TODO：整合到READMD中

#可结合后面的例子阅读指南

目前的适用范围：

1. 适用于一个固定体系(slab)中有一个活跃的小基团(ads)的能量学习预测

2. 目前只能跟踪一个ads的位置变化进行能量学习预测

3. 需要指定一个ads的中心位置，可以通过设置ads中的元素来自动求得中心位置

功能：

学习ads与slab的结合能随着ads位置变化的规律，进而预测将ads放在slab上任意一个位置的结合能

输入

1. 提供slab+ads的坐标能量数据，以及slab上没有ads的能量数据，用于得到ads和slab的结合能，或者直接提供结合能

2. 输入目标原子的位置，目前支持根据ads原子种类定位，不支持ads与slab有相同原子的情况

关于周期性：

给出Tensor Box，是一个3x3的，比如要在x方向重复，就把第一个x y z乘以-1 -2 1 2加到每一个坐标中。如果是y方向重复就是第二个x y z

例子：

1. 给一个Cu和Pt掺杂的slab，一共三个slab，Cu和Pt掺杂的比例不同

2. 都在这三个slab上计算OH的吸附能，于是需要提供OH在slab上不同位置的吸附能，可以用相应的slab+OH的VASP文件夹用以提取结构和能量，然后给出一个slab稳定的能量，用于程序自动相减得到吸附能（也可自行提取结合能，但是需要VASP每一步的迭代，不推荐）

3. 选择监测点，可以选择O元素或者OH两种元素，前者会使用所有O的坐标的均值作为中心店，后者则使用所有O和H元素坐标的均值，比如OH作为吸附质，只有一个O和一个H，使用O元素则会指定O的位置，使用O和H元素则会指定OH的坐标平均值，也就是OH键中心的位置。