

基于等变 Transformer 结合长程相互作用的原子间势预测

郑景峰¹

ZHENG Jingfeng

摘要

长程相互作用对原子间势能与力的精确预测具有关键作用,但现有的等变图神经网络模型多聚焦于局部原子环境,忽略了全局库仑效应耦合。文章提出了一种明确纳入长程相互作用的基于等变 Transformer 架构的机器学习原子间势和力的预测模型 CLRFNet (charge long range field network),通过学习原子潜在电荷,利用三线投影结合快速傅里叶变换,显式计算全局电势与电场,实现了长程库仑效应与原子局部环境在原子间势和力的预测任务中的有效结合。在 CCSD/CCSD (T) 和 revised MD17 两个基准数据集上,CLRFNet 相较于现有模型,将能量与力的预测平均绝对误差 (mean absolute error, MAE) 平均降低约 10%,达到了化学精度。实验结果证明,长程相互作用在原子局部和全局环境建模中的重要性,为原子间势预测的等变图神经网络模型的设计提供了新的思路。

关键词

等变性; Transformer; 图神经网络; 原子间势; 机器学习

doi: 10.3969/j.issn.1672-9528.2025.10.007

0 引言

传统的分子动力学模拟依赖于经典力场或量子力学方法^[1],经典力场计算效率高但精度有限,量子力学的方法,在拥有高精度的同时,也带来了昂贵的计算成本。机器学习方法可以有效解决传统方法无法解决的复杂问题^[2],平衡计算效率和计算精度之间的制约关系。

现代化的用于处理化学材料应用的机器学习方法可以追溯到 Behler 和 Parrinello 的人工神经网络 (artificial neural network, ANN) 力场 BPANN^[3]。图神经网络 (graph neural network, GNN) 将分子的结构看作是一个图结构,从而直接利用分子的图结构^[4],在效果上明显优于以前的模型。用于原子间势和力的预测任务的图神经网络模型大多基于消息传递神经网络^[5] (message passing neural network, MPNN) 框架构建,在 MPNN 的设计中,节点信息以消息 m_v 的形式由边传播到邻居节点,然后各个节点根据所有传入的消息更新每个节点的嵌入。SchNet^[6] 直接使用原子类型和坐标作为输入,采用连续滤波卷积来捕捉原子间相互作用,为后续结合额外原子特征来描述原子局部环境成功奠定了基础。

GNN 模型大多关注于原子局部环境^[7-8],忽略了原子之间的长程相互作用对于原子能量和力的影响。因此本文基于等变 Transformer 模型提出了一个捕获分子系统中长程相互作用的等变 GNN 模型 CLRFNet (charge long range field network),

模型首先预测原子的潜在电荷量,随后将电荷量提供给长程计算模块得到长程特征,经过更新层的信息传递以更新原子局部和全局环境的特征表示,最后由能量输出层结合能量偏置项校正能量输出并得到力,实现模型对于长程相互作用的有效利用,提高模型对于原子间势和力的预测精度。

1 相关工作

使用机器学习的方法预测分子体系的能量和力的研究开始于手工拟合的分析函数,最典型的例子是默克分子力场 (merck molecular force field, MMFF94)^[9]。自从出现第一个基于神经网络框架的 BPANN^[3] 以来,机器学习力场 (machine learning force fields, MLFFs) 的研究取得了重大进展。

在传统的消息传递神经网络 (MPNN) 中,模型在描述分子系统的性质时,要保证预测结果不受整体坐标旋转和平移的影响,以往的研究通常依赖于来自坐标系的相对结构信息。然而,预测任务不仅要求能够预测能量,还需要预测输出力向量。由于向量特征会随输入结构的变换而改变,因此必须确保各操作模块的输出在需要时能够与输入变换保持一致。

随着机器学习方法的发展,研究者们开始考虑等变模型,这些模型在多项任务中的性能迅速超过了仅具备不变性特征的传统方法。等变图神经网络 (equivariant graph neural networks, EGNNs) 有效地支持了对几何变换的等变性。EGNNs 的代表性工作 NequIP^[10] 基于 E(3) 等变卷积,实现了卓越的数据高效性; PaiNN^[11] 提出了标量 - 向量双通道表

1. 贵州财经大学信息学院 贵州贵阳 550025

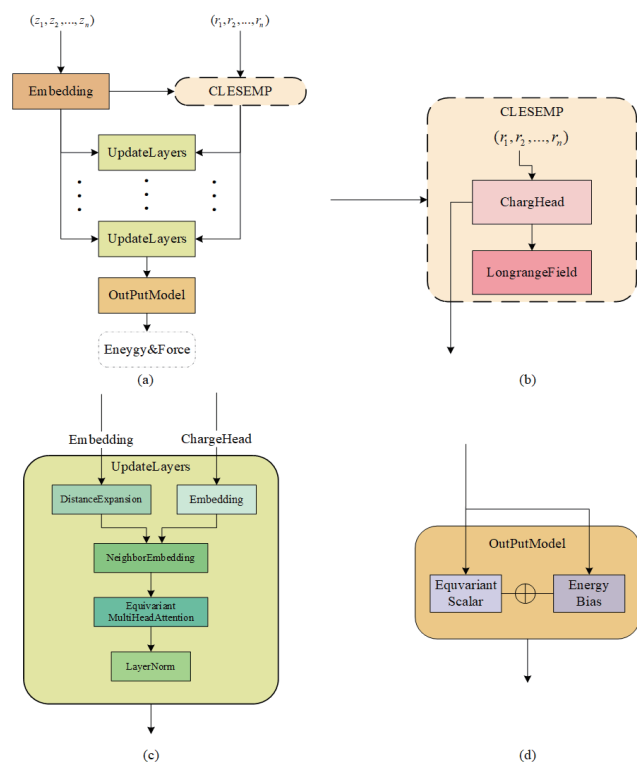
示方法,通过等变消息传递更新,无需复杂的张量积运算;Allegro^[12]采用张量积更新等变表示特征,并使其可用于大规模数据。等变模型大幅降低了传统机器学习方法对大量参考数据的依赖,为高质量但开销昂贵的AIMD数据的应用开辟了新路径。

将Transformer引入原子图并结合等变约束,是近年来另一重要研究方向。SE(3)-Transformer^[13]首次将点云的SE(3)等变注意力机制用于分子任务;SpookyNet^[14]结合Transformer的自注意力机制与消息传递,建模非局域相互作用;TorchMD-Net^[15]通过将Transformer^[16]自注意力机制应用于图结构,用多头注意力和跳跃连接高效建模原子间相互作用。

但多数等变GNN模型仅关注原子局部化学环境,而忽略了对于原子间相互作用建模至关重要的长程相互作用,本文通过明确纳入远程交互,并将局部特征和远程交互有效融合,提高了模型对于特征的捕捉能力,实现了对原子间势和力的预测精度的提升。

1.1 CLRFNet 模型介绍

本文提出了一种基于ET的结合长程相互作用的原子间势预测等变图神经网络模型CLRFNet,将长程相互作用明确纳入模型的计算流程,并实现局部相互作用和长程相互作用的有效融合,如图1所示。



注: (a) 为模型总体结构; (b) 为 CLESEMP 层实现全局库伦耦合; (c) 为更新层更新并传递特征; (d) 为输出模块接收传入的原子特征,输出预测能量和力。

图1 CLRF 模型示意图

模型通过预测目标分子系统中每个原子的潜在电荷,随后将电荷提供给长程计算模块,通过Ewald函数结合傅里叶变换与三线性投影得到电场与电势,然后经过多层更新层的信息传递来更新原子局部和全局环境的特征表示,最后由能量输出模块得到预测的势能与力的值,经过上述步骤实现模型对于长程相互作用与局部原子环境的有效结合,实现对分子体系原子间势和力的化学精度预测。

1.2 CLESEMP 层

对于包含 N 个原子的系统,模型将原子序数和坐标记为 $z=(z_1, z_2, \dots, z_n)$, $R=(r_1, r_2, \dots, r_n)$, $r_i \in \mathbb{R}^3$ 。首先,将 N 个原子 $(z_1, z_2, \dots, z_n)$ 输入嵌入层,每种原子 z_i 关联两个可学习向量,用于表征该原子性质和邻域嵌入。将嵌入后的向量 x_i 和原子坐标输入 ChargeHead 模块,对不同类型的原子 z_i 预测潜在电荷。模型通过一个线性层将输入的向量 x_i 处理后,对其施加 $\tanh$ 激活,用来学习潜在电荷 $\hat{q}$ 。

$$\hat{q}_i = \tanh(w_i^* x_i^{(L)} + b_q) \quad (1)$$

式中: $\hat{q} \in \mathbb{R}^N$, 其中 N 表示分子系统中的原子个数。

随后对潜在电荷 $\hat{q}$ 使用 Cloud-in-Cell (CIC) 投影将潜在电荷分布投影到立方网格得到 $\rho(x)$ 。

$$\rho(x) = \sum_{i=1}^N \hat{q}_i W_{\text{CIC}}\left(\frac{x-r_i}{h}\right) \quad (2)$$

式中: W_{CIC} 表示 Cloud-in-Cell 基函数; h 表示网格间距; $\hat{q}_i$ 表示第 i 个原子的潜在电荷; r_i 表示第 i 个原子的坐标。

随后,对离散的 $\rho(x)$ 进行 FFT 得到 $\tilde{\rho}(k)$, 并使用带有高斯屏蔽参数的 Ewald 函数计算 ϕ 的频域表示 $\tilde{\phi}(k)$:

$$\tilde{\phi}(k) = \frac{4\pi}{\epsilon_0 k^2} e^{-\frac{k^2}{4\alpha^2}} \tilde{\rho}(k) \quad (3)$$

式中: α 表示高斯屏蔽参数; ϵ_0 表示真空介电常数; k 表示模长; $k \neq 0$ 以避免分母奇异。对 $\tilde{\phi}(k)$ 执行逆 FFT 得到 $\phi(x)$, 再次使用 CIC, 将电势插值回原子坐标位置。

$$\phi_i = \sum_n \phi(x_n) W_{\text{CIC}}\left(\frac{x_i - r_n}{h}\right) \quad (4)$$

式中: ϕ_i 表示在原子位置 r_i 处通过 CIC 插值得到的离散电势值; x_n 表示立方网格上所有节点的位置集合。

接着,在原子所处位置处对实空间电势 $\phi(x)$ 取负梯度,得到电场 E_i :

$$E_i = -\nabla_x \phi(x) \Big|_{x=r_i} \quad (5)$$

式中: E_i 表示在原子位置 r_i 处的电场。

1.3 UpdateLayer 更新层

在更新层中,输入原子 z_i 所关联的可学习向量,以及电场 E_i 和电势 ϕ_i , 通过特征映射嵌入与局部特征融合。

$$\mathbf{x}_i^{(j)} = \mathbf{x}_i^{(j)} + \underbrace{W_\varphi \varphi_i}_{\substack{\text{scalar} \\ \text{shape } F}} \quad (6)$$

$$\mathbf{v}_i^{(j)} = \mathbf{v}_i^{(j)} + \underbrace{W_E E_i}_{\substack{\text{vector} \\ \text{shape } F \times 3}} \quad (7)$$

式中： $\mathbf{x}_i^{(j)}$ 表示第 j 层更新层在 r_i 处的标量特征； $\mathbf{v}_i^{(j)}$ 表示第 j 层更新层在 r_i 处的向量特征； W_φ 表示对 φ 的放缩参数； W_E 表示将 E_i 拆分成 F 个等变通道的3D过滤器。

随后，对任意原子对 i 和 j 之间的距离 d_{ij} 进行距离扩展。

$$e_k^{\text{RBF}}(d_{ij}) = \phi(d_{ij}) e^{-\beta_k [e^{-d_{\text{cut}}} - \mu_k]^2} \quad (8)$$

式中： β_k 与 μ_k 分别控制第 k 个基函数的宽度与中心；参数 μ 在初始时被均匀布置在 $e^{-d_{\text{cut}}}$ 至1的区间内；参数 β 设定为 $2K^{-1}(1 - e^{-d_{\text{cut}}})^{-2}$ 。为避免出现不连续跳跃，使用余弦截断函数对距离进行截断。

$$\phi(d_{ij}) = \begin{cases} \frac{1}{2} [\cos(\frac{\pi d_{ij}}{d_{\text{cut}}}) + 1], & d_{ij} \leq d_{\text{cut}}, \\ 0, & d_{ij} > d_{\text{cut}} \end{cases} \quad (9)$$

式中： d_{cut} 表示截断半径。随后，对原子 i 的邻接原子进行邻域嵌入：

$$n_i = \sum_{j=1}^N e^{\text{nbh}}(z_j) \odot e^{\text{RBF}}(d_{ij}) \quad (10)$$

式中： n_i 表示原子 i 的邻域嵌入； $\odot$ 表示逐元素相乘； e^{nbh} 表示邻域嵌入操作。

然后，将所得特征表示输入等变多头注意力层，对输入特征向量 $\mathbf{x}_i$ 进行层归一化，对每条边所对应的距离 d_{ij} 进行距离扩展，并分别通过线性映射与Sigmoid激活得到查询-键通路的距离滤波器 D^K 与值通路的距离滤波器 D^V 。

$$D^K = \sigma(W^{D^K} e^{\text{RBF}}(d_{ij}) + b^{D^K}) \quad (11)$$

$$D^V = \sigma(W^{D^V} e^{\text{RBF}}(d_{ij}) + b^{D^V}) \quad (12)$$

随后，计算查询向量 $\mathbf{Q} = W^Q \mathbf{x}_i$ 与键向量 $\mathbf{K} = W^K \mathbf{x}_i$ ，通过对三者进行逐元素相乘得到注意力权重分数。

$$P_{ij} = \sum_{k=1}^F \mathbf{Q}_k \odot \mathbf{K}_k \odot D_k^K \quad (13)$$

然后，在注意力机制的值通路中引入连续滤波卷积^[6]，将 $V_j \odot D_{ij}^V$ 划分为三段 $\{s_{ij}^1, s_{ij}^2, s_{ij}^3\} \subset \mathbb{R}^F$ ，对第三段应用注意力权

重并沿值维度聚合，使得模型可以在注意力权重中考虑原子间距离并直接纳入特征向量中。

$$\mathbf{y}_i = o(\sum_j P_{ij} s_{ij}^3) \quad (14)$$

该注意力机制的输出包括更新后的标量特征向量 y_i ，以及标量滤波器 s_{ij}^1, s_{ij}^2 ，用于对更新层内部信息进行加权。

随后，计算原子间的交互，在标量与向量特征之间进行信息交换，标量特征向量 y_i 被拆分成三部分 $q_i^1, q_i^2, q_i^3 \in \mathbb{R}^F$ ，标量增量 $\Delta \mathbf{x}_i$ 表示为，

$$\Delta \mathbf{x}_i = q_i^1 + q_i^2 \odot \langle U_1 \mathbf{v}_i, U_2 \mathbf{v}_i \rangle \quad (15)$$

式中： $\langle U_1 \mathbf{v}_i, U_2 \mathbf{v}_i \rangle$ 表示先经过线性映射 U_1, U_2 后向量 $\mathbf{v}_i$ 的点积。向量增量 $\Delta \mathbf{v}_i$ 表示为：

$$\Delta \mathbf{v}_i = \sum_{j=1}^N [s_{ij}^1 \odot \mathbf{v}_j + s_{ij}^2 \odot \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{\|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j\|}] + q_i^3 \odot U_3 \mathbf{v}_i \quad (16)$$

式中： $\frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{\|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j\|}$ 表示原子对之间的单位向量。

1.4 OutPutModel 输出模块

最后，经过 l 层更新层处理过后的特征 $\mathbf{x}$ 输入进输出模块，聚合各原子特征结合能量偏置项得到能量 $\hat{E}$ ：

$$\hat{E} = \sum_{i=1}^N \mathbf{x}_i + \mathbf{b}_E \quad (17)$$

式中： $\mathbf{b}_E$ 表示用于校正能量输出的偏置项。

然后对能量取负梯度 $F = -\frac{\partial \hat{E}}{\partial r_i}$ 得到力 F 。

2 实验分析

2.1 CCSD/CCSD (T)

为了验证模型的数据效率，首先在一个具有高精度数据但是数据规模较小的数据集上进行实验。实验在量子化学精度级别的CCSD/CCSD (T) 分子数据集^[4]上评估了CLRNet模型。本文参考之前的方法^[15]，使用950条数据作为训练集，50条数据作为验证集，500条数据作为测试集。在表1中，将CLRNet的实验结果与sGDML^[17]、ET^[15]进行了比较。实验结果显示，在引入长程相互作用之后，由于全局长程特征的加入，CLRNet在对原子间势和力的预测结果上表现出了更低的平均绝对误差(MAE)。

表1 在CCSD/CCSD (T) 数据集上预测能量和力的表现，使用平均绝对误差(MAE)作为指标

Molecule	Aspirin		Benzene		Ethanol		Toluene	
	Energy (/kcal·mol ⁻¹)	Force (/kcal·mol ⁻¹ ·Å ⁻¹)	Energy (/kcal·mol ⁻¹)	Force (/kcal·mol ⁻¹ ·Å ⁻¹)	Energy (/kcal·mol ⁻¹)	Force (/kcal·mol ⁻¹ ·Å ⁻¹)	Energy (/kcal·mol ⁻¹)	Force (/kcal·mol ⁻¹ ·Å ⁻¹)
sGDML	0.158	0.761	0.003	0.039	0.050	0.350	0.030	0.210
ET	0.068	0.268	0.002	0.008	0.016	0.103	0.011	0.062
CLRNet	0.062	0.245	0.000 6	0.006	0.015	0.096	0.009 6	0.056

2.2 revised MD17

本文在 revised MD17 数据集上测试了 CLRFNet。数据集包含 100 000 个对原 MD17 数据集分子进行重新计算的结构。对于 revised MD17 数据集，每个分子选择 950 条数据用于训练，50 条数据用于验证，并将剩余数据用于测试。表 2 展示了 CLRFNet 在 revised MD17 数据集上的模型预测表现，说明 CLRFNet 相较于没有结合长程相互作用的核方法^[18]、等变 Transformer 方法^[15]和浅层神经网络^[19]来说预测精度更准确。

表 2 在 revised MD17 数据集上预测能量和力的表现，使用平均绝对误差（MAE）作为指标

Molecule	Aspirin		Ethanol		Malonaldehyde		Naphthalene	
	Energy	Force	Energy	Force	Energy	Force	Energy	Force
	/(kcal·mol ⁻¹)	/(kcal·mol ⁻¹ ·Å ⁻¹)	/(kcal·mol ⁻¹)	/(kcal·mol ⁻¹ ·Å ⁻¹)	/(kcal·mol ⁻¹)	/(kcal·mol ⁻¹ ·Å ⁻¹)	/(kcal·mol ⁻¹)	/(kcal·mol ⁻¹ ·Å ⁻¹)
FCHL19	0.143	0.482	0.021	0.143	0.035	0.235	0.028	0.150
ANI	0.141	0.413	0.056	0.309	0.106	0.565	0.261	0.673
ET	0.068	0.255	0.016	0.114	0.037	0.193	0.015	0.053
CLRFNet	0.062	0.251	0.014	0.112	0.027	0.186	0.008	0.050

Molecule	Salicylic acid		Toluene		Uracil	
	Energy	Force	Energy	Force	Energy	Force
	/(kcal·mol ⁻¹)	/(kcal·mol ⁻¹ ·Å ⁻¹)	/(kcal·mol ⁻¹)	/(kcal·mol ⁻¹ ·Å ⁻¹)	/(kcal·mol ⁻¹)	/(kcal·mol ⁻¹ ·Å ⁻¹)
FCHL19	0.042	0.219	0.037	0.203	0.014	0.097
ANI	0.212	0.684	0.178	0.560	0.118	0.140
ET	0.031	0.138	0.015	0.061	0.018	0.097
CLRFNet	0.024	0.135	0.009	0.056	0.012	0.091

3 结论

长程相互作用对于建模原子间相互作用、预测原子间势和力至关重要。本文提出的 CLRFNet 模型通过 ChargeHead 模块预测原子潜在电荷量，通过 LRF 模块实现全局库仑耦合，捕捉原子间的长程相互作用，并通过将长程交互投影到更新层与局部特征进行融合，实现了模型对于分子系统局部特征和长程特征的有效利用，从而提高了预测精度。实验结果表明，在 CCSD/CCSD (T) 数据集和 revised MD17 数据集上，CLRFNet 较现有模型在能量和力的平均绝对误差上都有明显下降，说明通过纳入长程相互作用有效提升了 CLRFNet 模型的预测精度，体现了长程相互作用在原子间相互作用建模中的有效性。

参考文献：

[1] SCHLICK T, PORTILLO-LEDESMA S. Biomolecular modeling thrives in the age of technology[J]. Nature computational science, 2021, 1: 321-331.

[2] CHEN X L, WANG Z J, HE Y, et al. Machine learning applications for particle accelerators[J]. Frontiers of data and computing, 2020, 1(2): 110-120.

[3] BEHLER J, PARRINELLO M. Generalized neural-network representation of high-dimensional potential-energy

surfaces[J]. Physical review letters, 2007, 98: 146401.

[4] CHMIELA S, SAUCEDA H E, MÜLLER K-R, et al. Towards exact molecular dynamics simulations with machine-learned force fields[J]. Nature communications, 2018, 9: 3887.

[5] GILMER J, SCHOENHOLZ S S, RILEY P F, et al. Neural message passing for quantum chemistry[C]//ICML'17: Proceedings of the 34th International Conference on Machine Learning. New York: ACM, 2017: 1263-1272.

[6] SCHÜTT K T, KINDERMANS P-J, SAUCEDA H E, et al.

SchNet: a continuous-filter convolutional neural network for modeling quantum interactions[EB/OL]. (2017-12-19)[2025-05-25].<https://doi.org/10.48550/arXiv.1706.08566>.

[7] GASTEIGER J, GROB J, GÜNNEMANN S. Directional message passing for molecular graphs[EB/OL]. (2022-04-05)[2025-04-23].<https://doi.org/10.48550/arXiv.2003.03123>.

[8] YANG Z D, WANG X, LI Y F, et al. Efficient equivariant model for machine learning interatomic potentials[J/OL]. NPJ computational materials, 2025[2025-08-30].<https://www.nature.com/articles/s41524-025-01535-3>.

[9] HALGREN T A. Merck molecular force field. I. basis, form, scope, parameterization, and performance of MMFF94[J]. Journal of computational chemistry, 1996, 17(5-6): 490-519.

[10] BATZNER S, SCHWIEDRZIK L, SMIDT T E, et al. E (3)-equivariant graph neural networks for data-efficient and accurate interatomic potentials[J]. Nature communications, 2022, 13(1): 2453.

[11] SCHÜTT K T, UNKE O T, GASTEGGER M. Equivariant message passing for the prediction of tensorial properties and molecular spectra[EB/OL]. (2021-06-07)[2025-05-25].<https://doi.org/10.48550/arXiv.2102.03150>.

基于多种策略改进的小龙虾优化算法

徐 勇¹ 赵文贺¹
XU Yong ZHAO Wenhe

摘 要

针对传统小龙虾优化算法易早熟收敛、全局搜索能力弱及寻优精度不足等问题,文章创新性地提出了一种融合多种优化策略,对小龙虾优化算法加以改进的方法。首先,采用 Logistic-tent 混沌映射机制来完成种群初始位置的设定,有效提升种群初始位置分布的随机性;其次,使用及时信息同步反向学习机制来更新个体位置,加速搜索效率并提高解的质量;最后,对最优位置进行 Nelder-Mead 单纯形法扰动,增强了算法局部开发的能力。基于 CEC2020 部分测试集进行验证,并与其他群体智能优化算法进行对比,实验结果表明改进的小龙虾优化算法(ICOA)的性能有显著提高。

关键词

小龙虾优化算法; Logistic-tent 混沌映射; 反向学习; Nelder-Mead 单纯形法

doi: 10.3969/j.issn.1672-9528.2025.10.008

0 引言

近年来,群智能算法^[1]凭借其鲁棒性强、寻优效率高等优势快速发展,诸多学者不断开发新的元启发式算法以应对各类问题。例如, Jia 等人^[2]提出了一种新颖的群智能优化算法——小龙虾优化算法(COA),是一种模拟小龙虾避

暑、竞争和觅食行为的元启发式优化算法,在工程优化及路径规划等领域展现出巨大潜力,但仍然存在早熟收敛、全局搜索能力不足等缺陷。为进一步提升算法的性能,国内外学者对此也提出了相应的改进方法,李宏宇等人^[3]通过混沌映射和精英策略优化种群分布及解空间探索,并设计维度差异进食策略以提升精度;易锌鑫等人^[4]通过引入 Tent-Logistic-Cosine 混沌映射优化种群初始化,采用非线性收敛因子加速

1. 吉林建筑大学电气与计算机学院 吉林长春 130119

[12] MUSAELIAN A, BATZNER S, JOHANSSON A, et al. Learning local equivariant representations for large-scale atomistic dynamics[J/OL]. Nature communications, 2023[2025-05-13].<https://www.nature.com/articles/s41467-023-36329-y>.

[13] FUCHS F, WORRALL D, FISCHER V, et al. SE (3)-transformers: 3D roto-translation equivariant attention networks[J]. Advances in neural information processing systems, 2020, 33: 1970-1981.

[14] UNKE O T, CHMIELA S, GASTEGGER M, et al. SpookyNet: learning force fields with electronic degrees of freedom and nonlocal effects[J]. Nature communications, 2021, 12(1): 7273.

[15] THÖLKE P, DE FABRITIIS G. TorchMD-Net: equivariant transformers for neural network based molecular potentials[EB/OL].(2022-04-23)[2025-04-23].<https://doi.org/10.48550/arXiv.2202.02541>.

[16] VASWANI A, SHAZEER N, PARMAR N, et al. Attention is all you need[EB/OL].(2023-08-02)[2025-06-12].<https://doi.org/10.48550/arXiv.1706.03762>.

[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.

[18] CHRISTENSEN A S, VON LILIENFELD O A. On the role of gradients for machine learning of molecular energies and forces[J]. Machine learning: science and technology, 2020, 1(4): 45018.

[19] DEVEREUX C, SMITH J S, HUDDLESTON K K, et al. Extending the applicability of the ANI deep learning molecular potential to sulfur and halogens[J]. Journal of chemical theory and computation, 2020, 16(7): 4192-4202.

【作者简介】

郑景峰(1999—),男,山东德州人,硕士研究生,研究方向:计算机应用技术。

(收稿日期: 2025-05-05 修回日期: 2025-10-14)