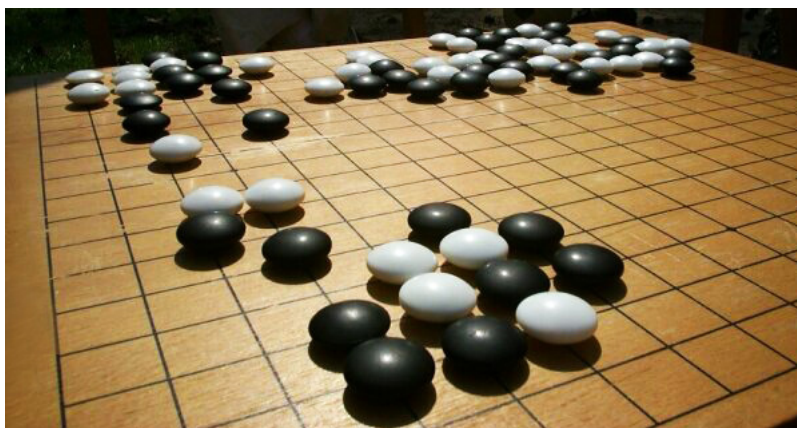


**Sztuczna inteligencja poszukuje
nowych materiałów, cząstek, planet, ...**

Janusz Adamowski



Rysunek 1: Go – najbardziej złożona strategiczna gra planszowa, powstała w Chinach ok. 1100 roku p.n.e.

Sztuczna inteligencja już istnieje.

1 2017 – rok przełomu

27 maja 2017 roku program AlphaGo (Master), stworzony przez firmę DeepMind, należąca do koncernu Google, wygrał w 209 ruchach ostatnią z trzech partii pojedynku gry planszowej go z arcymistrzem świata w tej grze (Ke Jie, Chiny).

Wynik rozgrywki: AlphaGo Master – Ke Jie 3:0.

⇒ moc obliczeniowa komputera użytego w końcowej rozgrywce była **10-krotnie mniejsza** niż komputera użytego w 2016 r. w rozgrywkach z koreańskimi arcymistrzami mistrzami gry go.

Program AlphaGo Master oparty jest na 2 sieciach neuronowych.

W październiku 2017 nowy program AlphaGo Zero (wykorzystujący algorytm samouczenia się) wygrał w grze go z AlphaGo Master w stosunku 100:0.

Pierwsza wygrana komputera z człowiekiem:

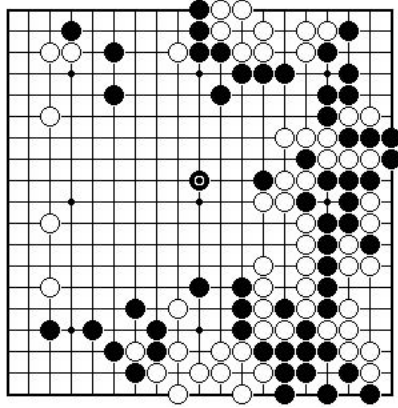
W 1997 r. arcymistrz szachów Garri Kasparow przegrał z komputerem Deep Blue firmy IBM.

Porównanie złożoności szachów i go

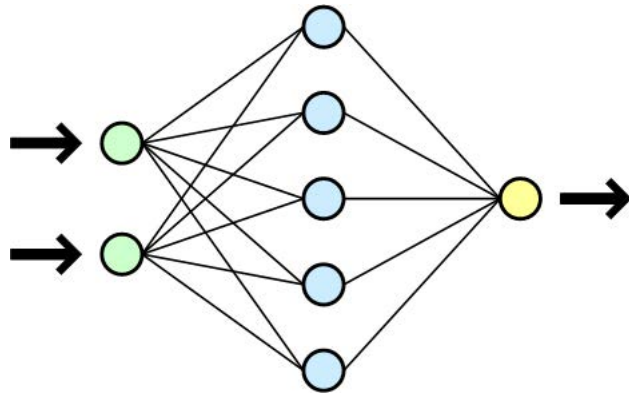
Szachy: liczba możliwych rozgrywek $\sim 10^{120}$

⇒ komputer może przewidzieć (prawie) wszystkie możliwe kombinacje przyszłych ruchów

Go: liczba możliwych rozgrywek $\sim 10^{171}$



Rysunek 2: Schemat rozgrywki go. Plansza zawiera $19 \times 19 = 361$ pól.



Rysunek 3: Schemat blokowy sieci neuronowej.

⇒ komputer nie może przewidzieć wszystkich możliwych kombinacji przyszłych ruchów. Do wygranej potrzebny jest przede wszystkim **instykt, umiejętność uczenia się i odpowiednia strategia**, czyli **inteligencja**.

Sprecyzowania pojęć

- **Sztuczna inteligencja (Artificial Intelligence [AI])** – koncepcja konstrukcji maszyn/komputerów, które są zdolne do wykonywania zadań w sposób inteligentny (smart)
- **Samouczenie się maszyn (Machine Learning [ML])** – zastosowanie AI opierające się na idei, że maszyny/komputery z dostępem do odpowiedniej bazy danych mogą uczyć się same.

2 Poszukiwanie nowych materiałów

Projekt badań

”Use machine learning to find energy materials”
Nature, 7 December 2017
by Edward Sargent, Alán Aspuru-Guzik et al.

Projekt zastosowania algorytmów AI do przeszukania bazy własności materiałów ($\sim 700\,000$ materiałów) w celu znalezienia tych materiałów (**energy materials**), które są odpowiednie do przetwarzania energii promieniowania słonecznego na energię prądu elektrycznego w bateriach słonecznych

⇒ Ponadto poszukiwane będą nowe materiały do budowy bardziej wydajnych ogniw słonecznych na podstawie obliczeń energii całkowitej.

Energetyka przyszłości

Przewidujemy, że – w niezbyt odległej przyszłości – większość energii potrzebnej ludzkości będzie pochodziła z promieniowania słonecznego.

Całkowita moc wykorzystywana przez ludzi wynosi ~ 18 TW,
czyli $\sim 0.02\%$ mocy promieniowania słonecznego docierającego do powierzchni Ziemi.

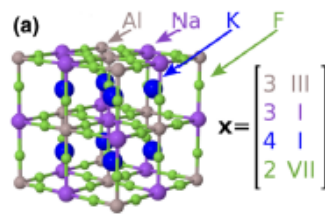
Przykład zakończonych badań naukowych wykonanych przy użyciu algorytmu sztucznej inteligencji

Phys. Rev. Lett. 117, 23 September 2016
”Machine Learning Energies of 2 Million Elpasolite (ABC_2D_6) Crystals” by F.A. Faber et al.
Elpasolit – minerał o strukturze krystalicznej typu AlNaK_2F_6 .



A solar farm floats on a lake that formed after the collapse of a deep coal mine in Huainan, China.

Rysunek 4: Farma słoneczna.



Rysunek 5: Struktura komórki elementarnej elpasolitu.

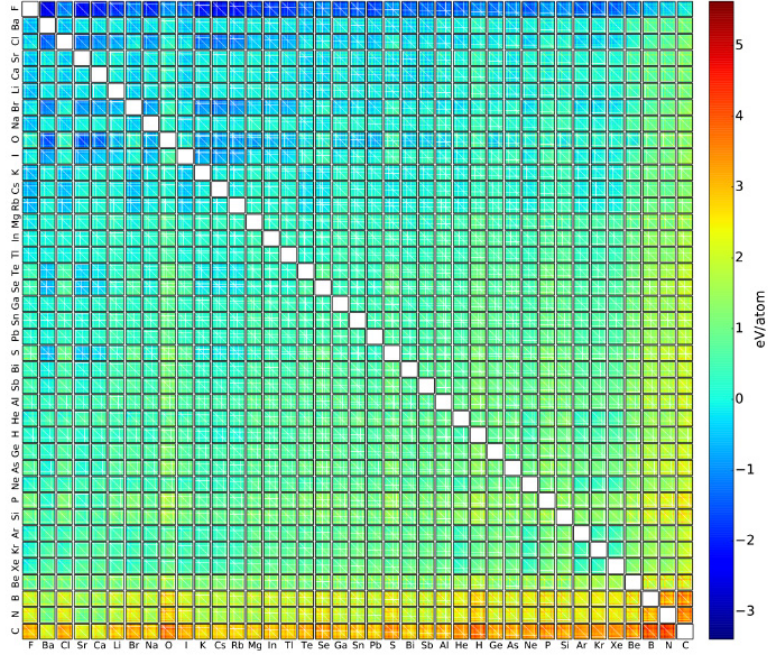


FIG. 2. Formation energies for all 2×10^6 elpasolites made up of all main-group elements up to Bi predicted by the 10×10^3 ML model. The outer vertical and horizontal axis corresponds to the x_4 and x_3 symmetry position, respectively. The inner vertical and horizontal axis corresponds to the x_2 and x_1 symmetry position, respectively. The elemental sequence follows the elpasolite order of Fig. 1(d). The white pixels correspond to subspaces of ternary, binary, or elementary nonelpasolite crystals.

Rysunek 6: Wyniki obliczeń metodą ML.

Niektóre elpasolity, poddane działaniu promieniowania jonizującego, emitują promieniowanie widzialne.

⇒ zastosowanie w przyrządach scyntylicyjnych

Model ML został zastosowany do obliczenia energii wiązania **wszystkich** $\sim 2 \times 10^6$ **elpasolitów** złożonych z pierwiastków grup głównych (aż do Bi).

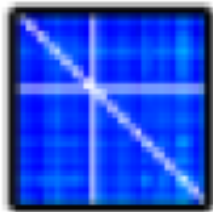
Energia całkowita obliczona metodą ML

$$E(\mathbf{x}) = \sum_I^{N'} \epsilon_I + \sum_i^N \alpha_i e^{-d_i/\sigma} \quad (1)$$

ϵ_I = średnia energia atomu w komórce elementarnej $N' =$ liczba atomów w komórce elementarnej, dla elpasolitów $N' = 10$ $\{\alpha_i\}$ = zbiór wag σ = skala układu $d_i = \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|$

Parametry we wzorze (1) zostały dobrane na "treningowym" zbiorze $N = 10^4$ przypadków.

Wyniki obliczeń zgadzają się z dokładnością $\simeq 0.1$ eV/atom z wynikami eksperymentów (dokładność lepsza od DFT).



Rysunek 7: Powiększony pojedynczy kwadrat z poprzedniego rysunku.

Obliczenia na tak dużą skalę byłyby niewykonalne przy użyciu innych metod, np. DFT.

3 Zastosowanie sztucznej inteligencji w nauce

Zastosowanie sztucznej inteligencji do poszukiwań nowych:

- materiałów fotowoltaicznych,
- materiałów nadprzewodzących,
- związków chemicznych,
- cząstek,
- planet poza Układem Słonecznym,
- ...

Program NASA poszukiwania nowych planet poza Układem Słonecznym

Kosmiczny teleskop "Kepler" od 2009 r. zebrał dane o trajektoriach ponad 150000 obiektów kosmicznych, w tym ponad 2500 exoplanet (planet poza Układem Słonecznym).

Analiza tych danych wykonana pod koniec roku 2017 przez sztuczną inteligencję zainstalowaną na komputerach Google'a pozwoliła na **odkrycie 2 nowych exoplanet**.

Odkryto przy tym pierwszy (poza Układem Słonecznym) **układ z 8 planetami**.

Nowe czasopisma naukowe

- Artificial Intelligence (Elsevier)
- Nature Machine Intelligence, Launching January 2019,
Chief Editor – Liesbeth Venema (poprzednio Physics Editor w Nature).
- Nick Bostrom, Oxford University, "Superintelligence: Paths, Dangers, Strategies" (jest także dostępne wydanie polskie)

Nowe tematy badań interdyscyplinarnych

"Zastosowanie algorytmów sztucznej inteligencji do ..."

Temat "Rekonstrukcja śladów typu "downstream" w eksperymencie LHCb metodami inteligencji obliczeniowej"

zgłoszony na Interdyscyplinarne Środowiskowe Studia Doktoranckie FCB przez prof. Piotra Kulczyckiego i dr. hab. Tomasza Szumlaka.

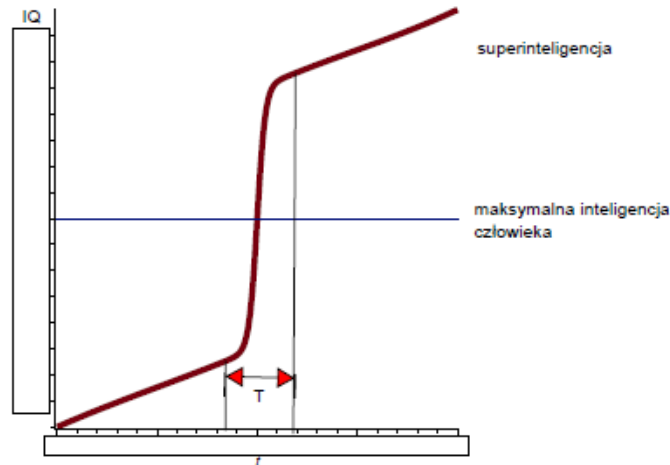
4 Scenariusze na przyszłość

Korzyści

- Rozwiązanie wielu problemów naukowych, szczególnie problemów wielu ciał.
- Zastosowanie algorytmów sztucznej inteligencji do wspomaganie badań naukowych: przeglądanie na bieżąco **wszystkich publikacji naukowych** z zakresu określonej tematyki i wybranie publikacji godnych zastosowania.
- Wspomaganie rozwoju cywilizacji, np.
 - zastosowanie AI w diagnostyce chorób (Nature, 15 March 2018)
 - **samochody autonomiczne (całkowicie kierowane przez komputery)**
- ...

Zagrożenia

- Zastosowanie sztucznej inteligencji do wpływania na **emocje** wyborców: indywidualnie adresowany przekaz informacji/dezinformacji podczas kampanii wyborczej.



Rysunek 8: Przewidywany rozwój sztucznej inteligencji: krzywa przejścia.

- W prowincji Sinciang (Chiny) wprowadzono system inwigilacji elektronicznej 11 mln Ujgurów za pomocą aplikacji zainstalowanej (**obowiązkowo**) na smartfonach wszystkich rdzennych mieszkańców tej prowincji.
- **Nowy wyścig zbrojeń (USA, Rosja, Chiny)**

T = czas przejścia

Krótki czas przejścia $T < \text{rok}$ (mogą to być nawet godziny!!!) – brak możliwości reakcji.

Długi czas przejścia $T \simeq \text{kilka/kilkanaście lat}$ – możliwe rozwiązania: wprowadzenie nowego prawa, umów międzynarodowych

⇒ **komputery z wbudowaną etyką ("etyka komputerów")**
Stephen Hawking (†14 marca 2018)

Prognoza/ostrzeżenie dla świata:

"Obawiam się, że AI może całkowicie zastąpić ludzi."

**Rozwój sztucznej inteligencji może zagrozić istnieniu
ludzkiej cywilizacji.**

Nieco optymizmu

Gdy już sztuczna inteligencja rozwiąże wszystkie nasze problemy naukowe
 ...



Rysunek 9: Zdjęcie z Dolomitów.

Podziękowania dla przeglądarki Google.

Dziękuję Państwu za uwagę.