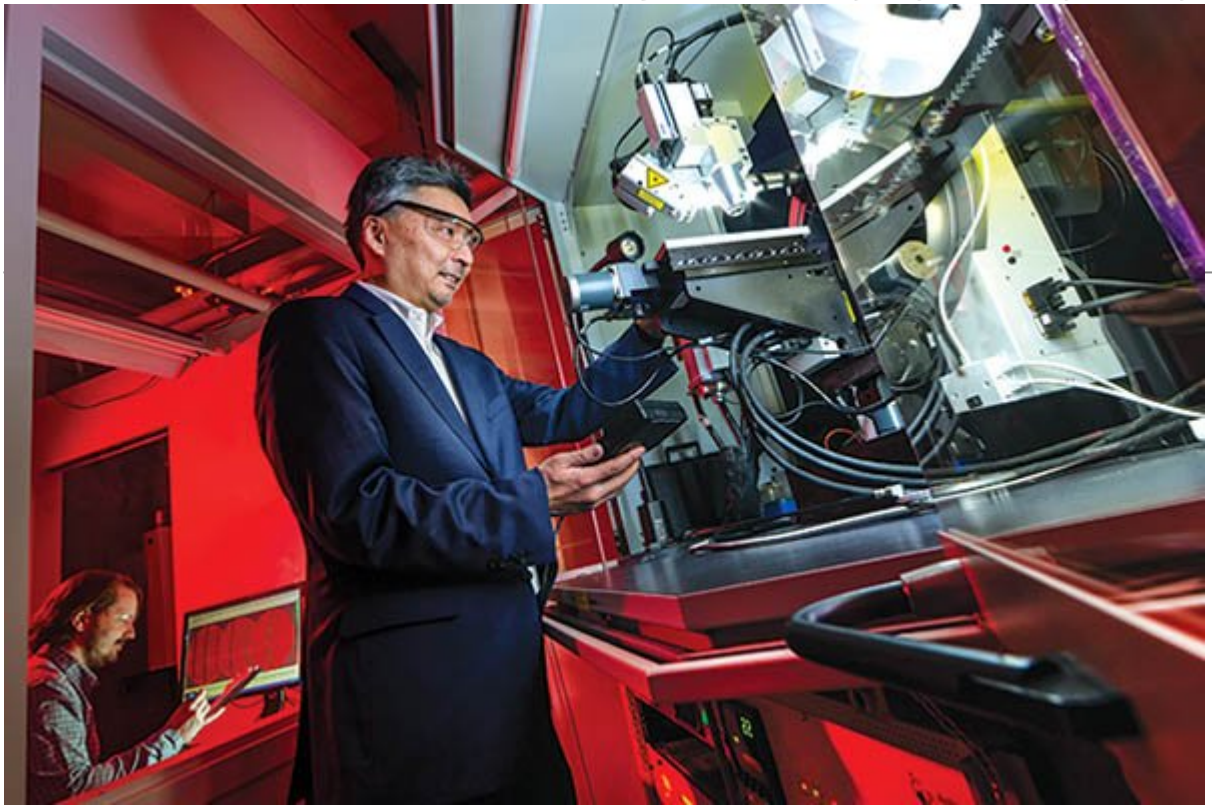
قابلیت پیش‌بینی یادگیری ماشین، تعداد آزمایش‌های لازم برای حل یک مسئله را به حداقل می‌رساند.

استفاده از یادگیری ماشین برای کشف مواد جدید



بیش از یک دهه پیش «ایچیرو تاکیوچی (Ichiro Takeuchi)، استاد علوم و مهندسی مواد دانشگاه ایالتی مریلند، برای کشف و ساخت مواد مغناطیسی جدید به استفاده از یادگیری ماشین (زیرشاخه‌ای از هوش مصنوعی) روی آورد. در آن سال‌ها، یادگیری ماشین در علم مواد کاربرد گسترده‌ای نداشت اما به‌گفته وی، حالا اوضاع خیلی فرق کرده است. بخشی از محبوبیت فعلی یادگیری ماشین ناشی از انقلابی است که در سال 2012 در عرصه یادگیری عمیق رخ داد. کشف مواد جدید با کمک یادگیری ماشین صرفا یک کار آزمایشگاهی نیست، بلکه روشی است که برای فائق آمدن بر چالش‌های ژئوپلتیکی هم کارایی دارد.

در سال 2010 هنگامی که چین صادرات عناصر خاکی کمیاب به آمریکا را ممنوع کرد، زنجیره تامین موتور وسایل نقلیه برقی در آمریکا دچار بحران شد. وقتی دسترسی تولیدکنندگان آمریکایی به این مواد قطع شد، از ساخت ماده کلیدی نئودیمیم بازماندند. نئودیمیم ماده مغناطیسی کمیابی است که در صنعت موتور وسایل نقلیه برقی نقش مهمی دارد. این ماجرا سبب شد تا گروه **تاکیوچی** استفاده از **یادگیری ماشین** برای توسعه **مواد مغناطیسی** جدید جایگزین را شروع کند.

در آغاز، **تاکیوچی** و گروه او داده‌های از قبل گزینش‌شده‌ای نداشتند تا با این داده‌ها به الگوریتم‌شان خوراک برسانند، لذا خودشان چنین پایگاه‌داده‌ای ایجاد کردند. گروه **تاکیوچی** به ماشین‌ها یاد دادند که چطور گنجینه مقالات علمی را بخوانند و داده‌ها را به‌منظور یافتن الگوها و پیش‌بینی‌ها تجزیه کنند. از این طریق درباره کارایی، ویژگی‌ها و عملکرد **مواد مغناطیسی** کمیاب در زمین، جزییات شیمیایی معناداری از مقالات استخراج شد. و بدین سان، پایگاه‌داده‌ای پدید آمد که خوراک الگوریتم دیگری می‌شد. این بار، **الگوریتم یادگیری ماشین** باید موادی را شناسایی می‌کرد که خصوصیات لازم برای ساخت آهنرباهای مبتنی بر عناصر خاکی کمیاب را داشته باشند و بتوانند جایگزین نئودیمیم شوند.

تاکیوچی می‌گوید، اشتیاق محققان به **کشف مواد جدید** با ویژگی‌های خاص، رو به افزایش است. به گفته وی، استفاده از **یادگیری ماشین** به‌منظور جستجوی مواد جدید، از نظر رایانشی کم‌هزینه و بسیار کارآمد است، لذا آن‌ها می‌توانند روابط بین ترکیب و ساختار ماده در یک‌سو و ویژگی‌های عملکردی ماده در سوی دیگر را دریابند.

در آزمایشگاه **تاکیوچی** جستجو برای **کشف مواد جدید**، با شیوه‌ای موسوم به آزمایش‌های توان بالا (High Throughput Experiments) صورت می‌پذیرد؛ شیوه‌ای که با آن می‌توان آزمایش‌های زیادی را به موازات هم انجام داد و با ترکیب و بررسی میلیون‌ها ماده شیمیایی طی مدتی کوتاه، در هر لحظه تا 1000 ماده جدید و کوهی از داده‌ها تولید کرد؛ طوری که **تاکیوچی** بگوید، «ما در داده‌ها غرق شده بودیم.»

آن‌ها پیش از به‌کارگیری **یادگیری ماشین**، ابزاری نداشتند تا با آن از تمام ظرفیت داده‌ها بهره ببرند. **یادگیری ماشین** نه تنها استفاده از مجموعه داده‌های بزرگ را ممکن می‌کند، بلکه دامنه اکتشافات خود را تا جایی گسترش می‌دهد که الگوریتم می‌تواند از سرنخ‌هایی که در داده‌ها می‌یابد، پیش‌بینی‌های جدیدی ارائه دهد. ماشین به‌طور خودکار روابط پنهان بین مواد و ویژگی‌های‌شان را کشف می‌کند، و این دانشی است که **تاکیوچی** و گروه او به دنبالش هستند.

آزمایشگاه **تاکیوچی** به نوآوری با اکتشافات مبتنی بر **یادگیری ماشین** ادامه می‌دهد. تازه‌ترین دستاورد آن‌ها از این سوال ناشی شد که: «در جستجو برای **کشف مواد جدید** با ویژگی‌های خاص، چرا اجازه ندهیم که کامپیوتر همه ویژگی‌ها را تحلیل کند و درباره نحوه اجرای آزمایش تصمیم بگیرد؟»

این الگوی جدید یادگیری فعال خودکار، هم سریع و ارزان و هم بسیار کارآمد است، زیرا قدرت و قابلیت پیش‌بینی یادگیری ماشین، تعداد آزمایش‌های لازم برای حل یک مسئله را به حداقل می‌رساند.

به‌گفته **تاکیوچی**، در شیوه یادگیری فعال خودکار، دیگر لازم نیست مثل آنچه آن‌ها با استفاده از آزمایش‌های توان بالا انجام دادند، 1000 آزمایش انجام دهید بلکه فقط به یک‌دهم یا یک‌پنجم آن آزمایش‌ها نیاز دارید، زیرا الگوریتم اجازه می‌یابد درباره مقصد بعدی خود در مرحله آتی تصمیم بگیرد.

تاریخ انتشار:

29 خرداد 1398

نشانی منبع:
https://www.shabakeh-mag.com/information-feature/artificial-intelligence/15163/%D8%A7%D8%B3%D8%AA%D9%81%D8%A7%D8%AF%D9%87-%D8%A7%D8%B2-%DB%8C%D8%A7%D8%AF%DA%AF%DB%8C%D8%B1%DB%8C-%D9%85%D8%A7%D8%B4%DB%8C%D9%86-%D8%A8%D8%B1%D8%A7%DB%8C-

%DA%A9%D8%B4%D9%81-%D9%85%D9%88%D8%A7%D8%AF-
%D8%AC%D8%AF%DB%8C%D8%AF