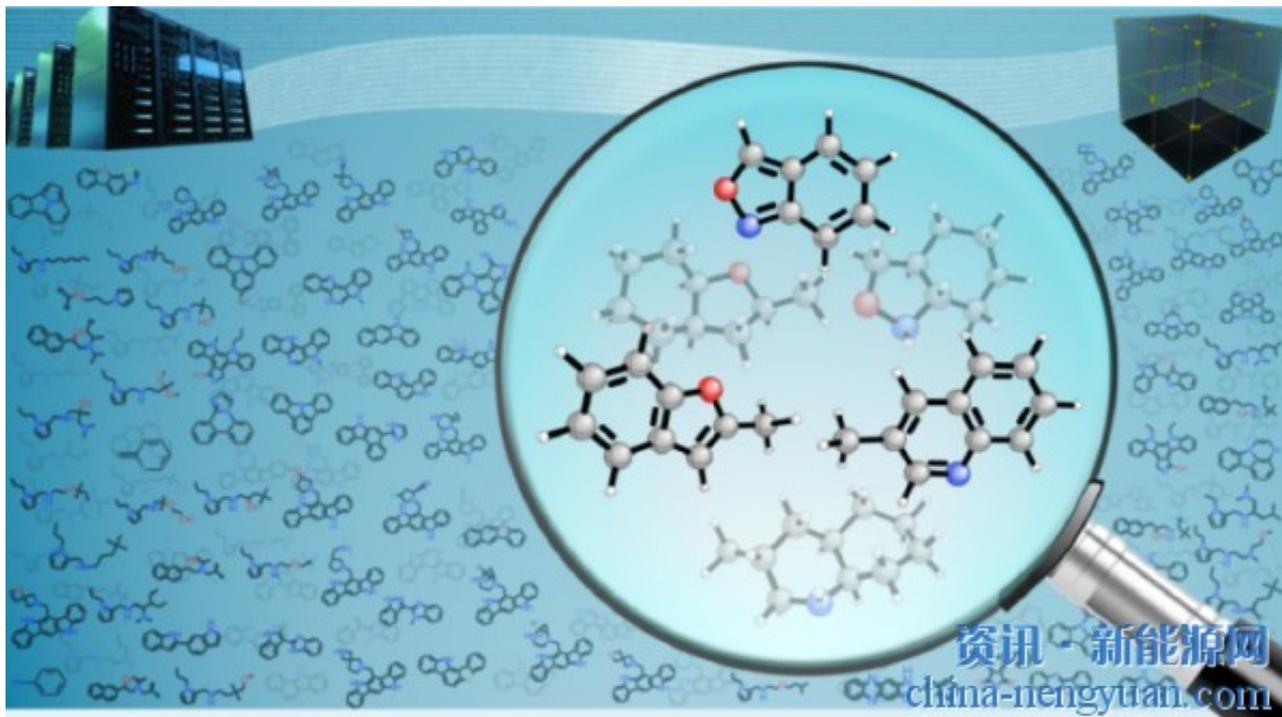


## 1600亿一夜而就！人工智能助力筛选液态氢载体



在一项利用人工智能(AI)的计算研究中，美国能源部(DOE)阿贡国家实验室(Argonne National Laboratory)的科学家们评估了1600亿个分子，这个数字超过了整个人类历史上出生的人口。他们的目标是筛选这些分子是否适合作为氢的液态载体。

太阳本质上是一个巨大的球体，主要由氢气组成，它释放的能量使地球和太阳系的其他部分变暖。由于它的能量含量和丰度，氢作为地球上的能源也显示出巨大的希望。它可以为汽车、卡车、公共汽车、火车和轮船提供燃料，也可以为消费者发电。太阳的能量来自氢原子的聚变，而研究小组计划在地球上使用的过程涉及氢的燃烧。

在正常条件下，纯氢以气体形式存在。作为燃料，挑战之一是将这种气体安全地运送到加氢站并储存。然而，液体形式的载氢化合物有几个优点。它们的安全性要好得多，因为它们不容易发生泄漏和爆炸。它们的单位体积能量含量也高得多，使储存和运输更加容易。

化学家、阿贡集团材料科学部门负责人Rajeev Surendran Assary说：

“液体化合物形式将基本上消除纯氢气的某些问题，特别是考虑到有一个完善的基础设施用于安全地储存和运输燃料油和其他液体化学品。”

“液态氢载体化合物最明显的形式是水——两个氢原子和一个氧原子。另一种形式是有机分子，本质上是氢和碳原子以及氮和氧等其他原子的无限数量的可能组合。”

数据科学与学习部门的计算科学家Logan Ward说：

“在人工智能的帮助下，我们正在寻找有机液体分子，通过与催化剂的低成本化学反应，可以交替添加或释放氢气用作燃料。”

“关键是这种反应不会向大气中添加碳。也就是说，它必须是碳中和的。”

材料科学部门的博士后Hassan Harb说：

“我们正在寻找能长时间吸附氢的有机液体分子，但强度不高，无法根据需要轻易去除。”

“它们还必须有能力储存足够的氢气以供实际使用。去除氢气后，将向液体中添加替代氢气以供重复使用。”



在数十亿种可能的液态氢载体中，常见的例子包括氨和甲醇等化学品。然而，迄今为止，在实验室中测试的相对较少的候选者出现了化学不稳定性和不必要的副反应。

研究小组根据四个因素筛选出候选分子。一：与已知液态氢载体的结构相似性。二：理想的物理性质，如熔点和沸点——当加入或提取氢气时，液体必须保持液态。三：液体必须能够储存每单位体积大量的氢气。四：从液体中释放氢气所需的能量必须足够低。

化学科学与工程部博士后Sarah Elliott说：

“我们首先访问含有有机分子数据的化学数据库。我们发现了超过1600亿个这样的分子，将人工智能与最新的理论计算方法相结合，对于筛选这一庞大的分子大军中最好的分子至关重要。”

该团队的计算需要访问世界上很少有地方可用的超级计算机。其中之一是阿贡，阿贡领导力计算设施（ALCF）的所在地，这是美国能源部科学办公室的用户设施。该团队还依靠Bebop，这是一个由阿贡实验室计算资源中心运营的计算集群。



即使有这些强大的资源可用，如果每个分子分配一毫秒的计算时间，这就意味着1600亿个分子需要五年的计算时间。出于这个原因，该团队开发了一种基于人工智能的筛选方法，将计算速度加快到每秒300万个分子，即筛选1600亿个分子的时间大约只需14小时。

计算科学家Logan Ward说：“这将在整个项目周期中只能做一的事情变成了可以在一夜之间完成的事情，并在从计算和实验中获得反馈时重复。”

通过他们独特的方法，该团队将候选者从1600多亿减少到只有41个。现在，这项任务交到了实验者手中，以测试有希望的人。该团队的计算方法为可持续能源解决方案的创新新时代铺平了道路。

这项研究发表在《数字发现》杂志上。除了Assary、Elliott、Ward和Harb，作者还包括Ian Foster、Stephen Klippenstein和Larry Curtiss。这项研究得到了阿贡实验室指导研究与开发基金的支持。

阿贡领导力计算设施（ALCF）为科学和工程界提供超级计算能力，以促进广泛学科的基础发现和理解。在美国能源部（DOE）科学办公室高级科学计算研究（ASCR）计划的支持下，ALCF是美国两个致力于开放科学的DOE领先计算设施之一。

（素材来自：Argonne National Laboratory 全球氢能网、新能源网综合）

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/news/205820.html>