# Molecular Simulation Environment Setting A to Z

Ver. 1 (22.03.23)

# Contents

1.	서버 컴퓨터에서 신규 유저 생성	2
2.	서버컴퓨터(신규유저)에서 ssh 디렉토리 생성	.2
3.	Client 컴퓨터에서 보안키 생성 및 공유키 이동	.2
4.	ssh 접속 단축어 설정	.2
5.	gcc 업데이트	.2
6.	RASPA 설치	.3
7	Vundle 및 편집기 설치	3

## 1. 서버 컴퓨터에서 신규 유저 생성

- 관리자 모드 실행	[서버] su
- 신규유저 생성	[서버] useradd (유저이름)
- 패스워드 설정	[서버] passwd (유저이름)
- 권한 추가	[서버] chmod +w /etc/sudoers
	[서버] vim /etc/sudoers
	(유저이름) ALL=(ALL) ALL
	[서버] chmod -w /etc/sudoers

## 2. 서버컴퓨터(신규유저)에서 ssh 디렉토리 생성

- 새로 만들어진 유저로	[서버] exit
접속	[로컬] ssh (유저이름)@10.175.121.31
- ssh 디렉토리 생성	[서버] mkdir .ssh

## 3. Client 컴퓨터에서 보안키 생성 및 공유키 이동

5. Cheft B11-1911 - 10-1	00 × 011/1 /10
- ssh 키 생성	[로컬] ssh-keygen
- 공유키 이동	[로컬] cd .ssh
	[로컬] scp id_rsa.pub (유저이름)@10.175.121.31:~/.ssh
- 서버컴퓨터 접속	[로컬] ssh (유저이름)@10.175.121.31
	[서버] cd .ssh
	[서버] mv id_rsa.pub authorized_keys
- 접속 확인	[서버] exit
	[로컬] ssh (유저이름)@10.175.121.31
- 접속 안되면 ssh 권한	[서버] chmod 700 ~/.ssh
변경	[서버] chmod 644 ~/.ssh/authorized_keys

## 4. ssh 접속 단축어 설정

- 접속 확인	[로컬] ssh (접속시 사용할 이름)
	Identityfile ~/.ssh/id_rsa
	User (유저 이름)
	HostName 10.175.121.31
	Host (접속시 사용할 이름)
수정	[로컬] vim config
- 로컬 컴퓨터에서 파일	[로컬] cd .ssh

## 5. gcc 업데이트

<b>3</b> — • • •	
	sudo yum upgrade
	[서버] sudo yum install centos-release-scl
	[서버] sudo yum-config-managerenable rhel-server-rhscl-
	7-rpms

	[서버] sudo yum install devtoolset-8
	[서버] scl enable devtoolset-8 bash
6. RASPA 설치	
- 시작 전 gcc 버전 다시 확인	[서버] gccversion
- gcc 버전이 최신버전이 아닐 경우 업데이트 해야 함!	⇒ 5. gcc 업데이트 수행
- RASPA 다운, 디렉토리 세팅	[서버] git clone https://github.com/iraspa/RASPA2 [서버] mkdir Research [서버] export RASPA_DIR=\${HOME}/Research/simulations/ [서버] cd RASPA2
- 캐시 삭제 후 설치 진행	rm -rf autom4te.cache mkdir m4 aclocal autoreconf -i automakeadd-missing autoconf ./configureprefix=\${RASPA_DIR} make make install
- 설치 확인	cd/Research/simulations/
7 Vundle 미 편지기 서치	
7. Vundle 및 편집기 설치 - 서버 접속 후 번들 설치	[서버] git clone https://github.com/VundleVim/Vundle.vim.git ~/.vim/bundle/Vundle.vim
- 다른사람 편집기 복붙해 오기	[서버] sudo cp/seby/.vimrc ~/.vimrc
- 파일 실행 및 설치	[서버] vim .vimrc :source % :PluginInstall
8. 각 PSID_ 설정 변경	
- 서버 접속	[서버] su [서버] ssh psid01 ※psid02, psid03, psid04, psid05 반복 [서버(root@psid01)] chmod +w /etc/group
- 수정1	[서버(root@psid01)] chmod +w /etc/group

**메모 포함[A1]:** git 에서 RASPA 다운받기

	[서버] vim /etc/group
	맨 밑에 추가
	: (유저이름):x:(n+1):
	[서버] chmod -w /etc/group
- 수정2	[서버(root@psid01)] chmod +w /etc/passwd
	[서버] vim /etc/passwd
	: (유저이름):x:n:(n+1)::/home/(유저이름):/bin/bash
	※bash 뒤로 공백 없음!
	[서버] chmod -w /etc/passwd
- 수정3	[서버(root@psid01)] chmod +w /etc/sudoers
	[서버] vim /etc/sudoers
	(유저이름) ALL=(ALL) ALL
	[서버] chmod -w /etc/sudoers
- 비밀번호 설정 후 확인	[서버] passwd (유저이름)
	exit
	[로컬] ssh psid01