



TOPS操作手册

- HONGZHIWEI TECHNOLOGY(SHANGHAI) CO.,LTD

鸿之微科技(上海)股份有限公司

HONGZHIWEI TECHNOLOGY(SHANGHAI) CO.,LTD

鸿之微科技(上海)股份有限公司

HONGZHIWEI TECHNOLOGY(SHANGHAI) CO.,LTD





TOPS是搭载在鸿之微Device Studio下的一款子软件，使用TOPS请下载Device Studio。

下载地址：<http://hzwtech.com/download-product.html?id=7>

下载之后申请带有TOPS子软件的Device Studio license（非免费）；

联系鸿之微售后团队安装TOPS。

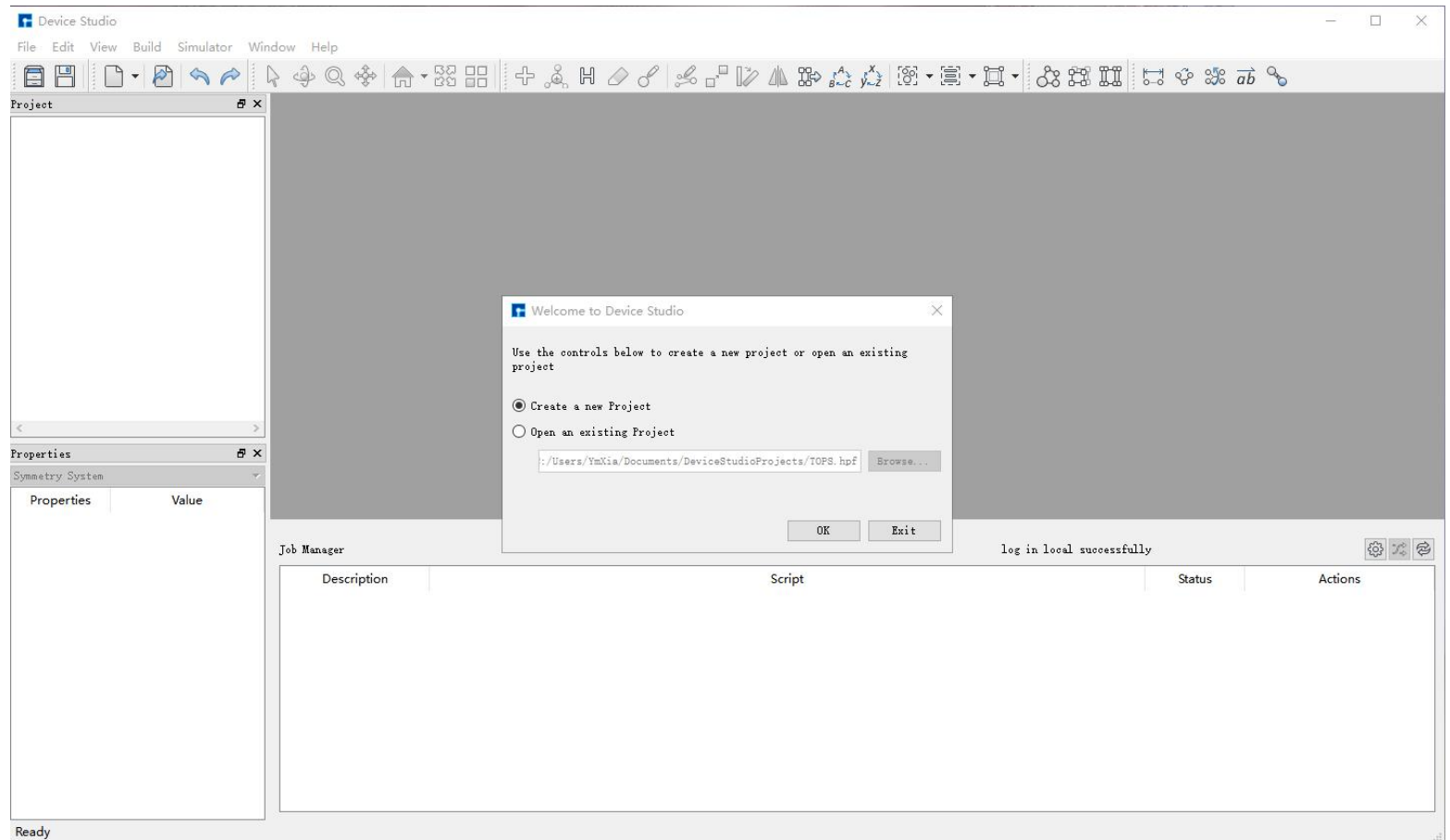
下载中心

最新版本 试用license申请

2020A版本	2019B版本
开放下载日期:	开放下载日期: 2019-09-30
DeviceStudio_x64.exe 1.33GB 	- DeviceStudio_x86.rar 311,962KB  - DeviceStudio_x64.rar 313,949kb 

1/ 安装之后，打开Device Studio，界面如下

选择 Create a new project后单击ok

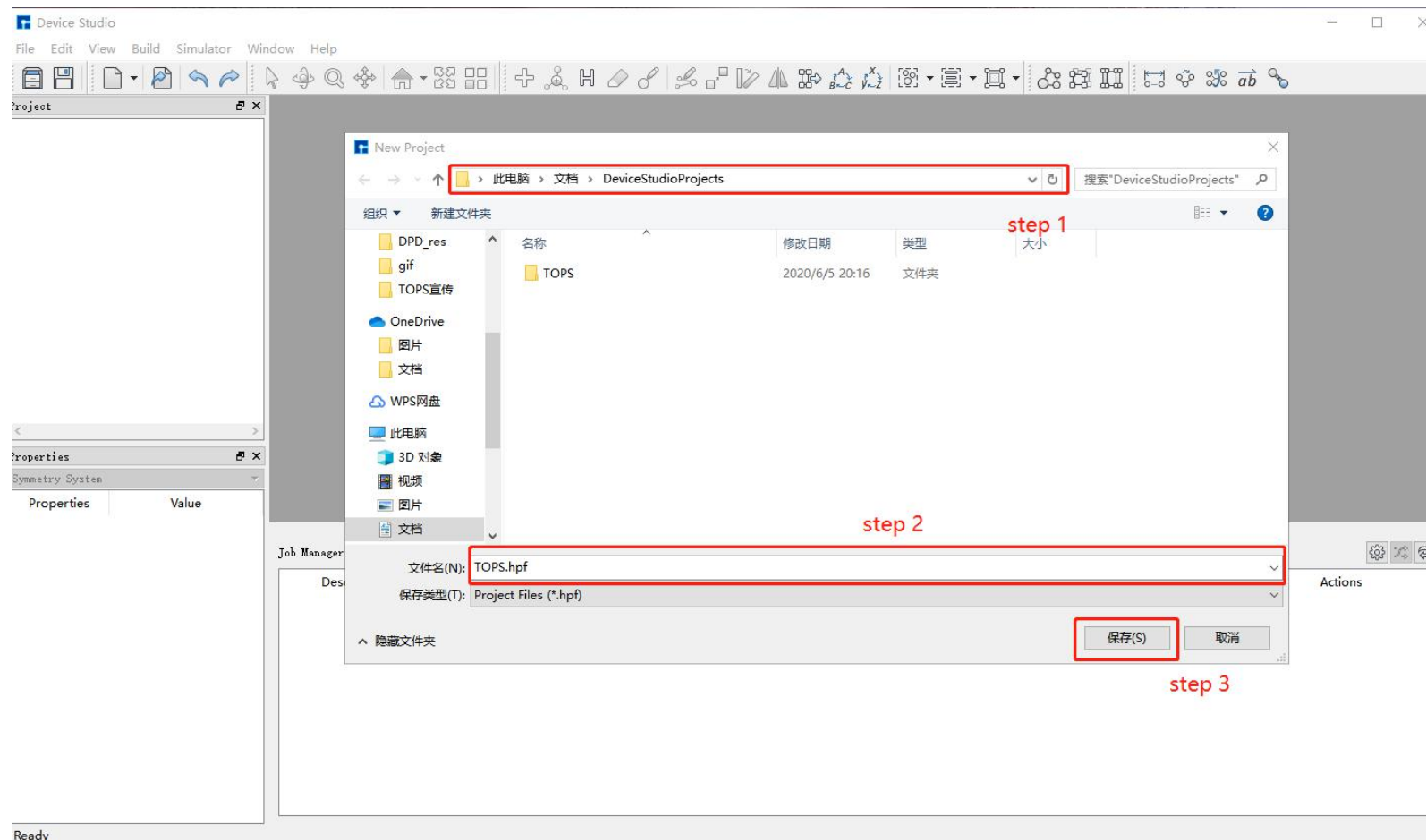


2/ 选择项目保存路径

step 1 选择项目保存路径

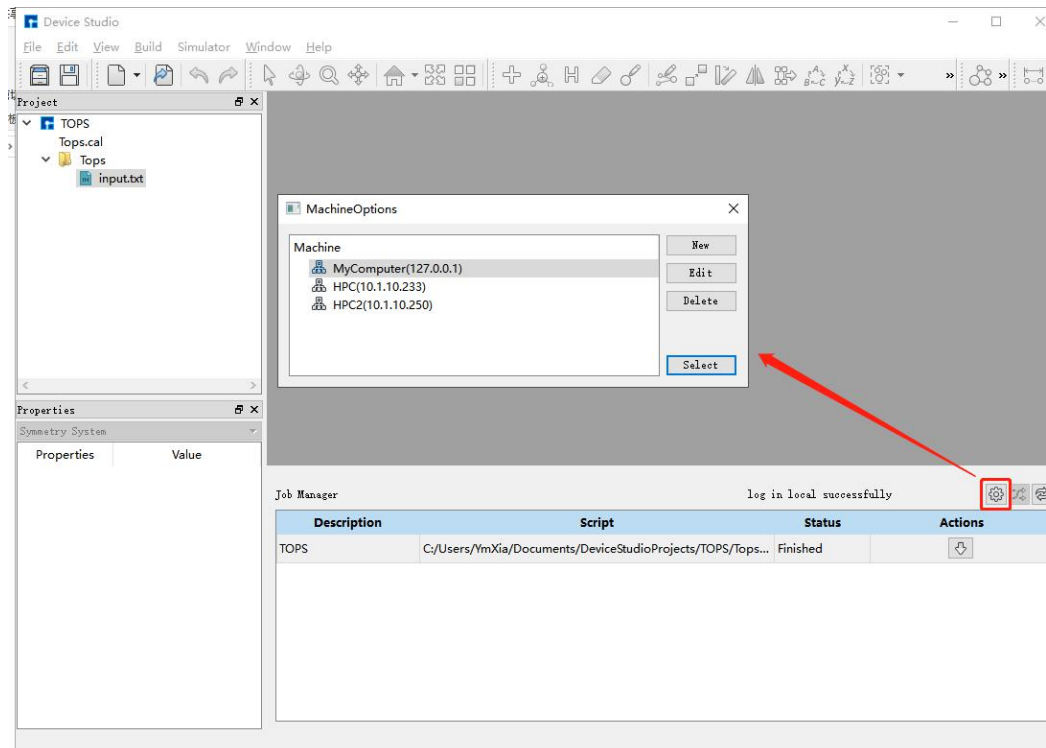
step 2 给项目命名

step 3 单击保存



3.1/ windows下使用TOPS计算——选择计算设备

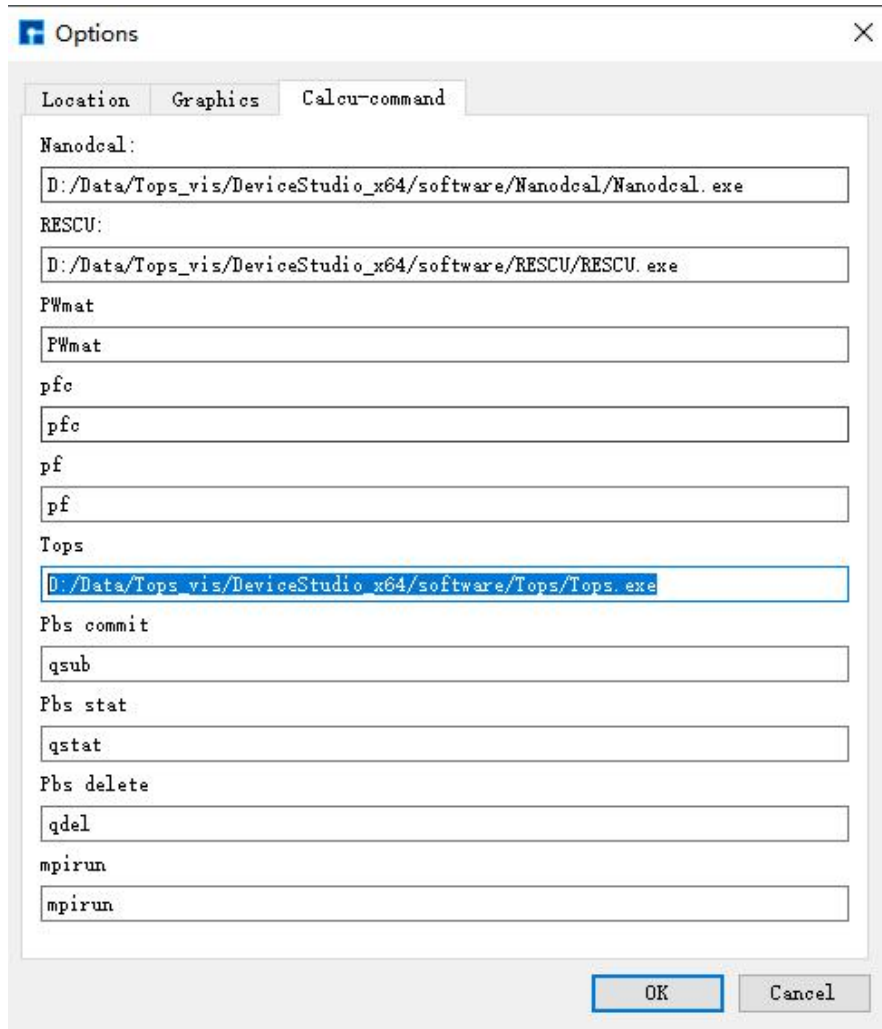
一般Device Studio 默认使用本地，也就是windows计算，在图中的设置中（红框中的按钮）可选择计算设备，默认选择MyComputer。



3.1/ windows下使用TOPS计算——设置TOPS计算路径

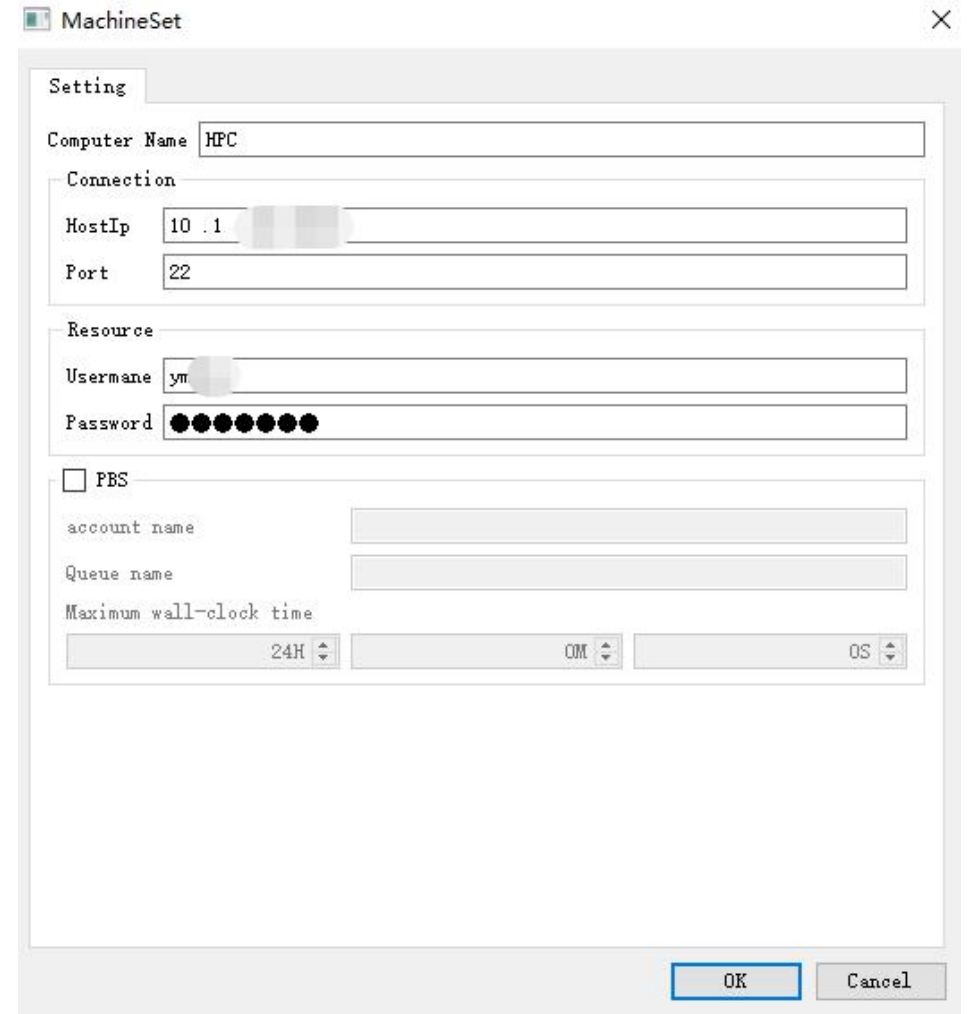
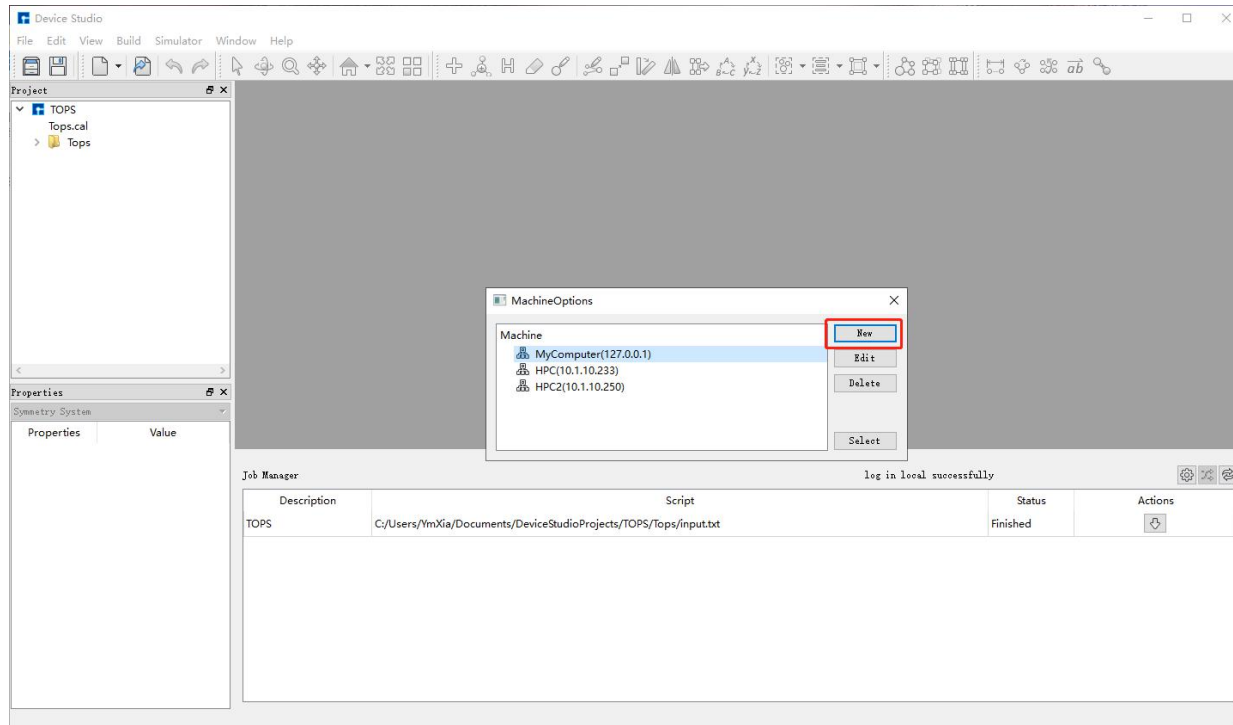
打开File->Options->Calca-command, 出现如右图的界面, 然后在Tops一栏中将Tops.exe文件的路径填入。此文件一般默认在Device Studio安装目录下software文件夹中。

bin	2019/9/26 9:45	文件夹	
doc	2017/6/9 9:26	文件夹	
example	2018/1/30 17:01	文件夹	
material	2018/5/11 14:20	文件夹	
neutralatomdatabase	2017/6/9 9:26	文件夹	
ONCV	2019/4/4 11:12	文件夹	
pseudopotential	2018/1/10 9:21	文件夹	
rescuatomdatabase	2018/1/10 9:18	文件夹	
software	2020/6/16 9:21	文件夹	
tpuhardness	2018/5/14 14:16	文件夹	
ds.ico	2015/12/23 13:00	ICO 文件	143 KB



3.1/ Linux下使用TOPS计算——选择计算设备

在选择计算设备时选择**New**，之后出现右图界面，按照自己设备的要求填好，最后如右图所示。





3.1/ Linux下使用TOPS计算——设置TOPS计算路径

打开File->Options->Calca-command, 出现如右图的界面, 然后在Tops一栏中Linux下的可执行文件路径写入Tops一栏, 。

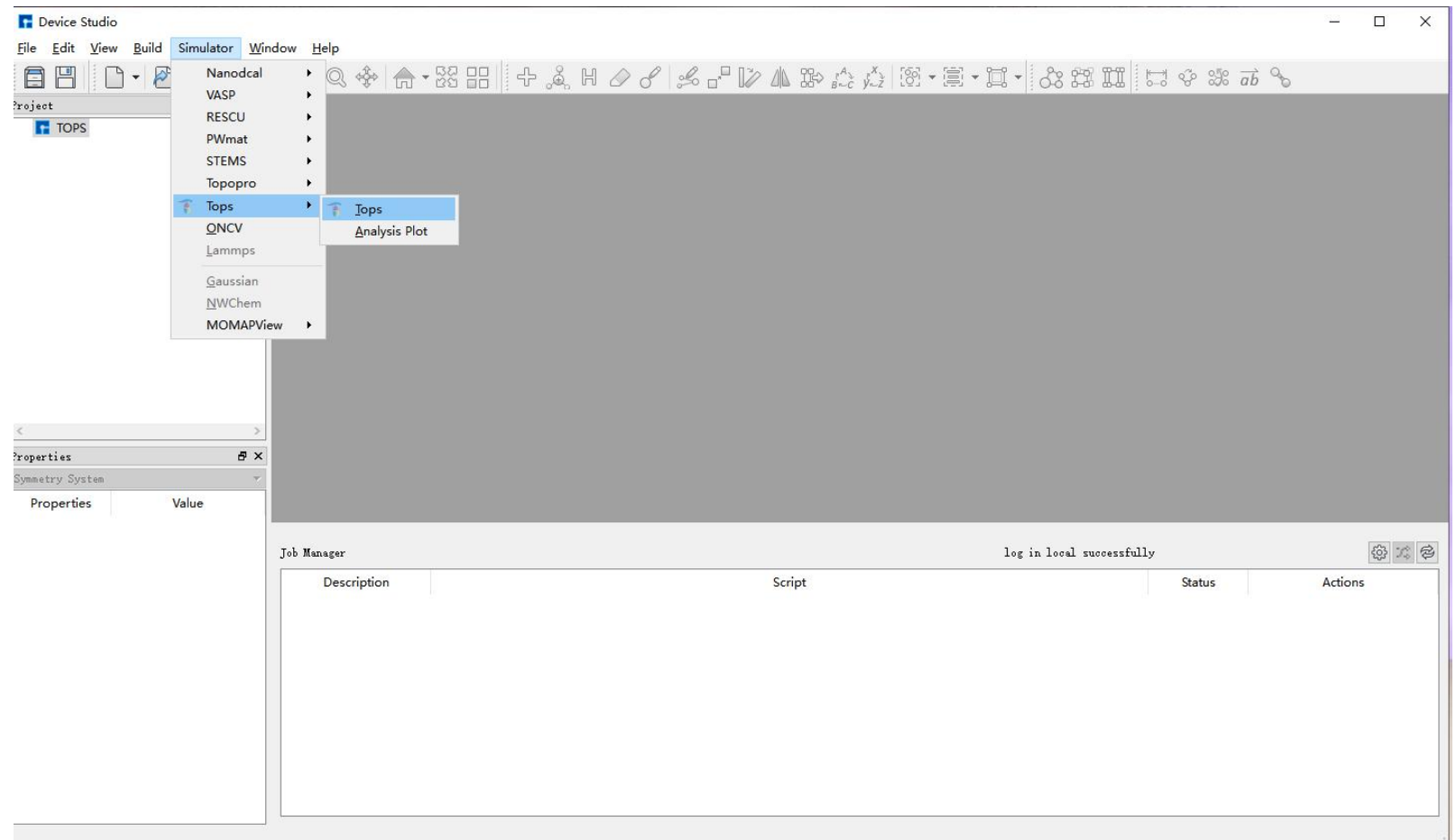
示例路径： /home/username/Tops/tops





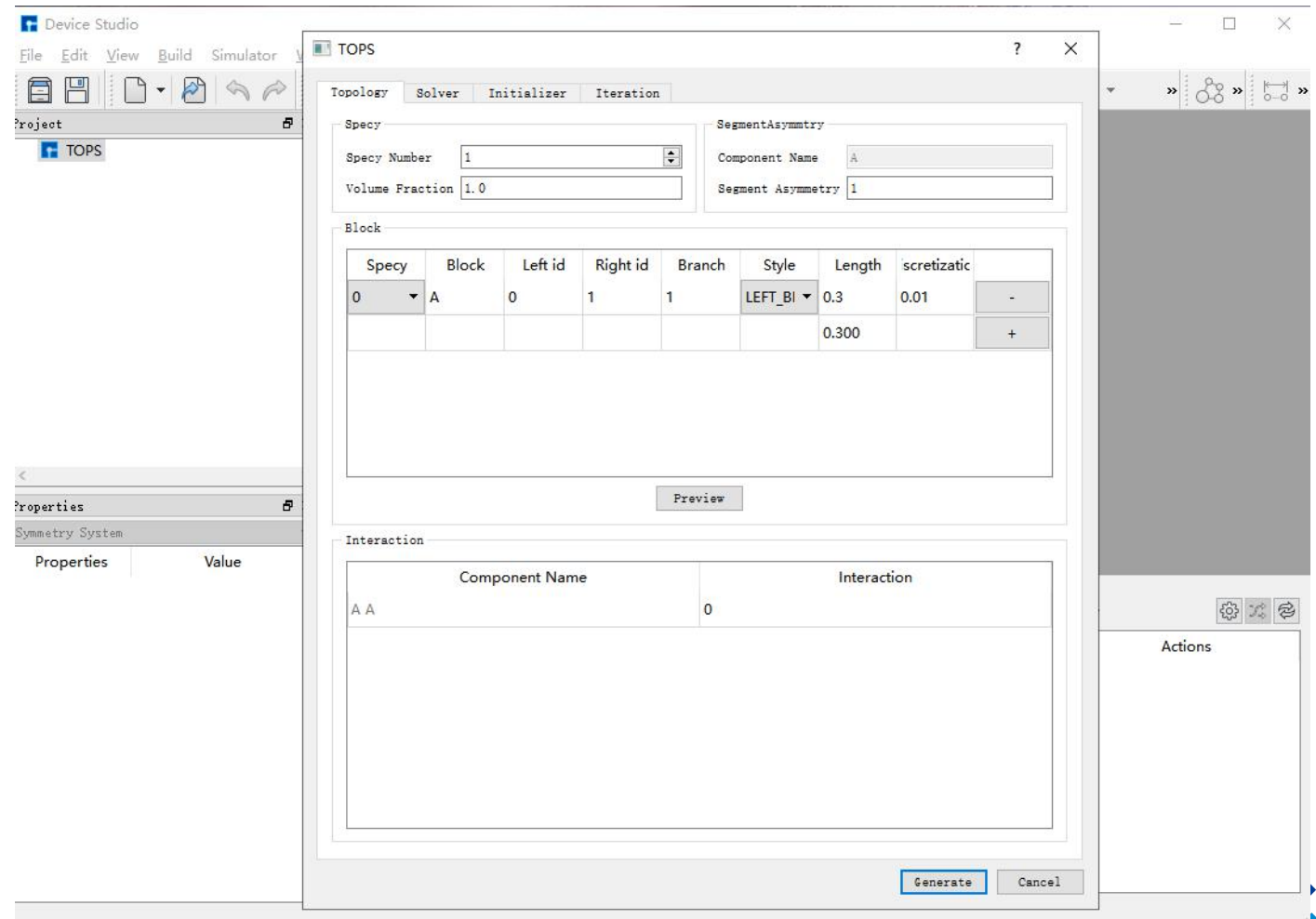
4/ 打开TOPS参数界面

选中项目栏中的项目后，选择
Simulator->TOPS->TOPS



4/ 参数设置——Topology

Topology主要定义待计算的分子拓扑信息





4.1/ 参数设置——Topology->Specy/Topology->Segement Asymmetry

参数名	物理意义	数据类型	范围	例子	备注
Specy Number	物种数	unsigned	≥ 0	1	——
Volume Fraction	体积分数	double	> 0	1.0	与物种数关联的多参数，空格分隔
Component Name	组分名称	string	$size() > 0$	A	与Block参数关联，自动补全
Segment Asymmetry	链段不对称性	double	> 0	1 1.5	可多参数，空格分隔

Topology

Solver

Initializer

Iteration

Specy

Specy Number1

Volume Fraction1.0

SegmentAsymmetry

Component NameA

Segment Asymmetry1

Block

Specy	Block	Left id	Right id	Branch	Style	Length	scretizatic
0	A	0	1	1	LEFT_BI	0.3	0.01
						0.300	

Preview

Interaction

Component Name	Interaction
A A	0



4.1/ 参数设置——Topology->block

参数名	物理意义	数据类型	范围	例子	备注
Specy	物种ID	enum	可选	0	物种总数相关联
Block	组分名	string	——	A	自定义嵌段名
left/right id	左/右端点	unsigned int	≥ 0	0	具体含义解释请看下页
Branch	分支数目	unsigned int	≥ 1	1	——
Branch Side	分支端	enum	可选	LEFT_BRANCH/ RIGHT_BRANCH	——
Length	嵌段体积分数	double	> 0	0.33	长度需要被链段离散整除，否则链段离散将会自动调整
Contour Discretization	链段离散	double	> 0	0.01	

Specy

Specy Number

Volume Fraction

SegmentAsymmetry

Component Name

Segment Asymmetry

Block

Specy	Block	Left id	Right id	Branch	Style	Length	scretizati	
0	A	0	1	1	LEFT_B	0.3	0.01	-
0	B	1	2	1	LEFT_B	0.3	0.01	-
0	A	2	3	1	LEFT_B	0.3	0.01	-
1	A	0	1	1	LEFT_B	0.3	0.01	-
1	B	1	2	1	LEFT_B	0.3	0.01	-
						1.500		

Preview

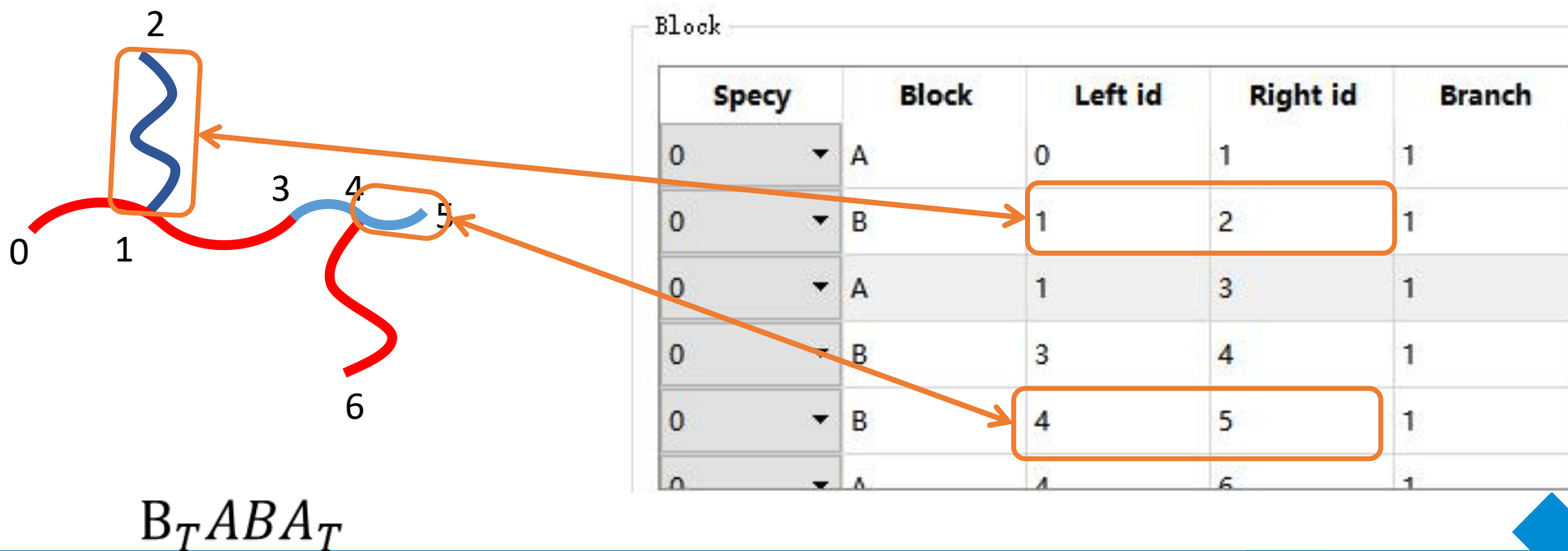
Interaction

Component Name	Interaction
A B	40



4.1/ 参数设置——Topology->block（嵌段共聚物建模方法）

- a/ 将待计算的分子的端点和连接点按顺序标号（从左往右），如下图；
- b/ 然后按Block的顺序，填入Block类型，Block左标号和右标号；
- c/ 界面Preview可以查看建模分子。



4.1/ 参数设置——Topology->block（嵌段共聚物建模例子1）

线型分子建模

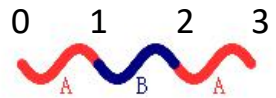
Block

Specy	Block	Left id	Right id	Branch	Style	Length	scretizati
0	A	0	1	1	LEFT_BI	0.3	0.01
0	B	1	2	1	LEFT_BI	0.3	0.01
0	A	2	3	1	LEFT_BI	0.3	0.01

Interact

A B

Molecule: 0



线型多组分分子建模

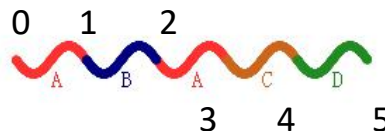
Block

Specy	Block	Left id	Right id	Branch	Style	Length	scretizati
0	A	0	1	1	LEFT_B	0.3	0.01
0	B	1	2	1	LEFT_B	0.3	0.01
0	A	2	3	1	RIGHT_	0.3	0.01
0	C	3	4	1	LEFT_B	0.3	0.01
0	D	4	5	1	LEFT_B	0.3	0.01

Interact

A B
A C
A D
B C
B D
C D

Molecule: 0



4.1/ 参数设置——Topology->block (嵌段共聚物建模例子2)

星型分子建模

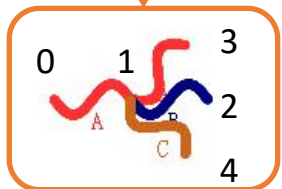
Block

Specy	Block	Left id	Right id	Branch	Style	Length	scretizati
0	A	0	1	1	LEFT_BI	0.3	0.01
0	B	1	2	1	LEFT_BI	0.3	0.01
0	A	1	3	1	LEFT_BI	0.3	0.01
0	C	1	4	1	LEFT_BI	0.3	0.01

Interaction

AB	AC	BC

Molecule: 0



多分子建模 (多分子数目请预先在Specy Number设定, 这里设定为两种分子)

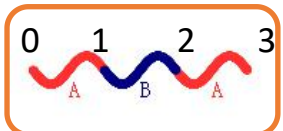
Block

Specy	Block	Left id	Right id	Branch	Style	Length	scretizati
0	A	0	1	1	LEFT_B	0.3	0.01
0	B	1	2	1	LEFT_B	0.3	0.01
0	A	2	3	1	LEFT_B	0.3	0.01
1	A	0	1	1	LEFT_B	0.3	0.01
1	B	1	2	1	LEFT_B	0.3	0.01

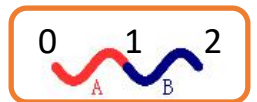
Interaction

AB

Molecule: 0



Molecule: 1



4.1/ 参数设置——Topology->Interaction

设定各block之间的相互作用参数 $\times N$, 默认值40

Topology

Solver

Initializer

Iteration

Specy

Specy Number

2

Volume Fraction

0.50 0.50

SegmentAsymmetry

Component Name

A B C

Segment Asymmetry

1 1 1

Block

Specy	Block	Left id	Right id	Branch	Style	Length	scretizati	
0	A	0	1	1	LEFT_B	0.3	0.01	-
0	B	1	2	1	LEFT_B	0.3	0.01	-
0	A	2	3	1	RIGHT	0.3	0.01	-
0	C	3	4	1	LEFT_B	0.3	0.01	-
0	B	4	5	1	LEFT_B	0.3	0.01	-
						1.500		

Preview

Interaction

Component Name	Interaction
A B	40
A C	40
B C	40



4.2/ 参数设置——Solver

定义使用的PDE求解方式以及相关设定

参数名	物理意义	数据类型	范围	例子	备注
SpaceGroup	对称群	enum	可选	Triclinic_P1	利用对称性加速
FFTThread	开启线程数	int	≥ 1	4	调用FFTW时开启的线程数
GridSize.Nx /Ny/Nz	空间网格点数	int	≥ 1	64	——
Method	求解PDE时线积分方式	enum	可选	OS2	一般默认

Topology Solver Initializer Iteration

SpaceGroup

Triclinic_P1

FFTThread

2

GridSize.Nx

64

GridSize.Ny

64

GridSize.Nz

64

Method

OS2





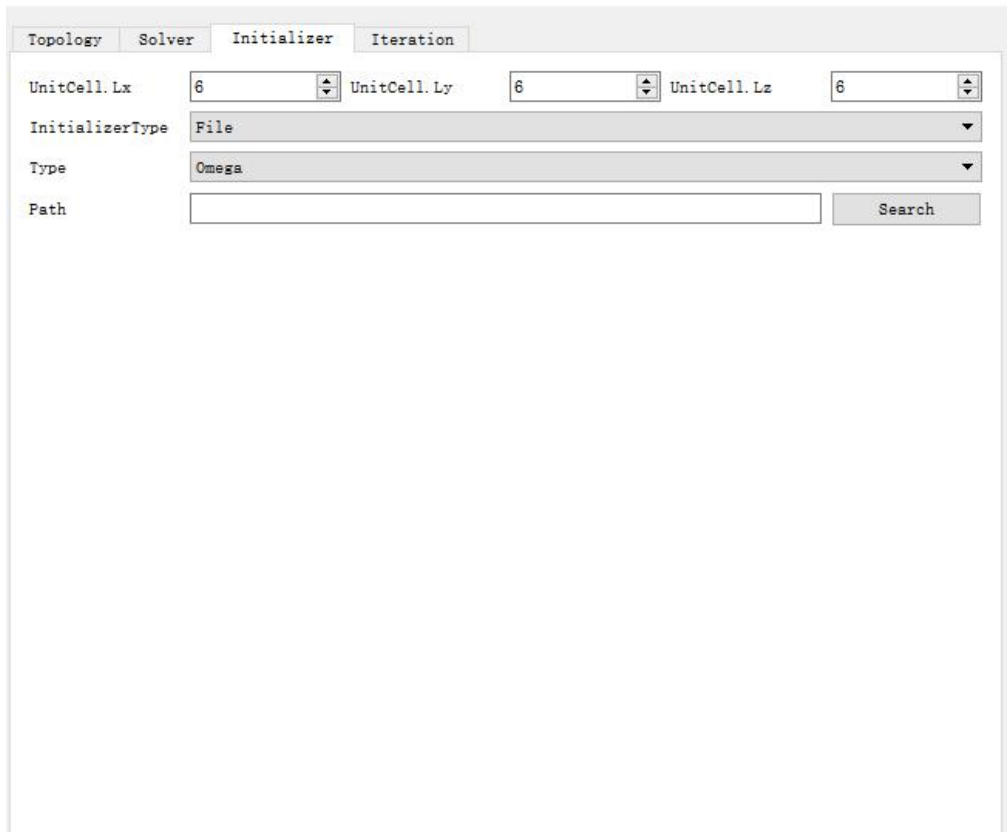
4.2/ 参数设置——Solver->SpaceGroup 对称群及对应的相

这里需要注意：
确定计算的相再使用对称加速， 否则很有可能计算错， 若不确定请使用默认Triclinic_P1。

对称群名	对称群号	对应相
Triclinic_P1	1	无对称加速适用于所有相
Orthorhombic_Fddd	70	O ₇₀
Tetragonal_P42mm	136	sigma
Hexagonal_P6mmm	191	Z
Hexagonal_P63mmc	194	HCP/PL/C14
Cubic_I4132	214	交替Gyroid
Cubic_Pm_3n	223	A15
Cubic_Pn_3m	224	Diamond
Cubic_Fm_3m	225	FCC
Cubic_Fd_3m	227	C15
Cubic_Fd_3c	228	交替Diamond
Cubic_Im_3m	229	BCC
Cubic_Ia_3d	230	Gyroid

4.3/ 参数设置——Initializer

参数名	物理意义	数据类型	范围	例子	备注
UnitCell.Lx /Ly/Lz	周期初猜 值	double	>0	4.45	Rg
InitializerT ype	初始化器 的类型	enum	可选	File	File和 Model两 种模式



Topology Solver Initializer Iteration

UnitCell.Lx 6 UnitCell.Ly 6 UnitCell.Lz 6

InitializerType File

Type Omega

Path Search



4.3/ 参数设置——Initializer->File

当选择初始化File模式时，需要你有可读的结构密度文件

Topology

Solver

Initializer

Iteration

UnitCell.Lx

6

UnitCell.Ly

6

UnitCell.Lz

6

InitializerType

File

Type

Omega

Path

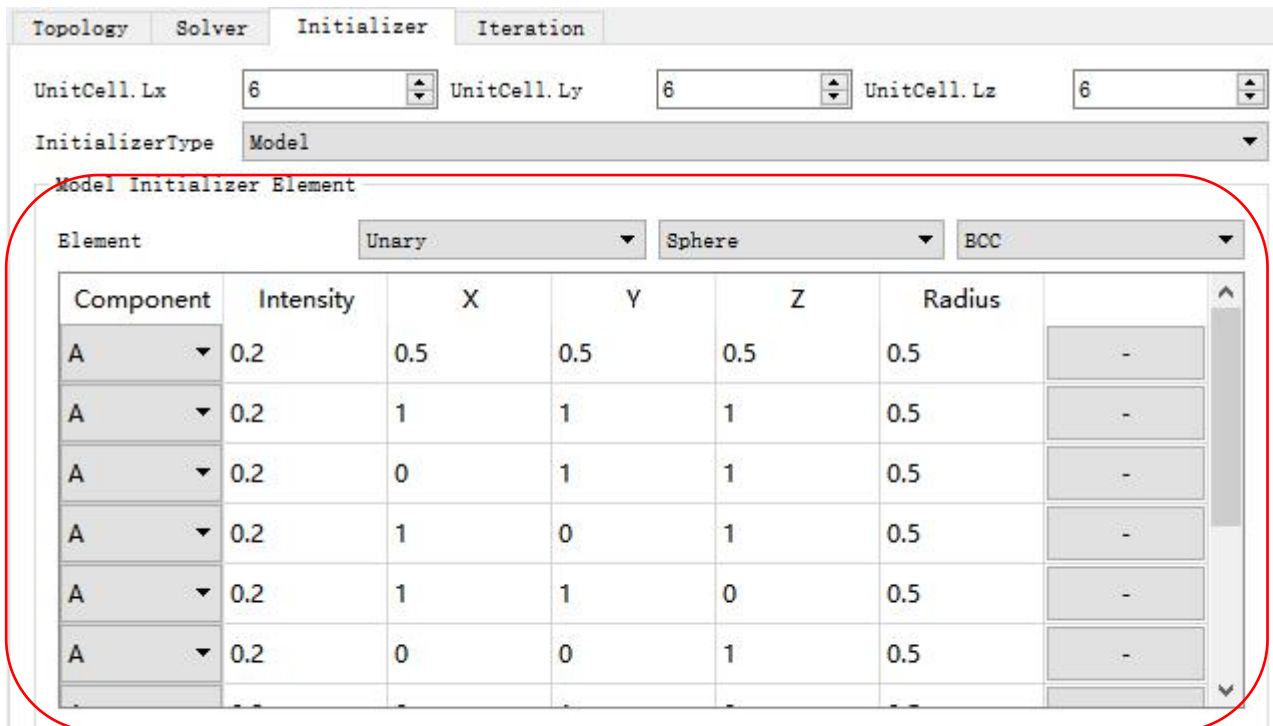
Search

参数名	物理意义	数据类型	范围	例子	备注
Type	读取数据类型	enum	——	Omega	Omega表示读取场 /Phi表示读取密度初始化
Path	文件路径	String	——	——	选择密度文件路径



4.3/ 参数设置——Initializer->Model

Model模式下，可特殊初始化结构，可选一元/二元的常用结构球/柱/层/连续相结构，或者根据规则自定义结构。



Topology Solver Initializer Iteration

UnitCell.Lx 6 UnitCell.Ly 6 UnitCell.Lz 6

InitializerType Model

Model Initializer Element

Element Unary Sphere BCC

Component	Intensity	X	Y	Z	Radius	
A	0.2	0.5	0.5	0.5	0.5	-
A	0.2	1	1	1	0.5	-
A	0.2	0	1	1	0.5	-
A	0.2	1	0	1	0.5	-
A	0.2	1	1	0	0.5	-
A	0.2	0	0	1	0.5	-



4.3/ 参数设置——Initializer->Model->Sphere

球相关参数设定如下：

参数名	物理意义	数据类型	范围	例子	备注
Component	形成球的组分	enum	可选	A	关联前面定义的分子结构中的组分
Intensity	强度	double	[-1,1]	0.2	默认0.2
X/Y/Z	球心坐标	double	[0,1]	0.5/0.5/0.5	——
Radius	球半径	double	>0	0.5	默认0.5





4.3/ 参数设置——Initializer->Model->Cylinder

柱相关参数设定如下：

参数名	物理意义	数据类型	范围	例子	备注
Component /Intensity/R adius	和球定义一致	——	——	——	——
X/Y/Z	柱下底面圆心 坐标	double	[0,1]	0/0/1	——
X1/Y1/Z1	柱上底面圆心 坐标	double	[0,1]	0/0/0	——

Component	Intensity	X	Y	Z	X1	Y1	Z1	Radius	
A ▼	0.2	0.5	0.5	0	0.5	0.5	1	0.5	-
A ▼	0.2	1	1	0	1	1	1	0.5	-
A ▼	0.2	0	1	0	0	1	1	0.5	-
A ▼	0.2	1	0	0	1	0	1	0.5	-
A ▼	0.2	0	0	0	0	0	1	0.5	-
									+





4.3/ 参数设置——Initializer->Model->Lamella

指定一个层状元件，实际上层就是一个无穷大半径的柱，层相关参数设定如下：

参数名	物理意义	数据类型	范围	例子	备注
Component/Intensity/Raduis	和球定义一致	——	——	——	——
X/Y/Z	柱下底面圆心坐标	double	[0,1]	0/0/1	——
X1/Y1/Z1	柱上底面圆心坐标	double	[0,1]	0/0/0	——

Model Initializer Element

Element

Unary

Lamellar

Default

Component	Intensity	X	Y	Z	X1	Y1	Z1	
A	0.2	0.5	0.3	0.5	0.5	0.8	0.5	-
								+



4.3/ 参数设置——Initializer->Model->Gyroid/Diamond/Primitive

参数设定如下：

参数名	物理意义	数据类型	范围	例子	备注
Component	组分	enum	可选	A	关联前面定义的分子结构中的组分
Intensity	强度	double	[-1,1]	0.2	默认0.2
Direction	方向	double	+1/-1	+1	——
Threshold	阈值	double	(-1,1)	0.7	默认值0.7

Model Initializer Element

Element

Unary

Gyroid

Default

Component	Intensity	Direction	Threshold	
A	0.2	1	0.7	-
A	0.2	-1	-0.7	-
				+



4.3/ 参数设置——Initializer->Model->Random

随机初始化元件，参数如下：

参数名	物理意义	数据类型	范围	例子	备注
Component	组分名称	enum	size()>0	A	——
Intensity	强度	double	[0,1]	0.2	——

Model Initializer Element

Element

Unary

Random

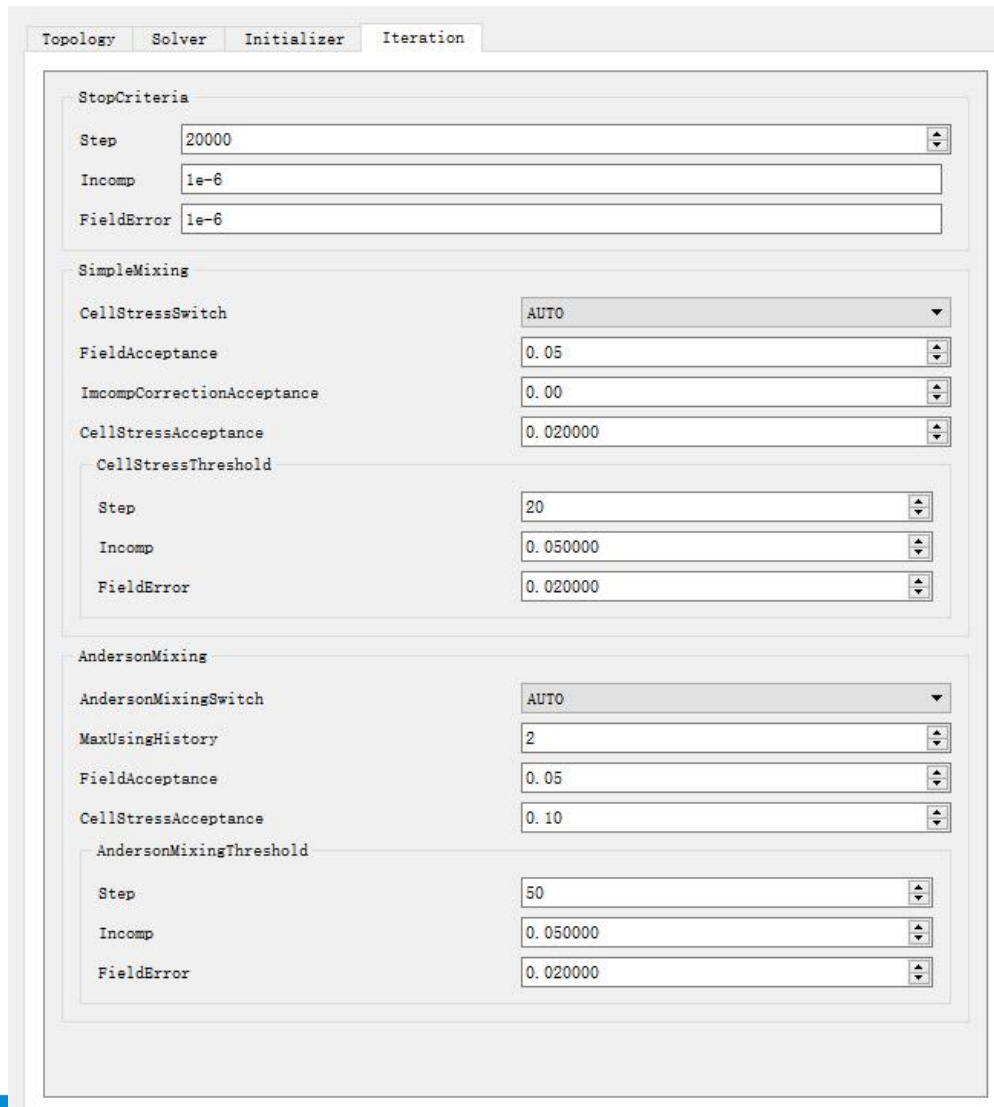
Default

Component	Intensity	
A	0.2	-
		+



4.4/ 参数设置——Iteration

迭代相关参数，相关参数都提供默认值，请了解完备后，再做修改。



Section	Parameter	Value
StopCriteria	Step	20000
	Incomp	1e-6
	FieldError	1e-6
SimpleMixing	CellStressSwitch	AUTO
	FieldAcceptance	0.05
	ImcompCorrectionAcceptance	0.00
	CellStressAcceptance	0.020000
	CellStressThreshold	
	Step	20
	Incomp	0.050000
	FieldError	0.020000
AndersonMixing	AndersonMixingSwitch	AUTO
	MaxUsingHistory	2
	FieldAcceptance	0.05
	CellStressAcceptance	0.10
	AndersonMixingThreshold	
	Step	50
	Incomp	0.050000
	FieldError	0.020000



4.4/ 参数设置——Iteration->StopCriteria

定义程序终止条件:

参数名	物理意义	数据类型	范围	例子	备注
Step	迭代最大步数	int	>0	100000	——
Incomp	收敛判据1, 不可压缩性	double	>0	1e-6	收敛小于 此值认为 收敛
FieldError	收敛判据2, 场误差	double	>0	1e-6	收敛小于 此值认为 收敛

这里请注意，当Incomp和FieldError都满足时程序才会终止。

StopCriteria

Step

20000

Incomp

1e-6

FieldError

1e-6

SimpleMixing

CellStressSwitch

AUTO

FieldAcceptance

0.05

ImcompCorrectionAcceptance

0.00

CellStressAcceptance

0.020000

CellStressThreshold

Step

20

Incomp

0.050000

FieldError

0.020000

AndersonMixing

AndersonMixingSwitch

AUTO

MaxUsingHistory

2

FieldAcceptance

0.05

CellStressAcceptance

0.10

AndersonMixingThreshold

Step

50

Incomp

0.050000

FieldError

0.020000



4.4/ 参数设置——Iteration->SimpleMixing

定义简单迭代时的相关参数：

参数名	物理意义	数据类型	范围	例子	备注
Field Acceptance	场的接受度	double	(0,1)	0.05	一般小于0.1，否则极易发散
ImcompCorrectionAcceptance	不可压缩性矫正的接受度	double	[0,1)	0.00	一般不会大于0.03，否则程序极易发散
CellStressSwitch	简单迭代时是否自动优化周期	enum	AUTO/FORCED_ON/FORCED_OFF	AUTO	自动周期优化算法每一次迭代额外带来50%计算量
CellStressAcceptance	周期应力的接受度	double	>0	0.02	一般不会大于0.1，否则程序极易发散，或者在自由能极小点附近震荡
CellStressThreshold/Step	需要的迭代步数	int	>1	20	三者同时满足开启
CellStressThreshold/Incomp	最差需要的不可压缩性	double	>0	0.05	
CellStressThreshold/FieldError	需要的场误差	double	>0	0.02	



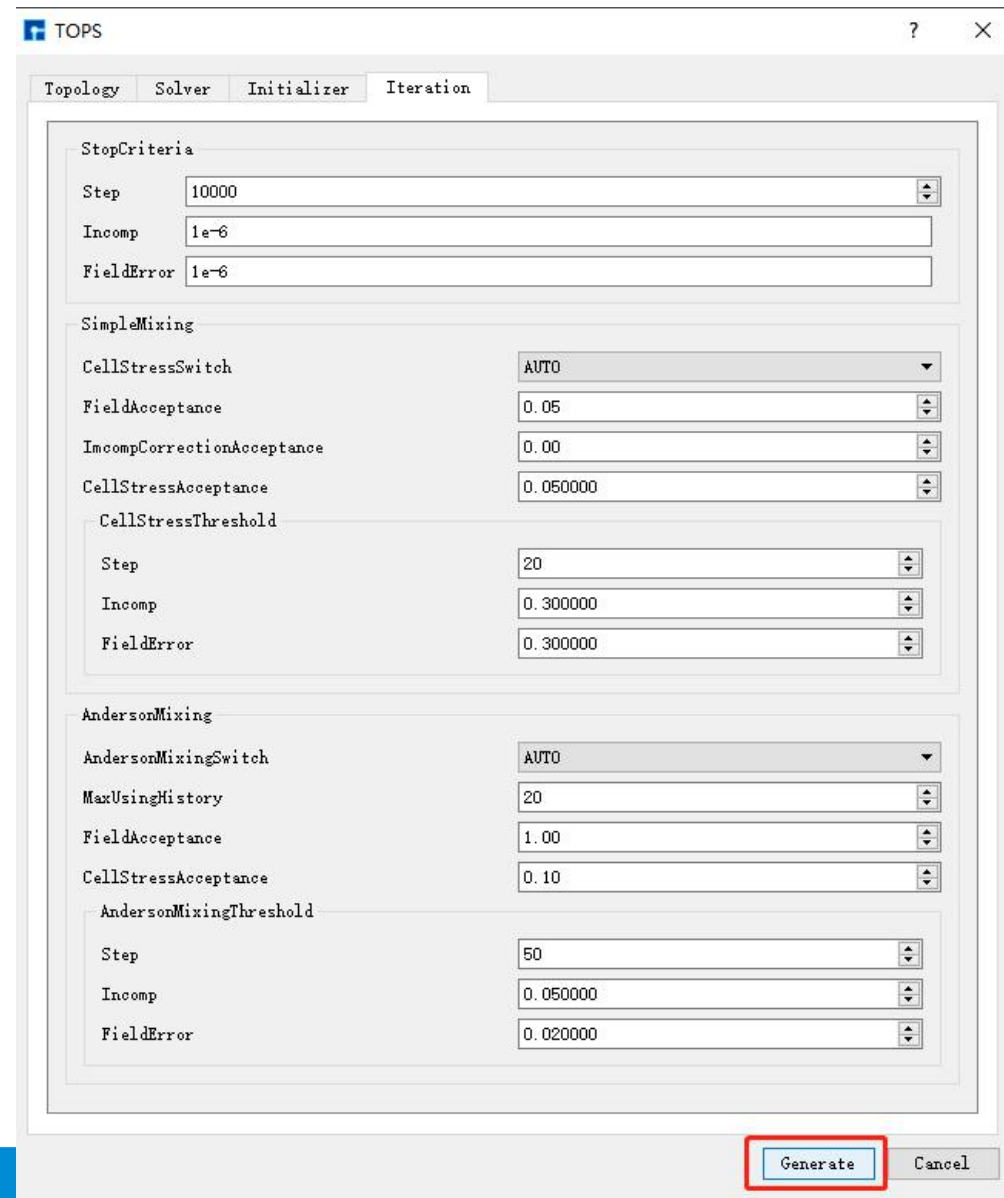
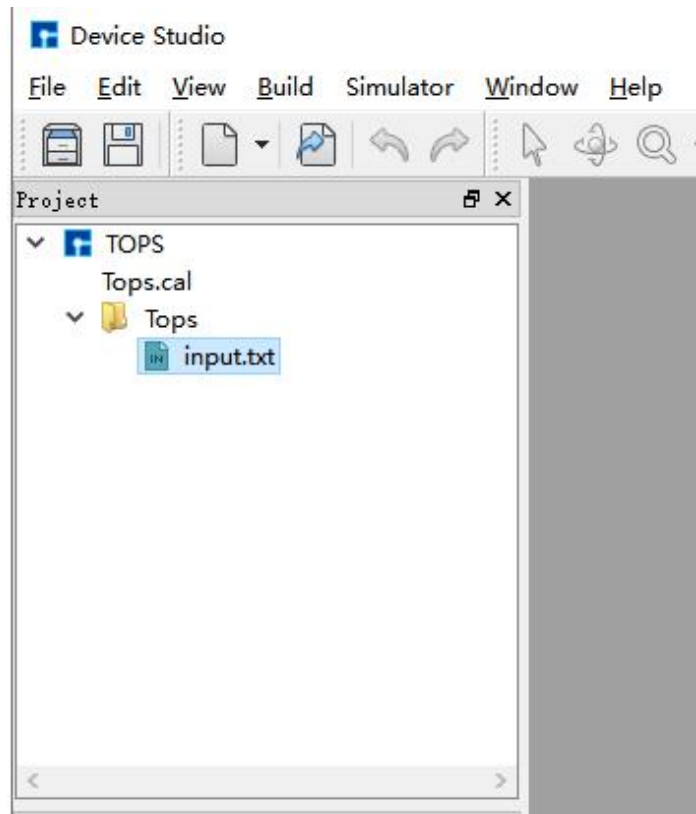
4.4/ 参数设置——Iteration->AndersonMixing

定义Anderson迭代时的相关参数:

参数名	物理意义	数据类型	范围	例子	备注
AndersonMixingSwitch	是否启用Anderson Mixing	Enum	AUTO/FORCED_ON/FORCED_OFF	AUTO	一般小于0.1, 否则极易发散
MaxUsingHistory	使用Anderson Mixing时最多使用的历史步数	int	[2,100]	50	一般而言更大的数值会带来更好的收敛性, 但是具有 $O(N^3)$ 的开销
Field Acceptance	场的接受度	double	(0,1]	1	此数值相对简单迭代时的接受度可以更大一些
CellStressAcceptance	周期应力的接受度	double	>0	0.1	此数值相对简单迭代时的接受度可以更大一些
AndersonMixingThreshold/Step	需要的迭代步数	int	>1	20	三者同时满足开启
AndersonMixingThreshold/Incomp	最差需要的不可压缩性	double	>0	0.05	
AndersonMixingThreshold/FieldError	需要的场误差	double	>0	0.02	

5/ 生成运行参数文件

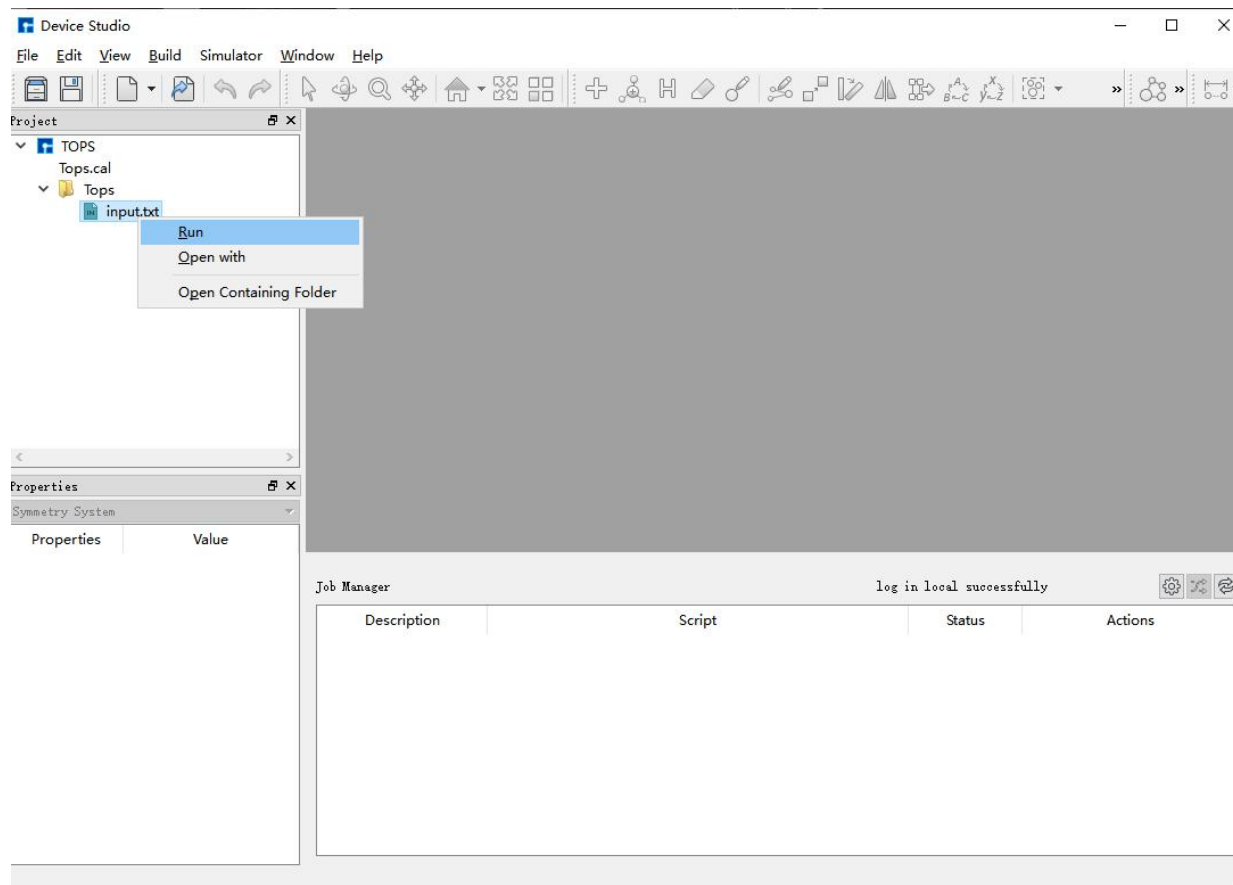
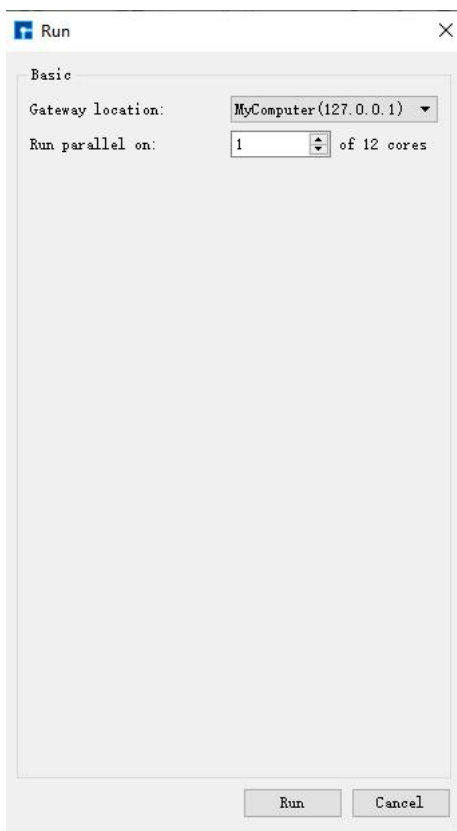
当参数设置好之后，单击**Generate**后在项目栏生成运行准备文件，如下图所示。





6/ 运行TOPS开始计算

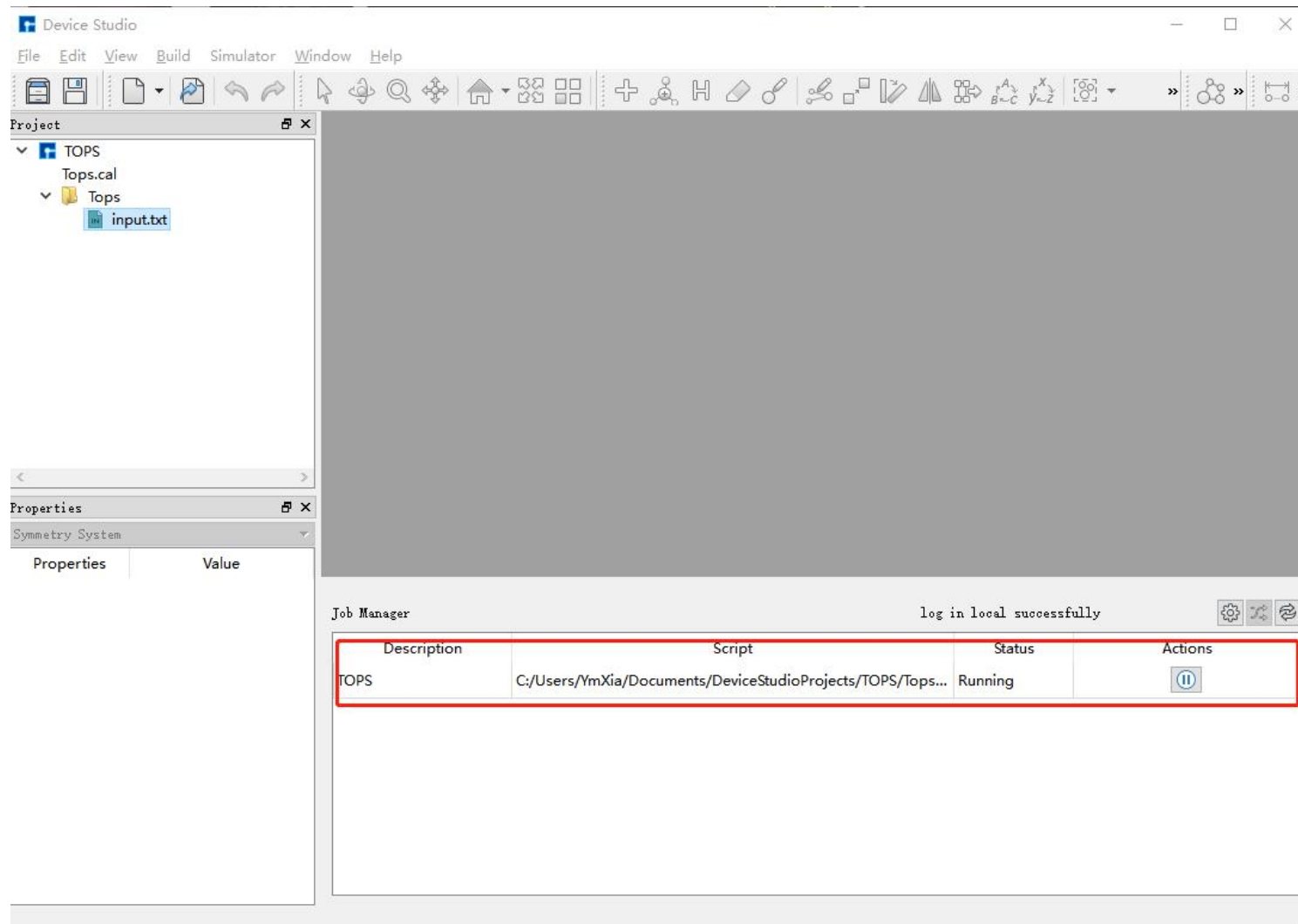
如右图所示选中项目栏生成运行准备文件input.txt，右键单击Run后出现，选择计算机后单击run，即可开始TOPS的计算。





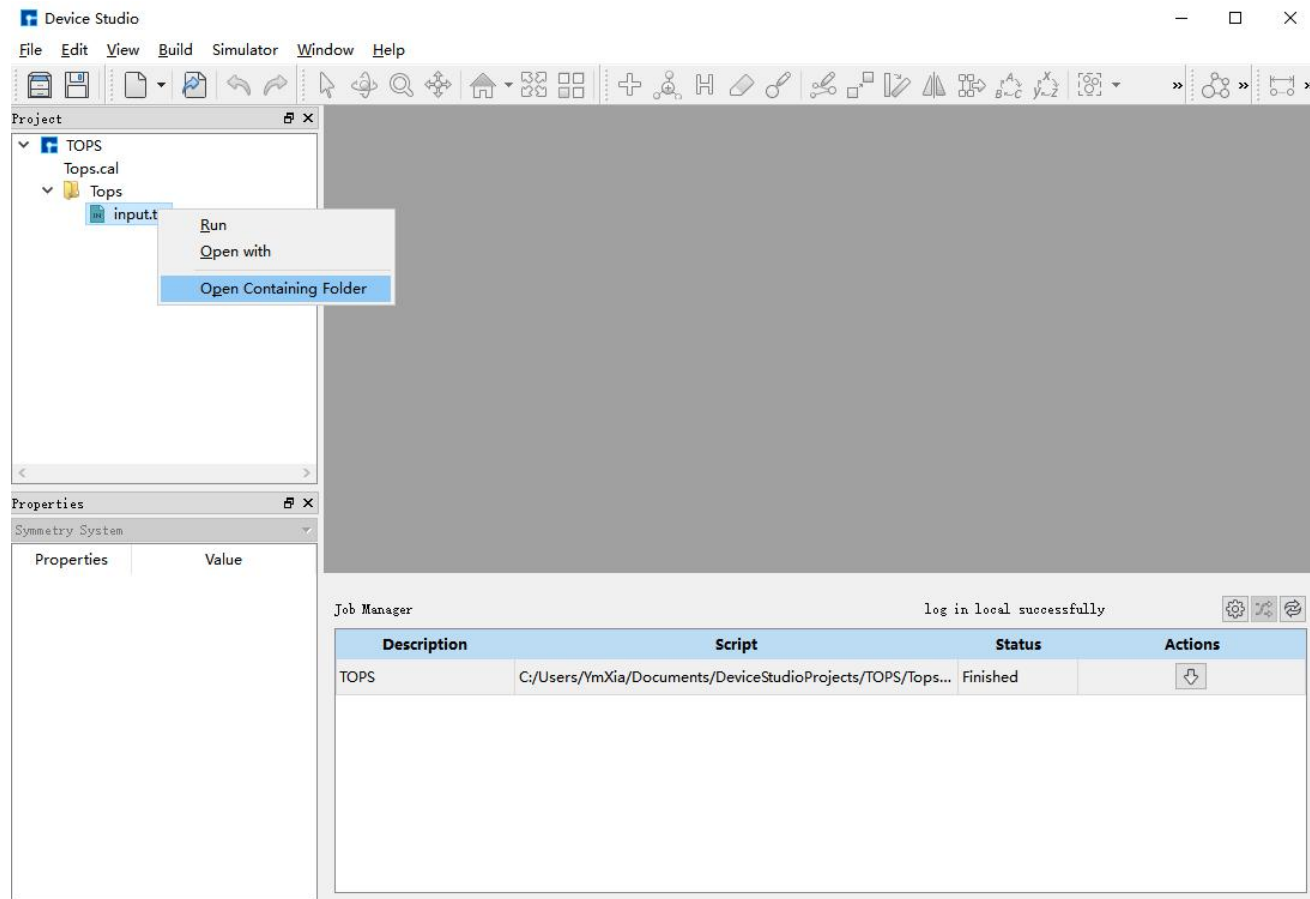
7/ 查看TOPS运行状态

在Device Studio中的Job Manager中可以查看计算状态，如右图红框中。



选择input文件右键选择 Open containing Folder后打开计算结果文件

debug.txt	2020/6/15 19:55
input.txt	2020/6/15 19:44
SCFT_20200615195232_Energy.txt	2020/6/15 19:55
SCFT_20200615195232_Field.txt	2020/6/15 19:55





7/ 查看TOPS计算结果——能量文件

debug.txt	2020/6/15 19:55
input.txt	2020/6/15 19:44
SCFT_20200615195232_Energy.txt	2020/6/15 19:55
SCFT_20200615195232_Field.txt	2020/6/15 19:55

打开图中的能量文件，在文件最后，如下图所示得到最后的值

优化后的最佳周期值
(Lx, Ly, Lz)

```
320 :    4.629378603e+00  2.545651861e+00  2.083726742e+00  5.248892241e-06  1.857528065e-06
4.50745 4.50745 4.50745
-0.00000 -0.00000 -0.00000
330 :    4.629377303e+00  2.545395275e+00  2.083982028e+00  9.994598203e-07  3.172106237e-07
*****Done*****
4.50745 4.50745 4.50745
330 :    4.629377303e+00  2.545395275e+00  2.083982028e+00  9.994598203e-07  3.172106237e-07
```

迭代最终步数

计算得到的能量值 (E)

计算得到的熵能 (-TS)

Incomp不可压缩值

计算得到的界面能 (U)

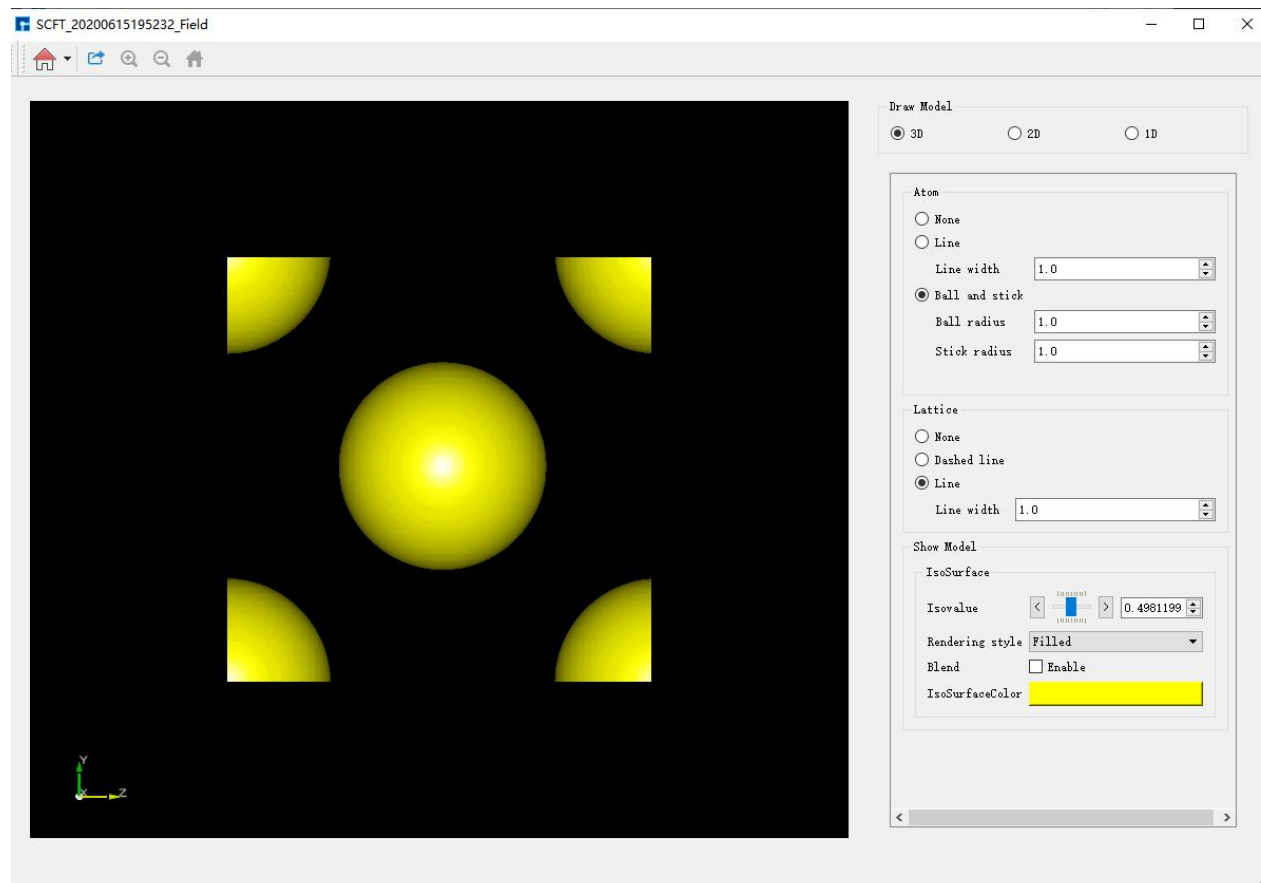
FieldError场误差值



7/ 查看TOPS计算结果——结构文件

选择Device Studio中Simulator->Tops->Anlysis Plot
打开Field 文件分析计算的结构文件。

debug.txt	2020/6/15 19:55
input.txt	2020/6/15 19:44
SCFT_20200615195232_Energy.txt	2020/6/15 19:55
SCFT_20200615195232_Field.txt	2020/6/15 19:55

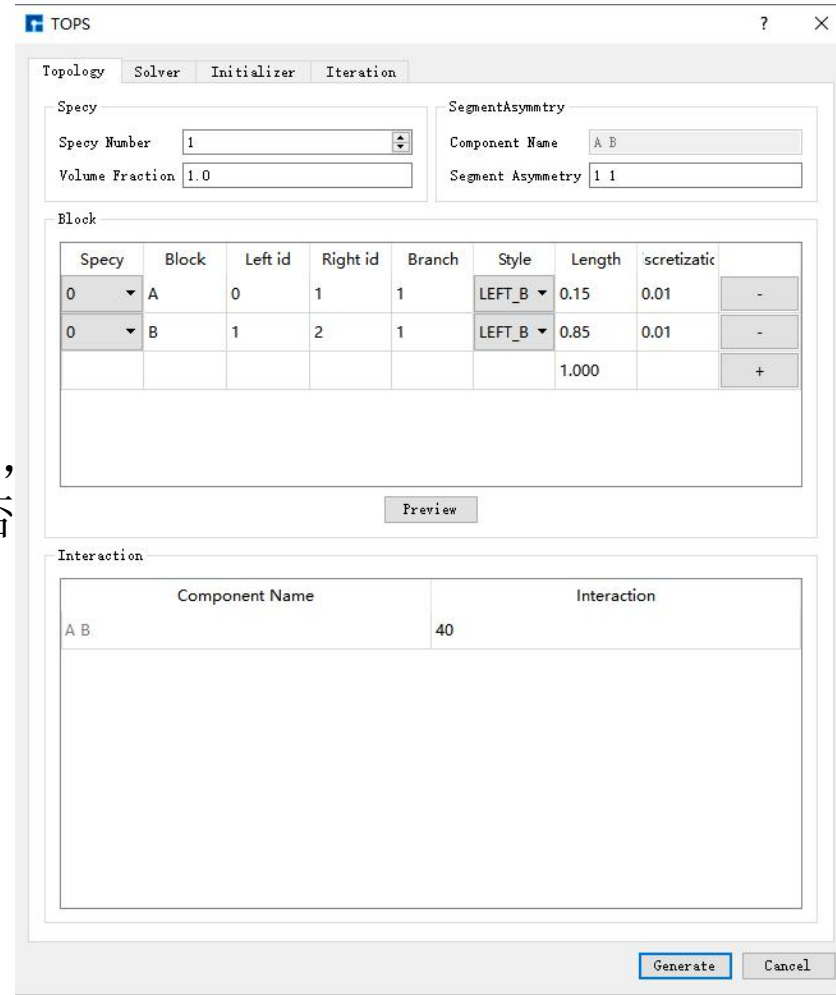


Linux AB两嵌段共聚物计算BCC结构

a/ 参考之前设置 Linux计算设备和文件路径;

b/ 设定Block, 创建AB两嵌段分子, 然后A的Length设定成0.15, B的Length设定成0.85, 同一分子的length的总和最好为1.0, 否则会自动归一化;

c/ 设定Slover参数, 全部选择默认;



The screenshot shows the TOPS software interface with the following configuration:

- Topology** tab is selected.
- Specy** section: Specy Number is 1, Volume Fraction is 1.0.
- SegmentAsymmetry** section: Component Name is A B, Segment Asymmetry is 1 1.
- Block** section: A table with columns: Specy, Block, Left id, Right id, Branch, Style, Length, scretizatic.

Specy	Block	Left id	Right id	Branch	Style	Length	scretizatic
0	A	0	1	1	LEFT_B	0.15	0.01
0	B	1	2	1	LEFT_B	0.85	0.01
						1.000	+

Below the table is a **Preview** button.

Interaction section: A table with columns: Component Name, Interaction.

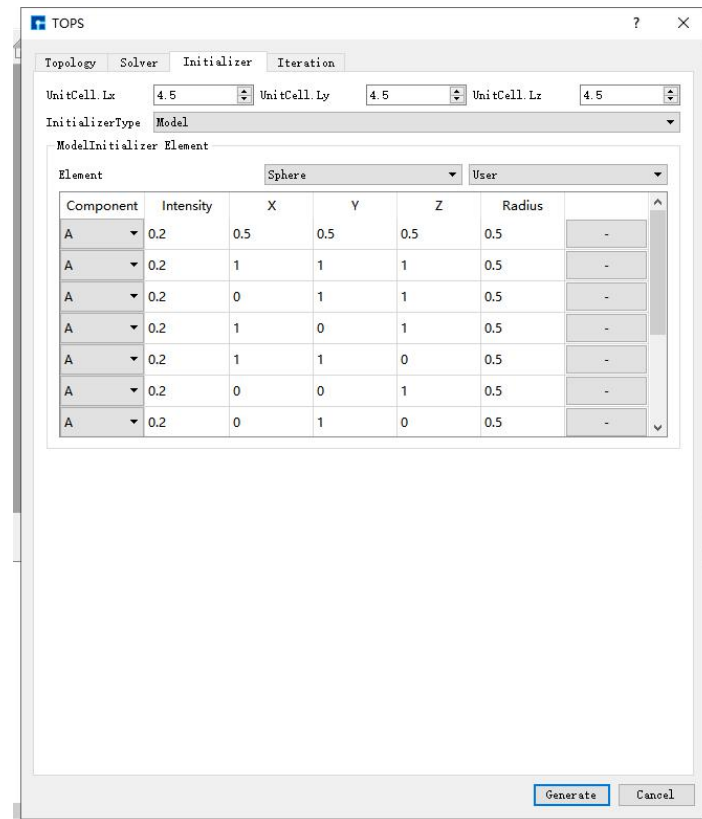
Component Name	Interaction
A B	40

At the bottom right are **Generate** and **Cancel** buttons.

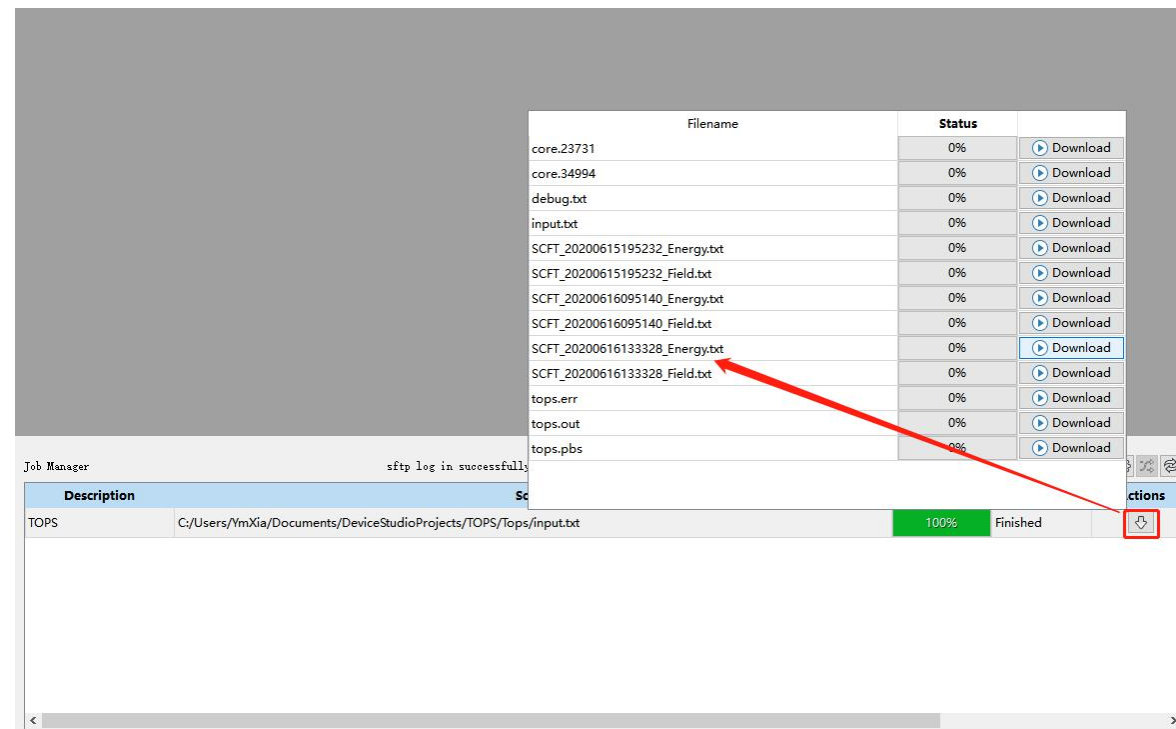
d/ 设定Initializer参数，将Lx/Ly/Lz全部设定成4.5，选择InitializerType为Model；然后选择Sphere->BCC

e/ 设定Iteration参数，全部选择默认，然后Generate。

f/ 选中项目栏的input文件右键run，即开始运行程序。



g/ 当计算结束后，选择右侧下载按钮将计算结果文件传回本地，然后再做数据分析。





9/ 问题解决

如果您有什么问题请及时联系我们: support@hzwtech.com





THANKS

鸿之微科技(上海)股份有限公司

HONGZHIWEI TECHNOLOGY(SHANGHAI) CO.,LTD

