### 2021.08.09-2021.08.13

1. 安装git/sourcetree:sourcetree只支持Mac/Windows，之后需要同步到云端；
2. 熟悉Linux命令；
3. Centos系统崩溃，未解决；
4. 整理计算机初步知识：gcc/ide

下周安排：

1. 再细读文献和贺巧鑫师姐、刘健师兄论文；刘健师兄的工作总结太厉害了！
2. 根据贺巧鑫师姐工作总结进行代码熟悉；
3. 开始学习C++标准库；

## Centos系统崩溃

解决方案一：❌

ctrl+alt+F2 用root登录：su

sudo yum history package-list gjs

sudo yum history package-list gnome-shell

sudo yum update --skip-broken

安装过程全程Y

sudo shutdown -r now

解决方案二：存在问题：无法在进入系统前联网更新系统安装包

图形用户界面, 文本

描述已自动生成

## 模拟流程：

**Materials Studio->**画分子结构得到分子坐标(mol2文件)->data文件（python转置成data文件）->使用服务器（VNC-Viewer、putty、Winscp）

->**ReaxFFMD计算-**>编译GMD->得到结果

手机屏幕的截图

描述已自动生成

输入nohup./ 可执行文件名 -c 命名文件名 文件名.data&

图形用户界面, 文本

描述已自动生成

注：

1. Mol2文件：atom、bond（无用）
2. VNC- Viewer：可视化远程连接、putty、Winscp可用终端命令替代
3. 终端连服务器命令：ssh xiaoyy@192.168.155.245 -p 22
4. Varxmd->data\_array->liuhan->p4-new->p1

图形用户界面, 应用程序

描述已自动生成

**Specslist.txt文件：种类及其inchi**图片包含 表格

描述已自动生成

**1000JP-10-01d.anm:**

文本, 信件

描述已自动生成

文本

描述已自动生成表格

描述已自动生成