**Quantum Espresso 실행관련 이슈**

**Quantum Espresso 인풋파일 작성시 주의사항 1 :**

&로 시작하는 Block이외의 Atomic Species와 같은 일반 블록의 경우 블록간의 구분을 띄워쓰기 이외의 문자로 일체 하지 아니한다. &로 시작하는 Block이 /으로 서로를 구분한다고 하더라도, ATOMIC\_SPECIES와 같은 일반블록은 띄워쓰기로 구분한다. /로 구분시 오류가 생김.

Quantum Espresso 실행시 CRASH경우 – 1

텍스트, 스크린샷, 폰트이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.

이와 같은 CRASH발생시에는 초기구조가 대칭적이지 않아서 발생할 수 있다. 이경우 &SYSTEM블록의 nosym 옵션을 .TRUE.로 해주면 해결될 수 있다. nosym = .TRUE.를 설정하면 결정의 대칭성을 무시하고 입력된 k-점을 그대로 사용하며, 전자 밀도 또한 대칭화되지 않습니다. Monkhorst-Pack k-점 격자의 경우, 전체 브릴루앙 존(BZ)을 채우도록 확장되며, 기본적으로 시간 반전 대칭을 가정하지만 noinv = .true.를 추가하면 이를 비활성화할 수 있습니다.

이 옵션은 낮은 대칭성을 가진 큰 셀, 분자동역학(MD) 시뮬레이션, 고립 원자 계산에서 유용하지만, 잘못 사용하면 불필요한 중복 계산이 발생할 수 있으므로 신중하게 적용해야 합니다. 만약 셀이 비대칭적인 구조(예: 표면, 계면, 무질서한 구조 등)를 가진다면, 대칭을 제거하는 것이 유용할 수 있습니다.텍스트, 스크린샷, 디스플레이, 번호이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다. 슬래브 모델에서는 일반적으로 `nosym = .TRUE.`를 사용하는 것이 적절합니다. 표면과 진공 층이 포함된 구조에서는 벌크처럼 완전한 대칭성이 성립하지 않으며, 대칭을 유지하면 표면 재구성이나 흡착체 효과가 정확히 반영되지 않을 수 있습니다. 또한, `nosym = .FALSE.`를 설정하면 k-포인트가 자동으로 축소될 수 있어, 의도한 계산이 왜곡될 가능성이 있습니다.

특히, 흡착 분자가 있는 경우 `nosym = .TRUE.`는 필수적입니다. 대칭이 적용되면 흡착 분자의 상대적인 위치가 강제로 맞춰질 가능성이 있어, 실제 표면 상호작용을 제대로 반영하지 못할 수 있습니다. 따라서 흡착 에너지, 표면 반응, 계면 물성 연구에서는 `nosym = .TRUE.`를 설정하는 것이 일반적입니다.

다만, 두꺼운 슬래브처럼 벌크에 가까운 경우에는 대칭을 유지하는 것이 유리할 수도 있습니다. `nosym = .TRUE.`를 사용하면 불필요한 k-포인트가 포함될 가능성이 있어 계산 비용이 증가할 수 있으므로, 특정 상황에서는 `nosym = .FALSE.`를 유지하는 것이 더 효율적일 수도 있습니다.

**No Sym 옵션과 시간복잡도**

동일한 설정

시스템 설명 : Zn 101 Plane 2x2x4

&CONTROL 핵심 변수

tprnfor = .true.

tstress = .true.

verbosity = 'high'

etot\_conv\_thr = 1.0e-5

forc\_conv\_thr = 5.0e-4

max\_seconds = 1.72800e+05

nstep = 100

&SYSTEM 핵심변수

ibrav = 0

nat = 32

ntyp = 1

ecutwfc = 30.0

ecutrho = 120.0

occupations = 'smearing'

smearing = 'mv'

degauss = 0.02

&ELECTRON 핵심변수

conv\_thr = 7.35e-7

electron\_maxstep = 200

mixing\_beta = 0.7

diagonalization = 'david'

startingwfc = "atomic+random"

startingpot = "atomic"

&IONS : ion\_dynamics = bfgs

&CELL : cell\_dofree = “all”

PP : Zn\_pbe\_v1.uspp.F.UPF (SSSP efficiency)

Fixatom : 상부 2층만 xyz모두 자유, 나머지 하부층 fix

실험 대상 시스템 : Zn101 Plane 2x2x4 (32atom); Zn100 Plane 2x2x4 (32atoms) ;

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Nosym | Zn101 | Zn100 |
| False | 5h15m CPU 5h18m WALL | 2h11m CPU 2h12m WALL |
| True | 2h50m CPU 2h52m WALL | 2h13m CPU 2h14m WALL |

결과를 해석하면, nosym설정을 했을 때 101 Plane의 경우 시간이 대폭 감소한 것을 볼 수 있다. 101의 경우 Nosym 설정이 적절한 시스템인것으로 보인다. 하지만 100plane의 경우에는 크게 계산시간이 감소하지 않은것으로 보아 sym설정이 잘맞는 특정 시스템에서 빠른 계산시간을 보장해주는것같다.

**relax 계산에서만 사용하는 항목**

relax 계산은 원자의 위치를 최적화하는 계산이므로, 원자 위치 및 셀을 조정하는 옵션이 포함된다. 아래 옵션들은 relax에서만 사용되며, scf 계산에서는 필요 없다:

(1) &CONTROL 섹션

forc\_conv\_thr = 5.0e-4 → 힘의 수렴 기준 (힘이 이 값보다 작아질 때까지 최적화)

etot\_conv\_thr = 1.0e-5 → 총 에너지 수렴 기준

nstep = 100 → 최대 반복 횟수 (원자 위치 최적화 반복)

(2) &IONS 섹션

ion\_dynamics = "bfgs" → 원자 위치 최적화 방법 (BFGS 알고리즘)

scf 계산에서는 원자 위치를 고정하므로, &IONS 섹션 자체가 필요 없음.

(3) &CELL 섹션

cell\_dofree = 'all' → 셀 최적화 (relax에서는 필요하지만, scf에서는 필요 없음)

**수렴여부 판단 방법**

텍스트, 스크린샷, 폰트, 번호이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.

.out파일에 기록되는 로그중에서 매 epoch마다 출력되는 Energy error와 Gradient error를 통해 설정한 etot\_conv\_thr과 forc\_conv\_thr이 얼마나 만족되었는지를 확인할 수 있다. 두 조건이 모두 만족되면 epoch는 종료되고 계산이 끝난다.

**Question : ecutwfc, ecutrho는 수렴 때문에 지정하는 것이다??**

**Question : 한 CPU 클러스터 노드에서 두개의 계산을 동시에 돌리면 느려진다??**

**Question : SCF iteration은 증가할수록 빨라진다??**

**Question : 흡착 relax시 1층만 고정하면 흡착이 제대로 이루어지지 않는다??**

**Question : Relax시에 Kpoint는 크게 상관없다? SCF시에 만 중요하다?**

**Question : SCF에서 가장 중요한 건?**

k-point와 수렴 조건(conv\_thr)이 에너지 정확도에 더 큰 영향

**Question : dE0 is positive 오류는 왜?**

**Question : DFT수렴성 테스트의 수렴 기준**

DFT 수렴성 테스트에서는 ecutwfc, k-point mesh 등 각 파라미터를 점진적으로 증가시키면서 최종 total energy나 에너지 per atom의 변화를 관찰합니다. 일반적으로, 에너지 변화가 약 1 meV/atom, 즉 약 0.001 eV/atom 이하가 되면 해당 파라미터 값이 수렴되었다고 판단하며, Quantum ESPRESSO에서는 이 값이 약 1×10⁻⁴ Ry/atom 정도로 적용됩니다.

그러나 QE의 total energy는 계산 셀 내 모든 원자들의 에너지 총합이므로, 만약 수렴 기준을 total energy 단위로 비교한다면, per-atom 기준에 셀 내 원자수를 곱해주어야 합니다. 예를 들어, 100원자 시스템의 경우 1×10⁻⁴ Ry/atom 기준은 1×10⁻² Ry의 총 에너지 변화가 수렴 기준이 될 수 있습니다. 많은 연구자들은 서로 다른 시스템 크기에서도 비교하기 쉽도록 per-atom 단위로 수렴 여부를 판단합니다.

요약하면, DFT 계산에서 수렴성 테스트는 각 파라미터를 변화시키며 에너지 per atom의 변화가 매우 작아지는 지점을 찾는 것이 핵심이며, QE에서는 대략 1×10⁻⁴ Ry/atom 이하로 수렴되면 안정적이라고 봅니다. 하지만 total energy 자체는 셀 내 모든 원자 에너지의 합이므로, 실제 비교할 때는 원자 수에 따라 스케일을 조정해야 합니다. 이 방식은 계산 정확도를 유지하면서도 효율적인 파라미터 선택을 가능하게 합니다.

**CPU 시간에 영향을 주는 요소**

https://pranabdas.github.io/espresso/hands-on/convergence텍스트, 스크린샷, 폰트, 대수학이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.

**libopenblas.so.0오류**

문제의 원인은 LD\_LIBRARY\_PATH상에 해당 라이브러리를 찾지 못해서이다. 따라서 직접 다운받아 넣어야한다. 간혹 특정 노드만 가지고 있고 나머지 노드는 /usr/lib64에 이 라이브러리가 없을 수 있다. 그럴떈 있는 노드에서 scp로 쏴주면 된다.

scp /usr/lib64/libopenblas.so.0 ga01:/usr/lib64/

**Defect가 있는 MOF**

Defect가 있는 MOF는 QE로 계산시 수렴을 잘 하지 않는 문제가 있다. Mixing-beta를 0.4~0.2로 조절하고, 그래도 수렴이 안되어서 결정 초기 원자 배치들도 조절해봤지만 그래도 수렴하지 않았다. 한번의 SCF계산조차 수렴하지 않아 대책이 요구된다.

**QE계산 Relaxation**꿀팁 – 낮은 Kpoint와 conv\_thr에서 시작해서 어느정도 수렴이 되면 KPOint와 ConvThr을 높여 다시 시작하기

다만 설정을 바꾸는 시점에 에너지 차이가 크게 달라지니 유념하자ㅣ