

La inteligencia artificial en la Ciencia de Materiales

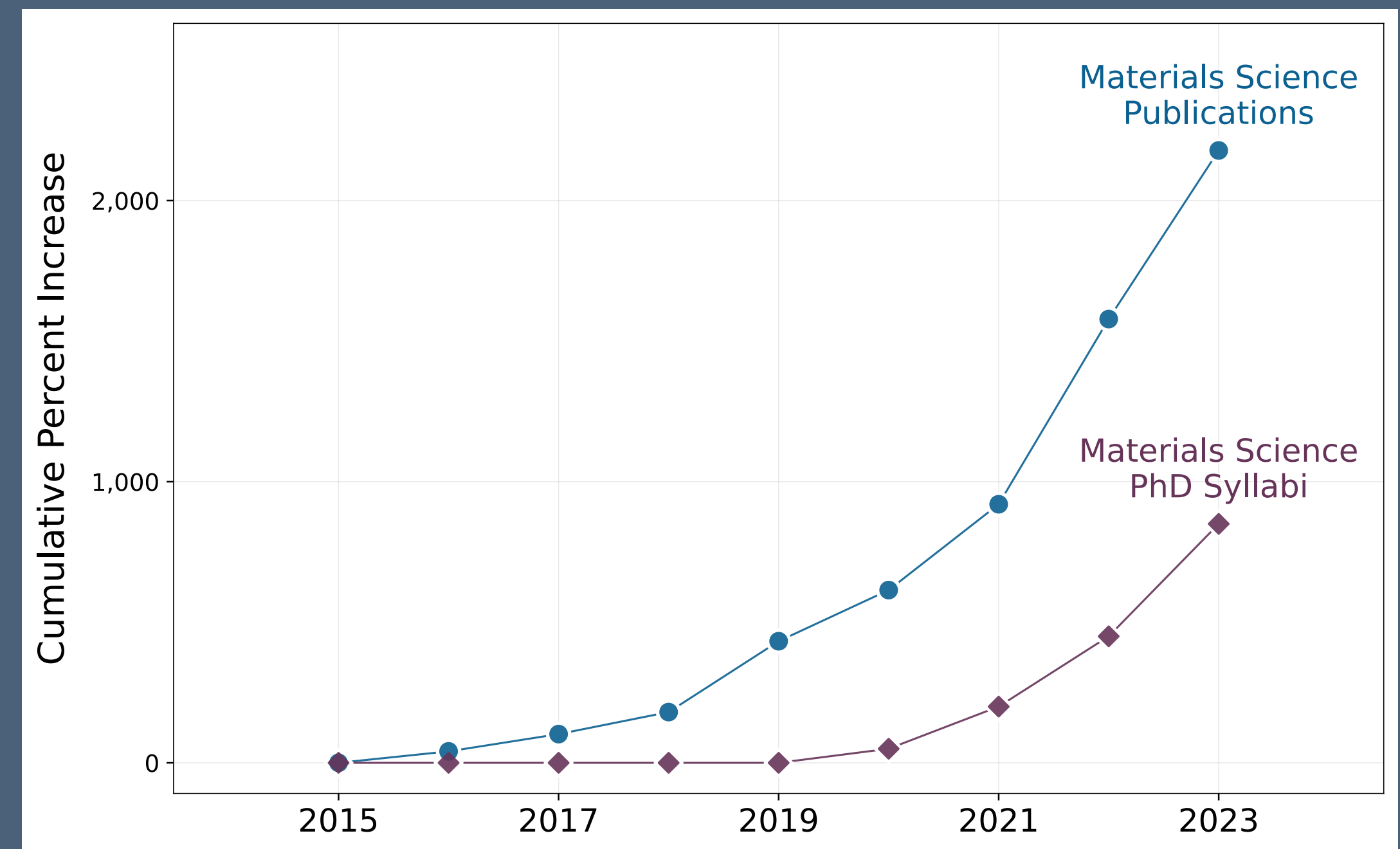
Resultados + reflexiones

Ignacio Romero
Universidad Politécnica de Madrid
Instituto IMDEA Materiales, Madrid

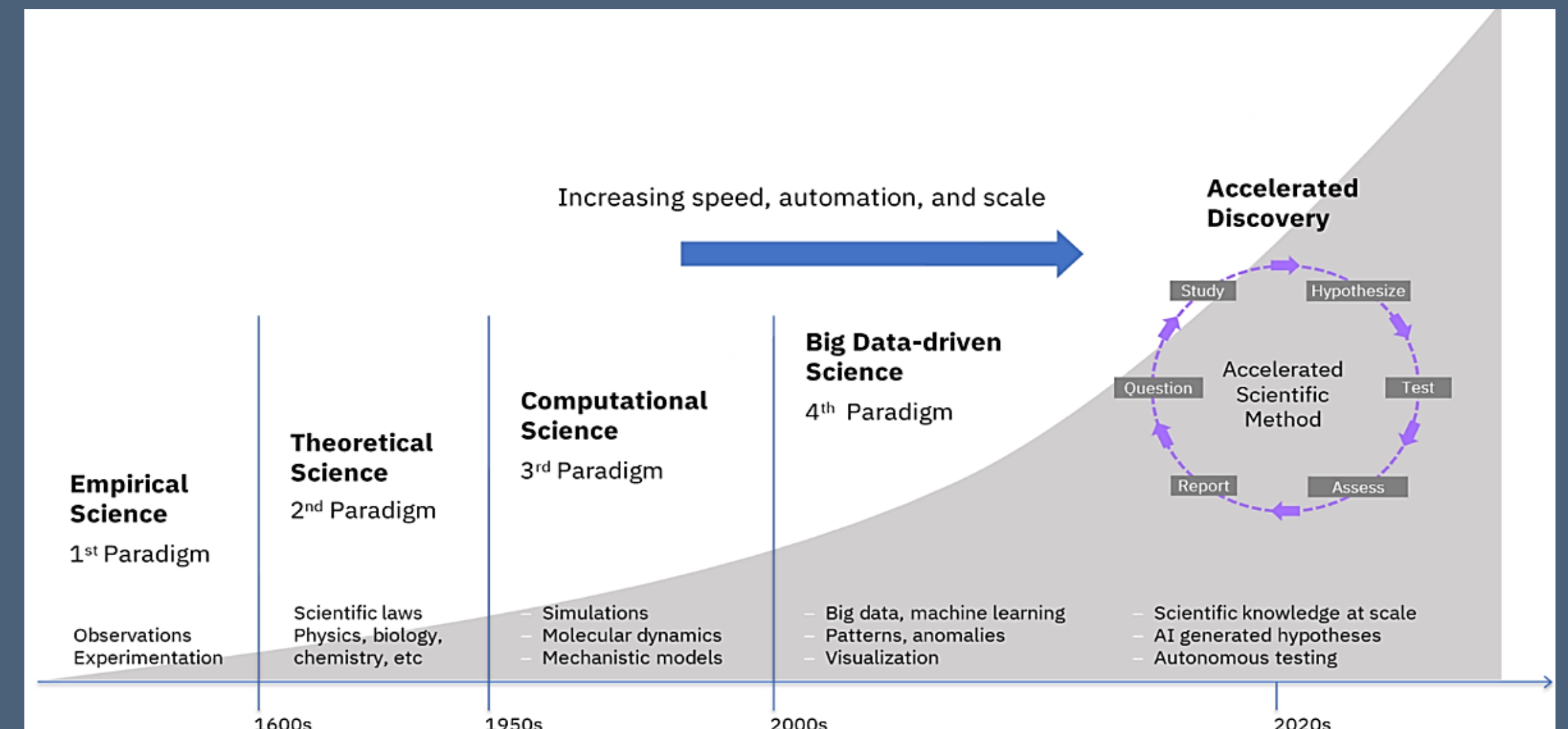


La IA está revolucionando la ciencia y la tecnología y, en particular, la ciencia de materiales.

- Dos áreas de aplicación importantes:
 - Exploración de nuevos materiales
 - Modelado de materiales complejos
- Un ejemplo: diseño de metamateriales
- Algunas reflexiones personales



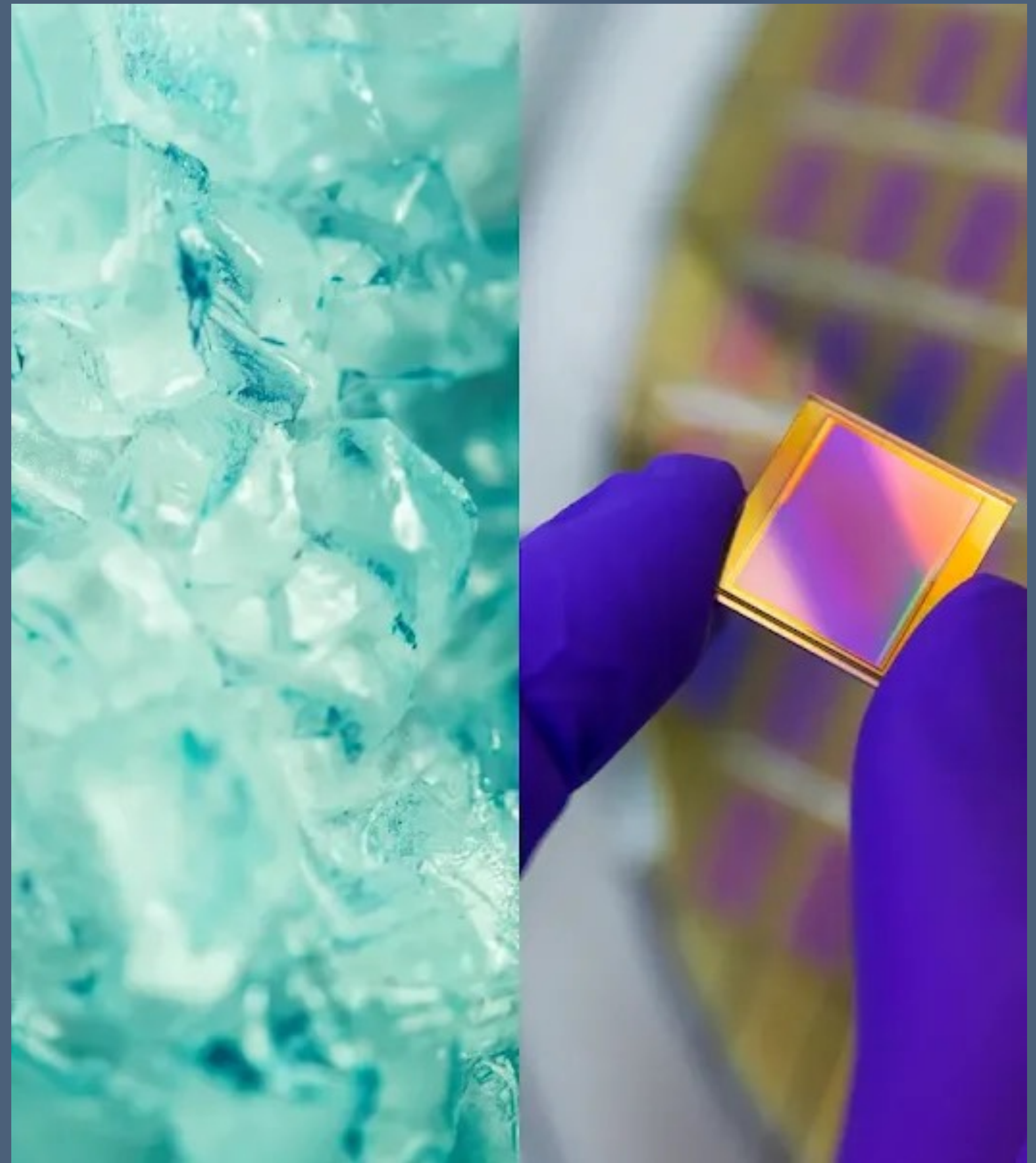
[Toner-Rodgers, MIT, 2024]



[Karande et al. 2022]

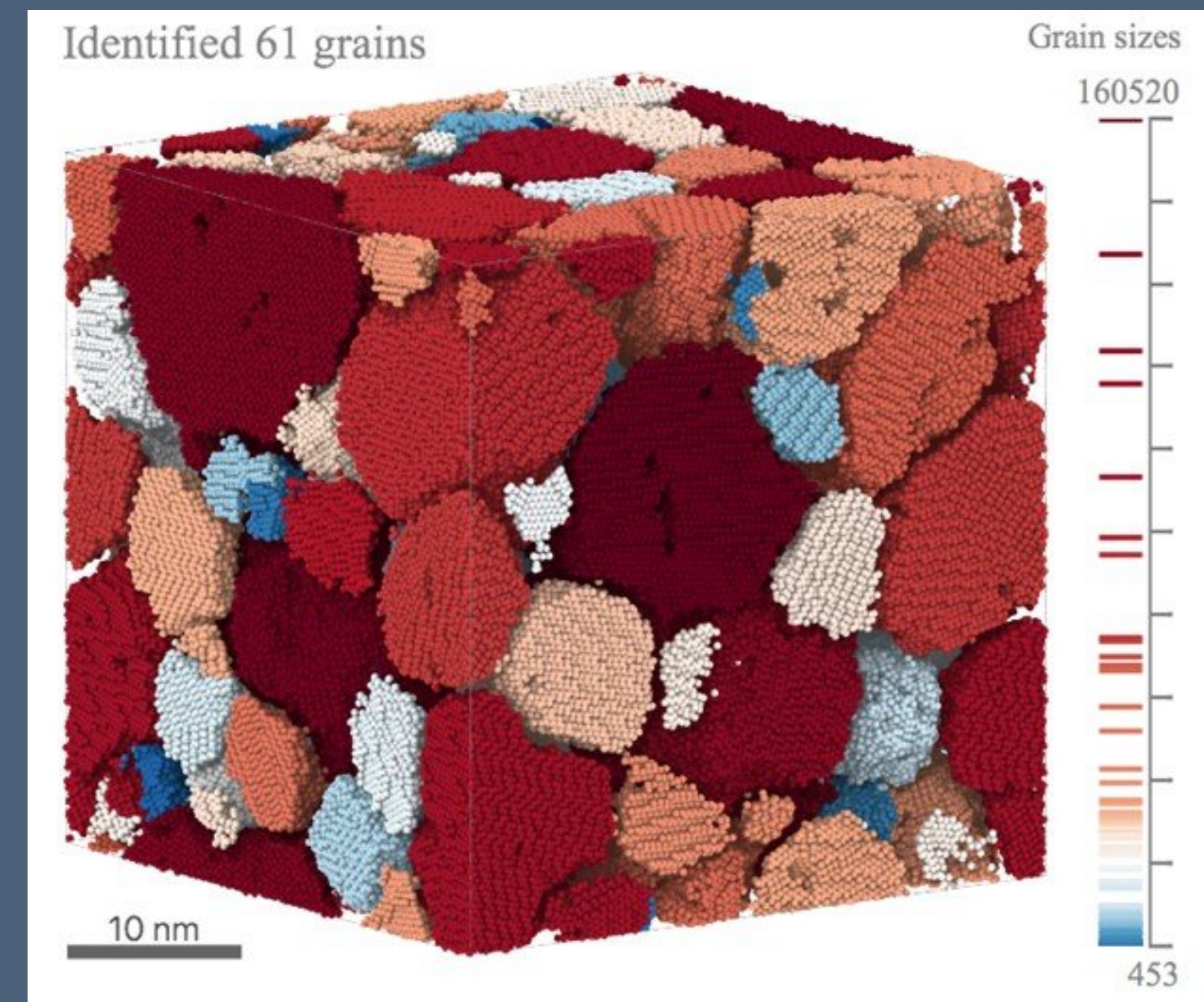
Descubrimiento de nuevos materiales

- Noticia 2024: “La herramienta GNoME encuentra 2.2 millones de nuevos cristales, incluyendo 380.000 materiales estables.”
- Las técnicas de AI ayudan a los científicos a explorar el enorme espacio de posibles materiales.
- Aplicaciones: almacenamiento de energía, biomateriales, materiales sostenibles, multifuncionales, materiales para entornos extremos, ..
- Es un problema algorítmico, donde el desarrollo de software y hardware están avanzando a enorme velocidad.
- Los tiempos de desarrollo pasan de décadas a años.
- Enormes consecuencias económicas para la industria.



Modelado de materiales complejos

- El modelado de materiales requiere el uso de complejas ecuaciones algebraicas y/o diferenciales que representen las interacciones entre tensiones / deformaciones / temperatura / campos electromagnéticos ...
- La IA intenta reemplazar ecuaciones por RRNN entrenadas con enormes bases de datos que “descubren” las interacciones sin necesidad de resolver ecuaciones.
- Proyecto AID4GREENEST (www.aid4greenest.eu)

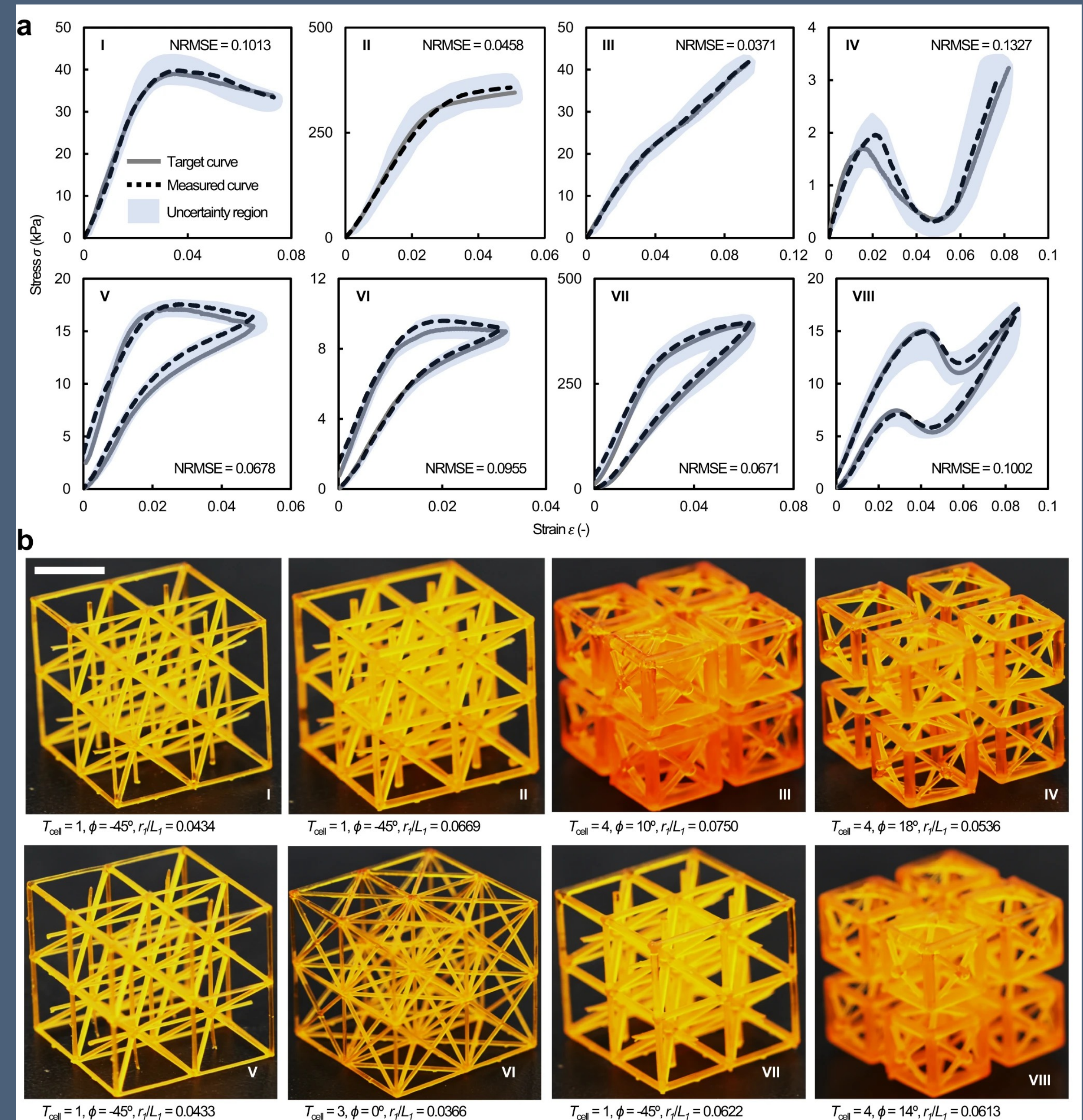


[Argonne National Lab]



Ejemplo: metamateriales

- Estructuras fabricadas con celdas micro/mili-métricas y con propiedades que no existen en la naturaleza
- En una escala mayor parecen materiales y se pueden diseñar para reflejar el sonido, aumentar de tamaño al comprimirse, absorber energía ...
- La IA propone nuevas estructuras, a partir de la respuesta deseada (aprendizaje no supervisado)



Algunas reflexiones

Se puede malinterpretar que no hace falta hacer ciencia, basta con tener datos y la IA se encarga del resto.

1. ¿Y si no se detectan los errores? Es necesario predecir ... pero también tener criterio.
2. Problemas con predicción fuera de rango. Los modelos entrenados con datos no pueden ir más allá del dominio de entrenamiento.
3. Es necesario incorporar las leyes físicas dentro de los modelos. Estas no son aproximables.

Reflexiones:

1. Hacen falta dos nuevos tipos de expertos: Expertos en IA, ML, ciencia de datos + Expertos en ingeniería, ciencia de materiales, que conozcan las limitaciones de la IA y sepan explotar sus oportunidades.
2. Estamos entrando en "territorio desconocido"

La inteligencia artificial en la Ciencia de Materiales

Resultados + reflexiones

Ignacio Romero
Universidad Politécnica de Madrid
Instituto IMDEA Materiales, Madrid

