**Molecular Simulation**

**Environment Setting A to Z**

**Ver. 1 (22.03.23)**

Contents

[1. 서버 컴퓨터에서 신규 유저 생성 2](#_Toc98942230)

[2. 서버컴퓨터(신규유저)에서 ssh 디렉토리 생성 2](#_Toc98942231)

[3. Client 컴퓨터에서 보안키 생성 및 공유키 이동 2](#_Toc98942232)

[4. ssh 접속 단축어 설정 2](#_Toc98942233)

[5. gcc 업데이트 2](#_Toc98942234)

[6. RASPA 설치 3](#_Toc98942235)

[7. Vundle 및 편집기 설치 3](#_Toc98942236)

|  |  |
| --- | --- |
| 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 |
|  |  |
| 1. **서버컴퓨터(신규유저)에서 ssh 디렉토리 생성** | |
| - 새로 만들어진 유저로 접속 | [서버] exit  [로컬] ssh (유저이름)@10.175.121.31 |
| - ssh 디렉토리 생성 | [서버] mkdir .ssh |
|  |  |
| 1. **Client 컴퓨터에서 보안키 생성 및 공유키 이동** | |
| - 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 변경 | [서버] chmod 700 ~/.ssh  [서버] chmod 644 ~/.ssh/authorized\_keys |
|  |  |
| 1. **ssh 접속 단축어 설정** | |
| - 로컬 컴퓨터에서 파일 수정 | [로컬] cd .ssh  [로컬] vim config  Host (접속시 사용할 이름)  HostName 10.175.121.31  User (유저 이름)  Identityfile ~/.ssh/id\_rsa |
| - 접속 확인 | [로컬] ssh (접속시 사용할 이름) |
|  |  |
| 1. **gcc 업데이트** | |
|  | sudo yum upgrade  [서버] sudo yum install centos-release-scl  [서버] sudo yum-config-manager --enable rhel-server-rhscl-7-rpms  [서버] sudo yum install devtoolset-8  [서버] scl enable devtoolset-8 bash |
|  |  |
| 1. **RASPA 설치** | |
| - 시작 전 gcc 버전 다시 확인 | [서버] gcc --version |
| - gcc 버전이 최신버전이 아닐 경우 업데이트 해야함! | ⇒ 5. gcc 업데이트 수행 |
| - RASPA 다운, 디렉토리 세팅 | [서버] git clone https://github.com/iraspa/RASPA2  [서버] mkdir Research  [서버] export RASPA\_DIR=${HOME}/Research/simulations/  [서버] cd RASPA2 |
| - 캐시 삭제 후 설치 진행 | rm -rf autom4te.cache  mkdir m4  aclocal  autoreconf -i  automake --add-missing  autoconf  ./configure --prefix=${RASPA\_DIR}  make  make install |
| - 설치 확인 | cd ../Research/simulations/ |
|  |  |
| 1. **Vundle 및 편집기 설치** | |
| - 서버 접속 후 번들 설치 | [서버] git clone [https://github.com/VundleVim/Vundle.vim.git ~/.vim/bundle/Vundle.vim](https://github.com/VundleVim/Vundle.vim.git%20~/.vim/bundle/Vundle.vim) |
| - 다른사람 편집기 복붙해오기 | [서버] sudo cp ../seby/.vimrc ~/.vimrc |
| - 파일 실행 및 설치 | [서버] vim .vimrc  :source %  :PluginInstall |
|  |  |
| 1. **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  [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 |