

Informática de materiales en el estudio de propiedades físicas de nanotubos de carbono Materials informatics in the study of physical properties of carbon nanotubes.

Luis Enrique Vivanco-Benavides ^a, Cecilia Mercado-Zúñiga ^b, María Teresa Torres-Mancera ^c, María Yesenia Díaz-Cárdenas ^d

^a TecNM-Tecnológico de Estudios Superiores de Coacalco, División de Ingeniería en Sistemas Computacionales, 55700, Coacalco, Estado de México, México

^b TecNM-Tecnológico de Estudios Superiores de Coacalco, Subdirección de Estudios Profesionales C, División de Ingeniería en Materiales, 55700, Coacalco, Estado de México, México

^c TecNM-Tecnológico de Estudios Superiores de Coacalco, Subdirección de Estudios Profesionales C, División de Ingeniería Química, 55700, Coacalco, Estado de México, México

^d TecNM-Tecnológico de Estudios Superiores de Coacalco, División de Ingeniería Química, 55700, Coacalco, Estado de México, México

Resumen

La informática de materiales (IM) constituye un nuevo paradigma en el estudio de nanomateriales, donde enfoques de aprendizaje automático (AA) se implementan en la nanotecnología. La IM es una poderosa herramienta en el estudio de nanotubos de carbono (NTC), los cuales poseen propiedades físicas excepcionales, llevándolos a ser utilizados en óptica, química, informática y medicina, entre otras áreas. Este trabajo describe las investigaciones más recientes en IM aplicado a los NTC. Se explican detalladamente los algoritmos de AA utilizados en el estudio de NTC, tales como redes neuronales artificiales, árboles de decisión y máquinas de vectores de soporte. Asimismo, se exponen los estudios donde enfoques de simulación computacional han sido útiles para desarrollar modelos predictivos de propiedades y comportamientos de NTC. Se identifican preguntas de investigación abiertas en el análisis de propiedades físicas como la conductividad térmica y los modos vibratorios de NTC, donde la IM podría apoyar para su mayor comprensión, ayudando en el desarrollo de nanosensores. Finalmente, la IM puede ayudar en reducir costos de tiempo y recursos en la caracterización de propiedades físicas de nanomateriales.

Palabras clave: Aprendizaje automático, inteligencia artificial, nanotecnología, nanoestructuras base carbono

Abstract

Materials informatics (MI) constitutes a new paradigm in the study of nanomaterials, where machine learning (ML) approaches are implemented in nanotechnology. IM is a powerful tool in the study of carbon nanotubes (CNTs), which have exceptional physical properties, leading them to be used in optics, chemistry, computing, and medicine, among other areas. This work describes the most recent research in IM applied to CNTs. The ML algorithms used in the NTC study, such as artificial neural networks, decision trees, and support vector machines, are explained in detail. Likewise, studies are presented where computational simulation approaches have been useful in developing predictive models of CNT properties and behaviors. Open research questions are identified in the analysis of physical properties such as thermal conductivity and vibrational modes of CNT, where IM could support their greater understanding, helping in the development of nanosensors. Finally, IM can help in reducing time and resource costs in the characterization of the physical properties of nanomaterials.

Keywords: Machine learning, artificial intelligence, nanotechnology, carbon-based nanostructures

*Autor para la correspondencia: enrique.sic@tesco.edu.mx

Correo electrónico: enrique.sic@tesco.edu.mx (Luis Enrique Vivanco-Benavides), cecilia@tesco.edu.mx (Cecilia Mercado Zúñiga), teresa@tesco.edu.mx (María Teresa Torres Mancera), maria.dc@tesco.edu.mx (María Yesenia Díaz Cárdenas). Esta área se llena cuando el manuscrito se aceptado con los nombres completos y correos de todos los autores.

Historial del manuscrito: recibido el 30/08/2024 última versión-revisada recibida el 20/09/2024, aceptado el 22/09/2024, en línea (postprint) desde el 15/11/2024, publicado el 15/11/2024. DOI: <https://doi.org/10.5281/zenodo.14193613>



Figura 1: Modelado de un NTCPS mediante el software de simulación Nanotube Modeler.

1. Introducción

Los nanotubos de carbono (NTC) son nanoestructuras cilíndricas únicas, que poseen propiedades excepcionales debido a su morfología (Volder et al., 2013). Su alta resistencia y baja densidad los convierte en unas nanoestructuras prometedoras para su aplicación en diferentes áreas, por lo cual el comprender sus propiedades es sustancial. Existen dos categorías de NTC: los de pared simple (NTCPS), que poseen una sola capa de grafeno enrollada sobre sí misma, y los de pared múltiple (NTCPM), conformados en múltiples capas concéntricas de átomos de carbono dispuestas en forma cilíndrica (Mendoza-Cachú et al., 2018). Los NTCPS poseen una conductividad eléctrica comparable a la del cobre, lo cual los convierte en candidatos ideales para su uso en dispositivos electrónicos a nanoescala, como transistores y sensores. Además, tienen propiedades ópticas que les permite absorber y emitir luz en una amplia gama de longitudes de onda, lo que los hace valiosos en aplicaciones de detección y diagnóstico (Zawadzka et al., 2019). Los NTCPM muestran una resistencia mecánica significativa además de permitir la transferencia de tensiones y la adhesión de otras nanopartículas en su estructura. Estas características les permite ser utilizados en pantallas táctiles, dispositivos de almacenamiento de energía, capacitores y como componentes en dispositivos electrónicos y eléctricos. Otras aplicaciones importantes de los NTCPM se observan en la catálisis, incluida la mejora de reacciones químicas y la producción de hidrógeno. También se investigan como componentes en celdas solares y supercondensadores. Las Figuras 1-2 representan gráficamente un NTCPS y NTCPM respectivamente.

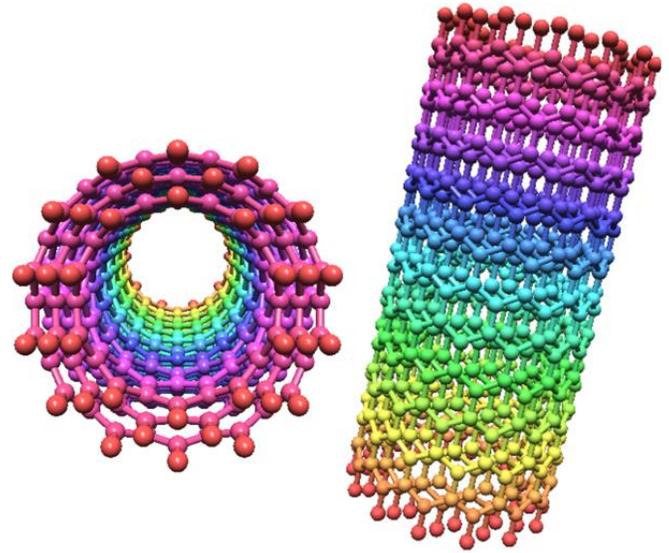
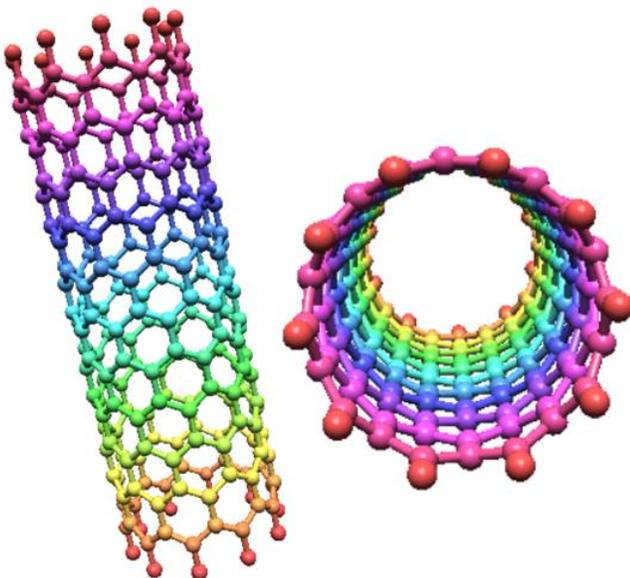


Figura 2: Modelado de un NTCPM mediante el software de simulación Nanotube Modeler.

Debido a sus propiedades y características, los NTC han marcado un antes y un después en el desarrollo de la nanotecnología. A medida que este campo avanza, se buscan métodos más eficientes para el modelado de nanomateriales como los NTC, de forma que se reduzcan costos, así como tiempos de experimentación y desarrollo. Campos como la inteligencia artificial (IA) tienen el potencial de ser la base para comprender a mayor profundidad las propiedades, la morfología y el comportamiento de materiales en a nanoescala. Tal relevancia ha mostrado la IA en la nanotecnología que ha surgido la informática de materiales (IM), área del conocimiento donde enfoques de IA y ciencia de datos interactúan con diferentes subáreas de ciencia de materiales para el estudio, diseño y descubrimiento de materiales (Agrawal & Choudhary, 2016).



La IM ha ayudado a mejorar el aprovechamiento de los datos experimentales, lo cual ha sido un problema que hasta hace poco no se había buscado atender seriamente, sobre todo en los resultados de las técnicas de caracterización, como por ejemplo en la espectroscopia Raman donde la mayor parte del espectro no es aprovechada y podría contener información estructural importante. Esta omisión probablemente se deba a las grandes cantidades de datos generados en los experimentos, a los diferentes formatos en los que estos se presentan y a los extensos repositorios donde pueden concentrarse, además de la alta dimensionalidad que pueden llegar a poseer. Esto representa uno de los desafíos más importantes para la implementación de enfoques computacionales en campos como la nanotecnología. Es aquí donde el descubrimiento de conocimiento en bases de datos o minería de datos, un campo interdisciplinario que fusiona ideas de estadística, aprendizaje automático (AA), bases de datos y computación paralela y distribuida, proporciona una

herramienta única para integrar información científica para el descubrimiento de materiales (Rajan, 2013). La Figura 3 condensa las principales funcionalidades de la IM.



Figura 3: Funcionalidades de la informática de materiales.

En esta revisión, se presentan los últimos avances de la IM en el estudio de las propiedades de los NTC, sus aplicaciones y también, se identifican las preguntas de investigación abiertas existentes en este fascinante campo.

2. Materiales y Métodos

Los artículos seleccionados para esta revisión de literatura corresponden a investigaciones de impacto internacional, publicadas en revistas clasificadas como Journal Citation Report (JCR), de áreas como nanotecnología, ciencia de materiales, química, física, y multidisciplinarias. Dichas revistas pertenecen a editoriales como IOP, Springer y Elsevier.

Los trabajos relacionados con el tema principal de esta investigación son recientes, no mayores a seis años de antigüedad, por lo cual se mantiene la vigencia de las preguntas de investigación abiertas, así como la importancia de la IM en la actualidad. Se excluyeron aquellos manuscritos con poca relevancia en el tema, y cuyas conclusiones eran poco claras o incompletas.

3. Resultados

En la actualidad, los datos poseen un valor trascendental puesto que con ellos es posible el descubrimiento de conocimiento, y son la base para nuevos desarrollos tecnológicos y científicos. En áreas de la ingeniería como la ciencia de materiales, los datos pueden generarse teóricamente mediante métodos computacionales de simulación, y experimentalmente a través de las técnicas de caracterización. Estas últimas permiten extraer datos relacionados con la estructura, propiedades y comportamiento de los nanomateriales (Abad et al., 2017; Scarisoreanu et al., 2019). Los datos se pueden relacionar con factores como son la presión y temperatura (Takdastan et al., 2019), condiciones

de síntesis (Zhu et al., 2019), interacción de un nanomaterial con otras nanopartículas (Karimipour et al., 2019) y respuestas de un nanomaterial en entornos diversos (Ahmadi Azghandi et al., 2017), por mencionar algunos. Los algoritmos de IA y AA utilizan datos como los antes mencionados para lograr un entrenamiento con el cual sea posible generar un modelo capaz de predecir respuestas de un nanomaterial, así como clasificar sus características, logrando un análisis profundo que no sería posible con técnicas de caracterización tradicionales.

Una consideración importante para el rendimiento del AA es la correcta representación de los datos. Es necesario que los datos experimentales sean transformados en valores que los algoritmos inteligentes puedan entender, además de cuidar que esos valores sean relevantes para la problemática de interés. Una correcta preparación de los datos además de la eliminación de valores erróneos es crucial para que el AA obtenga resultados útiles (Pedro, 2012).

3.1 Algoritmos de aprendizaje automático

Diferentes técnicas basadas en IA son utilizadas en el estudio de las nanoestructuras base carbono. Uno de los métodos más utilizados son las redes neuronales artificiales (RNA), las cuales han dado lugar a un gran avance en campos como el pronóstico del clima (Aggarwal, 2015), diagnóstico médico (Cleophas & Zwinderman, 2020), reconocimiento de patrones (Isayev et al., 2019) y recientemente en el modelado de nanomateriales (Cheng et al., 2021). Las RNA están formadas por diferentes capas de neuronas, donde las neuronas de cada capa están completamente conectadas con las neuronas de la siguiente capa. Cada neurona, al recibir suficiente información de las neuronas de su capa anterior, enviará una salida a las neuronas de la siguiente capa. Estos algoritmos son muy efectivos debido a sus importantes capacidades de aprendizaje, generalización y clasificación (Aggarwal, 2018). La capa de entrada contiene d nodos que transmiten las d características $\bar{X} = [x_1 \dots x_d]$ con pesos de $\bar{W} = [w_1 \dots w_d]$ a un nodo de salida. La capa de entrada no realiza ningún cálculo por sí misma. La función lineal $\bar{W} \cdot \bar{X} = \sum_{i=1}^d w_i x_i$ se calcula en el nodo de salida. Posteriormente, se utiliza el signo de este valor real para predecir la variable dependiente de \bar{X} . Por lo tanto, la predicción \hat{y} se calcula como se muestra a continuación (Aggarwal, 2018):

$$\hat{y} = \text{sign} \{ \bar{W} \cdot \bar{X} \} = \text{sign} \{ \sum_{j=1}^d w_j x_j \} \quad (1)$$

La función de signo aporta un valor real a $+1$ o -1 , apropiado para la clasificación binaria. Tenga en cuenta el circunflejo en la parte superior de la variable y para indicar un valor predicho en lugar de un valor observado. Por lo tanto, el error de predicción es $E(\bar{X}) = y - \hat{y}$, que es uno de los valores extraídos del conjunto $\{-2, 0, +2\}$. En los casos en que el valor del error $E(\bar{X})$ es distinto de cero, los pesos en

la RNA deben actualizarse en la dirección (negativa) del gradiente de error.

Una familia de algoritmos de AA que resaltan por su efectividad son los árboles de decisión (AD). Este método compara un atributo numérico o nominal con un conjunto de valores posibles, segmentando a partir de estos hasta encontrar todas las relaciones existentes. Los AD son utilizados como un medio para la representación del conocimiento, además de ser excelentes clasificadores (Cheng et al., 2021). Se ha comprobado su efectividad para la resolución de problemas de optimización combinatoria, geometría computacional y pronóstico de eventos, por nombrar algunos (Hastie et al., 2009). Cuando los AD están orientados a la regresión, su estructura consta de p entradas y una respuesta, para cada una de las N observaciones: es decir, (x_i, y_i) para $i = 1, 2, \dots, N$, con $x_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{ip})$. El algoritmo debe decidir automáticamente las variables de división y los puntos de división y qué topología debe tener el árbol. Si hay una partición en M regiones R_1, R_2, \dots, R_M , y la respuesta se modela como una constante c_m en cada región, entonces (Lin & Fan, 2019):

$$f(x) = \sum_{m=1}^M c_m I(x \in R_m) \quad (2)$$

Si el objetivo es un resultado de clasificación tomando valores $1, 2, \dots, K$, los únicos cambios necesarios en el algoritmo del árbol pertenecen a los criterios para dividir nodos y podar el árbol. En un nodo m , que representa la región R_m con N_m observaciones, sea:

$$\hat{p}_{mk} = \frac{1}{N_m} \sum_{x_i \in R_m} I(y_i = k) \quad (3)$$

a proporción de observaciones de clase k en el nodo m y las observaciones en el nodo m se clasifican en clase $k(m) = \arg \max_k \hat{p}_{mk}$, la clase mayoritaria en el nodo m .

Otro algoritmo de gran importancia son las máquinas de vectores de soporte (MVS), las cuales constituyen un método de optimización no paramétrico de clasificación y regresión donde el espacio de entrada está definido por el dominio de características, ajustándose posteriormente a través de la optimización de vectores, buscando un hiperplano de separación entre clases de datos etiquetados (Ziari et al., 2018). El hiperplano es un subespacio plano de dimensión $p-1$ en un espacio de dimensión p , y la distancia perpendicular más pequeña desde cada entrada en la muestra de entrenamiento (los vectores de soporte) al hiperplano es el margen. La MVS busca el hiperplano con el margen máximo entre todos los hiperplanos que separan las clases hasta encontrar el mejor ajuste. El problema de maximización se presenta de la siguiente manera:

$$\max_{\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_n} M \quad (4)$$

$$\text{sujeto a } \sum_{i=1}^n \beta_i^2 = 1 \quad (5)$$

$$y_j (\beta_0 + \beta_1 x_{j1} + \beta_2 x_{j2} + \dots + \beta_n x_{jn}) \geq M \quad \forall j = 1, 2, \dots, m \quad (6)$$

dónde M es el margen, $x_1, \dots, x_m \in \mathbb{R}^n$ y y_1, \dots, y_m son las etiquetas de clase.

3.2 Aprendizaje automático en el estudio de nanotubos de carbono

Los enfoques de IA adoptados en IM han demostrado una enorme capacidad en el análisis predictivo de propiedades físicas de NTC. La predicción de parámetros físicos y químicos en los nanomateriales es un desafío donde la IM ha tenido procesos relevantes (Unke et al., 2021). Ya se han presentado investigaciones de índole predictivo en problemáticas de la nanotecnología y ciencia de materiales con resultados fascinantes (Ni et al., 2021). Se han desarrollado modelos predictivos para estudiar la adsorción de hidrógeno en NTCPS con niveles de error sumamente bajos (Nasruddin et al., 2018). Las técnicas de IM ayudan a la predicción de propiedades del electrocatalizador en nanomallas de grafeno (Xia et al., 2022). Afrand et al. (2016) diseñaron una RNA para pronosticar la viscosidad relativa en NTCPM en nanofluidos, demostrando ser un método óptimo para esta tarea.

Los modelos de AA ayudan a estudiar a profundidad propiedades físicas y estructurales de los NTC. Este tipo de modelos ha servido para predecir coordenadas atómicas de NTC con una precisión del 99% (Acı y Avcı, 2016). Determinar los índices quirales de NTC también ha sido posible gracias al AA (Förster et al., 2020). Un modelo de RNA se utilizó para lograr una caracterización acelerada de NTC a partir de imágenes Raman (Kajendirarajah et al., 2020). Los AD evidenciaron su utilidad al buscar la calibración de sensores electrónicos basados en NTC (Bian et al., 2021). Asimismo, las MVS presentaron un alto nivel de precisión en la predicción de la eliminación de un fármaco al magnetizar NTCPM en una solución acuosa (Yousefi et al., 2021). Un caso interesante fue el de Baghban et al. (2019), quienes ocuparon modelos de RNA y MVS para estudiar la concentración volumétrica de intercambiadores de calor de bobina en presencia de NTC. De manera similar, se ha utilizado modelos de RNA y MVS para predecir la conductividad térmica de NTCPM con altos niveles de eficiencia (Karimipour et al., 2019).

La simulación computacional también ofrece un conjunto de herramientas que pueden potenciar el estudio de los NTC. La representación de datos teóricos y experimentales en algoritmos de IA es un importante hito en la IM (Hart et al., 2021). Las simulaciones en dinámica molecular han comenzado a tomar relevancia en varias áreas de la nanotecnología (Husch et al., 2021). Enfoques de simulación y de IA prometen ser un pilar de progreso para la caracterización de estructuras de baja dimensión (Poltavsky &

Tkatchenko, 2021). Farahbakhsh et al. (2019) propusieron un modelo de simulación para análisis de comportamiento de atributos en NTCPM utilizando algoritmos de IA. También se ha logrado la detección virtual de nanopartículas y el desarrollo de nuevos nanodescriptores universales mediante IA (Yan et al., 2019). En otro contexto, fue posible modelar mediante simulación baterías lo cual redujo la carga computacional en varios ordenes de magnitud (Wu et al., 2018). La combinación de la simulación por computadora y la IA presentan una utilidad altamente significativa para la comprensión del comportamiento de los NTC y otros nanomateriales.

4. Discusión

Los estudios respecto a las propiedades físicas de los NTC y otros nanomateriales mediante IA representan un nuevo paradigma de caracterización. Sin embargo, aún quedan preguntas de investigación abiertas en estos campos.

Un aspecto destacado es la capacidad de la IM para impulsar el diseño y la optimización de NTC con propiedades específicas. La predicción de propiedades a partir de la estructura atómica ha allanado el camino para la creación de NTC con características personalizadas para aplicaciones específicas. Desde la búsqueda de estructuras que maximicen la conductividad térmica, mecánica y eléctrica hasta la identificación de nanotubos con propiedades de absorción ideales para aplicaciones de sensores, la IM ha permitido un enfoque más racional en el diseño de materiales a nanoescala. Se ha estudiado mediante enfoques de simulación y AA los efectos de la funcionalización de NTC en las propiedades mecánicas del vidrio metálico, obteniendo información acerca de la conductividad térmica de los NTC cuando interactúa con este material (Sharma et al., 2020). Es necesario comparar los resultados de los enfoques de dinámica molecular con los generados por AA para verificar si es posible que se complementen entre sí o saber cuál es más eficiente para estudiar las propiedades térmicas.

El estudio de las propiedades de los NTC necesita procesos de experimentación que conlleva importantes implicaciones de tiempo y recursos. El uso de modelos de simulación y AA ayudaría a reducir estos problemas sin sacrificar la calidad experimental. Con la ayuda de un modelo de AA, fue posible pronosticar la conductividad eléctrica de NTC, además, dicho modelo puede usarse para cualquier compuesto de polímero con NTC (Matos et al., 2019). Una de las preguntas de investigación abierta es la relacionada con las propiedades mecánicas de los NTC, y con el análisis de sus modos vibratorios mediante AA. Se han utilizado cálculos basados en interacciones de Van der Waals para predecir comportamientos vibratorios en NTCPM (Jiang & Wang, 2017), además, se han implementado simulaciones de dinámica molecular para estudiar el comportamiento vibratorio de NTCPS en interacción con otras nanopartículas (Ajori et al., 2018). Faltaría desarrollar modelos predictivos

de AA con altos niveles de eficiencia para lograr comprender más a fondo las propiedades vibratorias de los NTC en diversos entornos y en interacción con otros nanomateriales. Al hacerlo, sería posible mejorar el desarrollo de nanosensores con aplicaciones en diferentes áreas, donde la comprensión del comportamiento vibratorio de los NTC es crucial para estos desarrollos tecnológicos.

A pesar de los avances significativos, la aplicación de la IM en el estudio de propiedades físicas de los NTC no está exenta de desafíos. La precisión de los modelos y la validez de los resultados continúan siendo cuestiones críticas. Los datos experimentales y teóricos utilizados para entrenar los modelos deben ser rigurosamente seleccionados y validados para garantizar la confiabilidad de las predicciones. Además, la naturaleza multidimensional y compleja de las propiedades de los NTC requiere modelos más sofisticados y la consideración de múltiples factores interdependientes.

5. Conclusiones

La IM ha demostrado ser una herramienta invaluable para caracterizar propiedades físicas de los NTC con un nivel de detalle sin precedentes. Las técnicas de simulación y modelado con IA han permitido analizar propiedades como la conductividad eléctrica, la conductividad térmica y la resistencia mecánica en función de diversos parámetros, como la estructura química y la quiralidad de los NTC. Esto ha permitido una comprensión más profunda de cómo estos factores influyen en las propiedades macroscópicas y ha revelado relaciones que pueden no ser evidentes en los enfoques experimentales tradicionales.

Es posible destacar que las consideraciones desde la perspectiva de los métodos computacionales de la IM deben ser abordadas. Asimismo, el rendimiento de los algoritmos de IA puede considerarse sumamente útil para los cálculos teóricos, ofreciendo oportunidades atractivas para la investigación experimental. Es importante destacar que el éxito continuo de la informática de materiales en el estudio de propiedades físicas de los NTC requerirá una colaboración interdisciplinaria sólida. La cooperación entre expertos en física de materiales, química, informática y otras disciplinas es esencial para garantizar la precisión, relevancia y aplicabilidad de los resultados.

A pesar de los desafíos, el potencial de la IM en el estudio de propiedades físicas de los NTC es innegable. A medida que los métodos computacionales y las capacidades de modelado continúan mejorando, es posible anticipar un aumento en la precisión y la aplicabilidad de los resultados de la IM en este campo. Esto puede llevar a avances notables en áreas como la electrónica a nanoescala, los materiales compuestos avanzados y la nanomedicina.

6. Referencias

Abad, S. N. K., Ganjeh, E., Zolriasatein, A., Shabani-Nia, F., & Siadati, M.

- H. (2017). Predicting carbon nanotube diameter using artificial neural network along with characterization and field emission measurement. *Iranian Journal of Science and Technology, Transaction A: Science*, 41(1), 151–163. <https://doi.org/10.1007/s40995-017-0198-9>
- Acı, M., & Avcı, M. (2016). Artificial neural network approach for atomic coordinate prediction of carbon nanotubes. *Applied Physics A: Materials Science and Processing*, 122(7). <https://doi.org/10.1007/s00339-016-0153-1>
- Afrand, M., Ahmadi Nadooshan, A., Hassani, M., Yarmand, H., & Dahari, M. (2016). Predicting the viscosity of multi-walled carbon nanotubes/water nanofluid by developing an optimal artificial neural network based on experimental data. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 77, 49–53. <https://doi.org/10.1016/j.icheatmasstransfer.2016.07.008>
- Aggarwal, C. C. (2015). Data mining: The textbook. In *Springer* (Vol. 1, Issue 3). Springer US. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-14142-8>
- Aggarwal, C. C. (2018). Neural Networks and Deep Learning. In *Neural Networks and Deep Learning*. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-94463-0>
- Agrawal, A., & Choudhary, A. (2016). Perspective: Materials informatics and big data: Realization of the “fourth paradigm” of science in materials science. *APL Materials*, 4(5), 1–10. <https://doi.org/10.1063/1.4946894>
- Ahmadi Azqhandi, M. H., Ghaedi, M., Yousefi, F., & Jamshidi, M. (2017). Application of random forest, radial basis function neural networks and central composite design for modeling and/or optimization of the ultrasonic assisted adsorption of brilliant green on ZnS-NP-AC. *Journal of Colloid and Interface Science*, 505, 278–292. <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2017.05.098>
- Ajori, S., Parsapour, H., & Ansari, R. (2018). Vibrational analysis of single-walled carbon nanotubes filled with gold nanowires using MD simulations. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, 104(April), 327–332. <https://doi.org/10.1016/j.physe.2018.08.005>
- Baghban, A., Kahani, M., Nazari, M. A., Ahmadi, M. H., & Yan, W. M. (2019). Sensitivity analysis and application of machine learning methods to predict the heat transfer performance of CNT/water nanofluid flows through coils. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 128, 825–835. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2018.09.041>
- Bian, L., Wang, Z., White, D. L., & Star, A. (2021). Machine learning-assisted calibration of Hg²⁺ sensors based on carbon nanotube field-effect transistors. *Biosensors and Bioelectronics*, 180(February), 113085. <https://doi.org/10.1016/j.bios.2021.113085>
- Cheng, Y., Wang, T., & Gang, Z. (2021). Artificial intelligence for materials science. In *Springer* (1st ed., Vol. 1, Issue 1). <https://doi.org/https://doi.org/10.1007/978-3-030-68310-8>
- Cleophas, T. J., & Zwinderman, A. H. (2020). Machine learning in medicine - a complete overview. In *Machine Learning in Medicine - A Complete Overview*. <https://doi.org/10.1007/978-3-030-33970-8>
- Farahbakhsh, J., Delnavaz, M., & Vatanpour, V. (2019). Simulation and characterization of novel reverse osmosis membrane prepared by blending polypyrrole coated multiwalled carbon nanotubes for brackish water desalination and antifouling properties using artificial neural networks. *Journal of Membrane Science*, 123–138. <https://doi.org/10.1016/j.memsci.2019.03.050>
- Förster, G. D., Castan, A., Loiseau, A., Nelayah, J., Alloyeau, D., Fossard, F., Bichara, C., & Amara, H. (2020). A deep learning approach for determining the chiral indices of carbon nanotubes from high-resolution transmission electron microscopy images. *Carbon*, 169, 465–474. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2020.06.086>
- Hart, G. L. W., Mueller, T., Toher, C., & Curtarolo, S. (2021). Machine learning for alloys. *Nature Reviews Materials*, 6(8), 730–755. <https://doi.org/10.1038/s41578-021-00340-w>
- Hastie, T., Tibshirani, R., & Friedman, J. (2009). The Elements of Statistical Learning Data mining, Inference and Prediction. In *Springer* (2nd ed.). Springer-Verlag New York. <https://doi.org/10.1007/978-0-387-84858-7>
- Husch, T., Sun, J., Cheng, L., Lee, S. J. R., & Miller, T. F. (2021). Improved accuracy and transferability of molecular-orbital-based machine learning: Organics, transition-metal complexes, non-covalent interactions, and transition states. *Journal of Chemical Physics*, 154(6). <https://doi.org/10.1063/5.0032362>
- Isayev, O., Tropsha, A., & Curtarolo, S. (2019). Materials informatics: Methods, tools and applications. In O. Isayev, A. Tropsha, & S. Curtarolo (Eds.), *Wiley-VCH* (Vol. 1). Wiley-VCH. <https://doi.org/10.1002/9783527802265>
- Jiang, J., & Wang, L. (2017). Timoshenko beam model for vibrational analysis of double-walled carbon nanotubes bridged on substrate. *Current Applied Physics*, 17(12), 1670–1690. <https://doi.org/10.1016/j.cap.2017.09.007>
- Kajendrarajah, U., Olivia Avilés, M., & Lagugné-Labarthe, F. (2020). Deciphering tip-enhanced Raman imaging of carbon nanotubes with deep learning neural networks. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 22(32), 17857–17866. <https://doi.org/10.1039/D0CP02950E>
- Karimipour, A., Bagherzadeh, S. A., Taghipour, A., Abdollahi, A., & Safaei, M. R. (2019). A novel nonlinear regression model of SVR as a substitute for ANN to predict conductivity of MWCNT-CuO/water hybrid nanofluid based on empirical data. *Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications*, 521, 89–97. <https://doi.org/10.1016/j.physa.2019.01.055>
- Lin, C. L., & Fan, C. L. (2019). Evaluation of CART, CHAID, and QUEST algorithms: a case study of construction defects in Taiwan. *Journal of Asian Architecture and Building Engineering*, 18(6), 539–553. <https://doi.org/10.1080/13467581.2019.1696203>
- Matos, M. A. S., Pinho, S. T., & Tagarielli, V. L. (2019). Predictions of the electrical conductivity of composites of polymers and carbon nanotubes by an artificial neural network. *Scripta Materialia*, 166, 117–121. <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2019.03.003>
- Mendoza-Cachú, D., López-Miranda, J. L., Mercado-Zúñiga, C., & Rosas, G. (2018). Functionalization of MWCNTs with Ag-AuNPs by a green method and their catalytic properties. *Diamond and Related Materials*, 84, 26–31. <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2018.03.004>
- Nasruddin, Lestari, M., Supriyadi, & Sholahudin. (2018). Optimization Study of Hydrogen Gas Adsorption on Zig-zag Single-walled Carbon Nanotubes: The Artificial Neural Network Analysis. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 333(1). <https://doi.org/10.1088/1757-899X/333/1/012031>
- Ni, D., Wu, W., Guo, Y., Gong, S., & Wang, Q. (2021). Identifying key parameters for predicting materials with low defect generation efficiency by machine learning. *Computational Materials Science*, 191(February), 110306. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2021.110306>
- Pedro, D. (2012). A Few Useful Things to Know About Machine Learning. *Communications of the ACM*, 55(10), 9–48. <https://doi.org/10.1145/2347736.2347755>
- Poltavsky, I., & Tkatchenko, A. (2021). Machine Learning Force Fields: Recent Advances and Remaining Challenges. *Journal of Physical Chemistry Letters*, 12(28), 6551–6564. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcclett.1c01204>
- Rajan, K. (2013). Materials Informatics: An Introduction. In *Informatics for Materials Science and Engineering: Data-Driven Discovery for Accelerated Experimentation and Application* (pp. 1–16). Elsevier Inc. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-394399-6.00001-1>
- Scarisoreanu, M., Ilie, A., Dutu, E., Badoi, A., Dumitrache, F., Tanasa, E., Mihailescu, C. N., & Mihailescu, I. (2019). Direct nanocrystallite size investigation in microstrained mixed phase TiO₂ nanoparticles by PCA of Raman spectra. *Applied Surface Science*, 470(June 2018), 507–519. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2018.11.122>
- Sharma, S., Tiwari, S. K., & Shakya, S. (2020). Mechanical properties and thermal conductivity of pristine and functionalized carbon nanotube reinforced metallic glass composites: A molecular dynamics approach. *Defence Technology*, xxx. <https://doi.org/10.1016/j.dt.2020.04.004>
- Takdastan, A., Samarbaf, S., Tahmasebi, Y., Alavi, N., & Babaei, A. A. (2019). Alkali modified oak waste residues as a cost-effective adsorbent for enhanced removal of cadmium from water: Isotherm, kinetic, thermodynamic and artificial neural network modeling. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 78, 352–363. <https://doi.org/10.1016/j.jiec.2019.05.034>
- Unke, O. T., Chmiela, S., Sauceda, H. E., Gastegger, M., Poltavsky, I., Schütt, K. T., Tkatchenko, A., & Müller, K. R. (2021). Machine Learning Force Fields. *Chemical Reviews*. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.0c01111>
- Volder, M. F. L., Tawfick, H. S., Baughman, R. H., & Hart, A. J. (2013). Carbon Nanotubes: Present and Future duction, CNT powders have

- already been incorporated in many commercial applications and are now Commercial Applications. *Science*, 339(6119), 535–539. <https://doi.org/10.1126/science.1222453>
- Wu, B., Han, S., Shin, K. G., & Lu, W. (2018). Application of artificial neural networks in design of lithium-ion batteries. *Journal of Power Sources*, 395(April), 128–136. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2018.05.040>
- Xia, W., Hou, Z., Tang, J., Li, J., Chaikittisilp, W., Kim, Y., Muraoka, K., Zhang, H., He, J., Han, B., & Yamauchi, Y. (2022). Materials informatics-guided superior electrocatalyst: A case of pyrolysis-free single-atom coordinated with N-graphene nanomesh. *Nano Energy*, 94(December 2021), 106868. <https://doi.org/10.1016/j.nanoen.2021.106868>
- Yan, X., Sedykh, A., Wang, W., Zhao, X., Yan, B., & Zhu, H. (2019). In silico profiling nanoparticles: Predictive nanomodeling using universal nanodescriptors and various machine learning approaches. *Nanoscale*, 11(17), 8352–8362. <https://doi.org/10.1039/c9nr00844f>
- Yousefi, M., Gholami, M., Oskoei, V., & Akbar, A. (2021). Comparison of LSSVM and RSM in simulating the removal of ciprofloxacin from aqueous solutions using magnetization of functionalized multi-walled carbon nanotubes: Process optimization using GA and RSM techniques. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 9(4), 105677. <https://doi.org/10.1016/j.jece.2021.105677>
- Zawadzka, A., Plóciennik, P., Korcala, A., & Szroeder, P. (2019). Optical properties of chiral single-walled carbon nanotubes thin films. *Optical Materials*, 96(August). <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2019.109295>
- Zhu, X., Wang, X., & Ok, Y. S. (2019). The application of machine learning methods for prediction of metal sorption onto biochars. *Journal of Hazardous Materials*, 378(May), 120727. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2019.06.004>
- Ziari, H., Amini, A., Goli, A., & Mirzaeiyan, D. (2018). Predicting rutting performance of carbon nano tube (CNT) asphalt binders using regression models and neural networks. *Construction and Building Materials*, 160, 415–426. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2017.11.071>