

C2110 *Operační systém UNIX a základy programování*

12. lekce

Petr Kulhánek, Jakub Štěpán

kulhanek@chemi.muni.cz

Národní centrum pro výzkum biomolekul, Přírodovědecká fakulta
Masarykova univerzita, Kotlářská 2, CZ-61137 Brno

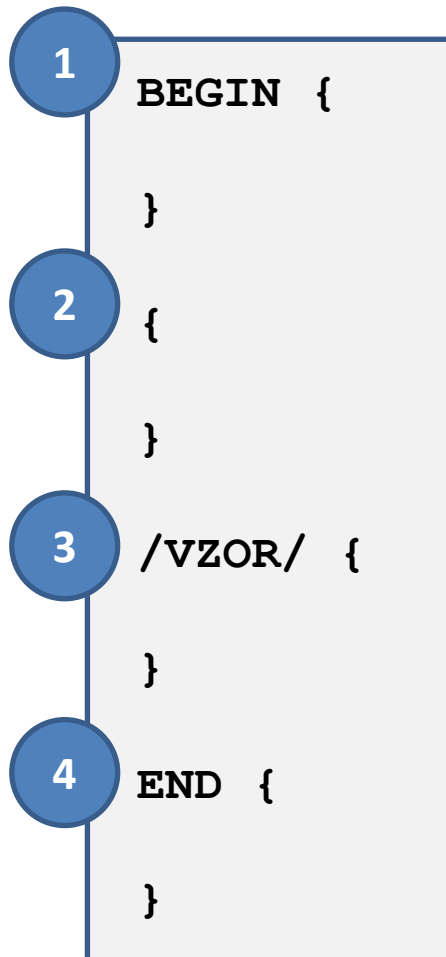


INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

➤ **AWK**

- **Analýza textových souborů**
- **Regulární výrazy**
- **Pole**

Průběh vykonávání skriptu



- Blok BEGIN (1) se vykoná (pokud je ve skriptu obsažen) před analýzou souboru.
 - Načte se záznam ze souboru. Ve výchozím nastavení je záznamem celý řádek analyzovaného souboru nebo proudu. Záznam se rozdělí na pole. Ve výchozím nastavení jsou pole jednotlivá slova v záznamu.
 - Pro daný záznam se vykoná blok (2).
 - Pokud záznamu vyhovuje VZOR, vykoná se blok (3).
 - vykonají se případně další bloky
- Blok END (4) se vykoná (pokud je ve skriptu obsažen) po analýze celého souboru.

Blok je uzavřen do složených závorek {}.

Výše uvedené programové bloky jsou volitelné.

Ve výchozím nastavení je záznamem řádek souboru.

Regulární výrazy

```
/VZOR/ {  
  
}
```

Pokud záznamu vyhovuje VZOR, tak se blok vykoná.

Vzor je **regulární výraz**.

Regulární výraz je jazyk, který popisuje strukturu textového řetězce. Jazyk se využívá k vyhledávání textových řetězců, k nahrazování části řetězců.

Příklady jednoduchých regulárních výrazů:

- TEXT** - je splněno, pokud je v daném záznamu obsažen TEXT (může být kdekoliv)
- ^TEXT** - je splněno, pokud je v daném záznamu obsažen TEXT na začátku
- TEXT\$** - je splněno, pokud je v daném záznamu obsažen TEXT na konci

1. Ze souboru **rst.out** vyextrahujte průběh teploty na čase. Průběh zobrazte v **gnuplotu**.

```
NSTEP =      1000    TIME(PS) =      1.000    TEMP(K) =    305.69    PRESS =      0.0
  Etot   =      907.8481    EKtot   =      160.3711    EPtot   =      747.4770
  BOND   =      40.6154    ANGLE  =      273.9238    DIHED   =      164.5827
  1-4 NB =      14.6900    1-4 EEL =      973.2602    VDWAALS =      -67.6091
  EELEC  =     -488.9232    EGB    =     -163.0629    RESTRAINT =      0.3793
  EAMBER (non-restraint) =      747.0977
```

2. Ze souboru **rst.out** vyextrahujte průběh celkové energie (**Etot**), kinetické energie (**EKtot**) a potenciální energie (**EPtot**) na čase. Průběh jednotlivých energií zobrazte v **gnuplotu**. Ověřte, že součet potenciální a kinetické energie se rovná celkové energii.

Pole

AWK používá asociativní pole. Pole má název, k prvkům pole se přistupuje pomocí klíče. Klíč může mít libovolnou hodnotu a typ. Klíčem může být hodnota proměnné.

Přiřazení hodnoty:

```
moje_pole[klic] = hodnota;
```

Získání hodnoty:

```
hodnota = moje_pole[klic];
```

Příklady:

```
i = 5;  
moje_pole[i] = 15;  
print moje_pole[i];
```

```
a = "slovo";  
moje_pole[a] = "hodnota";  
print moje_pole["slovo"], moje_pole[5];
```

Pole, ...

Procházení seznamu klíčů:

```
for( promenna in pole) {  
    print pole[promenna];  
    ...  
}
```

Vykoná tělo cyklu pro každý klíč, který byl použit pro uložení hodnoty do **pole**. Hodnota klíče je uložena do **proměnné**.

Mazání záznamů s klíčem:

```
delete pole[klic];
```

Cvičení

1. Ze souboru **rst.out** vyextrahujte **průběh teploty v čase**. Výsledný soubor nebude obsahovat dvě poslední hodnoty, které jsou průměrnou hodnotou a její fluktuací. **Průběh zobrazte** v gnuplotu.
2. Ze souboru **rst.out** vyextrahujte **průběh teploty** a spočítejte její **průměrnou hodnotu**. Vypočtenou hodnotu srovnejte s průměrnou hodnotou uvedenou v souboru **rst.out**. **Proč se hodnoty liší?**