

Universidad de Chile
Facultad de Ciencias
Departamento de Física

Programación y Métodos Numéricos

Tarea Nº 4
Publicada el 22 de Agosto de 2008
Nueva versión 2

Profesor: José Rogan
Ayudantes: Carola Cerda
Manuel Ramírez
Tabatha Rodríguez
Alejandro Varas

1. Una salida típica del comando `ls -l` es la siguiente:

```
drwxr-xr-x 2 bill bill    4096 2008-07-19 10:58 fotos
-rw-r--r-- 1 bill bill    42781 2008-06-06 19:27 verlet.cc
-rwxrwxrwx 1 bill bill    44881 2008-08-31 19:27 verlet.py
lrwx----- 1 bill bill    35172 2008-07-28 19:44 mitarea -> /home/bill/tarea_linus.pdf
```

Escriba un *script* que reemplace la acción del comando `ls -l`, desplegando la información anterior de la siguiente manera:

```
Directorio 755 fotos
Archivo 644 verlet.cc
Archivo 777 verlet.py
Link 700 mitarea -> /home/bill/tarea_linus.pdf
```

Comente en el script lo que realiza cada línea del mismo.

2. Un archivo de datos llamado `datos.ini` tiene la forma:

```
#Archivo de datos
distancia 1.1
```

El programa `energia.bin` lee este archivo de datos al ejecutarse. Cuando corremos el programa con el comando `energia.bin < datos.ini` escribe en la pantalla la siguiente salida:

```
#Parameters file : gm2.ini
SPECIES pure
SYMBOL Pd
NUMBER_OF_PARTICLES      2
CONF_IN_BANK      1
HOW_2_GENERATE ONLY_FILES
POTENTIAL      Finnis-Sinclair
FILE_MULTI_XYZ prueba.xyz
GM      EVALUATE
```

2

```
Configuracion 000 E= 2.93998082e+01 [eV] F= 6.64763359e+01 [eV/A] M= 0.0000 [muB]
Pd -0.55000 0.0000 0.0000
Pd 0.55000 0.0000 0.0000
```

Escriba un *script* que ejecute el programa `energia.bin` para diferentes valores de la distancia en el intervalo $[1, 3]$, y con una modificación en el valor de la distancia de 0.1. Además, el *script* deberá filtrar la salida, de tal manera que se genere un archivo `datos_grafico.dat` el cual contendrá dos columnas: la primera columna donde estará la distancia entre las partículas, y la otra la energía del sistema. Esta salida será utilizada posteriormente en un gráfico de energía versus distancia. Por tanto, el archivo debe poseer el siguiente formato

```
#distancia Energia
1.0          35.00
1.1          29.39980
.
.
.
3.0          -0.005
```

Escriba sus respuestas en formato ASCII, en archivos `txt`.
ENTREGA EL 1 DE SEPTIEMBRE DEL 2008, ANTES DE LAS 12:00 P.M.