

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

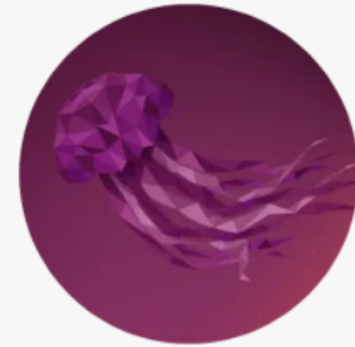
## Ubuntu 22.04.3 LTS

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](#)



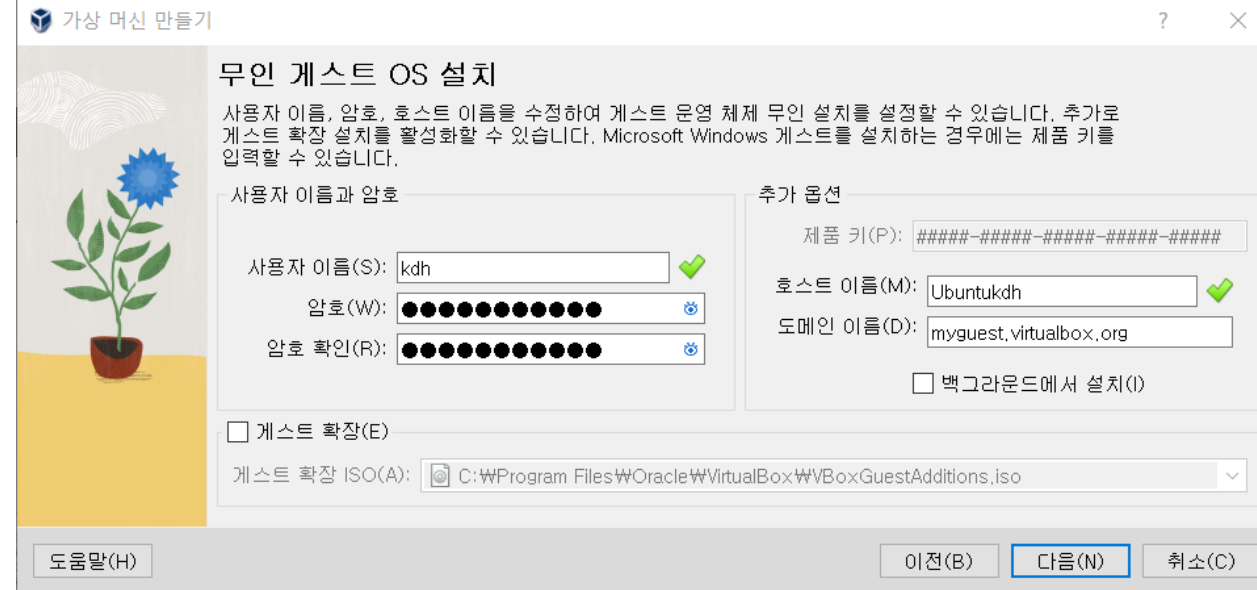
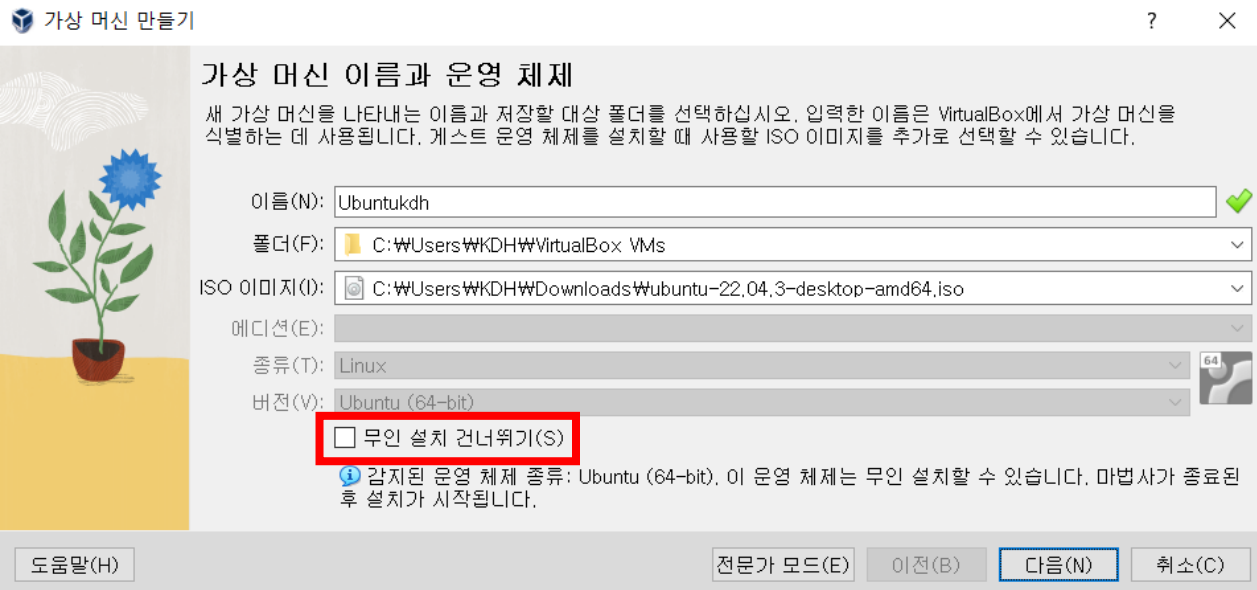
# Virtual box 설치 및 Ubuntu 실행 (Windows 버전)

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

무인 설치 건너뛰기 체크 (사진에는 체크 없는 상태)

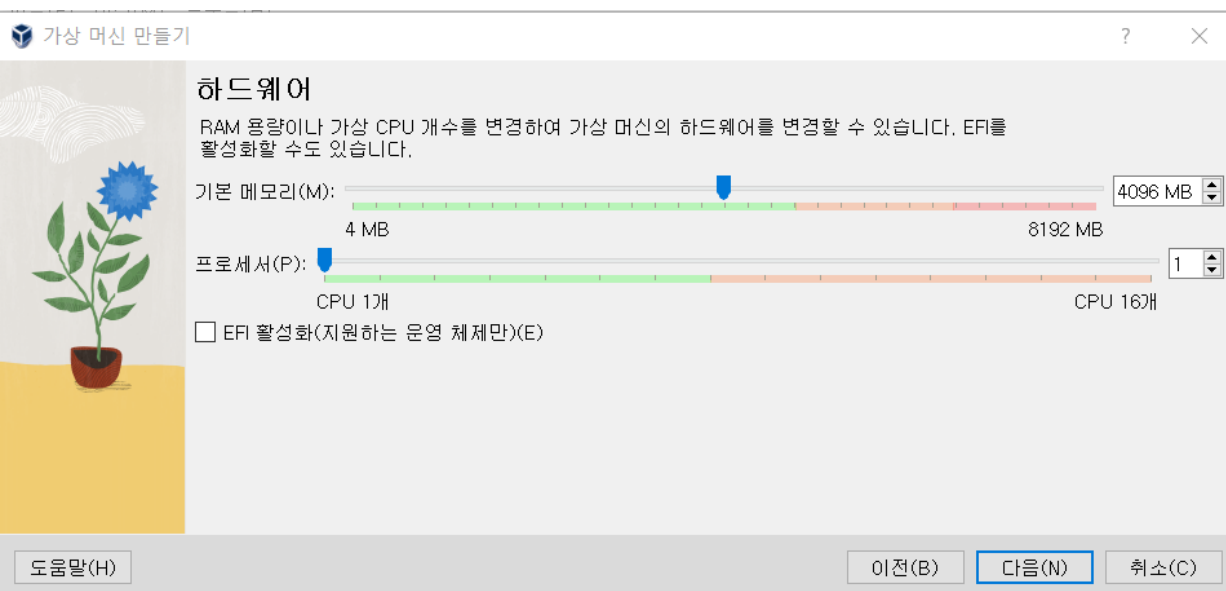
4 유저 이름 및 암호 설정

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

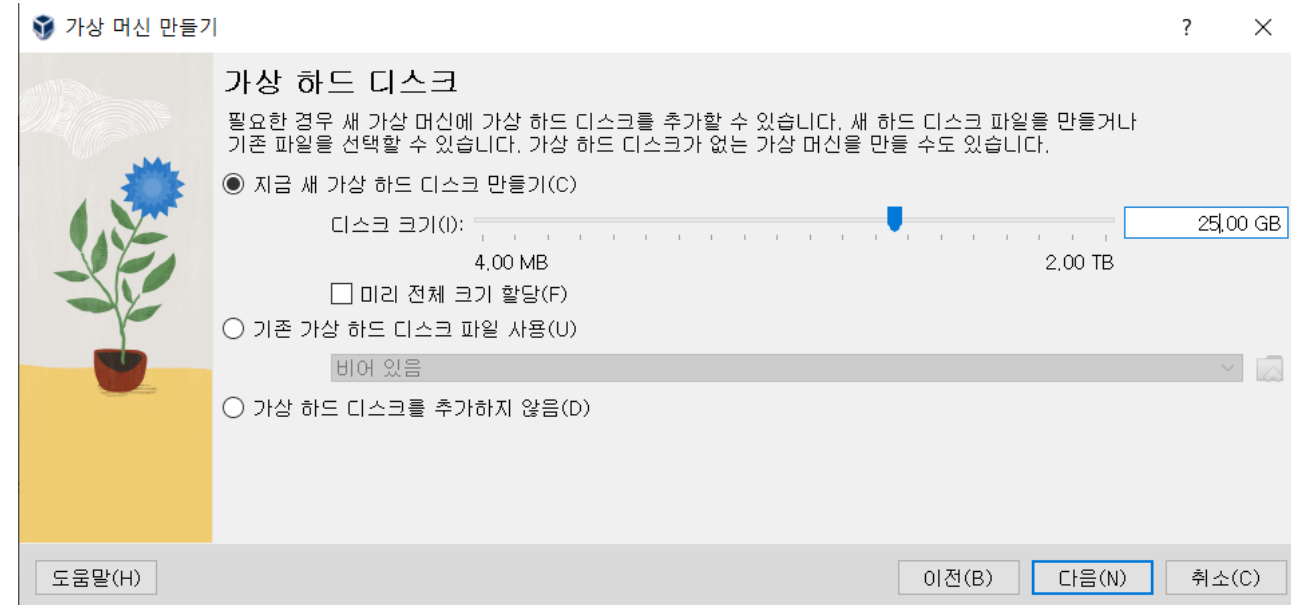


# Virtual box 설치 및 Ubuntu 실행 (Windows 버전)

5 할당할 메모리 및 cpu 개수 설정



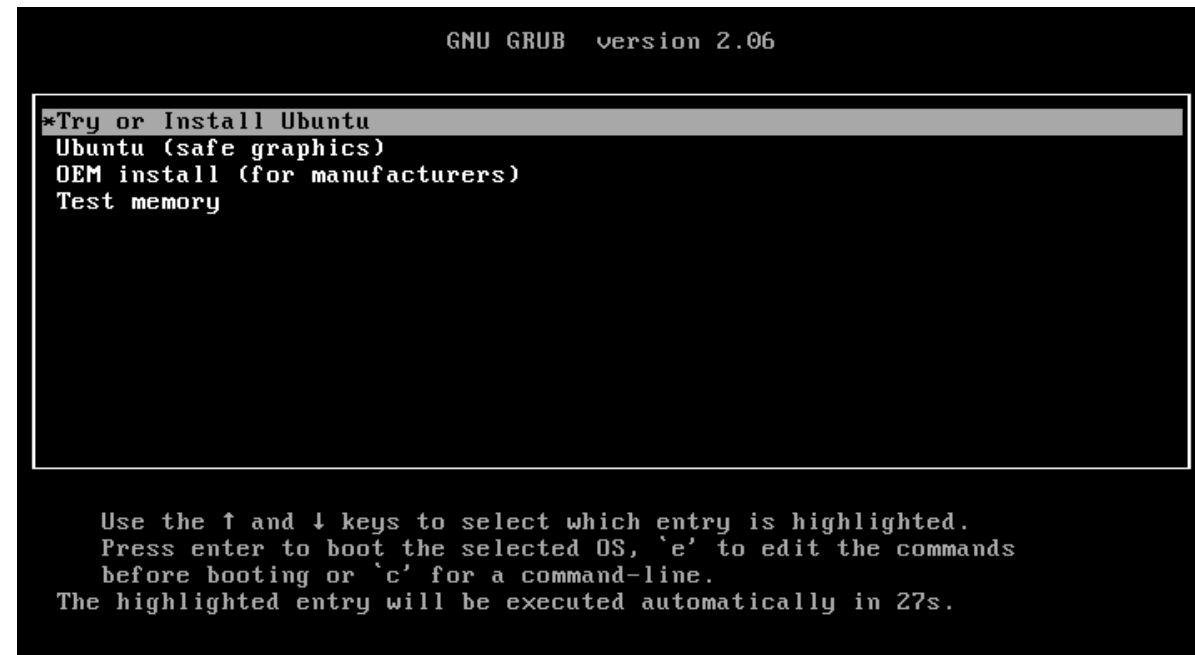
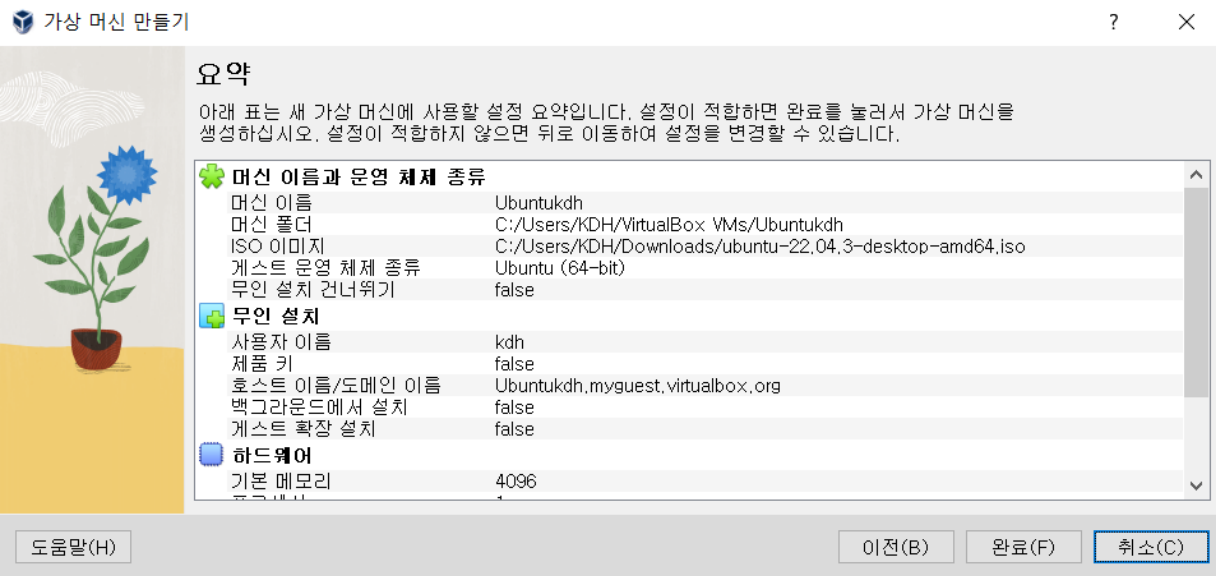
6 디스크 할당 (25GB 추천)



# 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



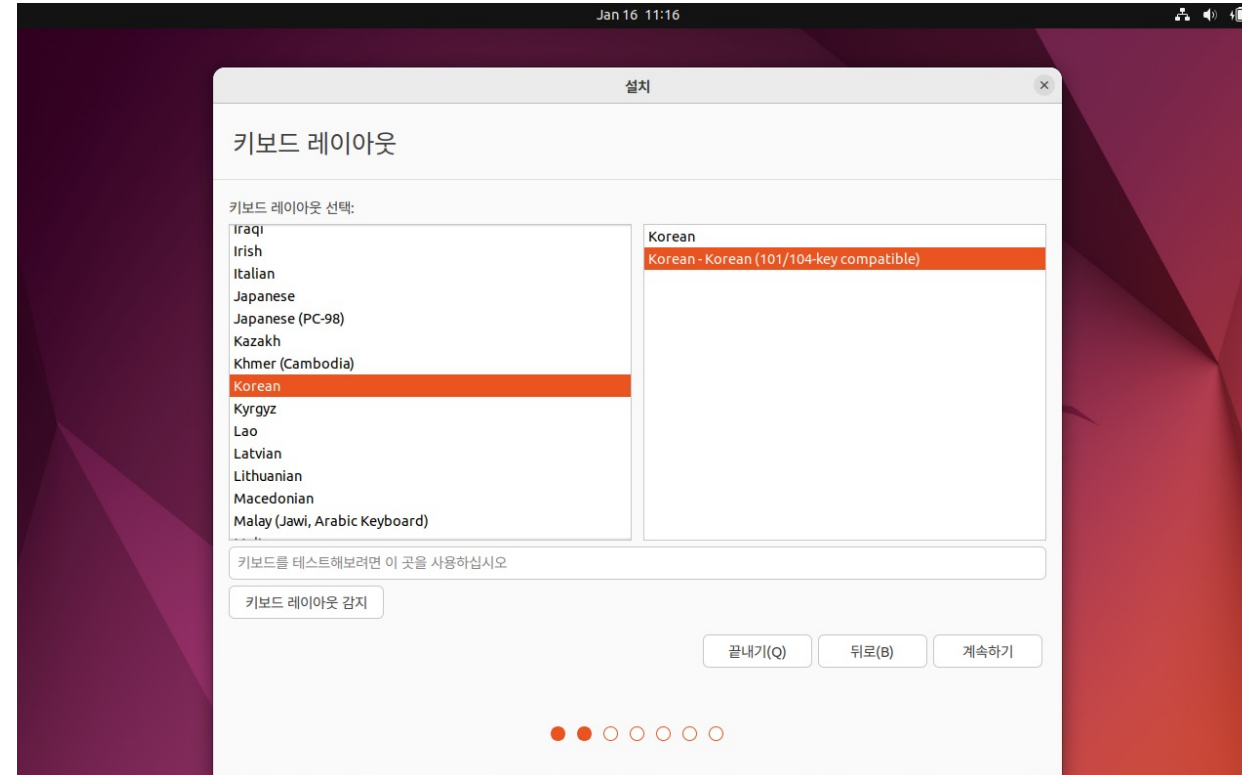
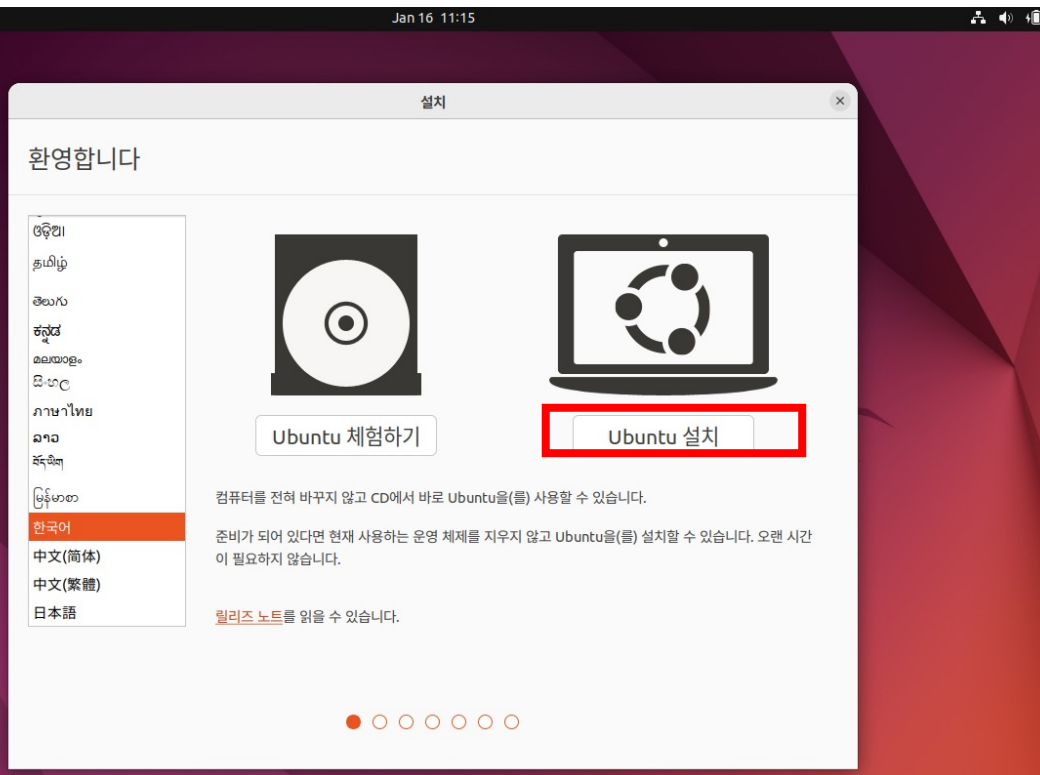
# Virtual box 설치 및 Ubuntu 실행 (Windows 버전)

9

언어는 희망하는 언어 지정  
이후 Ubuntu 설치 클릭

10

지정된 키보드 설정 후 계속하기 클릭





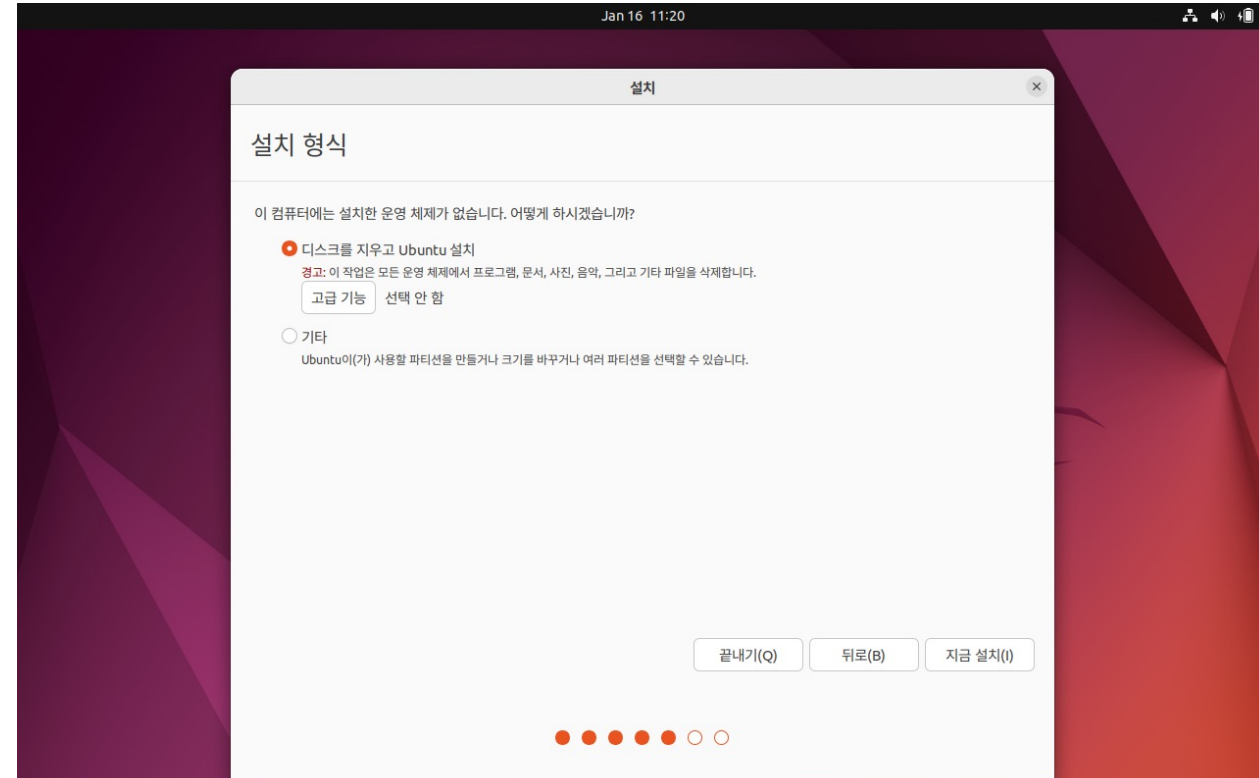
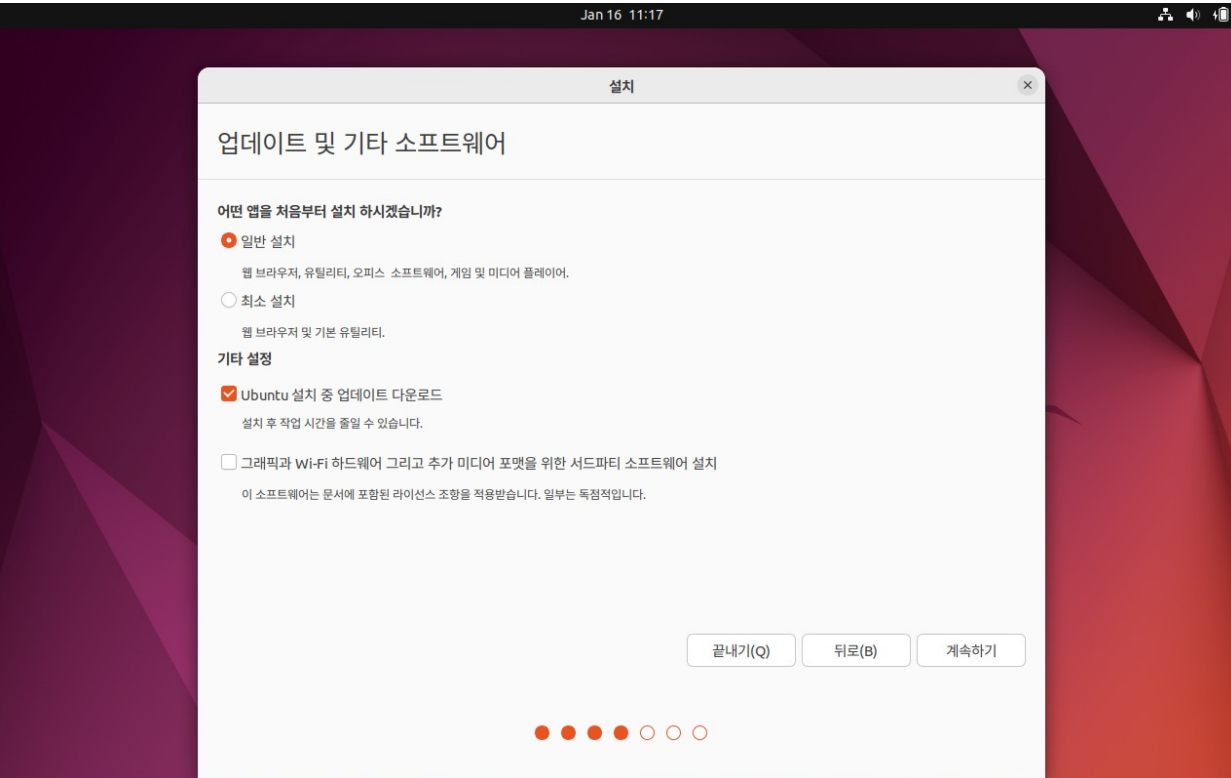
# Virtual box 설치 및 Ubuntu 실행 (Windows 버전)

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

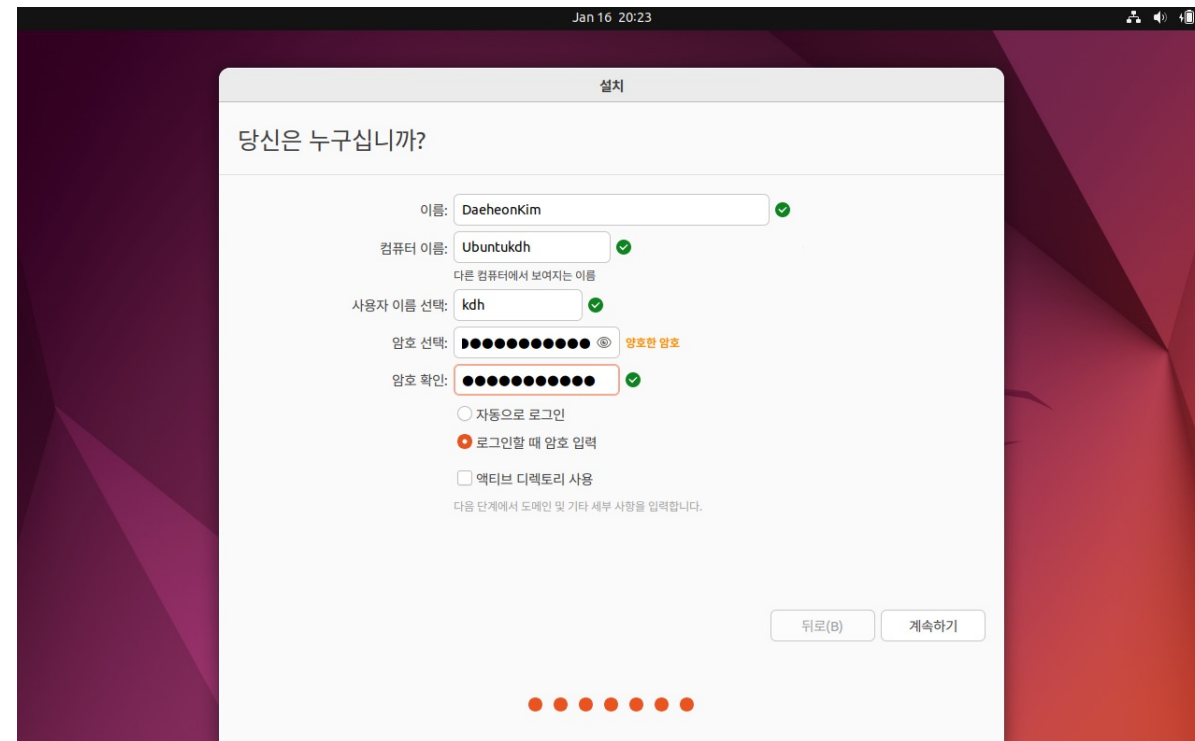
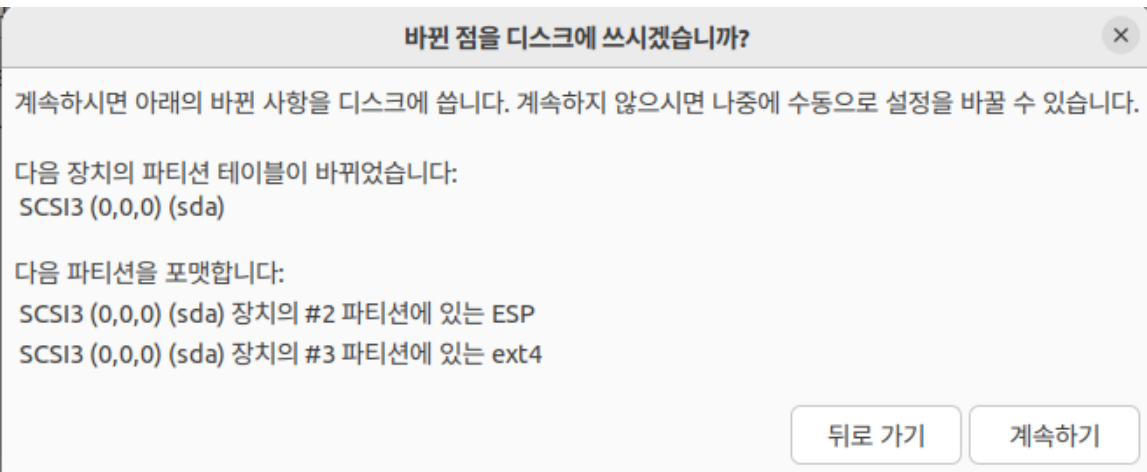


# Virtual box 설치 및 Ubuntu 실행 (Windows 버전)

13 다음 메시지가 나오는데, 계속하기 클릭

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

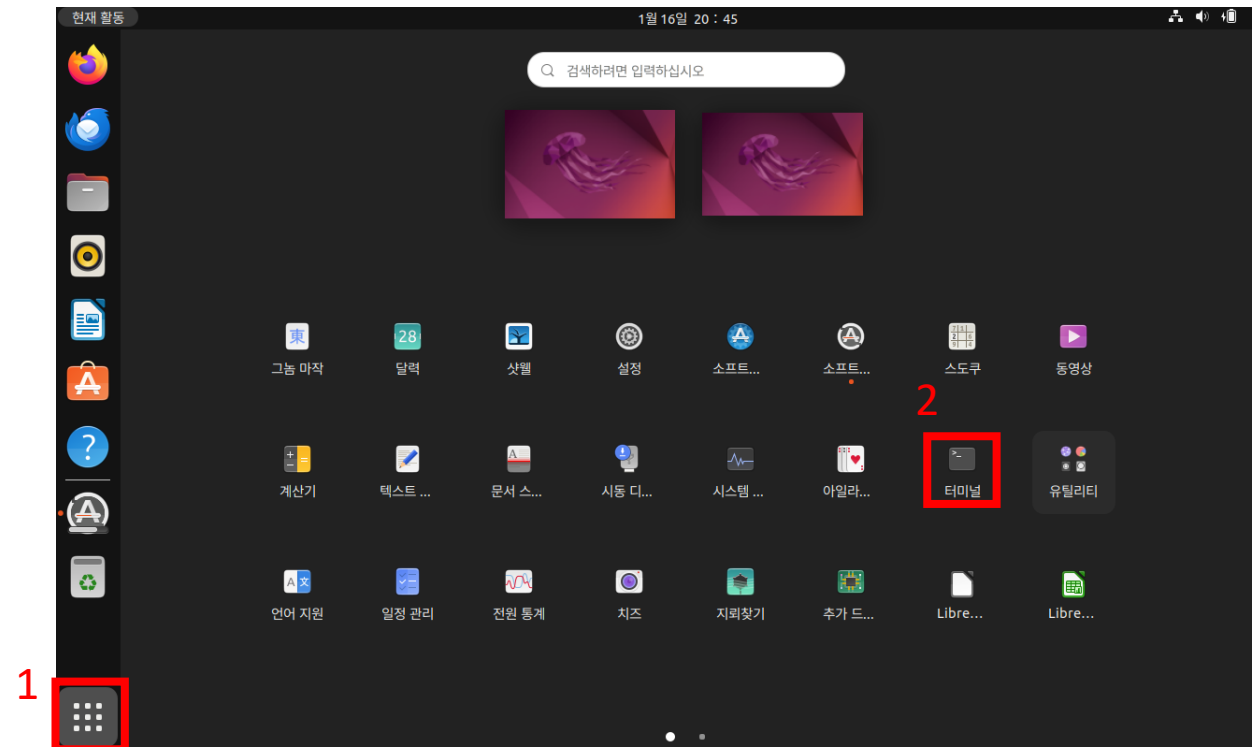
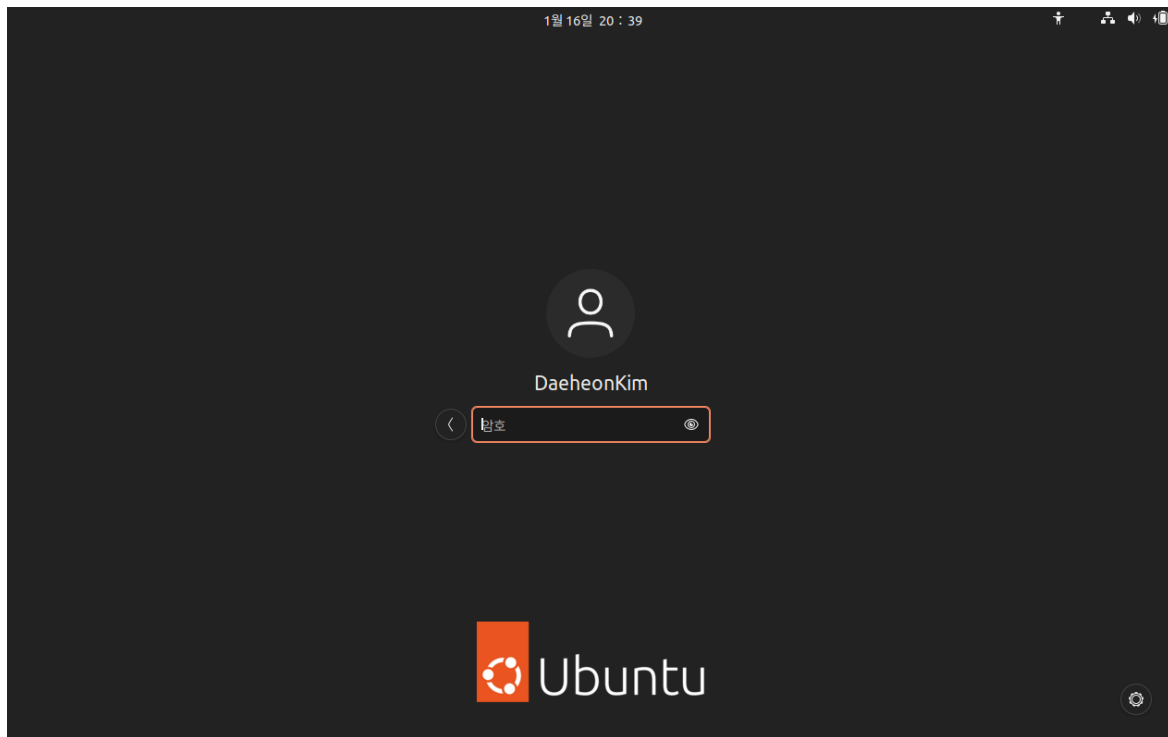
여기서 설정한 이름 및 암호가 우분투 사용자 이름 및 암호



# 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
```

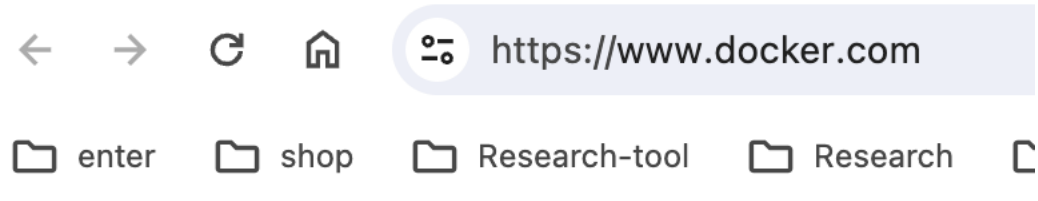
```
sudo apt-get install vim
```

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

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

# Docker 설치

1



Products ^

## Product Offerings

Docker Personal

Docker Pro

## Features

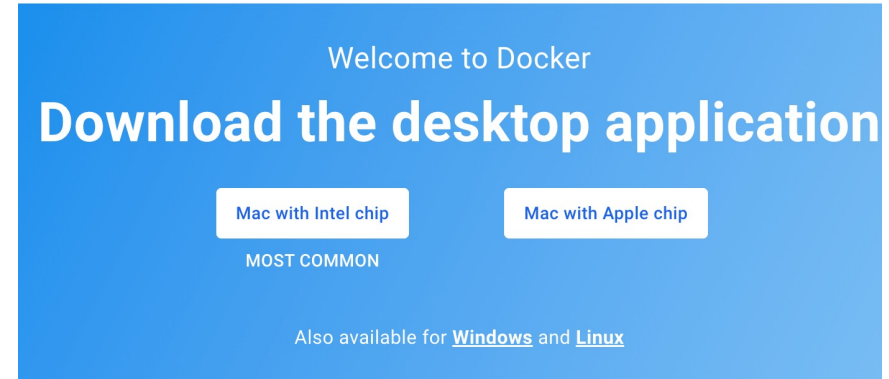
Secure Softw

Container Ru

클릭

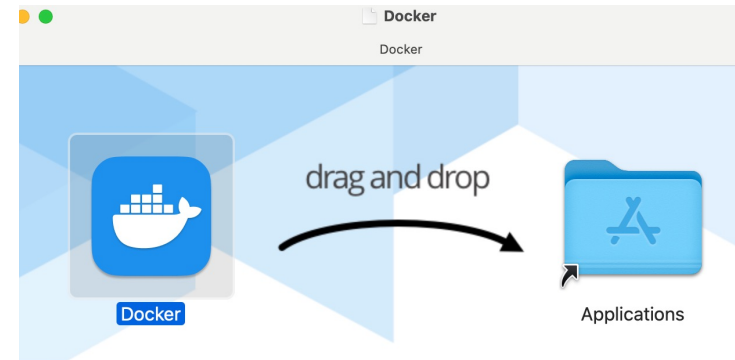
2

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/#/>

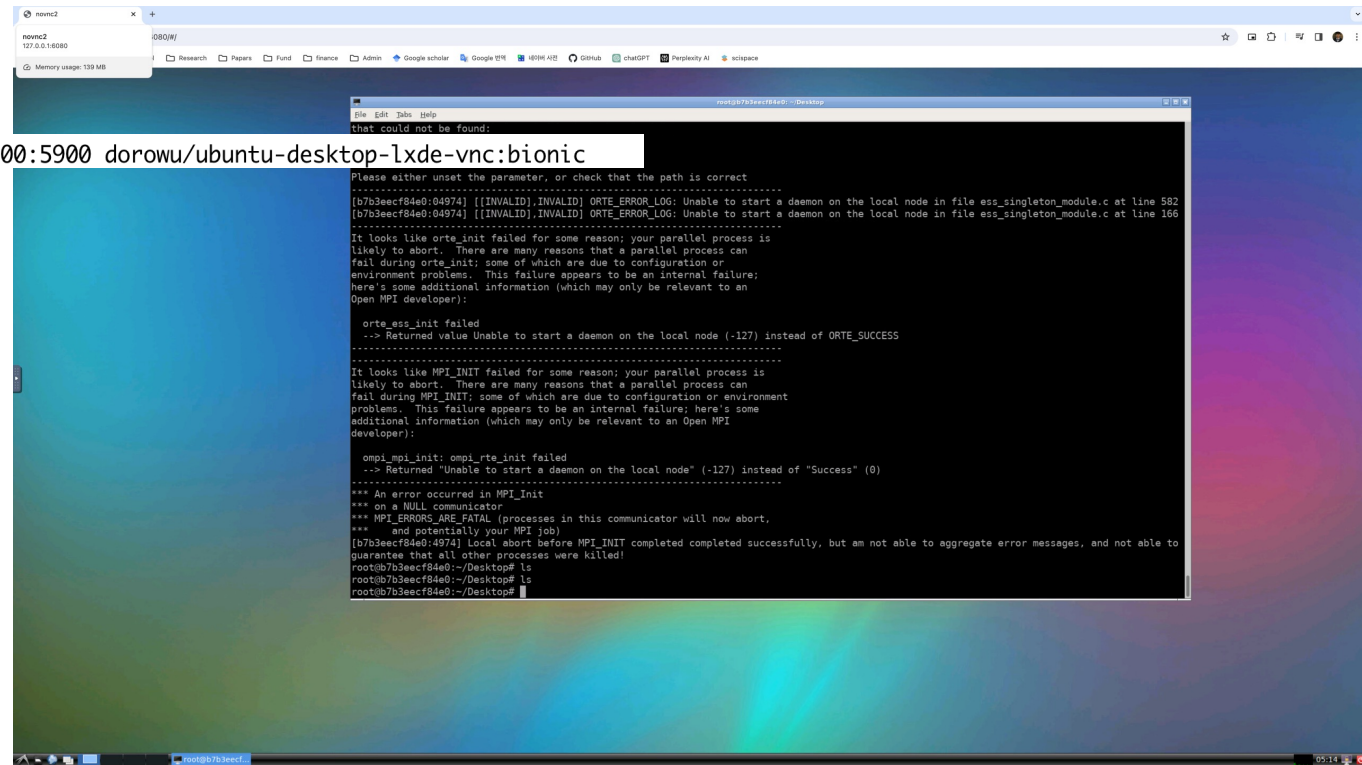
```
dshin@Dongbins-Mac-Studio ~ % sudo docker run --name ubvnc -p 6080:80 -p 5900:5900 dorowu/ubuntu-desktop-lxde-vnc:bionic
```

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
```