

# 晶体材料建模中的TFN与不变/等变网络方法

## TFN等架构下的周期性边区分

- **A geometric-information-enhanced crystal graph network for predicting properties of materials** (Cheng 等, Comm. Materials, 2021): 该工作提出了GeoCGNN模型。在构建晶体图时, 它为每对原子在周期复制单元内建立多条有向边 (最多取12个最近邻), 并将每条边的实际位移向量 $\vec{r}_{ij,k}$ 作为特征输入<sup>①</sup>。这样, 模型能够区分 $(i,j,R1)$ 和 $(i,j,R2)$ 等不同周期胞内复制造成的边 (同一原子对的不同平移向量对应的边), 相当于采用了利用晶胞平移方向来区分周期性邻居边的思路<sup>①</sup>。
- **Periodic Graph Transformers for Crystal Material Property Prediction** (Zhao 等, NeurIPS, 2022): 作者提出了Matformer模型, 通过向晶体图中添加“自连接”边来显式编码晶胞基矢信息<sup>②</sup>。具体做法是为每个原子添加6条自连接边, 分别对应晶胞三个基矢 $\ell_1, \ell_2, \ell_3$ 及其组合的长度, 这些边将晶胞周期性结构作为不变图模式引入模型<sup>②</sup>。这种周期性模式编码使模型区别了传统有限分子图无法捕获的晶体重复结构 (采用了显式周期性编码的思路)<sup>②</sup>。
- **Neural Equivariant Interatomic Potential (NequIP)** (Batzner 等, Nature Comm., 2022): 这是一种基于E(3)-等变卷积的原子势能模型<sup>③</sup>。虽然原文侧重于能量守恒等物理约束, 但其开源实现 (例如KUSP部署示例) 支持将晶胞平移信息输入网络: 输入字典包括 `edge_cell_shift` 字段, 为每条边指定晶胞平移向量<sup>④</sup>。这一实现细节表明, NequIP框架可以利用晶胞平移向量来区分同一原子对在不同周期图像下的连边 (采用了区分周期邻居边的做法)。

## 串联不变与等变网络的研究

- **A Materials Foundation Model via Hybrid Invariant-Equivariant Architectures (HIENet)** (Kwak 等, arXiv 2025): 该工作提出了一种混合不变-等变的图神经网络模型, 如图2所示先使用一个不变消息传递层, 再串联多个等变消息传递层<sup>⑤⑥</sup>。具体而言, 模型先通过不变图注意力层更新原子特征, 然后将输出传递给若干等变卷积层继续提炼信息。实验表明, 这种串联设计的架构 (首先不变再等变) 显著增强了模型的表达能力<sup>⑤⑥</sup>。
- **Equivariant Message-Passing Neural Network (EMPNN)** (Klipfel 等, arXiv 2024): 该模型针对晶体结构提出了带周期性边界条件的等变MPNN, 用于学习晶格变形。在其设计中, 作者提到EMPNN结合了不变和等变特征, 用以同时预测晶体的等变和不变属性<sup>⑦</sup>。虽然EMPNN主体是等变消息传递, 但它“结合了不变和等变特征”的描述表明模型在输出阶段融合了两者的信息, 体现出类似混合思路<sup>⑦</sup>。

参考文献: GeoCGNN<sup>①</sup>; Matformer<sup>②</sup>; NequIP<sup>③④</sup>; HIENet<sup>⑤⑥</sup>; EMPNN<sup>⑦</sup>。

---

<sup>①</sup> A geometric-information-enhanced crystal graph network for predicting properties of materials | Communications Materials

[https://www.nature.com/articles/s43246-021-00194-3?error=cookies\\_not\\_supported&code=1d4a1faa-784c-476f-a76e-441ceba644d2](https://www.nature.com/articles/s43246-021-00194-3?error=cookies_not_supported&code=1d4a1faa-784c-476f-a76e-441ceba644d2)

<sup>②</sup> proceedings.neurips.cc

[https://proceedings.neurips.cc/paper\\_files/paper/2022/file/6145c70a4a4bf353a31ac5496a72a72d-Paper-Conference.pdf](https://proceedings.neurips.cc/paper_files/paper/2022/file/6145c70a4a4bf353a31ac5496a72a72d-Paper-Conference.pdf)

3 E(3)-equivariant graph neural networks for data-efficient and accurate interatomic potentials | Nature Communications

[https://www.nature.com/articles/s41467-022-29939-5?error=cookies\\_not\\_supported&code=fc5bb4a9-8356-4953-b888-72629542f7dd](https://www.nature.com/articles/s41467-022-29939-5?error=cookies_not_supported&code=fc5bb4a9-8356-4953-b888-72629542f7dd)

4 openreview.net

<https://openreview.net/pdf?id=lQAnpCF7nq>

5 6 A Materials Foundation Model via Hybrid Invariant-Equivariant Architectures

<https://arxiv.org/html/2503.05771v2>

7 Equivariant Graph Neural Networks for Prediction of Tensor Material Properties of Crystals

<https://arxiv.org/html/2406.03563v1>