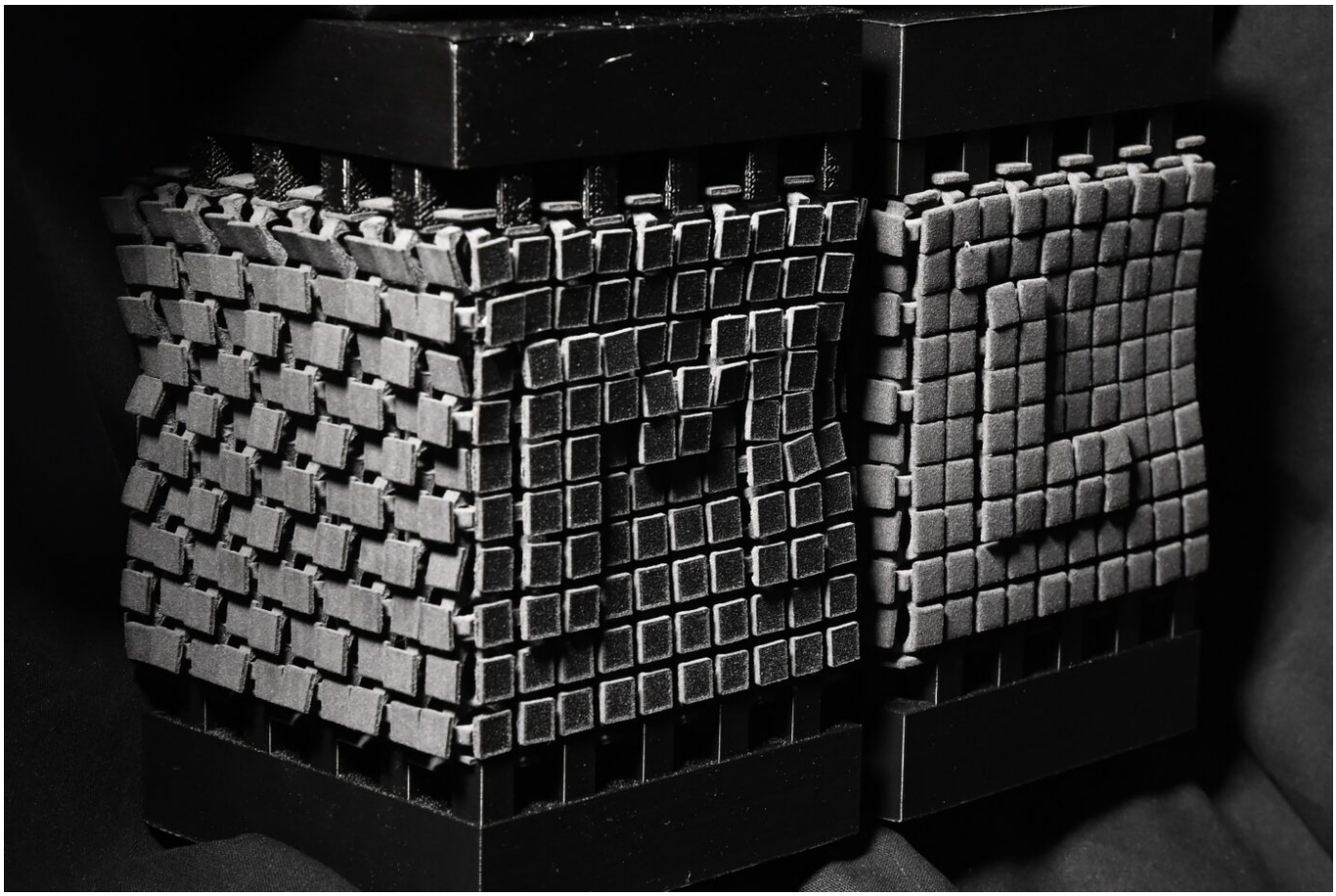
Stevig of niet?

Kun je een 3D origami-ontwerp platdrukken zonder het te beschadigen? Het antwoord op deze vraag is moeilijk te voorspellen, omdat alle vouwen in het ontwerp moeten samenwerken om het geheel pletbaar te maken. Dit is een voorbeeld van een combinatorisch probleem. Nieuw onderzoek toont aan dat machine learning-algoritmen dit soort vragen nauwkeurig en efficiënt kunnen beantwoorden. Dit geeft hoop voor het inzetten van kunstmatige intelligentie (AI) voor het ontwerpen van complexe en functionele (meta)materialen.



Afbeelding 1. Slimme metamaterialen. Twee combinatorische mechanische metamaterialen die zo zijn ontworpen dat de letters M en L naar buiten puilen wanneer ze worden geperst tussen twee platen (boven en onder). Het ontwerpen van nieuwe

metamaterialen zoals dit wordt gemakkelijk gemaakt door kunstmatige intelligentie. Afbeelding: Daan Haver en Yao Du.

Kunstmatige materialen

In hun meest recente onderzoek, deze week gepubliceerd in Physical Review Letters, heeft het onderzoeksteam getest hoe goed AI de eigenschappen van zogeheten combinatorische mechanische metamaterialen kan voorspellen. Dit zijn kunstmatige materialen waarvan de eigenschappen worden bepaald door hun geometrische structuur in plaats van door hun chemische samenstelling. Een stuk origami is ook een soort metamateriaal, waarvan de pletbaarheid (een eigenschap) wordt bepaald door hoe het is gevouwen (de structuur), in plaats van door het soort papier waarvan het is gemaakt. Meer in het algemeen kunnen we met een slim ontwerp precies bepalen waar of hoe een metamateriaal zal buigen, knikken of uitpuilen, wat toepassingen kan vinden in bijvoorbeeld schokdempers en uitklappende zonnepanelen op een satelliet.

Een typisch combinatorisch metamateriaal dat in het laboratorium wordt bestudeerd is opgebouwd uit twee of meer soorten of oriëntaties van bouwstenen, die op verschillende manieren vervormen wanneer er een mechanische kracht op wordt uitgeoefend. Als deze bouwstenen willekeurig worden samengevoegd, zal het materiaal als geheel meestal niet makkelijk vervormen onder druk omdat niet alle blokken kunnen bewegen zoals ze willen; ze zitten in elkaars weg. Waar één bouwsteen naar buiten wil puilen, moet zijn buurman naar binnen kunnen buigen. Om het metamateriaal als geheel gemakkelijk te laten vervormen onder druk, moeten alle vervormde bouwstenen als een legpuzzel in elkaar passen. Net zoals dat het veranderen van een enkele vouw een stuk origami onpletbaar kan maken, kan het veranderen van een enkele bouwsteen een ‘floppy’ metamateriaal stug maken.

Moeilijk te voorspellen

Hoewel metamaterialen veel potentiële toepassingen hebben, is het ontwerpen ervan niet makkelijk. Beginnend met een bepaalde set aan bouwstenen, is het moeilijk om te voorspellen welke samenstellingen nuttige of interessante eigenschappen zullen hebben. Vaak komt het vinden van een goed ontwerp neer op het simpelweg uitproberen van mogelijkheden. Omdat de eigenschappen van combinatorische metamaterialen echter zo gevoelig zijn voor de verandering van een enkele bouwsteen, zijn conventionele statistische

en numerieke methodes erg langzaam en vatbaar voor fouten.

Gelukkig biedt machine learning de oplossing: zelfs met alleen een kleine set aan voorbeelden om van te leren, laat dit onderzoek zien dat zogeheten convolutionele neurale netwerken in staat zijn om de eigenschappen van verschillende bouwsteen-samenstellingen nauwkeurig te voorspellen.

“Dit overtrof al onze verwachtingen,” zegt PhD-kandidaat en eerste auteur Ryan van Mastrigt. “De nauwkeurigheid van de voorspellingen laat zien dat de neurale netwerken feitelijk de wiskundige regels achter de metamateriaal-eigenschappen hebben geleerd, zelfs wanneer wij zelf niet alle regels kennen.”

Deze bevinding laat zien dat we AI kunnen gebruiken voor het ontwerpen van nieuwe complexe metamaterialen met nuttige eigenschappen. Meer in het algemeen stelt het toepassen van neurale netwerken op combinatorische problemen ons in staat om veel spannende vragen te stellen. Misschien kunnen ze ons helpen bij het oplossen van (combinatorische) problemen in andere contexten. En omgekeerd kunnen we hiermee ook meer leren over de neurale netwerken zelf, door bijvoorbeeld te kijken naar hoe de complexiteit van een neuraal netwerk zich verhoudt tot de complexiteit van de problemen die het kan oplossen.

Publicatie

Ryan van Mastrigt, Marjolein Dijkstra, Martin van Hecke en Corentin Coulais: *Machine Learning of Implicit Combinatorial Rules in Mechanical Metamaterials*. Phys. Rev. Lett. **129** (2022)198003, DOI: 10.1103/PhysRevLett.129.198003.