C2110 *Operační systém UNIX a základy programování*

9. lekce

Petr Kulhánek, Jakub Štěpán

kulhanek@chemi.muni.cz

Národní centrum pro výzkum biomolekul, Přírodovědecká fakulta
Masarykova univerzita, Kotlářská 2, CZ-61137 Brno

INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

CZ.1.07/2.2.00/15.0233

Obsah

- **Bash**
  - **cyklus pomocí while**
- **Gnuplot**
  - **přehled jazyka, příkaz plot, terminály, příkaz splot**

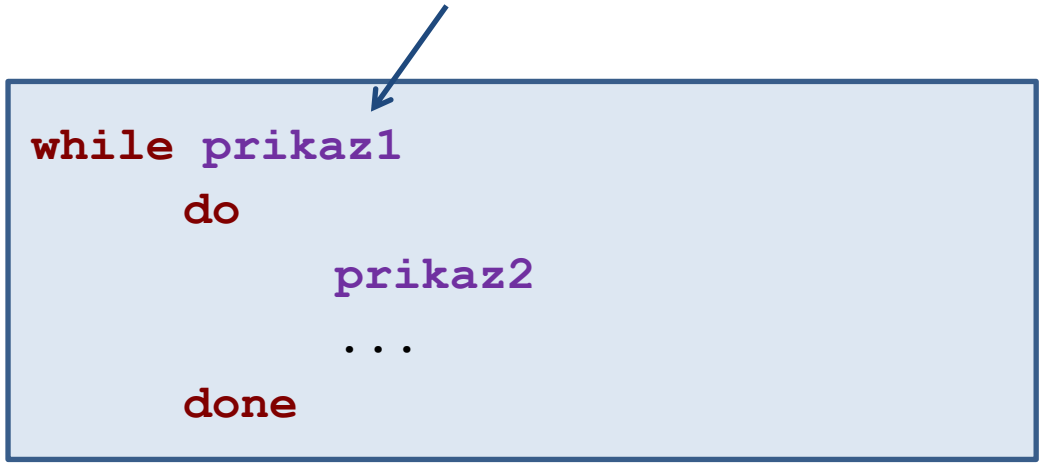
Bash

- **cyklus pomocí while**

Cyklus pomocí while

Cyklus (smyčka) je řídicí struktura, která opakovaně provádí posloupnost příkazů. Opakování i ukončení cyklu je řízeno podmínkou.

cyklus probíhá **dokud** prikaz1 vrací v návratové hodnotě 0

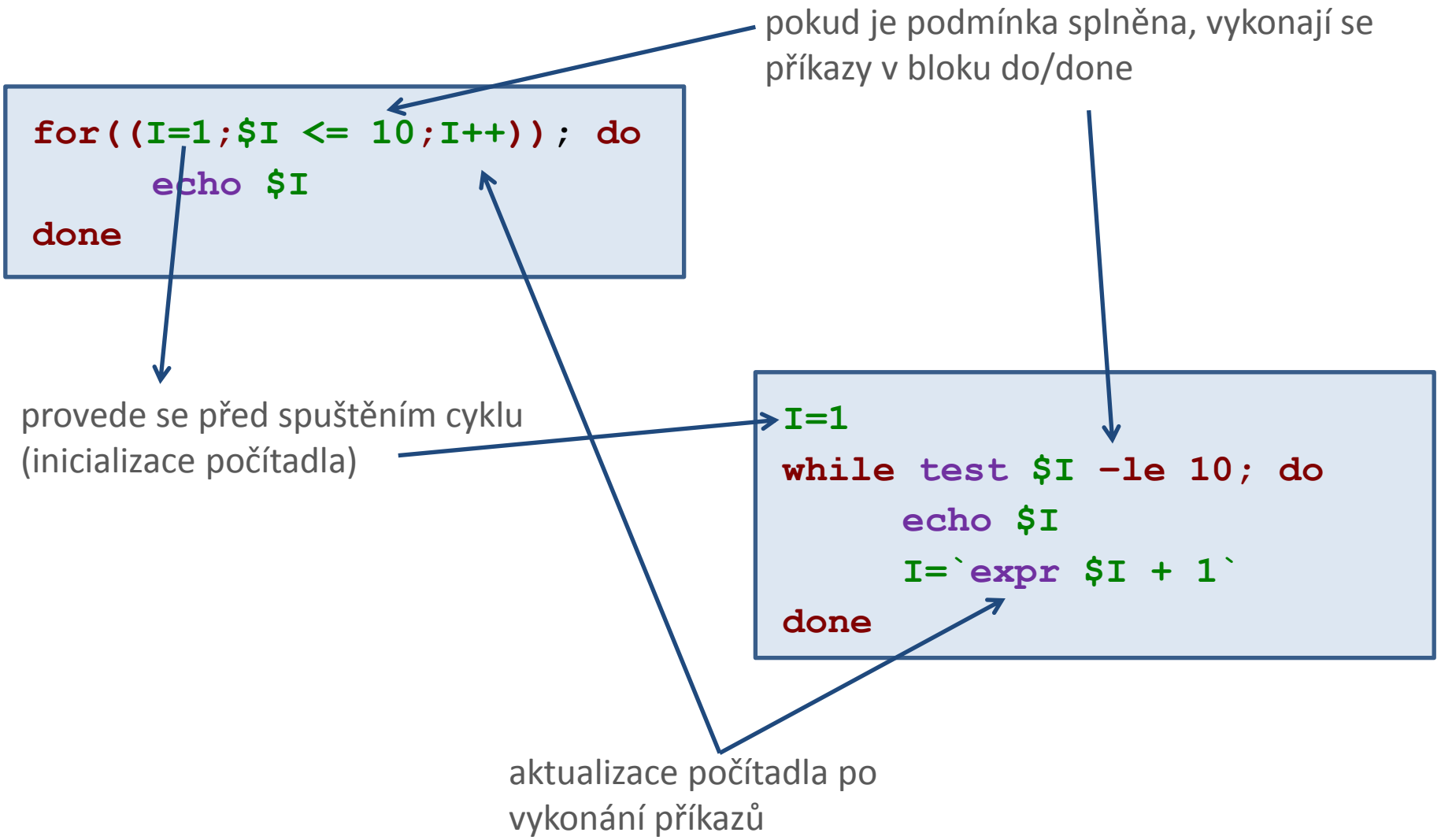


```
while prikaz1
      do
            prikaz2
            ...
      done
```

Kompaktní zápis:

```
while prikaz1; do
      prikaz2
      ...
done
```

Cyklus pomocí for versus while



Přesměrování a roury

Čtení souboru po řádcích:

```
cat soubor.txt | while read A; do
      prikaz2
      ...
done
```

roura

```
while read A; do
      prikaz2
      ...
done < soubor.txt
```

přesměrování

Přesměrování do souboru:

```
for((I=1;I <= 10;I++)); do
      echo $I
done > soubor.txt
```

Výstup všech příkazů v cyklu je přesměrován do **soubor.txt**.

Domácí úkol I

Vysvětlete rozdílné chování následujících skriptů. Soubor data.txt obsahuje pět řádků.

```
#!/bin/bash
I=0
cat data.txt | while read A; do
      I=$(($I+1))
done
echo $I
```

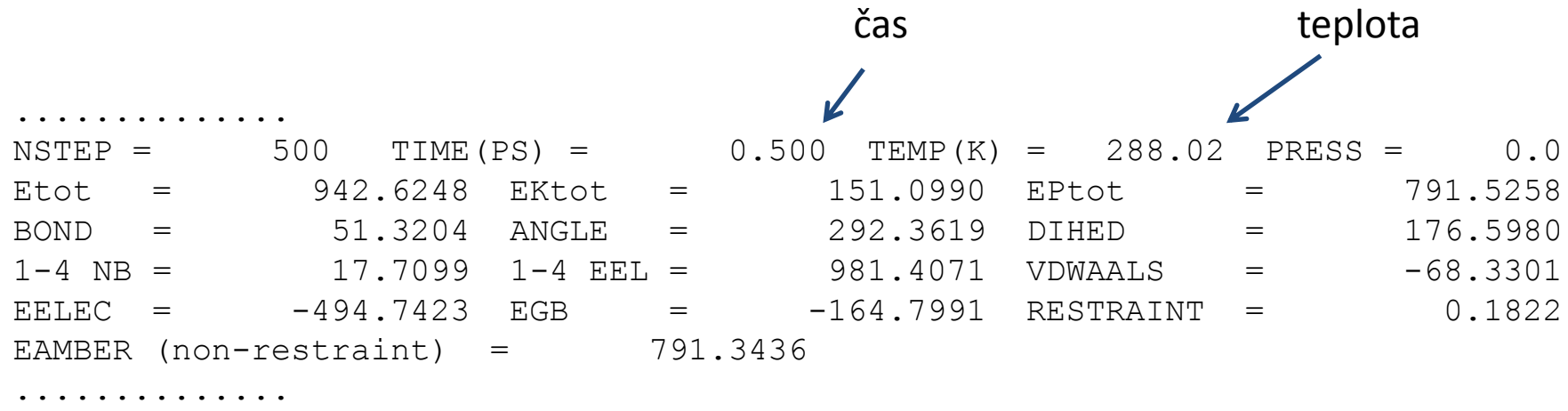
vypíše číslo 0

```
#!/bin/bash
I=0
while read A; do
      I=$(($I+1))
done < data.txt
echo $I
```

vypíše číslo 5

Domácí úkol II

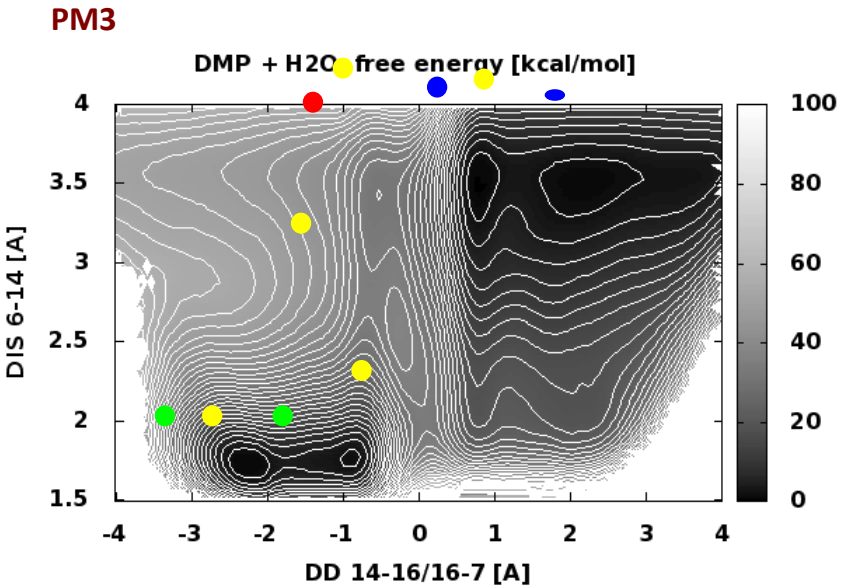
Soubor rst.out (wolf.ncbr.muni.cz:/home/kulhanek/Data/rst.out) obsahuje výsledky z molekulové dynamiky. Úkolem je ze souboru vyextrahovat závislost teploty simulovaného systému na čase.



POZOR: Skript nesmí obsahovat příkazy grep, awk a ani jejich varianty. Při řešení použijte příkaz read a while.

Gnuplot

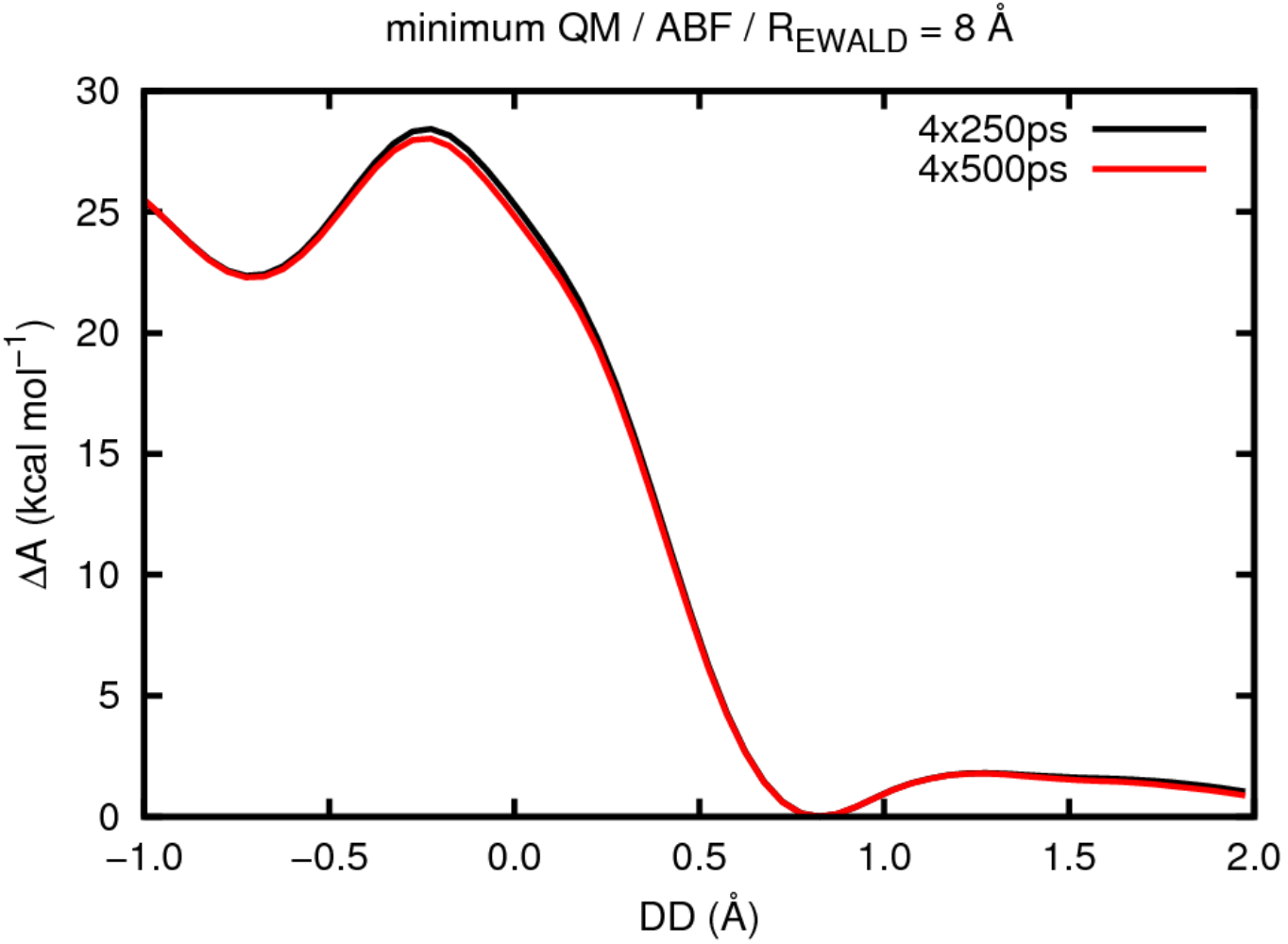
- (Ne)Interaktivní spouštění
- Příkaz plot
- Terminály
- Ukázky



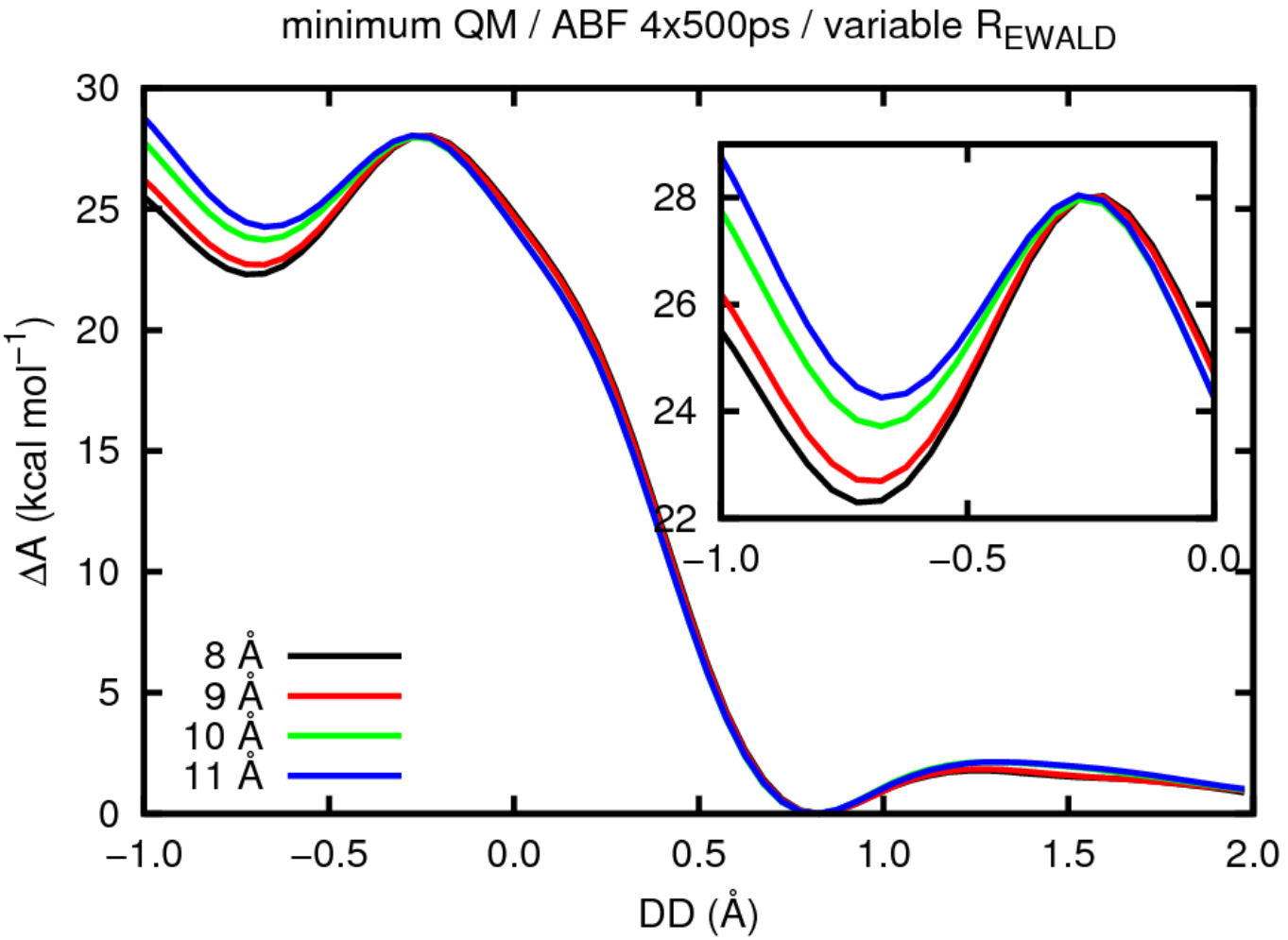
http://www.gnuplot.info/

(dokumentace, tutoriály, zdrojové kódy)

Ukázky


minimum QM / ABF / R_{EWALD} = 8 Å
4x250ps
4x500ps
ΔA (kcal mol^{-1})
DD (Å)
30
25
20
15
10
5
0
–1.0
–0.5
0.0
0.5
1.0
1.5
2.0

Ukázky


minimum QM / ABF 4x500ps / variable R_{EWALD}
ΔA (kcal mol^{-1})
DD (Å)
8 Å
9 Å
10 Å
11 Å
30
25
20
15
10
5
0
−1.0
−0.5
0.0
0.5
1.0
1.5
2.0
28
26
24
22
−1.0
−0.5
0.0

Interaktivní spouštění

Gnuplot slouží k vykreslování 2D a 3D grafů umožnující práci v interaktivním tak i skriptovacím režimu.

příkazová řádka shellu Bash

Interaktvní mód

```
[kulhanek@wolf ~]$ gnuplot

        G N U P L O T
        Version 4.4 patchlevel 3
        last modified March 2011
        System: Linux 3.2.0-31-generic

        Copyright (C) 1986-1993, 1998, 2004, 2007-2010
        Thomas Williams, Colin Kelley and many others

        gnuplot home:     http://www.gnuplot.info
        faq, bugs, etc:   type "help seeking-assistance"
        immediate help:   type "help"
        plot window:      hit 'h'

Terminal type set to 'wxt'
gnuplot>
```

příkazová řádka gnuplotu

Neinteraktivní spouštění

1) Nepřímé spouštění

Spouštíme interpreter jazyka a jako argument uvádíme jméno skriptu.

```
$ gnuplot muj_skript_v_gnuplotu
```

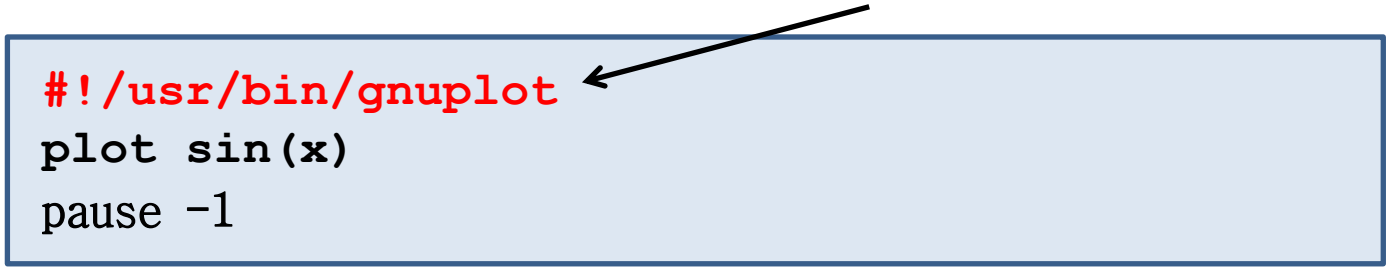
Skripty **nemusí** mít nastaven příznak x (executable).

2) Přímé spouštění

Spouštíme přímo skript (shell automaticky spustí interpreter).

```
$ chmod u+x muj_skript_v_gnuplotu
$./muj_skript_v_gnuplotu
```

Skripty **musí** mít nastaven příznak **x** (executable) a **interpreter** (součást skriptu).



Příkaz - plot

```
> plot funkce/soubor [nastaveni_zobrazeni] [, fce/soubor ...]
```

Zobrazí XY graf funkce nebo datové řady obsažené v souboru.

Příklady:

lines, points, linespoints, dots

barva čáry

```
> plot sin(x)
> plot cos(5.7*x+3.4) with points linecolor rgb "red" \
                      linewidth 2 title "cos"
```

tloušťka čáry

legenda

název souboru s daty

```
> plot "input.txt" using 1:2 with lines
```

druhý sloupec tvoří y-ové hodnoty

první sloupec tvoří x-ové hodnoty

```
> plot sin(x), cos(x)
```

zobrazí funkci sin a cos do jednoho grafu

Cvičení

1. Znázorněte průběh funkce $y=x^2$
2. Průběh funkce z prvního cvičení zobrazte modrou barvou
3. Zobrazte průběh teploty v čase obsažený v souboru **/home/kulhanek/Data/temp.txt** Čas je uveden v prvním sloupci, teplota je uvedena v druhém sloupci.
4. Zobrazte do jednoho grafu funkci sin(x) pomocí červené čáry a funkci cos(x) pomocí oranžové čáry a bodů.

Úlohy řešte v interaktivním režimu.

Další příkazy

```
> set title "popis"                          # záhlaví grafu
> set xrange[min_value:max_value]            # nastaví rozsah x-ové osy
> set xlabel "popis"                         # nastaví popis x-ové osy
> set yrange[min_value:max_value]            # nastaví rozsah y-ové osy
> set ylabel "popis"                         # nastaví popis y-ové osy
> set nokey                                  # nezobrazí legendu k datovým řadám
> pause -1                                   # čeká na zmáčknutí klávesy
```

Cvičení

1. Napište skript, který znázorní průběh funkce $y=x^2$ v rozsahu 0-10 pro x-ovou hodnotu. Skript spusťte nepřímo pomocí interpretru gnuplot.

2. Napište skript, který zobrazí průběh teploty v čase obsažený v souboru **/home/kulhanek/Data/temp.txt** . V grafu popište osy včetně určení jednotek. Čas je uveden v picosekundách, teplota v kelvinech.

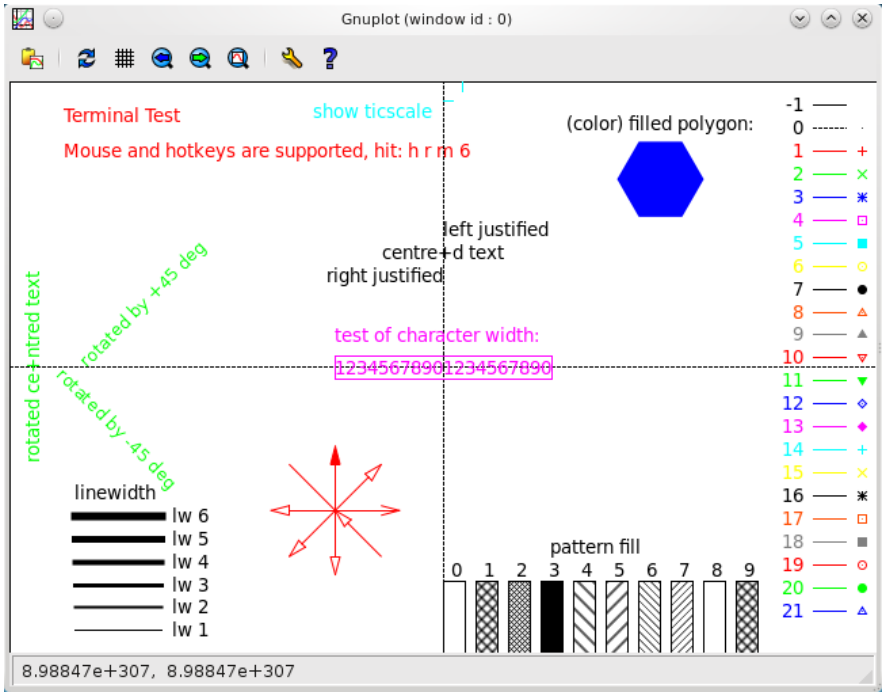
Terminály

Terminál určuje kam bude graf vykreslen.

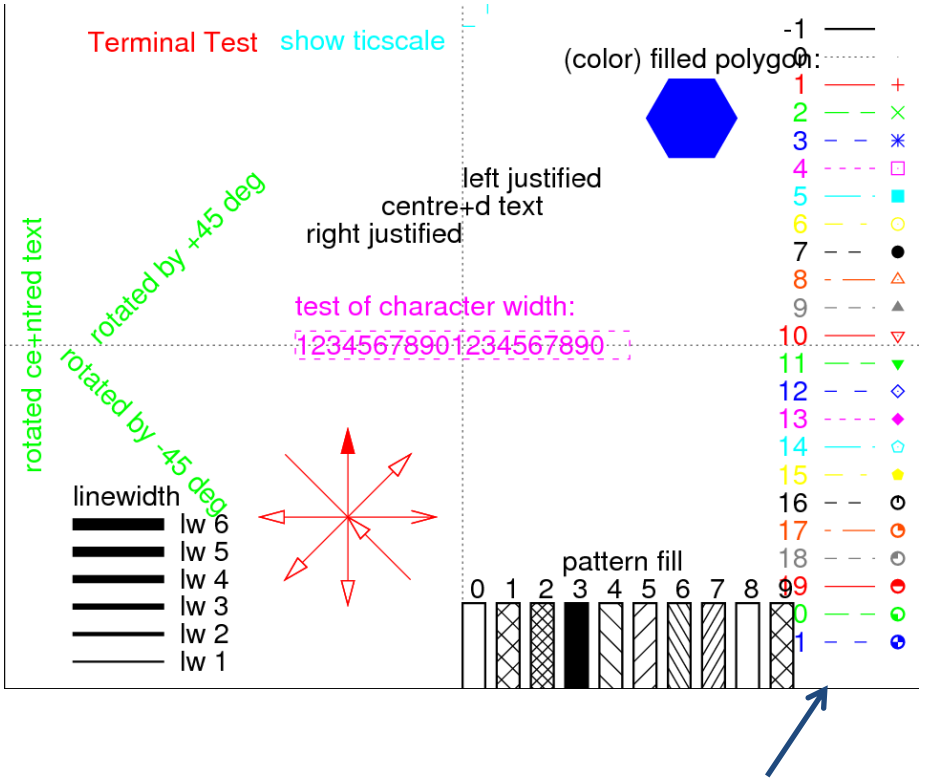
```
> set term x11                    # výstup je vykreslen do okna

> set term wxt                    # výstup je vykreslen do okna (lepší vlastnosti)

> set term png size 800,600
                                  # výstup je vykreslen jako obrázek ve formátu png

> set output "output.png"         # výstup bude uložen do souboru output.png

> test                            # vytiskne stránku demonstrující vlastnosti
                                  terminálu (ne všechny  terminály mají stejné
                                  možnosti výstupu)
```

Ukázky výstupu z různých terminálů

wxt



postcript/eps



podporuje přerušované čáry

Cvičení

1. Jaké vlastnosti poskytují terminály x11 a wxt. Pracujte v interaktivním režimu a použijte příkaz **test**.
2. Napište skript, který znázorní průběh funkce $y=5.x^3 + 6. x^2 - 7$ v rozsahu -10 až 5 pro x-ovou hodnotu. Skript spusťte přímo s uvedením interpretru v záhlaví skriptu.
3. Upravte předchozí skript tak, že se graf vykreslí do obrázku ve formátu png. Obrázek bude mít rozměry 640x480. Obrázek zobrazte pomocí příkazu **display**.
4. Zobrazte výsledek příkazu **test** pro terminál png a postscript.
5. Jaké terminály podporuje gnuplot (set terminal bez argumentu)?

Příkaz - splot

K zobrazování funkcí dvou proměnných lze použít příkaz splot.

```
> splot funkce/soubor [nastaveni_zobrazeni] [, fce/soubor ...]
```

Zobrazí **XYZ** graf funkce nebo datové řady obsažené v souboru.

Směr pohledu se nastavuje příkazem **set view a,b**, kde **a** a **b** jsou směrové úhly. Pohled shora lze nastavit pomocí **set view map**

Při zobrazování funkcí lze hustotu vzorkování pro x-ový a y-ový směr zadat příkazem **set isosamples a,b**, kde **a** a **b** udává počet vzorků v daném směru.

Pro zvýraznění plochy pomocí funkční hodnoty lze použít **pm3d** zobrazení, např.

```
> splot x*x+y*y with pm3d
```

Cvičení

1. Zobrazte funkci x^2+y^2
2. Nastavte pohled shora (**set view**)
3. Zrušte pohled shora (**unset view**)
4. Zvyšte hustotu bodů pro zobrazení funkce (**set isosamples**). Použijte hodnoty 10,20 ; 20,10 a 20,20
5. Použijte zobrazení **pm3d**
6. Nastavte pohled shora (**set view**)

Úlohy řešte v interaktivním režimu.