

Preparación del entorno para realizar simulaciones computacionales

Profesores: Dra. Karla Beatriz Cantún Avila
Dr. Geoffrey Humberto Israel Maury Cuna

Febrero, 2022

En el presente documento encontrarás las instrucciones necesarias para preparar el entorno computacional para realizar la simulación de la nube de electrones a un acelerador circular. Este está dividido en dos grandes secciones:

- Instalar una máquina virtual con el SO Ubuntu
- Instalar el código PyECLOUD

Es necesario que cuentes con los siguientes recursos:

- Computadora de escritorio o portátil personal.
- Conexión estable a internet

Instalación de máquina Virtual

Para instalar una máquina virtual:

1. Descargar Ubuntu en la versión más reciente (LTS)
2. Descargar la máquina virtual Virtual Box (Oracle virtual box
<https://www.virtualbox.org/wiki/Downloads>)
Seleccionar el SO anfitrión y descargar el que corresponde archivo de instalación.
 - a. Abrir Virtual box e iniciar el proceso de instalación
 - b. Aceptar en las opciones que aparecen.

Se abre la ventana de la máquina virtual y se configura para instalar UBUNTU

1. Para crear una nueva, es necesario nombrarla, por ejemplo: *UBUNTU_20*
2. Aumentar la memoria que se asigne. Sugerencia 4G (~4096 MB)
3. Crear un disco virtual opción: *crear un disco virtual ahora*
4. Tipo de disco duro: *VDJ(virtualbox disk image)*(opción por default)
5. Almacenamiento en unidad de disco duro física: *reservado dinámicamente*
6. Ubicación del archivo y tamaño, aquí se establece la trayectoria de los archivos(se sugiere no modificar) y se asigna tamaño : 40 G

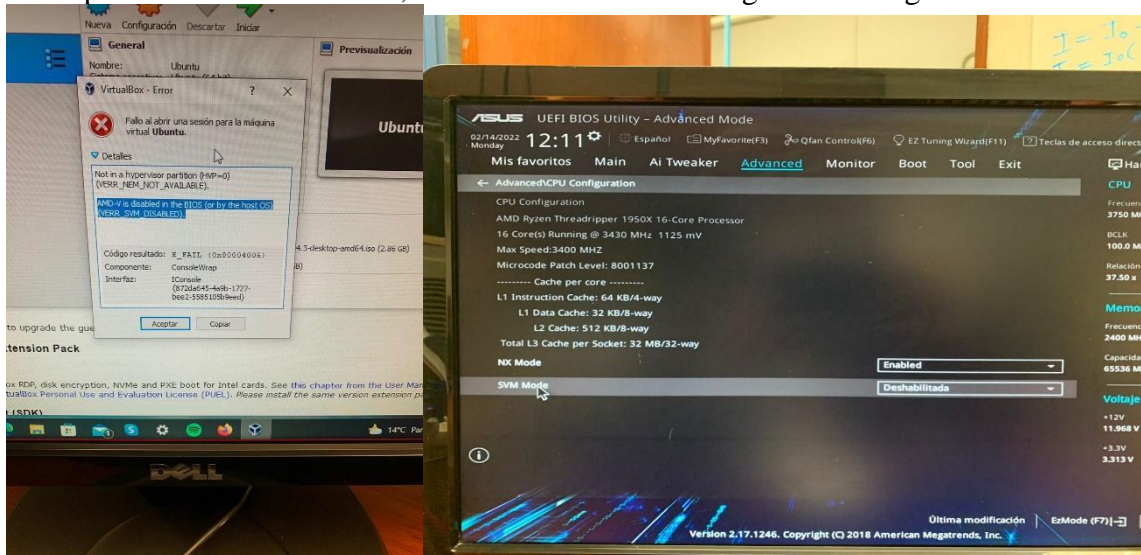
7. Selecciona *Crear*
8. Una vez creada la máquina virtual, ir a la opción:
 - a. *Almacenamiento*-> en la opción Controlador IDE seleccionar el disco (*Vacío*)
 - b. Se despliega una ventana. En el apartado *Atributos*, elegir en la opción *Unidad óptica*, en el ícono del disco, *seleccionar un archivo de disco*(en el que elegimos el archivo de Ubuntu previamente descargado.)
 - c. Aceptar las opciones que aparezcan.

Debe visualizarse en apartado de almacenamiento la imagen del archivo del SO Ubuntu.

Iniciar la máquina virtual

Desde el ícono de inicio de la barra de herramientas superior.

*En caso de que se arroje un error, es necesario revisar que en el BIOS esté activada la opción que corresponda a la virtualización, como se muestra en las siguientes imágenes.



1. Una vez dentro, procedemos a configurar la instalación de Ubuntu, seleccionar idioma de preferencia y posteriormente Instalar Ubuntu
2. Elegir la disposición del teclado. Aceptar
3. En el apartado de Actualizaciones y otro software verificar que están habilitadas las opciones: instalación normal, Descargar actualizaciones al instalar Ubuntu e instalar programas de terceros para hardware de gráficos wifi y formatos multimedia adicionales
4. En el apartado tipo de instalación: Borrar disco e instalar Ubuntu(opción por default)
5. Instalar, continuar
6. Elección de zona horaria
7. Configuración de usuario, proporcionar datos de SU, equipo, contraseña
8. Con estos pasos inicia la instalación automáticamente.

Entramos a la sesión en Ubuntu y aparecen algunas opciones para actualizar software o instalar paquetería. Puede realizarse en este momento para mantener actualizada la máquina virtual. Posterior a eso, reiniciar la máquina virtual.

Algunos elementos útiles:

*Click derecho en el escritorio, ir a el apartado Configuración de pantalla, para **ajustar la resolución del monitor** en la ventana de la máquina virtual

*Para poder emplear los **atajos de copiar y pegar**, arrastrar archivos entre la máquina virtual y la anfitriona hay que instalar “Guest Additions”.

Dirigirse al menú de la máquina virtual:

Dispositivos->Insertar imagen de CD de las eGuest Additions->Ejecutar.

* Para configurarlos, ir al menú de la máquina virtual en la opción :

máquina->Configuración->pestaña avanzado-> habilitar las opciones: *compartir en portapapeles* y *arrastrar y soltar* con la opción: bidireccional->aceptar.

*Para **compartir carpetas** entre el sistema anfitrión y la máquina virtual ir a:

Dispositivos->Carpetas compartidas->otros->elegir la carpeta a compartir

Y seleccionar las opciones : Automontar y Permanente, Aceptar

Se sugiere, reiniciar tanto la máquina virtual como el equipo anfitrión.

Instalación de PyCLOUD

1. Instalar Python 2 y 3
 - a. `sudo apt update`
 - b. `sudo apt upgrade`
 - c. `sudo apt install python3-pip`
 - i. Para verificar la version de phyton y de pip intaladas
 - d. `python3 --version`
 - e. `pip3 --version`
 - f. `sudo apt-get install gfortran`
 - g. `gfortran --version`
2. Hacer directorio PyECLoud_Friends
3. Cambiar a ese directorio
4. Instalar y activar miniconda
 - a. `wget http://repo.anaconda.com/miniconda/Miniconda3-latest-Linux-x86_64.sh`
 - b. `bash Miniconda3-latest-Linux-x86_64.sh`
 - c. En el home del usuario activar miniconda:
`source home/usuario/miniconda3/bin/activate`
5. Para instalar paquetes requeridos moverse nuevamente a la carpeta PyECLoud_Friends
 - a. `pip install numpy scipy matplotlib h5py cython ipython`
6. Instalar git, en caso de no contar con él: `sudo apt install git`
7. Clonar EPyCLOUD
 - a. `git clone https://github.com/pycomplete/PyECLoud`
 - b. `git clone https://github.com/pycomplete/PyPIC`
 - c. `git clone https://github.com/pycomplete/PyKLU`

- d. `git clone https://github.com/pycomplete/PyHEADTAIL`
- e. `git clone https://github.com/pycomplete/NAFFlib`
- f. `git clone https://github.com/pycomplete/PyPARIS`
- g. `git clone https://github.com/pycomplete/PyPARIS_sim_class`
- h. `git clone https://github.com/pycomplete/PyPARIS_CoupledBunch_sim_class`

8. Compilar cada carpeta

- a. `cd PyECLOUD`
- b. `./setup_pyeccloud`
- c. `cd ../PyPIC`
- d. `make`
- e. `cd ../PyKLU`
- f. `./install`
- g. `cd ../PyHEADTAIL`
- h. `make`
- i. `cd ../NAFFlib/NAFFlib`
- j. `make`
 - en caso de error al compilar esta librería, debido a de no tener instalado python2:sudo
`apt install python-dev`
`i. (sudo apt-get install python-numpy)`
- k. `cd ..`

9. Ir al home

- a. `pico .bashrc`
- b. Ir al final del archivo
- c. Anexar instrucciones al archivo .bashrc
- d. `export FOLDER_WITH_PACKAGES=/home/usuario/PYCLOUDFILES`
- e. `export`
`PYTHONPATH=$FOLDER_WITH_PACKAGES:$FOLDER_WITH_PACKAGES/PyHEADTAIL:$FOLDER_`
`WITH_PACKAGES/NAFFlib:$PYTHONPATH`
 - i. Cerrar archivo

Para que se ejecute reconociendo los cambios en las variables de entorno modificadas:
`source .bashrc`