



人工智能开发和优化燃料电池催化剂的初步探索

华秋茹¹, 顾一鸣², 郭显斌¹, 吴楚¹, 李刚¹, 张义煌^{1*}, 王树东^{2*}

1. 威孚高科技集团股份有限公司, 无锡 214028

2. 中国科学院大连化学物理研究所, 大连 116023

*通讯作者, E-mail: yihuang.zhang@weifu.com.cn; wangsd@dicp.ac.cn

收稿日期: 2024-06-17; 接受日期: 2024-09-05; 网络版发表日期: 2024-10-22

摘要 随着清洁能源技术的进步, 燃料电池技术与催化剂技术的发展已成为现代科技的迫切需求. 人工智能(AI)作为一种颠覆性的技术, 在催化剂设计和优化方面的应用正逐步展现其潜力. 本论文聚焦于AI在燃料电池催化剂研究中的应用探索, 首先从人工智能的定义、起源、工具以及应用进行AI技术的理解, 再探索使用AI进行新型催化剂的高效设计及性能的精准预测, 进一步探索应用AI进行燃料电池催化剂的反应机理及表面反应活性位点的作用机制的解析, 全方位探讨了AI如何助力燃料电池催化剂的研发. 最后, 通过构建数据驱动优化的AI模型, 展示了AI在快速筛选高效催化剂以及揭示其结构与性能关系方面的优势, 为实现高效、可控的催化剂制备提供了新的方法. 本文的综述研究不仅为燃料电池催化剂的研究提供了新的思路, 也为AI在催化科学中的应用提供了初步示范.

关键词 人工智能, 燃料电池, 催化剂, 模型优化

1 引言

能源转型和绿色环保日益迫切的需求使得燃料电池技术备受瞩目, 我国的燃料电池技术的研究起源可以追溯到20世纪50~60年代, 这些早期的研究主要集中在航天领域. 在燃料电池的研发方面, 袁权院士带领中国科学院大连化学物理研究所老一辈科学家们率先开展了燃料电池研发工作, 距今已超过40年. 1978年, 大连化学物理研究所成功研制出中国第一台自主研发设计的碱性燃料电池, 在无人状态下可以运行1000小时, 并通过了国家验收. 袁权院士主持完成了航天燃料电池系统的研制, 并发展了相应的理论. 这一时期, 他和研究团队成功解决了氢和氧在电堆中分

配不均的难题. 袁权院士等老一辈科学家的攻坚克难的研究精神一直影响和激励着后继研究者, 前辈科学家们的重要发现也不断启发后来的研究者在燃料电池领域的开拓创新.

21世纪以来, 人工智能(AI)在材料及燃料电池技术领域的研发和应用引起了研究领域的广泛关注. 目前的研究现状表明, 人工智能可以处理大规模的实验数据和计算模拟数据. 通过数据分析和特征提取, 可以预测催化剂等核心材料的性能和特性. 例如, 使用机器学习算法可以从实验数据中识别出关键的催化剂特征, 并进行性能预测^[1]. 人工智能在材料探索 and 发现方面也具有应用潜力. 通过高通量筛选和机器学习算法, 可以加速材料的设计和优化过程. 例如, 使用深

引用格式: Hua Q, Gu Y, Guo X, Wu C, Li G, Zhang Y, Wang S. Tentative exploration of artificial intelligence in developing and optimizing fuel cell catalysts. *Sci Sin Chim*, 2024, 54: 2055–2070, doi: 10.1360/SSC-2024-0128

度学习模型可以预测催化剂材料的稳定性和活性^[2]。2023年, *Nature*杂志刊登了两篇论文, 报道了AI和机器人在发现新材料过程中的新突破, 包括谷歌DeepMind的GNoME模型预测了220万种新材料的结构, 其中700多种已经在实验室中实现了合成^[3,4]。同时, 人工智能在燃料电池催化剂反应机理的理解和优化方面也发挥着重要作用。通过机器学习和深度学习算法, 可以解析复杂的反应机理, 并发现关键的反应路径和机理^[5]。

随着人工智能技术的不断进步, 其在燃料电池催化剂中的应用逐渐广泛深入。2020年, 刘建国教授团队^[6]首次将人工智能技术应用于非贵金属电催化剂的质子交换膜燃料电池(PEMFC)研究, 这是AI技术应用在燃料电池催化剂的里程碑事件。然而, 燃料电池催化剂研发中仍存在较多的困难和挑战。首先, 燃料电池催化剂研究面临的关键挑战在于催化剂活性不足, 这限制了电池的整体性能; 与此同时, 耐久性差也是一个突出问题, 长期运行中的结构退化和腐蚀会导致电池寿命缩短; 此外, 高昂的成本, 尤其是对贵金属催化剂的依赖, 不仅增加了总体成本, 而且由于资源稀缺, 不利于可持续性发展; 稳定性问题同样不容忽视, 因为催化剂在真实工作环境中的易失活会直接影响电池的可靠性; 同时, 传统的材料筛选过程效率低下, 难以快速识别出高性能的候选材料; 最后, 对催化剂作用机理的不深入理解, 限制了更高效催化剂的设计与开发, 这些都是当前研究亟待解决的问题^[7]。

正是燃料电池催化剂面临的复杂困难挑战, 更能凸显应用人工智能技术解决研发问题的卓越潜力, 人工智能技术高效准确的特点能极大地加速复杂体系的催化剂研发进程。然而, 人工智能的应用依赖于高质量、可靠的数据。在催化剂研发中, 数据的获取和准确性仍然是一个挑战, 确保数据的质量和可靠性是人工智能应用的关键问题之一。在燃料电池催化剂研发中, 解释模型如何得出某些预测结果以及这些结果的物理意义仍然是一个很难解决的问题, 解释模型的结果对于研究人员和工程师的接受和应用非常重要^[8]。燃料电池催化剂研发中的数据通常是高维的, 这导致模型训练和优化的挑战, 处理高维数据的方法和技术仍然需要进一步研究和改进^[9]。

综上所述, 人工智能在数据分析和预测、材料探索 and 发现以及反应机理理解和优化方面具有潜力。然而, 数据质量、模型解释和高维数据等方面的问题仍

需要解决。本文旨在探讨人工智能在解析燃料电池催化剂中的应用, 通过构建预测模型、特征提取与优化、反应路径模拟等手段, 深入揭示催化剂的反应机理, 为燃料电池催化剂的设计和优化提供有力支持, 为性能与寿命的提升提供更多的可能性^[10]。相信随着人工智能技术的不断发展, 人工智能将进一步推动燃料电池的性能提升、成本降低和实现商业化应用^[11]。

2 人工智能的概念理解

2.1 人工智能的定义与研究目的

1956年夏, 麦卡锡、明斯基等科学家在美国达特茅斯学院开会研讨“如何用机器模拟人的智能”, 首次提出“人工智能(Artificial Intelligence, 简称AI)”这一概念, 标志着人工智能学科的诞生。人工智能从1956年发展到现在, 已逐步发展为一个以计算机科学(Computer Science)为基础, 由计算机、心理学、哲学等多学科交叉融合的交叉学科、新兴学科, 研究、开发用于模拟、延伸和扩展人的智能的理论、方法、技术及应用系统的一门新的技术科学, 企图了解智能的实质, 并生产出一种新的能以人类智能相似的方式做出反应的智能机器, 该领域的研究包括机器人、语言识别、图像识别、自然语言处理和专家系统等^[12]。

人工智能可分为弱人工智能(Narrow AI)和强人工智能(General AI)^[13]。弱人工智能是指针对特定任务或领域开发的人工智能系统, 其能力有限, 仅限于解决具体的问题。例如, 语音助手和图像识别系统等。强人工智能是指具备与人类相当或超过人类的智能水平, 能够在各种任务和领域进行通用智能表现的人工智能。目前, 强人工智能的研究目的是促使智能机器会听(语音识别、机器翻译等)、会看(图像识别、文字识别等)、会说(语音合成、人机对话等)、会思考(人机对弈、定理证明等)、会学习(机器学习、知识表示等)、会行动(机器人、自动驾驶汽车等)^[14], 但是挑战很大, 尚未实现。

弱人工智能和强人工智能在燃料电池催化剂研究中都具有非常重要的作用。首先, 弱人工智能在燃料电池催化剂研究中扮演了重要角色。通过运用机器学习算法, 我们能够高效处理和分析大量的实验数据, 从而揭示催化剂性能与制备条件之间的关联, 进而指导催化剂的优化设计。此外, 弱人工智能还助力于自动

化实验流程,提高了实验的准确性和可重复性.其次,尽管强人工智能目前尚未实现,但其潜在价值在于能够模拟科学家的思维过程,为燃料电池催化剂研究提供更深层的洞察和创新思路.这有助于我们在未来研究中探索更加复杂的问题,推动催化剂技术的突破.

2.2 人工智能的应用研究范式

人工智能的应用研究范式涉及多个方面,包括但不限于选择合适的技术、确定应用目的、收集和准备数据、选择合适的AI工具和算法以及训练和优化AI模型等步骤^[15,16].

应用研究范式示例如下,流程图见图1:

1) 明确应用目的并选择适合的技术: 首先,需要明确应用人工智能技术的目的,比如进行图像识别可以选择深度学习.这一步是非常关键的,因为它决定了后续的步骤如何进行.

2) 收集并准备相关数据: 在开始应用人工智能技术之前,需要收集并准备相关的数据.这些数据可能包括图像、数据集或其他形式的信息.

3) 选择合适的AI工具和算法: 根据需求解决的问题或任务,选择合适的AI工具和算法.这可能包括机器学习、深度学习、神经网络、自然语言处理等技术.

4) 训练和优化AI模型: 选择好工具和算法后,接下来就是训练和优化人工智能模型.这一过程可能需要大量的计算资源和时间,因此需要耐心和细致的工作.

5) 学习和实践: 人工智能的学习和使用是一个持续的过程,需要不断学习新的技术和方法,并通过实践

来提高技能^[16].

图1中的收集准备数据的过程非常重要,它是整个数据分析流程的起点.数据采集涉及实验室实验数据、计算模拟数据和文献数据三个主要来源^[6].实验室数据通过高精度仪器收集,确保准确性和可重复性;计算模拟数据通过量子化学和分子动力学模拟获得,关键在于合理设置模拟参数;文献数据则通过学术检索系统筛选高质量文献提取.数据预处理包括清洗、去异常值、填补缺失值等,以提高数据质量.在实际采集过程中,建立标准化数据采集流程,保证数据一致性和后续分析准确性,为人工智能技术在燃料电池催化剂研究中的应用提供可靠的数据基础.

在使用人工智能技术时,还需要考虑其伦理和道德问题,确保技术的使用不会对人类造成伤害或产生负面影响.

2.3 人工智能常用的工具

AI工具可以根据其功能和应用领域进行分类^[17].以下是几种常见的AI工具类型:

1) 机器学习框架: 这些工具提供了构建、训练和部署机器学习模型所需的基础设施和功能.例如, TensorFlow(开源软件库,用于数据流编程)、PyTorch(开源的机器学习库)等.这些框架具有灵活性和扩展性,可以用于各种机器学习任务^[18].

2) 自然语言处理(Natural Language Processing, NLP)工具: 这些工具专注于处理和分析自然语言文本数据.例如,自然语言处理工具包(Natural Language Toolkit, NLTK)、用于自然语言处理的编程库(SpaCy is a library for natural language processing, SpaCy)、双向编码器表示(Bidirectional Encoder Representations from Transformers, BERT, 一种预训练语言表示的方法)等.它们可以用于文本分类、情感分析、信息提取等任务^[19].

3) 计算机视觉工具: 这些工具用于处理和分析图像和视频数据.例如, OpenCV(Open Source Computer Vision Library是一个开源的计算机视觉和机器学习软件库)、TensorFlow Object Detection API(一个基于TensorFlow的开源框架,用于实现对象检测系统; API是Application Programming Interface应用程序编程接口,它是一套预定义的规则和协议,用于构建和交互软件应用程序之间的接口)^[20]、YOLO(You Only Look

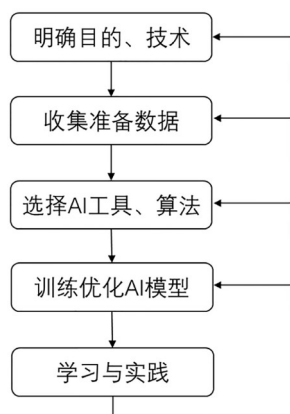


图1 应用研究范式示例的流程图
Figure 1 Flowchart of applied research paradigm

Once是一个流行的计算机视觉算法, 专门用于实现实时对象检测等. 它们可以用于目标检测、图像识别、人脸识别等任务.

4) 增强学习工具: 这些工具用于训练智能体通过与环境交互来学习最佳决策策略. 例如, OpenAI Gym (一个由OpenAI创建的环境库, 用于开发和测试强化学习算法)、TensorFlow Agents(由Google的研究员在2017年发布, 它基于TensorFlow和OpenAI Gym, 提供了一个高级应用程序编程接口, 用于构建、训练和测试强化学习模型)等. 它们可用于游戏智能、机器人控制等领域^[21].

5) 数据分析和可视化工具: 这些工具用于处理和分析数据, 并可通过图表和可视化方式呈现结果. 例如, Pandas(Python中用于数据处理和分析的一个库, 主要用于分析结构化数据, 如表格数据和时间序列数据)、Matplotlib(一个开源的Python绘图库, 广泛用于数据可视化、科学计算和工程领域, 使用户可以很容易地创建高品质的图表和图像)、Tableau(一款强大的数据可视化工具, 由Tableau Software公司开发. 它允许用户通过拖放界面创建和交互式的数据可视化, 而无需编写代码)等. 它们可用于数据清洗、特征工程、数据可视化等任务^[22].

表1是一些常见的国内可以使用的人工智能工具的分类、优缺点对比表格^[17].

2.4 人工智能在化学中的应用

在化学领域, 人工智能的应用日益广泛, 包括但不限于以下方面:

1) 材料发现和设计: 人工智能可以加快材料研发的速度和效率, 通过智能算法和机器学习模型, 辅助材

料的搜索、预测和优化, 加速新材料的发现和设计^[23]. Correa-Baena等^[24]研究表示首先工具自动化能够快速测试候选材料, 其次高性能计算能够通过预测和推断材料的宏观、界面和缺陷相关性质, 集中实验资源在有前景的化合物上; 最后, 机器学习将前两者结合, 通过实验结果自动完善理论, 并指导下一步实验的规划. 研究人员认为在未来十年内, 这一组合工具将彻底改变当前人们进行材料研究的方式, 而率先采用这些工具的研究人员将获得显著的优势.

2) 分子设计和药物发现: 在有机和药物化学领域, 人工智能可以用于分子结构的生成、评估和优化, 帮助药物发现和分子设计的过程, 加速药物研发和筛选^[25,26]. Brown等^[26]认为人工智能与制药、化学研究的紧密结合可以显著提高分子发现的效率和有效性, 增加计算工具在化学科学中的贡献, 并显著推动该领域的发展. 谷歌旗下的DeepMind公司开发了一款名为AlphaFold的人工智能程序, 能够在没有相似结构的情况下, 以接近实验精度的水平预测蛋白质的三维结构. 该模型结合了进化、物理和几何约束, 并采用了创新的神经网络架构和训练程序. AlphaFold 的开发推动了蛋白质结构预测领域的进步, 将加速结构生物学研究, 并促进药物开发等应用^[27]. 在此基础上, 化学家可以利用AlphaFold预测化学反应过程中可能出现的中间体和产物, 从而优化反应条件, 提高产率. 由此可见, 由自然语言处理、计算机视觉和机器人学等多个AI分支的汇聚所引发的进步会增加更多的可用信息, 改变人们的自动化能力, 提高实验的可重复性, 并加速人们对AI内部运作的理解.

3) 反应机理和反应设计: 人工智能可以帮助理解化学反应的机理, 预测反应性能和选择合适的催化剂,

表1 人工智能工具的分类、优缺点对比

Table 1 Classification and comparison of advantages and disadvantages of AI tools

工具名称	分类	优点	缺点
Python	数据分析工具	1. 强大的数据处理和分析功能; 2. 丰富的数据科学库和工具支持	1. 学习曲线较陡峭; 2. 需要编程技能
TensorFlow	深度学习工具	1. Google支持的深度学习框架; 2. 良好的性能和灵活性	1. 需要一定的深度学习背景和理解; 2. 配置和调试较复杂
Scikit-learn	机器学习工具	1. 易于上手的机器学习库; 2. 完整的机器学习算法覆盖	1. 不支持深度学习; 2. 可能在处理大规模数据集时效率较低
PyTorch	深度学习工具	1. 灵活的深度学习框架; 2. 适合研究和实验性工作	1. 社区相对 TensorFlow 较小; 2. 部分功能相对 TensorFlow 较弱

同时在优化反应的设计和催化剂性能方面可以提供潜在指导^[28,29]。Meuwly等^[30]讨论了从小分子反应动力学到反应规划的计算平台的各种应用。基于机器学习(Machine Learning, ML)的技术特别适用于涉及计算和实验的问题。首先, 贝叶斯推理是一种强大的方法, 可以开发与实验知识一致的模型。其次, 基于ML的方法也可以用于处理传统方法在形式上难以处理的问题, 例如在反应碰撞中详尽地表征状态-状态信息。最后, 使用机器学习得到的神经网络势能, 可以实现对燃烧中发生的反应网络的显式模拟。机器学习正逐渐成为研究反应机理与反应设计的有效工具。通过输入计算或实验数据, ML 算法可以预测尚未发现的材料的结构、电子、力学和化学性质。这些预测拓展了材料的反应设计 and 应用探索, 并大大缩短了发现和理解材料的时间和成本^[31]。以上研究概述了可以使用机器学习技术解决的化学问题, 以及这个多样化和充满活力的领域所面临的挑战, 展现了AI技术应用的广阔潜力。

人工智能在化学中的应用与计算化学既有联系又有区别。人工智能是计算机科学的一个分支, 旨在使计算机系统具备智能行为, 计算化学是利用计算机模拟和计算化学问题的学科。二者之间存在联系, 例如人工智能可以应用于计算化学中, 如通过机器学习预测分子性质; 但二者的侧重点不同, 计算化学更注重模拟和解析化学问题, 而人工智能更注重模拟人类智能行为^[28,32,33]。

综上, 人工智能技术在复杂化学体系的研究中更能发挥出特有的应用优势。燃料电池作为一种高效的能量转换装置, 其工作原理和性能受到多种因素的影响, 包括催化剂的性能、电解质的选择、电极材料的结构等。这些特点使得燃料电池的研究不仅具有挑战性, 而且对催化剂的性能要求极高, 为人工智能技术的应用提供了丰富的场景。

3 应用AI预测与设计燃料电池新型催化剂

燃料电池催化剂的研究不仅涉及化学和材料科学, 还包括电化学、表面科学和能源技术等多个学科。人工智能技术的引入, 特别是机器学习在材料筛选、性能预测和工艺优化方面的应用, 为这些跨学科研究提供了新的视角和方法。

3.1 使用AI预测新型燃料电池催化剂

AI在预测新型燃料电池催化剂方面的应用, 体现了其在多个领域的综合效能。本节将针对机器学习、深度学习、自然语言处理、数据科学、系统建模和仿真在燃料电池催化剂预测方面的应用和贡献进行阐述, 重点阐述机器学习的应用^[34,35]。

机器学习算法, 特别是监督学习和无监督学习, 在燃料电池催化剂的预测中发挥着关键作用, 监督学习是“有教练”的学习方式, 它告诉模型正确的答案是什么, 让模型通过这些正确的答案来学习; 而无监督学习更像是“自学”的方式, 它让模型自己探索数据中的结构和模式, 不依赖预先设定的答案。两者各有千秋, 在实际应用中根据实际需要和可用资源选择合适的学习方法。通过对大量实验数据进行训练, 机器学习模型能够识别出影响催化剂性能的关键因素, 如材料的化学成分、金属尺寸、晶体结构等。此外, 机器学习还可以用于构建预测模型, 根据给定的材料属性预测其催化性能, 从而加速新型结构催化剂的发现过程, 如图2所示^[35]。深度学习是机器学习的一个子集, 它使用神经网络模型处理复杂的数据集。在燃料电池催化剂的预测中, 深度学习模型可以处理大量的化学和结构数据, 并通过学习数据的内在规律和模式来预测催化剂的性能。此外, 深度学习还可以与计算机模拟相结合, 通过构建更精确的催化剂模型来进一步提高预测的准确性^[32]。

图2所示的方法不仅可以节省大量的实验时间和成本, 还可以降低实验风险, 加速新型催化剂的开发进程^[35,36]。这些技术和方法的综合应用可以大大提高催化剂预测的准确性和效率, 为燃料电池技术的发展提

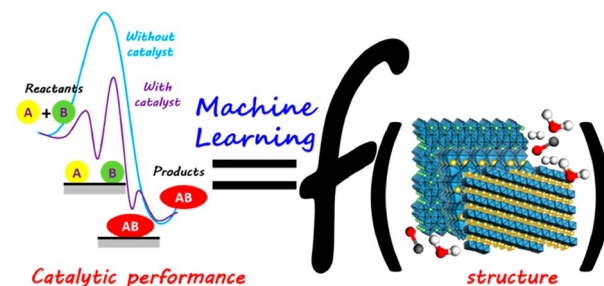


图2 (网络版彩图) 通过机器学习分析催化性能加速新结构催化剂的发现过程^[35]

Figure 2 (Color online) Accelerating the discovery process of new structural catalysts by analyzing catalytic performance through machine learning ^[35]. Copyright 2020, ACS.

供有力的支持, 如图3所示, Khajeh等人提出了一种数学替代方法, 该方法将阴极催化剂层 (Cathode Catalyst Layer, CCL)的物理模型与人工神经网络模型相结合. 该方法用于准确预测质子交换膜燃料电池(Proton Exchange Membrane Fuel Cells, PEMFC)中CCL的性能, 特别是激活过电位(η_{act})性能^[37].

机器学习在燃料电池催化剂领域应用较为广泛, 表2展示了各种机器学习算法在实际应用中的表现和对比^[31,38], 以便在实际应用中为研究者们选择合适算法提供可靠的建议.

综上所述可以看出, 机器学习在预测燃料电池催化剂的应用中具有非常重要的作用. 同时, 自然语言处理、数据科学、系统建模和仿真在燃料电池催化剂

预测方面也有重要的应用和贡献. 虽然自然语言处理 (Natural Language Processing, NLP)在燃料电池催化剂预测方面的直接应用相对较少, 但它可以在间接方面发挥作用. 例如, NLP可以用于分析大量的科研文献和专利, 提取出关于燃料电池催化剂的最新研究成果和趋势. 这些信息可以为研究人员提供有价值的线索, 帮助他们设计出更有效的催化剂^[39]. 数据科学在燃料电池催化剂预测中扮演着至关重要的角色. 通过对实验数据进行清洗、整合和分析, 数据科学家能够揭示出隐藏在数据中的有用信息^[40]. 此外, 数据科学还可以用于构建数据驱动的预测模型, 通过不断优化模型的参数来提高预测的准确性^[5]. 系统建模和仿真技术可以帮助研究人员在实验室之外模拟和测试燃料

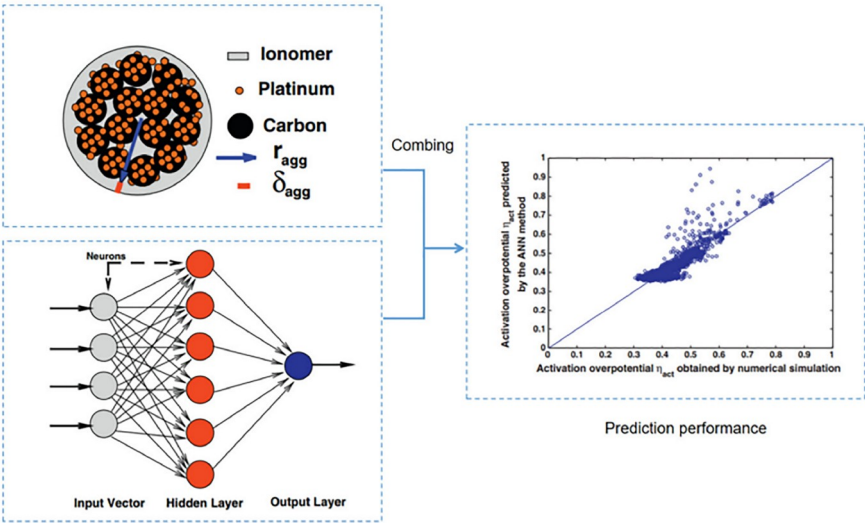


图 3 (网络版彩图) 通过机器学习分析催化性能加速新结构催化剂的发现过程^[37]
Figure 3 (Color online) Speeding up the discovery of novel structural catalysts by analyzing catalytic performance through machine learning ^[37]. Copyright 2011, Elsevier.

表 2 机器学习算法在实际应用上的表现和对比

Table 2 Performance and comparison of Machine Learning algorithms in practical applications

算法名称	随机森林	支持向量机	神经网络	梯度提升决策树
优点	1. 处理大量特征和复杂关系; 2. 避免过拟合; 3. 对异常值不敏感	1. 高维数据处理; 2. 处理非线性问题; 3. 核函数转换	1. 捕捉非线性关系; 2. 适应不同预测任务	1. 高预测精度; 2. 自动处理特征相互作用
缺点	1. 计算成本高; 2. 可解释性弱	1. 计算复杂度高; 2. 对参数选择敏感	1. 需大量训练数据; 2. 训练耗时; 3. 可解释性差	1. 易过拟合; 2. 训练过程慢
预测性能	高准确性和稳定性	适中数据量时表现良好	大数据时高精度	高准确率, 需特征工程
计算效率	中等规模数据集上较快	中等规模数据集上较快	大规模数据集上较慢	中等规模数据集上较慢
模型解释性	较易解释, 提供特征重要性评分	较易解释, 提供特征重要性评分	难以解释	难以解释
数据需求	数据量较少时也能表现不错	数据量较少时也能表现不错	需大量数据训练	需大量数据训练

电池催化剂的性能. 通过构建催化剂的虚拟模型, 研究人员可以预测其在不同条件下的催化性能, 并探索可能的优化方案.

Su等^[41]利用AI技术在新材料研发、催化剂设计等领域取得了突破, 通过精准合成和表征提高了能源和资源系统的效率. 他们开发了智能原子机器人探针技术, 实现了原子级精确合成量子材料. 这一研究不仅提高了能源和资源系统的效率, 而且展示了AI在催化领域中的强大潜力. 应用AI技术可以帮助研究人员更高效地预测出性能优异的催化剂.

3.2 运用AI技术加速新催化剂设计过程、降低实验成本

催化剂是燃料电池中的关键组分之一, 尤其是质子交换膜燃料电池(PEMFC)中的氧还原反应(Oxygen Reduction Reaction, ORR)催化剂, 利用人工智能(AI)技术加速燃料电池催化剂的设计过程并降低实验成本非常有研究前景, 下面从六个方面具体阐述^[42].

第一方面, 利用人工智能(AI)技术做数据驱动的催化剂设计, 具体分为以下四点:

- 1) 建立催化剂数据库: 收集和整合各种催化剂的材料属性、结构特征、性能数据等, 为AI模型提供训练和验证的基础.
- 2) 特征提取与选择: 利用机器学习技术从大量数据中提取与催化剂性能相关的关键特征, 如图3所示.
- 3) 模型训练与验证: 使用历史数据训练预测模型, 通过交叉验证来评估模型的准确性.
- 4) 基于模型的设计优化: 利用训练好的模型预测新催化剂的性能, 并优化其设计, 如调整活性组分的比例、载体材料等.

第二方面, 利用人工智能(AI)技术进行高通量虚拟筛选, 并对筛选出来的材料进行实验验证核性能测试:

- 1) 虚拟筛选: 利用机器学习模型对大量的化合物或材料进行虚拟筛选, 快速识别出潜在的高性能催化剂.
- 2) 实验验证: 对虚拟筛选出的候选催化剂进行实验室规模的测试, 以验证其性能.
- 3) 性能预测: 结合实验数据, 继续优化模型, 提高对催化剂性能的预测准确性.

第三方面, 利用人工智能(AI)技术进行实验自动

化与微缩化:

- 1) 实验自动化: 利用自动化实验设备, 如高通量实验机器人, 减少人工操作, 降低实验误差.
- 2) 微缩实验: 使用微反应技术, 进行小规模实验, 以减少原料消耗和实验成本.

第四方面, 利用人工智能(AI)技术进行智能实验设计:

- 1) 设计空间探索: 利用AI算法, 如遗传算法, 探索催化剂设计的潜在空间, 找到最优设计点.
- 2) 多目标优化: 考虑多个性能指标, 如活性和稳定性, 进行多目标优化, 以获得更全面的催化剂性能.
- 3) 实验方案推荐: 基于历史实验数据, AI可以推荐最佳的实验方案, 包括反应条件、材料配比等.

第五方面, 利用人工智能(AI)技术进行优化资源与降低成本:

- 1) 资源分配: AI可以分析实验需求和资源状况, 优化实验资源的分配, 如设备使用、化学品采购等.
- 2) 成本效益分析: 通过预测实验结果和成本, AI可以帮助决策者选择最经济的实验路径.
- 3) 绿色化学: AI可以帮助设计更环保的合成路线, 减少废物和副产品的产生.

第六方面, 利用人工智能(AI)技术进行实验安全与合规性的验证:

- 1) 风险评估: 使用AI对实验过程中可能出现的安全风险进行评估, 并提出预防措施.
- 2) 合规性监测: 确保实验设计和操作符合相关的法律法规和行业标准.
- 3) 实时监控: 在实验过程中, 利用AI对关键参数进行实时监控, 确保实验安全进行.

如图4所示^[43], AI可以通过大规模计算预测大量潜在催化剂的性能, 从而加快燃料电池催化剂的筛选速度. 通过AI预测, 可以减少研究人员进行实验的次数, 从而降低实验成本.

Ding等^[6]将AI引入到基于非贵金属电催化剂的质子交换膜燃料电池研究领域. 他们整理了从2010年至2020年的文献中收集了64篇高质量论文和140条IV曲线数据, 超过10000个数据点, 包括催化剂元素组成、微观结构到燃料电池的操作条件与输出性能信息, 构建了数据库. 进一步地, 通过运用分类决策树算法确定了获得高最大输出功率密度的必要条件. 通过使用XGBoost(eXtreme Gradient Boosting, 是一种强大的机

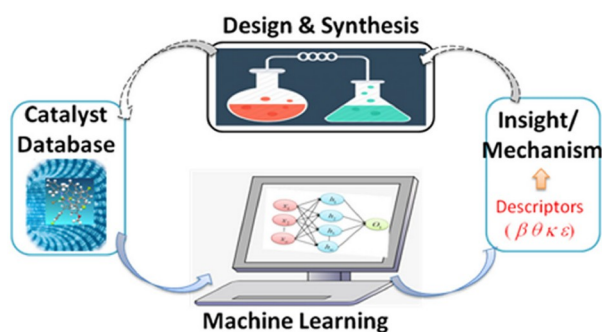


图4 (网络版彩图) 机械学习在催化剂设计与合成中的应用示意图^[43]

Figure 4 (Color online) Illustration of the application of machine learning in catalyst design and synthesis process [43]. Copyright 2020, ACS.

机器学习算法,它基于集成学习方法,将多个弱学习器组合成一个强学习器,从而提高模型的预测精度。算法评估了26个特征的重要性,发现背压、阴极负载量和BET比表面积是最重要的三个因素。确认了操作条件比催化剂化学性质对性能的影响更大。通过应用ANN(Artificial Neural Network, 人工神经网络)建立了能够预测最大输出功率密度和极化曲线的模型,预测精度高达 $R_2=0.9621$,并在未知极化曲线上展现出优异的重现性($R_2>0.99$),能够为研究人员提供有价值的建议。

韩国科学技术院(Korea Institute of Science and Technology, KIST)的研究人员开发了一种基于AI的催化剂筛选方法,并成功开发了一种新的三元元素基金属(Cu-Au-Pt)催化剂^[44]。他们使用了板坯图卷积神经网络(Slab Graph Convolutional Neural Network, SGCNN)模型来准确预测催化剂表面吸附物的结合能,这一方法显著提高了催化剂开发的效率和成功率。SGCNN该模型是在CGCNN(Crystal Graph Convolutional Neural Network)模型的基础上进行修改后得到,以适应催化系统应用。使用自建立的表面密度泛函理论(DFT)数据库,以准确预测包括H、CO、O、OH和OOH等多种吸附物的吸附能。在基于机器学习的设计协议中,材料根据其结构稳定性、催化性能和成本效益进行筛选。对于三元合金核@壳($X_3Y@Z$),这个顺序过程仅筛选出10个和37个有前景的ORR和HOR候选材料,它们的成本一般是低于纯铂,并且性能更高。最后,通过实验验证, $Cu_3Au@Pt$ 作为10种选定的ORR材料之一,确实比铂表现出更好的性能,在铂用量减少2.7倍的条件下动力学电流密度增加大约2倍。

Li等^[45]提出了一种基于自动机器学习(AutoML)的特征删除实验方法。这种方法从高通量密度泛函理论(Density Functional Theory, DFT)数据库中自动提取知识,用于确定催化剂表面反应物的化学吸附能量Eads的关键物理量。这种方法不仅展示了基于AutoML特征删除实验的稳定性、一致性和潜力,而且在催化剂设计优化方面具有重要意义。该方法通过结合机器学习和自动化实验技术,可以搭建智能实验平台,自动化地执行实验流程,并根据实时数据进行调整和优化。这项研究表明AI可以帮助设计和优化实验方案,以最大程度地提高催化剂的合成效率和性能。

Ding等^[46]研究了使用AI技术提高膜电极(Membrane Electrode Assembly, MEA)中Pt的利用效率的方法,面对众多相互作用参数,他们创新性地引入了机器学习(ML)来实现这一目标。在实验室的实验数据集上训练了九种不同的机器学习算法,以精确预测性能和Pt利用率(最大 R^2 分别为0.973和0.968)。为了找到最佳合成条件,Ding等使用了黑盒解释方法来获取可靠的定性和定量见解。在机器学习结果的指导下,在少量实验的前提下对条件进行了合理优化,包括离子树脂与催化剂的比例、水分含量、有机溶剂、催化剂负载、搅拌方式、固体含量和超声喷雾流量。在单个细胞(H_2 /空气)的0.6伏特电压下,实现了 $0.15 \text{ mg Pt cm}^{-2}$ 的总负载下 $0.147 \text{ g Pt kW}^{-1}$ 的Pt利用率和 1.02 W cm^{-2} 的功率密度。此项工作通过为ML优化复杂参数的膜电极铺平道路,从而有助于氢能经济的降低成本。

综上所述,AI可以帮助挖掘出具有优异活性和稳定性的新型催化剂,推动燃料电池领域的创新^[47]。然而应用AI也面临一些挑战,AI模型优化需要大量高质量的数据来训练,而且燃料电池领域的数据往往相对有限^[48],这可能会限制模型的准确性。复杂的AI模型可能难以解释,研究人员难以理解模型是如何做出预测的,这可能限制了其在实际应用中的可靠性。AI模型在预测未知催化剂的性能时可能存在泛化能力不足的问题,需要不断优化和改进模型以适应不同类型的催化剂^[49]。

4 应用AI解析催化剂的反应机理与作用机制

燃料电池催化剂的性能直接决定了其整体效率与稳定性,因此深入解析催化剂的反应机理显得尤为重要。

要. 人工智能技术的崛起, 为燃料电池催化剂反应机理的研究提供了新的契机. 传统的实验与理论计算方法在解析催化剂反应机理时, 往往面临周期长、成本高、精度有限等问题的挑战^[8]. 而人工智能, 特别是机器学习和深度学习技术, 能够通过对大量数据的分析和学习, 发现隐藏在数据中的规律和模式, 进而预测和优化催化剂的性能, 大大缩短了燃料电池催化剂的研发周期^[50].

4.1 使用AI解析燃料电池催化剂的电催化反应机理

人工智能(AI)在解析燃料电池催化剂的电催化反应机理方面发挥着重要作用, 主要通过以下几个方面实现: 1) 处理和分析大量的实验数据, 通过机器学习算法, 如深度学习、随机森林等^[51], 建立催化剂性能与反应条件之间的关系模型. 这些模型有助于揭示催化剂的活性、选择性和稳定性等特性与催化剂结构、组成和制备方法之间的关系. 2) 预测催化剂在不同反应条件下的电催化活性, 并通过实验进行验证. 通过不断迭代学习, AI模型能够更准确地预测反应机理, 从而指导实验人员优化催化剂设计和合成过程. 3) 与计算化学相结合, 可以实现对大量催化剂候选物的高通量计算模拟, 评估它们的电催化性能. 这种方法可以大幅度减少实验成本和时间, 加快催化剂的筛选过程. 4) 分析催化剂的结构信息, 如催化剂的电子结构、活性位点的分布等, 从而揭示结构与性能之间的关系^[52]. 这种洞察有助于设计具有特定活性的催化剂. 用于实时监测燃料电池的运行状态, 通过分析实时数据, 及时调整催化剂的活性, 以优化电池的性能.

以下是一个使用AI技术解析燃料电池催化剂电催化反应机理的逻辑过程示例^[53]:

1) 数据收集:

收集不同催化剂的电催化性能数据, 包括氧气还原反应(ORR)的起始电压、半波电压、电流密度等参数. 同时, 收集催化剂的结构信息, 如催化剂的组成、粒径、比表面积等.

2) 数据预处理:

对收集到的数据进行清洗和预处理, 包括去除异常值、填补缺失数据、归一化处理等.

3) 模型选择与训练:

选择合适的机器学习算法, 如支持向量机(SVM)、随机森林(RF)或深度学习(DL)模型^[51]. 使用

预处理后的数据训练模型, 并评估模型的性能.

4) 反应机理的构建与分析:

通过分析训练好的模型, 挖掘催化剂结构与电催化性能之间的关系. 例如, 可以识别出对ORR活性有显著影响的因素, 如催化剂的 state-of-charge(SOC)、活性位点密度等. 此外, 还可以通过分析不同催化剂的电催化性能差异, 推测出可能的反应机理.

5) 反应机理的验证与优化:

根据AI模型预测的反应机理, 设计实验进行验证. 例如, 可以通过改变催化剂的组成或结构, 观察其电催化性能的变化, 以验证AI模型预测的准确性. 在验证过程中, 可以不断收集新的实验数据, 并使用这些数据对AI模型进行优化, 以提高模型的预测精度.

通过以上步骤, 可以利用AI技术解析燃料电池催化剂的电催化反应机理. 需要注意的是, 实际应用中可能需要使用专业的机器学习库和化学软件, 如sci-kit-learn、TensorFlow等, 以及具备相应的化学知识, 才能有效地进行模型训练和反应机理分析^[53].

在实际的解析反应机理的过程中, 密度泛函理论(DFT) 计算是理解反应机理的重要工具, 可以帮助研究者探究催化活性位点、吸附能、反应路径等关键信息. Liu^[7]等详细介绍了氧还原反应(Oxygen Reduction Reaction, ORR)电催化剂的最新进展, 包括具有各种纳米结构的铂族金属(PGM)、过渡金属和碳基电催化剂, 并利用 DFT 计算和单原子催化剂研究来深入理解 ORR 机理. 此外, 研究人员对ORR电催化剂的发展前景和挑战进行了推测和讨论, 有助于形成高效ORR电催化剂的设计指南, 并影响未来研究以获得新的ORR原理知识. 然而, DFT 计算模型存在一定的局限性, 目前 DFT 计算模型无法充分考虑一些实际因素, 如缺陷、界面、电解质和 pH 值等, 导致计算结果与实际情况存在偏差.

为了更准确地解析催化剂的反应原理, DFT 计算与人工智能在电催化领域可以紧密地结合起来. AI 算法可以帮助优化 DFT 计算模型, 从而提高计算效率和精度, 使 DFT 计算能够处理更复杂的系统和更长时间尺度的问题. AI 算法可以帮助解释 DFT 计算结果, 从而加深对反应机理的理解.

对于AI解析催化剂反应原理的研究中, 英国曼彻斯特大学化学系的Jordi Burés和Igor Larrosa团队展示了如何使用深度神经网络模型分析动力学数据, 从而

自动阐明相应的机理类别^[54]。该模型能够识别各种类型的催化机理, 包括催化剂活化和失活步骤等非稳态的机理, 解析了催化有机反应的机理, 这对于设计新催化剂和开发更绿色、可持续的化学过程至关重要。如图5, 展示了研究中的催化剂机理的范围与数据构成。研究人员定义了20种常见的由催化剂(cat)介导的将底物(S)转化为产物(P)的反应机理。这些机理分别属于四个不同的类别: 1)核心机理(M1), 这是最简单的Michaelis-Menten型机理; 2)具有双催化步骤的机理(M2~M5), 涉及催化剂二聚化(M2和M3)或两种不同催化物种(M4和M5)之间的反应; 3)基于核心机理的催化剂活化步骤机理, 其中预催化剂需要通过底物配位(M7)或配体解离(M8)进行单分子(M6)活化; 4)核心机理的任一催化中间体具有多种催化剂失活步骤的机理(M9~M20), 由于不同机理之间的重叠会对模型训练产生不利影响, 研究人员使用化学标准来定义每个机理的动力学空间, 并优先考虑最简单的机理。

此项研究将催化机理问题简化为分类问题(定义了20类反应机理), 然后用常规的时序模型(本文用到

的AI模型是很常见的)进行分类预测, 但所应用的场景和获取数据的方式非常新颖, 具有较高的实际应用价值。

Wan等^[55]借助密度泛函理论(DFT)、机器学习(ML)和交叉验证方案, 建立了表现最佳的ML模型(氧还原反应ORR, Oxygen Reduction Reaction/氧析出反应OER, Oxygen Evolution Reaction的均方根误差分别为0.24 V/0.23 V), 并应用于描述碳氮化合物相关单原子催化剂(Single-Atom catalysts, SACs)的易于获得的物理和化学性质以及ORR/OER过电位的潜在模式。ML模型推荐的最好的SACs通过DFT计算进一步验证, 以确认模型的可靠性和准确性。确定了三种具有比贵金属更高活性的有前景的氧气电催化剂, 包括RhPc、Co-N-C和Rh-C₄N₃。通过进一步模型分析, 确定金属活性位点的d轨道电子数是最高效的描述符。最后, 获得了可以准确预测无需DFT计算和ML过程即可获得碳氮化合物相关单原子催化剂催化活性的普遍数学表达式。这种革命性的DFT-ML混合方案为合理且低成本设计理想催化剂以及从跨学科视角探索潜在活性来源

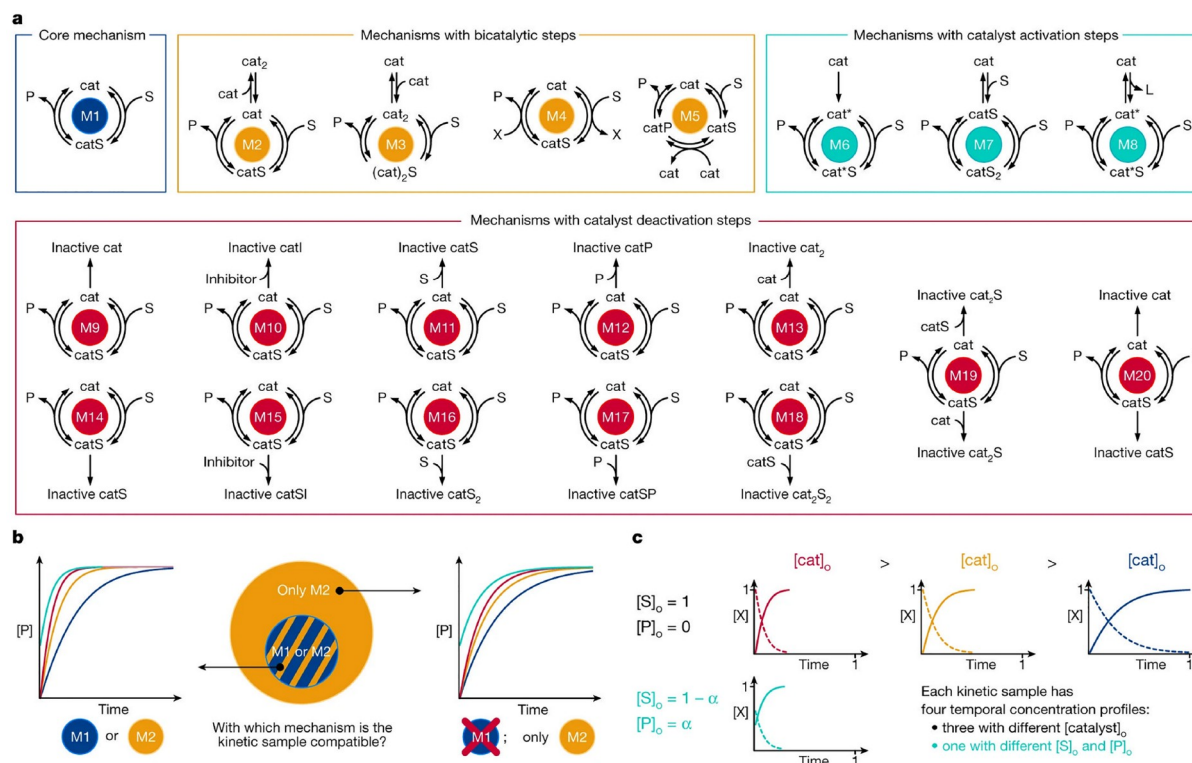


图5 (网络版彩图) 催化机理的范围和数据的构成^[54]

Figure 5 (Color online) Mechanism scope and composition of data^[54]. Copyright 2023, Springer.

开辟了新的途径.

Zhai等^[56]展示了一种经过实验验证的基于机器学习的方法来加速高效氧还原电极的发现, 其中离子Lewis酸强度(ISA)被引入作为过氧化物氧还原反应活性的有效物理描述符. 利用AI技术他们从6,871个独特的过氧化物组成中筛选出的四种氧化物, 成功地被合成出来并证实具有优越的活性指标. 实验表征揭示, 过氧化物中A位点的减少和B位点的增加显著改善了表面交换动力学. 理论计算表明, 这种改善的活性主要归因于A位和B位ISA的极化分布引起的电子对位移, 这极大地降低了氧空位形成能和迁移势垒. 该项研究从解析反应机理出发, 通过AI技术筛选出具有优越活性的阴极催化剂, 促进了陶瓷燃料电池技术的商业化.

人工智能在催化反应机理研究中的应用正在不断发展, 已经展现出在数据分析、催化剂性质预测、理论计算和实验设计等方面的强大能力. 随着AI技术的不断进步和光催化数据资源的日益丰富, 我们可以期待AI将在催化机理研究领域发挥越来越重要的作用.

4.2 借助人工智能技术揭示催化剂表面反应活性位点的作用机制

在燃料电池领域, 利用人工智能技术揭示催化剂表面反应活性位点的作用机制是一项重要的研究任务, 以下是一些方法^[57]:

1) 晶体结构预测和分析: 使用机器学习算法分析催化剂的晶体结构数据, 预测表面活性位点的位置和性质. 通过深度学习等技术, 可以识别对特定反应具有高催化活性的活性位点.

2) 反应路径模拟和优化: 基于机器学习模型, 进行反应路径的模拟和优化, 揭示不同表面活性位点在催化反应中的作用机制. 这种方法有助于理解活性位点的结构-活性关系.

3) 高通量计算和机器学习: 结合高通量计算和机器学习技术, 快速筛选潜在的活性位点, 并预测其在电催化反应中的催化活性, 具体示例见图6, 功能从左开始, 对有前途的材料家族进行高通量筛选(理论上和/或实验)来缩小相空间, 然后进行更深入、更窄的搜索以优化结构/功能特性, 最后一步(右)是重点关于通过最慢、信息最丰富的技术获得对能量、动量和自旋分辨率的理解. 通过这种方法, 可以加速活性位点的发现和优化过程.

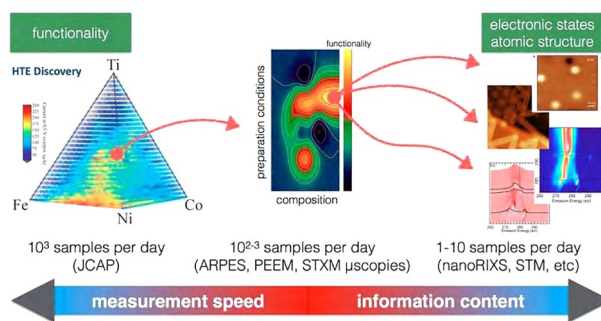


图6 (网络版彩图) 优化和理解材料的典型渐进途径^[58]

Figure 6 (Color online) Typical progressive approaches to optimizing and understanding materials ^[58]. Copyright 2018, Harvard.

4) 数据驱动的活性位点设计: 基于大量实验数据和理论计算结果, 利用机器学习算法建立活性位点设计模型, 从而实现对活性位点的精确控制和优化.

使用人工智能技术来揭示燃料电池催化剂表面反应活性位点的作用机制时, AI可以分析不同催化剂结构的电子密度、电荷状态、化学环境等特征, 从而预测其性能. 通过高斯等化学软件结合AI算法, 可以优化催化剂的微观结构, 寻找最佳活性位点. AI可以通过学习实验数据, 建立反应速率与催化剂性质之间的关系模型. 利用机器学习算法分析反应过程中的时间序列数据, 揭示反应动力学机制. AI可以从催化剂的微观结构中识别出可能的活性位点, 并通过模型验证其活性. 结合实验数据, AI可以鉴定活性位点的功能, 例如氧化还原能力、吸附能力等.

Fang等^[59]采用了一种将DFT与机ML相结合的高级方法, 研究了多种潜在催化剂上吸附质的吸附自由能, 以筛选出对氧还原反应(ORR)和氧析出反应(OER)高度活性的催化剂. 研究结果发现了30种ORR活性优于铂(Pt)的双金属位点催化剂(DMSCs), 10种OER活性优于氧化钌(RuO₂)的DMSCs, 以及4种同时适用于OER和ORR的双功能催化剂. 这项作为合理选择适用于可再生能源应用的高电催化性能的催化剂提供了有效指导.

Timoshenko等^[60]解决了双金属过渡金属氧化物如尖晶石型材料在碱性电解质中作为氧析出反应(OER)催化剂的活性物种和活性状态的揭示问题. 这些催化剂中金属离子的不同化学状态和不同的化学环境共存, 包括在反应条件下演化的无序X射线非晶相, 这些都阻碍了常见原位技术的方法应用. 研究通过原位快

速X射线吸收精细结构光谱学结合无监督和有监督的机器学习方法来解决这个问题。利用主成分分析理解X射线吸收近边结构光谱中的微小变化,并开发人工神经网络来解析扩展X射线吸收精细结构光谱,如图7所示。这使得我们能够分别追踪 $\text{Co}_x\text{Fe}_{3-x}\text{O}_4$ 催化剂及其活性表面在活化处理过程中和OER条件下,从无序氧化物转化为尖晶石状结构、尖晶石转化为活性氧羟化物以及尖晶石反转程度的变化。通过将揭示的结构变化与一系列 $\text{Co}_x\text{Fe}_{3-x}\text{O}_4$ 样品的独特催化活性相关联,阐明了活性物种和OER机制。

Moon等^[61]的研究证明了即使是小数据集上的主动学习也可以获得表现出卓越性能的材料。通过信息丰富的结构表征数据的支持并与闭环实验相结合,开发的模型不仅再现了几种不明显且正在积极研究的实验趋势,而且还识别了一种钙钛矿氧化物电催化剂的组成,其在 10 mA cm^{-2} 氧化物时的本征过电位为 391 mV ,这是已知四金属钙钛矿氧化物中最低的之一。

AI可以分析催化剂表面反应的路径和中间体,帮助理解复杂的反应机制,不同AI技术在研究催化剂作用机制的应用与优缺点对比见表3^[62,63]。通过比较不同催化剂的活性位点,可以推断反应机制中的关键步骤。通过虚拟筛选和计算化学方法,AI可以预测新型催化剂的性能,并指导实验合成。AI可以通过分析实验数据,提出提高燃料电池性能的策略,如优化催化剂负载、改善电解质性能等。AI还可以预测燃料电池在不同工况下的性能变化,为运行优化提供指导^[64]。

人工智能技术在催化剂设计和反应机制研究中的应用正变得越来越重要,它不仅能够加速科研进展,还有助于开发出更高效、更环保的新材料和技术。随着计算能力的提高和算法的不断进步,AI在未来有望在更多领域发挥更大的作用^[51]。

表3 AI在研究催化剂作用机制的应用与优缺点对比

Table 3 Performance and comparison of Machine Learning algorithms in practical applications

AI技术	应用范围	优点	缺点
机器学习	催化剂活性预测、反应机理分析、构效关系研究等	数据驱动,无需复杂的物理模型,可处理非线性关系	需要大量数据,模型可解释性较差,难以揭示微观机制
深度学习	催化剂活性预测、反应路径识别、分子结构预测等	自动特征提取,可处理高维数据,预测精度高	需要大量数据,模型复杂,训练成本高,可解释性较差
图神经网络	催化剂活性预测、反应机理分析、构效关系研究等	能够有效利用分子或材料的结构信息,可解释性强	需要构建图结构,模型训练成本高

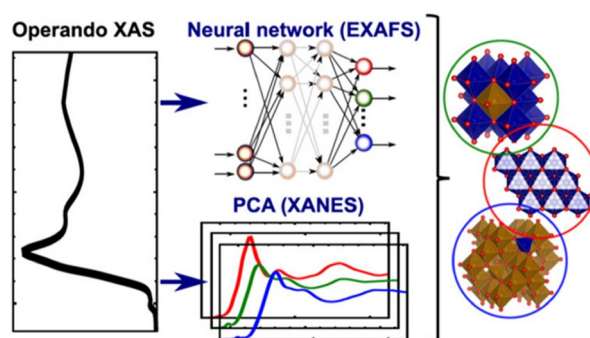


图7 (网络版彩图) 开发人工神经网络解析扩展X射线吸收精细结构光谱^[60]

Figure 7 (Color online) Developing artificial neural networks to analyze extended X-ray absorption fine structure spectra ^[60]. Copyright 2023, ACS.

5 结论

本文综述了人工智能技术在燃料电池催化剂中的应用,重点讨论了机器学习算法和深度学习技术在催化剂材料筛选、性能预测、结构优化、反应机理解析等方面的应用潜力,预测了AI技术在燃料电池催化剂领域能够发挥的作用,具体包括:

- 1) 利用AI算法筛选具有潜在活性的燃料电池催化剂材料,通过计算机模拟和优化,减少实验次数和成本,大大加快了催化剂的筛选过程,提高了燃料电池催化剂的性能和稳定性。
- 2) 利用深度学习技术构建预测模型,准确预测燃料电池催化剂的性能,为催化剂的优化提供了重要的指导。
- 3) 通过构建预测模型、特征提取与优化、反应路径模拟等手段,深入揭示燃料电池催化剂等材料的反应机理。
- 4) 通过高效的数据处理和分析、性能预测、模

型优化、资源优化以及个性化设计,可以显著提升燃料电池催化剂开发的效率,缩短研发周期,加速燃料电池催化剂的产业化。

以机器学习和数据驱动为典型代表的方法, AI技术能够从大量实验和模拟数据中提取有价值的信息,从而指导新型催化剂的开发和优化。AI技术在开发与优化燃料电池催化剂的过程中具有非常重要的作用,包括加速催化剂设计、优化催化剂性能、提高催化剂稳定性、深入揭示反应机理以及降低催化剂成本。进一步地,未来AI技术应用在燃料电池催化剂的研究方向可以是:深入研究AI算法在燃料电池催化剂性能预测中的准确性,并探索如何进一步提高预测的准确性;利用AI技术进行多尺度模拟,以更好地理解催化剂的微观结构与宏观性能之间的关系;开展AI与传统催化剂设计的结合研究,以充分发挥AI的优势,并整合传统设计方法的经验知识。

本研究的重要性和潜在价值在于,人工智能技术的应用为燃料电池催化剂设计提供了一种高效、可靠的方法,有助于加快催化剂的研发进程,提高燃料电池的性能和稳定性^[65]。同时,人工智能技术的应用也有助于减少实验成本,降低环境污染,具有显著的经济和社会效益。

基于上述研究结果,我们提出以下建议:

1) 进一步优化和改进人工智能技术在燃料电池催化剂设计中的应用,提高预测模型的准确性和稳定性,扩大其在实际应用中的范围。

2) 深入研究燃料电池催化剂的机理和性能,探索新的催化剂材料和结构,以提高燃料电池的性能和稳定性。

3) 探索如何将不同来源的数据(如计算数据、实

验数据和文献数据)更有效地融合,以提供更全面的数据支持。

4) 促进化学、材料科学、电化学等领域的专家与AI专家之间的合作,以充分利用各领域的专业知识。

5) 关注环境保护和安全性问题,研究和开发环境友好、安全可靠的燃料电池催化剂和系统。

6) 建议政府和相关机构提供更多的政策和资金支持,促进人工智能技术在燃料电池催化剂领域的应用,推动燃料电池技术的发展和运用。

此外,人工智能在燃料电池中的实际应用具有更多的潜在方向需要研究人员进行进一步的探索:使用人工智能模型预测燃料电池在不同工作条件下的性能,实时监控系统状态,实现故障预警;结合人工智能算法和控制系统,优化燃料电池系统的运行参数,提高能量转换效率和系统稳定性;通过分析生产数据,利用人工智能技术优化燃料电池的制造工艺,提高产品质量;利用人工智能进行能量管理和分配,优化燃料电池与其他能源系统的集成,实现高效能源利用;结合人工智能技术,实现燃料电池系统的实时故障诊断,快速定位问题并采取措施;分析用户使用数据,预测用户需求和行为模式,为燃料电池系统的个性化优化提供依据;利用人工智能技术研究燃料电池在不同环境条件下的性能变化,指导系统设计和优化;结合人工智能和经济学原理,评估燃料电池系统的经济性,指导投资决策;促进材料科学、化学、电子工程等领域的专家与人工智能专家的合作,共同推动燃料电池技术的发展。

综上所述,人工智能技术在燃料电池领域以及催化科学领域的应用将会取得更大的进展,为燃料电池技术及催化科学的发展和应用提供更多的可能性。

参考文献

- 1 Yao Z, Lum Y, Johnston A, Mejia-Mendoza LM, Zhou X, Wen Y, Aspuru-Guzik A, Sargent EH, Seh ZW. *Nat Rev Mater*, 2023, 8: 202–215
- 2 Chen BWJ, Xu L, Mavrikakis M. *Chem Rev*, 2020, 121: 1007–1048
- 3 Szymanski NJ, Rendy B, Fei Y, Kumar RE, He T, Milsted D, McDermott MJ, Gallant M, Cubuk ED, Merchant A, Kim H, Jain A, Bartel CJ, Persson K, Zeng Y, Ceder G. *Nature*, 2023, 624: 86–91
- 4 Merchant A, Batzner S, Schoenholz SS, Aykol M, Cheon G, Cubuk ED. *Nature*, 2023, 624: 80–85
- 5 Toyao T, Maeno Z, Takakusagi S, Kamachi T, Takigawa I, Shimizu K. *ACS Catal*, 2019, 10: 2260–2297
- 6 Ding R, Wang R, Ding Y, Yin W, Liu Y, Li J, Liu J. *Angew Chem*, 2020, 132: 19337–19345
- 7 Liu M, Xiao X, Li Q, Luo L, Ding M, Zhang B, Li Y, Zou J, Jiang B. *J Colloid Interface Sci*, 2022, 607: 791–815
- 8 Hamdollahi S, Jun L. *CI&CEQ*, 2023, 29: 61–74

- 9 Boucetta A, Ghodbane H, Ayad M, Bahri M. *Proceedings of the AIP Conference Proceedings*, F, 2016 [C]. AIP Publishing
- 10 Ong S, Al-Othman A, Tawalbeh M. *Energy*, 2023, 277: 127721
- 11 Kishore SC, Perumal S, Atchudan R, Alagan M, Sundramoorthy AK, Lee YR. *Catalysts*, 2022, 12: 743
- 12 Fjelland R. *Humit Soc Sci Commun*, 2020, 7: 10
- 13 Goertzel B. *J Artif Gen Intelligence*, 2014, 5: 1–48
- 14 Kuusi O, Heinonen S. *World Futures Rev*, 2022, 14: 65–79
- 15 Smilov D, Thorat N, Assogba Y, Nicholson C, Kreeger N, Yu P, Cai S, Nielsen E, Soegel D, Bileschi S. *Proceedings of Machine Learning and Systems*, 2019, 1: 309–321
- 16 Bengio Y, Courville A, Vincent P. *IEEE Trans Pattern Anal Mach Intell*, 2013, 35: 1798–1828
- 17 Khan M, Chakraborty S, Astya R, Khepra S. *Proceedings of the 2019 International Conference on Computing, Communication, and Intelligent Systems (ICCCIS), F*, 2019 [C]. IEEE
- 18 Novac OC, Chirodea MC, Novac CM, Bizon N, Oproescu M, Stan OP, Gordan CE. *Sensors*, 2022, 22: 8872
- 19 Chowdhary K. *Fundamentals of Artificial Intelligence*. Springer India, 2020. 603–649
- 20 Srivastava S, Gangwar A, Mishra R, Singh S. *Proceedings of the International Conference on Advanced Network Technologies and Intelligent Computing, F*, 2021 [C]. Springer
- 21 Brockman G, Cheung V, Pettersson L, Schneider J, Schulman J, Tang J, Zaremba W. *OpenAI Gym*, 2016, 1–4, <http://arxiv.org/pdf/1606.01540>
- 22 Bisong E. *Building Machine Learning and Deep Learning Models on Google Cloud Platform: A Comprehensive Guide for Beginners*. Berkeley, CA: Apress. 2019: 151–165
- 23 Wang XQ, Chen P, Chow CL, Lau D. *Matter*, 2023, 6: 1831–1859
- 24 Correa-Baena JP, Hippalgaonkar K, van Duren J, Jaffer S, Chandrasekhar VR, Stevanovic V, Wadia C, Guha S, Buonassisi T. *Joule*, 2018, 2: 1410–1420
- 25 Gupta R, Srivastava D, Sahu M, Tiwari S, Ambasta RK, Kumar P. *Mol Divers*, 2021, 25: 1315–1360
- 26 Brown N, Ertl P, Lewis R, Luksch T, Reker D, Schneider N. *J Comput Aided Mol Des*, 2020, 34: 709–715
- 27 Jumper J, Evans R, Pritzel A, Green T, Figurnov M, Ronneberger O, Tunyasuvunakool K, Bates R, Židek A, Potapenko A, Bridgland A, Meyer C, Kohl SAA, Ballard AJ, Cowie A, Romera-Paredes B, Nikolov S, Jain R, Adler J, Back T, Petersen S, Reiman D, Clancy E, Zielinski M, Steinegger M, Pacholska M, Berghammer T, Bodenstern S, Silver D, Vinyals O, Senior AW, Kavukcuoglu K, Kohli P, Hassabis D. *Nature*, 2021, 596: 583–589
- 28 Zou Z, Zhang Y, Liang L, Wei M, Leng J, Jiang J, Luo Y, Hu W. *Nat Comput Sci*, 2023, 3: 957–964
- 29 Krenn M, Pollice R, Guo SY, Aldeghi M, Cervera-Lierta A, Friederich P, dos Passos Gomes G, Häse F, Jinich A, Nigam AK, Yao Z, Aspuru-Guzik A. *Nat Rev Phys*, 2022, 4: 761–769
- 30 Meuwly M. *Chem Rev*, 2021, 121: 10218–10239
- 31 Ryu B, Wang L, Pu H, Chan MKY, Chen J. *Chem Soc Rev*, 2022, 51: 1899–1925
- 32 Dral PO. *Chem Commun*, 2024, 60: 3240–3258
- 33 He L, Bai L, Dionysiou DD, Wei Z, Spinney R, Chu C, Lin Z, Xiao R. *Chem Eng J*, 2021, 426: 131810
- 34 Wang Z, Sun Z, Yin H, Liu X, Wang J, Zhao H, Pang CH, Wu T, Li S, Yin Z, Yu XF. *Adv Mater*, 2022, 34: 2104113
- 35 Ma S, Liu ZP. *ACS Catal*, 2020, 10: 13213–13226
- 36 Yang W, Fidelis TT, Sun W-H. *ACS omega*, 2019, 5: 1: 83–88
- 37 Khajeh-Hosseini-Dalasm N, Ahadian S, Fushinobu K, Okazaki K, Kawazoe Y. *J Power Sources*, 2011, 196: 3750–3756
- 38 Wilberforce T, Olabi AG. *Int J Hydrogen Energy*, 2021, 46: 6037–6050
- 39 Chen L, Zhang X, Chen A, Yao S, Hu X, Zhou Z. *Chin J Catal*, 2022, 43: 11–32
- 40 Ghorbanzade Zaferani SP, Amiri MK, Sarmasti Emami MR, Zahmatkesh S, Hajiaghahi-Keshteli M, Panchal H. *Int J Hydrogen Energy*, 2024, 52: 746–766
- 41 Su J, Li J, Guo N, Peng X, Yin J, Wang J, Lyu P, Luo Z, Mouthaan K, Wu J. *Nature Synthesis*, 2024: 1–11
- 42 Raccuglia P, Elbert KC, Adler PDF, Falk C, Wenny MB, Mollo A, Zeller M, Friedler SA, Schrier J, Norquist AJ. *Nature*, 2016, 533: 73–76
- 43 Yang W, Fidelis TT, Sun WH. *ACS Omega*, 2020, 5: 83–88
- 44 Park Y, Hwang CK, Bang K, Hong D, Nam H, Kwon S, Yeo BC, Go D, An J, Ju BK, Kim SH, Byun JY, Lee SY, Kim JM, Kim D, Han SS, Lee

- HM. *Appl Catal B-Environ*, 2023, 339: 123128
- 45 Li Z, Zhao C, Wang H, Ding Y, Chen Y, Schwaller P, Yang K, Hua C, He Y. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2024, 121: e2320232121
- 46 Ding R, Yin W, Cheng G, Chen Y, Wang J, Wang X, Han M, Zhang T, Cao Y, Zhao H, Wang S, Li J, Liu J. *ACS Appl Mater Interfaces*, 2022, 14: 8010–8024
- 47 Xin H. *Nat Energy*, 2022, 7: 790–791
- 48 Li G, Zhu Y, Guo Y, Mabuchi T, Li D, Huang S, Wang S, Sun H, Tokumasu T. *ACS Appl Mater Interfaces*, 2023, 15: 5099–5108
- 49 Ulissi ZW, Tang MT, Xiao J, Liu X, Torelli DA, Karamad M, Cummins K, Hahn C, Lewis NS, Jaramillo TF, Chan K, Nørskov JK. *ACS Catal*, 2017, 7: 6600–6608
- 50 Nørskov JK, Rossmeisl J, Logadottir A, Lindqvist L, Kitchin JR, Bligaard T, Jónsson H. *J Phys Chem B*, 2004, 108: 17886–17892
- 51 Su D, Zheng J, Ma J, Dong Z, Chen Z, Qin Y. *Energies*, 2023, 16: 4390
- 52 Zhong M, Tran K, Min Y, Wang C, Wang Z, Dinh CT, De Luna P, Yu Z, Rasouli AS, Brodersen P, Sun S, Voznyy O, Tan CS, Askerka M, Che F, Liu M, Seifitokaldani A, Pang Y, Lo SC, Ip A, Ulissi Z, Sargent EH. *Nature*, 2020, 581: 178–183
- 53 Xu Y, Lin K, Wang S, Wang L, Cai C, Song C, Lai L, Pei J. *Future Med Chem*, 2019, 11: 567–597
- 54 Burés J, Larrosa I. *Nature*, 2023, 613: 689–695
- 55 Wan X, Yu W, Niu H, Wang X, Zhang Z, Guo Y. *Chem Eng J*, 2022, 440: 135946
- 56 Zhai S, Xie H, Cui P, Guan D, Wang J, Zhao S, Chen B, Song Y, Shao Z, Ni M. *Nat Energy*, 2022, 7: 866–875
- 57 Liu X, Fan K, Huang X, Ge J, Liu Y, Kang H. *Chem Eng J*, 2024, 490: 151625
- 58 Aspuru-Guzik A, Persson K. *Mission Innovation*, 2018, 4: 31–33
- 59 Fang Z, Li S, Zhang Y, Wang Y, Meng K, Huang C, Sun S. *J Phys Chem Lett*, 2024, 15: 281–289
- 60 Timoshenko J, Haase FT, Saddeler S, Rüschler M, Jeon HS, Herzog A, Hejral U, Bergmann A, Schulz S, Roldan Cuenya B. *J Am Chem Soc*, 2023, 145: 4065–4080
- 61 Moon J, Beker W, Siek M, Kim J, Lee HS, Hyeon T, Grzybowski BA. *Nat Mater*, 2024, 23: 108–115
- 62 Xie T, Grossman JC. *Phys Rev Lett*, 2018, 120: 145301
- 63 Ghanekar PG, Deshpande S, Greeley J. *Nat Commun*, 2022, 13: 5788
- 64 Zheng J, Qin Y, Guo Q, Dong Z, Zhu C, Wang Y. *Int J Green Energy*, 2023, 20: 816–822
- 65 Wang Y, Seo B, Wang B, Zamel N, Jiao K, Adroher XC. *Energy AI*, 2020, 1: 100014

Tentative exploration of artificial intelligence in developing and optimizing fuel cell catalysts

Qiuru Hua¹, Yiming Gu², Xianbin Guo¹, Chu Wu¹, Gang Li¹, Yihuang Zhang^{1*}, Shudong Wang^{2*}

¹ Weifu High-Technology Group Co.,LTD, Wuxi 214028, China

² Dalian Institute of Physical Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Dalian 116023, China

*Corresponding author (email: yihuang.zhang@weifu.com.cn; wangsd@dicp.ac.cn)

Abstract: With the advancement of clean energy technology, the development of fuel cell technology and catalyst technology has become a critical priority in modern technology. Artificial Intelligence (AI) is emerging as a transformative tool with its significant potential in the design and optimization of catalysts. This review explores AI's application in fuel cell catalyst research, beginning with an overview of AI technology, including its definition, origins, tools, and applications. It then examines the use of AI for the efficient design of novel catalysts and the accurate prediction of their performance. Additionally, the paper investigates AI's role in analyzing the reaction mechanisms of fuel cell catalysts and the interactions at reactive surface sites. The comprehensive discussion highlights AI's contributions to the research and development of fuel cell catalysts. By constructing data-driven AI models, the paper demonstrates AI's advantages in the rapid screening of efficient catalysts and elucidating the structure-performance relationship. This approach offers innovative methods for the preparation of efficient and controllable catalysts. The review provides new insights into fuel cell catalyst research and demonstrates AI's preliminary applications in catalytic science.

Keywords: Artificial Intelligence, fuel cell, catalyst, model optimization

doi: [10.1360/SSC-2024-0128](https://doi.org/10.1360/SSC-2024-0128)