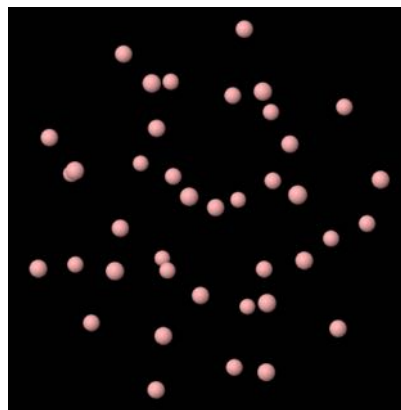


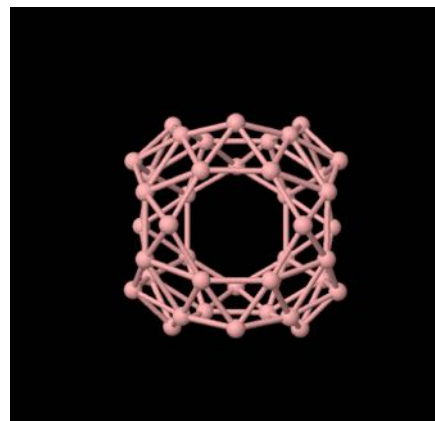
LASP 使用入门2 – 全局优化

利用势能面的能量和力寻找热力学最稳定的结构

参见 LASP
examples
NN-1; NN-2



随机表面行走
(SSW)



lasp.in

关键词

Explore_type ssw

选择SSW模块

选择SSW
任务类型

Run_type 5

晶胞大小固定

适用无周期性分子，团簇
固定晶胞的表面

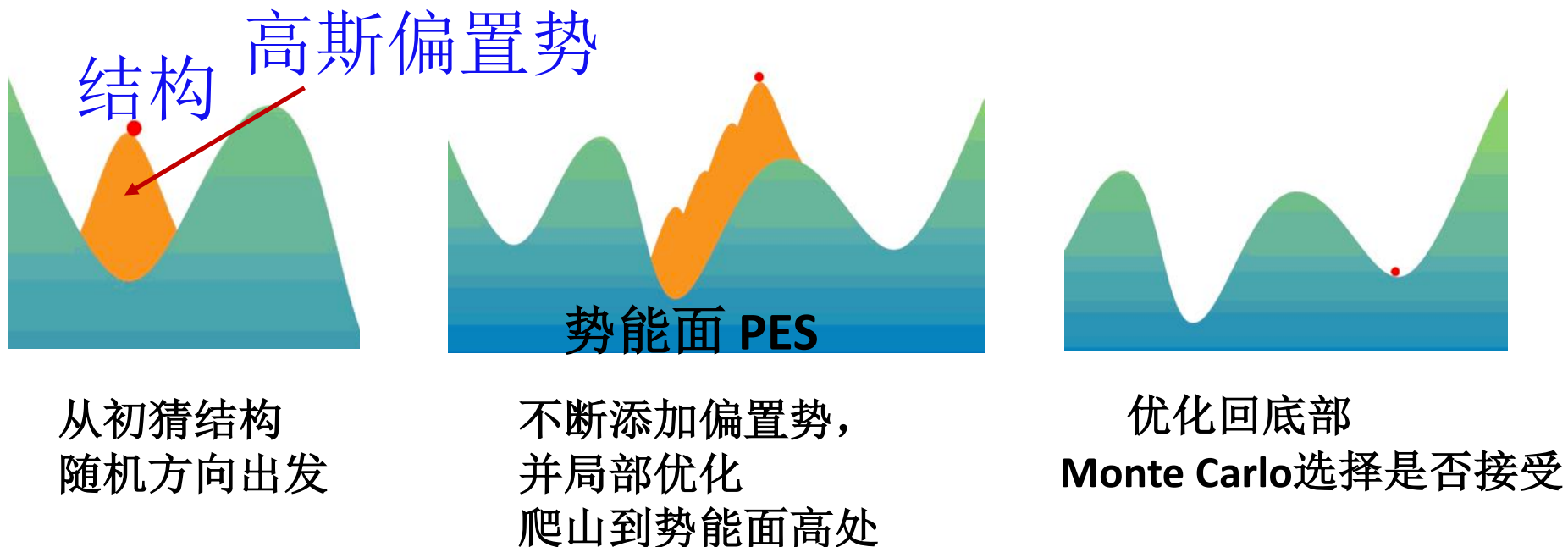
Run_type 15

晶胞大小可动

适用周期性固体（晶体）

LASP 使用入门2 - 全局优化

随机表面行走 (SSW) 工作原理



LASP 使用入门2 – 全局优化

总控制关键词

重要：全局优化是数学上 NP-Hard 问题。多原子数，玻璃/分子晶体等体系，需要非常多 SSW 步数

SSW.SSWsteps **10000** 设定 SSW 步数

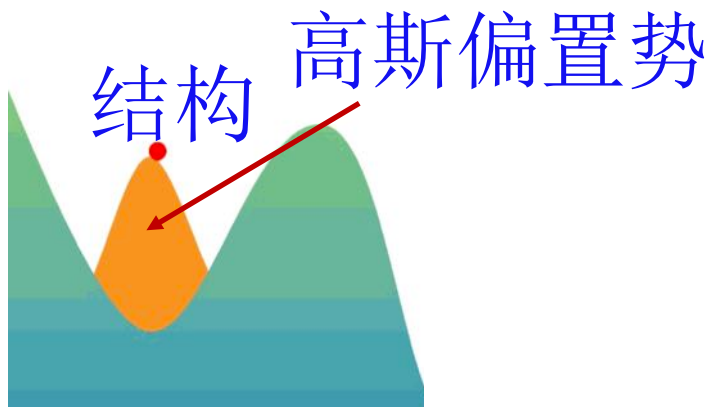
SSW.output **T/F** 设定 lasp.out 输出的多少

重要：如果采用第一性原理计算，建议打开输出结构，为后续神经网络拟合准备数据

SSW.printevery **T/F** 设定是否输出每一步的结构和力

SSW.printselect **0--6** 设定从 SSW 轨迹中选择输出的级别，数值越大一般输出越少，建议值 6

LASP 使用入门2 - 全局优化



随机方向出发

控制行走方向主要关键词

```
SSW.DimerdR      0.0050
SSW.globalcompress 0.1000
SSW.Lmode_Q      T
SSW.Ratio_local   50
SSW.Rotftol_preRot 1.0000
SSW.Rotftol       0.1000
SSW.Rotftol_ini   1.0000
```

控制双子优化mode精度

调制初始随机方向方案:

参数常见范围

SSW.globalcompress 0~1

压缩结构

SSW.Lmode_Q T/F

强制结构有序度参量变化

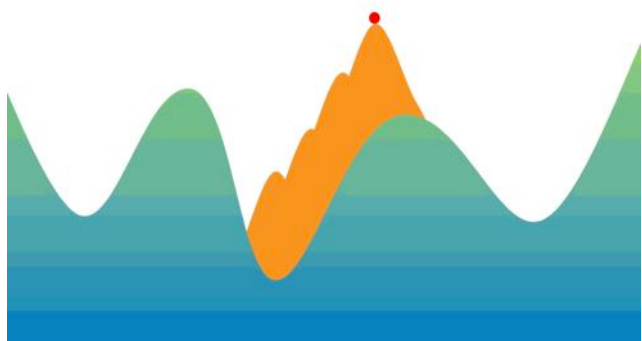
SSW.Ratio_local 15~100

选择任意原子对成键

SSW.cell_allowexpand 0~1

压缩/膨胀晶包

LASP 使用入门2 – 全局优化



控制爬山高度主要关键词

```
SSW.NG          10
SSW.NG_cell     8
SSW.ds_atom     0.6000
SSW.ds_cell     0.5000
```

调制爬山高度和距离

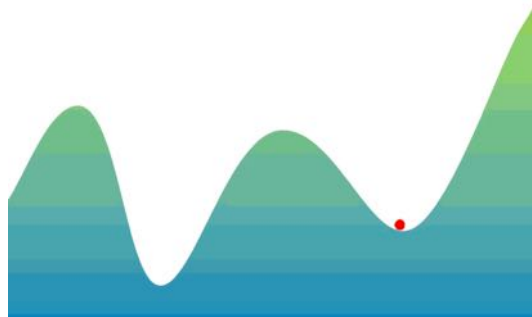
SSW.ds_atom 0.3 ~ 1
每个高斯原子移动距离

SSW.ds_cell 0.3 ~ 1.5
每个高斯晶包移动距离

SSW.NG 6-15
高斯总个数

SSW.NG_cell 4-11
在晶胞上加高斯总个数

LASP 使用入门2 - 全局优化



优化回底部

控制优化关键词

```
SSW.MaxOptstep 300
SSW.Bfgs_maxstepsize 0.2
SSW.ftol 0.05
SSW.strtol 0.05

SSW.Temp 300.0000
SSW.LowTemp 300.0000
SSW.HighTemp 300.0000
SSW.TempCycle 500
```

调制优化精度和接受概率

SSW.ftol 0.01~0.1 eV/A

原子上的最大力

SSW.strtol 0.1~1 GPa

晶包上的应力

SSW.Temp 10~500 K

蒙特卡洛选择的温度

SSW.LowTemp

SSW.HighTemp

SSW.TempCycle

也可以在
SSW过程中
变化温度

LASP 使用入门2 - 全局优化

查看结果

lasp.out

SSW步数

新找到minimum的能量

新找到minimum的空间群/符号

该步
SSW的
初始
(结束)
结构的
结构有
序量
Order
Parameter
Q2 Q4 and
Q6

```

*****
*****
Stru symm and Q 0 0 longQ T 0.08224 0.32782 0.32791 1 P1
Stru symm and Q 0 0 longQ T 0.08224 0.32782 0.32791 1 P1
Stru symm and Q 0 0 longQ T 0.16354 0.36058 0.35380 1 P1
minimum found 0 -199.38235 -200.27395 100.0 K 1 P1 0.0000 0.00 T 0.05 30 33
Stru symm and Q 1 0 longQ T 0.16423 0.35998 0.35405 1 P1
Stru symm and Q 1 0 longQ T 0.17135 0.36746 0.38207 1 P1
minimum found 1 -200.27395 -200.13133 100.0 K 1 P1 3.2403 4.20 T 0.05 78 213
Stru symm and Q 2 0 longQ T 0.17417 0.36639 0.38250 1 P1
Stru symm and Q 2 0 longQ T 0.14604 0.33380 0.34184 1 P1
minimum found 2 -200.13133 -197.58376 100.0 K 1 P1 5.7600 6.09 F 0.05 41 215
Stru symm and Q 3 0 longQ T 0.17558 0.36624 0.38236 1 P1
Stru symm and Q 3 0 longQ T 0.04115 0.29293 0.21020 2 P-1
minimum found 3 -200.13133 -201.48123 100.0 K 2 P-1 3.1941 3.31 T 0.05 27 164
Stru symm and Q 4 0 longQ T 0.04115 0.29293 0.21020 2 P-1
Stru symm and Q 4 0 longQ T 0.15661 0.32278 0.37713 1 P1
minimum found 4 -201.48123 -197.14580 100.0 K 1 P1 5.7600 7.37 F 0.05 60 239
Stru symm and Q 5 0 longQ T 0.04115 0.29290 0.21020 2 P-1
Stru symm and Q 5 0 longQ T 0.14327 0.32512 0.34593 1 P1
    
```

该步SSW的行走距离

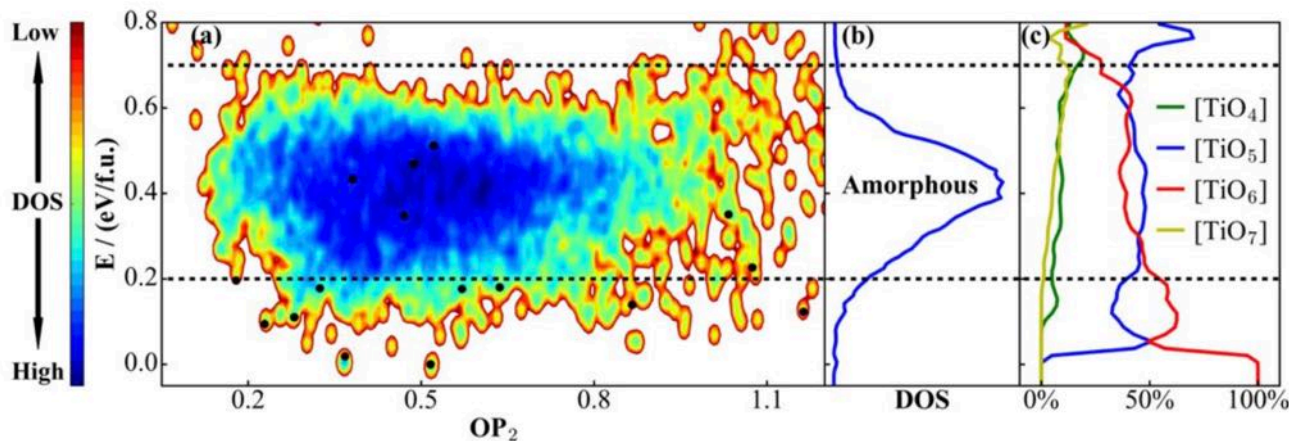
新找到minimum的最大force eV/Ang

LASP 使用入门2 - 全局优化

[查看结果](#)

利用SSW输出的all.arc，采用python脚本分析，画二维全局势能面，如下图

Chem. Sci. 2017, 8, 6327



可以查看全局势能面信息：如，晶体结构，无定形区间的能量，结构配位数的变化