

2024 제4회 APCTP-KIAS 전자구조계산 겨울학교

Quantum Espresso : 계산 실습

GIST

Dongbin Shin

- 수업전에 virtual box 또는 vmware를 설치 및 우분투를 설치하여 실습 준비 부탁드립니다.

Ubuntu 설치 (Windows 버전)

1

<https://ubuntu.com/download/desktop>

아래 버튼 클릭 후 Ubuntu iso 파일 설치

Ubuntu 22.04.3 LTS

The latest LTS version of Ubuntu, for desktop PCs and laptops. LTS stands for long-term support — which means five years of free security and maintenance updates, guaranteed until April 2027.

[Ubuntu 22.04 LTS release notes](#)

Recommended system requirements:

- ✓ 2 GHz dual-core processor or better
- ✓ 4 GB system memory
- ✓ 25 GB of free hard drive space
- ✓ Internet access is helpful
- ✓ Either a DVD drive or a USB port for the installer media



[Download 22.04.3](#)

For other versions of Ubuntu Desktop including torrents, the network installer, a list of local mirrors and past releases [see our alternative downloads](#).

Virtual box 설치 및 Ubuntu 실행 (Windows 버전)

1 <https://www.virtualbox.org/wiki/Downloads>
에서 Virtual box 설치

2 설치 완료 후 실행, 새로 만들기 클릭

VirtualBox 7.0.12 platform packages

- [Windows hosts](#)
- [macOS / Intel hosts](#)
- [Linux distributions](#)
- [Solaris hosts](#)
- [Solaris 11 IPS hosts](#)



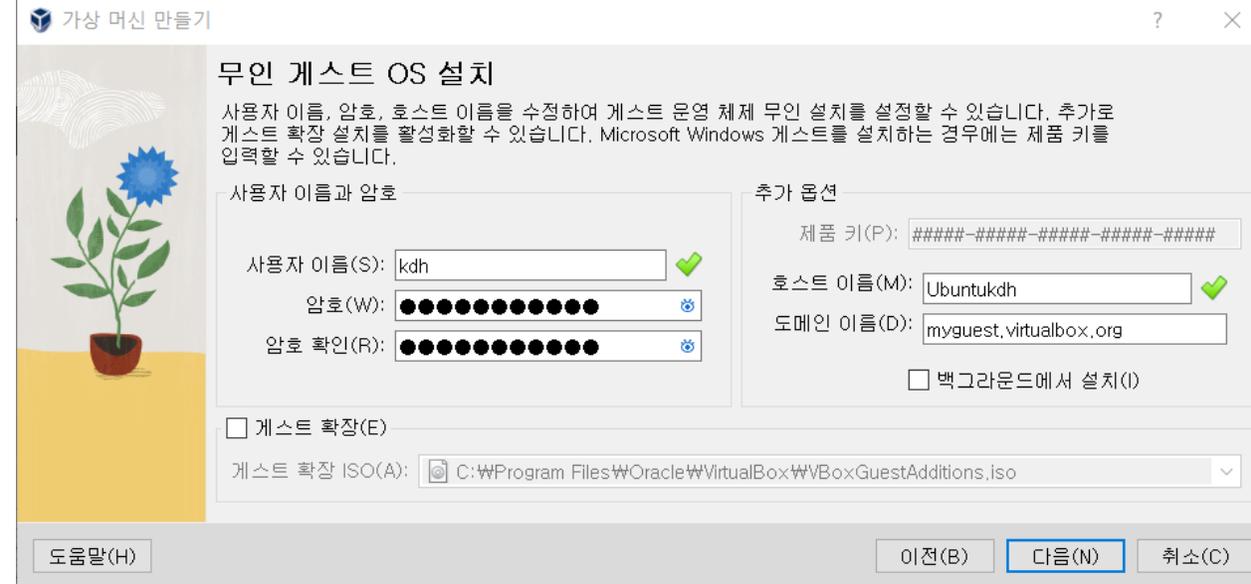
Virtual box 설치 및 Ubuntu 실행 (Windows 버전)

3 이름은 자신이 구분 할 수 있도록 지정,
iso 이미지는 설치한 Ubuntu iso파일 지정

무인 설치 건너뛰기 체크 (사진에는 체크 없는 상태)

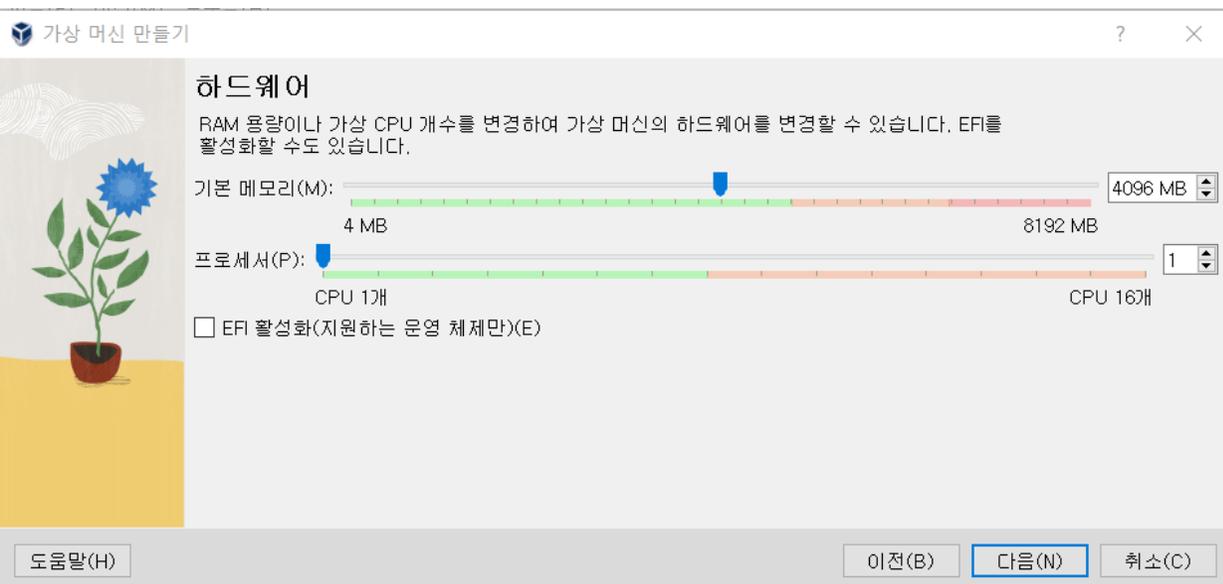
4 유저 이름 및 암호 설정

무인 설치 건너뛰기가 적용되면
나중에 우분투 환경에서 다시 이름 및 암호 설정
진행하면서 14번 설명 확인
14번 에서 적용된 이름 및 암호가 적용됨

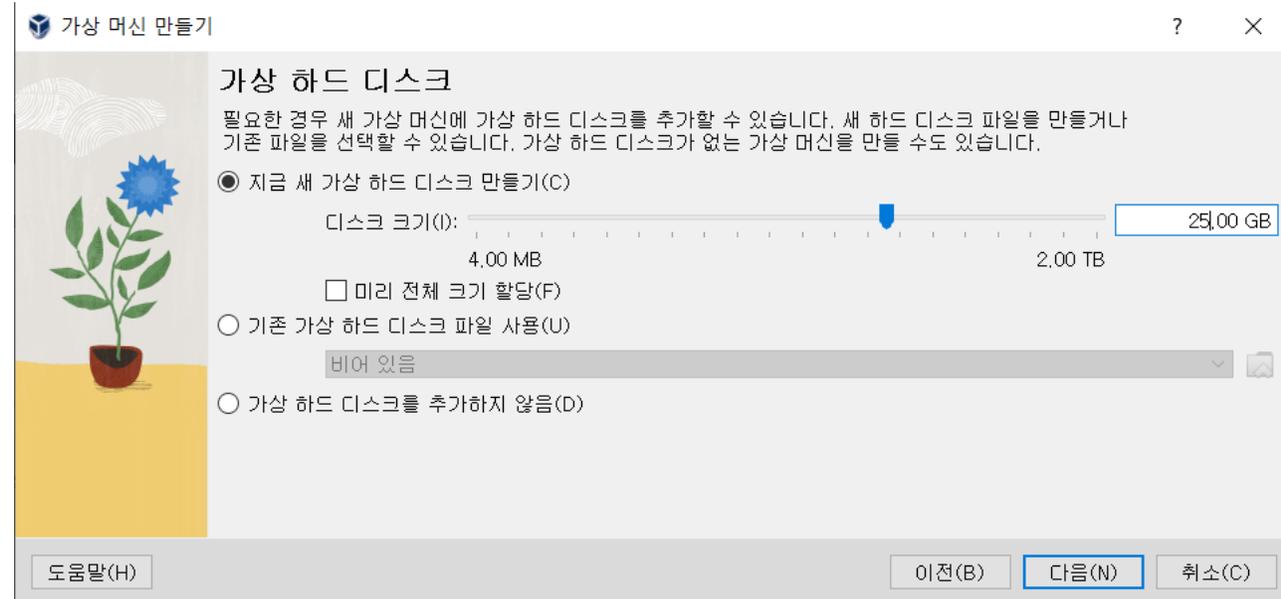


Virtual box 설치 및 Ubuntu 실행 (Windows 버전)

5 할당할 메모리 및 cpu 개수 설정



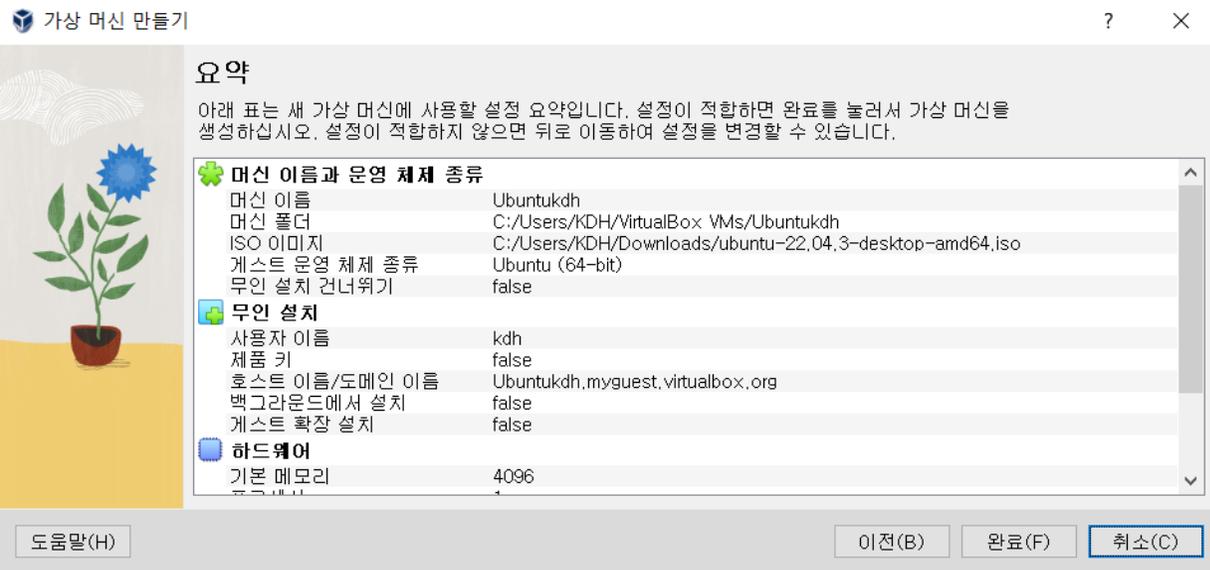
6 디스크 할당 (25GB 추천)



Virtual box 설치 및 Ubuntu 실행 (Windows 버전)

7 설정 확인 후 완료 클릭

8 방금 만든 우분투 가상 환경 실행
Try or Install Ubuntu 지정 후 엔터



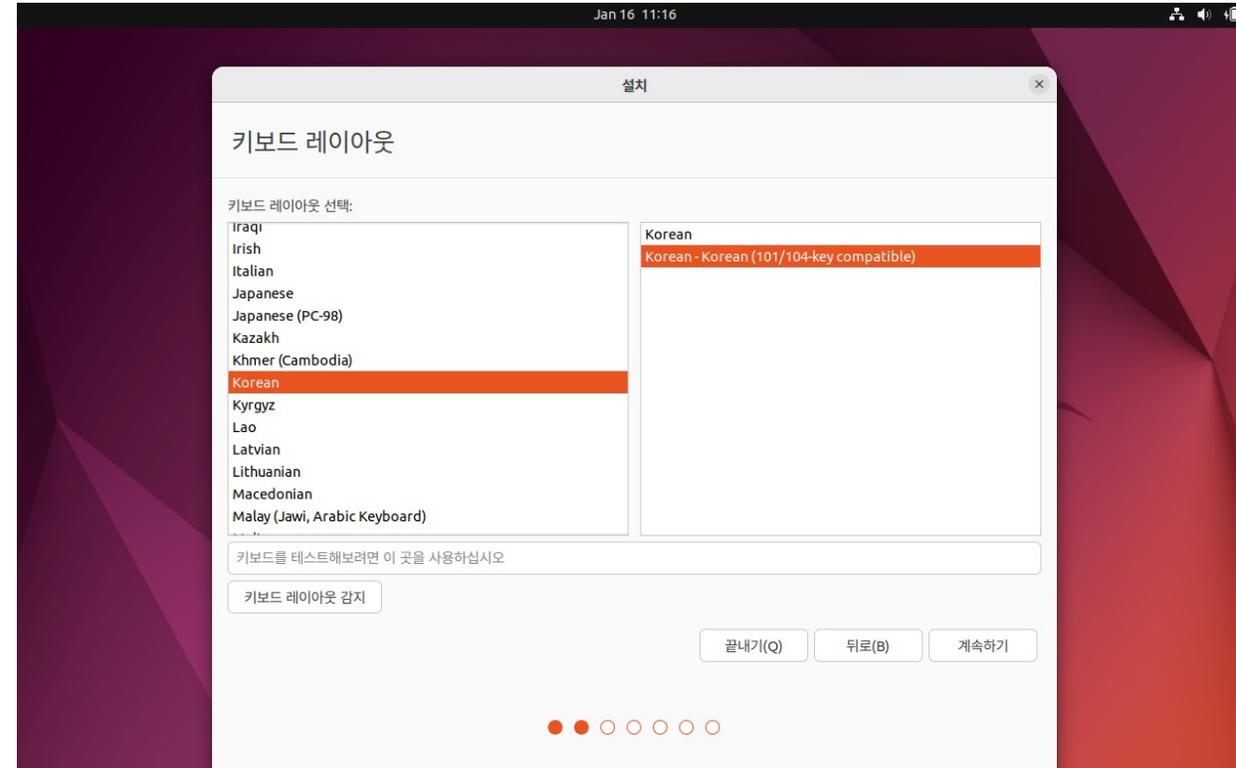
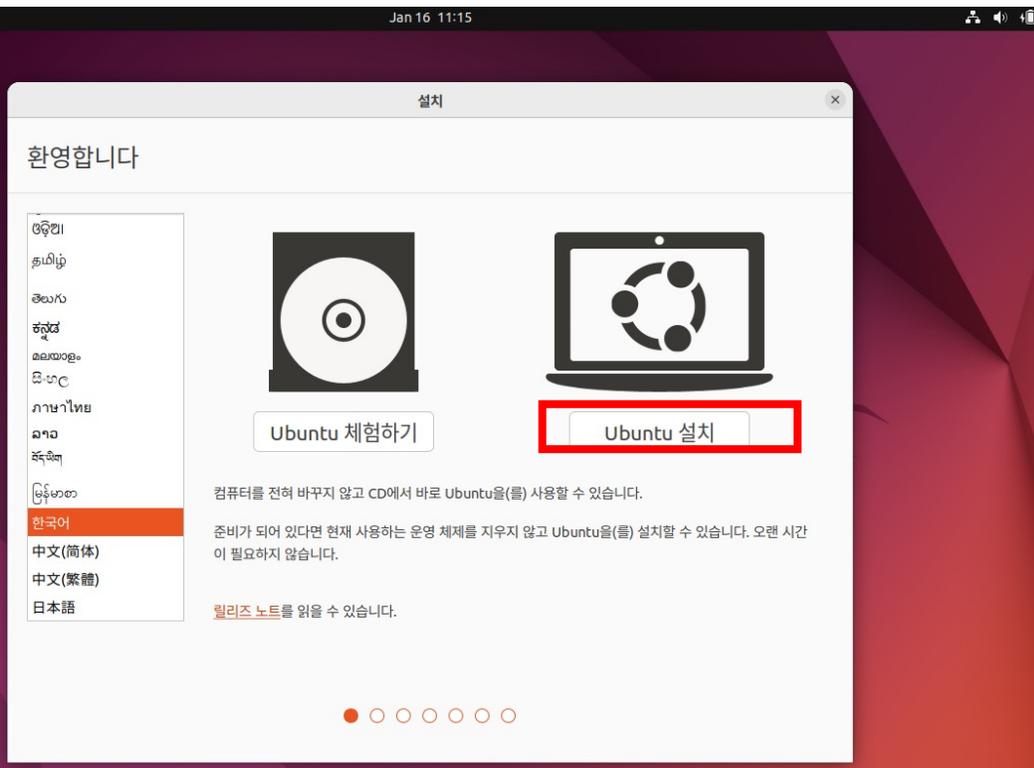
Virtual box 설치 및 Ubuntu 실행 (Windows 버전)

9

언어는 희망하는 언어 지정
이후 Ubuntu 설치 클릭

10

지정된 키보드 설정 후 계속하기 클릭



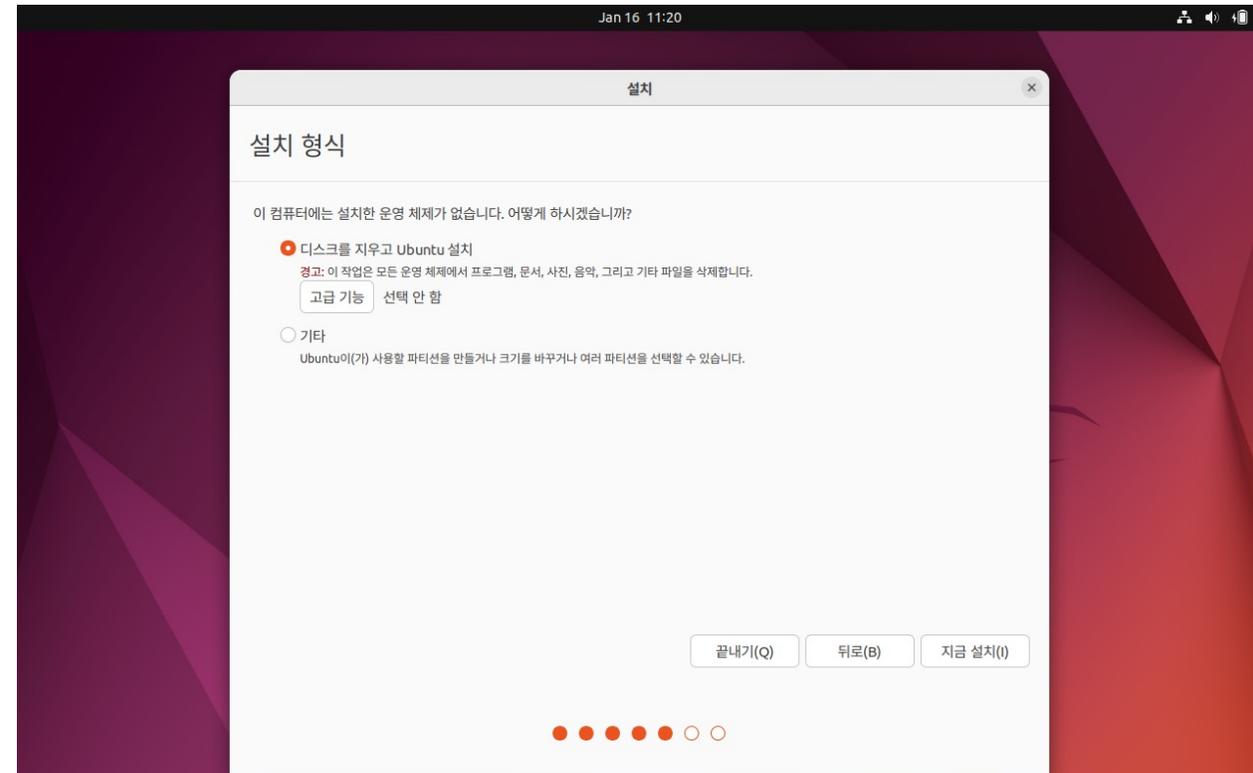
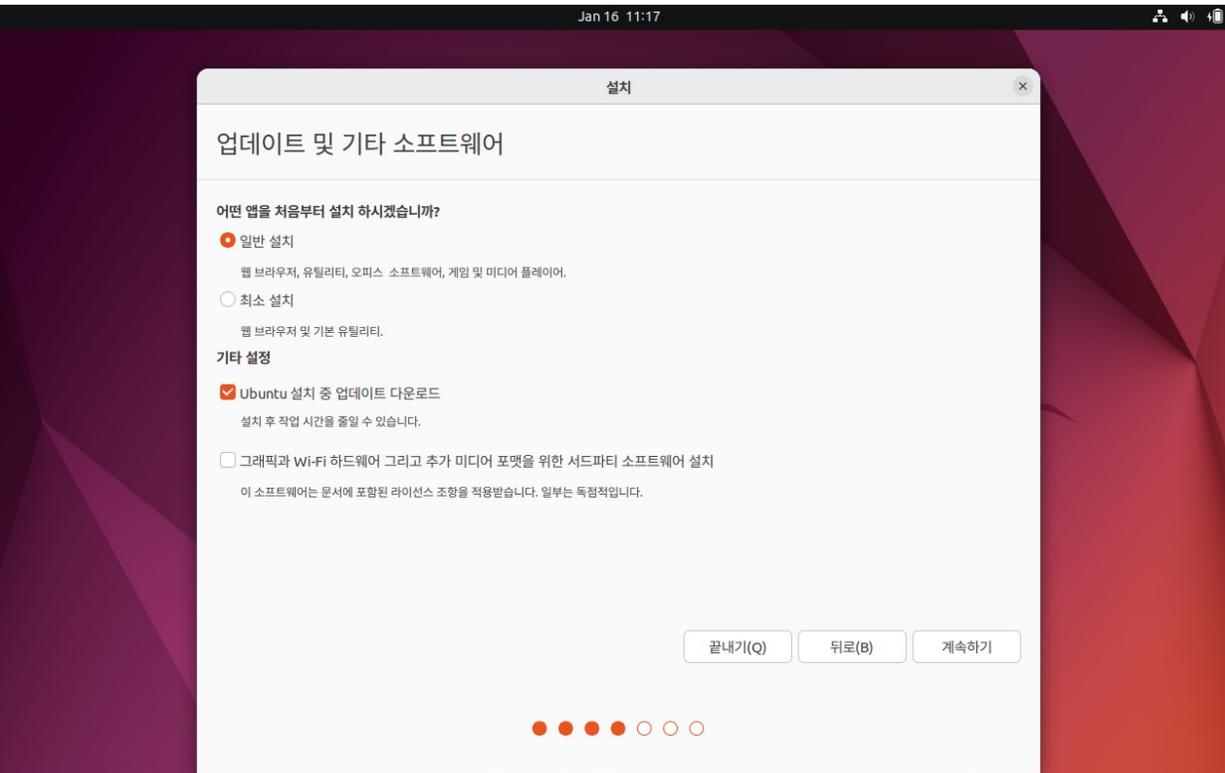
Virtual box 설치 및 Ubuntu 실행 (Windows 버전)

11

일반 설치 지정 (매우 권장)
기타 설정은 Ubuntu 설치 중 업데이트 다운로드만
지정 후 계속하기는 권장, 아래 것은 선택 사항

12

설치 형식은 디스크를 지우고 Ubuntu 설치

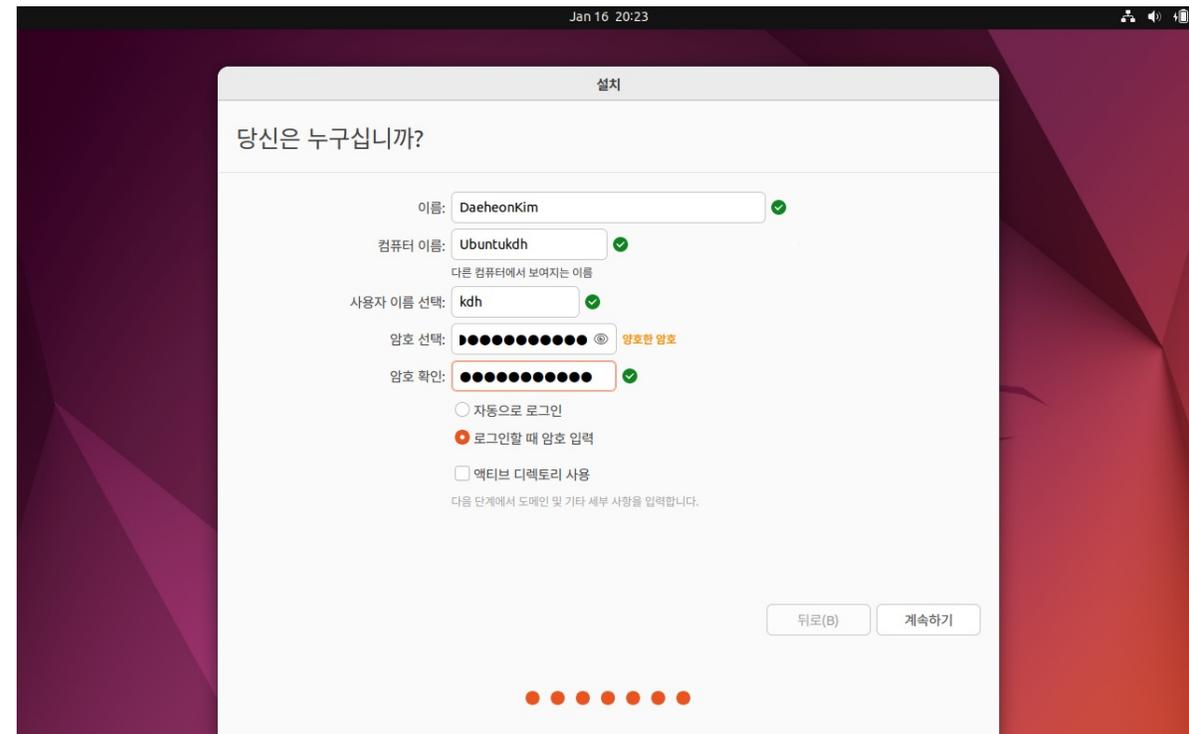
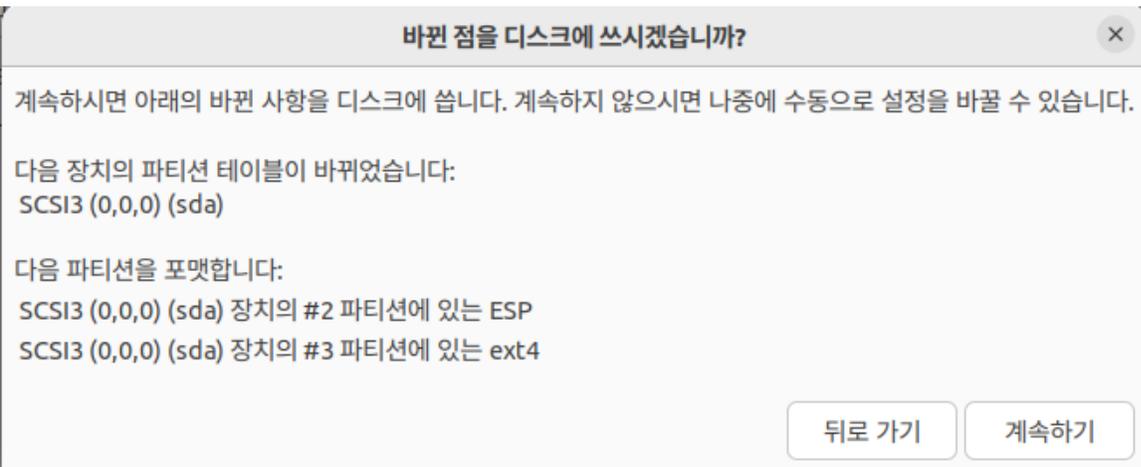


Virtual box 설치 및 Ubuntu 실행 (Windows 버전)

13 다음 메시지가 나오는데, 계속하기 클릭

14 이후 자신의 거주지 (서울로 해도 무관) 이름 및 컴퓨터 사용자 정보 입력 계속하기 클릭 -> 우분투 설치 진행

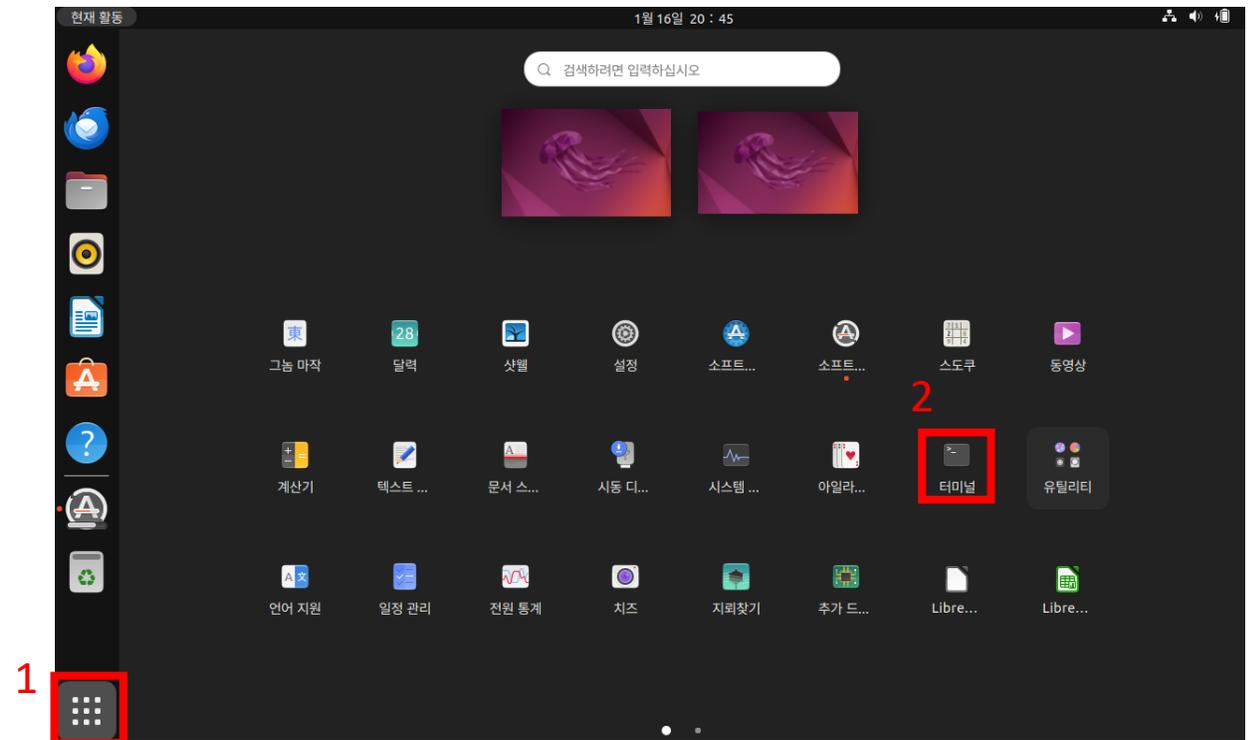
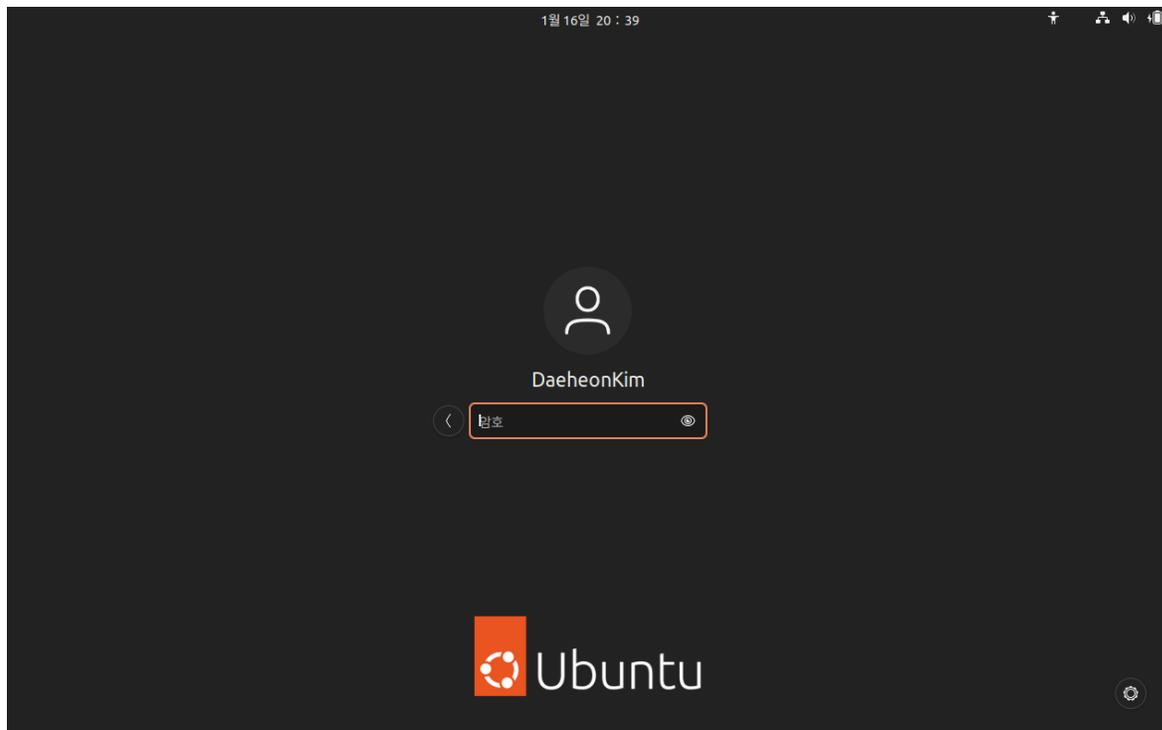
여기서 설정한 이름 및 암호가 우분투 사용자 이름 및 암호



Virtual box 설치 및 Ubuntu 실행 (Windows 버전)

15 리부트 이후 다음 화면이 제대로 나오면 설치 완료
14 에서 설정한 비밀번호 입력

16 터미널은 왼쪽 아래 프로그램 표시 클릭 이후
프로그램들 중에 위치한다.



Virtual box 설치 및 Ubuntu 실행 (Windows 버전)

- 17 sudo apt update && sudo apt upgrade -y 커맨드를 실행하여 apt 를 업데이트 한다.
sudo apt-get update 커맨드를 실행하여 apt-get을 업데이트 한다
이후, sudo snap refresh 커맨드를 실행하여 우분투에 있는 프로그램들을 업데이트 한다.

```
kdh@Ubuntukdh:~$ sudo apt update && sudo apt upgrade -y
기존:1 http://security.ubuntu.com/ubuntu jammy-security InRelease
기존:2 http://kr.archive.ubuntu.com/ubuntu jammy InRelease
기존:3 http://kr.archive.ubuntu.com/ubuntu jammy-updates InRelease
기존:4 http://kr.archive.ubuntu.com/ubuntu jammy-backports InRelease
패키지 목록을 읽는 중입니다... 완료
의존성 트리를 만드는 중입니다... 완료
상태 정보를 읽는 중입니다... 완료
4 패키지를 업그레이드할 수 있습니다. 확인하려면 'apt list --upgradable'를 실행하
십시오.
패키지 목록을 읽는 중입니다... 완료
의존성 트리를 만드는 중입니다... 완료
상태 정보를 읽는 중입니다... 완료
업그레이드를 계산하는 중입니다... 완료
다음 패키지를 과거 버전으로 유지합니다:
  gjs libgjs0g systemd-hwe-hwdb tzdata
0개 업그레이드, 0개 새로 설치, 0개 제거 및 4개 업그레이드 안 함.
```

Virtual box 설치 및 Ubuntu 실행 (Windows 버전)

- 18 17번 진행 중 에러가 발생 할 수 있다.
터미널에서 `sudo apt update` 시 다음과 같은 에러가 날 수 있다.

```
kdh@Ubuntukdh:~$ sudo apt update
패키지 목록을 읽는 중입니다... 완료
E: Could not get lock /var/lib/apt/lists/lock. It is held by process 2831 (aptd)
N: Be aware that removing the lock file is not a solution and may break your system.
E: /var/lib/apt/lists/ 디렉토리를 잠글 수 없습니다
```

```
sudo killall apt apt-get
sudo rm /var/lib/apt/lists/lock
sudo rm /var/cache/apt/archives/lock
sudo rm /var/lib/dpkg/lock*
sudo dpkg --configure -a sudo apt-get update
```

5개의 커맨드를 순서대로 입력하면 해결 할 수 있다.

Vmware fusion mac 버전

- <https://www.vmware.com/kr/products/fusion/fusion-evaluation.html>

Mac용 가상 머신(VM) 소프트웨어

Intel 또는 Apple Silicon Mac용 VMware Fusion Pro 사용해 보기

전 세계의 개발자와 IT 전문가는 VMware Fusion을 사용하여 최신 Mac에서 Windows, Linux 등을 실행하고 있습니다. 등록할 필요 없이 30일 무료 평가판을 시작하십시오.

무료로 PRO 사용해 보기

온라인 구매

Ubuntu 환경에서 Quantum espresso 설치

1

Quantum espresso를 실행하고 결과를 분석 하기 위해 본 프로그램 외에도 다양한 tool을 필요로 한다.
아래 커맨드를 실행하여 설치하면 된다.

```
sudo apt-get install quantum-espresso
```

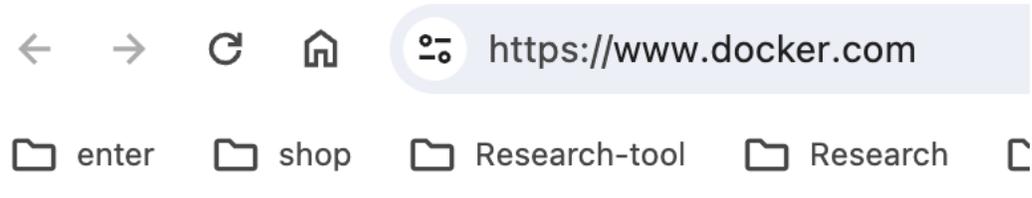
```
sudo apt-get install vim
```

```
sudo apt-get install grace
```

```
sudo apt-get install xcrysden
```

Docker 설치

1



Products ^

Product Offerings

[Docker Personal](#)

Docker Pro

Features

Secure Softw

Container Ru

클릭

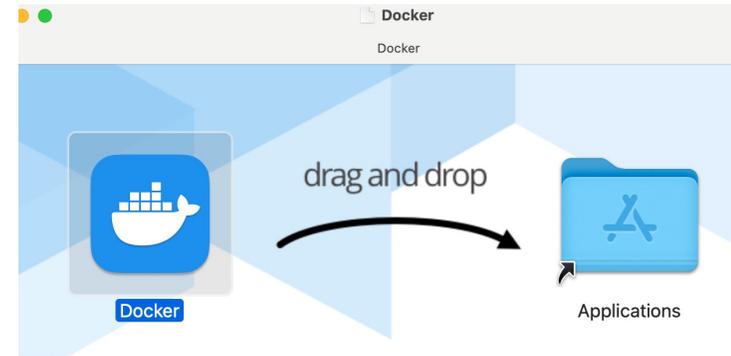
2

자신에 맞는 시스템 버전 다운로드



3

설치



Ubuntu gui 버전 설치

Windows: powershell에서 Max: terminal에서

```
sudo docker run --name ubvnc -p 6080:80 -p 5900:5900 dorowu/ubuntu-desktop-lxde-vnc:bionic
```

위의 설치 후

Chrome이나 인터넷 에서 아래의 주소로 접속

<http://127.0.0.1:6080/#/>

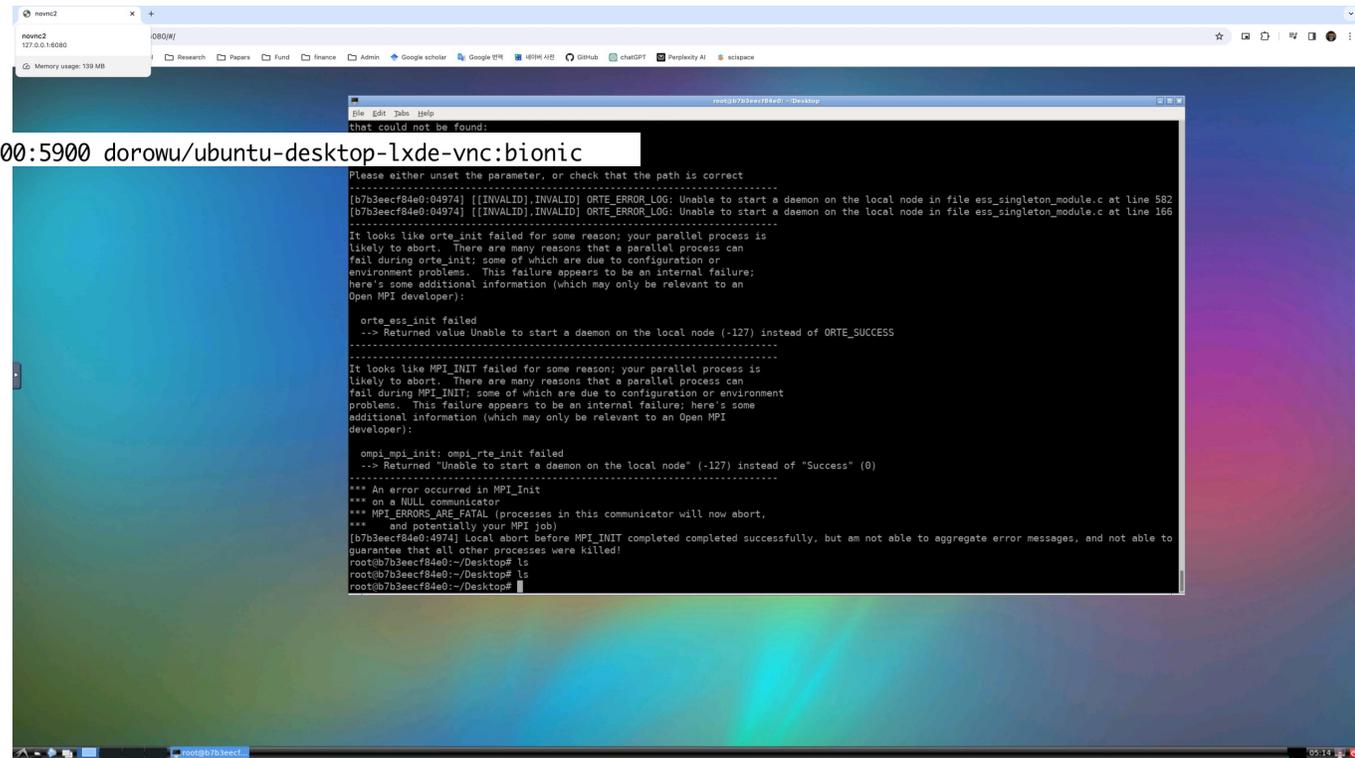
```
dshin@Dongbins-Mac-Studio ~ % sudo docker run --name ubvnc -p 6080:80 -p 5900:5900 dorowu/ubuntu-desktop-lxde-vnc:bionic
```

재시작

```
sudo docker start ubvnc
```

종료

```
sudo docker stop ubvnc
```



필수 프로그램 설치

```
apt-get update
```

```
apt-get install quantum-espresso
```

```
apt-get install vim
```

```
apt-get install grace
```

```
apt-get install xcrysden
```