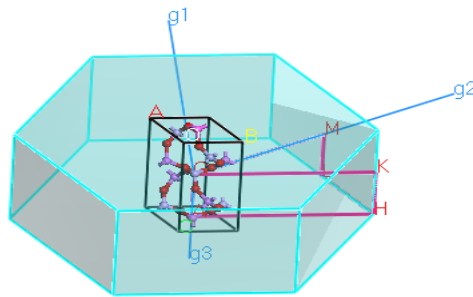


第一性原理计算，结构优化和收敛测试先做哪一个，为什么？

众所周知，能量越低越稳定。结构优化就是找到势能函数在附近的极小值，极值点对应的结构就是目标结构。

KPOINTS 是倒空间（动量空间）的基本构成点，只取在一个倒空间晶格向量的范围内来描述 KPOINTS。总能量计算是对布里渊区内的波函数进行积分，而积分是通过对部分特殊 K 点的求和完成的。



平面波是描述电子运动状态的函数。平面波函数即为平面波赝势方法中的基组 (Basis set)，基组的大小即为用于展开的价电子波函数的平面波个数。实际上选取的基函数就相当于选取了一定的动能的平面波，能量越低的平面波基函数在物理上越重要。截断能 (ENCUT) 决定了包含平面波函数动能的极限，平面波的个数直接关系到计算的精度。



因此，基于科研的完整性和严谨性，在对体系进行结构优化之前，有必要找到最优的 KPOINTS 和 ENCUT 值，在保证计算精度的同时还可以大幅度节约计算资源。通常的做法是先取一个比较大的 KPOINTS，这样保证 k 点是足够的，然后保持 k 点不变，对 ENCUT 值做测试。

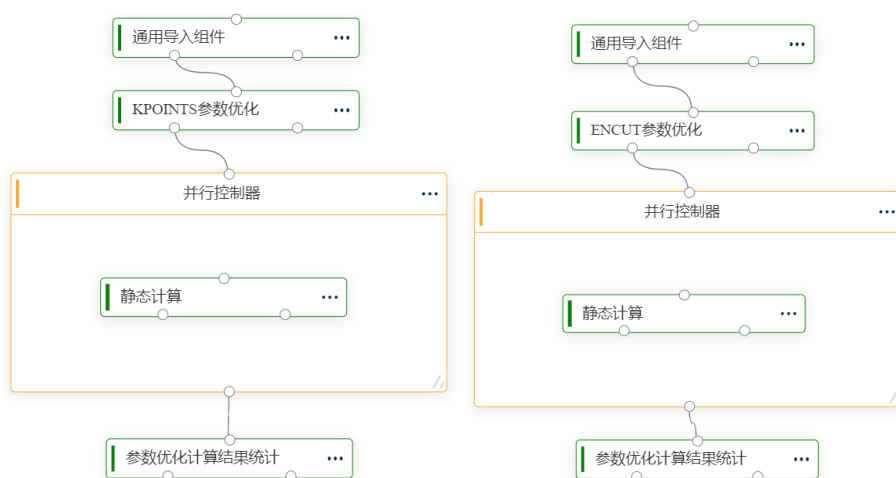
之前我们分享过【精度与成本平衡之道——K 点收敛性测试/截断能收敛性测试】软文，让初学者更轻易地了解计算的参数选取规则，做到心中有“数”，并得到了初学者的好评。

(链接之前的推文)

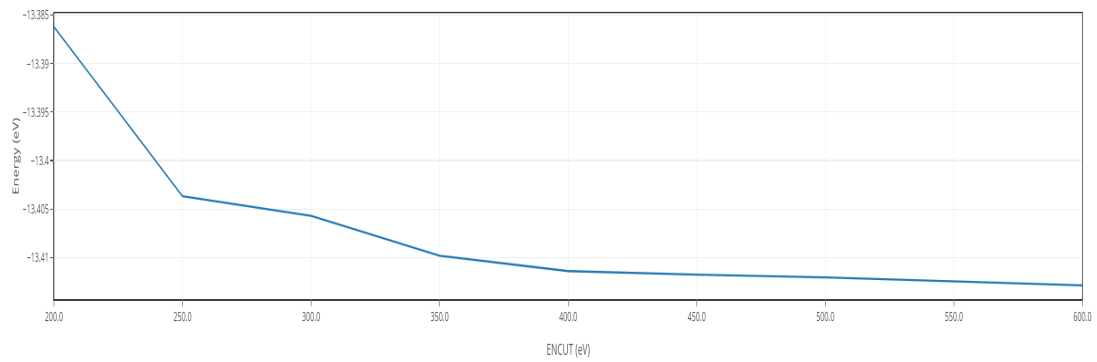
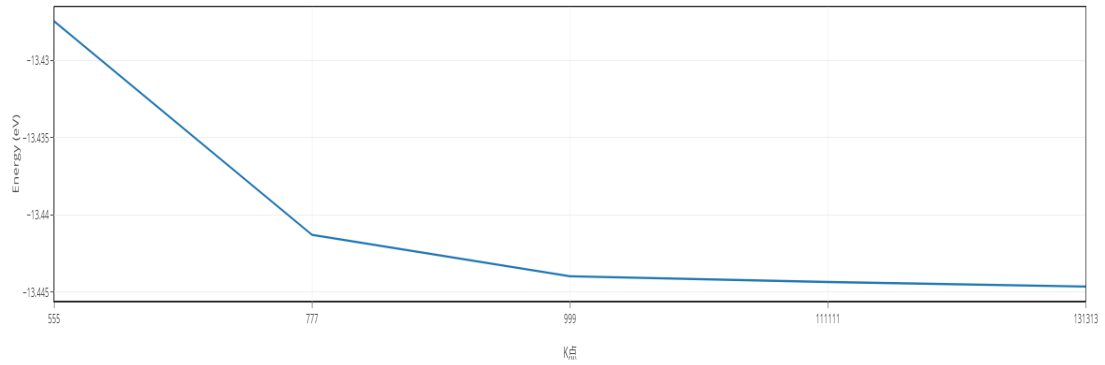


在大家掌握计算的参数选取规则后，今天教大家如何进行参数收敛性测试，让大家学以致用。

- 传统收敛性方法为：对体系设定不同的 KPOINTS/ENCUT 值，看体系能量随 KPOINTS/ENCUT 的变化，能量变化满足 1meV/atom 就足够了。因此需要设定 N 个不同的 KPOINTS/ENCUT，提交 N 次作业。
- MatCloud+ 将其繁琐、重复的收敛性测试步骤开发为高通量、自动化的 workflow 模板——【KPOINTS 参数优化】和【ENCUT 参数优化】。1 次作业即可快速帮助用户完成 N 多任务计算，以此确定体系的合理 KPOINTS/ENCUT 参数。



【KPOINTS/ENCUT 参数优化】组件中设置参数的最小值、最大值及间隔值，计算完成后，MatCloud+ 会将直接展示可视化的收敛性测试结果，方便用户直接读取数据。



严格来说，能量变化值满足 $1\text{meV}/\text{atom}$ 为 KPOINT/ENCUT 的选取值。一般的话，通过收敛性曲线图，我们选取曲线平滑处的值即可作为 KPOINT/ENCUT 值。

总结：

对于科研的完整性和严谨性，进行第一性原理计算时，收敛测试是优先于结构优化的。基于 MatCloud+ 平台的可视化界面，流程化操作，一个 workflow 即可完成 n 次重复的参数收敛性测试工作，“0” 计算基础也可轻松上手。

更多 Matcloud+ 教程可关注 **b 站迈高科技**。

更多动态请关注**迈高科技**微信公众号

