1. 自监督学习的进展

参考论文《CrysXPP: An explainable property predictor for crystalline materials》，论文使用的是从MP上下载下来的无机晶体数据，我这边现在把丹麦提供的数据集处理成它的代码需要的格式，然后进行训练，想看看结果怎么样？

能猜到结果会有问题，因为晶体图神经网络存在一个问题就是很难捕捉全局信息，这一点应该可以通过拓扑神经网络解决。

**现在的问题是COFs数据集中每一个COFs都太大了，服务器的显存直接爆了，前两天准备考试定位问题在模型那块的代码有问题，下周的工作重心就是修复这个问题，让代码跑起来。**

1. 数据集

这部分属于今天额外添加的任务，国外有一个叫做QMOF的数据库，我们想参考一下它，然后设计一下我们的COFs应该怎么计算。因为**其中涉及到一个问题，QMOF中过滤了所有原子数量大于300的MOFs，而我们现在使用的COFs的数据集基本上都达到了六七百的原子数，现在需要检查一下文章做筛选所留下来的MOFs是超胞原子数小于300，还是原胞原子数小于300。**