Revize 3

C2115 Praktický úvod do superpočítání

6. lekce

Petr Kulhánek

kulhanek@chemi.muni.cz

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

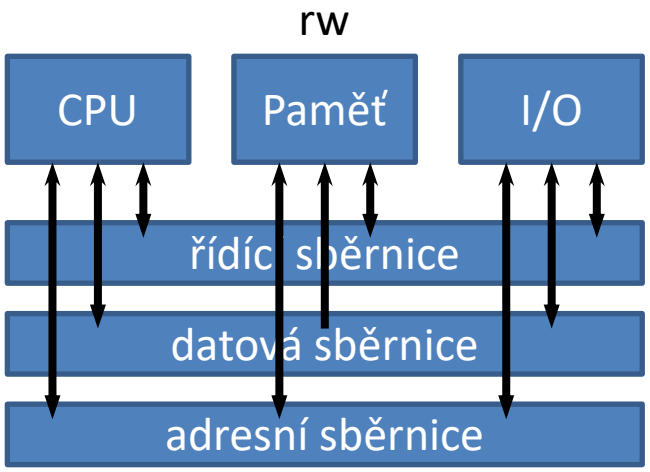
Obsah

- **Architektura počítače**
  CPU, paměť, grafický systém, disky, síť, periferie
- **Spouštíme úlohy**
  skripty vs programy, procesy, nohup, screen, VNC

Architektura počítače

Přehled

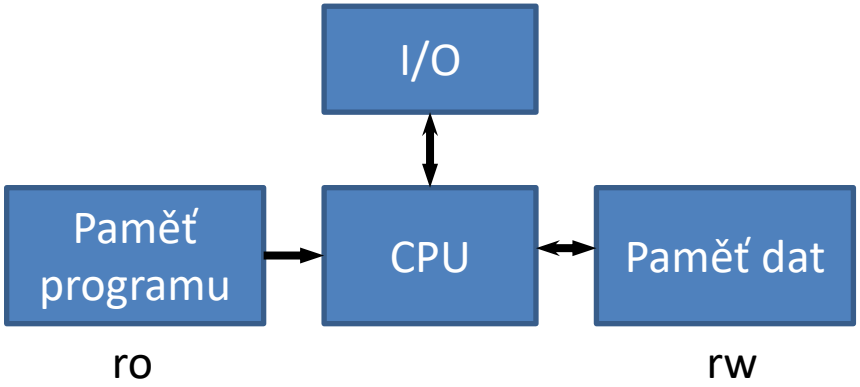
1945 von Neumannova architektura



- program může sebe modifikovat
- program a data nelze načítat současně

John von Neumann, původem maďarský matematik, působící ve spojených státech

1944 Hardwardská architektura

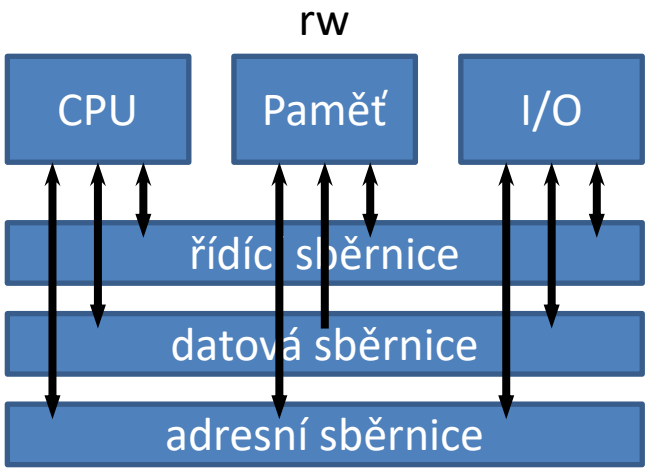


- program se nemůže modifikovat
- program a data se mohou načítat současně

Harvard Mark I - počítač složeny z relé, 24 bitové instrukce

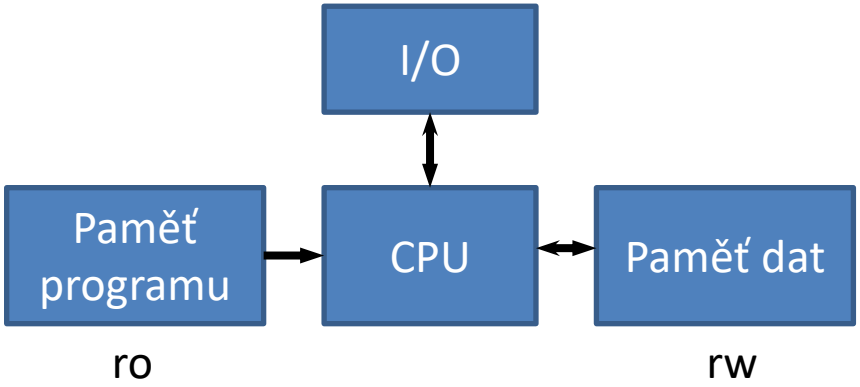
Přehled

1945 von Neumannova architektura



- program může sebe modifikovat
- program a data nelze načítat současně

1944 Hardwardská architektura



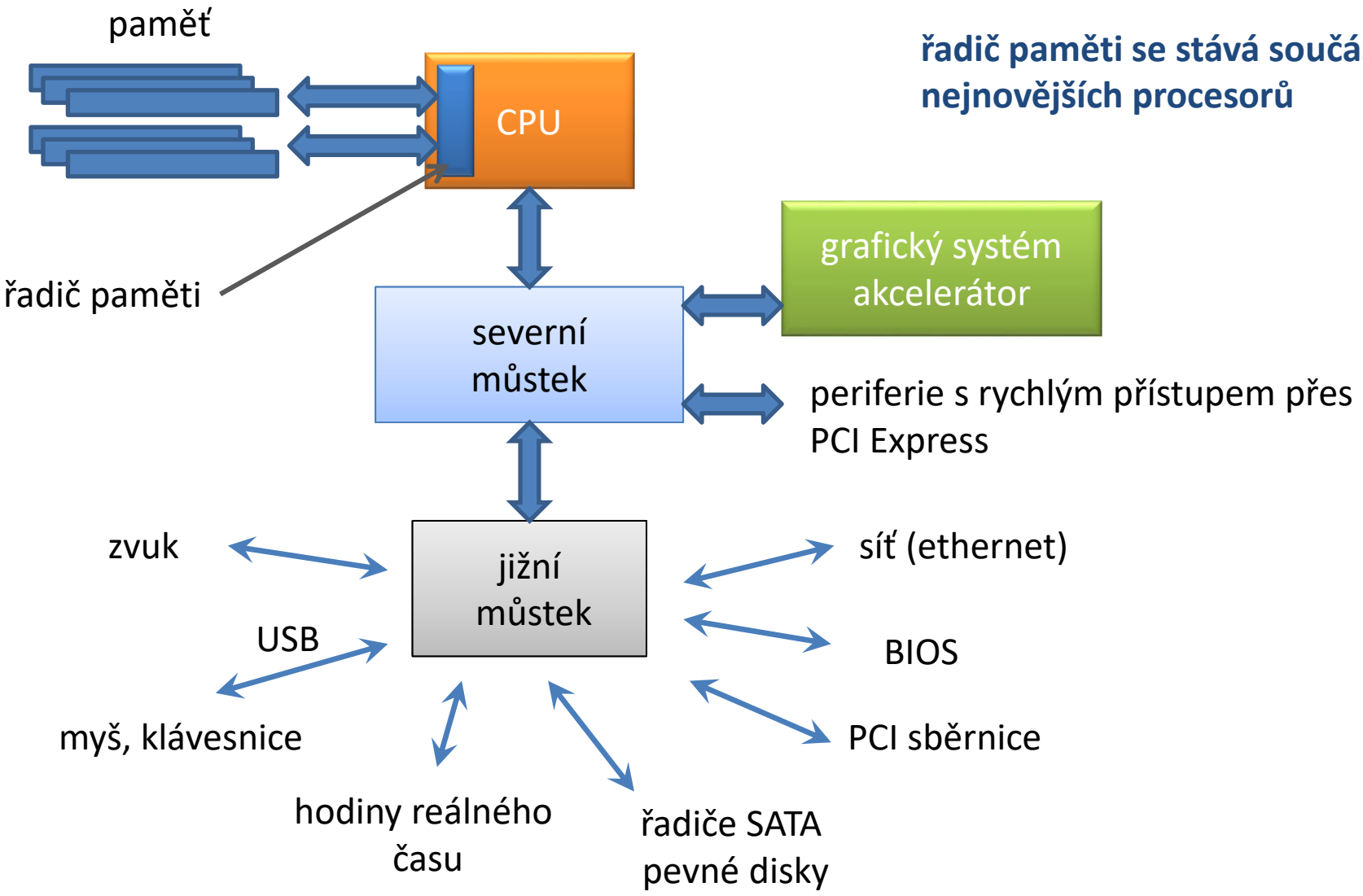
- program se nemůže modifikovat
- program a data se mohou načítat současně

v dnešních počítačích se kombinují obě architektury

John von Neumann, původem maďarský matematik, působící ve spojených státech

Harvard Mark I - počítač složeny z relé, 24 bitové instrukce

Typické schéma počítače

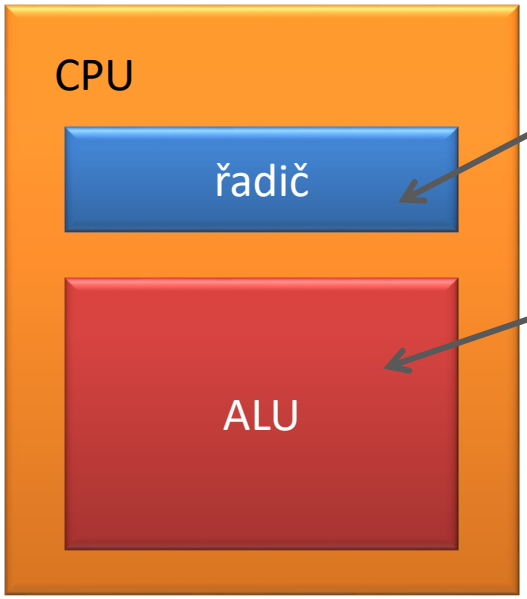


řadič paměti se stává součástí nejnovějších procesorů

CPU

Procesor též **CPU** (anglicky **Central Processing Unit**) je základní součástí počítače; jde o velmi složitý sekvenční obvod, který **vykonává strojový kód** uložený v operační paměti počítače. Strojový kód je složen z jednotlivých strojových instrukcí počítačových programů nahraných do operační paměti.

www.wikipedia.org



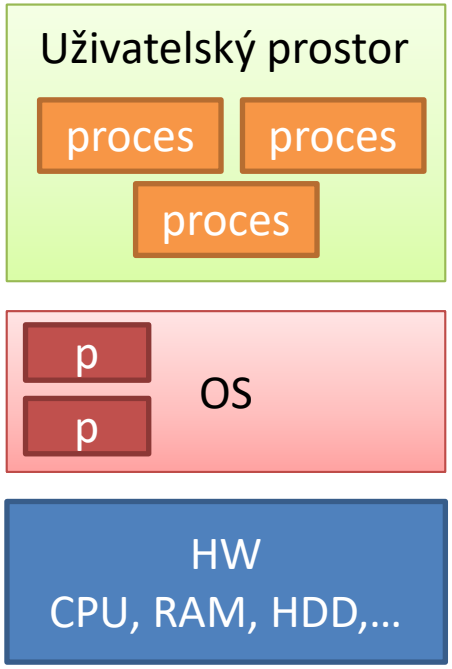
načítá strojové instrukce a data a připravuje jejich zpracování v ALU

ALU (arithmetic and logic unit), vykonává aritmetické operace, vyhodnocuje podmínky

sekvenční zpracovávání strojových instrukcí je řízeno vnitřním hodinovým taktem

Výpočetní úlohy

Úlohy vs Procesy



Proces (anglicky process) je v informatice název pro **spuštěný počítačový program**. Proces je **umístěn v operační paměti počítače** v podobě **sledu strojových instrukcí vykonávaných procesorem**. **Správu procesů vykonává operační systém**, který zajišťuje jejich oddělený běh, přiděluje jim systémové prostředky počítače a umožňuje uživateli procesy spravovat (spouštět, ukončovat atp.).

Multitasking (z angličtiny, multi = mnoho, task = úloha, používán ve víceúlohovém systému) označuje v informatice **schopnost operačního systému provádět několik procesů současně** (přinejmenším zdánlivě). Jádro operačního systému velmi rychle střídá na procesoru či procesorech běžící procesy (tzv. změna kontextu), takže uživatel počítače má dojem, že běží všechny současně.

upraveno z wikipedia.org

Výpočetní úloha je proces nebo skupina procesů.

Programy *vs* Skripty

Program je soubor strojových instrukcí zpracovávaných přímo procesorem. Program vzniká překladem zdrojového kódu programovacího jazyka.

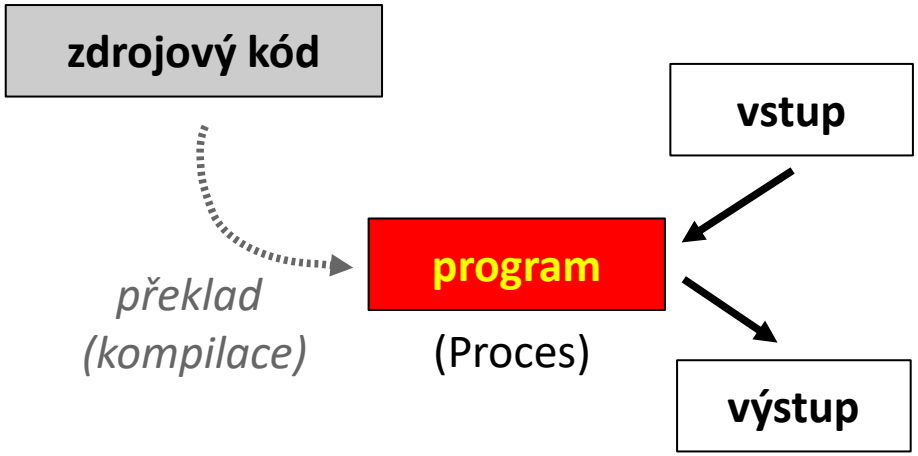
Překládané jazyky:

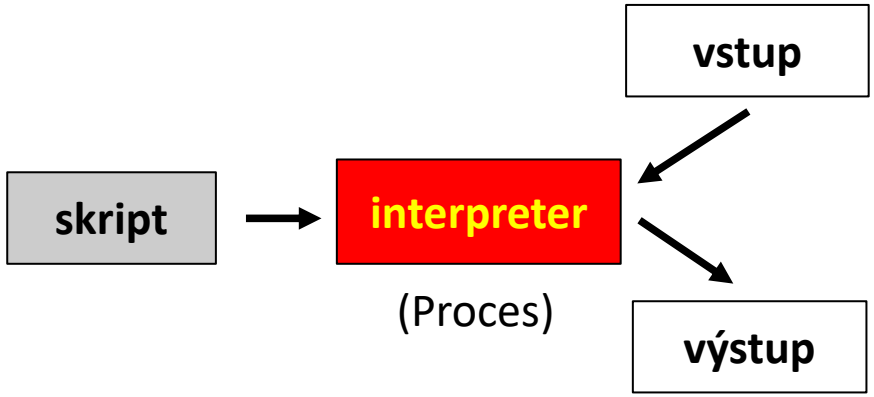
- **C/C++**
- **Fortran**

Skript je textový soubor obsahující příkazy a řídící sekvence, které jsou vykonávány interpreterem použitého skriptovacího jazyka.

Skriptovací jazyky:

- **bash**
- **gnuplot**
- **awk**
- JavaScript
- PHP





Programy *vs* Skripty

Programy určené pro **náročné vědeckotechnické výpočty** jsou vždy psané v **kompilovatelných programovacích jazycích.** Mezi tyto jazyky patří:

- Fortran
- C/C++

Skriptovací jazyky se pro náročné výpočty buď vůbec nepoužívají nebo se používají v **podpůrných částech výpočtů**, které nejsou výpočetně náročné.

Příkazy

top	průběžně zobrazuje procesy setříděné podle zátěže procesoru (ukončení klávesou q)
ps	vypíše procesy běžící v daném terminálu nebo podle zadaných specifikací (`ps -u user_name`)
pstree	vypíše procesy (stromový výpis)
type	vypíše cestu k standardní aplikaci/příkazu
kill	zašle signál procesu, lze použít k ukončení problematických programů
time	vypíše délku běhu procesu
ssh	spustí příkaz na vzdáleném počítači
sleep	spustí proces, který čeká po zadanou dobu
&	spustí proces na pozadí
wait	čeká na dokončení procesů na pozadí
nohup	spustí proces bez interakce s terminálem
screen	screen terminal multiplexer
vncserver	spustí VNC server } tigervnc
vncwiever	připojí se k VNC serveru } tigervnc

Cvičení 1

1. Určete procentuální zastoupení programů napsaných v jazyku Fortran, C/C++ a jiný, které jsou uvedeny na následující stránce:

   http://en.wikipedia.org/wiki/List_of_quantum_chemistry_and_solid_state_physics_software

   Výsledek znázorněte ve formě výsečového grafu.

Poznámka: k řešení použijte příkazy grep a wc.

Cvičení 2

1. Přihlaste se na jiný uzel klastru WOLF ve dvou terminálech. V jednom spusťte příkaz:

```
$ top -u <login_name>
```

2. V druhém terminálu spusťte program pi (součástí systému). K čemu slouží?
3. Napište skript, který vypočítá číslo pi s přesností od 10 až po 10000 cifer. Výsledné čísla pí ukládejte do souboru pi.txt.
4. Skript spusťte na pozadí a odhlaste se z uzlu.
5. Co se stane?
6. Znovu se přihlaste na uzel. Běžící úlohu zabijte.
7. Upravte skript tak, aby se výsledek vypisoval na standardní výstup. Skript spusťte znovu, tentokrát na popředí.
8. Co se stane, když dojde k přerušení síťového spojeni? K čemu slouží signál SIGHUP?

Spouštíme úlohy

- nohup
- screen
- tigervnc

Spouštění úloh

Pro spuštění úlohy, která je imunní vůči ukončení signálem SIGHUP, je možné použít:

- nohup (pro neinteraktivní úlohy)
- screen nebo tmux (pro interaktivní úlohy)
- VNC sezení (pro GUI úlohy)
- **dávkový systém**

- Příkazy nohup, screen, tmux používáme pouze pro spouštění úloh na počítačích, kde není dostupný dávkový systém.
- V superpočítačových centrech je možné tyto příkazy používat pouze v dávkových úlohách (screen, VNC) nebo pro spouštění servisních úloh (které nejsou výpočetně náročné) na čelních uzlech.

nohup

Typické použití:

```
$ nohup ./my_script &
```

Výstup ze skriptu *my_script* se připojí do souboru *nohup.out*.

Poznámka:

- Procesy běžící na pozadí (spuštěné pomocí nohup) mohou být ukončeny správcem systemd po ukončení posledního sezení uživatele.
- Tomu je možné zabránit změnou konfigurace:

```
/etc/systemd/login.conf
[Login]
KillUserProcesses=no
```

screen

Typické použití:

```
$ screen
  win1$ ./my_script
  win1$                          # Ctrl+a d – odpojí sezení
$ screen –list                   # vypise otevrena sezeni
$ screen –r session.id           # pripoji se k sezeni
```

Poznámka:

- Procesy běžící na pozadí (screen a procesy běžící v jeho instanci) mohou být ukončeny správcem systemd po ukončení posledního sezení uživatele.
- Tomu je možné zabránit změnou konfigurace:

```
/etc/systemd/login.conf
[Login]
KillUserProcesses=no
```

Cvičení 3

1. Přihlaste se na jiný uzel klastru WOLF.
2. Otevřete sezení programem screen. Spusťte v něm skript na výpočet čísla pí.
3. Odpojte se ze sezení a odhlaste se z uzlu.
4. Opětovně se přihlaste se na uzel a obnovte sezení v programu screen. Co pozorujete?

VNC

Virtual Network Computing (VNC) je grafický program, který umožňuje vzdálené připojení ke grafickému uživatelskému rozhraní pomocí počítačové sítě.

VNC pracuje jako klient-server, kde server vytváří grafickou plochu v operační paměti počítače a komunikuje přes síť s klientem, který plochu zobrazuje uživateli (většinou na jiném počítači).

Pro komunikaci se používá protokol RFB (anglicky remote framebuffer), jehož cílem je minimalizovat objem přenášených dat mezi klientem a serverem a umožnit tak komunikaci i přes pomalejší datové linky (např. přes Internet).

VNC ve výchozí konfiguraci nenabízí zabezpečený přenos dat!!!!

Poznámka:

- Procesy běžící (vncserver) na pozadí mohou být ukončeny správcem systemd po ukončení posledního sezení uživatele.
- Tomu je možné zabránit změnou konfigurace:

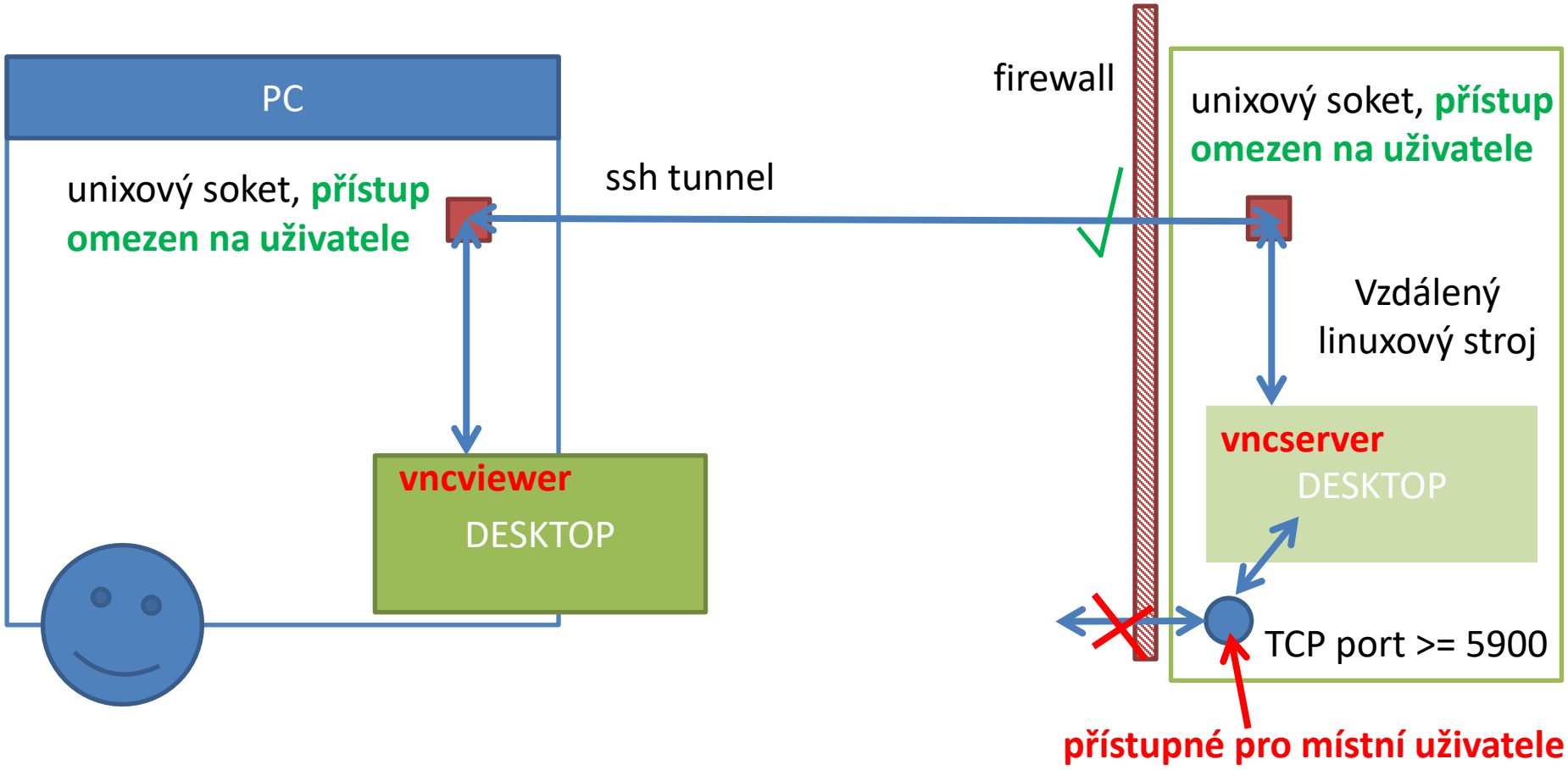
```
/etc/systemd/login.conf
[Login]
KillUserProcesses=no
```

wikipedia.cz

VNC - zabezpečení přenosu

Zabezpečení přenosu je poměrně komplikované. Buď vyžadující vytvoření X.509 certifikátu nebo zajištění zabezpečené linky pomocí ssh tunelování.

Druhou možnost nabízí upravené verze programů **vncviever** a **vncserver** z modulu **tigervnc**.



tigervnc

1

server

```
wolf39$ module add tigervnc
wolf39$ vncserver
..
VNCID:  kulhanek@wolf39.ncbr.muni.cz:1
..
wolf39$
```

2

klient

```
wolf01$ module add tigervnc
wolf01$ vncviewer kulhanek@wolf39.ncbr.muni.cz:1
```

Cvičení 4

1. Spusťte na jiném uzlu klastru WOLF vncserver z modulu tigervnc a připojte se k němu z vaší pracovní stanice. Ve VNC sezení spusťte program VMD a vněm otevřete model nanovlákna chitinu. Sezení nechte otevřené.
2. Na stejném uzlu klastru WOLF, který jsem použili v předchozím úkolu, spusťte program VMD (za použití exportu displeje) a v něm opět zobrazte model nanovlákna chitinu.
3. Srovnejte rychlost interaktivní práce s programem VMD, který zobrazuje pomocí VNC a přímo. Pozorování diskutujte.