

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

第一原理计算软件简介与应用

北京市计算中心 云平台事业部 姜骏

E-mail: jiangjun@bcc.ac.cn

北京科技大学 理化楼-308

2023.07.12

Outline

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

1 第一原理计算软件简介

2 VASP 算例与 WIEN2k 算例

3 光学性质计算

■ 载流子与 Lorentz-Drude 模型

4 简单磁性计算

5 遗传算法与结构预测

6 复杂磁性结构

材料计算软件发展现状

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构



国产第一原理计算软件现状

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

Xian-CI



XMVB

BNU-CI



BDF

Beijing Density Functional Program Package

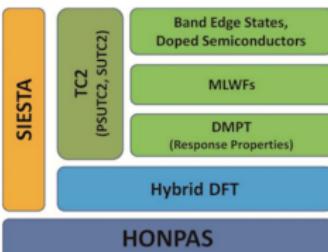


M@MAP

Molecular Material Property Prediction Package



PWMat



An Efficient Structure Prediction
Method and Computer Software

LSASP Large-scale atomic simulation package

VASP 软件的特点

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

VASP 软件是维也纳大学 (Universität Wien) G. Kresse 等开发的第一原理模拟软件包

- VASP 采用 PAW (Projector Augmented-Wave) 方法^[1]，平衡了赝势方法和全电子计算优点，兼顾了计算的精度和效率
- VASP 在实空间优化投影函数 (Projector)，将主要的计算过程变换到实空间完成，大大节省了内存的开销
- VASP 通过引入多样的优化算法，提高了矩阵对角化和电荷密度搜索的效率
- 在 VASP 的并行计算中，有效均衡了各节点处理 FFT 变换负载和通信，提升了软件的并行效率

相比于其他第一原理计算软件，VASP 从物理思想与方法、优化算法和并行计算实现等多个方面都有更为出色的性能

VASP 的开发团队

The VASP team



o. Univ. Prof. Dr. Georg Kresse



Dr. Doris Vogtenhuber



Dr. Martijn Marsman



Dr. Merzuk Kaltak



Dr. Ferenc Karsai



Dr. Martin Schlipf

Fig.: The development team of VASP.

VASP 的优化与迭代收敛

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算
遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

VASP 计算中，资源消耗的主要部分是求解 Kohn-Sham 方程，即偏微分方程 (Partial Differential Equations, PDE) 的自洽迭代，迭代过程主要包括

- 矩阵的迭代对角化
- 电荷密度的自洽迭代

VASP 的计算高效得益于求解过程中应用了多种经典优化算法，保证了迭代计算的快速收敛

- 拟牛顿法 (Quasi-Newton method)
- 共轭梯度法 (Conjugate Gradients method, CG)
- 残差最小化 (RMM-DIIS) 方法

VASP 的 Kohn-Sham 方程求解流程

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

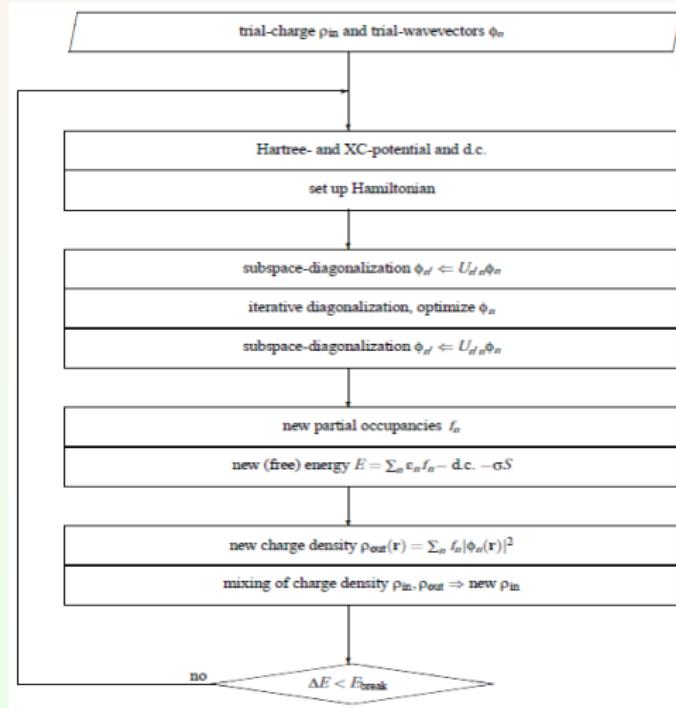


Fig.: The Flow of calculation for the KS-ground states.

VASP 的并行效率

与同类型软件相比，VASP 有着优异的并行能力

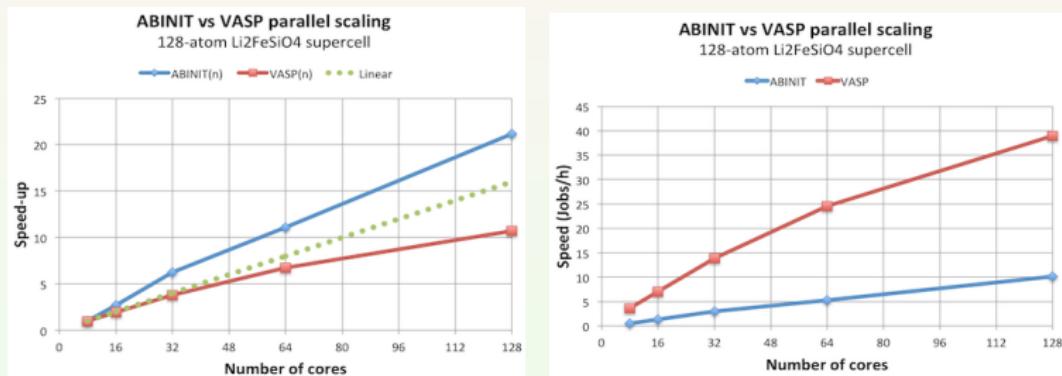


Fig.: The comparison of parallel scaling for ABINIT vs VASP.

- VASP 迭代对角化约束了矩阵的维度，减少了对角化过程中的迭代次数，保证了 MPI 并行的规模和扩展性
- VASP 实施 FFT 变换时，保证各节点上处理的网格负载均衡

VASP 的通信开销

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

在高性能的计算队列中，VASP 的并行上限可以突破 256 核，但当并行核数超过百核数量级，并行效率下降非常明显

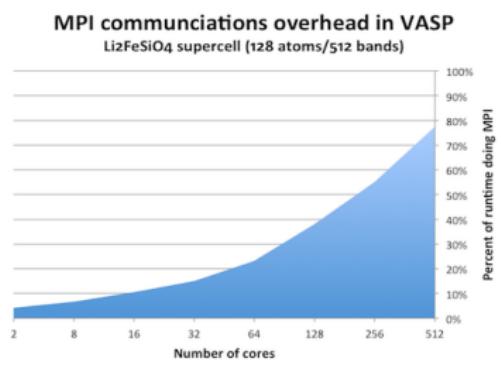


Fig.: Time spent in MPI calls with increasing the number of ranks in a VASP calculation.

如能对并行系统与 VASP 结合作深度改造 (如国家超算天津中心方案)，VASP 的并行扩展可以到 10^4 核级别，但这一改造需要对底层代码和计算框架作较大规模改动

VASP 的 GPU 加速

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

NVIDIA 多年来致力于 VASP 的 GPU 加速，取得了一定的成效

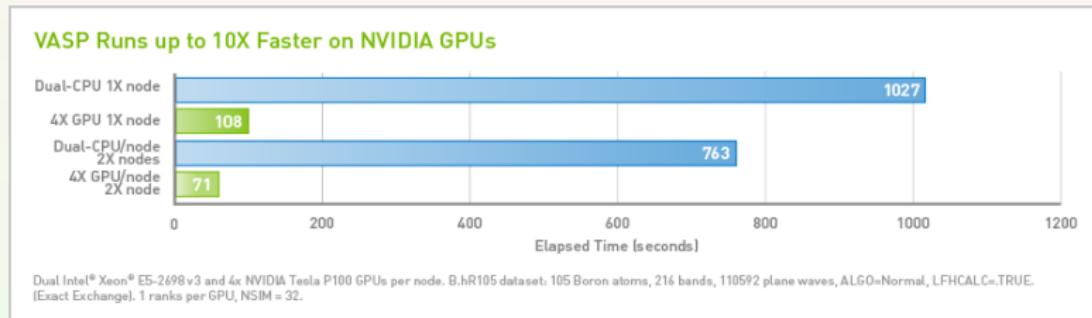


Fig.: Compare of VASP calculation with GPU and CPU.

- 通用配置下，GPU 对 VASP 计算有加速效果，一般可提升 4~6 倍
- 矩阵对角化的并行算法限制了 GPU 在第一原理计算中的应用
- GPU 加速的模式主要适合于分子动力学计算

VASP 软件概要

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算
遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

作为第一性原理计算的商用软件，VASP 已成为计算材料学领域应用最广泛的软件之一。全球绝大多数超算中心都安装了 VASP，据统计，VASP 软件的作业机时占用全球总机时的 12~20%，但由于其属于重型浮点计算密集型应用，实际耗电量占比则高达 30~50%

- **物理上**，VASP 基于 DFT 近似，求解 Kohn-Sham 方程，并将粒子基态密度问题转化为矩阵的本征函数和本征值问题
- **数学上**，方程求解过程的核心是矩阵对角化与 PDE 的自洽迭代，即便对于简单体系，也需要完成数十次的迭代，而规模大的计算模拟体系则可能需要成千上万次迭代计算
- **计算过程中**，VASP 计算的时长开销主要是本征值求解的矩阵对角化；此外由于算法限制，Kohn-Sham 方程作为线性方程组作并行处理时，节点间存在密集的通信。在上千节点，上万计算核的大规模并行系统上，数据通信将严重影响程序的性能，这是当前 VASP 软件的主要瓶颈

WIEN2k 软件简介

第一原理计算
软件简介与应用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算

载流子与
Lorentz-Drude
模型

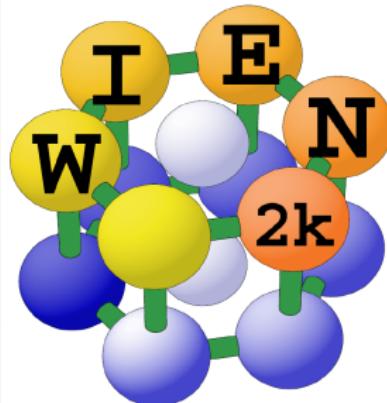
简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构



<http://www.wien2k.at>



WIEN2k 是由奥地利维也纳技术大学 (Vienna University of Technology) 开发的高精度第一原理材料计算软件包^[2]。

- 采用普适的全势 (Full-Potential, FP) 方法
对计算对象的化学环境依赖小
- LAPW 基组
兼备描述波函数邻近原子核和位于原子核间行为的能力
- 计算精度高，结果常作为理论计算的 Benchmark

WIEN2k 软件简介

第一原理计算
软件简介与应用

第一原理计算
软件简介
VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算
遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

制约 WIEN2k 软件应用的主要因素

- 高精度计算必须付出的代价
计算速度慢，处理体系有限
- 各计算模块部分独立
**输入控制文件过多
输出数据文件分散**
- 采用 tcsh 脚本串联各部分
计算中间结果需写入外部存储
I/O 耗时过多
- 软件的并行环境设置拙劣
mpi 并行效率低下
- 编译安装繁琐

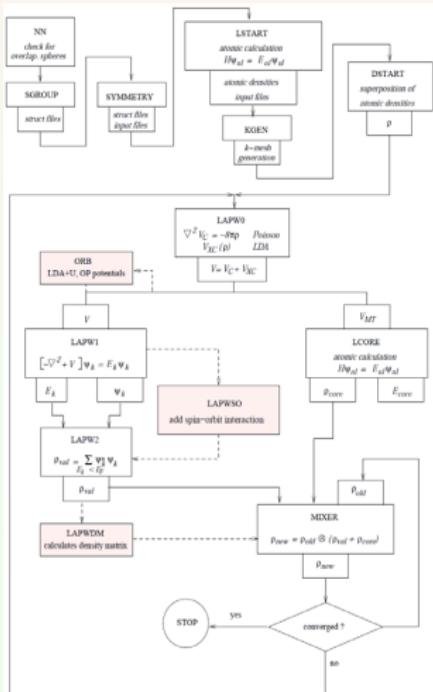
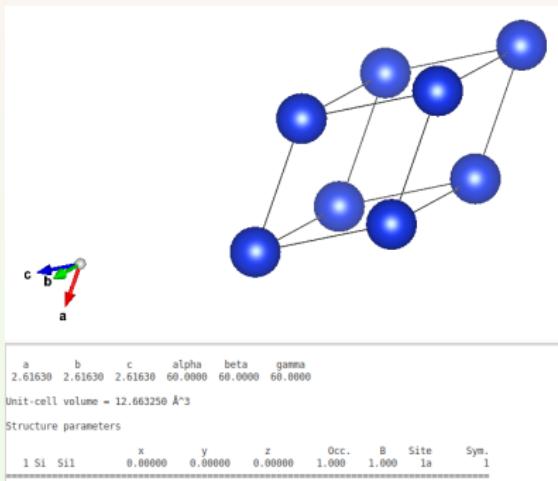


Fig.: Program flow in WIEN2k.

VASP 计算示范: Si



```
cubic      #diamond comment line
3.7        #universal scaling factor
0.5 0.5 0.0 #first Bravais lattice vector
0.0 0.5 0.5 #second Bravais lattice vector
0.5 0.0 0.5 #third Bravais lattice vector
1          #number of atoms per species
direct     #direct or cart (only first letter is significant)
0.0 0.0 0.0 #positions
```

VASP 计算示范: Si

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

```
Automatic mesh
0          # number of k-points = 0 ->automatic generation scheme
Gamma      # generate a Gamma centered grid
10 10 10   # subdivisions N_1, N_2 and N_3 along recipr. l. vectors
0. 0. 0.   # optional shift of the mesh (s_1, s_2, s_3)
```

```
SYSTEM = Si
# electronic degrees
ENCUT = 120
LREAL = A           # real space projection
PREC = Normal      # chose Low only after tests
EDIFF = 1E-5        # do not use default (too large drift)
ISMEAR = -1 ; SIGMA = 0.172 # Fermi smearing: 2000 K 0.086 10-3
ALGO = Very Fast   # recommended for MD (fall back ALGO = Fast)
MAXMIX = 40         # reuse mixer from one MD step to next
NCORE= 4            # one orbital on 4 cores
ISYM = 0             # no symmetry
NELMIN = 4           # minimum 4 steps per time step, avoid breaking after 2 steps
# LREAL = .FALSE.
# MD (do little writing to save disc space)
IBRION = 0 ; NSW = 100 ; NWRITE = 0 ; LCHARG = .FALSE. ; LWAVE = .FALSE.
TEBEG = 2000 ; TEEND = 2000
# canonic (Nose) MD with XDATCAR updated every 50 steps
SMASS = 3 ; NBLOCK = 50 ; POTIM = 1.5
# micro canonical MD with temperature scaling every 50 steps
# good for equilibration but usually better to use Nose thermostat
#SMASS = -1 ; NBLOCK = 50 ; POTIM = 1.5
```

VASP 计算示范: Si

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

```

PAW_PBE Si 05Jan2001
4.0000000000000000
parameters from PSCTR are:
VRHFIN =Si: sZp2
LEXCH = PE
EATOM = 103.0669 eV, 7.5752 Ry

TITEL = PAW_PBE Si 05Jan2001
LULTRA = F use ultrasoft_PP ?
IUNSCHR = 1 unscreen: 0-lin 1-nonlin 2-no
RPACOR = 1.500 partial core radius
POMASS = 28.085; ZVAL = 4.000 mass and valenz
RCORE = 1.900 outmost cutoff radius
RWIGS = 2.480; RWIGS = 1.312 wigner-seitz radius (au A)
ENMAX = 245.345; ENMIN = 184.009 eV
ICORE = 2 local potential
LCOR = T correct aug charges
LPAN = T paw PP
EAUG = 322.069
DEXC = -.007
RMAX = 2.944 core radius for proj-oper
RAUG = 1.300 factor for augmentation sphere
RDEP = 1.993 radius for radial grids
QCUT = -4.246; QCUT = 8.493 optimization parameters

Description
l E TYP RCUT TYP RCUT
0 .000 23 1.900
0 .000 23 1.900
1 .000 23 1.900
1 .000 23 1.900
2 .000 7 1.900

Error from kinetic energy argument (eV)
NDATA = 100
STEP = 20.000 1.050
10.1 9.04 8.56 7.65 7.23 6.44 5.73 5.40
4.79 4.25 4.00 3.54 3.13 2.77 2.45 2.16
1.91 1.69 1.50 1.24 1.10 .975 .812 .718
.636 .529 .440 .388 .322 .266 .219 .180
.148 .121 .986E-01 .804E-01 .614E-01 .504E-01 .392E-01 .328E-01
.265E-01 .220E-01 .189E-01 .166E-01 .149E-01 .135E-01 .123E-01 .109E-01
.977E-02 .840E-02 .707E-02 .605E-02 .488E-02 .387E-02 .290E-02 .229E-02

```

VASP 计算示范: Si

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

```
vasp.5.4.1 05Feb16 (build May 09 2017 15:55:29) complex
executed on           LinuxIFC date 2018.12.15 16:00:28
running on   24 total cores
distrk: each k-point on  24 cores,    1 groups
distr: one band on NCORES_PER_BAND=  1 cores,   24 groups
```

```
INCAR:
POTCAR: PAW_PBE Si 05Jan2001
```

```
W   W   AA   RRRR   N   N II   N   N   GGGG   !!!
W   W   A   A   R   R   NN   N II   NN   N G   G   !!!
W   W   A   A   R   R   NN   N II   NN   N G   G   !!!
W   W   W   AAAAA   RRRR   N   N N II   N   N N G   GGG   !
WW   WW   A   A   R   R   N   NN II   N   NN G   G   !
W   W   A   A   R   R   N   N II   N   N GGGG   !!!
```

```
For optimal performance we recommend to set
NCORE= 4 - approx SQRT( number of cores)
NCORE specifies how many cores store one orbital (NPAR=cpu/NCORE).
This setting can greatly improve the performance of VASP for DFT.
The default, NPAR=number of cores might be grossly inefficient
on modern multi-core architectures or massively parallel machines.
Do your own testing !!!!.
Unfortunately you need to use the default for GW and RPA calculations.
(for HF NCORE is supported but not extensively tested yet)
```

```
POTCAR: PAW_PBE Si 05Jan2001
VRHFIN =Si: s2p2
LEXCH  = PE
EATOM  = 103.0669 eV,    7.5752 Ry
TITEL  = PAW_PBE Si 05Jan2001
LULTRA = F use ultrasoft PP ?
```

VASP 计算示范: Si

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

```
augmentation part      -0.2585119 magnetization
Free energy of the ion-electron system (eV)
-----
alpha Z    PSCENC =      1.69359067
Ewald energy TEWEN =     -122.82983823
-Hartree energ DENC =     -1.28509908
-exchange   EXHF =      0.00000000
-V(xc)+E(xc) XCENC =     -9.57697808
PAW double counting =     32.68155839      -15.06110639
entropy T*S EENTRO =     -0.00386598
eigenvalues EBANDS =      0.73784546
atomic energy EATOM =     103.06077658
Solvation Ediel_sol =     0.00000058

free energy TOTEN =     -4.58311667 eV
energy without entropy = -4.57925068  energy(sigma->0) =     -4.58118367
```

```
average (electrostatic) potential at core
the test charge radil are      0.9892
(the norm of the test charge is      1.0000)
1 -83.7495
```

```
E-fermi : 6.3823    XC(G=0): -9.9470    alpha+bet :-12.0666
```

```
k-point    1 :      0.0000      0.0000      0.0000
band No. band energies      occupation
1        -5.3695      2.00000
2        14.2509      0.00000
3        14.2509      0.00000
4        14.2509      0.00000
5        17.3365      0.00000
```

VASP 计算示范: Si

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

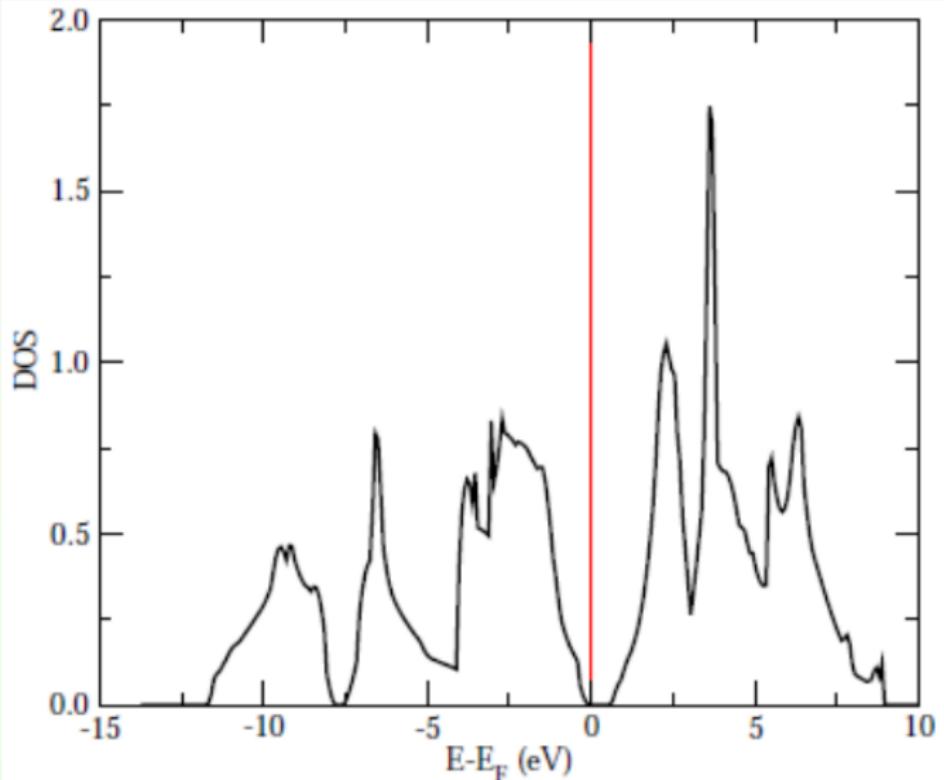
VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构



VASP 计算示范: Si

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

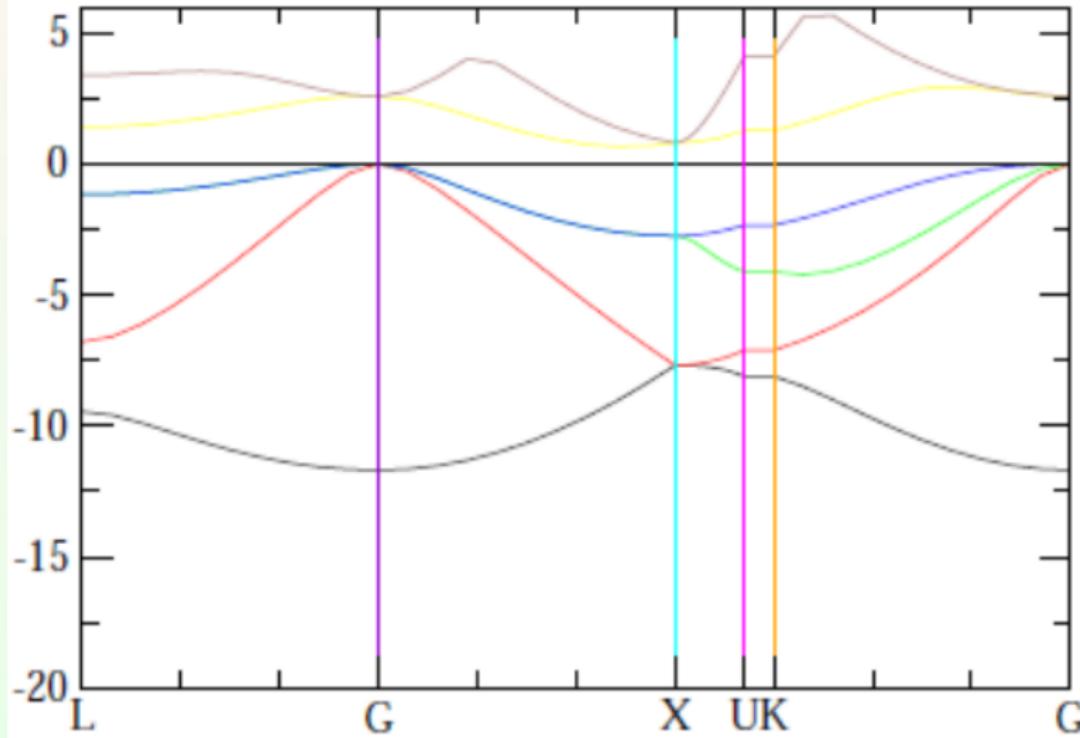
VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构



VASP 计算示范: Si

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算

载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

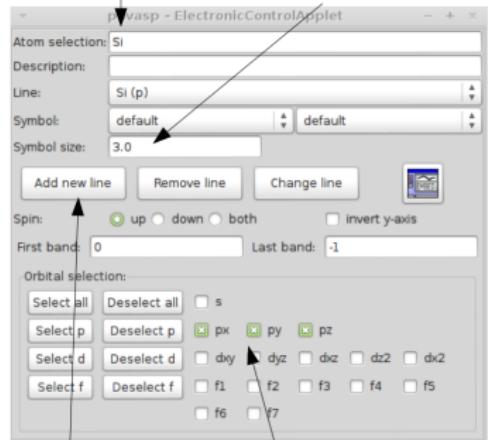
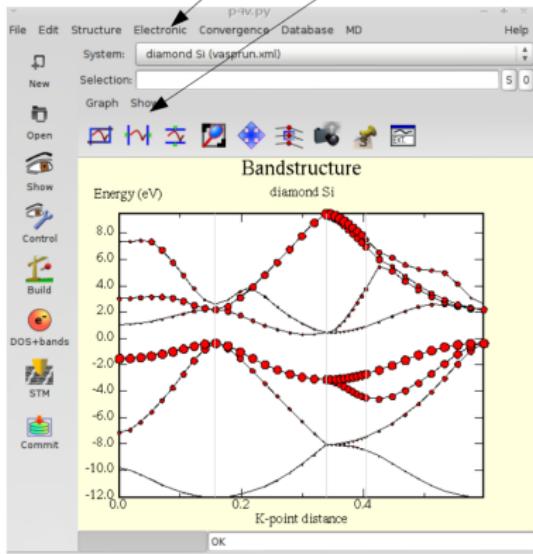
Start p4vasp:
> p4v [vasprun.xml]

Step 1.) go to:
Electronic/Local DOS+bands control

Step 2.) Go to: Show/Bands

Step 3.) select atoms: "all", "Si", "1", "2", ...

Step 4.) adjust symbol size



Step 5.) select orbital character

Step 6.) and "add new line"

WIEN2k 算例: case.structure

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

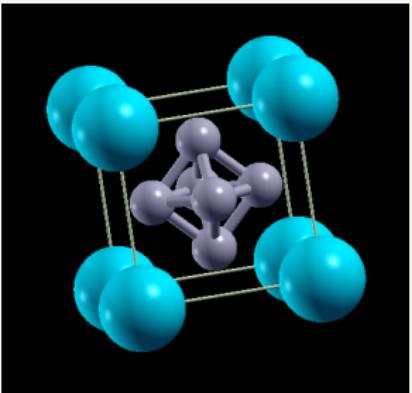


Fig.: The structure of CaB₆.

```

1 CaB6
2 P LATTICE,NONEQUIV.ATOMS: Z221_Pm-3m
3 MODE OF CALC:RELA unit=ang
4 7.757329 7.757329 7.757329 90.000000 90.000000 90.000000
5 ATOM 1: X=0.0000000 Y=0.0000000 Z=0.0000000
6 MULT= 1 ISPLIT= 2
7 Ca NPT= 781 RG=0.0001000 RMT= 2.50000 Z: 20.0
8 LOCAL ROT MATRIX: 1.0000000 0.0000000 0.0000000
9 0.0000000 1.0000000 0.0000000
10 0.0000000 0.0000000 1.0000000
11 ATOM -2: X=0.5000000 Y=0.5000000 Z=0.2010000
12 MULT= 6 ISPLIT= -2
13 -2: X=0.5000000 Y=0.5000000 Z=0.7990000
14 -2: X=0.2010000 Y=0.5000000 Z=0.5000000
15 -2: X=0.7990000 Y=0.5000000 Z=0.5000000
16 -2: X=0.5000000 Y=0.2010000 Z=0.5000000
17 -2: X=0.5000000 Y=0.7990000 Z=0.5000000
18 B NPT= 781 RG=0.0001000 RMT= 1.5 Z: 5.0
19 LOCAL ROT MATRIX: 1.0000000 0.0000000 0.0000000
20 0.0000000 1.0000000 0.0000000
21 0.0000000 0.0000000 1.0000000
22 48 NUMBER OF SYMMETRY OPERATIONS
23 -1 0 0 0.00000000
24 0 -1 0 0.00000000
25 0 0 -1 0.00000000
26 1
27 -1 0 0 0.00000000
28 0 -1 0 0.00000000
29 0 0 1 0.00000000
30 2
31 -1 0 0 0.00000000
32 0 0 -1 0.00000000
33 0 -1 0 0.00000000
34 3
35 -1 0 0 0.00000000
36 0 0 1 0.00000000
37 0 -1 0 0.00000000
38 4
39 -1 0 0 0.00000000
40 0 0 -1 0.00000000
41 0 1 0 0.00000000
42 5
43 -1 0 0 0.00000000
44 0 0 1 0.00000000
45 0 1 0 0.00000000
46 6
47 -1 0 0 0.00000000
48 0 1 0 0.00000000

```



WIEN2k 计算示范: SCF

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算

载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

```

1 Calculating CaB6 in /home/jun_jiang/WORKS/WIEN2k_Cal/CaB6
2 on jun with PID 6598
3 using WIEN2k_14.2 (Release 15/10/2014) in /home/jun_jiang/Softs/WIEN2k
4
5
6     start      (Thu Apr 21 15:45:13 CST 2016) with lapw0 (40/99 to go)
7
8     cycle 1    (Thu Apr 21 15:45:13 CST 2016) (40/99 to go)
9
10    > lapw0 -p   (15:45:13) starting parallel lapw0 at Thu Apr 21 15:45:13 CST 2016
11 ----- .Machine0 : 2 processors
12 1.956u 0.088s 0:02.24 90.6% 0+0k 0+1904t 8pf+0w
13 > lapw1 -p   (15:45:15) starting parallel lapw1 at Thu Apr 21 15:45:15 CST 2016
14 -> starting parallel LAPW1 jobs at Thu Apr 21 15:45:15 CST 2016
15 running LAPW1 in parallel mode (using .machines)
16 1 number of parallel jobs
17     localhost localhost(56) 32.584u 0.440s 0:17.20 191.9% 0+0k 0+31008t 8pf+0w
18     Summary of lapwpara:
19     localhost k=0 user=56 wallclock=26.4
20 32.640u 0.452s 0:19.33 171.1% 0+0k 0+31224t 8pf+0w
21 > lapw2 -p   (15:45:34) running LAPW2 in parallel mode
22     localhost 5.560u 0.212s 0:03.12 184.9% 0+0k 0+1600t 8pf+0w
23     Summary of lapw2para:
24     localhost user=5.56 wallclock=3.12
25 5.660u 0.236s 0:04.33 136.0% 0+0k 0+2672t 8pf+0w
26 > lcore   (15:45:39) 0.004u 0.004s 0:00.00 0.0% 0+0k 0+240t 0pf+0w
27 > mixer   (15:45:39) 0.020u 0.000s 0:00.02 100.0% 0+0k 0+936t 0pf+0w
28 > mixer   (15:45:39) 0.020u 0.000s 0:00.02 100.0% 0+0k 0+936t 0pf+0w
29 :ENERGY convergence: 0 0.0000730500000000
30 :CHARGE convergence: 0 0.0001 0.0006803
31 <c> cc and fc_conv 1 0 1
32
33     cycle 2    (Thu Apr 21 15:45:39 CST 2016) (39/98 to go)
34
35 > lapw0 -p   (15:45:39) starting parallel lapw0 at Thu Apr 21 15:45:39 CST 2016
36 ----- .Machine0 : 2 processors
37 1.960u 0.072s 0:02.23 91.0% 0+0k 0+1888t 8pf+0w
38 > lapw1 -p   (15:45:41) starting parallel lapw1 at Thu Apr 21 15:45:41 CST 2016
39 -> starting parallel LAPW1 jobs at Thu Apr 21 15:45:41 CST 2016
40 running LAPW1 in parallel mode (using .machines)
41 1 number of parallel jobs
42     localhost localhost(56) 32.776u 0.384s 0:17.21 192.6% 0+0k 0+30496t 8pf+0w
43     Summary of lapwpara:
44     localhost k=0 user=56 wallclock=23.04
45 32.816u 0.412s 0:19.32 171.9% 0+0k 0+30720t 8pf+0w
46 > lapw2 -p   (15:46:01) running LAPW2 in parallel mode
47     localhost 5.584u 0.216s 0:03.14 184.3% 0+0k 0+1600t 8pf+0w

```



WIEN2k 计算示范: CaB₆的 DOS

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

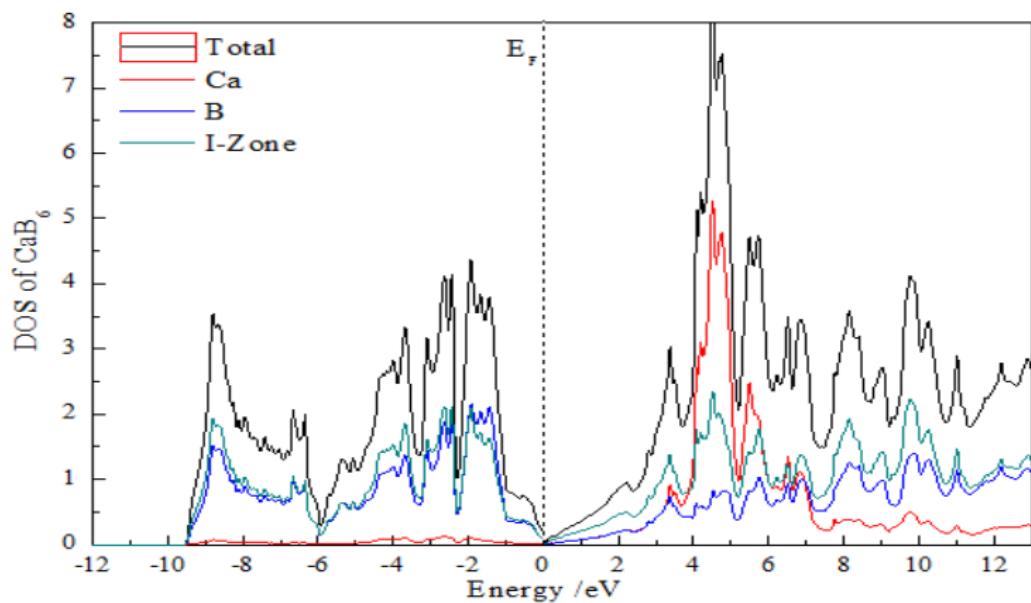
光学性质计算

载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构



WIEN2k 计算示范: CaB₆的能带结构

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

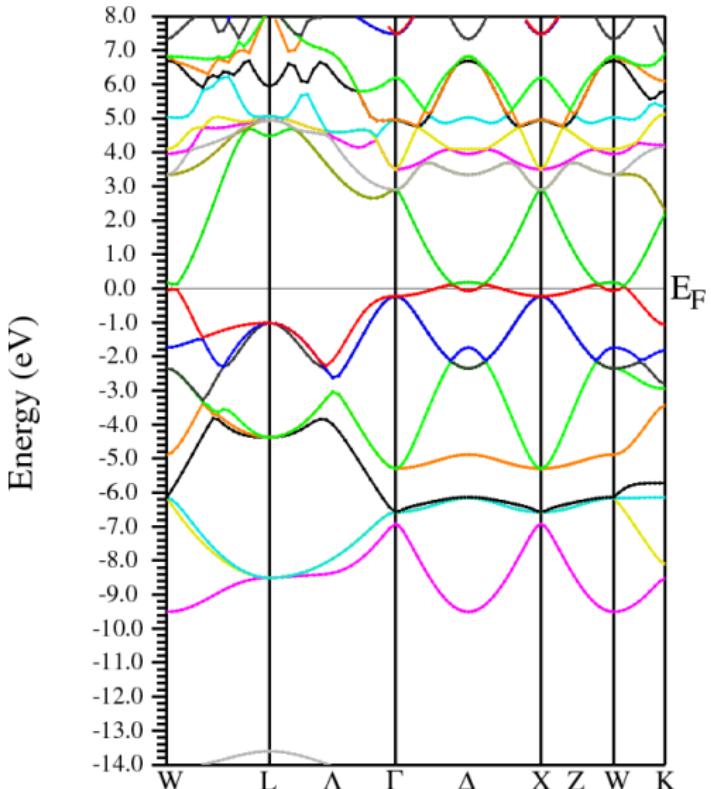
VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构



固体光学常数间的基本关系

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

固体光学常数间的基本关系

第一原理计算
软件简介与应用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

- 电磁波垂直入射时，反射波与入射波分别为

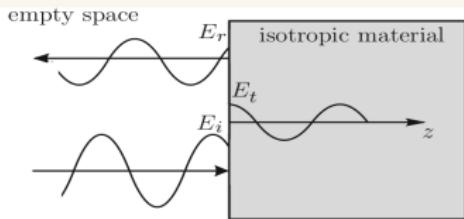


Fig.: Schematic representation of incident, reflected and transmitted electromagnetic wave at the surface.

$$E(z) = E_t e^{i(\omega/c)Nz} \quad z > 0$$

$$E(z) = E_i e^{i(\omega/c)z} + E_r e^{-i(\omega/c)z} \quad z < 0$$

反射率 R 可以表示为

$$R = \left| \frac{E_r}{E_i} \right|^2 = \left| \frac{1 - N}{1 + N} \right|^2 = \frac{(n - 1)^2 + k^2}{(n + 1)^2 + k^2}$$

光子与电子的激发

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

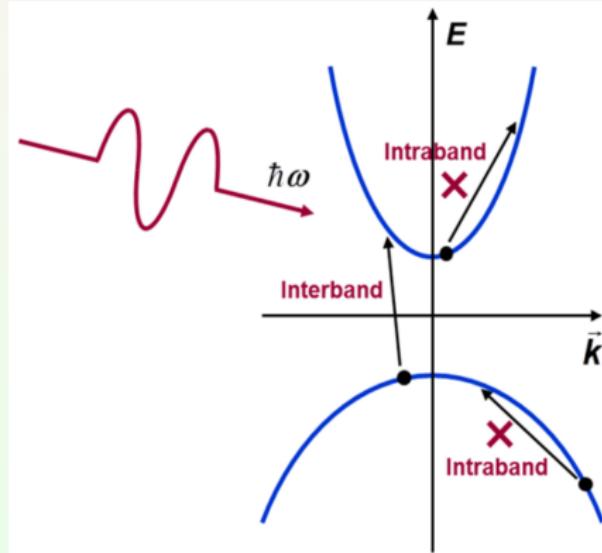


Fig.: Schematic representation of interaction of photons and the electrons in the semiconductor.

光子与电子的激发

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算
遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

粒子间相互作用遵守能量守恒与动量守恒：

假设介质中的电子初始态为 \vec{k}_i ，对应的能量为 $E_n(\vec{k}_i)$ ，电子吸收入射光子跃迁到终态 \vec{k}_f ，能量变为 $E_m(\vec{k}_f)$ ，则有

■ 能量守恒

$$E_m(\vec{k}_f) = E_n(\vec{k}_i) + \hbar\omega$$

$\hbar\omega$ 是入射光子能量

■ 动量守恒

$$\vec{k}_f = \vec{k}_i + \vec{q}$$

\vec{q} 是入射光子的动量

具体计算过程中，考虑光子引起的介质中电子的状态变化，采取了一系列的简化

电场中的自由电子: Lorentz 模型

第一原理计算
软件简介与应用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算
遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

- 载流子在外电场 $\mathbf{E}(\vec{r}, t) = \mathbf{E}_0 e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega t)}$ 下的运动方程

$$m\ddot{\vec{r}} = -\frac{m}{\tau}\dot{\vec{r}} + (-e)\mathbf{E}_0 e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega t)}$$

这里 $\vec{r}(t)$ 是载流子坐标, τ 是唯象弛豫时间

- 长波极限下, 忽略电磁波在空间的变化

$$m\ddot{\vec{r}} = -\frac{m}{\tau}\dot{\vec{r}} - e\mathbf{E}_0 e^{-i\omega t}$$

取载流子位置函数 $\vec{r}(t) = \vec{A}_0 e^{-i\omega t}$, 有

$$\vec{A}_0 = \frac{e\tau}{m} \frac{1}{(\omega^2 + i\omega\tau - \omega_0^2)} \mathbf{E}_0$$

经典图像中, 介质中载流子的运动可类比于谐振子, ω_0 为弹簧的固有频率

Lorentz 模型

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

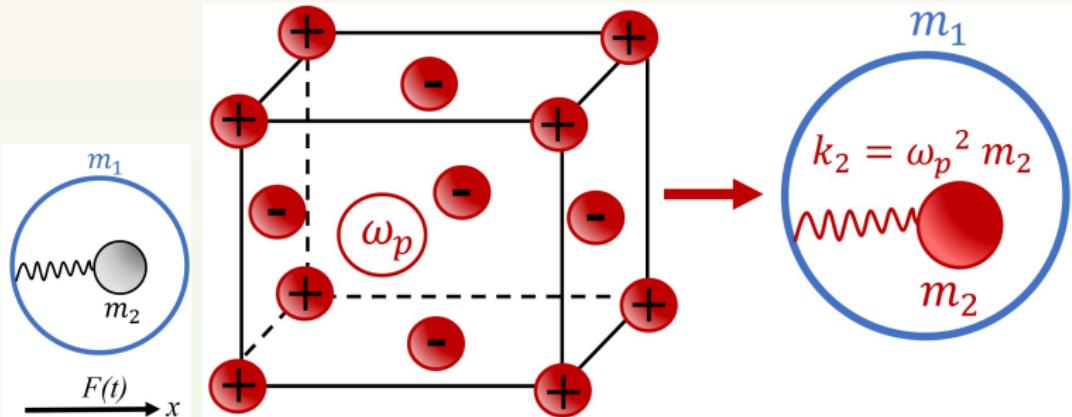


Fig.: Equivalent mechanical scheme of electron gas in ionic lattice.

ω_p 是载流子的等离振荡频率

$$\omega_p^2 = \frac{4\pi n e^2}{m}$$

电场对导带电子的影响

第一原理计算
软件简介与应用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算

载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

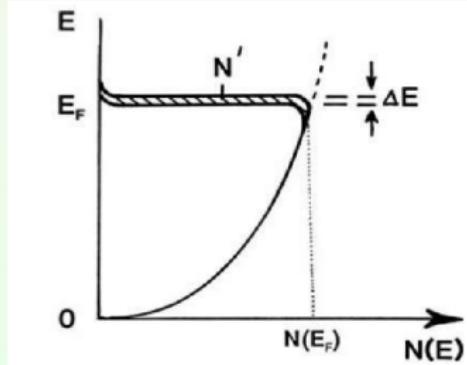
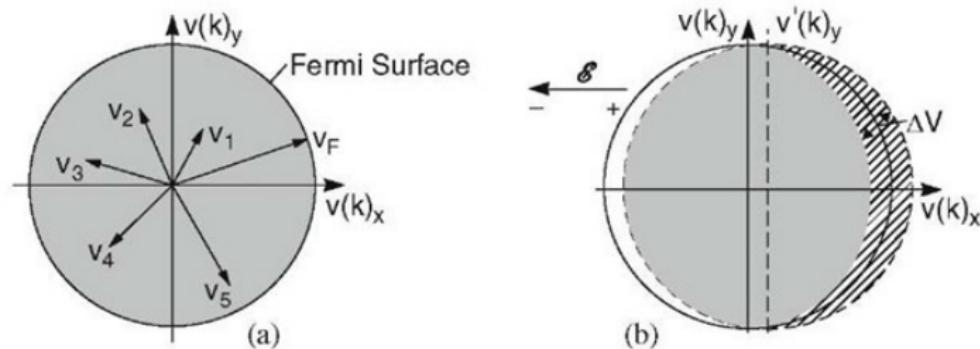


Fig.: Schematic representation of the Fermi-surface affected by the electromagnetic field

Lorentz-Drude 模型

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介
VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

■ Lorentz-Model:

始于电子与晶格离子间作用，侧重描述电子在固体中的运动，
介电函数为

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\tau - \omega_0^2}$$

Lorentz 模型中，取 $\omega_0 = 0$ ，即为 Drude 模型

■ Drude-Model:

侧重描述自由电子气对外部交变电场的响应，则介电函数可
以表示为：

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i/\tau)} = \underbrace{\left[1 - \frac{\omega_p^2 \tau^2}{1 + \omega^2 \tau^2} \right]}_{\text{实部}} + i \underbrace{\left[\frac{\omega_p^2 \tau}{\omega(1 + \omega^2 \tau^2)} \right]}_{\text{虚部}}$$

Lorentz-Drude 模型

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

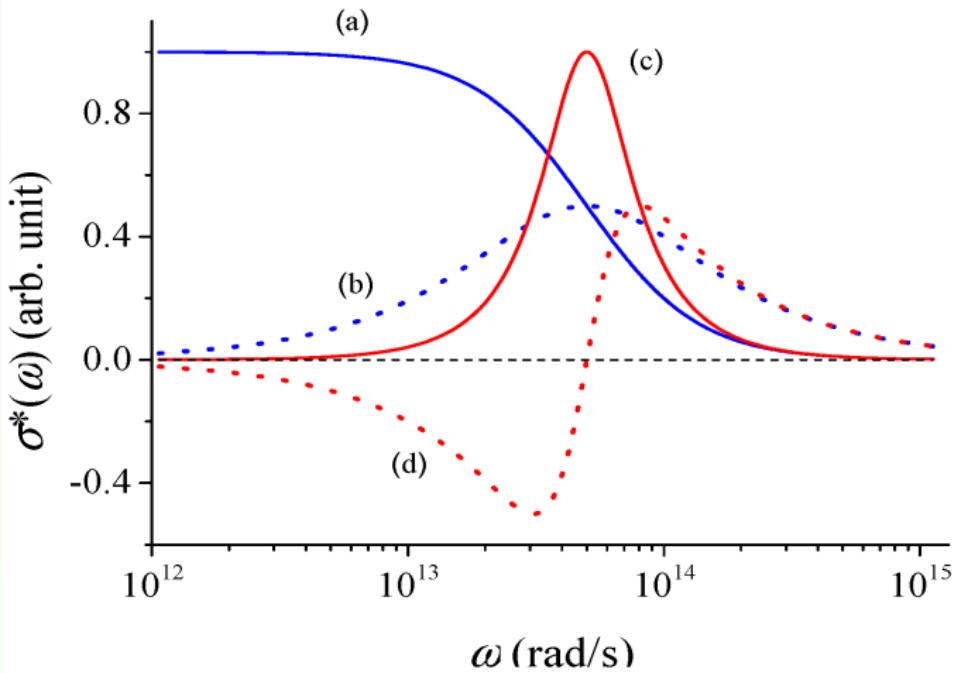


Fig.: Optical conductivity in the Drude relaxation and in the Lorentz resonance.

Drude 模型

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算
遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

在远红外区，经典自由电子气模型可以很好地描述金属的光学行为
如果载流子密度为 n ，则电流密度

$$\mathbf{J} = n(-e)\dot{\vec{r}} = n(-e)(-\text{i}\omega)\vec{A}_0 e^{-\text{i}\omega t} = \frac{ne^2\tau}{m} \frac{1}{1 - \text{i}\omega\tau} \mathbf{E}_0 e^{-\text{i}\omega t}$$

由此可得频率有关的电导率表示为

$$\sigma(\omega) = \frac{ne^2\tau}{m} \frac{1}{1 - \text{i}\omega\tau} = \sigma_0 \frac{1}{1 - \text{i}\omega\tau}$$

其中 $\sigma_0 = ne^2\tau/m$ 是静态电导率介电函数可表示为

$$\epsilon_1(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2\tau^2}{1 + \omega^2\tau^2} \quad \epsilon_2(\omega) = \frac{\omega_p^2\tau}{\omega(1 + \omega^2\tau^2)}$$

带间跃迁的计算

第一原理计算
软件简介与应用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算
遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

- 用半经典方法处理周期性体系的光学性质，用量子力学处理介质，对电磁波仍然采用经典电动力学描写
- 以半导体中的带间垂直跃迁（价带 $|v, \vec{k}\rangle$ ，导带 $|c, \vec{k}\rangle$ ）为例讨论固体的能带间跃迁

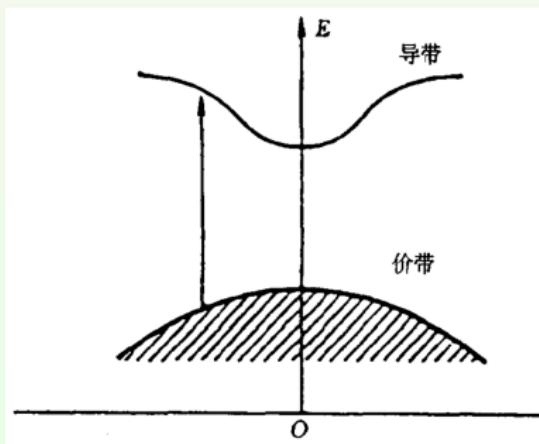


Fig.: Schematic representation of directly inter-band transition.

带间跃迁的计算

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算
遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

长波极限下 ($\vec{q} \rightarrow 0$), 根据光学性质的基本关系, 可有介电函数的介电函数虚部表达式

$$\begin{aligned}\varepsilon_2(\omega) = \lim_{\vec{q} \rightarrow 0} \frac{8\pi^2 e^2}{m_e^2 \omega^2} & \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} |\langle c, \vec{k} | \mathbf{e} \cdot \vec{p} | v, \vec{k} \rangle|^2 \\ & \times \delta(E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}) - \hbar\omega) [f(E_c(\vec{k})) - f(E_v(\vec{k}))]\end{aligned}$$

$\varepsilon_2(\omega)$ 是晶体的光学吸收和能带结构之间的基本关系
对应的 ε_1 可以根据 Kramers-Krönig 关系得到

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\varepsilon_2(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' = 1 + \frac{2}{\pi} \mathcal{P} \int_0^{+\infty} \frac{\omega' \varepsilon_2(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega'$$

因此介电函数表示为

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \frac{8\pi e^2}{m_e^2} \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{|\langle c, \vec{k} | \mathbf{e} \cdot \vec{p} | v, \vec{k} \rangle|^2}{(E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}))/\hbar^2} \frac{(-i)[f(E_c(\vec{k})) - f(E_v(\vec{k}))]}{E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}) - \hbar\omega - i\eta}$$

带间跃迁和带内跃迁的计算

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算

载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

电导率函数可表示为

$$\sigma(\omega) = \frac{2e^2}{m_e^2} \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{|\langle c, \vec{k} | \mathbf{e} \cdot \vec{p} | v, \vec{k} \rangle|^2}{(E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}))/\hbar} \frac{(-i)[f(E_c(\vec{k})) - f(E_v(\vec{k}))]}{E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}) - \hbar\omega - i\eta}$$

推广到长波极限下的带内跃迁

$$f(E_c(\vec{k})) - f(E_v(\vec{k})) \approx \frac{\partial f}{\partial E}(f(E_c(\vec{k})) - f(E_v(\vec{k})))$$

$$\sigma(\omega) = \frac{e^2 \hbar}{4\pi^3} \int d\vec{k} \langle c, \vec{k} | \mathbf{e} \cdot \vec{p} | v, \vec{k} \rangle|^2 \frac{-i}{E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}) - \hbar\omega - i\eta} \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right)$$

引入等式 $\eta = \hbar/\tau$, 并作展开

$$E_{\vec{k}+\vec{q}} - E_{\vec{k}} \approx \vec{q} \cdot (\partial E / \partial \vec{k}) = \frac{\hbar}{m_e} \langle c, \vec{k} | \mathbf{q} \cdot \vec{p} | v, \vec{k} \rangle$$

由此可得

$$\sigma(\vec{q}, \omega) = \frac{e^2}{4\pi^3} \int d\vec{k} \frac{\tau |\langle c, \vec{k} | \mathbf{e} \cdot \vec{p} | v, \vec{k} \rangle|^2}{1 - i\tau(\omega - \langle c, \vec{k} | \mathbf{q} \cdot \vec{p} | v, \vec{k} \rangle)} \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right)$$

WIEN2k 计算示范：光学性质计算

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

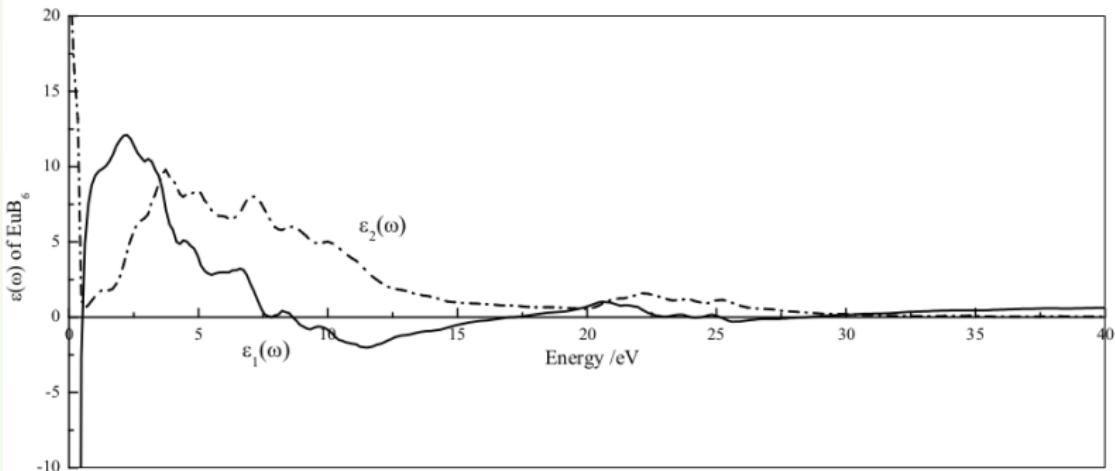


Fig.: The dielectric of EuB₆.

WIEN2k 计算示范: 光学性质计算

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

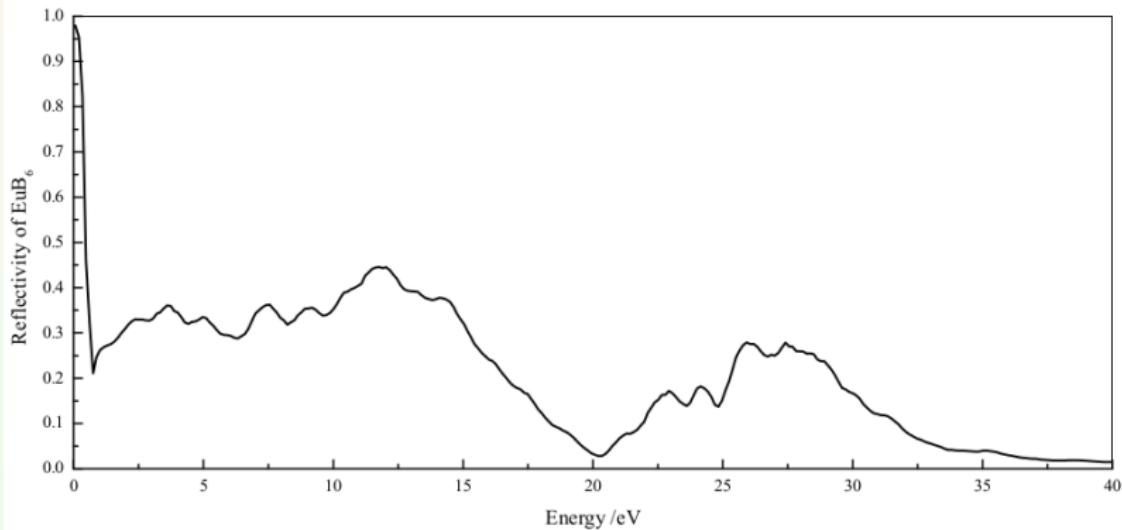


Fig.: The Reflectivity of EuB₆.

WIEN2k 计算示范: 光学性质计算

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

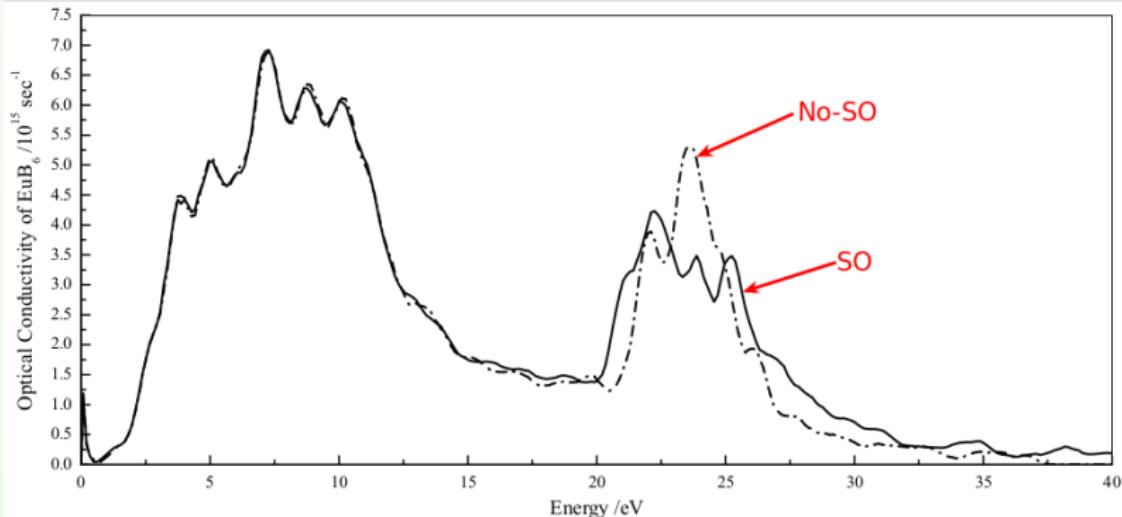


Fig.: The R-conductivity of EuB_6 .

WIEN2k 计算示范: 光学性质计算

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算
遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

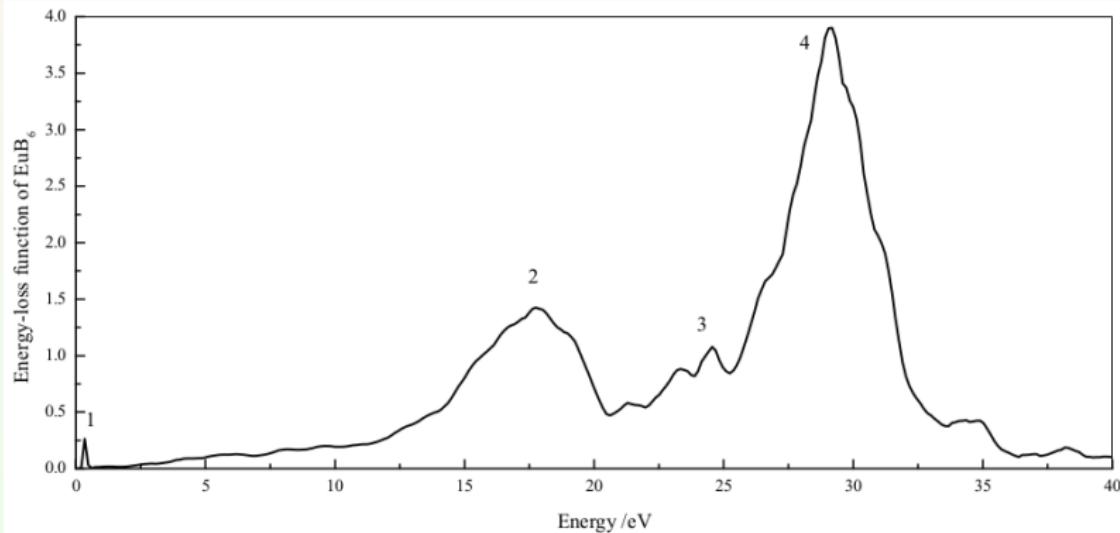


Fig.: The E-loss function of EuB_6 .

电子对光子的吸收与受激辐射

电子、空穴与相互作用

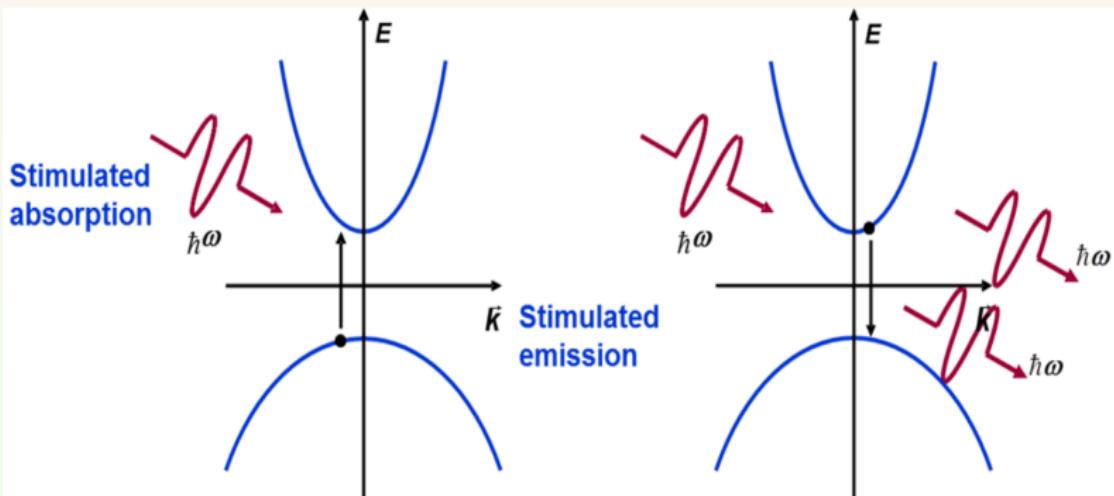


Fig.: Schematic representation of the stimulated absorption and emission of electrons.

电子-空穴对构成准粒子 (quasi-particle)

电子的自发辐射

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

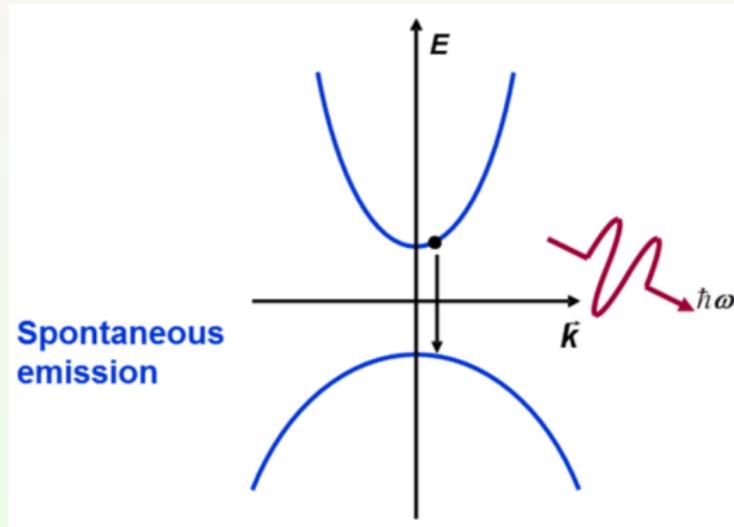


Fig.: Schematic representation of the spontaneous emission of electrons.

吸收谱与发射谱

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

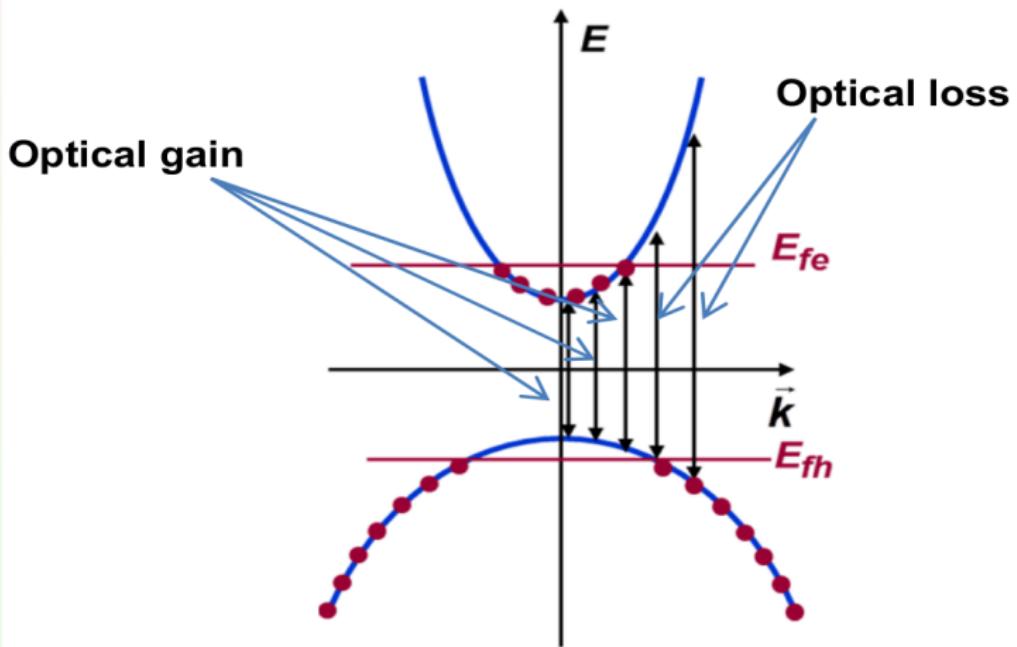


Fig.: Schematic representation of the gain-loss spectra.

光电子能谱与电子带隙

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

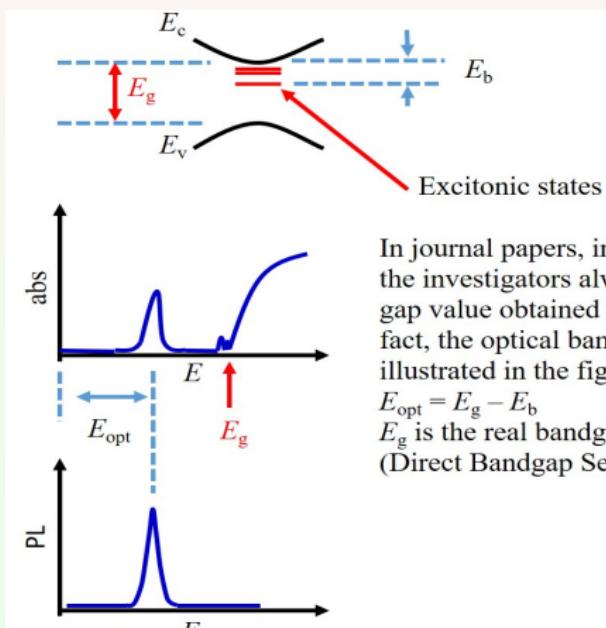
VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构



In journal papers, including many high impact journals, the investigators always used optical bandgap to name the gap value obtained from PL and absorption spectra. In fact, the optical bandgap is not the real bandgap as illustrated in the figure. Its value is:

$$E_{opt} = E_g - E_b$$

E_g is the real bandgap, E_b is the excitonic binding energy.
(Direct Bandgap Semiconductor)

Fig.: Schematic representation of the spectra vs the band gap.

Heisenberg 交换模型

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算

载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

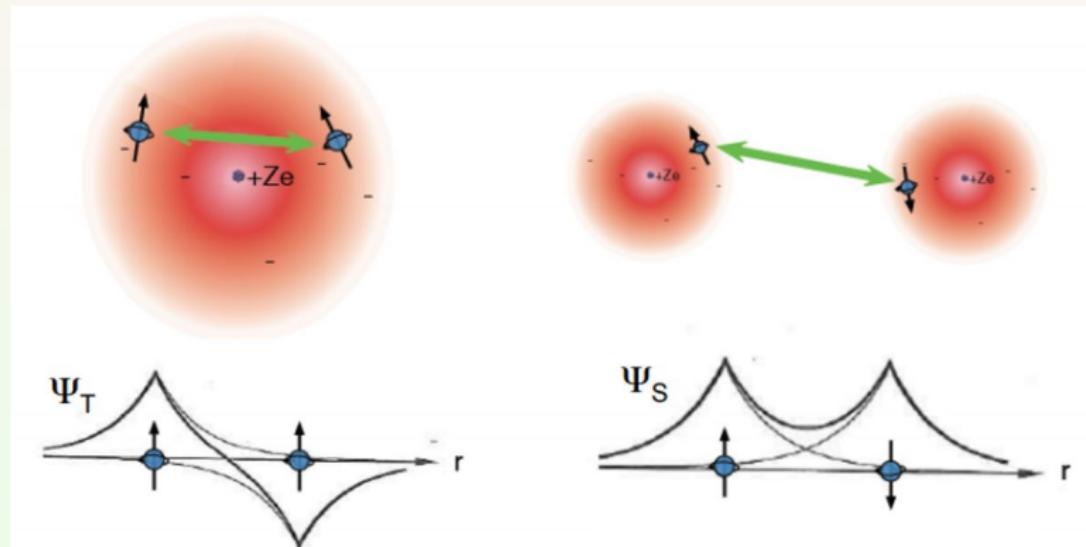


Fig.: The model of Heisenberg-exchange coupling.

铁磁、反铁磁和亚铁磁

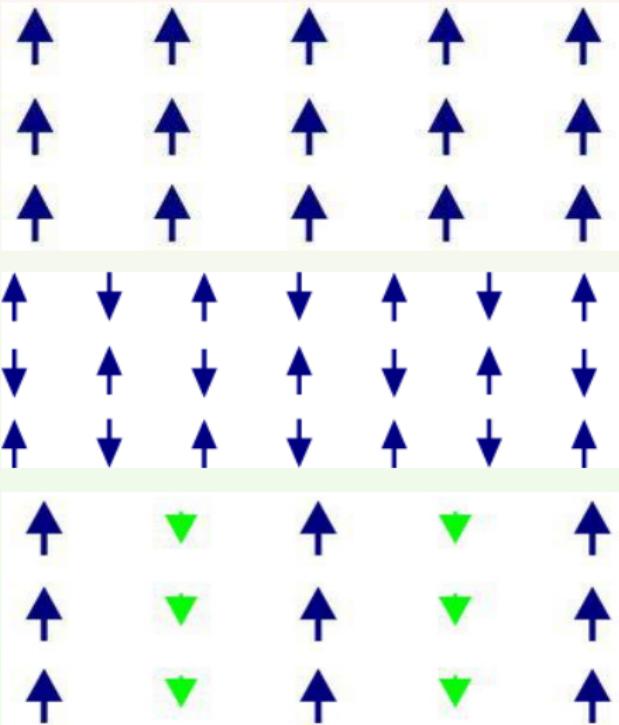


Fig.: The model of Ferromagnetic, Antiferromagnetic and Ferrimagnetic.

Stoner 模型

第一原理计算
软件简介与应用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

- Stoner 将金属的磁性考虑为晶格中巡游的 $3d$ 、 $4s$ 电子贡献，其相互作用为 I ，Fermi 面附近的 DOS 为 $N(E_F)$

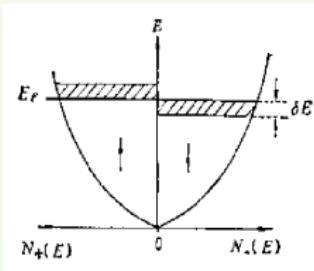


Fig.: The Stoner model.

- 体系的磁性由转变由 Fermi 面附近能量变化确定

$$\Delta E = N(E_F) [1 - I N(E_F)] (\delta E)^2$$

Stoner 模型

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

- Stoner 模型中参数 I 主要反映 $3d$ 电子的紧束缚特征，与晶体结构关系不大
- Stoner 用于孤立原子体系，参数 I 描述自旋电子的裂分，要求：
 - 1 对 LSDA 描述的单行列式态，参数 I 可以精确描述原子态的裂分
 - 2 LSDA 中应用 Stoner 模型，参数 I 与 Hubbard 规则的交换参数 U 一致
- 参数 U (或 I)、 J 的大小
 - 1 Hund 规则的交换参数 J 的数量级：1eV
 - 2 Hubbard 参数 U 的数量级：10eV

自旋波模型

第一原理计算
软件简介与应用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

- 作为平均场近似，分子场理论成功描述了强磁性物质的自发磁化行为，但在低温和 Curie 温度附近，理论与实验存在明显偏差
- 自旋波理论是从体系**整体激发**的角度出发，解释自发磁化的低温行为

1 0K 下电子自旋有序排列 (系统基态)

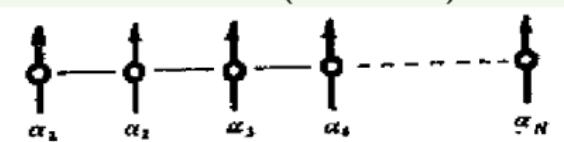
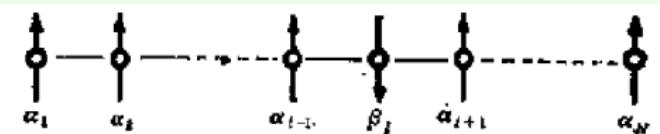


Fig.: The ground state $|0\rangle$.

2 温度略有升高时，电子自旋有一个发生翻转



自旋波模型

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算

载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

某个格点上出现自旋翻转，由于相邻格点间存在交换作用，使自旋趋于同向排列

- 翻转的自旋将牵动临近格点自旋，使之趋于翻转
- 近邻格点自旋力图驱使翻转的自旋重新翻转过来

自旋的翻转不会停留在一个格点，而是以波的形式向周围传播：
这种自旋翻转在晶体中的传播称为自旋波（又称磁激子）

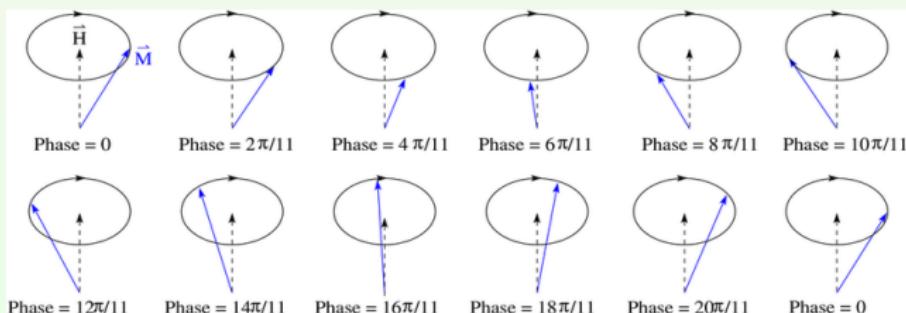


Fig.: The schematic spin-wave.

非共线磁矩

第一原理计算
软件简介与应用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

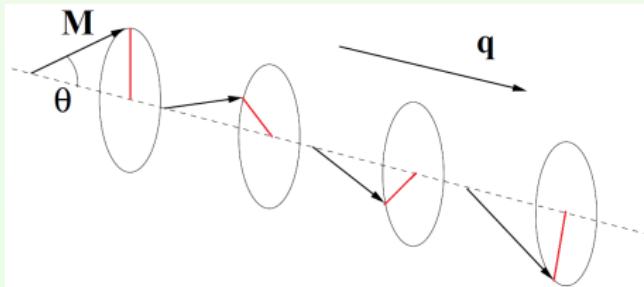
光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

- 真实的物理体系中总会出现非共线的磁结构:
特别是在铁磁/非磁金属界面上，铁磁性原子磁矩有可能形成
非共线排列
- 非共线体系中出现的新现象:电流诱导的自旋转矩
非共线的原子磁矩与电子的自旋之间能够通过交换作用，进而引起电子在输运过程中发生自旋翻转，使得自旋向上和自旋向下的输运通道发生了混合
- 由于非共线磁结构的引入使得问题变得复杂，目前的实验和理论还并不完备



深度神经网络基础

第一原理计算
软件简介与应用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

- 感知机 (Perceptron Learning Algorithm, PLA): 最早的监督式训练算法，是神经网络构建的基础

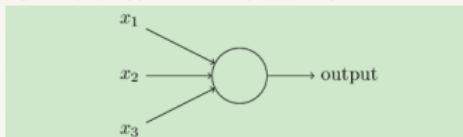


Fig.: Perceptron Learning Algorithm.

输出与输入之间将学习到一个线性关系，可有中间输出结果

$$z = \sum_{i=1}^m w_i x_i + b$$

中间结果连接一个神经元激活函数

$$\text{sign}(z) = \begin{cases} -1 & z < 0 \\ 1 & z \geq 0 \end{cases}$$

深度神经网络基础

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

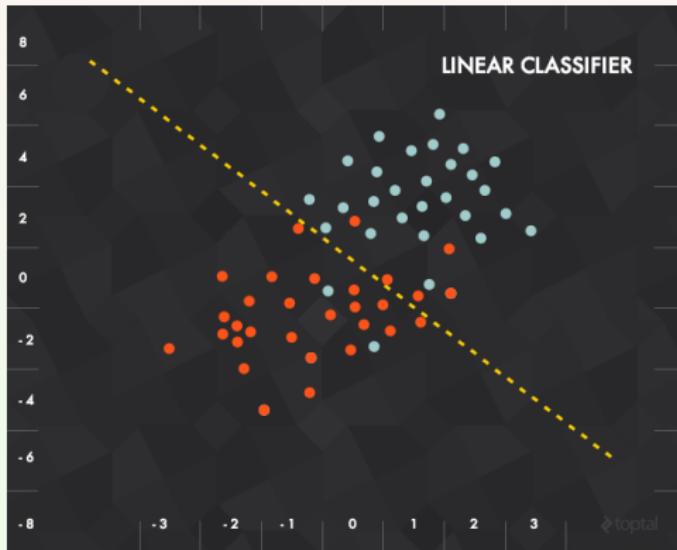
VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构



在本例中，每一个输入数据都可以表示为一个向量 $x = (x_1, x_2)$ ，而函数则是要实现“如果线以下，输出 0；线以上，输出 1”

深度神经网络基础

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

感知机模型只能用于二元分类，无法学习较为复杂的非线性模型，
神经网络在感知机模型基础上作了扩展

- 加入隐藏层 (hide layer): 隐藏层可以有很多层，增强模型的表达能力
- 输出层的神经元可以有不止一个输出
- 对激活函数作扩展，如 Sigmoid 函数

$$f(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}}$$

其他的激活函数还有 tanx、softmax 和 ReLU 等

深度神经网络

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算
遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

当前的深度神经网络 (Deep Learning Neural Network) 可以包含上百层神经元，通常有上万个参数，再加上超参数，实际的参数空间几乎是无限大的。如何从海量潜在的可能参数中做选择极具挑战性。

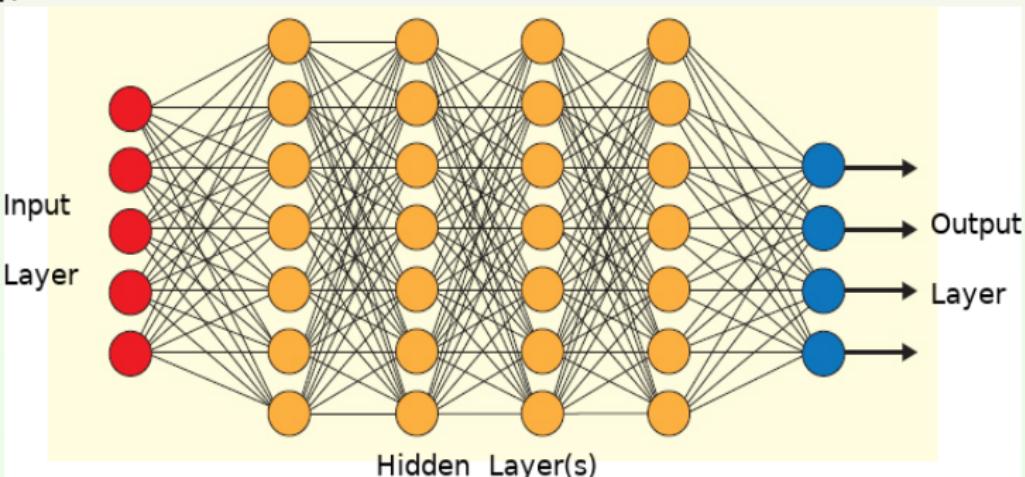


Fig.: Deep Learning Neural Network.

深度神经网络的前馈算法

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

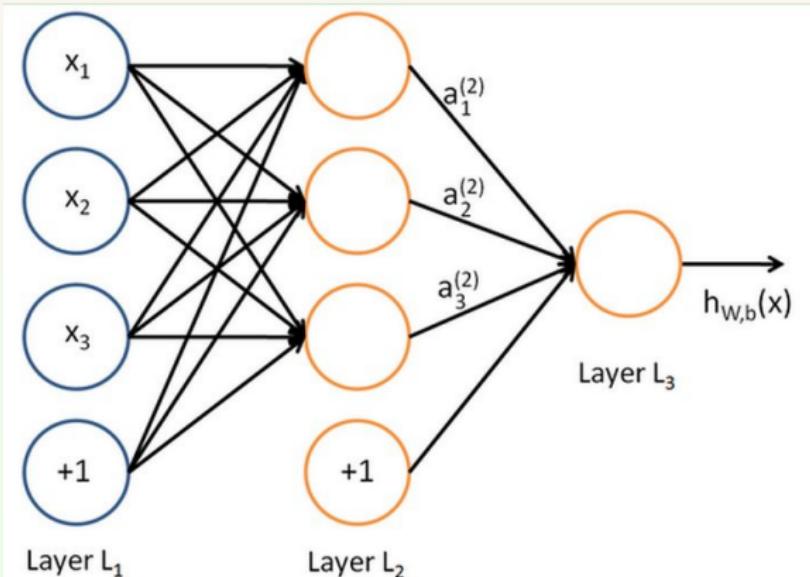
VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算
遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

以三层深度神经网络为例，说明深度神经网络的前馈算法



遗传算法的基本原理

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

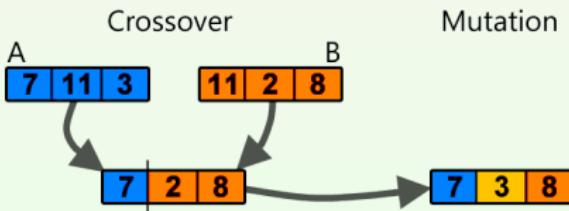
光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算
遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

遗传算法 (Genetic Algorithm, GA) 是模拟生物进化论的自然选择和遗传学机理的计算模型，通过模拟自然进化过程搜索最优解

- 1 优化问题可能潜在的解集构成一个种群，该种群由经过基因编码的一定数目的个体组成，每个个体是带有一定的优化特征
- 2 种群产生之后，借助于自然遗传学的遗传算子进行组合交叉 (crossover) 和变异 (mutation)，产生新一代个体



- 3 按照适者生存和优胜劣汰的原理，在每一代，根据问题域中个体的适应度，选择合适的个体，构成代表新的解集的种群
- 4 逐代演化后，产生出越来越好的近似解 (优化目标)

深度神经网络与遗传算法

第一原理计算
软件简介与应用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

深度神经网络类似问题的解决方案：遗传算法



GACNN: TRAINING DEEP CONVOLUTIONAL NEURAL NETWORKS WITH GENETIC ALGORITHM

Parsa Esfahanian
Department of Computer Science
Institute for Research in Fundamental Sciences
parsa.esfahanian@ipm.ir

Mohammad Akhavan
Department of Computer Science
Institute for Research in Fundamental Sciences
mohammad.akhavan@ipm.ir

AlphaStar: An Evolutionary Computation Perspective

Kai Arulkumaran
Imperial College London
London, United Kingdom
ka709@ic.ac.uk

Antoine Cully
Imperial College London
London, United Kingdom
a.cully@imperial.ac.uk

Julian Togelius
New York City, NY, United States
julian@togelius.com

In January 2019, DeepMind revealed AlphaStar to the world—the first artificial intelligence (AI) system to beat a professional player at the game of StarCraft II—representing a milestone in the progress of AI. AlphaStar draws on many areas of AI research, including the original game, and its equal PC R, have several properties that make it considerably more challenging than even Go: real-time play, partial observability, no single dominant strategy, complex rules that make it hard to build a fast forward model, and a particularly large and varied action space.

GACNN: 利用遗传算法训练深度卷积神经网络

多智能体强化学习: 神经网络

晶体结构优化的复杂性

第一原理计算
软件简介与应用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算
遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

■ 晶体结构预测与搜索中也遇到类似问题

在已知元素种类的条件下，有可能预测或搜索材料晶体的结构；但是材料的等能面存在无数个局部极小点，因而可能的晶体结构也是无限多的。这使得晶体结构的预测与搜索极其困难。

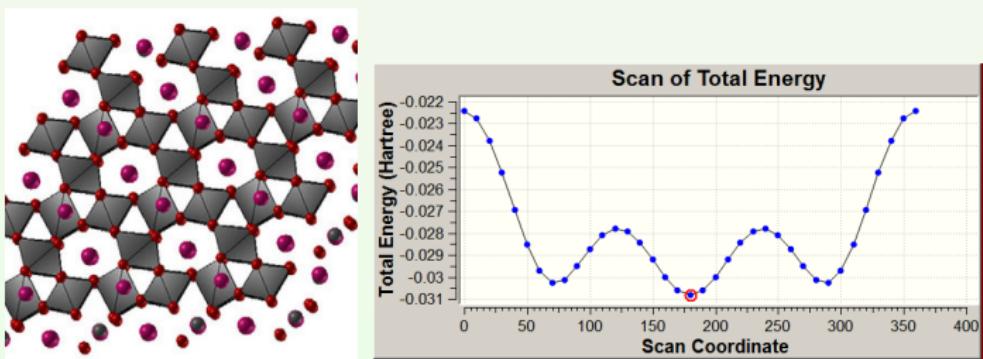


Fig.: The structure of Perovskite and schematic for the energy minimum searching.

晶体结构优化问题的解决

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算

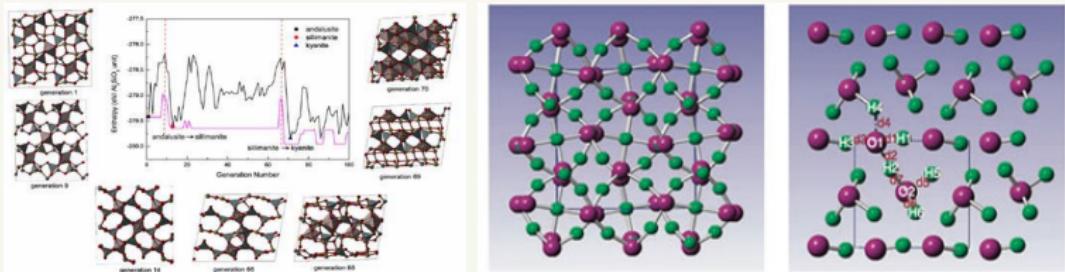
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

解决方案: 遗传算法、粒子群方法等



USPEX Computational Materials Discovery

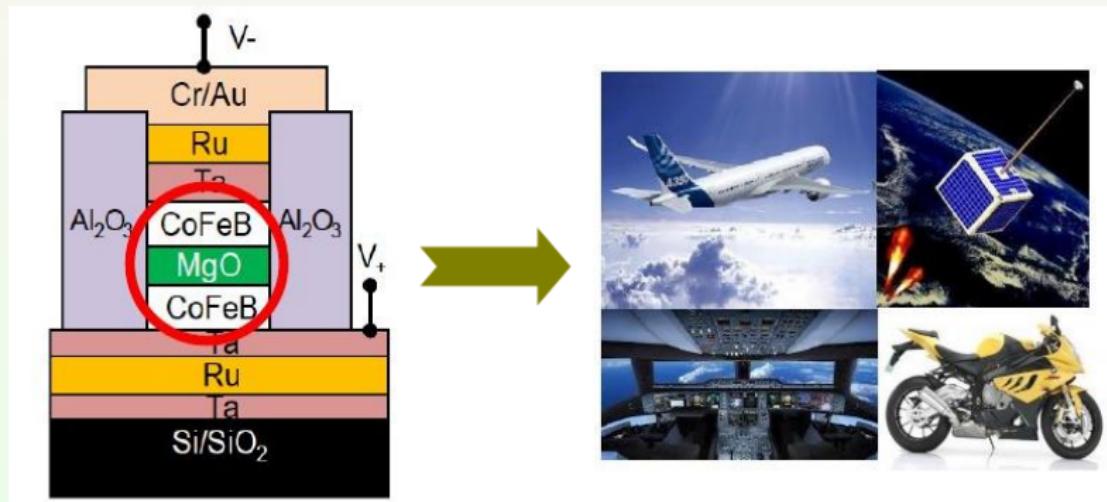


CALYPSO



磁随机存储器 (MRAM)

磁性材料的核心问题：材料自旋磁结构的构筑、调控与设计



磁随机存储器 (MRAM)

第一原理计算
软件简介与应用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

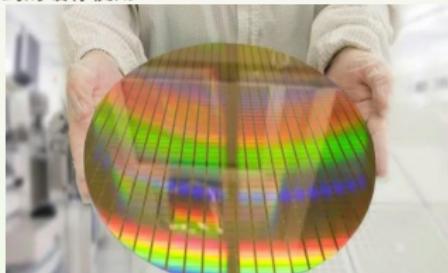
光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

- 日本东北大学的科研团队成功开发出存储密度达 128Mb 的 STT-MRAM，写入速度达 14ns，可作为物联网和人工智能中用到的缓存使用



- 韩国 Samsung 公司宣布已在一条基于 28nm FD-SOI 工艺的生产线上，开始大规模生产和商业运营嵌入式 MRAM(eMRAM) 解决方案



开发 MRAM 技术瓶颈问题

第一原理计算
软件简介与应用

第一原理计算
软件简介

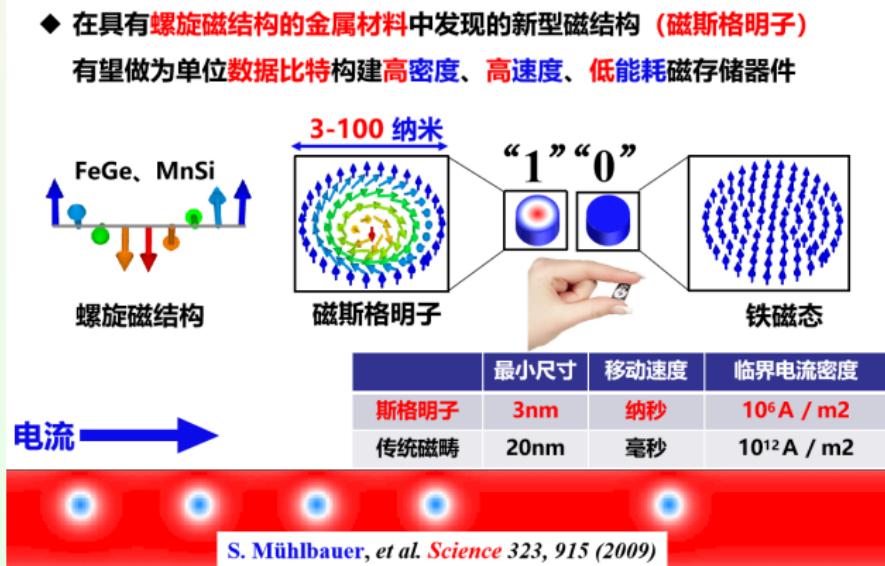
VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算
遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

- 如何构建一套具有范式意义的技术方法，使得我们能够**快速、精准地预测各类磁性材料的磁结构及磁参数**对加速开发 MRAM 具有至关重要的作用，目前属于国际空白



简单磁结构 .VS. 复杂磁结构

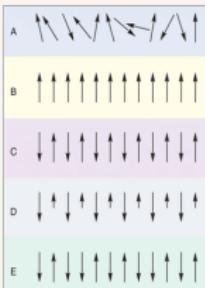


Fig.: Simple Magnetic structure: Ferromagnetism, Anti-Ferromagnetism, Ferrimagnetism

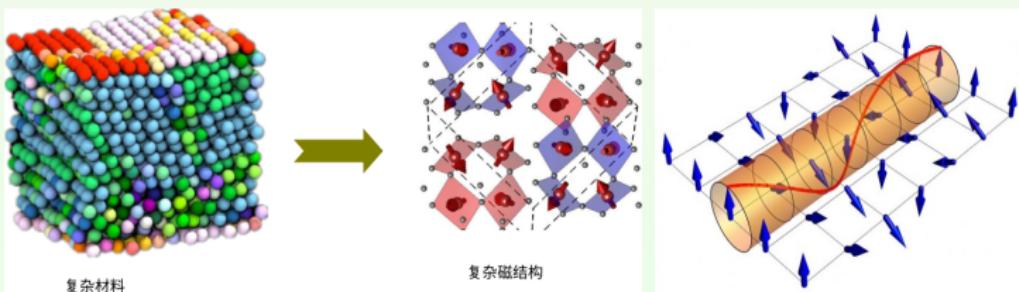


Fig.: Complex Magnetic structure: Spiral magnet, All-in-all-out, 3k-ordered

复杂磁结构的两大起源

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算

载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算

遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

■ 强磁阻挫: Kagome 晶格

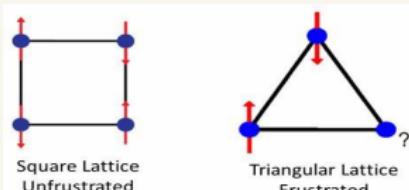


Fig.: The Kagome lattice

■ 强自旋-轨道耦合: 稀土、锕系元素, 核材料

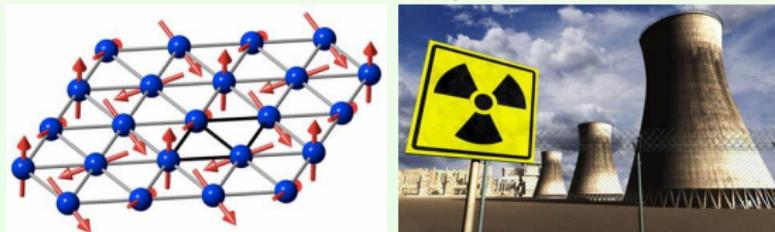


Fig.: Strong spin-orbit coupling and nuclear materials.

确定磁结构的方法和困难

第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算
遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

■ 确定磁结构的常用方法

- 1 实验方法: 中子散射
- 2 理论方法: 人工猜测-计算验证方法
- 3 理论方法: 拟合磁自由度 Hamiltonian-模拟退火

■ 复杂磁有序结构测定的困难

- 1 中子散射: 某些实验材料质量欠佳、极端条件
- 2 人工猜想-计算验证方法: 效率低下, 不适合复杂材料
- 3 Hamiltonian-模拟退火: Hamiltonian 拟合困难, 精度无
法保证

本质的困难: 海量潜在的可能结构导致常用方法失效

磁结构遗传算法预测软件 MagGene



第一原理计算
软件简介与应
用

第一原理计算
软件简介

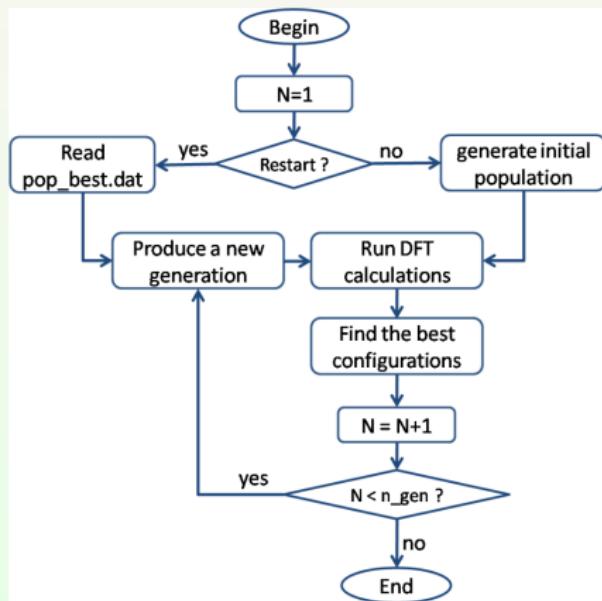
VASP 算例
与 WIEN2k
算例

光学性质计算
载流子与
Lorentz-Drude
模型

简单磁性计算
遗传算法与结
构预测

复杂磁性结构

鉴于遗传算法在深度学习和晶体结构预测中的成功应用，这种方法在磁结构预测中也大有用武之地。MagGene 就是整合遗传算法和常用的第一性原理计算软件预测材料磁结构新型软件。



国内已有的计算平台: MatCloud

第一原理计算
软件简介与应
用

高通量材料计
算平台开发现
状

MP 与 ASE

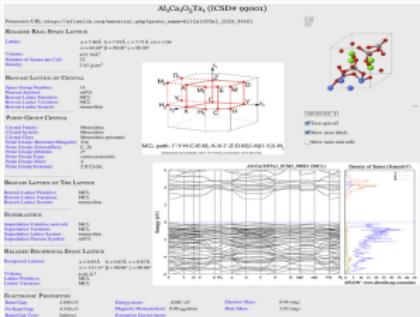


Fig.: 中科学院计算机网络信息中心 杨小渝团队开发^[3, 4]

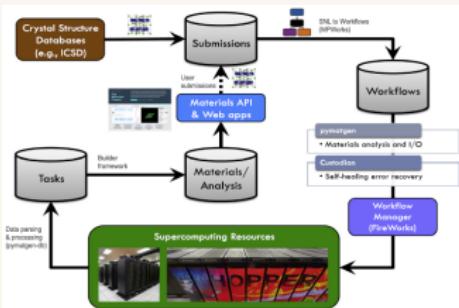
国外已有的计算平台



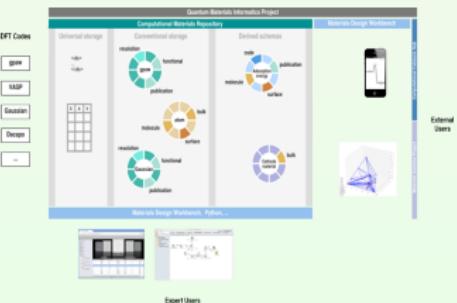
高通量材料计算平台开发现状



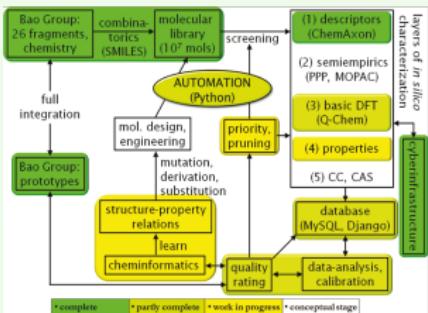
(a) Auto-FLOW (AFLOW)^[5]



(b) Material Project (MP)^[6]



(c) Quantum Materials Informatics Project (QMIP)



(d) Clean Energy Project (CEP)^[8]

ASE: 接口丰富的适应性计算平台

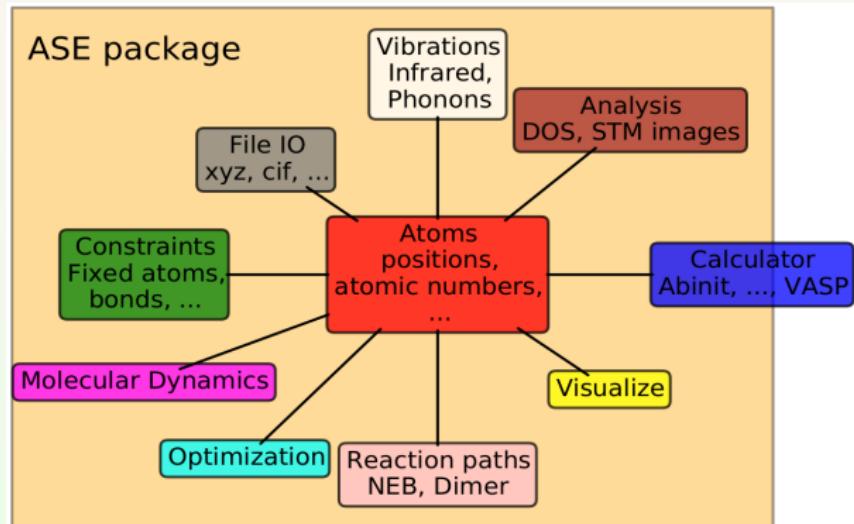


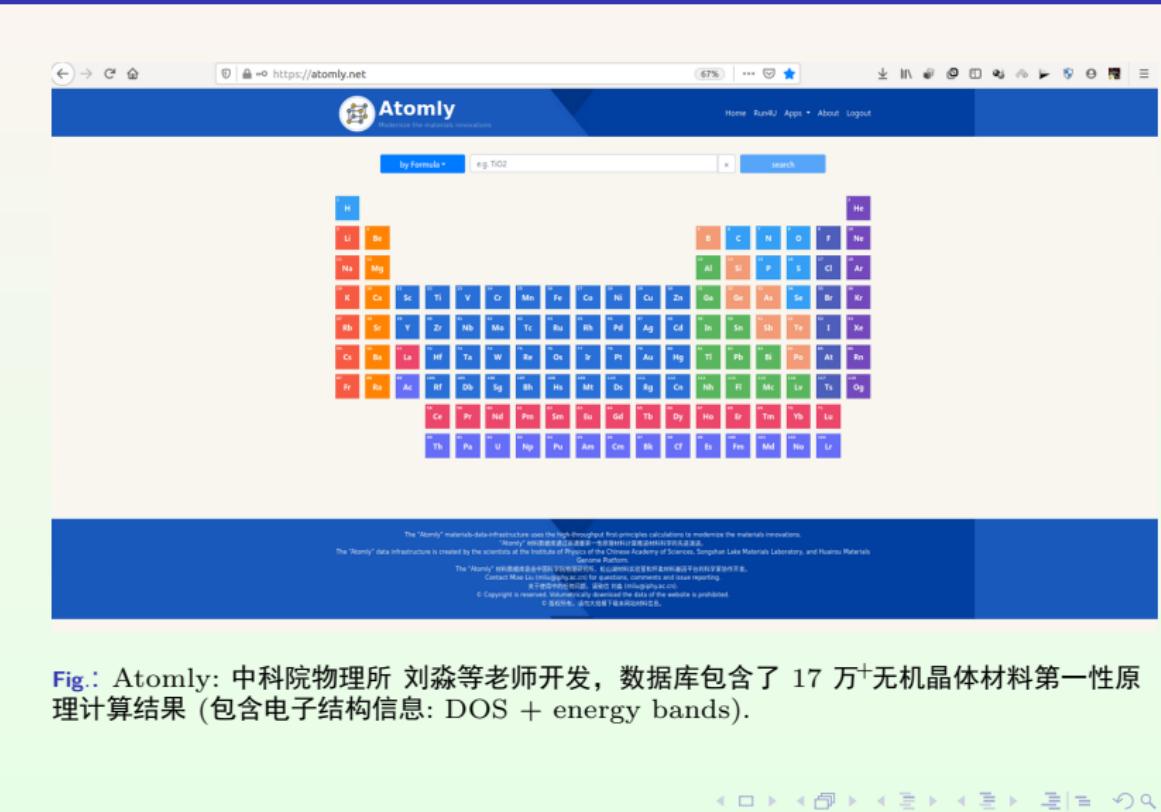
Fig.: ASE: a Python library for working with atoms.

Atomly: 物理所的无机晶体材料计算数据库

第一原理计算
软件简介与应
用

高通量材料计
算平台开发现
状

MP 与 ASE



The screenshot shows the Atomly website's main interface. At the top, there is a search bar with the URL <https://atomly.net>. Below the search bar is a large periodic table where each element is represented by a small icon and its symbol. A search bar with the placeholder "e.g. TiO₂" and a "search" button are positioned above the table. The footer contains the following text:

The "Atomly" materials-data-infrastructure uses the high-throughput first-principles calculations to maximize the materials innovations.
The "Atomly" data-infrastructure is created by the scientists at the Institute of Physics of the Chinese Academy of Sciences, Shengxing-Late Materials Laboratory, and Huaxiao Materials Research Platform.

Contact Atomly@itpm.ac.cn for questions, comments and issue reporting.
未经许可不得转载。未经授权不得使用本网站上的任何信息。
© Copyright is reserved. Any unauthorized use of the information on this website is prohibited.

At the bottom, there is a navigation bar with icons for back, forward, search, and other website functions.

Fig.1: Atomly: 中科院物理所 刘淼等老师开发, 数据库包含了 17 万+无机晶体材料第一性原
理计算结果 (包含电子结构信息: DOS + energy bands).

第一原理计算软件简介与应用

计算平台的功能和总体架构

第一原理计算
软件简介与应用

高通量材料计
算平台开发现
状

MP 与 ASE

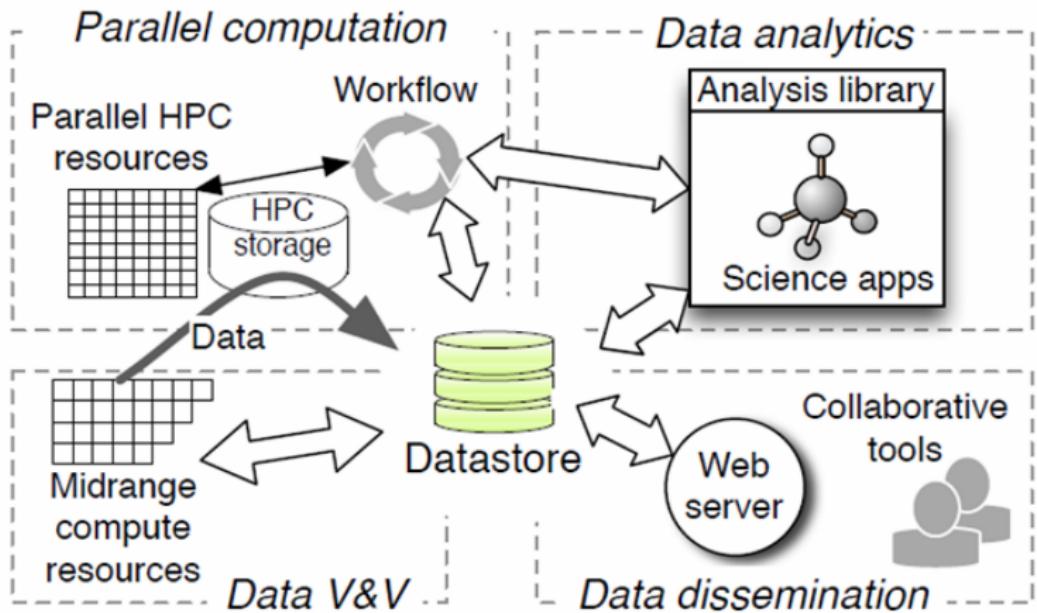


Fig.: The schematic framework and platform of all those project.

现有高通量计算平台概览

	编程语言	建模功能	任务提交与管理		后处理	数据组织管理
			软件接口	运行容错		
AFLOW	C++	✓	△	☆	☆	Django
MP	Python	✓	✓	☆	☆	MongoDB
QMIP	JavaScript/SVG +html/Python	✓	✓	—	✓	—
CEP	Python	✓	✓	—	✓	Django/MySQL
ASE	Python	☆	☆	—	△	—
MatCloud	JavaScript +.NETCore	✓	△	✓	✓	MongoDB

☆ 该功能较突出

✓ 该功能基本满足需求

△ 该功能存在不足

Lin L. Materials databases infrastructure constructed by first principles calculations: a review. **Mater. Perform. Character.**, 2015, 4(1):148.

MP 自动流程的设计与开发

- **设计目标:** 围绕 VASP 作业高通量并发提交与过程监控
- **设计方案:** 开发针对不同计算场景的功能模块

1 Pymatgen

前处理: 计算模型的分析与预处理

后处理: 计算结果的可视化

2 FireWorks

计算流程设计与管理: 数据库支持的计算流程管理

3 Custodian

计算流程容错与应对: 提供计算过程错误判断接口, 由用
户提供解决策略和针对性设计

Pymatgen 的模块结构

第一原理计算
软件简介与应用

高通量材料计
算平台开发现
状

MP 与 ASE

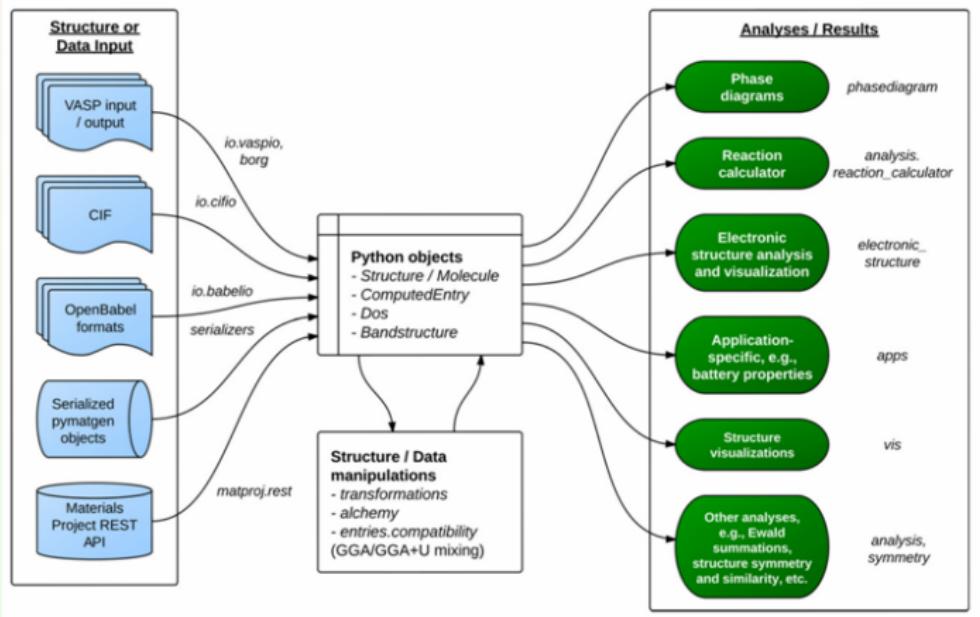


Fig.: Overview of a typical workflow for pymatgen.

Pymatgen 可展示的材料物性

第一原理计算
软件简介与应
用

高通量材料计
算平台开发现
状

MP 与 ASE

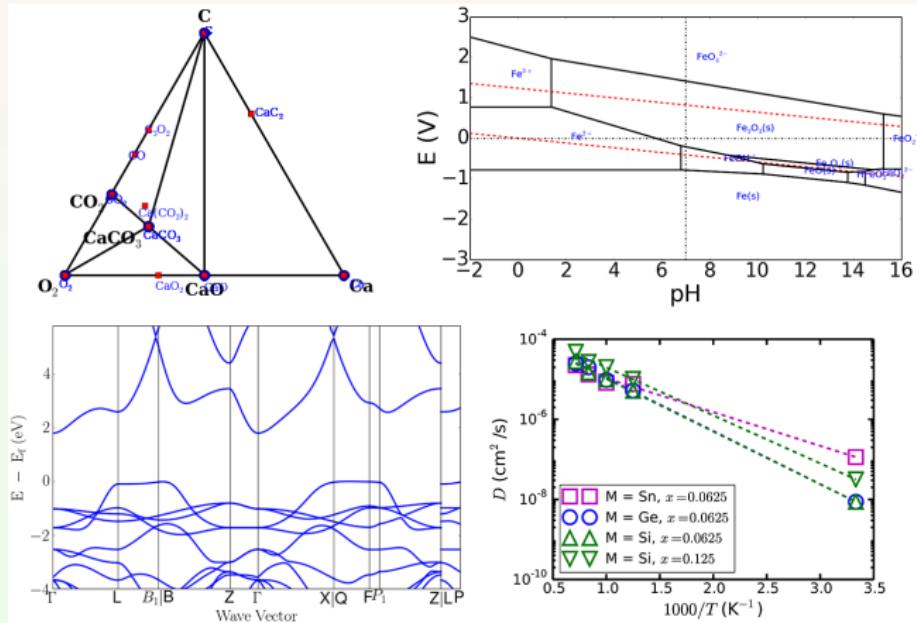


Fig.: Top left: Phase; Top right: Pourbaix diagram from the Materials API.
 Bottom left: Calculated bandstructure plot using pymatgen's parsing and plotting utilities.
 Bottom right: Arrhenius plot using pymatgen's Diffusion Analyzer.

FireWorks 的模块结构

- Firetask: 基本执行单元，是执行计算的最基本脚本命令或 Python 命令。
- Firework: 组织基本执行单元构成任务单元组，并指定各基本执行单元所需的参数。
- Workflow: 彼此相关联的任务单元组构成完整的工作流程：FireWork 之间的数据传递、任务执行序列等由 FWAction 完成。

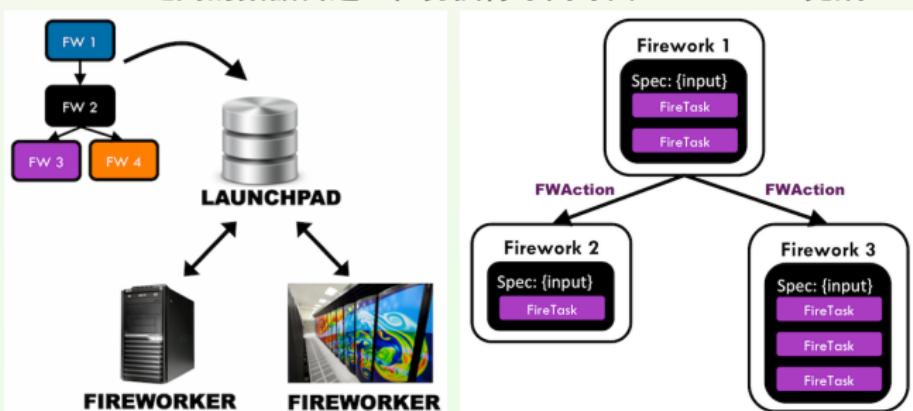


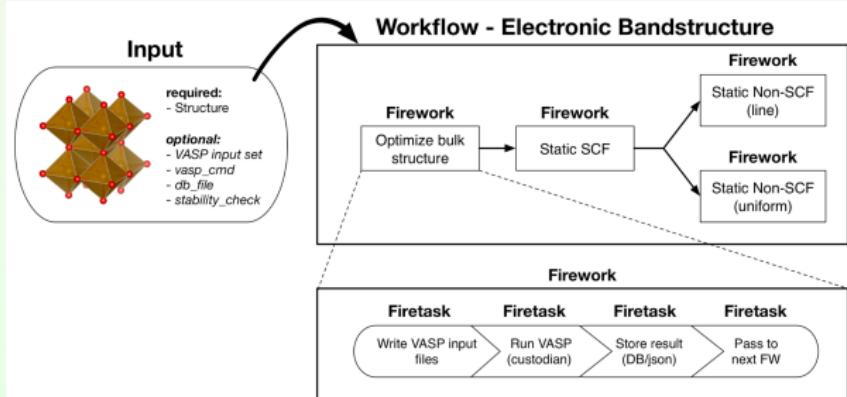
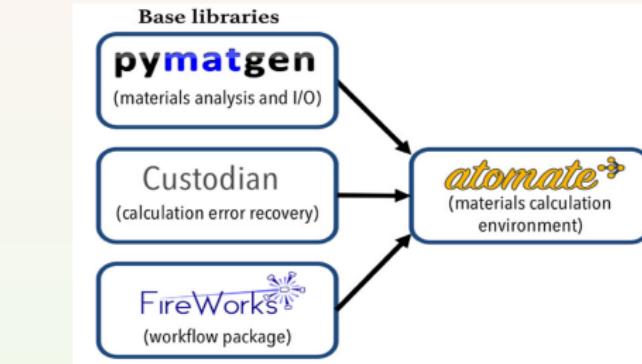
Fig.: The basic infrastructure of FireWorks.

atomate: 计算流程控制示范

第一原理计算
软件简介与应
用

高通量材料计
算平台开发现
状

MP 与 ASE



ASE 自动流程的设计与管理

ASE: 模块加载式计算流程控制，更符合复杂多尺度计算场景

- 灵活的建模功能

- 1 简单堆积: 原子直接组成分子

- 2 理想周期体系 (包括一维、二维、三维)

- 3 表面和表面吸附，可指定吸附位

- 丰富的软件接口

- 提供了包括绝大部分第一原理和分子动力学计算软件接口，
方便组合实现多尺度计算

- 不依赖软件的优化与动力学模拟

- 适合复杂材料物性模拟的优化和多种动力学过程模拟

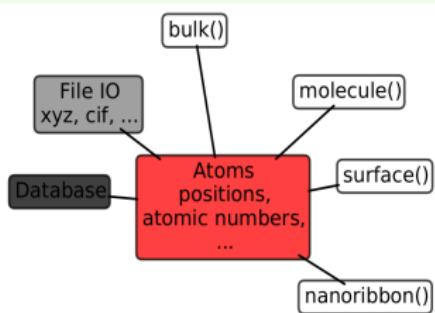
- 多样化的数据库类型

ASE 特色: 材料结构生成模块

第一原理计算
软件简介与应
用

高通量材料计
算平台开发现
状

MP 与 ASE



```

from ase import Atoms
h2 = Atoms('H2', [(0, 0, 0), (0, 0, 0.74)])
from ase.structure import molecule
water = molecule('H2O')
from ase.lattice import bulk
si2 = bulk('Si')
from ase.lattice.spacegroup import crystal
rutile = crystal(['Ti', 'O'],
                 basis=[(0, 0, 0), (u, u, 0)],
                 spacegroup=136,
                 cellpar=[a, a, c,
                          90, 90, 90])
from ase.lattice.surface import fcc110
slab = fcc110('Pt', (2, 1, 7), a=4.0,
              vacuum=6.0)
from ase.lattice.surface import add_adsorbate
add_adsorbate(slab, 'H', site='hollow')
from ase.lattice.surface import surface
nasty_cut = surface(rutile, (1, 1, 0),
                     layers=5)
from ase.io import read
q = read('quarts.cif')
import ase.db
con = ase.db.con('mystuff.db')
atoms = con.get_atoms(foo='bar', H=0)
# same as this:
atoms = read('mystuff.db@foo=bar,H=0')
  
```

ASE 特色: 软件接口丰富



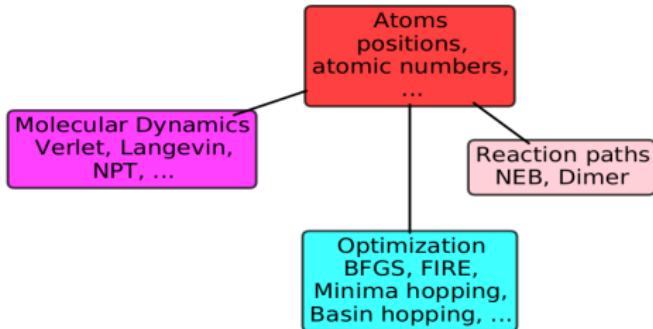
Fig.: The integrated calculator in ASE.

ASE 特色: 提供多种优化算法模块和数据库

第一原理计算
软件简介与应
用

高通量材料计
算平台开发现
状

MP 与 ASE



Taxonomy:

- Atoms object (positions, atomic numbers, ...)
- ID, user-name, creation and modified time
- Constraints
- Calculator name and parameters
- Energy, Forces, Stress tensor, dipole moment, magnetic moments

Folksonomy:

- Key-value pairs
- Keywords

Additional stuff:

- extra data (band structure, ...)

Back-ends: JSON, SQLite3 and PostgreSQL.

学习知识不是越多越好，而是应当
与自己驾驭知识的能力相匹配。

黄昆



一九九〇·十一月

Fig.: 黄昆 教授的治学名言

主要参考文献

- [1] G. Kresse and M. Marsman and J. Furthmüller, *Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP) the Guide*. Computational Materials Physics, Faculty of Physics, Universität Wien, Austria (2016)
- [2] P. Blaha, K. Schwarz, G. Madsen, D. Kvasnicka and J. Luitz. *User's Guide of WIEN2K, An Augmented Plane Wave Plus Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties*. Vienna University of Technology, Inst. of Physical and Theoretical Chemistry, Vienna, Austria (2012)
- [3] X. Yang, Z. Wang, X. Zhao and H. Liu *Comp. Mater. Sci.*, **146** (2018), 319
- [4] <http://matcloud.cnic.cn>
- [5] S. Curtarolo, W. Setyawan, S. Wang, J. Xue, K. Yang, R. H. Taylor, L. J. Nelson, G. L. Hart, S. Sanvito, M. Buongiorno-Nardelli, N. Mingo and O. Levy *Comp. Mater. Sci.*, **58** (2012), 227
- [6] S. P. Ong, S. Cholia, A. Jain, M. Brafman, D. Gunter, G. Ceder and K. A. Persson. *Comp. Mater. Sci.*, **97** (2015), 209
- [7] <http://www.qmip.org/qmip.org/Welcome.html>
- [8] J. Hachmann, R. Olivares-Amaya, S. Atahan-Evrnek, C. Amador-Bedolla, R. S. Sánchez-Carrera, A. Gold-Parker, L. Vogt, A. M. Brockway and A. Aspuru-Guzik *J. Phys. Chem. Lett.*, **2** (2011), 2241
- [9] L. Lin *Mater. Perform. Character.*, **4** (2015), 148

第一原理计算
软件简介与应
用

高通量材料计
算平台开发现
状

MP 与 ASE

谢谢大家！