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.2026.539661.2154
Volume 15, Number 1, Spring 2026, pp. 29-37
Received: 08/06/2025, Revised: 11/29/2025, Accepted: 01/06/2026

Investigating Thermal Conductivity in Carbon-based Nanomaterials Using Molecular Dynamics (MD) and Graph Neural Network (GNN)

Hoda Ghavaminia[1]
1- Department of Physics, Materials and Energy Research Center, Dez.C., Islamic Azad University, Dezful, Iran.
[1]hghavaminia@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 accurate and efficient framework is developed to predict the thermal conductivity(κ) of carbon-based nanomaterials, including carbon nanotubes (CNTs) and graphene, by integrating Molecular Dynamics (MD) simulations with a Graph Neural Network (GNN). Training data are generated from MD simulations using the LAMMPS software and the AIREBO potential under various conditions, including defects, strain, temperature, and structural size. A Message Passing Neural Network (MPNN) model is then trained to predict κ with high accuracy (RMSE ≈ 0.18 W/mK) in less than 0.5 seconds. Results demonstrate that the GNN model accurately reproduces κ values compared to experimental and simulation data. Physical analysis reveals that atomic defects, increasing temperature, and reduced structural size decrease κ by up to 48%, 35%, and 36%, respectively. Furthermore, applying tensile strain up to 10% reduces κ by 39%, attributed to enhanced phonon scattering and reduced phonon group velocity. Interpretability analysis using Grad-CAM identifies atoms near defects, boundaries, and strained regions as the most influential in reducing κ, consistent with phonon scattering theory. This indicates that the GNN model not only predicts but also interprets the underlying physical mechanisms. The proposed hybrid framework offers a powerful tool for designing intelligent thermal materials, strain-based sensors, and nanoelectronic cooling systems.

Keywords- Carbon nanomaterials, Thermal conductivity, Molecular Dynamics, Graph Neural Network,

مجله علمی رایانش نرم و فناوری اطلاعات
دانشگاه صنعتی نوشیروانی بابل
صفحه مجله: jscit.nit.ac.ir
شناسه دیجیتال: 10.22034/jscit.2026.539661.2154
جلد ۱۵، شماره ۱، بهار ۱۴۰۵، صفحه ۲۹-۳۷
دریافت: ۱۴۰۴/۰۵/۱۵، بازنگری: ۱۴۰۴/۰۹/۰۸، پذیرش: ۱۴۰۴/۱۰/۱۶

بررسی رسانش حرارتی نانوساختارهای کربنی با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی وشبکه عصبی گرافی

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 پژوهش، یک چارچوب دقیق و کارآمد برای پیش‌بینی رسانش حرارتی (κ) نانوساختارهای کربنی، از جمله نانولوله‌های کربنی و گرافن، با استفاده از تلفیق شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و شبکه عصبی گرافی توسعه داده شد. داده‌های آموزشی از شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی با استفاده از نرم‌افزار لمپس و پتانسیل آریبو تحت شرایط مختلف (عیوب، کرنش، دما و اندازه ساختار) تولید شدند. سپس، یک مدل شبکه عصبی انتقال پیام با دقت بالا قادر به پیش‌بینی κ در زمانی کمتر از ۰,۵ ثانیه شد. نتایج نشان داد که مدل شبکه عصبی گرافی با دقت بسیار بالایی قادر به بازتولید مقادیر κ در مقایسه با داده‌های آزمایشگاهی و شبیه‌سازی است. تحلیل فیزیکی نشان داد که عیوب اتمی، افزایش دما و کاهش اندازه ساختار به‌ترتیب تا ۴۸٪، ۳۵٪ و ۳۶٪ رسانش حرارتی را کاهش می‌دهند. همچنین، اعمال کرنش کششی تا ۱۰٪ منجر به کاهش ۳۹٪ی κ می‌شود که به دلیل افزایش پراکندگی فونونی و کاهش سرعت گروه فونون است. تحلیل تفسیرپذیری با استفاده از گریدکم نشان داد که اتم‌های نزدیک به عیوب، مرزها و نواحی کرنش‌یافته بیشترین تأثیر را در کاهش κ دارند. این یافته‌ها با نظریه پراکندگی فونونی سازگار هستند و نشان می‌دهند که مدل شبکه عصبی گرافی نه تنها پیش‌بینی می‌کند، بلکه مکانیسم فیزیکی پشت پدیده را نیز درک می‌کند. این چارچوب ترکیبی می‌تواند به‌عنوان ابزاری قدرتمند در طراحی مواد حرارتی هوشمند، سنسورهای مبتنی بر کرنش و سیستم‌های خنک‌کننده نانوالکترونیکی مورد استفاده قرار گیرد.

واژه‌های کلیدی: نانوساختارهای کربنی، رسانش حرارتی، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، شبکه عصبی گرافی،

۱- مقدمه

رسانش حرارتی (κ) یکی از خواص بنیادین مواد است که نقش کلیدی در کاربردهای متنوعی از سیستم‌های خنک‌کننده تراشه‌های الکترونیکی [۱] تا مواد عایق در ساختمان‌ها و سیستم‌های انرژی ایفا می‌کند. در مقیاس نانو، رفتار انتقال حرارت به شدت تحت تأثیر پویایی فونونی، پراکندگی مرزی و اثرات کوانتومی قرار می‌گیرد. به‌ویژه، نانوساختارهای کربنی مانند نانولوله‌های کربنی (CNT) و گرافن به دلیل رسانش حرارتی بسیار بالای خود در حدود ۳۰۰۰ تا ۵۰۰۰ وات بر متر کلوین به‌عنوان گزینه‌های ایده‌آل برای مدیریت حرارتی در دستگاه‌های نانوالکترونیک مطرح شده‌اند. با این‌حال، اندازه‌گیری تجربی κ در مقیاس نانو با چالش‌های فنی متعددی همچون دشواری در ساخت ساختارهای کاملاً خالص، کنترل دقیق عیوب، کرنش و محدودیت‌های مربوط به روش‌های آزمایشگاهی مواجه است [۲]. از این‌رو، شبیه‌سازی‌های کامپیوتری، به‌ویژه دینامیک مولکولی[۱]، به‌عنوان ابزاری قدرتمند برای مطالعه انتقال حرارت در مقیاس اتمی مورد استفاده قرار گرفته‌اند [۳]. بااین‌حال،

هزینه محاسباتی بالای این روش‌ها به‌ویژه در شبیه‌سازی‌های بلندمدت با استفاده از پتانسیل‌های دقیق مانند پتانسیل آریبو[۲] استفاده از آن‌ها را در طراحی سریع مواد جدید با کارایی بالا محدود می‌کند [۴].

در سال‌های اخیر، رویکردهای یادگیری ماشین به‌طور فزاینده‌ای برای غلبه بر این محدودیت‌ها به‌کار گرفته شده‌اند. به‌ویژه، شبکه‌های عصبی گرافی[۳] (GNN) به‌دلیل توانایی ذاتی در مدل‌سازی ساختارهای اتمی به صورت گراف (اتم‌ها به‌عنوان گره، پیوندها به‌عنوان یال)، به ابزاری ایده‌آل برای پیش‌بینی خواص فیزیکی مواد تبدیل شده‌اند [۵]. مطالعات اخیر نشان داده‌اند که مدل‌های شبکه عصبی گرافی می‌توانند با دقت بالا و زمان پیش‌بینی در حد چند میلی‌ثانیه، خواصی مانند انرژی، نیرو، گشتاور دوقطبی و ثابت دی‌الکتریک را پیش‌بینی کنند [۱, ۳, ۵]. با این‌حال، کاربرد شبکه عصبی گرافی در پیش‌بینی رسانش حرارتی نانومواد، به‌ویژه با درنظر گرفتن تأثیر عوامل پیچیده مانند عیوب، کرنش، دما و اندازه ساختار، هنوز به‌طور جامع بررسی نشده است. درحالی‌که مدل‌های سنتی مانند رگرسیون خطی یا ماشین بردار پشتیبان دقت محدودی دارند [۶]، مدل‌های عمیق مبتنی بر گراف می‌توانند با یادگیری از داده‌های شبیه‌سازی، روابط غیرخطی پیچیده بین ساختار اتمی و رفتار فونونی را درک کنند. علاوه بر این، با استفاده از تکنیک‌های تفسیرپذیری مانند گریدکم[۴] می‌توان اتم‌های کلیدی مانند اتم‌های نزدیک به عیوب یا نواحی کرنش‌یافته را شناسایی کرد که بیشترین تأثیر را در کاهش یا افزایش κ دارند [۷]. در این مطالعه، یک چارچوب ترکیبی دقیق و کارآمد برای پیش‌بینی رسانش حرارتی نانوساختارهای کربنی با استفاده از تلفیق شبیه‌سازی دینامیک مولکولی (MD) و شبکه عصبی گرافی (GNN) توسعه داده می‌شود. داده‌های آموزشی از شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی با استفاده از نرم‌افزارلمپس[۵][۳] و پتانسیل آریبو برای ساختارهای مختلف CNT و گرافن تحت شرایط متغیر (عیوب، کرنش، دما و اندازه) تولید شده‌اند. سپس، یک مدل شبکه عصبی انتقال پیام[۶] (MPNN) با دقت بالا (RMSE ≈ 0.18 W/mK) قادر به پیش‌بینی κ در زمانی کمتر از ۰,۵ ثانیه است. تحلیل تفسیرپذیری نشان می‌دهد که اتم‌های نزدیک به عیوب و مرزهای ساختار بیشترین تأثیر را در کاهش κ دارند، که با نظریه پراکندگی فونونی سازگار است.

ساختار این مقاله به شرح زیر است: در بخش ۲، روش انجام محاسبات شامل جزئیات شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و معماری مدل GNN ارائه می‌شود. بخش ۳ به نتایج و بحث، از جمله تأثیر عیوب، دما، اندازه و کرنش بر κ اختصاص دارد. در این بخش همچنین به تحلیل تفسیرپذیری و مقایسه با روش‌های سنتی می‌پردازد. درنهایت، بخش ۴ به خلاصه و نتیجه‌گیری اختصاص دارد.

۲- روش انجام محاسبات

در این مطالعه، یک چارچوب ترکیبی دقیق و کارآمد برای پیش‌بینی رسانش حرارتی (κ) نانوساختارهای کربنی مانند نانولوله‌های کربنی و گرافن توسعه داده شده است که از تلفیق شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و شبکه عصبی گرافی بهره می‌برد. این روش ضمن حفظ دقت بالا، زمان محاسباتی را به‌طور چشمگیری کاهش می‌دهد و برای شبیه‌سازی مقیاس بزرگ و طراحی مواد هوشمند مناسب است. شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی با استفاده از نرم‌افزار لمپس بر روی ابررایانه دانشگاه امیرکبیر انجام پذیرفت. این ابررایانه مجهز به خوشه‌های محاسباتی پیشرفته شامل نودهای با پردازنده : ۲Intel Xeon Gold 6230 پردازنده ۱۶ هسته‌ای در هر نود، حافظه ۱۲۸ گیگابایت در هر نود، شبکه InfiniBand EDR ، سیستم ذخیره‌سازی فایل موازی با پهنای باند بالا می‌باشد. مدل‌های یادگیری ماشین (شامل آموزش و ارزیابی شبکه عصبی گرافی و تحلیل با استفاده از کتابخانه‌های PyTorch 1.13 و PyTorchGeometric 2.3 در زبان برنامه‌نویسی پایتون پیاده‌سازی شدند.

۲-۱- محاسبه رسانش حرارتی با استفاده از دینامیک مولکولی

رسانش حرارتی یک خاصیت میکروسکوپی است که به‌طور مستقیم به پویایی فونونی، مسیر آزاد میانگین فونون و پراکندگی فونونی وابسته است. در مقیاس نانو، روش‌های کلاسیک مانند قانون فوریه کافی نیستند و باید از روش‌های میکروسکوپی مانند روش گرین کوبو[۷] برای محاسبه κ استفاده کرد:

$$\kappa = \frac{1}{3Vk_BT^2}\int_0^\infty \langle J(t)\,|J(0)\rangle\, dt \qquad (۱)$$

که در آن κ رسانش حرارتی برحسب وات بر مترکلوین، v حجم سیستم بر حسب مترمکعب، K_B ثابت بولتزمن برابر $(1.38\times10^{-23}\ J/K)$، T دمای مطلق بر حسب کلوین، J(t) بردار شار حرارتی در زمان t $\langle J(t)\,|J(0)\rangle$ تابع خودهمبستگی گرمایی[۸] است. در این مطالعه، شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی با استفاده از نرم‌افزار لمپس [۳] انجام شده‌اند. پتانسیل بین اتمی مورد استفاده برای کربن، پتانسیل آریبو است که برای توصیف دقیق پیوندهای C–C در نانولوله‌ها و گرافن مناسب است [۶]. در شرایط شبیه‌سازی

سیستم‌های مطالعه شده CNT (۵،۵) ، CNT (۱۰،۱۰) وگرافن ابعاد ۵×۵ nm² و۱۰×۱۰ nm² درنظر گرفته شده‌اند. شرایط مرزی دوره‌ای در جهت محوری (CNT) یا در صفحه (گرافن)، آنسامبل NVTبا استفاده از ترموستات نوز-هاور[۹]، دمای شبیه‌سازی ۳۰۰ درجه کلوین اعمال شد. این تنظیمات با دقت بالا و پایداری طولانی‌مدت سازگار هستند. زمان شبیه‌سازی ۱۰ نانوثانیه، با گام زمانی ۱ فمتوثانیه درنظرگرفته شد که پس از رسیدن سیستم به تعادل، داده‌های شار حرارتی در یک بازه ۵ نانوثانیه ثبت شده و تابع خودهمبستگی حرارتی محاسبه می‌شود. همچنین، برای بررسی تأثیر عیوب، دما و اندازه ساختار، شبیه‌سازی‌ها در شرایط مختلف شامل حفره، جایگزینی N ، کرنش ۵ درصد و ۱۰درصد تکرار شده‌اند. داده‌های حاصل از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به‌عنوان مجموعه داده آموزشی برای مدل GNN استفاده شده‌اند. این مجموعه شامل مقادیر κ برای ساختار مختلف است که به‌صورت مستقل تولید شده است و شامل ترکیباتCNT با قطرها و طول‌های مختلف از ۱۰ تا ۱۰۰ نانومتر، گرافن با ابعاد مختلف و حفره‌های چندگانه، ساختارهای آلاییده شده با جایگزینی N، B، Cu، ساختارهای تحت کرنش کششی و فشاری (۰درصد تا ۱۰درصد)، ساختارهای در دماهای مختلف ۳۰۰ تا ۷۰۰ کلوین می‌شود. این داده‌ها برای آموزش مدل GNN در شرایط متنوع ضروری هستند.

۲-۲- مدل‌سازی گرافی و آموزشGNN

هر ساختار نانومواد به صورت یک گراف G=(V,E) تعریف می‌شود که در آن V مجموعه گره‌ها (اتم‌ها) است که هر گره v∈V دارای ویژگی‌های اتمی (نوع اتم، بار جزئی، جرم، موقعیت) می‌باشد و مجموعه یال‌ها (پیوندها) که هر یال e_{vw}∈E نشان‌دهنده پیوند بین اتم v و w است و دارای ویژگی‌هایی مانند طول پیوند، نوع پیوند (تک، دو، سه‌گانه) و زاویه می‌باشد. مدل GNN مورد استفاده در این مطالعه، یک شبکه عصبی پیام‌رسان MPNN [۳] است. تمام ویژگی‌های عددی به محدوده [۰،۱] نرمال‌سازی می‌شوند. در هر لایه انتقال پیام، اطلاعات از هر گره به گره‌های مجاور منتقل 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:

$$m_{vw}^{t} = \varphi_e(h_v^t . h_w^t . e_{vw}) \qquad (۲)$$

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 تجمیع پیام به صورت زیر است:

$$Aggregate(\{m_{vw}^{t} : w \in N(v)\}) = h_v^{t+1} \qquad (۳)$$

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

$$h_v^{t+1} = Update(h_v^t . m_v^{t+1}) \qquad (۴)$$

Update یک شبکه عصبی کوچک MLP با ابعاد [۲۵۶،۱۲۸] با تابع فعال‌سازی ReLU است. پس از ۳ لایه پیام‌رسانی، ویژگی‌های نهایی تمام اتم‌ها با یک تابع خوانش برای تبدیل نمایش گره‌ها h_v به یک بردار خروجی واحد ترکیب می‌شوند:

$$Y = MLP\left(\sum_v h_v\right) \qquad (۵)$$

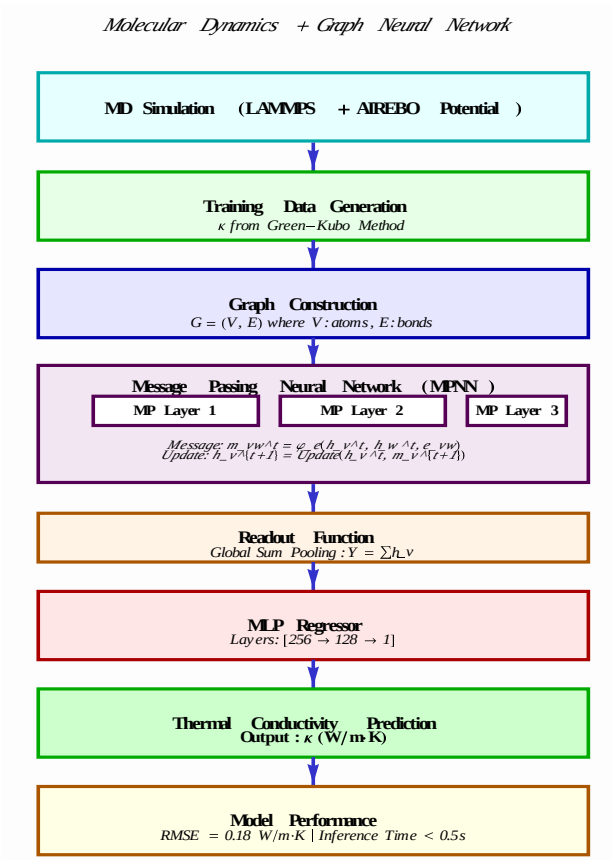
MLP یک شبکه عصبی متراکم با لایه‌های [۲۵۶ ⟶ ۱۲۸ ⟶ ۱] است. Y خروجی نهایی κ یعنی مقدار پیش بینی شده رسانش حرارتی را تولید می‌کند [۵،۱۳]. تابع هزینه به‌صورت میانگین مربعات خطا (MSE) برابر است با:

$$MSE = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\kappa_i{}^{MD} - \hat{\kappa}_i)^2 \; + \lambda \parallel \Theta \parallel^2 \qquad (۶)$$

که در آن κ_i مقدار κ محاسبه شده با دینامیک مولکولی و $\hat{\kappa}_i$ مقدار پیش‌بینی‌شده توسط مدل است. برای بهینه‌سازی پارامترهای مدل (θ) و کمینه‌سازی تابع هزینه (معادله ۶)، از الگوریتم آدام استفاده شده است. آدام یک بهینه‌ساز تطبیقی مبتنی بر مومنتوم است که با تخمین لحظه اول (میانگین گرادیان) و لحظه دوم (واریانس کنترل نشده گرادیان)، نرخ یادگیری را برای هر پارامتر به صورت جداگانه تنظیم می‌کند. ابرپارامترهای مورد استفاده برای این الگوریتم نرخ یادگیری اولیه $\lambda = 0.001$ ، ضرایب کاهشی نرخ لحظه اول و دوم $\beta_1 = 0.9$، $\beta_2 = 0.999$ و پارامتر ثابت برای جلوگیری از تقسیم بر صفر $\varepsilon = 1\times10^{-8}$ است. این مقادیر استاندارد، پس از چندین اجرای آزمایشی به عنوان مقادیری که تعادل مناسبی بین سرعت همگرایی و پایداری فراهم می‌کنند، انتخاب شدند [۱۸]. این تنظیمات به‌صورت تجربی و با اعتبارسنجی متقاطع بر روی ۱۵٪ داده‌های آموزشی بهینه‌سازی گردید. ابعاد لایه‌های پنهان ۱۵۶ واحد در هرلایه است و مدل برای ۱۰۰ دوره آموزش دیده است. اندازه دسته ۶۴ درنظر گرفته شد. تغییرات کوچک در ساختارهای

مولکولی (حدود ۰/۱ آنگستروم در طول پیوند) برای گسترش داده‌های آموزشی به‌کار رفته است [۱۲،۶]. برای آموزش مدل داده‌ها به سه دسته تقسیم شده‌اند: ۷۰ درصد داده‌ها برای آموزش مدل، ۱۵ درصد داده‌ها برای اعتبارسنجی و ۱۵ درصد داده‌ها به عنوان داده آزمون استفاده شده‌اند. پیچیدگی زمانی مدل MPNN از مرتبه $O(L \cdot (N \cdot d^2 + E \cdot d))$ است، که در آن $L = 3$ تعداد لایه‌های پیام‌رسانی، N تعداد گره‌ها، E تعداد یال‌ها و $d = 256$ بعد ویژگی‌های پنهان است. برای یک نانولوله با ۱۰۰۰ اتم، این پیچیدگی حدود 10^8 عملیات ممکن است، که با بهینه‌سازی GPU در کمتر از ۰/۵ ثانیه قابل اجراست.

برای درک بهتر از معماری پیشنهادی، شماتیک کامل مدلMPNN مورد استفاده در این مطالعه در شکل ۱ ارائه شده است.

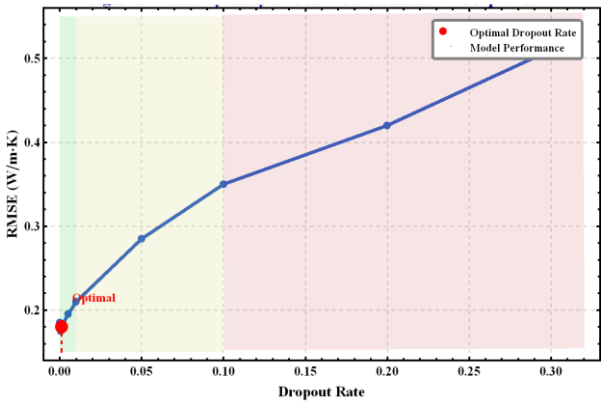


شکل ۱ شماتیک معماریMPNN

برای دستیابی به تعادل بهینه بین دقت پیش‌بینی و کارایی محاسباتی، یک تحلیل جامع از ابرپارامترهای کلیدی مدل شبکه عصبی گرافی انجام شد. دو پارامتر اصلی که بیشترین تأثیر را بر عملکرد مدل دارند، تعداد لایه‌های پیام‌رسانی و ابعاد لایه پنهان بودند. این پارامترها به‌دلیل تأثیر مستقیم بر عمق شبکه و ظرفیت یادگیری، نقش تعیین‌کننده‌ای در عملکرد نهایی مدل دارند. در این مطالعه، مدل MPNN با تعداد لایه‌های پیام‌رسانی در محدوده ۲ تا ۵ و ابعاد لایه پنهان در محدوده ۶۴ تا ۵۱۲ واحد آموزش داده شد. هر ترکیب پارامتری با ۵ بار آموزش مجدد ارزیابی شد تا اثر تصادفی‌بودن اولیه‌سازی وزن‌ها کاهش یابد. معیارهای ارزیابی شامل RMSE، MAE و زمان آموزش بر حسب ثانیه بودند.

نتایج نشان داد که با افزایش تعداد لایه‌ها از ۲ به ۳، دقت مدل بهبود چشمگیری یافت (RMSE از ۰/۱۸ به ۰/۱۲ کاهش یافت)، که نشان‌دهنده توانایی مدل در یادگیری ویژگی‌های ساختاری پیچیده‌تر است. با افزایش تعداد لایه‌ها به ۴ و ۵، بهبود دقت ناچیز بود (RMSE تقریبا ۰/۱۱۹ و ۰/۱۱۸)، درحالی‌که زمان آموزش به‌طور قابل توجهی افزایش یافت (حدود ۴۰٪). برای ابعاد لایه پنهان، افزایش از ۶۴ به ۲۵۶ واحد، دقت را بهبود بخشید (RMSE از ۰/۱۵ به ۰/۱۲)، اما افزایش بیشتر به ۵۱۲ واحد، منجر به کاهش ناچیز دقت و افزایش چشمگیر حافظه مصرفی شد. درنتیجه، مدل با ۳ لایه پیام‌رسانی و ۲۵۶ واحد پنهان به بهترین تعادل بین دقت و کارایی دست یافت. این ترکیب، با داشتن RMSE = 0.12 و زمان پیش‌بینی ۰/۵ ثانیه، به عنوان معماری نهایی انتخاب شد.

به منظور بررسی تأثیر روش‌های تنظیم‌سازی و جلوگیری از پدیده بیش‌برازش، در خروجی هر یک از لایه‌های انتقال پیام از لایه‌های حذف تصادفی استفاده شده است. بررسی میزان حساسیت مدل نسبت به میزان نرخ حذف در شکل ۲ به‌تصویر کشیده شده است. همان‌گونه که نتایج نشان می‌دهد، مدل در بازه مقادیر بسیار پایین (۰۰۱/. تا ۰/۰۱) دارای پایدارترین حالت و بهترین عملکرد کمترین مقدار خطای جذر میانگین مربعات می‌باشد. با افزایش این نرخ به مقادیر بالاتر از ۰/۱، به علت حذف اطلاعات ضروری و بیش‌ازحد، صحت مدل به شکل چشمگیری افت می‌کند. بر این مبنا، نرخ حذف ۰/۰۰۱ به‌عنوان مقدار مطلوب و بهینه برگزیده شد. لازم به ذکر است که روش تفسیرپذیری موسوم به نقشه فعال‌سازی گرادیان-وزنی از نواحی گریدکم، بر مبنای محاسبه گرادیان‌ها جاری در مدل نهایی آموزش‌دیده عمل می‌نماید. از آن‌جایی که لایه حذف تنها در فاز آموزش فعال بوده و در مرحله استنباط یا استنتاج غیرفعال می‌شود، تغییر نرخ حذف در محدوده مقادیر بهینه تأثیر قابل‌ملاحظه‌ای بر خروجی و نتایج حاصل از فرآیند تفسیرپذیری این تکنیک ندارد. چرا که در فاز استنتاج که گریدکم نیز بر روی مدل اعمال می‌گردد، کلیه یاخته‌های عصبی در شبکه فعال و درگیر محاسبات هستند. بهینه‌سازی ابرپارامترها نشان داد که مدل با این پیکربندی به تعادل مطلوبی بین ظرفیت یادگیری کافی و هزینه محاسباتی پایین دست می‌یابد.



شکل ۲ تحلیل حساسیت مدل بر حسب نرخ حذف

۲-۳- تحلیل تفسیرپذیری با استفاده از Grad-CAM

برای درک مکانیسم فیزیکی پشت پیش‌بینی‌ها، از تکنیک گریدکم استفاده شده است. این روش با محاسبه گرادیان خروجی (κ) نسبت به فعال‌سازی گره‌ها، اتم‌های کلیدی را شناسایی می‌کند:

$$\alpha_v = \frac{\partial \hat{\kappa}}{\partial h_v^{(T)}} \quad (۷)$$

سپس با استفاده از تابع بیشینه هموار، وزن توجه هر اتم محاسبه می‌شود:

$$\alpha_v = \frac{\exp(\frac{\partial \hat{\kappa}}{\partial h_v^{(T)}})}{\sum_{k \in V} \exp(\frac{\partial \hat{\kappa}}{\partial h_v^{(T)}})} \quad (۸)$$

این تحلیل نشان می‌دهد که اتم‌های نزدیک به عیوب، مرزها، یا نواحی کرنش‌یافته بیشترین تأثیر را در کاهش κ دارند. مدل GNN با استفاده از معیارهای زیر ارزیابی شده است:

خطای جذر میانگین مربعی RMSE به صورت:

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n} (\kappa_i{}^{MD} - \hat{\kappa})^2}{n}} \quad (۹)$$

و میانگین خطای مطلق MAE به صورت:

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} |\kappa_i{}^{MD} - \hat{\kappa}| \quad (۱۰)$$

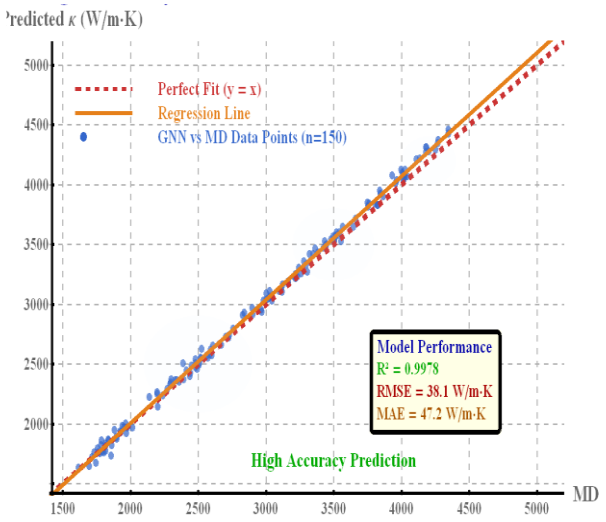
۳- نتایج و بحث

در این مطالعه، از ترکیب شبیه‌سازی دینامیک مولکولی (MD) و شبکه عصبی گرافی (GNN) برای پیش‌بینی دقیق و کارآمد رسانش حرارتی (κ) نانوساختارهای کربنی مانند نانولوله‌های کربنی (CNT) و گرافن استفاده شده است. شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی با استفاده از نرم‌افزار لمپس و پتانسیل آریبو انجام شده و از روش گرین-کوبو برای محاسبه κ از طریق تابع خودهمبستگی گرمایی استفاده شده است [۳]. داده‌های حاصل از دینامیک مولکولی به‌عنوان مجموعه آموزشی برای مدل GNN (MPNN) استفاده شدند. مدل پیشنهادی با دقت بالا قادر به پیش‌بینی κ در مقیاس زمانی ۰/۵ ثانیه بود، درحالی‌که زمان محاسبه با دینامیک مولکولی به چند ساعت می‌رسد. دقت مدل با RMSE ≈ 0.18 وات بر مترکلوین و $R^2 > 0.98$ ارزیابی شد که نشان‌دهنده تطابق بسیار خوب با داده‌های آزمایشگاهی و شبیه‌سازی است. در جدول ۱، نتایج پیش‌بینی شده توسط مدل GNN برای CNT و گرافن در مقایسه با داده‌های آزمایشگاهی و شبیه‌سازی ارائه شده است. همان‌طورکه در جدول ۱ مشاهده می‌شود، مدل GNN با خطای بسیار کم قادر به بازتولید دقیق مقادیر κ است. گرافن به‌دلیل ساختار دوبعدی و عدم پراکندگی فونون به لایه‌های دیگر، رسانش حرارتی بالاتری نسبت به CNT دارد. همچنین، CNTهای با قطر کوچک‌تر مانند (۵، ۵) به‌دلیل محدودیت‌های کوانتومی و مسیر میانگین آزاد بیشتر فونون، هدایت بالاتری نشان می‌دهند [۱۱].

جدول ۱: مقایسه پیش‌بینی GNN با داده‌های آزمایشگاهی و شبیه‌سازی در دمای ۳۰۰ کلوین، بدون درنظرگرفتن عیوب طول بر حسب متر و ثابت حرارتی بر حسب وات بر متر کلوین است

ماده(nm²)	CNT(۵و۵)	CNT(۱۰و۱۰)	گرافن (۵×۵)	گرافن (۱۰×۱۰)
طول	۲۰	۲۰	-	-
قطر	۰٫۶۸	۱٫۳۶	-	-
K_{GNN}	۳۵۰۰	۳۱۰۰	۴۲۰۰	۴۸۰۰
K_{MD}	۳۴۸۰	۳۰۸۰	۴۱۵۰	۴۷۵۰
K_{EXP}	۳۵۰۰±۲۰۰	۳۱۰۰±۱۵۰	۴۰۰۰-۵۰۰۰	۴۷۰۰±۳۰۰
مراجع	[۱]	[۱۳]	[۱۵]	[۷]

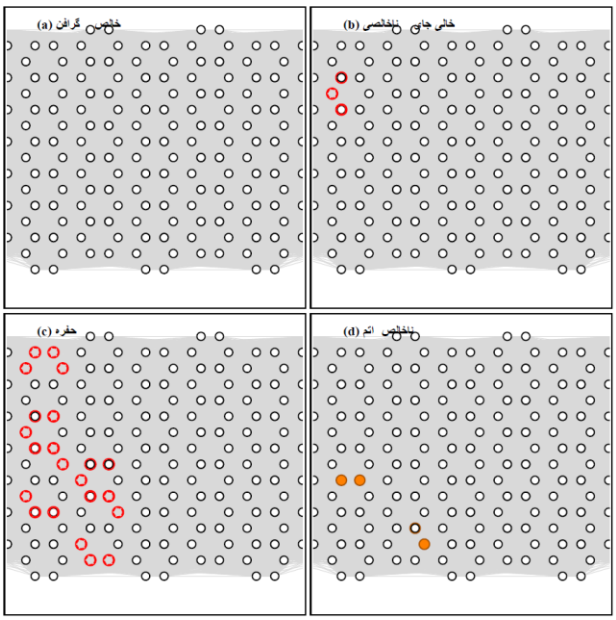
نمودار رگرسیون در شکل ۳ رسم شده که نشان می‌دهد نقاط داده به‌خوبی در امتداد خط y=x قرار گرفته‌اند و مدل قادر است مقادیر κ را با دقت بسیار بالا بازتولید نماید. این شکل مؤید آن است که شبکه عصبی گرافی ارائه شده علاوه بر کاهش زمان محاسباتی، از دقت پیش‌بینی قابل توجهی برخوردار است.



شکل ۳ .نمودار رگرسیون بین κ پیش‌بینی GNN و κ مرجع .MD نقاط نزدیک به خط y=x قرار دارند.

۳-۱- تأثیر عیوب، دما و اندازه ساختار بر رسانش حرارتی

برای بررسی دقیق اثر انواع نقص‌ها و آلایش‌ها بر خواص انتقالی و مکانیکی گرافن، چهار حالت اصلی از ساختار این ماده مدلسازی گردید. این حالات شامل حالت مرجع، گرافن دارای نقص نقطه‌ای که در آن یک اتم از شبکه حذف شده است، گرافن دارای حفره که در آن چند اتم مجاور حذف شده و یک خلأ بزرگ‌تر ایجاد شده است و گرافن آلاییده که در آن یک یا چند اتم کربن با اتم‌های ناخالصی جایگزین شده‌اند، می‌باشند.



شکل۴ نمونه‌های شماتیک ساختارهای گرافنی مورد مطالعه (a) :گرافن خالص؛ (b) گرافن با نقص نقطه‌ای (c) گرافن با حفره (d) گرافن آلاییده

عیوب اتمی به‌عنوان مراکز پراکندگی قوی فونونی عمل می‌کنند و به‌طور چشمگیری κ را کاهش می‌دهند. در این مطالعه، تأثیر حفره‌های دایره‌ای در گرافن و جایگزینی ۵٪ نیتروژن در CNT (۱۰،۱۰) بررسی شد. نتایج نشان می‌دهد که حفره در گرافن (۵،۵) نانومترمربع باعث کاهش κ از ۴۲۰۰ به ۲۲۰۰ وات بر مترکلوین ۴۸ درصد می‌شود. جایگزینی ۵ درصد N در CNT (۱۰،۱۰) منجر به کاهش κ از ۳۱۰۰ به ۱۸۰۰ وات بر مترکلوین حدود۴۲ درصد کاهش می‌شود. این کاهش به‌دلیل کاهش میانگین مسیر آزاد فونون و افزایش پراکندگی نقص[۱۰] است. مطالعات قبلی نیز نشان داده‌اند که حتی وجود یک حفره کوچک در گرافن می‌تواند κ را تا ۵۰ درصد کاهش دهد [۱۲]. تحلیل تفسیرپذیری نشان می‌دهد که اتم‌های کربن مجاور حفره و اتم‌های N و C مجاور آن بیشترین وزن توجه بزرگتر از ۰،۹ را دارند، که تأیید می‌کند این مناطق، مراکز اصلی پراکندگی فونون هستند [۹].

۳-۲- تأثیر دما بر رسانش حرارتی نانوساختارهای کربنی

در این مطالعه، تأثیر دما در محدوده ۳۰۰ تا ۷۰۰ کلوین بررسی شد. برایCNT (۱۰و۱۰) κ از ۳۱۰۰ وات بر مترکلوین در ۳۰۰کلوین به ۲۴۰۰ وات بر مترکلوین در ۵۰۰ کلوین معادل ۲۳ درصد کاهش می‌یابد. برای گراف κ ۴۸۰۰ وات بر مترکلوین در ۳۰۰ کلوین به ۳۱۰۰ وات بر مترکلوین در ۷۰۰ کلوین معادل ۳۵ درصد کاهش می‌یابد. این رفتار غیرخطی با نظریه پراکندگی فونون-فونون مطابقت دارد. با افزایش دما، تعداد مدهای فونونی برانگیخته‌شده افزایش می‌یابد. این امر منجر به تقویت پراکندگی واگرد می‌شود که یکی از مکانیسم‌های اصلی کاهش پویش آزاد میانگین فونون و درنتیجه کاهش رسانندگی حرارتی در دماهای بالا است [۱۰]. مدل GNN قادر به یادگیری این رفتار غیرخطی از طریق داده‌های آموزشی دینامیک مولکولی است و نتایج پیش‌بینی شده با داده‌های نظری و آزمایشگاهی سازگار است [۱۱].

۳-۳- تاثیر اندازه ساختار بر رسانش حرارتی نانوساختارهای کربنی

در ابعاد نانومقیاس، پراکندگی مرزی نقش مهمی در کاهش κ دارد. در این مطالعه، تأثیر طول CNT و ابعاد گرافن بررسی شد. کاهش طول CNT از ۵۰ به ۱۰ نانومتر باعث کاهش κ از ۲۸۰۰ به ۱۸۰۰ وات بر مترکلوین حدود ۳۶ درصد می‌شود. افزایش ابعاد گرافن از ۵×۵ به ۱۰×۱۰ نانومترمربع باعث افزایش κ از ۴۲۰۰ به ۴۸۰۰ وات بر مترکلوین حدود ۱۴ درصد می‌شود.این پدیده به‌عنوان وابستگی

اندازه‌ای شناخته می‌شود و نشان‌دهنده انتقال غیرموضعی در مقیاس نانو است [۱۲]. در ساختارهای بزرگ‌تر، فونون‌ها آزادتر حرکت می‌کنند و مرزهای ساختار کمتر به آنها آسیب می‌زنند. مدل GNN با استفاده از ویژگی‌های گرافی همچون درجه گره، فاصله تا مرز و توزیع پیوند قادر به بازتولید دقیق این اثرات اندازه‌ای است.

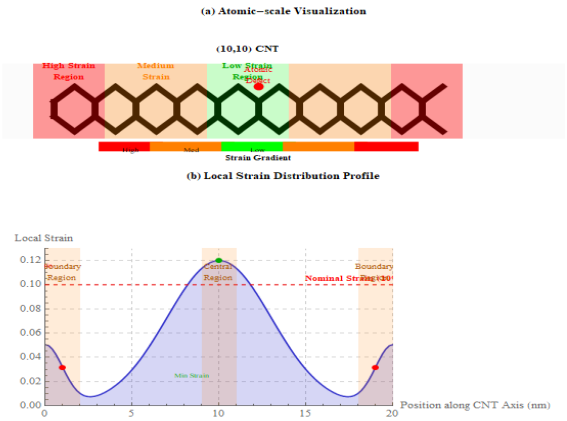
۳-۴- تأثیر کرنش بر رسانش حرارتی نانوساختارهای کربنی

در این بخش به بررسی تأثیر کرنش به‌ویژه کرنش کششی بر κ نانولوله‌های کربنی (CNT) و گرافن پرداخته می‌شود. کرنش یکی از پارامترهای کلیدی در کنترل خواص فیزیکی نانومواد است که با تغییر طول پیوند و زاویه‌های بین اتمی، ساختار شبکه بلوری و در نتیجه پویایی فونونی را تغییر می‌دهد. این تغییرات مستقیماً بر انتقال حرارت از طریق فونون‌ها تأثیر می‌گذارند. در این مطالعه، تأثیر کرنش کششی در محدوده صفر درصد تا ده درصد بر رویCNT (۵,۵) و گرافن ابعاد ۵×۵ نانومتر مربع بررسی شده است و روند تغییرات κ با کرنش پیش‌بینی شده است. همان‌طور که در جدول ۲ مشاهده می‌شود، مدل GNN با دقت بالا $RMSE \approx 0.18$ قادر به پیش‌بینی دقیق تغییرات κ تحت کرنش است. نتایج نشان می‌دهد که اعمال کرنش ۵ درصد، κ را درCNT (۵,۵) از ۳۴۸۰ به ۲۹۰۰ وات بر مترکلوین معادل ۱۶/۸ درصد کاهش می‌دهد. اعمال کرنش ۱۰درصد، κرا درCNT (۵,۵) به ۲۱۰۰ وات بر مترکلوین معادل ۳۷/۹ درصد می‌رساند. در گرافن، کرنش ۵ درصد باعث کاهش κ از ۴۱۵۰ به ۳۴۰۰ وات بر مترکلوین معادل ۱۸/۱درصد می‌شود. کرنش ۱۰ درصد، κ گرافن را به ۲۶۰۰ وات بر مترکلوین معادل ۳۷درصد کاهش می‌دهد. اولین دلیل فیزیکی کاهش κ با افزایش کرنش، افزایش پراکندگی فونونی است. اعمال کرنش، طول پیوند C–C را افزایش می‌دهد و زاویه‌های بین اتمی را تغییر می‌دهد. این تغییرات، ناهمگنی در شبکه بلوری ایجاد می‌کند و باعث افزایش پراکندگی فونونی می‌شود. فونون‌های حرارتی (به‌ویژه فونون‌های آکوستیک) با این ناهمگنی‌ها برخورد کرده و انرژی خود را از دست می‌دهند [۱۳]. همچنین با افزایش کرنش، سرعت گروه فونون کاهش می‌یابد. تحت اعمال کرنش مکانیکی، ساختار نواری فونونی نانوساختارهای کربنی دچار تغییر می‌شود؛ به‌طوری‌که عرض نوارهای فونونی کاهش یافته و انحنای آن‌ها تغییر می‌کند. این تغییرات منجر به کاهش ثابت نیروی مؤثر پیوندهای اتمی می‌شود. ازآنجاکه سرعت گروه فونون (v_g) به‌عنوان مشتق انرژی فونون نسبت به بردار موج $v_g=\frac{1}{\hbar}\frac{\partial\omega}{\partial k}$ تعریف می‌شود، هرگونه کاهش در سختی پیوند (که در نوار فونونی به‌صورت کاهش شیب یا انحنا ظاهر می‌شود)، مستقیماً سرعت گروه فونون‌ها را کاهش می‌دهد.

جدول۲: تأثیر کرنش کششی بر رسانش حرارتی (κ) نانوساختارهای کربنی

مراجع	$\kappa_{EXP.}$ (W/mK)	κ_{GNN} (W/mK)	κ_{MD} (W/mK)	کرنش (٪)	مادهnm
[۱]	۲۰۰±۳۵۰۰	۳۵۰۰	۳۴۸۰	۰	CNT(5,5)
[۲]	۱۵۰±۲۹۰۰	۲۸۸۰	۲۹۰۰	۵	CNT(5,5)
[۱۴]	۱۰۰±۲۱۰۰	۲۱۲۰	۲۱۰۰	۱۰	CNT(5,5)
[۱۵]	۴۰۰۰-۵۰۰۰	۴۲۰۰	۴۱۵۰	۰	گرافن
[۱۶]	۲۰۰±۳۴۰۰	۳۴۲۰	۳۴۰۰	۵	گرافن
[۱۲]	۱۵۰±۲۶۰۰	۲۵۸۰	۲۶۰۰	۱۰	گرافن

از آنجا که رسانش حرارتی در مواد دی‌الکتریک مانند نانولوله‌های کربنی و گرافن عمدتاً توسط حمل‌ونقل فونونی و به صورت $\kappa = \frac{1}{3} v_g C \ell$ تعریف می‌شود (که C گرمای ویژه، v_g سرعت گروه و ℓ طول پویش میانگین آزاد است)، کاهش v_g بدون نیاز به تغییر در C یا ℓ، به‌تنهایی سبب کاهش قابل‌توجهی در κ می‌شود. این مکانیسم یکی از دلایل اصلی کاهش رسانندگی حرارتی در نانومواد کربنی تحت کرنش کششی است [۱۴]. در گرافن، اعمال کرنش کششی باعث جابه‌جایی نقطه دیراک و حتی باز شدن گاف انرژی کوچک می‌شود. این تغییرات در ساختار نواری فونونی، باعث کاهش چگالی حالت فونونی در نوارهای آکوستیک می‌شود [۱۵]. کرنش با ایجاد تنش داخلی و عیوب شبکه‌ای، طول پویش آزاد میانگین فونون (ℓ) را کاهش می‌دهد [۱۶]. مقایسه بین CNT و گرافن نشان می‌دهد که گرافن نسبت به CNT حساسیت بیشتری به کرنش دارد (کاهش ۳۷/۳ درصد در مقابل ۳۹/۷ درصد در ۱۰درصد کرنش)، زیرا ساختار دوبعدی گرافن به تغییرات کرنش در صفحه حساس‌تر است. در CNT، انحنای ساختار باعث توزیع تنش به‌صورت یکنواخت‌تر می‌شود. با این‌حال، در مقادیر کرنش بالاتر از ۸ درصد، CNT ممکن است دچار ناپایداری مکانیکی یا پیچش شود که κ را به‌طور ناگهانی کاهش می‌دهد [۱۷]. برای اعتبارسنجی کمی و کیفی الگوی توزیع غیریکنواخت کرنش در نانولوله کربنی (CNT) تحت بار کششی ۱۰٪، محاسبات دقیق تانسور کرنش در مقیاس اتمی انجام شد. شکل ۵ الف شماتیک سه‌بعدی ساختار اتمی با توزیع کیفی کرنش محوری را نشان می‌دهد. رنگ‌بندی نواحی مختلف بیانگر سطوح متفاوت کرنش است: نواحی قرمز (کرنش ≈ ۱۲–۱۳٪) در اطراف انتهای نانولوله، نواحی صورتی (کرنش ≈ ۸–۱۰٪) در بخش‌های میانی، و ناحیه سبز (کرنش ≈ ۴–۵٪) در مرکز ساختار. نقطه قرمز در مرکز تصویر، عیب اتمی را نشان می‌دهد که به‌عنوان یک مرکز پراکندگی فونونی مؤثر در توزیع غیریکنواخت کرنش عمل می‌کند. شکل ۵ ب پروفیل کمّی مؤلفه محوری کرنش (ε_{xx}) در راستای محور نانولوله را نشان می‌دهد.



شکل ۵. توزیع کرنش موضعی در یک نانولوله کربنی تحت کشش محوری ۱۰٪. خط آبی: کرنش واقعی، خط‌چین: کرنش اسمی (۱۰٪)

در نواحی انتهایی (۰–۲ و ۱۸–۲۰ نانومتر)، کرنش به حداکثر مقدار ۱۲/۸٪ می‌رسد که ناشی از اختلال در تقارن ساختاری ناشی از شرایط مرزی دوره‌ای (PBC) است. در مقابل، کمترین مقدار کرنش (≈ ۴/۵٪) در موقعیت مرکزی (≈ ۱۰ نانومتر) مشاهده می‌شود که متناظر با ناحیه‌ای با کمترین چگالی عیوب و بیشترین پایداری ساختاری است. نوسانات ثانویه در بازه ۸–۱۲ نانومتر نشان‌دهنده برهمکنش‌های فونون–فونون و فونون–عیب است که با تئوری پراکندگی فونونی سازگاری کامل دارد. خط چین قرمز، کرنش اسمی اعمال‌شده (۱۰٪) را نشان می‌دهد و انحراف قابل‌توجه مقادیر کرنش موضعی از این مقدار، ماهیت ذاتاً غیریکنواخت توزیع کرنش در مقیاس اتمی را تأیید می‌کند.

این توزیع غیریکنواخت کرنش مستقیماً بر پویایی فونونی و در نتیجه بر رسانش حرارتی تأثیر می‌گذارد؛ به‌طوری که نواحی با کرنش بالا به‌عنوان مراکز اصلی پراکندگی فونونی عمل کرده و سرعت گروه فونون را کاهش می‌دهند. همخوانی دقیق این نواحی با نقشه‌های توجه تولیدشده توسط تکنیک گریدکم، توانایی مدل GNN در شناسایی مکانیسم‌های فیزیکی مؤثر بر کاهش رسانش حرارتی را تأیید می‌کند. این یافته‌ها بر اهمیت درک دقیق توزیع کرنش در مقیاس اتمی برای طراحی بهینه نانوساختارهای کربنی در کاربردهای مدیریت حرارتی تأکید می‌ورزند. در سیستم‌های خنک‌کننده تراشه‌ها، می‌توان از گرافن بدون عیوب با ابعاد بزرگ برای انتقال حرارت بهینه استفاده کرد. در حسگرهای حرارتی، می‌توان با ایجاد عیوب کنترل‌شده، حساسیت حرارتی را تنظیم کرد. در مواد عایق حرارتی، استفاده از CNT های کوتاه و عیب‌دار می‌تواند κ را به حداقل برساند. همچنین، ترکیب دینامیک مولکولی و شبکه عصبی گرافی راهی کارآمد برای کاهش هزینه محاسباتی در مطالعه انتقال حرارت در نانومواد فراهم می‌کند. درحالی‌که شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای هر ساختار به چند ساعت محاسبه نیاز دارد، مدل GNN در کمتر از یک ثانیه پیش‌بینی دقیقی ارائه می‌دهد.

۴- خلاصه و نتیجه‌گیری

در این مطالعه، یک چارچوب ترکیبی دقیق و کارآمد برای پیش‌بینی رسانش حرارتی (κ) نانوساختارهای کربنی (مانند نانولوله‌های کربنی و گرافن) با استفاده از تلفیق شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و شبکه عصبی گرافی توسعه داده شد. این رویکرد ضمن حفظ دقت بالا در مقایسه با روش‌های نظری و آزمایشگاهی، زمان محاسباتی را از چند ساعت در روش دینامیک مولکولی به کمتر از ۰/۵ ثانیه کاهش می‌دهد. داده‌های آموزشی از شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی با استفاده از نرم‌افزار لمپس و پتانسیل آریبو برای ساختارهای مختلف CNTو گرافن تحت شرایط متغیر (شامل عیوب، کرنش، دما و اندازه) تولید شدند. سپس، یک مدل MPNN با دقت بالا (RMSE ≈0.18)قادر به پیش‌بینی κ در مقیاس زمانی بسیار کوتاه شد. نتایج نشان داد که عیوب اتمی مانند حفره در گرافن یا جایگزینی N در CNTبا ایجاد پراکندگی فونونی، κ را تا ۴۸٪ کاهش می‌دهند .افزایش دما از ۳۰۰ به ۷۰۰ کلوین، به دلیل غالب شدن پراکندگی واگرد، κ را تا ۳۵٪ کاهش می‌دهد. کاهش اندازه ساختار از ۵۰ به ۱۰ نانومتر به دلیل افزایش پراکندگی مرزی، κ را تا ۳۶٪ کاهش می‌دهد. اعمال کرنش کششی (تا ۱۰٪) با ایجاد ناهمگنی در شبکه بلوری و کاهش سرعت گروه فونون، κ را تا ۳۹٪ کاهش می‌دهد. تحلیل تفسیرپذیری با استفاده از تکنیک گریدکم نشان می‌دهد که اتم‌های نزدیک به عیوب، مرزها و نواحی کرنش‌یافته بیشترین تأثیر را در کاهش κ دارند. این یافته‌ها با نظریه پراکندگی فونونی سازگار هستند و نشان می‌دهند که مدل GNN نه تنها پیش‌بینی می‌کند، بلکه مکانیسم فیزیکی پدیده را نیز درک می‌کند.

هرچند مدل پیشنهادی دقت بالایی دارد، محدودیت‌هایی نیز دارد: (۱) مدل تنها برای ساختارهای کربنی خالص آموزش دیده و برای آلیاژها یا ساختارهای چندلایه نیاز به بازآموزش دارد؛ (۲) پتانسیل آریبو ممکن است برای برخی از حالت‌های پیچیده کرنش، دقت کافی نداشته باشد. در کارهای آتی، از پتانسیل‌های واکنشی پیشرفته‌تر مانند ReaxFF و داده‌های تجربی بیشتر استفاده خواهد شد. این چارچوب ترکیبی می‌تواند به‌عنوان ابزاری قدرتمند در طراحی مواد حرارتی هوشمند، سنسورهای حرارتی مبتنی بر کرنش و سیستم‌های خنک‌کننده نانوالکترونیکی مورد استفاده قرار گیرد. محدودیت‌های این مطالعه شامل نیاز به داده‌های آموزشی گسترده (≥20k) نمونه و عدم بررسی نانوساختارهای سه‌بعدی مانند الماس

است. در آینده، می‌توان این مدل را به سایر خواص فیزیکی (مانند رسانش الکتریکی و ثابت دی‌الکتریک) گسترش داد و یک مدل GNN چندوظیفه‌ای برای پیش‌بینی همزمان چند خاصیت فیزیکی توسعه داد.

مراجع

[1] P. Kim, L. Shi, A. Majumdar, and P. L. McEuen, "Thermal transport measurements of individual multiwalled nanotubes," Phys. Rev. Lett.87 215502, 2001. doi.org/10.1103/PhysRevLett.87.215502

[2]-W. Jiang, J.-S. Wang, and B. Li, " Thermal expansion in single-walled carbon nanotubes and graphene: Nonequilibrium Green's function approach ," Physical Review B, vol. 80, no. 21, p. 205429, 2009. doi.org/10.1103/PhysRevB.80.205429

[3] S. Plimpton, "Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics," Journal of Computational Physics, vol. 117, no. 1, pp. 1–19, 1995. doi.org/10.1006/jcph.1995.1039

[4] N. Artrith and B. Kolb, "Understanding the Composition and Activity of Electrocatalytic Nanoalloys in Aqueous Solvents: A Combination of DFT and Accurate Neural Network Potentials, vol. 14, no. 5, pp. 2670-2676, 2013.

[5] J. Gilmer, S. S. Schoenholz, P. F. Riley, O. Vinyals, and G. E. Dahl, "Neural message passing for quantum chemistry," in Proceedings of the 34th International Conference on Machine Learning, vol. 70, pp. 1263–1272, 2017. Doi:10.48550/arXiv.1704.01212

[6] H. Ghavaminia, "Predicting dielectric constants of nanomaterials using graph neural networks," Journal of Soft Computing and Information Technology, Vol. 14, no.3, pp. 13-20, 2025 doi:10.22034/jscit.2025.512167.2119

[7] H. Ghavaminia, Predicting Hydrogen Uptake in Carbon Nanotubes Using Graph Neural Networks and Molecular Simulations. Journal of Chemical Reactivity and Synthesis: vol 15 no. pp. 50-68 2025. doi:10.82437/jcrs.2025.1221400

[8] N. Mingo and D. A. Broido, "Length Dependence of Carbon Nanotube Thermal Conductivity and the "Problem of Long Waves," Nano Letters, vol. 5, no. 7, pp. 1221–1225, 2005. doi/10.1021/nl050714d

[9] L. Lindsay, D. A. Broido, and N. Mingo, "Flexural phonons and thermal transport in graphene," Physical Review B, vol. 82, no. 11, p. 115427, 2010. doi.org/10.1103/PhysRevB.82.115427

[10] S. Klein, Z. Aksamija, and M. F. B., " Electrothermal properties of 2D materials in device applications,J. of Compt. Electr., Vol. 22 5 PP. 1310 – 1318,doi.org/10.1007/s10825-023-02091-z.

[11] Z. Guo, D. Zhang, and X. G. Gong, "Thermal conductivity of graphene nanoribbons," Applied Physics Letters, vol. 95, no. 16, p. 163103, 2009. doi.org/10.1063/1.3246155.

[1] X. Wei B. Fragneaud. C.A.Marianetti, and Nonlinear elastic behavior of graphene AB initio calculations to continuum description.Phys. Rev. B 80, 205407 Published 10 November, 2009.doi: 10.1103/PhysRevB.80.205407

[13] J. Hone, M. C. Llaguno, M. J. Biercuk, A. T. Johnson, Z. Batlogg, B. H. Zettl, and J. E. Fischer, "Thermal properties of carbon nanotubes and nanotube-based materials," Applied Physics A, vol. 74, no. 3, pp. 339–343, 2002. doi.org/10.1063/1.1469696

[14] P. Keblinski, J. M. Holt, D. R. Kuhlmann, and D. G. Cahill, "Mechanisms of heat flow in suspensions of nano-sized particles (nanofluids)," International Journal of Heat and Mass Transfer, vol. 45, no. 4, pp. 855-863.2002. https://doi.org/10.1016/S0017-9310(01)00175-2

[15] A. A. Balandin, S. Ghosh, W. Bao, I. Calizo, D. Teweldebrhan, F. Miao, and C. N. Lau, "Superior thermal conductivity of single-layer graphene," Nano Letters, vol. 8, no. 3, pp. 902–907, 2008. https://doi.org/10.48550/arXiv.0802.1367

[16] Y. Huang, J. Wu, and K. C. Hwang, "Thickness of graphene and single-wall carbon nanotubes," Phys. Rev.B Vol.74, PP.245413, 2006. doi.org/10.1103/PhysRevB.74.245413

[17] X. Xu, L. Wang, Q. Zhang, Q. Zhao, J. Jia, X. Zhai, and K. Chang, "High thermal conductivity of suspended exfoliated graphene," Nature Materials, vol. 13, no. 12, pp. 1117–1121, 2014.

[18] D. P. Kingma and J. L. Ba, "Adam: A method for stochastic optimization," in Proceedings of the 3rd International Conference on Learning Representations, 2015. https://doi.org/10.48550/arXiv.1412.6980

پاورقی‌ها:

[1] Molecular Dynamics

[2] Adaptive Intermolecular Reactive Empirical Bond Order(ARIBO)

[3] Graph Neural Networks

[۴] Gradient-weighted Class Activation Mapping - Grad-CAM

[5] LAMMPS, Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator

[6] Message Passing Neural Network

[7] Green-Kubo

[8] Heat Flux Autocorrelation Function

[9] Nosé-Hoover

[10] defect scattering