

计算物理 作业一

Exercise 1.1. Unix file system:

提示:

cd [目标目录的路径名] 进入目标目录

pwd 显示当前目录的绝对路径

mkdir 创建目录

ls 显示目录下的文件及文件夹

cp 复制文件

find -name 查找文件

grep 查找文件中特定的样式

rm 删除文件

mv 把原文件名改成新文件名

man 显示指令的功能及语法格式

1. 创建一个 exercise 文件夹
2. 查看自己所在的绝对路径
3. 查看当前目录下所包含的文件及文件夹
4. 进入 exercise 目录, 查看当前绝对路径, 返回主目录
5. 把文件从主目录下拷到 exercise 目录下, 查看 exercise 目录下的文件及目录, 返回主目录
6. 查找某一文件, 然后查找此文件中的一个词语, 并看其输出形式
7. 进入 exercise 目录下, 删除某些文件, 并改变某些文件的文件名, 然后返回主目录
8. 查看使用过的指令的用法以及语法格式
9. 最后自己通过查看指令用法并根据需求来使用每一指令

Exercise 1.2. vi editor

提示:

vi 打开文本文件, 或新建文本文件

按 I 键由命令模式进入文本输入模式, 进行文本输入。

按 Esc 键退出文本输入模式进入命令模式

进入命令模式下, : w 保存文件, : q 退出不保存后面加 “!” “强制退出, : x 或: wq 退出并保存。

x 键 删除光标所在位置的字符

dd 删除光标所在行

u 撤销最近一次的修改

r 替换光标位置的字符

新建一个文本文件文件名为自己的名字的拼音, 把自己的学生信息输入此文件。按照上面的提示进行操作, 直到熟练, 并复习上次 Unix 的各个基本操作。

Exercise 1.3. Unix 下数据处理练习

cut:

cut 一般格式为:

```
cut [options] file1 file2
```

下面介绍其可用选项:

-c list 指定剪切字符数。

-f field 指定剪切域数。

-d 指定与空格和 **tab** 键不同的域分隔符。

-c 用来指定剪切范围, 如下所示:

-c1,5-7 剪切第 1 个字符, 然后是第 5 到第 7 个字符。

-c1-50 剪切前 50 个字符。

-f 格式与 **-c** 相同。

-f1,5 剪切第 1 域, 第 5 域。

-f1,10-12 剪切第 1 域, 第 10 域到第 12 域。

`cut -f n inputfile` 表示把第 **n** 个**字符段**剪切出来并显示

`cut -f n,m inputfile` 表示把第 **n** 个和第 **m** 个字符段剪切并显示

`cut -f n-m inputfile` 表示把第 **n** 个到第 **m** 个字符段剪切并显示

`cut -f 1,n-m inputfile` 表示把第 1 个和第 **n** 个到第 **m** 个字符段剪切并显示

`cut -c n-m inputfile` 表示把第 **n** 个到第 **m** 个**字符**剪切出来并显示

同样的练习 **-c** 的用法。

paste:

用 **paste** 可以将一些数据粘贴起来形成相关文件。粘贴两个不同来源的数据时, 首先需将其分类, 并确保两个文件行数相同。**paste** 将按行将不同文件行信息放在一行。缺省情况下, **paste** 连接时, 用空格或 **tab** 键分隔新行中不同文本, 除非指定 **-d** 选项, 它将成为域分隔符。

paste 格式为:

```
paste -d -s -file1 file2
```

选项含义如下:

-d 指定不同于空格或 tab 键的域分隔符。例如用@分隔域，使用-d @。

-s 将每个文件合并成行而不是按行粘贴。

- 使用标准输入。例如，ls -l |paste 意即只在一列上显示输出。

```
paste inputfile1 inputfile2
```

```
paste -d: inputfile1 inputfile2
```

```
paste -s inputfile1 inputfile2
```

```
ls -l |paste
```

sed:

```
sed '操作的内容' 文件名
```

使用模式和行号进行查询:

查找文件中的相应行号的文本 `sed -n '行号 p' 文件名`

查找文件中的包含相应文本行的文本 `sed -n '/文本/' 文件名`

在选定的行的最前面插入目标文本 `sed '/文本/i\目标文本' 文件名`

在选定的行最后面附加目标文本 `sed '/文本/a\目标文本' 文件名`

对选定的行进行修改成目标文本 `sed '/文本/c\目标文本' 文件名`

删除所选的行 `sed '/文本/d' 文件名`

把所选的文本改成目标文本 `sed 's/文本/目标文本/' 文件名`

附: 其中/文本/是用来确定所要修改内容所在的行, 可以直接用行号来代替。

替换文本一项中/文本/确是直接所要修改的内容而非修改行, 如果要全文件对某一文本进行修改则用 : `sed 's/文本/目标文本/g' 文件名`

awk:

使用 `awk` 的第一个理由是基于文本的样式扫描和处理是我们经常做的工作，`awk` 所做的工作有些象数据库，但与数据库不同的是，它处理的是文本文件，这些文件没有专门的存储格式，普通的人们就能编辑、阅读、理解和处理它们。而数据库文件往往具有特殊的存储格式，这使得必须用数据库处理程序来处理它们。

`awk` 提供两种变量，一种是 `awk` 内置的变量，这前面我们已经讲过，需要着重指出的是，与后面提到的其它变量不同的是，在 `awk` 程序中引用内置变量不需要使用标志符"\$"（回忆一下前面讲过的 `NR` 的使用）。`awk` 提供的另一种变量是自定义变量。`awk` 允许用户在 `awk` 程序语句中定义并调用自己的变量。当然这种变量不能与内置变量及其它 `awk` 保留字相同，在 `awk` 中引用自定义变量必须在它前面加上标志符"\$"。与 C 语言不同的是，`awk` 中不需要对变量进行初始化，`awk` 根据其在 `awk` 中第一次出现的形式和上下文确定其具体的数据类型。当变量类型不确定时，`awk` 默认其为字符串类型。这里有一个技巧：如果你要让你的 `awk` 程序知道你所使用的变量的明确类型，你应当在在程序中给它赋初值。

`awk` 中内置变量及其含义：

`FILENAME` 当前输入文件的名字

`FS` 输入字段分隔符 空格

`NF` 当前记录中的字段个数

`NR` 已经读出的记录数

`OFMT` 数字的输出格式 `%.6g`

`OFS` 输出字段分隔符 空格

`ORS` 输出的记录分隔符 换行

`RS` 输入的记录他隔符 换行

与其它 UNIX 命令一样，`awk` 拥有自己的语法：

```
awk [-F re] [parameter...] ['prog'] [-f progfile][in_file...]
```

参数说明:

-F re: 允许 `awk` 更改其字段分隔符。

parameter: 该参数帮助为不同的变量赋值。

'prog': `awk` 的程序语句段。这个语句段必须用单括号: '和'括起, 以防被 `shell` 解释。这个程序语句段的标准形式为:

```
'pattern {action}'
```

`()`, `{}`, `“”`, `“”` 这四个符号的用处要弄明白。

其中 `pattern` 参数可以是 `egrep` 正则表达式中的任何一个, 它可以使用语法 `/re/` 再加上一些样式匹配技巧构成。与 `sed` 类似, 你也可以使用 `“,”` 分开两样式以选择某个范围。关于匹配的细, 你可以参考附录, 如果仍不懂的话, 找本 `UNIX` 书学学 `grep` 和 `sed`。 `action` 参数总是被大括号包围, 它由一系统 `awk` 语句组成, 各语句之间用 `“;”` 分隔。 `awk` 解释它们, 并在 `pattern` 给定的样式匹配的记录上执行其操作。与 `shell` 类似, 你也可以使用 `“#”` 作为注释符, 它使 `“#”` 到行尾的内容成为注释, 在解释执行时, 它们将被忽略。你可以省略 `pattern` 和 `action` 之一, 但不能两者同时省略, 当省略 `pattern` 时没有样式匹配, 表示对所有行 (记录) 均执行操作, 省略 `action` 时执行缺省的操作——在标准输出上显示。

-f progfile: 允许 `awk` 调用并执行 `progfile` 指定有程序文件。 `progfile` 是一个文本文件, 他必须符合 `awk` 的语法。

in_file: `awk` 的输入文件, `awk` 允许对多个输入文件进行处理。值得注意的是 `awk` 不修改输入文件。如果未指定输入文件, `awk` 将接受标准输入, 并将结果显示在标准输出上。 `awk` 支持输入输出重定向。

我们用下面的文本文件来练习上面的 `cut`, `paste`, `sed` 三个命令, 以达到认识其功能的目的, 把文件一改写成文件二。

第一列表示每一行都是一个原子,

第二列原子的序号

第三列原子在特定的力场数据库下的记号

第四列原子所在的氨基酸的简称

第五列原子所在氨基酸的序号

第六至八时原子的 x, y, z 坐标

第九至十列是其它信息

第十一列表示原子名称

文件一:

ATOM	1	N	PHE	2	1.378	-1.795	-1.043	1.00	0.00	N
ATOM	2	CA	PHE	2	1.893	-0.429	-1.043	1.00	0.00	C
ATOM	3	C	PHE	2	3.403	-0.419	-1.043	1.00	0.00	C
ATOM	4	O	PHE	2	4.076	-1.172	-0.286	1.00	0.00	O
ATOM	5	CB	PHE	2	1.385	0.334	0.218	1.00	0.00	C
ATOM	6	CG	PHE	2	-0.139	0.429	0.393	1.00	0.00	C
ATOM	7	CD1	PHE	2	-0.821	-0.586	1.074	1.00	0.00	C
ATOM	8	CD2	PHE	2	-0.860	1.483	-0.173	1.00	0.00	C
ATOM	9	CE1	PHE	2	-2.208	-0.556	1.171	1.00	0.00	C
ATOM	10	CE2	PHE	2	-2.248	1.518	-0.066	1.00	0.00	C
ATOM	11	CZ	PHE	2	-2.921	0.497	0.603	1.00	0.00	C
ATOM	12	HA	PHE	2	1.547	0.085	-1.960	1.00	0.00	H
ATOM	13	HB2	PHE	2	1.801	1.361	0.219	1.00	0.00	H
ATOM	14	HB1	PHE	2	1.822	-0.122	1.130	1.00	0.00	H
ATOM	15	HD1	PHE	2	-0.276	-1.423	1.490	1.00	0.00	H
ATOM	16	2HD	PHE	2	-0.346	2.267	-0.712	1.00	0.00	H
ATOM	17	HE1	PHE	2	-2.727	-1.360	1.672	1.00	0.00	H
ATOM	18	HE2	PHE	2	-2.802	2.331	-0.512	1.00	0.00	H
ATOM	19	HZ	PHE	2	-3.998	0.515	0.675	1.00	0.00	H
ATOM	20	H	PHE	2	1.259	-2.110	-0.091	1.00	0.00	H
ATOM	21	H	PHE	2	2.030	-2.401	-1.521	1.00	0.00	H
ATOM	22	N	PHE	3	4.111	0.495	-1.952	1.00	0.00	N
ATOM	23	CA	PHE	3	5.536	0.277	-1.725	1.00	0.00	C
ATOM	24	C	PHE	3	6.291	1.585	-1.720	1.00	0.00	C
ATOM	25	O	PHE	3	5.709	2.692	-1.895	1.00	0.00	O
ATOM	26	CB	PHE	3	6.122	-0.638	-2.843	1.00	0.00	C
ATOM	27	CG	PHE	3	5.476	-2.023	-3.002	1.00	0.00	C
ATOM	28	CD1	PHE	3	4.368	-2.176	-3.844	1.00	0.00	C
ATOM	29	CD2	PHE	3	5.941	-3.119	-2.271	1.00	0.00	C

ATOM	30	CE1	PHE	3	3.722	-3.404	-3.937	1.00	0.00	C
ATOM	31	CE2	PHE	3	5.301	-4.351	-2.373	1.00	0.00	C
ATOM	32	CZ	PHE	3	4.190	-4.492	-3.204	1.00	0.00	C
ATOM	33	HA	PHE	3	5.673	-0.201	-0.736	1.00	0.00	H
ATOM	34	HB2	PHE	3	7.208	-0.777	-2.672	1.00	0.00	H
ATOM	35	HB1	PHE	3	6.080	-0.109	-3.817	1.00	0.00	H
ATOM	36	HD1	PHE	3	3.980	-1.328	-4.392	1.00	0.00	H
ATOM	37	HD2	PHE	3	6.789	-3.011	-1.608	1.00	0.00	H
ATOM	38	HE1	PHE	3	2.850	-3.504	-4.566	1.00	0.00	H
ATOM	39	HE2	PHE	3	5.659	-5.193	-1.800	1.00	0.00	H
ATOM	40	HZ	PHE	3	3.684	-5.443	-3.274	1.00	0.00	H
ATOM	41	H	PHE	3	3.694	1.144	-2.604	1.00	0.00	H

END

文件二:

PHE1	1	N	2.378	0.205	1.957
The fisrt residue					
PHE1	2	C	2.893	1.571	1.957
The fisrt residue					
PHE1	3	C	4.403	1.581	1.957
The fisrt residue					
PHE1	4	O	5.076	0.828	2.714
The fisrt residue					
PHE1	5	CB	2.385	2.334	3.218
The fisrt residue					
PHE1	6	CG	0.861	2.429	3.393
The fisrt residue					
PHE1	7	CD	0.179	1.414	4.074
The fisrt residue					
PHE1	8	CD	0.14	3.483	2.827
The fisrt residue					
PHE1	9	CE	-1.208	1.444	4.171
The fisrt residue					
PHE1	10	CE	-1.248	3.518	2.934
The fisrt residue					
PHE1	11	CZ	-1.921	2.497	3.603
The fisrt residue					
PHE1	12	HA	2.547	2.085	1.04
The fisrt residue					
PHE1	13	HB2	2.801	3.361	3.219
The fisrt residue					
PHE1	14	HB1	2.822	1.878	4.13
The fisrt residue					

PHE1	15	HD1	0.724	0.577	4.49
The first residue					
PHE1	16	HD	0.654	4.267	2.288
The first residue					
PHE1	17	HE1	-1.727	0.64	4.672
The first residue					
PHE1	18	HE2	-1.802	4.331	2.488
The first residue					
PHE1	19	HZ	-2.998	2.515	3.675
The first residue					
PHE1	20	H	2.259	-0.11	2.909
The first residue					
PHE1	21	H	3.03	-0.401	1.479
The first residue					
PHE2	22	N	5.111	2.495	1.048
The second residue					
PHE2	23	CA	6.536	2.277	1.275
The second residue					
PHE2	24	C	7.291	3.585	1.28
The second residue					
PHE2	25	O	6.709	4.692	1.105
The second residue					
PHE2	26	CB	7.122	1.362	0.157
The second residue					
PHE2	27	CG	6.476	-0.023	-0.002
The second residue					
PHE2	28	CD	5.368	-0.176	-0.844
The second residue					
PHE2	29	CD	6.941	-1.119	0.729
The second residue					
PHE2	30	CE	4.722	-1.404	-0.937
The second residue					
PHE2	31	CE	6.301	-2.351	0.627
The second residue					
PHE2	32	CZ	5.19	-2.492	-0.204
The second residue					
PHE2	33	HA	6.673	1.799	2.264
The second residue					
PHE2	34	HB2	8.208	1.223	0.328
The second residue					
PHE2	35	HB1	7.08	1.891	-0.817
The second residue					
PHE2	36	HD1	4.98	0.672	-1.392
The second residue					

```

PHE2  37  HD2  7.789  -1.011  1.392
The second residue
PHE2  38  HE1  3.85  -1.504  -1.566
The second residue
PHE2  39  HE2  6.659  -3.193  1.2
The second residue
PHE2  40  HZ  4.684  -3.443  -0.274
The second residue
PHE2  41  H  4.694  3.144  0.396
The second residue

```

利用上面给的文件进行练习：

`awk -F % 'NR==7,NR==15 {printf $1 $3 $7}'` 显示文本文件 `myfile` 中第七行到第十五行中以字符%分隔的第一字段，第三字段和第七字段：

`awk '/101/' file` 显示文件 `file` 中包含 101 的匹配行。

`awk '{print NR,NF,$1,$NF,}' file` 显示文件 `file` 的当前记录号、域数和每一行的第一个和最后一个域

`awk -F "|" '{print $1}' file` 按照新的分隔符“|”进行操作

`awk 'length($0)>80 {print NR}' myfile` 显示文本 `myfile` 中所有超过 80 个字符的行号，在这里，用 `$0` 表示整个记录（行），同时，内置变量 `NR` 不使用标志符 `$`

`awk 'BEGIN { max=100 ;print "max=" max}'` `BEGIN` 表示在处理任意行之前进行的操作

`awk 'END {print $1}'` `END` 之后列出的操作将在扫描完全部的输入之后执行

`awk '{print length($1)}' inputfile` 调用内置函数 `length()`

`awk 'BEGIN {total=0} {print $2 ;total=total+$2} END{print total} inputfile` 编一小程序对文件的第二列进行统计求和

Exercise 1.4. 本征问题求解编程

用 C/C++ 或者 FORTRAN 语言编程实现 Jacobi 方法求解复数对称矩阵的本征值和本征矢量。