

Sztuczna inteligencja (AI) i uczenie maszynowe oferują ogromny potencjał rozwoju materiałoznawstwa i badań chemicznych. Sztuczna inteligencja jest w stanie analizować ogromne zbiory danych, rozpoznawać złożone wzorce i dokonywać dokładnych prognoz znacznie wykraczających poza to, co jest możliwe dla ludzkich badaczy, którzy nie wykorzystują jeszcze potencjału tych złożonych metod obliczeniowych. Możliwości te mogą znacznie przyspieszyć rozwój nowych materiałów o zoptymalizowanych właściwościach do szerokiego zakresu zastosowań.

W dziedzinie chemii sztuczna inteligencja jest już stosowana w celu usprawnienia różnych obszarów badań. W przypadku odkrywania i projektowania leków, modele uczenia maszynowego są szkolone w celu przewidywania właściwości i zachowania cząsteczek w celu identyfikacji nowych kandydatów na leki w bardziej efektywny sposób. Sztuczna inteligencja jest również wykorzystywana do analizy dużych zbiorów danych znanych materiałów w celu odkrycia nowych zależności między strukturą a właściwościami, które mogą pomóc w projektowaniu nowych materiałów o ukierunkowanej wydajności.

Narzędzia sztucznej inteligencji są szczególnie obiecujące, jeśli chodzi o przyspieszenie rozwoju nowych materiałów funkcjonalnych, takich jak ciecze jonowe. Te projektowalne rozpuszczalniki składają się w całości z jonów i wykazują intrygujące właściwości, które czynią je potencjalnie użytecznymi w szerokim zakresie zastosowań komercyjnych i przemysłowych. Jednak synteza cieczy jonowych o zoptymalizowanych właściwościach do konkretnych zadań pozostaje trudnym procesem prób i błędów.

W tym projekcie algorytm Model Agnostic Meta Learner może zaoferować skuteczne podejście do szybszego przewidywania zdolności sorpcyjnych nowych cieczy jonowych. Poprzez trenowanie modeli na danych z powiązanych, ale innych zadań sorpcyjnych, meta-uczenie ma na celu wyodrębnienie ogólnych wzorców, które umożliwiają modelowi szybkie i skuteczne dostosowanie się do nowych zadań przy niewielkiej ilości danych. Może to przesunąć projektowanie cieczy jonowych w kierunku paradygmatu bardziej opartego na danych, który uwzględnia wcześniejszą wiedzę chemiczną, aby zmaksymalizować wydajność eksperymentu i szybkość odkrywania nowych związków.

Analiza modelu posłuży jako podstawa do bardziej wydajnego projektowania nowych, specyficznych dla zadania cieczy jonowych, których zdolność sorpcyjna zostanie oceniona na etapie eksperymentalnym projektu dla amfoterycyny i tlenu. W związku z tym zostanie zbadane, w jaki sposób ten nowy algorytm może usprawnić badania strukturalne nad związkiem między absorpcją a chemicznymi grupami strukturalnymi. Oczekuje się, że zostanie udowodnione, że proponowana metoda może być przydatna w badaniach struktura-właściwości nawet przy niewielkiej ilości danych, a cel projektu, jakim jest zaproponowanie nowych, specyficznych dla zadania cieczy o zwiększonej zdolności sorpcyjnej, zostanie osiągnięty. Temat badań jest ważny dla społeczności naukowej i został wybrany do dogłębnego zbadania ze względu na rosnące znaczenie technik sztucznej inteligencji w materiałoznawstwie i duże znaczenie cieczy jonowych w dziedzinie projektowalnych zielonych rozpuszczalników przyszłości.

Podsumowując, integracja sztucznej inteligencji oraz nauk chemicznych i materiałowych może zasadniczo zmienić sposób odkrywania i opracowywania nowych materiałów funkcjonalnych, takich jak ciecze jonowe. Dzięki odpowiednim technikom i zbiorom danych, narzędzia sztucznej inteligencji mogą umożliwić bardziej racjonalne, oparte na danych projektowanie, które przyspieszy odkrywanie cieczy jonowych dostosowanych do konkretnych zastosowań o wysokiej wartości.