

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

**1. lekce / modul 2**

**PS/2021 Prezenční forma výuky: Rev3**

**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

---

- **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 nabyté 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 2021

- Národní gridová infrastruktura, OS Debian, OS CentOS
- cca **28000 CPU** jader, **15 PiB** diskové pole, **17 PiB** hierarchická úložiště

Účet může získat student libovolné vysoké školy ČR.

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

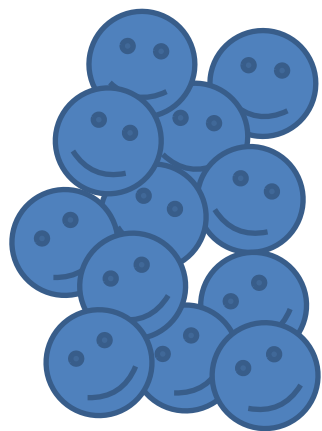
- Národní superpočítačové centrum, OS CentOS
- karolina (výkon 15,2 PFLOP/s, CPU+GPU, 2021)
- barbora (výkon 826 TFLOP/s, CPU+GPU, 2019)
- ~~salomon (výkon 2 PFLOP/s)~~
  - ~~(TOP500, 40. místo 09/2015) (TOP500, 139. místo 06/2018)~~
- ~~anselm (cca 3000 CPU jader, 15TB RAM, 2013)~~

O strojový čas se žádá formou grantových soutěží.

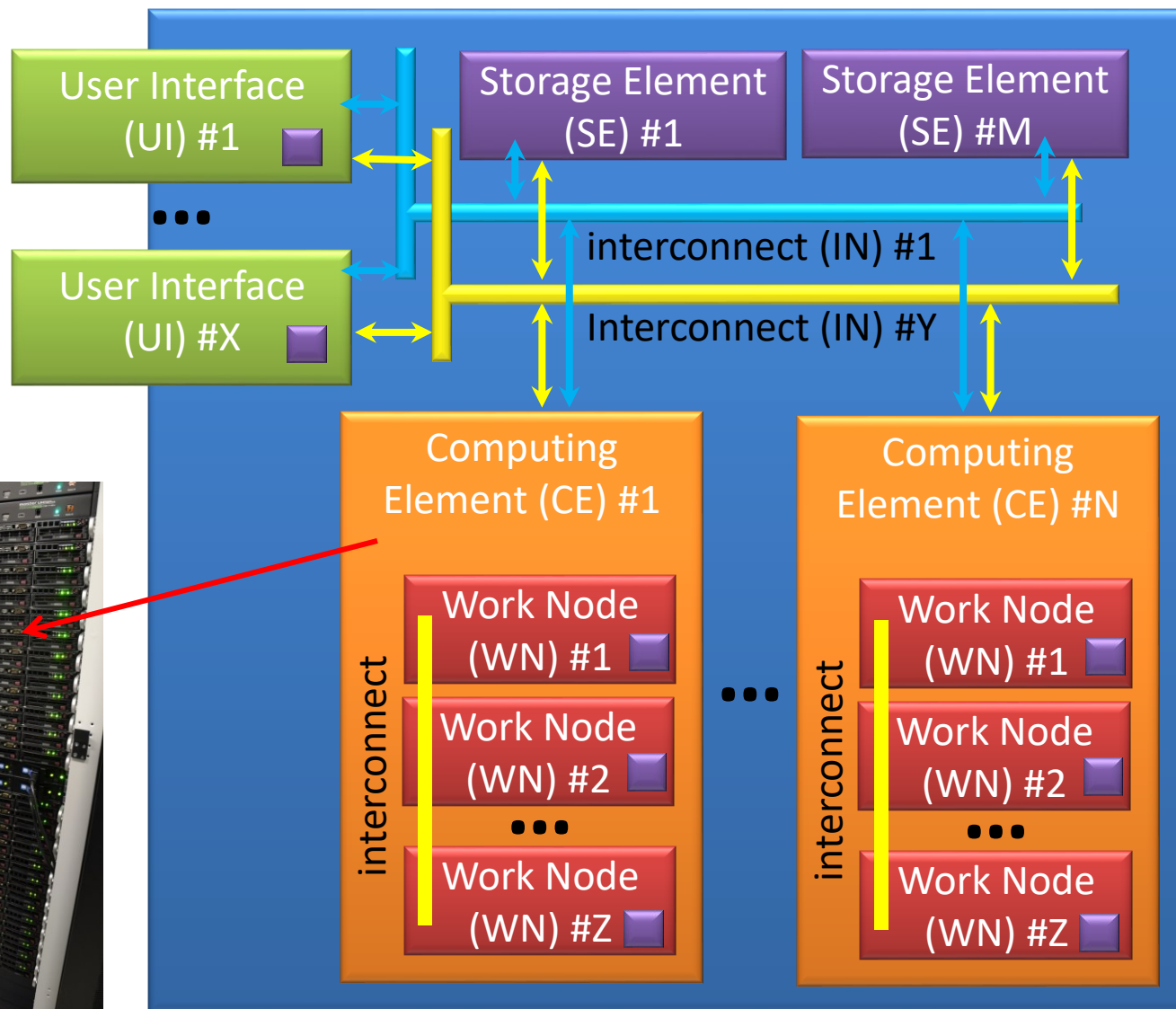
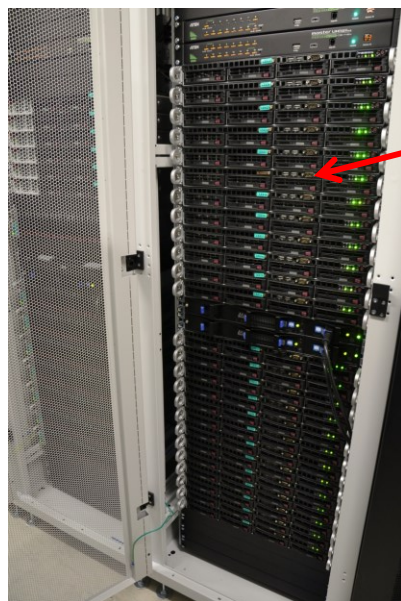
## Lokální výpočetní klastry

- např. LCC – laboratoř výpočetní chemie

# Superpočítače



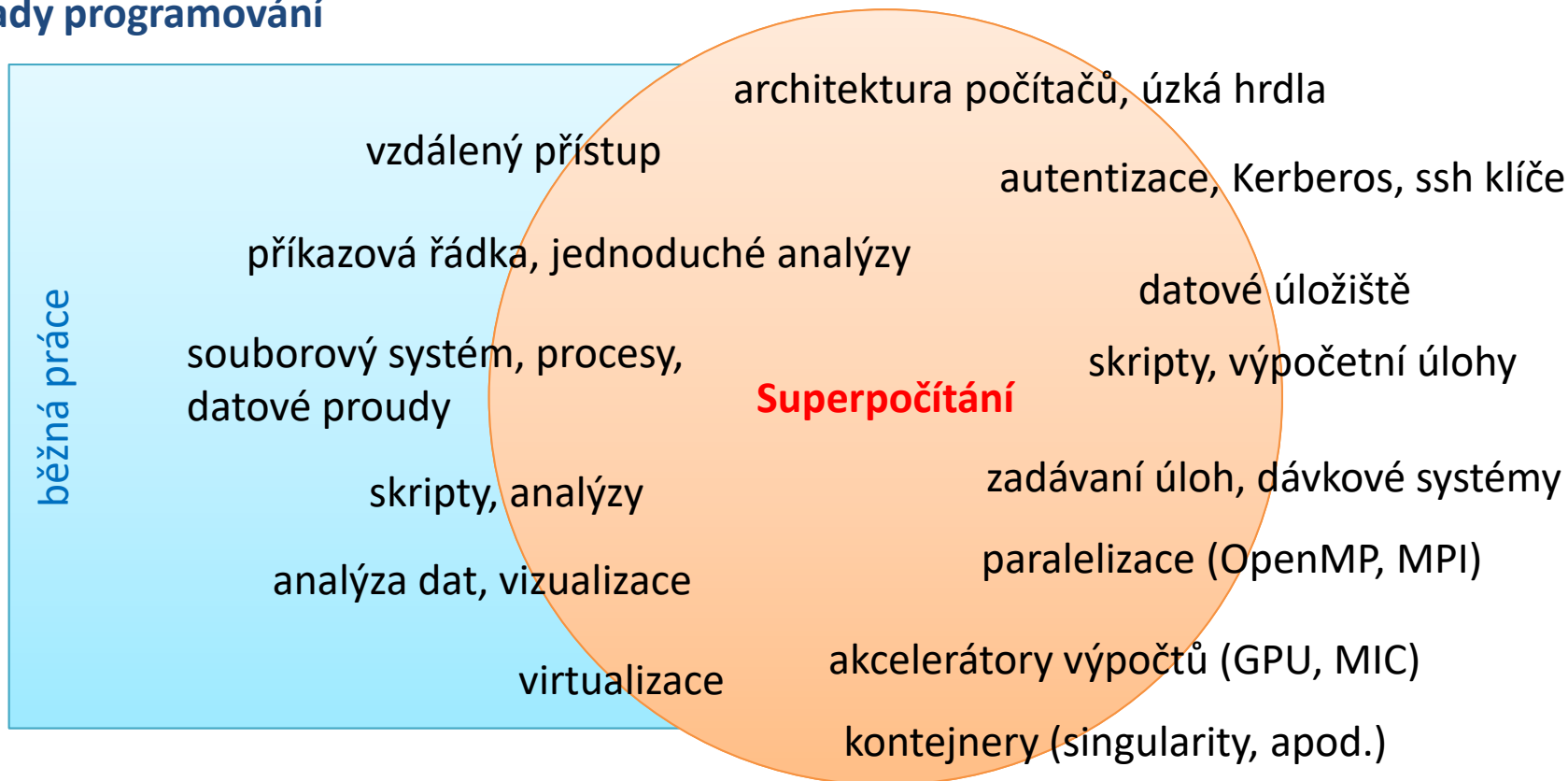
users



# C2110 vs C2115

## C2110 Operační systém UNIX a základy programování

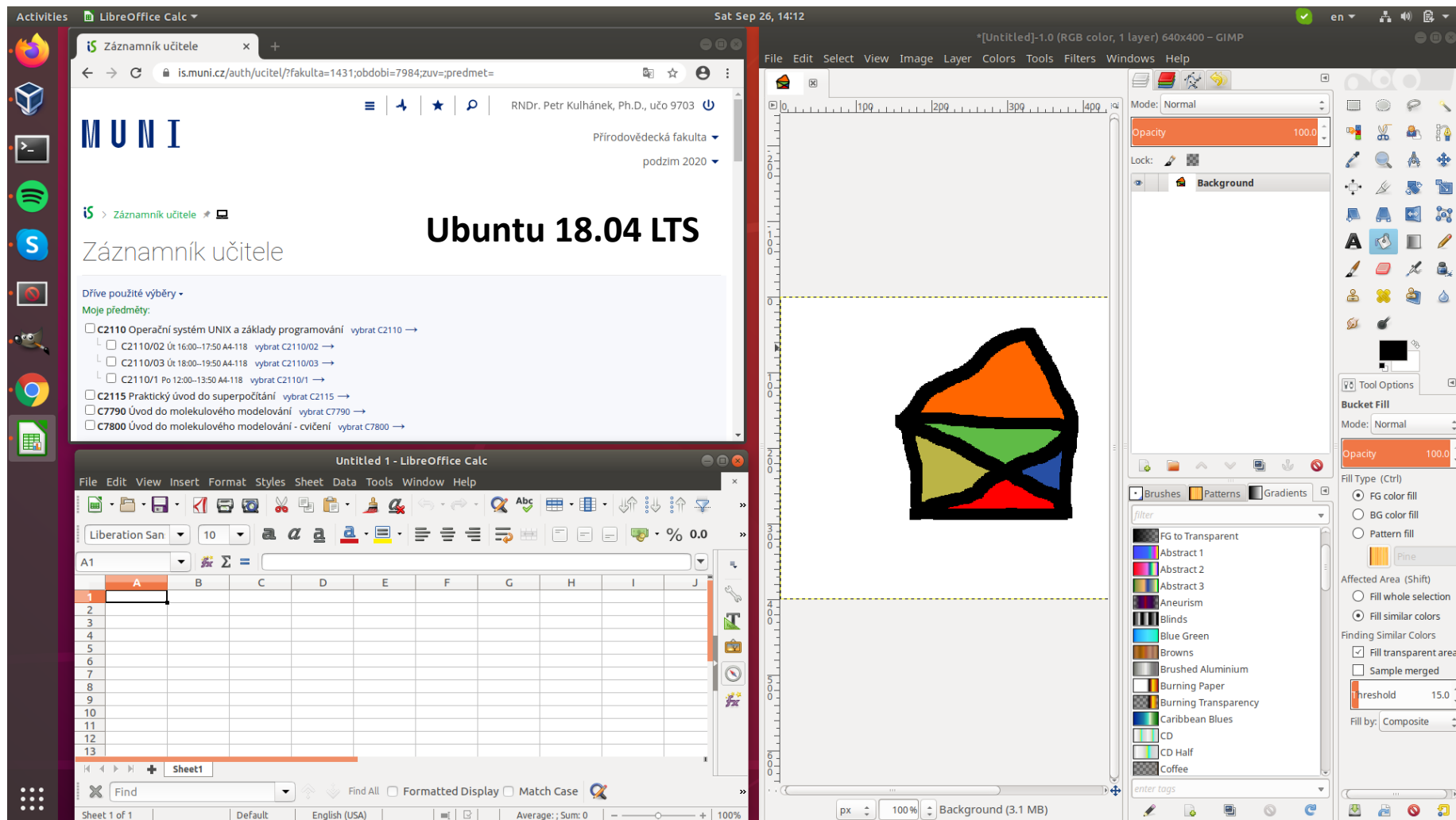
## C2115 Praktický úvod do superpočítání



### C2115 je navazující předmět na C2110

- podzimní semestr – bloková výuka (leden 2022)
- 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

The screenshot shows a virtual machine environment. The host is Ubuntu 18.04 LTS, running a web browser displaying the 'Zápisník učitele' (Teacher's Notebook) page on the MUNI website. The guest is MS Windows 10, running a presentation titled 'C2110 vs C2115' and 'Linux - Desktopový systém'. Blue arrows point from the host and guest labels to the respective parts of the screenshot.

**Hostitel: Ubuntu 18.04 LTS**

**Host: MS Windows 10 (virtuální stroj)**

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

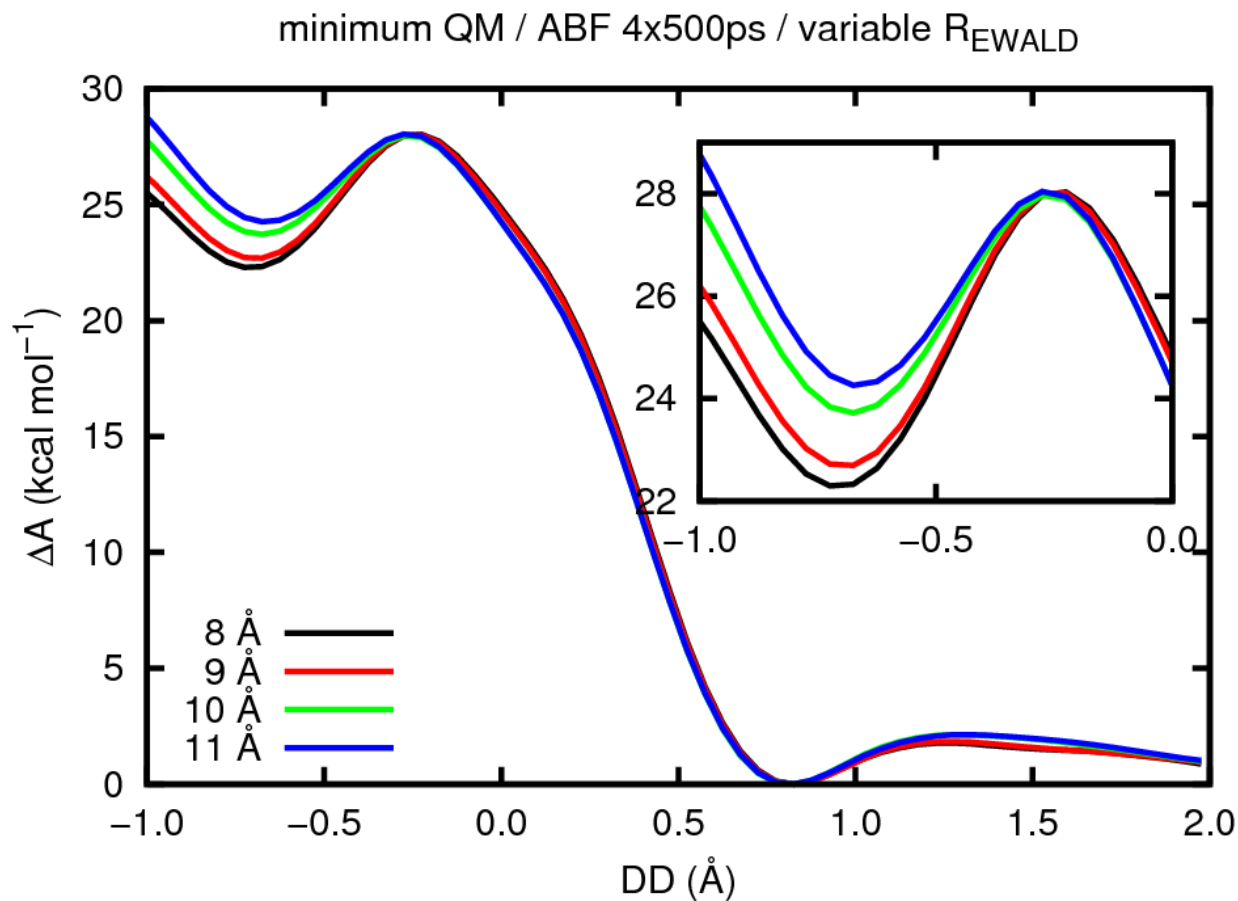
Snadná extrakce dat pomocí jazyka AWK.  
(výstupy výpočetních programů)

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

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

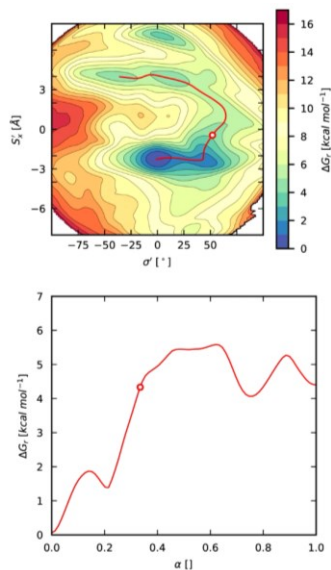
```
$ grep TIME rst.out | awk '{ print $6, $9 }'  
$ awk '/TIME/{ print $6, $9 }' rst.out
```

# Vizualizace výsledků

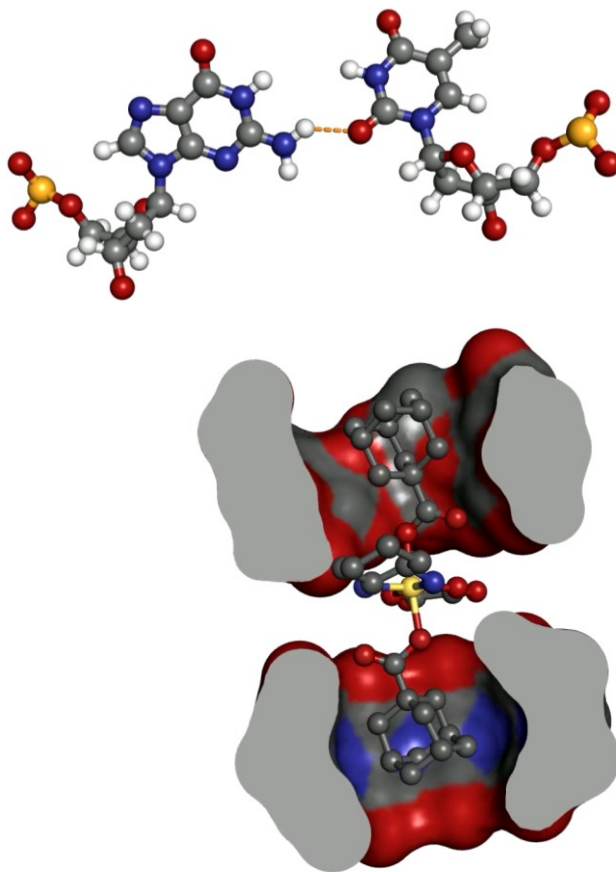


Zobrazování extrahovaných dat ve formě grafů (gnuplot).

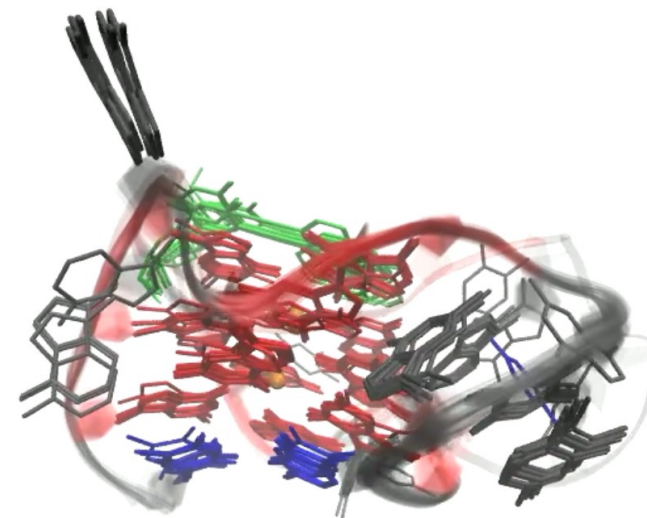
# Automatizace



aG/aT mismatch: Tomáš Bouchal



**Ukázat video**



Kvadruplex: Ivo Durník

Supramolekulární komplex: Ivo Durník

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

# Domácí úkoly

---



# Domácí úkol

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 Barbora a Karolina?
4. Jaké operační systémy jsou použity na prvních 10 nejrychlejších superpočítačích světa?



Domácí úkol