

结合神经网络方法和扩大训练基组构建新B3LYP泛函

张家虎, 王秀军

华南理工大学化学与化工学院应用化学系, 广州 510640

摘要:

神经网络方法成功地应用于修正密度泛函理论B3LYP方法中的三个参数(a_0 、 a_x 和 a_c)以构建新B3LYP交换相关泛函. 本文采用包含输入层、隐藏层和输出层的三层式的神经网络结构. 总电子数、多重度、偶极矩、动能、四极矩和零点能被选为物理描述符. 296个能量数据被随机地分成两组, 246个能量数据作为训练集以确定神经网络的最优结构和最优突触权重, 50个能量数据作为测试集以测试神经网络的预测能力. 修正后的三个参数 a_0 、 a_x 、 a_c 从输出层处得到, 并用于计算体系的热化学性质如原子化能(AE)、电离势(IP)、质子亲和能(PA)、总原子能(TAE)和标准生成热($\Delta_f H^\ominus$). 修正后的计算结果优于传统B3LYP/6-311+G(3df,2p)方法的计算结果. 经过神经网络修正后, 296个物种的总体均方根偏差从41.0减少到14.2 kJ·mol⁻¹.

关键词: B3LYP泛函 神经网络 描述符 训练基组

收稿日期 2009-08-04 修回日期 2009-10-17 网络版发布日期 2009-11-24

通讯作者: 王秀军 Email: xjwangcn@scut.edu.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(817KB)

服务与反馈

把本文推荐给朋友

加入我的书架

加入引用管理器

引用本文

Email Alert

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ B3LYP泛函

▶ 神经网络

▶ 描述符

▶ 训练基组

本文作者相关文章

▶ 张家虎

▶ 王秀军