

基于图神经网络用于预测原子相互作用研究

贺浩杰¹
HE Haojie

摘要

近年来,利用图神经网络(GNN)模型方法在计算化学(CompChem)中越来越受到研究者的关注。在参考和使用适当的从头算(Ab Initio)方法训练数据情况下,利用图神经网络模型可以精确地求解化学系统性质,如能量和力场,避免了求解电子薛定谔方程(schrodinger equation, SE)的需求。但图神经网络模型在处理边缘节点效果不佳。基于此,文章基于图神经网络数值预测类任务具有处理复杂关系和依赖性,提出一个深度学习网络模型(external attention newton net, EANTNet)。首先优化图神经网络提取单颗原子的特征方式,让神经网络提取重要的特征。其次,基于外部注意力机制的思想,重新构造能量聚合器,用来聚合图神经网络提取的特征。实验结果表明,在数据集 MD17 中,对比 NewtonNet 网络模型, EANTNet 网络模型不仅在化学系统中提取更好的特征,并且提升了化学系统中的能量和力场的预测精度,分别平均提高了 3.39% 和 1.53%。

关键词

EANTNet; 能量聚合器; 力场; 预测精度

doi: 10.3969/j.issn.1672-9528.2025.03.006

0 引言

在分子动力学模拟中,一个最新的挑战是:如何构建更精确的力场来描述分子间相互作用^[1]。

正如狄拉克在 1929 年指出的那样,原则上,薛定谔方程包含了描述整个化学过程所必需的一切^[2]。然而,SE 是一个高维方程,变量是化学系统中所有电子的坐标。例如,在一个化学系统中包含 m 颗电子,那么变量的维度就是 $3m$ 维,而一个普通化学系统中,电子数量是以千万为计数单位,需要巨大的算力。超高的计算资源投入和超低的产出是不可接

受的。因此,近似方程被创建来寻找近似解。尽管这些近似方程降低了求解电子 SE 的计算要求,但近似方程所要求的精度是有限的,而且只能处理有限数量的原子。面对大规模系统仿真问题,如何构造力场是解决这一挑战的关键。机器学习在建立力场方面有一个巨大的优势。机器学习方法不依赖于任何预设的化学键或相互作用的知识,而只通过对参考数据的训练,来找到适当的力场^[3]。随着深度学习在机器学习领域的快速发展,特别是图神经网络的发展,为构建精确力场提供了一种新的方案。图神经网络(GNNS)在构建力场方面的优势在于能够直接利用分子和材料的图结构,提供灵活和可扩展的表示,同时通过引入物理先验和有效的学习

1. 贵州财经大学信息学院 贵州贵阳 550025

- [10] 宋时磊,杨逸云. 应用场景、风险与前景: ChatGPT 类大语言模型时代的学术出版 [J]. 出版科学, 2023, 31 (5): 76-84.
- [11] 陈邦睿,陆雪松. 基于开源代码大语言模型提示的学生代码修复 [J]. 华东师范大学学报(自然科学版), 2024(5):93-103.
- [12] 毛秋力,沈庆飞,李秀红. 面向算力中心的大模型推理优化技术 [J]. 质量与认证, 2024(9):40-44.
- [13] 叶国林,郭家文,张晓宇,等. 基于开源大语言模型的智能体算法研究 [J]. 中国信息界, 2024(4):161-163.
- [14] 李荣涵,浦荣成,沈佳楠,等. 基于思维链的大语言模型

- 知识蒸馏 [J]. 数据采集与处理, 2024, 39(3):547-558.
- [15] 陈小平. 大模型关联度预测的形式化和语义解释研究 [J]. 智能系统学报, 2023, 18(4):894-900.

【作者简介】

肖明魁(1979—),男,江苏南京人,本科,工程师,研究方向:机器学习、大模型。

张亮(1983—),男,江苏无锡人,硕士研究生,高级工程师,研究方向:信息化管理。

(收稿日期: 2024-11-13)

策略提高数据效率和预测精度^[4]。这些特性使 GNN 能够保持从头计算方法的准确性，并提供灵活和可扩展的分子和材料表示，提供类似于传统经验力场的计算效率。

然而，基于图神经网络模型的方法在处理边缘节点时，效果并不理想^[5-6]。为解决这一限制，在 NewtonNet^[7] 网络模型的基础上，通过重新构造提取原子特征的结构，使其重点提取分子中的碳、氮、氧原子等重原子特征，忽略氢原子等轻原子特征，然后在能量聚合器重利用外部注意力机制，补全氢原子的特征。通过上述方式来优化图神经网络处理边缘节点效能。

1 机器学习在分子动力学模拟中的现状

此前，机器学习（ML）方法得到了前所未有的发展。由于 ML 结合了 DFT 和经验力场的优点^[8-10]，计算机可以在不显式编程的情况下学习数据中的模式。并用于在参考数据集上训练后估计未知化合物或结构的性质。在这种情况下，特别是能量 E，从派生的力可以用于驱动分子动力学（molecular dynamics, MD）模拟。而确定 E 所需的所有信息都包含在 $\{Z, r_i\}$ 。因此，必须存在一个精确的映射 $f: \{Z, r_i\} \rightarrow E$ ，它通常被称为势能面（potential energy surfaces, PES）。

消息传递神经网络（message passing neural network, MPNN）^[11] 是图神经网络的一种。MPNN 可以通过迭代的消息传递和图卷积操作，有效捕捉原子之间的局部相互作用和全局上下文信息。在分子表示学习方面，MPNN 可以学习分子的低维表示，将高维的分子结构转化为固定长度的向量表示。这样的表示能够捕捉到分子的结构信息和化学特征，为后续预测任务提供输入。三维结构主要贡献的 MPNN 方法是 SchNet^[12]，利用分解原子间距离与原子属性的卷积，相关方法随后在此基础上成功地结合其他特征来描述原子环境。例如，PhysNet 增加了关于远程静电的先验知识能量预测，而 DimeNet^[13] 利用了角信息和基于贝塞尔函数的更稳定的基函数。

但在标准的 MPNN 中，表示通常被简化为变换相同的特征，例如，对平移和排列不变的量，如能量。但目标不仅是预测能量，而且还预测力向量，并且考虑到向量特征可以受到输入结构变换的影响。具体而言，旋转变换（如通过角位移）是 3D 对象建模中的最大挑战之一，在学习具有许多分子的 MD 轨迹结构的全局方向中说明了这一点，这是非常困难或不可行的。

直到最近，等变欧氏空间的机器学习方法才被开发出来，并且在对各种任务进行评估时的预测性能方面处于最先进的水平，这些任务正在迅速取代纯不变模型。此外，如变量模型减少了对训练数据的需求量，创建了在新时代机器学习使用的初始数据。例如，一组机器学习模型引入了多极扩展，如 NequIP^[14] 中使用的，旨在利用使用分子轨道预计计算特征，而 PaiNN^[15] 是满足等变性的 MPNN 模型。尽管将额外的物

理知识注入到机器学习模型中有额外的优势，但球面谐波的计算成本和预计计算特征的可用性和通用性，和缺乏物理可解释性，可能会受到限制。

NewtonNet 通过根据牛顿第三定律创建潜力向量来提高 ML 模型中结构信息的容量。力的方向根据原子在三维空间中相对于彼此的方向位置，有助于描述相邻原子对中心原子的影响。本文通过优化提取化学系统中原子特征，提高图神经网络提取特征的效率，降低在迭代过程中的特征损失，并结合外部注意力机制，提高能量聚合器的聚合能力。

2 EANTNet 模型介绍

给定一组原子特征组 $a_i \in \mathbb{R}^{n_f}$ (n_f 是原子的特征数量) 和原子的边缘属性特征 $e_{ij} \in \mathbb{R}^{n_e}$ ，一个消息传递层就可定义为：

$$m_{ij} = M_l(a_i^l, a_j^l, e_{ij}) \quad (1)$$

$$m_i = \sum_{j \in N(i)} m_{ij} \quad (2)$$

$$a_i^{l+1} = U_l(a_i^l, m_i) \quad (3)$$

式中： M_l 表示消息函数； U_l 表示更新函数； l 表示原子特征迭代的次数，消息传递阶段运行 l 个时间步，由消息函数 M_l 和更新函数 U_l 定义； $N(i)$ 表示分子图中原子 i 的邻域。消息函数 M_l ，更新函数 U_l 都是可微的学习函数。模型的核心思想是通过结合消息函数 M_l 和更新函数 U_l ，获得和更新每一个原子特征组 a_i^l 。

图 1 是 NENTNet 模型的整体结构图，其中包含一层 Embedding 层、一层 RBF 层、三层 Interaction block 层、一层 EA 层、一层 AtomicEnergy 层。

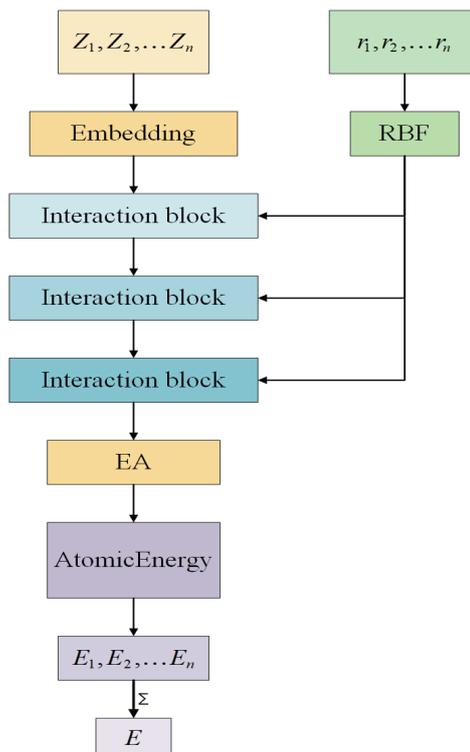


图 1 EANTNet 模型图

模型是由原子序数 $Z_i \in \mathbb{R}^1$ 和相对位置向量 $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i \in \mathbb{R}^3$ 定义的无向分子图, 在消息传递的阶段, 将原子特征组 \mathbf{a}_i^l 输入到消息函数中, 并求和, 再将求和的结果和原子的特征组作为更新函数的输入, 并获得下一个原子特征组 \mathbf{a}_i^{l+1} 。

2.1 原子特征聚合器

第一: 嵌入一组可训练的原子序列数 Z_i , 初始化原子特征, 即 $\mathbf{a}_i^0 = \mathbf{g}(Z_i)$ 和 $\mathbf{g}: \mathbb{R}^1 \rightarrow \mathbb{R}^{n_f}$, 然后去除其中氢原子的特征, 即 $\mathbf{b}_i^0 = \mathbf{C}(\mathbf{a}_i^0)$ 和 $\mathbf{C}: \mathbb{R}^{n_f} \rightarrow \mathbb{R}^{n_b}$ 。其次使用边缘函数表示原子间的距离。为了将三维的数据映射到其他维度, 本文引入了径向函数。径向函数的表达式:

$$e_{ij} = \sqrt{\frac{2}{r_c}} \frac{\sin\left(\frac{n\pi}{r_c} \|\mathbf{r}_{ij}\|\right)}{\|\mathbf{r}_{ij}\|} \quad (4)$$

式中: r_c 表示模型的截止半径; $\|\mathbf{r}_{ij}\|$ 表示原子与原子之间欧式的距离。使用一个相互作用的线性层 $\phi_{\text{bf}}: \mathbb{R}^{n_b} \rightarrow \mathbb{R}^{n_f}$ 将径向函数的输出与其他参数相结合。之后就使用包络函数在每个原子周围实现一个连续的径向截止。在边缘操作中, $\phi_c: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^{n_f}$ 是被定义为截止半径 r_c 中相对原子位置向量的可训练变换:

$$\phi_c(\mathbf{r}_{ij}) = \phi_{\text{bf}}(e_{ij}) e_{\text{cut}}(r_c, \|\mathbf{r}_{ij}\|) \quad (5)$$

式中: ϕ_c 的输出是旋转不变的, 只与原子间的距离相关。根据神经消息传递的符号, 定义了一个消息函数来收集相邻信息并更新原子特征。在这里, 更倾向于在任何一对原子之间传递对称消息, 即在原子 i 和原子 j 之间传递的消息在两个方向上都是相同的。因此, 在涉及任何二体交互的所有特征数组之间通过原子级乘积引入对称消息传递 n_{ij} , 公式表示为:

$$n_{ij} = \phi_b(b_i^l) \phi_b(b_j^l) \phi_c(r_{ij}) \quad (6)$$

式中: $\phi_b: \mathbb{R}^{n_b} \rightarrow \mathbb{R}^{n_f}$ 表示第一层后具有非线性激活函数 SiLU 的可训练可微网络。需要注意的是适用于所有原子的相同函数, 因此, 由于二体交互的两个头部的输出特征的权重共享和乘法, 在每一层消息传递中保持对称。为完成特征数组聚合器, 使用公式 (2) 简单地求和中心原子从其邻居接收到的所有消息。最后, 使用接收消息的总和更新每层的原子特征, 公式表示为:

$$b_i^{l+1} = b_i^l + \sum_{j \in N(i)} n_{ij} \quad (7)$$

2.2 力特征计算

模型遵循的是旋转不变的消息传递。在力场计算模块中就利用了方向信息。此模块的思想核心是根据牛顿第三定律潜在力向量。牛顿第三定律指出, 作用力与反作用力的关系是大小相等, 方向相反, 即原子 i 对原子 j 的作用力大小相同, 方向相反。这就是模型引入消息传递功能的原因。因此, 估计对称力的大小作为 n_{ij} 的函数, 即 $\|F_{ij}\| = \phi_f(n_{ij})$ 。力的大小与

单位距离向量的乘积 $\hat{\mathbf{r}}_{ij} = \mathbf{r}_{ij} / \|\mathbf{r}_{ij}\|$ 给出了服从牛顿第三定律的反称原子间力。

$$F_{ij} = \phi_f(n_{ij}) \hat{\mathbf{r}}_{ij} \quad (8)$$

式中: $\phi_f: \mathbb{R}^{n_f} \rightarrow \mathbb{R}^1$ 是一个可微的学习函数。原子上每层的总力原子环境中相邻原子的所有维度的力之和, 公式为:

$$F_i^l = \sum_{j \in N(i)} F_{ij}^l \quad (9)$$

接下来, 使用可学习的函数 $\phi_j: \mathbb{R}^{n_f} \rightarrow \mathbb{R}^n$ 在每个维度上分解和缩放力向量完成力的运算, 公式为:

$$f = \sum_{j \in N(i)} \phi_j(n_{ij}) F_{ij}^l \quad (10)$$

因此, 所构造的原子间的反作用力被沿各维旋转不变的特征分解, 即 $f \in \mathbb{R}^{3 \times n_f}$ 。根据消息传递策略, 在每一层更新反作用力特征向量 Δf_i , 其初始化为零值 $f_i^0 = 0$ 。

$$f_i^{l+1} = f_i^{l+1} + f \quad (11)$$

2.3 位移特征计算

此模型对位移计算的思想是, 位移必须沿着上一步中更新力的特征进行运动。根据牛顿运动方程, 计算受到力的作用所造成的原子位移, 并且积累每一层的位移, 而不是更新每一层原子的坐标。使用一个可学习的函数 $\phi_d: \mathbb{R}^{n_f} \rightarrow \mathbb{R}^n$ 来近似位移因子, 该函数作用于由其原子特征 b 所呈现的每个原子的当前状态 b_i^l , 公式为:

$$d_i = \phi_d(b_i^{l+1}) f_i^{l+1} \quad (12)$$

利用 d_i 和前一层所有原子位移的加权之和来更新位移特征向量。权重是基于原子间消息的可训练函数 ($\phi'_d: \mathbb{R}^{n_f} \rightarrow \mathbb{R}^n$) 来估计的, 公式为:

$$D_i^{l+1} = \sum_{j \in N(i)} \phi'_d(n_{ij}) D_j^l + d_i \quad (13)$$

这一步中的重量分量就像注意力机制一样, 集中在两体相互作用上, 这种相互作用会导致原子的最大运动。由于 $l=0$ 处的力为零, 因此位移也初始化为零值, 即 $D_i^0 = 0$ 。

2.4 能量计算

最后一个模块将方向信息压缩到旋转不变的原子特征上。由于此模型是根据牛顿运动方程实施前面的步骤, 直接使用 f_i^l 和 d_i^l 来近似每一颗原子的势能变化, 类似高维空间 \mathbb{R}^n 中的 $f_i^l \approx -u / d_i^l$ 。因此, 能量变化的公式为:

$$u_i = -\phi_u(b_i^{l+1}) \langle f_i^{l+1} D_i^{l+1} \rangle \quad (14)$$

式中: $u_i \in \mathbb{R}^n$ 和 $\phi_u: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ 表示可微的学习函数, 操作于原子特征, 并预测每个原子的能量系数。两个特征向量的点积将沿着每个维度的特征收缩到单个特征数组。再次使用以原子势能变化表示的收缩方向信息来更新原子特征, 公式为:

$$b_i^{l+1} = b_i^{l+1} + u_i \quad (15)$$

2.5 能量聚合计算

能量聚合模块的功能就是将高维的分子能量特征聚合为

表 1 在原始 MD17 数据集上分子的能量和力的平均绝对误差 MAE, 分别以 [meV] 和 [meV/Å] 为单位

Molecule		SchNet	PhysNet	DimeNet	sGDML	PaiNN	NewtonNet	EANTNet
Aspirin	Energy	16.0	10.0	8.8	8.2	6.9	8.06	7.76
	Forces	58.5	26.2	21.6	29.5	14.7	20.68	19.95
Ethanol	Energy	3.5	2.6	2.8	3.0	2.7	2.69	2.57
	Forces	16.9	6.9	10.0	14.3	9.7	9.35	9.26
Malonaldehyde	Energy	5.6	4.1	4.5	4.3	3.9	4.29	4.15
	Forces	28.6	13.8	16.6	17.8	13.8	16.61	16.36
Naphthalene	Energy	6.9	6.2	5.3	5.2	5.0	4.94	4.86
	Forces	25.2	13.4	9.3	4.8	3.3	4.29	4.24
Salicylic acid	Energy	8.7	5.5	5.8	5.2	4.9	5.20	5.04
	Forces	36.9	14.6	16.2	12.1	8.5	10.28	10.19
Toluene	Energy	5.2	4.3	4.4	4.3	4.1	4.38	4.17
	Forces	24.7	8.3	9.4	6.1	4.1	5.12	5.06
Uracil	Energy	6.1	4.8	5.0	4.8	4.5	4.60	4.51
	Forces	24.3	10.8	13.1	10.4	6.0	6.68	6.59
Azobenzene	Energy		8.5		4.0		6.37	6.11
	Forces		20.0		17.3		7.63	7.55
Paracetamol	Energy		7.8		6.6		5.85	5.75
	Forces		22.5		21.3		13.40	13.31

一维的能量。其中特征 b 首先输入到外部注意力机制模块, 目的是通过外部注意力机制自动学习补全氢原子的特征, 公式为:

$$b'_i = \phi_E(b'_i) \quad (16)$$

式中: $\phi_E: \mathbb{R}^{n_r} \rightarrow \mathbb{R}^{n_r}$ 是可微的学习函数, 其目的是为补全氢原子的特征。

3 实验分析

3.1 评测指标

为了评估模型的性能, 本文采用能量的绝对平均误差 (energy MAE) 和力的绝对平均误差 (force MAE)。

3.2 单个小分子

本文利用密度泛函理论 (DFT) 对 9 个小有机的分子动力学轨迹数据集 MD17^[16] 进行评估, 来测试模型的性能。实验将数据集划分为训练集、验证集和测试集, 其中随机划分 950 条数据当作训练集, 随机划分 50 条数据作为验证集, 剩余的数据全部划分为测试集。根据表 1 数据显示, EANTNet 网络模型评估性能优于 NewtonNet, 这是由于图神经网络提取化学系统中边缘节点特征精度不高, 而 EANTNet 网络模型中更改地特征提取方式, 并且增加外部注意力机制, 可以更好的处理分子的边缘节点, 因此在数据上的表现是能量和力的绝对平均误差 (MAE) 值更小, 预测精度更高。

在一项类似的任务中, 对 5 个小分子的 CCSD/CCSD(T) 数据进行了训练。这个实验的意义在于, 它提供了获取数据的理论黄金标准, 并解决了可接受的训练样本数量下, 以高参考精度评估机器学习模型的最终目标。在表 2 中, 将 EANTNet 网络模型训练的结果与 NewtonNet 模型和 sGDML^[17] 模型训练的结果进行比较, 其中 EANTNet 不仅在五种分子中的 5 种中表现出了最好的预测性能, 并且在剩下的苯分子中, 对力场的预测表现最优。

表 2 在 CCSD 或 CCSD (T) 精度下, 模型在预测分子能量 [meV] 和力 [meV/Å] 的平均绝对误差 MAE 方面的性能

Molecule		sGDML	NewtonNet	EANTNet
Aspirin	Energy	6.85	5.42	5.25
	Forces	33.0	19.38	19.21
Benzene	Energy	0.13	0.22	0.18
	Forces	1.69	0.78	0.71
Ethanol	Energy	2.17	1.30	1.23
	Forces	15.18	7.98	7.84
Malonaldehyde	Energy	10.75	2.12	2.01
	Forces	16.0	12.62	12.47
Toluene	Energy	1.30	1.0	0.94
	Forces	9.11	5.55	5.43

4 结论

在化学和生化系统的研究中，能够高精度地预测分子动力学轨迹的能量和力，但在有效时间尺度上是相当重要的。本文改进提取原子特征的方式，并与原来模型相比，改进后的模型可以更好的处理边缘粒子之间的特征。实验结果表明，在数据集 MD17 数据集上改进后的 EANTNet 网络模型在能量和力场的预测精度上优于 NewtonNet 模型，证明了改变特征提取的方法应用在 NewtonNet 模型上是有效的。未来还可以进一步改进特征提取的方法，让该模型可以更好地处理化学系统中边缘粒子之间的特征。

参考文献:

- [1] UNKE O T, CHMIELA S, SAUCEDA H E, et al. Machine learning force fields[J]. *Chemical reviews*, 2021, 121(16): 10142-10186.
- [2] UNKE O T, MEUWLY M. PhysNet: a neural network for predicting energies, forces, dipole moments, and partial charges[J]. *Journal of chemical theory and computation*, 2019, 15(6): 3678-3693.
- [3] ZHANG J, CHEN D, XIA Y J, et al. Artificial intelligence enhanced molecular simulations[J]. *Journal of chemical theory and computation*, 2023, 19(14): 4338-4350.
- [4] REISER P, NEUBERT M, EBERHARD A, et al. Graph neural networks for materials science and chemistry[J]. *Communications materials*, 2022, 3(1): 93.
- [5] CHAMBERLAIN B P, ROWBOTTOM J, GORINOVA M, et al. Grand: graph neural diffusion[DB/OL].(2021-09-22)[2024-05-11].<https://doi.org/10.48550/arXiv.2106.10934>.
- [6] ALON U, YAHAV E. On the bottleneck of graph neural networks and its practical implications[DB/OL]. (2021-03-09)[2024-06-26].<https://doi.org/10.48550/arXiv.2006.05205>.
- [7] HAGHIGHATLARI M, LI J, GUAN X Y, et al. NewtonNet: a newtonian message passing network for deep learning of interatomic potentials and forces[DB/OL].(2021-03-09)[2024-07-11].<https://doi.org/10.48550/arXiv.2108.02913>.
- [8] WANG J J, WANG Y, ZHANG H T, et al. E (n)-Equivariant cartesian tensor message passing interatomic potential[J]. *Nature communications*, 2024, 15: 7607.
- [9] ZHANG L F, HAN J Q, WANG H, et al. Deep potential molecular dynamics: a scalable model with the accuracy of quantum mechanics[DB/OL].(2017-12-12)[2024-04-11].<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.120.143001>.
- [10] LU D H, WANG H, CHEN M H, et al. 86 PFLOPS deep potential molecular dynamics simulation of 100 million atoms with ab initio accuracy[J]. *Computer physics communications*, 2021, 259: 107624.
- [11] GILMER J, SCHOENHOLZ S S, RILEY P F, et al. Message passing neural networks[J]. *Machine learning meets quantum physics*, 2020,968:199-214.
- [12] SCHÜTT K T, KINDERMANS P J, SAUCEDA H E, et al. SchNet: a continuous-filter convolutional neural network for modeling quantum interactions[DB/OL]. (2017-12-19)[2024-01-19].<https://doi.org/10.48550/arXiv.1706.08566>.
- [13] GASTEIGER J, GROSS J, GUNNEMANN S. Directional message passing for molecular graphs[DB/OL].(2022-04-05)[2024-06-23].<https://doi.org/10.48550/arXiv.2003.03123>.
- [14] BATZNER S, MUSAEILIAN A, SUN L X, et al. E (3)-equivariant graph neural networks for data-efficient and accurate interatomic potentials[J]. *Nature communications*, 2022, 13: 2453.
- [15] SCHÜTT K T, UNKE O T, GASTEGGER M. Equivariant message passing for the prediction of tensorial properties and molecular spectra[DB/OL].(2021-06-07)[2024-02-22].<https://doi.org/10.48550/arXiv.2102.03150>.
- [16] CHMIELA S, TKATCHENKO A, SAUCEDA H E, et al. Machine learning of accurate energy-conserving molecular force fields[J]. *Science advances*, 2017, 3(5): 3015.
- [17] CHMIELA S, SAUCEDA H E, POLTAVSKY I, et al. sGDML: constructing accurate and data efficient molecular force fields using machine learning[J]. *Computer physics communications*, 2019, 240: 38-45.

【作者简介】

贺浩杰(2000—)，男，江西萍乡人，硕士研究生，研究方向：计算机应用技术。

(收稿日期：2024-11-07)