

Übungsblatt 4: Shellskripte 2

7.11.2013

Allgemeine Hinweise

- Abgabetermin für die Lösungen ist
 - **Dienstag, 12.11., 10:00** für die Übungsgruppen am Donnerstag und Freitag
 - **Mittwoch, 13.11., 10:00** für die Übungsgruppen am Montag und Dienstag
- Schickt die Lösungen bitte per Email an Euren Tutor.

Die Aufgabe auf diesem Blatt ist die Lösung eines Problems aus dem „wahren Leben“. Es geht darum, ein Shellskript zu programmieren, welches tatsächlich nützlich für Wissenschaftler wäre, die Simulationen durchführen.

In `/group/cgl/2013/04/mdrun` liegt ein Programm (tatsächlich ist es selbst ein Shellskript, aber das ist für die Aufgabe egal), das das echte Simulationsprogramm GROMACS¹ simuliert, sowie eine Parameterdatei dafür namens `/group/cgl/2013/04/params.mdp`. Kopiert Euch beide Dateien in ein Unterverzeichnis Eures Heimatverzeichnisses.

Die Simulationssimulation führt man wie folgt aus:

```
./mdrun params.mdp
```

Schaut Euch die Parameterdatei an; sie legt die verschiedenen Parameter einer Molekulardynamiksimulation fest. Insbesondere enthält sie den Parameter `nsteps`, der festlegt, wieviele Schritte der Simulation durchgeführt werden sollen. Nach Ablauf der Simulation erzeugt sie eine Datei namens `result.dat`, die die Ergebnisse der Simulation enthält.

In der Realität kann eine solche Simulation zwischen mehreren Stunden bis zu mehreren Wochen dauern, und ein Wissenschaftler muss möglicherweise hunderte solcher Simulationen laufen lassen. Dabei kann es leicht vorkommen, dass eine Simulation abgebrochen wird, bevor sie fertig ist, beispielsweise, weil der Computer neu gestartet wird, auf dem die Simulation läuft, oder weil ein Programm immer nur einige Stunden am Stück laufen darf, bevor wieder ein anderes Programm die Rechnerzeit in Anspruch nehmen darf. Damit die bis dahin verbrauchte Rechenzeit nicht umsonst war, schreiben Simulationsprogramme in regelmäßigen Abständen sogenannte *Checkpoints*, die dazu verwendet werden können, um eine Simulation neu zu starten. Der Parameter `nstcheckpoint` gibt an, nach jeweils wievielen Simulationsschritten ein solcher Checkpoint erzeugt wird. Wenn man die Simulation dann von einem Checkpoint aus neu starten will, dann muss man den Parameter `init_step` auf den gewünschten Wert setzen.

Ein Lauf unserer Simulationssimulation dauert glücklicherweise nur wenige Sekunden, dennoch bricht auch sie häufig vor dem Ende ab. Dafür erzeugt sie jedoch auch Checkpoints. Probiert das Verhalten des Programmes einfach aus.

Eure Aufgabe ist es, ein Shellskript zu schreiben, dem man ebenfalls die Parameterdatei als Argument übergibt. Das Skript soll überprüfen, ob die Simulation bereits gelaufen ist und ob sie eine

¹<http://www.gromacs.org/>

Ergebnisdatei erzeugt hat. Wenn nicht, dann soll es den letzten Checkpoint suchen und einen neuen Simulationslauf von diesem starten.

Punkte fürs Blatt stimmen nicht (0 statt 10)!