

هوش، ماشین، مهندسی؛

مهندسی شیمی در عصر یادگیری ماشین شماره ۳۰ - خرداد ۱۴۰۴



هوش، ماشین، مهندسی شیمی

باعث افتخار است که یک شماره دیگر از نشریه «میم» را با همراهی شما عزیزان منتشر می‌کنیم. در سال‌های اخیر، «هوش مصنوعی» صرفاً یک واژه علمی نیست؛ بلکه به بخشی جدانشدنی از زندگی روزمره و آینده شغلی ما تبدیل شده است. ورود این فناوری به عرصه‌های مهندسی، به‌ویژه مهندسی شیمی، آغازگر فصل جدیدی از تحلیل، طراحی و بهینه‌سازی فرآیندهاست؛ فصلی که در آن، داده‌ها و الگوریتم‌ها در کنار تجربه و تخصص انسانی، مسیری نو برای حل مسائل پیچیده می‌گشایند.

در این شماره از نشریه «میم» تلاش کردیم نگاهی کاربردی به نقش هوش مصنوعی در مهندسی شیمی داشته باشیم؛ از بررسی تاریخچه و زمینه‌های فعالیت مهندسان در این حوزه تا معرفی نرم‌افزارها و الگوریتم‌های پیشرفته. همچنین به کاربردهای یادگیری ماشین در مدل‌سازی و کنترل فرآیند پرداختیم.

شکل‌گیری این شماره، بی‌تردید بدون همراهی، پشتکار و همدلی اعضای پرتلاش تحریریه نشریه «میم» ممکن نبود. هر صفحه، بازتابی از دقت، خلاقیت و تلاش بی‌وقفه آنهاست؛ قدردان تک‌تک‌شان هستیم.

امیدواریم مطالعه این شماره بتواند زمینه‌ساز نگاهی نو به مهندسی شیمی در عصر فناوری‌های نوین باشد؛ و تلنگری باشد برای آن‌که در کنار دانش فنی، خلاقیت، نوآوری و بهره‌گیری از ابزارهای هوشمند را نیز جدی بگیریم.

در این روزهای پرتنش که کشورمان با چالش‌ها و تحولات مهمی روبروست، بیش از هر زمان دیگری حفظ اتحاد، همدلی و امید ضرورت یافته است. امید است که بتوانیم از این شرایط سخت عبور کنیم و آینده‌ای روشن‌تر و پایدار برای کشور عزیزمان بسازیم. به امید آینده‌ای روشن‌تر.

فائزه اسکندری اهدا

سردبیر نشریه علمی‌ترویجی «میم»

اعضای نشریه و همکاران



گرافیکست و صفحه آرا
محمدحسین روح بخش



سر دبیر
فائزة اسکندری اهدا



مدیر مسئول
محمد رضا مرتاضی

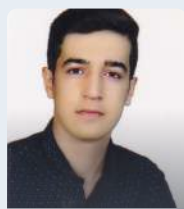
بخش مقالات



دبیر ویراستاری
صبا شاکر



هیئت تحریریه
میلاد محمدی



هیئت تحریریه
علی طاهری استاد



هیئت تحریریه
فاطمه علائی فر



دبیر مقالات
علی غزی

بخش اخبار



هیئت تحریریه
فرشته شیخ الاسلام زاده



هیئت تحریریه
صنم نیک خواه



هیئت تحریریه
سپهر قره چاهی



هیئت تحریریه
یگانه صادق پور

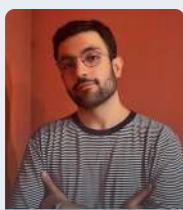


دبیر اخبار
حسام الدین اعتصامی

بخش معرفی



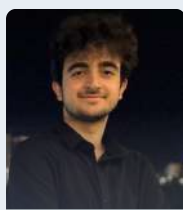
هیئت تحریریه
علی مرتضوی



هیئت تحریریه
علی چراغ نیا



هیئت تحریریه
فاطمه خسرو بیگی



هیئت تحریریه
فرحان فارسیدجانی



دبیر معرفی
مریم سوارانی

بازخوانی از گذشته:

خاطرات بردیا ایراجیان (سردبیر پیشین نشریه میم)



پس از چند سال دوری از نوشتن، آن هم برای نشریه‌ی میم که زمانی سردبیرش بودم، پیدا کردن موضوعی که هم درخور فضای نشریه باشد و هم برای بیشتر مخاطبان جذابیت داشته باشد، آسان نبود. تصمیم گرفتم بخشی از خاطراتم را در این نشریه به شکل یادداشتی بازگو کنم.

شروعی دوباره:

پس از ثبت‌نام در انتخابات انجمن علمی و اعلام نتایج، فعالیت خود را از آبان ۱۳۹۹ به عنوان سردبیر نشریه‌ی میم آغاز کردم. این نشریه تا آن زمان با تلاش سردبیران پیشین زنده مانده بود، اما برای انتشار منظم و هدفمند به سازمان‌دهی تازه‌ای نیاز داشت. با همراهی علی گلستانی (دبیر وقت انجمن)، نشریات دانشگاهی مشابه را بررسی کردیم. متأسفانه به دلیل شرایط کرونایی، دسترسی به نسخه‌های فیزیکی یا گفت‌وگو با فعالان نشریات دیگر ممکن نبود. در نهایت، با تکیه بر نسخه‌های موجود، چارچوبی برای موضوعات نشریه طراحی کردیم.

مطالب در چند بخش دسته‌بندی شدند: تازه‌ها، نانو، محیط زیست، معرفی‌ها (کتاب، شخصیت‌ها و نرم‌افزار)، مقالات علمی، و گفت‌وگوها و سایر موارد. به عنوان دانشجوی مهندسی پلیمر، تلاش داشتم تا در کنار موضوعات مرتبط با مهندسی شیمی، به مطالب تخصصی در حوزه‌ی پلیمر نیز هویت ببخشم و در هر شماره به هر دو زمینه بپردازم.

روند دریافت مطالب:

در ابتدا برای هر بخش، مسئولی تعیین شد تا نویسندگان مطالب خود را به او ارسال کنند. سپس با راهنمایی و ویرایش مطالب، نسخه‌ی نهایی به دست من می‌رسید. با این حال، این سیستم چندان کارآمد نبود؛ چرا که با وجود زحمات داوطلبانه، در بسیاری از بخش‌ها نویسندگانی فعال وجود نداشت و گاه مطالب برخی بخش‌ها ناقص یا خالی می‌ماند. در نهایت تصمیم گرفتیم برای هر شماره با انتشار فراخوان، مستقیماً با نویسندگان در ارتباط باشیم.

یکی از چالش‌های اصلی، گردآوری مطالب متنوع تا موعد مقرر بود. فاصله‌ی دوماهه‌ی انتشار، نیاز به حضور پیوسته‌ی نویسندگان داشت، که در تابستان‌ها این امر دشوارتر می‌شد.

راه اندازی سایت:

پس از ثبت رسمی نشریه میم، برای دریافت دامنه‌ی سایت از سامانه‌ی نشریات دانشگاه تهران اقدام کردیم. پیگیری امور اداری بر عهده‌ی علی و امیر (نایب دبیر دوره) بود. برای انتخاب نام دامنه، گزینه‌های مختلفی را بررسی کردیم و در نهایت، با ترکیب دو حرف اول عبارت (sj) Scientific Journal با mim به آدرس mimsj رسیدیم که هم کوتاه بود و هم نشانگر هویت علمی نشریه.

گام بعدی، گردآوری نسخه‌های پیشین نشریه بود. به دلیل نبود ساختار منسجم برای بایگانی، این کار دشوار بود. با کمک آروین (سر دبیر پیش از من) و علی، توانستیم بخش بزرگی از نسخه‌های گذشته را جمع‌آوری کنیم، هرچند برخی شماره‌ها دیگر در دسترس نبودند.

نیم فاصله، بلای جان ویراستاران و صفحه آراها:

یکی از مشکلات رایج با مطالب ارسالی، رعایت نشدن نیم فاصله و علائم نگارشی بود. پس از تقسیم مطالب میان اعضای تیم ویرایش، کار اصلاح آغاز می‌شد و سپس به مرحله‌ی صفحه‌آرایی می‌رسیدیم. صفحه‌آرایی از چالش برانگیزترین مراحل بود؛ چرا که این کار نیز داوطلبانه انجام می‌شد و همیشه امکان همکاری با صفحه‌آرای حرفه‌ای وجود نداشت. برخی شماره‌ها را با قالب‌های آماده اینترنتی صفحه‌آرایی می‌کردیم.

گاه مطالب پس از قالب‌بندی، خوانایی خود را از دست می‌دادند و نیاز به حروف‌چینی مجدد داشتند. از جمله مشکلات، بهم‌ریختگی نیم‌فاصله‌ها و جای‌گیری نامناسب تصاویر بود. استفاده از حروف‌چین حرفه‌ای‌تری مانند LaTeX به جای Word هم در زبان فارسی آنقدرها رایج نیست، هر چند می‌تواند بسیاری از مشکلات را حل کند.

انتشار:

در نهایت، با همکاری نویسندگان، ویراستاران، گرافیست و اعضای انجمن علمی، توانستیم شش شماره از نشریه میم و یک ویژه‌نامه‌ی اختصاصی برای دانشجویان ورودی جدید (که بیشتر با مشارکت دانشجویان سال‌های پایین‌تر تهیه شد) منتشر کنیم. هر شماره در وبسایت و کانال انجمن علمی منتشر شد.



«Like any good catalyst, this page does nothing — but makes everything flow better. »

فهرست



اخبار

۱

۹ هوش مصنوعی در آستانه تحول مهندسی شیمی

۱۳ الگوریتم‌های هوش مصنوعی در خدمت مهندسی داروسازی

۱۶ انقلاب هوش مصنوعی در بهینه‌سازی فرآیندهای شیمیایی

۱۹ مهندسان شیمی زیر تیغ هوش مصنوعی!



معرفی‌ها

۲

۲۲ هوش مصنوعی در مهندسی شیمی از کجا تا کجا؟

۲۶ زمینه‌های فعالیت مهندسان شیمی در هوش مصنوعی

۲۹ معرفی مشاهیر ایران و جهان

۳۲ معرفی نرم‌افزارهای کاربردی



مقالات

۳

۳۸ کاربردهای هوش مصنوعی در طراحی کاتالیست

۴۴ پیش‌بینی دمای انتقال شیشه‌ای به وسیله یادگیری ماشین

۴۹ مدیریت انرژی در ریزشبکه‌ها

۵۲ کاربرد هوش مصنوعی در جذب و ذخیره‌سازی کربن



هوش مصنوعی در آستانه تحول مهندسی شیمی

طراحی مواد، کشف دارو و بهینه‌سازی صنعتی ایجاد کرده و نیاز به آزمون و خطا را کاهش می‌دهد.

گذار از آزمون و خطا به عصر شبیه‌سازی

هوشمند

در گذشته، مهندسی شیمی و طراحی سازه‌ها متکی بر آزمون و خطا و تجربه بود، مانند پل‌سازی در دوران باستان که هر طرحی ریسک فروپاشی داشت. امروزه، ابزارهای شبیه‌سازی مدرن، دقت بی‌سابقه‌ای در مدل‌سازی فرایندها ایجاد کرده‌اند. هوش مصنوعی و شبیه‌سازی مولکولی، تحولی مشابه دینامیک سیالات محاسباتی (CFD)^۱ و تحلیل المان محدود (FEA)^۲ در مهندسی شیمی ایجاد کرده‌اند. این فناوری‌ها مهندسان را حذف نمی‌کنند، بلکه توانایی‌هایشان را افزایش می‌دهند. شرکت‌هایی که از این فناوری‌ها استفاده کنند، در سرعت توسعه، کاهش هزینه‌ها، بهینه‌سازی محصولات و کاهش اثرات زیست‌محیطی پیش‌تاز خواهند بود.

مهندسی شیمی در آستانه‌ی تحولی بی‌سابقه قرار دارد؛ تحولی که هوش مصنوعی موتور محرک آن خواهد بود. پیشرفت‌های اخیر در مدل‌سازی هوش مصنوعی، نه تنها سرعت شبیه‌سازی‌های شیمیایی را به طرز چشمگیری افزایش داده، بلکه امکان پیش‌بینی دقیق رفتار مولکولی را نیز فراهم کرده است. فرایندهایی که تا چند سال پیش نیازمند ماه‌ها پردازش بر روی ابرکامپیوترها بودند، اکنون در عرض یک شب و با یک کامپیوتر معمولی انجام می‌شوند. مهندسی شیمی از یک فرایند مبتنی بر آزمون و خطا، به عصری از پیش‌بینی و طراحی دقیق در حال گذر است. همان‌طور که طراحی دیجیتال، معماری و صنعت تولید را متحول کرد، امروز شبیه‌سازی‌های مولکولی پیشرفته که توسط هوش مصنوعی و شبکه‌های عصبی قدرتمند امکان‌پذیر شده‌اند، شبکه‌های عصبی بادقت کوانتومی و سرعت بالا، رفتار مولکولی را پیش‌بینی می‌کنند. این فناوری انقلابی در



شکل ۱- هوش مصنوعی در مسیر متحول کردن مهندسی شیمی: از تحلیل داده‌های مولکولی تا طراحی فرایندهای نوین.

با این حال، چالش‌هایی مانند کیفیت داده‌ها، اعتبارسنجی مدل‌ها و کمبود مهارت‌ها وجود دارد. در آینده، طراحی فرایندهای شیمیایی بدون شبیه‌سازی هوشمند، غیرقابل‌تصور خواهد شد.

تجربه پژوهشگران:

تیم دوینان، پژوهشگر ارشد، ذکر می‌کند مدل‌سازی سیستم‌های پیچیده مانند الکترولیت باتری‌ها که قبلاً ماه‌ها زمان می‌برد، اکنون در چند ساعت انجام می‌شود. این فناوری نه تنها سرعت پژوهش را افزایش داده، بلکه ماهیت تحقیق و توسعه را دگرگون کرده است. امروزه، مهندسان می‌توانند هزاران طرح مولکولی را پیش از آزمایش فیزیکی تحلیل کنند. به عنوان مثال، طراحی کاتالیست‌ها که قبلاً نیازمند سنتز و آزمایش‌های گسترده بود، اکنون با شبیه‌سازی پیش‌بینی و بهینه‌سازی می‌شود. این تحول، پرسش‌های بنیادین در شیمی را از حدس و گمان به محاسبات دقیق تبدیل کرده و منجر به توسعه سریع‌تر محصولات، کاهش هزینه‌ها و درک عمیق‌تر از فرایندهای شیمیایی شده است.

درک عمیق‌تر از فرایندهای مولکولی

درک چگونگی تحول شبیه‌سازی مولکولی توسط هوش مصنوعی نیازمند آشنایی با مفهومی کلیدی به نام پتانسیل‌های شبکه عصبی^۳ است. همان‌گونه که دانشمندان در علم شیمی ابتدا اصول پایه را می‌آموزند و به تدریج توانایی پیش‌بینی رفتار مولکولی را توسعه می‌دهند، شبکه‌های عصبی نیز با تحلیل داده‌های کوانتومی، الگوهای پیچیده مولکولی را شناسایی می‌کنند. این سیستم‌ها قادرند میلیون‌ها نمونه را هم‌زمان پردازش کرده و هزاران متغیر مؤثر را در روابط غیرخطی پیچیده در نظر بگیرند. شبکه‌های عصبی

توانایی درک الگوهای پنهان در داده‌های کوانتومی را دارند، به این معنا که به جای تدوین قوانین ریاضی پیچیده، می‌توان از این مدل‌ها برای شناسایی روابط میان اتم‌ها و مولکول‌ها استفاده کرد. این فناوری، درکی جامع‌تر از محیط مولکولی ارائه می‌دهد و امکان بررسی تعاملات پیچیده را که پیش‌تر در مدل‌های کلاسیک قابل‌شناسایی نبودند، فراهم می‌کند. برای مثال، در شبیه‌سازی محلول‌های الکترولیتی، مدل‌های سنتی قادر به پیش‌بینی تأثیر یون‌ها بر رفتار مولکول‌های آب و در نتیجه عملکرد کلی باتری نبودند. اما شبکه‌های عصبی می‌توانند این تعاملات پیچیده را با دقت بالا مدل‌سازی کنند و دیدگاهی عمیق‌تر از فرایندهای شیمیایی ارائه دهند.

میکروسکوپ محاسباتی: دیدی روشن‌تر از

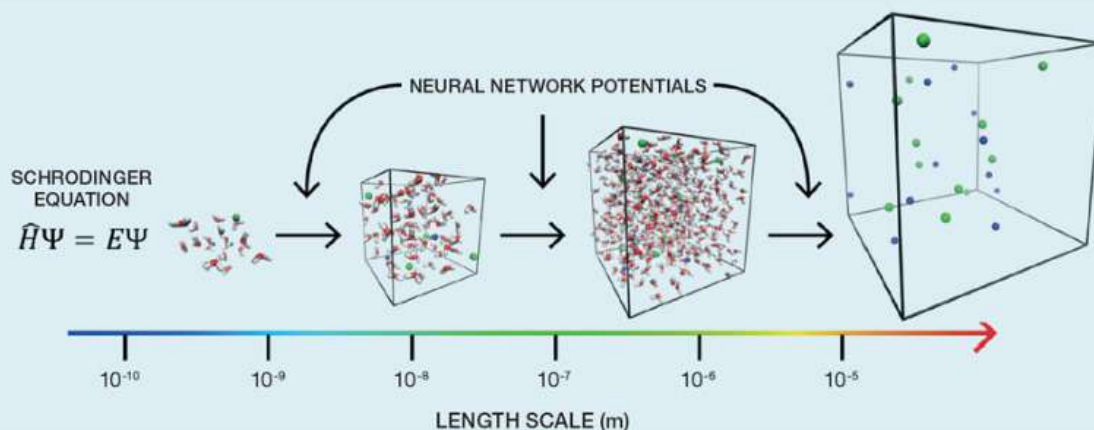
دنای مولکولی

یکی از تأثیرات کلیدی این فناوری، فراهم‌شدن ابزاری به نام ((میکروسکوپ محاسباتی)) است که امکان مشاهده مستقیم فرایندهای مولکولی را با دقتی بی‌سابقه فراهم می‌کند. تاکنون، درک این فرایندها به داده‌های غیرمستقیم آزمایشگاهی مانند طیف‌سنجی و فشار بخار متکی بود. اما اکنون، با استفاده از هوش مصنوعی، می‌توان لحظات بحرانی واکنش‌های شیمیایی (مثل شکستن و تشکیل پیوندها)، حرکت یون‌ها، واکنش‌های شیمیایی، حرکت یون‌ها در کانال‌های زیستی و نحوه تعامل کاتالیست‌ها با بسترهایشان را شبیه‌سازی کرد. این ابزار به مهندسان شیمی این امکان را می‌دهد که فرایندهای پیچیده‌تری را در مقیاس‌های زمانی و مکانی طولانی‌تری شبیه‌سازی کنند و بر مبنای آن‌ها تصمیمات هوشمندانه‌تری بگیرند.

را فراهم کرده‌اند. این روش با تمرکز بر بخش‌های کلیدی سیستم، دو مزیت اساسی ارائه می‌دهد:

(۱) بررسی فرایندها در بازه‌های زمانی طولانی‌تر

از مقیاس مولکولی تا فرایندهای صنعتی پیشرفت‌های اخیر در شبکه‌های عصبی، امکان شبیه‌سازی هم‌زمان در سطوح مولکولی و ماکروسکوپی (شبیه‌سازی درشت‌دانه)^۵



شکل ۲- دیاگرامی که نشان می‌دهد چگونه یک پتانسیل شبکه عصبی مقیاس‌ها را به هم متصل می‌کند و امکان دسترسی به مقیاس‌های بسیار بزرگ‌تر در شبیه‌سازی‌های مولکولی را تنها بر اساس مکانیک کوانتومی فراهم می‌سازد.

مواد، مسیر توسعه فناوری‌های نوین را تسهیل می‌کنند. شبکه‌های عصبی با محاسبه دقیق ضرایب فعالیت و نفوذ، مدل‌سازی فرایندهای صنعتی را بهبود می‌بخشند و نیاز به آزمایش‌های پرهزینه را کاهش می‌دهند. پیشرفت‌های اخیر در سخت‌افزار و معماری مدل‌ها، مانند مدل اورب^۶ شرکت اوربیتال، دقت و سرعت پردازش ترکیبات شیمیایی را به طور انقلابی افزایش داده است. شرکت‌های بزرگ و استارت‌آپ‌ها در این رقابت پیش‌تازند.

ادغام با مدل‌های زبانی بزرگ^۷

ترکیب این ابزارها با مدل‌های زبانی بزرگ (مانند چت‌بات‌ها) بسیار قدرتمند است، زیرا می‌توانند منبعی از اطلاعات معتبر حتی برای سیستم‌های جدید فراهم کنند. اوربیتال در حال توسعه ابزارهایی است که می‌توانند فرایند تنظیم، اجرا و تحلیل شبیه‌سازی‌ها را خودکار کنند.

(۲) کاهش قابل توجه هزینه‌های محاسباتی این فناوری در طراحی دارو، بهینه‌سازی مواد و شبیه‌سازی فرایندهای شیمیایی کاربرد دارد. به‌ویژه در صنایع نانوساختار و فرایندهای بلورش، امکان مدل‌سازی از مقیاس اتمی تا صنعتی را فراهم کرده است. شبکه‌های عصبی با ارائه پیش‌بینی‌های دقیق از رفتار



شکل ۳- تصویری مفهومی که با استفاده از هوش مصنوعی ساخته شده است، نقش پیشرفته هوش مصنوعی در مهندسی شیمی را به نمایش می‌گذارد.

تبدیل شدن به یک علم محاسباتی است. آنهایی که این تغییر را بپذیرند، آینده را شکل خواهند داد. آنهایی که مقاومت کنند، فقط در دوران بازنشستگی درباره آن خواهند خواند.

یگانه صادقپور

¹ Computational Fluid Dynamics

² Finite Element Analysis

³ Neural Network Potentials

⁴ Computational microscope

⁵ Computational microscope

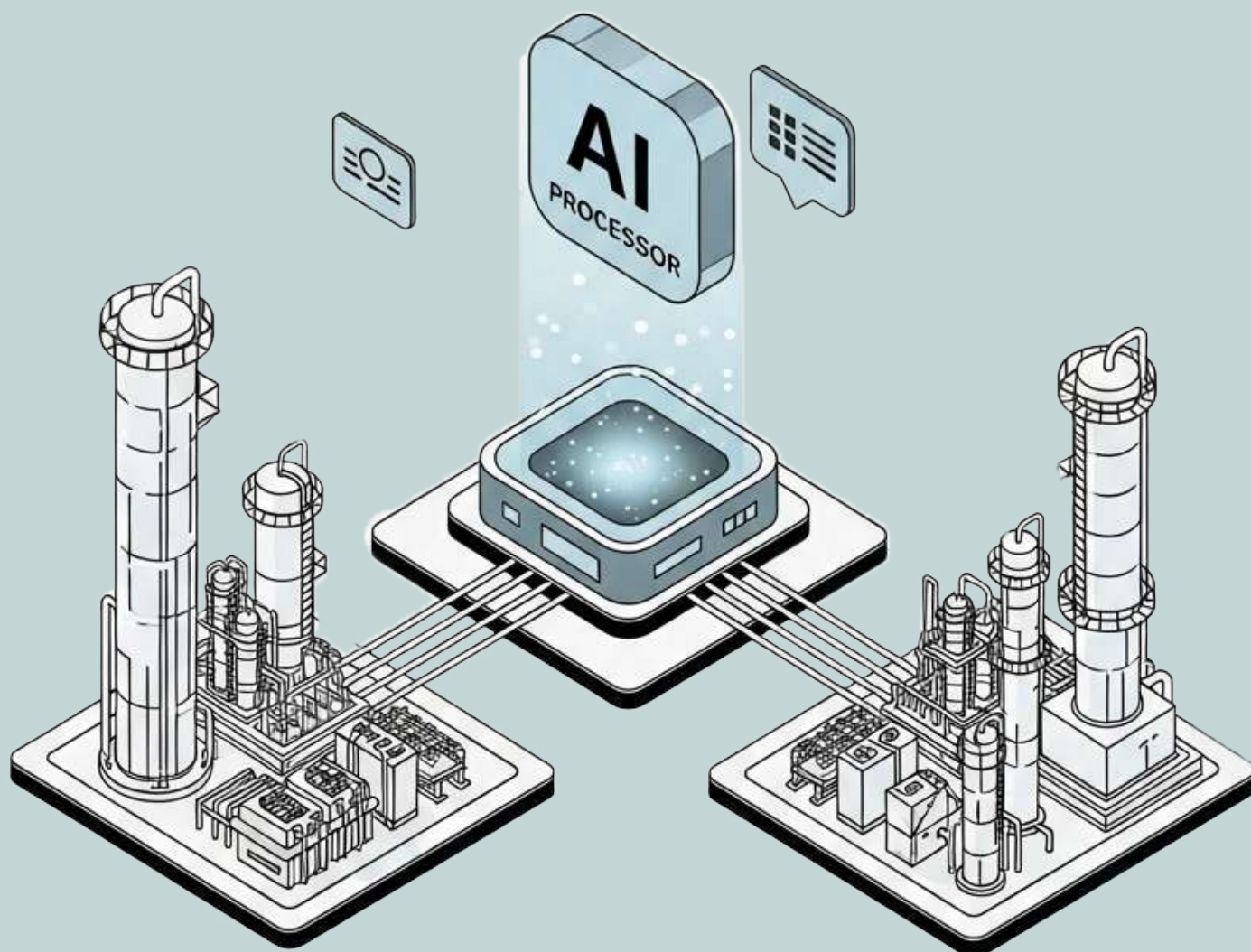
⁶ Orb

⁷ Large Language Models

مهندسان شیمی اکنون چه باید بکنند؟

ما اکنون به عنوان مهندسان شیمی در این عصر می‌بایست سواد هوش مصنوعی خود را افزایش دهیم، با پروژه‌های کوچک شروع کنیم و همکاری‌های بین‌رشته‌ای ایجاد کرده و برنامه‌های آموزشی را به‌روزتر را دنبال کنیم. آینده مشخص است: مهندسی شیمی در حال

برای دسترسی به منابع، بارکد را اسکن کنید.



الگوریتم‌های هوش مصنوعی در خدمت مهندسی داروسازی

آنتی‌بیوتیک‌های جدید را تسریع و گسترش دهد.

کشف دارو

در چند دهه اخیر، بسیاری از باکتری‌های بیماری‌زا در برابر آنتی‌بیوتیک‌های موجود مقاوم شده‌اند، در حالی که تعداد بسیار کمی آنتی‌بیوتیک جدید توسعه یافته است. چند سال پیش، کالینز، استوکس و رجینا بارزیلای (استاد MIT) تصمیم گرفتند تا با کمک یادگیری ماشینی، نوعی از هوش مصنوعی که می‌تواند الگوهای موجود در حجم وسیعی از داده‌ها را شناسایی کند، برای مقابله با این مشکل استفاده کنند.

کالینز و بارزیلای، که به طور مشترک مرکز Abdul Latif Jameel Clinic for Machine Learning in Health در MIT را مدیریت می‌کنند، امیدوار هستند که این روش بتواند آنتی‌بیوتیک‌های جدیدی را که ساختار شیمیایی آنها با داروهای موجود متفاوت است، شناسایی کند.

در اولین آزمایش، پژوهشگران یک الگوریتم یادگیری ماشینی را برای شناسایی ساختارهای شیمیایی که می‌توانند رشد *E. coli*^۱ را متوقف کنند، آموزش دادند. این الگوریتم از میان بیش از ۱۰۰ میلیون ترکیب، یک مولکول را شناسایی کرد که پژوهشگران آن را هالیسین^۲ (برگرفته از سیستم هوش مصنوعی داستانی در فیلم ادیسه فضایی) نامیدند. آنها نشان دادند که این مولکول نه تنها قادر به از بین بردن *E. coli* است، بلکه می‌تواند چندین گونه دیگر از باکتری‌های مقاوم را نیز نابود کند. استوکس می‌گوید: «پس از انتشار آن مقاله، که نشان داد این روش‌های یادگیری ماشینی

الگوریتم یادگیری ماشین، ترکیبی را شناسایی کرده است که قادر به از بین بردن *Acinetobacter baumannii*، باکتری‌ای است که در بسیاری از محیط‌های بیمارستانی وجود دارد.

با استفاده از یک الگوریتم هوش مصنوعی، پژوهشگران دانشگاه‌های MIT و مک‌مستر یک آنتی‌بیوتیک جدید شناسایی کرده‌اند که می‌تواند نوعی باکتری را از بین ببرد که عامل بسیاری از عفونت‌های مقاوم به دارو است. در صورت توسعه برای استفاده در بیماران، این دارو می‌تواند به مقابله با *Acinobacter* کمک کند؛ باکتری‌ای که اغلب در بیمارستان‌ها یافت می‌شود و می‌تواند باعث ذات‌الریه، مننژیت و سایر عفونت‌های جدی شود. این میکروب همچنین یکی از عوامل اصلی عفونت در سربازان زخمی است.

جاناتان استوکس، استادیار بیوشیمی و علوم زیست‌پزشکی در دانشگاه مک‌مستر و یکی از پژوهشگران این مطالعه، می‌گوید: «*Acinobacter* می‌تواند برای مدت طولانی روی دستگاه‌های در بیمارستان و تجهیزات باقی بماند و ژن‌های مقاوم به آنتی‌بیوتیک را از محیط خود جذب کند. در حال حاضر، یافتن سویه‌هایی از این باکتری که در برابر تقریباً همه آنتی‌بیوتیک‌ها مقاوم هستند، امری رایج است.»

پژوهشگران با استفاده از یک مدل یادگیری ماشینی، از میان مجموعه‌ای نزدیک به ۷۰۰۰ ترکیب شیمیایی بالقوه، این آنتی‌بیوتیک جدید را شناسایی کرده‌اند. این یافته بیشتر نشان می‌دهد که هوش مصنوعی می‌تواند به طور قابل‌توجهی جستجو برای

برای کشف آنتی‌بیوتیک‌های پیچیده کارآمد هستند، توجه خود را به دشمن شماره یک عفونت‌های باکتری‌ای مقاوم، یعنی *Acinetobacter* معطوف کردیم. «

برای تهیه داده‌های آموزشی مدل محاسباتی خود، پژوهشگران ابتدا حدود ۷۵۰۰ ترکیب شیمیایی مختلف را روی *Acinetobacter* در یک محیط آزمایشگاهی آزمایش کردند تا ببینند کدام یک از آنها قادر به مهار رشد این میکروب هستند. سپس ساختار هر مولکول را به مدل دادند و مشخص کردند که آیا این ساختار توانایی مهار رشد باکتری را دارد یا نه. این روش به الگوریتم اجازه داد تا ویژگی‌های شیمیایی مرتبط با مهار رشد باکتری را بیاموزد.

پس از آموزش مدل، پژوهشگران از آن برای تجزیه و تحلیل مجموعه‌ای از ۶۶۸۰ ترکیب شیمیایی که قبلاً مورد بررسی قرار نگرفته بودند، استفاده کردند. این ترکیبات از مرکز Hub Repurposing Drug در مؤسسه Broad جمع‌آوری شده بودند. این فرآیند، که کمتر از دو ساعت طول کشید، چندصد ترکیب برتر را شناسایی کرد. از میان آنها، پژوهشگران ۲۴۰ ترکیب را برای آزمایش‌های تجربی در آزمایشگاه انتخاب کردند و تمرکز آنها بر ترکیباتی بود که ساختاری متفاوت از آنتی‌بیوتیک‌های موجود یا مولکول‌های موجود در داده‌های آموزشی داشتند. این آزمایش‌ها به شناسایی ۹ آنتی‌بیوتیک منجر شد که یکی از آنها بسیار قوی بود.



می‌شود. به‌طور خاص، به نظر می‌رسد که این دارو، یکی از پروتئین‌های دخیل در این فرایند را مهار می‌کند.

همه باکتری‌های گرم‌منفی این آنزیم را تولید می‌کنند، بنابراین محققان از این که abaucin تنها *Acinetobacter* را هدف قرار می‌دهد، شگفت‌زده شدند. آنها حدس می‌زنند که تفاوت‌های جزئی در نحوه عملکرد این باکتری در حمل‌ونقل لیپوپروتئین ممکن است دلیل این انتخاب‌پذیری باشد.

در حال حاضر، آزمایشگاه استوکس در همکاری با محققان دیگر در دانشگاه مک‌مستر در تلاش است تا ویژگی‌های دارویی این ترکیب را بهینه‌سازی کند، به این امید که بتوان آن را در نهایت برای بیماران توسعه داد.

پژوهشگران همچنین قصد دارند از روش مدل‌سازی خود برای شناسایی آنتی‌بیوتیک‌های بالقوه علیه سایر عفونت‌های مقاوم به دارو، از جمله عفونت‌های ناشی از *Pseudomonas aeruginosa* و *Staphylococcus aureus* استفاده کنند.

سپهر قره‌چاهی

این ترکیب، که در ابتدا به عنوان یک داروی بالقوه برای دیابت مورد بررسی قرار گرفته بود، در از بین بردن *Acinetobacter* بسیار مؤثر عمل کرد، اما بر سایر گونه‌های باکتری مانند *aeruginosa Pseudomonas*، *aureus* و *Enterobacteriaceae Staphylococcus* مقاوم به کاربایتم، تأثیری نداشت. این ویژگی که دارو به‌طور خاص فقط یک نوع باکتری را هدف قرار می‌دهد، در آنتی‌بیوتیک‌ها بسیار مطلوب است، زیرا خطر گسترش سریع مقاومت دارویی را کاهش می‌دهد.

مکانیسمی نوین

در مطالعات انجام‌شده روی موش‌ها، پژوهشگران نشان دادند که این دارو، که آن را abaucin نامیدند، می‌تواند عفونت‌های ناشی از *Acinetobacter* را درمان کند. همچنین، آزمایش‌های آزمایشگاهی نشان داد که این دارو بر طیف وسیعی از سویه‌های مقاوم این باکتری که از بیماران انسانی جدا شده بودند، اثرگذار است.

تحقیقات بیشتر نشان داد که این دارو با مختل کردن فرایندی به نام حمل‌ونقل لیپوپروتئین، که سلول‌ها برای انتقال پروتئین‌ها از داخل سلول به غشای بیرونی از آن استفاده می‌کنند، باعث از بین رفتن باکتری

¹ باکتری که به طور طبیعی در روده انسان و حیوانات زندگی می‌کند.

² Halicin

برای دسترسی به منابع، بارکد را اسکن کنید.



انقلاب هوش مصنوعی در بهینه‌سازی فرآیندهای شیمیایی

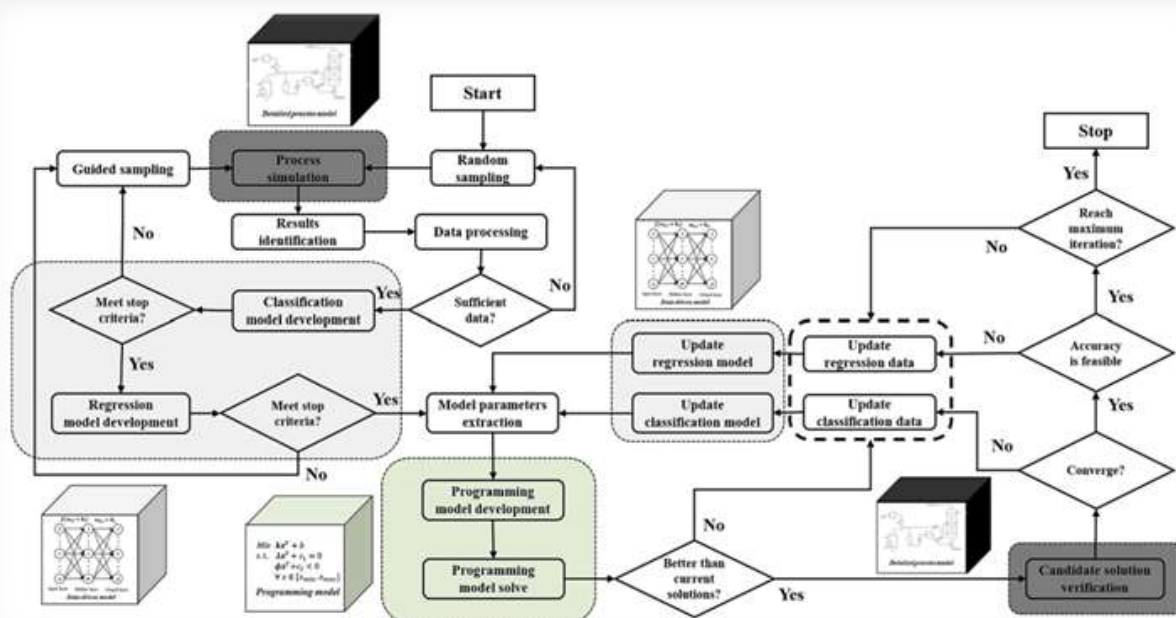
گرفته است. با این حال، بهینه‌سازی این سیستم‌های پیچیده - که اغلب با معادلات دیفرانسیل جزئی و معمولی کوپل شده حل می‌شوند - چالش‌های قابل توجهی ایجاد می‌کند. گرچه شبیه‌سازهای تجاری مانند Aspen Plus، gPROMS و HYSYS طراحی فرآیند را ساده‌تر کرده‌اند ولیکن ماهیت «جعبه سیاه» آن‌ها اثربخشی روش‌های بهینه‌سازی مبتنی بر مشتق را محدود می‌کند. برای غلبه بر این مشکل، یک روش جایگزین توسط این تیم تحقیقاتی ارائه شده که از استراتژی یادگیری در حین بهینه‌سازی پیروی می‌کند که به صورت یک چرخه‌ی خودکار عمل می‌کند. این روش سیستم عصبی مصنوعی ReLU-ANN و روش بهینه‌سازی خطی ترکیبی (MILP) را با یکدیگر ادغام می‌کند تا بهینه‌سازی عملیاتی کارآمد برای فرایندهای شیمیایی پیچیده ارائه کند. در ابتدا، داده‌ی اولیه از طریق شبیه‌سازی به منظور پیش‌تعلیم مدل‌های مبتنی بر ReLU-ANN (طبقه‌بندی و خطی‌سازی) تولید می‌شوند و هم‌زمان از روش بهینه‌سازی MILP به منظور بهینه‌سازی این مدل‌ها استفاده می‌شود. در این چرخه محدودیت‌های ضمنی ناشی از اصول اولیه، با استفاده از مدل‌های طبقه‌بندی جایگزین شده‌اند که نیاز به شبیه‌سازی‌های پرهزینه را کاهش می‌دهد به طوری که مدل‌های داده‌محور به صورت مکرر به‌روزرسانی می‌شوند.

محققان دانشگاه پلی‌تکنیک هنگ‌کنگ یک روش نوین و پیشرفته مبتنی بر هوش مصنوعی معرفی کرده‌اند که به‌طور چشمگیری کارایی و سرعت بهینه‌سازی فرآیندهای شیمیایی پیچیده را بهبود می‌بخشد. این روش جدید با ادغام شبکه‌های عصبی مصنوعی ReLU و روش بهینه‌سازی خطی عدد صحیح (MILP)، از روش‌های پیشین بهینه‌سازی فرایندها پیشی گرفته و محققان موفق شدند با بکارگیری این روش در فرایندهایی چون تقطیر استخراجی، چرخه‌های رانکین آلی و سنتز متانول، کارایی بهینه‌سازی را تا ۶۹.۲۸ درصد افزایش داده و زمان محاسبات را تا ۷۱.۷۱ درصد در مقایسه با روش‌های متداول مانند بهینه‌سازی همچون ازدحام ذرات (PSO)، الگوریتم‌های ژنتیک (GA) و جستجوی مستقیم مش تطبیقی (MADS) کاهش دهند چرا که این روش، به سیستم این امکان را می‌دهد تا راه‌حل‌های غیرعملی را در مراحل اولیه فرآیند به‌طور هوشمندانه شناسایی و از چرخه خارج کند و در نهایت تعداد شبیه‌سازی‌های پرهزینه و ناکارآمد را ۵۰ تا ۷۵ درصد کاهش دهد و نتایج قابل اعتماد و دقیق تری را در کمترین زمان ارائه می‌دهد.

مدل‌سازی و شبیه‌سازی عددی مبتنی بر مدل‌های ریاضی مدت‌هاست که به‌عنوان استاندارد طلایی برای توصیف فرآیندهای شیمیایی با دقت بی‌نظیر مورد استفاده قرار

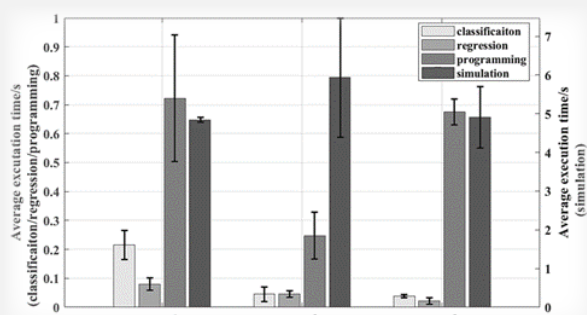
۱. فاز اول: ساخت یک مدل طبقه‌بندی اولیه قابل اطمینان
۲. فاز دوم: ساخت یک مدل رگرسیون اولیه قابل اطمینان
۳. فاز سوم: تعیین راهکار بهینه

لازم به ذکر است که برای جلوگیری از رخداد حلقه‌های بی‌نهایت، یک میزان مشخص برای حداکثر گام هر چرخه تعریف شده است. این مراحل طبق شکل ۱ شامل سه چرخه اصلی می‌شوند:



شکل ۱- هوش مصنوعی در مسیر متحول کردن مهندسی شیمی: از تحلیل داده‌های مولکولی تا طراحی فرایندهای نوین

● فرایند سوم: تولید متانول از گاز سنتز در راستای ایجاد مدل‌های شبیه‌سازی معتبر برای فرایندهای بالا، الگوریتم‌های PSO، GA و MADS به ترتیب برای بهینه‌سازی تقطیر استخراجی، چرخه رانکین آلی (ORC) و تولید متانول با اتصال MATLAB و Aspen Plus به عنوان مراجع مقایسه استفاده شده‌اند.



شکل ۲- میانگین زمان اجرا برای مراحل مختلف

محققان روش بهینه‌سازی نوین ارائه شده را در سه فرایند شیمیایی به کار گرفته و نتایج به دست آمده را با نتایج حاصل از روش‌های برگزیده‌ی مطالعات قبلی مورد مقایسه قرار دادند. لازم به ذکر است که این فرایندها به دلیل استفاده گسترده از آن‌ها به عنوان واحدهای فرایندی اصلی در کاربردهای صنعتی شیمیایی متنوع انتخاب شده‌اند. علاوه بر این، هر یک از این فرایندها دارای مجموعه چالش‌ها و پیچیدگی‌های منحصر به فردی هستند که آن‌ها را به گزینه‌های برای نمایش قابلیت‌های چارچوب پیشنهادی تبدیل می‌کند.

- فرایند اول: تقطیر استخراجی اتانول (EtOH) و اتیل پروپیونات (EtPA)
- فرایند دوم: چرخه رانکین آلی مبتنی بر R۱۲۳ (ORC)

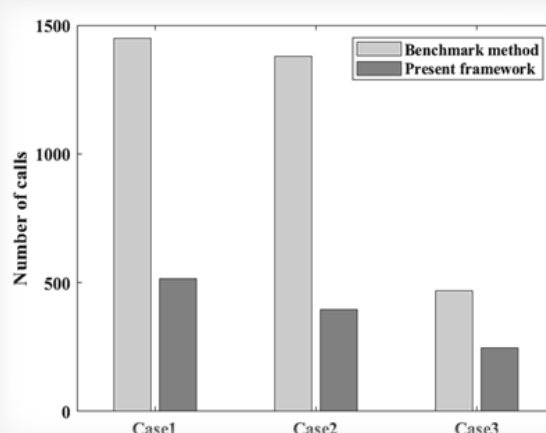
ارزیابی عملکرد روش شناختی

پارامترهای مورد بررسی شامل موارد زیر هستند:

• مقایسه مقادیر میانگین تابع هدف
(Average values of Obj)

• زمان اجرا (Average time)

در این روش بهینه‌سازی جامع، چهار مرحله وجود دارد که عبارتند از: شبیه‌سازی فرآیند، ساخت مدل طبقه‌بندی، ساخت مدل رگرسیون و حل مدل برنامه‌ریزی.

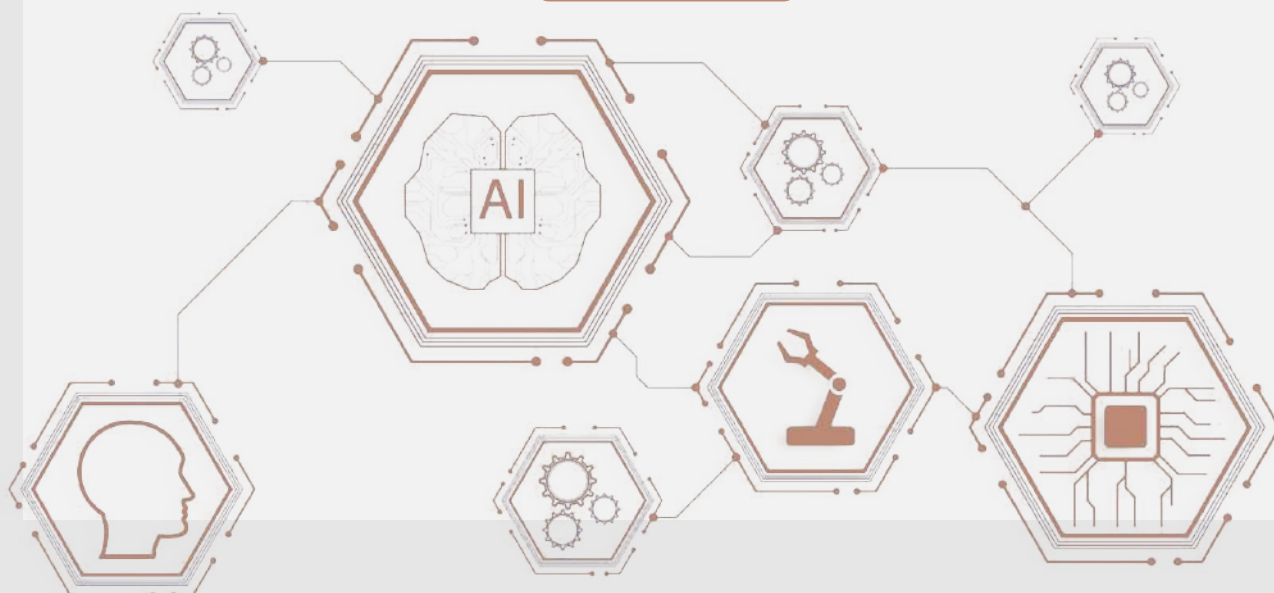


شکل ۳- تعداد فراخوانی‌های شبیه‌سازی در بهینه‌سازی با روش‌های مختلف

طبق شکل ۲، میانگین زمان‌های اجرای این مراحل در موارد مطالعاتی مختلف محاسبه گردیده. گرچه این روش شامل مراحل جدیدی نسبت به روش‌های مرجع و قدیمی‌تر هست اما لازم به ذکر است که تعداد شبیه‌سازی‌های مورد نیاز برای دستیابی به نقطه بهینه از حدود ۱۴۵۰، ۱۴۰۰ و ۵۰۰ بار برای موارد اول، دوم و سوم به حدود ۵۰۰، ۴۰۰ و ۲۵۰، کاهش یافته و همچنین بار محاسباتی مراحل روش نوین بسیار کمتر از بار ناشی از شبیه‌سازی فرآیند است. نتایج نشان می‌دهد که مقادیر تابع هدف به دست آمده توسط روش پیشنهادی به طور چشمگیری از روش‌های معیار (مطالعات قبل) پیشی گرفته است. همچنین، زمان کلی اجرا نیز کاهشی قابل توجه با مقادیر تقریبی ۷۰٪، ۵۵٪ و ۶۰٪ (به ترتیب برای هر مورد) نشان می‌دهد.

صنم نیک‌خواه

برای دسترسی به منابع، بارکد را اسکن کنید.



مهندسان شیمی زیر تیغ هوش مصنوعی!

صنعت و دور زدن چالش کمبود استعداد ضروری است، به طوری که انتظار می‌رود حدود ۳۰ درصد از نیروی کار فعلی در پنج سال آینده بازنشسته شوند. از این رو به شرکت‌ها توصیه می‌شود از مدل‌های زبان هوش مصنوعی و یادگیری ماشینی برای کمک به مهندسان و اپراتورهای کارخانه و ثبت و حفظ تخصص مهندسين ارشد بازنشسته بهره بگیرند و از آن برای ساخت مدل‌های آموزشی استفاده کنند.

بر اساس گزارش منتشر شده توسط Accenture، حجم کاری مهندسان شیمی توسط هوش مصنوعی مولد^۱ تغییر خواهد کرد و به کارگران فرصت بیشتری برای انجام «وظایف قضاوتی پیچیده»^۲ می‌دهد. چندین شرکت شیمیایی، از جمله BASF و Dow، پروژه‌های هوش مصنوعی را در سال‌های اخیر به عنوان بخشی از خروجی خدمات مشتری و تلاش‌های تحقیق و توسعه راه‌اندازی کرده‌اند. این گزارش می‌گوید که بهره‌گیری از هوش مصنوعی برای بهبود بهره‌وری نیروی کار در



شکل ۱- مشاغل در خطر هوش مصنوعی

تا به صورت خودکار صورت گیرند و ۱۰٪ دیگر می‌توانند از افزایش بهره‌مند شوند. خودکارسازی (اتوماسیون) عمدتاً به کار مدل‌های زبان و فشرده‌سازی مجموعه‌های بزرگ داده مانند تاریخچه ماشین و جداول تولید مربوط می‌شود. استوارت پرسکات (Stuart Prescott)، دانشیار دانشکده مهندسی

تغییر در حجم کار

این گزارش نشان می‌دهد که کارگران تولیدی، از جمله برنامه‌ریزان و ناظران، در شرکت‌های شیمیایی ۹۰٪ از وقت خود را صرف کارهای ساده، مانند مدیریت و مستندسازی در بخش بهره‌برداری کارخانه می‌کنند. حدود ۵۷٪ از نقش‌های برنامه‌ریزان این پتانسیل را دارند

شیمی UNSW سیدنی، می‌گوید: «به جای اینکه مهندسان هزاران سند را برای درک یک فرآیند مرتب کنند، می‌توان این اسناد را به یک مدل زبانی با پایگاه دانش ارائه کرد تا پاسخی براساس داده‌های شرکت خصوصی ایجاد کند.»

او افزود: «من تصور می‌کنم شرکت‌های بزرگ تیمی را برای محک زدن اینکه آیا این ایده احتمالاً موفق خواهد بود یا خیر بسازند و ببینند که چه چیزی با هوش مصنوعی در مقیاس کارخانه ممکن است.»

پرسکات گفت که هوش مصنوعی می‌تواند با در اختیار گرفتن حجم وسیعی از داده‌های دورکاوی^۳، به بهینه‌سازی عملیات کارخانه کمک کند، که بر درک انسان غلبه می‌کند و امکان کنترل بیشتر بر اندازه‌گیری و مدیریت ریسک فرآیندها را فراهم می‌کند.

پایداری یا تضاد منافع؟!

گزارش Accenture بیان می‌کند که هوش مصنوعی برای پاسخگویی به تقاضای جهانی محصولات مرتبط با پایداری، از جمله مواد مورد استفاده در پیل‌های خورشیدی، که انتظار می‌رود تا سال ۲۰۲۸ به ارزش ۵۷۰ میلیون دلار آمریکا برسد، ضروری است. با

این حال، این نگرانی وجود دارد که تقاضا برای مراکز داده برای تسهیل هوش مصنوعی اهداف انتشار بسیاری از مشاغل را تحت الشعاع قرار دهد - مراکز داده و شبکه‌های انتقال داده مسئول ۱٪ از انتشار گازهای گلخانه‌ای مرتبط با انرژی در جهان هستند. ماه گذشته، مایکروسافت فاش کرد که به دلیل افزایش انتشار گازهای گلخانه‌ای محدوده سوم (Scope 3)^۴، در مسیر تحقق تعهد خود در سال ۲۰۲۰ مبنی بر منفی شدن کربن تا سال ۲۰۳۰ قرار ندارد. پرسکات گفت که استفاده از هوش مصنوعی به لطف موفقیت آن در پیش بینی تقاضا، می‌تواند تا حدودی این مشکل را برطرف کند. وی گفت: بسیاری از فرآیندهای شیمیایی در حال حاضر خودکار هستند و بیشتر اتاق‌های کنترل کارخانه، کامپیوتری هستند. همچنین مدل‌های هوش مصنوعی در پیش‌بینی و بهینه‌سازی فرآیندها خوب هستند، بنابراین فضایی وجود دارد که می‌توان با بهبود بهره‌وری انرژی در نیروگاه‌ها، انتشار گازهای گلخانه‌ای را جبران کرد.

فرشته شیخ‌الاسلام زاده

¹ نوعی هوش مصنوعی که می‌تواند محتوا و ایده‌های جدیدی از جمله مکالمات، تصاویر، ویدئوها و... ایجاد کند.

² یک کار گروهی که در آن همه اعضای گروه باید یک عمل خاص را قبل از اتمام آن انجام دهند. بدترین عضو گروه عملکرد گروه را تعیین می‌کند.

³ Data Sensor

⁴ محدوده 3 شامل انتشار گازهای گلخانه‌ای است که توسط خود شرکت تولید نمی‌شود.

برای دسترسی به منابع، بارکد را اسکن کنید.





۲

معرفی ها



هوش مصنوعی در مهندسی شیمی از کجا تا کجا؟

پرفراز و نشیبی در پشت صحنه این حوزه وجود دارد. امروزه پیشرفت‌های محاسباتی، دسترسی به حجم عظیمی از داده‌ها و نیازهای صنعتی، هوش مصنوعی را بیش از هر زمان دیگری در قلب تحولات مهندسی شیمی قرار داده است.

هوش مصنوعی چیست؟

این اصطلاح در سال ۱۹۵۶ در یک کنفرانس ریاضی در کالج دارتموث^۳ ابداع شد. در طول سال‌ها، تعاریف زیادی از هوش مصنوعی

در دهه‌های اخیر، پیشرفت‌های چشمگیر در حوزه هوش مصنوعی (AI)^۱ و به‌ویژه یادگیری ماشین (ML)^۲ را شاهد بوده‌ایم. این پیشرفت‌ها باعث گستردگی عظیم هوش مصنوعی در همه فعالیت‌های صنعتی شده است که به همین سبب شاهد ظهور هوش مصنوعی در مهندسی شیمی نیز هستیم.

تاریخچه‌ای که بیش از سه و نیم دهه در مسیر به‌کارگیری هوش مصنوعی در مهندسی شیمی طی شده است نشان می‌دهد تاریخچه‌ای



شکل ۱- تحقیق و گسترش هوش مصنوعی در مهندسی شیمی

ارائه شده است، اما به طور ساده می‌توان گفت: «هوش مصنوعی مطالعه این است که چگونه رایانه‌ها را وادار به انجام کارهایی کنیم که بهتر از انسان‌ها آن کارها را انجام می‌دهند».

هوش مصنوعی دارای شاخه‌های مختلفی است، سیستم‌های هوشمند^۵ و یادگیری ماشین که بیشتر مورد توجه مهندسان هستند به صورت روش‌شناختی عمل می‌کنند. این دو شاخه به‌طور مستقیم کاربرد بسیاری در حوزه مهندسی شیمی دارند، و از این رو اهمیت بالایی برای ما دارند، به گونه‌ای که در ۳۵ سال گذشته بیشتر، مورد تحقیق محققان هوش مصنوعی در مهندسی شیمی قرار گرفته‌اند.

پیدایش هوش مصنوعی

فاز صفر: تلاش‌های اولیه

تلاش‌های عمده برای توسعه روش‌های هوش مصنوعی در مسائل مهندسی شیمی از اوایل دهه ۱۹۸۰ آغاز شد. سیستم سنتزگر طراحی اولیه تطبیقی^۶ که برای سنتز فرآیندی، توسعه یافته بود نمایانگر یک پیشرفت چشمگیر است. این سیستم به‌طور قابل‌توجهی نخستین سیستمی بود که در آن از روش‌های هوش مصنوعی مانند تحلیل اهداف و وسایل و ساختارهای داده‌ای پیوندی، در مهندسی شیمی استفاده می‌شد.

فاز اول: دوران سیستم‌های هوشمند

از اوایل دهه ۱۹۸۰ تا اواسط دهه ۱۹۹۰ اولین تلاش‌های گسترده برای بهره‌برداری از هوش مصنوعی در مهندسی شیمی را شاهد بوده‌ایم. در این دوره ما شاهد ظهور چندین سیستم موفق بوده‌ایم، برای مثال سیستم (CONPHYDE) در سال ۱۹۸۳ برای پیش‌بینی خواص ترموفیزیکی مخلوط‌های سیال پیچیده و سیستم (DECADE) در

سال ۱۹۸۵ برای طراحی کاتالیزورها که هر دو کاربردهای عملی ویژه‌ای در مهندسی شیمی داشتند. همچنین، این دوره شاهد برگزاری اولین دوره‌های آموزشی و همایش‌های ملی و بین‌المللی مرتبط با هوش مصنوعی در فرآیندهای مهندسی بود. برنامه‌های بزرگ مانند کنسرسیوم (ASM)^۷ نیز در این دوره شکل گرفتند که با حمایت مالی قابل توجه هفده میلیون دلاری و همکاری چندین گروه دانشگاهی، به توسعه سیستم‌های هوشمند پرداختند.

فاز دوم: عصر شبکه‌های عصبی

با افول هیجان پیرامون سیستم‌های هوشمند در دهه ۱۹۹۰ به دلیل مشکلات عملیاتی، علاقه به یکی دیگر از تکنیک‌های هوش مصنوعی به شدت در حال افزایش بود. این سرآغاز فاز دوم، یعنی عصر شبکه‌های عصبی بود. در این مدل تغییر اساسی رخ داد و سیستم به گونه‌ای طراحی شده بود که دانش را به طور خودکار از حجم زیادی از داده‌ها به دست می‌آورد و در نتیجه نگهداری و توسعه مدل‌ها را آسان‌تر می‌کرد.

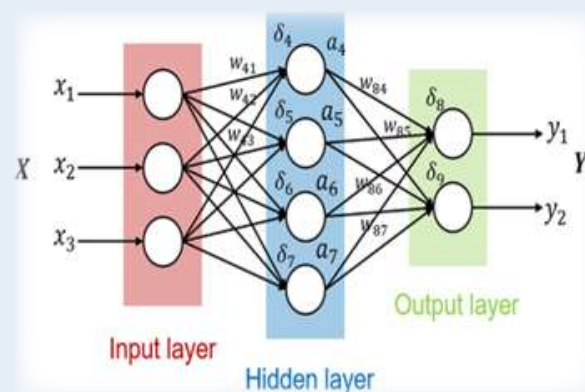
از آنجایی که سیستم‌های هوشمند به دلیل نیاز به فضای عظیم، دانش تخصصی و مسائل نگهداری و به‌روزرسانی مشکل داشتند، رویکرد «آموزش خودکار»^۸ در شبکه‌های عصبی به عنوان جایگزین مورد توجه قرار گرفت. این رویکرد امکان استخراج الگوها و حل مسائل غیرخطی را بدون نیاز به تعریف صریح قوانین فراهم کرد. اما طرح طلایی این فاز «الگوریتم پس‌انتشار خطا»^۹ بود.

تصور کنید که یک شبکه عصبی مانند یک سیستم چند لایه وجود داشته باشد که وظیفه‌اش شناسایی الگوها و یادگیری روابط از داده‌ها است. وقتی شبکه تلاش می‌کند تا خروجی مورد نظر (مثلاً تشخیص یک تصویر

مدل کنند. این تحول زمینه‌ای را فراهم آورد تا مسائل، مدل‌سازی و تشخیص ایراد شوند که در نتیجه کنترل و طراحی محصولات در مهندسی شیمی به شیوه‌ای خودکارتر و دقیق‌تر انجام بشود.

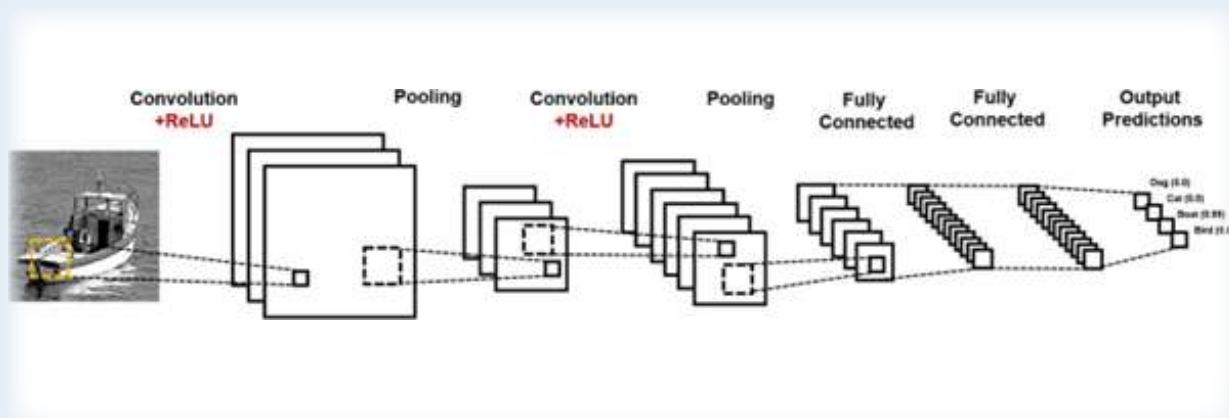
فاز سوم: عصر علم داده و یادگیری عمیق فاز سوم هوش مصنوعی در مهندسی شیمی، که از حدود سال ۲۰۰۵ تا به امروز ادامه دارد و به عنوان تحلیل پیش‌بینی‌کننده شناخته می‌شود، با سه ایده: شبکه‌های عصبی عمیق^۹، یادگیری تقویتی و یادگیری ماشین آماری آغاز شد. برخلاف شبکه‌های عصبی دهه ۱۹۹۰ که معمولاً فقط یک لایه پنهان نوروں داشتند، شبکه‌های عصبی عمیق دارای چندین لایه پنهان هستند که این نوع طراحی امکان استخراج ویژگی‌ها را به صورت سلسله مراتبی برای تشخیص الگوهای پیچیده فراهم می‌کند. آموزش این شبکه‌های عمیق با الگوریتم پس انتشار تقریباً غیرممکن بود، اما در سال ۲۰۰۶ با استفاده از یک استراتژی آموزش لایه به لایه همراه با افزایش قابل توجه سرعت پردازش به شکل واحدهای پردازش گرافیکی (GPU)^{۱۰} این امر ممکن شد.

یا پیش‌بینی یک مقدار) را تولید کند، ابتدا یک پیش‌بینی انجام می‌دهد. اما اگر این پیش‌بینی اشتباه باشد، تفاوت بین خروجی پیش‌بینی شده و خروجی واقعی «خطا» نامیده می‌شود، سپس این خطا از لایه خروجی به سمت لایه‌های قبلی «پس‌انتشار»



شکل ۲- ساختار شبکه عصبی

داده می‌شود. در هر لایه شبکه می‌سنجد که چه بخشی از این خطا مربوط به آن لایه بوده است و سپس به اصلاح آن می‌پردازد. این قابلیت که یک شبکه عصبی بتواند خود از اشتباهاتش یاد بگیرد و آنها را اصلاح کند از مهم‌ترین دستاوردهای این فاز محسوب می‌شود. در نتیجه به لطف الگوریتم پس‌انتشار خطا شبکه‌های عصبی قادر شدند مسائل غیرخطی را که در گذشته توسط سیستم‌های هوشمند قابل حل نبودند به صورت خودکار



شکل ۳- شبکه‌های عمیق چند لایه

گرفت. به نظر می‌رسد که هوش مصنوعی به عنوان یک ابزار قدرتمند و کارا نقش مهمی در شکل‌دهی آینده مهندسی شیمی ایفا خواهد کرد.

فرحان فارسیجانی

آینده هوش مصنوعی در مهندسی شیمی بسیار امیدوارکننده است، اما نیازمند رویکردی واقع‌بینانه، محتاطانه و مبتنی بر تلفیق دانش و داده است. هوش مصنوعی پتانسیل زیادی برای متحول کردن مهندسی شیمی دارد اما برای تحقق کامل این پتانسیل باید با چالش‌ها روبرو شد و از تجربیات گذشته درس

¹ Artificial Intelligence

² machine learning

³ Dartmouth College

⁴ Expert systems or knowledge-based systems—for example, MYCIN, CONPHYDE

⁵ Adaptive Initial Design Synthesizer

⁶ Abnormal Situation Management

⁷ bottom-up method

⁸ Backpropagation

⁹ convolutional

¹⁰ graphics processing unit

برای دسترسی به منابع، بارکد را اسکن کنید.



1990-2000

2005-Present

1980-1995

1980



معرفی زمینه‌های فعالیت مهندسان شیمی در زمینه هوش مصنوعی

تحلیل داده‌ها: هوش مصنوعی از طریق تجزیه و تحلیل داده‌ها، اطلاعات ارزشمندی برای پایش و بهینه‌سازی چرخه‌های تولید ارائه می‌دهد[۱].

بهینه‌سازی فرایندها

تکنیک‌های بهینه‌سازی ریاضی در مهندسی شیمی نقش کلیدی در طراحی، بهره‌برداری و بهینه‌سازی فرآیندهای صنعتی ایفا می‌کنند. هر روش بهینه‌سازی با توجه به ویژگی‌های مسئله، مانند خطی یا غیرخطی، پیوسته یا گسسته، مقید یا نامحدود، قابلیت به کارگیری دارد. به کارگیری این تکنیک‌ها به مهندسان شیمی امکان می‌دهد تا چالش‌های پیچیده را مدل‌سازی و حل کرده و کارایی و نوآوری در فرآیندهای شیمیایی را بهبود بخشند. در این راستا، هوش مصنوعی و الگوریتم‌های یادگیری ماشین با ترکیب روش‌های بهینه‌سازی، امکان تحلیل داده‌های پیچیده و ارائه راهکارهای کارآمدتر را فراهم می‌کنند. الگوریتم‌های یادگیری ماشین می‌توانند به صورت پویا پارامترهای فرآیندی مانند دما، فشار و جریان را برای بهبود کارایی و کاهش مصرف انرژی تنظیم کنند. این به ویژه در فرآیندهایی مانند راکتورهای شیمیایی، فرآیندهای تقطیر و مبدل‌های حرارتی اهمیت دارد[۲].

هوش مصنوعی^۱ به شبیه‌سازی هوش انسانی در ماشین‌هایی اطلاق می‌شود که برای تصمیم‌گیری و حل مسائل طراحی شده‌اند. این ابزار به سرعت در حال تغییر شکل صنایع با افزایش کارایی، دقت و نوآوری است. هوش مصنوعی به ابزاری قدرتمند در مهندسی شیمی که حوزه‌ای مملو از فرآیندها و سیستم‌های پیچیده است تبدیل شده است و با خودکارسازی وظایف زمان‌بر و پرزحمت، کاهش هزینه‌ها، بهبود بهره‌وری فرآیندها و تضمین ایمنی نقش بسزایی در رشد این صنعت ایفا می‌کند. در اینجا نگاهی دقیق‌تر به فناوری‌های هوش مصنوعی و تحولات حاصل از آن در مهندسی شیمی خواهیم داشت.

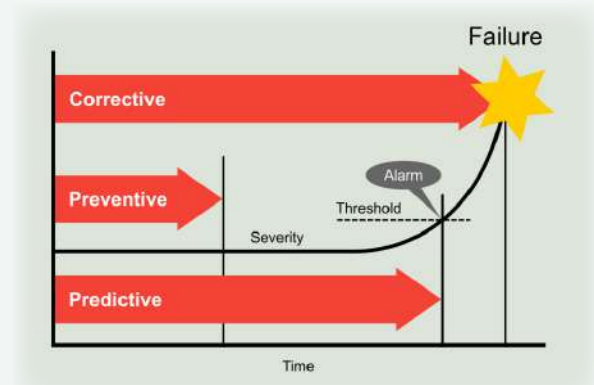
فناوری‌های اساسی هوش مصنوعی

یادگیری ماشین^۲: الگوریتم‌های یادگیری ماشین با تحلیل گسترده وسیعی از داده‌ها، الگوهای پنهان را شناسایی کرده و فرآیندهای شیمیایی را بهینه‌سازی می‌کنند.

شبکه‌های عصبی^۳: این سیستم‌ها با الهام از عملکرد مغز انسان، نتایج را با دقت بالا پیش‌بینی می‌کنند و در مدل‌سازی سیستم‌های پیچیده فرایندی نقش کلیدی دارند.

تشخیص زود هنگام مشکلات ایمنی (نگهداری پیش‌بینی کننده)'

یکی از کاربردهای کلیدی هوش مصنوعی در ایمنی فرایندها، تشخیص زود هنگام نشت‌ها یا نقص‌ها در سیستم‌ها است (شکل ۱). الگوریتم‌های یادگیری ماشین می‌توانند داده‌های جمع‌آوری شده از حسگرهای مختلف (مثل دما، فشار، صدا و ارتعاشات) را تحلیل کرده و الگوهای خطرناک را شناسایی کنند. این الگوریتم‌ها می‌توانند شرایط غیرعادی را به طور خودکار شناسایی کرده و هشدارهای فوری برای جلوگیری از حوادث ناگوار ارسال کنند. این روش باعث کاهش خرابی‌های ناگهانی، افزایش بهره‌وری، کاهش هزینه‌های تعمیر و نگهداری، و افزایش عمر تجهیزات می‌شود. با این حال، چالش‌هایی همچون هزینه‌های اولیه بالا، پیچیدگی تحلیل داده‌ها و نیاز به نگهداری سنسورها وجود دارد که باید در نظر گرفته شوند [۳].



شکل ۱- مقایسه استراتژی‌های نگهداری و تعمیرات: نگهداری پیش‌بینی کننده، پیشگیرانه و اصلاحی در برابر خرابی تجهیزات [۳]

شبیه‌سازی مبتنی بر داده°

شبیه‌سازی مبتنی بر داده از الگوریتم‌های هوش مصنوعی برای استخراج الگوهای مفید از داده‌های تجربی یا شبیه‌سازی‌های قبلی استفاده می‌کند. این شبیه‌سازی‌ها می‌توانند

برای مدل‌سازی و بهینه‌سازی فرآیندهایی که در آن‌ها اطلاعات دقیق اولیه موجود نیست، مفید باشند [۴].

بهینه‌سازی مصرف انرژی و تولید انرژی‌های پاک

بخش انرژی در حال حاضر با چالش‌های رو به رشدی از جمله افزایش تقاضا، کاهش کارایی و کمبود تحلیل‌های لازم برای مدیریت بهینه این صنعت و تغییر الگوهای عرضه و تقاضا مواجه است. هوش مصنوعی با تحلیل الگوهای مصرف انرژی در صنایع، نیروگاه‌ها و ساختمان‌های هوشمند، می‌تواند پیشنهادهایی برای کاهش مصرف انرژی ارائه دهد و بهینه‌سازی سیستم‌های تولید انرژی را تسهیل کند. به علاوه این الگوها برای بررسی‌های اقتصادی تولید انرژی‌های پاک مانند قیمت‌گذاری‌های رقابتی، زمان‌بندی و مدیریت تاسیسات در تولید انرژی‌های تجدیدپذیر نیز کاربرد گسترده‌ای دارند [۵].

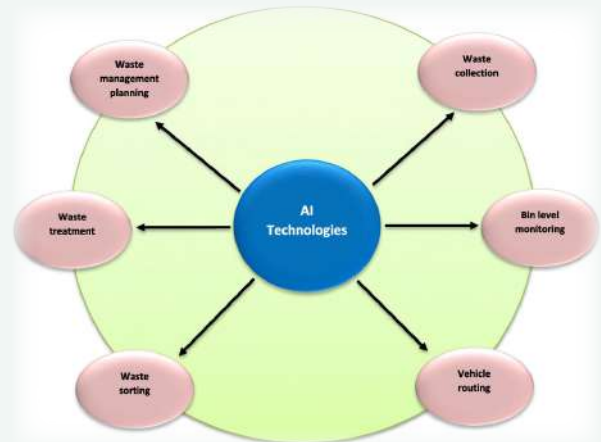
مدیریت پسماند و بازیافت هوشمند

الگوریتم‌های یادگیری ماشین می‌توانند در تشخیص، تفکیک، و بازیافت پسماندها کمک کنند (شکل ۲). این فناوری باعث می‌شود که زباله‌های صنعتی و شهری به‌طور مؤثرتر دسته‌بندی و بازیافت شوند، در نتیجه میزان دفن زباله کاهش یافته و آلودگی محیط‌زیست کمتر شود. در یک مطالعه به بررسی استفاده از فناوری‌های هوش مصنوعی در بخش‌های مختلف مدیریت پسماند جامد، از جمله تولید، تفکیک، جمع‌آوری، مسیریابی وسایل نقلیه، پردازش، دفع و بازیافت پرداخته شده است. نتایج نشان می‌دهد که هوش مصنوعی می‌تواند با بهینه‌سازی فرآیندها، کاهش هزینه‌ها و افزایش کارایی، به پایداری مدیریت پسماند کمک کند. با

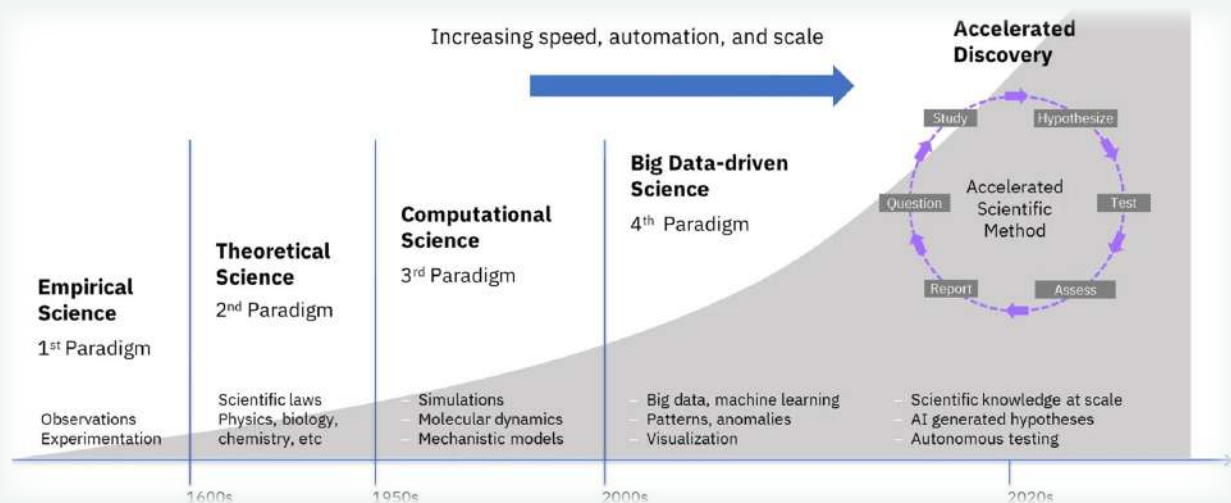
توسعه و کشف خواص مواد

هوش مصنوعی با تسریع کشف، طراحی و بهینه‌سازی، تحول بزرگی در علم مواد و کاتالیزورها ایجاد کرده است. روش‌های سنتی توسعه مواد زمان‌بر و پرهزینه‌اند، اما الگوریتم‌های یادگیری ماشین و یادگیری عمیق با تجزیه و تحلیل داده‌های گسترده، این چالش‌ها را کاهش می‌دهند (شکل ۳). در کشف ترکیبات جدید، پیش‌بینی خواص مواد، بهینه‌سازی فرآیندهای تولید و شبیه‌سازی‌های مولکولی نقش مهمی دارد. همچنین، طراحی مواد هوشمند و خودترمیم‌شونده را تسهیل کرده و کاربردهای متنوعی در صنایع مختلف، از جمله هوافضا، انرژی، پلیمر، تصفیه آب و کاتالیست‌ها ایجاد کرده است. در آینده، ادغام هوش مصنوعی با روش‌های تجربی و محاسباتی، توسعه مواد پایدار و پیشرفته را تسریع خواهد کرد [۷].

این حال، چالش‌هایی مانند نیاز به داده‌های با کیفیت و مسائل اخلاقی نیز در پیاده‌سازی این فناوری‌ها وجود دارد [۶].



شکل ۲: نقش فناوری‌های هوش مصنوعی در بهینه‌سازی مدیریت پسماند: از جمع‌آوری زباله تا پردازش و برنامه‌ریزی مدیریت پسماند [۶]



شکل ۳: تکامل روش‌های علمی: از مشاهدات تجربی تا کشف سریع‌تر با علم مبتنی بر داده‌های کلان و هوش مصنوعی [۷].

فاطمه خسروبیگی

¹ Artificial Intelligence (AI)

² Machine Learning (ML)

³ Artificial Neural Networks (ANN)

⁴ Predictive Maintenance

⁵ Data-driven Simulation

برای دسترسی به منابع، بارکد را اسکن کنید.



معرفی مشاهیر

مشاهیر ایران و جهان فعال در زمینه هوش مصنوعی

در سال‌های اخیر، هوش مصنوعی (AI) تحولات عظیمی در حوزه‌های مختلف مهندسی، از جمله مهندسی شیمی، ایجاد کرده است. این فناوری پیشرفته به دانشمندان و مهندسان کمک می‌کند تا فرآیندهای پیچیده شیمیایی را بهینه‌سازی کنند، مواد جدیدی طراحی کنند و مدل‌سازی دقیقی از واکنش‌های شیمیایی ارائه دهند. در این راستا، برخی از پژوهشگران برجسته در ایران و جهان با تحقیقات نوآورانه‌ی خود نقش مهمی در پیشبرد این حوزه ایفا کرده‌اند. در این مقاله به معرفی دو چهره‌ی برجسته در این زمینه، یکی از ایران و دیگری از سطح بین‌المللی، می‌پردازیم.



برای دسترسی به صفحه لینکدین،
اسکن کنید.



دکتر سمیرا سیاه‌رستمی

فعال در شیمی محاسباتی و طراحی
مواد نانو برای تولید انرژی پاک

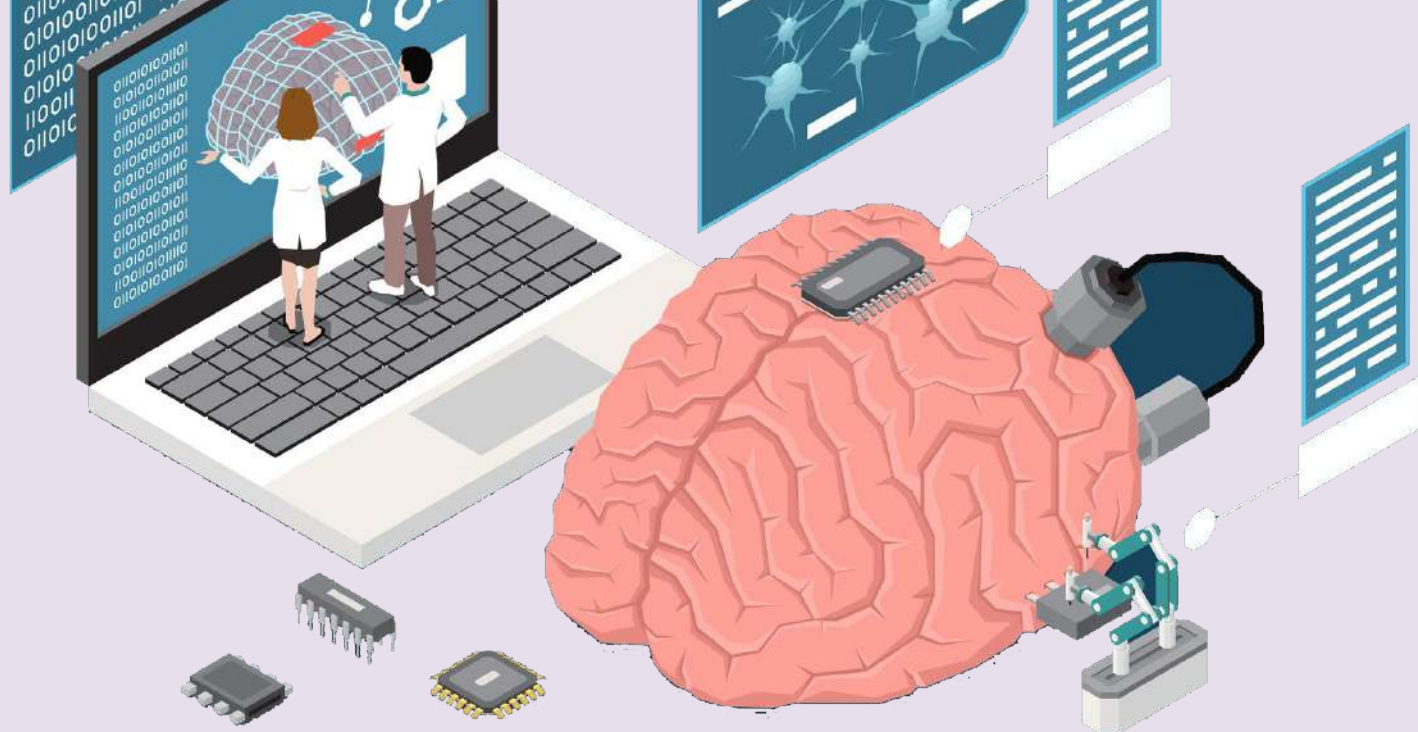


یکی از حوزه‌های کلیدی تحقیقات او، توسعه‌ی کاتالیست‌های جدید برای واکنش‌های الکتروشیمیایی است. این واکنش‌ها برای تولید انرژی پایدار و کاهش وابستگی به سوخت‌های فسیلی اهمیت زیادی دارند. با استفاده از ماشین لرنینگ و شبیه‌سازی‌های دقیق، او توانسته است خواص فیزیکی و شیمیایی کاتالیست‌های بالقوه را پیش‌بینی کند و موادی را شناسایی کند که بازدهی بالاتری نسبت به نمونه‌های سنتی دارند. پژوهش‌های او تأثیر زیادی بر صنایعی مانند پیل‌های سوختی و تبدیل دی‌اکسید کربن به سوخت‌های مفید داشته است.

دکتر سمیرا سیاه‌رستمی یکی از دانشمندان برجسته‌ی ایرانی در زمینه‌ی شیمی محاسباتی است که از روش‌های ماشین لرنینگ برای تحلیل و طراحی کاتالیست‌های جدید و شبیه‌سازی واکنش‌های الکتروشیمیایی استفاده می‌کند. وی که در حال حاضر استاد دانشگاه کلگری کانادا است، تحقیقات گسترده‌ای در زمینه‌ی استفاده از هوش مصنوعی برای بهینه‌سازی فرآیندهای شیمیایی انجام داده است. پژوهش‌های او منجر به کشف و توسعه‌ی مواد جدیدی شده که در صنایع مختلف، از جمله انرژی‌های تجدیدپذیر، کاربرد دارند.

دکتر سیاه‌رستمی جوایز متعددی از جمله جایزه‌ی انجمن سلطنتی شیمی (Royal Society of Chemistry) و انجمن شیمی کانادا (Canadian Society for Chemistry) را کسب کرده است.





برای دسترسی به صفحه لینکدین،
اسکن کنید.



پروفسور یوشوا بنجیو

فعال در دیپ لرنینگ، ماشین لرنینگ
و هوش مصنوعی



برای نوآوری در این حوزه گشوده است. یکی از مهم‌ترین پروژه‌های بنجیو در این زمینه، همکاری با شرکت‌ها و آزمایشگاه‌های داروسازی برای توسعه الگوریتم‌های دیپ لرنینگ است که می‌تواند ترکیبات دارویی جدید را شناسایی کنند. این روش باعث تسریع در فرآیند کشف دارو شده و هزینه‌های تحقیقاتی را کاهش داده است. الگوریتم‌های او همچنین در زمینه طراحی مواد نانویی و مدل‌سازی واکنش‌های شیمیایی پیچیده کاربرد دارند، که می‌تواند به تولید مواد با خواص منحصر به فرد برای صنایع مختلف کمک کند.

علی مرتضوی

یوشوا بنجیو یک دانشمند کامپیوتر کانادایی-فرانسوی و پیشگام شبکه‌های عصبی مصنوعی و دیپ لرنینگ است. او استاد دانشگاه مونترال و مدیر علمی مؤسسه هوش مصنوعی MILA است.

پروفسور یوشوا بنجیو یکی از تأثیرگذارترین چهره‌ها در توسعه هوش مصنوعی و دیپ لرنینگ است. او که یکی از سه بنیان‌گذار اصلی دیپ لرنینگ محسوب می‌شود، تحقیقات گسترده‌ای در زمینه استفاده از شبکه‌های عصبی مصنوعی برای مدل‌سازی سیستم‌های شیمیایی و زیستی انجام داده است. پژوهش‌های او به بهبود فرآیندهای طراحی دارو، شبیه‌سازی مولکولی و کشف مواد جدید از طریق هوش مصنوعی کمک کرده است. دستاوردهای او در این زمینه تأثیر بسزایی بر پیشرفت صنایع داروسازی و مهندسی شیمی داشته و مسیرهای جدیدی را

معرفی نرم افزار

معرفی نرم افزارهای کاربردی در مهندسی شیمی



برای شبیه‌سازی، بهینه‌سازی طراحی و بهبود فرآیندهای موجود استفاده می‌کنند. مدل‌سازی دقیق خواص ترمودینامیکی در این نرم‌افزار، به‌ویژه در جداسازی مخلوط‌های غیریاده‌آل، از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. یکی از مزایای مهم HYSYS این است که دارای یک پایگاه داده گسترده از گونه‌های شیمیایی و پارامترهای رگرسیونی خالص آن‌ها است.

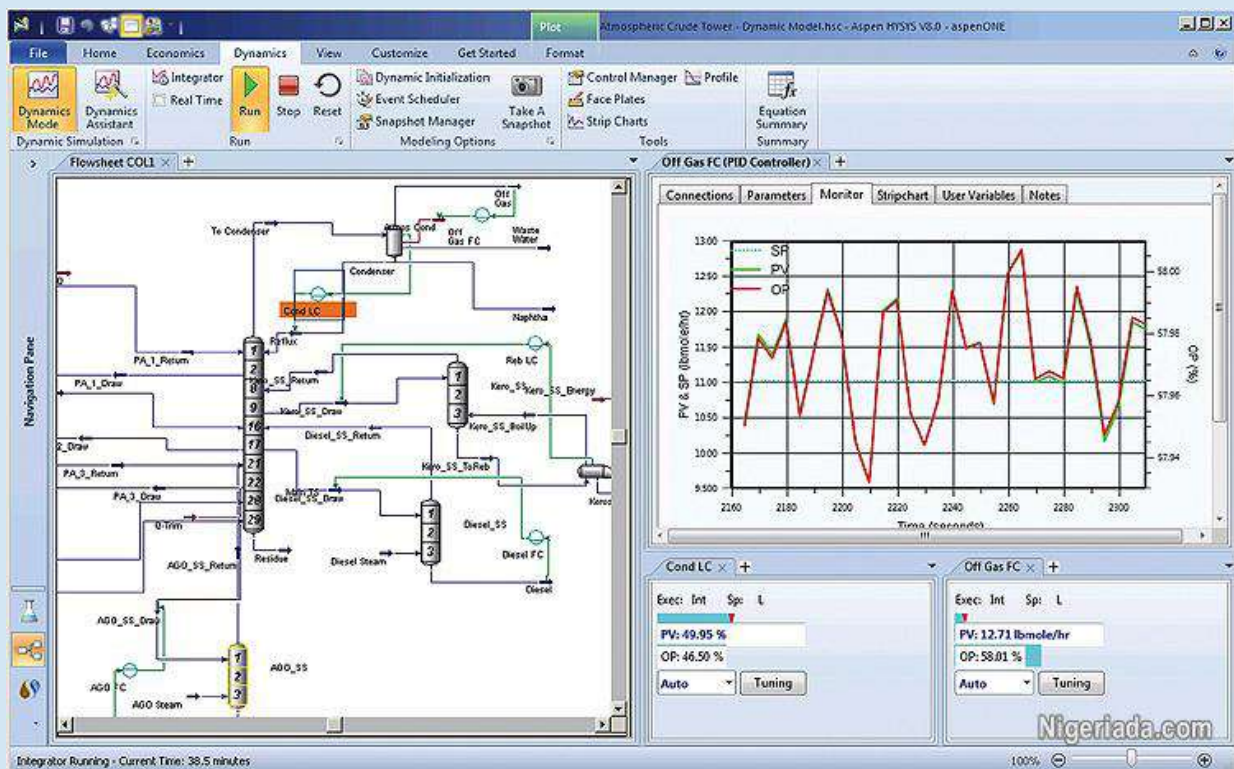
این نرم‌افزار همچنین قادر به مدیریت فرآیندهای بسیار پیچیده است، از جمله:

- عملیات واحد اختصاصی برای صنایع پالایشگاهی (مانند کراکرها، کُکر، ریفورمر، واحد FCC و...)
- راکتورهای شیمیایی
- شبیه‌سازی نفت خام (بر اساس خواص آن‌ها)
- فرآیندهای دارای حلقه‌های بازگشتی و جریان‌های بای‌پس پیچیده

HYSYS که به اختصار Aspen HYSYS نامیده می‌شود، (ترکیبی از کلمات Hyprotech و System) یکی از پیشروترین نرم‌افزارهای شبیه‌سازی فرآیندهای شیمیایی در بازار (یا حداقل در دنیای مهندسی شیمی) است.

HYSYS به دلیل قابلیت‌های گسترده در شبیه‌سازی پایا و دینامیکی، طراحی فرآیند، مدل‌سازی عملکرد و بهینه‌سازی، به‌طور گسترده‌ای در صنعت مورد استفاده قرار می‌گیرد. این نرم‌افزار به کاربران اجازه می‌دهد تا یک مدل فرآیندی ایجاد کرده و سپس با استفاده از محاسبات پیچیده (شامل مدل‌ها، معادلات، محاسبات ریاضی، رگرسیون‌ها و غیره) آن را شبیه‌سازی کنند.

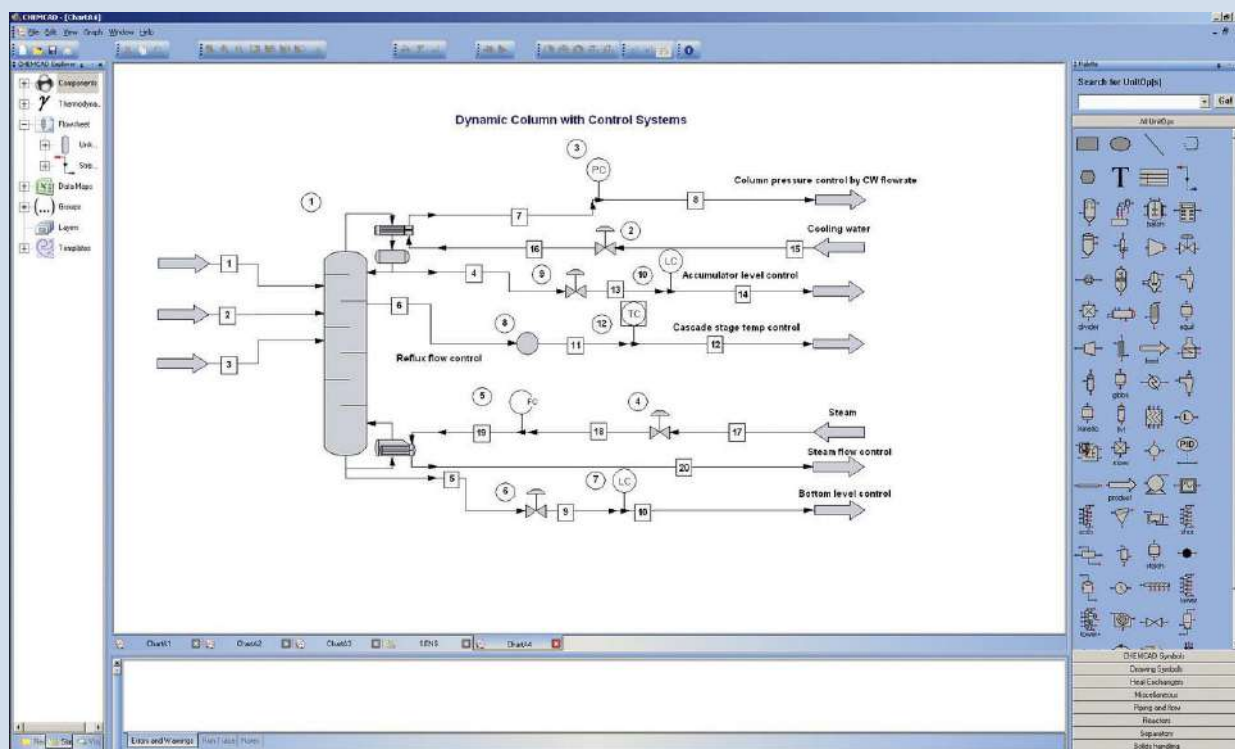
با داشتن یک طراحی فرآیند و انتخاب مناسب مدل‌های ترمودینامیکی، HYSYS از مدل‌های ریاضی برای پیش‌بینی عملکرد فرآیند استفاده می‌کند. مهندسان معمولاً از این نرم‌افزار





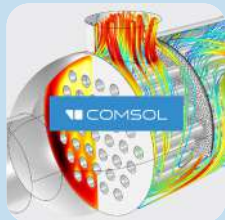
این نرم‌افزار به مهندسان کمک می‌کند تا گلوگاه‌های فرآیندی را شناسایی کرده، شرایط عملیاتی را بهینه‌سازی کنند و بازده کلی فرآیند را بهبود دهند. CHEMCAD محاسبات ترمودینامیکی مختلفی از جمله موازنه‌های جرم، انرژی و تعادل شیمیایی را انجام می‌دهد. این نرم‌افزار همچنین می‌تواند برای برآورد هزینه‌های طراحی و بهره‌برداری از فرآیندها استفاده شود. CHEMCAD در صنایع مختلفی از جمله صنایع شیمیایی، پتروشیمی، داروسازی، زیست‌فرآوری، نفت و گاز و تأسیسات کاربرد دارد و در دانشگاه‌ها برای آموزش و تحقیقات علمی نیز استفاده می‌شود.

CHEMCAD یک نرم‌افزار شبیه‌سازی فرآیندهای شیمیایی است که توسط مهندسان شیمی برای مدل‌سازی، تحلیل و طراحی فرآیندهای شیمیایی استفاده می‌شود. این نرم‌افزار شامل شبیه‌سازی‌های حالت پایدار و دینامیکی، طراحی تجهیزات و بهینه‌سازی فرآیندها است. CHEMCAD به مهندسان این امکان را می‌دهد که فرآیندهای شیمیایی مختلف از جمله واکنش‌ها، جداسازی‌ها و انتقال حرارت را شبیه‌سازی کنند تا عملکرد فرآیند را پیش‌بینی کرده و تصمیمات آگاهانه بگیرند. این نرم‌افزار از شبیه‌سازی‌های استاتیکی (حالت پایدار) و دینامیکی پشتیبانی می‌کند و به مهندسان اجازه می‌دهد فرآیندها را در شرایط عملیاتی مختلف مدل‌سازی کنند. همچنین می‌تواند برای طراحی و تعیین ابعاد تجهیزات فرآیندی مانند راکتورها، برج‌های تقطیر، مبدل‌های حرارتی، پمپ‌ها و لوله‌ها استفاده شود.



ویژگی‌های خاص نرم افزار

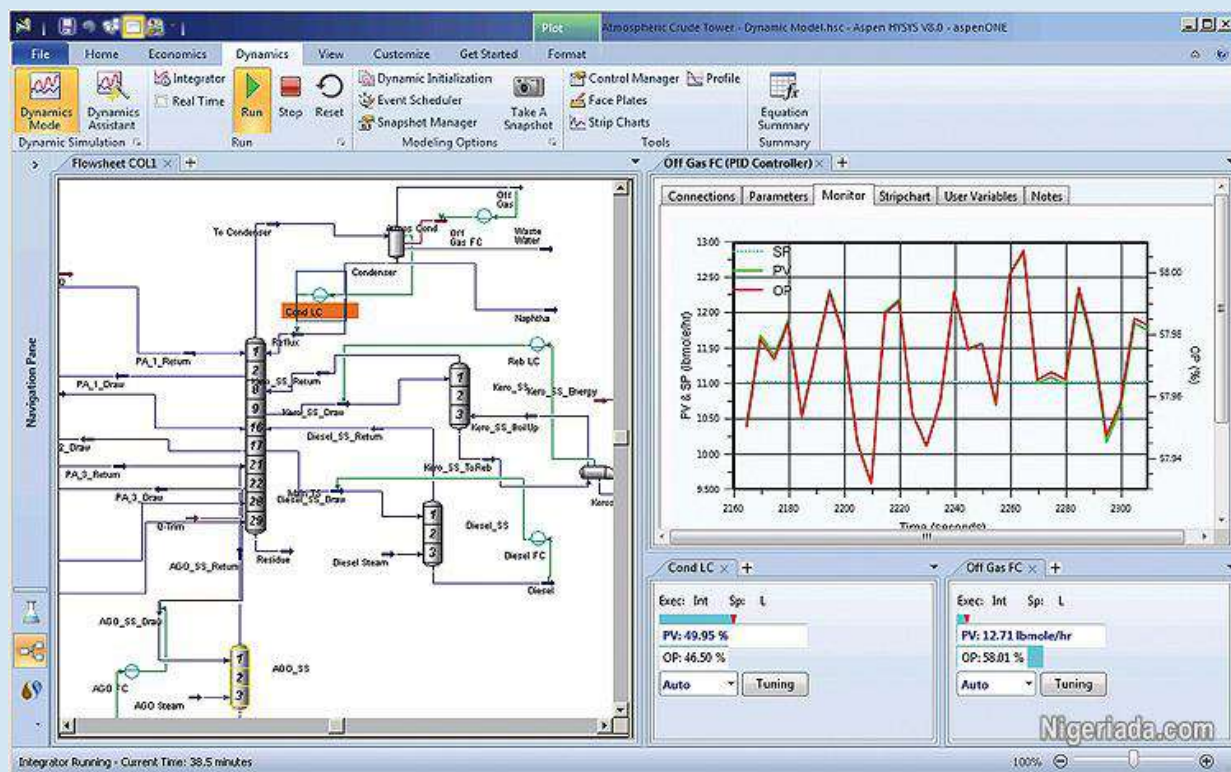
- پایگاه داده گسترده از ترکیبات: شامل هزاران ترکیب گازی، مایع، جامد و الکترولیت‌ها
- ادغام با MATLAB: امکان انجام محاسبات پیچیده و شبیه‌سازی‌های پیشرفته
- اتصال به Excel: قابلیت ارسال و دریافت اطلاعات بین CHEMCAD و Excel در حین محاسبات
- توسعه مداوم: این نرم‌افزار به‌طور مداوم به‌روزرسانی شده و با نیازهای مهندسان شیمی هماهنگ می‌شود.



COMSOL

- ماژول‌های افزودنی: مجموعه‌ای گسترده از ماژول‌های تخصصی را برای حوزه‌های مختلف فیزیکی ارائه می‌دهد، از جمله الکترومغناطیس، مکانیک سازه، آکوستیک، جریان سیال، انتقال حرارت و مهندسی شیمی.
- ادغام با سایر نرم‌افزارها: با نرم‌افزارهای CAD و ابزارهای جانبی دیگر یکپارچه می‌شود و به کاربران امکان وارد کردن هندسه‌ها و داده‌ها را می‌دهد.
- دانشنامه‌ی چندفیزیکی: این منبع به‌عنوان راهنمای مهندسی برای مفاهیم و تئوری‌های پایه‌ای فیزیک‌های درهم‌تنیده و مقدمه‌ای بر شبیه‌سازی‌های کوپل‌شده عمل می‌کند.
- مزایای استفاده از COMSOL Multiphysics
- شبیه‌سازی دقیق: این نرم‌افزار امکان مدل‌سازی دقیق پدیده‌های دنیای واقعی را فراهم می‌کند و باعث تصمیم‌گیری‌های بهتر در طراحی و توسعه محصول می‌شود.
- COMSOL Multiphysics یک پلتفرم قدرتمند شبیه‌سازی است که برای مدل‌سازی و شبیه‌سازی طیف گسترده‌ای از پدیده‌های فیزیکی، به‌ویژه مواردی که شامل فیزیک‌های کوپل‌شده هستند، استفاده می‌شود. این نرم‌افزار به مهندسان امکان می‌دهد تا طراحی‌ها، دستگاه‌ها و فرآیندها را درک، پیش‌بینی و بهینه‌سازی کنند.
- ویژگی‌ها و قابلیت‌های کلیدی
- شبیه‌سازی چندفیزیکی: در شبیه‌سازی سیستم‌هایی که در آن چند پدیده فیزیکی به‌طور هم‌زمان تعامل دارند، عملکرد بی‌نظیری دارد.
- تحلیل المان محدود: این نرم‌افزار بر اساس روش عددی المان محدود (FEM) کار می‌کند که یک تکنیک پیشرفته برای حل معادلات دیفرانسیل جزئی مرتبط با پدیده‌های فیزیکی است.
- مدل‌ساز: ویژگی Model Builder به کاربران اجازه می‌دهد تا هندسه‌ها، خواص مواد، مدل‌های فیزیکی و معادلات مربوطه را تعریف و مدیریت کنند.

- شناسایی مشکلات در مراحل اولیه: شبیه‌سازی‌ها می‌توانند مشکلات احتمالی را در مراحل اولیه طراحی شناسایی کنند و از هدررفت زمان و منابع جلوگیری نمایند.
- کاهش هزینه‌ها: بهینه‌سازی طراحی‌ها از طریق شبیه‌سازی، هزینه‌های مربوط به نمونه‌سازی و آزمایش‌های فیزیکی را کاهش می‌دهد.



علی چراغ‌نیا



۳

مقالات

کاربرد هوش مصنوعی در طراحی کاتالیست

مقدمه

کاتالیست‌ها نقش کلیدی در تسریع واکنش‌های شیمیایی و بهینه‌سازی فرآیندهای صنعتی دارند. با وجود اهمیت بالای آن‌ها، کشف و توسعه کاتالیست‌های جدید معمولاً فرآیندی پرهزینه و زمان‌بر است که نیازمند آزمایش‌های متعدد و محاسبات پیچیده است. هوش مصنوعی (AI) و یادگیری ماشین (ML) به عنوان ابزارهای پیشرفته در علوم داده، انقلابی در طراحی و کشف کاتالیست‌های جدید ایجاد کرده‌اند. این فناوری‌ها می‌توانند با تحلیل داده‌های گسترده، پیش‌بینی خواص مواد و شبیه‌سازی واکنش‌های شیمیایی، روند کشف و بهینه‌سازی کاتالیست‌ها را تسریع کنند.

معرفی کاتالیست‌ها

کاتالیست‌ها موادی هستند که سرعت واکنش‌های شیمیایی را بدون مصرف شدن در فرآیند افزایش می‌دهند. این مواد با کاهش انرژی فعال‌سازی مورد نیاز برای انجام واکنش، فرآیندهای شیمیایی را تسریع کرده و بازدهی آن‌ها را افزایش می‌دهند. کاتالیست‌ها را می‌توان به سه دسته کلی همگن، ناهمگن و زیستی دسته‌بندی کرد [۱].

بررسی چالش‌های توسعه کاتالیست‌ها

روش‌های سنتی کشف و سنتز کاتالیست‌ها با چالش‌های متعددی همراه هستند، از جمله این چالش‌ها هزینه‌های بالا و نیاز به انرژی زیاد، عدم قطعیت در فضای شیمیایی بزرگ و کشف‌نشده، چالش‌های مربوط به آزمایش‌های تکراری، نامشخص بودن احتمال موفقیت در کشف کاتالیست‌های جدید و اثرات زیست‌محیطی استفاده از کاتالیست‌ها

می‌باشد [۲].

نقش هوش مصنوعی در طراحی کاتالیست و علم مواد

هوش مصنوعی (AI) با ورود به علوم شیمی و مهندسی، روند کشف کاتالیست‌ها را از روش‌های سنتی آزمون و خطا به رویکردهای داده‌محور تغییر داده است. این فناوری با تحلیل داده‌های پیچیده و غیرساختاری، به کاهش چالش‌های طراحی، بهینه‌سازی واکنش‌ها، پیش‌بینی فعالیت زیستی داروها و خودکارسازی آزمایشگاه‌ها کمک می‌کند [۱]. یادگیری ماشین^۱ شاخه‌ای از علوم کامپیوتر است که به‌طور خاص به هوش مصنوعی مرتبط بوده و از الگوریتم‌هایی برای تفسیر داده‌ها به شیوه‌ای مشابه فرآیند یادگیری انسانی استفاده می‌کند. یادگیری ماشین، سیستم‌های کامپیوتری را آموزش می‌دهد تا از مجموعه‌های بزرگ داده، تصمیم‌گیری کنند. در حال حاضر یادگیری ماشین به‌طور گسترده‌ای شیمی محاسباتی و مهندسی شیمی را در سطوح مختلف تقویت کرده است [۱]. با این حال، علیرغم تأثیرات آن در حوزه‌های مختلف، چالش‌هایی در خلاصه‌سازی پیشرفت‌های صورت‌گرفته در این زمینه وجود دارد. این پیشرفت‌ها برگرفته از مطالعات اخیر هستند که می‌توان آن‌ها را مکمل یکدیگر دانست که تصویری کلی از کاربردهای یادگیری ماشین ارائه می‌دهند. از جمله این کاربردها می‌توان به موارد زیر اشاره کرد [۳].

۱. درک و کنترل سیستم‌های شیمیایی و رفتارهای مرتبط.

۲. محاسبه، بهینه‌سازی یا پیش‌بینی روابط

۳. هدایت مدل‌های مولد برای طراحی معکوس.
۴. غربالگری، سنتز و شناسایی ترکیبات و مواد جدید.
۵. بهبود فناوری‌های کاتالیستی و ابزارهای تحلیلی.
۶. توسعه الگوریتم‌های کوانتومی^۲ برای شبیه‌سازی مولکولی.

مدل‌های یادگیری ماشین در طراحی

کاتالیست

یادگیری ماشین (ML) شاخه‌ای از هوش مصنوعی (AI) است که شامل روش‌هایی می‌شود که به‌طور خودکار ساختارها و الگوهای ادراکی را از داده‌های مرتبط استخراج می‌کنند. پژوهشگران حوزه کاتالیز از این ساختارها و الگوهای استخراج‌شده برای بهینه‌سازی کار خود در حوزه‌های مختلف و در سطوح متفاوت استفاده کرده‌اند، از جمله شبیه‌سازی اتمی شرایط واکنش، ساخت نمودار فازی سطح کاتالیست، پیش‌بینی مکانیزم واکنش و رفع ابهام از ساختار کاتالیست.

تاکنون، بیشتر کاربردهای یادگیری ماشین در حوزه کاتالیز از مدل‌های جعبه سیاه (Black-Box) مانند مدل‌های فرآیند گاوسی^۳ یا شبکه‌های عصبی^۴ استفاده کرده‌اند. این مدل‌ها به‌طور گسترده‌ای در حوزه کاتالیز به کار گرفته شده‌اند. این مدل‌ها می‌توانند پیش‌بینی‌هایی از خواص فیزیکی مانند انرژی جذب یا انرژی تشکیل ارائه دهند، که با عملکرد کاتالیست (مانند فعالیت یا پایداری آن) مرتبط است. مدل‌های جعبه سیاه، اغلب بر دقت تأکید دارند. یکی از چالش‌های این مدل‌ها، پیچیدگی زیاد منطق داخلی آن‌ها

است که استخراج بینش‌های فیزیکی معنادار را دشوار می‌سازد. برای غلبه بر این چالش، روش‌هایی برای استخراج اطلاعات تفسیری از مدل‌های جعبه سیاه پس از آموزش آن‌ها توسعه یافته‌اند، که به روش‌های پساتحلیلی (Post-hoc)^۵ معروف هستند. این روش‌ها که تحت عنوان مدل‌های جعبه خاکستری (Grey-Box Model) شناخته می‌شوند، به تحلیل غیرمستقیم مدل‌های جعبه سیاه کمک می‌کنند. همه روش‌های یادگیری ماشین به تکنیک‌های جعبه خاکستری برای تفسیر روابط کشف‌شده نیاز ندارند. برخی روش‌های یادگیری ماشین به‌طور مستقیم این بینش‌ها را ارائه می‌دهند و تحت عنوان مدل‌های جعبه شفاف (Glass-Box Models) شناخته می‌شوند[۱].

مدل‌های جعبه شفاف برای استخراج روابط تحلیلی ساده بین متغیرهای ورودی و ویژگی‌های هدف، شناسایی ساختارهای پنهان در داده‌ها و انجام پیش‌بینی‌های تحت محدودیت‌های خاص مورد استفاده قرار می‌گیرند. این مدل‌ها به‌طور کلی دارای محدودیت‌هایی مانند سادگی تحمیلی هستند، که همین امر باعث می‌شود خروجی آن‌ها به راحتی تفسیر شود. در نتیجه، اگر استخراج بینش علمی هدف اصلی باشد، مدل‌های جعبه شفاف به سایر روش‌ها ترجیح داده می‌شوند[۱].

کاربرد عملی هوش مصنوعی در طراحی

کاتالیست

کاربرد ANN^۶ در فرآیندهای کاتالیستی در میان الگوریتم‌های یادگیری ماشین، شبکه‌های عصبی مصنوعی (ANN) پرکاربردترین مدل‌ها محسوب می‌شوند، زیرا برای تجزیه و تحلیل روابط غیرخطی در مجموعه داده‌هایی با متغیرهای ورودی متعدد

بسیار مناسب هستند. یک شبکه عصبی مصنوعی مدلی پیش‌بینی‌کننده است که از واحدهای به هم پیوسته‌ی چندلایه‌ای تشکیل شده است [۲].

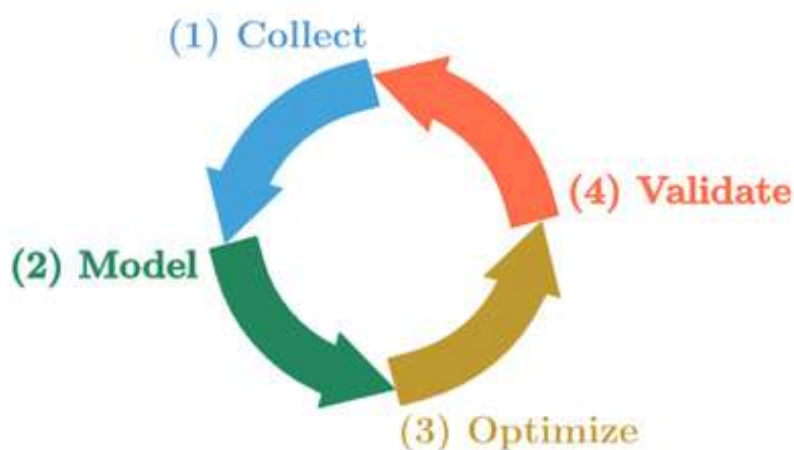
در حوزه‌ی کاتالیز، شبکه‌های عصبی مصنوعی (ANN) با موفقیت برای پیش‌بینی بازده واکنش‌ها به کار رفته‌اند. گونای و ییلدریم^۹ با استفاده از داده‌های آزمایشگاهی اکسیداسیون کاتالیستی CO بر روی $\text{Au/Al}_2\text{O}_3$ ، مدلی برای آموزش یک ANN جهت پیش‌بینی میزان تبدیل CO توسعه دادند. به طور مشابه، شمر و همکارانش^{۱۰} شبکه‌ی عصبی‌ای را توسعه دادند که تبدیل متان در فرایند ریفورمینگ خشک^{۱۱} را بر اساس ترکیب کاتالیست، روش آماده‌سازی و شرایط عملیاتی پیش‌بینی می‌کرد. مدل آن‌ها در نهایت توانست خطای پیش‌بینی کمتر از ۱۵٪ را ثبت کند [۴].

با توجه به اهمیت صنعتی فرآیند اکسیداسیون SO_2 ^{۱۲}، این واکنش به عنوان نمونه‌ی موردی انتخاب شده است. این مدل

وظیفه دارد میزان تبدیل SO_2 به SO_3 را بر اساس ترکیب کاتالیست و شرایط عملیاتی پیش‌بینی کند. سپس، یک بهینه‌سازی چندهدفه برای شناسایی ترکیباتی که حداکثر تبدیل SO_2 و بیشترین بهره‌وری را دارند، در عین کمینه‌سازی هزینه‌ی کاتالیست، انجام دهد.

چرخه بهبود مدل و آینده پژوهش

شکل ۱ چهار مرحله از روش پیشنهادی را نشان می‌دهد. در مرحله اول، مقالات علمی حاوی داده‌های قابل استفاده شناسایی می‌شوند. به طور ایده‌آل، یک مقاله باید متغیرهای ترکیبی (مانند اجزای فاز فعال و پایه)، متغیرهای عملیاتی (مانند دما، فشار، سرعت فضایی، ترکیب خوراک) و همچنین یک یا چند معیار عملکردی مانند تبدیل، انتخاب‌پذیری، بهره‌وری را گزارش کند.



شکل ۱- مراحل روش پیشنهادی برای مدل‌سازی و بهینه‌سازی طراحی کاتالیست [۴]

به کار گرفته می‌شود تا راه‌حل‌هایی (ترکیب مشخصی از کاتالیزور تحت یک مجموعه معین از شرایط عملیاتی) که بهترین عملکرد را ارائه می‌دهند، شناسایی شوند. بسته به اینکه یک یا چند تابع هدف در نظر گرفته

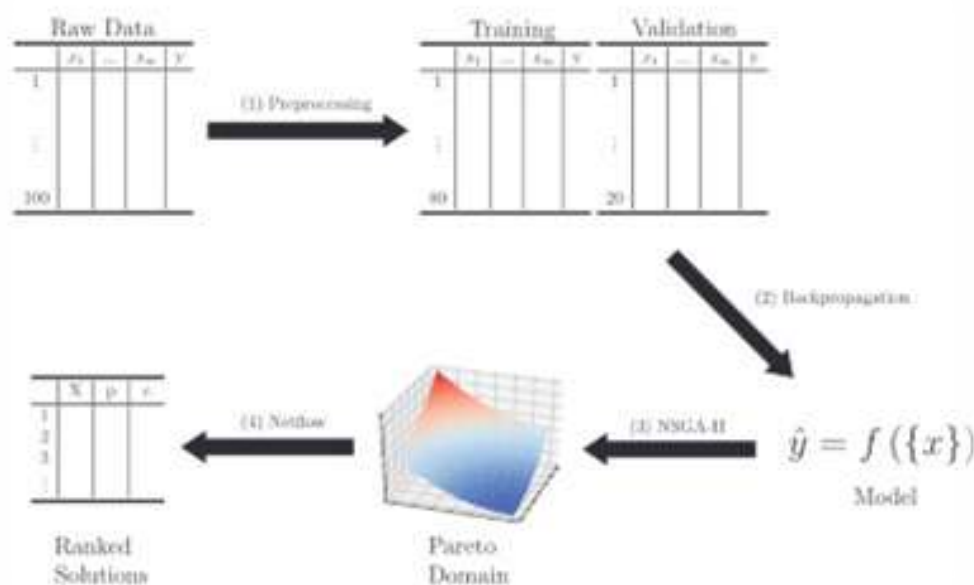
در مرحله دوم، بانک اطلاعاتی به عنوان مجموعه آموزشی برای تنظیم یک شبکه عصبی مصنوعی (ANN) مورد استفاده قرار می‌گیرد. در مرحله سوم، خروجی مدل به عنوان تابع هدف در یک فرآیند بهینه‌سازی

هرگونه اثر ناشی از دامنه داده‌ها حذف شود. مرحله دوم تقسیم‌بندی داده‌ها برای آموزش و اعتبارسنجی می‌باشد. بانک اطلاعاتی که شامل ۱۷۸۴ داده است، به‌صورت تصادفی به نسبت یک چهارم تقسیم شد. ۸۰ درصد داده‌ها (۱۴۱۶) برای آموزش مدل استفاده شده‌است و ۲۰ درصد آن (۳۶۸) برای اعتبارسنجی مدل کنار گذاشته شده‌است. در مرحله سوم برای آموزش مدل‌ها، از الگوریتم پسانتشار خطا^{۱۳} استفاده شده‌است. این الگوریتم یکی از رایج‌ترین الگوریتم‌های یادگیری است، زیرا به‌صورت تدریجی وزن‌ها را بر اساس خطای لایه بعدی به‌روزرسانی می‌کند. در مرحله چهارم دقت مدل با محاسبه ریشه میانگین مربعات خطا^{۱۴} (RMSE) بر روی مجموعه داده‌های آموزشی و اعتبارسنجی ارزیابی شده‌است [۴].

شده‌اند، به ترتیب ممکن است از یک الگوریتم بهینه‌سازی غیرخطی یا یک الگوریتم تکاملی استفاده شود. مرحله چهارم و نهایی شامل اعتبارسنجی تجربی نتایج مدل و فرآیند بهینه‌سازی است. این مرحله نهایی به مرحله اول فرایند بازمی‌گردد [۴].

جزئیات محاسباتی

تمام کارهای محاسباتی در زبان برنامه‌نویسی پایتون انجام شده‌است. شکل ۲ هر مرحله از گردش کار را نشان می‌دهد. اولین مرحله شامل پیش‌پردازش داده‌های خام برای آماده‌سازی آنها جهت آموزش مدل است. متغیرهایی که دامنه داده‌های وسیعی دارند، احتمالاً تأثیر بیشتری بر خروجی مدل نسبت به متغیرهایی با دامنه کوچک‌تر خواهند داشت. برای جبران این مسئله، متغیرهای پیوسته بین ۰ و ۱ مقیاس‌بندی شدند تا



شکل ۲- گردش کار محاسباتی در طراحی و بهینه‌سازی کاتالیزور

۳. محدودسازی دامنه پارتو^{۱۵} با استفاده از الگوریتم ژنتیک^{۱۶}.
۴. رتبه‌بندی راه‌حل‌های دامنه پارتو [۴]

- این شکل فرآیند محاسباتی را در چهار مرحله اصلی نشان می‌دهد:
۱. پیش‌پردازش داده‌های خام.
 ۲. تولید شبکه عصبی مصنوعی.

مطالعه و تحقیقات اخیر

طراحی کاتالیست با استفاده از ترکیبات مختلف فلزی

در طراحی کاتالیست با استفاده از ترکیبات مختلف فلزی (مانند فلزات دوگانه و آلیاژها)، شناسایی و درک هم‌افزایی‌هایی که بین فلزات وجود دارد بسیار دشوار است، زیرا این مواد دارای ساختارهای شیمیایی پیچیده‌ای هستند. محاسبات شیمی کوانتومی نشان می‌دهد که امکان بررسی رابطه شیمیایی بین ترکیب ساختاری آلیاژها و خواص آن‌ها وجود دارد؛ ولی هزینه‌های محاسباتی و زمانی بالا، توسعه مواد کاتالیستی بر پایه ترکیبات فلزی را محدود می‌کند. خوشبختانه، یادگیری ماشین (ML) با توانایی در مدیریت مسائل پیچیده، ثابت کرده است که می‌تواند مشکلات مربوط به سیستم‌های ترکیبی فلزی را به طور مؤثر حل کند. در این زمینه، این فناوری باعث پیشرفت سریع در کشف مواد آلیاژی با عملکرد بالا می‌شود [۱].

برای تأیید این ادعا، سارجنت و همکاران^{۱۷} موفق شدند با استفاده از محاسبات تئوری و یادگیری ماشین، یک الکتروکاتالیست کارآمد از آلیاژ مس-آلومینیوم (Cu-Al) تولید کنند. این محققان ۲۴۴ ساختار مختلف بلورین حاوی مس را طراحی کرده و ۱۲,۲۲۹ سطح و ۲۲۸,۹۶۹ محل جذب را شناسایی کردند. سپس، انرژی‌های جذب CO در سایت‌های مختلف با استفاده از نظریه تابعی چگالی (DFT) محاسبه شد تا یک مجموعه داده برای یادگیری ماشین تولید شود. نتایج پیش‌بینی‌های یادگیری ماشین نشان داد که Cu-Al یکی از امیدوارکننده‌ترین مواد با فعالیت و انتخاب‌پذیری بالا برای کاهش CO₂ است. علاوه بر این، بازده فارادی^{۱۸} این سیستم بیش از ۸۰٪ با چگالی جریان بالا

بود، که بالاترین بازده فارادی به دست آمده تا کنون محسوب می‌شود [۵].

سنتز مواد کاتالیزوری انرژی

کاربرد یادگیری ماشین در ساخت مدل‌های پیش‌بینی‌کننده بر دسترسی به طیف گسترده‌ای از الگوریتم‌های کیفی و کمی برای پیش‌بینی فضای شیمیایی ناشناخته متکی است؛ که این موضوع هسته اصلی کاربرد آن در طراحی کاتالیست، شناسایی مواد بسیاری از حوزه‌های پژوهشی دیگر محسوب می‌شود. فناوری هوش مصنوعی با دقت بالا توانسته است نرخ غربالگری و سنتز مواد کاتالیستی انرژی را بهبود بخشد و دقت آن‌ها را افزایش دهد [۲].

مواد کاتالیستی معمولاً در زمینه‌های مختلف کاربردی، شاخص‌های عملکرد نظری متفاوتی دارند، مانند پتانسیل بیش از حد تئوری در زمینه الکتروکاتالیست‌ها، انرژی جذب واسطه‌های مرتبط با پتانسیل بیش از حد و انرژی در حوزه فتوکاتالیست‌ها.

این پارامترهای ارزیابی عملکرد، معمولاً مانعی شبیه‌سازی شده در انرژی یک واکنش کاتالیستی یا ویژگی‌های شیمی-فیزیکی مواد هستند که از طریق محاسبات قابل‌دستیابی می‌باشند [۱].

چالش‌های کلیدی و آینده یادگیری ماشین

در طراحی کاتالیست

استرهیزن و همکاران^{۱۹} چالش‌های کلیدی مرتبط با ادغام یادگیری ماشین (ML) با آزمایش‌های تجربی را برجسته کرده‌اند. از جمله این چالش‌ها می‌توان به ادغام ML قابل توضیح با داده‌های تجربی، درک پیچیدگی‌های طراحی کاتالیست با استفاده از توصیف‌کننده‌های استخراج شده توسط ML، حجم زیاد مجموعه داده‌ها، دسترسی‌پذیری و قابلیت بازیافت مدل‌های یادگیری ماشین

در کاتالیز است. این مدل‌ها به دلیل دقت بالای پیش‌بینی از لحاظ عملی سودمند هستند، اما تفسیر مستقیم رفتار آن‌ها بسیار دشوار است [۷].

نتیجه‌گیری

ورود هوش مصنوعی و یادگیری ماشین به حوزه طراحی کاتالیست، رویکردی نوین و تحول‌آفرین در علم مواد و مهندسی شیمی ایجاد کرده است. این فناوری‌ها با کاهش هزینه‌های آزمایشگاهی، افزایش دقت پیش‌بینی‌ها و شناسایی ترکیبات جدید، فرآیند کشف کاتالیست‌ها را کارآمدتر ساخته‌اند. با این حال، چالش‌هایی مانند نیاز به داده‌های دقیق، مدل‌سازی صحیح و محدودیت‌های سخت‌افزاری همچنان وجود دارند. توسعه الگوریتم‌های هوشمندتر و همکاری میان دانشمندان علوم داده و شیمی‌دانان می‌تواند به پیشرفت‌های چشمگیری در این زمینه منجر شود. آینده این حوزه نویدبخش کشف کاتالیست‌های کارآمدتر، ارزان‌تر و پایدارتر برای صنایع مختلف خواهد بود.

فاطمه علائی فر

و توضیح تفاسیر خروجی مدل‌ها اشاره کرد. برای حل این چالش‌ها، همکاری نزدیک میان پژوهشگران نظری و تجربی ضروری است. بر اساس پیش‌بینی‌ها، احتمال افزایش علاقه پژوهشی به کاربرد یادگیری ماشین در زمینه کاتالیز ناهمگن در آینده زیاد است. تقریباً قطعی به نظر می‌رسد که با توجه به پیچیدگی چالش‌های موجود در این حوزه (مانند کشف روابط میان ساختار، مکانیزم و واکنش‌پذیری در کاتالیست‌های چندجزئی، پلاسمایی-کاتالیستی و الکتروکاتالیستی، تحلیل داده‌های میکروسکوپی و طیف‌سنجی)، روش‌های آزمایشگاهی سنتی به‌تنهایی قادر به حل این مسائل نیستند. یادگیری ماشین، با ظرفیت بالای خود، امکانات گسترده‌ای برای حل این مشکلات فراهم می‌کند [۶].

موارد موفقیت اولیه ML در تسریع تحقیقات و توسعه در حوزه‌های مختلف، امیدوارکننده است. با این حال، کاربرد یادگیری ماشین در تولید دانش جدید و ارائه فرضیات علمی همچنان محدود است. استریت و همکاران^{۲۰} اشاره کرده‌اند که دلیل اصلی این محدودیت اتکای بیش از حد به مدل‌های جعبه سیاه

¹ ML (Machine Learning)

² Density functional theory functionals

³ Interatomic potentials

⁴ Quantum algorithms

⁵ Gaussian process models

⁶ Neural Networks

⁷ post-hoc analysis methods

⁸ Artificial neural networks

⁹ Gunay and Yildirim

¹⁰ Sener et al

¹¹ Dry Reforming

¹² Oxidation

¹³ Backpropagation

¹⁴ Root mean square error

¹⁵ Pareto domain

¹⁶ Genetic algorithm

¹⁷ Sargent et al

¹⁸ Faraday efficiency

¹⁹ Esterhuizen et al

²⁰ Strieth et al



پیش‌بینی دمای انتقال شیشه‌ای پلیمرها با استفاده از چارچوب یادگیری ماشین

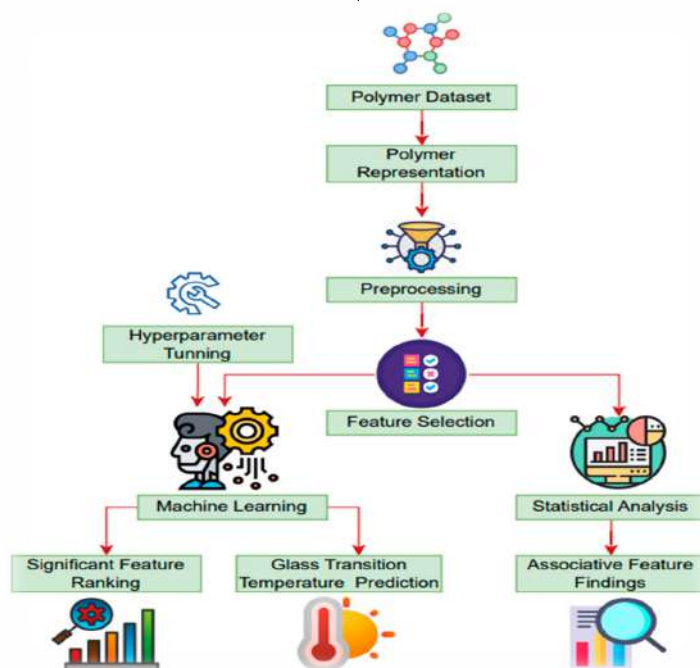
مقدمه

پلیمرها به عنوان موادی با ساختار مولکولی متنوع، نقش بسیار مهمی در صنایع مختلف از جمله بسته‌بندی، خودروسازی و پزشکی ایفا می‌کنند [۱، ۲]. یکی از ویژگی‌های کلیدی پلیمرها، دمای انتقال شیشه‌ای (T_g) است که تأثیر قابل توجهی بر رفتار مکانیکی و کاربردی آن‌ها دارد. دمای انتقال شیشه‌ای به محدوده دمایی اطلاق می‌شود که در آن پلیمر از حالت شیشه‌ای به حالت انعطاف‌پذیرتر تغییر می‌کند. این ویژگی برای تعیین سازگاری پلیمرها با نیازهای خاص صنعتی، ضروری است [۳].

در حالی که روش‌های سنتی مانند تحلیل گرمایی و مکانیکی برای اندازه‌گیری T_g به کار

می‌روند، این روش‌ها اغلب زمان‌بر و هزینه‌بر هستند. در این میان، یادگیری ماشین (ML)^۲ به عنوان ابزاری نوین و قدرتمند در پیش‌بینی این ویژگی‌ها، مورد توجه قرار گرفته است [۴].

هدف این مقاله، ارائه چارچوبی جامع برای پیش‌بینی دمای انتقال شیشه‌ای پلیمرها با استفاده از تکنیک‌های یادگیری ماشین است. این مطالعه علاوه بر ارائه مدل‌های پیش‌بینی، به بررسی تأثیر ویژگی‌های مختلف مولکولی بر T_g پرداخته و نقشه‌ای برای طراحی پلیمرهای جدید پیشنهاد می‌دهد. جریان کاری این پژوهش در شکل ۱ نمایش داده شده است [۵].



شکل ۱- چارچوب یادگیری ماشین برای پیش‌بینی دمای انتقال شیشه پلیمری [۵]

روش‌های مرسوم پیش‌بینی دمای انتقال

شیشه‌ای پلیمرها

این روش‌ها شامل تکنیک‌های تجربی، مدلسازی‌های تئوری، و رویکردهای مبتنی بر داده هستند که هر کدام نقاط قوت و ضعف خاص خود را دارند.

روش‌های تجربی

روش‌های تجربی شامل ابزارهایی مانند کالری‌سنجی پویشی تفاضلی (DSC)^۳، تحلیل گرمایی مکانیکی (TMA)^۴ و تحلیل حرارتی تفاضلی (DTA)^۵ هستند. این روش‌ها به‌طور گسترده در آزمایشگاه‌ها برای اندازه‌گیری T_g استفاده می‌شوند و داده‌های دقیقی ارائه می‌دهند. با این حال، این روش‌ها زمان‌بر و پرهزینه هستند و نیازمند تجهیزات پیشرفته و نیروی متخصص هستند [۳].

مدلسازی‌های تئوری

رویکردهای تئوری شامل استفاده از شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی (MD)^۶ و مدل‌های مونت کارلو (MC)^۷ می‌شود. این روش‌ها برای ارائه بینش‌های عمیق در مورد ساختارهای مولکولی و تأثیر آن‌ها بر خواص مواد به‌کار می‌روند. اگرچه این مدل‌سازی‌ها اطلاعات مفیدی ارائه می‌دهند، اما اغلب به محاسبات سنگین و پیچیده نیاز دارند که محدودیت‌هایی در کاربرد عملی آن‌ها ایجاد کند [۶].

رویکردهای مبتنی بر داده

در سال‌های اخیر، روش‌های مبتنی بر داده با استفاده از تکنیک‌های یادگیری ماشین و هوش مصنوعی، به ابزاری قدرتمند برای پیش‌بینی خواص پلیمرها تبدیل شده‌اند. این روش‌ها شامل الگوریتم‌هایی مانند جنگل تصادفی (RF)^۸، رگرسیون بردار پشتیبان (SVR)^۹، و شبکه‌های عصبی مصنوعی (ANNs)^{۱۰} هستند. این تکنیک‌ها

قادر به شناسایی الگوهای پنهان در داده‌های بزرگ و کشف روابط غیرخطی میان متغیرها هستند [۵].

مقایسه روش‌ها

با مقایسه این رویکردها، روش‌های مبتنی بر داده به‌دلیل توانایی در کاهش زمان و هزینه‌ها، همچنین دقت بالای پیش‌بینی، جایگاه ویژه‌ای در پژوهش‌های اخیر پیدا کرده‌اند.

یادگیری ماشین در پیش‌بینی دمای انتقال

شیشه‌ای پلیمرها

پیشرفت‌های اخیر در حوزه یادگیری ماشین و کاربردهای آن در علوم مواد، تحولی بنیادین در پیش‌بینی خواص پیچیده‌ای همچون دمای انتقال شیشه‌ای پلیمرها ایجاد کرده است. این تکنیک‌ها امکان تحلیل داده‌های بزرگ و کشف روابط غیرخطی میان متغیرهای مؤثر بر T_g را نیز فراهم آورده‌اند [۷].

چارچوب کلی یادگیری ماشین برای پیش‌بینی T_g

در رویکردهای یادگیری ماشین برای تحلیل داده‌های پلیمری، ابتدا ویژگی‌های مولکولی و شیمیایی پلیمرها به‌صورت عددی کدگذاری می‌شوند. پس از آن، داده‌ها تحت فرآیند پیش‌پردازش قرار گرفته که شامل حذف نویز، استانداردسازی و انتخاب ویژگی‌های مرتبط است. همچنین، برای بهبود کارایی و کاهش پیچیدگی، از روش‌هایی مانند حذف ویژگی‌های کم‌تنوع و انتخاب ویژگی مبتنی بر همبستگی (نظیر ضریب همبستگی پیرسون^{۱۱}) بهره گرفته می‌شود. در ادامه، مدل‌سازی با استفاده از الگوریتم‌های مختلف یادگیری ماشین مانند جنگل تصادفی، بوستینگ گرادیانی^{۱۲} و شبکه‌های عصبی مصنوعی انجام می‌شود. به‌منظور دستیابی به بیشترین دقت، فرایارامترهای این مدل‌ها

با استفاده از تکنیک‌هایی مانند جستجوی شبکه‌ای بهینه‌سازی می‌شوند [5].

الگوریتم‌های کلیدی در پیش‌بینی Tg

برای مدل‌سازی و پیش‌بینی خواص پلیمرها، از الگوریتم‌های مختلف یادگیری ماشین استفاده می‌شود. شبکه‌های عصبی مصنوعی به دلیل توانایی بالا در مدل‌سازی روابط غیرخطی پیچیده، ابزار قدرتمندی برای تحلیل خواص مواد هستند. در مواردی که داده‌ها ساختار پیچیده‌تری دارند، می‌توان از معماری‌های پیشرفته‌تر مانند شبکه‌های عصبی کانولوشنی (CNNs)^{۱۳} برای تحلیل داده‌های فضایی یا تصویری و شبکه‌های بازگشتی (RNNs)^{۱۴} برای داده‌های ترتیبی یا زمانی استفاده کرد. در کنار این شبکه‌ها، الگوریتم جنگل تصادفی نیز با بهره‌گیری از مجموعه‌ای از درخت‌های تصمیم، دقت پیش‌بینی را افزایش داده و برای داده‌هایی با تعداد زیاد ویژگی‌ها بسیار مؤثر است. همچنین، روش بوستینگ گرادیانی با تمرکز بر کاهش خطاهای مدل‌های قبلی، عملکرد کلی مدل را بهبود بخشیده و در شرایطی که بین متغیرها همبستگی بالایی وجود دارد، بسیار کاربردی است [۸].

موانع و چالش‌ها

اگرچه یادگیری ماشین مزایای بسیاری دارد، اما محدودیت‌هایی مانند نیاز به داده‌های بزرگ، پیچیدگی محاسباتی و خطر بیش‌برازش^{۱۵} نیز

باید مدنظر قرار گیرند. پژوهش‌های آینده می‌توانند با استفاده از روش‌های پیشرفته‌تر، مانند یادگیری انتقالی^{۱۶} و شبکه‌های گراف^{۱۷}، برای این محدودیت‌ها غلبه کنند [۸].

مرور مطالعات برجسته در پیش‌بینی دمای

انتقال شیشه‌ای با یادگیری ماشین

در سال‌های اخیر، بسیاری از پژوهش‌ها به بررسی قابلیت یادگیری ماشین در پیش‌بینی دمای انتقال شیشه‌ای (Tg) پلیمرها پرداخته‌اند. در این بخش، برخی از مهم‌ترین مطالعات در این زمینه مرور و تحلیل می‌شوند.

استفاده از توصیف‌گرهای مولکولی

مطالعات اولیه در این حوزه، مانند کار Uddin و همکاران، از توصیف‌گرهای شیمیایی نظیر اثرانگشت مولکولی و ویژگی‌های ساختاری برای نمایش داده‌های پلیمر استفاده کرده‌اند. این پژوهش‌ها نشان داده‌اند که مدل‌های مبتنی بر جنگل تصادفی و گرادیان تقویتی می‌توانند دقت بالایی در پیش‌بینی Tg داشته باشند. به عنوان مثال، الگوریتم RF در این مطالعات، با ارائه ضریب تعیین (R^2) بالای ۰.۸۵، عملکرد قابل توجهی را ثبت کرده است. در جدول ۱ نتایج مربوط به ضریب تعیین (R^2) برای مقایسه عملکرد الگوریتم‌های مختلف یادگیری ماشین ارائه شده که بیانگر توانایی هر مدل در تبیین واریانس داده‌های هدف می‌باشد [5].

جدول ۱- نتایج الگوریتم‌های یادگیری ماشین با استفاده از توصیف‌گرهای مولکولی [5]

معیار / الگوریتم	DT	SVR	AB	KNN	XGB	RF	LGB	HGB	ETR
R^2	0.690	0.652	0.679	0.805	0.841	0.850	0.857	0.851	0.867

شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی پرداخته است. این مطالعه نشان داد که استفاده از داده‌های شبیه‌سازی‌شده در کنار داده‌های تجربی می‌تواند مدل‌هایی با دقت بیشتر

ترکیب روش‌های یادگیری ماشین با شیمی محاسباتی

پژوهشی دیگر توسط Lee و همکاران به ترکیب تکنیک‌های یادگیری ماشین با

مزایای استفاده از یادگیری ماشین

یادگیری ماشین تحولی چشمگیر در حوزه طراحی مواد و بهینه‌سازی فرمولاسیون‌های پلیمری ایجاد کرده است. افزون بر دقت، یادگیری ماشین با صرفه‌جویی در زمان و هزینه، جایگزینی کارآمد برای روش‌های تجربی محسوب می‌شود. ML بدون نیاز به تجهیزات پیشرفته و فرآیندهای زمان‌بر، به نتایج قابل اعتماد دست می‌یابد. برای ارزیابی دقت مدل‌های پیش‌بینی، دماهای انتقال شیشه‌ای پیش‌بینی‌شده توسط مدل با مقادیر تجربی مقایسه شده است. همان‌طور که در شکل ۲ مشاهده می‌شود، پراکندگی داده‌ها نشان‌دهنده نزدیکی زیادی بین نتایج پیش‌بینی و مقادیر واقعی بوده که عملکرد مطلوب مدل را تأیید می‌کند [5].

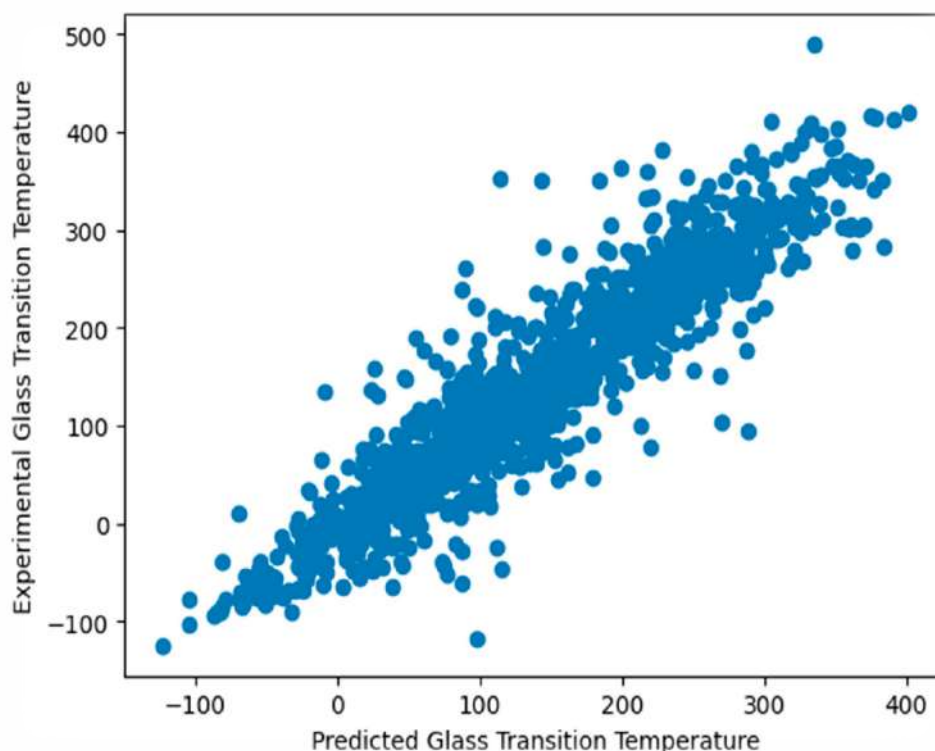
ایجاد کند. علاوه بر این، روش‌های انتخاب ویژگی مانند حذف بازگشتی ویژگی‌ها (RFE)^{۱۸} نقش مهمی در بهبود عملکرد مدل‌ها ایفا کرده‌اند [۸].

استفاده از معماری‌های پیشرفته شبکه‌های عصبی

در پژوهشی دیگر، استفاده از شبکه‌های عصبی عمیق (DNNs)^{۱۹} برای تحلیل داده‌های پیچیده و بزرگ مقیاس پلیمرها بررسی شده است. این مدل‌ها با استفاده از لایه‌های متعددی که به کشف الگوهای پیچیده در داده‌ها می‌پردازند، توانستند دقت پیش‌بینی را نسبت به مدل‌های ساده‌تر بهبود بخشند [۹].

تحلیل نتایج و یافته‌های کلیدی

مرور مطالعات پیشین نشان‌دهنده گسترش قابل توجه کاربرد یادگیری ماشین در پیش‌بینی دمای انتقال شیشه‌ای پلیمرها است. این پیشرفت‌ها، فرصت‌های جدیدی را برای طراحی بهینه مواد و کاهش محدودیت‌های روش‌های سنتی فراهم کرده‌اند.



شکل ۲- نمودار پراکندگی مقایسه‌ای بین دماهای انتقال شیشه‌ای پیش‌بینی‌شده و تجربی پلیمرها [5]

محدودیت‌ها و چالش‌ها

در کاربرد مدل‌های یادگیری ماشین در حوزه پلیمرها، چالش‌هایی وجود دارد که باید به آن‌ها توجه ویژه‌ای شود. یکی از مهم‌ترین این چالش‌ها، نیاز به داده‌های گسترده و با کیفیت است. کیفیت داده‌ها نقش تعیین‌کننده‌ای در عملکرد مدل‌های یادگیری ماشین دارد چرا که وجود نویز یا کمبود داده‌های دقیق می‌تواند منجر به کاهش دقت پیش‌بینی شود [5].

فرصت‌های آینده

برای ارتقای عملکرد مدل‌ها و گسترش دامنه کاربرد آن‌ها در حوزه‌های علمی و صنعتی، رویکردهای متعددی می‌توانند به صورت مکمل مورد استفاده قرار گیرند. یکی از این رویکردها، ادغام داده‌های چندمنبعی است. ترکیب داده‌های تجربی با داده‌های شبیه‌سازی شده، نظیر نتایج حاصل از دینامیک مولکولی، نه تنها دقت مدل‌ها را افزایش می‌دهد بلکه امکان تحلیل سیستم‌های پیچیده‌تر را نیز فراهم می‌سازد. در کنار این، بهره‌گیری از الگوریتم‌های پیشرفته‌تر همچون یادگیری انتقالی و شبکه‌های عصبی گراف، می‌تواند بر چالش‌هایی مانند محدودیت داده‌های کوچک و پیچیدگی‌های ساختاری غلبه کند و قدرت تعمیم‌پذیری مدل‌ها را ارتقا بخشد. طراحی مدل‌هایی با قابلیت

تفسیر بهتر و پایداری بیشتر می‌تواند اعتماد پژوهشگران و صنایع را نسبت به استفاده از این ابزارهای هوشمند افزایش دهد [8].

جمع‌بندی

استفاده از یادگیری ماشین در پیش‌بینی دمای انتقال شیشه‌ای پلیمرها، نه تنها روشی نوآورانه برای جایگزینی فرآیندهای سنتی و زمان‌بر محسوب می‌شود، بلکه به توسعه‌ی چارچوب‌هایی مؤثر برای طراحی مواد پیشرفته نیز کمک کرده است. مرور مطالعات نشان می‌دهد که ترکیب داده‌های مولکولی با الگوریتم‌های یادگیری ماشین، امکان پیش‌بینی دقیق‌تر خواص پلیمرها را فراهم کرده و درک ما از رفتار این مواد را گسترش می‌دهد. در نهایت، این پژوهش‌ها نشان دهنده این بوده که یادگیری ماشین، نه تنها در کاهش هزینه‌ها و زمان مورد نیاز برای توسعه مواد نقش دارد، بلکه می‌تواند به پیشرفت فناوری‌های مرتبط با مواد در حوزه‌های گوناگون از جمله پزشکی، محیط‌زیست و انرژی کمک کند. بنابراین، یادگیری ماشین نه صرفاً یک ابزار محاسباتی، بلکه یک عامل تحول در علم مواد بوده که افق‌های تازه‌ای را در این زمینه گشوده است.

علی طاهری استاد

¹ Transition Glass

² Machine Learning (ML)

³ Differential Scanning Calorimetry (DSC)

⁴ Thermomechanical Analysis (TMA)

⁵ Differential Thermal Analysis (DTA)

⁶ Molecular Dynamics (MD)

⁷ Monte Carlo (MC)

⁸ Random Forest (RF)

⁹ Support Vector Regression (SVR)

¹⁰ Artificial neural network (ANN)

¹¹ Pearson Correlation Coefficient (PCC)

¹² Gradient Boosting

¹³ Convolutional Neural Network (CNN)

¹⁴ Recurrent Neural Networks (RNNs)

¹⁵ Overfitting

¹⁶ Transfer Learning

¹⁷ Graph Neural Networks

¹⁸ Recursive Feature Elimination (RFE)

¹⁹ Deep Neural Network (DNN)

برای دسترسی به منابع، بارکد را اسکن کنید.



مدیریت انرژی در ریزشبکه‌ها با استفاده از کنترل پیش‌بینی مدل محور توانمند شده با هوش مصنوعی

چکیده

ریزشبکه‌ها به عنوان یکی از اجزای کلیدی در تحول شبکه‌های قدرت مدرن، نقش مهمی در بهینه‌سازی مدیریت انرژی، افزایش پایداری و کاهش هزینه‌های عملیاتی ایفا می‌کنند. با توجه به افزایش وابستگی به منابع انرژی تجدیدپذیر، مدیریت بهینه انرژی در این سیستم‌ها به دلیل نوسانات بار و تولید انرژی، چالش برانگیز است. کنترل پیش‌بینی مدل محور (MPC) به دلیل قابلیت پیش‌بینی آینده و بهینه‌سازی تصمیمات کنترلی، یک روش کارآمد در مدیریت انرژی ریزشبکه‌ها محسوب می‌شود. با این حال، مدل‌های سنتی MPC دارای محدودیت‌هایی نظیر نیاز به مدل‌های دقیق و هزینه محاسباتی بالا هستند. ترکیب این روش با هوش مصنوعی می‌تواند با بهبود پیش‌بینی‌ها، افزایش انعطاف‌پذیری و کاهش هزینه‌های عملیاتی، بهره‌وری سیستم را افزایش دهد. این مقاله به بررسی روش‌های ترکیب MPC با AI، چالش‌های پیاده‌سازی، مزایا و مسیرهای آینده این حوزه می‌پردازد.

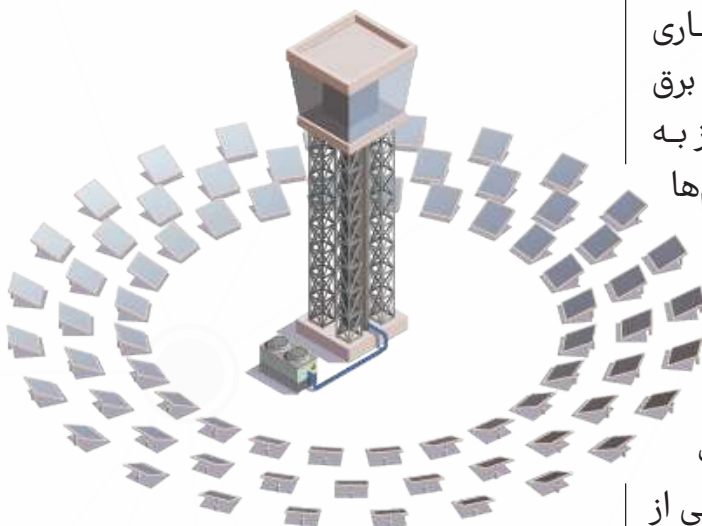
مقدمه

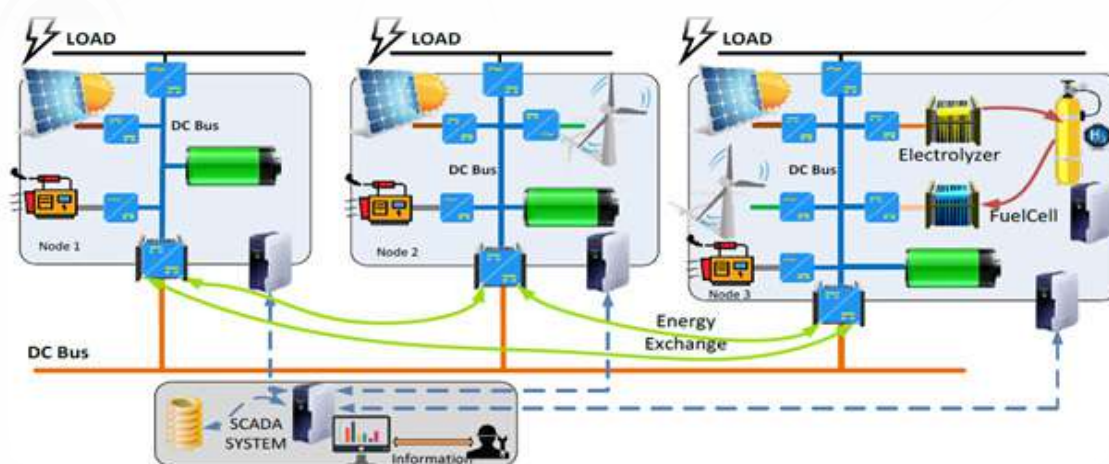
ریزشبکه‌ها سیستم‌های الکتریکی خودمختاری هستند که می‌توانند مستقل از شبکه برق سراسری فعالیت کنند یا در صورت نیاز به شبکه اصلی متصل شوند. این سیستم‌ها معمولاً شامل منابع انرژی تجدیدپذیر (مانند خورشیدی و بادی)، سیستم‌های ذخیره‌سازی انرژی، بارهای متغیر و سامانه‌های مدیریت هوشمند هستند. به دلیل ماهیت متغیر تولید و مصرف در این شبکه‌ها، کنترل انرژی بهینه یکی از

چالش‌های اساسی در عملکرد آنها محسوب می‌شود.

کنترل پیش‌بین مدل محور (MPC) به عنوان یکی از روش‌های مدرن کنترل، قابلیت پیش‌بینی وضعیت آینده سیستم را فراهم کرده و بر اساس این پیش‌بینی، استراتژی‌های بهینه‌ای را برای بهره‌برداری انرژی تعیین می‌کند. این روش به‌خصوص در سیستم‌های پیچیده‌ای مانند ریزشبکه‌ها که دارای منابع تولید و بارهای متغیر هستند، کارایی بالایی دارد. با این حال، محدودیت‌هایی مانند نیاز به مدل‌های دقیق و حجم بالای محاسباتی، کارایی این روش را کاهش می‌دهد.

در این میان، هوش مصنوعی (AI) به‌عنوان یک فناوری توانمند در پیش‌بینی و تصمیم‌گیری، می‌تواند عملکرد MPC را بهبود ببخشد. الگوریتم‌های یادگیری ماشین، یادگیری عمیق و یادگیری تقویتی می‌توانند با تحلیل داده‌های گسترده و در نظر گرفتن شرایط متغیر، استراتژی‌های کنترلی بهینه‌تری ارائه دهند. این مقاله به بررسی نقش هوش مصنوعی در بهینه‌سازی MPC برای مدیریت انرژی در ریزشبکه‌ها می‌پردازد.





شکل ۱- توپولوژی ریزشبکه چند گرهی [۱]

نقش مؤثری در بهبود عملکرد MPC ایفا کند [۲، ۱].

نقش هوش مصنوعی در بهبود عملکرد MPC

هوش مصنوعی با ارائه مدل‌های داده‌محور و تصمیم‌گیری هوشمند، می‌تواند محدودیت‌های سنتی MPC را کاهش دهد. برخی از مهم‌ترین کاربردهای AI در این حوزه عبارتند از:

- پیش‌بینی دقیق‌تر بار و تولید انرژی: الگوریتم‌های یادگیری ماشین مانند شبکه‌های عصبی مصنوعی (ANN) و جنگل تصادفی (RF) می‌توانند با تحلیل داده‌های تاریخی و شرایط محیطی، دقت پیش‌بینی‌ها را افزایش دهند.
- کاهش نیاز به مدل‌های دقیق: در بسیاری از موارد، مدل‌سازی دقیق سیستم‌های پیچیده دشوار است. یادگیری عمیق (DL) می‌تواند بدون نیاز به مدل‌سازی ریاضی پیچیده، رفتار سیستم را تخمین بزند.
- کنترل و تصمیم‌گیری بهینه با یادگیری تقویتی (RL): یادگیری تقویتی به سیستم اجازه می‌دهد تا از طریق تعامل با محیط، استراتژی‌های کنترلی بهینه را بدون نیاز به مدل‌سازی دقیق بیاموزد.

کنترل پیش‌بین مدل محور (MPC) در مدیریت انرژی ریزشبکه‌ها

MPC یک روش کنترل پیشرفته است که از طریق حل یک مسئله بهینه‌سازی تکراری، مسیرهای بهینه برای کنترل متغیرهای سیستم را تعیین می‌کند. این روش از سه مرحله اساسی تشکیل شده است:

۱. مدل‌سازی سیستم: در این مرحله، دینامیک سیستم از طریق معادلات ریاضی توصیف می‌شود.
۲. پیش‌بینی آینده MPC: بر اساس مدل ارائه‌شده، وضعیت آینده سیستم را برای یک بازه زمانی مشخص پیش‌بینی می‌کند.
۳. بهینه‌سازی و کنترل: یک الگوریتم بهینه‌سازی، مجموعه‌ای از تصمیمات کنترلی را برای حداقل‌سازی هزینه یا بهینه‌سازی بهره‌وری سیستم تولید می‌کند.

استفاده از MPC در ریزشبکه‌ها، علی‌رغم کارایی بالا، چالش‌هایی را به همراه دارد. به عنوان مثال، در شرایطی که منابع انرژی تجدیدپذیر به شدت تحت تأثیر تغییرات محیطی هستند، نیاز به مدل‌های دقیق‌تر و به‌روزرسانی مداوم مدل‌های MPC احساس می‌شود. در اینجا، هوش مصنوعی می‌تواند

مروری بر کاربرد هوش مصنوعی در جذب و ذخیره‌سازی کربن

چکیده

انتشار گازهای گلخانه‌ای موجب تغییرات جدی اقلیمی در سطح جهانی شده است و ضروری است که انتشار CO_2 کاهش یابد. جذب و ذخیره‌سازی کربن (CCS) به عنوان یکی از مهم‌ترین تکنولوژی تضمینی برای کاهش انتشار کربن در حال ظهور است. یادگیری ماشین (ML) یکی از سریع‌ترین حوزه‌های فناوری هوشمند در عصر حاضر، به عنوان ابزاری مهم برای پیش‌بینی تقاضا با استفاده از علوم کامپیوتر و آمار داده‌ها شناخته می‌شود. نتایج مطالعه نشان داد که الگوریتم‌های ML مانند شبکه عصبی مصنوعی (ANN) و شبکه عصبی کانولوشنی (CNN) به طور گسترده‌ای استفاده می‌شوند (عمدتاً برای پیش‌بینی خواص فیزیکی، ارزیابی پایداری مکانیکی و نظارت بر مهاجرت و نشت گاز CO_2 در حین ذخیره‌سازی آن). الگوریتم‌های یادگیری عمیق (DL)، مانند شبکه مولد رقابتی (GAN) و حافظه کوتاه‌مدت طولانی (LSTM)، نتایج خوبی در نظارت بر مهاجرت و نشت CO_2 نشان داده‌اند.

مقدمه

غلظت دی‌اکسید کربن (CO_2) در جو از زمان انقلاب صنعتی افزایش یافته و این روند در ۱۰۰ سال گذشته شتاب بیشتری گرفته است. صنایع انرژی و نیروگاه‌ها به عنوان اصلی‌ترین منابع انتشار CO_2 شناخته می‌شوند. با وجود تلاش‌های فراوان کشورها برای گذار انرژی، همچنان تقاضا برای زغال‌سنگ و نفت غیرقابل انکار است. در این شرایط، افزایش دمای متوسط جهانی به $0/1$ درجه سانتی‌گراد و تحقق تعهدات Net Zero تا سال ۲۰۵۰ بسیار

چالش‌برانگیز است. جذب و ذخیره‌سازی کربن (CCS) یکی از استراتژی‌های کلیدی برای تحقق انتشار صفر کربن است و به عنوان راه‌حلی مؤثر برای کاهش کربن در صنایع شناخته می‌شود.

استفاده از ML برای حل مسائل علمی مرتبط با تحقیقات CCS به عنوان یک راهکار بالقوه برای پیشرفت فناوری CCS شناخته می‌شود. ML مجموعه‌ای غنی از الگوریتم‌ها و مدل‌ها، شامل شبکه‌های عصبی مصنوعی (ANN)، ماشین بردار پشتیبان (SVM)، جنگل تصادفی (RF)، یادگیری عمیق (DL) و ... را توسعه داده است. این الگوریتم‌های ML به طور گسترده در تحقیقات CCS استفاده شده و نتایج خوبی به دست آورده‌اند، از جمله شبیه‌سازی فرآیند جذب CO_2 و پیش‌بینی ظرفیت جذب، پیش‌بینی پارامترهای فیزیکی و مدل‌سازی مخزن در ذخیره CO_2 ، تحلیل نشت CO_2 و ...

با وجود کاربردهای اکتشافی الگوریتم‌های ML در زمینه‌های مختلف تحقیقاتی CCS، هنوز شکاف تحقیقاتی در زمینه طبقه‌بندی و خلاصه‌سازی سیستماتیک این کاربردها از منظر علوم زمین وجود دارد. در این مطالعه با توجه به نیازهای توسعه فناوری CCS و محبوبیت الگوریتم‌های ML، ابتدا اصول روش‌های کلاسیک ML و وضعیت کاربرد آن‌ها در CCS معرفی شده است. سپس، اجرای روش‌های ML در زمینه‌های اصلی تحقیقاتی CCS، از جمله پیش‌بینی خواص فیزیکی فاز غنی از CO_2 ، فشار مخزن، تحلیل تغییر شکل و یکپارچگی، نظارت بر مهاجرت و نشت CO_2 و ارزیابی احتمال موفقیت

خروجی نگاشت می‌کند. در ANN، CCS برای پیش‌بینی اشباع CO_2 ، حلالیت CO_2 ، چگالی و ویسکوزیته در مخلوط‌های گاز-مایع چندجزئی و برآزش معادلات حالت (EoS) برای پیش‌بینی خواص ترمودینامیکی استفاده می‌شود. همچنین می‌توان از ANN برای شبیه‌سازی ویژگی‌های زیرسطحی در مقیاس مخزن با استفاده از داده‌های نفوذپذیری و تخلخل سنگ‌های مغزه استفاده کرد. برای مخازن کربناته که داده‌های مغزه در دسترس نیست، ترکیب ANN با روش‌های زمین‌آماري به مدل‌سازی زمین‌شناسی مخازن و تحلیل نشت CO_2 کمک می‌کند.

ماشین بردار پشتیبان (SVM)

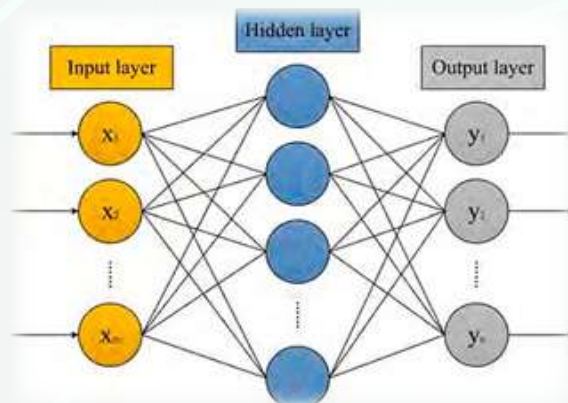
ماشین بردار پشتیبان (SVM) توسط Vapnik برای حل مسائل طبقه‌بندی بر اساس نظریه یادگیری آماری پیشنهاد شده است. اصل SVM این است که بردارهای ورودی را از طریق یک تابع کرنل به فضای ویژگی‌های با ابعاد بالا نگاشت کرده و بهترین ابرصفحه تقسیم‌کننده را بیابد. این ابرصفحه داده‌ها را به درستی طبقه‌بندی کرده و فاصله کل داده‌ها از ابرصفحه را به حداکثر می‌رساند.

پروژه‌های CCS مشخص شده است. در نهایت، چالش‌ها و چشم‌اندازهای آینده از منظر علوم زمین ارائه شده است که می‌تواند ایده‌هایی برای کاربرد و اکتشاف روش‌های ML در CCS فراهم کند.

روش‌های یادگیری ماشین

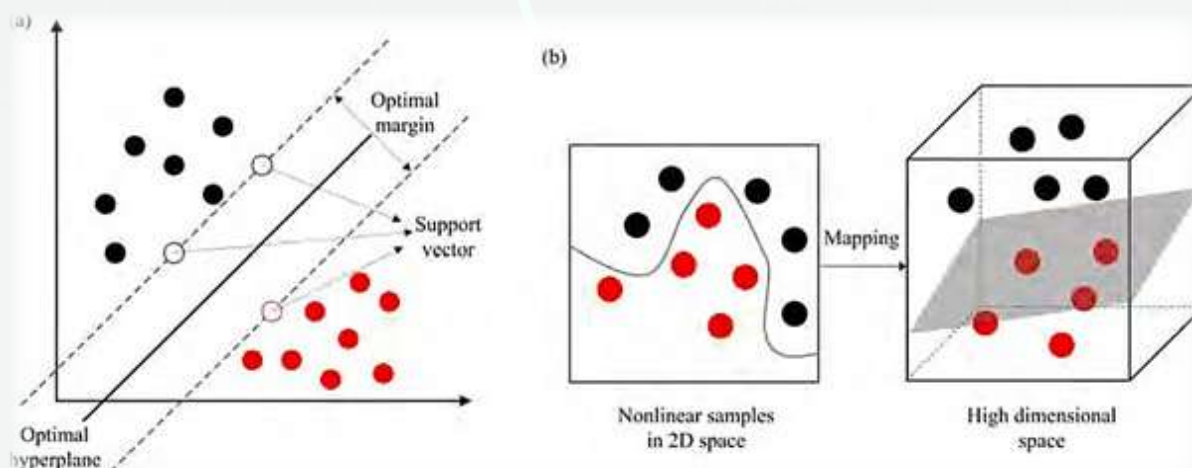
شبکه عصبی مصنوعی (ANN)

شبکه عصبی مصنوعی (ANN) یک مدل شبیه‌سازی شده است که شبکه عصبی مغز انسان را برای پردازش اطلاعات تقلید می‌کند. واحد پایه در ANN نورون است که شامل پورتهای ورودی و خروجی می‌باشد. ANN شامل سه لایه: ورودی، پنهان و خروجی مطابق شکل ۱ است.



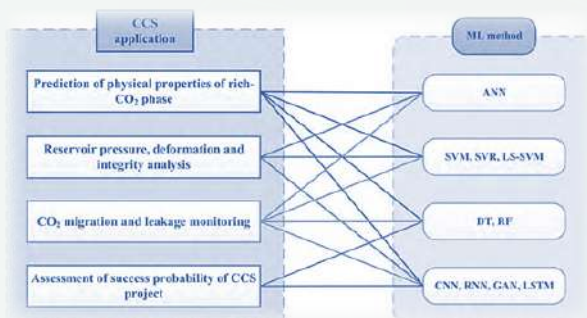
شکل ۱- ساختار ANN

این شبکه داده‌ها را از لایه ورودی دریافت کرده و نتایج پردازش را از لایه خروجی ارائه می‌دهد و پارامترهای ورودی را به متغیرهای



شکل ۲- نمودار شمایک SVM بر اساس: الف) آموزش طبقه‌بندی نمونه‌ها در فضای دوبعدی ب) طبقه‌بندی نمونه‌های غیرخطی در فضای چندبعدی.

زود هنگام زلزله در سایت‌های ذخیره‌سازی CO_2 و تحلیل الگوهای زمانی و مکانی داده‌ها کاربرد دارند.



شکل ۴- ارتباط بین روش‌های یادگیری ماشین (ML) و کاربردهای ذخیره‌سازی و جداسازی کربن (CCS)

کاربرد یادگیری ماشین در جذب و ذخیره‌سازی کربن

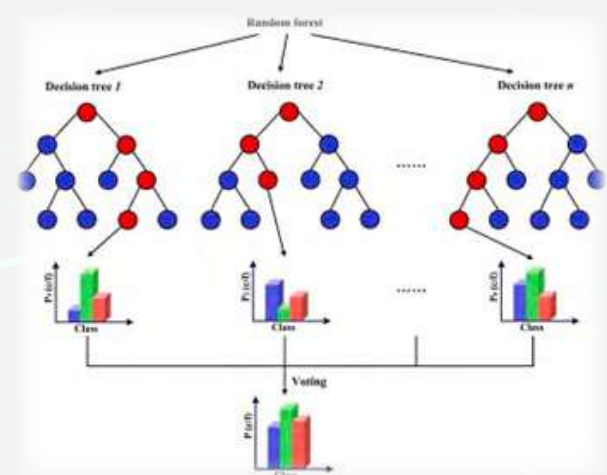
یادگیری ماشین نقش کلیدی در بهینه‌سازی فرآیند جذب و ذخیره‌سازی کربن (CCS) ایفا می‌کند، به‌ویژه در بخش ذخیره‌سازی زمین‌شناسی دی‌اکسید کربن (CCS). این فناوری با استفاده از روش‌های مختلف یادگیری ماشین، امکان ذخیره‌سازی ایمن و کارآمد CO_2 در سازندهای زمین‌شناسی مانند آبخوان‌های شور عمیق، مخازن نفت و گاز و لایه‌های زغالی را فراهم می‌کند.

در بخش پیش‌بینی خواص فیزیکی فاز غنی از CO_2 ، یادگیری ماشین با به‌کارگیری مدل‌هایی مانند شبکه‌های عصبی مصنوعی (ANN)، ماشین‌بردار پشتیبان (SVM) و شبکه‌های عصبی پیچشی (CNN)، به مدل‌سازی تداخل و نفوذپذیری سنگ‌ها بر اساس داده‌های آزمایشگاهی و چاه‌نگاری می‌پردازد. همچنین، روش‌هایی مانند LS-SVM و یادگیری ماشین ترکیبی برای پیش‌بینی دقیق‌تر انحلال CO_2 در شرایط مختلف به‌کار گرفته می‌شوند. علاوه بر این، شبکه‌های عصبی مصنوعی در تحلیل خواص ترمودینامیکی مخلوط‌های CO_2 مورد استفاده قرار می‌گیرند.

در CCS، SVM برای شناسایی عوامل خطر اصلی موثر بر پروژه‌ها و تحلیل حساسیت به عدم قطعیت پارامترها استفاده می‌شود. همچنین این روش برای تخمین حداقل فشار امتزاجی (MMP) در EOR با CO_2 بسیار مفید است.

جنگل تصادفی (RF)

جنگل تصادفی (RF) یک الگوریتم ترکیبی شامل تعداد زیادی درخت تصمیم‌گیری است که با یکدیگر ترکیب می‌شوند. این روش برای ارزیابی موفقیت احتمالی پروژه‌های CCS و همچنین بررسی امکان‌سنجی فناوری‌های ترکیبی مانند تبدیل زیست‌توده و فرآیندهای حرارتی استفاده می‌شود. همچنین RF به تحلیل روابط متغیرها و شبیه‌سازی فرایند تصمیم‌گیری کمک می‌کند.



شکل ۳- شمای جنگل تصادفی

یادگیری عمیق (DL)

یادگیری عمیق (DL) نوع پیشرفته‌ای از ANN است که شامل لایه‌های پنهان متعدد است و توانایی کشف ساختارهای پیچیده در داده‌های با ابعاد بالا را دارد.

در CCS، DL برای پیش‌بینی خواص فیزیکی مخازن، ردیابی مهاجرت CO_2 و نظارت بر نشت در زمان واقعی استفاده می‌شود. مدل‌های DL همچنین برای هشدار

ریسک‌های احتمالی مانند نشت CO_2 ، ناپایداری سنگ‌پوش و تحریک زمین‌لرزه‌ها را تحلیل و مدیریت کرد. همچنین، توسعه پایگاه داده‌های جامع با کمک یادگیری ماشین، امکان تجزیه و تحلیل دقیق‌تر ریسک‌ها و ارزیابی داده‌های پروژه را فراهم می‌کند. علاوه بر این، روش‌هایی مانند جنگل تصادفی (RF) در مطالعه تأثیر سیاست‌های اجتماعی و مزایای اقتصادی بر پذیرش عمومی پروژه‌های CCS به‌کار گرفته می‌شوند.

نتیجه‌گیری

یادگیری ماشین به‌عنوان ابزاری پیشرفته در پیش‌بینی، تحلیل ریسک و بهبود فرآیندهای جذب و ذخیره‌سازی کربن نقش مهمی ایفا می‌کند. تلفیق الگوریتم‌های ML با داده‌های تجربی، شبیه‌سازی‌های فیزیکی و پیش‌بینی‌های مرتبط با CCS، به افزایش کارایی، ایمنی و مقیاس‌پذیری این فناوری در مقابله با تغییرات آب‌وهوایی کمک شایانی می‌کند.

صبا شاکر

یادگیری ماشین در تحلیل فشار مخزن، تغییرشکل و یکپارچگی سازندها نیز کاربرد دارد. این فناوری با مدل‌سازی تغییرات فشار منفذی ناشی از تزریق CO_2 و بررسی تأثیر آن بر پایداری مکانیکی سنگ، به طراحی بهینه چاه‌های تزریق و تولید کمک می‌کند. الگوریتم‌هایی مانند SVR برای تخمین فشار شکست و پیش‌بینی تغییرات ساختاری مخزن استفاده می‌شوند.

در زمینه پایش مهاجرت و نشت CO_2 ، مدل‌های یادگیری عمیق مانند CNN، GAN و LSTM برای پیش‌بینی مسیرهای مهاجرت CO_2 و شناسایی مناطق احتمالی نشت به‌کار می‌روند. این مدل‌ها با پردازش داده‌های ژئوفیزیکی و الکترومغناطیسی، امکان نظارت مؤثر بر تغییرات مخزن و تشخیص سریع نشت‌های احتمالی را فراهم می‌کنند.

یادگیری ماشین در ارزیابی احتمال موفقیت پروژه‌های CCS نیز نقش مهمی ایفا می‌کند. با استفاده از مدل‌هایی مانند شبکه‌های بیزین (BN) و درخت تصمیم (DT)، می‌توان

برای دسترسی به منابع، بارکد را اسکن کنید.



معرفی‌ها- معرفی زمینه‌های فعالیت مهندسان شیمی در زمینه هوش مصنوعی:

1. Schweidtmann, A. M. , Esche, E. , Fischer, A. , Kloft, M. , Repke, U. , Sager, S. , & Mitsos, A. (2021). Machine Learning in Chemical Engineering: A Perspective. *Chemie Ingenieur Technik*, 93(12), 2029-2039. <https://doi.org/10.1002/cite.202100083>
2. Cheng Chen, Yuhuan Hu, Marimuthu Karupiah, Priyan Malarvizhi Kumar, Artificial intelligence on economic evaluation of energy efficiency and renewable energy technologies, *Sustainable Energy Technologies and Assessments*, Volume 47, 2021, 101358, ISSN 2213-1388, <https://doi.org/10.1016/j.seta.2021.101358>
3. Lynda Andeobu, Santoso Wibowo, Srimannarayana Grandhi, Artificial intelligence applications for sustainable solid waste management practices in Australia: A systematic review, *Science of The Total Environment*, Volume 834, 2022, 155389, ISSN 0048-9697, <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2022.155389>
4. Pyzer-Knapp, E. O. , Pitera, J. W. , Staar, P. W. J. et al. Accelerating materials discovery using artificial intelligence, high performance computing and robotics. *npj Comput Mater* 8, 84 (2022). <https://doi.org/10.1038/s41524-022-00765-z>

مقالات- کاربرد هوش مصنوعی در طراحی کاتالیست:

1. Eko, A. S. , Catalyst Design: A Narrative Study on Artificial Intelligence. *Int J Recent Res Phys Chem Sci (IJRRPCS)*, 2024. 10: p. 113-140.
2. Mu, Y. and L. Sun, Catalyst optimization design based on artificial neural network. *Asian J. Res. Comput. Sci.* , 2022. 13(2): p. 1-12.
3. Elton, D. C. , et al. , Deep learning for molecular design—a review of the state of the art. *Molecular Systems Design & Engineering*, 2019. 4(4): p. 828-849.
4. Boucheikhchoukh, A. , J. Thibault, and C. Fauteux-Lefebvre, Catalyst design using artificial intelligence: SO₂ to SO₃ case study. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 2020. 98(9): p. 2016-2031.
5. Wang, Z. , et al. , Machine learning guided dopant selection for metal oxide-based photo-electrochemical water splitting: the case study of Fe₂O₃ and CuO. *Advanced Materials*, 2022. 34(10): p. 2106776
6. Goldsmith, B. R. , et al. , Machine learning for heterogeneous catalyst design and discovery. 2018.
7. Strieth-Kalthoff, F. , et al. , Machine learning the ropes: principles, applications and directions in synthetic chemistry. *Chemical Society Reviews*, 2020. 49(17): p. 6154-6168.

مقالات- پیش‌بینی دمای انتقال شیشه‌ای پلیمرها با استفاده از چارچوب یادگیری ماشین:

1. M. Z. Rahman, M. Rahman, T. Mahbub, M. Ashiquzzaman, S. Sagadevan, and M. E. Hoque, "Advanced biopolymers for automobile and aviation engineering applications," *Journal of Polymer Research*, vol. 30, no. 3, p. 106, 2023.
2. G. Satchanska, S. Davidova, and P. D. Petrov, "Natural and synthetic polymers for biomedical and environmental applications," *Polymers*, vol. 16, no. 8, p. 1159, 2024.

3. O. Startsev, Y. M. Vapirov, M. Lebedev, and A. Kychkin, "Comparison of glass-transition temperatures for epoxy polymers obtained by methods of thermal analysis," *Mechanics of Composite Materials*, vol. 56, no. 2, pp. 227-240, 2020.
4. J. N. Kumar, Q. Li, and Y. Jun, "Challenges and opportunities of polymer design with machine learning and high throughput experimentation," *Mrs Communications*, vol. 9, no. 2, pp. 537-544, 2019.
5. M. J. Uddin and J. Fan, "Interpretable Machine Learning Framework to Predict the Glass Transition Temperature of Polymers," *Polymers*, vol. 16, no. 8, p. 1049, 2024. [Online]. Available: <https://www.mdpi.com/2073-4360/16/8/1049>.
6. R. Huang, "A Review on the Glass Transition of Polymer on Surface and in the Thin Film," *Advanced Materials Research*, vol. 1002, pp. 17-22, 2014.
7. W. Ge, R. De Silva, Y. Fan, S. A. Sisson, and M. H. Stenzel, "Machine Learning in Polymer Research," *Advanced Materials*, p. 2413695, 2025.
8. Y. Zhao, R. J. Mulder, S. Houshyar, and T. C. Le, "A review on the application of molecular descriptors and machine learning in polymer design," *Polymer Chemistry*, vol. 14, no. 29, pp. 3325-3346, 2023.
9. C. Liu and H. Su, "Prediction of glass transition temperature of oxide glasses based on interpretable machine learning and sparse data sets," *Materials Today Communications*, vol. 40, p. 109691, 2024.

مقالات- مدیریت انرژی در ریزشبکه‌ها

1. Trigkas, D. , et al. , Energy Management in Microgrids Using Model Predictive Control Empowered with Artificial Intelligence. *Chemical Engineering Transactions*, 2022. 94: p. 961-966.
2. Hasani, A. , H. Heydari, and M. S. Golsorkhi, Enhancing microgrid performance with AI-based predictive control: Establishing an intelligent distributed control system. *IET Generation, Transmission & Distribution*, 2024. 18(15): p. 2499-2508.
3. Albarakati, A. J. , et al. , Real-time energy management for DC microgrids using artificial intelligence. *Energies*, 2021. 14(17): p. 5307.

**«نشریه میم»، جایی برای یادگیری، تجربه و به اشتراک
گذاشتن دانش و ایده‌هاست. اگر شما هم علاقه‌مند
به نوشتن، طراحی یا کار رسانه‌ای هستید، منتظر حضور
شما هستیم.**



@mimscientificjournal



mimsj. ut. ac. ir



linkedin. com/company/mim-scientific-journal