

Nazwa przedmiotu: Pracownia technik obliczeniowych S (1100-3BP25)

Nazwa w języku polskim:

Nazwa w jęz. angielskim: Laboratory of Computational Techniques

Dane dotyczące przedmiotu:

Jednostka oferująca przedmiot: Wydział Fizyki

Przedmiot dla jednostki: Wydział Fizyki

Domyślny typ protokołu dla przedmiotu:

Zaliczenie na ocenę

Opis:

Celem zajęć jest wykształcenie praktycznych umiejętności wymaganych do sprawnego wykonywania obliczeń i złożonych symulacji komputerowych. W szczególności dyskutowane będą następujące zagadnienia:

1. Środowisko pracy – powłoka systemu (shell), programy systemowe, praca zdalna, edytor tekstowy, system kontroli wersji. Przykładowe oprogramowanie:

- shell – bash, fish
- narzędzia POSIX
- praca zdalna – SSH, screen, tux, boy
- edytor tekstowy – vim, nano
- system kontroli wersji – Subversion

2. Przetwarzanie plików tekstowych przy pomocy narzędzi POSIX. Wyrażenia regularne. Ćwiczenia polegające na prostej analizie danych (np. przeszukiwanie bazy SCOP). Oprogramowanie:

- textutils
- sed
- awk
- Perl
- wyrażenia regularne w Pythonie

3. Automatyzacja obliczeń przy pomocy języków skryptowych. Ćwiczenia polegające na wykonywaniu obliczeń standardowymi narzędziami (bio)informatycznymi na dużym zbiorze danych. Oprogramowanie:

- język skryptowy – bash, Perl, Python
- przykładowe narzędzie – DSSP

4. Automatyzacja dostępu do zasobów internetowych. Automatyczne generowanie żądań HTTP typu GET i POST. Oprogramowanie:

- wget, curl
- httplib2

5. Klastry obliczeniowe. Systemy kolejkowe. Oprogramowanie:

- SLURM

6. Podział danych na zadania (paczki), w zależności od ich struktury – lista, macierz kwadratowa, górny trójkąt macierzy, macierz prostokątna. Ćwiczenia np. na podstawie porównywania struktur lub sekwencji białek. Opcjonalnie: dystrybucja zadań w strukturze master-slaves w środowisku MPI. Oprogramowanie:

- mpi4py

7. Analiza wyników obliczeń. Przekształcanie plików tekstowych. Format CSV. Obróbka danych w środowisku Mathematica.

8. Przygotowywanie publikacji naukowych. Zagadnienia związane ze składem tekstu, formatami graficznymi, rozdzielczością. Generowanie ilustracji (wizualizacja struktur molekularnych, wykresy). Oprogramowanie:

- LaTeX
- Mathematica (wykresy)
- PyMol

9. Instalowanie oprogramowania naukowego. Zależności. Instalowanie bibliotek. Kompilacja. Oprogramowanie:

- yum, apt
- GCC
- GNU Make
- Python Setuptools

10. Zagadnienia zaproponowane przez studentów (np. związane z technicznymi aspektami wieloskalowych symulacji w ramach

przygotowywanych prac dyplomowych).

Przynależność do grup przedmiotów w cyklach:

Opis grupy przedmiotów	Cykl pocz.	Cykl kon.
ZFBM - Projektowanie molekul i bioinformatyka; przedmioty dla III roku (1100-BProMol_3)	2014	

Punkty przedmiotu w cyklach:

<bez przypisanego programu>

Typ punktów	Liczba	Cykl pocz.	Cykl kon.
Europejski System Transferu i Akumulacji Punktów (ECTS)	3	2014	