

## 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!
- Řešení se může skládat z více souborů (skriptů), které vložíte do odevzdávacího balení zabalené do archívu ve formátu tar.

### 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

Fibonacciho posloupnost je v matematice označována nekonečná posloupnost přirozených čísel. Pro tuto posloupnost platí, že hodnota pro index  $N$  se rovná součtu dvou předchozích hodnot ( $F_N = F_{N-1} + F_{N-2}$ ), a první dvě hodnoty jsou 0 a 1 ( $F_1 = 0$ ,  $F_2 = 1$ ). Vytvořte skript, který do souboru „fibonacci.txt“ vypíše prvních  $N$  hodnot Fibonacciho posloupnosti. V prvním sloupci bude hodnota indexu a v druhém Fibonacciho číslo pro tento index. Počet hodnot vypsanych do souboru uživatel zvolí interaktivně po spuštění skriptu **(15 bodů)**. Ověřte, že uživatel zadal celé číslo větší než 2 **(5 bodů)**. Průběh posloupnosti dále zobrazte ve formě grafu s řádně popsanými osami vykresleného do souboru „fibonacci.png“ **(10 bodů)**.