研究论文

DOI：10.11949/0438-1157.20251295

基于图神经网络的MXenes性能预测

周敏霞，满奕

（华南理工大学先进造纸与纸基材料全国重点实验室，广东 广州 510630）

摘要： MXenes作为新兴的二维材料，在能源存储、电磁屏蔽等领域前景广阔。但其种类繁多，传统方法对其性能预测的准确性和效率有限。本研究提出几何感知图神经网络架构（GEOGAT），通过混合基函数强化几何信息编码，结合多头注意力机制精准捕获原子间复杂相互作用，引入层内-层间注意力分离机制处理MXenes独特的层状结构，实现磁矩、带隙和晶格常数的高精度、高效率预测。结果表明，GEOGAT模型在三项关键性能指标上预测精度较主流图神经网络模型提升10.3%~74.4%，训练时间较主流方法缩短57.6%~77.8%，推理速度提升20.7%~71.2%，在精度-效率权衡上达到最优平衡。这一结果证明GEOGAT在二维材料性能预测领域的潜力，为MXenes材料的设计和高通量筛选提供了强有力的计算工具。

关键词： MXenes；神经网络；预测；算法；多头注意力机制

中图分类号： TQ 021.8　　**文献标志码：** A

文章编号： 0438-1157（2026）10-6212-14

Prediction of MXenes performance based on graph neural networks

ZHOU Minxia, MAN Yi

(*State Key Laboratory of Advanced Papermaking and Paper-based Materials, South China University of Technology, Guangzhou* 510630, *Guangdong, China*)

Abstract: MXenes, as emerging two-dimensional materials, show great promise in energy storage and electromagnetic shielding. However, due to their diverse types, traditional methods have limited accuracy and efficiency in predicting their performance. This study proposes a geometry-aware graph attention network (GEOGAT) that enhances geometric information encoding through hybrid basis functions combining radial basis functions (RBF) and spherical basis functions (SBF), and employs multi-head attention mechanisms to precisely capture complex atomic interactions. The model introduces a layer-intra/layer-inter attention separation mechanism to address MXenes' unique layered structure, distinguishing between strong intralayer covalent bonds and weak interlayer van der Waals forces, thereby achieving high-accuracy and high-efficiency prediction of magnetic moment, bandgap, and lattice constant. Trained on 23857 MXene structures from the aNANt database, the results demonstrate that GEOGAT achieves 10.3%—74.4% higher prediction accuracy than mainstream graph neural network (GNN) models across three key performance metrics, with mean absolute error (MAE) of 0.0884 μB for magnetic moment, 0.0097 eV for bandgap, and 0.0032 Å(1 Å=0.1 nm) for lattice constant. The model also reduces training time by 57.6%—77.8% and improves inference speed by 20.7%—71.2%, achieving an optimal balance between accuracy and efficiency. This outcome demonstrates GEOGAT's potential in predicting two-

收稿日期： 2025-11-22　　**修回日期：** 2026-01-20

通信作者： 满奕（1988—），男，博士，副研究员，manyi@scut.edu.cn

第一作者： 周敏霞（2001—），女，硕士研究生，lizhouminxia@mail.scut.edu.cn

基金项目： 国家自然科学基金项目（22478141）

引用本文： 周敏霞, 满奕. 基于图神经网络的MXenes性能预测[J]. 化工学报, 2026, 77(10): 6212-6225

Citation: ZHOU Minxia, MAN Yi. Prediction of MXenes performance based on graph neural networks[J]. CIESC Journal, 2026, 77(10): 6212-6225

dimensional material properties, providing a powerful computational tool for MXenes material design and high-throughput screening.

Keywords: MXenes; neural networks; prediction; algorithm; multi-head attention mechanism

引 言

MXene是一个新兴的二维过渡金属碳化物、氮化物和碳氮化物家族，其丰富的表面化学性质使得MXenes表现出从金属性到半导体性的宽范围可调性[1]以及丰富的磁性行为，应用涵盖自旋电子学[2]、电磁屏蔽干扰[3]、生物医学[4]等领域。但目前对其性能的准确预测仍面临巨大挑战，MXenes的性能高度依赖于其组成元素、表面官能团类型及分布、层间距等多种因素的复杂相互作用[5]。传统的实验方法虽然能够精确测定材料性能，但其合成条件苛刻、表征过程复杂，难以实现大规模、高通量的材料筛选。同时，基于第一性原理计算的计算模拟如密度泛函理论(density functional theory，DFT)[6]虽然预测准确，但计算成本高昂，对于包含数万种可能组合的MXenes材料体系，系统性的性能预测变得不现实[7]。为了克服这些局限性，近年来研究人员开始探索基于数据驱动的预测方法[8-9]。Rajan等[10]采用不同的机器学习方法对MXenes的带隙进行预测，但模型仅针对单一功能基团的MXenes，且复合特征效果有限；Roy等[11]使用机器学习方法开发了一系列预测MXenes的功函数的模型，但对于混合表面终止的MXenes无法准确预测其功函数。

近年来，深度学习[12]作为机器学习的一种算法已广泛应用于复杂材料结构和性能的分析和预测，它利用已知或模拟的二维材料的结构、电学、热力学和化学特征，智能解析这些特征之间复杂的相互关联，从而预测新型二维材料的未知特性[13]。而且深度学习模型一旦完成训练，即可实现快速预测，使其成为评估大量二维材料的理想工具。因此，深度学习的应用有效推动了MXenes等二维材料的理解、发现与合成等多方面研究。其中图神经网络(graph neural networks，GNN)[14]是发展最快的深度学习模型类别之一，它们直接对分子和材料的图或结构表示进行操作，在处理图结构数据方面具有天然的优势，能够精确捕捉和学习材料中原子间的复杂相互作用和拓扑关系[15]，为材料性能预测提供了新的解决方案。

自2018年以来，研究人员提出了各种GNN来提高分子及晶体材料的预测性能，例如SchNet[16]、CGCNN[17]、MEGNet[18]、iCGCNN[19]、OGCNN[20]、GATGNN[21]、GEO-CGNN[22]等，这些现有的GNN模型性能总体上远优于非GNN方法，但这些模型训练过程耗费时间长，且性能趋于饱和，彼此之间没有显著的差异，且对于复杂的结构，模型的训练时间会达到1~2天。Reiser等[15]系统综述了GNN在材料科学中的应用，指出现有方法通常将角度或距离展开为高斯函数、径向函数和球谐傅里叶-贝塞尔函数，对于MXenes等层状材料，单一的几何编码策略尚不能完全捕获层内共价键和层间范德华力的差异化作用。Cheng等[22]提出的GEO-CGNN通过高斯径向基函数和平面波的组合强化几何信息编码，使其形成能预测精度较CGCNN提升了25.6%，但该方法主要针对三维晶体材料设计，未考虑二维材料独特的层状结构特征且运行成本较高；Jiang等[23]提出的SFTGNN通过球谐函数变换编码角度依赖性，将键角计算复杂度从$O(k^2)$降至$O(k)$，但其球谐函数展开主要用于周期性晶体的标量性质预测，普适性不高。这些研究表明，虽然混合基函数的引入改善了预测性能，但针对二维层状材料的专门几何编码策略仍然缺失。Li等[24]提出MSAIGNN模型，通过将晶体图分解为多个子图来考虑不同尺度的结构特征，并采用自注意力图池化机制，虽然该模型考虑了多尺度特征，但并未针对金属有机框架材料或层状材料中层内共价键与层间范德华力的物理本质差异进行专门的分离建模。Teng等[25]提出多模态金属有机框架材料吸附图神经网络，采用基于Transformer的注意力机制提取和融合分子及空间特征，该模型的注意力机制主要用于融合不同模态特征，而非区分层内和层间相互作用的物理差异。Li等[26]在研究多层石墨烯的粗粒化机器学习势时，通过区分层内信息损失和层间信息损失，成功描述了多层石墨烯的层间剪切行为，并指出，传统神经进化势在训练多层石墨烯的粗粒化势时难以准确确定层间相互作用，需要通过约束描述子组件的截止区域来减少层间信息损失。由此可见，现有的GNN模型均采用统一的消息传递机制，难以有效区分强层内共价键与弱层间范德华力的本质差异。考虑到MXenes独

特的多层结构以及金属原子面内和面外有序或无序的排列方式[27]，原子间的相互作用更加复杂，不仅需要提高预测准确率，还需要和运行成本之间达到一个平衡，因此本研究认为需要建立一个低成本快速预测的模型。

针对MXenes这类二维层状材料的特殊性质以及现有方法在预测精度与计算效率之间难以兼顾的问题，本研究提出一种几何感知的图神经网络模型，该模型通过多头注意力机制捕获材料内部的复杂相互作用，结合几何结构特征提取空间信息，并通过全局特征融合机制实现局部-全局信息的有效整合，在保持较低计算成本的同时实现对MXenes材料磁矩、带隙和晶格常数的准确预测。该方法有望为MXenes材料的高通量筛选和性能优化提供高效且精准的计算工具，在性能预测和成本控制之间达到良好平衡。

1 方 法

本研究的技术路线如图1所示。由于MXenes的性能高度依赖于其原子排列和层状结构的几何特征，模型在特征编码层通过节点、边以及全局变量的编码生成初始的特征融合表示，以充分捕获材料的结构信息；然后针对原子间相互作用的复杂性和多样性问题，深度特征提取层利用多层注意力机制来自适应地学习不同化学环境下的相互作用模式；为了准确建模MXenes独特的层状结构中层内共价键和层间范德华力的差异化作用，模型创新性地引入了层内注意力机制和层间注意力机制来分别计算不同尺度的注意力权重并生成加权节点特征；考虑到局部原子环境信息与材料整体性质之间的关联，全局池化层对提取的多尺度特征进行了有效聚合；最终回归层的多层感知机网络将这些深层特征映射为具体的性能预测值。整个框架还结合了贝叶斯优化策略来寻找最优的超参数配置，从而在保持计算效率的同时实现对MXenes性质的精准预测。

1.1 特征编码层

模型首先将MXenes晶体结构表示为图 $G=(V,E)$，其中节点 V 代表原子，边 E 代表原子间的相互作用关系。由于在晶体中，原子之间没有明确定义的化学键，因此首先需要定义原子之间的邻接关系。本模型将每个原子的邻居定义为截止半径 c 内最近的 k 个原子，在消息传递过程中，每条边和顶点的嵌入都会根据其邻域进行更新。与CGCNN类似，在本研究中，令：$k=12$，$c=8$ Å（1 Å =0.1 nm）[17]。图 G 保留了MXenes的拓扑和几何结构信息，包括晶格矢量和晶胞体积。每个节点 i 具有原始特征向量 $\boldsymbol{x}_i \in \mathbf{R}^{d_{\text{atom}}}$，每条边 (i,j) 具有特征向量 $\boldsymbol{e}_{ij} \in \mathbf{R}^{d_{\text{edge}}}$，节点

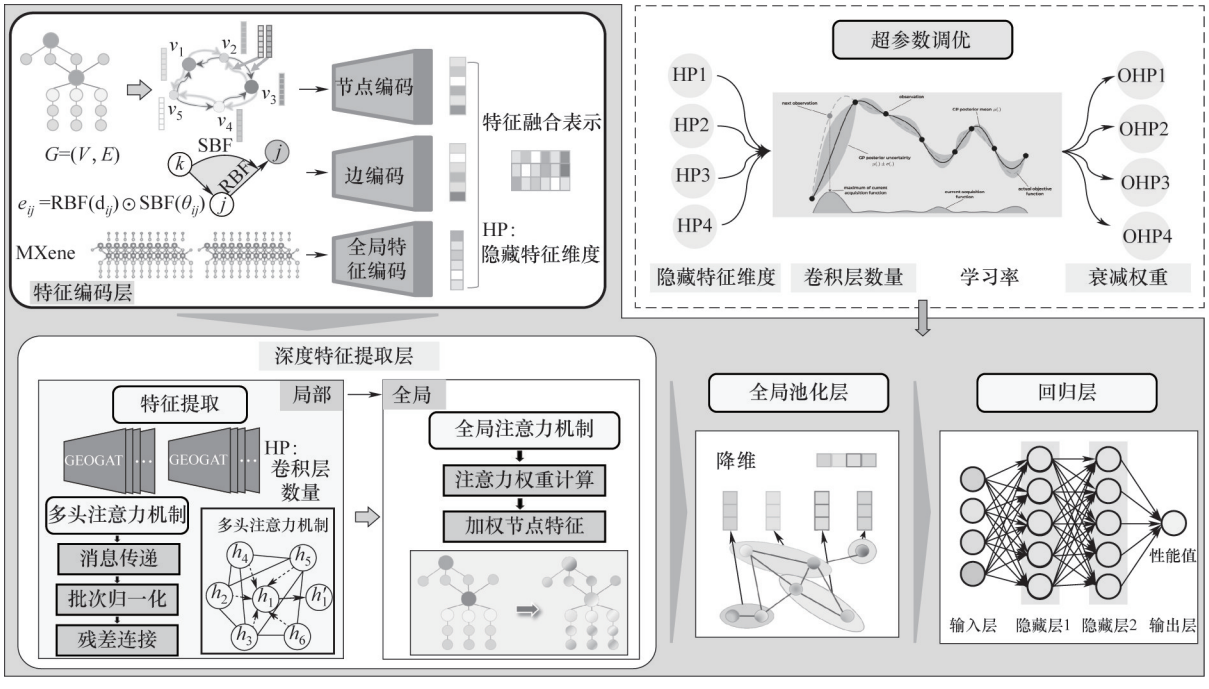


图1 GEOGAT模型架构图

Fig.1 GEOGAT model architecture diagram

特征嵌入通过多层感知机(multi-layer perceptrons, MLP)[28]将原始原子特征和化学键特征映射到隐藏表示空间,转换为统一的高维表示。

MXenes的性质很大程度上取决于原子间的几何关系,而传统的GNN模型在编码几何信息时使用单一的距离或角度,这会导致对MXenes的物理信息提取不够充分,因此在本研究中除了使用距离编码外还使用了混合基函数,即高斯径向基函数(radial basis function, RBF)[29]和球谐函数(spherical basis function, SBF)[23]的组合来更全面地捕捉空间几何结构。材料的原子间相互作用本质上是径向距离和角度方向的耦合函数,RBF函数能够更好地保持距离信息的非线性特征,捕获原子间距离的连续变化对化学键强度和相互作用的影响;在MXenes等周期性晶体中,SBF函数可以通过傅里叶变换将距离向量转换为倒易空间中的表示,从而捕捉晶体的周期性和对称性。混合基函数通过张量积同时保留两种信息,数学上对应三维空间中的完备正交基展开。

距离编码是计算原子i与原子j之间的欧氏距离[31],角度编码是针对MXenes层状结构的关键:

$$\theta_{ij}=\arccos\left(\frac{\left(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j\right)\cdot\boldsymbol{n}_{\text{layer}}}{\left\|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j\right\|\cdot\left\|\boldsymbol{n}_{\text{layer}}\right\|}\right) \tag{1}$$

边特征向量最终表示为:

$$\mathbf{e}_{ij}=\text{RBF}\left(d_{ij}\right)\odot\text{SBF}\left(\theta_{ij}\right) \tag{2}$$

为了更好地捕捉MXenes的整体性质,在模型中引入了全局特征机制,通过对所有原子特征进行聚合,获得体现MXenes全局表征的特征向量,来提升模型对晶体的宏观性质和整体结构特征的理解。在MXenes材料中,除了局部的原子特征和原子间相互作用外,材料的整体结构信息对性质预测同样重要。全局特征编码采用可学习的注意力加权平均池化策略来生成全局特征:

$$\boldsymbol{h}_{\text{global}}=\frac{\sum_{i=1}^{N}\beta_i\cdot\boldsymbol{h}_i^{(0)}}{\sum_{i=1}^{N}\beta_i} \tag{3}$$

式中,$\beta_i=\sigma(\boldsymbol{W}_{\text{global}}\cdot\boldsymbol{h}_i^{(0)}+\boldsymbol{b}_{\text{global}})$为可学习的注意力权重;$\boldsymbol{h}_i^{(0)}$为节点$i$经过MLP映射后的初始特征;$N$为原子总数。该策略相比于简单的求和或平均池化,能够自适应地为不同化学环境的原子分配权重,生成能够反映MXenes材料宏观特性的全局描述符$\boldsymbol{h}_{\text{global}}$,该特征将在后续的多头注意力机制和预测层中与局部特征进行多次融合。

1.2 多头注意力图卷积层

多头注意力图卷积层是本模型的核心模块,旨在解决传统图神经网络在处理MXenes材料时面临的局部特征提取不充分和长程依赖关系捕获困难的问题。本模块通过引入多头注意力机制,能够自适应地关注不同化学环境下的原子特征,同时利用图卷积网络的局部聚合能力,实现了局部特征提取与全局上下文建模的有机结合。通过多头并行计算,模型能够从多个子空间同时学习原子间的复杂相互作用模式,以此来提升对MXenes材料性质预测的准确性和鲁棒性。

1.2.1 多头注意力机制 模型在计算注意力权重时,首先对原子特征、边特征以及全局特征进行拼接增强,这是局部特征和全局特征的第一次融合,使得每条边在计算注意力权重时不仅考虑局部几何信息,还感知材料的整体结构特征:

$$\boldsymbol{e}_{ij}^{(\text{aug})}=\left[\boldsymbol{e}_{ij};\boldsymbol{h}_{\text{global}}\right] \tag{4}$$

然后采用多头注意力机制[32-33]来学习MXenes原子间的复杂相互作用,该机制也应用于其他图神经网络[34-35]中,每个注意力头可以专注于捕获不同类型的化学相互作用。注意力权重通过LeakyReLU激活[36]的点积注意力机制计算:

$$\alpha_{ij}^{(k)}=\frac{\exp\left[\text{LeakyReLU}\left(\frac{\boldsymbol{Q}_i^{(k)}\cdot\boldsymbol{K}_j^{(k)T}}{\sqrt{d_{\text{head}}}}+\boldsymbol{W}_{\text{att}}^{(k)}\cdot\boldsymbol{e}_{ij}^{(\text{aug})}\right)\right]}{\sum_{l\in N(i)}\exp\left[\text{LeakyReLU}\left(\frac{\boldsymbol{Q}_i^{(k)}\cdot\boldsymbol{K}_j^{(k)T}}{\sqrt{d_{\text{head}}}}+\boldsymbol{W}_{\text{att}}^{(k)}\cdot\boldsymbol{e}_{ij}^{(\text{aug})}\right)\right]} \tag{5}$$

图神经网络的核心在于节点特征的迭代更新过程。在该模型架构中,首先每个原子节点i通过多头注意力机制聚合来自其k个邻近原子的信息,形成综合的特征表示。这个聚合过程模拟了原子间的相互作用传递,每个原子的性质不仅取决于自身,还受到周围原子环境的影响,多头机制确保了不同原子类型之间的范德华力、共价键合等相互作用能够分别被捕获和处理。在这里不仅考虑了特征相似性,还考虑了几何关系,即使两个原子的特征相似,但如果它们的距离很远,注意力权重也会降低。最终输出通过多头信息的加权求和获得:

$$\text{head}_i^{(k)}=\sum_{j\in N(i)}\alpha_{ij}^{(k)}\cdot\boldsymbol{V}_j^{(k)} \tag{6}$$

为了在处理具有不同分子大小的批量数据时能减少内部协变量,还引入了批量归一化和注意力

权重归一化，以此来稳定训练过程，加速收敛。

1.2.2 *残差连接* 由于本研究的模型是深层次的图卷积网络，往往会出现梯度消失的问题，为了缓解这个问题引入了残差连接[式(7)][37]，防止深层网络中的信息丢失，模型将原始几何特征与更新后的特征相结合来确保MXenes结构中的关键几何信息在深层传播中得以保持，这也使得模型能够训练更深的网络结构。

$$\boldsymbol{h}_i^{(\mathrm{att})} = \mathrm{ELU}\left(\boldsymbol{W}_{\mathrm{concat}} \cdot \left[\mathrm{head}_i^{(1)}; \mathrm{head}_i^{(2)}; \cdots; \mathrm{head}_i^{(K)}\right] + b_{\mathrm{concat}}\right) \quad (7)$$

1.3 全局注意力层

MXenes有明显的层状结构，其层内相互作用（即共价键）与层间相互作用（即范德华力）在强度上存在较大差异，导致不同原子对MXenes结构整体性质的贡献不同，因此本文引入全局注意力机制[38]来学习材料层内和层间的相互作用。

为了更精确地建模同一层内原子间的相互作用，本研究引入层内注意力机制[39]，该机制专门用于建模同一层原子间的强相互作用，它能够捕获同层原子间的化学键合、电子云重叠等近程相互作用。该机制通过层标识符l将原子划分到不同层，对于层l内的所有原子集合$\{i|\mathrm{layer}(i) = l\}$，采用多头自注意力计算同层原子间的注意力权重：

$$\boldsymbol{h}_{\mathrm{intra}}^{(l)} = \mathrm{MultiHead}\left(\boldsymbol{Q}^{(l)}, \boldsymbol{K}^{(l)}, \boldsymbol{V}^{(l)}\right) \quad (8)$$

考虑到MXenes不同层之间存在着显著的范德华相互作用和电子耦合效应，还进一步设计了层间注意力机制[40]来建模跨层的信息传递，用于原子间的弱相互作用。为了准确捕获这种长程但较弱的跨层依赖关系，该机制采用交叉注意力策略，将当前层l的特征作为$\boldsymbol{Q}^{(l)}$，将所有其他层的聚合特征作为$\boldsymbol{K}^{(l)}$、$\boldsymbol{V}^{(l)}$：

$$\boldsymbol{h}_{\mathrm{inter}}^{(l)} = \mathrm{CrossAttention}\left(\boldsymbol{H}^{(l)}, \mathrm{Aggregate}\left(\{\boldsymbol{H}^{(k)}\}_{k=1}^{l-1}\right)\right) \quad (9)$$

在获得层内和层间注意力增强的特征后，再将其整合到全局注意力框架中。第一层将拼接后的高维特征向量映射到统一的隐藏空间，中间层通过多层非线性变换来学习局部原子特征与全局分子特征之间的复杂交互关系，每一层都在前一层的基础上抽象出更高层次的特征组合，形成用于注意力权重计算的特征表示，并输出不同原子的重要性分数，然后将所有原子注意力权重Softmax归一化[41]，最后将注意力权重与原子特征相乘，模型实现了自适应的特征重加权。

$$\boldsymbol{h}_i^{(0)} = \sigma\left(\boldsymbol{W}_{\mathrm{global}}^{(0)}\left[\boldsymbol{h}_i^{\mathrm{local}}; \boldsymbol{h}_{\mathrm{global}}\right] + \boldsymbol{b}_{\mathrm{global}}^{(0)}\right) \quad (10)$$

在全局注意力层中进行全局特征的第二次融合。对于每个原子，其经过层内和层间注意力增强后的局部特征与全局特征拼接后输入多层感知机进行特征变换。其中$\boldsymbol{h}_i^{\mathrm{local}}$表示原子$i$经过层内注意力增强的局部特征，$\boldsymbol{h}_i^{\mathrm{inter}}$表示经过层间注意力增强的跨层特征，$\boldsymbol{h}_{\mathrm{global}}$表示全局分子特征。通过Softmax归一化，最后将注意力权重与原子特征相乘，重要的原子特征被放大，而不重要的原子特征被抑制。该融合策略确保了每个原子的特征表示既包含其局部化学环境信息，又感知材料的整体结构特征，从而实现了多尺度信息的有效整合。

$$\alpha_i^{(l)} = \mathrm{Attention}\left(\boldsymbol{h}_i^{\mathrm{intra}}, \boldsymbol{h}_i^{\mathrm{inter}}, \boldsymbol{h}_{\mathrm{global}}\right) \quad (11)$$

$$\widetilde{\boldsymbol{h}}_i = \sum_{l=1}^{L} \alpha_i^{(l)} \cdot \boldsymbol{h}_i^{(l)} \quad (12)$$

1.4 全局-局部融合预测层

本模块是整个GEOGAT模型的输出模块，负责将前述各层提取和编码的多尺度特征信息转化为最终的MXenes性质预测结果。该模块实现了第三次全局-局部特征融合，通过全局池化策略将所有原子的局部特征聚合为统一的材料级表示。全局特征能够提供MXenes的整体结构信息和宏观性质倾向，而局部特征则保留了原子级的精细化学环境信息。为了从局部原子特征中提取全局材料性质，采用注意力加权的全局池化方法对所有原子经过全局注意力层增强后的特征进行聚合：

$$\boldsymbol{r} = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i^{(l)} \cdot \widetilde{\boldsymbol{h}}_i \quad (13)$$

其中$\alpha_i^{(l)}$为式(11)计算的全局注意力权重，$\widetilde{\boldsymbol{h}}_i$为式(12)得到的原子的最终表示。这种池化方法能够有效聚合所有原子的贡献，并能自适应地选择重要的原子特征，输出的拼接向量$\boldsymbol{r}$包含了查询向量和最终读取向量，生成更丰富的特征表示。最终预测部分采用多层MLP，首先将融合特征映射到中间层，对分子表示进行进一步的非线性变换和特征精炼，通过多层堆叠增强模型的非线性表达能力，再通过线性映射到最终预测值：

$$z^{(0)} = \mathrm{ELU}\left(\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{W}_{\mathrm{pred}}^{(0)} + \boldsymbol{b}_{\mathrm{pred}}^{(0)}\right) \quad (14)$$

$$z^{l} = \mathrm{ELU}\left(\boldsymbol{W}_{\mathrm{pred}}^{(l)} \cdot \boldsymbol{z}^{(l-1)} + \boldsymbol{b}_{\mathrm{pred}}^{(l)}\right) \quad (15)$$

$$y = \boldsymbol{W}_{\mathrm{out}} \cdot \boldsymbol{z}^{(z^{l}-1)} + \boldsymbol{b}_{\mathrm{out}} \quad (16)$$

1.5 数据源

为确保模型训练的数据质量，研究采用aNANt MXene数据库作为MXenes性能预测的数据来源。该数据库包含23857个MXenes结构的全面信息，是

目前世界上最大的二维材料数据库[42]。选择该数据库主要基于以下几点考虑：首先，数据库涵盖了多种金属元素组合、不同的碳/氮元素配比以及丰富的表面终端基团类型，能够充分代表MXenes材料空间的结构多样性，为模型学习复杂的结构-性质关系提供了充足的样本；其次，所有结构均通过DFT计算获得了可靠的物理化学性质标签，包括晶格参数、电子结构特征、形成能、带隙值以及磁性和拓扑性质等，这些高质量的标注数据为监督学习提供了坚实基础；此外，数据库提供的标准化POSCAR格式结构文件便于进行批量处理和特征提取。但由于POSCAR结构文件仅包含晶格向量、原子类型、原子数量和原子坐标，格式较为简洁，缺乏空间群和对称性信息；而CIF文件格式在POSCAR文件的基础上还增加了空间群信息、晶系分类以及键长键角等几何信息[43]，标准化程度更高，更适合作为图神经网络的输入。因此本研究将数据库中所有的POSCAR文件进行解析，并利用spglib库[44]进行空间群识别和对称性分析，以得到更加精确和标准化的晶体结构描述。

图2展示了3种不同性质分布对比的密度图，一共有71571个数据点（每个性能各23857组），带隙主要集中在0附近，反映了MXenes材料普遍的金属性或小带隙半导体特征；晶格常数分布相对集中，主要集中在2~4 Å，符合典型二维材料的结构特点；磁矩的分布相对较宽，范围主要集中在-2~4 μB，体现了MXenes丰富的磁性行为。其中磁矩的正负是相对的，表示自旋方向的不同。数据增强后共分为5维，分别是“ID名称”“磁矩”“带隙”“晶格常数”以及对应的CIF结构文件，其中磁矩、带隙和晶格常数作为每个样本的性能标签。以8∶1∶1的比例将数据集划分为训练集、验证集、测试集，确保了模型评估的科学性和可靠性。

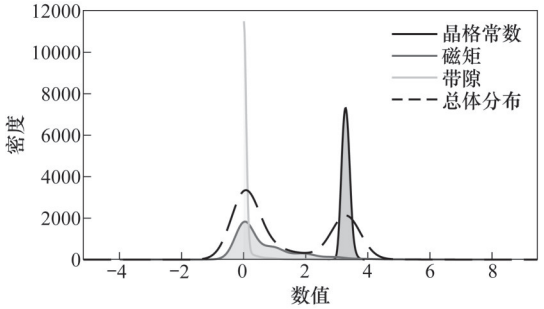


图2 MXenes不同性能数值分布

Fig.2 Numerical distribution of different performance values of MXenes

2 结果与讨论

本研究基于上述GEOGAT模型架构，采用aNANt数据库中23857个MXenes结构进行了全面的预训练和性能评估。研究系统地评估了模型在磁矩、带隙和晶格常数3个物理性质预测方面的性能表现，并通过与CGCNN、OGCNN、GEO-CGNN、ALIGNN的对比验证了所提方法的有效性和优越性。为确保模型性能的充分发挥，首先通过贝叶斯优化策略[45]对关键超参数进行了精细调优，随后分析了训练过程中的收敛特性和稳定性，最终通过详细的预测精度分析和误差分布研究，深入探讨了不同物理性质预测难度的差异及其潜在机制。

2.1 超参数调优

在建模过程中，对模型的卷积层数量、学习率、衰减权重、隐藏特征维度4种超参数进行了贝叶斯优化。如图3(a)所示，学习率是影响模型性能最敏感的因素，过大的学习率会导致训练不稳定；适当的正则化有利于模型的泛化，衰减权重在0~1×10^{-3}时保持相对稳定的低MAE值；图卷积层的数量对模型性能无显著影响，但当数量增加时，模型的运行时间会不断增加；隐藏特征维度小于128时，模型的效果较差，在128~512区间，模型的效果逐渐变好。图3(b)则展示了4个关键超参数之间的交互效应，模型性能主要集中在0.085~0.180 μB的MAE范围内，最优性能区域主要出现在隐藏特征数为256~300且GCN层数为17~21层，学习率在1×10^{-3}~5×10^{-4}内配合0~0.0005的权重衰减值时。如图3(c)所示，贝叶斯优化经过50次迭代后在第18次达到最优MAE（0.0884 μB），在后续的迭代过程中MAE没有继续降低，因此本研究认为模型在学习率为1×10^{-3}、衰减权重为0、卷积层数量为20、隐藏特征维度为300时达到最优效果。此外，考虑到模型对超参数的学习率很敏感，本研究实施了一种基本方法，在后面的50个epoch中将学习率降低到1×10^{-4}，以实现更紧密的收敛。

2.2 模型训练过程分析

基于优化后的超参数配置，本研究对GEOGAT模型进行了系统的训练。如图4所示，3种不同物理性质的预测任务均展现出良好的收敛特性和稳定性。模型在前5~20个epoch内经历快速学习阶段，

训练集和验证集的MAE显著下降；晶格常数预测中验证集MAE从0.028 Å降至0.006 Å，带隙预测中训练和验证曲线基本重合且MAE降至0.012 eV，磁矩预测中MAE从初始的0.59 μB迅速下降至0.2 μB以下；在10~50个epoch时，所有任务的收敛曲线均呈现平滑下降趋势，未出现剧烈振荡，显示了良好的训练稳定性；50个epoch后，3个预测任务均达到稳定收敛状态，晶格常数预测的训练集和验证集MAE分别稳定在0.002 Å和0.003 Å附近，带隙预测MAE稳定在0.009 eV左右，磁矩预测MAE稳定在0.07~0.09 μB水平，训练和验证曲线几乎重合，表明模型具有良好的泛化能力。

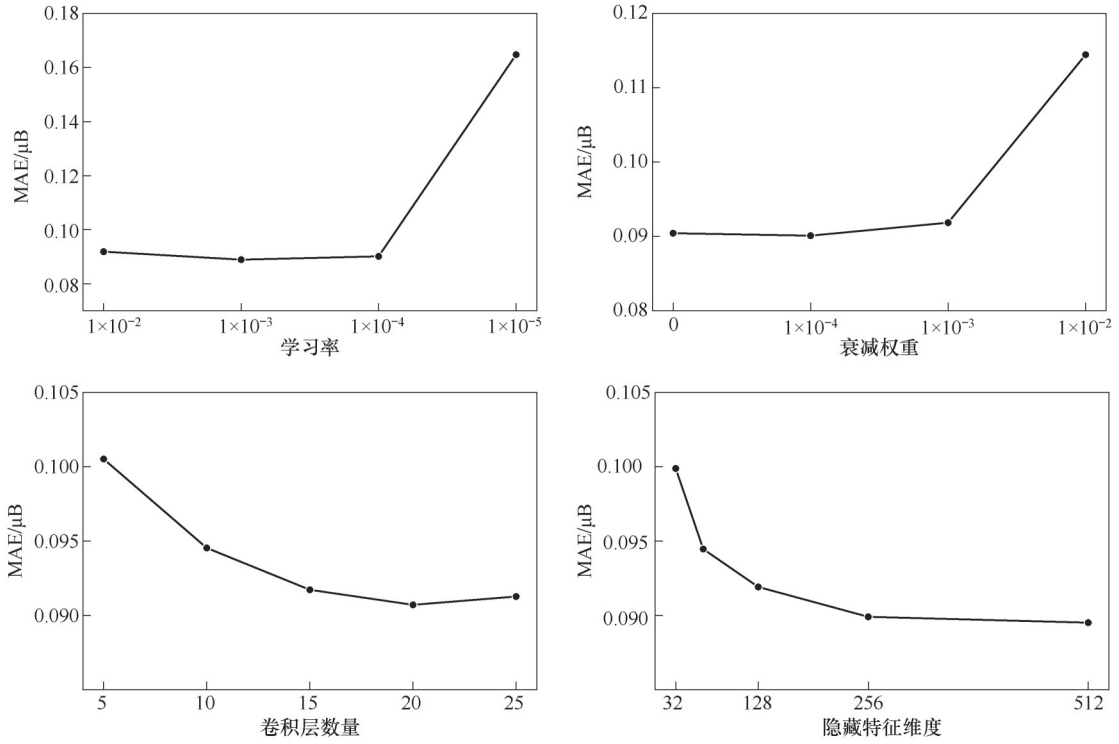
2.3 模型预测性能分析

模型训练完成后，对测试集结构进行了性能预测，结果如图5所示。由图可以看出，模型在晶格常数预测上表现最为优异，MAE仅为0.0032 Å，R^2达到0.9986，散点几乎沿着理想预测线分布。这是因为晶格常数本质上反映了原子间的平衡距离，与原子半径、化学键性质等基本物理参数密切相关。带隙的预测也表现得很好，MAE仅为0.0097 eV，R^2高达0.9748，这可能源于带隙与晶体结构之间相对明确的物理关联，原子排列、键长键角等几何因素对电子能带结构有着较为直接的影响，使得GEOGAT能够有效捕捉这种关系。相比之下，磁矩预测的MAE为0.0884 μB，R^2为0.9473，预测准确度不如前两个性质，散点图显示在较大磁矩值区域存在更明显的预测偏差，这也反映了磁性的复杂本质：磁矩不仅依赖于原子的自旋状态和轨道磁矩，还受到电子关联效应、温度、磁场等多种因素影响，其中许多微观机制难以仅从静态晶体结构中完全推断。这种性能差异表明基于结构的机器学习模型在预测与几何结构直接相关的性质时更加可靠，而对于涉及复杂电子关联和量子多体效应的性质则需要引入更多的物理先验知识或更精细的特征工程来进一步提升预测精度。

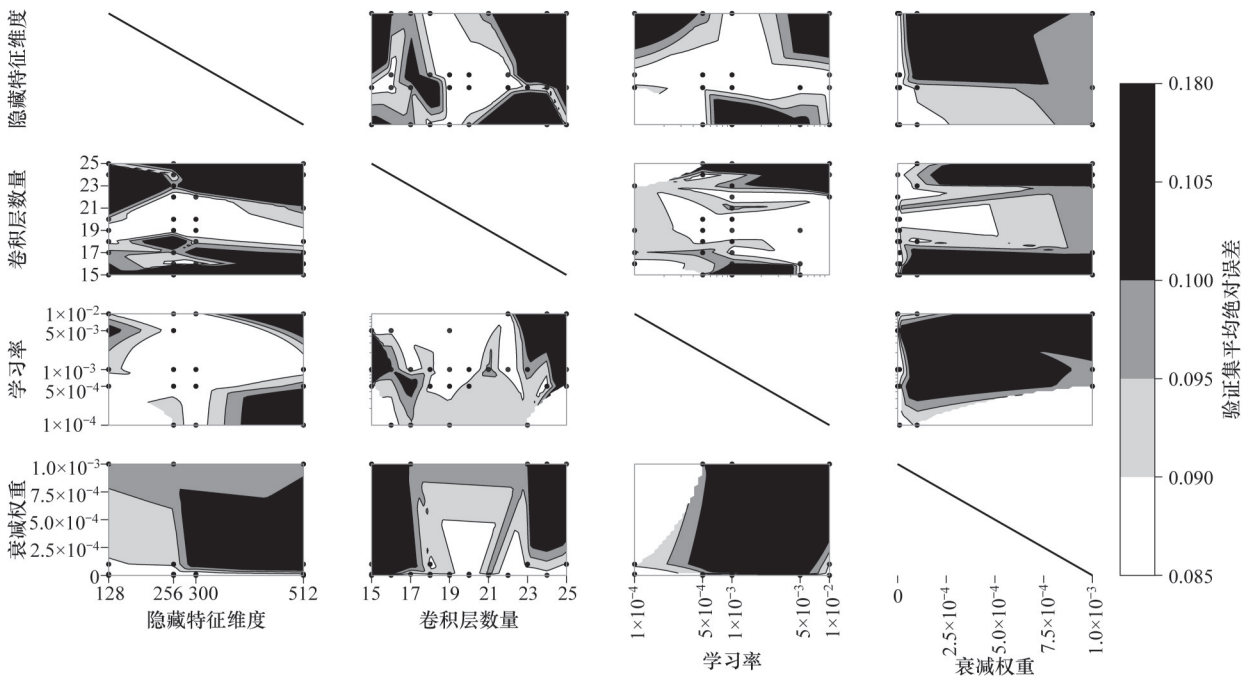
为了进一步验证模型的预测可靠性，表1展示了部分MXenes磁矩预测值和DFT计算值的详细对比。从结果可以看出，大部分材料的预测误差控制在0.1%以下，这些极低的误差值充分说明了模型的高精度预测能力。即使对于一些预测难度较大的样本，相对误差仍然控制在0.5%以内，展现出了良好的预测稳定性。这些结果充分证明了GEOGAT模型的可靠性和实用价值。

2.4 不同几何编码方式对模型性能的影响分析

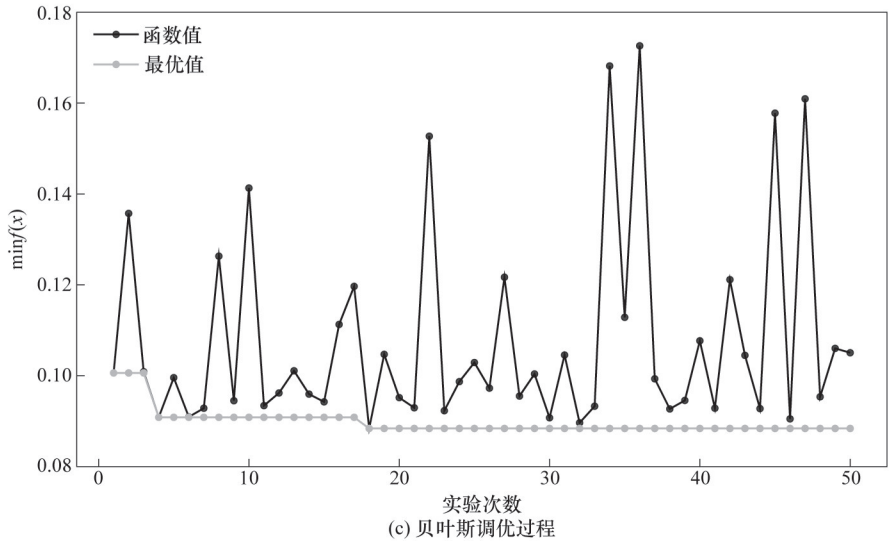
为系统评估几何信息编码方式对模型性能的影响，本研究还设计了消融实验，对比分析了4种不



(a) 超参数定义空间的确定



(b) 4个关键超参数之间的交互效应对模型MAE的影响



(c) 贝叶斯调优过程

图3 超参数调优过程

Fig.3 Hyperparameter tuning process

同的几何编码方案。考虑到MXenes材料中原子间相互作用同时依赖于径向距离和角度方向,本研究分别测试了仅使用欧氏距离编码(配置A)、仅使用高斯径向基函数RBF(配置B)、仅使用球谐函数SBF(配置C),以及本研究提出的RBF+SBF混合编码方案(配置D)。所有配置均在相同的训练条件下进行评估,包括相同的数据集划分以及优化器设置,以确保对比的公平性。表2展示了不同几何编码方案在3个预测任务上的性能表现。

从表2可以看出,混合基函数编码方案在3个预测任务上均显著优于单一编码方案,验证了本研究提出的几何信息编码策略的有效性。相比仅使用欧氏距离的配置A,RBF+SBF组合使磁矩、带隙和晶格常数的MAE分别降低了46.0%、65.1%和65.2%。这一显著改进充分证明了角度信息对于准确捕获MXenes层状结构中原子间相互作用的重要性。进一步对比配置B和配置C的结果发现,仅使用RBF的性能优于仅使用SBF的性能,这表明在MXenes的结构–性质关系建模中,径向距离信息在化学键强度描述中起主导作用,而角度信息则提供了关键的方向性补充。这些结果表明,针对MXenes二维层状材料的特殊结构特征,设计专门的几何信

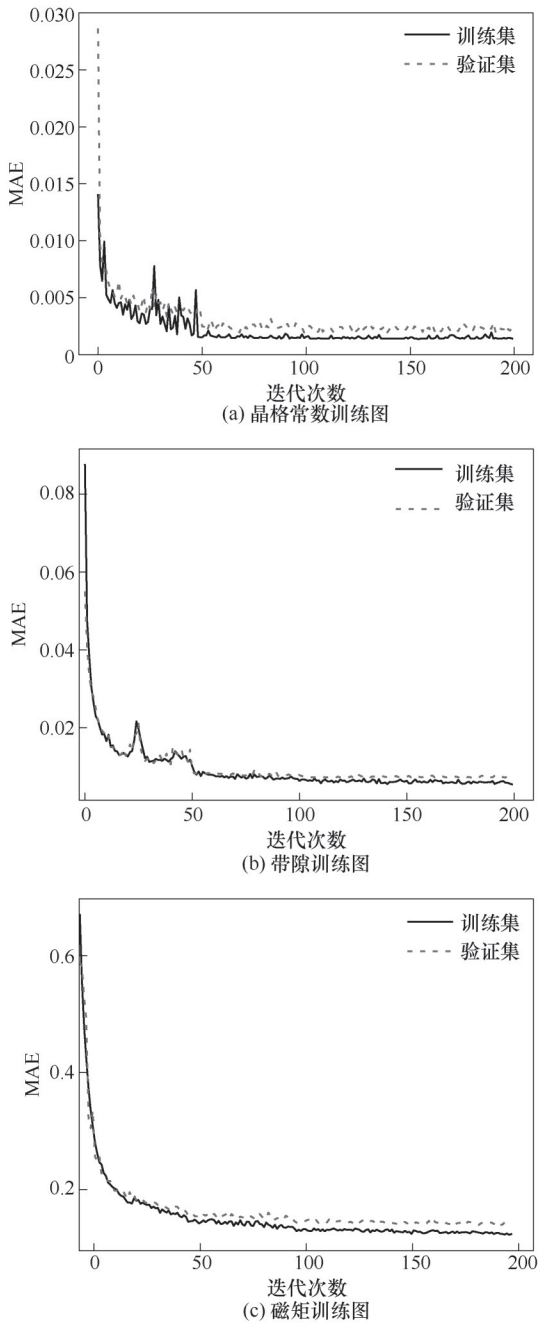


图4 模型训练图

Fig.4 Model training diagram

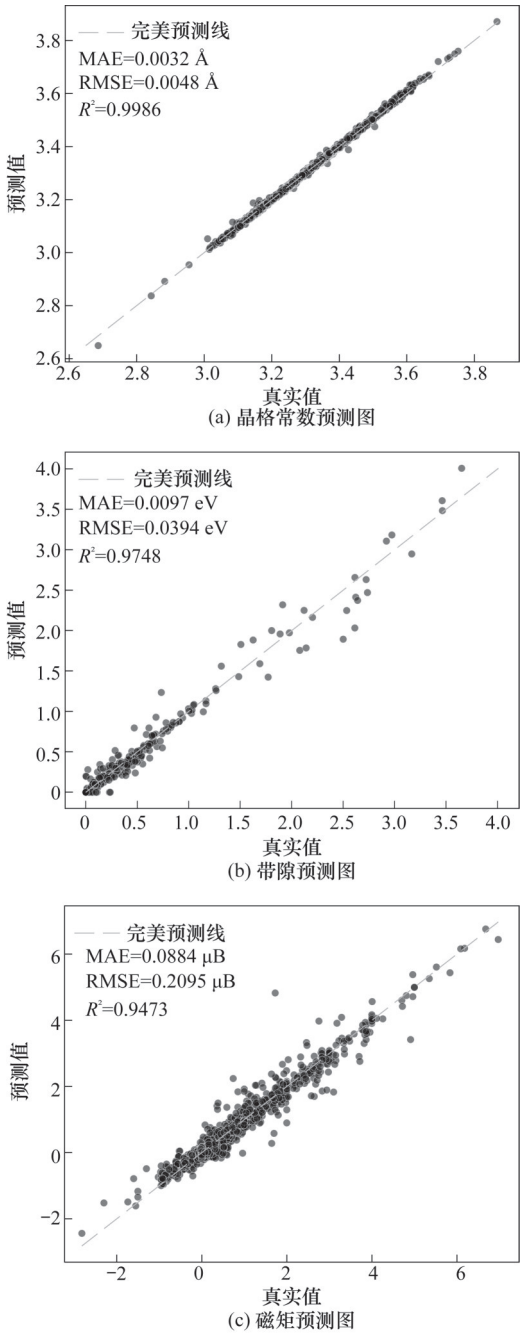


图5 MXenes三种性能预测

Fig.5 Three performance predictions of MXenes

息编码策略对于提升预测精度具有重要意义。

2.5 数据集规模对模型性能的影响分析

深度学习架构的成功很大程度上取决于训练数据的数量和质量，为了系统评估数据集规模对GEOGAT模型性能的影响，本研究设计了对比实验，分别使用不同规模的数据子集进行模型训练和评估。如图6所示，随着训练数据量的增加，模型在3个预测任务上的性能均呈现出持续改善的趋势。当训练样本数量从5000个增加到23857个全量数据集时，模型的整体预测精度显著提升，平均MAE降低幅度达到25%~40%。这种显著改进主要归因于更大规模的数据集能够涵盖更多样化的MXenes结构变体，包括不同金属原子组合、表面终端基团配置以及层间相互作用等复杂情况，从而提高泛化能力，使得模型能够学习到更全面和准确的结构和性质关系。从计算效率角度考虑，虽然更大的数据集能够带来更好的预测性能，但也伴随着训练时间和计算资源需求的显著增加。实验表明，使用全量

表1 不同MXenes磁矩的预测误差

Table 1 Prediction errors of different MXenes magnetic moments

材料ID	目标值/μB	预测值/μB	误差/%
relax_POSCAR_Hf-Hf-N-NO-F	0.9448	0.9449	0.011
relax_POSCAR_Cr-Cr-N-Br-Br	2.8337	2.8331	0.021
relax_POSCAR_Cr-Y-C-NO-NCO	2.8821	2.8836	0.052
relax_POSCAR_Cr-Cr-N-SCN-O	6.2141	6.2194	0.085
relax_POSCAR_Sc-Y-C-NO-SCN	1.9309	1.9285	0.124
relax_POSCAR_Zr-Ti-N-OCl-Br	−0.9394	−0.9396	0.021
relax_POSCAR_Hf-Y-N-OCl-F	−0.8467	−0.8469	0.024
relax_POSCAR_Mo-Nb-C-Cl-H	−0.2016	−0.2017	0.050
relax_POSCAR_Ti-V-C-OCl-Cl	−0.1663	−0.1664	0.060
relax_POSCAR_Sc-Mo-N-PO-H	−0.1093	−0.1092	0.091

表2 不同几何编码方案预测效果对比

Table 2 Comparison of prediction performance of different geometric encoding schemes

配置	编码方式	参数量	磁矩MAE/μB	带隙MAE/eV	晶格常数MAE/Å
A	仅欧氏距离	494×10^3	0.1638	0.0278	0.0092
B	仅RBF	528×10^3	0.1127	0.0136	0.0073
C	仅SBF	514×10^3	0.1432	0.0204	0.0088
D	RBF+SBF	561×10^3	0.0884	0.0097	0.0032
改善幅度(D *vs*. A)			46.0%	65.1%	65.2%
改善幅度(D *vs*. B)			21.6%	28.7%	56.2%
改善幅度(D *vs*. C)			38.3%	52.5%	63.6%

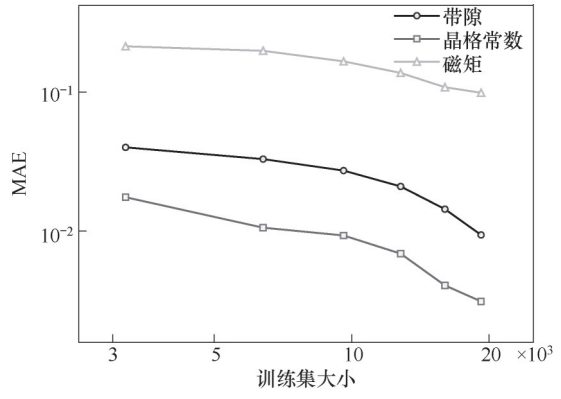


图6 数据集大小对模型性能的影响

Fig.6 Impact of dataset size on model performance

数据集的训练时间约为使用部分数据时的2~3倍，但性能提升幅度为15%~25%，这种权衡关系为实际应用中的数据集规模选择提供了重要参考。

2.6 模型对比分析

为了公平客观地评估GEOGAT模型的性能优势，本研究选择了4个具有代表性的图神经网络模型进行对比：CGCNN、OGCNN、GEO-CGNN、ALIGNN。所有模型均在相同的数据集上进行训练，并采用相同的数据预处理方法、评估指标以及硬件配置，以确保实验的客观性和公平性。如表3所示，GEOGAT模型在3个预测任务上均实现了最优性能。磁矩预测任务中，GEOGAT模型达到了0.0884 μB的精度，相比CGCNN、OGCNN、GEO-CGNN和ALIGNN分别提升了60.7%、45.7%、21.9%和10.3%；在带隙预测任务中，GEOGAT模型实现了0.0097 eV的误差，较CGCNN、OGCNN、GEO-CGNN和ALIGNN分别降低了74.4%、56.3%、36.2%和28.1%；晶格常数预测结果同样表明GEOGAT模型的优越性，其预测误差仅为0.0032 Å，相比其他4种模型分别降低了70.1%、54.3%、44.8%和47.5%。

表3 不同模型预测效果对比

Table 3 Comparison of prediction effects of different models

性能	CGCNN	OGCNN	GEO-CGNN	ALIGNN	GEOGAT
磁矩/μB	0.2247	0.1629	0.1132	0.0986	0.0884
带隙/eV	0.0379	0.0222	0.0152	0.0135	0.0097
晶格常数/Å	0.0107	0.0070	0.0058	0.0061	0.0032

这些性能的提升源于GEOGAT在特征提取能力上的两个核心优势：首先，MXenes中的M—X键具有共价-金属混合键特性，键长通常在2.0~2.2 Å，键角接近90°或120°。CGCNN仅使用欧氏距离作为边特征，无法有效区分相同距离但不同角度的原子对，而GEOGAT通过引入SBF编码角度信息[式(1)~式(2)]，能够区分层内不同方向的化学键。ALIGNN虽引入键角信息，但其线图构建未针对层状材料进行优化。实验显示，对于Ti-V-C等多金属体系，GEOGAT带隙预测误差较CGCNN和ALIGNN分别降低42.3%和28.1%。其次，针对表面官能团的电子调控效应导致的带隙差异，例如$Zr_3N_2O_2F_2$的带隙为0.899 eV，$Zr_3N_2O_2$的带隙为0.401 eV；此外，针对层间范德华相互作用，传统GNN难以建模跨层电子耦合，GEO-CGNN虽强化了几何编码，但其消息传递仍局限于局部邻域[22]，而GEOGAT的层内-层间注意力分离机制能够捕获MXenes体系中不同原子间电子转移引起的磁矩变化。以$Ti_3C_2O_2$为例，该材料的层内Ti—C键长为2.16 Å，层间距为6.95 Å，传统GNN对跨层原子对采用相同的消息传递机制，导致模型难以区分强弱相互作用的差异。实验表明，使用统一注意力机制的GEO-CGNN对该材料的磁矩预测误差为0.186 μB，而GEOGAT通过层内-层间

分离机制将误差降低至0.071 μB，性能提升了61.8%。进一步分析发现，GEOGAT学习到的层内注意力权重平均值为0.52，而层间注意力权重平均值为0.13，这种权重差异准确反映了MXenes中强层内键合与弱层间耦合的物理本质，从而实现了对复杂层状结构的精准建模。

除此之外，图7更直观地展示了5种模型在磁矩预测任务上的误差分布对比。从误差分布图可以观察到，GEOGAT模型的误差分布呈现出最为集中的特征，其误差峰值最为尖锐且分布范围最窄，表明该模型具有最高的预测准确性和最小的预测方差。具体而言，GEOGAT模型约85%的预测误差集中在±0.05 μB范围内，而CGCNN、OGCNN、GEO-CGNN、ALIGNN模型的相应比例分别仅为45%、58%、72%和78%。这些结果表明，GEOGAT模型通过引入几何注意力机制，能够更好地捕获材料结构中的空间几何信息，从而在材料性质预测任务中实现了更高的精度和更强的泛化能力。

除了预测精度的提升外，模型的计算效率同样是评估其实用价值的重要指标。为了全面评估GEOGAT模型的实用性，本研究进一步对比了不同模型在相同硬件平台（NVIDIA RTX3090）和训练配置下的计算效率，包括模型参数量、收敛所需的迭代轮数、总训练时间、单轮训练速度以及单个样本推理速度等关键指标。表4总结了5种模型在计算效率方面的详细对比结果。

表4的结果表明，GEOGAT模型在保持高预测精度的同时，展现出优异的计算效率，在精度和效率的权衡方面达到了最优平衡。从训练效率来看，GEOGAT的参数量处于中等水平，但GEOGAT模型仅需100个epoch即可达到收敛，其训练时间仅为70 min，较计算密集型的GEO-CGNN和ALIGNN缩短了76.7%和77.8%。这种快速收敛特性表明本研究提出的混合基函数编码和多头注意力机制能够更高效地学习材料的结构和性质关系，加速了模型的训练过程。在推理阶段，GEOGAT处理单个样本仅需0.0823 s，较GEO-CGNN和ALIGNN分别提升了71.2%和70.1%，这对于需要快速评估大量候选材料的高通量筛选应用场景具有实际意义。综合考虑预测精度和计算效率，GEOGAT模型不仅在磁矩、带隙和晶格常数预测上实现了25.8%~70.1%的性能提升，还将训练时间缩短至主流方法的22%~43%，这种兼顾准确性与计算经济性的特点使得GEOGAT为材料的快速筛选和优化提供了可行的解决方案。

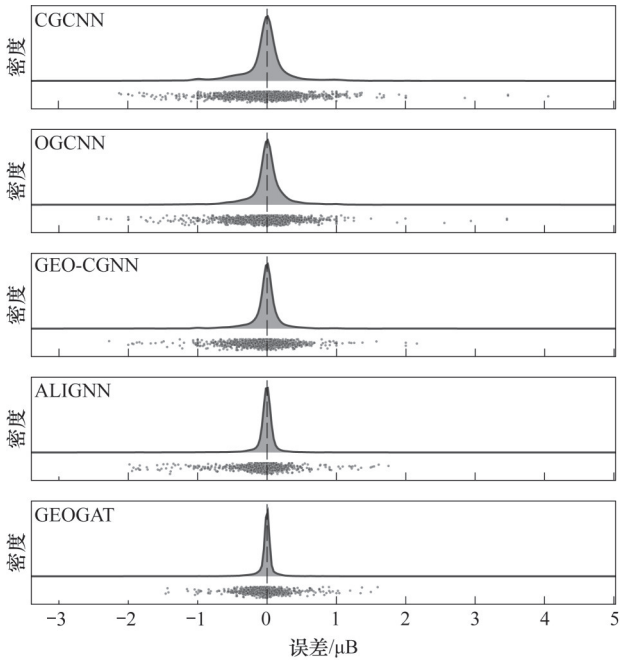


图7 不同模型预测MXenes磁矩误差分布

Fig.7 Distribution of MXenes magnetic moment prediction error of different models

3 结 论

随着二维材料在能源、电子器件等领域应用需求的快速增长，高效、准确的材料性能预测方法成为推动材料科学发展的关键技术。MXenes作为具有优异可调性能的新兴二维材料，其复杂的结构-

表4 不同模型计算效率对比

Table 4 Comparison of computational efficiency of different models

模型	参数量	迭代收敛/epoch	训练时间/min	训练速度/(min/epoch)	推理速度/(s/样本)
CGCNN	491×10^3	150	165	1.1	0.1038
OGCNN	672×10^3	200	240	1.2	0.1374
GEO-CGNN	903×10^3	200	300	1.5	0.2862
ALIGNN	785×10^3	350	315	0.9	0.2751
GEOGAT	561×10^3	100	70	0.7	0.0823

性质关系和庞大的材料空间使传统预测方法面临巨大挑战。针对这一瓶颈问题，本研究开发了一个几何感知的图神经网络模型GEOGAT，专门针对MXenes这类二维材料的磁矩、带隙、晶格常数等关键性能进行准确预测。

GEOGAT模型的核心创新在于3个方面：在几何信息编码方面，模型突破了传统图神经网络仅使用单一距离或角度特征的局限性，创新性地采用混合基函数来全面捕获MXenes层状结构中的空间几何信息和周期性特征；针对MXenes独特的层状结构特征，模型引入了层内-层间注意力分离机制，成功建模了层内共价键相互作用与层间范德华力的差异化作用模式；通过多头注意力机制结合全局-局部融合预测策略，模型在消息传递过程中既能精确捕获近邻原子间的复杂相互作用，又能有效建模长距离的依赖关系，实现了局部化学环境与全局结构信息的有机融合。

通过系统的实验验证和对比分析，得出以下主要结论。

（1）GEOGAT在23857个MXenes结构数据集上的预测精度显著优于现有方法，磁矩、带隙和晶格常数的MAE分别达到0.0884 μB、0.0097 eV和0.0032 Å，较主流图神经网络模型提升10.3%~74.4%，证明了模型设计的有效性。且模型计算效率突出，100个epoch即可收敛，训练时间仅需70 min，较主流方法缩短57.6%~77.8%；推理速度达0.0823 s/样本，提升20.7%~71.2%，为高通量材料筛选提供了实用工具。

（2）消融实验证明，混合基函数编码较单一编码方案使预测精度提升21.6%~65.2%，验证了同时捕捉径向距离和角度方向信息的必要性。针对MXenes层状结构的特殊性，层内-层间注意力分离机制成功区分了强层内共价键与弱层间范德华力的差异化作用模式，准确反映了MXenes的物理本质。这些结果表明，针对特定材料体系设计专门的几何信息表征策略和注意力机制对于提升预测精度至关重要，为其他二维层状材料的建模提供了新思路。

（3）不同物理性质的预测难度分析表明，与几何结构直接相关的性质如带隙和晶格常数预测精度更高，反映了图神经网络在捕捉原子排列、键长键角等结构特征方面的优势；而涉及复杂电子关联效应的性质如磁矩预测相对困难但仍达到实用水平，这表明即使对于涉及复杂电子关联效应的性质，基于结构的机器学习方法仍具有重要价值。数据集规模分析也为实际应用中的数据集规模选择和计算资源配置提供了重要参考。

尽管GEOGAT在MXenes性能预测方面取得了显著成效，但本研究仍存在以下局限性：模型性能高度依赖于训练数据的质量与覆盖范围，而GEOGAT的训练数据均来源于aNANt数据库，对于数据库中尚未涵盖的新型MXenes组合，模型的泛化能力有待进一步验证；当前模型主要针对磁矩、带隙和晶格常数3项静态性质进行预测，而MXenes在实际应用中更为关键的动态性质以及表面化学反应活性尚未被纳入预测框架，这在一定程度上限制了模型在高通量材料设计中的应用广度；GEOGAT专为MXenes的层状结构设计，其层内-层间注意力分离机制及几何编码策略主要针对该类材料的特征，直接迁移至其他类型二维材料或三维块体材料时，可能需要对模型架构进行适应性调整。

符 号 说 明

$\boldsymbol{b}$——偏置向量
c——截止半径，Å
d——特征维度
d_{ij}——原子i与原子j之间的欧氏距离
E——图的边集合
$\boldsymbol{e}_{ij}$——原子i与原子j之间的边特征向量
G——图结构
$\boldsymbol{H}^{(l)}$——第l层的节点特征矩阵
$\boldsymbol{h}_{\text{global}}$——全局特征向量
$\boldsymbol{h}_i$——节点i的隐藏特征向量
$\boldsymbol{h}_{\text{inter}}^{(l)}$——第$l$层的层间注意力特征向量
$\boldsymbol{h}_{\text{intra}}^{(l)}$——第$l$层的层内注意力特征向量
$\boldsymbol{K}^{(k)}$——第k个注意力头的键矩阵
k——注意力头索引
L——网络层数
l——层标识符
N——原子总数
$\boldsymbol{n}_{\text{layer}}$——层法向量
$\boldsymbol{Q}^{(k)}$——第k个注意力头的查询矩阵
r——全局池化后的材料级特征向量
$\boldsymbol{V}^{(k)}$——第k个注意力头的值矩阵
$\boldsymbol{W}$——权重矩阵
$\boldsymbol{x}_i$——节点i的原始特征向量
y——预测输出值

$z^{(l)}$——第l层MLP的中间特征向量

$\alpha_{ij}^{(k)}$——第k个注意力头中原子i对原子j的注意力权重

$\alpha_i^{(l)}$——全局注意力层中原子i的注意力权重

β_i——全局特征编码中原子i的可学习注意力权重

θ_{ij}——原子i与原子j之间的角度

σ——Sigmoid激活函数

下角标

att——多头注意力拼接输出

aug——增强后的边特征

concat——多头拼接操作对应参数

global——全局特征对应参数

head——注意力头特征维度

inter——层间

intra——层内

local——局部

out——输出层对应参数

pred——预测层对应参数

参考文献

[1] 居涛, 李国辉, 耿凤霞. 一步法合成二维Ti_3C_2及其电化学性能研究[J]. 化工学报, 2022, **73**(2): 951-959.
Ju T, Li G H, Geng F X. One-step synthesis of two-dimensional Ti_3C_2 and its electrochemical performance[J]. CIESC Journal, 2022, **73**(2): 951-959.

[2] Li X Z, Ma Y Y, Li X R, et al. Dendritic-honeycomb porous polyoxometalate/MXene films for supercapacitor applications[J]. Chemical Engineering Journal, 2025, **524**: 169061.

[3] Si Z K, Yan Y Z, Liu X, et al. Flexible and multifunctional microcrystalline cellulose/$Ti_3C_2T_x$ MXene-POSS composite films for electromagnetic interference shielding in extreme environments [J]. Chemical Engineering Journal, 2025, **525**: 169897.

[4] Zeng Q, Liu Y C, Hu Y W, et al. Injectable MXene@zinc phthalocyanine heterojunction engineered hydrogel with self-regulating ROS for single 808 nm-activated photodynamic/photothermal synergistic therapy in scar-reduced wound healing [J]. Chemical Engineering Journal, 2025, **524**: 169002.

[5] Anasori B, Gogotsi Y. MXenes: trends, growth, and future directions[J]. Graphene and 2D Materials, 2022, **7**: 75-79.

[6] Xu H, Lv W H, Yang S J, et al. Enhancing HER catalyst screening of modified MXenes through DFT and machine learning integration[J]. AIChE Journal, 2025, **71**(2): e18618.

[7] Ryu B, Wang L Q, Pu H H, et al. Understanding, discovery, and synthesis of 2D materials enabled by machine learning[J]. Chemical Society Reviews, 2022, **51**(6): 1899-1925.

[8] 陈新宇, 宋志龙, 陆帅华, 等. AI驱动的材料设计: 从小数据到大数据的范式转变[J]. 中国科学: 化学, 2025, **55**(6): 1648-1659.
Chen X Y, Song Z L, Lu S H, et al. AI-driven materials design: paradigm shift from small data to big data[J]. Scientia Sinica (Chimica), 2025, **55**(6): 1648-1659.

[9] 钱润彤, 杨世悦, 宋子林, 等. 人工智能加速分子动力学模拟[J]. 中国科学: 化学, 2025, **55**(6): 1688-1703.
Qian R T, Yang S Y, Song Z L, et al. Accelerating molecular dynamics simulations with artificial intelligence[J]. Scientia Sinica (Chimica), 2025, **55**(6): 1688-1703.

[10] Rajan A C, Mishra A, Satsangi S, et al. Machine-learning-assisted accurate band gap predictions of functionalized MXene [J]. Chemistry of Materials, 2018, **30**(12): 4031-4038.

[11] Roy P, Rekhi L, Koh S W, et al. Predicting the work function of 2D MXenes using machine-learning methods[J]. Journal of Physics: Energy, 2023, **5**(3): 034005.

[12] 姚少伦, 宋杰, 冯尊磊, 等. 基于深度学习的3D分子生成模型研究进展[J]. 中国科学: 化学, 2023, **53**(2): 174-195.
Yao S L, Song J, Feng Z L, et al. Advances in deep learning-based 3D molecular generative models[J]. Scientia Sinica (Chimica), 2023, **53**(2): 174-195.

[13] He H, Wang Y H, Qi Y J, et al. From prediction to design: recent advances in machine learning for the study of 2D materials[J]. Nano Energy, 2023, **118**: 108965.

[14] 洪小东, 董轩, 林美金, 等. 图神经网络预测烃类工质的热力学性质[J]. 化工学报, 2023, **74**(11): 4466-4474.
Hong X D, Dong X, Lin M J, et al. Prediction of thermodynamic properties of hydrocarbon working fluids by graph neural network models[J]. CIESC Journal, 2023, **74**(11): 4466-4474.

[15] Reiser P, Neubert M, Eberhard A, et al. Graph neural networks for materials science and chemistry[J]. Communications Materials, 2022, **3**: 93.

[16] Westermayr J, Gastegger M, Marquetand P. Combining SchNet and SHARC: the SchNarc machine learning approach for excited-state dynamics[J]. The Journal of Physical Chemistry Letters, 2020, **11**(10): 3828-3834.

[17] Xie T, Grossman J C. Crystal graph convolutional neural networks for an accurate and interpretable prediction of material properties [J]. Physical Review Letters, 2018, **120**(14): 145301.

[18] Chen C, Ye W K, Zuo Y X, et al. Graph networks as a universal machine learning framework for molecules and crystals[J]. Chemistry of Materials, 2019, **31**(9): 3564-3572.

[19] Park C W, Wolverton C. Developing an improved crystal graph convolutional neural network framework for accelerated materials discovery[J]. Physical Review Materials, 2020, **4**(6): 063801.

[20] Karamad M, Magar R, Shi Y T, et al. Orbital graph convolutional neural network for material property prediction[J]. Physical Review Materials, 2020, **4**(9): 093801.

[21] Louis S Y, Zhao Y, Nasiri A, et al. Graph convolutional neural networks with global attention for improved materials property prediction[J]. Physical Chemistry Chemical Physics, 2020, **22**(32): 18141-18148.

[22] Cheng J C, Zhang C K, Dong L F. A geometric-information-enhanced crystal graph network for predicting properties of materials[J]. Communications Materials, 2021, **2**: 92.

[23] Jiang Z, Tian H. SFTGNN: an efficient spherical Fourier transform-enhanced graph neural network for high-accuracy crystal property prediction[J]. ACS Omega, 2025, **10**(44): 52658-52669.

[24] Li L J, Yu H B, Wang Z. Attention-based interpretable multiscale graph neural network for MOFs[J]. Journal of Chemical Theory and Computation, 2025, **21**(3): 1369-1381.

[25] Teng Y K, Tan H Y, Huang W, et al. Atomic-level interpretable

multimodal graph neural network for predicting carbon dioxide adsorption in metal-organic frameworks[J]. Communications Physics, 2025, **8**: 491.

[26] Li M Q, Wang L F, Zheng Z Q. Coarse-grained machine learning potential for mesoscale multilayered graphene[J]. npj Computational Materials, 2025, **11**: 374.

[27] VahidMohammadi A, Rosen J, Gogotsi Y. The world of two-dimensional carbides and nitrides (MXenes)[J]. Science, 2021, **372** (6547): eabf1581.

[28] Liu T X, Fan D C, Chen Y S, et al. Prediction of CO_2 solubility in ionic liquids *via* convolutional autoencoder based on molecular structure encoding[J]. AIChE Journal, 2023, **69**(10): e18182.

[29] Gasteiger J, Groß J, Günnemann S. Directional message passing for molecular graphs[PP/OL]. vz. arXiv(2022-04-05) [2026-01-20]. https://doi.org/10.48550/arXiv.

[30] Shymkovych V, Telenyk S, Kravets P. Hardware implementation of radial-basis neural networks with Gaussian activation functions on FPGA[J]. Neural Computing and Applications, 2021, **33**(15): 9467-9479.

[31] Wu X, Han J Z, Wang D, et al. Incorporating surprisingly popular algorithm and euclidean distance-based adaptive topology into PSO[J]. Swarm and Evolutionary Computation, 2023, **76**: 101222.

[32] Schmidt J, Pettersson L, Verdozzi C, et al. Crystal graph attention networks for the prediction of stable materials[J]. Science Advances, 2021, **7**(49): eabi7948.

[33] 杨晔, 卢建刚. 基于融合Transformer的门尼系数预测建模研究[J]. 化工学报, 2025, **76**(1): 266-282.
Yang Y, Lu J G. Mooney viscosity prediction modeling based on fusion Transformer[J]. CIESC Journal, 2025, **76**(1): 266-282.

[34] Goodall R E A, Lee A A. Predicting materials properties without crystal structure: deep representation learning from stoichiometry [J]. Nature Communications, 2020, **11**: 6280.

[35] Ahmad W, Tayara H, Chong K T. Attention-based graph neural network for molecular solubility prediction[J]. ACS Omega, 2023, **8**(3): 3236-3244.

[36] Liao X Y, Li Y Y, Li S Y, et al. Enhanced integration of single-cell multi-omics data using graph attention networks[J]. ACS Synthetic Biology, 2025, **14**(3): 931-942.

[37] Rassil A, Chougrad H, Zouaki H. Augmented graph neural network with hierarchical global-based residual connections[J]. Neural Networks, 2022, **150**: 149-166.

[38] Lei R F, Jia J H, Qin L L, et al. iPro2L-DG: hybrid network based on improved densenet and global attention mechanism for identifying promoter sequences[J]. Heliyon, 2024, **10**(6): e27364.

[39] Sun C C, Li C H, Lin X, et al. Attention-based graph neural networks: a survey[J]. Artificial Intelligence Review, 2023, **56**(S2): 2263-2310.

[40] Yang X W, Li X B, Qin Y Y, et al. Interlayer information fusion-based and dual-attention improved U-net for ABVS image sequence intelligent tumor segmentation[J]. Biomedical Signal Processing and Control, 2024, **98**: 106740.

[41] Pahari S, Lee C H, Sitapure N, et al. Predicting both thermodynamic and kinetic properties of crystallizing molecules *via* transformer-based language model[J]. AIChE Journal, 2025, **71**(10): e18923.

[42] Guha S, Kabiraj A, Mahapatra S. High-throughput design of functional-engineered MXene transistors with low-resistive contacts[J]. npj Computational Materials, 2022, **8**: 202.

[43] Zhao G B, Zhao P Y, Chung Y G. MOFClassifier: a machine learning approach for validating computation-ready metal-organic frameworks[J]. Journal of the American Chemical Society, 2025, **147**(37): 33343-33349.

[44] Togo A, Shinohara K, Tanaka I. Spglib: a software library for crystal symmetry search[J]. Science and Technology of Advanced Materials: Methods, 2024, **4**(1): 2384822.

[45] 郭恭涵, 丁晖殿, 李强, 等. 间歇精馏操作过程的动态贝叶斯优化方法[J]. 化工学报, 2025, **76**(2): 755-768.
Guo G H, Ding H D, Li Q, et al. Dynamic Bayesian optimization method for batch distillation operation process[J]. CIESC Journal, 2025, **76**(2): 755-768.