

---

# AI助力新材料开发

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/25150.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！**

AI助力新材料开发。英国和美国科学家在两项独立研究中指出，人工智能驱动的平台可以改善发现和合成新无机化合物的速度和精确性。相关研究11月30日分别发表于《自然》。

技术的近期进展已经改进了计算机程序识别新材料的能力。但这个过程面临的阻碍，是学习算法适应与其所学相反的结果的能力，因为新发现本质上需要的是用新的、创造性的方式理解数据的能力。

英国伦敦谷歌深度思维公司的Ekin Cubuk和同事提出了一个计算模型，能够通过大规模主动学习改进材料发现的效率。这个程序使用现有文献训练，生成多样的潜在化合物候选结构，然后通过一系列回合不断改进这些结构。这些模型发现了超过220万稳定结构，将结构稳定预测的精确性提高到80%以上，在预测成分时每100次试验的精确度提高到33%。

加州大学伯克利分校的Gerbrand Ceder和同事开发了一种自动实验室（A-Lab）系统。该系统根据现存科学文献训练，随后结合主动学习，可对拟定化合物创造最多5个初始合成配方。随后，它可以用机器臂执行实验，合成粉末形态的化合物。如果一个配方产量低于50%，A-Lab会调整配方继续实验，在成功达到目标或穷尽所有可能配方后结束。经过17天的连续实验，A-Lab进行了355次实验，产生了58个拟定化合物中的41个（71%）。作者表明，对决策算法做一些小改动，这一成功率还可提高到74%，如果计算技术能得到同样改进，还能进一步提高到78%。

这两项研究展示了通过结合提高计算力和基于现有文献的训练，在使用学习算法辅助发现和合成无机化合物方面的有前景的进展。（来源：中国科学报 冯维维）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41586-023-06734-w>

<https://doi.org/10.1038/s41586-023-06735-9>

作者：Ekin Cubuk 来源：《自然》

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