



(10) 授权公告号 CN 119005347 B

(45) 授权公告日 2025. 01. 03

(21) 申请号 202411488338.6

G06N 5/022 (2023.01)

(22) 申请日 2024.10.24

(56) 对比文件

(65) 同一申请的已公布的文献号

CN 114564567 A, 2022.05.31

申请公布号 CN 119005347 A

CN 116663839 A, 2023.08.29

(43) 申请公布日 2024.11.22

审查员 徐盛辉

(73) 专利权人 中国科学技术大学

地址 230026 安徽省合肥市包河区金寨路
96号(72) 发明人 江俊 尚伟伟 张飞 陈林江
宋涛(74) 专利代理机构 北京凯特来知识产权代理有
限公司 11260

专利代理师 付久春 郑立明

(51) Int. Cl.

G06N 5/043 (2023.01)

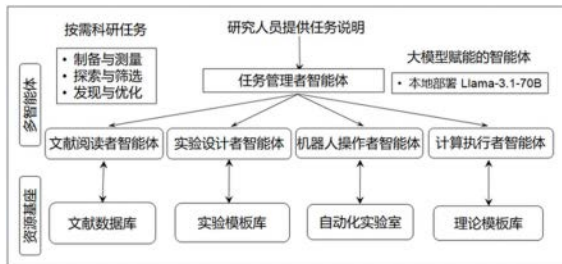
权利要求书4页 说明书14页 附图6页

(54) 发明名称

一种多智能体驱动的机器人人工智能化学
家系统

(57) 摘要

本发明公开一种多智能体驱动的机器人人工智能化学家系统,属机器人化学实验系统领域,包括:任务管理者智能体,能根据研究人员输入的化学实验目标说明,协调其它各智能体协同完成对应化学实验操作;文献阅读者智能体,能挖掘文献数据库,从中积累与给定的化学实验操作相关知识;实验设计者智能体,能接收任务管理者智能体的对应化学实验操作的预期实验指令,计划实验任务,利用实验模板库一步步生成化学实验程序;机器人操作者智能体,能将化学实验程序转换为操作自动化实验室的机器人和工作站的代码和命令,使它们按代码和命令执行完成对应的化学实验操作。该系统能以最小的人为干预执行复杂的、多步骤的化学实验,提升化学实验效率。



1. 一种多智能体驱动的机器人人工智能化学家系统,其特征在于,包括:

任务管理者智能体、文献阅读者智能体、实验设计者智能体、机器人操作者智能体、文献数据库、实验模板库和自动化实验室;其中,

所述任务管理者智能体、文献阅读者智能体、实验设计者智能体、机器人操作者智能体均采用基于大语言模型的智能体;

所述任务管理者智能体,分别与所述文献阅读者智能体、实验设计者智能体和机器人操作者智能体通信连接,能与人类研究人员交互,根据人类研究人员输入的目标化学任务的描述信息,协调所述文献阅读者智能体、实验设计者智能体和机器人操作者智能体协同完成对应于目标化学任务的化学实验操作;

所述文献阅读者智能体,与所述文献数据库通信连接,能接收所述任务管理者智能体给出的与目标化学任务相关的关键词,根据关键词搜索所述文献数据库,并从中挖掘出与目标化学任务相关的知识,并将与目标化学任务相关的知识传送给所述任务管理者智能体;

所述实验设计者智能体,与所述实验模板库通信连接,能接收所述任务管理者智能体转发的由所述文献阅读者智能体挖掘出的与目标化学任务相关的知识,并根据知识生成对应于目标化学任务的化学实验指令,计划化学实验操作,并利用实验模板库一步步生成化学实验程序,并将所述化学实验程序传送给所述任务管理者智能体;

所述机器人操作者智能体,与所述自动化实验室通信连接,能接收所述任务管理者智能体转发的所述实验设计者智能体生成的化学实验程序,并将所述化学实验程序转换为操作自动化实验室的机器人和工作站的代码,使所述机器人和 workstation 按代码执行,完成对应于目标化学任务的化学实验操作。

2. 根据权利要求1所述的多智能体驱动的机器人人工智能化学家系统,其特征在于,所述任务管理者智能体、文献阅读者智能体、实验设计者智能体、机器人操作者智能体所采用的大语言模型为开源大语言模型、商用大语言模型中的任一种;

所述目标化学任务包括:制备与测量的化学实验任务、探索与筛选的化学实验任务。

3. 根据权利要求1或2所述的多智能体驱动的机器人人工智能化学家系统,其特征在于,所述文献数据库为包含多篇化学和材料科学学科的科学出版物的标题和摘要的数据库;

所述文献阅读者智能体分别设有文献检索工具和文献挖掘工具,该文献阅读者智能体能接收由所述任务管理者智能体提供的与目标化学任务相关的关键词,并通过文献检索工具利用接收的关键词从所述文献数据库中检索收集与目标化学任务相关的出版物标题和摘要;并将检索收集的出版物标题和摘要传送给文献挖掘工具,由所述文献挖掘工具采用无监督句法距离分析方法挖掘出版物标题和摘要对应文献中的数据,从数据中提取化学物质、物理化学性质、化学和/或材料功能、实验条件各信息,并将提取的信息生成作为设计化学实验操作先验知识的统计数据,将统计数据作为与目标化学任务相关的知识传送给所述任务管理者智能体。

4. 根据权利要求1或2所述的多智能体驱动的机器人人工智能化学家系统,其特征在于,所述实验模板库包含自动化实验室的历史实验的化学实验程序模板以及自动化实验室中各个 workstation 的各种配置协议,各种配置协议以 XML 格式存储,并以自然语言描述化学实验

程序模板的实验步骤和参数;

所述实验设计者智能体包括:协议编写器和协议评论器;其中,

所述协议编写器,与所述任务管理者智能体通信连接,是基于大语言模型的智能体,设有协议搜索工具和站点查询工具,能根据收到的任务管理者智能体对目标化学任务的描述信息,调用所述协议搜索工具在实验模板库中寻找最佳匹配的化学实验程序模板,若发现最佳匹配的化学实验程序模板,则引用最佳匹配的化学实验程序模板,并调整该化学实验程序模板的实验步骤和参数,来制定针对目标化学任务对应的化学实验操作的实验程序;若没有现有的化学实验程序模板,则调用所述站点查询工具获取自动化实验室能用的工作站的站点列表,根据站点列表规划实验 workflow,基于大语言模型功能生成一个针对目标化学任务对应的化学实验操作的化学实验程序;

所述协议评论器,与所述协议编写器通信连接,是基于大语言模型的智能体,能根据预定义的程序检查专家规则审查、批评和改进所述协议编写器得出的化学实验程序,并以与化学实验程序模板统一的格式输出最终的化学实验程序。

5. 根据权利要求4所述的多智能体驱动的机器人人工智能化学家系统,其特征在于,所述协议评论器所使用的程序检查专家规则如下:

- (1) 检查化学实验程序的第一步是“从样本架工作站取回架”;
- (2) 检查化学实验程序中的最后一步是“将架子放入样品架工作站”;
- (3) 添加样品后,请确保所有实验参数不超过过程中样品瓶的最大容量;
- (4) 固体分配工作站和液体分配工作站的实验参数以质量为单位;
- (5) 气相色谱工作站前的工作站是封装站;
- (6) 使用电催化工作站前,确保测试瓶中有液体;
- (7) 在使用紫外-可见光谱工作站之前,确保测试瓶中有液体。

6. 根据权利要求1或2所述的多智能体驱动的机器人人工智能化学家系统,其特征在于,所述自动化实验室包括:多个机器人、多个自动化工作站和机器人应用接口;其中,多个所述机器人包括:移动式机器人和台式机器人;

多个所述自动化工作站包括:样品架工作站、液体分配工作站、固体分配工作站、磁搅拌工作站、离心工作站、煅烧工作站、吸液工作站、干燥工作站、超声波工作站、封装工作站、光催化工作站、气相色谱工作站、样品制备工作站、拉曼光谱工作站、红外光谱工作站、紫外-可见光谱工作站、荧光光谱工作站、x射线衍射工作站、激光诱导击穿光谱工作站和电催化工作站;

所述机器人应用接口包括:视觉定位应用接口、运动规划应用接口、实验操作应用接口和仪器通讯应用接口;

所述机器人操作者智能体包括:代码编写器、代码评论器和代码校对器;其中,

所述代码编写器,分别与所述自动化实验室的机器人应用接口和代码评论器通信连接,是基于大语言模型的智能体,设有机器人应用接口查询工具,能根据接收的实验设计者智能体生成的化学实验程序,通过所述机器人应用接口查询工具获取所述自动化实验室的各机器人的能使用的机器人应用接口,并根据接收的化学实验程序和查询的能使用的机器人应用接口利用大语言模型的功能编写一个与化学实验程序对应的操作机器人的代码;

所述代码评论器,与所述代码校对器通信连接,是基于大语言模型的智能体,能根据代

码检查专家规则来检查、纠正、批评和改进所述代码编写器编写的代码；

所述代码校对器,分别与所述自动化实验室的机器人应用接口和代码评论器通信连接,是基于大语言模型的智能体,能利用所述机器人应用接口查询工具查询获取所述自动化实验室的各机器人的能使用的机器人应用接口,对接收的所述代码评论器传送的程序代码进行校对,并将校对后的代码传送给自动化实验室,由自动化实验室的机器人执行校对后的代码。

7. 根据权利要求6所述的多智能体驱动的机器人人工智能化学家系统,其特征在于,所述代码检查专家规则如下:

- (1) 在新工作站操作前必须进行视觉定位;
- (2) 调用'locate()'函数后,'locate()'函数获得的先前操作姿势将无效;
- (3) 如果在两个相邻步骤中操作的工作站相同,则不需要重复移动和视觉定位;
- (4) 只有固体分配工作站、液体分配工作站、离心机工作站、封装工作站、光催化工作站和气相色谱工作站需要放置测试瓶;其他工作站应按要求直接放置样品架;
- (5) 每个样品架能容纳10个测试瓶,每个合成实验对应一个特定的测试瓶;请不要更改瓶号以避免错误;调用需要指定瓶号的函数时要小心,因为编号从0开始;
- (6) 样品架编号也从0开始,每个合成实验对应于特定样品架中的一个测试瓶;确保整个程序中样品架编号的一致性,以避免错误;
- (7) 固体分配工作站和液体分配工作站的实验参数必须以质量单位为单位;
- (8) 所有工作站的时间参数,包括磁搅拌工作站和离心工作站,必须以秒为单位;
- (9) 调用'wait()'函数所需的时间明显长于调用其他函数;但是,根据限制,您仍然需要在必要时调用'wait()'函数;
- (10) 液体分配工作站具有10个通道的容量,相邻的液体取样操作不需要重复拿取和放置测试瓶;只需要仪器通信即能改变液体类型并继续取样;
- (11) 你需要严格遵循给定的化学实验操作顺序,并尽可能减少运行时间。

8. 根据权利要求1或2所述的多智能体驱动的机器人人工智能化学家系统,其特征在于,还包括:计算执行者智能体和理论模型库;其中,

所述计算执行者智能体,分别与所述任务管理者智能体和理论模型库通信连接,是基于大语言模型的智能体,能根据接收的所述任务管理者智能体传送的目标化学任务的相关信息,在所述理论模型库中搜索出合适的预训练模型,并根据对应的方法使用搜索出的预训练模型,通过模型融合将预训练模型与所述机器人操作者智能体得出的实验数据进行融合得到融合模型,通过贝叶斯优化在得出的融合模型上进行优化得出优化的实验数据,并将得出的优化的实验数据传送给所述任务管理者智能体,用于所述机器人操作者智能体的后续操作。

9. 根据权利要求8所述的多智能体驱动的机器人人工智能化学家系统,其特征在于,所述理论模型库中存储历史出版物的预先训练的机器学习模型、针对机器人人工智能化学家开发的机器学习模型和开源的机器学习模型;

所述计算执行者智能体包括:

计算任务管理者智能体、模型搜索工具、模型融合工具、贝叶斯优化器和深度学习计算平台;其中,

所述计算任务管理者智能体,分别与所述任务管理者智能体、模型搜索工具、深度学习计算平台、模型融合工具和贝叶斯优化器通信连接,是基于大语言模型的智能体,能接收所述任务管理者智能体发送的输入信息,所述输入信息包括:目标化学任务的关键字、目标化学任务的详细描述信息和机器人操作者智能体的实验结果信息,调用所述模型搜索工具用关键字在理论模型库中搜索获得一个合适的预训练机器学习模型,调用所述模型融合工具将预训练机器学习模型与所述机器人操作者智能体得出的实验数据进行融合得到一个融合模型,调用所述贝叶斯优化器对融合模型进行优化并生成机器学习代码,由所述深度学习计算平台接收并执行生成的机器学习代码得到对应于目标化学任务的化学实验操作参数的预测结果作为优化的实验数据,并将优化的实验数据传送给所述任务管理者智能体,用于所述机器人操作者智能体的后续操作。

10. 根据权利要求8所述的多智能体驱动的机器人人工智能化学家系统,其特征在于,所述目标化学任务为发现与优化的化学实验任务。

一种多智能体驱动的机器人人工智能化学家系统

技术领域

[0001] 本发明涉及机器人化学实验系统技术领域,尤其涉及一种多智能体驱动的机器人人工智能化学家系统。

背景技术

[0002] 目前由大语言模型 (LLM) 驱动的“智能体”在自然语言处理、自主任务执行和协作解决问题的方面提供了健壮的能力。它们与外部工具和平台的集成使它们能够在不同领域执行广泛的任务,包括化学,在这些领域它们正在彻底改变研究和发现过程。其中一个国外研究例1就是ChemCrow,这是一种由GPT-4驱动的智能体,旨在简化各种常见化学任务的推理过程,包括有机合成、药物发现和材料设计。它的操作方式是依次提示GPT-4,引导它推理任务的当前状态,考虑它与最终目标的相关性,并相应地计划下一个步骤。ChemCrow已被证明是专家化学家的有效助手,同时也通过提供一个简单的界面来获取准确的化学知识,降低了非专家的入门门槛。更普遍的,LLM驱动的智能体是一种自主系统,它利用LLM的能力,以一种模仿类似人类的理解和推理的方式来解释、处理和响应文本输入。它们与外部工具和平台的集成使它们能够在自主任务执行和协作解决问题方面提供强大的能力,从而提高生产力,加速创新,并使先进的研究工具更加普及。

[0003] 与在化学和材料研究中快速采用大语言模型的同时,机器人技术在实验室自动化方面也取得了重大进展,提供了不同的系统,以满足自主化学研究的复杂需求。这些平台包括但不限于,处理高通量实验的自动化平台,执行精确操作的台式固定机械臂,以及在实验室环境中导航以执行和协调复杂任务的移动机器人。更复杂的装置包括能够执行复杂、协调任务的双臂机器人,它们能够模仿人类化学家的灵巧性,以及能够无缝协作以优化工作流程效率和产出的多机器人系统。自然,自动化机器人硬件与LLM技术的集成成为自主化学研究的一个新研究方向。例如,国外研究例2的Boiko等人建立了Co-scientist的,这是一个GPT-4驱动的人工智能系统,能够通过互联网和文档搜索、代码执行和实验自动化来半自主地设计、规划和执行实验。

[0004] 尽管最近由大语言模型推动的自主化学研究取得了这些进展,但当面对复杂的实验场景,如多步骤、多实验工作站和/或多机器人设置时,挑战出现了:如何有效地利用大语言模型来构建一个能够熟练地执行复杂化学任务的自动化系统?在单次请求中为LLM分配过于复杂的任务是不切实际的。同样,在自主化学中,一次或在一次对话中提示LLM执行一系列实验任务也是不切实际的,这些任务可能涉及解释给定问题、生成测试假设、规划实验程序、为机器人执行指令、调整假设、为后续实验做出决策等等。

[0005] 有鉴于此,特提出本发明。

发明内容

[0006] 本发明的目的是提供了一种多智能体驱动的机器人人工智能化学家系统,能实现智能体之间协作和协调共同处理复杂的化学实验操作并实现确定的化学实验目标,提升单

个大语言模型智能体的有效性,以最小的人为干预执行复杂的、多步骤的化学实验,提升化学实验效率,满足不同的化学实验需求,进而解决现有技术中存在的上述技术问题。

[0007] 本发明的目的是通过以下技术方案实现的:

[0008] 一种多智能体驱动的机器人人工智能化学家系统,包括:

[0009] 任务管理者智能体、文献阅读者智能体、实验设计者智能体、机器人操作者智能体、文献数据库、实验模板库和自动化实验室;其中,

[0010] 所述任务管理者智能体、文献阅读者智能体、实验设计者智能体、机器人操作者智能体均采用基于大语言模型的智能体;

[0011] 所述任务管理者智能体,分别与所述文献阅读者智能体、实验设计者智能体和机器人操作者智能体通信连接,能与人类研究人员交互,根据人类研究人员输入的目标化学任务的描述信息,协调所述文献阅读者智能体、实验设计者智能体和机器人操作者智能体协同完成对应于目标化学任务的化学实验操作;

[0012] 所述文献阅读者智能体,与所述文献数据库通信连接,能接收所述任务管理者智能体给出的与目标化学任务相关的关键词,根据关键词搜索所述文献数据库,并从中挖掘出与目标化学任务相关的知识,并将与目标化学任务相关的知识传送给所述任务管理者智能体;

[0013] 所述实验设计者智能体,与所述实验模板库通信连接,能接收所述任务管理者智能体转发的由所述文献阅读者智能体挖掘出的与目标化学任务相关的知识,并根据知识生成对应于目标化学任务的化学实验指令,计划化学实验操作,并利用实验模板库一步步生成化学实验程序,并将所述化学实验程序传送给所述任务管理者智能体;

[0014] 所述机器人操作者智能体,与所述自动化实验室通信连接,能接收所述任务管理者智能体转发的所述实验设计者智能体生成的化学实验程序,并将所述化学实验程序转换为操作自动化实验室的机器人和工作站的代码,使所述机器人和工作站按代码执行,完成对应于目标化学任务的化学实验操作。

[0015] 与现有技术相比,本发明所提供的多智能体驱动的机器人人工智能化学家系统,其有益效果包括:

[0016] 通过设置任务管理者智能体、文献阅读者智能体、实验设计者智能体和机器人操作者智能体,由任务管理者智能体协同控制文献阅读者智能体、实验设计者智能体和机器人操作者智能体,分别控制文献数据库、实验模板库和自动化实验室,通过形成的这种基于大语言模型的分层多智能体系统,实现智能体之间的协作和协调,每个智能体都具有独特的角色和相关能力,且任务管理者智能体放大了单个大语言模型智能体的有效性,使它们能够共同处理复杂的任务并实现确定的化学实验操作目标,能很好的满足不同的化学实验需求。

附图说明

[0017] 为了更清楚地说明本发明实施例的技术方案,下面将对实施例描述中所需要使用的附图作简单地介绍,显而易见地,下面描述中的附图仅仅是本发明的一些实施例,对于本领域的普通技术人员来讲,在不付出创造性劳动的前提下,还可以根据这些附图获得其他附图。

[0018] 图1为本发明实施例提供的多智能体驱动的机器人人工智能化学家系统的构成示意图。

[0019] 图2为本发明实施例提供的机器人人工智能化学家系统的文献读者智能体构成示意图。

[0020] 图3为本发明实施例提供的机器人人工智能化学家系统的实验设计者智能体构成示意图。

[0021] 图4为本发明实施例提供的机器人人工智能化学家系统的机器人操作者智能体构成示意图。

[0022] 图5为本发明实施例提供的机器人人工智能化学家系统的计算执行者智能体构成示意图。

[0023] 图6为本发明实施例2提供的机器人人工智能化学家系统处理任务1的实验结果示意图。

[0024] 图7为本发明实施例3提供的机器人人工智能化学家系统处理任务2的实验结果示意图。

[0025] 图8为本发明实施例4提供的机器人人工智能化学家系统处理任务3的实验流程图。

[0026] 图9为本发明实施例4提供的机器人人工智能化学家系统处理任务3的实验结果示意图。

具体实施方式

[0027] 下面结合本发明的具体内容,对本发明实施例中的技术方案进行清楚、完整地描述;显然,所描述的实施例仅仅是本发明一部分实施例,而不是全部的实施例,这并不构成对本发明的限制。基于本发明的实施例,本领域普通技术人员在没有做出创造性劳动前提下所获得的所有其他实施例,都属于本发明的保护范围。

[0028] 首先对本文中可能使用的术语进行如下说明:

[0029] 术语“和/或”是表示两者任一或两者同时均可实现,例如,X和/或Y表示既包括“X”或“Y”的情况也包括“X和Y”的三种情况。

[0030] 术语“包括”、“包含”、“含有”、“具有”或其它类似语义的描述,应被解释为非排它性的包括。例如:包括某技术特征要素(如原料、组分、成分、载体、剂型、材料、尺寸、零件、部件、机构、装置、步骤、工序、方法、反应条件、加工条件、参数、算法、信号、数据、产品或制品等),应被解释为不仅包括明确列出的某技术特征要素,还可以包括未明确列出的本领域公知的其它技术特征要素。

[0031] 术语“由……组成”表示排除任何未明确列出的技术特征要素。若将该术语用于权利要求中,则该术语将使权利要求成为封闭式,使其不包含除明确列出的技术特征要素以外的技术特征要素,但与其相关的常规杂质除外。如果该术语只是出现在权利要求的某子句中,那么其仅限定在该子句中明确列出的要素,其他子句中所记载的要素并不被排除在整体权利要求之外。

[0032] 除另有明确的规定或限定外,术语“安装”、“相连”、“连接”、“固定”等术语应做广义理解,例如:可以是固定连接,也可以是可拆卸连接,或一体地连接;可以是机械连接,也

可以是电连接;可以是直接相连,也可以通过中间媒介间接相连,可以是两个元件内部的连通。对于本领域的普通技术人员而言,可以根据具体情况理解上述术语在本文中的具体含义。

[0033] 术语“中心”、“纵向”、“横向”、“长度”、“宽度”、“厚度”、“上”、“下”、“前”、“后”、“左”、“右”、“竖直”、“水平”、“顶”、“底”“内”、“外”、“顺时针”、“逆时针”等指示的方位或位置关系为基于附图所示的方位或位置关系,仅是为了便于描述和简化描述,而不是明示或暗示所指的装置或元件必须具有特定的方位、以特定的方位构造和操作,因此不能理解为对本文的限制。

[0034] 下面对本发明所提供的方案进行详细描述。本发明实施例中未作详细描述的内容属于本领域专业技术人员公知的现有技术。本发明实施例中未注明具体条件者,按照本领域常规条件或制造商建议的条件进行。本发明实施例中所用试剂或仪器未注明生产厂商者,均为可以通过市售购买获得的常规产品。

[0035] 如图1所示,本发明实施方式提供一种多智能体驱动的机器人人工智能化学家系统,包括:

[0036] 任务管理者智能体、文献阅读者智能体、实验设计者智能体、机器人操作者智能体、文献数据库、实验模板库和自动化实验室;其中,

[0037] 所述任务管理者智能体、文献阅读者智能体、实验设计者智能体、机器人操作者智能体均采用基于大语言模型的智能体;

[0038] 所述任务管理者智能体,分别与所述文献阅读者智能体、实验设计者智能体和机器人操作者智能体通信连接,能与人类研究人员交互,根据人类研究人员输入的目标化学任务的描述信息,协调所述文献阅读者智能体、实验设计者智能体和机器人操作者智能体协同完成对应于目标化学任务的化学实验操作;

[0039] 所述文献阅读者智能体,与所述文献数据库通信连接,能接收所述任务管理者智能体给出的与目标化学任务相关的关键词,根据关键词搜索所述文献数据库,并从中挖掘出与目标化学任务相关的知识,并将与目标化学任务相关的知识传送给所述任务管理者智能体;

[0040] 所述实验设计者智能体,与所述实验模板库通信连接,能接收所述任务管理者智能体转发的由所述文献阅读者智能体挖掘出的与目标化学任务相关的知识,并根据知识生成对应于目标化学任务的化学实验指令,计划化学实验操作,并利用实验模板库一步步生成化学实验程序,并将所述化学实验程序传送给所述任务管理者智能体;

[0041] 所述机器人操作者智能体,与所述自动化实验室通信连接,能接收所述任务管理者智能体转发的所述实验设计者智能体生成的化学实验程序,并将所述化学实验程序转换为操作自动化实验室的机器人和工作站的代码,使所述机器人和 workstation 按代码执行,完成对应于目标化学任务的化学实验操作。

[0042] 优选的,上述系统中,所述任务管理者智能体、文献阅读者智能体、实验设计者智能体、机器人操作者智能体所采用的大语言模型为开源大语言模型、商用大语言模型中的任一种,优选使用如开源的大语言模型 Llama-3.1-70B;

[0043] 所述目标化学任务包括:制备与测量的化学实验任务、探索与筛选的化学实验任务。其中,制备与测量的化学实验任务是指执行所需化合物的合成和/或对给定化合物的表

征;探索与筛选的化学实验任务是指探索和/或筛选出所需功能材料的实验参数。

[0044] 优选的,上述系统中,所述文献数据库为包含多篇化学和材料科学学科的科学出版物的标题和摘要的数据库;

[0045] 如图2所示,所述文献阅读者智能体分别设有文献检索工具和文献挖掘工具,该文献阅读者智能体能接收由所述任务管理者智能体提供与目标化学任务相关的关键词,并通过文献检索工具利用接收的关键词从所述文献数据库中检索收集与目标化学任务相关的出版物标题和摘要;并将检索收集的出版物标题和摘要传送给文献挖掘工具,由所述文献挖掘工具采用无监督句法距离分析方法挖掘出版物标题和摘要对应文献中的数据,从数据中提取化学物质、物理化学性质、化学和/或材料功能、实验条件各信息,并将提取的信息生成作为设计化学实验操作先验知识的统计数据,将统计数据作为与目标化学任务相关的知识传送给所述任务管理者智能体。

[0046] 优选的,上述系统中,所述实验模板库包含自动化实验室的历史实验的化学实验程序模板以及自动化实验室中各个工作站的各种配置协议,各种配置协议以XML格式存储,并以自然语言描述化学实验程序模板的实验步骤和参数;

[0047] 如图3所示,所述实验设计者智能体包括:协议编写器和协议评论器;其中,

[0048] 所述协议编写器,与所述任务管理者智能体通信连接,是基于大语言模型的智能体,设有协议搜索工具和站点查询工具,能根据收到的任务管理者智能体对目标化学任务的描述信息,调用所述协议搜索工具在实验模板库中寻找最佳匹配的化学实验程序模板,若发现最佳匹配的化学实验程序模板,则引用最佳匹配的化学实验程序模板,并调整该化学实验程序模板的实验步骤和参数,来制定针对目标化学任务对应的化学实验操作的实验程序;若没有现有的化学实验程序模板,则调用所述站点查询工具获取自动化实验室能用的工作站的站点列表,根据站点列表规划实验 workflow,基于大语言模型功能生成一个针对目标化学任务对应的化学实验操作的化学实验程序;

[0049] 所述协议评论器,与所述协议编写器通信连接,是基于大语言模型的智能体,能根据预定义的程序检查专家规则审查、批评和改进所述协议编写器得出的化学实验程序,并以与化学实验程序模板统一的格式输出最终的化学实验程序。

[0050] 优选的,上述系统中,所述协议评论器所使用的程序检查专家规则如下:

[0051] (1) 检查化学实验程序的第一步是“从样本架工作站取回架”;

[0052] (2) 检查化学实验程序中的最后一步是“将架子放入样品架工作站”;

[0053] (3) 添加样品后,请确保所有实验参数不超过过程中样品瓶的最大容量;

[0054] (4) 固体分配工作站和液体分配工作站的实验参数以质量为单位;

[0055] (5) 气相色谱工作站前的工作站是封装站;

[0056] (6) 使用电催化工作站前,确保测试瓶中有液体;

[0057] (7) 在使用紫外-可见光谱工作站之前,确保测试瓶中有液体。

[0058] 优选的,上述系统中,所述自动化实验室包括:多个机器人、多个自动化工作站和机器人应用接口;其中,多个所述机器人包括:移动式机器人和台式机器人;

[0059] 多个所述自动化工作站包括:样品架工作站、液体分配工作站、固体分配工作站、磁搅拌工作站、离心工作站、煅烧工作站、吸液工作站、干燥工作站、超声波工作站、封装工作站、光催化工作站、气相色谱工作站、样品制备工作站、拉曼光谱工作站、红外光谱工作

站、紫外-可见光谱工作站、荧光光谱工作站、x射线衍射工作站、激光诱导击穿光谱工作站和电催化工作站；

[0060] 所述机器人应用接口包括：视觉定位应用接口、运动规划应用接口、实验操作应用接口和仪器通讯应用接口；

[0061] 如图4所示，所述机器人操作者智能体包括：代码编写器、代码评论器和代码校对器；其中，

[0062] 所述代码编写器，分别与所述自动化实验室的机器人应用接口和代码评论器通信连接，是基于大语言模型的智能体，设有机器人应用接口查询工具，能根据接收的实验设计者智能体生成的化学实验程序，通过所述机器人应用接口查询工具获取所述自动化实验室的各机器人的能使用的机器人应用接口，并根据接收的化学实验程序和查询的能使用的机器人应用接口利用大语言模型的功能编写一个与化学实验程序对应的操作机器人的代码；

[0063] 所述代码评论器，与所述代码校对器通信连接，是基于大语言模型的智能体，能根据代码检查专家规则来检查、纠正、批评和改进所述代码编写器编写的代码；

[0064] 所述代码校对器，分别与所述自动化实验室的机器人应用接口和代码评论器通信连接，是基于大语言模型的智能体，能利用所述机器人应用接口查询工具查询获取所述自动化实验室的各机器人的能使用的机器人应用接口，对接收的所述代码评论器传送的程序代码进行校对，并将校对后的代码传送给自动化实验室，由自动化实验室的机器人执行校对后的代码。

[0065] 优选的，上述系统中，所述代码检查专家规则如下：

[0066] (1) 在新工作站操作前必须进行视觉定位；

[0067] (2) 调用'locate()'函数后，'locate()'函数获得的先前操作姿势将无效；

[0068] (3) 如果在两个相邻步骤中操作的工作站相同，则不需要重复移动和视觉定位；

[0069] (4) 只有固体分配工作站、液体分配工作站、离心机工作站、封装工作站、光催化工作站和气相色谱工作站需要放置测试瓶；其他工作站应按要求直接放置样品架；

[0070] (5) 每个样品架能容纳10个测试瓶，每个合成实验对应一个特定的测试瓶；请不要更改瓶号以避免错误；调用需要指定瓶号的函数时要小心，因为编号从0开始；

[0071] (6) 样品架编号也从0开始，每个合成实验对应于特定样品架中的一个测试瓶；确保整个程序中样品架编号的一致性，以避免错误；

[0072] (7) 固体分配工作站和液体分配工作站的实验参数必须以质量单位为单位；

[0073] (8) 所有工作站的时间参数，包括磁搅拌工作站和离心工作站，必须以秒为单位；

[0074] (9) 调用'wait()'函数所需的时间明显长于调用其他函数；但是，根据限制，您仍然需要在必要时调用'wait()'函数；

[0075] (10) 液体分配工作站具有10个通道的容量，相邻的液体取样操作不需要重复拿取和放置测试瓶；只需要仪器通信即能改变液体类型并继续取样；

[0076] (11) 你需要严格遵循给定的化学实验操作顺序，并尽可能减少运行时间。

[0077] 优选的，上述系统还包括：计算执行者智能体和理论模型库；其中，

[0078] 所述计算执行者智能体，分别与所述任务管理者智能体和理论模型库通信连接，是基于大语言模型的智能体，能根据接收的所述任务管理者智能体传送的目标化学任务的相关信息，在所述理论模型库中搜索出合适的预训练模型，通过模型融合将预训练模型与

所述机器人操作者智能体得出的实验数据进行融合得到融合模型,通过贝叶斯优化在得出的融合模型上进行优化得出优化的实验数据,并将得出的优化的实验数据传送给所述任务管理者智能体,用于所述机器人操作者智能体的后续操作。

[0079] 优选的,上述系统中,所述理论模型库中存储历史出版物的预先训练的机器学习模型、针对机器人人工智能化学家开发的机器学习模型和开源的机器学习模型;

[0080] 如图5所示,所述计算执行者智能体包括:计算任务管理者智能体、模型搜索工具、模型融合工具、贝叶斯优化器和深度学习计算平台;其中,

[0081] 所述计算任务管理者智能体,分别与所述任务管理者智能体、模型搜索工具、深度学习计算平台、模型融合工具和贝叶斯优化器通信连接,是基于大语言模型的智能体,能接收所述任务管理者智能体发送的输入信息,所述输入信息包括:目标化学任务的关键字、目标化学任务的详细描述信息和机器人操作者智能体的实验结果信息,调用所述模型搜索工具用关键字在理论模型库中搜索获得一个合适的预训练机器学习模型,调用所述模型融合工具将预训练机器学习模型与所述机器人操作者智能体得出的实验数据进行融合得到一个融合模型,调用所述贝叶斯优化器对融合模型进行优化并生成机器学习代码,由所述深度学习计算平台接收并执行生成的机器学习代码得到对应于目标化学任务的化学实验操作参数的预测结果作为优化的实验数据,并将优化的实验数据传送给所述任务管理者智能体,用于所述机器人操作者智能体的后续操作。

[0082] 优选的,上述系统中,所述目标化学任务为发现与优化的化学实验任务,该发现与优化的化学实验任务是指结合文献挖掘、计算建模和闭环优化来发现功能材料。

[0083] 综上所述,本发明实施方式的多智能体驱动的机器人人工智能化学家系统,通过设置任务管理者智能体、文献阅读者智能体、实验设计者智能体、机器人操作者智能体以及计算执行者智能体,构成一种基于大语言模型的分层多智能体系统,这些智能体——文献阅读者、实验设计者、机器人操作者和计算执行者——接收文本指令,执行特定的操作(例如,使用外部工具、编写代码等),并产生适当格式的输出,可直接作为其他智能体的输入指令或由人类研究人员解释,由任务管理者智能体协同控制文献阅读者智能体、实验设计者智能体、机器人操作者智能体和计算执行者智能体,分别控制和/或利用文献数据库、实验模板库、自动化实验室和理论模型库,实现多个智能体之间的协作和协调,每个智能体都具有独特的角色和相关能力,这样任务管理者智能体协调特定于角色的其它智能体,配合集成外部软件工具和机器人硬件来自主地计划、管理和执行复杂的化学实验任务,任务管理者智能体放大了单个大语言模型智能体的有效性,使它们能够共同处理复杂的任务并实现确定的化学实验操作目标,能很好的满足不同的化学实验需求。本发明的系统在处理以下三类复杂性不断增加的实验任务方面能满足性能要求且能达到很好的效果:(1)执行所需化合物的合成和/或对给定化合物的表征,可称为制造与测量的化学实验任务;(2)探索和/或筛选所需功能材料的实验参数,可称为探索与筛选的化学实验任务;(3)结合文献挖掘、计算建模和闭环优化来发现功能材料,可称为发现与优化的化学实验任务。

[0084] 为了更加清晰地展现出本发明所提供的技术方案及所产生的技术效果,下面以具体实施例对本发明实施例所提供的方案进行详细描述。

[0085] 实施例1

[0086] 本实施例提供一种多智能体驱动的机器人人工智能化学家系统,是以开源的

Llama-3.1-70B作为大语言模型的基础,该系统的总体架构如图1所示,以任务管理者智能体作为中央协调实体,它与人类研究人员交互,并与管理的几个特定角色的智能体——文献阅读者智能体、实验设计者智能体、机器人操作者智能体以及计算执行者智能体通信连接。任务管理者智能体设有自身的预设系统提示,在其中,将为它可以使用的所有实体(包括较低级别的智能体及其工具)定义其角色、任务、特定功能和接口描述,以及用于 workflow 和通信的消息格式。通过利用大语言模型的功能,任务管理者智能体以自然语言与人类研究人员进行交互。它解释需求描述,计划和分解任务,并指示和管理特定于角色的智能体使用相应的基础资源来执行指定的操作,促进了需求描述的自动化实验 workflow。每个特定于角色的智能体都有自己的大语言模型实例和内置工具,它们在系统的四种基本资源中的一种上进行操作,参见图1。文献阅读者智能体从任务管理者智能体那里接收与目标化学任务相关的关键词,搜索文献数据库,并从文献数据中挖掘出与目标化学任务相关的知识。实验设计者智能体从任务管理者智能体那里接收关于预期实验的指令,计划实验任务,并通过利用实验模板库一步一步地生成化学实验程序。机器人操作者智能体将实验设计者智能体的实验程序转换为操作自动化实验室的机器人和工作站的代码和命令,促进和完成机器人化学实验的执行。计算执行者智能体在理论模型库中搜索合适的预先训练过的机器学习模型,通过融合机器人操作者智能体的实验结果来增强模型,并在此基础上进行贝叶斯优化得出对应目标化学任务的参数优化结果。

[0087] 进一步的,上述系统中的文献阅读者智能体的构成和作用如下:

[0088] 文献阅读者智能体使用的文献数据库是构建的一个本地文献数据库,其中包含大约120万篇化学和材料科学学科的科学出版物的标题和摘要,从Crossref下载。这些出版物涵盖了各种各样的研究主题、主题和领域,通过文献阅读者智能体来挖掘该文献数据库并分析得到的数据以提炼知识。

[0089] 文献阅读者智能体的构成如图2所示,设有两种内置工具:(1)文献检索工具,可称为LiteratureSearch,能根据输入关键词在文献数据库中进行检索,返回相关文献数据;(2)文献挖掘工具,可称为LiteratureMine,采用无监督句法距离分析方法挖掘文献数据,能够提取化学物质、物理化学性质、化学/材料功能和实验条件等信息。文献阅读者智能体的工作流程如下:它从任务管理者智能体接收关键词,然后使用文献检索工具来收集相关的出版物标题和摘要。这些数据随后被传递给文献挖掘工具,该文献挖掘工具处理数据并生成统计数据。这些统计数据可以作为设计化学实验的先验知识。

[0090] 可以知道上述的文献检索工具与文献挖掘工具,可采用需要的能实现对应功能的软件工具即可,如:文献检索工具可依据文献数据库提供的功能接口进行使用和封装,文献挖掘工具可依据自然语言处理领域相关技术进行设计实现,也可采用开源的文献挖掘工具。

[0091] 进一步的,上述系统中的实验设计者智能体的构成和作用如下:

[0092] 实验设计者智能体使用的实验模板库,是根据自动化实验室进行的历史实验中积累起来的模板库,该实验模板库包括以往实验的化学实验程序模板,以及来自自动化实验室中20个实验工作站的各种配置的协议。这些协议以XML格式存储,并以自然语言描述了化学实验步骤。工作站包括样品架工作站、液体分配工作站、固体分配工作站、磁搅拌工作站、离心工作站、煅烧工作站、吸液工作站、干燥工作站、超声波工作站、封装工作站、光催化工

工作站、气相色谱工作站、样品制备工作站、拉曼光谱工作站、红外光谱工作站、紫外-可见光谱工作站、荧光光谱工作站、x射线衍射工作站、激光诱导击穿光谱工作站和电催化工作站。这些协议和工作站共同定义了自动化实验室在化学和材料合成、表征和性能测试方面的实验能力。

[0093] 实验设计者智能体的架构如图3所示,它本身是一个多智能体系统,集成了两个基于大语言模型的智能体:即一个基于大语言模型的协议编写器(可称为Protocol writer)和一个基于大语言模型的协议评论器(可称为Protocol critic);其中,协议编写器通过预先提示的大语言模型发挥功能,使用两个内置的工具:(1)协议搜索工具,可称为ProtocolSearch,它基于关键字搜索实验模板库并返回最佳匹配的化学实验程序模板;(2)站点查询工具,可称为StationQuery,它允许协议编写器查询关于自动化实验室中可用的工作站的详细信息,如特定的功能和相关参数。协议评论器是另一个具有自己的预设提示的大语言模型实例。这些提示概述了其具体任务,即根据不同工作站的操作限制,利用预定义的程序检查专家规则来检查和纠正化学实验程序。

[0094] 实验设计者智能体的工作流程如下:首先,协议编写器从任务管理者智能体那里收到对目标化学任务对应化学实验的描述,然后,它调用协议搜索工具,在实验模板库中寻找最佳匹配的化学实验程序模板,如果发现有匹配的化学实验程序模板,协议编写器将引用相关的化学实验程序模板,调整该化学实验程序模板的步骤和参数,以制定针对目标化学任务对应化学实验的化学实验程序,如果没有现有的化学实验程序模板,协议编写器将调用站点查询工具来获取自动化实验室的可用工作站的站点列表,规划实验 workflow,并仅依赖于大语言模型的功能生成一个对应化学实验程序,接下来,协议评论器进行一个反思过程来检查由协议编写器生成的化学实验程序,它根据预定义的程序检查专家规则进行审查、批评和改进该化学实验程序,最后,协议评论器将检查后的化学实验程序按与化学实验程序模板格式相同的格式进行格式化输出,以确保生成的化学实验程序与预期的实验和自动化实验室的能力相一致。

[0095] 上述协议评论器所用的预定义的程序检查专家规则如下:

[0096] (1) 检查化学实验程序的第一步是“从样本架工作站取回架”;

[0097] (2) 检查化学实验程序中的最后一步是“将架子放入样品架工作站”;

[0098] (3) 添加样品后,请确保所有实验参数不超过过程中样品瓶的最大容量;

[0099] (4) 固体分配工作站和液体分配工作站的实验参数以质量为单位;

[0100] (5) 气相色谱工作站前的工作站是封装站;

[0101] (6) 使用电催化工作站前,确保测试瓶中有液体;

[0102] (7) 在使用紫外-可见光谱工作站之前,确保测试瓶中有液体。

[0103] 进一步的,上述系统中的机器人操作者智能体的构成和作用如下:

[0104] 机器人操作者智能体控制的自动化实验室包括两个机器人和20个自动化实验工作站,它们具有智能体-机器交互接口和一个针对所有硬件的后端控制系统。现有两个机器人中,一个是移动式机器人,一个是台式机器人,可以是台式机械臂。移动式机器人能在实验室内自由移动,主要处理涉及多种仪器的任务。台式机器人被放置在实验室中心的一个平台上,在轨道上移动,处理平台上的表征和性能测试仪器,包括拉曼光谱、x射线衍射、红外光谱、紫外-可见光谱、荧光光谱和电化学测试。后端控制系统调度任务,管理数据,并通

过HTTP协议与各机器人和工作站点进行通信。为了提高可伸缩性和灵活性,对机器人和工作站点的操作方法进行了抽象和封装,建立了标准的操作命令和通用的接口规范。这些命令包含机器人应用接口,其中包括:视觉定位应用接口、运动规划应用接口、实验操作应用接口和仪器通讯引用接口等操作接口。这些应用接口允许通过机器人操作者智能体的代码来利用硬件,从而确保了实验操作的准确和高效的执行。

[0105] 机器人操作者智能体的架构如图4所示,它是一个多智能体系统,由三个基于大语言模型的智能体——代码编写器、代码评论器和代码校对器构成,它与自动化实验室集成在一起。代码编写器是一个预先提示的大语言模型实例,配备了一个内置工具:机器人应用接口查询工具,可称为RobotAPIQuery,用于获取机器人可用的高级应用接口函数。代码评论器是另一个预先提示的大语言模型实例,负责根据预定义的程序检查专家规则来检查、纠正、批评和改进用于机器人执行的机器人代码。代码校对器利用机器人应用接口查询工具,根据机器人应用接口规范和代码标准,对机器人代码的语法、拼写和格式化错误进行最终的代码检查。

[0106] 机器人操作者智能体的工作流程如下:首先,代码编写器接收到由实验设计者智能体生成的化学实验程序。然后,它调用机器人应用接口查询工具来获取机器人的可用应用接口列表,并利用大语言模型的功能编写一个机器人执行的代码。接下来,代码评论器将根据预定义的代码专家规则来审查和改进代码。然后将改进后的代码传递给代码校对器,后者再次调用机器人应用接口查询工具来检索可用机器人应用接口列表,并对代码进行校对以进行进一步增强,最后,自动化实验室接收到执行自动化学实验的最终代码,用于机器人执行,完成对应的实验操作。

[0107] 上述代码评论器所用的代码检查专家规则如下:

[0108] (1) 在新工作站操作前必须进行视觉定位;

[0109] (2) 调用'locate()'函数后,'locate()'函数获得的先前操作姿势将无效;

[0110] (3) 如果在两个相邻步骤中操作的工作站相同,则不需要重复移动和视觉定位;

[0111] (4) 只有固体分配工作站、液体分配工作站、离心机工作站、封装工作站、光催化工作站和气相色谱工作站需要放置测试瓶;其他工作站应按要求直接放置样品架;

[0112] (5) 每个样品架能容纳10个测试瓶,每个合成实验对应一个特定的测试瓶;请不要更改瓶号以避免错误;调用需要指定瓶号的函数时要小心,因为编号从0开始;

[0113] (6) 样品架编号也从0开始,每个合成实验对应于特定样品架中的一个测试瓶;确保整个程序中样品架编号的一致性,以避免错误;

[0114] (7) 固体分配工作站和液体分配工作站的实验参数必须以质量单位为单位;

[0115] (8) 所有工作站的时间参数,包括磁搅拌工作站和离心工作站,必须以秒为单位;

[0116] (9) 调用'wait()'函数所需的时间明显长于调用其他函数;但是,根据限制,您仍然需要在必要时调用'wait()'函数;

[0117] (10) 液体分配工作站具有10个通道的容量,相邻的液体取样操作不需要重复拿取和放置测试瓶;只需要仪器通信即能改变液体类型并继续取样;

[0118] (11) 你需要严格遵循给定的化学实验操作顺序,并尽可能减少运行时间。

[0119] 上述自动化实验室的机器人应用接口具体如下:

[0120] (1) 视觉定位应用接口的功能是允许机器人利用计算机视觉处理相关技术获取待

操作实验站点的位姿信息,包括'locate()'函数,该'locate()'函数接收实验站名字作为参数,返回机器人操作姿势;

[0121] (2) 运动规划应用接口的功能是允许机器人利用移动导航相关技术在实验站点之间进行移动,包括'move()'函数,该'move()'函数接收实验站名字作为参数,控制机器人移动到相应位置;

[0122] (3) 实验操作应用接口的功能是允许机器人执行化学实验操作,包括'take_bottle()','put_bottle()','take_rack()','put_rack()'函数,这些函数均接收实验站名字、样品架编号、样品瓶编号作为参数,分别控制机器人进行拿取样品瓶、放置样品瓶、拿取样品架、放置样品架的实验操作;

[0123] (4) 仪器通讯应用接口的功能是允许机器人与实验站点的仪器进行消息通讯,包括'command()'和'wait()'函数,'command()'函数接收实验站名字、化学实验参数作为参数,控制实验站的化学仪器进行实验,'wait()'函数接收实验站名字作为参数,目的是等待仪器完成实验操作;

[0124] 上述应用接口通过抽象和封装的机器人高级API函数实现,以PYTHON作为编程语言。

[0125] 进一步的,上述系统中的计算执行者智能体的构成和作用如下:

[0126] 人类研究人员要求本发明的机器人人工智能化学家系统的大多数按需实验任务都遵循制备测量测试的方式(例如,测量分子的红外光谱)或涉及探索规定的设计空间(例如,对某些变量进行全因子实验)。对于这样的任务,任务管理者智能体只调用实验设计者智能体和机器人操作者智能体就足够了。然而,需要数据驱动的发现或闭环迭代优化的研究任务(例如,在广阔的搜索空间中发现高性能的催化剂)需要额外的计算能力。为了满足这一需求,编制一个理论模型库,其中大部分是以前出版物的预先训练的模型,或者是针对为机器人人工智能化学家系统开发的模型。每个预训练的模型都为处理输入数据提供辅助功能,确保数据预处理的一致性(如归一化和处理缺失值),并可用于直接预测。这些模型附带了详细说明其技术规格和起源的注释,使人类研究人员或基于大语言模型的智能体可以查询它们。进一步该理论模型库也可以包括开源模型,可以根据特定研究任务的要求,用机器人人工智能化学家收集的实验数据进行扩展训练。

[0127] 计算执行者智能体的体系结构如图5所示,它集成了两个基于大语言模型的智能体,即计算任务管理者智能体和贝叶斯优化器,和两个内置的工具,以及一个深度学习计算平台;其中,这两个内置的工具是:(1) 模型搜索工具,可称为ModelSearch,它能使用关键字在理论模型库中执行搜索并返回一个匹配的模型;(2) 模型融合工具,可称为ModelFuse,它通过附加额外的隐藏层扩展一个预先训练过的神经网络模型来创建一个融合模型。贝叶斯优化器是一个基于大语言模型的智能体,使用人类研究人员提供给任务管理者智能体的任务描述,编写贝叶斯优化代码;其任务的完成完全依赖于大语言模型的能力。深度学习计算平台为计算执行者智能体提供了一个完整的运行环境,如TensorFlow环境,这是运行机器学习代码和获得结果所必需的。

[0128] 该计算执行者的工作流程如下:首先,计算任务管理者智能体接收输入信息,包括实验任务关键字、详细的任务描述和机器人实验结果。然后,它调用模型搜索工具来获得一个合适的预训练模型,调用模型融合工具将预训练模型与所述机器人操作者智能体得出的

实验数据进行融合得到一个融合模型,调用贝叶斯优化器对融合模型进行优化并生成机器学习代码,最后,通过在深度学习计算平台上执行生成的代码,得到优化后的预测结果。

[0129] 本发明实施例的多智能体驱动的机器人人工智能化学家系统可以根据需要执行各种化学实验操作,其主要限制是在实验室中实现自动化工作站的可用性和实验能力。它根据理解人类研究人员提供的任务描述,生成合适的工作流,并根据特定工作流的需要,选择和组合必要的智能体和工作站。为了证明这一点,以下通过不同实施例,用指示本发明的机器人人工智能化学家系统执行几个复杂程度和复杂性不同的实验任务,来证明本发明机器人人工智能化学家系统的性能。

[0130] 实施例2

[0131] 本实施例是通过实施例1的多智能体驱动的机器人人工智能化学家系统处理实验类别为制备与测量的化学实验任务,这种制备与测量的化学实验任务是多智能体驱动的机器人人工智能化学家系统能完成的最直接的实验任务类型。在收到任务描述后,任务管理者智能体会解释并理解指令,将必要的信息传递给实验设计者智能体,实验设计者智能体发现并使用合适的实验模板来生成合适的实验程序,然后由机器人操作者智能体将实验程序转换为所需的机器人可执行代码,以便在自动化实验室中执行机器人合成和测试,并获得返回给任务管理者智能体的实验结果。

[0132] 本实施例处理的任务1属于这类按需研究任务。任务1涉及利用傅里叶变换红外(FT-IR)光谱对三个偶氮苯分子进行表征的实验。偶氮苯是一类有机分子,其特征是存在一个 $N=N$ 双键连接两个苯基环。它们以其可光转换的特性而闻名,这使它们能够在辐照时改变其分子结构和化学性质。任务管理者智能体被指示测量三种偶氮苯分子的红外光谱,使用以下提示输入:“你被分配了一项科学研究任务来测量偶氮苯分子的红外光谱。你需要对以下每种固体粉末进行一次测量:偶氮苯、1-(苯唑)萘-2-胺和4,4'-二羟甲基苯唑苯。”在收到这个任务描述后,机器人人工智能化学家系统成功地计划、协调和收集了高质量的分子的红外光谱。结果显示的预期特征峰值的拉伸振动 $N=N$ 在 $1600-1500\text{ cm}^{-1}$,以及 $C=C$ 和 $C-H$ 的苯环在 $1500-1400\text{ cm}^{-1}$ 和 $3100-3000\text{ cm}^{-1}$,实验结果如图6所示。

[0133] 实施例3

[0134] 本实施例是通过实施例1的多智能体驱动的机器人人工智能化学家系统处理实验类别为探索与筛选的化学实验任务,比起制造与测量任务,探索与筛选的化学实验任务需要更高级的大语言模型能力。例如,任务管理者智能体必须有能够解释需要深入了解特定领域知识的任务说明,如理解和执行“进行全因子实验”的指令。这涉及到认识到全因子实验的概念,并系统地改变多个因素来评估其影响的重要性。同样,实验设计者智能体在适应现有化学实验程序模板时也必须表现出灵活性和创造性。这可能包括根据实验需求为变量分配不同的值,并通过扩展或组合这些变量来定制实验程序,以适应更复杂的实验设计。

[0135] 本实施例处理的任务2属于这类按需研究任务。任务2涉及机器人人工智能化学家进行一个完整的全因子实验,以合成石墨碳氮化物(g-C₃N₄),并测试它们的析氢反应(HER)性能。为了进行演示,本发明的多智能体驱动的机器人人工智能化学家系统被要求考虑三种加热温度(500°C、550°C和600°C)和三种加热时间(3小时、4小时和5小时)。通过测量所得到的g-C₃N₄材料的HER性能,说明了在不同合成条件下产生的不同样品质量,突出了筛选这些合成条件对优化g-C₃N₄的HER性能的重要性。如图7所示,结果表明g-C₃N₄在较高的温度

下降解或过度烧结,在600°C时尤其明显。此外,很明显,增加加热时间对所有三种温度下的HER性能都有负面影响。

[0136] 实施例4

[0137] 本实施例是通过实施例1的多智能体驱动的机器人人工智能化学家系统处理实验类别为发现与优化的化学实验任务,发现与优化的化学实验任务是多智能体驱动的机器人人工智能化学家系统目前能够完成的最先进的研究任务,需要使用所有四种角色特定的智能体及其相应的基础资源。一个典型的工作流程包括(1)文献阅读者智能体从文献数据库挖掘实验知识,(2)实验设计者智能体从实验模板库定制实验程序,(3)机器人操作者智能体生成代码控制自动实验室进行机器实验,和(4)计算执行者智能体使用理论模型库以分析数据和生成优化目标。本实施例处理的任务3属于这类按需研究任务。

[0138] 任务3涉及让机器人人工智能化学家系统发现了用于析氧反应(OER)的金属有机高熵催化剂(MO-HECs)。这个过程以对任务管理者智能体的一个提示开始:“你被分配了一项科学研究任务来发现高性能金属有机高熵催化剂(MO-HECs),由五种金属元素组成,用于析氧反应(OER)。请使用文献阅读者智能体来发现文献中OER的流行金属,并选择前五个建议。自动化实验室配备了必要的前体溶液和其他所需的化学品。请随机抽取100种不同的金属配比,每种金属的比例在5%~35%之间,并进行合成和过电位测量。从100个自动实验中获得实验数据后,使用计算执行者智能体对实验进行优化。利用这100个实验的组成和测量到的过电位,以及一个预先训练过的模型,建立一个融合模型,从配比中预测过电位。然后,将这个融合模型与贝叶斯优化相结合,以寻找给出最低预测过电位的组合。贝叶斯优化的约束条件是,金属比例必须在5%到35%之间,总和必须达到100%。在计算执行者智能体提供结果后,你最后的实验是合成和测试这个最佳组合。”,多智能体驱动的机器人人工智能化学家系统的工作流程如图8所示,具体为:任务管理者智能体首先调用文献阅读者智能体阅读析氧反应的大量文献,得出推荐采用的五种金属元素分别为钴(Co)、镍(Ni)、铁(Fe)、锰(Mn)和铜(Cu);然后任务管理者智能体将实验内容与参数传递给实验设计者智能体,设计出合适的化学实验程序;然后任务管理者智能体将实验程序传递给机器人操作者智能体,机器人操作者智能体依据程序编写代码,并进行机器人化学实验,得到实验数据;任务管理者智能体将实验内容与实验数据传递给计算执行者智能体,由计算执行者智能体建立融合模型给出优化的参数结果;最终,任务管理者智能体再次将参数信息给实验设计者智能体生成实验程序,随后机器人操作者智能体依据实验程序进行机器人实验,得到一种性能优越的金属有机高熵催化剂。实验中,多智能体驱动的机器人人工智能化学家系统按照人类研究人员需求首先合成了100个金属有机高熵催化剂,并测量了它们的过电位,所有这些过电位在10mA/cm²处都超过300mV。而在使用计算执行者智能体进行优化后,具有最佳金属成分的催化剂表现出266.1mV的过电位,比随机选择金属成分的100个催化剂有显著改善。图9证实了最佳金属有机高熵催化剂保持了高度稳定性,在连续运行500小时后性能下降不到2%。

[0139] 综上所述,本发明的多智能体驱动的机器人人工智能化学家系统,利用了大语言模型的能力,如开源的Llama-3.1-70B,这种分层的多智能体系统集成了各种基于大语言模型的专业智能体,即文献阅读者智能体、实验设计者智能体、机器人操作者智能体和文献阅读者智能体、实验设计者智能体、机器人操作者智能体,能够单独或协同执行复杂的化学研

究任务。它包括一个任务管理者智能体,它与人类研究人员交互,并通信连接管理四个特定角色的智能体——文献阅读者智能体、实验设计者智能体、计算执行者智能体和机器人操作者智能体。这种体系结构通过协作和协调增强了单个智能体的有效性,使它们能够共同处理复杂的任务并实现确定的目标。系统具备四个基础资源:一个全面的文献数据库,一个广泛的实验模板库,一个通用的理论模型库,和一个最先进的自动化实验室。这些资源使机器人人工智能化学家系统能够执行广泛的化学实验操作,从文献挖掘和实验过程生成到计算建模和机器人执行目标化学实验。能很好的完成制备与测量的化学实验任务、探索与筛选的化学实验任务、发现与优化的化学实验任务这三类实验任务,这些实验任务突出了智能体在生成实验程序、执行机器人实验以及利用计算模型进行数据驱动的发现和优化方面的适应性和精确性。值得注意的是,机器人人工智能化学家系统成功地探索了可能的五种成分的巨大化学空间,以发现用于电催化析氧反应的高性能金属有机高熵催化剂(MO-HECs)。通过文献挖掘、计算建模和贝叶斯优化,该系统发现并实验验证了一个最优的MO-HEC组成,实现了过电位性能的显著提高。该系统使在最少的人为干预下执行复杂的、多步骤的实验成为可能,从而为科学探究开辟了新的途径。

[0140] 本领域普通技术人员可以理解:实现上述实施例方法中的全部或部分流程是可以通程序来指令相关的硬件来完成,所述的程序可存储于一计算机可读取存储介质中,该程序在执行时,可包括如上述各方法的实施例的流程。其中,所述的存储介质可为磁碟、光盘、只读存储记忆体(Read-Only Memory,ROM)或随机存储记忆体(Random Access Memory, RAM)等。

[0141] 以上所述,仅为本发明较佳的具体实施方式,但本发明的保护范围并不局限于此,任何熟悉本技术领域的技术人员在本发明披露的技术范围内,可轻易想到的变化或替换,都应涵盖在本发明的保护范围之内。因此,本发明的保护范围应该以权利要求书的保护范围为准。本文背景技术部分公开的信息仅仅旨在加深对本发明的总体背景技术的理解,而不应当被视为承认或以任何形式暗示该信息构成已为本领域技术人员所公知的现有技术。

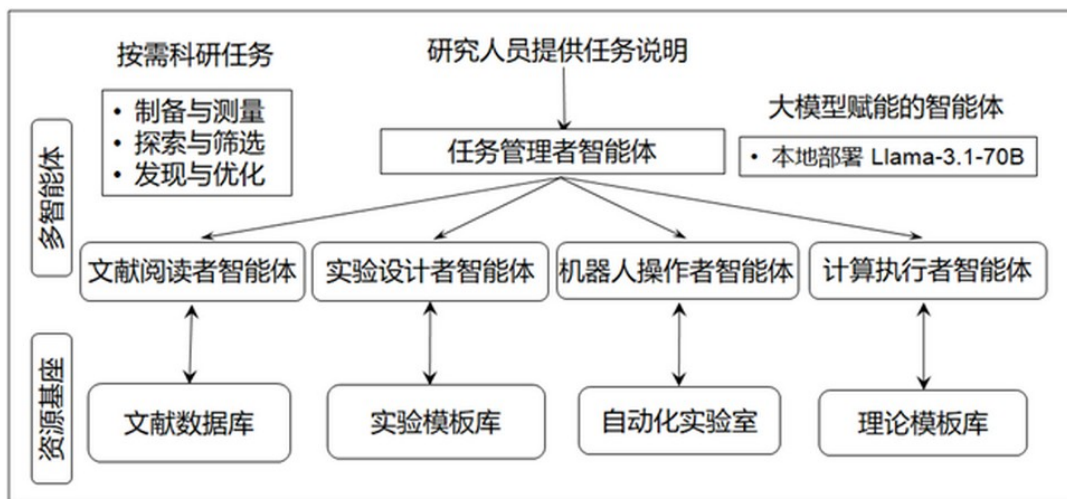


图 1

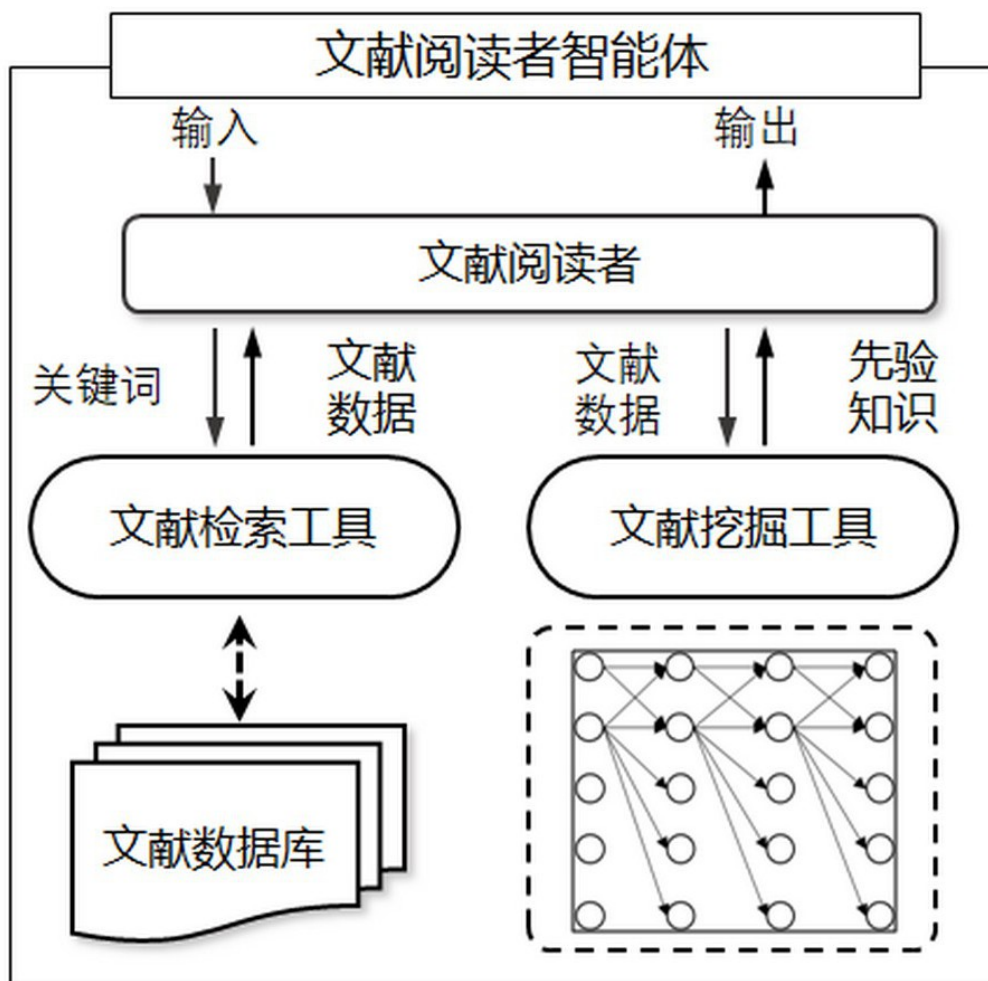


图 2

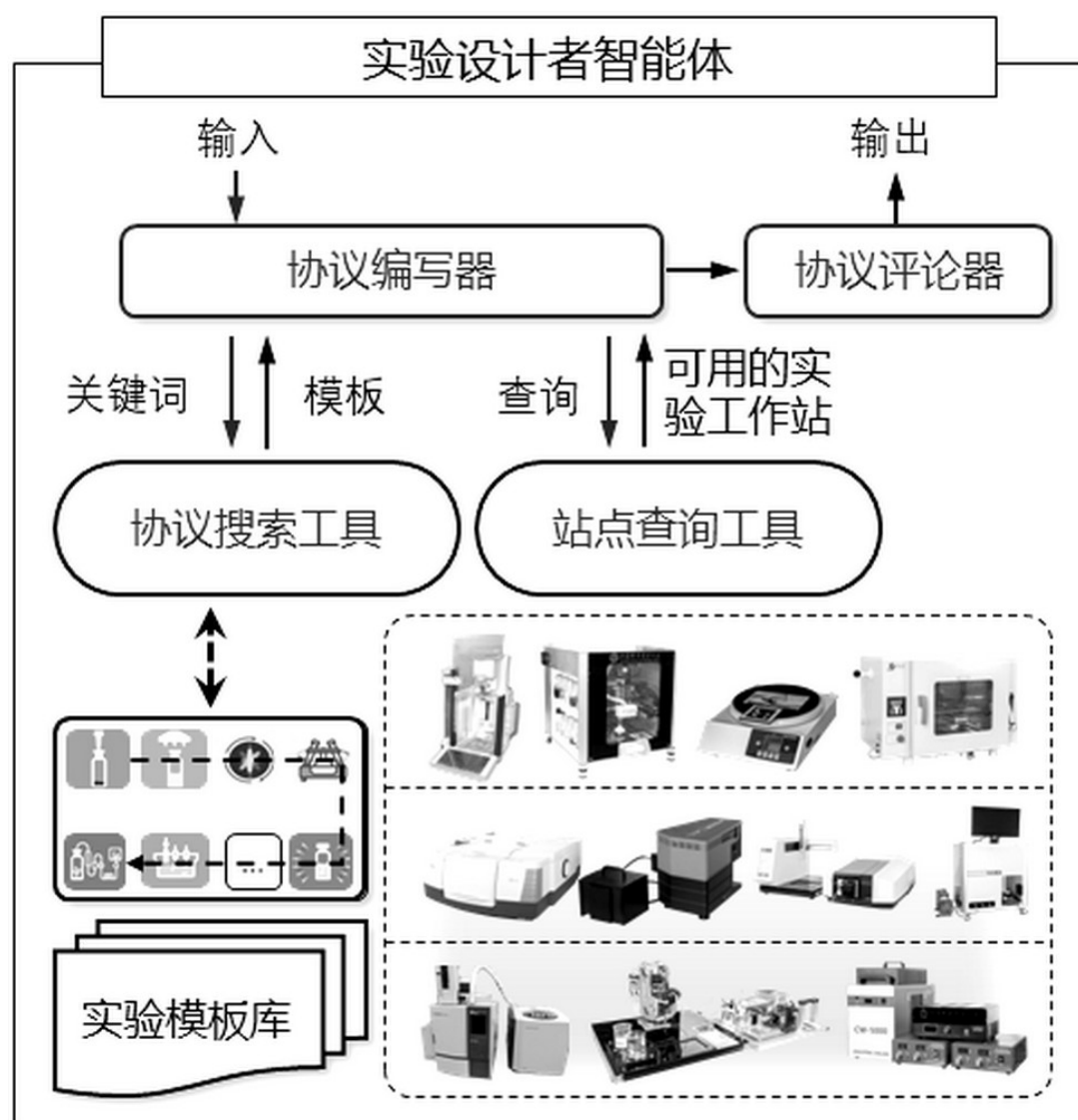


图 3

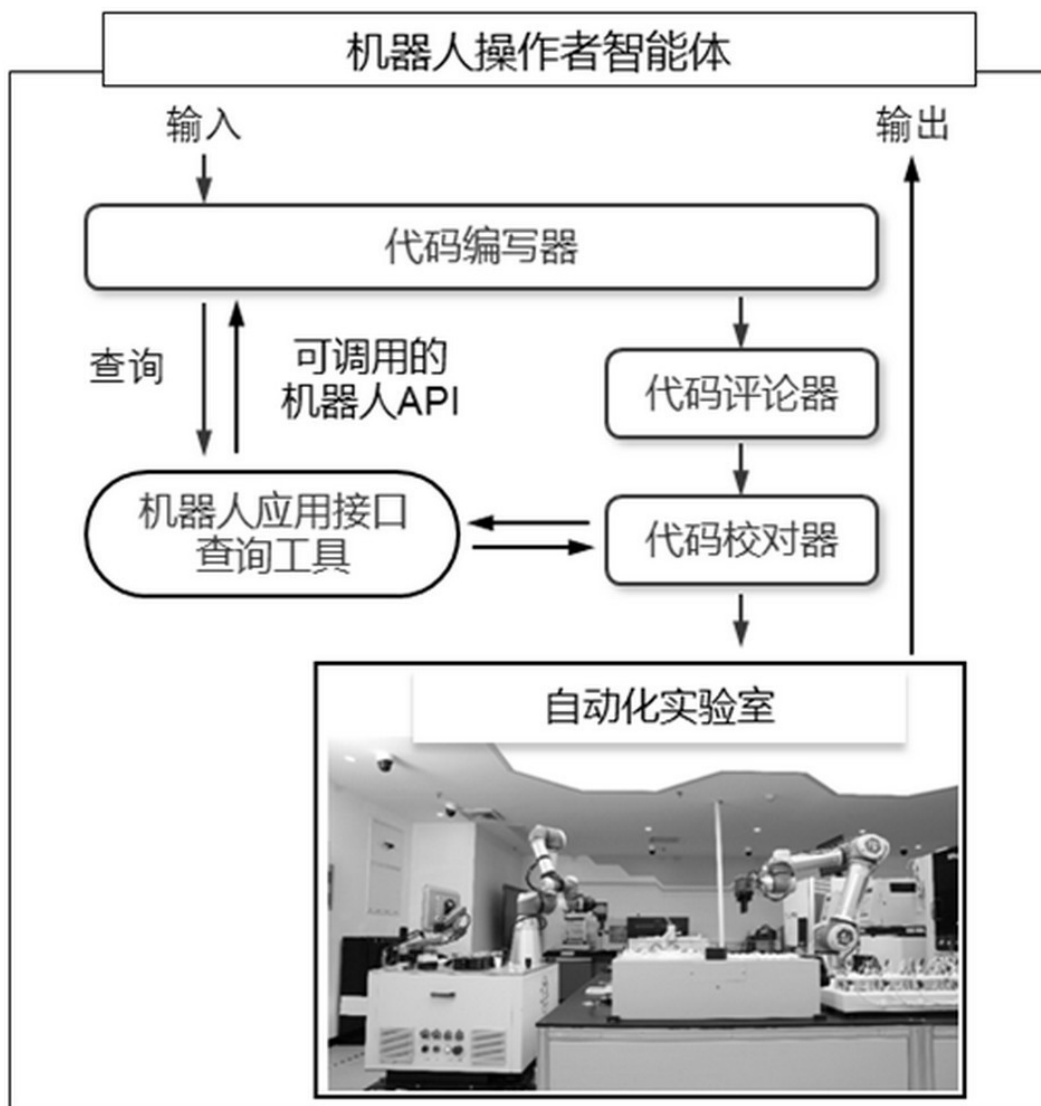


图 4

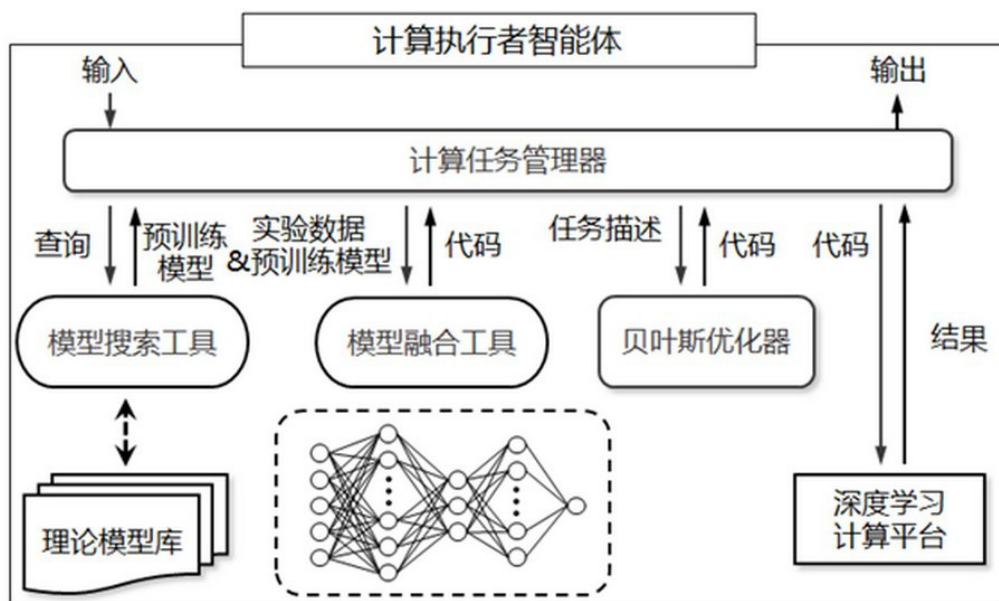


图 5

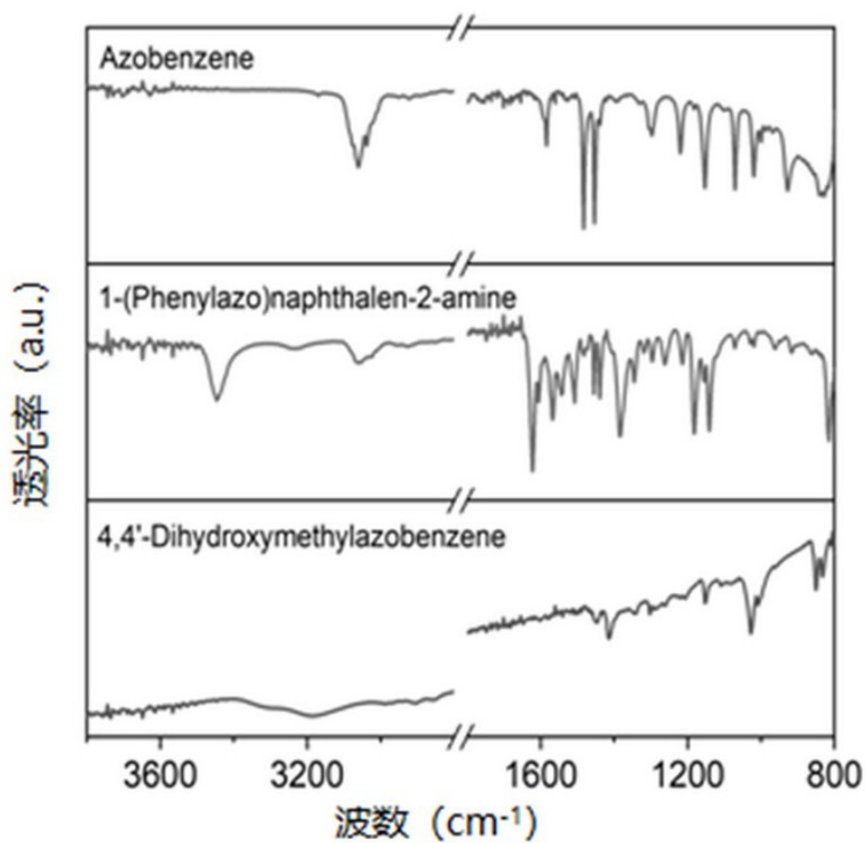


图 6

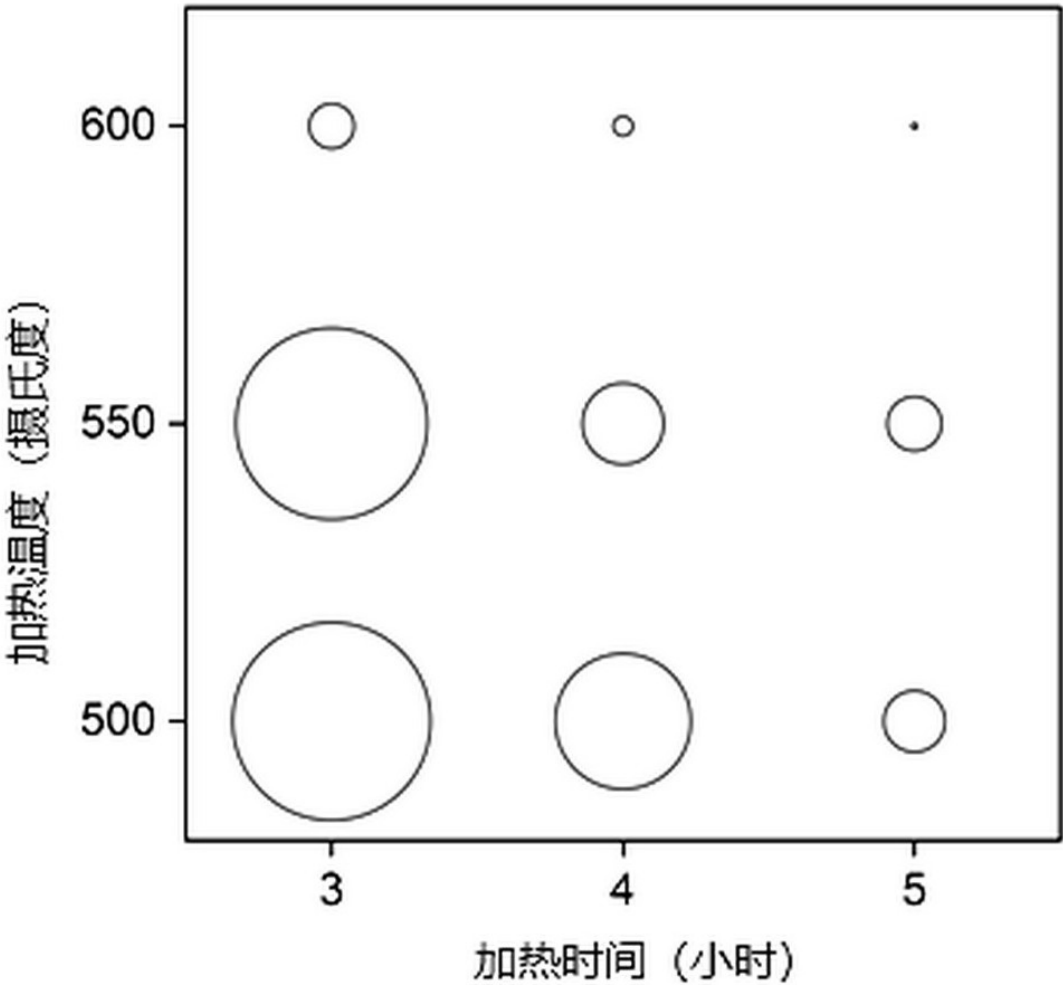


图 7

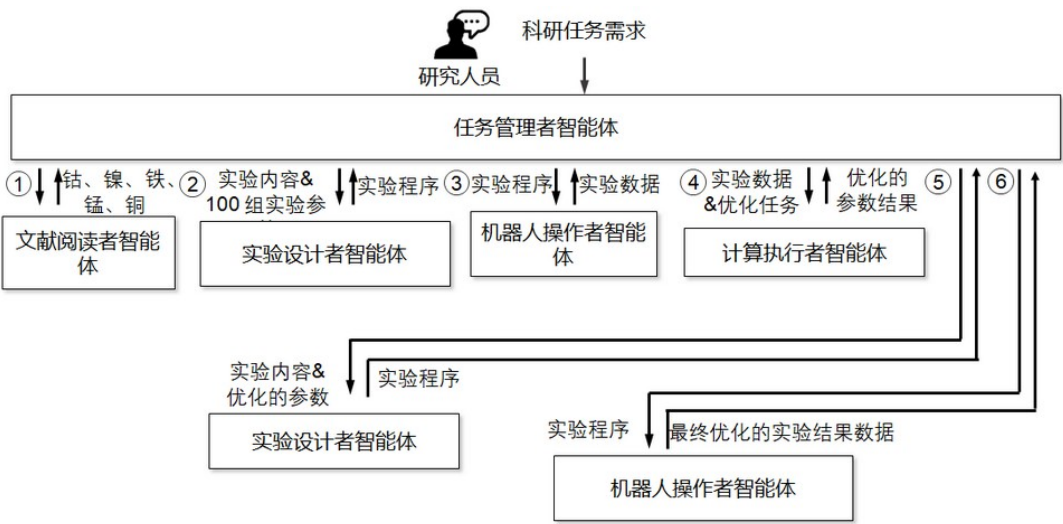


图 8

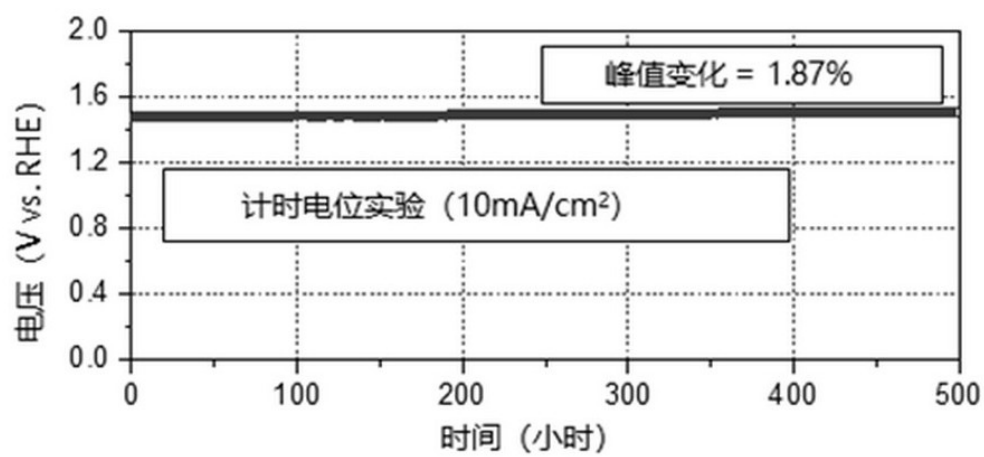


图 9