

# C2184 Úvod do programování v Pythonu

## Domácí úkol 8

1. Ze studijních materiálu si stáhněte soubor `homework08.zip` a rozbalte jej. V rozbalené složce `homework08` se nachází 35 různých výstupů podobných jako v úkolu 3, který jste pracovali na cvičení.
2. Projděte obsah složky pomocí funkce `glob` v modulu `glob`:

```
from glob import glob
for filename in glob("homework08/*.log"):
    print(filename)
```

3. Projděte všechny soubory a vyextrahujte energie a délku běhu programu.

```
...
Initial convergence to 1.0D-05 achieved. Increase integral accuracy.
SCF Done: E(RHF) = -2358.35523059 A.U. after 15 cycles
                NFock= 15 Conv=0.90D-08 -V/T= 2.0015
...
Job cpu time: 0 days 0 hours 12 minutes 10.4 seconds.
File lengths (MBytes): RWF= 273 Int= 0 D2E= 0 Chk= 19 Scr= 1
Normal termination of Gaussian 09 at Thu Mar 5 14:37:54 2015.
```

Hodnotu energie převedte z atomových jednotek na kcal/mol (1 hartree = 627,503 kcal/mol) a hodnotu času převedte na sekundy. Výsledek uložte do jednoho souboru v tomto formátu:

```
Molecule ID;energy (hartree);energy (kcal/mol);cpu time (s)
1;-2358.35523059;-1.4798e+06;730.4
2;...
3;...
...
```

4. Zkuste si tento soubor naimportovat do Excelu jako CSV soubor.
5. Vyextrahujte z každého výstupu (souboru) citát na konci souboru a uložte je do jednoho samostatného souboru:

```
BETTER TO HUNT IN FIELDS, FOR HEALTH UNBOUGHT
THAN FEE THE DOCTOR FOR A NAUSEOUS DRAUGHT.
THE WISE, FOR CURE, ON EXERCISE DEPEND;
GOD NEVER MADE HIS WORK FOR MAN TO MEND.
-- JOHN DRYDEN (1631-1700)
```

```
OLD AGE AND TREACHERY WILL ALWAYS PREVAIL OVER YOUTH AND SKILL.
```

```
...
```