

11. Metacentrum

Bi3101 Úvod do matematického modelování



Návod na výpočet v Metacentru

Metacentrum



- Virtuální organizace MetaCentrum (Metavo) je tzv. „catch-all“ virtuální organizace sdružující všechny uživatele registrované v MetaCentru.
- MetaVO je otevřená všem akademickým pracovníkům, zaměstnancům a studentům vědeckovýzkumných institucí v České republice.
- Uživatelé registrovaní v MetaVO mají možnost bezplatného využití výpočetní a úložné kapacity a řady aplikačních programů jako jsou Matlab, Maple, R, Gaussian...
- Všichni studenti Masarykovy univerzity mají registraci zdarma.
- <https://metavo.metacentrum.cz/>

Metacentrum



- V současné době jsou hlavními středisky MetaCentra: MU, UOCHB, ZČU, JČU, AVČR, ČVUT a CESNET.



Návod na spuštění úloh v Metacentru



- Nejprve je třeba umístit soubory dat a skriptů na server Metacentra (např. přes WinSCP):
 - Hostname: *skirit.ics.muni.cz*
 - User name: *xUČO (nebo jiné zvolené při registraci)*
 - Password: primární IS (nebo jiné)
- Dále je vhodné si vytvořit vlastní složku (ideálně na */auto/brno6/home/fsbrno2/-* lze i jinde, ale tady by nemělo dojít k žádným problémům, pak lze psát napevno adresu *brno6/home/fsbrno2*).
- Nahrávat je třeba: soubor s daty, skript (R nebo Maple) a shell skript pro spuštění úlohy.

Návod na spuštění úloh v Metacentru



- Pro spuštění skriptu (Maple, R) je potřeba mít napsaný jednoduchý skript v shellu bash. Skript lze napsat ve vhodném textovém editoru a poté přepsat příponu na .sh. Např. pro úlohu v R:

- `#!/bin/bash`

Tzv. shebang informující shell, že má následující text interpretovat v programu bash.

- `#inicializace modulu R`

- `module add R`

- `#nastaveni adresare, kde mam skript a data`

- `cd /auto/brno6/home/fsbrno2/x150824/Bi3101/`

- `#predani vstupnich dat programu R`

- `R --save < pi.R`

Nastavení módu, ve kterém běží R, pokud není interaktivní.
--save, --no-save, --vanilla

Návod na spuštění úloh v Metacentru



- Pro samotné spuštění skriptu je třeba se připojit k serveru. Přihlašovací údaje jsou stejné jako v předchozím kroku:
 - Hostname: *skirit.ics.muni.cz*
 - Login as: *xUČO (nebo jiné zvolené při registraci)*
 - Password: primární IS
- Pro připojení k serveru z prostředí Windows je třeba mít vhodný program – ideálně putty.exe.



Návod na spuštění úloh v Metacentru



- V dalším kroku je vhodné otevřít screen, pro přístup k výpočtům i po zavření okna:
 - *screen* (zapne se po zadání příkazu do putty)
 - výpis seznamu existujících screenů: *screen -ls*
- výběr okna screenu: screen s popiskem *Attached* je aktivní, a v něm poběží následně spuštěný výpočet.
- Lze otevřít i jiné okno screenu, přenastavit pomocí *screen -r číslo_screenu*

Návod na spouštění úloh v Metacentru



- Ověření dostupných zdrojů na webu metacentra <http://metavo.metacentrum.cz/>
 - záložka Stav zdrojů -> Osobní pohled - v Sestavovači příkazu `qsub` na této stránce je třeba navolit svoje požadavky na výpočet a vygenerovat sekvenci příkazu `qsub`, např.:
- *`qsub -l walltime=1d -l mem=60gb -l scratch=2gb -l nodes=1:ppn=1:x86_64:linux:brno`*
- *(úloha poběží maximálně 1 den s alokovanou pamětí 60gb, na jednom uzlu, 1 procesoru)*

Návod na spouštění úloh v Metacentru



- Pod vygenerovaným příkazem qsub je napsáno, jestli aspoň jeden stroj odpovídá mým požadavkům.
- Pokud ano, pokračuji dál.
- Pokud ne, můžu zkusit pokračovat dál, pokud jsou jen stroje aktuálně zabrané někým jiným – můj požadavek se vloží do fronty a po uvolnění zdrojů se sám spustí. Jinak můžu přehodnotit požadavky nebo požádat administrátory o přidělení vyšší priority.

Návod na spuštění úloh v Metacentru



- Spuštění úlohy se provede příkazem `qsub` nakopírovaným ze sestavovače.
- Na konec je třeba připsat název shell skriptu s příponou `.sh`, který spustí Maple a Maplový skript s výpočtem.
 - `qsub -l walltime=1d -l mem=60gb -l scratch=2gb -l nodes=1:ppn=1:x86_64:linux:brno ulohamapleml.sh`
- Putty vypíše název spuštěné úlohy a jméno serveru, na kterém běží. Lze sledovat online na webu Metacentra.
- Po kliknutí na název stroje jsou dostupné podrobnosti o běhu úlohy, např. dokdy se nejpozději ukončí.

Návod na spuštění úloh v Metacentru



úloha	CPU	vyhraz. paměť	použitá paměť	jméno	CPU čas	čas běhu	stav	stroj/cpu	fronta	čas vytvoření
7757201.arien.ics.muni.cz	1	60gb	89mb	ulohamaplempi.sh	00:00:02	00:31:33	R - běží	mandos2/63	q_1d	20.1.15 16:08

- Spuštěné úlohy jsou pro každého uživatele dostupné na adrese:

http://metavo.metacentrum.cz/pbsmon2/user/moje_slozka

Domácí úkol č. 6 (do konce roku)



- Vyjděte z řešení maticového populačního modelu, ve kterém jste zkonstruovali model společenstva více druhů v maticovém tvaru.
- Předpokládejte ve společenstvu 4 stabilní druhy nacházející se v prostředí a přidejte 5. druh, který bude podléhat náhodným mutacím.
- Označte vliv j -tého druhu na i -tý druh (na jeho koeficient růstu) $\beta_{i,j}$ a vnitřní koeficient růstu i -tého druhu α_i .
- Předpokládejte, že pro všechna $i=1, 2, 3, \dots$ platí $\alpha_i=0,9$.

Domácí úkol č. 6



- Nejprve se pokuste nalézt libovolné hodnoty koeficientů $\beta_{i,j}$ společenstva pro všech 5 druhů, takové, že dojde k oscilacím, ale všechny druhy budou z dlouhodobého pohledu koexistovat a nedojde k jejich vyhynutí.
- Vyjádřete graficky výsledek modelu pro 1000 časových jednotek. Pro řešení (simulaci) modelu použijte možnosti superpočítače nabízeného prostřednictvím Metacentra.

Domácí úkol č. 6



- Dále pomocí cyklu měňte koeficienty pátého druhu podle následujících pravidel.
 - Předpokládejme, že každý druh má pouze omezenou možnost investovat svoji energii a schopnosti na přizpůsobení se prostředí a podmínkám daným ostatními druhy ve společenstvu.
 - V průběhu náhodných mutací tedy může dojít ke změnám koeficientů $\beta_{5,j}$, tedy ovlivnění našeho 5. druhu ostatními druhy ve společenství, ale součet koeficientů $\beta_{5,j}$ musí zůstat konstantní:

$$\sum_{j=1}^4 \beta_{5,j} = \textit{konst.}$$

Domácí úkol č. 6



- ○ Každá mutace se projeví vznikem „nového poddruhu“ počínaje číslem 6 a dále, jehož populace bude mít na počátku velikost 1 jedince. Takový poddruh bude v matici vystupovat jako samostatný nový druh.
- Bude tedy zapotřebí měnit velikost matice, se kterou budete pracovat.
- Hodnoty koeficientů $\beta_{i,j}$ pro $i > 4$ určete libovolným (náhodným) způsobem tak, aby byla dodržena podmínka z předchozího slidu:

$$\sum_{j=1}^4 \beta_{s_j} = konst.$$

Domácí úkol č. 6



- Protože nově vzniklé poddruhy budou mít velmi podobné parametry jako původní 5. druh ve společenstvu, budeme předpokládat, že jejich vztah bude silně kompetitivní. Stanovte proto pro všechna $\beta_{i,j}$, kde $i > 4$ a $j > 4$ pravidlo $\beta_{i,j} = c$.
- Konstantu c volte jako velmi nízkou (tj. zápornou) s přihlédnutím k ostatním hodnotám $\beta_{i,j}$ (navrhuji např. -0,05 pokud se budete pohybovat v řádově podobných hodnotách, jaké jsme měli v modelech ze skript).
- To by mělo zajistit, aby z dlouhodobého pohledu přežívala ve společenství vždy jen jedna ze zmutovaných variant 5. populace.

Domácí úkol č. 6



- Zajistěte v náhodných časových okamžicích vznik mutací – tj. objevení se nového n -tého poddruhu s náhodnými koeficienty $\beta_{n,1}$, $\beta_{n,2}$, $\beta_{n,3}$ a $\beta_{n,4}$ a velikostí populace 1.
- Předpokládejte (a v modelu zajistěte), že (pod)druh, jehož populace klesne pod méně než 1 jedince, vyhyne a ze společenství definitivně zmizí.
- To se provede nejlépe testováním (ve vhodných časech) a případným vyloučením řádku z matice.

Domácí úkol č. 6



- Při správné konstrukci celého modelu bude docházet k tomu, že pokud bude nově se objevivší poddruh mít „lepší“ koeficienty (které ovšem neumíme analyticky určit) než předchozí poddruhy (tj. z pohledu modelu druhy s pořadovými čísly $i > 5$), postupně dojde k tomu, že vytlačí předchozí zmutované poddruhy a zaujme stabilní pozici v modelu.
- Pokud naopak mutace povede ke vzniku (v daném společenství) méně životaschopného poddruhu, ten po nějaké době vyhyne.

Domácí úkol č. 6



- Pokuste se zajistit vizualizaci modelu s mutacemi pomocí grafu velikostí populací v čase, kde jednotlivé (pod)druhy zobrazíte různými barvami.
- Navrhněte stručnou interpretaci modelu a pokuste se zodpovědět otázku, jak vypadá mutacemi vzniklý poddruh 5. druhu, který v systému zaujme nejstabilnější pozici (jde v podstatě o výsledek evoluce za zjednodušujícího předpokladu, že prostředí ani ostatní druhy se v čase nemění).

Domáci úkol č. 6

