

使用主动生成图学习调整高熵电催化剂成分的系统与方法

能源和环境

计算机/人工智能/数据处理和信息技术

纳米技术与新材料

节能/发电/管理/储存 (电池)

机会

全球能源危机和气候变化迫切需要发展高效、清洁的能源转换技术。氢析出反应 (HER) 对于水分解和化学储能至关重要，其依赖于高活性且成本效益高的电催化剂。虽然铂和钌等贵金属表现出优异的HER性能，但其稀缺性和高成本推动了对经济替代品的探索。由五种或更多主要元素组成的高熵合金 (HEAs) 因其独特的机械和催化性能，已成为亚纳米尺度上有前景的电催化剂候选材料。然而，优化高熵电催化剂 (HEEC) 的成分极具挑战性，因为其成分空间是巨大且多维的。像从头算模拟这样的传统方法计算成本过高，通常每个成分需要数千次计算。现有的数据驱动方法，包括传统机器学习和图神经网络 (GNNs) 等深度学习模型，要么缺乏处理复杂系统的灵活性，要么需要不切实际的大型数据集。此外，HEEC 空间中大多数成分表现出较差的催化活性，使得穷举采样效率极低。这催生了一个关键需求：需要一个有针对性的、数据高效的框架，能够智能地探索成分空间，快速识别高性能HEEC，而无需巨大的计算开销。

技术

本发明提出了一种新颖的集成系统和方法，将主动学习 (AL) 与深度生成图模型相结合，以高效发现最优的高熵电催化剂成分。核心创新是一个迭代的、闭环的框架，能够战略性地减少所需的密度泛函理论 (DFT) 计算。该系统采用了几个相互关联的模块。基于初始DFT数据集训练的原子图注意力网络 (AGAT) 模型作为一个原子间势函数，其本身尊重物理对称性 (平移、旋转、置换)。该AGAT模型对新的候选成分进行氢吸附自由能 ($\Delta G(H)$) 的高通量预测，这是HER活性的关键描述符。然后，一个条件生成对抗网络 (CGAN) 模块以这些预测的 $\Delta G(H)$ 值为条件，生成新颖的、假设的成分，这些成分偏向于与优异HER性能 (接近 $\Delta G(H) = 0 \text{ eV}$) 相关的成分空间区域。这些AI生成的成分的一个子集通过高通量DFT模拟进行验证，其结果用于扩充训练数据集。最后，一个k近邻 (KNN) 分类器对验证后的成分进行分类，以确保下一轮AL迭代中候选池的多样性。一个协调模块负责编排整个循环。该系统的主动学习机制将计算资源仅集中在最有希望的成分区域，从而能够以据报道仅为先前方法所需数据集规模四分之一的数据量发现高性能催化剂。

优势

- 显著降低计算成本：与先前工作相比，主动学习框架识别高性能候选成分所需的DFT计算量大幅减少 (例如，数据集规模仅为四分之一)。
- 数据高效：集成了AGAT模型，无需大量特征工程即可捕获原子相互作用，从而能够从小型数据集中有效学习。

备注

IDF:1720

IP状态

已申请专利



技术成熟度等级 (TRL) ?

4

发明人

赵仕俊教授

张俊博士

查询: kto@cityu.edu.hk

Proof Concept

Build Value

Follow-on Funding

Develop Concept

- 定向探索：CGAN模型以期望的催化性能为条件，智能地生成新颖成分，避免了对广阔成分空间的随机或穷举采样。
- 自动化、模块化工作流程：系统自动化了从数据生成、模型训练到候选验证和数据集扩充的整个过程，最大限度地减少了人工干预。
- 高预测精度：训练好的AGAT模型在预测总能量和原子力方面具有高精度，为昂贵的DFT计算提供了可靠的替代方案。
- 可推广性：模块化设计允许该框架扩展到优化HER以外的其他材料性能和催化反应。

应用

- 加速发现高性能电催化剂，用于氢析出反应（HER）、氧还原反应（ORR）和其他清洁能源转换过程。
- 高效优化高熵材料成分，用于催化以外的各种应用，包括具有定制机械性能的结构材料和合金。
- 开发具有成本效益的催化剂配方，通过部分替代识别出能最大限度减少昂贵金属（如Pt、Pd）使用的最优成分。
- 集成到计算材料设计平台中，用于自动化、高通量筛选新型无机化合物和复杂合金。
- 通过微调元素浓度和吸附物-表面相互作用来增强现有材料性能，以适应特定的工业条件。

