Unixの基本コマンド (注) はスペース

```
ディレクトリを作成する
mkdir dirA
           カレントディレクトリの情報を表示する
ls dirA
           dirAの中身を表示する
ls -a
           隠しファイルを含むすべてのファイルを表示する
ls -l
           ファイルの詳細を表示する(ファイル形式,作成日,実行時刻,アクセス権等)
                アクセス権の記述法 d[rwx][rwx] (順に[自分][グループ][全員]の権限を示す) (r...読み出し, w...書き込み, x...実行, -...不可)
cd dirA
           dirAに移動する
           ひとつ上のディレクトリに移動する
cd ..
           ホームディレクトリに移動する
cd
           一つ前のディレクトリに戻る
cd -
cd /
           ルートディレクトリに移動する
                                                                  <役立つキー>
                                                                 ~/ ホームディレクトリ
           カレントディレクトリの場所を絶対パスで表示する
pwd
                                                                  ./ カレントディレクトリ
                                                                 * "全部"を意味する
           fileA(空のファイル)を作成する。
touch fileA
           fileAの名前をfileBに変更する(名前の変更)
my fileA fileB
                                                                 <ターミナルのショートカットキー>
           fileAをdirAの中へ移動する(ファイルの移動)
my fileB dirA
                                                                 Ctrl+l 画面をクリアする
           dirAの名前をdirBに変更する(名前の変更)
mv dirA dirB
                                                                 tab ディレクトリ名等の入力を補完する
cp fileA dirA
           fileAをdirAの中へコピーする
cp fileA fileB
           fileAをfileBにコピーする
cp -r dirA dirB
           dirAをdirBにコピーする
                        (注) Unixでは、ゴミ箱はなく、削除すると復元できないので、注意すること。
rm fileA
           fileAを削除する
           fileAを削除するかどうかを尋ね、Yesなら消す。rm -i test.*のようにワイルドカードと組み合わせて使う。
rm -i fileA
           ディレクトリを(中身も含む)削除する
rm -r dirA
           シェルを終了する
exit
```

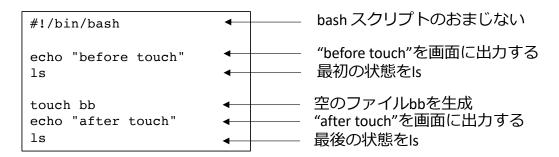
シェルスクリプト(bash)

シェルスクリプトは、一連の処理を行うコマンドをファイルに保存したものです。そのファイルを実行することで、毎回、 コマンドを打つ手間が省け、また間違いを防ぐことができます。

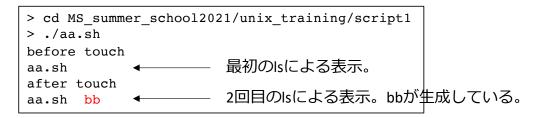
演習用のフォルダへ移動します。

> cd MS_summer_school2021/unix_training

<u>練習1</u>: WinSCPで、MS summer school2021/unix training/script1へ移動し、aa.shをダブルクリックすると、エディターが開きます。

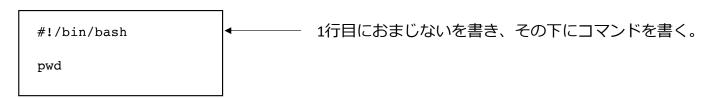


PuTTYのターミナルを開き、同じディレクトリーへ移動し、以下のコマンドを実行します。

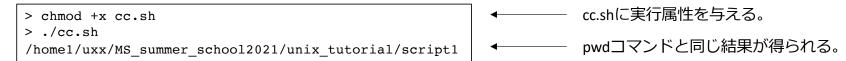


<u>練習2</u>:自分でスクリプトを作ってみよう。

WinSCPで、新規→ファイルを選び、ファイル名をcc.shと入力すると、エディターが開きます。

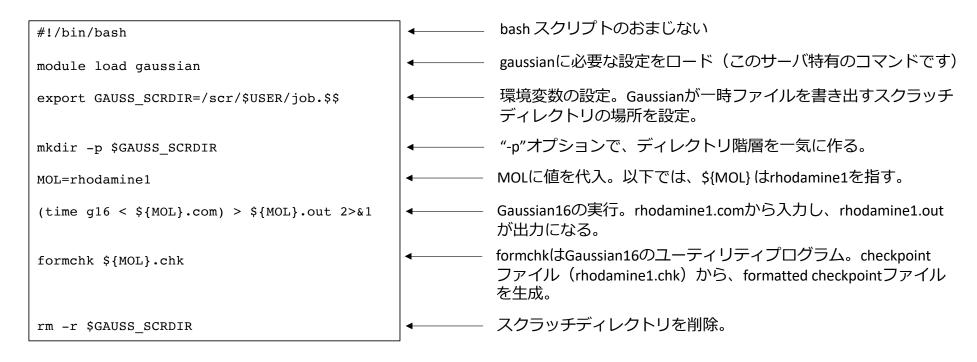


左上の保存ボタンを押すと、cc.shがサーバに作成されます。 PuTTYのターミナルで同じディレクトリーへ移動し、以下のコマンドを実行してみよう。



練習3:Gaussian16を実行してみよう。

WinSCPで、script2ディレクトリーへ移動すると、rhodamine1.comとrun.shがあります。rhodamine1.comはGaussian16のインプットで、run.shは実行スクリプトです。ダブルクリックすることで、中身を見ることができます。rhodamine1.comの内容は後ほど説明します。run.shは以下のようになっています。



Gaussian16を実行するには、PuTTYターミナルで以下のようにします。

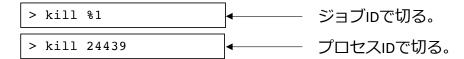
"&"をつけ忘れると、ジョブが終わるまで(約15分)、コマンドプロンプトが返ってきません。対処法は、

あるいは、ジョブを切っても良ければ、



となります。ジョブの状態は、jobsや、jobstコマンドで確認することができます。

流れているジョブを切りたいとき。



rhodamine1.outはアスキー形式のアウトプットで、ダブルクリックすることで中身を見れます。しかし、非常に分量が多いため、grepコマンドによるキーワードの抜き出しが有効です。

```
> grep "SCF Done" rhodamine1.out
SCF Done: E(RB3LYP) = -1106.22100154 A.U. after 16 cycles
SCF Done: E(RB3LYP) = -1106.23648347 A.U. after 16 cycles
SCF Done: E(RB3LYP) = -1106.23910627 A.U. after 16 cycles
SCF Done: E(RB3LYP) = -1106.24376086 A.U. after 16 cycles
SCF Done: E(RB3LYP) = -1106.24376580 A.U. after 13 cycles
```

容量の大きいファイルをダウンロードするとき、ファイルを圧縮・アーカイブすると容量が減ります。

```
zip -r data.zip rhodamine1.*
adding: rhodamine1.chk (deflated 26%)
adding: rhodamine1.com (deflated 67%)
adding: rhodamine1.fchk (deflated 61%)
adding: rhodamine1.out (deflated 71%)
```

data.zipが生成するので、これをWinSCPでダウンロードします。ダウンロードしたファイルを右クリック→すべて展開、 を選ぶことで、解凍されます。