

## ردپای هوش مصنوعی در طراحی پلیمر

دانشمندان چینی اعلام کردند که استفاده از هوش مصنوعی می تواند تعداد آزمایش های طراحی پلیمر را به طور چشمگیری کاهش دهد.

به گزارش گروه علم و فناوری ایسکانیوز، دانشمندان چینی اعلام کردند که استفاده از هوش مصنوعی می تواند تعداد آزمایش های طراحی پلیمر را به طور چشمگیری کاهش دهد. در ادامه به ارائه روش هوش مصنوعی مطرح شده در این تحقیق و نتایج آن می پردازیم.

محققان تحقیقات مبتنی بر هوش مصنوعی ( ) را برای طراحی پلیمرهایی با خواص مطلوب انجام دادند و هدف آن ها اثربخشی فناوری در فرآیند طراحی پلیمر بود. به عنوان یک مدل، آن ها روی دمای انتقال شیشه که یک شاخص مقاوم برای انتقال دما بود، تمرکز کردند.

آنها یک جستجوی مبتنی بر را با استفاده از ۴۱۷ نوع داده های ساختاری مختلف روی پلیمرهایی با ساختارهای شناخته شده و دمای انتقال شیشه\*، برای پلیمر با بالاترین دمای انتقال انجام دادند تا دریابند آیا امکان دارد این چرخه توسعه کاهش یابد یا خیر.

در ابتدا ۱۰ مجموعه داده به طور تصادفی به عنوان داده های آموزشی در سیستم هوش مصنوعی انتخاب شدند. (یک روش برای نشان دادن سازه های مونومر) برای آموزش و دیجیتالی کردن ساختار ویژگی های پلیمرها مورد استفاده قرار گرفت.

از روش بهینه سازی بیزین\* ( ) برای پیش بینی و تایید پلیمر با بالاترین دمای انتقال شیشه از ۴۰۷ مجموعه باقی مانده داده ها استفاده شد.

بنابراین، تعداد آزمایش مورد نیاز تا کشف پلیمر هدف مورد بررسی قرار گرفت. برای جلوگیری از تاثیر انتخاب داده ها روی نتایج، ۵۰۰ آزمون با مجموعه های مختلف داده های آموزش اولیه انجام شد و میانگین تعداد آزمایش ها مورد ارزیابی قرار گرفت.

در نتیجه، محققان موفق به کشف یک پلیمر هدف با بالاترین دمای انتقال شیشه با میانگین ۴.۶ آزمایش شدند. این رقم حدود یک درصد از تعداد آزمایشات مورد نیاز برای انتخاب تصادفی پلیمرها است که اثر بخشی طراحی پلیمر مبتنی بر را تأیید می کند.

برای ساخت ، لازم است ویژگی های پلیمر را به مقادیر عددی تبدیل کنیم. محققان برای این کار از (یک روش برای نشان دادن سازه های مونومر) استفاده کردند و دریافتند که واحدهای مولکولی تکرار شده (مانند گروه های عملکردی) به طور خودکار استخراج و ویژگی های ساختاری به طور مناسب در بردارهای عددی بیان می شود.

محققان با استفاده از سیستم هوش مصنوعی ساخته شده روی این داده ها، پیش بینی های بسیار دقیقی را با سرعت ۰.۲۵ ثانیه برای هر پلیمر انجام دادند. بنابراین، امکان پیش بینی جامع برای تعداد زیادی از پلیمرهای کاندیدا در مدت زمان محدود فراهم شد.

علاوه بر این، با استفاده از روش بهینه سازی بیزین در پیش بینی، یک پلیمر با بالاترین دمای انتقال شیشه از بین حدود ۴۰۰ نوع پلیمر کاندید بر اساس ۱۳.۶ مجموعه داده آموزشی کشف شد.

پیش از این مطالعه، اعتقاد بر این بود که پیش بینی های مبتنی بر با تعداد پائینی از داده های آموزشی دقت کمتری دارد و به اطلاعات آموزشی بیشتری نیاز است. با این حال، این کار نشان می دهد که در حل مسائل حتی در زمینه توسعه مواد عملیاتی پیشرفته تر، موثر خواهد بود، جایی که فقط تعداد محدودی از داده های آموزشی موجود در دسترس است.

\*دمای انتقال به شیشه ( ) :دمایی است که در آن هنگام گرم کردن، رفتار شیشه از حالت الاستیک به حالت ویسکوالاستیک تبدیل می شود. این دما با تغییر ناگهانی در ضریب انبساط حرارتی ماده مشخص می شود.

پلیمرهای ساخته شده از جمله مهم ترین خواص لاتکس نهایی است. با توجه به محصول می توان مصارف مختلفی را با در نظر گرفتن اثر گذاری این پارامتر در بیشتر خواص لاتکس در نظر گرفت.

پلیمرهایی با بالا می توانند در رنگ های ساختمان های ساختمانی برای نواحی گرمسیر به کار روند. این پلیمرها به دلیل سختی سطح آنها دارای مقاومت شستشوی بالایی نیز هستند. این پلیمرها همچنین در صنایع پوشش های نساجی و چسب چوب نیز نقش با اهمیتی را بازی می کنند. رنج برای محصولات مورد مصرف در صنعت رنگ بین ۵+ تا ۳۵+ است.

\*بهینه سازی بیزین: یک روش برای انتخاب مواد داوطلب بعدی که با در نظر گرفتن خطای پیش بینی، علاوه بر مقادیر پیش بینی شده است.

این الگوریتم از اطلاعات اولیه ای که کاربر در مورد مسئله به الگوریتم می دهد و همچنین اطلاعاتی که از تجزیه و تحلیل در حین اجرای الگوریتم، توسط الگوریتم حاصل می شود، استفاده می کند. اطلاعات اولیه در مورد ساختار مسئله و نیز اطلاعاتی که توسط راه حل های با کیفیت بالا (-) بیان می شوند، می توانند در این الگوریتم مورد استفاده قرار بگیرند. ترکیب اطلاعات اولیه و مجموعه ای از راه حل های نوید بخش ( ) برای تخمین توزیع مورد استفاده قرار می گیرند.

انتهای پیام/