

Linux相关操作介绍

贾向正
武汉大学土木建筑工程学院

1. 操作系统下载
2. 常用命令总结
3. Tab键补全
4. 文字编辑器 vi操作
5. 集群登录及相关操作
6. expect命令快速登陆集群
7. LAMMPS本地安装使用
8. Fortran程序的使用
9. Shell脚本的使用

操作系统下载

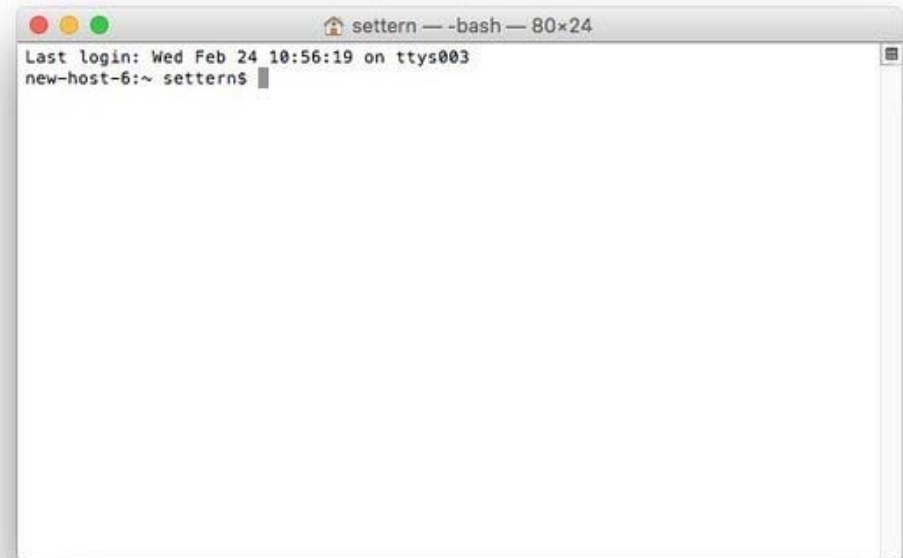
Win10操作系统:

打开Microsoft Store，搜索ubuntu并下载安装



Mac操作系统:

使用Terminal终端即可进行操作



第一次使用时需要设置账户名和密码，密码一定要记清楚。

右键点击ubuntu界面上方白色区域，选择“属性”后可以设置自己的偏好。



常用命令总结:

Command	用途	用法
cd	进入文件夹	cd /mnt/d (进入d盘); cd .. (返回到上一目录)
ls	列出文件夹中内容	直接输入ls, 或参考ls -help
pwd	列出目前所在路径	直接输入pwd
mkdir	创建文件夹	mkdir test (创建名为test的文件夹)
touch	创建文件	mkdir test (创建名为test的文件)
rm	删除文件或文件夹	rm -rf test (删除名为test的文件/文件夹)
cp	复制文件或文件夹	cp test1 test2 (将文件test1复制为文件test2) 加 -r 后对文件夹进行复制操作
mv	移动文件或文件夹、重命名	mv test1 test2 (将test1更名为test2) mv test1 aaa (将test1移动到文件夹aaa中, 需要此路径下先有aaa文件夹)



Tab键补全

输入命令时，按tab键可以进行预览或补全，例如：

输入cd /mnt/ 后不要按Enter，而是按两次tab键，可以观察到如下现象：

```
jxz@LAPTOP-8DOUNKCD:/mnt/d/jxz/data/03_fold_graphene_9.6$ cd /mnt/  
c/ d/ e/ f/ g/
```

即看到mnt文件夹下的所有内容。

使用cp/cd等命令对文件(夹)进行操作时，可以输入文件(夹)名字的前几个字母后按tab键进行补全

```
jxz@LAPTOP-8DOUNKCD:/mnt/d/jxz/data$ ls  
00_gra_ten 03_fold_graphene_9.6 07_stretchable 10_webscrapen  
01_assembly 05_MGI 08_crosslink 11-nanopillar  
02_dy_nano 06_anisotropic 09_SiNC_impact 2019年微纳米力学热点回眸.pdf
```

如上图，如果要进入到05_MGI文件夹中，只需输入 cd 03后按tab补全即可。

文字编辑器 vi操作

`vi file` (文件存在时打开文件进行编辑，文件不存在则创建文件并进行编辑)

`vi -o file1 file2` 同时打开file1和file2文件，此时可以按`ctrl+w`在两个文件内变动光标。

vi打开文件后，默认处于一般模式，可以使用特定命令进行删除(`dd`)、复制(`y`)、粘贴(`p`)操作等；

插入模式：按`i`或`a`进入(左下角显示--INSERT--)，此时可以进行文字编辑，按`esc`退出此模式；

在一般模式情况下，输入`:q!`退出该文件编辑并不保存；输入`:wq!`退出该文件编辑并保存。

*注意linux操作系统中鼠标不能改变光标位置

`shift+g`跳到文件最后一行；输入`:0`跳到文件开头；输入`yy`可复制光标所在行，然后按`p`可以将其粘贴在下一行；`100dd`表示删除100行；`ctrl+v`进入可视模式，可以对选中区域进行操作；`/test`搜索文件中包含`test`字段的的部分，可以按`n`跳到下一个，按`N`跳到上一个。

详情可参考<https://www.runoob.com/linux/linux-vim.html>

集群登录及相关操作

下载校内vpn (easyconnect)并登陆后，输入ssh+地址可登陆集群 (详细地址询问办公室其他同学)

集群中一般命令与前面相同，其他常用命令：

Command	用途	用法
sbatch	提交任务	sbatch job
sq	查看任务队列	直接输入sq
qstat	查看任务核数等详细情况	直接输入qstat
ent	快速转到任务所在目录	ent jobID
scancel	取消任务	scancel jobID

scp -r 地址+文件所在路径 ./ :将集群上的文件下载到当前所在文件夹

scp -r file1 地址+文件夹所在路径 :将文件上传到集群特定文件夹内

例： scp -r xxx@xxx.xxx.xxx.xxx:/home/file1/file2 ./

expect命令快速登陆集群

参考网址: https://blog.csdn.net/yabingshi_tech/article/details/75228248

1. 安装expect (可直接用sudo apt-get install expect* 命令 或在网上下载安装包)

将expect和tcl的软件包下载放到/usr/local/src目录下

(1) 解压tcl, 进入tcl解压目录, 然后进入unix目录进行编译安装

```
[root@xw4 src]# tar -zvxf tcl8.4.11-src.tar.gz
```

```
[root@xw4 src]# cd tcl8.4.11/unix
```

```
sed -i "s/reliid'/reliid'" configure
```

```
[root@xw4 unix]# ./configure
```

```
[root@xw4 unix]# make && make install
```

(2) 安装expect

```
[root@xw4 src]# tar -zvxf expect-5.43.0.tar.gz
```

```
[root@xw4 src]# cd expect-5.43.0
```

```
[root@xw4 expect-5.43.0]# ./configure --with-tclinclude=/usr/local/src/tcl8.4.11/generic --with-tclconfig=/usr/local/lib/
```

```
[root@xw4 expect-5.43.0]# make && make install
```

2. 在/usr/bin目录下touch whu, 将bash程序内容复制于此

```
#!/usr/bin/expect
```

```
set timeout 15
```

```
spawn ssh xxx@xxx.xxx.xx.xxx
```

```
expect "*password:"
```

```
send "xxxxxxxx\r"
```

```
expect "]"
```

```
send "source /home/elgao/.bashrc\r"
```

```
send "module load intel\r"
```

```
send "cd /home/elgao/project\r"
```

```
interact
```

3. 执行命令 chmod +x whu

上述操作完成后, 以后可以在连接校内vpn的前提下输入whu直接连接学校集群。

LAMMPS本地安装使用

解压LAMMPS安装包： `tar -xvf xxx.tar.gz`

运行命令： `bash lmp_install_gel.sh` (bash脚本询问贾向正)

进入lammeps文件夹中的src文件夹，并依次输入：

```
make mpi -j8
```

```
sudo cp lmp_mpi /usr/local/bin
```

```
make mpi
```

至此安装完成，进行测试：

```
Total # of neighbors = 14364
Ave neighs/atom = 8.33179
Neighbor list builds = 714
Dangerous builds = 0
Total wall time: 0:00:04
jxz@LAPTOP-8DOUNKCD:/mnt/d/software/lammps-7Aug19/examples/friction$ lmp_mpi <in.friction
```

安装过程中可能遇到的问题:

关于E: Unable to correct problems, you have held broken packages.的错误解决方法: 因为某些软件包冲突导致, 幸运的话`sudo apt-get update && sudo apt-get upgrade`可以解决, 若没有解决, 则运行下列命令:

```
$sudo apt-get install aptitude
$aptitude why-not gcc*      (以gcc*为例)
$dpkg -l | grep gcc*
$sudo dpkg --purge --force-all gcc*
$sudo apt-get -f install
$sudo apt-get install gcc*-dev
```

其他问题可以使用到网上搜索解决办法尝试解决。

Fortran程序的使用

安装LAMMPS的过程中已经安装了fortran，可以直接使用，使用方法：

创建名为test.f90的文件(注意文件后缀一定要是.f90)；

对文件进行相应的修改，完成后保存并退出；

运行命令： gfortran test.f90 (或gfortran -o main test.f90)

运行命令： ./a.out (./main)

示例：

```
jxz@LAPTOP-8DOUNKCD:/mnt/d/jxz/424/freshman$ cat test.f90
program main
implicit none
write(*,*)'Hello world'
end program main
jxz@LAPTOP-8DOUNKCD:/mnt/d/jxz/424/freshman$ gfortran test.f90
jxz@LAPTOP-8DOUNKCD:/mnt/d/jxz/424/freshman$ ./a.out
Hello world
jxz@LAPTOP-8DOUNKCD:/mnt/d/jxz/424/freshman$
```

cat 命令查看文件内容

Shell脚本的使用

shell脚本常用于处理批量重复性工作，基本使用过程如下：

创建脚本文件(后缀为.sh): `touch test.sh`;

对文件进行相应的修改，完成后保存并退出；

运行命令: `bash test.sh`

例如：创建名为1, 2, 3,, 100的100个文件夹

要实现更复杂的操作可以参考办公室中常用的一些脚本，或自行在网上搜索。

```
jxz@LAPTOP-8DOUNKCD:/mnt/d/jxz/424/freshman/test$ ls
test.sh
jxz@LAPTOP-8DOUNKCD:/mnt/d/jxz/424/freshman/test$ cat test.sh
for((i=1;i<=100;i=$((i+1)))
do mkdir $i
done
jxz@LAPTOP-8DOUNKCD:/mnt/d/jxz/424/freshman/test$ bash test.sh
jxz@LAPTOP-8DOUNKCD:/mnt/d/jxz/424/freshman/test$ ls
1 11 14 17 1 23 25 28 30 33 36 39 41 44 47 49 51 54 57 60 63 66 69 71 74 77 80 83 86 89 91 94 97 99 test.sh
10 12 15 18 21 24 27 31 34 37 40 43 46 48 50 53 56 59 62 65 68 70 73 76 79 82 85 88 90 93 96 98
```