

# Εισαγωγή στην Υπολογιστική Βιολογία

Διάλεξη 1η :

Οργάνωση, στόχος, εξετάσεις,  
βαθμολογία, σύγγραμμα, σχέδιο μαθήματος.

# Οργάνωση μαθήματος

---

## Διαλέξεις (10)

- Η παρακολούθηση των διαλέξεων είναι αληθώς προαιρετική.
- Τα slides των διαλέξεων είναι διαθέσιμα μέσω δικτύου [ως PDF (portable document format) αρχεία].
- Η κεντρική ιστοσελίδα του μαθήματος είναι διαθέσιμη μέσω e-Class :

<http://eclass.duth.gr/>

# Οργάνωση μαθήματος

---

## Εργαστηριακές ασκήσεις (8)

- Η παρουσία στα εργαστήρια είναι αληθώς υποχρεωτική.
- Λόγω της (δυσ)αναλογίας φοιτητών/προσωπικού απουσίες δεν επιτρέπονται και επαναληπτικά εργαστήρια δεν προβλέπονται.

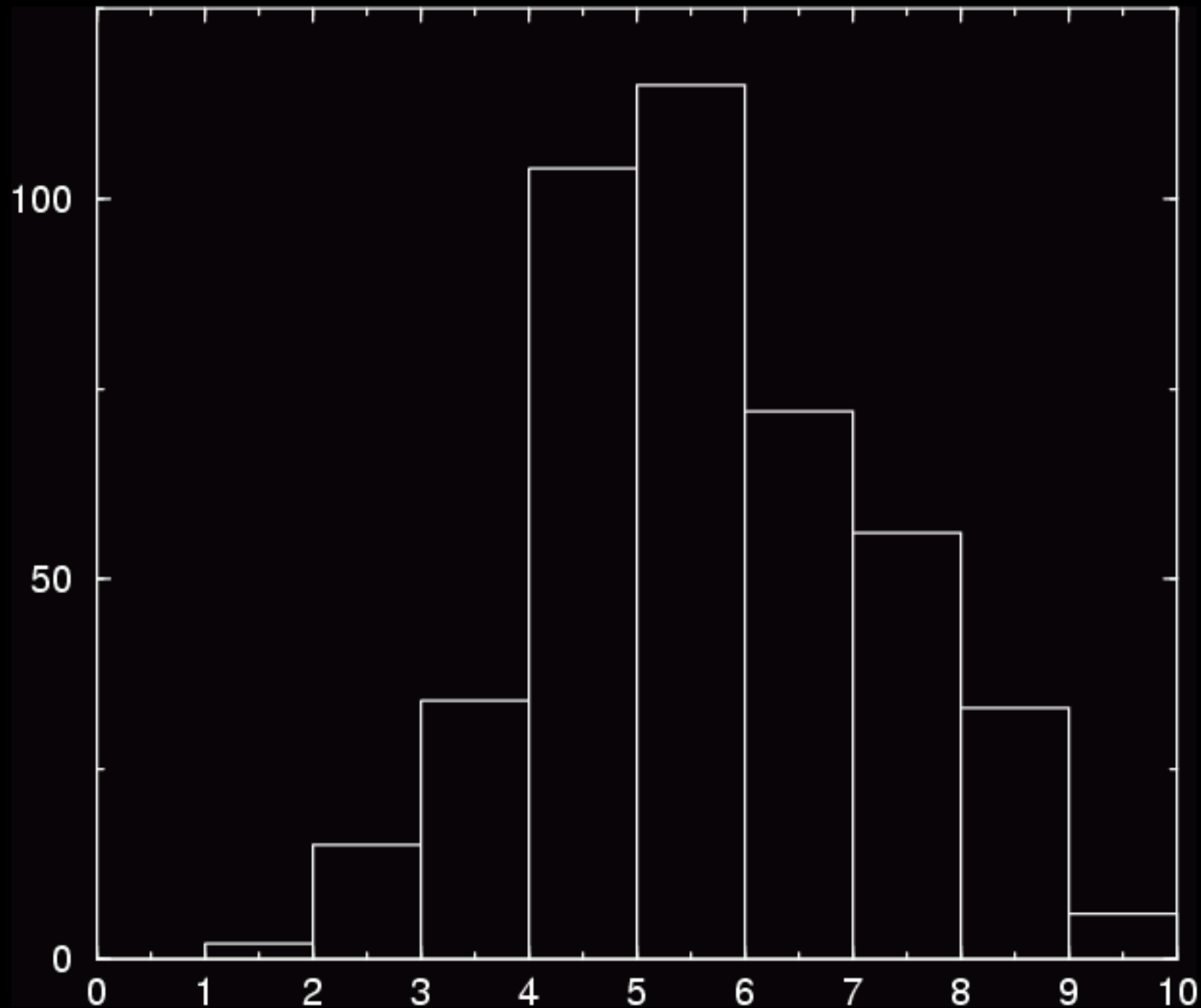
# Οργάνωση μαθήματος

## Αίθουσα υπολογιστών τμήματος



# Στόχος μαθήματος

Να το περάσετε.



# Βαθμολογία

---

Εργαστήρια : 30%

Εξεταστική : 70% του τελικού βαθμού.

- Για να περάσετε το μάθημα θα πρέπει (α) να γράψετε κατ'ελάχιστο 5 στις εξετάσεις Ιανουαρίου (ασχέτως του βαθμού του εργαστηρίου), (β) ο τελικός βαθμός του μαθήματος (Εργαστήρια+Εξεταστική) θα πρέπει επίσης να είναι κατ'ελάχιστο 5.
- Το εργαστήριο δεν θα έχει ξεχωριστές εξετάσεις και ο βαθμός του προκύπτει από την (γραπτή) απόδοσή σας στις επιμέρους ασκήσεις.



# Βαθμολογία (Σενάρια)

Εργαστήριο : 10/10

Εξεταστική : 4/10 -> Σεπτέμβριος

Εργαστήριο : 10/10

Εξεταστική : 5/10 -> 6.5 (7)

Εργαστήριο : 0/10 (απών/απούσα)

Εξεταστική : 5/10 -> Σεπτέμβριος

Εργαστήριο : 0/10 (απών/απούσα)

Εξεταστική : 6/10 -> Σεπτέμβριος

Εργαστήριο : 0/10 (απών/απούσα)

Εξεταστική : 7/10 -> 5

# Εξεταστέα ύλη

---

Η εξεταστέα ύλη του μαθήματος είναι η διδαχθείσα. Δηλαδή, δεν εξετάζεται το εκάστοτε σύγγραμμα, εξετάζεται ό,τι έχει διδάχθει (διαλέξεις+εργαστήρια). Σημαντικό τμήμα της ύλης του μαθήματος εμπεριέχεται στο σύγγραμμα, αλλά ένα ακόμα πιο σημαντικό τμήμα δεν υπάρχει στο βιβλίο. Οι διαφάνειες των διαλέξεων και οι εκφωνήσεις των εργαστηριακών ασκήσεων είναι διαθέσιμες μέσω e-class.



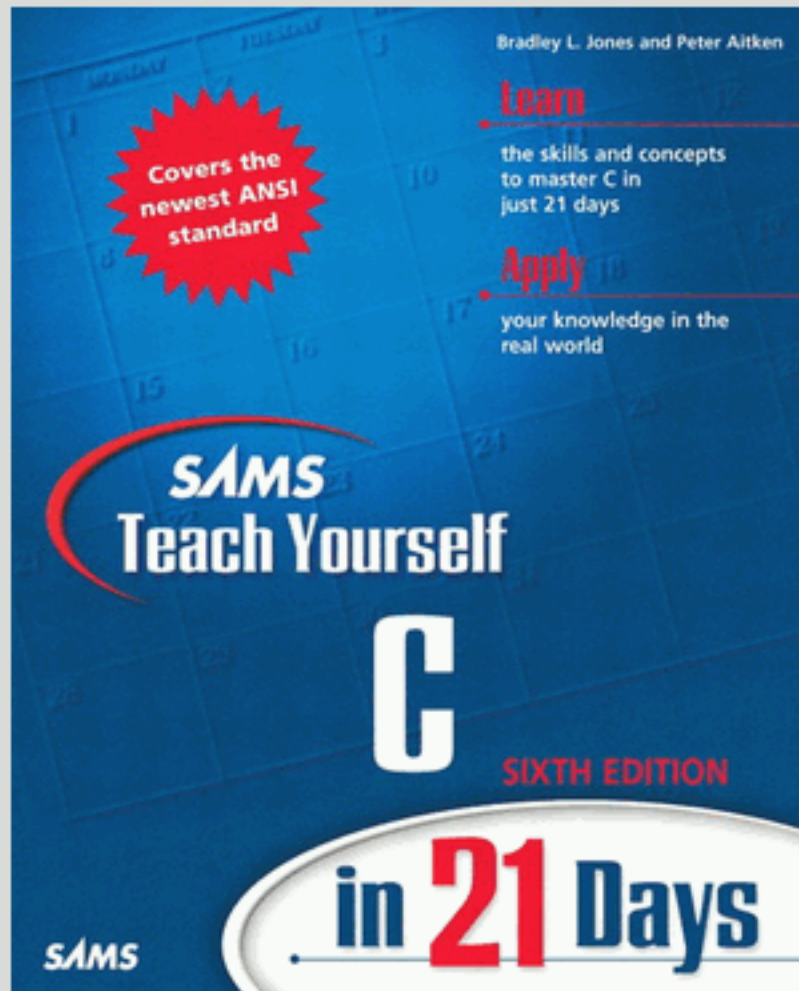
# Εξετάσεις

---

Τριάντα θέματα τύπου multiple choice σε περίπου 5 διαφορετικά set. Όλα τα sets θα έχουν τις ίδιες ερωτήσεις και πιθανές απαντήσεις μόνο που η σειρά τους (τόσο των ερωτήσεων όσο και των πιθανών απαντήσεων) θα είναι τυχαία.

Ένα θέμα προγραμματισμού σε C (βαρύτητας 2/10).

# Βιβλία



# Μια αντίφαση ...

---

## Σύνοψη μαθήματος

- Εισαγωγή στο περιβάλλον προγραμματισμού Unix.
- Εισαγωγή στη γλώσσα προγραμματισμού C.

# Μια αντίφαση ...

---

## Υπολογιστική βιολογία : ορισμός (NIH)

Η ανάπτυξη και εφαρμογή αναλυτικών και θεωρητικών μεθόδων, μαθηματικών μοντέλων και τεχνικών υπολογιστικών προσομοιώσεων για τη μελέτη βιολογικών συστημάτων.

Τι σχέση έχει αυτό με το Unix και τη C ;

Σχεδόν καμία.

# Μια αντίφαση ...

Άρα, γιατί 'εισαγωγή στην υπολογιστική βιολογία' ;;

Κυρίως γιατί ο προηγούμενος τίτλος του μαθήματος ("εισαγωγή στην πληροφορική") δημιουργούσε την εσφαλμένη προσδοκία ότι το περιεχόμενο του μαθήματος θα μπορούσε να σχετίζεται με θέματα όπως η επεξεργασία κειμένου ή η προετοιμασία διαφανειών (με π.χ. προγράμματα του microsoft office).

Αλλά, γιατί να μη μάθουμε προγραμματισμό με τα windows που τα γνωρίζουμε ήδη ;

Το ότι γνωρίζετε να κάνετε ποδήλατο σημαίνει ότι περιττεύει να μάθετε να οδηγείτε αυτοκίνητο ;



# Γιατί Unix και όχι windows ;

## 1. Ηθικοί λόγοι

- Η έμπρακτη, επίμονη και διαρκής προώθηση των προϊόντων μίας και μόνο μίας κερδοσκοπικής εταιρίας είναι ασύμβατη με τον χαρακτήρα του πανεπιστημίου.
- Το unix στη μορφή εκδόσεων όπως το GNU/Linux, OpenBSD, FreeBSD, κλπ, είναι ελεύθερο λογισμικό με ανοικτό (ελεύθερα προσβάσιμο πηγαίο κώδικα). Η ελεύθερη και ανοικτή πρόσβαση είναι απόλυτα συμβατή με το πνεύμα και την πρακτική των πανεπιστημιακών ιδρυμάτων (και του ανθρώπινου δυναμικού τους).



# Γιατί Unix και όχι windows ;

---

## 2. Οικονομικοί λόγοι

Η αγορά, συντήρηση, και αναβάθμιση εμπορικά διαθέσιμου λογισμικού απαιτεί κεφάλαια τα οποία δεν υπάρχουν. Το ίδιο ισχύει και για τις περιπτώσεις στις οποίες απαιτείται η επίλυση προβλημάτων του εν λόγω λογισμικού.

# Γιατί Unix και όχι windows ;

## 3. Εκπαιδευτικοί λόγοι

Στόχος του μαθήματος είναι η απομυθοποίηση των υπολογιστών : Από την άποψη των επιστημονικών εφαρμογών οι υπολογιστές είναι προγραμματιζόμενες υπολογιστικές μηχανές. Ο μοναδικός τρόπος για να απομυθοποιηθούν αυτές οι μηχανές είναι να τις προγραμματίσετε. Για να επιτευχθεί αυτό απαιτείται ένα υγιές, πλήρες και αυτάρκες περιβάλλον προγραμματισμού, δηλαδή Unix : Fortran (66/77/90), C, C++, Python, Perl, Tcl/Tk, Pascal, Ada, Java, Lisp, Logo, Prolog, Caml, shells, assembly, ...

# Γιατί Unix και όχι windows ;

## 4. Ιστορικοί και φιλολογικοί λόγοι

Το unix δημιουργήθηκε από ακαδημαϊκούς για ακαδημαϊκούς, και χρησιμοποιείται κυρίως από ακαδημαϊκούς εδώ και 35 χρόνια. Είναι το συμπαγές προϊόν της συγχρονισμένης δουλειάς τριών μυαλών. Ως αποτέλεσμα αυτού έχει συνοχή έκφρασης, καθαρό συντακτικό και λειτουργική ευελιξία (το ίδιο πράγμα μπορεί να επιτευχθεί με πολλούς διαφορετικούς τρόπους). Ως αρνητική συνέπεια του καθαρού και συμπαγούς συντακτικού είναι το ότι πρέπει να συγχρονίσετε το μυαλό σας με τον τρόπο σκέψης των δημιουργών του (το οποίο είναι -με έναν άλλο τρόπο- επίσης αληθές για τα windows).

# Γιατί Unix και όχι windows ;

## 5. Αφθονία υποστήριξης από τη βάση χρηστών

Τα windows έχουν μια τεράστια βάση χρηστών. Το unix έχει μια πολύ μεγαλύτερη (σε απόλυτα, όχι σχετικά μεγέθη) βάση χρηστών-προγραμματιστών. Η συλλογική αυτή γνώση (όπως εκφράζεται από το πλήθος των mailing lists) είναι διαθέσιμη άμεσα, ελεύθερα και σε πραγματικό χρόνο (όσο χρόνο χρειάζεται να παραδοθεί ένα μήνυμα σε κάποια mailing list).

# Γιατί Unix και όχι windows ;

## 6. Αφθονία ειδικού (επιστημονικού) λογισμικού

Το περιβάλλον unix είναι εδώ και πολλά χρόνια το φυσικό περιβάλλον ανάπτυξης επιστημονικών εφαρμογών. Για τις επιστημονικές εφαρμογές η συνηθισμένη πορεία είναι η μεταφορά-μετατροπή προγραμμάτων από unix προς windows και όχι το ανάποδο. Η αφθονία αυτή εκφράζεται με τον καλύτερο τρόπο μέσω της ύπαρξης διανομών του GNU/Linux οι οποίες έχουν ειδικό επιστημονικό προσανατολισμό (π.χ. Quantian για αριθμητική ανάλυση).



# Γιατί Unix και όχι windows ;

## 7. Τεχνικοί λόγοι

- Το unix είναι (εδώ και 35 χρόνια) ένα πραγματικά multitasking, multiuser, network aware (εάν όχι oriented) λειτουργικό σύστημα.
- Το unix είναι συμπαγές και οικονομικό σε πόρους υλικού : υπάρχουν εκδόσεις του linux που χωράνε σε μια δισκέτα και μπορούν να εκκινήσουν επιτυχώς PC με μόνο 8 MBytes φυσικής μνήμης. Η ανταπόκριση του unix (ιδιαίτερα στη μορφή του GNU/Linux) είναι άψογη ακόμα και σε περιπτώσεις υλικού όπως ένα PIII@733MHz με 64 MBytes φυσικής μνήμης.



# Γιατί Unix και όχι windows ;

## 7. Τεχνικοί λόγοι

- Σταθερότητα : ο σχεδιασμός τόσο των πυρήνων των unices, όσο και του υπόλοιπου περιβάλλοντος στοχεύει στη μακρόχρονη και απρόσκοπτη λειτουργία του συστήματος. Για ένα κοντινό παράδειγμα, ο server της αίθουσας υπολογιστών του τμήματος έχει επανεκκινηθεί οκτώ φορές από τότε που εγκαταστάθηκε (17 Απριλίου 2004) με μέγιστο συνεχές διάστημα λειτουργίας 109 ημέρες (3.5 μήνες). Αξιοσημείωτο είναι ότι και τις οκτώ φορές αιτία ήταν μια διακοπή ρεύματος λόγω καταιγίδας. Περίοδοι συνεχούς λειτουργίας της τάξεως των 1000 ημερών (3 χρόνια) δεν είναι σπάνιες στο χώρο των unix servers.

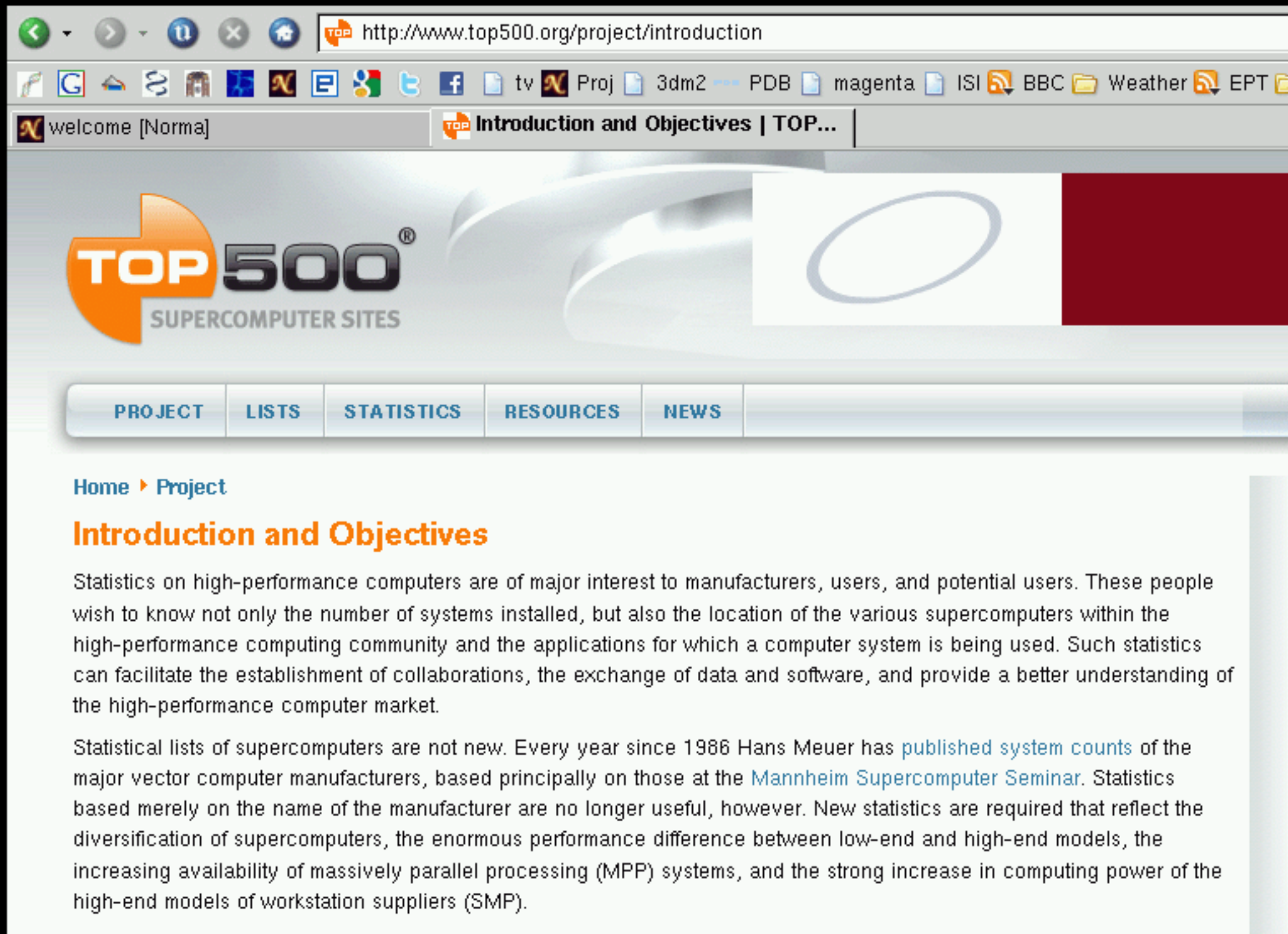
# Γιατί Unix και όχι windows ;

## 8. Ερευνητικοί λόγοι

Στο χώρο του unix, το clustering (δηλαδή η χρήση παράλληλα και ταυτόχρονα πολλών υπολογιστών για την ταχύτερη επίλυση ενός προβλήματος) έχει μια μακρά και επιτυχημένη ιστορία. Η ύπαρξη του κατάλληλου λογισμικού (πάλι ελεύθερο και δωρεάν) επιτρέπει τη δημιουργία ταχύτατων παράλληλων υπολογιστικών μηχανών ξεκινώντας από μια συλλογή από συνηθισμένα PCs. Αυτό με τη σειρά του επιτρέπει ακόμα και σε "φτωχά" πανεπιστημιακά τμήματα την εκτέλεση ερευνητικών υπολογισμών που αλλιώς θα ήταν ανέφικτες.

# Γιατί Unix και όχι windows ;

## 9. Τι είναι το 'windows' ; The top500 story ...



The screenshot shows a web browser window with the address bar displaying <http://www.top500.org/project/introduction>. The browser's toolbar includes various icons for navigation and search. The website's header features the TOP500 logo, which consists of an orange 'TOP' and '500' in black, with 'SUPERCOMPUTER SITES' written below. A navigation menu below the header contains links for PROJECT, LISTS, STATISTICS, RESOURCES, and NEWS. The main content area is titled 'Introduction and Objectives' and contains two paragraphs of text.

**TOP500<sup>®</sup>**  
SUPERCOMPUTER SITES

[PROJECT](#) [LISTS](#) [STATISTICS](#) [RESOURCES](#) [NEWS](#)

[Home](#) ▶ [Project](#)

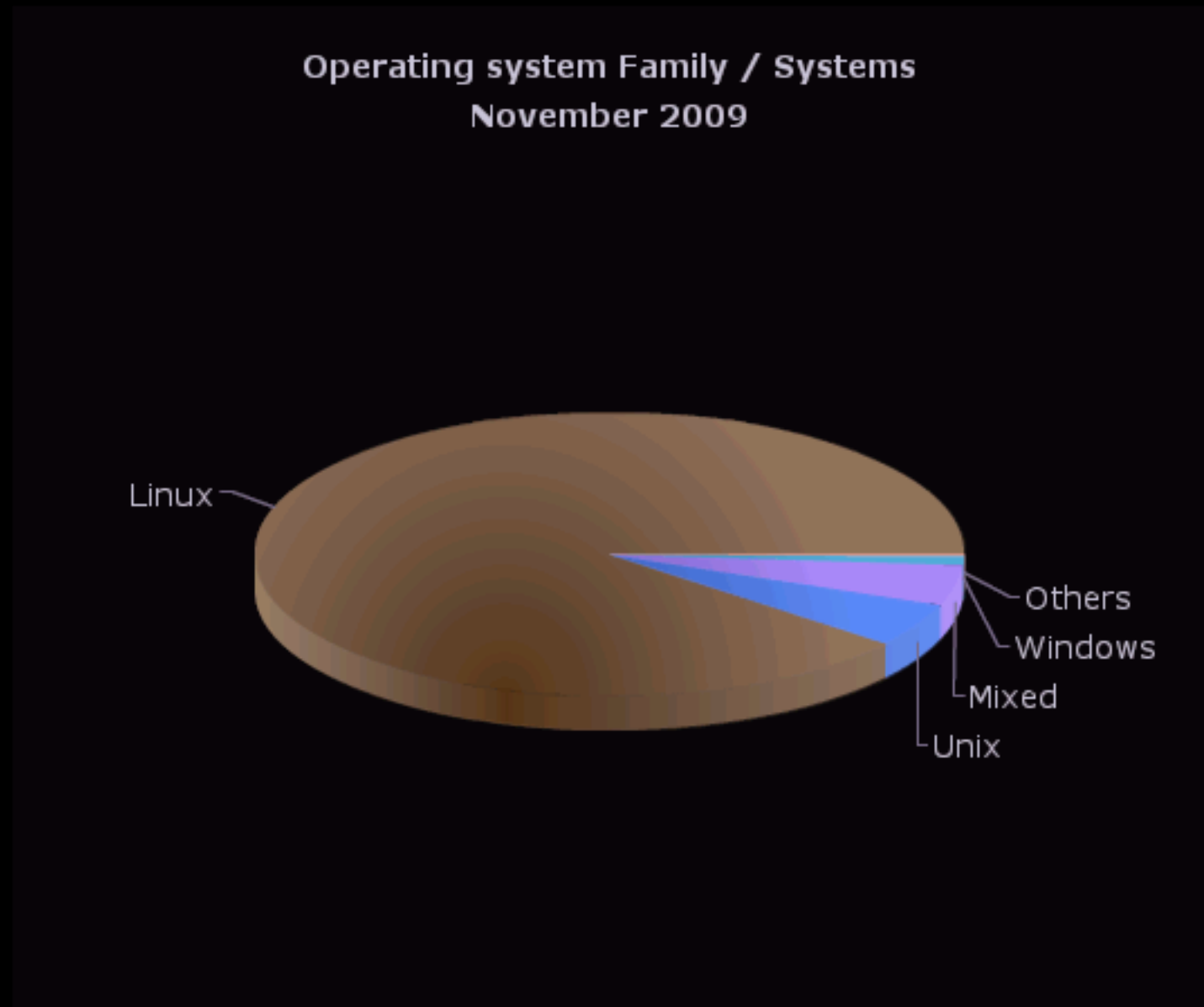
### Introduction and Objectives

Statistics on high-performance computers are of major interest to manufacturers, users, and potential users. These people wish to know not only the number of systems installed, but also the location of the various supercomputers within the high-performance computing community and the applications for which a computer system is being used. Such statistics can facilitate the establishment of collaborations, the exchange of data and software, and provide a better understanding of the high-performance computer market.

Statistical lists of supercomputers are not new. Every year since 1986 Hans Meuer has [published system counts](#) of the major vector computer manufacturers, based principally on those at the [Mannheim Supercomputer Seminar](#). Statistics based merely on the name of the manufacturer are no longer useful, however. New statistics are required that reflect the diversification of supercomputers, the enormous performance difference between low-end and high-end models, the increasing availability of massively parallel processing (MPP) systems, and the strong increase in computing power of the high-end models of workstation suppliers (SMP).

# Γιατί Unix και όχι windows ;

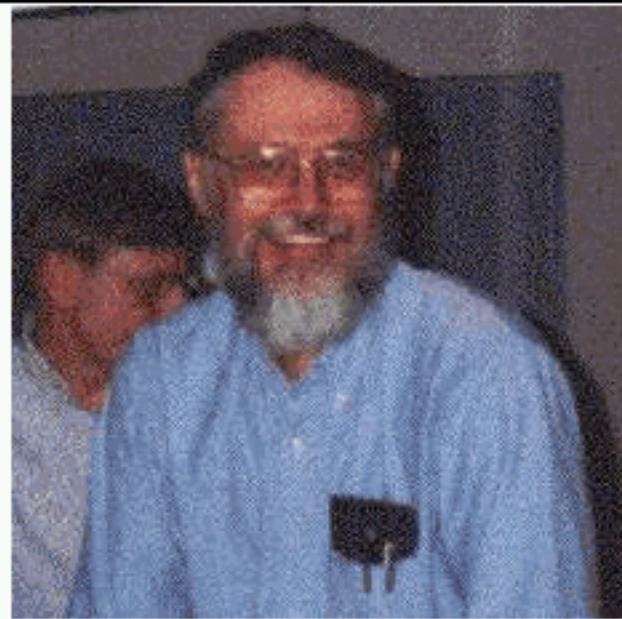
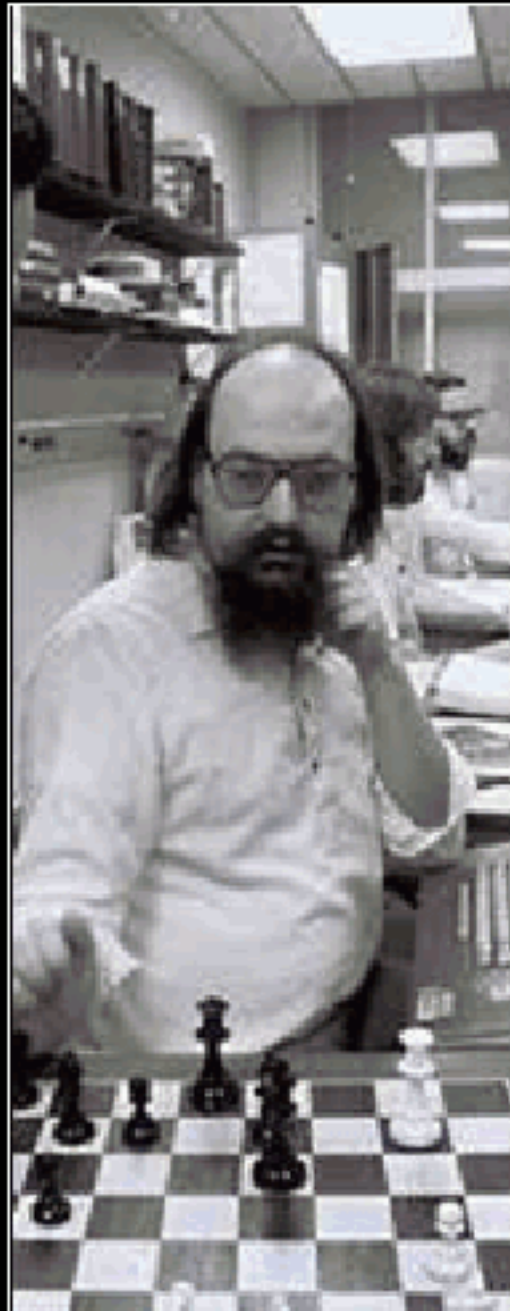
## 9. Τι είναι το 'windows' ; The top500 story ...





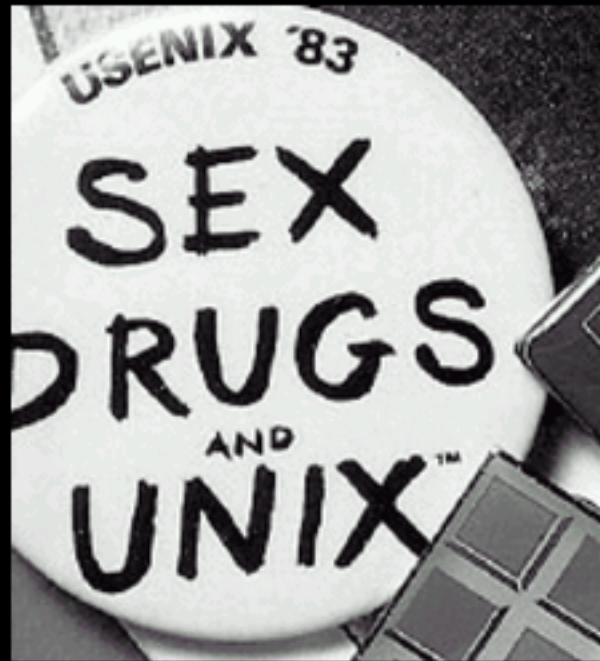
# Γιατί Unix και όχι windows ;

## 10. Ιδεολογικοί λόγοι



# Γιατί Unix και όχι windows ;

## 10. Ιδεολογικοί λόγοι





# Χρήσεις των Windows

---

Επεξεργασία κειμένου, δημιουργία παρουσιάσεων, δημιουργία γραφημάτων και εικόνων, αποθήκευση και οργάνωση αρχείων mp3, jpg, ...

# Κριτική του Unix

---

Η πλέον ολοκληρωμένη και πικρόχολη κριτική που έχω υπόψη μου είναι το :

**The Unix-Haters Handbook**

Το βιβλίο αυτό είναι διαθέσιμο μέσω e-class (στα "Εγγγραφα", αρχείο τύπου pdf, μέγεθος 3 MBytes).