
DeepMind攻克最有价值化学技术

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/16847.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

DeepMind攻克最有价值化学技术。



人工智能预测分子中电子的分布并计算其物理性质。图片来源：DeepMind

英国人工智能公司DeepMind的科学家团队开发了一个机器学习模型，可以通过预测分子中电子的分布来显示分子特征，该模型比现有技术更能准确地计算某些分子性质。相关研究结果发表于12月10日《科学》。

波兰罗兹理工大学计算化学家Katarzyna Pernal说，这篇论文是一篇坚实的作品。但她认为，机器学习模型要想对计算化学家有用，还有很长的路要走。

原则上，材料和分子的结构完全由量子力学决定，特别是由控制电子波函数行为的薛定谔方程决定。这些都是数学上的小工具，用来描述在空间中某个特定位置发现特定电子的概率。论文通讯作者之一、DeepMind物理学家James Kirkpatrick表示，因为所有的电子都相互作用，所以根据这种第一原理计算结构或分子轨道是一场计算上的噩梦，而且只能对最简单的分子（如苯）进行计

算。

研究人员几十年来一直依靠一套称为密度泛函理论（DFT）的技术来预测分子的物理性质。该理论并不试图对单个电子进行建模，而是旨在计算电子负电荷在分子中的总体分布。Kirkpatrick说：DFT研究的是平均电荷密度，所以它不知道单个电子是什么。从这个密度可以很容易地计算出物质的大多数特性。

自20世纪60年代诞生以来，DFT已成为物理科学中应用最广泛的技术之一：2014年《自然》的一项调查发现，在100篇被引用最多的论文中，有12篇是关于DFT的。现代材料属性数据库，如材料项目，在很大程度上由DFT计算组成。

但是这种方法也有局限性。虽然DFT计算比从基本量子理论开始的计算效率要高得多，但它们仍然很麻烦，而且通常需要超级计算机。因此，在过去十年中，理论化学家越来越多地开始进行机器学习实验，特别是研究材料的化学反应性或导热能力等性质。

DeepMind团队可能已经做出了迄今为止最雄心勃勃的尝试，部署AI来计算电子密度，这是DFT计算的最终结果。论文通讯作者之一、DeepMind长期从事DFT研究的理论化学家Aron Cohen表示，这是机器学习的一个理想问题：你知道答案，但不知道你想要应用的公式。

该团队根据1161个薛定谔方程精确解的数据训练了一个神经网络。为了提高准确性，他们还将一些已知的物理定律硬连接到网络中。奥地利维也纳大学材料科学家Anatole von Lilienfeld介绍，随后他们在一组经常用作DFT基准的分子上测试了经过训练的系统，结果令人印象深刻。

von Lilienfeld补充道，机器学习的一个优点是，尽管训练模型需要大量的计算能力，但这一过程只需完成一次。与每次从头开始计算相比，个人预测可以在普通笔记本电脑上完成，大大降低了成本和碳足迹。

该研究作者透露，DeepMind正在向其他人发布他们经过训练的系统。目前，该模型主要适用于分子，而不是材料的晶体结构，但未来的版本也可能适用于材料。（来源：中国科学报辛雨）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1126/science.abj6511>

版权声明：凡本网注明来源：中国科学报、科学网、科学新闻杂志的所有作品，网站转载，请在正文上方注明来源和作者，且不得对内容作实质性改动；微信公众号、头条号等新媒体平台，转载请联系授权。邮箱：shouquan@stimes.cn。

作者：Katarzyna Pernal 来源：《科学》

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://iikx.com)转发