

COMUNICATO STAMPA

INTELLIGENZA ARTIFICIALE E DATABASE "EVOLUTIVI": UN RECENTE LAVORO DEL POLITECNICO DI TORINO PROPONE MIGLIAIA DI NUOVI MATERIALI PER L'ENERGIA

Un gruppo di ricercatori del Politecnico di Torino apre la strada a una nuova generazione di strumenti computazionali per accelerare l'identificazione di materiali sostenibili per applicazioni energetiche

Il lavoro, pubblicato sulla rivista Energy and AI, introduce nuove prospettive sull'uso di Intelligenza Artificiale nell'ambito della ricerca d'avanguardia

Torino. 6 ottobre 2025

Un team di ricercatori del **Politecnico di Torino** composto da **Paolo De Angelis**, **Giulio Barletta**, **Giovanni Trezza**, **Pietro Asinari** ed **Eliodoro Chiavazzo** del laboratorio <u>SMaLL</u> – presso il Dipartimento Energia-DENERG – ha sviluppato un innovativo protocollo basato su Intelligenza Artificiale per selezionare, tra centinaia di migliaia di materiali finora inesplorati, i candidati più promettenti per applicazioni energetiche. Lo studio, pubblicato sulla rivista <u>Energy and Al</u>, introduce <u>Energy-GNoME</u>, il primo database "**evolutivo**" ad integrare algoritmi di Machine Learning con i preziosi dati del progetto GNoME (Graph Networks for Materials Exploration), sviluppato da Google DeepMind.

GNoME ha recentemente messo a disposizione della comunità scientifica un patrimonio senza precedenti: centinaia di migliaia di materiali mai studiati prima e teoricamente stabili, individuati grazie a tecniche di intelligenza artificiale generativa. Tuttavia, questi materiali non sono stati "caratterizzati", ovvero non ne sono state indicate le possibili applicazioni tecnologiche. È proprio in questo contesto che si inserisce Energy-GNoME: il metodo sviluppato al Politecnico di Torino permette di individuare, tra l'enorme mole di candidati proposti da GNoME, quelli più ricchi di potenziale per il settore energetico, fornendo così un ponte essenziale tra la generazione di nuovi materiali e il loro utilizzo pratico.

Il protocollo utilizza un approccio in due fasi: prima, un sistema di "esperti artificiali" che votando a maggioranza - identificano i composti con maggiori probabilità di possedere proprietà utili per applicazioni energetiche; successivamente, altri modelli opportunamente addestrati ne stimano con precisione i parametri chiave. Questo metodo consente di ridurre drasticamente il numero di candidati ritenuti utili per una certa applicazione tecnologica, ma al tempo stesso propone migliaia di nuove soluzioni per la conversione e lo stoccaggio di energia.

"Con Energy-GNoME abbiamo voluto dimostrare come l'Intelligenza Artificiale possa essere non solo uno strumento di analisi, ma un vero acceleratore di scoperta scientifica,

capace di imparare dall'esperienza umana e crescere con i contributi della comunità. Allo stesso tempo puntiamo a risolvere una sfida cruciale dell'Al generativa: non basta esplorare alla cieca nuove possibilità, serve anche indirizzare questa esplorazione verso obbiettivi utili, perché un cristallo è solo un composto chimico, è la sua funzione ingegneristica che lo rende un materiale", spiega **Paolo De Angelis**, primo autore dello studio.

"Un'importante merito del progetto risiede proprio nella natura "evolutiva" del database: attraverso una libreria Python open-source e linee guida rese pubbliche su <u>GitHub</u>, la comunità scientifica potrà contribuire con nuovi dati sperimentali o teorici, alimentando un processo iterativo di apprendimento attivo. In questo modo, la piattaforma è destinata a evolvere e a migliorare costantemente la sua capacità predittiva", precisano **Giulio Barletta e Giovanni Trezza**.

"Questo approccio rappresenta una nuova frontiera nella modellazione dei materiali per le applicazioni energetiche: da un lato combina e sfrutta i saperi derivati da metodi sperimentali, teorici e di apprendimento automatico; dall'altro rende disponibile la conoscenza sintetizzata in un linguaggio interoperabile e accessibile, favorendo l'adozione e l'adattamento da parte di comunità scientifiche diverse", aggiunge **Pietro Asinari**.

"Il nostro contributo principale è duplice: da un lato, aver reso disponibili alla comunità scientifica un'ampia selezione di nuovi materiali promettenti per applicazioni energetiche; dall'altro, aver messo a punto un protocollo metodologico che può essere facilmente esteso anche ad altri ambiti oltre a quelli trattati nello studio", conclude **Eliodoro Chiavazzo**, coordinatore della ricerca. "In questo senso, Energy-GNoME non è solo un database, ma una vera e propria mappa per orientare futuri studi sperimentali e computazionali, accelerando l'esplorazione dei materiali avanzati in molteplici campi".

Oltre al contributo diretto nel campo dell'energia, il lavoro apre prospettive più ampie: il protocollo messo a punto mira ad essere un **riferimento metodologico per la comunità scientifica**, offrendo una via rapida e scalabile per esplorare nuovi materiali in settori diversi, dall'elettronica avanzata alla biomedicina, fino alle tecnologie quantistiche e a quelle emergenti per la sostenibilità.