یکشنبه ۱۷ تیر ۱۴۰۳
شماره ۴۱۷۹
FARHIKHTEGANDAILY.COM
FARHIKHTEGANONLINE

کارشناسان می‌گویند AI ماده‌های جدید را به علم مواد اضافه خواهد کرد

کیمیاگری هوش مصنوعی

علی محمولی
مترجم

تلفن همراه، رایانه شخصی، ماشین لباسشویی و تلویزیون چه اشتراکی با یکدیگر دارند؟ همه آنها نوعی از هوش مصنوعی را در خود دارند، حالا یکی هوش مصنوعی باهوش است و یکی کم‌هوش. موضوع آنجاست که این فناوری نوین سال‌هاست در اشکال مختلف، راه خود را به زندگی روزمره بشر باز کرده و مقداری زندگی کسالت‌بار کاری ۹ صبح تا ۵ عصر را آسان‌تر کرده است. اما اگر پیگیر اخبار فناوری، به‌خصوص از میزی باشید که ما در «فرهیختگان» این مقالات را برای شما تهیه می‌کنیم، می‌بینید هوش مصنوعی بسیار قبل از آنکه تبدیل به نقطه اشتراک محصولات خانگی و روزمره ما شود، در تحقیقات علمی و صنایع وارد شده بود. بااین‌حال، جهش‌های قابل‌توجه در حوزه فناوری در سال‌های اخیر، درهای جدیدی را روی بهره‌برداران این فناوری باز کرده است. دوباره باز می‌گردیم به سوال سطر اول؛ آن وسایل چه اشتراکی با یکدیگر دارند؟ در هر کدام از آنها، نوعی خاص از مواد به کار رفته که امکان استفاده از آنها را با حداکثر بهره‌وری فراهم می‌کند. این مواد درطول سالیان دراز و با تحقیقات آزمایشگاهی گرانقیمت که غالبا مبتنی بر آزمون و خطا بودند، کشف شده‌اند. اما هوش مصنوعی، این حوزه را به‌قول معروف، وارد لیگ دیگری کرده است.

کیمیای یادگیری ماشینی

به گزارشی که چند سال قبل توسط الکترونیک اسپسیفایر منتشر شد، گرت کاندویت، مدیر ارشد فناوری شرکت اینتلجنس (Intellegens) مستقر در کمبریج، بریتانیا، در کنفرانس نمایشگاه مواد پیشرفته ۲۰۱۹ توضیح داد که چگونه الگوریتم‌های یادگیری عمیق می‌توانند به سازمان‌ها کمک کنند تا ارزش بیشتری از داده‌های تجربی خود به‌دست آورند. با استفاده از مثال‌های واقعی، کاندویت نشان داد چگونه داده‌های موجود می‌توانند با شبیه‌سازی‌های کامپیوتری و اطلاعات موجود و عمومی ترکیب شوند تا به‌طور چشمگیری زمان و هزینه مورد نیاز برای توسعه مواد جدید را کاهش دهند. به‌عنوان یک مطالعه موردی، کاندویت بررسی کرد چگونه هوش مصنوعی در طراحی یک ماده نانومقیاس در گرماسنجی نقش داشته است که نتیجه آن، تولید ماده‌ای جدید با خواص مطلوب است که دو مرتبه بزرگ‌تر از هر جایگزین تجاری موجود است.

وی گفت: «در سراسر جهان، میلیون‌ها ماده تجاری موجود است که با صدها خاصیت مختلف شناخته شده‌اند. استفاده از تکنیک‌های سنتی برای بررسی اطلاعاتی که درباره این مواد می‌دانیم و برای کشف مواد، زیرلایه‌ها و ساختارهای جدید، فرآیندی پرزحمت است که ممکن است ماه‌ها یا حتی سال‌ها طول بکشد. با یادگیری همبستگی‌های پنهان در داده‌های مواد موجود برای تخمین خواصی از آنها که ما نمی‌دانیم، موتور هوش مصنوعی ما تحت‌عنوان آلکمایت ای‌آی (Alchemite AI)، می‌تواند با سرعت، کارایی و دقت، مواد جدیدی با خواص مطلوب ارائه دهد و فرآیند توسعه را تسریع کند. پتانسیل این فناوری در بخش مواد پیشرفته بسیار زیاد است.»

موتور هوش مصنوعی آلکمایت از شرکت اینتلجنس، برای کار با داده‌های پراکنده یا شلوغ طراحی شده و قادر به یادگیری از مجموعه داده‌هایی به کوچکی ۰٫۰۵ درصد است. الگوریتم آلکمایت کاربردهای تجاری اثبات‌شده‌ای در طراحی مواد دارد و می‌تواند مدل‌های آموزش دیده‌ای ایجاد کند که برای پیش‌بینی، تشخیص خطا و بهینه‌سازی پارامتر استفاده شود.

MIT علیه آزمون و خطا

در یک مورد مشابه، به گزارش موسسه مهندسان مکانیک انگلیس، یک سامانه هوش مصنوعی توسعه‌یافته در موسسه فناوری ماساچوست (MIT)، مواد جدیدی را کشف کرده که سخت و بادوام هستند و می‌توانند برای نیازهای مختلف مهندسی استفاده شوند. این سامانه که با هدف «توسعه مواد با روشی فارغ از آزمون و خطای سنتی» طراحی شده، توسط دانشمندان آزمایشگاه علوم کامپیوتر و هوش مصنوعی این دانشگاه (CSAIL) طراحی شده است.

با ادغام آزمایش‌های فیزیکی، شبیه‌سازی‌های مبتنی‌بر فیزیک و شبکه‌های عصبی برای مدیریت اختلافات معمول بین مدل‌های نظری و نتایج عملی، محققان از این سامانه برای کشف کامپوزیت‌های میکروسازه‌ای استفاده کرده‌اند. این مواد جدید که برای استفاده در خودروها و هواپیماها بسیار مناسبند، گزارش شده که سخت‌تر و بادوام‌تر از گزینه‌های سنتی هستند و دارای «تعادل بهینه‌ای» از سفتی و سختی‌اند. به‌گفته بایچن لی، یکی از دانشمندان اصلی این پروژه، طراحی و ساخت کامپوزیت در مهندسی، یک کار اساسی است و امیدواریم تاثیرات کار ما، فراتر از حوزه مکانیک جامدات برود. روش‌شناسی ما، نقشه‌راهی برای طراحی محاسباتی فراهم می‌کند که می‌تواند با زمینه‌های متنوعی مانند شیمی پلیمر، دینامیک سیالات، هواشناسی و حتی رباتیک سازگار شود.»

یکی از نوآوری‌های کلیدی در رویکرد این گروه، استفاده از شبکه‌های عصبی به‌عنوان «مدل‌های جایگزین» برای شبیه‌سازی‌ها بود که زمان و منابع مورد نیاز برای طراحی مواد را کاهش می‌دهد. به‌گفته لی «این الگوریتم تکاملی که با شبکه‌های عصبی تقویت شده، اکتشافات ما را پیش می‌برد و به ما اجازه می‌دهد نمونه‌های با عملکرد برتر را به‌صورت کارآمد پیدا کنیم.»

محققان، فرآیند خود را با ساخت فتوپلیمرهای سه‌بعدی چاپ‌شده آغاز کردند که به اندازه یک تلفن هوشمند هستند، اما نازک‌تر. پس از آنکه نمونه‌ها در معرض تابش ویژه‌ای از نور فرابنفش قرار گرفتند، با استفاده از یک دستگاه تست استاندارد برای تست کششی، ارزیابی شدند تا قدرت و انعطاف‌پذیری آنها سنجیده شود. این مطالعه به‌طور همزمان، آزمایش‌های فیزیکی را با شبیه‌سازی‌های پیچیده ترکیب کرد. با استفاده از یک چهارچوب محاسباتی با عملکرد بالا، تیم توانست ویژگی‌های مواد را پیش از ساخت آنها پیش‌بینی کند و بهبود دهد.

بزرگ‌ترین موفقیت به اعتقاد آنها، در تکنیک دقیق اتصال مواد مختلف در مقیاس میکروسکوپی بود؛ روشی که شامل الگوی پیچیده‌ای از قطرات ریز بود که مواد سخت و انعطاف‌پذیر را به هم می‌چسباند و تعادل درستی بین قدرت و انعطاف‌پذیری آنها ایجاد می‌کرد. شبیه‌سازی‌ها با دقت خوبی با نتایج آزمایش‌های فیزیکی مطابقت داشتند و اثربخشی کلی آنها را تایید می‌کردند.

الگوریتم بهینه‌سازی چندمنظوره تقویت‌شده با شبکه عصبی (NMO) که برای مدیریت طراحی پیچیده میکروسازه‌ها استفاده می‌شود، سامانه را تکمیل کرد. طبق اعلامیه موسسه فناوری ماساچوست، این الگوریتم، پیکربندی‌هایی را کشف کرد که دارای ویژگی‌های مکانیکی «نزدیک به بهینه» بودند. جریان کاری این سامانه مانند یک سازوکار خوداصلاح عمل کرده و به‌طور مداوم، پیش‌بینی‌ها را برای تطابق بیشتر با واقعیت تصحیح می‌کند. به‌گفته لی، در این پروژه، حفظ انسجام در چاپ سه‌بعدی و ادغام پیش‌بینی‌های شبکه عصبی، شبیه‌سازی‌ها و آزمایش‌های دنیای واقعی با یکدیگر، چالش‌های اصلی کار بودند. گروه آنها اکنون روی قابل‌استفاده و مقیاس‌پذیرتر کردن فرآیند تمرکز دارد. لی آینده‌ای را متصور است که در آن آزمایشگاه‌ها کاملا خودکارند و نظارت انسانی به حداقل و کارایی به حداکثر رسیده است. «هدف ما این است که همه‌چیز، از ساخت تا آزمایش و محاسبات، به صورت خودکار در یک آزمایشگاه یکپارچه صورت بگیرد.»

کاشفی با ذهنی عمیق

در این میان، جدی‌ترین دستاورد را شاید بتوان متعلق به گوگل دانست. به گزارش نشریه ساینس، محققان گزارش داده‌اند با استفاده از یک هوش مصنوعی جدید، مواد تشکیل‌دهنده و خواص ۲٫۲ میلیون ماده دیگر را پیش‌بینی کرده‌اند. در مطالعه‌ای که همراه با این دستاورد انجام شد، گروهی جداگانه نشان داده که چنین مواد پیش‌بینی‌شده‌ای می‌توانند مجددا و با استفاده از هوش مصنوعی، به شکلی کارآمد طراحی شوند. محققان می‌گویند که این گزارش‌ها از آغاز یک عصر جدید در علم مواد خبر می‌دهند، دورانی که برنامه‌ها و ربات‌های مبتنی‌بر هوش مصنوعی، جست‌وجو برای ساخت باتری‌ها، ابررساناها و کاتالیزورهای منحصربه‌فرد و یکتا را پیش می‌برند. به گفته اندرو روزن، دانشمند حوزه مواد محاسباتی در دانشگاه پرینستون «این بسیار چشمگیر است.»

پیش‌بینی‌هایی که در مجله نیچر منتشر شده‌اند، دستاوردی دیگر برای نوآوران هوش مصنوعی در شرکت دیپ مایند (DeepMind) هستند که شاخه‌ای از گوگل است. ماه گذشته آنها یک الگوریتم هوش مصنوعی را معرفی کردند که روی رایانه شخصی اجرا می‌شود و می‌تواند آب و هوا را با همان دقت مدل‌های بزرگ مبتنی‌بر ابررایانه‌ها پیش‌بینی کند. قبل از آن دیپ مایند، آلفافولد (AlphaFold) را توسعه داده بود، یک هوش مصنوعی که قادر است شکل سه‌بعدی صدها میلیون پروتئین مختلف را از توالی آمینواسیدهای آنها پیش‌بینی کند. روزن می‌گوید: «کار جدید ما معادل آلفافولد برای علم مواد است.»

مانند دستاوردهای قبلی دیپ مایند، این بار نیز آنها یک هوش مصنوعی را با داده‌های گسترده، آموزش دادند. محققان با پروژه مواد شروع کردند که یک پایگاه داده از تمام کریستال‌های غیرآلی شناخته شده و پیش‌بینی شده بود. این پایگاه داده شامل نه‌تنها ساختار کریستالی هر کدام از مواد، بلکه خواصی مانند ساختار الکترونیکی، رفتار مغناطیسی و سختی آن نیز می‌شود. در طول دهه گذشته، گروه‌های دخیل در «پروژه مواد» داده‌های ۲۰ هزار کریستال غیرآلی شناخته‌شده را به الگوریتم‌های یادگیری ماشینی تطبیق الگو وارد کرده‌اند تا ۲۸ هزار کریستال غیرآلی دیگر را پیش‌بینی کنند که باید پایدار باشند.

برای کار فعلی خود محققان دیپ مایند به سرپرستی دوغوش چوبوک که مسئول بخش کشف مواد در این شرکت است، از داده‌های مذکور و همچنین اطلاعاتی از پایگاه‌های داده مرتبط دیگر برای آموزش یک مدل هوش مصنوعی «یادگیری فعال» استفاده کردند. نام این مدل شبکه‌های گراف کاوش مواد یا به‌اختصار گنوم (GNoME) است و می‌تواند الگوهایی فراتر از داده‌های اولیه آموزش‌داده‌شده را شناسایی کند. این مدل در اولین بار مجموعه پیش‌بینی‌هایی از مواد جدید پایدار و خواص آنها را انجام داد، سپس گروه نتایج را به داده‌های آموزشی اضافه کرد و چرخه را تکرار کرد. پس از چندین دور مشابه، گنوم ۲٫۲ میلیون ترکیب جدید را پیش‌بینی کرد. هوش مصنوعی چیزی را تحت عنوان «انرژی تشکیل» را برای ۳۸۱ هزار مورد از آن مواد محاسبه کرد. با توجه به این محاسبات اگر محققان بتوانند آنها را سنتز کنند اصولا باید پایدار باشند و به ساختارهای دیگر تجزیه نشوند.

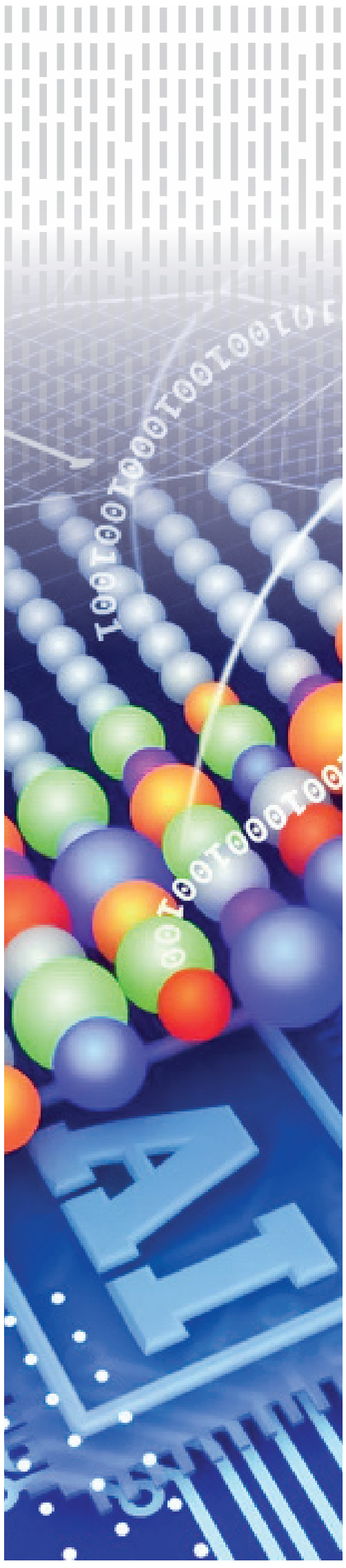
در میان یافته‌های فوق موادی لایه‌ای هستند که در الکترودهای باتری استفاده مورد استفاده قرار می‌گیرند. درحالی‌که پروژه مواد هزار ترکیب از این نوع را شناسایی کرده بود گنوم ۵۲ هزار ترکیب را پیش‌بینی کرد من جمله ۵۲۸ رسانای لیتیوم یون؛ نوعی ماده که برای ساخت بهترین باتری‌های امروز حیاتی است. چوبوک همچنین اشاره می‌کند که برخلاف کریستال‌های پیش‌بینی‌شده قبلی که عمدتا شامل دو، سه یا چهار عنصر بودند بسیاری از ساختارهای پیش‌بینی‌شده توسط دیپ مایند شامل پنج و حتی شش عنصر هستند. الکساندر گانوس، شیمیدان دانشگاه کالج سلطنتی لندن در این رابطه گفت «این واقعا بسیار جذاب است. این امر، امکان کشف مواد در یک دامنه ترکیبی بسیار گسترده‌تر را فراهم می‌کند. ما ممکن است بتوانیم مواد آینده را در این مجموعه داده پیدا کنیم.»

از تئوری تا واقعیت

گام بعدی در واقع سنتز مواد است، فرآیندی که به‌طور سنتی و با استفاده از روش آزمون و خطا ممکن است ماه‌ها یا سال‌ها، تنها برای یک ترکیب، طول بکشد. جنین جورج، دانشمند مواد محاسباتی در موسسه فدرال تحقیقات و آزمایش مواد برلین در این مورد می‌گوید «پیش‌بینی کار خوبی است، اما ساختن مواد است که کار عالی و ارزشمندی است.»

بنچمارک‌های بیرونی نشان می‌دهند که نرخ موفقیت گنوم در پیش‌بینی ساختارهای پایدار به ۸۰ درصد می‌رسد که از ۵۰ درصد در الگوریتم‌های قبلی بیشتر است. محققان دیپ مایند اشاره می‌کنند که آزمایش‌کنندگان مستقل، قبلا ۷۳۶ مورد از مواد پیش‌بینی‌شده را ساخته و پایداری آنها را تایید کرده‌اند. چوبوک می‌گوید حتی موادی که مطمئن نیستند پایدار باشند ممکن است مدت بسیار زیادی دوام بیاورند، همان‌طور که الماس قبل از آنکه به گرافیت تبدیل شود، بیش از یک میلیارد سال دوام می‌آورد.

بنا بر مطالعه‌ای دیگر که در نشریه نیچر منتشر شد یک نوع متفاوت از هوش مصنوعی نیز ممکن است به سنتز بیشتر پیش‌بینی‌های گنوم کمک کند. محققان در آزمایشگاه ملی لارنس برکلی به سرپرستی گربراند سدر، دانشمند مواد، اخیرا یک آزمایشگاه رباتیک مبتنی‌بر هوش مصنوعی ساختند که برای ساخت مواد پیش‌بینی شده جدید، به کار گرفته خواهد شد. اکنون او و همکارانش گزارش می‌دهند که این سامانه به‌سرعت یاد گرفت تا دستورالعمل‌های سنتز ترکیبات جدید پیش‌بینی‌شده توسط الگوریتم «پروژه مواد» را پالایش کند. در ۱۷ روز، ربات‌ها ۴۱ ماده از ۵۸ ماده‌ای که سعی کردند را با موفقیت سنتز کردند. محققان دیپ مایند می‌گویند که بلافاصله داده‌های ۳۸۱ هزار ترکیب پیش‌بینی‌شده پایدار را منتشر خواهند کرد و کد هوش مصنوعی آن را به‌صورت عمومی در دسترس قرار خواهند داد. هرچند ممکن است درنهایت تمام ۲٫۲ میلیون را منتشر کنند اما گانوس نمی‌خواهد صبر کند. مطالعه همه مجموعه‌ها می‌تواند به دانشمندان کمک کند بهتر تعیین کنند چه چیزی برخی ترکیبات را پایدار می‌کند درحالی‌که دیگران پایدار نیستند. به گفته وی «اگر این اطلاعات مخفی بماند، واقعا ضرری برای علم است.» چوبوک اما اشاره می‌کند که با داشتن تقریبا ۱۰ برابر اهداف بیشتر از همیشه دانشمندان مواد در حال حاضر چیزهای زیادی دارند تا آزمایشگاه‌های خود را مشغول کنند.



«فرهیختگان» گزارش می‌دهد

سنجش و هویت‌گذاری دام و طیور با سیستم‌های هوشمند بومی

محققان شرکت دانش‌بنیان «ریزسامانه های سبز آینده» مستقر در پارک علم و فناوری دانشگاه صنعتی امیرکبیر موفق به طراحی و تولید سنسورهای هوشمند شده‌اند. این سنسورها در زمینه پایش دام‌ها به صنعت دامداری کشور کمک شایانی کرده‌اند. نهال تبریزی، مدیر محصول این شرکت دانش‌بنیان در گفت‌وگو با «فرهیختگان» گفت: «ما در شرکت فعالیت‌هایی را در زمینه هوشمندسازی پلتفرم‌های مختلف دامی، پایش هوشمند، کارخانه و انبار هوشمند انجام می‌دهیم. یکی از محصولات ما «بلوس‌های الکترونیکی» هستند که با محیط‌زیست سازگار بوده و به بدن دام هیچ آسیبی وارد نمی‌کند. این سنسورهای الکترونیکی توسط دام سنگین بلعیده و به شکمبه دام (سیرابی) متصل می‌شود. این سنسورها اطلاعاتی را از داخل بدن دام مانند دمای بدن، زمان فحلی (زمان جفت گیری دام)، احتمال بارداری دام، میزان مصرف خوراک و آب دام را از طریق «مودم لوراون» (LoRaWAN) نشان می‌دهد. عمر دام شیری پنج سال است و عمر باتری این سنسورها نیز پنج سال بوده و بعد از ذبح دام نیز می‌توان دوباره از این محصول استفاده کرد اما به دلیل مسائل بهداشتی توصیه نمی‌شود.»

او در ادامه بیان کرد: «محصول بعدی ما میکروچیپ‌های تزریقی هستند که به آنها «تگ RFID» (سامانه بازشناسی با امواج رادیویی است که روشی برای انتقال داده محسوی می‌شود) هم گفته می‌شود و از طریق گان تزریق خشاب‌دار به زیر پوست دام تزریق می‌شود. همچنین می‌توان این محصول را به حیوانات خانگی، پرندگان و ماهی‌ها هم تزریق کرد. در گان‌های خشاب‌دار، جایی برای ۱۰ خشاب تعبیه شده که دامدار قادر است میکروچیپ‌ها را به بدن دام تزریق کند. میکروچیپ‌ها کاربرد هویت‌گذاری دارند و شجره دام را مشخص می‌کند بنابراین برای تشخیص ژنتیک، بیماری و وزن‌کشی روزانه دام‌ها، مقدار تولید روزانه شیر و شناسایی گونه‌های اصیل حیوانی به کار می‌رود. Reader این میکروچیپ‌ها نیز تولید شرکت ماست و قادر است اطلاعات ثبت‌شده روی این میکروچیپ‌ها را نشان دهد. متوسط عمر باتری این میکروچیپ‌ها نیز پنج سال است و مانند سنسورهای قبلی پس از مرگ دام نیز می‌توان دوباره از آن استفاده کرد اما به دلیل مسائل بهداشتی توصیه نمی‌شود.»

تبریزی در ادامه افزود: «میکروچیپ‌های تزریقی تاکنون نمونه داخلی نداشته و حتی نمونه وارداتی از این محصول هم در داخل کشور وجود نداشته اما در مقایسه با نمونه‌های خارجی با نصف قیمت عرضه می‌شود. مزیتی که میکروچیپ‌های تولیدشده نسبت به نمونه‌های خارجی دارد این است که در هویت‌گذاری معمولی، داده‌ها به‌صورت دستی در فایل اکسل ثبت می‌شوند اما محصول ما به دلیل هویت‌گذاری الکترونیکی داده‌ها به‌طور مادام‌العمر باقی می‌مانند بنابراین می‌توان داده‌ها را همیشه نگه داشت.»

رسا
ریز سامانه های سبز آینده