

课题一任务进展

北京市计算中心 姜骏

清华大学 物理系

2018.07.26-27

课题一任务进展

北京市计算中心 姜骏

材料计算中的对称性问题

自动流程框架与软件

1 材料计算中的对称性问题

2 自动流程框架与软件

对称性模块与电子结构计算

- 第一原理计算中，材料初始结构经过弛豫会引起晶胞参数和原子坐标改变，体系对称性也可能发生变化。
- 材料的电子能带结构表示与体系的对称性密切关联

高通量自动流程中的对称性模块

- 高通量计算中，利用对称性可以有效地降低计算量且不损失计算精度
- 没有完整的材料结构数据库支持，第一原理“结构弛豫-静态计算-能带表示”自动流程闭环必须有对称性模块支持

传统能带计算的问题

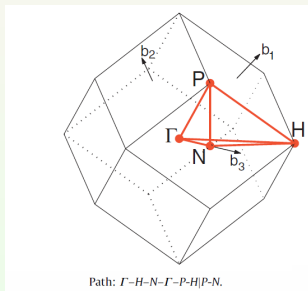
课题一任务进展

北京市计算中心 姜骏

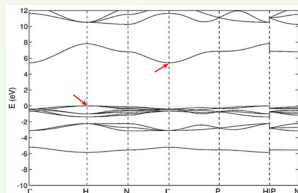
材料计算中的对称性问题

自动流程框架与软件

初基原胞相同的材料电子结构表现出一定的相似性，但传统能带计算和表示的 \vec{k} 点路径 (\vec{k} -Path) 选择有着明显的人为性和任意性



(a) Brillouin Zone of BCC lattice



(b) Band structure of GeF_4

利用对称性模块实现能带表示路径 \vec{k} -path “标准化”，对于高通量材料电子结构数据挖掘有着重要意义

标准化的对称性模块



课题一任务进展

北京市计算中心 姜骏

材料计算中的对称性问题

自动流程框架与软件

1 结构文件转换子模块: 不同格式的结构文件间的相互转换

2 对称性分析功能子模块

- 确定原胞的点群、空间群和对称操作矩阵
- 标准化的初基原胞 (primitive cell)

按晶轴长度和晶面夹角的大小确定晶格矢量排列顺序

3 标准化 \vec{k} 点生成子模块^[1]

- 确定 14 种 Bravais 格子所有标准化 Wigner-Seitz 原胞
- 确定所有高对称性点的分数坐标和能带图中 \vec{k} -path

4 标准化结构参数的数据存储: 元素、晶格、对称性等信息

现有 VASP 软件的对称性判断

课题一任务进展

北京市计算中心 姜骏

材料计算中的
对称性问题

自动流程框架
与软件

```
Analysis of symmetry for initial positions (statically):  
=====  
Subroutine PRICEL returns:  
Original cell was already a primitive cell.  
  
Routine SETGRP: Setting up the symmetry group for a  
face centered cubic supercell.  
  
Subroutine GETGRP returns: Found 48 space group operations  
(whereof 24 operations were pure point group operations)  
out of a pool of 48 trial point group operations.  
  
The static configuration has the point symmetry T_d .  
The point group associated with its full space group is O_h .
```

Figure: Analysis of symmetry in VASP.

VASP 软件的对称性判断与功能解析

课题一任务进展

北京市计算中心 姜骏

材料计算中的对称性问题

自动流程框架与软件

VASP 软件的对称性判断，确定体系的点群对称性

- 模块**LATTYP**: 晶胞结构的标准化

- 1 根据 POSCAR 中的原始矢量，确定所属 Bravais 格子和晶胞参数
- 2 确定最小晶格矢量

- 模块**PRICEL**: 确定初基原胞 (primitive cell)

- 模块**CHKSYM**: 确定体系的对称操作

- 1 依次检查点群对称元素是否是有效的对称操作
- 2 判断对称操作是否属于对应的点群:
 - 所有的原子位置可重合 (纯粹的点群操作)
 - 点群对称操作, 须外加滑移对称性 (空间群操作)
 - 原子位置无法重合 (不允许的对称操作)

对称性判断与能带路径标准化

课题一任务进展

北京市计算中心 姜骏

材料计算中的对称性问题

自动流程框架与软件

- 基于 VASP 的对称性分析, 标准化 \vec{k} -path 路径的自动生成 (针对不同 Bravais 格子, 枚举“标准化”路径的 \vec{k} -点分布)

```

.....check lattice and generate symmetry operations
call latsym(nsym, amat, atrans, nat)
allocate (iatnr(nat), spos(3, nat*48*16))
allocate ( pos(3, nat*48*16), index1(nat), index2(nat))
allocate ( name(nat), mult(nat), mult0(nat), iatnr(nat*48*16))
.....read POSCAR file
rewind 20
call rstruc(title, lattic, nat, a, alpha, index2, iatnr, &
  index1, pos, mult, mult0, name, iatnr)

gmax=12.d0
rewind 20
.....START READING/Writing FILE SYNTH (first 4 lines)
do 5 i=1,4
  READ(20,1510) TITLE
5  write(21,1510) TITLE
1510 FORMAT(A79)

  read(17,*,end=778)
  read(17,*,end=778)
  read(17,*,end=778)
778 continue
  noper1=noper
  if(lattic(1:1).eq.'H') noper1=24
  if(lattic(1:1).eq.'R') noper1=24
  nbas=index2(nat)
  nbas=index
  write(*,*) alpha
  write(6,199) nbas
  do 777 im=1, nbas
  write(6,*) im, iatnr(im), (pos(k, im), k=1,3)
777
  tol=1.e-3
  pl=4.d0*atan(1.d0)

```

```

/* decompositions of primitive vectors over vectors of elem. cell */
/* 1 vector is 1 column, ... */
int get_Telpr(int lat, double Telpr[3][3])
{
  switch( lat ) {
    case CUBIC_P:
    case HEXAGONAL:
    case TETRAGONAL_P:
    case ORTHOROMBIC_P:
    case MONOCLINIC_P:
    case TRICLINIC:
      Telpr[0][0]= 1.; Telpr[0][1]= 0.; Telpr[0][2]= 0.;
      Telpr[1][0]= 0.; Telpr[1][1]= 1.; Telpr[1][2]= 0.;
      Telpr[2][0]= 0.; Telpr[2][1]= 0.; Telpr[2][2]= 1.;
      break;

    case CUBIC_I:
    case TETRAGONAL_I:
    case ORTHOROMBIC_I:
      Telpr[0][0]=-0.5; Telpr[0][1]= 0.5; Telpr[0][2]= 0.5;
      Telpr[1][0]= 0.5; Telpr[1][1]=-0.5; Telpr[1][2]= 0.5;
      Telpr[2][0]= 0.5; Telpr[2][1]= 0.5; Telpr[2][2]=-0.5;
      break;

    case CUBIC_F:
    case ORTHOROMBIC_F:
      Telpr[0][0]= 0.0; Telpr[0][1]= 0.5; Telpr[0][2]= 0.5;
      Telpr[1][0]= 0.5; Telpr[1][1]= 0.0; Telpr[1][2]= 0.5;
      Telpr[2][0]= 0.5; Telpr[2][1]= 0.5; Telpr[2][2]= 0.0;
      break;

    case ORTHOROMBIC_C:
      Telpr[0][0]= 0.5; Telpr[0][1]= 0.5; Telpr[0][2]= 0.0;
      Telpr[1][0]=-0.5; Telpr[1][1]= 0.5; Telpr[1][2]= 0.0;
      Telpr[2][0]= 0.0; Telpr[2][1]= 0.0; Telpr[2][2]= 1.0;
      break;
  }
}

```

(a) Procedure for Point-Group

(b) Procedure for \vec{k} -path generation

标准化结构参数的数据存储子模块

课题一任务进展

北京市计算中心 姜骏

材料计算中的对称性问题

自动流程框架与软件

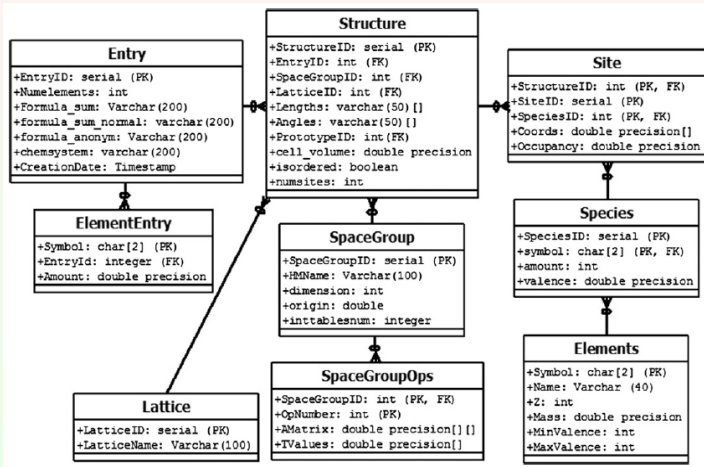


Figure: Basic database schema for storing periodic crystal structures. Ref[2]

VASP 软件的对称性判断与能带绘制

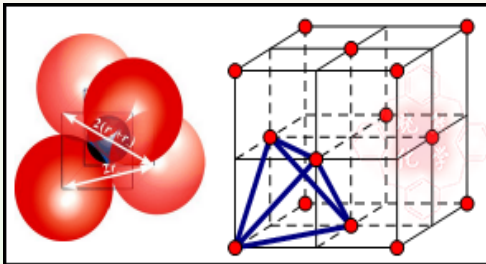
课题一任务进展

北京市计算中心 姜骏

材料计算中的
对称性问题

自动流程框架
与软件

以面心立方的 Si 为例，其结构和对应的 POSCAR 文件可以选为



```

1 Si
2 1.0000000000000000
3 3.8999999999999999 0.0000000000000000 0.0000000000000000
4 0.0000000000000000 3.8999999999999999 0.0000000000000000
5 0.0000000000000000 0.0000000000000000 3.8999999999999999
6 4
7 Cartesian
8 0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
9 0.0000000000000000 1.9500000000000000 1.9500000000000000
10 1.9500000000000000 0.0000000000000000 1.9500000000000000
11 1.9500000000000000 1.9500000000000000 0.0000000000000000
    
```

```

1 Si
2 1.0000000000000000
3 0.0000000000000000 1.9500000000000000 1.9500000000000000
4 1.9500000000000000 0.0000000000000000 1.9500000000000000
5 1.9500000000000000 1.9500000000000000 0.0000000000000000
6 1
7 Cartesian
8 0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000
    
```

Figure: The FCC Si and its possible POSCAR for VASP.

VASP 软件的对称性判断与能带绘制



北京市计算中心
Beijing Computing Center

课题一任务进展

北京市计算中心 姜骏

材料计算中的对称性问题

自动流程框架与软件

在 VASP 中，对应的对称性判断为

```
135 Analysis of symmetry for dynamics (positions and initial velocities):
136 =====
137 Subroutine PRICEL returns following result:
138
139 LATTYP: Found a face centered cubic cell.
140 ALAT = 3.9000000000
141
142 Lattice vectors:
143
144 A1 = ( 1.9500000000, 1.9500000000, 0.0000000000)
145 A2 = ( 1.9500000000, 0.0000000000, -1.9500000000)
146 A3 = ( 0.0000000000, 1.9500000000, -1.9500000000)
147
148 4 primitive cells build up your supercell.
149
150
151 Routine SETGRP: Setting up the symmetry group for a
152 simple cubic supercell.
153
154
155 Subroutine GETGRP returns: Found 48 space group operations
156 (whereof 48 operations were pure point group operations)
157 out of a pool of 48 trial point group operations.
158
159
160 The dynamic configuration has the point symmetry O_h .
161
162
163 Subroutine INISYM returns: Found 48 space group operations
164 (whereof 48 operations are pure point group operations),
165 and found 4 'primitive' translations
166
167
168
169 KPOINTS: kpoints for bandstructure L-G-X-U K-G
170 interpolating k-points between supplied coordinates
171 k-points in reciprocal lattice
172 +-- 53 lines: Space group operators:-----
225
```

```
118 Analysis of symmetry for dynamics (positions and initial velocities):
119 =====
120 Subroutine PRICEL returns:
121 Original cell was already a primitive cell.
122
123
124 Routine SETGRP: Setting up the symmetry group for a
125 face centered cubic supercell.
126
127
128 Subroutine GETGRP returns: Found 48 space group operations
129 (whereof 48 operations were pure point group operations)
130 out of a pool of 48 trial point group operations.
131
132
133 The dynamic configuration has the point symmetry O_h .
134
135
136 Subroutine INISYM returns: Found 48 space group operations
137 (whereof 48 operations are pure point group operations),
138 and found 1 'primitive' translations
139
140
141
142 KPOINTS: kpoints for bandstructure L-G-X-U K-G
143 interpolating k-points between supplied coordinates
144 k-points in reciprocal lattice
145 +-- 53 lines: Space group operators:-----
198
```

VASP 软件的对称性判断与能带绘制

课题一任务进展

北京市计算中心 姜骏

材料计算中的对称性问题

自动流程框架与软件

根据 VASP 计算得到 FCC-Si 的电子结构:Band

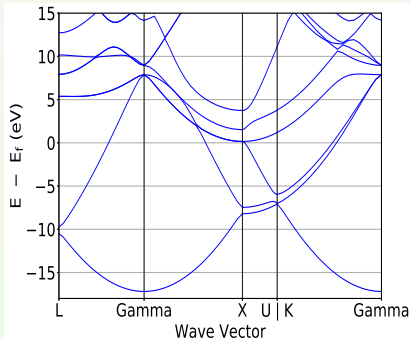
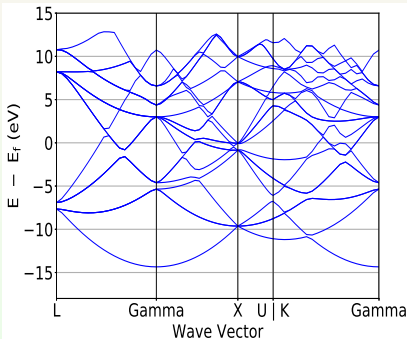


Figure: The Band-structure of FCC-Si from VASP.

VASP 软件的对称性判断与能带绘制

课题一任务进展

北京市计算中心 姜骏

材料计算中的对称性问题

自动流程框架与软件

根据 VASP 计算得到 FCC-Si 的电子结构:DOS

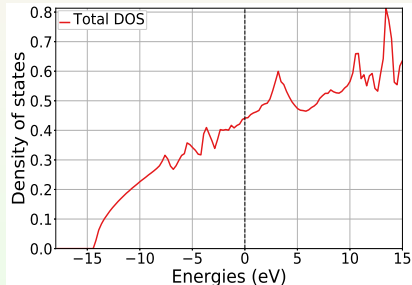
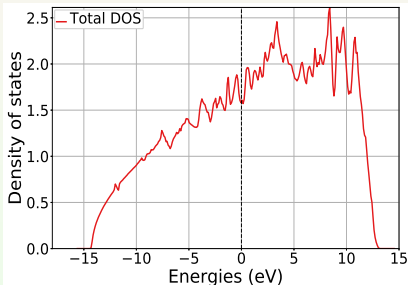


Figure: The Density of States of FCC-Si from VASP.

初基原胞 (primitive cell) 用能带表示电子结构: 包含对称性信息

超晶胞 (super cell) 适合用态密度表示电子结构信息

后续工作: 复杂体系的对称性

课题一任务进展

北京市计算中心 姜骏

材料计算中的对称性问题

自动流程框架与软件

在 VASP 中, $\text{Ni} : \text{Ni}_3\text{Al}$ 体系的对称性判断,

```

404 0.714 0.500 0.727- 336 2.48 336 2.48 335 2.49 341 2.49 294 2.52 296 2.52 295 2.52 297 2.52
      337 2.52 339 2.52 338 2.53 340 2.53
405 0.768 0.000 0.727- 342 2.47 341 2.48 341 2.48 336 2.48 295 2.51 297 2.51 340 2.52 338 2.52
      345 2.53 343 2.53 300 2.53 302 2.53
406 0.821 0.500 0.727- 305 2.39 341 2.48 342 2.48 342 2.48 300 2.51 302 2.51 345 2.51 343 2.51
      301 2.55 303 2.55 346 2.57 344 2.57

LATTYP: Found a simple orthorhombic cell
ALAT = 4.9593281648
B/A-ratio = 7.0799877646
C/A-ratio = 9.3779261949

Lattice vectors:
A1 = ( 0.0000000000, 4.9593281648, 0.0000000000)
A2 = ( 0.0000000000, 0.0000000000, -35.1119827273)
A3 = ( -46.5082135057, 0.0000000000, 0.0000000000)

Analysis of symmetry for initial positions (statically):
=====
Subroutine PRICEL returns:
Original cell was already a primitive cell.

Routine SETGRP: Setting up the symmetry group for a
simple orthorhombic supercell.

Subroutine GETGRP returns: Found 4 space group operations
(whereof 4 operations were pure point group operations)
out of a pool of 8 trial point group operations.

The static configuration has the point symmetry C2v.

Analysis of symmetry for dynamics (positions and initial velocities):
=====

```

后续工作: 复杂体系的对称性

课题一任务进展

北京市计算中心 姜骏

材料计算中的对称性问题

自动流程框架与软件

- 当前的对称性判断程序主要针对简单体系:
初基原胞 (primitive cell) 是对称性判断的核心
- 程序中已经考虑了体系中平移操作的判断, 但没有给出确定空间群 (Space-Group) 方案
- 针对超晶胞 (super-cell), 特别是合金体系, 有更复杂的需求
 - 如何快速地确定实际最小重复单元及其元素组成
 - 合金元素的存在对于对称性判断的影响
 - 界面与多相合金对于对称性判断的影响

计算主体框架的基本构想

课题一任务进展

北京市计算中心 姜骏

材料计算中的对称性问题

自动流程框架与软件

- 统一的高通量自动流程的数据格式
- 自动执行的多尺度、高通量计算流程，实现多组元材料体系从微观到宏观的结构、物性和服役行为的全链条多尺度集成计算
- 多尺度、高通量、高并发计算过程中不同计算任务间的高效信息传递、储存
- 规范定义不同模块间的 I/O 接口，搭建集成计算环境框架

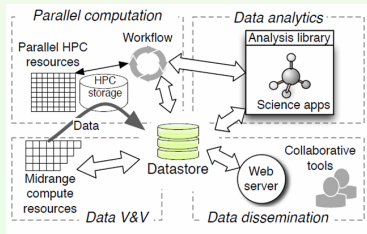


Figure: High throughput architecture. The datastore serves all four functions, clockwise from upper-left: Parallel computation, Data analytics, Data dissemination, and Data

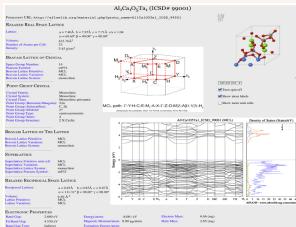
国内外已有的计算平台

课题一任务进展

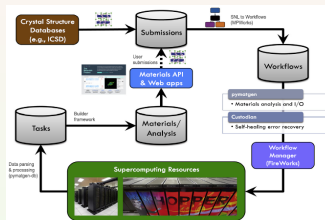
北京市计算中心 姜骏

材料计算中的对称性问题

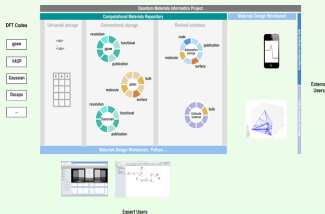
自动流程框架与软件



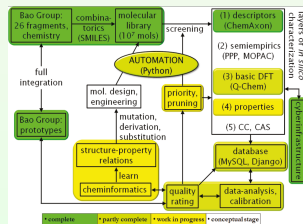
(a) Auto-FLOW (AFLOW)^[4]



(b) Material Project (MP)^[5]



(c) Quantum Materials Informatics Project (QMIP)^[6]



(d) Clean Energy Project (CEP)^[7]

基于 ASE 设计的多尺度计算

课题一任务进展

北京市计算中心 姜骏

材料计算中的
对称性问题

自动流程框架
与软件



Figure: The integrated calculator in ASE (Atomic Simulation Environment).

计算平台的作业自动提交: 基于 ASE

课题一任务进展

北京市计算中心 姜骏

材料计算中的对称性问题

自动流程框架与软件

```

1 from math import pi, cos, sin
2 from ase.test.vasp import installed
3 assert installed()
4 from ase import Atoms
5 from ase.io import write
6 from ase.calculators.emt import EMT
7 from ase.calculators.vasp import Vasp
8 from ase.constraints import FixBondLengths, FixAtoms
9 from ase.optimize import BFGS
10 from ase.build import molecule, fcc111, add_adsorbate
11 import numpy as np
12
13 #for wrap in [False, True]:
14 #    rpo0 = cos(134.3 / 2.0 * pi / 180.0) * 1.197
15 #    rpo0 = sin(134.3 / 2.0 * pi / 180.0) * 1.19
16 #    rpo = Atoms('COO', positions=[(-rpo0 + 1.2, 0, -rpo0),
17 #                                     (-rpo0 + 1.2, -1.1, -rpo0),
18 #                                     (-rpo0 + 1.2, 1.1, -rpo0)])
19 CH4 = molecule('CH4')
20 O2 = molecule('O2')
21
22 slab = fcc111('Rh', size=(2, 2, 4), vacuum=2 * 5, orthogonal=True)
23 # slab = fcc111('Au', size=(2, 2, 4), vacuum=2 * 5, orthogonal=False)
24 slab.center()
25 add_adsorbate(slab, CH4, 1.5, 'bridge')
26 # add_adsorbate(slab, O2, 1.5, position=(1.5,0.0))
27 add_adsorbate(slab, O2, 1.5, position=(-1.5,0.0))
28 slab.set_constraint(FixAtoms(indices=[0,17]))
29 # slab.set_constraint(FixAtoms(mask=slab.positions[0:18,1]))
30 slab.set_pbc((True, True, False))
31
32 calc = Vasp(
33     xc = 'PBE',
34     prec = 'Low',
35     algo = 'Fast',
36     ismear = 0,
37     sigma = 1.,
38     istsart = 0,
39     lwave = False,
40     lcharg = False)
41
42 slab.set_calculator(calc)
43 en = slab.get_potential_energy()
44 # if wrap:

```

计算平台的结果展示: 基于 Pymatgen



课题一任务进展

北京市计算中心 姜骏

材料计算中的
对称性问题

自动流程框架
与软件

```
1 import pymatgen as mg
2 from pymatgen.io.vasp.outputs import BSVasprun, Vasprun
3 # from pymatgen import Spin
4 from pymatgen.electronic_structure.plotter import BSPlotter, BSDOSPlotter, DosPlotter
5
6 import matplotlib.pyplot as plt
7 # matplotlib inline
8
9 run = BSVasprun("vasprun.xml", parse_projected_eigen=True)
10 dosrun = Vasprun("DOS/vasprun.xml", parse_dos=True)
11 # dosrun = Vasprun("vasprun.xml", parse_dos=True)
12 dosrun = Vasprun("vasprun.xml")
13 dos = dosrun.complete_dos
14
15 bs = run.get_band_structure("KPOINTS")
16 bsdosplot = BSDOSPlotter(
17     bs_projection="elements",
18     dos_projection="elements",
19     vb_energy_range=18,
20     cb_energy_range=15,
21     egrid_interval=2.5
22 )
23 plt = bsdosplot.get_plot(bs, dos=dos)
24 # plt = bsdosplot.get_plot(bs)
25 # plt.show()
26 plt.savefig("Band_DOS.eps", format="eps")
27 # plt.savefig("Band_DOS", dpi=100)
28 plt.close()
29
30 dosplot = BSDOSPlotter(
31     bs_projection="elements",
32     dos_projection="elements",
33     vb_energy_range=18,
34     cb_energy_range=15,
35     egrid_interval=2.5
36 )
37 plt = dosplot.get_plot(bs, dos=dos)
38 plt.show()
```

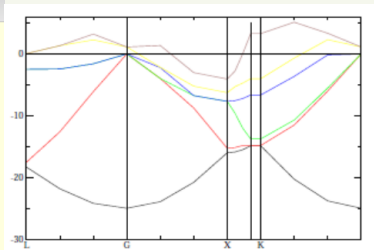
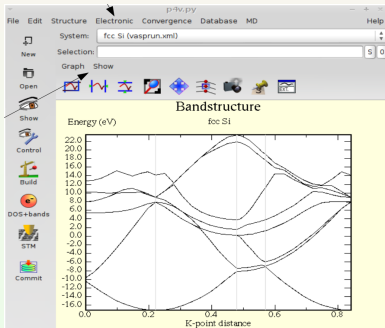
北京市计算中心 姜骏

课题一任务进展

结果示例: FCC-Si

算例来源:

http://cms.mpi.univie.ac.at/wiki/index.php/Fcc_Si_bandstructure



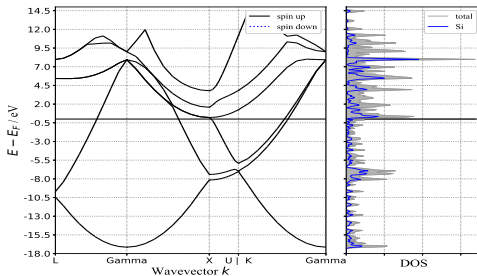
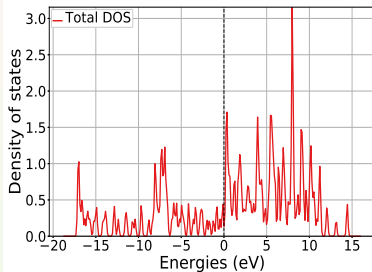
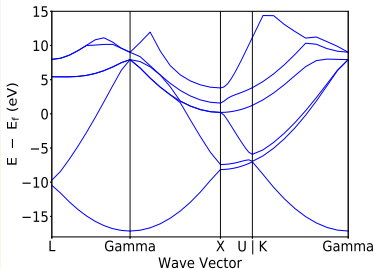
结果示例: FCC-Si

课题一任务进展

北京市计算中心 姜骏

材料计算中的对称性问题

自动流程框架与软件



基于 ASE 和 Pymatgen 的自动流程

课题一任务进展

北京市计算中心 姜骏

材料计算中的
对称性问题

自动流程框架
与软件

- ASE 和Pymatgen 都是基于 Python 开发的，易于整合
为实现跨平台的高通量并发式集成计算提供了软件基础
- ASE (建模-计算)
 - 1 方便的材料建模能力 (有扩展余地)
 - 2 为多种第一原理和分子动力学软件提供接口，方便各类软件输入参数控制
- Pymatgen (表示-分析)
 - 1 为计算结果 (能带、DOS、相图等) 可视化提供了多种工具
 - 2 提供数据库管理相关工具 (使用方式待了解)
- 当前自动流程的实现，要求用户
 - 1 有一定的 Python 语言基础
 - 2 对ASE 和Pymatgen 的功能模块有一定了解

主要参考文献

课题一任务进展



W. Setyawan and S. Curtarolo *Comp. Mater. Sci.*, **49** (2010), 299

北京市计算中心 姜骏



A. Jain, G. Hautier, C. J. Moore, S. P. Ong, C. C. Fischer, T. M. Kristin, K. A. Persson and G. Ceder *Comp. Mater. Sci.*, **50** (2011), 2295

材料计算中的对称性问题



D. Gunter, S. Cholia, A. Jain, M. Kocher, K. Persson, L. Ramakrishnan, S. P. Ong and G. Ceder. *Community Accessible Datastore of High-Throughput Calculations: Experiences from the Materials Project* (unpublished)

自动流程框架与软件



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



S. P. Ong, S. Cholia, A. Jain, M. Brafman, D. Gunter, G. Ceder and K. A. Persson. *Comp. Mater. Sci.*, **97** (2015), 209



<http://www.qmip.org/qmip.org/Welcome.html>



J. Hachmann, R. Olivares-Amaya, S. Atahan-Evrenk, 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

课题一任务进展

北京市计算中心 姜骏

材料计算中的
对称性问题

自动流程框架
与软件

谢谢大家！