

研究生研发新方法，数分钟筛选99%高性能材料

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/19704.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！

研究生研发新方法，数分钟筛选99%高性能材料。



一种基于深度学习的金属有机框架材料碳捕获性能的端到端的人工智能预测方法一文被选作《化学信息与建模杂志》封面文章 万夕里课题组供图

怎样在数分钟内完成对数十万材料的性能预测，从而寻找出具有优质性能的碳捕获和储存（CCS）金属有机框架材料（MOF）？近日，南京工业大学计算机科学与技术学院副教授万夕里指导的2020级硕士研究生鹿存兴通过一种算法解决了这一问题。

日前，相关研究以一种基于深度学习的金属有机框架材料碳捕获性能的端到端的人工智能预测方法为题，被美国化学学会出版的《化学信息与建模杂志》录用，并被选作当期封面文章刊发。

如何在数量庞大的MOF中找到具有CCS性能优异的MOF是当前学术研究中的难点。金属有机框架材料由于其在气体吸附方面出色的优异性能而被视为实现碳捕获与储存的理想材料，但是MOF的高度可调性导致可生成上百万种不同的MOF。

据万夕里介绍道，鹿存兴阐述了一种基于深度学习的金属有机框架材料碳捕获性能的端到端的人工智能预测方法，这种方法具有两大优点。一是具有深度学习的特性，可以通过不断的自我训练与调节寻找出最优的预测方法；二是其端到端的特性使得无计算机基础的学者可以直接使用。

近年来，学界虽有致力于解决这一问题的研究，但均有部分限制。如分子模拟方法需要消耗大量的计算资源，应对大型数据集时非常低效。此外，该方法既需要构建大量的描述符，又需要很强的先验知识与不断地试错，且需要在特征工程上投入大量时间来获取通过分子模拟的描述符数值。

鹿存兴的计算方法避开了现有计算的耗时耗力的弊端，开发出一种无需构建描述符的端到端的预测方法，仅以晶体学信息文件（CIF）作为输入，通过深度学习来自适应地学习影响性能的高维度的特征，从而对MOF的性能进行快速而精准地预测。

据鹿存兴介绍，他创新性地使用投影的方法，将材料领域中的三维结构转化为计算机可读的二维信息，在结合时下计算机领域深度学习的研究热点后，实现了端到端的性能预测。具体来说就是这种具有自学习能力的计算方法，在每次循环结束时评估自己的预测与真实值的差距，进而通过这个差距调整自身的参数减少差距，多次循环后将误差降到最小，从而实现一个比较准确的拟函数。实验表明，我们的计算方法数分钟内可对几十万MOF进行预测，预测值前12%的MOF中包含了真实高性能材料中的99.3%。这一算法在实际应用中，缩短了1/10的计算时间，即节省计算时间近一个量级。（来源：中国科学报 温才妃 杨芳）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1021/acs.jcim.2c00092>

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：万夕里等 来源：《化学信息与建模杂志》

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://www.iikx.com)转发