

Temel Bilişim Yazılımları HBM 801
2020-2021 Güz Dönemi
Shell Scripting Ödevi

Argüman olarak kullanıcı tarafından istenilen sayıda verilen (birden çok output için çalışabilmeli) her bir Quantum Espresso outputu için;

1. “enthalpy new” kelime öbeğinin geçtiği satırları bulan ve bu satırlarda geçen Ry biriminden olan enerji değerleri için Gnuplot ile (her bir output için ayrı ayrı) grafikleri çizdiren ve farklı isimlerle png olarak kaydeden,
2. “new unit-cell volume” kelime öbeğinin geçtiği satırları bulan ve bu satırlarda geçen a.u.^3 ve Ang^3 birimlerinde verilen volume değerlerinden Ang^3 biriminden olan hacim değerleri için Gnuplot ile (her bir output için ayrı ayrı) grafikleri çizdiren ve farklı isimlerle png olarak kaydeden,
3. Programın sonlanmadan önce verdiği (outputun son satırlarında geçen) son enerji değerlerini “Final enthalpy” ve son cell volume değerlerini “unit-cell volume” kelime öbeğinin geçtiği satırları bularak final enerji değerlerini, final cell volume değerlerini (a.u.^3 biriminden olan değeri Ang^3 birimine çevirerek) ve toplam iterasyon sayısını Quantum Espresso output isimleri ile birlikte ekrana bastırarak (enerjisi en düşükten en yükseğe sıralı olacak şekilde) rapor eden,
4. Final enerji değerleri bakımından en küçük enerji değerine sahip olan Quantum Espresso outputunu aşağıdaki örnekte verildiği şekilde ekrana bastıran;

Bir kabul betiği (shell script) yazınız.

Açıklamalar

script_ismi.sh output1.out output2.out

şeklinde iki argüman vererek scriptinizi çalıştırmanız halinde elde etmeniz gereken sonuçlar şu şekilde olmalıdır.

1. her bir output için iki adet png formatında (enerji ve volume için birer tane) kaydedilmiş grafik

2.

OUTPUT_NAME	ENERGY	ITER	VOL
output2.out	-170.5483238387 Ry	108	459.57786 Ang^3
output1.out	-170.4913689621 Ry	368	489.54107 Ang^3

3.

Lowest Energy Structure:

output2.out -170.5483238387 Ry



