# 分子动力学命令

Prmtop---拓扑文件

Inpcrd---坐标文件

TP3：这是tleap工作空间中一个水分子的名字，我们准备在这个水分子周围加水盒子

com：工作空间中的操作对象分子

写入表头：

echo “eptot” > eptot.dat

命令中双引号内标红色的eptot为表头；蓝色的eptot.dat为提取文件后输出的文件名，

提取数据：

awk '/EPtot/ {print $9};($1=="A"&& $2=="V"){exit 0};' wat\_eq1.out >> eptot.dat

命令解释：

awk是一个处理文本文件的命令，它可可以根据单引号内所罗列的条件，把文本文件中符合条件的信息输出出来，使用时命令的结构是这样的：

awk ‘罗列一系列条件’ 文本文件的文件名 >> 符合条件的内容写入的文件名

合并数据文件：

paste -d " " time.dat etot.dat eptot.dat ektot.dat density.dat temp.dat > total.dat

命令解释：

psate 是按列合并文件的命令，它可以把制定的命令按列进行合并，使用方法如下：

psate -d “分隔符” 需要合并的文件名，用空格隔开 > 合并后的文件名

---------------------------------------------------------------------

for ((i=0;i<=180;i=i+3))

> do

> cat dihedral\_$i.dat >> sum.dat

> done

---------------------------------------------------------------------

Ls -v

Cat \*.dat > total.dat

vi ala7.pdb

**解压：**

.tar  
　　解包：tar xvf FileName.tar  
　　打包：tar cvf FileName.tar DirName  
　　（注：tar是打包，不是压缩！）

.gz  
　　解压 1：gunzip FileName.gz  
　　解压2：gzip -d FileName.gz  
　　压缩：gzip FileName  
　　.tar.gz 和 .tgz  
　　解压：tar zxvf FileName.tar.gz  
　　压缩：tar zcvf FileName.tar.gz DirName  
.bz2  
　　解压1：bzip2 -d FileName.bz2  
　　解压2：bunzip2 FileName.bz2  
　　压缩： bzip2 -z FileName  
.tar.bz2  
　　解压：tar jxvf FileName.tar.bz2        或tar --bzip xvf FileName.tar.bz2  
　　压缩：tar jcvf FileName.tar.bz2 DirName  
　　 ———————————————  
.bz  
　　解压1：bzip2 -d FileName.bz  
　　解压2：bunzip2 FileName.bz  
　　压缩：未知

.tar.bz  
　　解压：tar jxvf FileName.tar.bz  
　　压缩：未知  
.Z  
　　解压：uncompress FileName.Z  
　　压缩：compress FileName  
.tar.Z  
　　解压：tar Zxvf FileName.tar.Z  
　　压缩：tar Zcvf FileName.tar.Z DirName  
.zip  
　　解压：unzip FileName.zip  
　　压缩：zip FileName.zip DirName  
　　压缩一个目录使用 -r 参数，-r 递归。例： $ zip -r FileName.zip DirName  
.rar  
　　解压：rar x FileName.rar  
　　压缩：rar a FileName.rar DirName

.lha  
　　解压：lha -e FileName.lha  
　　压缩：lha -a FileName.lha FileName  
.rpm  
　　解包：rpm2cpio FileName.rpm | cpio -div  
.deb  
　　解包：ar p FileName.deb data.tar.gz | tar zxf -  
.tar .tgz .tar.gz .tar.Z .tar.bz .tar.bz2 .zip .cpio .rpm .deb .slp .arj .rar .ace .lha .lzh .lzx .lzs .arc .sda .sfx .lnx .zoo .cab .kar .cpt .pit .sit .sea  
　　解压：sEx x FileName.\*  
　　压缩：sEx a FileName.\* FileName

rm -r job5

top -u 2020E8004184037

ll -rt

ps

cp ../run3.tgz ./

tar -xzvf run3.tgz

paste -d " " dihedral\_0.dat dihedral\_3.dat dihedral\_6.dat dihedral\_9.dat dihedral\_12.dat dihedral\_15.dat dihedral\_18.dat dihedral\_21.dat dihedral\_24.dat dihedral\_27.dat dihedral\_30.dat dihedral\_33.dat dihedral\_36.dat dihedral\_39.dat dihedral\_42.dat dihedral\_45.dat dihedral\_48.dat dihedral\_51.dat dihedral\_54.dat dihedral\_57.dat dihedral\_60.dat dihedral\_63.dat dihedral\_66.dat dihedral\_69.dat dihedral\_72.dat dihedral\_75.dat dihedral\_78.dat dihedral\_81.dat dihedral\_84.dat dihedral\_87.dat dihedral\_87.dat dihedral\_90.dat dihedral\_93.dat dihedral\_96.dat dihedral\_99.dat dihedral\_102.dat dihedral\_105.dat dihedral\_108.dat dihedral\_111.dat dihedral\_114.dat dihedral\_117.dat dihedral\_120.dat dihedral\_123.dat dihedral\_126.dat dihedral\_129.dat dihedral\_132.dat dihedral\_135.dat dihedral\_138.dat dihedral\_141.dat dihedral\_144.dat dihedral\_147.dat dihedral\_150.dat dihedral\_153.dat dihedral\_156.dat dihedral\_159.dat dihedral\_162.dat dihedral\_162.dat dihedral\_165.dat dihedral\_168.dat dihedral\_171.dat dihedral\_174.dat

cp in13/\*.in ./

source .bashrc

nohup sh run2.sh &

ssh 2020E8004184037@124.16.75.191 -p 12306

source /etc/profile

vi run4.sh

vi cmps\_min.out

vi nohup.out

vi cmps

vi: crtl+: quit!

Crtl + C

文件读取

echo “eptot” > eptot.dat

awk '/EPtot/ {print $9};($1=="A"&& $2=="V"){exit 0};' wat\_eq1.out >> eptot.dat

awk是一个处理文本文件的命令，它可可以根据单引号内所罗列的条件，把文本文件中符合条件的信息输出出来，使用时命令的结构是这样的：

awk ‘罗列一系列条件’ 文本文件的文件名 >> 符合条件的内容写入的文件名

echo “etot” > etot.dat

awk '/Etot/ {print $3};($1=="A"&& $2=="V"){exit 0};' wat\_eq1.out >> etot.dat

echo “ektot” > ektot.dat

awk '/EKtot/ {print $6};($1=="A"&& $2=="V"){exit 0};' wat\_eq1.out >> ektot.dat

vi wat\_eq1.out