

Algoritmi umjetne inteligencije pronalaze inženjerske materijale

Istraživači sa sveučilišta Stanford primjenjuju strojno učenje kako bi učinkovitije pronalazili inženjerske materijale.

Zamislite da ste inženjer koji je riješio davni izazov, ali postoji jedan problem: nemate savršen materijal za svoje rješenje i niste sigurni da takav materijal uopće postoji. Čak i da postoji, broj mogućih kandidata broji se u tisućama ili milijunima.

Izvanredni profesor znanosti o materijalima Evan Reed sa Stanford University, u suradnji sa dva studenta poslijediplomskog studija Austinom Sendekom i Gowoonom Cheonom, pronašao je rješenje. Razvili su algoritme umjetne inteligencije koji inženjerima mogu pomoći pri traženju optimalnog materijala za određenu primjenu. "Ovi algoritmi su poput tražilica za materijale", rekao je Reed.

U tri novija rada^{1,2,3} opisuju kako primijeniti strojno učenje – računalne sustave koji se sami uče – za analizu fizikalnih i kemijskih svojstava tisuća materijala. Sustavi strojnog učenja kreiraju algoritme koji "češljaju" baze materijala kako bi pronašli one koji matematički odgovaraju zahtjevima. Eksperimentalni znanstvenici mogu to upotrijebiti kako bi stvorili i ispitali materijale u stvarnim uvjetima, što je znatno brže od standardnih metoda pogađanja.

U radu¹ su istraživani materijali poznati kao metalno-organski okviri (engl. *metal-organic framework* – MOF). MOF su kristali koji su strukturno jaki, porozni na nanoskali i jeftini za izradu. Do sada su se upotrebljavali za hvatanje plinova vodika i ugljika unutar pora krutih materijala. Istraživači su se zainteresirali za primjenu MOF-a za gorivne ćelije i termoelektrične uređaje, a one zahtijevaju električnu vodljivost. Nažalost, vrlo malo poznatih MOF-a je električki vodljivo.

Reed je pregledao gotovo 3000 MOF-a da bi došao do šest najboljih kandidata. Njegov tim potvrdio je detaljnim izračunima električnu vodljivost tih materijala. To je eksperimentalnim istraživačima otvorilo novu paletu mogućnosti MOF-a.

Strojno učenje za pronalazak poluvodičkih baterija

Sendekov² rad opisuje identificiranje sigurnijih materijala baziranih na litiju za litij-ionske (*Li-Ion*) poluvodičke baterije. Radi se o zamjeni za komercijalne litij-ionske baterije s tekućim elektrolitima koje su već uzrokovala zapaljenje pametnih telefona i električnih automobila.

Desetljećima se potraga za čvrstim *Li-Ion* elektrolitskim materijalima odvijala uglavnom na osnovi pokušaja i pogreške. Sendek je primjenom strojnog učenja pregledao 12 000 mogućih kandidata i identificirao 21 materijal koji ima niz svojstava povoljnih za čvrste elektrolite uključujući visoku vodljivost. Nakon godinu dana evaluacije otkrio je da 10 od 21 materijala pokazuju vodljivost kakvu je predvidio model strojnog učenja. To je bio ogroman napredak u usporedbi s dotadašnjim pretragama vođenim intuicijom.

Štoviše, Sendek je pretragu pretvorio u malo natjecanje. Svoj je algoritam suprotstavio timu od šest doktoranda koji su provodili sličan lov za litij-ionskim vodičima. Njegov model se pokazao dvostruko točnijim i više od tisuću puta bržim od ljudskog tima. "Naš algoritam za materijale sličan je onome za prepoznavanje lica.", rekao je Sendek.



Predviđanje postojanja 2-D materijala

Cheonin rad³ opisuje primjenu strojnog učenja za predviđanje postojanja dvodimenzijskih materijala – tvari koje su toliko tanke da se njihova debljina mjeri u slojevima atoma. Grafen, atomski sloj grafita, bio je prvi otkriveni 2-D materijal. Znanstvenici koji su ga otkrili 2004. godine podijelili su Nobelovu nagradu za fiziku 2010. za otkrivanje njegovih nevjerojatnih svojstava. Istraživači se nadaju da će 2-D materijale iskoristiti za strujne krugove i uređaje na razini atoma. Međutim, za sada je otkriveno samo nekoliko desetaka spojeva.

Cheon je primijenila model strojnog učenja temeljen na fizici i proučavala 16 milijuna kemijskih spojeva da bi predvidjela koji bi se mogli odijeliti u 2-D slojeve. Model je našao više od tisuću kandidata. Većina ih nikada nije sintetizirana, što je eksperimentalnim istraživačima dalo putokaz u potrazi za odgovarajućim ultra-tankim materijalima.

Prednosti umjetne inteligencije i strojnog učenja

Prof. Reed tvrdi da je taj proces koristan jer je malo takvih materijala ikada izmjereno i ispitano, a još manje katalogizirano u bazama podataka. Strojno učenje može znatno ubrzati proces otkrivanja.

Proces je složen, ali logika je jednostavna: molekule i kristalne strukture imaju fizička i kemijska svojstva. Računalni sustavi su vični matematičkoj analizi i mogu izraziti ta svojstva. "Premda nam za većinu materijala nedostaju laboratorijska ispitivanja, ipak možemo računski predvidjeti njihova očekivana svojstva", rekao je Reed.

Literatura

1. Y. He, E. D. Cubuk, M. D. Allendorf, E. J. Reed, Metallic Metal–Organic Frameworks Predicted by the Combination of Machine Learning Methods and Ab Initio Calculations, *J. Phys. Chem. Lett.* **9** (16) (2018) 4562–4569, doi: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcclett.8b01707>.
2. A. D. Sendek, E. D. Cubuk, E. R. Antoniuk, G. Cheon, Y. Cui, E. J. Reed, Machine Learning-Assisted Discovery of Solid Li-Ion Conducting Materials, *Chem. Mater.* **31** (2) (2019) 342–352, doi: <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.8b03272>.
3. G. Cheon, E. D. Cubuk, E. R. Antoniuk, L. Blumberg, J. E. Goldberg, E. J. Reed, Revealing the Spectrum of Unknown Layered Materials with Superhuman Predictive Abilities, *J. Phys. Chem. Lett.* **9** (24) (2018) 6967–6972 doi: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcclett.8b03187>.
4. <https://www.controleng.com/articles/artificial-intelligence-algorithms-developed-to-find-engineering-materials/>. Illustration – courtesy of Kevin Craft, Stanford University (6. 2. 2019.).
5. <https://engineering.stanford.edu/magazine/article/new-algorithm-acts-facial-recognition-software-materials> (6. 2. 2019.).