

Article | Published: 23 September 2025

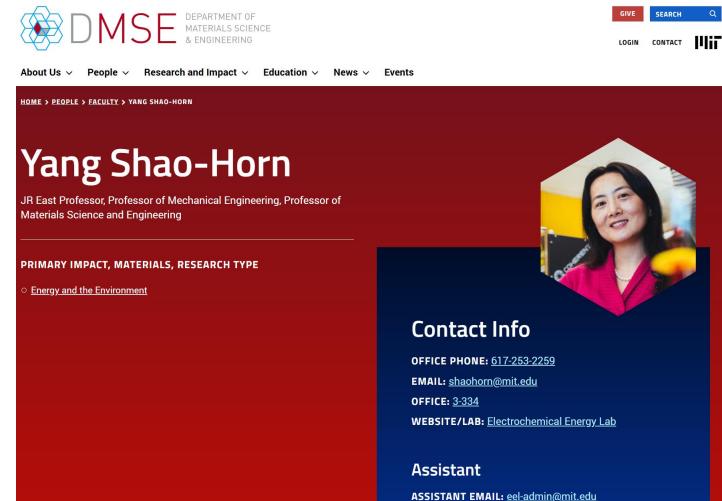
A multimodal robotic platform for multi-element electrocatalyst discovery

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](#)



The screenshot shows the DMSE website's faculty page for Yang Shao-Horn. At the top right are navigation links: GIVE, SEARCH, LOGIN, CONTACT, and a magnifying glass icon. Below the header is a navigation bar with links: About Us, People, Research and Impact, Education, News, and Events. A breadcrumb trail indicates the current location: HOME > PEOPLE > FACULTY > YANG SHAO-HORN. The main content area features a large portrait of Yang Shao-Horn, a bio stating she is a JR East Professor, Professor of Mechanical Engineering, Professor of Materials Science and Engineering, and her research focus on PRIMARY IMPACT, MATERIALS, RESEARCH TYPE (Energy and the Environment). On the right side, there is a "Contact Info" section with office details: OFFICE PHONE: 617-253-2259, EMAIL: shaohorn@mit.edu, OFFICE: 3-334, WEBSITE/LAB: Electrochemical Energy Lab. Below this is an "Assistant" section with an email: ASSISTANT EMAIL: eel.admin@mit.edu.

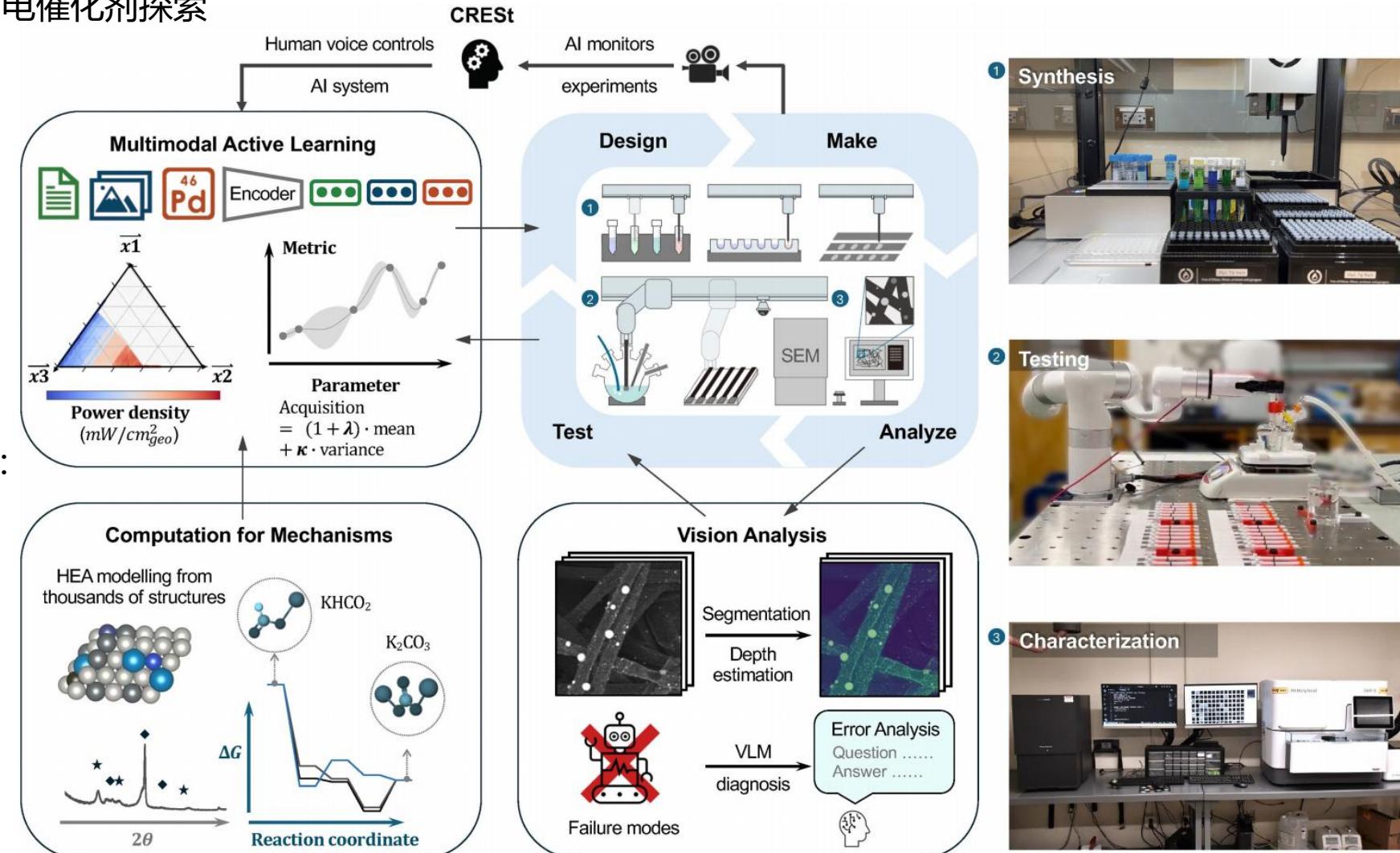


The screenshot shows the DMSE website's faculty page for Ju Li. The layout is identical to the one for Yang Shao-Horn, with the same header, navigation bar, and breadcrumb trail. The main content area features a large portrait of Ju Li, a bio stating he is a Carl Richard Soderberg Professor in Power Engineering, Professor of Materials Science and Engineering, and his research focus on 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). The right side contains the "Contact Info" and "Assistant" sections.

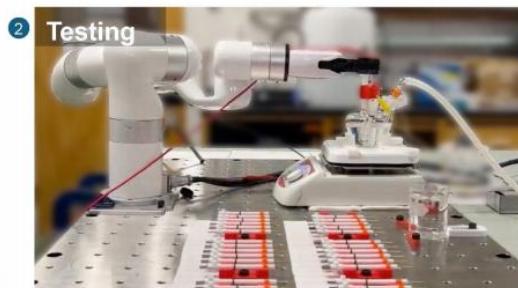
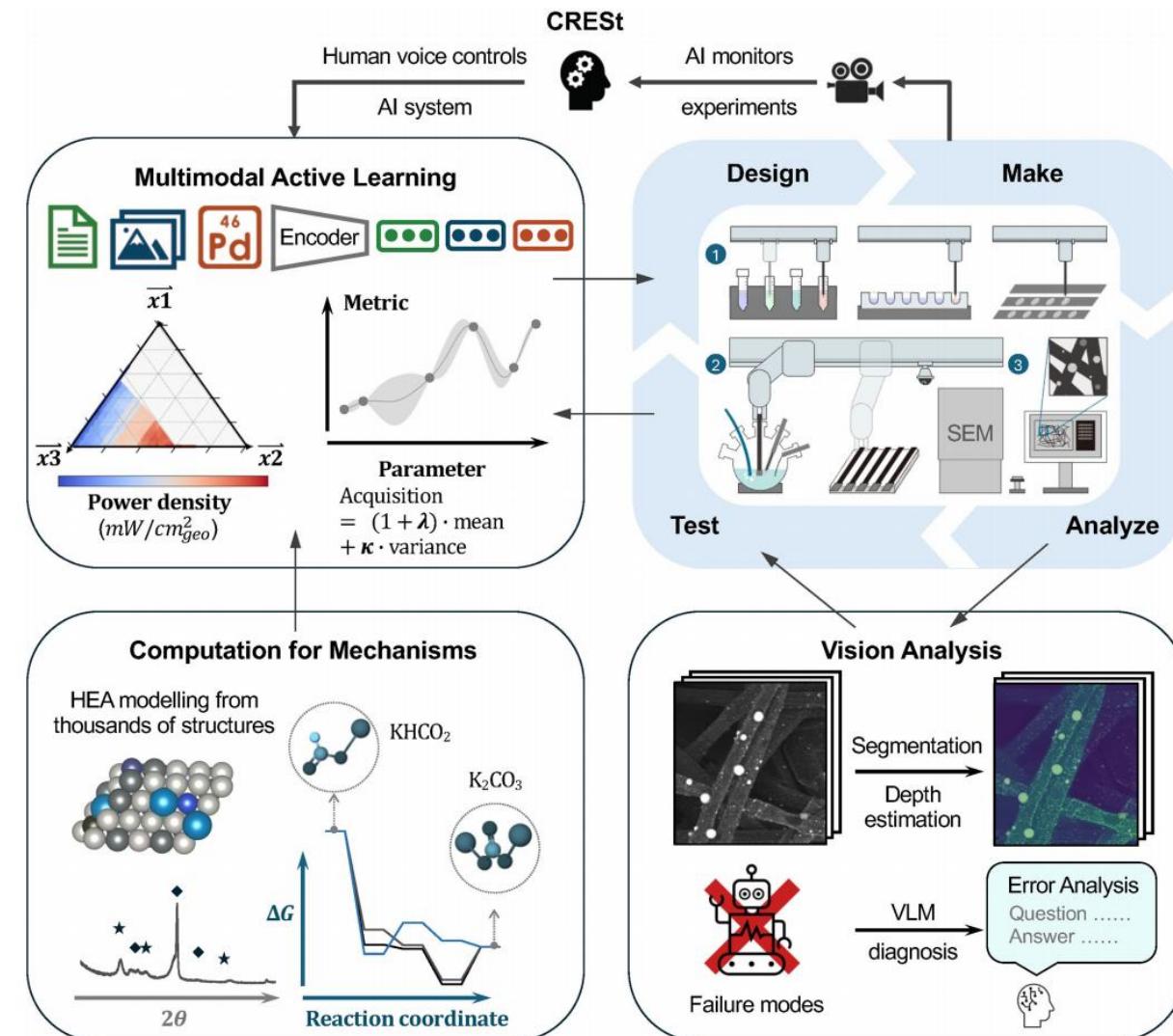
多模态机器人平台 CRESt

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，成本特异性能提高9.3倍（成本特异性能：指在考虑材料或设备的成本因素后，其性能的衡量标准）



CRESt 系统架构



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（ $2 * 10^{17}$ ），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。

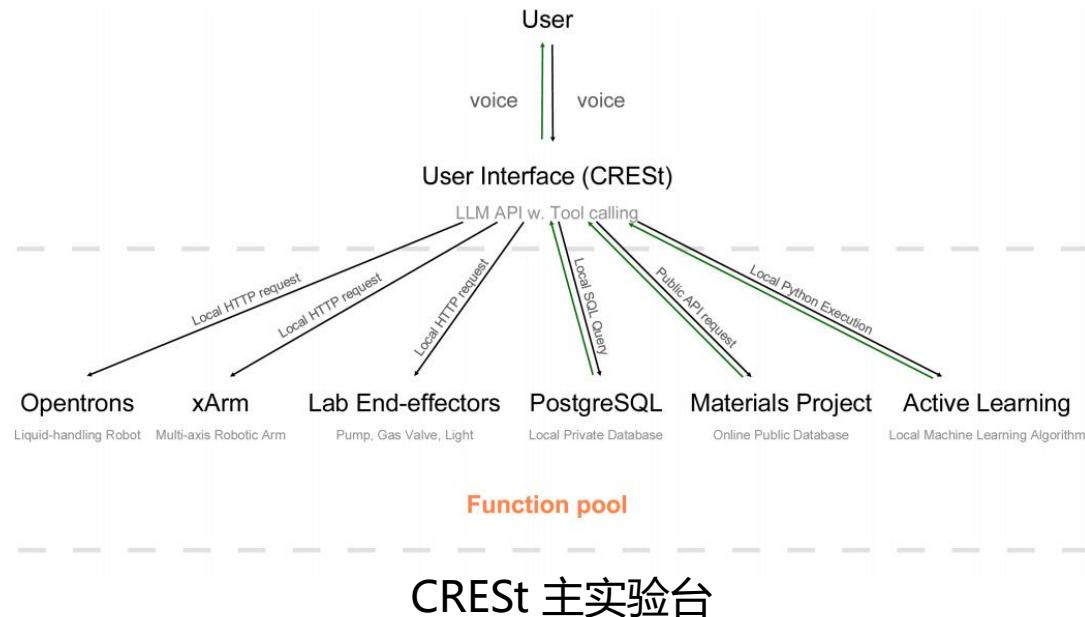
←多模态（文献知识&显微图像）

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。

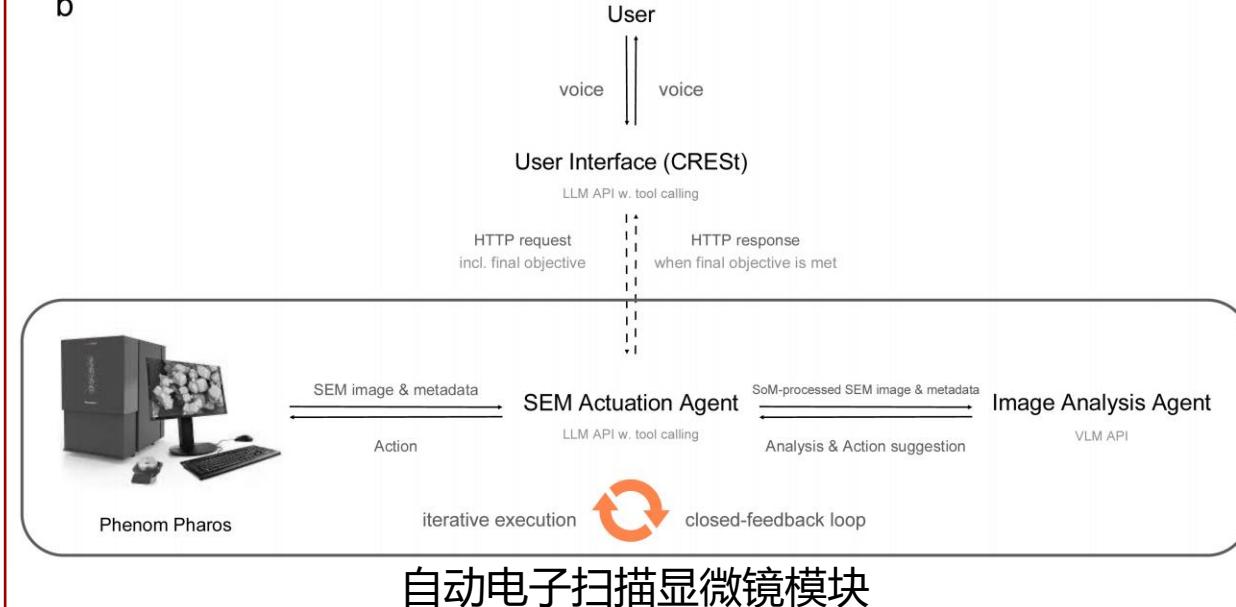
←大模型分析&纠错

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

a



b



自动电子扫描显微镜模块

主要功能：

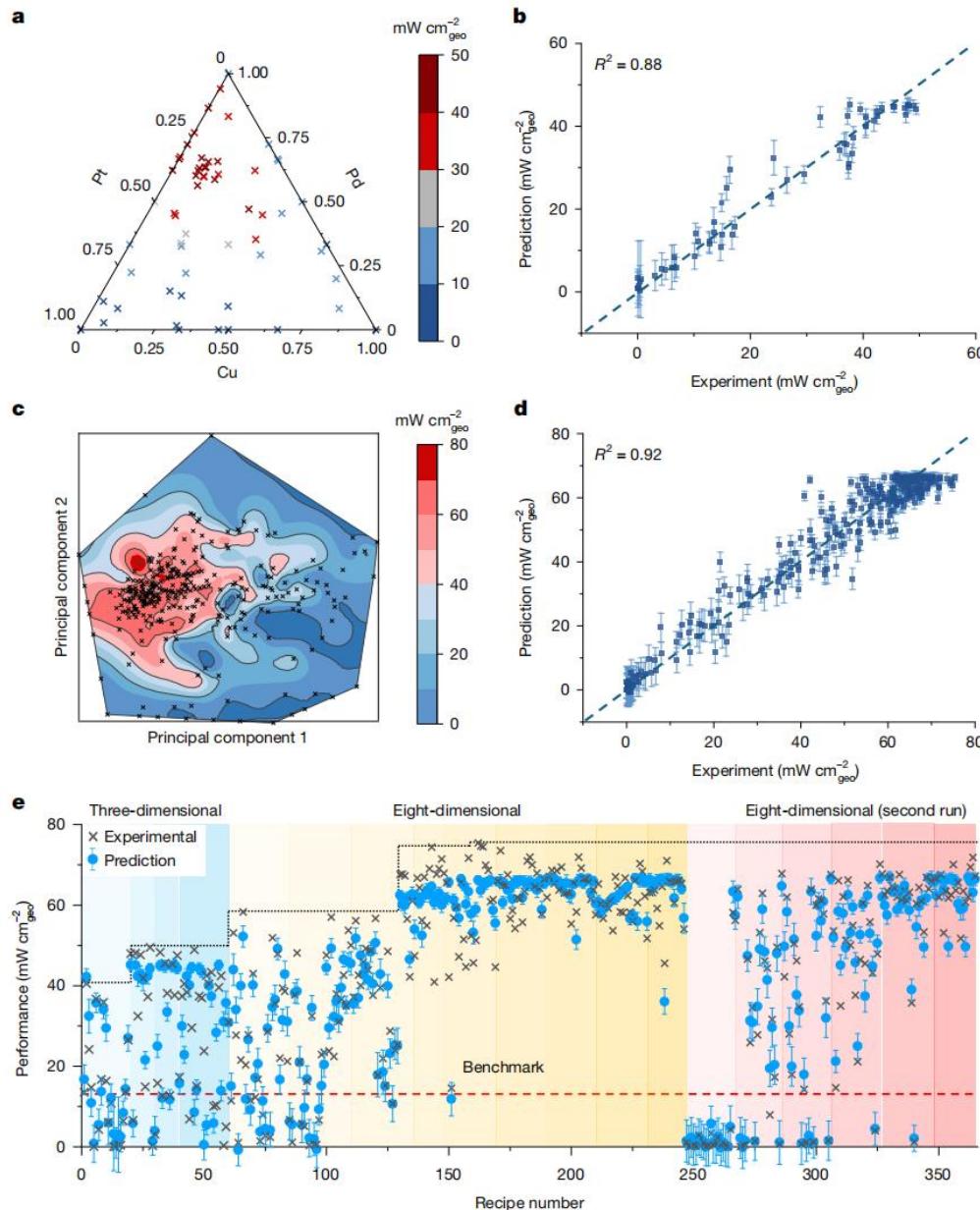
- 本地HTTP请求和公共API请求：**与外部资源或系统的连接，获取数据或执行外部任务。
- 本地SQL查询：**用于从本地数据库中查询数据。
- 本地机器学习算法：**Active Learning用于分析和优化实验过程，选择最重要的数据进行学习，提高实验效率。

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

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



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。

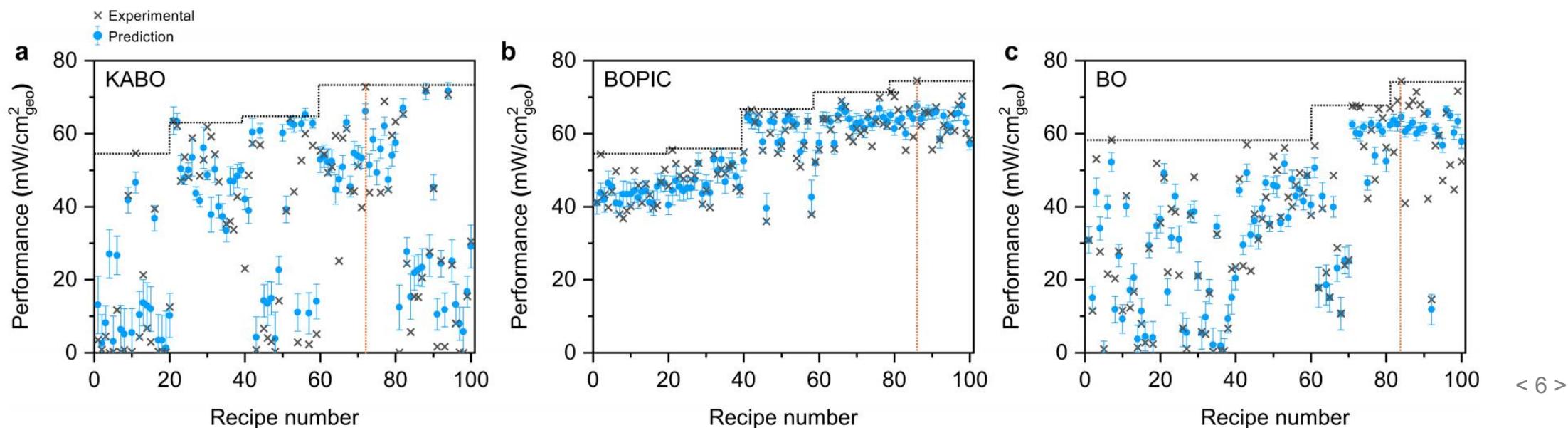
3. 降维与优化：

- 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%以上的信息变异性。
- 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)

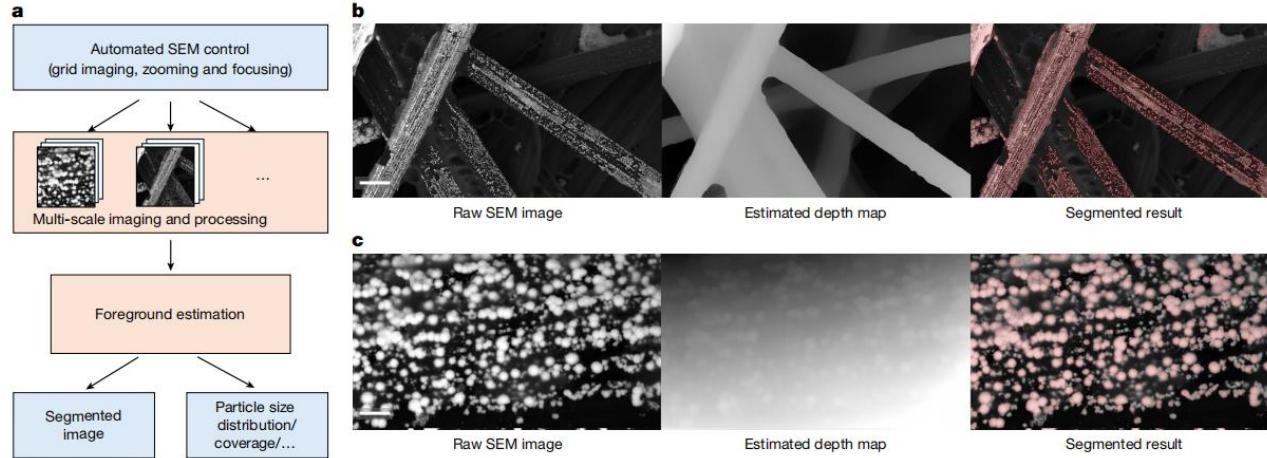
- **KABO**: Knowledge-Assisted Bayesian Optimization 知识辅助贝叶斯优化
利用LLM（大语言模型）从文献中提取的“先验知识”来初始化和指导搜索。
- **BOPIC**: Bayesian Optimization with Policy Improvement Constraints 带有策略改进约束的贝叶斯优化
引入了一个动态调节机制（拉格朗日乘数），自动平衡“探索”（去未知区域看看）和“利用”（在已知好区域深挖）之间的关系。

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。



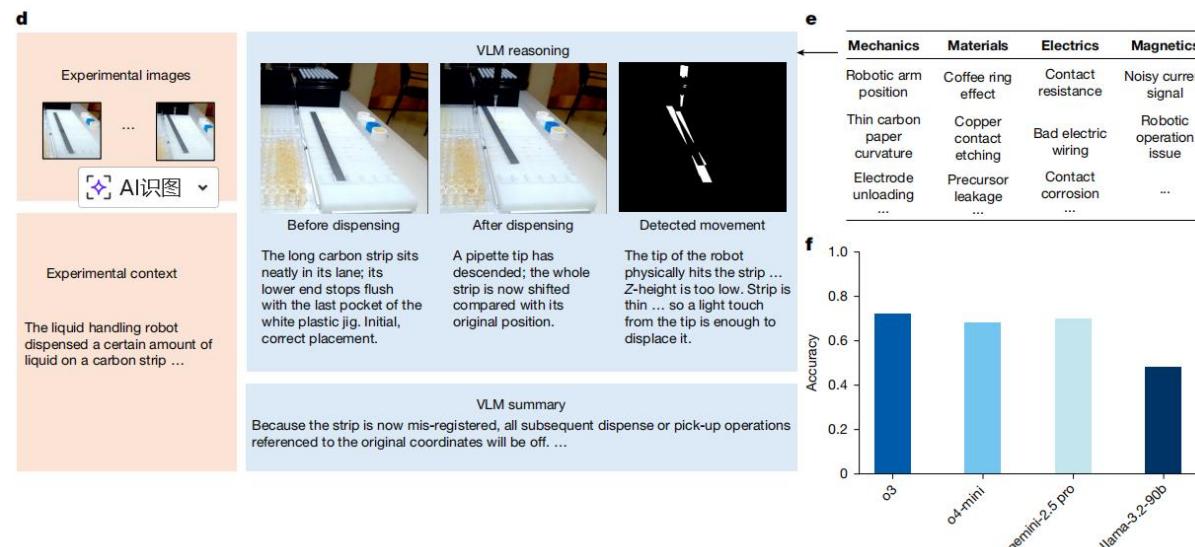
核心技术 II——视觉：自动SEM & 实验错误诊断

自动SEM

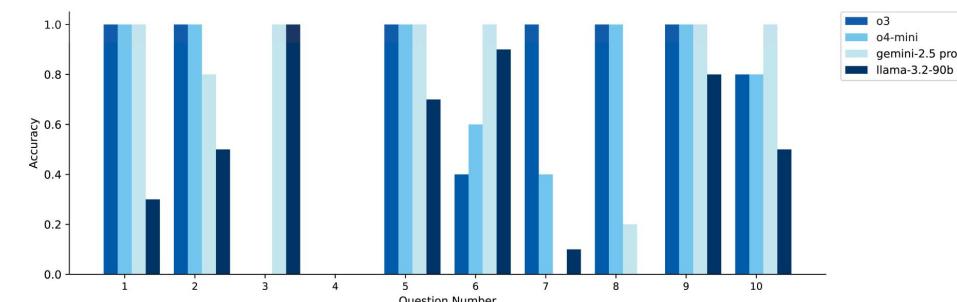


- 自动扫描电子显微镜控制
- 多尺度图像处理
- 前景估计

实验错误诊断

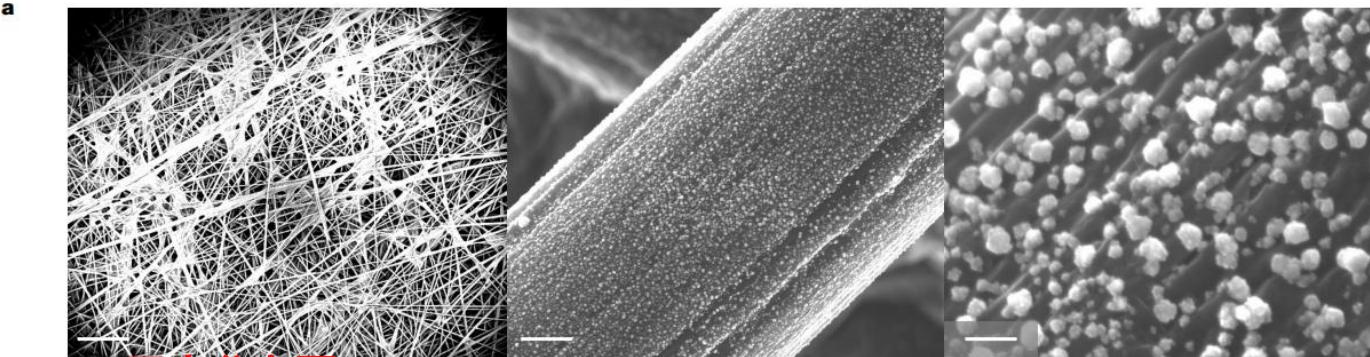


- **异常诊断：**利用VLM(API)监控实验视频，发现物理异常(如移液枪头碰歪样品)
- **自我修正：**不仅发现错误，还能提出解决方案，形成闭环

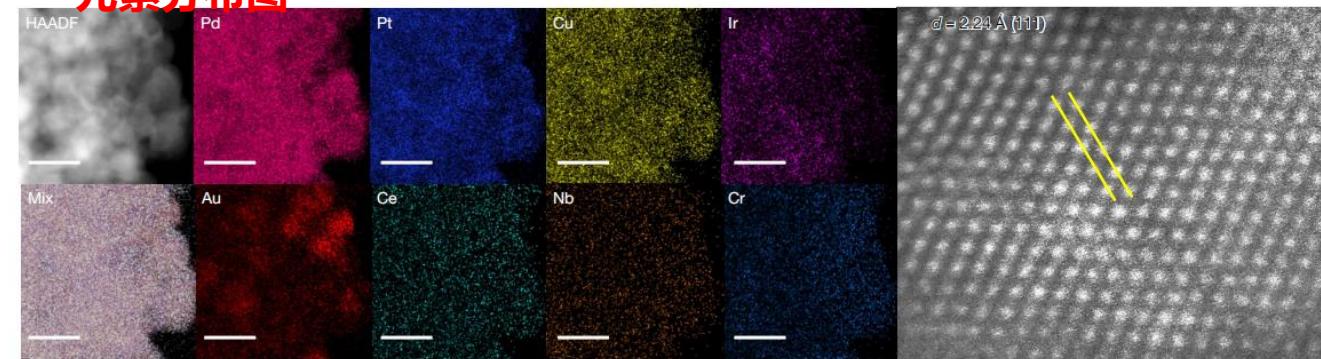


最终成果——高性能八元催化剂

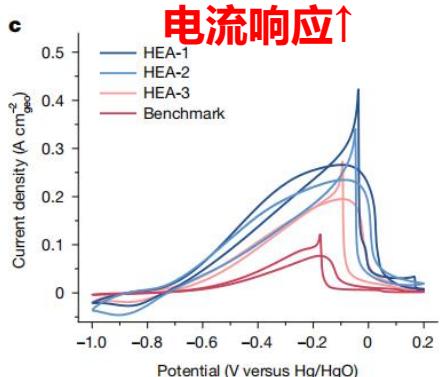
SEM图像



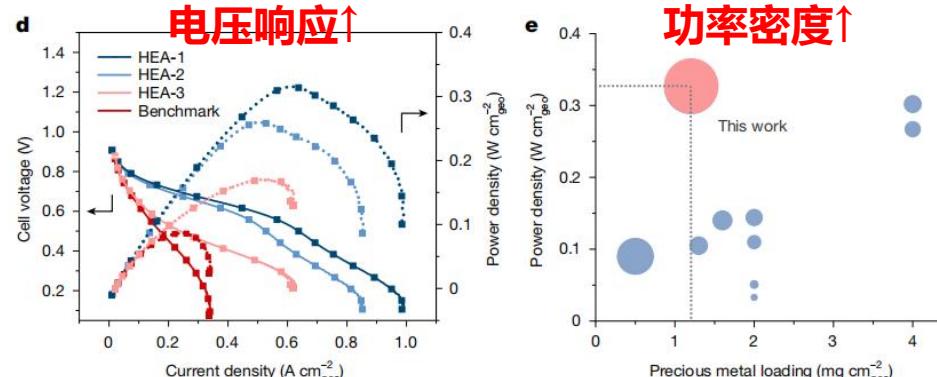
元素分布图



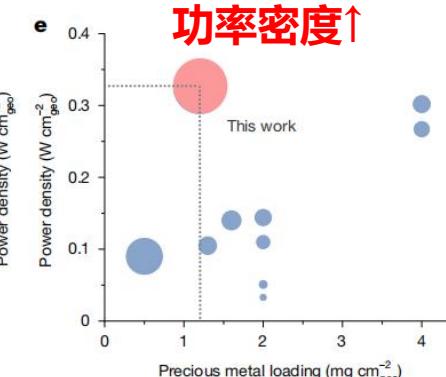
电流响应↑



电压响应↑



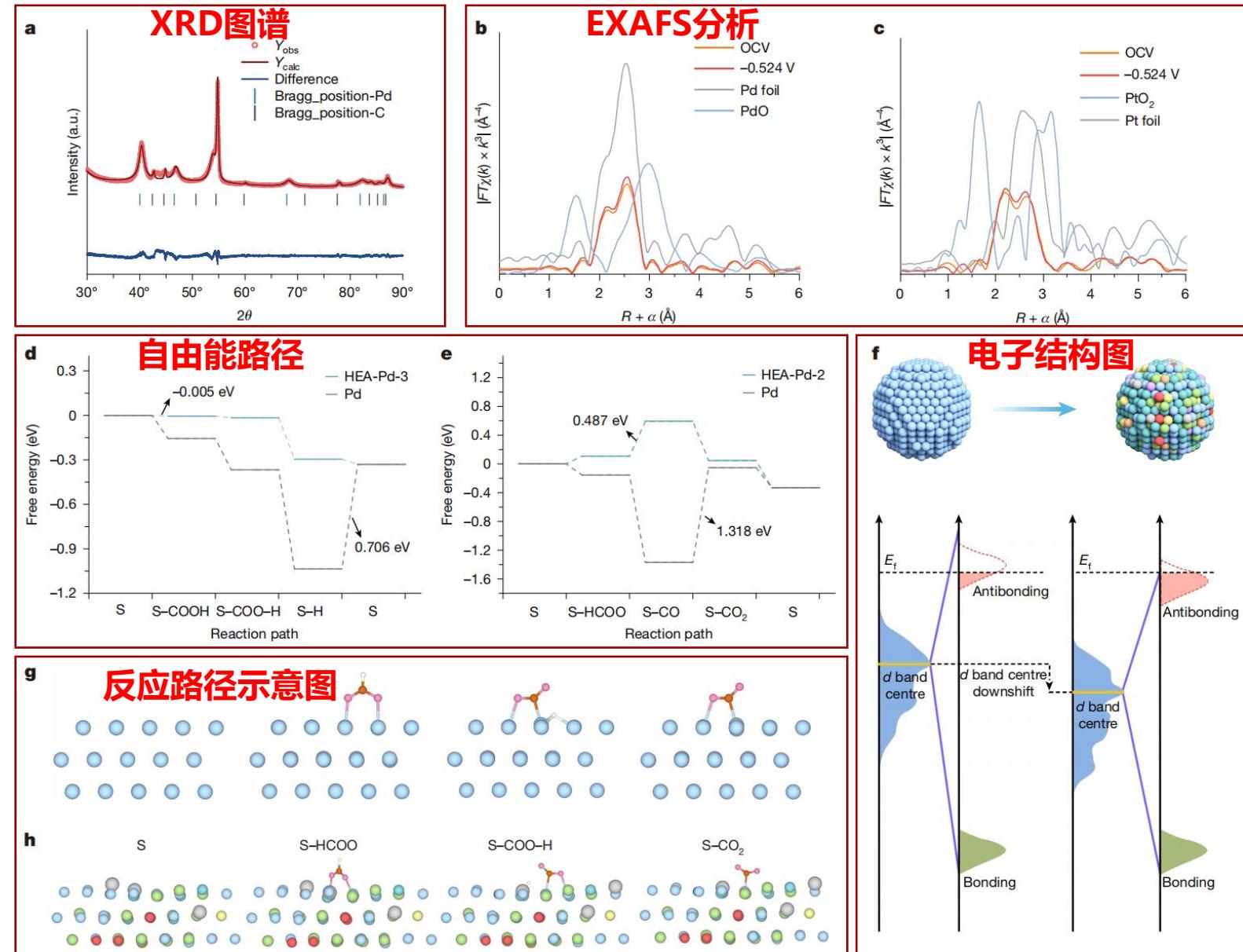
功率密度↑



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