**Quantum Espresso Install Guide**

본 문서는 Quantum Espresso를 설치하는 과정을 상세하게 다룬다. 리눅스 운영체제를 기반으로 설치되며, 최신버전의 gcc와 gfortran 컴파일러를 요구할 수 있다.

**1 : 퀀텀 에스프레소 설치**

<https://gitlab.com/QEF/q-e/-/releases> 사이트에서 원하는 버전의 .tar.gz압축파일을 다운로드한다. 본 문서에서는 7.3.1버전을 다운로드 했다.

**: 리눅스 터미널에서 다음 명령어를 통해 다운로드**  
wget https://gitlab.com/QEF/q-e/-/archive/qe-7.3.1/q-e-qe-7.3.1.tar.gz

**: 압축 해제**tar -xzvf q-e-qe-7.3.1.tar.gz

설치 소스 파일들을 다운로드 받았다. 이제 실제 컴파일 과정을 통해 실제 실행파일로 만들어보자.

**: gcc 컴파일을 위한 configuration 설정**cd q-e-qe-7.3.1  
./configure --prefix=/usr/local

**: make 컴파일**make all

컴파일 과정이 완료가 되면 잘 실행파일이 생성되었는지 확인해보자

**: 실행파일들 체크**cd bin

\*\*.x라는 프로그램들이 여러 개 생성되어 있으면 성공이다.  
텍스트, 스크린샷, 폰트이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.

실행파일들이 원활하게 잘 설치된 것을 확인했다면, pw.x를 예시로 실행해보자

**: pw.x 실행**  
./pw.x  
텍스트, 스크린샷, 폰트, 소프트웨어이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.

잘 돌아가는 것을 확인했다. bin폴더에 가서 ./pw.x를 실행하면 된다. 이 경우 환경변수가 정의되지 않아, 직접 그 폴더에 들어가서 프로그램을 실행시켜야하는 경우이므로, 어느 디렉터리에서 실행하던 pw.x라는 명령어를 찾을 수 있게 quantum espresso의 실행파일들이 모여있는bin폴더를 환경변수 경로에 추가해두자.

**: (option) 환경변수 경로 추가**  
vi ~/.bashrc  
<다음을 추가>  
export PATH={quantumespresso 디렉터리}/bin:$PATH  
export LD\_LIBRARY\_PATH=/usr/lib:$LD\_LIBRARY\_PATH  
:wq  
source ~/.bashrc

**Solution**

Quantum espresso 컴파일 과정에서 문제가 생길 수 있다. Gcc 버전이 낮으면 생기는 문제이다. 먼저 현재 내 시스템의 gcc버전을 확인해보자.

**: gcc 버전 확인**  
gcc --version

만약 버전 4와 같이 낮은 버전이 출력된다면, 업데이트가 필요하다. 이때 gfortran도 동시에 업데이트를 해주면 좋다. 본 문서에서는 11버전으로 업그레이드하는 방법을 설명한다.

Centos 버전에 따라 기본 제공되는 최신 gcc버전이 낮을 수 있다. 이런 경우, devtoolset의 최신 gcc패키지를 다운받아 적용하면 된다.

**# yum / dnf등의 패키지 매니저가 잘 작동하는 경우**

yum install centos-release-scl  
yum install devtoolset-11  
scl enable devtoolset-11 bash  
gcc --version

위 네줄이면 끝난다.

이후 다시 quantum espresso 폴더로 들어가서 ./configure및 make를 진행하자.

**# yum / dnf 등의 패키지 매니저가 잘 작동하지 않는 경우**

wget --no-check-certificate <https://buildlogs.centos.org/centos/7/extras/x86_64/centos-release-scl-rh-2-3.el7.centos.noarch.rpm>

sudo rpm -ivh centos-release-scl-rh-2-3.el7.centos.noarch.rpm

mkdir temp\_devtool

cd temp\_devtool

wget --no-check-certificate https://buildlogs.centos.org/centos/7/sclo/x86\_64/rh/Packages/d/devtoolset-11-gcc-11.2.1-9.el7.x86\_64.rpm

wget --no-check-certificate https://buildlogs.centos.org/centos/7/sclo/x86\_64/rh/Packages/d/devtoolset-11-gcc-c++-11.2.1-9.el7.x86\_64.rpm

wget --no-check-certificate https://buildlogs.centos.org/centos/7/sclo/x86\_64/rh/Packages/d/devtoolset-11-libstdc++-devel-11.2.1-9.el7.x86\_64.rpm

wget --no-check-certificate https://buildlogs.centos.org/centos/7/sclo/x86\_64/rh/Packages/d/devtoolset-11-runtime-11.1-2.el7.x86\_64.rpm

wget --no-check-certificate <https://buildlogs.centos.org/centos/7/sclo/x86_64/rh/Packages/d/devtoolset-11-binutils-2.36.1-1.el7.x86_64.rpm>

sudo rpm -Uvh devtoolset-11-\*.rpm

sudo scl enable devtoolset-11 bash

mkdir gfortran

cd gfortran

wget --no-check-certificate https://buildlogs.centos.org/centos/7/sclo/x86\_64/rh/Packages/d/devtoolset-11-gcc-gfortran-11.2.1-9.el7.x86\_64.rpm

wget --no-check-certificate https://buildlogs.centos.org/centos/7/sclo/x86\_64/rh/Packages/d/devtoolset-11-libquadmath-devel-11.2.1-9.el7.x86\_64.rpm

wget <ftp://ftp.icm.edu.pl/vol/rzm7/linux-centos-vault/7.6.1810/cr/x86_64/Packages/libgfortran5-8.3.1-2.1.1.el7.x86_64.rpm>

sudo rpm -Uvh \*.rpm

sudo scl enable devtoolset-11 bash

위 코드를 전부 실행해주면 된다. 만약 rpm 설치중 추가 의존성 문제로 에러가 발생한다면, 인터넷에서 devtoolset관련한 해당 버전의 의존성 파일을 찾아 wget해준뒤에 같이 rpm설치 해줘야한다.

이후 다시 quantum espresso 폴더로 들어가서 ./configure및 make를 진행하자.