

Article | Published: 23 September 2025

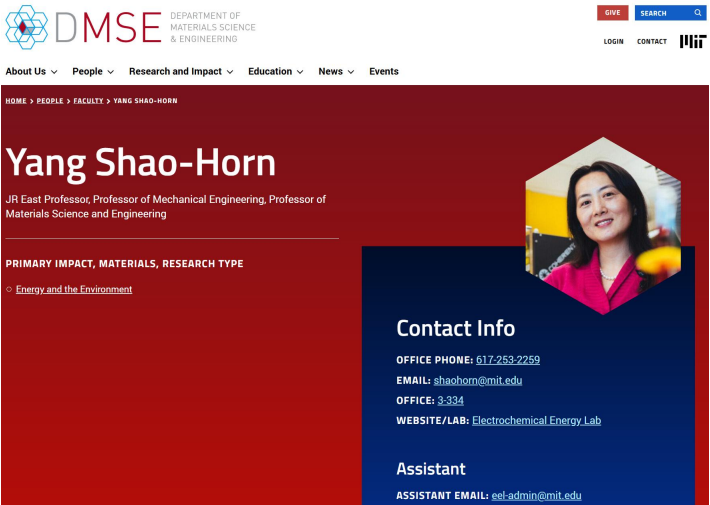
# A multimodal robotic platform for multi-element electrocatalyst discovery

## 一个用于多元素电催化剂发现的多模态机器人平台

[Zhen Zhang](#), [Zhichu Ren](#), [Chia-Wei Hsu](#), [Weibin Chen](#), [Zhang-Wei Hong](#), [Chi-Feng Lee](#), [Aubrey Penn](#), [Hongbin Xu](#), [Daniel J. Zheng](#), [Shuhan Miao](#), [Yimeng Huang](#), [Yifan Gao](#), [Weiyin Chen](#), [Hugh Smith](#), [Yaoshen Niu](#), [Yunsheng Tian](#), [Ying-Rui Lu](#), [Yu-Cheng Shao](#), [Sipei Li](#), [Hsiao-Tsu Wang](#), [Iwnetim I. Abate](#), [Pulkit Agrawal](#), [Yang Shao-Horn](#) & [Ju Li](#) ✉

[Nature](#) **647**, 390–396 (2025) | [Cite this article](#)

视频: [Robotic synthesis and testing of nanocatalysts](#)



DMSE DEPARTMENT OF MATERIALS SCIENCE & ENGINEERING

HOME > PEOPLE > FACULTY > YANG SHAO-HORN

### Yang Shao-Horn

JR East Professor, Professor of Mechanical Engineering, Professor of Materials Science and Engineering

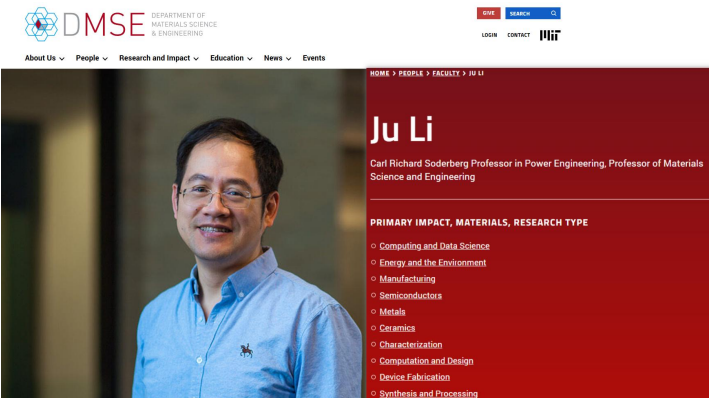
PRIMARY IMPACT, MATERIALS, RESEARCH TYPE

- Energy and the Environment

Contact Info

OFFICE PHONE: 617-253-2259  
EMAIL: [shaohorn@mit.edu](mailto:shaohorn@mit.edu)  
OFFICE: 3-334  
WEBSITE/LAB: [Electrochemical Energy Lab](#)

Assistant  
ASSISTANT EMAIL: [eei-admin@mit.edu](mailto:eei-admin@mit.edu)



DMSE DEPARTMENT OF MATERIALS SCIENCE & ENGINEERING

HOME > PEOPLE > FACULTY > JU LI

### Ju Li

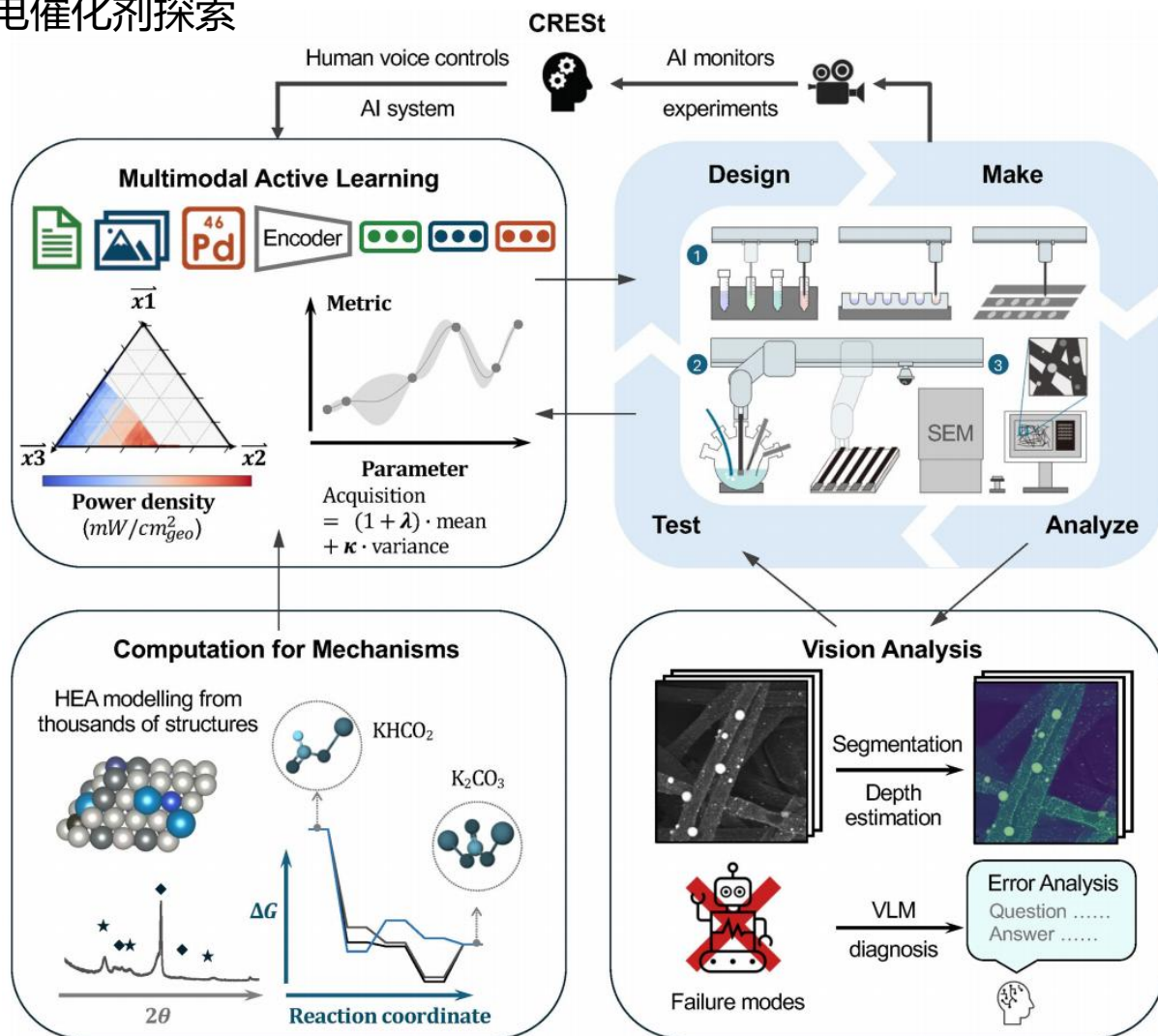
Carl Richard Soderberg Professor in Power Engineering, Professor of Materials Science and Engineering

PRIMARY IMPACT, MATERIALS, RESEARCH TYPE

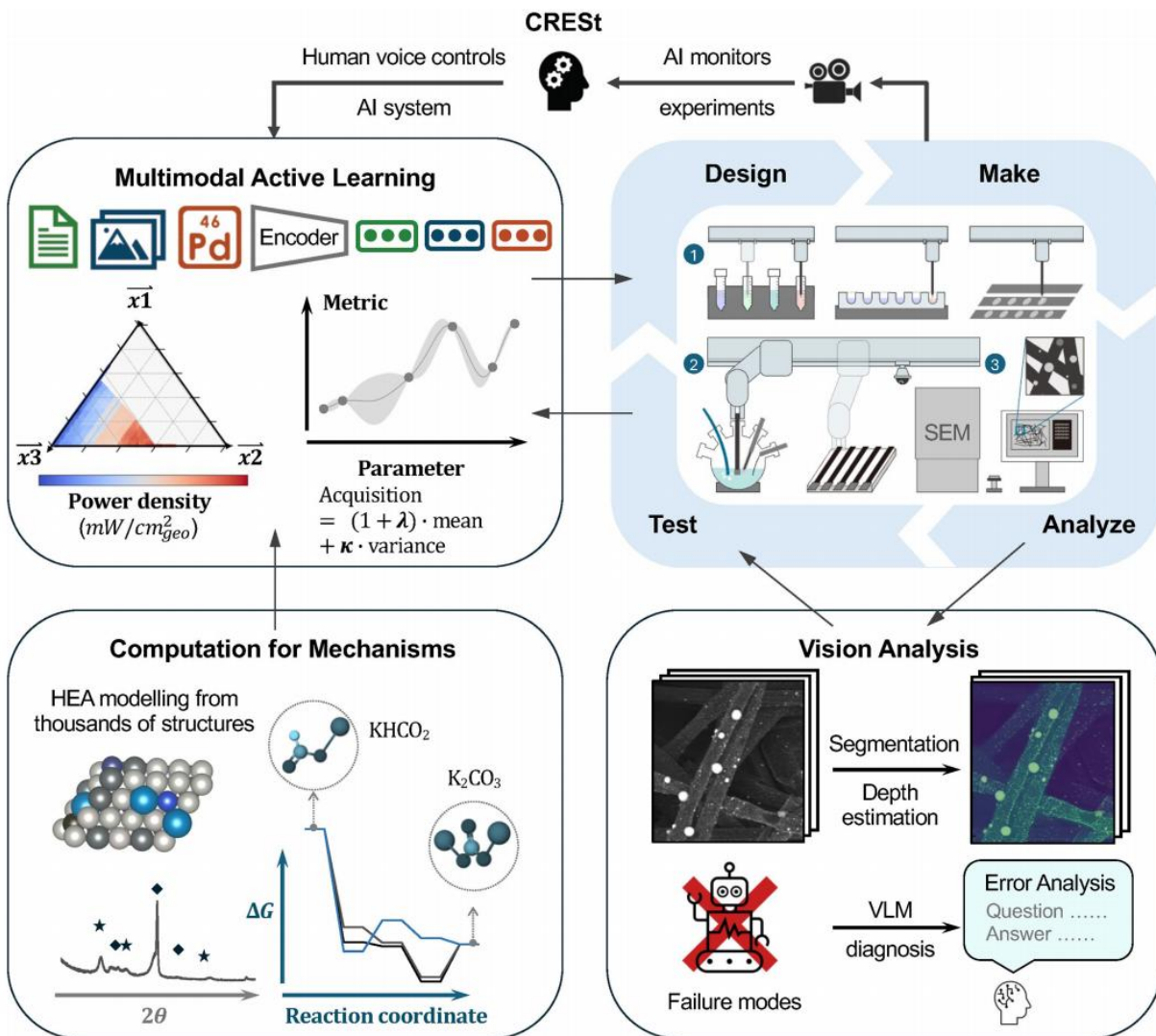
- Computing and Data Science
- Energy and the Environment
- Manufacturing
- Semiconductors
- Metals
- Ceramics
- Characterization
- Computation and Design
- Device Fabrication
- Synthesis and Processing

多模态机器人平台 CRES<sub>t</sub>融合**大模型**、**自动化**与**主动学习**的电催化剂探索

- 领域**：加速定制材料的发现，特别是电催化剂
- 效果**：用于探索电化学甲酸氧化反应的催化剂，在三个月内测试了900多种化学配方和3500次电化学测试，成本特异性提高9.3倍（成本特异性：指在考虑材料或设备的成本因素后，其性能的衡量标准）







## 主要解决的问题:

**1.高维空间搜索难:** 多元素合金 (如8元合金) 搜索空间巨大 ( $2 \times 10^{17}$ ), 传统实验大海捞针。

←先验&降维&自动化

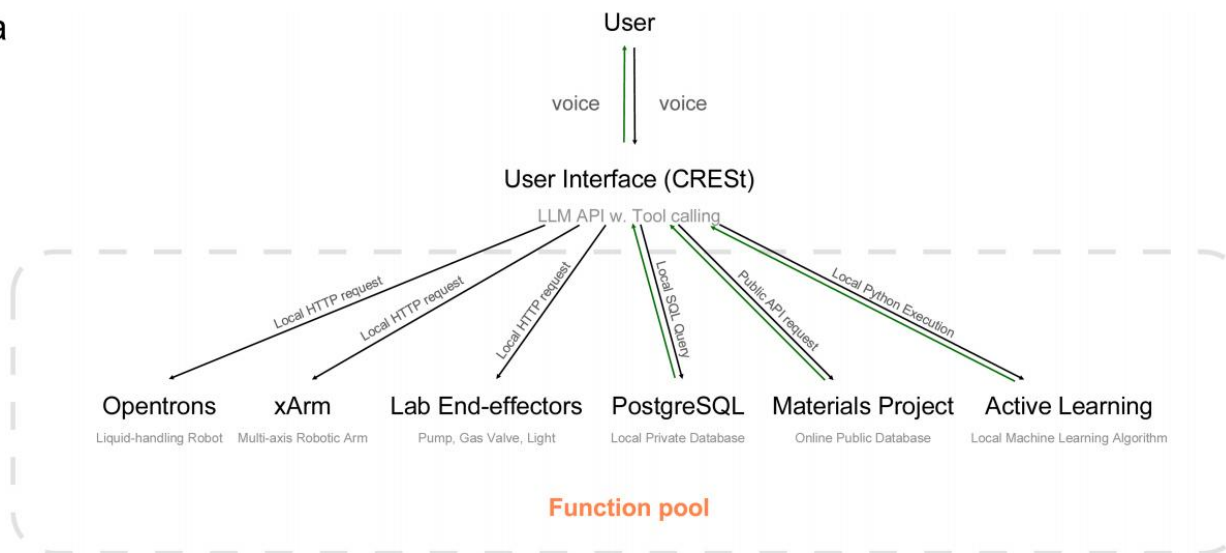
**2.传统AI的局限:** 现有主动学习 (AL) 多为单模态, 忽略了文献知识和微观图像。

←多模态 (文献知识&显微图像)

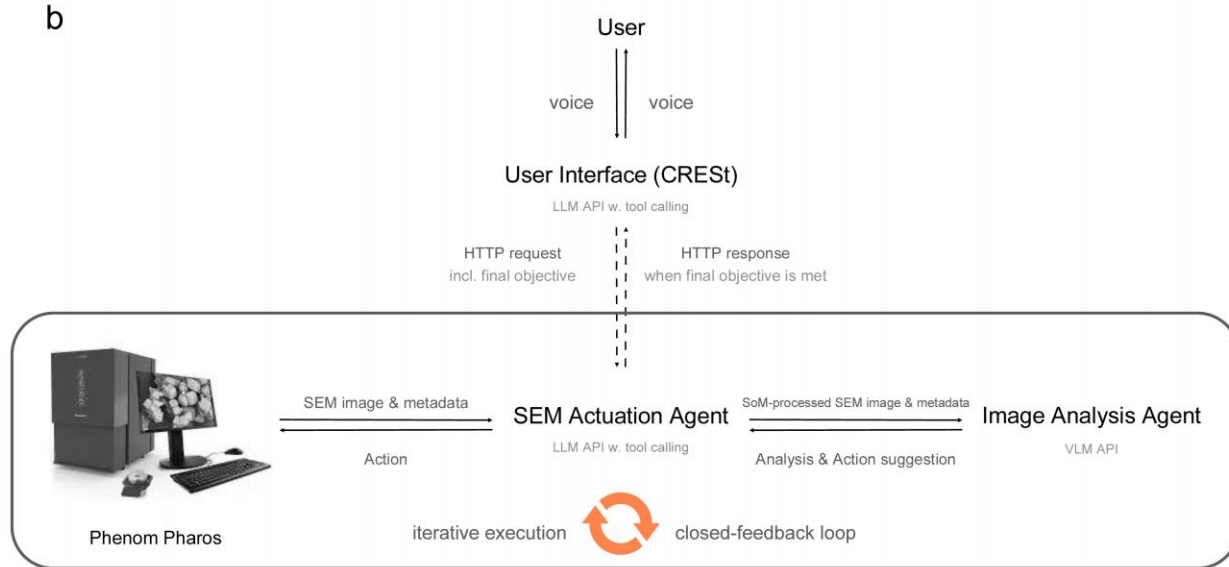
**3.真实实验脆弱&无法复现:** 真实实验充满干扰 (机械、热、电误差), 容易导致数据不可重现。

←大模型 分析&纠错

人类科学家通过自然语言指挥，AI转化指令并控制液体处理机器人、机械臂、SEM等设备



CRESt 主实验台



自动电子扫描显微镜模块

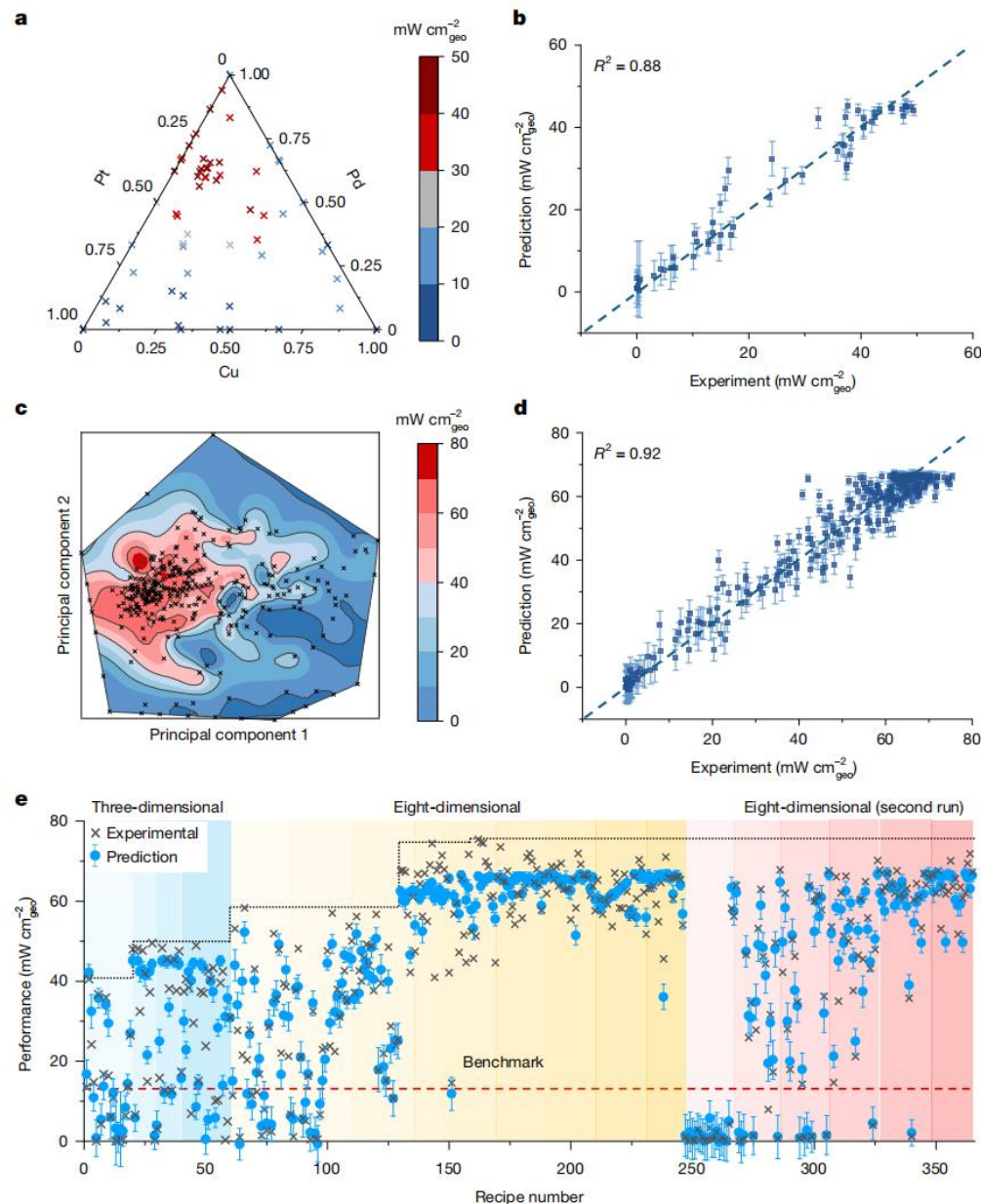
## 主要功能:

- **本地HTTP请求和公共API请求:** 与外部资源或系统的连接，获取数据或执行外部任务。
- **本地SQL查询:** 用于从本地数据库中查询数据。
- **本地机器学习算法:** Active Learning用于分析和优化实验过程，选择最重要的数据进行学习，提高实验效率。

## 三大部分:

- **用户界面CRESt:** 用户通过语音与CRESt平台交互，发送请求并接收响应。
- **SEM执行代理:** 控制扫描电子显微镜进行操作并获取图像数据。
- **图像分析代理:** 分析SEM图像并根据结果提出行动建议，形成闭环反馈。

**执行与分析代理不断循环，直到图像达到预期，返回图像给CRESt**



AI利用“先验知识”（阅读文献）来缩小搜索范围，提高效率。

## 1. 文本嵌入——利用“先验知识”：

- AI检索大量文献，了解哪些金属元素对特定的反应有效。
- 将文字描述转化为向量，建立元素之间的化学性质关联，帮助缩小搜索空间。

## 2. 图像嵌入——关注微观结构：

- CREST平台利用高通量扫描电子显微镜（SEM）拍摄催化剂的微观照片。
- AI提取图像中的形态特征（如颗粒分布函数的斜率、偏差、覆盖率等），将这些视觉信息也作为输入数据。

## 3. 降维与优化：

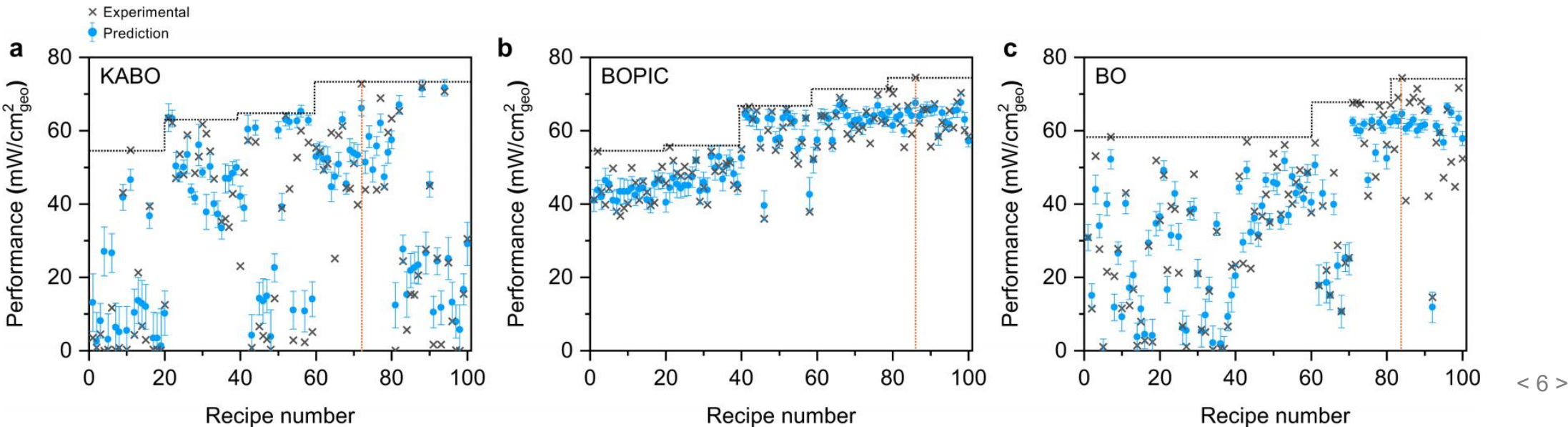
- 使用主成分分析（PCA）将这些高维数据压缩到一个“潜在空间”，同时保留80%以上的信息变异度。
- AI在这个潜在空间里运行优化算法（KABO和BOPIC），找到最优解后，再反向映射回实际的化学配比进行实验（SLSQP）。



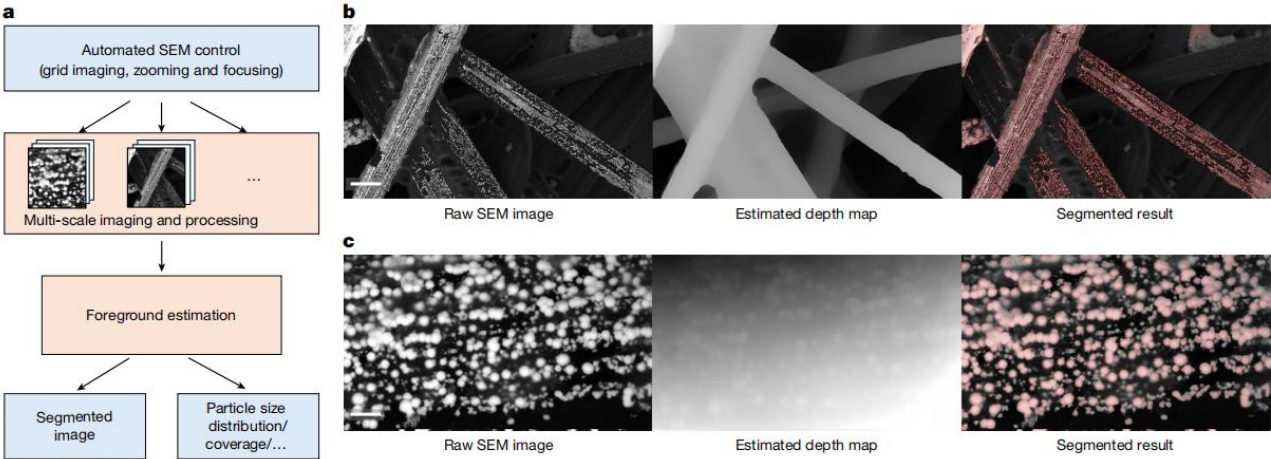
# 核心技术 I——多模态主动学习 (Multimodal Active Learning)

- **KABO**: Knowledge-Assisted Bayesian Optimization 知识辅助贝叶斯优化  
利用LLM（大语言模型）从文献中提取的“先验知识”来初始化和指导搜索。
- **BOPIC**: Bayesian Optimization with Policy Improvement Constraints 带有策略改进约束的贝叶斯优化  
引入了一个动态调节机制（拉格朗日乘数），自动平衡“探索”（去未知区域看看）和“利用”（在已知好区域深挖）之间的关系。

算法	核心策略	效果
KABO	知识辅助优化	利用多模态知识，收敛最快。预测最准、
BOPIC	动态平衡探索与利用	高性能样本最多，侧重与高效挖掘高性能区域。在探索到高性能区域后能挖掘更多同等优秀配方。
BO	标准贝叶斯优化方法	没有利用先验知识，收敛最慢，代价最高。

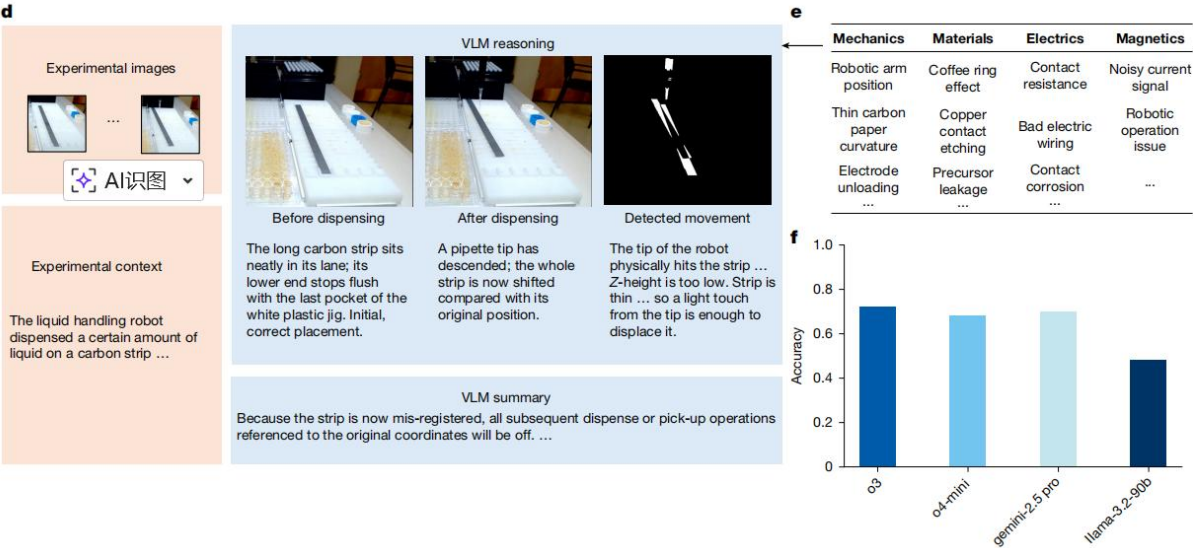


自动SEM

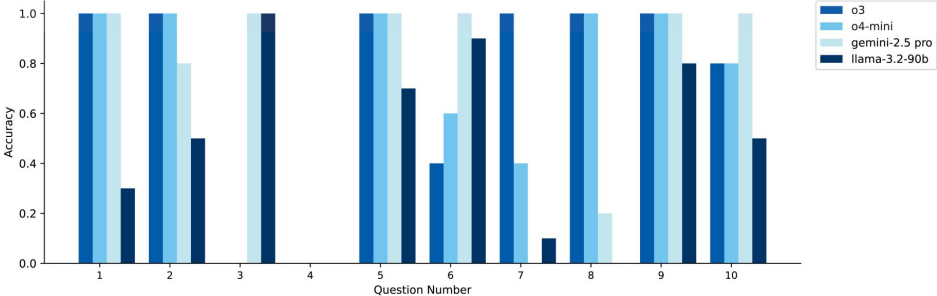


- 自动扫描电子显微镜控制
- 多尺度图像处理
- 前景估计

实验错误诊断



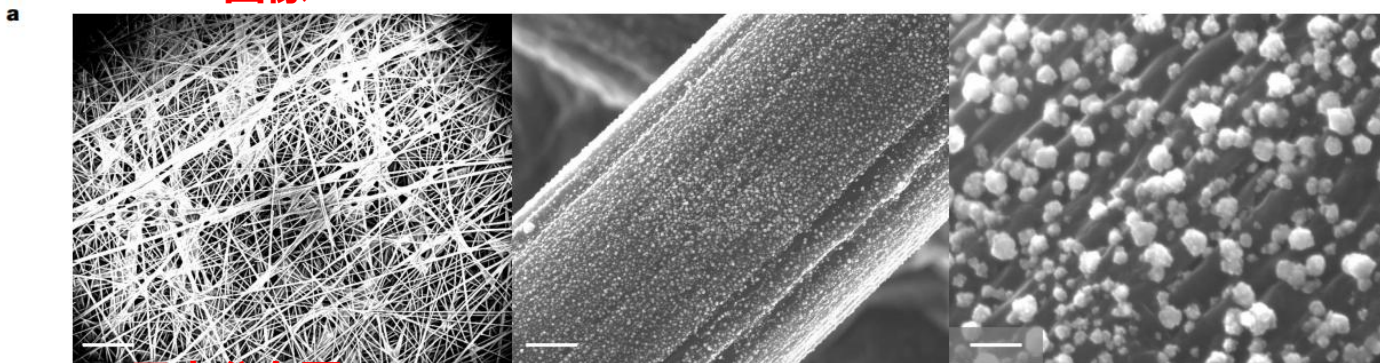
- 异常诊断：利用VLM(API)监控实验视频，发现物理异常(如移液枪头碰歪样品)
- 自我修正：不仅发现错误，还能提出解决方案，形成闭环



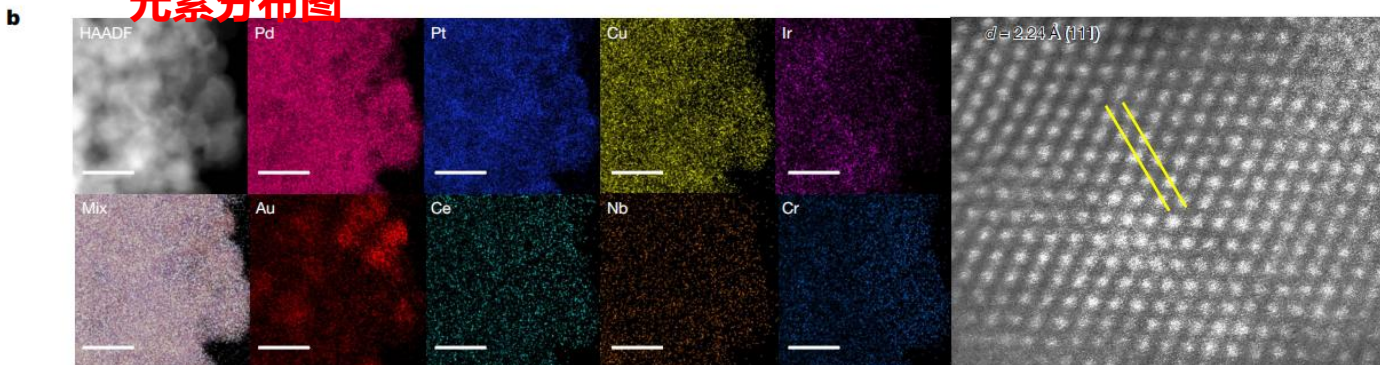


# 最终成果——高性能八元催化剂

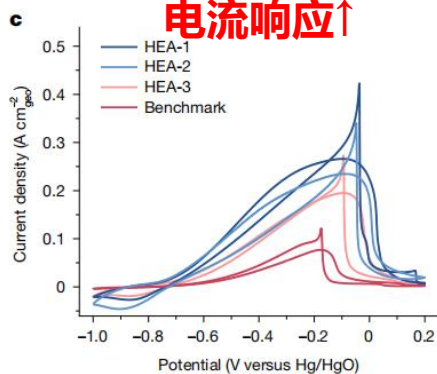
SEM图像



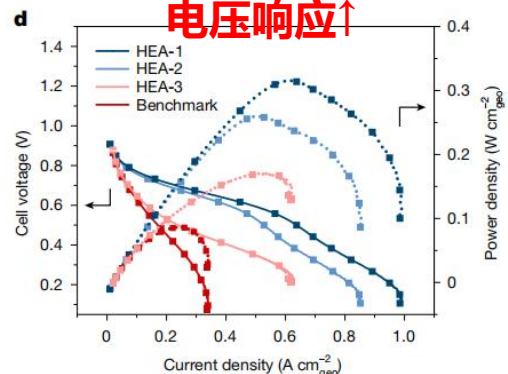
元素分布图



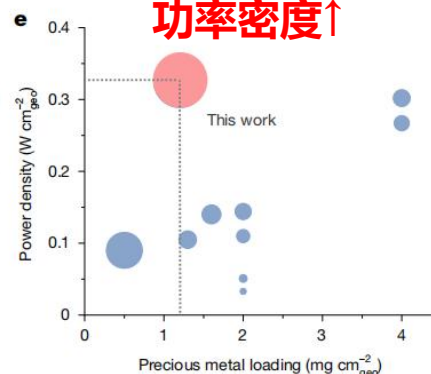
电流响应↑



电压响应↑



功率密度↑

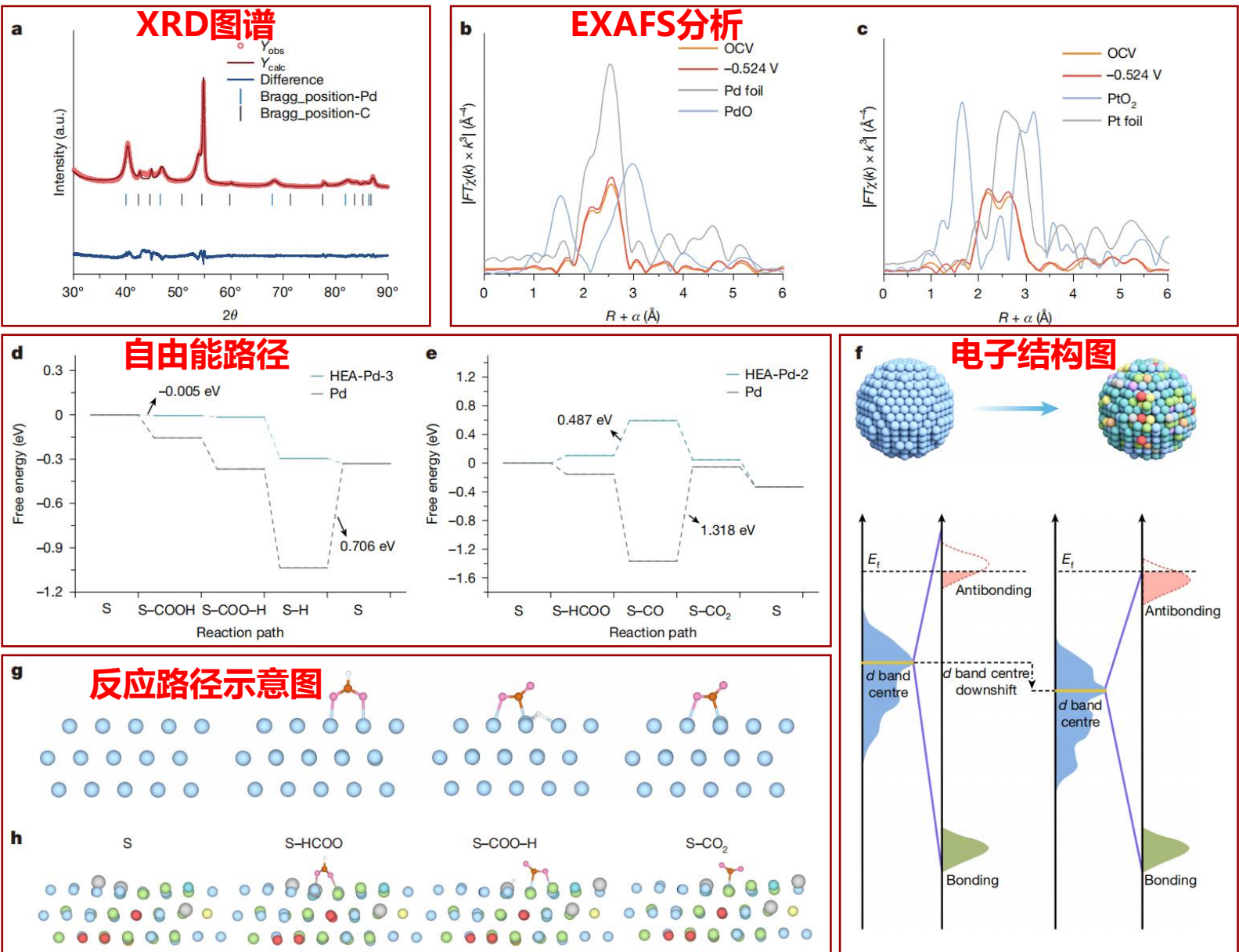


**发现新材料：**确定了Pd-Pt-Cu-Au-Ir-Ce-Nb-Cr八元合金。

**对比基准：**在电流响应、电压响应、功率密度方面表现更优。



# 最终成果——高性能八元催化剂



- **XRD图谱**: 晶体结构更加稳定
- **EXAFS分析**: 不同电位下原子结构变化较为稳定
- **自由能路径**: 活化能较低, 更容易启动反应, 在催化反应中更加高效
- **电子结构图**: 调整d带中心位置, 更适合吸附反应物, 增强催化活性
- **反应路径示意图**: 更好的吸附能力, 有助于加速反应