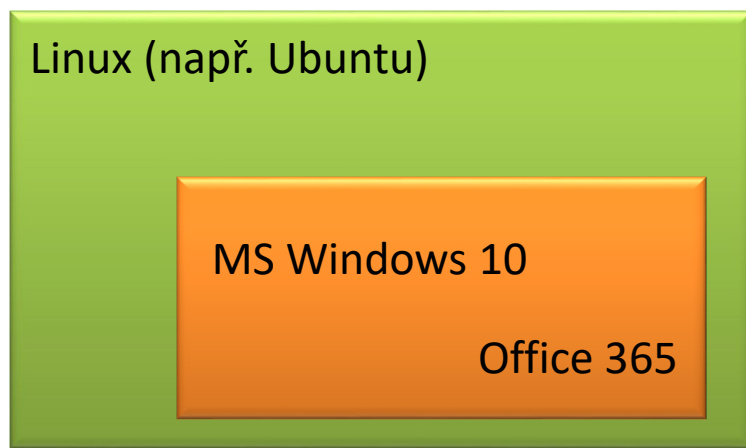
Který desktop použít?

Historie:

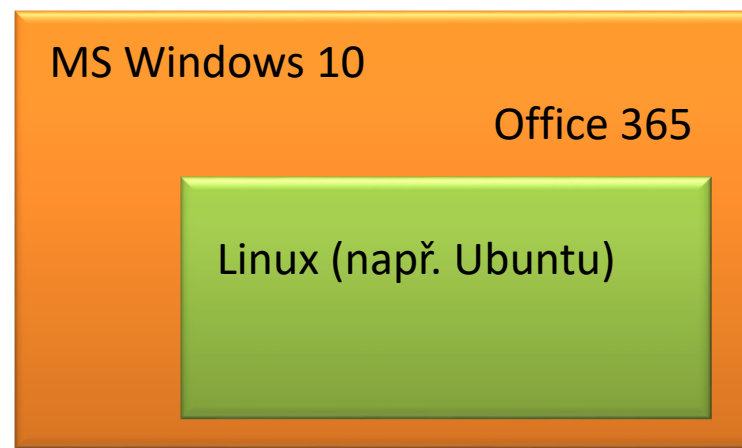
- dual boot

Současnost

- různé typy virtualizace



VirtualBox



VirtualBox

Cygwin

Windows Support For Linux (WSL)

Poznámka:

Studenti MU mají přístup k Office 365 (možnost instalace na domácí počítače).

<https://it.muni.cz/sluzby/microsoft-office-365>

Virtualizace

Hostitel: Ubuntu 18.04 LTS

Host: MS Windows 10 (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  
.....  
.....
```

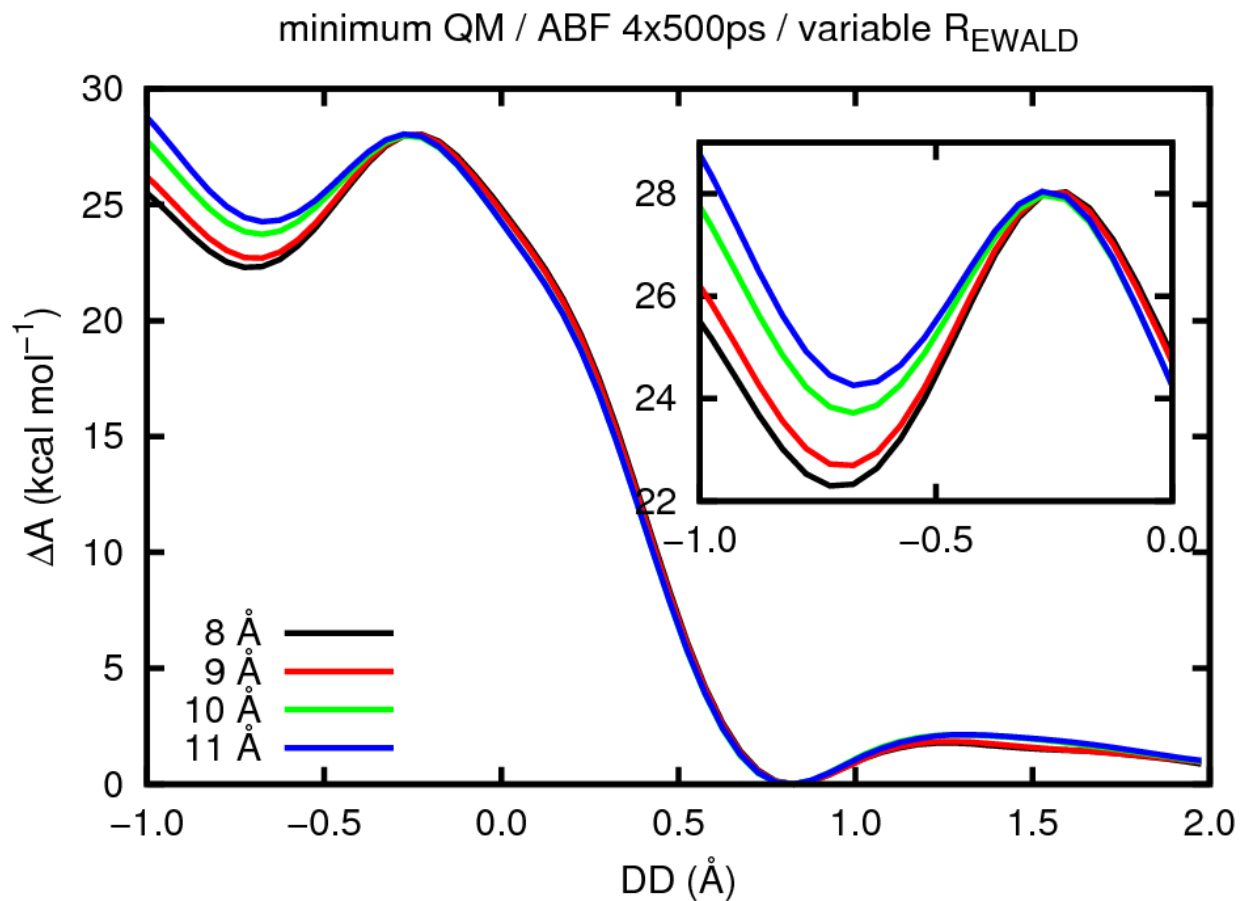
Snadná extrakce dat pomocí jazyka AWK.
(výstupy výpočetních programů)

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

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

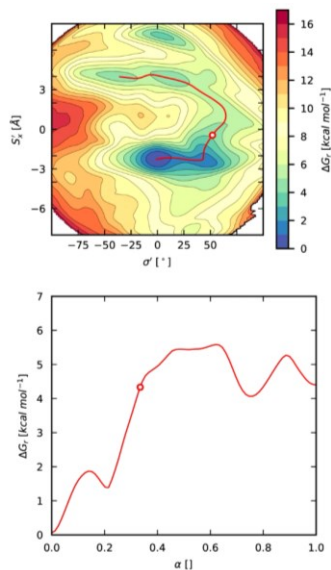
```
$ grep TIME rst.out | awk '{ print $6, $9 }'  
$ awk '/TIME/{ print $6, $9 }' rst.out
```

Vizualizace výsledků

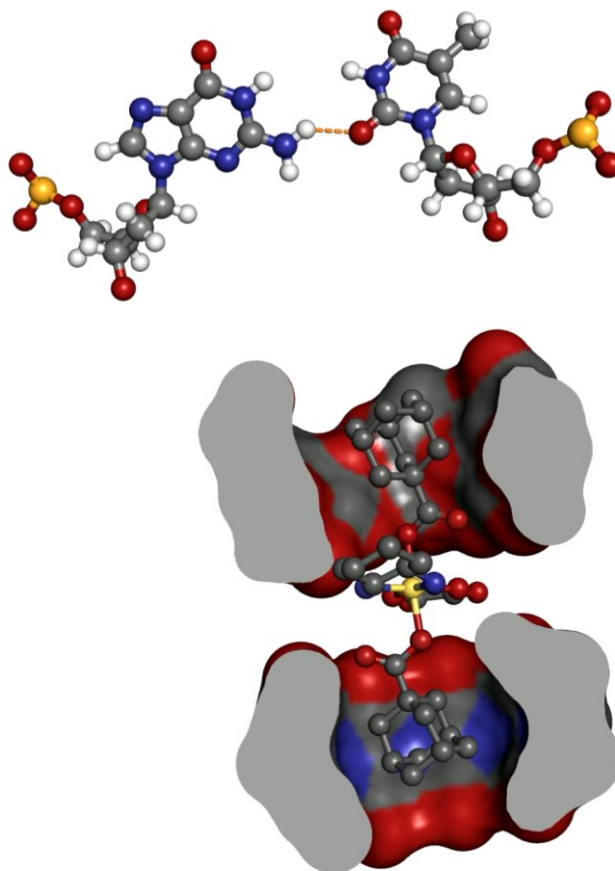


Zobrazování extrahovaných dat ve formě grafů (gnuplot).

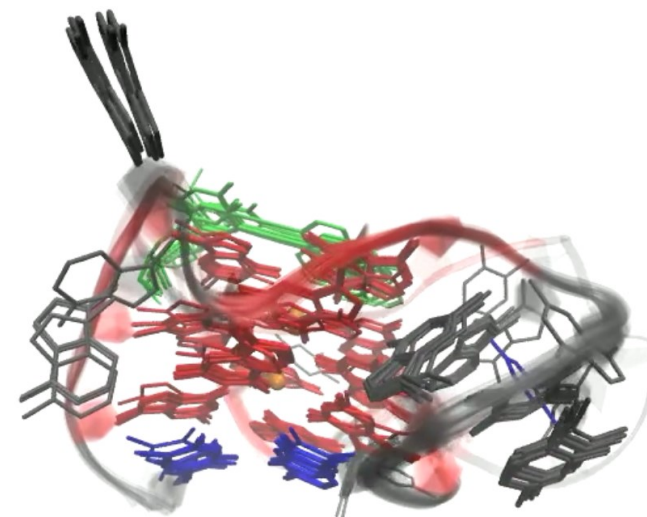
Automatizace



aG/aT mismatch: Tomáš Bouchal



[Ukázat video](#)



Kvadruplex: Ivo Durník

Supramolekulární komplex: Ivo Durník

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

Cvičení 1

1. Vyjmenujte jména čelních uzlů (front-endy), které je možné použít pro přístup do superpočítačového centra MetaCentrum.
2. Jaké superpočítače jsou dostupné v IT4I?
3. Na jaké příčce v seznamu TOP500 se nachází superpočítač Salomon?
4. Jaké operační systémy jsou použity na prvních 10 nejrychlejších superpočítačích světa?