

計算ハンズオンセミナーを始めるために

大上 雅史¹, 寺川 剛²

1 東京工業大学 大学院情報理工学研究科 計算工学専攻 秋山研究室 博士課程 3年

2 京都大学大学院 理学研究科 生物科学専攻 高田研究室 博士課程 3年

1 実行環境の準備

本ハンズオンセミナーでは、Linux という OS の種類のうち、Ubuntu と呼ばれる OS を使って行います。通常の PC に Ubuntu をインストールするためには、HDD のパーティション分けなどの作業が必要ですが、ここでは VMware や VirtualBox というソフトウェアを用いて仮想的な HDD を準備し、その上に Ubuntu をインストールすることで手軽に Ubuntu を利用できる環境を構築します。Ubuntu のインストール後は、Ubuntu 上で MEGADOCK や Cafemol を動かすための準備をします。全体の所要時間は 1~2 時間程度かかるとお思いますので、暇で暇で仕方がないときや、研究に行き詰まって気分転換をしたいときに取り組んでください。

VMware のインストール(Win)

- (1) <http://www.vmware.com> から、製品→VMware Player と移動、「VMware Player for Windows 32-bit and 64-bit」をダウンロードする。(VMware-player-5.0.2-1031769.exe)
(数字部分は変わるかも)
- (2) exe ファイルを実行し、すべてデフォルトのまま (好きに変更可)、インストール。

VirtualBox のインストール(Mac)

- (1) <https://www.virtualbox.org/wiki/Downloads> の"VirtualBox 4.2.12 for OS X hosts"の右の"x86/amd64"をクリックして"VirtualBox-4.2.12-84980-OSX.dmg"をダウンロードする。
- (2) Ctrl+Space で Spotlight を開き,"VirtualBox-4.2.12-84980-OSX.dmg"と打ち込み, Enter を押す。
- (3) "VirtualBox.pkg"を実行し、すべてデフォルトのまま (好きに変更可) , インストール。

Ubuntu のインストール(Win+VMware)

- (1) <http://www.ubuntulinux.jp> から、Ubuntu のダウンロード→日本語 Remix イメージのダウンロード→Ubuntu12.04.2 の DVD イメージ(iso ファイル)をダウンロード (時間がかかります)
(バージョンは好きなので良いですが、Long Time Support (LTS) 版の 12.04.2 をおすすめします)

(2) VMware の設定

- VMware Player を実行し，新規仮想マシンの作成.
- 後で OS をインストール を選択，次へ
- ゲスト OS：Linux，バージョン：Ubuntu を確認し，次へ
- 仮想マシン名をテキストに設定，場所も自由に設定，次へ
- ディスク容量を設定．自分の PC との兼ね合いで自由に．最低でも 10GB は欲しい．仮想ディスクを云々はどちらでも好きな方で．単一ファイル推奨． 次へ
- 完了

(3) VMware の仮想ハードディスクに Ubuntu をインストールする準備

- VMware Player の初期ウインドウで，(2)で作成した仮想マシンを選択，仮想マシン設定の編集をクリック
- メモリの値や，プロセッサの値を，自分の PC に合わせて編集
- デバイスの「CD/DVD(IDE)」を選択，ISO イメージファイルを使用する から，先ほどダウンロードした Ubuntu12.04.2 の iso ファイルを参照する OK を選択
- 仮想マシンの再生を選択

(4) Ubuntu のインストール

- ようこそ画面が表示されたら，日本語が選択されていることを確認，Ubuntu をインストールを選択
- インストール中にアップデートをダウンロードする を選択し，続ける
- ディスクを削除して Ubuntu をインストール を選択し，続ける
- インストール をクリック
- どこに住んでいますか？が表示されたら Tokyo を選択し，続ける
- キーボードレイアウト，使用しているものに合わせて，続ける
- あなたの情報を入力してください になったら，それぞれの情報を入力するパスワードは絶対に忘れないように．続ける
- しばし待つ
- 完了したら，今すぐ再起動する を選択.

(5) VMware の後処理

- 仮想マシン設定を選択
- CD/DVD(IDE)の接続欄を，物理ドライブを使用する に変更.

(6) Ubuntu の実行とターミナルのショートカット作成

- Ubuntu を起動
- 左上のアイコン(Dash ホーム)をクリック，小窓に Terminal と入力し，端末のアイコンを左側のバーにドラッグドロップ

Ubuntu のインストール(Mac+VirtualBox)

- (1) <http://www.ubuntulinux.jp> から, Ubuntu のダウンロード→日本語 Remix イメージのダウンロード→Ubuntu12.04.2 の DVD イメージ(iso ファイル)をダウンロード (時間がかかります)
(バージョンは好きなので良いですが, Long Time Support (LTS) 版の 12.04.2 をおすすめします)
- (2) Ctrl+Space で Spotlight を開き, “VirtualBox”と入力して Enter を押し、VirtualBox を起動する
- (3) “新規”をクリックし、適当に名前をつけ、タイプは”Linux”に、バージョンは”Ubuntu”にそれぞれ設定して”続ける”をクリックする。あとはすべてデフォルトのまま (好きに変更可) 設定する.
- (4) “電源オフ”をクリックし、仮想マシンを起動し、(1)でダウンロードした iso ファイルを選択して Ubuntu を起動する
- (5) Ubuntu のインストール
 - ・ ようこそ画面が表示されたら, 日本語が選択されていることを確認, Ubuntu をインストールを選択
 - ・ インストール中にアップデートをダウンロードする を選択し, 続ける
 - ・ ディスクを削除して Ubuntu をインストール を選択し, 続ける
 - ・ インストール をクリック
 - ・ どこに住んでいますか?が表示されたら Tokyo を選択し, 続ける
 - ・ キーボードレイアウト, 使用しているものに合わせて, 続ける
 - ・ あなたの情報を入力してください になったら, それぞれの情報を入力する
パスワードは絶対に忘れないように. 続ける
 - ・ しばし待つ
 - ・ 完了したら, 今すぐ再起動する を選択.
- (6) Ubuntu の実行とターミナルのショートカット作成
 - ・ Ubuntu を起動
 - ・ 左上のアイコン(Dash ホーム)をクリック, 小窓に Terminal と入力し, 端末のアイコンを左側のバーにドラッグドロップ

必要なアプリのインストール (apt-get を利用)

Ubuntu の強力な機能の 1 つである apt-get を利用して必要なアプリをインストールします.

(以下, \$ から始まる行はターミナルでの入力です. \$は入力する必要はありません.)

```
$ sudo apt-get update
```

```
$ sudo apt-get upgrade (時間がかかります)
```

```
$ sudo apt-get install emacs
$ sudo apt-get install pymol (ver 1.4.1 が入ります)
$ sudo apt-get install g++
$ sudo apt-get install gfortran
$ sudo apt-get install python2.7-dev
$ sudo apt-get install python-numpy
$ sudo apt-get install gnuplot
```

ProDy のセットアップ

- <http://www.csb.pitt.edu/prody/#downloads> へ
- “ProDy-1.4.3.tar.gz”をクリックしてダウンロード.
- ターミナルを開く

```
$ cd ダウンロード
$ tar xzvf ProDy-1.4.3.tar.gz
$ cd ProDy-1.4.3
$ python setup.py build
$ sudo python setup.py install
```

VMD のインストール

- <http://www.ks.uiuc.edu/Development/Download/download.cgi?PackageName=VMD> へ
- “LINUX OpenGL, CUDA”をクリックしてダウンロード.
- ターミナルを開く

```
$ cd ダウンロード
$ tar xzvf vmd-1.9.1.bin.LINUX.opengl.tar.gz
$ cd vmd-1.9.1
$ ./configure LINUX
$ cd src
$ sudo make install
```

MEGADOCK のインストール

(1) FFTW3 のインストール

- <http://www.fftw.org/download.html> へ
- fftw-3.3.3.tar.gz をクリックしてダウンロード. ホームのダウンロードに保存される.
- ターミナルを開く

```
$ cd ダウンロード
$ ls (fftw-3.3.3.tar.gz があることを確認)
$ tar xzvf fftw-3.3.3.tar.gz
```

```
$ cd fftw-3.3.3
$ ./configure --enable-float (しばらく待つ)
$ make (しばらく待つ)
$ sudo make install
```

(2) MEGADOCK のコンパイル

- <http://www.bi.cs.titech.ac.jp/megadock> へ
- megadock-2.6.tgz をクリックしてダウンロード.
- ターミナルを開く

```
$ cd ダウンロード
$ ls (megadock-2.6.tgz があることを確認)
$ tar xzvf megadock-2.6.tgz
$ cd megadock-2.6
$ make
$ sudo cp megadock /usr/bin (分かる人は/usr/bin に突っ込まず path を通す)
```

CafeMol のインストール

- <http://www.cafemol.org/download.php> へ
- 氏名, Email アドレスを入力し, Ver.2.1 (Latest) をクリックしてダウンロード
- ターミナルを開く

```
$ cd ダウンロード
$ ls
$ tar xzvf cafemol_2.1.1164.tar.gz
$ cd cafemol2.1
$ cd src
$ make (しばし待つ)
```

大上ハンズオンセミナー用のファイル群のダウンロード

```
$ wget http://www.bi.cs.titech.ac.jp/~ohue/bps2013/handson2013.tgz
$ tar xzvf handson2013.tgz
$ cd tutorial
```

以上で計算ハンズオンセミナーを行う準備ができました.

----- MEMO -----



ubuntu
linux for human beings

2 よく使う Unix コマンドの解説

本ハンズオンセミナーでは Terminal(CUI)上でのコマンド操作が主となります。マウスでポチポチ操作の GUI と違い、CUI はコマンドの入力で全ての操作を行うものなので、いくつものコマンドを覚えなないといけない気もしますが、だいたいこれくらいのコマンドを知ってればなんとかなる、というものを以下に羅列しました。適宜参照してください。

cd — ディレクトリの移動

```
$ cd hoge      (hoge に移動)
$ cd ..       (一つ上の階層のディレクトリに移動)
$ cd          (ホームディレクトリに移動)
$ cd -        (直前に居たディレクトリに戻る)
```

ls — ファイルやディレクトリの表示

```
$ ls          (カレントディレクトリの内容を表示)
$ ls hoge    (hoge ディレクトリの内容を表示)
$ ls *.pdb   (接尾辞が.pdb のファイルの一覧を表示)
```

cp — コピー (ディレクトリのときは -r を付ける)

```
$ cp foo.txt bar.txt (foo.txt と同じ内容の bar.txt というファイルを作成)
$ cp -r hoge fuga   (hoge と同じ内容の fuga というディレクトリを作成)
```

mv — ファイルの移動 / 名前の変更

```
$ mv foo.txt boo.csv      (foo.txt の名前を boo.csv に変更する)
$ mv foo.txt hoge
(hoge というディレクトリがあるなら、foo.txt を hoge に移動する、
無ければ foo.txt を hoge というファイル名に変更する)
```

rm — 削除 (ディレクトリのときは -r を付ける)

```
$ rm foo.txt      (foo.txt を削除する)
$ rm -r hoge      (hoge ディレクトリを削除する)
```

tar — 圧縮・解凍

```
$ tar xzvf mono.tar.gz          (mono.tar.gz を解凍する)
$ tar czvf mono.tar.gz hoge     (hoge を圧縮した mono.tar.gz を作成する)
```

cat — テキストファイルの表示

```
$ cat foo.txt                   (foo.txt の内容を表示する)
$ cat -n foo.txt                (foo.txt に行番号を付けて表示する)
$ cat foo1.txt foo2.txt         (foo1.txt のあとに foo2.txt をくっつけたものを表示する)
```

less — テキストファイルを少しずつ表示

```
$ less foo.txt                  (foo.txt の内容を表示する)
※パイプ (|) で使うことも多いです。詳しくは後述。
```

cut — テキストファイルの切り出し

```
$ cut -f 2 foo.txt              (foo.txt の 2 列目のみを抜き出す)
$ cut -b 3-5 foo.txt            (foo.txt の縦 3 文字(byte)目から 5 文字(byte)目のみを抜き出す)
```

sort — テキストファイルの並べ替え

```
$ sort foo.txt                  (foo.txt の行を辞書式順序で並び替える)
```

sed — テキストファイルの操作 (ここでは置換のみ紹介します)

```
$ sed 's/hoge/fuga/g' foo.txt   (foo.txt の内容の hoge を全て fuga に置換する)
```

paste — ファイルの結合

```
$ paste foo1.txt foo2.txt       (foo1.txt と foo2.txt をタブ文字を介して縦に結合する)
```

wc — 文字数や行数のカウント

```
$ wc foo.txt                    (foo.txt のバイト数/単語数/行数を表示する)
$ wc -l foo.txt                 (foo.txt の行数を表示する)
$ less foo.txt | wc -l          (パイプを用いて、ファイル名を表示せずに行数のみ表示する)
```


パイプ“|”とリダイレクト“>”

pen を dog に置換した foo.txt を less でちょっとずつ表示する

```
$ sed 's/pen/dog/g' foo.txt | less
```

pen を dog に置換した foo.txt を dog.txt という名前で保存する

```
$ sed 's/pen/dog/g' foo.txt > dog.txt
```

foo1.txt と foo2.txt をつなげた foo3.txt を作成する

```
$ cat foo1.txt foo2.txt > foo3.txt
```

```
$ paste 1PPE.outh.zr.out 1PPE.rmsd.txt | sort -n -k 2 | cut -f 4 | cat -n | sort -n -k 2 | less
```

このコマンドを解釈すると、

「1PPE.outh.zr.out と 1PPE.rmsd.txt を `paste` → `sort -n -k 2` (ZRANK スコア列) で並び替え → `cut -f 4` で 4 列目 (RMSD 列) だけ抜き出す → `cat -n` で行番号を付加する → `sort -n -k 2` (RMSD 列) で並び替え → `less` で表示する」

という操作を行っていることが分かります。それぞれのパイプの前で区切って実行し、内容を確認してみましょう。

emacs — テキストエディタ

- ・ ファイルを開く, またはファイルを作成

```
$ emacs foo.txt
```

- ・ 終了操作

```
Ctrl+x Ctrl+c
```

- ・ 保存

```
Ctrl+x Ctrl+s
```

----- MEMO -----

