

Jméno:	Test I:	Test II:	Test III:	Finální test:
Datum: 17. 12. 2021	Absence:	Algoritmus:	Skript:	Celkem:

Data k úkolům jsou v adresáři: /home/kulhanek/Documents/C2110/Tests/Final/2021/WeekA

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

Zadání A

Soubor obsahuje výsledek molekulárně dynamické simulace v explicitním solventu při teplotě 300 K a tlaku 100 kPa. Ze souboru vyextrahujte průběh vazebných energií pro vazby (BOND), úhly (ANGLE), a dihedrální úhly (DIHED) na čase (TIME(PS)) až po část „A V E R A G E S O V E R“ a zobrazte jej ve formě grafu (10 bodů). Energie jsou v kcal/mol. Graf bude mít popsané osy včetně jednotek (5 bodů). Jméno analyzovaného souboru se předloží jako první argument skriptu, který provede analýzu a zobrazí graf ve formě obrázku ve formátu png. Název vytvářeného obrázku se zadá jako druhý argument analyzačního skriptu (10 bodů). Ošetření chybného vstupu (5 bodů): analyzovaný soubor z MD simulace musí existovat, výsledek (obrázek v png formátu) nesmí existovat. Soubor pro testování: prod010.out

Zadání B

Vykreslete obdélník se šířkou $2N$ a výškou N na obrazovku a do souboru (10 bodů). Levá polovina bude vykreslena pomocí znaků „L“ a pravá pomocí „P“ (10 bodů). Rozměr N a název souboru, do kterého se bude obrazec vykreslovat, zadá uživatel interaktivně po spuštění skriptu (5 bodů). Skript ošetří chybový vstup: N musí být větší než dva a zadaný soubor nesmí existovat (5 bodů).

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 (10 bodů). V prvním sloupci bude hodnota indexu a v druhém Fibonacciho číslo pro tento index. Počet hodnot vypsaných do souboru uživatel zvolí interaktivně po spuštění skriptu (5 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).