

C2110 Operační systém UNIX a základy programování

Data k úkolům jsou v adresáři:

/home/kulhanek/Documents/C2110/Tests/Final/Data/Scripts/WeekC

UPOZORNĚNÍ:

Jednu zvolenou úlohu řešte v adresáři C2110-kolokvium, který bude mít plně zakázaný přístup pro skupinu a pro ostatní uživatele!

Zadání A

Vytvořte skript, který vypočítá kořeny kvadratických rovnic ve formátu $ax^2 + bx + c = 0$. Parametry rovnic budou zadány v textovém souboru. První sloupec souboru obsahuje parametr a , druhý b a třetí c . Každý řádek pak obsahuje parametry pro jednu kvadratickou rovnici. Vstupní soubor se bude zadávat jako první argument skriptu. Kořeny se budou vypisovat na standardní výstup. **(15 bodů)** V případě, že rovnice nemá reálné řešení, skript o této skutečnosti uživatele informuje **(5 bodů)**. V případě, že určitý řádek vstupního souboru neobsahuje správný počet parametrů, skript o této skutečnosti opět informuje uživatele **(5 bodů)**. Skript ověří, že vstupní soubor existuje. Pokud ne, tak vypíše chybové hlášení a ukončí se **(5 bodů)**.

Testovací soubory quadratic1.dat a quadratic2.dat jsou dostupné v adresáři Quadratics.

Zadání B

Pomocí kvantově-chemického výpočtu metodou HF/6-31G(d) byla provedena optimalizace geometrie molekuly. Výsledkem optimalizace je nalezení geometrického uspořádání atomů, které má nejnižší energii. Úkolem je ze zaznamenaného průběhu optimalizace vyextrahovat pro každou geometrii její energii a ověřit, že poslední geometrie má skutečně nejnižší energii. Energie pro každý optimalizační krok je uvedena za klíčovým výrazem: „SCF Done:“. Jednotkou energie je Hartree **(15 bodů)**. Průběh energie zobrazte ve formě grafu, který uložíte do souboru s názvem „optimization.png“. Řádně popište osy grafu **(10 bodů)**. Název analyzovaného souboru zadá uživatel jako první argument skriptu. Skript ověří, že zadaný soubor skutečně existuje **(5 bodů)**.

Testovací soubor s názvem „aceticacid.log“ je dostupný v adresáři „QM“.

Zadání C

Výsledkem literární rešerše je soubor, který obsahuje informace důležitosti aminokyselin pro funkci membránového receptoru. Soubor ve formátu tsv obsahuje sloupce oddělené tabulátorem. Popis sloupců je uveden na prvním řádku. Typ aminokyseliny je zapsán ve sloupci „residue“ pomocí jednopísmenného kódu. Proveďte statistickou analýzu důležitostí jednotlivých aminokyselin, pro které jsou dostupné anotace. Výsledkem bude soubor aminoacids.txt, který bude v prvním sloupci obsahovat jednopísmenný kód aminokyseliny a ve druhém počet záznamu pro tuto aminokyselinu **(15 bodů)**. Na standardní výstup dále vypište aminokyselinu s největším a nejmenším zastoupením **(10 bodů)**. Jméno vstupního souboru k analýze uživatel zadá jako první argument skriptu. Skript ověří, zdali soubor existuje. Pokud ne, tak vypíše chybové hlášení a ukončí se **(5 bodů)**.

Testovací soubor **2020.tsv** je dostupný v adresáři Annotations.