

C2110 Operační systém UNIX a základy programování

11. lekce / modul 1

PS/2020 Distanční forma výuky: Rev1

Petr Kulhánek

kulhanek@chemi.muni.cz

Národní centrum pro výzkum biomolekul, Přírodovědecká fakulta
Masarykova univerzita, Kamenice 5, CZ-62500 Brno

Bash+AWK+Gnuplot

Data jsou v adresáři:

`/home/kulhanek/Documents/C2110/Lesson11`

Cvičení 2

1. Ze souboru prod006.out vyextrahujte průběh celkové energie (E_{tot}), kinetické energie (E_{Ktot}) a potenciální energie (E_{Ptot}) na čase. Průběh jednotlivých energií zobrazte v gnuplotu a uložte do souboru energy.png. Ověřte, že součet potenciální a kinetické energie se rovná celkové energii.

čas
↓

```
.....  
NSTEP =          500    TIME (PS) =          0.500    TEMP (K) =    288.02    PRESS =          0.0  
Etot   =          942.6248    EKtot   =          151.0990    EPtot   =          791.5258  
BOND   =          51.3204    ANGLE  =          292.3619    DIHED   =          176.5980  
1-4 NB =          17.7099    1-4 EEL =          981.4071    VDWAALS =          -68.3301  
EELEC  =          -494.7423    EGB    =          -164.7991    RESTRAINT =          0.1822  
EAMBER (non-restraint) =          791.3436  
.....
```

Cvičení 3

1. Napište skript(y), který vypíše řadu čísel 3^n pro n od 1 do N do souboru data.txt. (10 bodů). Číslo N uživatel zadá jako první argument skriptu (5 bodů). Ošetření vstupu (5 bodů). Průběh číselné řady uložené v souboru data.txt zobrazte v gnuplotu, zobrazení proveďte neinteraktivně (10 bodů).

Ukázka zadání úkolu ke zkoušce.

Cvičení 4

1. Vykreslete do souboru rovnostranný pravoúhlý trojúhelník, jehož obrys bude ze znaků “*” (5 bodů) a výplň pomocí znaků “@” (10 bodů). Rozměr odvěsen trojúhelníka a název souboru zadá uživatel interaktivně po spuštění skriptu (5 bodů). Ošetření vstupu: Trojúhelník musí obsahovat alespoň jeden znak „@“ (5 bodů). Skript nedovolí zápis do již existujícího souboru (5 bodů).

Ukázka zadání úkolu ke zkoušce.

Cvičení 5

1. V zadaném adresáři najde všechny soubory s příponami .hpp a .cpp a vypište na standardní výstup jejich počet celkem a poté zvlášť pro .hpp a .cpp soubory (10 bodů), dále celkový počet řádků ve všech nalezených souborech a poté zvlášť pro .hpp a .cpp soubory (10 bodů). Výpis zároveň uložte do souboru „summary.txt“ (5 bodů). Analyzovaný adresář se zadá jako první argument skriptu. Ošetření vstupu (5 bodů): analyzovaný adresář musí existovat. Data pro testování najdete v adresáři pmflib.

Ukázka zadání úkolu ke zkoušce.

Cvičení 6

1. Napište skript v awk, který ze souboru s kvantově-mechanickou analýzou molekulárního komplexu metodou SAPT0 vyextrahuje komponenty interakční energie v kcal/mol uvedené v sekci "SAPT Results" uvedené na konci souboru. Konkrétně elektrostatickou (Electrostatics), výměnnou (Exchange), indukční (Induction) a disperzní (Dispersion) energii. Poslední sloupec bude obsahovat celkovou interakční energii (Total SAPT0). Testovací data najdete v adresáři "sapt0".
2. Napište skript v bashi, který provede výše uvedenou analýzu pro všechny soubory se zakončením ".out". V prvním sloupci bude název analyzovaného komplexu (jméno souboru bez zakončení .out) a dále jednotlivé složky interakční energie. Výsledek uložte do textového souboru "results.txt". Data jsou v adresáři "sapt0".