

常用 Linux 命令简介

目录

1、ls-显示目录下内容.....	2
2、mkdir-创建目录.....	4
3、pwd-显示路径.....	6
4、vi/vim-创建/编辑文件.....	8
5、cd-进入目录.....	13
6、cp-复制文件/目录.....	16

1、ls-显示目录下内容

ls: 查看目录中的文件

情景一:

登录高性能账号后，查看文件夹（图片中为~/TEST/MS/Castep_7.0）下有哪些文件，直接输入“ls”:

```
nsfn1340_QLL@fncn03:~/TEST/MS/Castep_7.0> ls
032209.pid  32215.pid  54402      Al203.check      core          std_out.txt
32210.pid   32216.pid  Al203.bands Al203.cst_esp    mpd.hosts    test61.lsf
32211.pid   32217.pid  Al203.bib   Al203.geom       output.532460 test70.lsf
32212.pid   32218.pid  Al203.castep Al203.param      output.548179
32213.pid   32219.pid  Al203.castep_bin Al203.status.dat std_err
32214.pid   32220.pid  Al203.cell   Castepexe.log    std_err.txt
```

情景二:

查看文件夹下的隐藏文件有哪些，输入“ls -a”，注意中间有空格:

```
nsfn1340_QLL@fncn03:~/TEST/MS/Castep_7.0> ls -a
.          32214.pid  Al203.bands  Al203.param    std_err.txt
..         32215.pid  Al203.bib    Al203.status.dat std_out.txt
.shellscrip 32216.pid  Al203.castep Castepexe.log   test61.lsf
032209.pid  32217.pid  Al203.castep_bin core            test70.lsf
32210.pid   32218.pid  Al203.cell   mpd.hosts
32211.pid   32219.pid  Al203.check  output.532460
32212.pid   32220.pid  Al203.cst_esp output.548179
32213.pid   54402      Al203.geom   std_err
```

与情景一中的文件相比，多了.shellscrip 隐藏文件

```
[nsyw145_QLL@ygn24 ~]$ ls -a
.          .Xauthority  .bash_history  .bashrc
..         .abinit      .bash_logout  .bashrc-anaconda3.bak
.InstallShield .ansys      .bash_profile  .bashrc.swp
[nsyw145_QLL@ygn24 ~]$
```

可以看到隐藏的.bashrc 文件

情景三:

查看计算的结果文件是否有更新，或者查看安装的可执行文件中哪个是最新生成的，输入“ls -l”:

```
nsfn1340_QLL@fncn03:~/TEST/MS/Castep_7.0> ls -l
total 22125
-rw-r--r-- 1 nsfn1340_QLL users      8 Feb 27  2018 011444.pid
-rw-r--r-- 1 nsfn1340_QLL users      8 Feb 27  2018 11445.pid
-rw-r--r-- 1 nsfn1340_QLL users      8 Feb 27  2018 11446.pid
-rw-r--r-- 1 nsfn1340_QLL users      8 Feb 27  2018 11447.pid
-rw-r--r-- 1 nsfn1340_QLL users      8 Feb 27  2018 11448.pid
-rw-r--r-- 1 nsfn1340_QLL users      8 Feb 27  2018 11449.pid
-rw-r--r-- 1 nsfn1340_QLL users      8 Feb 27  2018 11450.pid
-rw-r--r-- 1 nsfn1340_QLL users      8 Feb 27  2018 11451.pid
-rw-r--r-- 1 nsfn1340_QLL users      8 Feb 27  2018 11452.pid
-rw-r--r-- 1 nsfn1340_QLL users      9 Feb 27  2018 11453.pid
-rw-r--r-- 1 nsfn1340_QLL users      9 Feb 27  2018 11454.pid
-rw-r--r-- 1 nsfn1340_QLL users      9 Feb 27  2018 11455.pid
-rw-r--r-- 1 nsfn1340_QLL users    4922 Feb 27  2018 Al203.bands
-rw-r--r-- 1 nsfn1340_QLL users     1706 Feb 27  2018 Al203.bib
-rw-r--r-- 1 nsfn1340_QLL users   143038 Feb 27  2018 Al203.castep
```

没有重新提交作业前，输出文件的时间

```
nsfn1340_QLL@fncn03:~/TEST/MS/Castep_7.0> ls -l
total 22008
-rw-r--r-- 1 nsfn1340_QLL users      8 Nov 12  15:56 032209.pid
-rw-r--r-- 1 nsfn1340_QLL users      8 Nov 12  15:56 32210.pid
-rw-r--r-- 1 nsfn1340_QLL users      8 Nov 12  15:56 32211.pid
-rw-r--r-- 1 nsfn1340_QLL users      8 Nov 12  15:56 32212.pid
-rw-r--r-- 1 nsfn1340_QLL users      8 Nov 12  15:56 32213.pid
-rw-r--r-- 1 nsfn1340_QLL users      8 Nov 12  15:56 32214.pid
-rw-r--r-- 1 nsfn1340_QLL users      8 Nov 12  15:56 32215.pid
-rw-r--r-- 1 nsfn1340_QLL users      8 Nov 12  15:56 32216.pid
-rw-r--r-- 1 nsfn1340_QLL users      8 Nov 12  15:56 32217.pid
-rw-r--r-- 1 nsfn1340_QLL users      9 Nov 12  15:56 32218.pid
-rw-r--r-- 1 nsfn1340_QLL users      9 Nov 12  15:56 32219.pid
-rw-r--r-- 1 nsfn1340_QLL users      9 Nov 12  15:56 32220.pid
drwxr-xr-x 2 nsfn1340_QLL users    4096 Nov 12  15:55 54402
-rw-r--r-- 1 nsfn1340_QLL users     4922 Feb 27  2018 Al203.bands
-rw-r--r-- 1 nsfn1340_QLL users     1706 Feb 27  2018 Al203.bib
-rw-r--r-- 1 nsfn1340_QLL users    18977 Nov 12  15:57 Al203.castep
```

提交任务计算后，输入文件更新的时间

2、mkdir-创建目录

mkdir: 创建目录

情景一:

登录高性能账号后，需要在 test 文件夹下创建 crack 和 dipole 文件夹来放置算例文件:

- 1、创建 crack 文件夹“`mkdir crack`”; 再创建 dipole 文件夹“`mkdir dipole`”:

```
nssc722_TEST@egg0110:~/test> ls  
nssc722_TEST@egg0110:~/test>
```

创建 crack 和 dipole 前，test 文件夹下没有任何文件

```
nssc722_TEST@egg0110:~/test> mkdir crack  
nssc722_TEST@egg0110:~/test> ls  
crack
```

创建 crack 后，test 文件夹下出现 crack

```
nssc722_TEST@egg0110:~/test> mkdir dipole  
nssc722_TEST@egg0110:~/test> ls  
crack dipole
```

创建 dipole 后，test 文件夹下有 crack 和 dipole

- 2、一次性创建 crack 和 dipole 文件夹“`mkdir crack dipole`”:

```
nssc722_TEST@egg0110:~/test> ls  
nssc722_TEST@egg0110:~/test>
```

创建 crack 和 dipole 前，test 文件夹下没有任何文件

```
nssc722_TEST@egg0110:~/test> mkdir crack dipole  
nssc722_TEST@egg0110:~/test> ls  
crack dipole
```

创建 crack 和 dipole 后，test 文件夹下出现 crack 和 dipole

情景二：

需要在 test 文件夹下创建 meam/24-50W 文件夹来放置算例文件，输入“`mkdir -p meam/24-50W`”（`-p` 或 `--parents` 若所要建立目录的上层目录目前尚未建立，则会一并建立上层目录）：

```
nssc722_TEST@egg0110:~/test> ls  
crack dipole
```

创建前

```
nssc722_TEST@egg0110:~/test> mkdir -p meam/24-50W  
nssc722_TEST@egg0110:~/test> ls  
crack dipole meam  
nssc722_TEST@egg0110:~/test>
```

创建后

3、pwd-显示路径

pwd: 显示工作路径

情景一:

在服务器中安装好一个软件以后，使用这个软件时，就需要知道这个软件的路径在哪里，进入该文件所在的文件夹后，输入“pwd”:

```
nssc722_TEST@gg0110:~/Softwares/Lammps/lammps-11Aug17/src> ls
ASPHERE          imbalance_group.cpp
BODY             imbalance_group.h
CLASS2           imbalance_neigh.cpp
COLLOID          imbalance_neigh.h
COMPRESS         imbalance_store.cpp
Package.sh       lattice.cpp
Purge.list       lattice.h
QEQ              library.cpp
REAX             library.h
REPLICA          lmp_mpi
RIGID            lmptype.h
SHOCK            lmpwindows.h
```

找到可执行文件 lmp_mpi

```
nssc722_TEST@gg0110:~/Softwares/Lammps/lammps-11Aug17/src> pwd
/home-gg/users/nssc722_TEST/Softwares/Lammps/lammps-11Aug17/src
```

可以查到 lmp_mpi 的绝对路径

情景二:

中心高性能分区有 7 个，如果忘记自己高性能账号所在的分区，还可以使用“pwd”命令来查到，“home-xx/”中 xx 就表示高性能账号所在的分区:

```
nssc722_TEST@gg0110:~> pwd
/home-gg/users/nssc722_TEST
nssc722_TEST@gg0110:~>
```

该高性能账号所在的分区为 GG 分区

```
nsfn1340_QLL@fncn03:~$ pwd  
/home-fn/users/nsfn1340_QLL  
nsfn1340_QLL@fncn03:~$
```

该高性能账号所在的分区为 FN 分区

4、vi/vim-创建/编辑文件

vi/vim: 创建文本文件，文本文件编辑器

在中心高性能计算分区中，vim 和 vi 的用法是一样的，选择任何一个即可。

情景一：

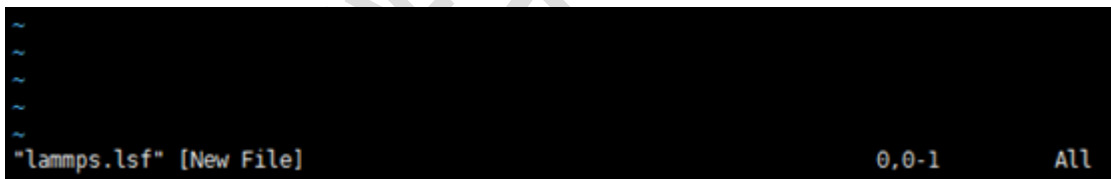
新创建一个提交作业脚本文件 lammps.lsf:

- 1、在需要使用 lammps.lsf 脚本的文件夹下，输入“**vim lammps.lsf**”:

```
nsc722_TEST@gg0110:~/test> vim lammps.lsf
```

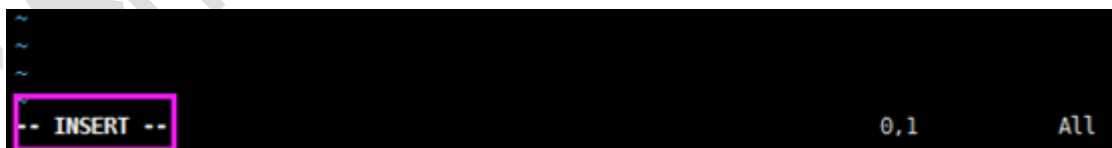
按“Enter”键前

- 2、按键盘上的“Enter”键，打开文件，文件左下角会出现文件名称和“[New File]”:



按“Enter”键后

- 3、从键盘上键入“i”，即进入编辑模式，文件左下角会出“INSERT”:



进入编辑模式后

- 4、利用键盘上的“上下左右”键可以移动光标，编辑完成后，按下键盘上的“Esc”键，退出编辑模式，“INSERT”消失:


```
#!/bin/bash
APP_NAME=intelg_mid
NP=36
NP_PER_NODE=12
RUN="RAW"

source /home-ys/env/openmpi-1.6.5-intel.sh
source /home-ys/env/intel-2016.sh

export lmp=/home-ys/users/nsys247_LDC/lammps/lammps-16Mar18/src/lmp_mpi

mpirun -np $NP lmp < in.gk.2d > output
```

进入编辑模式后

- 5、从键盘上输入“:wq”，按下键盘上的“Enter”键后即可保存：

```
#!/bin/bash
APP_NAME=intelg_mid
NP=36
NP_PER_NODE=12
RUN="RAW"

source /home-ys/env/openmpi-1.6.5-intel.sh
source /home-ys/env/intel-2016.sh

export lmp=/home-ys/users/nsys247_LDC/lammps/lammps-16Mar18/src/lmp_mpi

mpirun -np $NP lmp < in.gk.2d > output

:wq
```

选择保存

```
nsc722_TEST@gcn02:~/test> vim lammps.lsf
nsc722_TEST@gcn02:~/test>
```

按“Enter”键退出

情景二：

打开脚本文件 gromacs.lsf（名称可更换为需要操作的文件名称）：

- 5、假若不小心对文件，进行了修改，在输入“:q”，按下“Enter”键后，会出现“No write since last change (add ! to override)”的警告。假若需要保存修改则输入“:wq”；假若不需要保存修改则输入“:q!”即可。

```
#!/bin/bash
APP_NAME=intelg_mid
NP=24
NP_PER_NODE=12
RUN="RAW"
CURDIR=$PWD

gmx_mpi=/home-gg/users/nsgg018_AYJ/gromacs/gromacs-5.1.4/gromacs/bin/gmx_mpi

source /home-gg/env/intel-12.1.sh
source /home-gg/env/openmpi-1.4.4-intel.sh

export LD_LIBRARY_PATH=/home-gg/users/nsgg018_AYJ/gromacs/install/fftw/lib:$LD_LIBRARY_PATH

$gmx_mpi grompp -f user.mdp -c start.gro -p system.top -o test_em.tpr
mpirun -np $NP $gmx_mpi mdrun -v -s test_em.tpr -o test_em.trr -c test_em.gro -e test_em.edr -g test_em.log
```

1233445677

~

~

:q

对文档进行修改，按“Enter”键前

```
1233445677
~
~
~
E37: No write since last change (add ! to override) 19,10 All
```

对文档进行修改，输入“:q”，按“Enter”键无法退出

```
1233445677
~
~
~
~
~
:q!
```

对文档进行修改，输入“:q!”不保存修改部分，再“Enter”键退出

```
1233445677
~
~
~
:wq
```

对文档进行修改，输入“:wq”保存修改部分，再“Enter”键退出

5、cd-进入目录

cd: 进入目录

这里需要说明的，中心高性能计算分区的主目录（登录账号进入的目录）一般结构为：`home-xx/users/高性能账号/`，“xx”就表示高性能账号所在的分区。

```
nsc722_TEST@gcn02:~/test> pwd
/home-gg/users/nsc722_TEST
nsc722_TEST@gcn02:~/test>
```

该高性能账号的主目录路径

```
nsc722_TEST@gcn02:~/test> ls
crack dipole gromacs.lsf lammps.lsf meam
nsc722_TEST@gcn02:~/test>
```

test 目录下的几个文件夹

情景一:

在高性能账号中的某个文件夹回到主目录，输入“`cd`”或“`cd ~`”:

```
nsc722_TEST@gcn02:~/test/meam> pwd
/home-gg/users/nsc722_TEST/test/meam
nsc722_TEST@gcn02:~/test/meam> cd
nsc722_TEST@gcn02:~> pwd
/home-gg/users/nsc722_TEST
nsc722_TEST@gcn02:~>
```

使用“`cd`”命令回到主目录

```
nsc722_TEST@gcn02:~/test/crack> pwd
/home-gg/users/nsc722_TEST/test/crack
nsc722_TEST@gcn02:~/test/crack> cd ~
nsc722_TEST@gcn02:~> pwd
/home-gg/users/nsc722_TEST
nsc722_TEST@gcn02:~>
```

使用“`cd ~`”命令回到主目录

情景二:

进入当前文件夹下的上一级目录，输入“`cd ..`”，注意空格:

```
nssc722_TEST@gcn02:~/test/meam/24-50W> pwd
/home-gg/users/nssc722_TEST/test/meam/24-50W
nssc722_TEST@gcn02:~/test/meam/24-50W> cd ../
nssc722_TEST@gcn02:~/test/meam> pwd
/home-gg/users/nssc722_TEST/test/meam
nssc722_TEST@gcn02:~/test/meam>
```

进入编辑模式后

情景三:

进入当前文件夹下的上两级目录，输入“`cd ../../`”，注意空格:

```
nssc722_TEST@gcn02:~/test/meam> pwd
/home-gg/users/nssc722_TEST/test/meam
nssc722_TEST@gcn02:~/test/meam> cd ../../
nssc722_TEST@gcn02:~> pwd
/home-gg/users/nssc722_TEST
nssc722_TEST@gcn02:~>
```

进入编辑模式后

情景四:

进入当前文件夹下的已有某个文件夹（必须确定文件夹已经存在），输入“`cd 路径名称`”，注意空格:

```
nssc722_TEST@gcn02:~> pwd
/home-gg/users/nssc722_TEST
nssc722_TEST@gcn02:~> cd test/meam/
nssc722_TEST@gcn02:~/test/meam> pwd
/home-gg/users/nssc722_TEST/test/meam
nssc722_TEST@gcn02:~/test/meam> cd ..
```

直接进入

```
nssc722_TEST@gcn02:~/test/meam/24-50W> pwd
/home-gg/users/nssc722_TEST/test/meam/24-50W
nssc722_TEST@gcn02:~/test/meam/24-50W> cd ../../crack/
nssc722_TEST@gcn02:~/test/crack> pwd
/home-gg/users/nssc722_TEST/test/crack
nssc722_TEST@gcn02:~/test/crack>
```

采用相对路径进入

```
nsc722_TEST@gcn02:~/test/crack> pwd
/home-gg/users/nsc722_TEST/test/crack
nsc722_TEST@gcn02:~/test/crack> cd ~/test/dipole/
nsc722_TEST@gcn02:~/test/dipole> pwd
/home-gg/users/nsc722_TEST/test/dipole
nsc722_TEST@gcn02:~/test/dipole>
```

HOME 路径进入

```
nsc722_TEST@gcn02:~/test> cd ../123456
-bash: cd: ../123456: No such file or directory
nsc722_TEST@gcn02:~/test>
```

没有相关文件夹时，会出现“No such file or directory”的报错

6、cp-复制文件/目录

cp: 复制文件/目录

复制文件或者文件夹之前，首先确认源文件或文件夹都是存在的。

```
nsc722_TEST@gcn02:~/test/dipole> cd ..
nsc722_TEST@gcn02:~/test> ls
crack dipole gromacs.lsf lammps.lsf meam
nsc722_TEST@gcn02:~/test>
```

test 目录下的文件夹及文件

情景一:

将已有文件复制到已有文件夹中，输入“cp 文件名 文件夹路径和名称”:

```
nsc722_TEST@gcn02:~/test> ls
crack dipole gromacs.lsf lammps.lsf meam
nsc722_TEST@gcn02:~/test> cp lammps.lsf meam/24-50W/
nsc722_TEST@gcn02:~/test> cd meam/24-50W/
nsc722_TEST@gcn02:~/test/meam/24-50W> ls
in.gk.2d lammps.lsf
nsc722_TEST@gcn02:~/test/meam/24-50W>
```

情景二:

将已有文件夹下的所有文件复制到已有文件夹中，输入“cp -r 源文件路径 文件夹路径和名称”（“*”表示 24-50W 下的所有文件）:

```
nsc722_TEST@gcn02:~/test/dipole> cd ..
nsc722_TEST@gcn02:~/test> cp -r meam/24-50W/* dipole/
nsc722_TEST@gcn02:~/test> cd dipole/
nsc722_TEST@gcn02:~/test/dipole> ls
in.gk.2d lammps.lsf
nsc722_TEST@gcn02:~/test/dipole>
```