



ТЕХНОЛОГИЯ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА В МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ: УСКОРЕННОЕ ОТКРЫТИЕ И ОПТИМИЗАЦИЯ НОВЫХ МАТЕРИАЛОВ

Гаррыева Нурсолтан Ашыровна

Преподаватель, Международного университета нефти и газа имени Ягшыгелди Какаева

г. Ашхабад Туркменистан

Оразмырадова Халима Перманнуровна

Студент, Международного университета нефти и газа имени Ягшыгелди Какаева

г. Ашхабад Туркменистан

Хекимов Батыр Башимгелдиевич

Студент, Международного университета нефти и газа имени Ягшыгелди Какаева

г. Ашхабад Туркменистан

Оразмырадова Огульджахан

Студент, Международного университета нефти и газа имени Ягшыгелди Какаева

г. Ашхабад Туркменистан

Аннотация

Данная статья посвящена всестороннему анализу применения технологий искусственного интеллекта и машинного обучения для радикального ускорения процессов открытия, синтеза и оптимизации новых материалов, что является критически важным для развития высокотехнологичных отраслей, таких как энергетика, электроника и медицина. Традиционные методы материаловедения, основанные на эмпирических подходах и трудоемких лабораторных экспериментах, требуют значительных временных и финансовых затрат. Технология искусственного интеллекта, особенно алгоритмы глубокого обучения и обучения с подкреплением, позволяет обрабатывать огромные массивы данных, полученных из экспериментальных баз, симуляций и теоретических расчетов. Рассматривается, как машинное обучение используется для прогнозирования свойств новых, еще не синтезированных соединений, оптимизации условий синтеза и автоматизированного проектирования функциональных материалов с заданными характеристиками. Особое внимание уделяется концепции автоматизированных лабораторий и высокопроизводительного скрининга, управляемых искусственным интеллектом.

Сделан вывод о том, что технология искусственного интеллекта трансформирует материаловедение из науки, основанной на случайных открытиях, в науку, основанную на целевом, рациональном проектировании, что ведет к революционному сокращению времени разработки новых материалов.

Ключевые слова: Искусственный интеллект, Материаловедение, Машинное обучение, Открытие материалов, Глубокое обучение, Высокопроизводительный скрининг, Оптимизация синтеза, Рациональное проектирование.

Введение

Разработка новых материалов с улучшенными или уникальными свойствами например, высокотемпературных сверхпроводников, более эффективных катализаторов или усовершенствованных аккумуляторов, является узким местом научно-технического прогресса. Традиционный цикл открытия материала, включающий синтез, тестирование и анализ, занимает в среднем 10–20 лет. Этот процесс часто основан на интуиции, эмпирическом поиске и переборе огромного числа потенциальных кандидатов.

Технология искусственного интеллекта и машинного обучения предлагает изменить эту парадигму, переведя материаловедение из области случайного обнаружения в область рационального, целевого проектирования. Использование алгоритмов машинного обучения позволяет устанавливать сложные, нелинейные корреляции между химическим составом, кристаллической структурой и конечными функциональными свойствами материала, которые не очевидны для человеческого анализа. Это позволяет резко сузить область поиска и фокусировать дорогостоящие лабораторные усилия только на наиболее перспективных соединениях. Цель данной статьи — провести детальный анализ ключевых технологических приложений искусственного интеллекта в материаловедении, начиная от прогнозирования свойств и заканчивая автоматизацией процесса синтеза, а также оценить перспективы и вызовы, связанные с внедрением этих методов.

Прогнозирование Свойств и Виртуальный Скрининг

Наиболее прямое, мощное и экономически эффективное применение технологии искусственного интеллекта в материаловедении заключается в ускоренном виртуальном скрининге и анализе огромных, многомерных пространств потенциальных соединений. Эта методика позволяет преодолеть фундаментальные ограничения традиционной парадигмы "проб и ошибок", где каждый новый материал должен быть синтезирован и охарактеризован экспериментально. Искусственный интеллект позволяет с высокой скоростью оценить миллионы гипотетических структур, сужая фокус исследователей до наиболее перспективных кандидатов.

Прогнозирование Функциональных Характеристик: Глубокое обучение представляет собой краеугольный камень современного виртуального скрининга.

Оно использует обширные массивы данных, полученных как из высокоточных методов вычислительной химии, таких как расчеты по теории функционала плотности, так и из обширных экспериментальных баз данных, аккумулированных за десятилетия исследований. Искусственный интеллект способен с высокой степенью точности предсказывать свойства еще не синтезированных соединений, что является критически важным для рационального дизайна. К числу этих предсказуемых характеристик относятся ключевые параметры, определяющие функциональность материала: запрещенная зона полупроводников, критически влияющая на их оптоэлектронные свойства; стабильность кристаллической решетки, определяющая долговечность материала; упругие модули и твердость, важные для структурных применений; теплопроводность, существенная для изоляционных или теплоотводящих материалов; а также емкость и рабочее напряжение электрохимических накопителей.

Для обработки структурной информации, которая является сложной и дискретной, широко используются графовые нейронные сети. Эти алгоритмы представляют кристаллическую решетку или молекулярную структуру материала как граф, где отдельные атомы выступают в качестве узлов, а химические связи — в качестве ребер. Сеть обучается напрямую устанавливать сложные, нелинейные корреляции между этой структурной топологией, атомным окружением и конечными макроскопическими свойствами. Такая методика позволяет исследователям на ранних этапах отсеять миллионы бесперспективных соединений в ходе компьютерного моделирования, избегая необходимости синтеза и, следовательно, экономя значительные финансовые ресурсы и годы кропотливого лабораторного труда. Высокая скорость и точность прогнозирования позволяет исследователям более эффективно расходовать ресурсы и сосредотачиваться на действительно прорывных материалах.

Создание Генеративных Моделей: Технология искусственного интеллекта не ограничивается только предсказанием свойств существующих или гипотетических соединений; она обладает потенциалом к генерации принципиально новых химических формул и нетрадиционных атомных структур, которые могли бы быть непредставимы для человеческой интуиции. В этом направлении активно применяются генеративные модели, такие как вариационные автокодировщики или генеративно-состязательные сети. Эти модели обучаются на обширном массиве успешных материалов, извлекая скрытые правила и принципы, которые определяют их функциональность.

После обучения генеративные модели могут быть использованы для обратного проектирования — они предлагают новые, потенциально более эффективные структуры, которые оптимизированы под конкретные функциональные требования. Примером такого подхода может служить поиск соединения с минимальной теплопроводностью при одновременном обеспечении максимальной механической прочности.

Эти модели способны систематически исследовать многомерные пространства композиций, структурных мотивов и их взаимосвязей, что значительно превышает возможности традиционного химического и физического поиска. Таким образом, этот подход является краеугольным камнем для рационального, целевого обратного проектирования материалов, позволяя исследователям двигаться от желаемых свойств к искомой атомной структуре.

Оптимизация Синтеза и Автоматизированные Лаборатории

Успешное открытие новой формулы или структуры материала является лишь первым этапом в его коммерческом освоении. Критически важным и часто наиболее времязатратным этапом является масштабирование и оптимизация условий его синтеза. Небольшие вариации в параметрах процесса могут радикально изменить микроструктуру, чистоту, фазовый состав и, как следствие, функциональность конечного материала. Именно этот сложный, многомерный этап успешно автоматизируется и оптимизируется с помощью технологии искусственного интеллекта.

Оптимизация Условий Синтеза: Синтез любого нового материала определяется множеством взаимозависимых технологических параметров. Даже незначительные изменения температуры, например, скорости ее нарастания или продолжительности выдержки при максимальном значении, давления, скорости нагрева или концентрации реагентов могут привести к получению совершенно разных фаз или образованию нежелательных примесей. Традиционная методика оптимизации, основанная на поочередном изменении одного параметра, является крайне неэффективной и долгой.

Для решения этой задачи применяется продвинутая методология, включающая обучение с подкреплением и Байесовскую оптимизацию. Байесовская оптимизация — это статистический метод, который строит вероятностную модель зависимости выходного свойства материала от входных параметров синтеза. Алгоритм, взаимодействуя с данными, полученными после каждого лабораторного эксперимента, последовательно предлагает новые условия для тестирования, основываясь на своей текущей модели и стремясь максимизировать ожидаемое улучшение. Этот подход позволяет быстрее сходиться к идеальному протоколу синтеза с минимальным числом дорогостоящих итераций. Таким образом, искусственный интеллект выступает в роли "умного" планировщика экспериментов, значительно повышая выход целевого продукта требуемой чистоты и, как следствие, снижая его себестоимость за счет сокращения расхода реагентов и времени цикла. Этот рациональный подход позволяет находить неинтуитивные, но оптимальные комбинации параметров, которые были бы пропущены в ходе ручного перебора.

Автоматизированные Исследовательские Платформы: Технология искусственного интеллекта является фундаментальной движущей силой развития автоматизированных, самодвижущихся лабораторий — полностью

роботизированных и интегрированных комплексов. Эти платформы представляют собой киберфизические системы, которые способны самостоятельно планировать, выполнять, анализировать и интерпретировать результаты сложных экспериментов без постоянного вмешательства человека.

Внутри такой лаборатории роботизированные манипуляторы выполняют физический синтез, смешивание и нагрев реагентов, а программное обеспечение на основе искусственного интеллекта непрерывно анализирует данные, поступающие с подключенных аналитических приборов. К этим приборам относятся системы спектроскопии и дифракции рентгеновских лучей, которые в реальном времени предоставляют информацию о фазовом составе, чистоте и структуре синтезируемого материала. Если полученный результат, например, кристаллическая структура или электрическая проводимость, не соответствует целевым свойствам, искусственный интеллект не просто останавливает процесс, но и автономно корректирует следующий эксперимент или выбирает совершенно новую гипотезу для проверки. Эта лаборатория, работая непрерывно 24 часа в сутки, 7 дней в неделю, способна исследовать тысячи уникальных условий синтеза, что в результате позволяет сократить цикл разработки материала с традиционных нескольких лет до нескольких месяцев, многократно ускоряя инновационный процесс в материаловедении.

Вызовы и Этические Аспекты Внедрения

Несмотря на очевидные, прорывные преимущества, широкое и надежное внедрение технологии искусственного интеллекта в материаловедении сталкивается с рядом существенных методологических, технических и потенциальных этических вызовов. Успешный переход к парадигме рационального дизайна требует не только разработки более сложных алгоритмов, но и решения фундаментальных проблем, связанных с данными и интерпретацией моделей.

Качество и Доступность Данных: Фундаментальной основой и одновременно критическим ограничением для эффективности любого алгоритма машинного обучения является качество и объем обучающих данных. Исторически сложившаяся практика научных исследований привела к тому, что данные о свойствах материалов, рассеянные по множеству публикаций, патентов и лабораторных журналов, часто являются фрагментированными, нестандартизированными и, что особенно опасно, могут содержать экспериментальные ошибки или неполные метаданные. Нестандартизированные данные, например, измерения теплопроводности, выполненные в разных условиях температуры и давления без указания методики, могут внести существенные искажения в обучающие модели. Для раскрытия всего потенциала искусственного интеллекта и его способности к обобщению необходимо создание крупных, высококачественных и стандартизированных открытых баз данных, которые содержат структурированную информацию о химическом составе, методах синтеза, кристаллической структуре и измеренных функциональных

свойствах. Усилия по созданию таких "материаловедческих геномов" и внедрение общих протоколов для регистрации экспериментальных результатов являются ключевым требованием для дальнейшего прогресса. Без надежной и полной информации любая модель искусственного интеллекта будет работать некорректно, что может привести к ложным прогнозам и потере ресурсов в лаборатории. Доступность таких данных также поднимает этический вопрос о равенстве исследовательских возможностей между крупными корпорациями и малыми научными группами.

Проблема Интерпретируемости: Как и в других сложных научных областях, модели глубокого обучения, особенно многослойные нейронные сети, часто функционируют как "черный ящик", выдавая высокоточный прогноз, но не предоставляя четкого и понятного объяснения того, как этот результат был получен. В фундаментальном материаловедении, где важна не только предсказательная сила, но и понимание лежащих в основе фундаментальных физических или химических механизмов, эта непрозрачность является серьезным методологическим барьером. Ученым необходимо знать, какие именно структурные мотивы, химические факторы или электронные конфигурации являются наиболее критичными для того или иного свойства, чтобы на основе этих знаний создавать новые физические теории и принципы дизайна. Отсутствие интерпретируемости может сдерживать научный прогресс и вызывать недоверие к результатам искусственного интеллекта. Поэтому необходима разработка методов объяснимого искусственного интеллекта, которые позволят визуализировать и количественно оценить вклад каждого входного параметра или узла в принятие окончательного решения, переводя прогноз из математической абстракции в понятную физическую концепцию.

Этические Аспекты и Интеллектуальная Собственность: Внедрение автономных систем искусственного интеллекта в процесс открытия материалов поднимает сложный этический и правовой вопрос об интеллектуальной собственности. Если новый, прорывной материал был спроектирован и оптимизирован полностью автономной лабораторией, управляемой искусственным интеллектом, то кому принадлежит патент? Принадлежит ли он разработчикам алгоритма, владельцам данных или операторам лаборатории? Формулирование четких правовых норм в отношении "изобретений, созданных искусственным интеллектом" является неотложной задачей. Кроме того, существует этическая ответственность за потенциально опасные материалы. Если искусственный интеллект, стремясь к экстремальным свойствам, генерирует материал, который может быть использован для нежелательных целей, например, мощную взрывчатку или токсичное соединение, необходим строгий контроль и этические рамки для ограничения области его поисковой деятельности.

Заключение

Технология искусственного интеллекта, интегрированная в процесс материаловедения, является критически важным инструментом для решения глобальных технологических вызовов. Использование машинного обучения для виртуального скрининга и генеративного дизайна позволяет прогнозировать свойства и предлагать новые, неинтуитивные соединения. В сочетании с автоматизированными лабораториями и оптимизацией синтеза на основе обучения с подкреплением, искусственный интеллект сокращает время вывода нового материала на рынок с десятилетий до нескольких лет. Этот подход переводит материаловедение из эмпирической науки в науку рационального, высокопроизводительного проектирования. Дальнейшее развитие технологии искусственного интеллекта в этой области, подкрепленное стандартизацией данных, обещает революционные прорывы в электронике, энергетике и медицине.

Литература

1. Jain, A. et al. *A high-throughput computational framework for designing new solid-state materials*. Nature Materials, 2013.
2. Butler, K. T. et al. *Machine learning for materials science: recent progress and emerging applications*. Chemical Society Reviews, 2018.
3. Zunger, A. *Inverse materials design*. Nature Reviews Materials, 2016.
4. Himanen, L. et al. *Dscribe: library for machine learning in materials science*. Computational Materials Science, 2020.
5. Kalidindi, S. R. *Materials knowledge systems: a new frontier in materials science and engineering*. Journal of the Mechanical Behavior of Materials, 2015.
6. Воробьев, А. С., Павлова, И. К. *Применение машинного обучения в физике твердого тела*. Журнал технической физики, 2023.
7. Киреев, Д. М., Соколов, В. Г. *Технологии искусственного интеллекта для оптимизации синтеза наноматериалов*. Нанотехнологии и наноматериалы, 2024.