

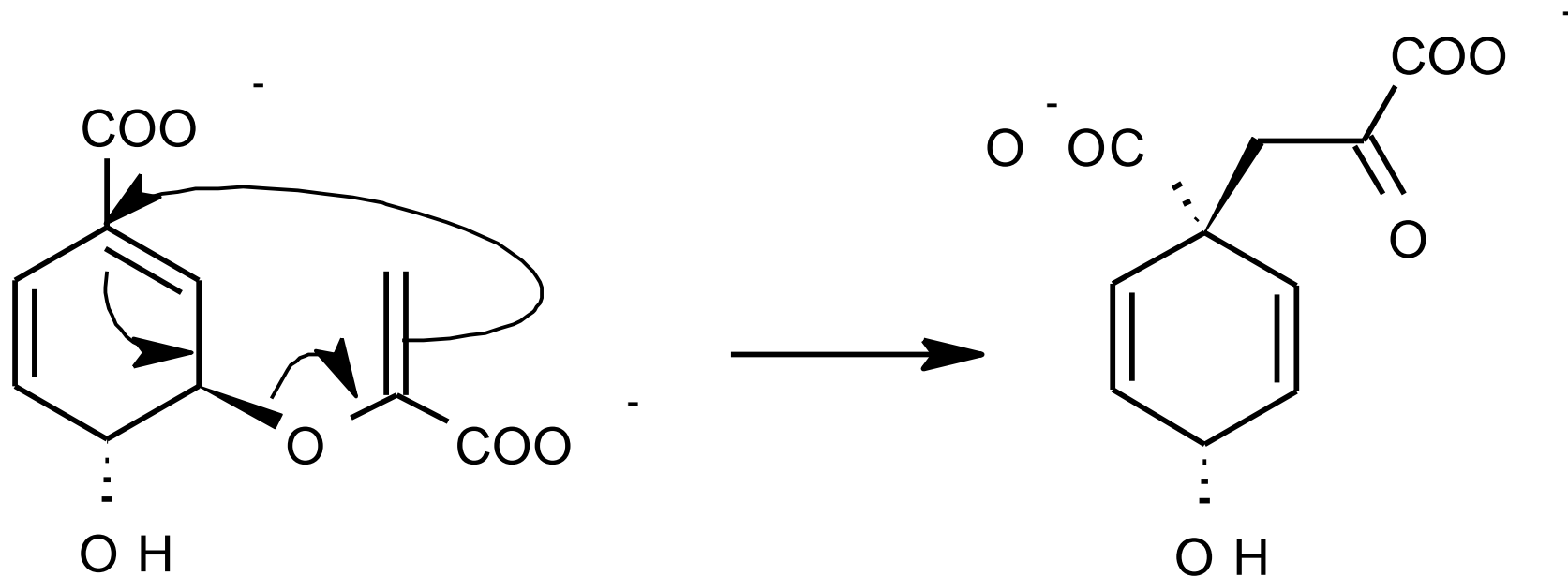
# Studium enzymatické reakce metodami výpočetní chemie

2. kolo

Petr Kulhánek, Zora Střelcová

[kulhanek@chemi.muni.cz](mailto:kulhanek@chemi.muni.cz)

CEITEC - Středoevropský technologický institut  
Masarykova univerzita, Kamenice 5, 625 00 Brno



**Přeměna chorismátu na prefenát  
(modelování reakce ve vakuu)**

# I. část

(prerekvizity)

# II. část

(molekulová mechanika)

# III. část

(klastr WOLF)

# IV. část

(kvantová mechanika)

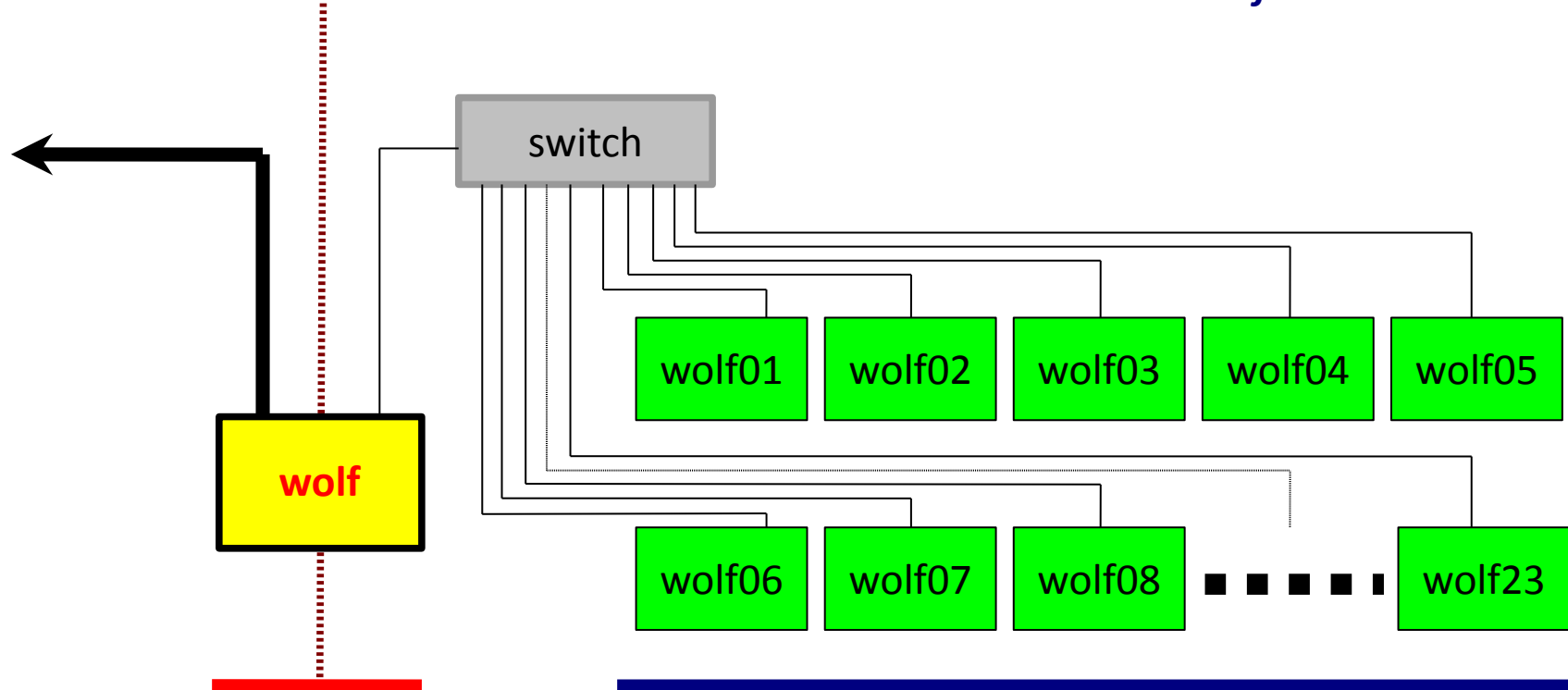
# Klastr WOLF

# Struktura klastru WOLF

univerzitní síť  
**wolf.ncbr.muni.cz**

místní síť  
**wolf.wolf.inet**

veřejně nedostupná doména:  
**wolf.inet**



server

pracovní stanice (výpočetní uzly)

Operační systém: **Ubuntu 10.04 (Lucid) LTS**

<http://www.ubuntu.com/>

# Pravidla používání

**Klaster WOLF je určen výhradně pro účely výuky či pro vědeckou práci v rámci Národního centra pro výzkum biomolekul.**

## **Klaster 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

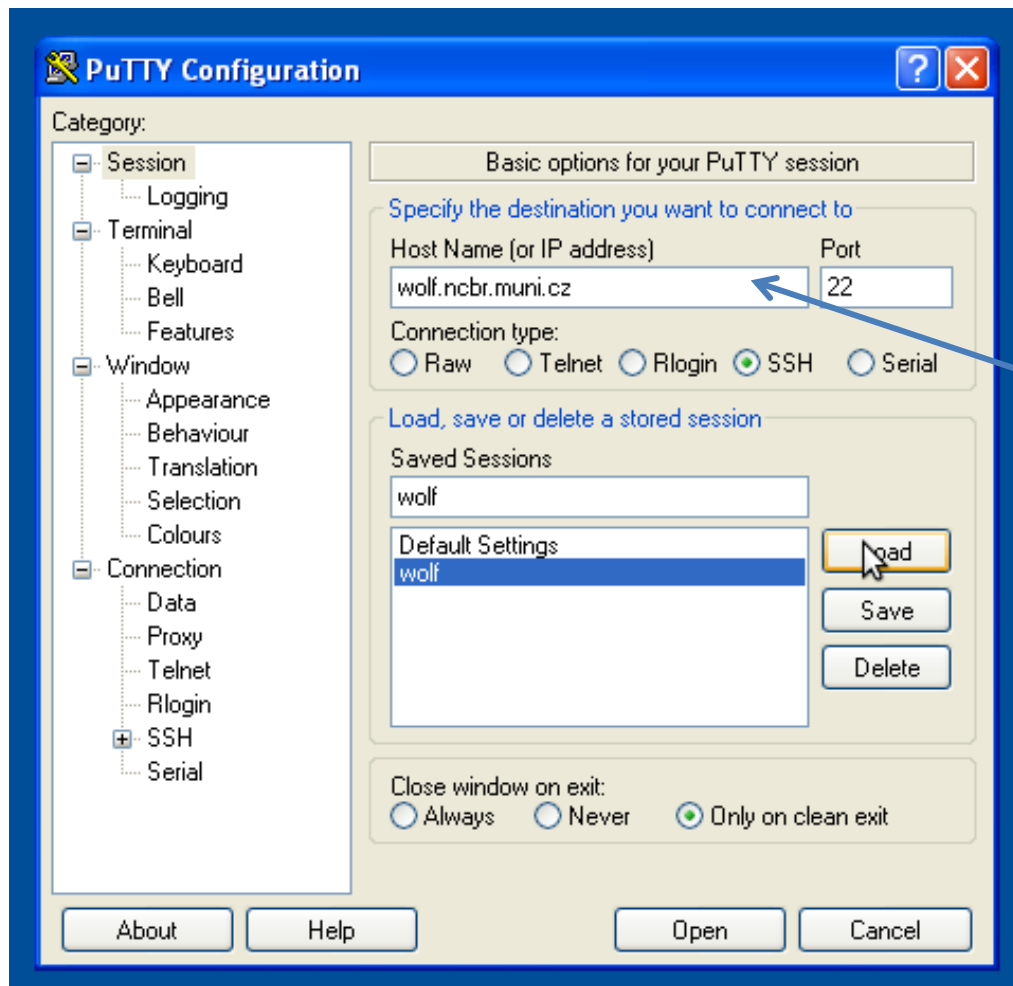
## **Dodržují se pravidla užívání počítačové sítě Masarykovy univerzity:**

[https://is.muni.cz/auth/do/rect/normy/smernicerektora/Smernice\\_rektora\\_13-2005.pdf](https://is.muni.cz/auth/do/rect/normy/smernicerektora/Smernice_rektora_13-2005.pdf)

# Vzdálené přihlášení z MS Windows

Putty

<http://www.chiark.greenend.org.uk/~sgtatham/putty/>

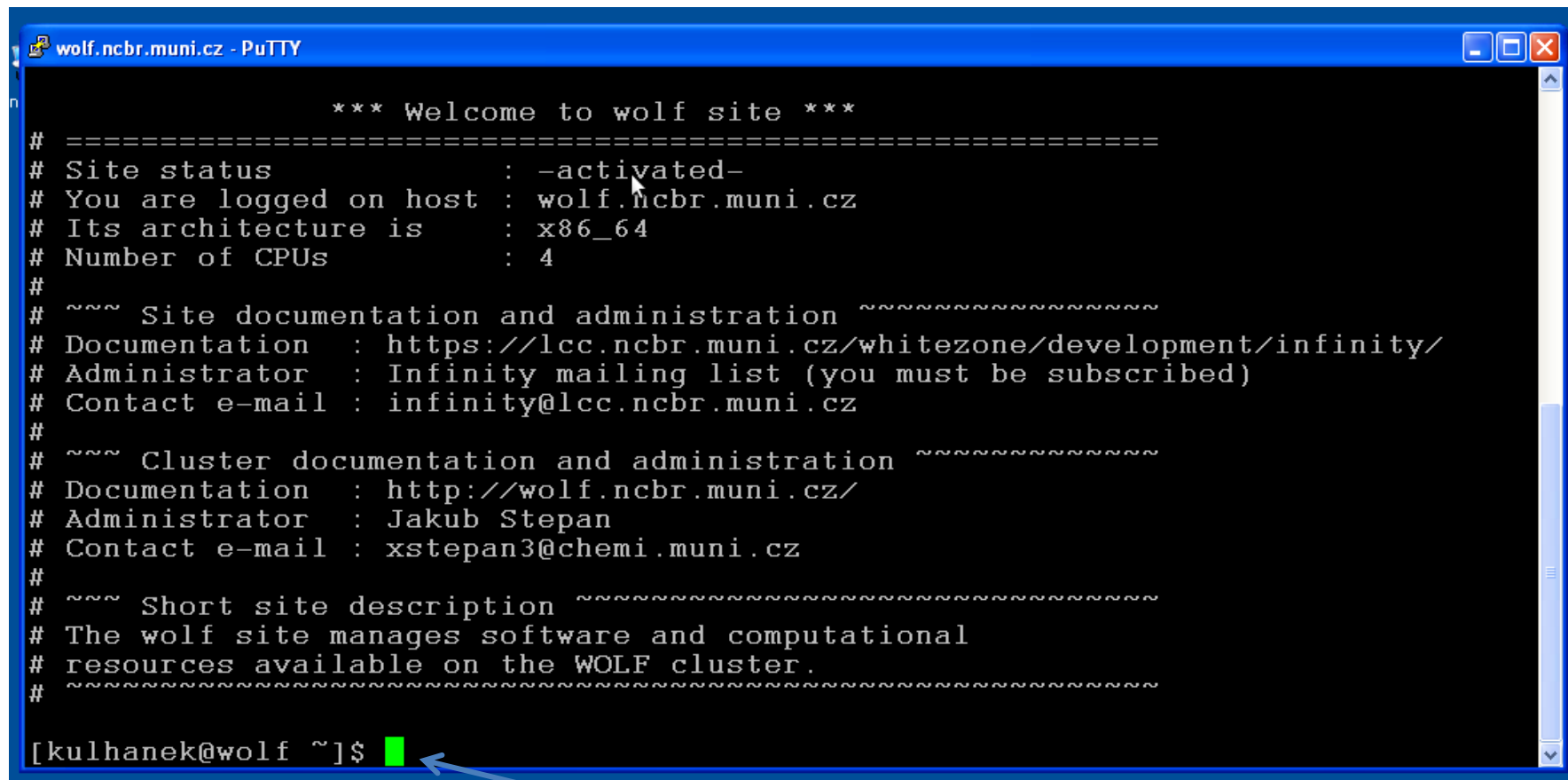


**wolf.ncbr.muni.cz**

# Vzdálené přihlášení z MS Windows

Putty

<http://www.chiark.greenend.org.uk/~sgtatham/putty/>



```
wolf.ncbr.muni.cz - PuTTY
*** Welcome to wolf site ***
# =====
# Site status      : -activated-
# You are logged on host : wolf.ncbr.muni.cz
# Its architecture is  : x86_64
# Number of CPUs     : 4
#
# ~~~ Site documentation and administration ~~~~~
# Documentation      : https://lcc.ncbr.muni.cz/whitezone/development/infinity/
# Administrator      : Infinity mailing list (you must be subscribed)
# Contact e-mail     : infinity@lcc.ncbr.muni.cz
#
# ~~~ Cluster documentation and administration ~~~~~
# Documentation      : http://wolf.ncbr.muni.cz/
# Administrator      : Jakub Stepan
# Contact e-mail     : xstepan3@chemi.muni.cz
#
# ~~~ Short site description ~~~~~
# The wolf site manages software and computational
# resources available on the WOLF cluster.
# ~~~~~
[kulhanek@wolf ~]$
```

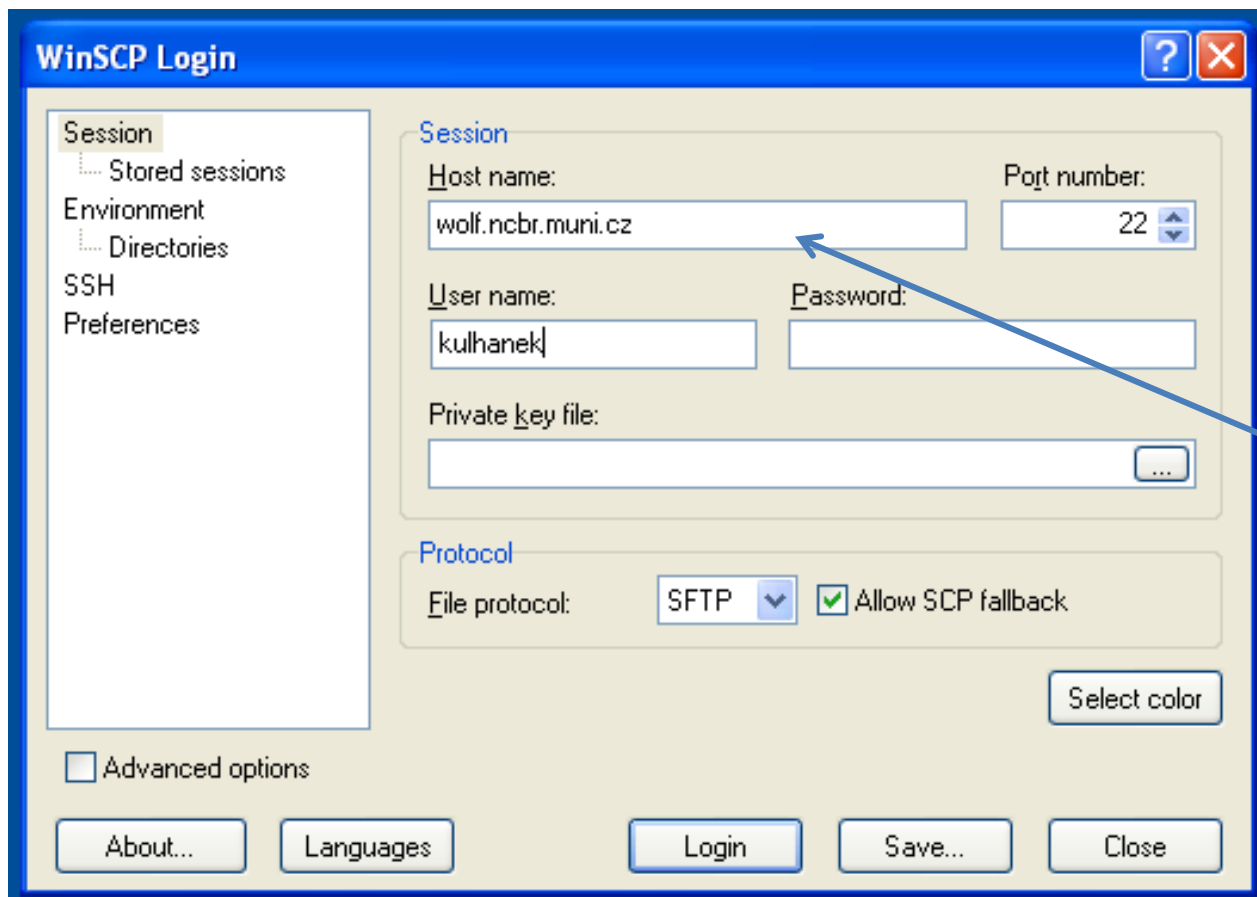
→ příkazová řádka



# Vzdálené kopírování z MS Windows

WinSCP

<http://winscp.net/eng/docs/lang:cs>

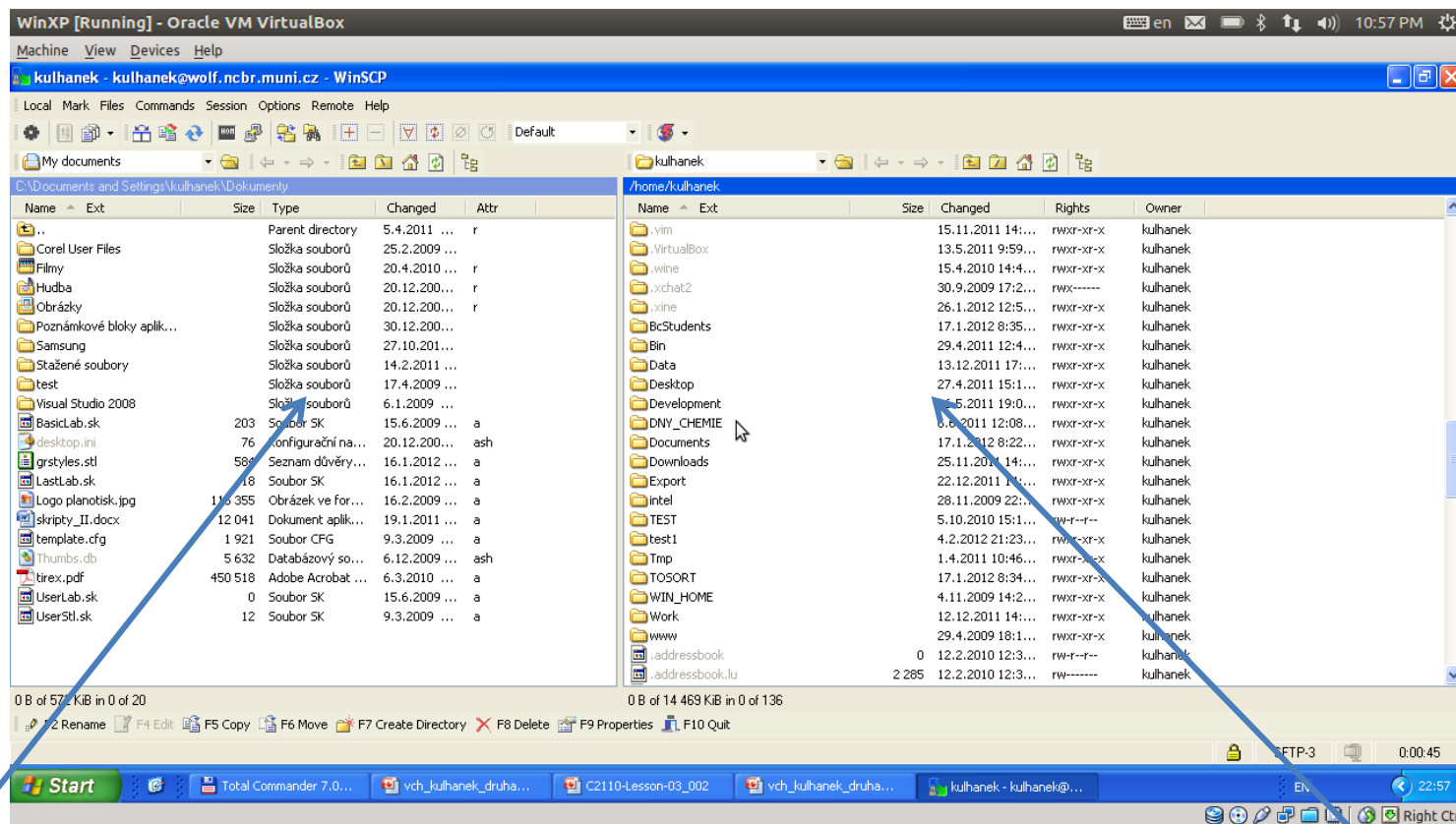


wolf.ncbr.muni.cz

# Vzdálené kopírování z MS Windows

WinSCP

<http://winscp.net/eng/docs/lang:cs>



lokální souborový systém

vzdálený souborový systém

# Vzdálené přihlášení z Linuxu

Existuje několik možností vzdáleného přihlášení (rsh, XDMCP, apod.) avšak nejpoužívanějším a **nejbezpečnějším** je použití příkazu **ssh** (secure shell).

## Syntaxe:

```
$ ssh [user@]hostname [command]           [] - možno vynechat
```

jméno uživatele;  
pokud není uvedeno, použije se  
jméno přihlášeného uživatele

jméno počítače

příkaz, který se má vykonat;  
pokud není uveden, zpřístupní se  
příkazová řádka

## Příklady použití:

```
$ ssh vibuch01@wolf.ncbr.muni.cz
```

# Vzdálené kopírování z Linuxu

Ke vzdálenému kopírování se používá příkaz **scp**. Pokud nemá lokální počítač veřejnou IP adresu, musí být příkaz scp spuštěn pouze z tohoto lokálního počítače.

## Syntaxe:

```
$ scp co kam
```



**Lokální soubor:**

```
/cesta/k/souboru.txt
```

**Vzdálený soubor:**

```
[user@]hostname:/cesta/k/souboru.txt
```

## Příklady použití:

```
$ scp vstup.com vibuch01@wolf.ncbr.muni.cz:/home/vibuch01/test1/
```

```
$ scp vibuch01@wolf.ncbr.muni.cz:/home/vibuch01/test1/vysledek.xyz .
```

# Linux ↔ MS Windows

## Přihlašování do Linuxu z MS Windows (textový terminál):

- › **putty** (<http://www.chiark.greenend.org.uk/~sgtatham/putty/>)
- › **ssh** (např. z prostředí Cygwin; <http://www.cygwin.com/>)

## Kopírování dat mezi Linuxem a MS Windows:

- › **WinSCP** (<http://winscp.net>)

## Export displeje z Linuxu do MS Windows (X11 server):

- › **Xming** (<http://sourceforge.net/projects/xming/>)
- › **cygwin** (<http://www.cygwin.com/>)
- › celá řada komerčních řešení

## Přihlašování z Linuxu do MS Windows (vzdálená plocha):

- › **rdesktop**

# Linux v kostce

# Souborový systém

Vlastnost	Linux (ext2/ext3/ext4)	MS Windows (FAT32,NTFS)
Diskové oddíly (partitions)	Ne Diskové oddíly se připojují jako adresáře.	C:, D:, atd. Je však možné připojit I jako adresář (ntfs).
Jména	Rozlišuje malá a velká písmena (case sensitive).	Nerozlišuje malá a velká písmena (case insensitive).
Oddělování jmen	Lomítko	Zpětné lomítko
Přístupová práva	Ano POSIX	Ano (pouze NTFS) ACL
Zařízení (hardware)	Jako speciální soubory.	Ne

## Speciální jména adresářů:

- . aktuální adresář (**tečka**)
- .. rodičovský adresář (**dvě tečky**)

# Příkazy - nápověda

## Manuálové stránky (aneb co dělat, když si nevím rady):

- `man` vypíše manuálovou stránku příkazu

```
$ man [section_number] topic
```

↑  
jméno příkazu, funkce, tématu, kapitoly apod.

## Dostupné sekce:

- *Section 1* user commands
- *Section 2* system calls
- *Section 3* library functions
- *Section 4* special files
- *Section 5* *file formats*
- *Section 6* games
- *Section 7* conventions and miscellany
- *Section 8* administration and privileged commands
- *Section L* math library functions
- *Section N* tcl functions

Číslo sekce je nutné udávat u témat se stejným jménem zařazených do různých sekcí.

`$ man 1 printf` manuálová stránka příkazu `printf`

`$ man 3 printf` manuálová stránka funkce `printf()` jazyka C



# Příkazy - přehled

## *Souborový systém:*

- pwd
- cd
- mkdir
- rmdir
- ls
- cp
- mv
- rm

vypíše cestu aktuálního pracovního adresáře  
změní aktuální pracovní adresář  
vytvoří adresář  
odstraní adresář  
vypíše obsah adresáře  
zkopíruje soubor či adresář  
přesune soubor či adresář  
odstraní soubor či adresář

## *Zjišťovací příkazy:*

- hostname
- id
- whoami

vypíše jméno počítače  
vypíše identifikační čísla uživatele  
vypíše jméno přihlášeného uživatele

# Vytvoření adresářů

- **Vytvoření adresáře**

```
$ mkdir jmeno_adresare
```

- **Vytvoření vnořených adresářů**

```
$ mkdir -p jmeno_adresare1/jmeno_adresare2/jmeno_adresare3
```

# Kopírování

- Ke kopírování slouží příkaz “cp”

\$ cp soubor1 soubor2

vytvoří kopii souboru “soubor1” s názvem “soubor2”

\$ cp soubor1 soubor2 soubor3 adresar1/

kopíruje soubory “soubor1”, “soubor2”, “soubor3” do adresáře “adresar1”

\$ cp -r adresar1 adresar2

vytvoří kopii adresáře “adresar1” s názvem “adresar2”; pokud adresář “adresar2” již existuje, vytvoří kopii adresáře “adresar1” jako podadresář adresáře “adresar2”

\$ cp -r soubor1 adresar2 soubor3 adresar1/

kopíruje soubory “soubor1”, “soubor3” a adresář “adresar2” do adresáře “adresar1”

# Přesouvání

- K přesouvání nebo přejmenování slouží příkaz “mv”

\$ mv soubor1 soubor2

přejmenuje soubor “soubor1” na “soubor2”

\$ mv soubor1 soubor2 soubor3 adresar1/

přesune soubory “soubor1”, “soubor2”, “soubor3” do adresáře “adresar1”

\$ mv adresar1 adresar2

přejmenuje adresář “adresar1” na “adresar2”; pokud adresář “adresar2” již existuje, přesune adresář “adresar1” do adresáře “adresar2”

\$ mv soubor1 adresar2 soubor3 adresar1/

přesune soubory “soubor1”, “soubor3” a adresář “adresar2” do adresáře “adresar1”

# 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**

**Přehled dostupných verzí aplikace:**

\$ **module versions gaussian**

**Aktivace aplikace:**

\$ **module add gaussian**

**Spuštění aplikace z modulu gaussian:03.E1**

\$ **g03 vstupni\_soubour**