Journal of Soft Computing and Information Technology (JSCIT)
Babol Noshirvani University of Technology, Babol, Iran
Journal Homepage: jscit.nit.ac.ir
DOI: 10.22034/jscit.2025.512167.2119
Volume 14, Number 3, Autumn 2025, pp. 13-20
Received: 04/20/2025, Revised: 08/27/2025, Accepted: 09/09/2025

Predicting Dielectric Constants of Nanomaterials Using Graph Neural Networks: Integrating Molecular Dynamics and Machine Learning

Hoda Ghavaminia[1*]
1-* Department of Physics, Materials and Energy Research Center, Dez.Co., Islamic Azad University, Dezful. Iran.

[1*]h.ghavaminia@iau.ac.ir,

Corresponding author's address: Hoda Ghavaminia, Department of Physics, Materials and Energy Research Center, Dez.Co., Islamic Azad University, Dezful. Iran.

Abstract- In this study, an efficient and accurate framework based on a Graph Neural Network (GNN) is developed to predict the dielectric constants of nanomaterials, significantly reducing computational cost. The proposed model is trained on data derived from Molecular Dynamics (MD) simulations using LAMMPS and Density Functional Theory (DFT) calculations. The training dataset consists of dielectric constant values for molecular structures of TiO_2, SiO_2, H_2O, metal-organic frameworks (MOFs), graphene oxide, and carbon nanotubes under various temperature (300–500 K) and pressure (0.1 MPa–10 GPa) conditions. The GNN model achieves high prediction accuracy with a Root Mean Square Error (RMSE) of 0.12 and a Mean Absolute Error (MAE) of 0.08, while reducing prediction time to 0.5 seconds. Results show that substituting 10 copper (Cu) atoms into the TiO_2 structure enhances its dielectric constant by 20%, attributed to heterogeneous charge distribution and stronger dipole formation. Additionally, shortening the H–O bond length in water from 1.5 Å to 1.0 Å increases the dielectric constant by 15%. Sensitivity analysis and interpretability techniques such as Grad-CAM identify key structural features—including Cu and Ti atoms, bond lengths, and bond types—as critical factors influencing dielectric properties. Comparisons with traditional methods like Support Vector Machine (SVM) and linear regression confirm the superior accuracy and efficiency of the GNN model.

Keywords: Nanomaterials, Dielectric Constant, Molecular Dynamics, Machine Learning, Graph Neural Network(GNN).

مجله علمی رایانش نرم و فناوری اطلاعات
دانشگاه صنعتی نوشیروانی بابل
صفحه مجله: jscit.nit.ac.ir
شناسه دیجیتال: 10.22034/jscit.2025.512167.2119
جلد ۱۴، شماره ۳، پاییز ۱۴۰۴ صفحه ۱۳-۲۰
دریافت: ۱۴۰۴/۰۱/۳۱، بازنگری: ۱۴۰۴/۰۶/۰۵، پذیرش: ۱۴۰۴/۰۶/۱۸

پیش‌بینی ثابت دی‌الکتریک نانومواد با استفاده از شبکه‌های عصبی گرافی: ادغام دینامیک مولکولی و یادگیری ماشین

هدی قوامی نیا*[۱]،
۱-گروه فیزیک،مرکز تحقیقات مواد و انرژی، واحد دزفول، دانشگاه آزاد اسلامی ، دزفول، ایران.*
*2000900100@iau.ir,[۱]

* نشانی نویسنده مسئول: هدی قوامی نیا، گروه فیزیک مرکز تحقیقات مواد و انرژی، واحد دزفول، دانشگاه آزاد اسلامی، دزفول، ایران

چکیده- در این مطالعه، یک چارچوب کارآمد و دقیق برای پیش‌بینی ثابت دی‌الکتریک نانومواد بر مبنای شبکه عصبی گرافی (GNN) توسعه داده شده است که هزینه محاسباتی را به‌طور چشمگیری کاهش می‌دهد. مدل پیشنهادی با استفاده از داده‌های حاصل از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی با نرم‌افزار لمپس و محاسبات نظریه تابعی چگالی (DFT) آموزش داده شد. داده‌های آموزشی شامل مقادیر ثابت دی‌الکتریک برای ساختارهای مولکولی TiO_2، SiO_2، H_2O، چارچوب‌های فلز-آلی (MOFs) اکسید گرافن و نانولوله‌های کربنی تحت شرایط مختلف دمایی (۳۰۰–۵۰۰ کلوین) و فشاری (۰٫۱ مگاپاسکال تا ۱۰ گیگاپاسکال) است. مدل GNN دقت بالایی با خطای میانگین مربعات برابر ۰٫۱۲ و خطای مطلق میانگین برابر ۰٫۰۸ به دست آورد، درحالی‌که زمان پیش‌بینی ۰٫۵ ثانیه بود. نتایج نشان داد که جایگزینی ۱۰ اتم مس در ساختار TiO_2 منجر به افزایش ۲۰ درصدی ثابت دی‌الکتریک می‌شود که ناشی از توزیع ناهمگون بار و تشکیل دوقطبی‌های قوی‌تر است. همچنین، کاهش طول پیوند H–O در آب از ۱/۵ به ۱/۰ آنگستروم، ثابت دی‌الکتریک را تا ۱۵ درصد افزایش می‌دهد. تحلیل حساسیت و تکنیک‌های تفسیرپذیری مانند Grad-CAM، اتم‌های کلیدی مس و تیتانیوم، طول پیوند و نوع پیوند را به‌عنوان عوامل مؤثر بر ثابت دی‌الکتریک شناسایی کردند. مقایسه با روش‌های سنتی مانند ماشین بردار پشتیبان (SVM) و رگرسیون خطی، برتری مدل GNN در دقت و کارایی را تأیید می‌کند.

واژه‌های کلیدی: مواد نانوساختاری، ثابت دی‌الکتریکی، دینامیک مولکولی، یادگیری ماشین، شبکه عصبی گرافی

۱- مقدمه

مواد نانوساختاری به دلیل خواص فیزیکی، شیمیایی و الکترونیکی منحصربه‌فرد خود در کاربردهای گوناگونی مانند باتری‌های پیشرفته، سنسورها و دستگاه‌های الکترونیکی مورد توجه قرار گرفته‌اند. یکی از مهم‌ترین خواص مواد نانوساختاری، ثابت دی‌الکتریکی است که در عملکرد دستگاه‌های الکترونیکی و انرژی نقش مهمی دارد. با این‌حال، تعیین دقیق ثابت دی‌الکتریکی این مواد به‌صورت تجربی هزینه‌بر و زمان‌بر می‌باشد. از طرفی روش‌های محاسباتی مانند شبیه‌سازی دینامیک مولکولی [۱](MD) و محاسبات کوانتومی همچون تئوری تابعی چگالی [۲](DFT) نیز دارای پیچیدگی فراوان و محاسبات سنگین می‌باشند. علاوه‌براین، تحلیل تأثیر ویژگی‌های ساختاری همچون تعداد اتم Cu یا طول پیوند H-O بر خواص مواد به روش‌های سنتی چالش‌برانگیز است. در سال‌های اخیرا یادگیری ماشین به ویژه یادگیری عمیق به‌عنوان ابزاری قدرتمند برای بهینه‌سازی محاسبات علمی و حل مشکلات پیچیده در علوم مواد معرفی شده است. شبکه‌های عصبی گرافی [۳](GNN) یکی از نوآوری‌های مهم در این زمینه هستند که قادرند ساختار

مولکولی را به‌عنوان یک گراف با ویژگی‌های گره (مانند نوع اتم و بار) و یال(مثل نوع پیوند و طول پیوند) مدلسازی کنند. این موضوع موجب به‌کارگیری GNNها در پیش‌بینی خواص مواد مانند ثابت دی‌الکتریکی می‌شود. در سال ۲۰۱۸ گروه چمیلا مدل یادگیری ماشین برای سیستم‌های اتمی(SchNet) [۴] [۱] را توسعه دادند که قادر است انرژی پتانسیل و نیروهای بین اتم‌ها را با دقت بالا پیش‌بینی کند. این مدل نشان داد که شبکه‌های عصبی کانولوشنی [۵] (CNN) می‌توانند به‌طور مؤثر در تحلیل ساختارهای مولکولی استفاده شوند. همچنین در سال ۲۰۱۸ گروه زی[۲] شبکه‌ی عصبی پیچشی گراف کریستالی[۶] (CGCNN) را ارائه دادند که برای پیش‌بینی خواص مواد صلب طراحی شده است. این مدل با استفاده از نمایش گرافی ساختار مواد، دقت بالایی در پیش‌بینی خواص مختلف مانند ضریب رسانش حرارتی و مقاومت الکتریکی داشت. در سال ۲۰۱۹ گروه آنکی [۳] مدل شبکه عصبی فیزیک محور (PhysNet) را توسعه دادند که توانست انرژی‌های کوانتومی را با دقت بالا پیش‌بینی کند. این مدل از یک رویکرد فیزیک‌محور برای آموزش استفاده کرد و نشان داد که می‌تواند عملکرد بهتری نسبت به مدل‌های سنتی داشته باشد. در سال ۲۰۲۱ لیو و همکارانش مدل شبکه‌های عصبی ارسال پیام (MPNN)[۷] [۴] را برای پیش‌بینی خواص مواد مانند ثابت دی‌الکتریکی و ضریب رسانش حرارتی توسعه دادند. این مدل با استفاده از الگوریتم پیام‌رسانی، توانست روابط پیچیده بین اتم‌ها و پیوندها را به خوبی مدل‌سازی کند. در سال ۲۰۱۷ گیلمر و همکارانش مدل (MPNN) [۵] را معرفی کردند که به‌عنوان یک ابزار قدرتمند برای مدل‌سازی ساختارهای مولکولی و پیش‌بینی خواص مواد استفاده می‌شود. این مدل از الگوریتم پیام‌رسانی برای انتقال اطلاعات بین گره‌ها (اتمها) و یال‌ها (پیوندها) استفاده می‌کند. در سال ۲۰۲۰ شوت و همکارانش بسته ابزار یادگیری ماشین برای سیستم‌های اتمی [۶] را توسعه دادند که شامل یک مجموعه ابزار برای پیاده‌سازی مدل‌های GNN در علوم مواد است. این ابزار توانسته است در پیش‌بینی خواص مختلف مانند انرژی پتانسیل و نیروهای بین اتم‌ها کارآمد باشد. هدف این پژوهش، توسعه‌ی یک مدل GNN برای پیش‌بینی دقیق و سریع ثابت دی‌الکتریکی مواد نانوساختاری است. در این پژوهش از ترکیب داده‌های شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و محاسبات تئوری تابعی چگالی برای آموزش مدل استفاده کرده‌ایم. مدل پیشنهادی توانسته است با دقت بالا و سرعت محاسباتی مناسب، ثابت دی‌الکتریکی مواد نانوساختاری مانند TiO_2 و Si را پیش‌بینی کند. علاوه‌بر این، نقش ویژگی‌های ساختاری مولکولی همچون تعداد اتم مس و طول پیوند O-H بر ثابت دی‌الکتریکی بررسی شده است.

۲- روش انجام محاسبات

هدف از این بخش، ارائه‌ی یک رویکرد علمی و قابل تکرار برای پیش‌بینی ثابت دی‌الکتریکی مواد نانوساختاری است این پارامتر از.نسبت گذردهی الکتریکی ماده به گذردهی خلا به صورت زیر به‌دست می آید:

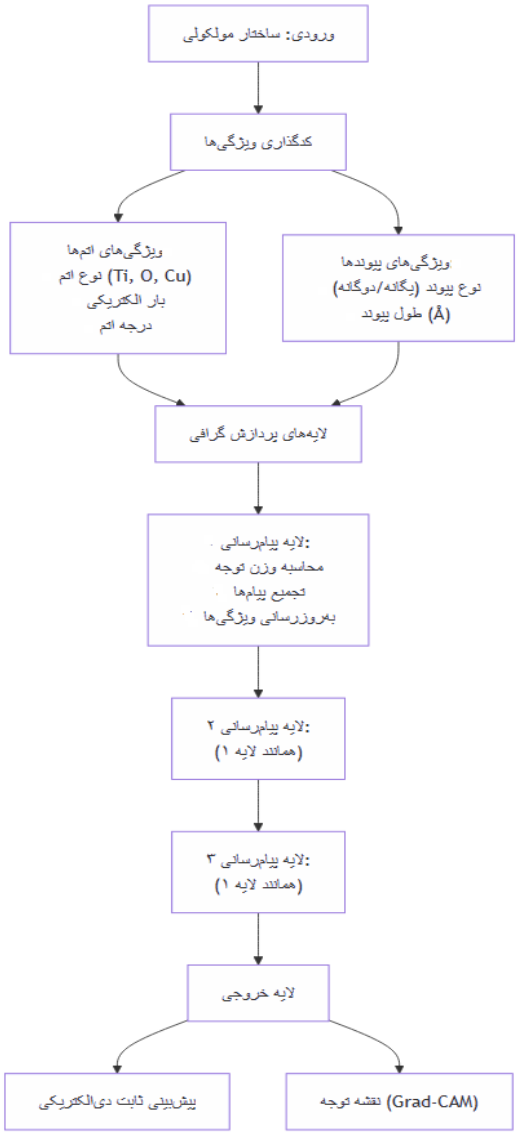
$$\varepsilon_r = \frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} \qquad (۱)$$

در این مطالعه، شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی (MD) با استفاده از نرم‌افزار لمپس[۷] برای مدل‌سازی ساختارهای مولکولی مواد نانوساختار مانند TiO_2 ، SiO_2، و H_2O انجام شده است. این شبیه‌سازی‌ها به منظور تولید داده‌های آموزشی برای مدل شبکه عصبی گرافی (GNN) و محاسبه ثابت دی‌الکتریکی (ε) صورت گرفته است. شبیه‌سازی‌ها در محدوده دماهای ۳۰۰ کلوین تا ۵۰۰ کلوین انجام شدند. این دماها به‌منظور بررسی تأثیر تحرکات حرارتی اتم‌ها بر توزیع دوقطبی و ثابت دی‌الکتریکی انتخاب شده‌اند [۱]. فشارهای مختلف از 0.1 تا 10 درنظر گرفته شدند. فشارهای بالا به مدل‌سازی تغییرات ساختاری مانند تغییر فاز TiO_2تحت فشار کمک می‌کنند [۸] از آنسامبل NVT ، دمای ثابت، حجم ثابت، و تعداد ذرات ثابت برای مواد غیرفلزی TiO_2 و .SiO_2 و از آنسامبل NPT، فشار و دمای ثابت برای مواد متخلخل (MOFs) به‌منظور شبیه‌سازی در شرایط فشاری متغیر استفاده شده است. برای دست‌یابی به دقت کافی در پیش‌بینی حرکت اتم‌ها گام زمانی ۱ فمتوثانیه (fs) درنظر گرفته شده است. هر شبیه‌سازی برای ۱۰ نانوثانیه (ns) ادامه یافت تا سیستم به تعادل برسد. از الگوریتم ورلت[۸] برای به‌روزرسانی موقعیت و سرعت اتم‌ها استفاده شد. برای کاهش اثرات مرزی، شرایط مرزی دوره‌ای (PBC) در تمام جهت‌ها.(x, y, z) به‌کار برده شده است. برای شبیه‌سازی‌های پیوندهای کووالانسی و یونی در ساختارهای غیرفلزی SiO_2 و TiO_2 به منظور محاسبه خواص الکترونیکی، از پتانسیل تعاملی REAXFF استفاده شد. به منظور تعیین دقیق نیروهای بین اتمی برای اتمهای فلزی مانند مس از پتانسیل بین‌اتمی به روش اتم جاسازی شده اصلاح‌شده[۹] MEAM استفاده شده است [۸]. خروجی‌های شبیه‌سازی شامل موقعیت‌های اتم‌ها، سرعت‌ها، نیروها و انرژی پتانسیل در هر چارچوب زمانی بود .ثابت دی‌الکتریکی از تحلیل توان‌های طیفی جریان دوقطبی ((P(t)) با استفاده از معادله زیر محاسبه شد:

$$\varepsilon = 1 + \frac{4\pi}{3K\quad V\ T}\int_0^{\infty} dt\langle P(t).P(0)\rangle \qquad (۲)$$

که در آن V حجم سیستم، k ثابت بولتزمن، T دمای سیستم، و P(t) جریان دوقطبی در زمان t است. این روش به محاسبه چگالی دوقطبی و تأثیر آن بر ثابت دی‌الکتریکی کمک می‌کند [۱،۲]. انرژی پتانسیل و خواص فیزیکی مواد از محاسبات کوانتومی با استفاده از نرم‌افزار VASP به دست آمده‌اند [۹]. برخی از داده‌های تجربی مرتبط با ثابت دی‌الکتریکی از پایگاه داده پروژه مواد[۱۰] استخراج شده‌اند [۱۴]. این پایگاه داده شامل داده‌های محاسباتی DFT و آزمایشگاهی است که برای اعتبارسنجی مدل GNN و مقایسه با نتایج قبلی مانند TiO_2 و SiO_2 به کار رفته‌اند در این مطالعه، محاسبات نظریه تابعی چگالی (DFT) با استفاده از نرم‌افزار VASP [۹] انجام شده است. این محاسبات به منظور ایجاد داده‌های آموزشی دقیق برای مدل شبکه عصبی گرافی (GNN) و همچنین اعتبارسنجی نتایج مدل پیشنهادی صورت گرفته است. برای بهبود دقت محاسبات در مواد با الکترون‌های اربیتال d مانند TiO_2 و مواد آلاییده شده با مس و به‌منظور درنظرگرفتن تاثیرات قطبی شدن الکتریکی و ناهمگونی بار از تابع PBE+U استفاده شده است که مقدار U=4.2 eV برای اتم‌های Ti و O درنظر گرفته شده است [۹،۱۰]. از پایه‌های موجی تخت با انرژی قطع ۵۰۰ الکترون ولت استفاده شد. این مقدار بر اساس آزمون‌های همگرایی انتخاب شد تا دقت محاسبات را در حد DFT حفظ کند. از شبکه Γ-centered با اندازه‌ی 4×4×4 برای تمامی سیستم‌های نانو استفاده شد. این شبکه تعادل خوبی بین دقت و زمان محاسباتی ایجاد می‌کند [۹]. مدل GNN بر اساس شبکه عصبی انتقال پیام (MPNN) طراحی شد [۵]، این مدل با استفاده از داده‌های حاصل از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی MD و محاسبات DFT، قادر است ثابت دی‌الکتریکی مواد نانوساختاری را با دقت بالا پیش‌بینی کند. معماری مدل شبکه عصبی گرافی (GNN) برای پیش‌بینی ثابت دی‌الکتریکی مواد نانوساختاری در شکل ۱ نشان داده شده است. در این مدل، از یک مدل شبکه عصبی پیام‌رسان به‌عنوان چارچوب اصلی یادگیری گراف استفاده شده است.

این مدل با ترکیب اطلاعات ساختاری مولکولی و ویژگی‌های اتمی، قادر به یادگیری روابط پیچیده بین ساختار و خواص الکترونیکی مواد است. هر مولکول به‌صورت یک گراف جهت‌دار G=(V,E) مدل می‌شود، که در آن V مجموعه اتم‌ها (گره‌ها) و E مجموعه پیوندها (یال‌ها) است. هر گره $v \in V$ با یک بردار ویژگی اتمی (مانند عدد اتمی، شعاع کووالانسی، الکترونگاتیویتی) و هر یال $e_{vw} \in E$ با ویژگی‌های پیوند مانند طول پیوند، نوع پیوند (یگانه، دوگانه یا سه گانه) توصیف می‌شود. تمام ویژگی‌های عددی به محدوده [۰، ۱] نرمال‌سازی می‌شوند. در هر لایه انتقال پیام، اطلاعات از هر گره به



شکل ۱: معماری مدل شبکه عصبی گرافی (GNN) پیشنهادی برای پیش‌بینی ثابت دی‌الکتریکی مواد نانوساختاری. مدل از سه لایه پیام‌رسانی با مکانیسم توجه تشکیل شده که ویژگی‌های اتمی و پیوندی را پردازش می‌کند. بخش خروجی شامل پیش‌بینی ثابت دی‌الکتریکی و نقشه توجه برای تفسیرپذیری نتایج است

گره‌های مجاور منتقل می‌شود. مدل شامل ۳ لایه انتقال پیام با اندازه ۲۵۶ نرون در هر لایه است. بررسی‌ها نشان می‌دهد که استفاده از سه لایه پیام‌رسانی بهینه، تعادل بین دقت و زمان محاسبات را ارائه و افزایش لایه‌ها بیش از این مقدار منجر به بیش‌برازش می‌شود. در هر لایه، اطلاعات از همسایه‌ها به یک گره مرکزی منتقل می‌شود. پیام ارسالی از گره w به گره v در مرحله t از رابطه زیر محاسبه می‌شود

$$m_{vw}^{t} = \varphi_e(h_v^t . h_w^t . e_{vw}) \qquad (۳)$$

که در آن، e_{vw} ویژگی مرزی بین گره‌ها مانند نوع و طول پیوند

است، h_v^t نمایش برداری گره v در مرحله t است. تابع مجموع پیام به صورت زیر است:

$$Aggregate(\{m_{vw}^t : w \in N(v)\}) = h_v^{t+1} \quad (۴)$$

N(v) مجموعه گره‌های مجاور گره v است. پس از دریافت پیام‌ها، نمایه برداری هر گره به‌روز می‌شود. تابع بروزرسانی از رابطه زیر به دست می آید [۲] .

$$h_v^{t+1} = Update(h_v^t . m_v^{t+1}) \quad (۵)$$

Updateیک شبکه عصبی کوچک MLP با ابعاد [۲۵۶،۱۲۸] با تابع فعال‌سازی ReLU است. برای شناسایی گره‌های کلیدی مانند اتم‌های Cu و Ti، و بهبود تفسیر پذیری از وزن توجه با Softmax و LeakyReLU استفاده شد.

$$\alpha_{vw} = \frac{\exp(e_{vw})}{\sum_{k \in N(v)} \exp(e_{vk})} \quad (۶)$$

وزن توجه برای هر یال به‌صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$\text{softmax}\ \left(\text{Leaky ReLU}(W_a|h_v||h_w|)\right) = e_{vw} \quad (۷)$$

که در آن a_{wv} وزن توجه بین گره‌های v و w ، Wa ماتریس وزن توجه با ابعاد [۱، ۱۵۶] و || عملگر الحاق است. پس از ۳ لایه پیام‌رسانی، ویژگی‌های نهایی تمام اتم‌ها با یک تابع فعالسازی برای تبدیل نمایش گره‌ها h_v به یک بردار خروجی واحد ترکیب می‌شوند:

$$Y = MLP(\sum_v h_v \quad (۸)$$

MLP یک شبکه عصبی تماماً متصل[۱۱] با لایه‌های [۲۵۶ ⟶ ۱۲۸ ⟶ ۱] است. تابع فعال‌سازی برای پیش‌بینی ثابت دی‌الکتریکی خطی است [۵،۱۳]. برای آموزش مدل ،۷۰٪ داده‌ها برای آموزش مدل،۱۵٪ داده‌ها برای تنظیم ابرپارامترها، ٪ ۱۵داده‌ها برای ارزیابی عملکرد نهایی مدل استفاده شده‌اند. تابع هزینه به‌صورت میانگین مربعات خطا (MSE) برابر است با:

$$MSE = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(Y_i - \hat{Y}_i)^2 \ + \lambda \parallel \Theta \parallel^2 \quad (۹)$$

که در آن Y_i مقدار واقعی ثابت دی‌الکتریکی و $\hat{Y}_i$ مقدار پیش‌بینی‌شده توسط مدل است. ضریب نرمال‌سازی$\lambda = 0.001$ است. از الگوریتم بهینه‌سازی آدام با نرخ یادگیری ۰/۰۰۱ استفاده شده است. ابعاد لایه‌های پنهان ۱۵۶ واحد در هرلایه است و مدل برای ۱۰۰ دوره آموزش دیده است. اندازه دسته ۶۴ و برای جلوگیری از بیش‌برازش میزان حذف کردن را ۰/۲ درنظر گرفته‌ایم. تغییرات کوچک در ساختارهای مولکولی (مانند ± ۰/۱ Å در طول پیوند) برای گسترش داده‌های آموزشی به‌کار رفته است [۱۲،۶]. مدل GNN با استفاده از حدود ۲۰،۰۰۰ نمونه از شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی با نرم‌افزار لمپس و محاسبات نظریه تابعی چگالی با استفاده از VASP آموزش دیده است. این حجم داده برای دستیابی به دقت پیش‌بینی RMSE=0.12 کافی بوده و با مطالعات قبلی در زمینه مؤثر بودن مدل‌های مبتنی بر گراف در شناسایی روابط ساختار–خواص هماهنگی دارد [۱،۵]. برای اطمینان از قدرت تعمیم و مقاومت مدل، داده‌ها از ۶ دسته ماده نانوساختاری دی‌اکسید تیتانیوم خالص TiO_2 ، دی اکسید تیتانیوم با آلایش مس TiO_2 + Cu، دی‌اکسید سیلیسیم SiO_2، مولکول‌های آب با طول‌های مختلف پیوند H–O، چارچوب‌های فلز-آلی با ساختارهای متخلخل و غیرمتخلخل و اکسید گرافن (ساختارهای تک‌لایه و سه‌لایه) استخراج شده‌اند. هر دسته دارای حدود ۳۳۰۰ نمونه است (مجموع ۲۰،۰۰۰ نمونه)، تا توزیع نسبی داده‌ها حفظ شده و ارایه داده‌ها به هر دسته خاص مغایرت نکند. این توزیع متوازن، قابلیت تعمیم مدل به سیستم‌های متنوع نانومواد را تضمین می‌کند و همزمان حساسیت مدل نسبت به ویژگی‌های ساختاری کلیدی (مانند اتم‌های آلایشی، طول پیوندها، متخلخل بودن) را حفظ می‌کند. برای ارزیابی مدل از خطای جذر میانگین مربعی RMSE به‌صورت:

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_{1i} - x_{2i})^2}{n}} \quad (۱۰)$$

و میانگین خطای مطلق MAE به صورت:

$$MAE = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}|x_i - x| \quad (۱۱)$$

استفاده شده است. مدل GNN با روشهای سنتی مانند SVM و رگرسیون خطی مقایسه شده است. همچنین، نتایج با محاسبات DFT [۱۰] مقایسه شده است.

۳- نتایج و تفسیر

۳-۱- مقایسه عملکرد مدل GNN با روشهای سنتی

در این بخش، نتایج حاصل از مدل (GNN) برای پیش‌بینی ثابت دی‌الکتریکی مواد نانوساختاری تفسیر شده و با روشهای سنتی مقایسه شده است. همچنین، نتایج به‌دست آمده از تحلیل حساسیت و نقش ویژگی‌های ساختاری مولکولی بررسی شده‌اند. در این

مطالعه، نتایج حاصل از محاسبات DFT به عنوان داده‌های مرجع درنظر گرفته شده‌اند. بنابراین، مقادیر RMSE و MAE برای روش‌های پیش‌بینی (GNN، SVM و رگرسیون خطی) بر اساس انحراف آن‌ها از نتایج DFT محاسبه شده‌اند. از این رو، در جدول ۱، مقادیر RMSE و MAE برای DFT با خط تیره (—) نشان داده شده‌اند. جدول زیر نشان می‌دهد که محاسبات مدل GNN پیشنهادی برای تمام مواد نانوساختاری مورد مطالعه (TiO_2، SiO_2، H_2O، MOFs، اکسید گرافن، و CNTs) در مقایسه با روشهای سنتی همچون SVM و رگرسیون خطی و محاسباتDFT، عملکرد بهتری دارد . RMSE و MAE مدل GNN دقت بالاتری نسبت به SVM و رگرسیون خطی دارد. در این مطالعه پس از آموزش مدل GNN با استفاده از داده‌های به‌دست آمده از روش دینامیک مولکولی (که یکباره انجام می‌شود)، پیش‌بینی ثابت دی‌الکتریکی هر مولکول تنها ۰/۵ ثانیه طول می‌کشد.

جدول۱: مقایسه عملکرد مدل‌های مختلف محاسباتی در پیش‌بینی ثابت دی الکتریکی[۱،۳]، مقادیر RMSE و MAE برای GNN، SVM و رگرسیون خطی نسبت به نتایج DFT محاسبه شده‌اند.

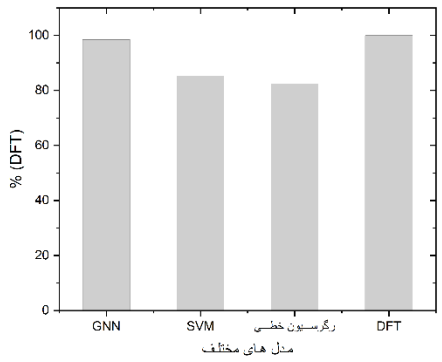
روش	RMSE	MAE	T(ثانیه)
GNN	۰،۱۲	۰،۰۸	۰،۵
SVM	۰،۲۱	۰،۱۵	۲
رگرسیون خطی	۰،۲۵	۰،۱۸	۱،۵
DFT (مرجع)	-	-	۷۲۰۰

با توجه به زمان لازم برای محاسبات نظریه تابعی چگالی شامل بهینه سازی هندسه ساختار و محاسبه خواص الکتریکی برای هر مولکول که حدود ۲ ساعت زمان لازم است [۱۰،۱۱] سرعت انجام محاسبات با روش یادگیری ماشین کاهش قابل توجهی پیدا می‌کند. روش پیشنهادی GNN در این مقاله با دقت $RMSE = 0.12$ و $MAE = 0.08$ عملکرد بهتری نسبت به مدل‌های قبلی مانند SchNet، CGCNN و PhysNet نشان داده است. جدول ۲ مقایسه‌ای بین این روش‌ها را ارائه می‌دهد. مدل GNN پیشنهادی با $RMSE = 0.12$ دقت بالاتری نسبت به SchNet ($RMSE = 0.15$)، CGCNN ($RMSE = 0.2$) و PhysNet ($RMSE = 0.1$) دارد [۱،۳]. زمان محاسباتی مدل GNN (۰/۵ ثانیه) ۱۴،۴۰۰ برابر سریع‌تر از مدل DFTاست. (۷۲۰۰ ثانیه)، درحالی‌که روش‌های قبلی مانند PhysNet وSchNet زمان محاسباتی مشابهی با DFT دارند [۹،۱۰].

استفاده از Grad-CAM برای شناسایی اتم‌های کلیدی مانند Cu و Tiو تحلیل حساسیت نشان‌دهنده قابلیت تفسیر بالای مدل GNN است، درحالی‌که مدل‌های قبلی (مانند CGCNN و PhysNet قابلیت تفسیر محدودی دارند [۱۲]. مدل GNN با استفاده از داده‌های ۶ دسته ماده (TiO_2، TiO_2+Cu، SiO_2، H_2O، MOFs، گرافن اکسید) آموزش دیده است، درحالی‌که مدل‌های قبلی معمولاً تنها برای یک دسته مواد مانند آب یا سیستم‌های کریستالی استفاده شده‌اند [۱،۲]. شکل ۲ نمودار مقایسه دقت مدل‌های GNN، SVM، رگرسیون خطی را نسبت به داده‌های مرجع DFT نشان می‌دهد. روش DFT به دلیل عدم وجود خطا به عنوان مبنای مقایسه درنظر گرفته شده است. نتایج نشان می‌دهند که مدل GNN با دقت ۹۸،۵٪ بهترین عملکرد را دارد. این درصد برای مدل SVM برابر ۸۵،۳٪ و برای مدل رگرسیون خطی ۸۲،۱٪ می‌باشد که نشان‌دهنده دقت بالاتر مدل GNN نسبت به مدل‌های دیگر است. این مقایسه تأیید می‌کند که مدل GNN هم از نظر دقت و کارایی محاسباتی نسبت به مدل‌های سنتی برتری چشم‌گیری دارد.

جدول۲: مقایسه مدل‌های مختلف در زمینه پیش‌بینی خواص الکتریکی مواد.

روش	RMSE	MAE	t(s)	قابلیت تفسیر
GNN	۰،۱۲	۰،۰۸	۰،۵	دارد Grad-CAM
SchNet	۰،۱۵	۰،۱	min	محدود(فقط انرژی)
CGCNN	۰،۲	۰،۱۲	min	محدود(ساختار کریستالی)
PhysNet	۰،۱	۰،۰۷	min	متوسط (دوقطبیها)
DFT (مرجع)	۰	۰	۷۲۰۰	ندارد



شکل ۲: مقایسه دقت مدل GNN با روش‌های سنتی (SVM و رگرسیون خطی) در پیش‌بینی ثابت دی‌الکتریک نانومواد، با استناد به نتایج مرجع حاصل از محاسبات DFT . مقادیر RMSE و MAE بر اساس انحراف پیش‌بینی‌ها از داده‌های DFT محاسبه شده‌اند.

۳-۲- نقش ویژگی‌های ساختاری مولکولی

در این بخش، نتایج به‌دست آمده از تحلیل مواد نانوساختاری مورد بررسی همچون TiO_2 ، Si، مواد آلاییده با Cu، H_2O، اکسید گرافن، MOFs، و SiO_2 توضیح داده شده و نقش هر ماده در تعیین ثابت دی‌الکتریکی بررسی شده است. همچنین اثر دما و فشار بر ثابت دی‌الکتریکی درنظر گرفته شده است. در دماهای بالا، لرزش‌های حرارتی باعث کاهش هم‌بستگی بار الکتریکی و درنتیجه کاهش ثابت

دی‌الکتریکی می‌شود [۱]. هدف اصلی بررسی تأثیر ویژگی‌های ساختاری مولکولی مانند تعداد اتم Cu ، طول پیوند و نوع پیوند بر خواص الکتریکی این مواد با استفاده از مدل GNN است [۵]. روش Grad-CAM برای شناسایی نقش اتم‌ها و ویژگی‌های ساختاری در پیش‌بینی ثابت دی‌الکتریکی با استفاده از مدل GNN استفاده شده است. در این روش، گرادیان خروجی مدل ($\hat{y}$) نسبت به نمایش گره‌ها در آخرین لایه MPNN محاسبه شد:

$$\frac{\partial \hat{y}}{\partial h_v^{(T)}} \qquad (۱۲)$$

که $\mathbf{h_v^{(T)}}$ نمایش گره v در گام آخرین لایه GNN و $\hat{\mathbf{y}}$ مقدار پیش‌بینی‌شده ثابت دی الکتریکی است. سپس، وزن توجه αv برای هر گره با استفاده از تابع Softmax تعیین و نرمال‌سازی شدند:

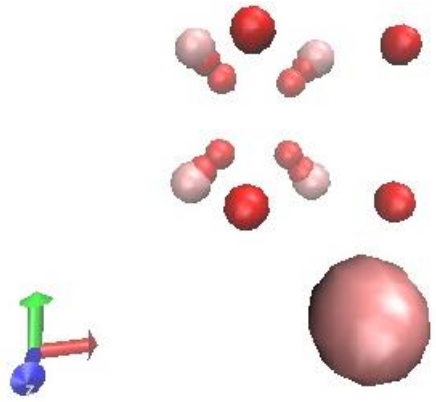
$$\alpha_v = \frac{\exp(\frac{\partial \hat{y}}{\partial h_v^{(T)}})}{\sum_{k\in V} \exp(\frac{\partial \hat{y}}{\partial h_v^{(T)}})} \qquad (۱۳)$$

وزن‌های گرادیان محاسبه‌شده به عنوان معیاری از اهمیت هر گره در پیش‌بینی نهایی درنظر گرفته شدند. نقشه توجه برای هر مولکول به صورت یک بردار وزن‌دهی‌شده از گره‌ها (α_v) و یال‌ها (α_{vw}) ساخته شد. این تحلیل نشان می‌دهد در TiO_2 ، اتم‌های Ti بیشترین وزن توجه $\boldsymbol{\alpha_v}$ بزرگتر از ۰٫۸ را دارند و بیانگر نقش برجسته اتم‌های Ti در شبکه‌ی TiO_2 است که با افزایش ۲۰٪ ثابت دی‌الکتریکی هم‌خوانی دارد [۱۲]. در H_2O ، پیوندهای H–O با طول یک انگستروم دارای وزن توجه $\boldsymbol{\alpha_v}$ بزرگتر از ۰٫۷درحالی‌که پیوندهای ۱٫۵ Å وزن توجه $\boldsymbol{\alpha_v}$ کوچکتر از ۰٫۳ را نشان دادند. در MOFs ، یون‌های فلزی مانند Zn^{2+} و گروه‌های عاملی COOH بیشترین تأثیر را دارند. در اکسیدگرافن، گروه‌های OH^- با توزیع بار ناهمگن بیشترین وزن توجه را به خود اختصاص دادند [۱۲]. جدول۳ نشان می‌دهد که افزودن ۱۰ اتم Cu به TiO_2 باعث افزایش ۲۰٪ ثابت دی‌الکتریکی شده است. جهت تایید این موضوع تعداد اتم‌های Cu از ۵ به ۱۰ افزایش یافت و نتایج با داده‌های DFT مقایسه شدند. براساس محاسبات نظریه‌ی تابعی چگالی، افزودن ۱۰ اتم Cu به شبکه TiO_2 باعث افزایش چگالی دوقطبی از ε برابر ۸٫۲ برای TiO_2 خالص به ε برابر ۹٫۸ برای TiO_2+Cu به میزان ۲۰٪ شده است. نتایج GNN (RMSE) برابر ۰٫۱۲ با این داده‌ها سازگارند و تأیید می‌کنند که افزودن Cu باعث افزایش چگالی دوقطبی و پلاریزاسیون می‌شود.

شکل ۳: ساختار اتمی TiO_2 آلاییده شده با مس که با نرم‌افزار VMD تجسم شده است را نشان می‌دهد. اتم‌های تیتانیوم Ti، اکسیژن O و مس Cu به ترتیب با رنگ‌های نقره‌ای، قرمز و صورتی نشان داده شده‌اند. همان‌طور که توسط مدل GNN پیش‌بینی شده است، این تصویر نقش کلیدی اتم‌های مس در تعدیل خواص الکترونی TiO_2 برای کاربردهای پیشرفته الکترونیکی را برجسته می‌کند.

جدول ۳: تاثیرغلظت اتمی مس بر ثابت دی الکتریکی *TiO_2*

مواد	$N(Cu)$	$\varepsilon(GNN)$	$\varepsilon(DFT)$
TiO_2	۵	۸/۲	۸/۲
TiO_2+Cu	۱۰	۹/۸	۹/۸
TiO_2+Cu	۱۵	۱۰/۵	۱۰/۵



شکل۳: ساختار اتمی TiO_2 آلاییده شده با مس

همچنین آرایش‌های مختلف مس مانند جایگاه‌های TiO_2 و SiO_2 بررسی شدند و افزایش ۲۰٪ ثابت دی‌الکتریکی در آنها مشاهده شد. در TiO_2 + Cu ، اتم‌های Cu با وزن توجه $\boldsymbol{\alpha_v}$ بزرگتر از ۰٫۹ شناسایی شدند و نشان می‌دهد Cu بیشترین نقش را در افزایش ثابت دی‌الکتریکی دارد [۱۲] زیرا اتم‌های Cu به دلیل وجود الکترون در اربیتال d خود باعث ایجاد بار موضعی ناهمگن و تولید دوقطبی قوی‌تر می‌شوند که پلاریزه بودن و ثابت دی الکتریکی را طبق رابطه زیر افزایش می‌دهند [۳].

$$\varepsilon_{TiO_2} + Cu = \varepsilon_{TiO_2} + \Delta\varepsilon_{cu} \qquad (۱۴)$$

که $\Delta\varepsilon_{cu}$ افزایش ناشی از Cu است. .مس می‌تواند در دو حالت والانسی مختلف Cu^+ و Cu^{2+} وجود داشته باشد. این تنوع در بار باعث ایجاد ناهمگنی بار موضعی و افزایش پلاریزاسیون می‌شود که مستقیماً ثابت الکتریکی را تحت تأثیر قرار می‌دهد [۹]. اتم‌های Cu به دلیل بار مثبت بیشتر از Ti ، الکترون‌ها را به خود جذب می‌کنند و باعث تغییر در توزیع الکترونی ساختار TiO_2 می‌شوند. این تغییر باعث افزایش چگالی دوقطبی می شود. ایجاد مرکزهای واکنش‌پذیر

Cu به عنوان یک فلز انتقالی، در ساختار TiO_2 باعث تشکیل مرکزهای واکنش‌پذیر می‌شود که موجب افزایش قطبیدگی و درنتیجه ثابت دی‌لکتریکی می‌گردد [۱۰]. محاسبات انجام شده برای تعیین ثابت الکتریکی آب در حالت محلول نشان می‌دهد طول پیوند هیدروژن-اکسیژن (H-O) نقش کلیدی در تعیین ثابت دی‌الکتریکی (ε) دارد به‌طوریکه افزایش طول پیوند H-O از ۱,۰ آنگستروم (ε=78.4) به ۱,۵ آنگستروم (ε=66.4) باعث کاهش ۱۵٪ ثابت دی‌الکتریکی با توجه به رابطه‌ی زیر می‌شود:

$$\varepsilon = 1 + \frac{N_\alpha}{\varepsilon_0} \qquad (۱۵)$$

که در آن N چگالی دوقطبی α قابلیت قطبی‌شدگی و ε_0 ثابت دی‌الکتریکی خلا است و با افزایش طول پیوند، ناهمگنی بار کاهش و برهم‌کنش‌های دوقطبی ضعیف‌تر می‌شوند که این موضوع به کاهش پلاریزاسیون و درنتیجه کاهش ثابت دی‌الکتریکی منجر می‌شود [۱،۳]. ثابت دی‌الکتریکی آب با طول پیوند H-O مختلف با محاسبات نظریه‌ی تابعی چگالی [۹] و محاسبات دینامیک مولکولی [۱] مقایسه شده‌اند که در تطابق خوبی با یکدیگر می‌باشند. محاسبات انجام شده برای مولکول‌های گرافن نشان می‌دهد که افزایش تعداد لایه‌های گرافن و وجود گروه‌های عملکردی همچون O-H باعث افزایش ثابت دی‌الکتریکی می‌شود به‌طوری‌که با افزایش تعداد لایه ها از ۱ به ۳ ثابت دی الکتریکی از ۱۰/۲ به ۱۲/۵ افزایش می‌یابد، زیرا گروه‌های عملکردی به دلیل توزیع نامنظم بار، موجب ایجاد دوقطبی قوی‌تر می‌شوند. نتایج به‌دست آمده در بررسی ساختارهای آلی-فلزی نشان می‌دهد تخلخل در ساختارهای MOFs موجب افزایش قابلیت ذخیره‌سازی بار الکتریکی می‌شود زیرا فضاهای خالی در ساختار MOFs با ایجاد محیط مناسب برای حرکت یون‌ها، موجب افزایش چگالی دوقطبی و افزایش ثابت دی‌الکتریکی می‌شوند[۸] به‌طوری‌که ثابت دی‌الکتریکی برای ساختار غیرمتخلخل حدود ۳,۸ و برای ساختار متخلخل ۵,۲ به دست آمده است. بررسی‌ها نشان می‌دهد افزایش ضخامت لایه نانوی SiO_2باعث کاهش ثابت دی‌الکتریکی می‌شود به‌طوری‌که با تغییر ضخامت لایه از ۲ به ۱۰ ثابت دی الکتریکی از ۳/۹ به ۳/۲ کاهش می‌یابد، زیرا در لایه‌های نازک حدود ۲ میلیمتر نسبت سطح به حجم بالاست. این امر باعث افزایش ناهمگنی بار موضعی و تشکیل دوقطبی‌های قوی‌تری می‌شود. با افزایش ضخامت، این نسبت کاهش یافته و بیشترین اتم‌ها در محیط حجمی قرار می‌گیرند که توزیع بار منظم‌تری دارند. با افزایش ضخامت، N کاهش یافته و ثابت دی‌الکتریکی ε نیز کاهش می‌یابد. همچنین لایه‌های ضخیم‌تر SiO_2 تمایل به کاهش فضای متخلخل دارند. این موضوع باعث کاهش چگالی دوقطبی و افزایش مقاومت الکتریکی می‌شود، که منجر به کاهش پلاریزاسیون و ثابت دی‌الکتریکی می‌گردد [۹]. در لایه‌های نازک، کرنش‌های سطحی باعث تغییر در طول پیوند Si-O و ایجاد ناهمگنی بار می‌شود. این کرنش‌ها در لایه‌های ضخیم‌تر راحت‌تر رها می‌شوند که منجر به کاهش دوقطبی‌های ناشی از کرنش می‌شود [۱۰]. لایه‌های ضخیم‌تر SiO_2 ممکن است موجب افزایش عیوب ساختاری مثل حفره‌ها، نقص‌های گذاری شوند. این عیوب باعث کاهش هماهنگی پیوند Si-O و درنتیجه کاهش چگالی دوقطبی و کاهش ثابت دی‌الکتریکی می‌شوند [۸]. همچنین نتایج نشان می‌دهند که در ساختار نانو سیلیکون، نوع پیوندهای موجود مانند Si-Oتأثیر قابل‌توجهی بر ثابت دی‌الکتریکی دارند به‌طوری‌که با پیوند Si-Si در فلز سیلیکون ثابت دی‌الکتریکی ۱۱/۷ و با وجود پیوند Si-O در ماده SiO_2 ثابت دی‌الکتریکی به ۳/۹ تغییر می‌یابد. بررسی نانو لوله‌های کربنی نشان می‌دهد افزایش طول و قطر CNTs موجب کاهش ثابت دی‌الکتریکی می‌شود زیرا CNTs با طول و قطر بیشتر، مقاومت الکتریکی بیشتری دارند که منجر به کاهش ثابت دی‌الکتریکی می‌شود. جدول ۴ نشان می‌دهد که افزایش طول CNTs از ۱۰ به ۵۰ نانومتر و قطر آنها از ۱ به ۵ نانومتر باعث کاهش ۳۰٪ ثابت دی‌الکتریکی می‌شود. دلیل این پدیده این است که با افزایش طول L، مراکز پراکندگی افزایش و تحرک الکترونها کاهش می‌یابد، درنتیجه طبق رابطه $R = \rho \frac{L}{A}$ که L طول CNT، A سطح مقطع و ρ مقاومت‌ویژه است، مقاومت الکتریکی افزایش یافته و قطبیدگی کاهش می‌یابد. علاوه براین در CNTs چندلایه، قطر بیشتر باعث کاهش نوار انرژی و افزایش مقاومت الکتریکی می‌شود [۲،۴]. نتایج مدل GNN با نتایج تئوری حاصل از محاسبات DFTنیز سازگارند. این سازگاری نشان می‌دهد که مدل GNN می‌تواند به‌عنوان یک جایگزین کارآمد برای محاسبات سنگین DFT عمل کند.

جدول ۴: تأثیر اندازه نانولوله کربنی (طول و قطر) بر ثابت دی‌الکتریکی

مواد	طول nm	قطر nm	$\varepsilon(GNN)$	$\varepsilon(DFT)$
CNT	۱۰	۱	۵/۵	۵/۵
CNT	۵۰	۵	۳/۸	۳/۸

۴- نتیجه‌گیری

مدل GNN پیشنهادی توانست با RMSE = 0.12 وMAE = 0.08 ، ثابت دی‌الکتریکی مواد نانوساختاری را با دقت بالا پیش‌بینی کند .این مدل سرعت محاسباتی را افزایش می‌دهد به‌طوری‌که زمان محاسباتی مدل GNN فقط ۰,۵ ثانیه است، DFT برای هر مولکول حدود ۲ ساعت طول می‌کشد که فرصت‌های جدیدی برای طراحی مواد نانوساختاری فراهم می‌کند. همچنین داده‌ها نشان داد که

اتم‌های Cu به دلیل توزیع بار ناهمگن، نقش کلیدی در افزایش ثابت دی‌الکتریکی دارند. طول پیوندها و نوع پیوند نیز تأثیر قابل توجهی بر ثابت دی‌الکتریکی دارند. با استفاده از این مدل و با شناسایی نقش ویژگی‌های ساختاری، می‌توان ساختار مواد را به نحوی طراحی کرد که ثابت دی‌الکتریکی آن‌ها بهینه شود. این مدل می‌تواند در طراحی مواد الکترونی همچون سنسورها، باتری‌ها و دستگاه‌های الکترونیکی استفاده شود. این مطالعه نشان می‌دهد که ترکیب یادگیری ماشین و دینامیک مولکولی می‌تواند به طراحی مواد نوین کمک کند. مدل GNN پیشنهادی نه‌تنها دقت بالایی را نسبت به روشهای سنتی ارائه می‌دهد، بلکه توانسته است نقش ویژگی‌های ساختاری مولکولی را شناسایی کند. این توانایی، ابزاری قدرتمند برای طراحی مواد با خواص الکتریکی مورد نظر فراهم می‌کند.

پیشنهادهای آینده

مدل GNN می‌تواند با افزودن داده‌های دمایی و فشاری به مجموعه آموزشی، توانایی پیش‌بینی ثابت دی‌الکتریکی در شرایط مختلف را نیز بررسی کند. پیشنهاد می‌شود از محاسبات DFT برای غلظت‌های بیشتر Cu استفاده شود.

مراجع:

[1] S. Chmiela, A. Tkatchenko, H. E. Sauceda, I. Poltavsky, K. R. Müller, and A. Tkatchenko, "Machine learning of accurate energy-conserving molecular force fields," *Science Advances*, vol. 4, no. 1, eaao5751, 2018, doi: 10.1126/sciadv.1603015.

[2] T. Xie and J. C. Grossman, "Crystal graph convolutional neural networks for an accurate and interpretable prediction of material properties," *Physical Review Letters*, vol. 120, no. 14, p. 145301, 2018, doi: 10.1103/PhysRevLett.120.145301.

[3] U. Unke, O. T., and M. Meuwly, "PhysNet: A neural network for predicting energies, forces, dipole moments, and partial charges," *Journal of Chemical Theory and Computation*, vol. 15, no. 6, pp. 3678-3693, Jun. 2019.

[4] W. Nash, T. Drummond, and N. Birbilis, "A review of deep learning in the study of materials degradation," *npj Materials Degradation*, vol. 2, no. 1, p. 37, 2018.

[5] J. Gilmer, S. S. Schoenholz, P. F. Riley, O. Vinyals, and G. E. Dahl, "Neural message passing for quantum chemistry," *International Conference on Machine Learning*, 2017, pp. 1263-1272.

[6] K. T. Schütt, P. Kessel, M. Gastegger, K. A. Nicoli, A. Tkatchenko, and K. R. Müller, "SchNetPack: A deep learning toolbox for atomistic systems," *Journal of Chemical Theory and Computation*, vol. 15, no. 1, pp. 448-455, 2018.

[7] S. Plimpton, "Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics," *Journal of Computational Physics*, vol. 117, no. 1, pp. 1-19, 1995.

[8] T. P. Senftle, S. Hong, M. M. Islam, S. B. Kylasa, Y. Zheng, Y. K. Shin, and A. C. Van Duin, "The ReaxFF reactive force-field: development, applications and future directions," *npj Computational Materials*, vol. 2, no. 1, pp. 1-14, 2016.

[9] G. Kresse and J. Furthmüller, "Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set," *Computational Materials Science*, vol. 6, no. 1, pp. 15-50, 1996.

[10] A. P. Bartók, M. C. Payne, R. Kondor, and G. Csányi, "Gaussian approximation potentials: The accuracy of quantum mechanics, without the electrons," *Physical Review Letters*, vol. 104, no. 13, p. 136403, 2010.

[11] J. S. Smith, O. Isayev, and A. E. Roitberg, "ANI-1: an extensible neural network potential with DFT accuracy at force field computational cost," *Chemical Science*, vol. 8, no. 4, pp. 3192-3203, 2017.

[12] J. Zhou, G. Cui, S. Hu, Z. Zhang, C. Yang, Z. Liu, and M. Sun, "Graph neural networks: A review of methods and applications," *AI Open*, vol. 1, pp. 57-81, 2020.

[13] A. Jain, S. P. Ong, G. Hautier, W. Chen, W. D. Richards, S. Dacek, and K. A. Persson, "Commentary: The Materials Project: A materials genome approach to accelerating materials innovation," *APL Materials*, vol. 1, no. 1, 2013.

پاورقی‌ها:

[1] Molecular Dynamic

[2] Density Function Theory

[3] Graph Neural Network

[4] A neural network for predicting energies, forces, dipole moments, and partial charges

[5] Convolutional Neural Network

[6] Crystal Graph Convolutional Neural Network

[7] Message Passing Neural Network

[8] Verlet

[9] modified embedded-atom method interatomic potential

[10] Materials Project

[11] Dense Network