# СКАЗ О ТОМ, КАК ТАНЦЕВАТЬ С БУБНАМИ ТАК, ЧТОБЫ УСТАНОВИЛСЯ И РАБОТАЛ VAMPIRE 5.0

#### Это поможет разобраться. Если у вас Windows: Пока не могу прокомментировать Тогда Linux можно установить как подсистему https://skesov.ru/32-bit-ili-64-bit-kak-uznat/ такой способ. Но я рада, что вы Если у вас Linux: https://docs.microsoft.com/ru-ru/windows/wsl/install-win10 богаты. https://itfb.com.ua/kak-uznat-kakoj-razryadnosti-linux/ Windows 10 Есть ли 64-разрядный Актуальная версия VAMPIRE 5.0 процессор в вашем есть, характеристики\_\_\_\_ только для Ubuntu Linux 64 bit и Mac Это лечится. Но способы разные компьютере? OS X 64 bit. мне известны для разных систем. Какая у вас? Знаете ли вы разрядность Какая у вас ОС? своей ОС? уже есть Ubuntu 64 bit Надеюсь она <u>не</u> в Wubi или Как поставить Ubuntu «рядом с вашей ОС»? Для этого не обязательно покупать VirtualBox, Vmware (и других или освобождать ещё один жёсткий диск под вторую ОС, искать и записывать загрузочный СD-диск. Вторую ОС можно поставить на тот же, где ваша текущая виртуальных машинах), <u>не</u> рекомендую их ОС. Подробно описываю процесс в гайде «установка Linux»: использовать (но решать вам). https://github.com/101Room/vampire-workshop-RUS-guide-for-beginners/blob/ master/гайд%20по%20установке%20на%20русском/установка%20Linux.pdf почему нет допустим, вы поставили Linux всё в порядке <del>Установка</del> Скачивание VAMPIRE 5.0 Что насчёт виртуальных машин и Wubi? Скачайте дистрибутив для Ubuntu: Сами знаете, что чем меньше костылей, https://vampire.york.ac.uk/download/ посредников и ходунков используется в работе, тем надёжнее, более предсказуемо и стабильно всё будет работать. Целью проекта Wubi является оказание

### Договоримся на берегу.

- 1) Я не несу ответственность за какие-либо травмы, повреждения, нанесенные собственности, или какие-либо другие убытки, будь то реальные, косвенные или компенсаторные, произошедшие непосредственно или косвенно вследствие применения или использования моих материалов.
- 2) Я не несу ответственность и не предоставляю гарантию, прямую или предполагаемую, относительно точности или полноты любого материала, содержащегося в моих материалах, а также не несу ответственность и не предоставляю гарантию того, что содержащаяся в моём гайде информация отвечает каким-либо вашим целям или нуждам.
- 3) Я не предоставляю гарантию относительно качества каких-либо продуктов или услуг отдельных торговых марок, которые будут упоминаться в моих материалах.
- 4) Я рисую как маразматик, в курсе, спасибо.
- 5) Кто умнее автора и у кого есть желание высказаться и дополнить что-то, оставить обратную связь, исправить ошибку, добавить объективных знаний или что-то ещё, пишите: dart.swan@gmail.com

#### 6) Место обитания данного гайда и других пояснений:

 https://github.com/101Room/vampire-workshop-RUS-guide-forbeginners

помощи пользователям OC Windows в освоении ОС Linux без риска потерять данные при классической инсталляции. То

есть это не более, чем временная поддержка в процессе адаптации для тех, кто боится / не может / ленится нормально с помощью компилятора и Ассемблера в бинарный пакет. Однако установить OC Linux и это отличается от классической инсталляции и имеет свои ограничения и особенности. Виртуальная машина требует больше

ресурсов вашего компьютера чем поставленная напрямую вторая система и ведёт себя менее стабильно (у меня сломалась вся Ubuntu в виртуалке от того, что я установила браузер и удалённый

привести к катастрофе). Работа в виртуальной машине или Wubi не будет такой стабильной и надёжной, как обычная установка, кроме этого вы

рабочий стол, безобидные действия могут

Подробнее о недостатках на русском (машинный перевод): http://ubuntu.fliplinux.com/wubi-2.html

## Подробнее о недостатках на английском (оригинальные источники):

http://fliplinux.com/wubi.html

- https://askubuntu.com/questions/615/ whats-the-difference-between-wubi-anda-regular-alongside-windows-installatio
- https://unix.stackexchange.com/ questions/5258/wubi-pros-and-cons

Нужно выбрать то, что вам подойдёт, там есть несколько вариантов: 1) Get the source code — если вы знаете что такое Git и вы его установили, то

можете получить исходный код через него. Если не понимаете о чём речь, я

просто скажу, что смысл Git в **контроле версий**. Легко отслеживать изменения и обновления программы и легко обновлять у себя – в этом его 2) Vampire 5.0 binary packages (630kB) — бинарный пакет. Это самый быстрый и простой способ, но вы не сможете ковыряться в программе и не будете знать о тонкостях её работы. Исходный код превращается

из бинарного вернуть исходный код это то же самое, что сделать из котлеты корову. Компилятор делает необратимые вещи (именно поэтому декомпиляция вещь не тривиальная). Чтобы корректировать что-то в программе и разбираться в её логике, тонкостях (порой и в вопросах безопасности) нужен исходный код, а не этот способ.

3) Source code packages – исходный код. Это для тех, кому нужно иметь возможность что-то менять в программе и разбираться в её работе.

4) Development version – разрабатываемая версия доступна через Git. Это как последний релиз, но круче. В том плане, что добавлены новые фишечки и возможности. Но её слабость в том, что там могут быть ошибки и баги, которые могут привести к ошибочным результатам. Используйте

5) Previous releases – предыдущие релизы. Они на случай проверки **воспроизводимости чьих-то результатов**. Их не рекомендуется использовать, там меньше возможностей и неисправленные ошибки и баги могут быть.

Командную строку (терминал) можно открыть щёлкнув по рабочему столу правой кнопкой и выбрав «терминал». Некоторые команды с этой страницы можно сделать и в графическом интерфейсе (такие как разорхивирование, копирование и прочее). Переход в директорию «рарка» \_ в терминале выполняется командой «cd papka», просмотр файлов и поддиректорий «Is -la». Совет: пишите первые две или три буквы команды/названия файла и нажимайте tab, чтобы терминал дописал их полностью за вас, повторное нажатие tab предложит вам ещё один подходящий вариант окончания.

Скачайте «Vampire 5.0 binary packages (630kB)». У файла двойное расширение, значит он прошёл через два этапа: сначала из него сделали \*.tar, а потом этот \*.tar сжали в архив \*.gz. Первый этап нужен, чтобы объединить файлы в один (а не чтобы усложнить процесс установки, как я думал). Дело в том, что архиваторы в Ubuntu могут работать только с одним файлом, сразу несколько запихать в архив нельзя. Чтобы получить содержимое можно в терминале перейти в директорию с архивом и выполнить команды: gunzip vampire-5.0-linux.tar.gz tar xf vampire-5.0-linux.tar

Теперь можно перейти в появившуюся папку «linux» и выполнить скрипт установки:

cd linux

sudo bash install.sh

Программа установится в /opt/vampire/. И скрипт не добавит сам в переменную «РАТН» директорию, как можно подумать читая оригинальную инструкцию. В скрипте вам напишут о том, что это вы сами должны в «~/.bashrc» добавить коекакую строку. Чтобы открыть и редактировать этот «~/.bashrc» введите команду: sudo gedit ~/.bashrc

Добавьте в файл строку которую просит добавить скрипт (можете в терминале прямо мышью выделить и скопировать нажав правой кнопкой мыши и выбрав соответствующий пункт или сочетанием ctrl+shifh+С и вставить в файл): export PATH=/opt/vampire/bin/:\$PATH

выдаётся терминалом (warning не error, так и чёрт с ним). Выполнить команду: source ~/.bashrc

Если вы не знаете что это сейчас произошло, то простым языком это нужно чтобы можно было запустить из командной строки VAMPIRE не указывая полный путь к нему. Когда вы пишете имя программы в терминале, но не указываете путь к ней, то её система ищет программу в «РАТН». Для запуска того, чего нет в «PATH» нужно указать полный путь к программе. В текущем каталоге Ubuntu исполняемый файл искать не будет, если не указать его с помощью «./», пример: «./имя программы». После этого от команды: echo \$PATH

В той папке «linux» (из \*.tar вышла которая) есть необходимые для запуска: input и Co.mat. Чтобы проверить сработали ли махинации с «РАТН» скопируйте их куда-нибудь, где нет файла «vampire-serial», перейдите в эту папку и запустите программу командой: vampire-serial

от второй вижу «command not found»

вижу от первой команды «Permission denied»

·наконец-то заработало

растём до параллельных вычислений

Вот это у меня не работает, «sudo» – не панацея, но может у вас сработает, я не sudo vampire-serial

Для работы с исходным кодом (Source code packages).

Тогда может помочь дабвление прав на

sudo chmod +x vampire-serial

Теперь какой-то способ запуска из

предыдущего шага должен сработать (у

меня первый работает только). Если нет,

попробуйте перезагрузку. Если ничего

(напоминаю, для запуска нужно быть в

sudo /opt/vampire/bin/vampire-

не помогло, то всегда сработает это

cd /opt/vampire/bin

папке с input и Co.mat):

serial

Для параллельной (parallel) версии надо установить ещё пару пакетов: openmpibin и openmpi-dev. Но я не поняла что за «openmpi-dev», если честно, у меня такое не гуглится, зато есть «libopenmpi-dev». Моветон это или всё же это разные пакеты я не знаю. В такой непонятной ситуации предлагаю на всякий случай установить сразу множество пакетов орептрі командой: sudo apt-get openmpi-bin openmpi-common openssh-client opensshserver libopenmpi1.3 libopenmpi-dbg libopenmpi-dev

Тут на пятой странице можно найти решения некоторых проблем с openmpi:

http://lsi.ugr.es/jmantas/pdp/ayuda/datos/instalaciones/Install\_OpenMPI\_en.pdf

Вы знаете что такое компиляция, линковка и сборка? Если нет, то можете узнать. Для сборки программы, чтобы была параллельность воспользуйтесь командой «make parallel-llvm -j n», где вместо п нужно написать максимальное число процессов, которое ОС будет выполнять параллельно. Как узнать что лучше указать? Можете указать там число ядер. А вообще вы легко можете проверить на практике даёт ли вам сокращение времени вычисления какое-то число, указанное в jobs (программа ведь может по итогу показать сколько времени ушло на моделирование). В общем, команда для запуска может быть такой, например: make parallel-llvm -j 8

Для запуска в параллельном режиме на двух процессорах используйте команду (цифра это число процессоров, впишите своё если надо): mpirun -np 8 --oversubscribe ./vampire-parallel

В этом видео создатель пакета показывает как запустить параллельные вычисленияі:

s://www.youtube.com/watch?v=Q6D21Dp0iCY

Другие высокопроизводительные вычисления с Vampire: Компиляция для CUDA пока на уровне beta-версии. В последнем выпуске есть реализация для CUDA атомистической спиновой динамики. Для компиляции нужно установить драйверы CUDA и среду выполнения. После установки для компиляции использовать команду: make gcc-cuda

По умолчанию бинарный код содержит код устройства для широкого спектра архитектур. В зависимости от вашего устройства/карты, вам может понадобиться изменить параметр генерации кода устройства в make-файле.

ARCHER национальный суперкомпьютер Великобритании, он включает в себя специальные компиляторы, разработанные Cray Inc. Можно выполнить компиляцию для него, но это не ко мне.

