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)

<u>https://ubuntu.com/download/desktop</u> 아래 버튼 클릭 후 Ubuntu iso 파일 설치

Ubuntu 22.04.3 LTS

The latest <u>LTS</u> 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

1

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.

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

설치 완료 후 실행, 새로 만들기 클릭 2

I Y E7 VirtualBox 7.0.12 platform packages

- ➡Windows hosts
- ➡macOS / Intel hosts
- Linux distributions
- ➡Solaris hosts

1

Solaris 11 IPS hosts



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

3

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

가상 머신 만들기	1	? ×	🜍 가상 머신 만들기			? ×	
	가상 머신 이름과 운영 체제 색각상 머신을 나타내는 이름과 저장할 대상 폴더를 선택하십시오, 입력한 이름은 VitualBox에서 가상 머식별하는 데 사용됩니다. 게스트 운영 체제를 설치할 때 사용할 ISO 이미지를 추가로 선택할 수 있습니다. 이름(N): Ubuntukdh 폴더(F): C:\Users\Users\Users\Users\VMS ISO 이미지(): C:\Users\U	신을		무인 게스트 OS 설치 사용자 이름, 암호, 호스트 이름을 수정하여 게스트 문 게스트 확장 설치를 활성화할 수 있습니다. Microsoft V 입력할 수 있습니다. 사용자 이름과 암호 사용자 이름(S): Kdh 암호(W): ●●●●●●●●●●●●●●●●●●●●●●● 암호 확인(R): ●●●●●●●●●●●●●●●●●●●●●●●●●●●●●●●●●●●●	영 체제 무인 설치를 설정할 수 있습니다. 추가로 Windows 게스트를 설치하는 경우에는 제품 키를 추가 옵션 제품 키(P): #####-#####-##### 호스트 이름(M): Ubuntukdh 도메인 이름(D): myguest, virtualbox,org U 백그라문드에서 설치(I)	<pre>/// *******</pre>	
도움말(H)	전문가 모드(E) 이전(B) 다음(N)	취소(C)	도움말(H)		이전(B) 다음(N)	취소(C)	

할당할 메모리 및 cpu 개수 설정

5

6 디스크 할당 (25GB 추천)



8

설정 확인 후 완료 클릭

7

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

🞲 가장 머신 만들기 ? X 요약 아래 표는 새 가상 머신에 사용할 설정 요약입니다. 설정이 적합하면 완료를 눌러서 가상 머신을 생성하십시오, 설정이 적합하지 않으면 뒤로 이동하여 설정을 변경할 수 있습니다. 로마신 이름과 운영 체제 종류 머신 이름 Ubuntukdh 머신 폴더 C:/Users/KDH/VirtualBox VMs/Ubuntukdh ISO 010171 C:/Users/KDH/Downloads/ubuntu-22.04.3-desktop-amd64.iso 게스트 운영 체제 종류 Ubuntu (64-bit) 무인 설치 건너뛰기 false 무인 설치 사용자 이름 kdh 제품 키 false. Ubuntukdh, myguest, virtualbox, org 호스트 이름/도메인 이름 백그라운드에서 설치 false 게스트 확장 설치 false 하드웨어 길본 메모리 4096 도움말(H) 이전(B) 완료(F) 취소(C)

Ubuntu (safe graphics) OEM install (for manufacturers) Test memory	
OEM install (for manufacturers) Test memory	
Test memory	

GNU GRUB version 2.06

Use the T and ↓ keys to select which entry is highlighted. Press enter to boot the selected OS, 'e' to edit the commands before booting or 'c' for a command-line. The highlighted entry will be executed automatically in 27s.

언어는 희망하는 언어 지정 이후 Ubuntu 설치 클릭

9

10 지정된 키보드 설정 후 계속하기 클릭



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



13 다음 메시지가 나오는데, 계속하기 클릭

14이후 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

	Jan 16 20:23		∴ 4) 4Î
	설치		
당신은 누구십니까?			
이름:	DaeheonKim	0	
컴퓨터 이름:	Ubuntukdh 📀		
	다른 컴퓨터에서 보여지는 이름		
사용자 이름 선택:	kdh 🖉		
암호 선택:) • • • • • • • • • • • • • • • • • • •		
암호 확인:	••••••		
	○ 자동으로 로그인		
	로그인할 때 암호 입력		
	·····································		
	나눔 전세에서 또매한 및 거나 제구 사항을 합격합니다.		
		뒤로(B) 계속하기	

바뀐 점을 디스크에 쓰시겠습니까?		×
녜속하시면 아래의 바뀐 사항을 디스크에 씁니다. 계속하지 않으시면 나중에	수동으로 설정을 바꿀 수 있습	하니다.
나음 장치의 파티션 테이블이 바뀌었습니다: 5CSI3 (0,0,0) (sda)		
사음 파티션을 포맷합니다: SCSI3 (0,0,0) (sda) 장치의 #2 파티션에 있는 ESP SCSI3 (0,0,0) (sda) 장치의 #3 파티션에 있는 ext4		
	뒤로 가기 계속하	21

15리부트 이후 다음 화면이 제대로 나오면 설치 완료14 에서 설정한 비밀번호 입력

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



 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.

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 sys tem. E: /var/lib/apt/lists/ 디렉터리를 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 시작 하십시오.



Ubuntu 환경에서 Quantum espresso 설치

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

1



자신에 맞는 시스템 버전 다운로드



Ubuntu gui 버전 설치

Windows: powershall에서 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