

A kiadványhoz kapcsolódó viták, statisztikák és szerzői profilok a következő címen olvashatók: <https://www.researchgate.net/publication/355738811>.

# Művészi intelligencia: A tudományos kutatás hatékony paradigmája

Cikk a The Innovation című *lapban* - október 2021

DOI: 10.1016/j.xinn.2021.100179

SZÍTÁCIÓK

63

READS

1,214

47 szerző, köztük:



Yong-Jun Xu

Kínai Tudományos Akadémia

184 PUBLIKÁCIÓ 1,724 IDÉZET

NÉZZE MEG AZ  
ADATLAPOT



Qi Wang

Kínai Tudományos Akadémia

32 PUBLIKÁCIÓ 412 IDÉZET

NÉZZE MEG AZ  
ADATLAPOT



Zhulin An

Kínai Tudományos Akadémia

61 PUBLIKÁCIÓ 473 IDÉZET

NÉZZE MEG AZ  
ADATLAPOT



Fei Wang

Kínai Tudományos Akadémia

39 PUBLIKÁCIÓ 616 IDÉZET

NÉZZE MEG AZ  
ADATLAPOT

E kiadvány néhány szerzője szintén dolgozik ezeken a kapcsolódó projekteken:



szerves napelemek projekt megtekintése



Pixelés-polarizációs-kamera alapú polarimetriás rendszer Projekt megtekintése

# Művészi intelligencia: A tudományos kutatás erőteljes paradigmája

Yongjun Xu,<sup>1,35,42</sup> Xin Liu,<sup>5,35,42</sup> Xin Cao,<sup>10,42</sup> Changping Huang,<sup>18,35,42</sup> Enke Liu,<sup>11,37,42</sup> Sen Qian,<sup>26,42</sup> Xingchen Liu,<sup>28,42</sup> Yanjun Wu,<sup>2,35</sup> Yanjun Wu,<sup>2,35</sup> Fengliang Dong,<sup>3,35</sup> Cheng-Wei Qiu,<sup>4</sup> Junjun Qiu,<sup>6,36</sup> Keqin Hua,<sup>6,36</sup> Wentao Su,<sup>7</sup> Jian Wu,<sup>41</sup> Huiyu Xu,<sup>8</sup> Yong Han,<sup>9</sup> Chenguang Fu,<sup>12</sup> Zhigang Yin,<sup>13</sup> Miao Liu,<sup>11,37</sup> Ronald Roepman,<sup>14</sup> Sabine Dietmann,<sup>15</sup> Marko Virta,<sup>16</sup> Fredrick Kengara,<sup>17</sup> Ze Zhang,<sup>19</sup> Lifu Zhang,<sup>18,19</sup> Taolan Zhao,<sup>20</sup> Ji Dai,<sup>21,35,38</sup> Jialiang Yang,<sup>22</sup> Liang Lan,<sup>23</sup> Ming Luo,<sup>24,39</sup> Zhaofeng Liu,<sup>26,35</sup> Tao An,<sup>27</sup> Bin Zhang,<sup>28</sup> Xiao He,<sup>26</sup> Shan Cong,<sup>29</sup> Xiaohong Liu,<sup>30</sup> Wei Zhang,<sup>30</sup> James P. Lewis,<sup>28</sup> James M. Tiedje,<sup>34</sup> Qi Wang,<sup>1,35,40,\*</sup> Zhulin An,<sup>1,35,\*</sup> Fei Wang,<sup>1,35,\*</sup> Libo Zhang,<sup>2,35,\*</sup> Tao Huang,<sup>25,\*</sup> Chuan Lu,<sup>31,\*</sup> Zhipeng Cai,<sup>32,\*</sup> Fang Wang,<sup>33,35,\*</sup> és Jiabao Zhang<sup>33,35,\*</sup>.

A számítástechnikaigénció (AI) mesterséges intelligenciát (MI) tanulási gépek (ML) technikákkal párosított mesterséges intelligencia (AI) széles körben befolyásolja a különböző területek számos aspektusát, beleértve a tudományt és a technológiát, az ipart, sőt a mindennapi életünket is. Az ML-technikákat a nagy adateresztőképesű adatok elemzésére fejlesztették ki azzal a céllal, hogy hasznos meglátásokat nyújtsanak újrszerű módon kategorizálásuk, előrejelzésük és bizonyítékokon alapuló döntéseket hozzanak, ami elősegíti az újrszerű alkalmazások növekedését és támogatja a mesterséges intelligencia fenntartható fejlődését. Ez a tanulmány átfogó áttekintést nyújt a mesterséges intelligencia fejlődéséről, és alkalmazásairól az alaptudományok különböző területein, beleértve az informatikát, a matematikát, az orvostudományt, az anyagtudományt, a földtudományt, az élettudományokat, a fizikát és a kémiát. Részletesen tárgyalja az egyes tudományágak előtt álló kihívásokat, és a mesterséges intelligencia technikák lehetőségeit e kihívások kezelésében. Ezen túlmenően megvitatjuk az új kutatási trendeket, amelyek a mesterséges intelligencia technikáinak integrációját vonják maguk után az egyes tudományágakba. Ezen tanulmány célja, hogy átfogó kutatási irányultatást nyújtson a mesterséges intelligencia potenciális beépítéséről a rendelkező alaptudományokról, hogy segítsen motiválni a kutatókat a mesterséges intelligencia alapuló alaptudományok legkorszerűbb alkalmazásainak mélyebb megértésére, és ezáltal elősegítse a mesterséges intelligencián alapuló alaptudományok folyamatos fejlődését.

<sup>1</sup>Informatikai Technológiai Intézet, Kínai Tudományos Akadémia, Peking 100190, Kína

<sup>2</sup>Szoftver Intézet, Kínai Tudományos Akadémia, Peking 100190, Kína

<sup>3</sup>Nemzeti Nanotudományi és Technológiai Központ, Peking 100190, Kína

<sup>4</sup>Elektrotechnikai és Számítástechnikai Tanszék, Szingapúri Nemzeti Egyetem, Szingapúr 117583, Szingapúr

<sup>5</sup>Matematikai és Rendszertudományi Akadémia, Kínai Tudományos Akadémia, Peking 100190, Kína

<sup>6</sup>Nőgyógyászati Tanszék, Szülészeti és Nőgyógyászati Kórház, Fudan Egyetem, Sanghaj 200011, Kína

<sup>7</sup>Élelmiszer-tudományi és Technológiai Tanszék, Dalian Polytechnic University, Dalian 116034, Kína

<sup>8</sup>Szülészeti és Nőgyógyászati Osztály, Pekingi Egyetem Harmadik Kórház, Peking 100191, Kína

<sup>9</sup>Zhejiang Tartományi Népi Kórház, Hangzhou 310014, Kína

<sup>10</sup>Zhongshan Kórház Klinikai Tudományok Intézete, Fudan Egyetem, Sanghaj 200032, Kína

<sup>11</sup>Fizikai Intézet, Kínai Tudományos Akadémia, Peking 100190, Kína

<sup>12</sup>Műanyag-tudományi és Mérnöki Kar, Zhejiang Egyetem, Hangzhou 310027, Kína

<sup>13</sup>Fujian Institute of Research on the Structure of Matter, Kínai Tudományos Akadémia, Fuzhou 350002, Kína

<sup>14</sup>Medical Center, Radboud Egyetem, 6500 Nijmegen, Hollandia

<sup>15</sup>Institute for Informatics, Washington University School of Medicine, St. Louis, MO 63110, USA

<sup>16</sup>Mikrobiológiai Tanszék, Helsinki Egyetem, 00014 Helsinki, Finnország

<sup>17</sup>Tisztán és Alkalmazott Tudományok Iskolája, Bomet University College, Bomet 20400, Kenya

<sup>18</sup>Aerospace Information Research Institute, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100094, China

<sup>19</sup>Agriculture College of Shihezi University, Xinjiang 832000, China

<sup>20</sup>Genetikai és Fejlődésbíológiai Intézet, Kínai Tudományos Akadémia, Peking 100101, Kína

<sup>21</sup>Az Agyi Kogníció és Agybetegek Intézete, Shenzhen Institute of Advanced Technology, Kínai Tudományos Akadémia, Shenzhen 518055, Kína

<sup>22</sup>Geneis (Beijing) Co., Ltd., Peking 100102, Kína

<sup>23</sup>Kommunikációs Tanulmányok Tanszék, Hong Kong Baptista Egyetem, Hong Kong, Kína

<sup>24</sup>Dél-kínai Botanikus Kert, Kínai Tudományos Akadémia, Guangzhou 510650, Kína

<sup>25</sup>Shanghai Institute of Nutrition and Health, Kínai Tudományos Akadémia, Shanghai 200031, Kína

<sup>26</sup>Nagyenergiás Fizikai Intézet, Kínai Tudományos Akadémia, Peking 100049, Kína

<sup>27</sup>Sanghaji Csillagászati Obszervatórium, Kínai Tudományos Akadémia, Sanghaj 200030, Kína

**Kulcsszavak:** artificial intelligence; machine learning; deep learning; inferenciális tudomány; matematika; orvostudomány; anyagtudomány; geotudomány; élettudomány; fizika; kémia.

## BEVEZETÉS

"Tudnak a gépek gondolkodni?" Alan Turing tette fel ezt a kérdést a "Számítógépek és intelligencia" című híres művében. "Úgy véli, hogy a kérdés megválaszolásához meg kell határozunk, hogy mi a gondolkodás. A gondolkodást azonban nehéz egyértelműen definiálni, mert a gondolkodás szubjektív viselkedés. Turing ekkor vezetett be egy közvetett módszert annak ellenőrzésére, hogy egy gép képes-e gondolkodni, a Turing-tesztet, amely azt vizsgálja, hogy egy gép képes-e az emberi intelligenciától megkülönböztethetetlen intelligenciát felmutatni. Az a gép, amely sikeresen teljesíti a tesztet, mesterséges intelligenciának minősül.

A mesterséges intelligencia az emberi intelligencia szimulációját jelenti egy rendszer vagy gép által. A mesterséges intelligencia célja olyan gép kifejlesztése, amely képes úgy gondolkodni, mint az ember, és utánozni az emberi viselkedést, beleértve az érzékelést, az érvelést, a tanulást, a tervezést, a jóslást és így tovább. Az intelligencia az egyik fő jellemző, amely megkülönbözteti az embert az állatoktól. A véget nem érő ipari forradalmakkal egyre többféle géptípus váltja fel folyamatosan az emberi munkát az élet minden területén, és a közelgő



az emberi erőforrások gépi intelligenciával való helyettesítése a következő nagy kihívás...

leküzdendő kihívás. Számos tudós foglalkozik a mesterséges intelligencia területével, és ez gazdaggá és változatossá teszi a mesterséges intelligencia területén folyó kutatásokat. A mesterséges intelligencia kutatási filozófiák közé tartoznak a keresési algoritmusok, a tudásgráfok, a természetes nyelvek feldolgozása, a szakértői rendszerek, az evolúciós algoritmusok, a gépi tanulás (ML), a mélytanulás (DL) és így tovább.

A mesterséges intelligencia általános keretét az 1. ábra szemlélteti. A mesterséges intelligencia fejlesztési folyamata magában foglalja az érzékelési intelligenciát, a kognitív intelligenciát és a döntéshozatali intelligenciát. Az észlelési intelligencia azt jelenti, hogy a gép rendelkezik az emberek által ismert alapvető látási, hallási, tapintási stb. képességekkel. A kognitív intelligencia az indukció, a következtetés és az ismeretszerzés magasabb szintű képességét jelenti. A kognitív tudomány, az agytudomány és az agyszerű intelligencia inspirálta, hogy a gépeket az emberhez hasonló gondolkodási logikával és kognitív képességgel ruházza fel. Amint egy gép rendelkezik az érzékelés és a megismerés képességeivel, gyakran elvárják tőle, hogy az emberekhez hasonlóan optimális döntéseket hozzon, hogy javítsa az emberek életét, az ipari gyártást stb. A döntési intelligencia megköveteli az alkalmazott adattudomány, a társadalomtudomány, a döntésmélelet és a menedzsmenttudomány alkalmazását az adattudomány kiterjesztéséhez, hogy optimális döntéseket hozhasson. Az érzékelési intelligencia, a kognitív intelligencia és a döntéshozatali intelligencia céljának eléréséhez az AI infrastruktúrális rétegére van szükség, amelyet adatok, tárolási és számítási teljesítmény, ML-algoritmusok és AI-keretek támogatnak. Ezután a modellek képzésével képes megtanulni az adatok belső törvényszerűségeit az AI-alkalmazások támogatásához és megvalósításához. A mesterséges intelligencia alkalmazási rétege egyre kiterjedtebbé válik, és mélyen integrálódik az alaptudományokkal, az ipari gyártással, az emberi élettel, a társadalmi kormányzással és a kibertérrel, ami mélyreható hatással van a munkánkra és az életmódunkra.

## A MESTERSÉGES INTELLIGENCIA TÖRTÉNETE

A modern mesterséges intelligencia kutatás kezdete John McCarthy-ra vezethető vissza, aki 1956-ban a Dartmouth College-ban tartott konferencián alkotta meg az "artificial intelligence (AI)" kifejezést. Ez jelképezte a mesterséges intelligencia tudományág születését. A következő években a fejlődés elképesztő volt. Sok tudós és kutató az automatizált következtetésre összpontosított, és a mesterséges intelligenciát matematikai tételek bizonyítására és algebrai problémák megoldására alkalmazta. Az egyik híres példa a Logic Theorist, egy Allen Newell, Herbert A. Simon és Cliff Shaw által írt számítógépes program, amely a "Principia Mathematica" első 52 tételéből 38-at bizonyít, és néhányhoz elegendő bizonyításokat is szolgáltat. <sup>2</sup> Ezek a sikerek sok mesterséges intelligencia úttörőt vadul optimizmussá tettek, és alátámasztották azt a hitet, hogy a közeljövőben teljesen intelligens gépeket fognak építeni. Hamarosan azonban rájöttek, hogy még hosszú út áll előttük, mire az emberi intelligenciával egyenértékű intelligenciával rendelkező gépek végcéljai megvalósulhatnak. Számos nem triviális problémát nem tudtak kezelni a

a logikai alapú programok. Egy másik kihívás a számítási resources to compute more and more complicated problems. As a result, organizations and funders stopped supporting these under-delivering AI projects.

A mesterséges intelligencia az 1980-as években újra népszerűvé vált, amikor több kutatóintézet és egyetem feltalálta a mesterséges intelligencia rendszerek egy olyan típusát, amely a szakértői tudásból származó alapvető szabályok egy sorát foglalja össze, hogy segítsen a nem szakértőknek speciális döntéseket hozni. Ezek a rendszerek a "szakértői rendszerek". "Ilyen például a Carnegie Mellon Egyetem által aláírt XCON és a Stanford Egyetem által tervezett MYCIN. A szakértői rendszer a szakértői tudásból származtatott logikai szabályokat a valós világ figyelemmel kapcsolatos problémáinak megoldására. A mesterséges intelligencia kutatásának lényege ebben az időszakban az a tudás, amely a gépeket "okosabbá" tette. " A szakértői rendszer azonban fokozatosan számos hátrányt tárt fel, mint például az adatvédelmi technológiák, a flexibilitás hiánya, a gyenge sokoldalúság, a drága karbantartási költségek stb. Ugyanakkor a japán kormány által nagymértékben finanszírozott Ötödik Generációs Számítógép Projekt nem érte el eredeti céljainak nagy részét. Ismét megszűnt a mesterséges intelligencia kutatásának finanszírozása, és a mesterséges intelligencia élete második mélypontjára jutott.

2006-ban Geoffrey Hinton és munkatársai<sup>3,4</sup> áttörést értek el a mesterséges intelligencia területén azáltal, hogy

a mélyebb neurális hálózatok építésének megközelítését, valamint a gradiens eltűnésének elkerülését javasolja a képzés során. Ez újra fellendítette a mesterséges intelligencia kutatását, és a DL algoritmusok a mesterséges intelligencia kutatás egyik legaktívabb területévé váltak. A DL az ML egy alcsoportja, amely többretegű neurális hálózatokon alapul reprezentációs tanúlással,<sup>5</sup> míg az ML a mesterséges intelligenciának egy olyan része, amelyet egy számítógép vagy program emberi beavatkozás nélkül képes tanulni és intelligenciát szerezni. A "tanulás" tehát az AI-kutatás e korszakának kulcsszava. A nagy adatmennyiségű technológiák és a számítási teljesítmény növekedése hatékonyabbá tette a jellemzők és információk levezetését a hatalmas adatmintákból. Egyre több új neurális hálózati struktúrát és képzési módszert javasoltak a DL reprezentatív tanulási képességének javítására, valamint a DL általános alkalmazásokra való további kiterjesztésére. A jelenlegi DL-algoritmusok megfelelnek az emberi képességeknek, sőt felülmúlják azokat a számítógépes látás (CV) és a természetes nyelvfeldolgozás (NLP) területén. A mesterséges intelligencia-technológiák az élet minden területén figyelemre méltó sikereket értek el, és továbbra is bizonyítják értéküket a tudományos kutatás és a valós alkalmazások gerinceként.

A mesterséges intelligencián belül az ML jelentős és széles körű hatást gyakorol a következő területek számos aspektusára technológia és tudomány: a számítástechnikától a földtudományokon át az anyagtudományokig, az élettudományoktól az orvostudományokon át a kémiáig, a matematikáig és a fizikáig, a menedzsmenttudományoktól a közgazdaságtanon át a pszichológiáig és más adatintenzív empirikus tudományokig, mivel az ML módszereket fejlesztettek ki a nagy áteresztőképességű adatok elemzésére, hogy hasznos meglátásokat nyerjenek, kategorizáljanak, előrejelezzenek és újszerű módon bizonyítékokon alapuló döntéseket hozzanak. Egy rendszer kiképzése a kívánt bemeneti-kimeneti viselkedés példáinak bemutatásával, messze lehet

28Szenkémiai Intézet, Kínai Tudományos Akadémia, Taiyuan 030001, Kína

<sup>29</sup>Suzhou Institute of Nano-Tech and Nano-Bionics, Chinese Academy of Sciences, Suzhou 215123, Kína <sup>30</sup>Chongqing

Institute of Green and Intelligent Technology, Chinese Academy of Sciences, Chongqing 400714, Kína <sup>31</sup>Department of

Computer Science, Aberystwyth University, Aberystwyth, Ceredigion SY23 3FL, UK

<sup>32</sup>Department of Computer Science, Georgia State University, Atlanta, GA 30303, USA

<sup>33</sup>Talajtani Intézet, Kínai Tudományos Akadémia, Nanjing 210008, Kína

<sup>34</sup>Center for Microbial Ecology, Department of Plant, Soil and Microbial Sciences, Michigan State University, East Lansing, MI 48824, USA

<sup>35</sup>Kínai Tudományos Akadémia Egyeteme, Peking 100049, Kína

<sup>36</sup>Shanghai Key Laboratory of Female Reproductive Endocrine-Related Diseases, Sanghaj 200011, Kína

<sup>37</sup>Songshan Lake Materials Laboratory, Dongguan, Guangdong 523808, Kína

<sup>38</sup>Shenzhen-Hong Kong Institute of Brain Science-Shenzhen Fundamental Research Institutions, Shenzhen 518055, Kína <sup>39</sup>Center

of Economic Botany, Core Botanical Gardens, Chinese Academy of Sciences, Guangzhou 510650, Kína <sup>40</sup>Zhejiang Lab,

Hangzhou 311121, Kína

<sup>41</sup>Second Affiliated Hospital School of Medicine, és School of Public Health, Zhejiang University, Hangzhou 310058, Kína

<sup>42</sup> A zsebszámológép egyenlő mértékben járul hozzá a Partner Journal

\*Korrespondencia: [wangqi08@ict.ac.cn](mailto:wangqi08@ict.ac.cn) (Q.W.), [anzhulin@ict.ac.cn](mailto:anzhulin@ict.ac.cn) (Z.A.), [wangfei@ict.ac.cn](mailto:wangfei@ict.ac.cn) (F.W.), [libo@iscas.ac.cn](mailto:libo@iscas.ac.cn) (L.Z.), [huangtao@sibs.ac.cn](mailto:huangtao@sibs.ac.cn) (T.H.), [cul@aber.ac.uk](mailto:cul@aber.ac.uk) (C.L.), [zcai@gsu.edu](mailto:zcai@gsu.edu) (Z.C.), [wangfang@issas.ac.cn](mailto:wangfang@issas.ac.cn) (F.W.), [jiabaozhang@issac.ac.cn](mailto:jiabaozhang@issac.ac.cn) (J.Z.).

Megérkezett: Elfogadva: 2021. augusztus 29: Október 26, 2021; Online közzététel: 2021. október 26: Október 28, 2021; <https://doi.org/10.1016/j.xinn.2021.100179>

<sup>a</sup> 2021 A szerző(k). Ez egy nyílt hozzáférésű cikk a CC BY-NC-ND licenc alatt (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>). Xu Y., Liu X., Cao X., et al., (2021). Artifikiai intelligencia: Egy erőteljes paradigma a scientific kutatáshoz. *The Innovation* 2(4), 100179.

1. ábra. A mesterséges intelligencia általános kerete

egyszerűbb, mint kézzel programozni, megjósolva a kívánt választ az összes lehetséges bemenetre. A következő fejezetek nyolc olyan alaptudományt - köztük az informatikát, a matematikát, az orvostudományt, az anyagtudományt, a földtudományt, az élettudományt, a fizikát és a kémiát - tekintenek át, amelyek mesterséges intelligencia technikákat fejlesztenek vagy használnak fel a tudományok fejlődésének előmozdítására és alkalmazásuk felgyorsítására az emberek, a társadalom és a világ javára.

## AI AZ INFORMATIKÁBAN

A mesterséges intelligencia célja az érzékelés, a megismerés és a döntéshozatal képességeinek biztosítása a gépek számára. Jelenleg az informatika területén soha nem látott ütemben jelennek meg új kutatások és alkalmazások, ami elválaszthatatlan a mesterséges intelligencia infrastruktúrájának támogatásától. Amint a 2. ábrán látható, az AI infrastruktúra rétege magában foglalja az adatokat, a tárolási és számítási teljesítményt, az ML algoritmusokat és az AI keretrendszert. Az érzékelési réteg lehetővé teszi, hogy a gépek rendelkezzenek a látás, hallás stb. alapvető képességével. A CV például lehetővé teszi a gépek számára, hogy "lássanak" és azonosítsák a tárgyakat, míg a beszédfelismerés és beszédszintézis segíti a gépeket a beszédelemek "hallásában" és felismerésében. A kognitív réteg az NLP,<sup>6,3</sup> tudásgráfok,<sup>7</sup> és a folyamatos tanulás segítségével biztosítja az indukció, az érvelés és a tudás megszerzésének magasabb szintű képességeit.<sup>8</sup> A döntéshozatali rétegben a mesterséges intelligencia optimális döntések meghozatalára képes, mint például az automatikus tervezés, a szakértői rendszerek és a döntéstámogató rendszerek. A mesterséges intelligencia számos alkalmazása mélyreható hatást gyakorolt az alaptudományokra, az ipari gyártásra, az emberi életre, a társadalmi kormányzásra és a kibertérre. A következő alfejezetek áttekintést nyújtanak a mesterséges intelligencia keretrendszeréről, az automatikus gépi tanulás (AutoML) technológiájáról és számos, az információszervezés területén alkalmazott, legkorszerűbb AI/ML alkalmazásról.

### A mesterséges intelligencia keretrendszer alapvető eszközöket biztosít a mesterséges intelligencia algoritmusok megvalósításához.

Az elmúlt 10 évben a mesterséges intelligencia algoritmusokon alapuló alkalmazások jelentős szerepet játszottak különböző területeken és témákban, amelyek alapján a DL keretrendszer és platform virágzása megalapozódott. A mesterséges intelligencia keretrendszerek és platformok csökkentik a mesterséges intelligencia technológiához való hozzáférés követelményét azáltal, hogy integrálják az algoritmusok fejlesztésének teljes folyamatát, ami lehetővé teszi a különböző területek kutatói számára, hogy azt más figyelemterületeken is használják, lehetővé téve számukra, hogy a neurális hálózatok szerkezetének megtervezésére összpontosítsanak, így jobb megoldásokat kínálva a saját figyelemterületük problémáira. A 21. század elején csak néhány eszköz, például a MATLAB, az OpenNN és a Torch volt képes a neurális hálózatok leírására és fejlesztésére. Ezek az eszközök azonban eredetileg nem AI-modellekhez készültek, így olyan problémákkal

szembesültek, mint a bonyolult felhasználói API és a GPU-támogatás hiánya. Ebben az időszakban ezeknek a keretrendszereknek a használata szakmai informatikai ismereteket és fárasztó modellépítési munkát igényelt. Megoldásként megjelentek a DL korai keretrendszerei, például a Caffe, a Chainer és a Theano, amelyek lehetővé tették a felhasználók számára, hogy kényelmesen építsenek komplex mély neurális hálózatokat (DNN), például konvolúciós neurális hálózatokat (CNN), rekurrens neurális hálózatokat (RNN) és LSTM-eket,

és ez jelentősen csökkentette a mesterséges intelligencia modellek alkalmazásának költségeit. A technológiai óriások ezután csatlakoztak az AI-keretrendszerek kutatásának menetéhez.<sup>9, 3</sup> Google kifejlesztette a híres nyílt forráskódú keretrendszert, a TensorFlow-t, míg a Facebook AI-kutatócsoportja egy másik népszerű platformot, a PyTorch-ot, amely a Torch-ra épül; a Microsoft Research kiadta a CNTK-t, az Amazon pedig bejelentette az MXNet-et. Közülük a TensorFlow, amely egyben a legrepresentatívabb keretrendszer is, a Theano deklaratív programozási stílusára hivatkozott, amely nagyobb teret kínál a gráfolapú optimalizáláshoz, míg a PyTorch a Torch imperatív programozási stílusát örökölte, amely intuitív, felhasználóbarát, flexibilisebb és könnyebben követhető. Mivel a modern AI keretrendszerek és platformok széles körben alkalmazásra kerülnek, a szakemberek ma már gyorsan és kényelmesen állíthatnak össze modelleket azáltal, hogy különböző, adott figyelemterületekre specifikusan alkalmas építőelemkészleteket és nyelveket alkalmaznak. Az idő múlásával csiszolódva ezek a platformok fokozatosan kifejlesztettek egy világosan definiált felhasználói API-t, a több GPU-s és az elosztott képzés képességét, valamint különféle modell-állatkerteket és eszközkészleteket a speciális feladatokhoz.<sup>10, 4</sup> Jövőre nézve van néhány olyan trend, amely a következő generációs keretrendszerek fejlesztésének főáramává válhat. (1) A szuperméretű modellképzés képessége. A Transformerből származó modellek, például a BERT és a GPT-3 megjelenésével a nagyméretű modellek képzésének képessége a DL keretrendszer ideális jellemzőjévé vált. Az AI-keretrendszereknek több száz vagy akár több ezer eszköz léptékben is hatékonyan kell képezniük. (2) Egységesített API-szabvány. Számos keretrendszer API-ja általában hasonló, de bizonyos pontokon kissé eltérő. Ez némi

diffikációhoz és felesleges tanulási erőfeszítésekhez vezet, amikor a felhasználó megpróbál egyik keretrendszerről a másikra váltani. Néhány keretrendszer API-ja, mint például a JAX, már kompatibilis a NumPy API-szabványával, amely a legtöbb gyakorló számára ismerős. Ezért a jövőben fokozatosan létrejöhet egy egységes API-szabvány az AI-keretrendszerek számára: (3) Univerzális operátoroptimalizálás. Jelenleg a DL operátorok kerneljeit vagy kézzel vagy harmadik féltől származó könyvtárak alapján valósítják meg. A legtöbb harmadik féltől származó könyvtárat bizonyos hardverplatformokhoz fejlesztették ki, ami nagy szükségtelen kiadásokat okoz, amikor a modelleket különböző hardverplatformokon képzik vagy telepítik. Az új DL-algoritmusok fejlesztési sebessége általában sokkal gyorsabb, mint a könyvtárak frissítési sebessége, ami miatt az új algoritmusok gyakran meghaladják a könyvtárak támogatását.<sup>11</sup>

A mesterséges intelligencia algoritmusok végrehajtási sebességének javítása érdekében sok kutatás folyik a hardveres gyorsítás használatának módjáról. A DianNao család az egyik legkorábbi kutatási innováció az AI hardveres gyorsítók terén.<sup>12</sup> Ide tartozik a DianNao, a DaDianNao, a ShiDianNao és a PuDianNao, amelyek a neurális hálózatok és más ML-algoritmusok következtetési sebességének gyorsítására használhatók. Ezek közül a legjobb teljesítményt egy 64 chipes DaDianNao rendszer 450,653-as sebességnövekedést érhet el egy GPU-hoz képest, és 150,313-mal csökkentheti az energiát. Prof. Chen és csapata a Számítástechnikai Intézetben egy utasításkészlet-architektúrát is tervezett a neurális hálózati gyorsítók széles skálájához, Cambricon néven, amely egy soros DL-gyorsítóvá fejlődött. A Cambricon után számos, a mesterséges intelligenciához kapcsolódó vállalat, például az Apple, a Google, a HUAWEI stb. kifejlesztette ki saját DL gyorsítóit, és a mesterséges intelligencia gyorsítók a mesterséges intelligencia fontos kutatási területévé váltak.

2. ábra. Az AI keretrendszer tudásgráfja

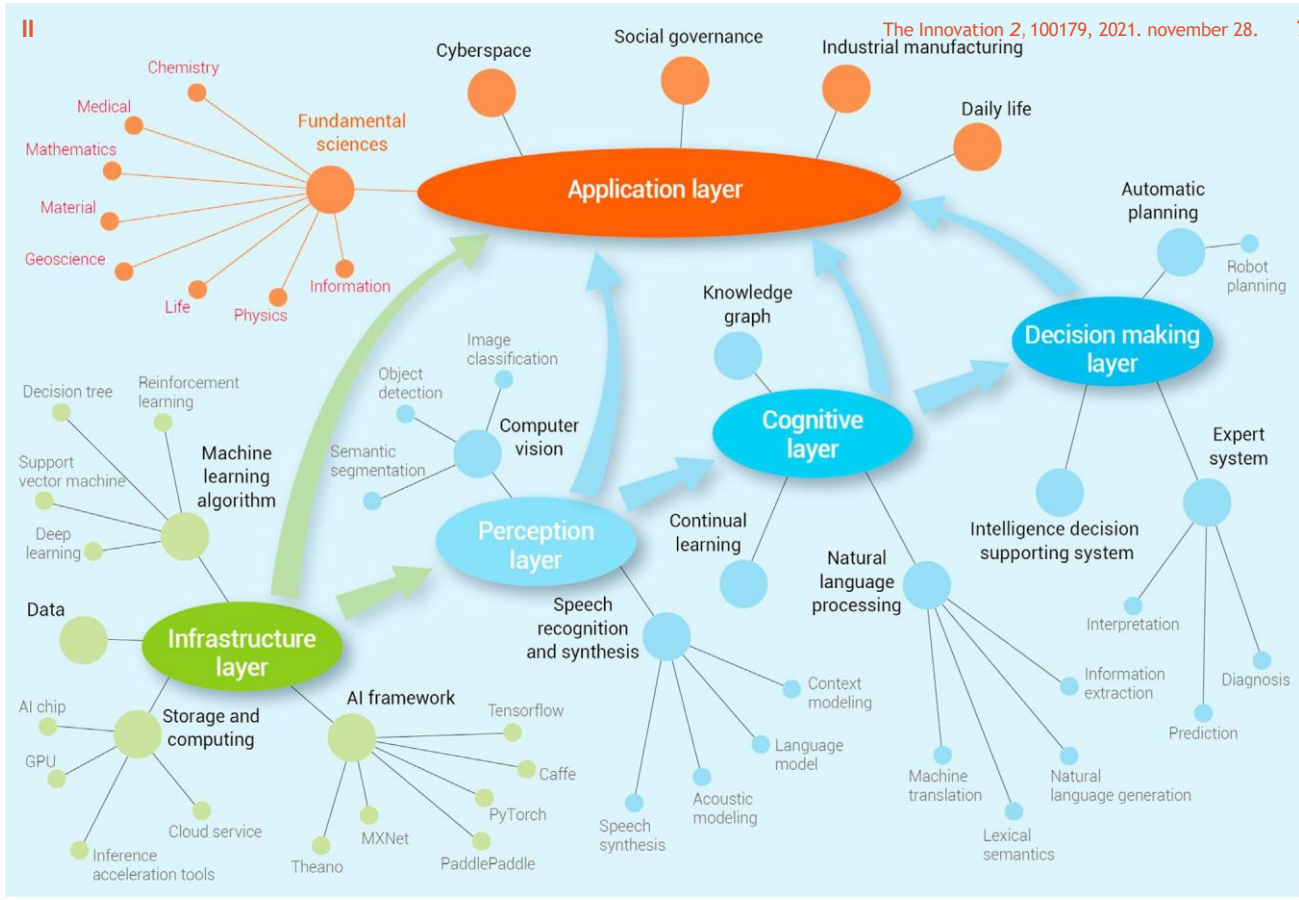
### AI for AI-AutoML

Az AutoML célja annak tanulmányozása, hogyan lehet az evolúciós számítás, a megerősítő tanulást (RL) és más mesterséges intelligencia algoritmusokat használni, hogy automatikusan speciális mesterséges intelligencia algoritmusokat hozzon létre. A neurális hálózatok automatikus generálásával kapcsolatos kutatások már a DL megjelenése előtt is folytak, pl. a neurális evolúció.<sup>13</sup> A neurális evolúció fő célja, hogy a neurális hálózatok a biológiai világban a fiatalabb túlélésének elve szerint fejlődjenek. A szelekció, a keresztezés, a mutáció és más evolúciós operátorok révén a populációban az egyedek minősége folyamatosan javul, és végül a legjobb tulajdonságokkal rendelkező egyed képviseli a legjobb neurális hálózatot. A biológiai inspirációt ebben a figyelemben az emberi agy neuronjainak evolúciós folyamata adja. Az emberi agy olyan fejlett tanulási és memóriefunkciókkal rendelkezik, hogy nem nélkülözheti az agyban lévő komplex neurális hálózati rendszert. Az emberi agy teljes neurális hálózati rendszere inkább egy hosszú evolúciós folyamatból profitál, mint gradiens leszármazásból és visszaterjedésből. A DL korszakában a mesterséges intelligencia algoritmusok alkalmazása a DNN automatikus generálására egyre nagyobb figyelmet kapott, és fokozatosan az AutoML kutatás egyik fontos irányává fejlődött: a neurális architektúra-keresés. A neurális architektúra-keresés megvalósítási módszereit általában RL-alapú módszerre és evolúciós algoritmus-alapú módszerre osztják. Az RL-alapú módszerben egy RNN-t vezérlőként használnak egy neurális hálózati struktúra rétegenkénti generálásához, majd a hálózatot kiképzik, és a verifikációs készlet pontosságát az RNN jutalomjeleként használják a stratégia gradiensének kiszámításához. Az iteráció során a vezérlő a nagyobb pontosságú neurális hálózatnak nagyobb valószínűségi értéket ad, hogy a stratégiai függvény az optimális hálózati struktúrát tudja kiadni.<sup>14</sup> A neurális architektúra evolúción keresztül történő keresésének módszere hasonlít a neurális evolúciós módszerhez, amely egy populáción alapul, és folyamatosan iterál a fittest túlélésének elve szerint, hogy kiváló minőségű neurális hálózatot kapjon.<sup>15</sup>

A neurális architektúra keresési technológia alkalmazásával a neurális hálózatok tervezése hatékonyabb és automatizáltabb, és a hálózat pontossága fokozatosan felülmúlja a mesterséges intelligencia szakértők által tervezett hálózatokét. Például a Google EfficientNet nevű SOTA-hálózata a neurális architektúra-keresésen alapuló alaphálózat segítségével valósult meg.<sup>16</sup>

### Az AI lehetővé teszi a komplex hálózati feltételekhez alkalmazkodó hálózattervezést

A DL alkalmazása a hálózattervezés területén nagy érdeklődésre tart számot. A hálózattervezés gyakran támaszkodik a kezdeti hálózati feltételekre és/vagy elméleti feltételezésekre a valós hálózati környezetek jellemzésére. A hagyományos, matematikai modellek által szabályozott hálózati modellezés és tervezés azonban nem alkalmas a sok tökéletlen és nagy dinamikájú hálózati környezetet tartalmazó összetett forgatókönyvek kezelésére. A DL integrálása a hálózatok kutatásba lehetővé teszi a komplex hálózati környezetek jobb reprezentációját. Továbbá a DL kombinálható a Markov-döntési folyamattal, és továbbfejlelhető a mély újra tanulási modellé (DRL), amely a jutalomfüggvény és a rendszer állapotai alapján figyelembe veszi az optimális politikát. Ezek a technikák együttesen jobb döntések meghozatalára használhatók a megfelelő hálózattervezés irányítására, ezáltal javítva a hálózat szolgáltatásminőségét és a tapasztalatok minőségét. A hálózati protokoll stack különböző rétegeinek szempontjait tekintve a DL/DRL a hálózati jellemzők kinyerésére, a döntéshozatalra stb. alkalmazható. A fizikai rétegben a DL az interferencia összehangolására használható. Használható továbbá a modulációs módok osztályozására, az efficients hálózati kódolásra<sup>17</sup> és a hibajavító kódok stb. megtervezésére. Az adatkapcsolati rétegben a DL felhasználható az erőforrások (például csatornák) elosztására, a médiumhozzáférés-szabályozásra, a [traffice-előrejelzésre](#)<sup>18</sup>, a kapcsolatminőség értékelésére stb. A hálózati (útválasztási) rétegben az útvonalak létrehozása és az útválasztás optimalizálása<sup>19</sup> segíthet az optimális útválasztási útvonal elérésében. A magasabb rétegekben (például az alkalmazási rétegben) a továbbfejlesztett adatátviteli



tömörítést és feladatkioldást használnak. A fenti protokollhalmaz mellett a DL használatának egyik kritikus területe a hálózati biztonság. A DL használható a csomagok jóindulatú/rosszindulatú típusokba történő osztályozására, és hogyan integrálható más ML-sémákkal, például a felügyelet nélküli klaszterezéssel, a jobb anomália-felismerési hatás elérése érdekében.

### A mesterséges intelligencia nagyobb teljesítményű és intelligensebb nanofotonikát tesz lehetővé

A nanofotonikus komponensek a közelmúltban forradalmasították az optika területét a metaanyagok/metafelületek révén, lehetővé téve a fény-anyag kölcsönhatások tetszőleges manipulálását a hullámhossz alatti meta-atomokkal vagy meta-molekulákkal.<sup>20-22</sup> Az ilyen komponensek hagyományos tervezése általában előremodellezést, azaz a Maxwell-egyenletek empirikus és intuitív nanoszerkezetek alapján történő megoldását jelenti a megfelelő optikai tulajdonságok figyelembe vételéhez, valamint a nanofotonikai eszközök inverz tervezését, ha adott az optikai válasz. Az összetett nano-antennákból álló makro-optikai komponensek transzdimenziós jellemzője a tervezési folyamatot nagyon időigényessé, számításgigényessé, sőt numerikusan megkerülhetetlenné teszi, például az eszköz méretének és összetettségének növekedésével. A DL egy effizitív és automatikus platform, amely új effizitív megközelítéseket tesz lehetővé a nagy teljesítményű és sokoldalú funkciókkal rendelkező nanofotonikai eszközök tervezéséhez. Itt briefly bemutatjuk a DL-alapú nanofotonika legújabb fejlődését és széleskörű alkalmazásait. A DL-t a DNN segítségével előremodellezésre használtuk figyelembe.<sup>23</sup> Az átviteli vagy reflektációs koeficiensek jól megjósolhatók a hatalmas adathalmazokon való edzés után. A DNN előrejelzési pontosságának javítása érdekében kis adathalmazok esetén a transzfer tanulást vezették be a különböző fizikai forgatókönyvek közötti tudás migrálására, ami jelentősen csökkentette a relatív hibát. Továbbá egy CNN-t és egy RNN-t fejlesztettek ki az optikai tulajdonságok előrejelzésére tetszőleges struktúrákból képek segítségével.<sup>24</sup> A CNN-RNN kombináció sikeresen megjósolta az abszorpciós spektrumokat az adott bemeneti szerkezeti képekből. A nanofotonikus eszközök inverz tervezésében a DL módszerek három különböző paradigmája létezik, azaz a felügyelt, a felügyelet nélküli és az RL.<sup>25</sup> A felügyelt tanulást az előre definiált geometriák szerkezeti paramétereinek tervezésére használták, mint például a tandem DNN és a kétirányú DNN. A nem felügyelt tanulási módszerek önmaguktól tanulnak, specifikus cél nélkül, és így jobban hozzáférhetők új és tetszőleges minták felfedezéséhez<sup>26</sup> teljesen új adatokban mint a felügyelt tanulás. A feltételes GAN-okat és a Wasserstein GAN-okat kombináló generatív adverzális hálózat (GAN) alapú megközelítést javasoltak a szabad alakú, teljesen dielektrikus, többfunkciós metafelületek tervezéséhez. Az RL, különösen a kétszeresen mély Q-tanulás, nagy teljesítményű nanofotonikus eszközök inverz tervezését hajtja végre.<sup>27</sup> A DL jobb teljesítménnyel és több feltörekvő alkalmazással ruházta fel a nanofotonikai eszközöket.<sup>28,29</sup> Például egy DL által vezérelt intelligens mikrohullámú köpeny milliszekundumos és önadaptív választ mutat a folyamatosan változó beeső hullámra és háttérre.<sup>28</sup> Egy másik példa, hogy egy DL-vel kiegészített infravörös nanoplaszmonikus metafelületet fejlesztettek ki a biomolekulák négy fő osztálya közötti dinamika megfigyelésére, ami hatással lehet a biológia, a bio-analitika és a farmakológia figyelemterületeire az alapkutatótól a betegségdiagnosztikán át a gyógyszerfejlesztésig.<sup>29</sup> A DL-ben rejlő lehetőségek a nanofotonika széles területén bontakoztak ki. Még az optikai és fotonikai háttérrel nem rendelkező végfelhasználók is kihasználhatják a DL-t, mint egy fekete doboz eszköztárat, hogy nagy teljesítményű optikai eszközöket tervezzenek. Mindazonáltal érdemes mélyrehatóan megvizsgálni, hogyan lehet értelmezni/közvetíteni a köztes DL folyamatot, és meghatározni a legdominánsabb tényezőket az optimális megoldások keresése során. Optimista elképzeléseink szerint a DL-algoritmusok és a számítási/optimalizálási infrastruktúrák fejlődése lehetővé tenné, hogy hatékonyabb és megbízhatóbb tréningalkalmazásokat valósítsunk meg. megközelítések, összetettebb nanoszerkezetek eddig nem látott formák és méretek, valamint intelligensebb és rekonstruálhatóbb optikai/optoelektronikai rendszerek.

### A mesterséges intelligencia az informatika egyéb területein

Úgy véljük, hogy a mesterséges intelligencia nagy lehetőségeket rejt magában a következő irányokban:

- d A mesterséges intelligencia alapú kockázatellenőrzés és -kezelés a közműveknél megelőzheti a költséges vagy veszélyes berendezések meghibásodását olyan érzékelők használatával, amelyek érzékelik és elküldik a gép állapotára vonatkozó információkat a gyártónak.

a lehetséges problémák előrejelzésével, hogy biztosítsa az időben történő karbantartást vagy az automatikus leállítást.

- d A mesterséges intelligencia felhasználható a valós világ tárgyainak szimulációjára, az úgynevezett digitális ikrekre. A mérnöki tudományok területén alkalmazva a digitális ikrek lehetővé teszik a mérnökök és technikusok számára, hogy virtuálisan elemezzék egy berendezés teljesítményét, elkerülve ezzel a hagyományos tesztelési módszerekhez kapcsolódó biztonsági és költségvetési problémákat.
- d A mesterséges intelligenciával kombinálva az intelligens robotok fontos szerepet játszanak az iparban és az emberi életben. A hagyományos robotoktól eltérően, amelyek az ember által meghatározott eljárások szerint dolgoznak, az intelligens robotok képesek érzékelni, felismerni, sőt, a környezeti feltételek változásai alapján automatikusan tervezni és dönteni.
- d AI of things (AIoT) vagy AI-alapú IoT-alkalmazások. <sup>30</sup> ígéretes fejlesztési irányzattá váltak. Az AI képessé teheti a különböző fizikai infrastruktúrákba ágyazott, csatlakoztatott IoT-eszközöket arra, hogy érzékeljenek, felismerjenek, tanuljanak és cselekedjenek. Az intelligens városok például folyamatosan adatokat gyűjtenek az életminőségi tényezőkről, például az áramellátás, a tömegközlekedés, a légszennyezés és a vízhasználat állapotáról, hogy a városok rendszereit irányítsák és optimalizálják. Ezen adatok, különösen a tájékozott vagy nem tájékozott résztvevőktől gyűjtött személyes adatok miatt az adatbiztonság és a magánélet<sup>31</sup> védelme szükséges.

## AI MATEMATIKÁBAN

A matematika mindig döntő és nélkülözhetetlen szerepet játszik a mesterséges intelligenciában. Évtizedekkel ezelőtt számos klasszikus, a mesterséges intelligenciával kapcsolatos megközelítést, mint például a k-nearest neighbor,<sup>32</sup> a support vector machine,<sup>33</sup> és az AdaBoost,<sup>34</sup> javasoltak és fejlesztettek ki

miután szigorú matematikai formuláikat megalkották. Az utóbbi években, a DL gyors fejlődésével,<sup>35</sup> a mesterséges intelligencia egyre nagyobb figyelmet kapott a matematikai közösségben. A Markov-folyamat, a minimax optimalizálás és a Bayes-statisztika segítségével felszerelve az RL,<sup>36</sup> a GAN-ok,<sup>37</sup> és a Bayes-tanulás<sup>38</sup> a legkedvezőbb eszközökké váltak számos AI-alkalmazásban. Mindazonáltal még mindig rengeteg nyitott probléma létezik a matematikában az ML számára, beleértve a neurális hálózatok értelmezhetőségét, a paraméterbecslés optimalizálási problémáit és a tanulási modellek általánosítási képességét. A fejezet további részében ezt a három kérdést tárgyaljuk sorban.

### A neurális hálózatok értelmezhetősége

Matematikai szempontból az ML általában nemlineáris modelleket épít, tipikusan neurális hálózatokkal, bizonyos függvények közelítésére. A jól ismert univerzális közelítési tétel azt sugallja, hogy nagyon enyhe feltételek mellett bármilyen folytonos függvényt kompakt tartományokban a neurális hálózatokkal egységesen közelíteni lehet,<sup>39</sup> ami létfontosságú szerepet játszik a neurális hálózatok értelmezhetőségében. A valós alkalmazásokban azonban úgy tűnik, hogy az ML-modellek számos rendkívül bonyolult függvény pontos közelítését teszik lehetővé, néha még a fekete dobozokét is, amelyek messze túlmutatnak a folytonos függvények hatókörén. Az ML modellek hatékonyságának megértése érdekében számos kutató vizsgálta az általuk jól közelíthető függvénytereket és a megfelelő mennyiségi mértékeket. Ez a kérdés szorosan kapcsolódik a klasszikus közelítésmélethez, de a közelítési séma különbözik. Bach<sup>40</sup> figyelem például azt találja, hogy a véletlenszerű jellemzőmodellhez természetesen hozzátartozik a megfelelő reprodukáló kernel Hilbert-tér. Ugyanígy a Barron-tér a kétrétegű neurális hálózatokhoz kapcsolódó természetes függvényterként azonosítható, és a közelítési hibát a Barron-norma segítségével mérjük. <sup>41</sup> flow-indukált terekre defináltak a reziduális hálózatok (ResNets) megfelelő mennyiségeit. Többretegű hálózatok esetén a közelítésmélet céljaira a természetes függvényterek a Wojtowysch által bevezetett fa-szerű függvényterek. <sup>42</sup> A neurális hálózatok és a parciális differenciálegyenletek megoldására szolgáló numerikus algoritmusok kapcsolatát több munka is feltárja. He és Xu<sup>43</sup> például felfedezte, hogy a képosztályozásra szolgáló CNN-ek szoros kapcsolatban állnak a többrácsos (MG) módszerekkel. Valójában a CNN-ekben az összevonási művelet és a jellemzőkinyerés közvetlenül megfelel a

### 3. ábra. A mesterséges intelligencia a matematikában

korlátozási művelet és az MG-ben az iteratív simítások. Így a CNN-ekben használt különböző konvolúciós és pooling műveletek jobban megérthetők.

#### A paraméterbecslés optimalizálási problémái

Általánosságban elmondható, hogy bizonyos DNN-ek paramétereinek becslésére vonatkozó optimalizálási probléma a gyakorlatban erősen nem konvex és gyakran nem sima. Várhatóak-e a globális minimalizálók? Milyen a lokális minimalizálók tájképe? Hogyan kezeljük a nem simaságot? Mindezek a kérdések optimalizálási szempontból nem triviálisak. Valóban, számos munka és kísérlet bizonyítja, hogy a DL paraméterbecslésére irányuló optimalizálás önmagában sokkal szebb probléma, mint korábban gondolták; lásd pl. Goodfellow et al. <sup>44</sup>. Ennek következtében a neurális hálózatok veszteségfelületének is nevezett megoldási tájkép (3. ábra) vizsgálata már nem feltételezhető, hogy elérhetetlen, sőt viszont még a globális optimalizáláshoz is útmutatást adhat. Az érdeklődő olvasók az e téren elért legújabb eredményekről az áttekintő tanulmányban (Sun et al. <sup>45</sup>) tájékozódhatnak.

A legújabb tanulmányok azt mutatják, hogy a nem sima aktiválási függvények, pl. a egyenes vonalú lineáris egységek, jobbak a sima függvényeknél a ritka megoldások megtalálásában. A láncszabály azonban nem működik abban az esetben, ha az aktiválási függvények nem simák, ami aztán a széles körben használt sztochasztikus gradiens (SG) alapú megközelítéseket elméletileg nem teszi megvalósíthatóvá. A nem sima iterátumokon közelítő gradiensok orvoslásként való alkalmazása biztosítja, hogy az SG-típusú módszerek továbbra is széleskörűen használatosak, de a numerikus bizonyítékok rávilágítottak a korlátaikra is. Emellett a Cui et al. <sup>46</sup> valamint Liu et al. <sup>47</sup> által javasolt büntetésalapú megközelítések új irányt adnak a nem sima optimalizálási problémák efficiens megoldására.

#### A tanulási modellek általánosítási képessége

A kis képzési hiba nem mindig vezet kis tesztelési hibához. Ezt a szakadékot a tanulási modellek általánosító képessége okozza. A statisztikus tanuláselmélet egyik legfontosabb figyelemzése szerint az általánosítási hiba egy olyan mennyiséggel van korlátozva, amely a modell kapacitásának növekedésével nő, de a gyakorló példák számának növekedésével zsugorodik. <sup>48</sup> Egy gyakori feltételezés a

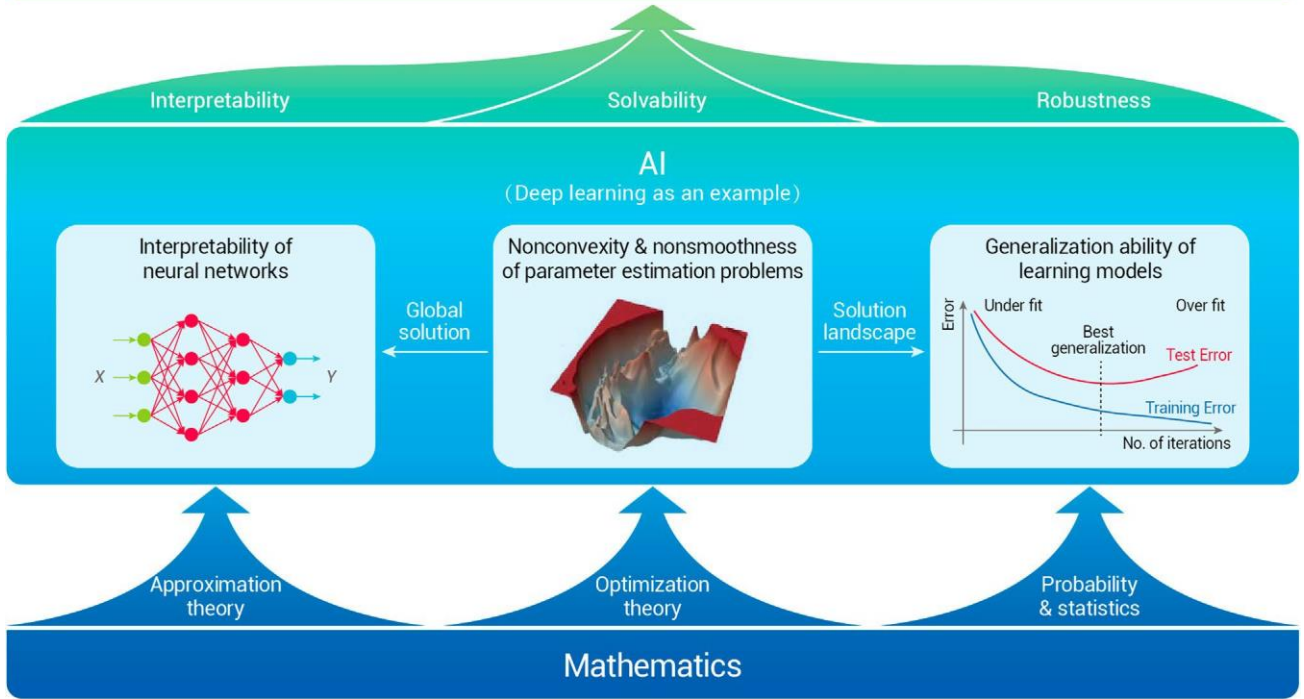
általánosítás a megoldási tájra az, hogy a flat és a széles minimumok jobban általánosíthatók, mint az élesek. Ezért jelentek meg a regularizációs technikák, köztük a kieséses megközelítés, <sup>49</sup> amelyek arra kényszerítik az algoritmusokat, hogy megkerüljék az éles minimumokat. Az ennek hátterében álló mechanizmust azonban még nem vizsgálták meg teljesen. A közelmúltban néhány kutató a ResNet-típusú architektúrára összpontosított, ahol a dropoutot az egyes moduláris épületek utolsó konvolúciós rétege után illesztik be. Így sikerült megmagyarázniuk a sztochasztikus kieséses képzési folyamatot és az ebből következő kieséses regularizációs hatást az optimális vezérlés szempontjából. <sup>50</sup>

#### AI AZ ORVOSTUDOMÁNYBAN

Az AI-technológia egyre nagyobb jelentőséggel bír a mindennapi működésben, beleértve az orvosi filozófiát is. A betegek egészségügyi ellátásának növekvő igényeivel a kórházi igények az informatizációs hálózatból az internetes kórházba és végül az intelligens kórházba fejlődnek. Ezzel egyidejűleg az AI-eszközök és a hardverek teljesítménye is gyorsan növekszik napról napra. Végül az általános AI-algoritmusok, mint például a CV, az NLP és az adatbányászat, elkezdnek beépülni az orvosi berendezések piacára (4. ábra).

#### Elektronikus orvosi nyilvántartáson alapuló mesterséges intelligencia-orvos

A körtörténeti adatok esetében elkerülhetetlen megemlíteni az IBM Watson platformja által kifejlesztett Doctor Watson, valamint az onkológia megoldását célzó Modernizing Medicine-t, amelyet az Egyesült Államokban a CVS és a Walgreens, Kínában pedig különböző orvosi szervezetek is alkalmaznak. A Doctor Watson kihasználja az IBM Watson platform NLP-teljesítményét, amely már összegyűjtötte az orvosi előzmények hatalmas adatait, valamint a szakirodalomban található előzetes ismereteket referenciaként. A páciensek esetének bevétele után Doctor Watson átnézi az orvosi történeti tartalmakat, és egy elemi kezelési javaslatot alkot, amelyet az előzetes tudástartalmak alapján tovább rangsorol. A tárolt többféle modellel Watson doktor megadja a finális javaslatot, valamint a javaslat konfinícióját. Az ilyen mesterséges intelligencia-doktorok esetében azonban még mindig vannak problémák, mivel <sup>51</sup> az amerikai kórházak előzetes tapasztalataira támaszkodnak, a javaslat nem biztos, hogy más, eltérő egészségbiztosítással rendelkező régiókban is alkalmazható.



#### 4. ábra. A mesterséges intelligencia az orvostudományban

politikák. Emellett a Watson platform tudásfrissítése is nagymértékben támaszkodik a tudástartalék frissítésére, ami továbbra is kézi munkát igényel. (például májrákra, tüdőrákra, emlőrákra,

#### AI a közegészségügyben: QR-kód a COVID-19 számára

A mesterséges intelligencia számos módon használható közegészségügyi célokra. Az egyik klasszikus felhasználási mód a betegségek kitörésének felderítése a keresőmotorok lekérdezési adatai vagy a közösségi média adatai alapján, ahogyan azt a Google tette az influenzajárványok előrejelzésére<sup>52</sup> és ahogyan azt a Kínai Tudományos Akadémia tette a COVID-19 járvány modellezésére több forrásból származó információk fúziója révén.<sup>53</sup> A COVID-19 járvány kitörése után Kína kifejlesztett egy digitális egészségügyi gyorsreagálási (QR) kódrendszert, figyelembe véve egyrészt a confirmált COVID-19-es esetekkel való potenciális érintkezés felderítését, másrészt a személy egészségi állapotának jelzését mobil big data segítségével.<sup>54</sup> A különböző színek különböző egészségi állapotot jeleznek: a zöld az egészséges és a mindennapi élethez megfelelő, a narancssárga a kockázatos és karantént igénylő, a piros pedig a confirmed COVID-19 beteget jelenti. A nagyközönség számára könnyen használható, és számos más ország is átvette. Az egészségügyi QR-kód nagyban hozzájárult a COVID-19 világjárvány világméretű megelőzéséhez és ellenőrzéséhez.

#### Biomarkerek felfedezése mesterséges intelligenciával

A nagydimenziós adatokat, beleértve a multi-omikai adatokat, a betegjellemzőket, az orvosi laboratóriumi vizsgálati adatokat stb., gyakran használják különböző prediktív vagy prognosztikai modellek létrehozására DL vagy statisztikai modellezési módszerek segítségével. Például a COVID-19 súlyossági értékelési modellt ML segítségével építették fel a szérumok proteomikai és metabolomikai profiling adatainak felhasználásával<sup>55</sup>; integrált geo- netikai, klinikai és demográfiai adatok felhasználásával Taliaz és munkatársai ML-modellt építettek az antidepresszáns gyógyszerekre adott betegválasz előrejelzésére<sup>56</sup>; prognosztikai modellek többféle ráktípusra

gyomorrák, vastagbélrák, hasnyálmirigyák, prosztatarák, petefészekrák, limfóma, leukémia, szarkóma, melanoma, hólyagrák, veserák, pajzsmirigyák, fej-nyakrák stb.) DL vagy statisztikai módszerekkel, például a legkisebb abszolút zsugorodás és a kiválasztási operátor (LASSO) segítségével, Cox arányos veszélyek regressziójával kombinálva alakították ki. modell genomikai adatok felhasználásával. 57

**Képalapú orvosi AI**

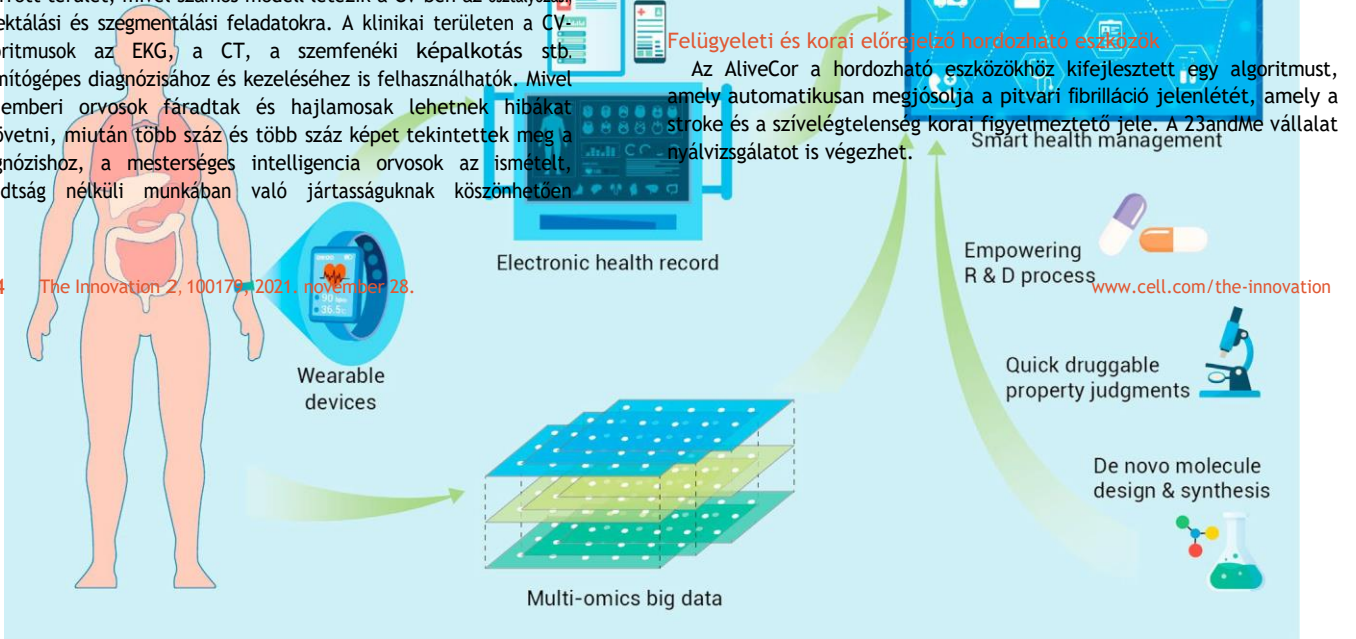
Az orvosi képi mesterséges intelligencia az egyik legfejlettebb, kiforrott terület, mivel számos modell létezik a CV-ben az osztályozási, detektálási és szegmentálási feladatokra. A klinikai területen a CV-algoritmusok az EKG, a CT, a szemfenéki képalkotás stb. számítógépes diagnosztikához és kezeléséhez is felhasználhatók. Mivel az emberi orvosok fáradtak és hajlamosak lehetnek hibákat elkövetni, miután több száz és több száz képet tekintettek meg a diagnosztikához, a mesterséges intelligencia orvosok az ismételt, fáradtság nélküli munkában való jártasságuknak köszönhetően

felülmúlhatják az emberi orvosi képnézegetőt. Az FDA által jóváhagyott első orvosi AI termék az IDx-DR, amely egy AI modellt használ a diabéteszes retinopátia előrejelzésére. A SkinVision okostelefon-alkalmazás pontosan felismeri a melanomákat. 58 "Fraktáleanalízist" használ az anyajegyek és a környező bőrfelületek azonosítására a méret, az átmérő és számos más paraméter alapján, valamint az abnormalis növekedési tendenciák felismerésére. A LEPU Medical AI-EKG alkalmazása képes automatikusan felismerni a szívbetegségeket EKG-képek alapján. A Lianying Medical kihasználja hardveres berendezéseit, hogy valós idejű, nagydefiniójú, képzérezelt, teljes körű sugárterápiás technológiát állítson elő, amely sikeresen megvalósítja a pontos kezelést.

**Felügyeleti és korai előrejelző hordozható eszközök**

Az AliveCor a hordozható eszközökhöz kifejlesztett egy algoritmust, amely automatikusan megjósolja a pitvari fibrilláció jelenlétét, amely a stroke és a szívelégtelenség korai figyelmeztető jele. A 23andMe vállalat nyálvizsgálatot is végezhet.

714 The Innovation 2, 100179, 2021, november 28.



mintákat kis költséggel, és az ügyfél a génjei alapján információkat kaphat, beleértve azt is, hogy kik voltak az ősei, vagy hogy milyen lehetséges betegségekre lehet hajlamos a későbbi életében. Az egyéni és családi genetikai adatokon alapuló, pontos egészségügyi menedzsment megoldásokat kínál. A közeli funkció 20-30 év alatt véleményünk szerint több irányba is folytatódhat a kutatás: (1) ok-okozati következtetés a valós idejű kórházi kockázat-előrejelzéshez. A klinikai orvosok általában ésszerű magyarázatokat szereznek bizonyos orvosi döntésekhez, de a jelenlegi AI modellek manapság általában fekete doboz modellek. Az ok-okozati következtetés segít az orvosoknak megmagyarázni bizonyos AI-döntéseket, és akár új alapigazságokat is felfedezhetnek. (2) Eszközök, beleértve a viselhető eszközöket a többdimenziós egészségmegfigyeléshez. A multimodális modell mostanában az AI-kutatás egyik trendje. A multimodális adatok gyűjtésére szolgáló különböző eszközökkel és az összes ilyen adatot egyesítő központi processzossal a modell képes a felhasználó általános, valós idejű egészségi állapotának megfigyelésére és pontosabb óvintézkedések megtételére.

(3) A klinikai markerek automatikus felfedezése olyan betegségek esetében, amelyeket nehéz

diagnózis. Az olyan betegségek, mint az ALS, még mindig nehezen diagnosztizálhatók a klinikai orvosok számára, mivel nincs hatékony általános markerük. Lehetséges lehet, hogy a mesterséges intelligencia felfedezzen közös jelenségeket ezeknél a betegeknél, és fiatalítson egy hatékony markert a korai diagnózishoz.

### AI-alapú gyógyszerkutatás

Ma a precíziós orvoslás korszakába léptünk, és az új célzott gyógyszerek a precíziós terápia sarokkövei. Az elmúlt évtizedekben azonban átlagosan több mint egymilliárd dollár és 10 év kellett ahhoz, hogy egy új gyógyszer piacra kerüljön. A gyógyszerfejlesztés felgyorsítása és a késői stádiumú kudarok elkerülése kulcsfontosságú kérdés a nagy és nagy versenytárs gyógyszeripari vállalatok számára. A mesterséges intelligencia - beleértve az ML-t, a DL-t, a szakértői rendszereket és a mesterséges neurális hálózatokat (ANN) - kiemelkedő szerepe új ismereteket és nagyfokú hatékonyságot hozott az új gyógyszerek felfedezésének folyamatába. A mesterséges intelligenciát a gyógyszerkutatás számos területén alkalmazzák, beleértve a *de novo* molekula-tervezést, a fehérjék és ligandumok szerkezetalapú modellezését, a szerkezet-hatáskapcsolat kvantitatív kutatását és a gyógyszerképeség megítélését. A DL-alapú mesterséges intelligencia-berendezések kiváló érdemeket mutatnak a gyógyszerkutatás néhány kihívást jelentő problémájának megoldásában. Természetesen a kémiai szintézisútvonalak előrejelzése és a kémiai folyamatok optimalizálása is értékes az új gyógyszerek felfedezésének felgyorsításában, valamint a gyártási költségek csökkentésében. Az elmúlt években jelentős előrelépés történt a mesterséges intelligenciával támogatott új gyógyszerek felfedezésében, mind az új kémiai egységek felfedezése, mind a kapcsolódó üzleti terület tekintetében. A DeepMind a DNN-ek alapján építette fel az AlphaFold platformot a 3D-s fehérjeszerkezetek előrejelzésére, amely felülmúlta a többi algoritmust. A nagyszerű teljesítmény illusztrációjaként az AlphaFold sikeresen és pontosan megjósolt 25 karcfehérje szerkezetet egy 43 fehérje panelből, anélkül, hogy korábban épített fehérjemodelleket használt volna. Ennek megfelelően az AlphaFold 2018 decemberében megnyerte a CASP13 fehérje- hajtogató versenyt.<sup>59</sup> A GAN-ok és más ML-módszerek alapján az Insilico felépített egy moduláris gyógyszertervezési platformot, a GENTRL rendszert. 2019 szeptemberében beszámoltak a GENTRL rendszerrel kifejlesztett first *de novo* aktív DDR1 kináz inhibitor felfedezéséről. A csapat a célpont kiválasztásától számítva mindössze 46 napot vett igénybe, hogy *in vivo* adatok felhasználásával aktív hatóanyag-kandidátumot kapjon.<sup>60</sup> Az Exscientia és a Sumitomo Dainippon Pharma a Centaur Chemist AI platformon fejlesztett ki egy új gyógyszerjelöltet, a DSP-1181-et a kényszeres kényszerbetegség kezelésére. A DSP-1181 2020 januárjában kezdte meg az I. fázisú klinikai vizsgálatokat, ami azt jelenti, hogy a program elindításától az I. fázisú vizsgálatig az átfogó feltárás kevesebb mint 12 hónapot vett igénybe. Ezzel szemben a hagyományos módszerekkel történő hasonló gyógyszerkutatás

a hagyományos módszerekkel általában 4-5 évre van szükség.

Ce Press Partner Journal

Hogyan alakítja át a mesterséges intelligencia az orvosi gyakorlatot:

### A méhnyakrák esettanulmánya

A méhnyakrák, mint a nők leggyakoribb rosszindulatú daganata, olyan betegség, amelynek egyértelmű oka van, és amely korai felismerés esetén megelőzhető, sőt kezelhető. A méhnyakrák szűrési stratégiája hagyományosan főként a "háromlépcsős" modellt követi: "méhnyakcitológia-kolposzkópia-hisztopatológia".<sup>61</sup> Azonban a vizsgálati módszerek szintje miatt a méhnyakrákszűrés hatékonysága nem magas. Emellett az orvosok ismereteinek hiánya miatt egyes alapkórházakban a betegek nem kapják meg a legjobb diagnózist és kezelési döntéseket. Az elmúlt években, a

a számítástechnika és a big data korszakában a mesterséges intelligencia fokozatosan elkezdett terjeszkedni és beoladni a különböző filmekbe. Különösen a mesterséges intelligenciát széles körben használták a különböző rákbetegségekben, mint az adatbányászat új eszközeit. A méhnyakrák esetében több millió orvosi feljegyzést és patológiai adatot tartalmazó klinikai adatbázist hoztak létre, és kifejlesztettek egy AI orvosi eszközkészletet.<sup>62</sup> Egy ilyen AI-elemző algoritmus támogatja az orvosokat abban, hogy hozzáférjenek a gyors iteratív AI-modellképzés képességéhez. Ezenkívül kifejlesztettek egy ML által létrehozott prognosztikai előrejelző modellt és egy webalapú prognosztikai eredmény-kalkulátort, amely pontosan meg tudja jósolni a méhnyakrákos betegeknek a posztoperatív kiújulás és a halálozás kockázatát, és ezáltal jobban irányítja a döntéshozatalt a posztoperatív adjuváns kezelésben.<sup>63</sup>

## AI IN MATERIALS SCIENCE

A modern ipar sarokköveként az anyagok döntő szerepet játszottak az anyag forradalmi formáinak megtervezésében, olyan célzott tulajdonságokkal, amelyek széleskörű alkalmazásokat tesznek lehetővé az energia, az információ, a biomedicina, az építőipar, a szállítás, a nemzetbiztonság, az űrkutatás stb. területén. A hagyományos stratégiák az új anyagok felfedezéséhez az empirikus kísérleti próbálkozásokra és hibákra, valamint az elméleti szimulációs módszerekre, például a sűrűségfüggvény-elméletre, a termodinamikára vagy a molekuladinamikára támaszkodnak.<sup>64</sup> Ezek a módszerek gyakran szembesülnek a hosszú kutatási ciklusok, a magas költségek és az alacsony sikerességi arányok kihívásaival, és így nem képesek megfelelni a jelenlegi anyagtudomány egyre növekvő igényeinek. A fejlett anyagok felfedezésének és alkalmazásának felgyorsítása ezért alapvető fontosságú lesz a következő korszakban.

Az adatfeldolgozás és a nagy teljesítményű algoritmusok gyors fejlődésével az AI-alapú módszerek, például az ML és a DL, jó lehetőségeket kínálnak az új anyagok keresésében és tervezésében, még a tényleges gyártásuk előtt.<sup>65,66</sup> Az olyan anyagtulajdonsági adatok integrálásával, mint az alkotóelem, a rácsszimmetria, az atomsugár, a valencia, a kötési energia, az elektronegativitás, a mágnesség, a polarizáció, az energiasáv, a szerkezet-tulajdonság kapcsolat és a funkcionalitások, a gépet be lehet tanítani arra, hogy "gondolkodjon" az anyagtervezés javításáról, és akár

költséghatékony módon előre jelezze az új anyagok tulajdonságait (5. ábra).

## Mesterséges intelligencia az új anyagok felfedezésében és tervezésében

A közelmúltban a mesterséges intelligencia technikák jelentős előrelépéseket tettek különböző anyagok racionális tervezésében és gyorsított felfedezésében, mint például a nagy elektromos feszültségű piezoelektromos anyagok,<sup>67</sup> a szerves-szerves perovszkitok a fotovolttaikumokhoz,<sup>68</sup> a molekuláris emitterek az efficients fénykibocsátó diódákhoz,<sup>69</sup> a szerves-szerves szilárd anyagok a termoelektrikához,<sup>70</sup> és a szerves elektronikus anyagok a megújuló energiaforrásokhoz.<sup>66,71</sup> Az adatvezérelt számítástechnika és az algoritmus optimalizálás ereje elősegítheti a szimuláció és az ML (azaz a nagy áteresztőképességű virtuális szűrés, az inverz molekuláris tervezés, a Bayes-optimalizálás és a felügyelt tanulás stb.) átfogó alkalmazását az anyagfeltárásban és a tulajdonságok előrejelzésében a különböző filmekben.<sup>72</sup> Például egy DL Bayes-féle keretrendszer használatával az attribútumvezérelt inverz anyagtervezést demonstrálták a funkcionális molekuláris anyagok hatékony és pontos előrejelzésére, a kívánt félévezető tulajdonságokkal vagy redox-stabilitással a szerves vékonyrétegű tranzistorokban, szerves napelemekben vagy lítium-ionos elemekben való alkalmazásra.<sup>73</sup> A potenciális anyagok gyors kísérleti teszteléséhez automatizálási eszközöket célszerű alkalmazni, és nagy teljesítményű számítástechnikát kell alkalmazni az ömlesztett, határfületi és hibákkal kapcsolatos tulajdonságaik kiszámításához.<sup>74</sup> Az automatizálás, a számítástechnika és az ML hatékony konvergenciája jelentősen felgyorsíthatja az anyagok felfedezését. A jövőben a mesterséges intelligencia technikák segítségével megvalósítható lesz a szupravezetők, fémüvegek, szilárd ötvözetek, nagyentrópiájú ötvözetek, magas hőmérsékletű szuperötvözetek, termoelektromos anyagok, kétdimenziós anyagok, magnetokalorikus anyagok, polimer bioinspirált anyagok, érzékeny kompozit anyagok, topológiai (elektronikus és fonon) anyagok stb. tervezése. Az elmúlt évtizedben a topológiai anyagok lángra lobbantották a kondenzált anyagokkal foglalkozó fizikusok, anyagtudósok és kémikusok kutatási lelkesedését, mivel egzotikus fizikai tulajdonságokkal rendelkeznek, amelyek potenciális alkalmazásokat kínálnak az elektronikában, a termoelektrikában, az optikában, a katalízisben és az energiával kapcsolatos figyelemben. A legfrissebb előrejelzések szerint a természetben található szerves anyagok több mint egynegyede topológiai nem triviális. A topológiai elektronikai anyagok adatbázisainak<sup>75-77</sup> létrehozása és a

5. ábra. A mesterséges intelligencia várhatóan az anyagtudomány fejlődésének motorja lesz

topológiai fononikus anyagok adatbázisa<sup>78</sup> nagy áteresztőképességű módszerek alkalmazásával felgyorsítja a funkcionális alkalmazásokhoz szükséges új topo- logikus anyagok szűrését és kísérleti felfedezését. Elismert tény, hogy a mesterséges intelligencia gyakorlásához nagyméretű, kiváló minőségű adathalmazokra van szükség. Nagy erőfeszítéseket tettek a kiváló minőségű anyagtudományi adatbázisok létrehozására is. <sup>A</sup> maga nemében az egyik legjelentősebb adatbázis, az "atomly.net" <sup>anyagadat-infrastruktúra</sup><sup>79</sup> több mint 180 000 szervesen vegyület tulajdonságait számította ki, beleértve az egyensúlyi szerkezetüket, az elektronenergia-sávokat, a dielektromos tulajdonságokat, a szimulált diffrakciós mintákat, a rugalmassági tenzorokat stb. is. Az atomly.net adatbázis így szilárd alapot teremtett a mesterséges intelligencia kiterjesztéséhez az anyagtudományi kutatás területére. Az atomly.net röntgendiffrakciós (XRD)-illesztő modellje ML-t használ a kísérleti XRD és a szimulált minták összevetésére és osztályozására. Nemrégiben az atomly.net adatkészletének felhasználásával egy pontos AI-modellt építettek, amely szinte bármely adott vegyület formázási energiáját gyorsan megjósolja, és meglehetősen jó előrejelző képességgel rendelkezik.<sup>80</sup>

#### AI-alapú anyaggenom kezdeményezés

Az Anyaggenom Kezdeményezés (MGI) egy nagyszerű terv az új anyagok és a kapcsolódó funkciók racionális megvalósítására, és célja a fejlett anyagok effciens, költséghatékony és intelligens felfedezése, gyártása és alkalmazása. A kezdeményezés politikát, erőforrásokat és infrastruktúrát hoz létre az anyagfejlesztés magas szintű felgyorsításához. Ez egy új paradigma a következő generációs anyagok felfedezéséhez és tervezéséhez, és az alapvető építőelemek nézőpontjából az általános anyagfejlesztés felé halad, és az elmélet, a számítás és a kísérlet terén tett erőfeszítéseken keresztül, magasan integrált, nagy áteresztőképességű módon gyorsítja fel az anyagfejlesztést. Az MGI rendkívül magas célt és magas színvonalat tűz ki az anyagfejlesztés és az emberiség számára a jövő anyagtudománya számára. Az MGI szellemisége az új anyagok tervezése az adathalmazok és a nagy teljesítményű számítások felhasználásával, amint a funkcionális felhasználás követelményei vagy asz- pirációi megjelennek. Az elmélet, a számítás és az algo- rithmus az elsődleges és lényeges tényezők az MGI létrehozásában és megvalósításában. Az elméletek, a számítások és a kísérletek fejlődése a

Az anyagtudomány és az anyagmérnöki tudományok biztosítják az alapot ahhoz, hogy ne csak az új anyagok megvalósításának sebességét gyorsítsák fel, hanem az új termékek piacra jutásához szükséges időt is lerövidítsék. Ezek a mesterséges intelligencia technikák nagy ígéretet jelentenek a fejlődő MGI számára. Az új technológiák, például az ML és a DL alkalmazása közvetlenül felgyorsítja az anyagkutatást és az MGI létrehozását. A modellépítés és a tudományban és a mérnöki tudományokban való alkalmazás, valamint az adatinfrastruktúra központi jelentőségű. Ha a mesterséges intelligencia által támogatott MGI-megközelítések a gyártási módszerek folyamatos autonómiájával párosulnak, akkor a jövőben a társadalomra és a gazdaságra gyakorolt potenciális hatás mélyreható. Most kezdjük látni, hogy az AI-alapú MGI többek között integrálja a kísérleteket, a számításokat és az elméletet, és megkönnyíti az anyagokkal kapcsolatos adatokhoz való hozzáférést, felkészíti az anyagokkal foglalkozó munkaerő következő generációját, és paradigmaváltást tesz lehetővé az anyagfejlesztésben. A mesterséges intelligenciával támogatott MGI emellett operatív eljárásokat is tervezhet és irányíthatja a kísérletek végrehajtásához szükséges berendezéseket, valamint a jövőbeni anyagkutatásban az autonóm kísérletezés további megvalósítása érdekében.

#### Fejlett funkcionális anyagok a mesterséges intelligencia generációs fejlesztéséhez

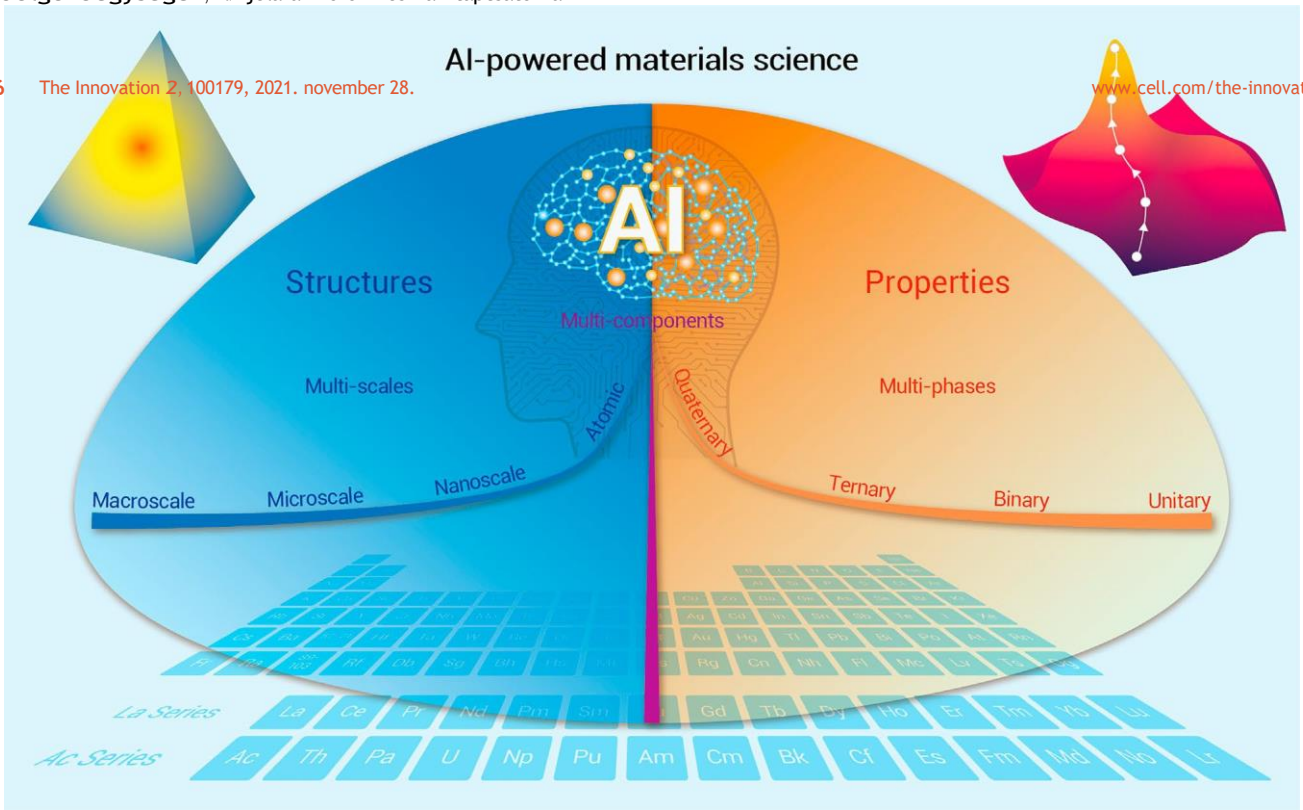
A mesterséges intelligencia technikák megvalósítása és alkalmazása a számítási képességektől és a számítógépes hardvertől függ, és ez a fizikai funkcionalitást a számítógépek vagy szuperszámítógépek teljesítményére alapozza. A jelenlegi technológiánk esetében az elektromos áramot vagy az elektromos chipok és eszközök meghajtására szolgáló elektromos hordozókat hétköznapi tulajdonságokkal rendelkező elektronok alkotják, például nagy tömeggel és alacsony mobilitással. Minden chip és eszköz viszonylag jelentős hőmennyiséget bocsát ki, ami túl sok energiát fogyaszt és csökkenti az információátvitel hatékonyságát. A modern fizika gyors fejlődésének köszönhetően egy sor fejlett, egzotikus funkcionális hatással rendelkező anyagot fedeztek fel vagy terveztek, köztük szupravezetőket, kvantum anomális Hall-szigetelőket és topológiai fermionokat. Különösen a szupravezető állapot vagy a topológiai nem triviális elektronok fogják elősegíteni a következő generációs mesterséges intelligencia technikákat, amint ezen állapotok (közel) szobahőmérsékletű alkalmazásait megvalósítják

és integrált áramkörökbe ültetik. <sup>81</sup> Ebben az esetben a központi feldolgozóegységek, a jeláramkörök és a tápcsatornák

meghajtása a következők alapján történik majd.

716 The Innovation 2, 100179, 2021. november 28.

[www.cell.com/the-innovation](http://www.cell.com/the-innovation)



a tömegmentes, energiadiffúzió nélküli, ultranagy mozgékonyágú vagy királis védelmet biztosító tulajdonságokkal rendelkező elektronikus hordozókra. A közönséges elektronokat eltávolítják a jövő generációs chipek és eszközök fizikai áramköréből, így a szupravezető és topológiai királis elektronok maradnak a jövő mesterséges intelligencia chipjeiben és szuperszámítógépeiben. Az információátvitel és a logikai számítások hatékonysága hatalmas mértékben és nagyon alacsony költséggel javulni fog.

### AI az anyagokért és anyagok a mesterséges intelligenciáért

Az elkövetkező évtizedben folytatódik a fejlett ML-algoritmusok, az újonnan megjelenő adatvezérelt mesterséges intelligencia-módszerek és a szerkezettervezést és a tulajdonságok előrejelzését megkönnyítő integrált technológiák fejlesztése, valamint a fejlett anyagok felfedezésének, tervezésének, fejlesztésének és a meglévő és új ipari ágazatokban való alkalmazásának felgyorsítása. Jelenleg kihívásokkal állunk szemben, amikor a kísérlet, a számítás és az elmélet integrálásával gyorsított anyagkutatót kell megvalósítanunk. A magas szintű anyagkutatóra javasolt nagyszerű MGI segíti ezt a folyamatot, különösen akkor, ha azt mesterséges intelligencia technikák segítik. Még mindig hosszú út áll előttünk ahhoz, hogy a fejlett funkcionális anyagok felhasználása a jövő generációs elektromos chipekben és eszközökben megvalósuljon. Még több anyagot és funkcionális hatást kell felfedezni vagy javítani a fejlődő mesterséges intelligencia technikák segítségével. Mindeközben érdemes megjegyezni, hogy az anyagok a fejlett mesterséges intelligencia-rendszerek számítógépek vagy gépek építéséhez használt eszközök és chipek alapvető alkotóelemei. Az új anyagok gyors fejlődése, különösen a rugalmas, érzékeny és intelligens anyagok megjelenése nagy jelentőséggel bír a vonzó technológiák széles köre számára, mint például a rugalmas áramkörök, a nyújtható tapintású érzékelők, a többfunkciós működtetők, a tranzistoralapú művi szinapszisok, a félvezető/kvantumesczözök integrált hálózatai, az intelligens robotika, az ember-gép interakciók, a szimulált izmok, a bioméretű protézisek stb. számára. Ezek az ígéretes anyagok, eszközök és integrált technológiák nagymértékben elősegítik a mesterséges intelligencia rendszerek fejlődését az emberi életben való széles körű alkalmazás felé. Amint a fizikai áramköröket fejlett funkcionális vagy intelligens anyagokkal fejleszti, a mesterséges intelligencia technikák nagymértékben elősegítik az összes tudományág fejlesztését és alkalmazását.

### AI A FÖLDTUDOMÁNYOKBAN

#### A földtudományok számos területén alkalmazott mesterséges intelligencia-technológiák

A jelenlegi társadalmat fenyegető jelentős kihívások a földtudományokhoz tartozó problémák megoldását igénylik, mint például az éghajlatváltozás hatásainak értékelése, a levegőtisztaság felmérése, a katasztrófahelyzetek infrastruktúrára gyakorolt hatásainak előrejelzése, az élelmiszer-, víz- és talajforrások bejövő fogyasztásának és rendelkezésre állásának kiszámítása, valamint az esetleges vulkánkitörések, szökőárok, árvizek és földrengések indikátorainak azonosítása.<sup>82,83</sup> A fejlett technológiai termékek (pl. mélytengeri fúróhajók és távérzékelő műholdak) megjelenésével lehetővé vált a számítási infrastruktúra olyan fejlesztései, amelyek lehetővé teszik a földtudományok területén több modell nagyszabású, széleskörű szimulációinak feldolgozását, valamint az internetalapú adatelemzés, amely megkönnyíti az adatok elosztott és tömeges környezetben történő gyűjtését, feldolgozását és tárolását.<sup>84</sup> A tömeges földtudományi adatok egyre növekvő hozzáférhetősége korlátlan lehetőségeket biztosít a mesterséges intelligencia számára - amely mindennapi életünk minden aspektusát (pl. szórakozás, közlekedés és kereskedelem) népszerűsítette -, hogy jelentősen hozzájáruljon a nagy társadalmi jelentőségű földtudományi problémák megoldásához. Ahogy a földtudomány a hatalmas adatmennyiség korszakába lép, a különböző filmekben már nagy sikereket elért mesterséges intelligencia hatalmas lehetőségeket kínál a földi rendszerek egy sor problémájának megoldására.<sup>85,86</sup> A diverzifikált adatok kíséretében a mesterséges intelligenciával támogatott technológiákat, mint például az intelligens szenzorok, a képi vizualizáció és az intelligens inverzió, aktívan vizsgálják a földtudományok számos területén, mint például a tengeri földtudomány, a közetfizika, a geológia, az ökológia, a szeizmicitás, a környezetvédelem, a hidrológia, a távérzékelés, az Arc GIS és a síkvidéktudomány.<sup>87</sup>

### Többszörös kihívások a földtudományok fejlődésében

A földtudományok fejlődésének van néhány olyan jellemzője, amely korlátozza az alapvető algoritmusok alkalmazhatóságát a tudás feltárására: (1) a földtudományi folyamatok eredendő kihívásai, (2) a földtudományi adatgyűjtés korlátai, és (3) a minták és az alapigazság bizonytalansága.<sup>88-90</sup> Amorf kötött

A földtudományokban általában olyan tér és idő közötti objektumok léteznek, amelyek nem olyan jól definiáltak, mint más területeken. A földtudományi jelenségek is jelentősen többváltozósak, nemlineáris összefüggéseknek engedelmessé válnak, tér-időbeli struktúrákat és nem stacionárius jellemzőket mutatnak. A földtudományi megfigyelések eredendő kihívásait leszámítva, az idő és tér több dimenziójában, különböző szintű hiányosságokkal, zajjal és bizonytalanságokkal rendelkező hatalmas mennyiségű adat zavarja a földtudományi folyamatokat. A felügyelt tanulási megközelítések esetében a földtudományi alkalmazásokban a gold standard alapigazság hiánya és a minták "kis mérete" (pl. kis mennyiségű, sufficiens megfigyeléseket tartalmazó történeti adat) miatt további diffikációk merülnek fel.

#### Usage of AI technologies as efficient approaches to promote the geoscience processes

A földtudósok folyamatosan mindent megtesznek annak érdekében, hogy jobb technikákat fejlesszenek ki a Föld rendszer jelenlegi állapotának (pl. mennyi üvegházhatású gáz kerül a légkörbe), valamint az alrendszerek közötti és azokon belüli kapcsolatoknak (pl. hogyan befolyásolja a megemelkedett hőmérséklet az óceáni ökoszisztémát) szimulálására. A földtudományok szemszögéből nézve az újonnan kialakuló megközelítések a mesterséges intelligencia segítségével tökéletes kombinációt jelentenek a földtudományok alkalmazása során felmerülő ezen kérdésekhez: (1) objektumok és események jellemzése<sup>91</sup>; (2) földtudományi változók becslése megfigyelésekből<sup>92</sup>; (3) földtudományi változók előrejelzése hosszú távú megfigyelések alapján<sup>85</sup>;

(4) a földtudományi adatok összefüggéseinek feltárása<sup>93</sup>, és (5) az ok-okozati összefüggések feltárása és az ok-okozati összefüggések tulajdonítása.<sup>94</sup> Míg a földtudományi objektumok és események jellemzése a hagyományos módszerekkel elsősorban a kézzel kódolt jellemzőkben gyökerezik, az algoritmusok a teljesítményt mintázatbányászati technikákkal javítva automatikusan felismerhetik az adatokat. A homályos határokkal rendelkező tér-időbeli célok és a kapcsolódó bizonytalanságok miatt azonban a különböző események és objektumok jellemzésekor szükség lehet olyan minta- bányászati módszerek fejlesztésére, amelyek képesek megmagyarázni a földtudományi adatok időbeli és térbeli jellemzőit. A földtudományi adatok nem stacionárius problémájának megoldására a mesterséges

intelligenciával támogatott algoritmusokat kiterjesztették a professzionális előrejelzők holisztikus eredményeinek integrálására és az éghajlati változók (pl. páratartalom és hőmérséklet) robusztus becslésére. Továbbá a Föld rendszerének jelenlegi helyzetére vonatkozó hosszú távú tendenciák előrejelzése mesterséges intelligenciával támogatott technológiák segítségével szimulálhatja a jövőbeli forgatókönyveket, és korai erőforrás-tervezési és alkalmazkodási politikákat alakíthat ki. A földtudományi adatok kapcsolatainak bányászata segíthet megragadni a Föld rendszerének létfontosságú jeleit, és elősegítheti a földtudományi fejlemények megértését. Nagy érdeklődésre tarthat számot a mesterséges intelligencia-döntési módszertan fejlődése bizonytalan előrejelzési valószínűségekkel, ami homályos kockázatokat generál rosszul megoldott csóvakkal, jelezve a modellkészletek által megfogalmazott legszélsőségesebb, átmeneti és ritka eseményeket, ami különböző eseteket támogat a pontosság és a hatékonyság javítása érdekében.

#### AI technológiák a földtudományi erőforrás-gazdálkodás optimalizálására

Jelenleg a mesterséges intelligencia néhány jól definiált feladatban jobban teljesít, mint az ember. A mesterséges intelligencia technikákat például a városi vízkészlet-tervezésben használják, főként a modellezés, a rugalmasság, az érvelés, valamint a vízigény és a vízkapacitás előrejelzésének figyelemre méltó képessége miatt. Az adaptív intelligens dinamikus vízkészlet-tervezési rendszer, a városi régiók fenntartható vízkészlet-gazdálkodásának AI részhalmozatának tervezése és alkalmazása, amely nagyrészt a vízkészletek elosztásának optimalizálását ösztönözte, figyelembe fogja venni a működési költségeket és javítani fogja a környezetgazdálkodás fenntarthatóságát<sup>95</sup> (6. ábra). A meteorológia is óriási mennyiségű adat gyűjtését igényli számos különböző változóról, például a páratartalomról, a magasságról és a hőmérsékletről; egy ilyen hatalmas adathalmaz kezelése azonban nagy kihívást jelent.<sup>96</sup> Egy AI-alapú technikát használnak a sekélyvízi zátonyokról készült képek elemzésére, a korallok színének felismerésére - az éghajlatváltozás hatásainak nyomon követésére -, valamint a páratartalom, a hőmérséklet és a CO<sub>2</sub> adatok gyűjtésére - ökológiai környezetünk egészségének megragadására.<sup>97</sup> A mesterséges intelligencia meteorológiai képességein túlmenően kritikus szerepet játszhat az elektromos energiaszektorból származó üvegházhatású gázok kibocsátásának csökkentésében is. A villamos energia termeléséből, szállításából, elosztásából és fogyasztásából álló villamosenergia-ágazatban számos lehetőség kínálkozik az AI-alkalmazások számára, többek között a fejlesztés felgyorsítására.

6. ábra. A mesterséges intelligencia alkalmazása a hidraulikus erőforrás-gazdálkodásban

az új, tiszta energiaforrások, a rendszeroptimalizálás és -irányítás javítása, a villamosenergia-igény előrejelzésének és elosztásának javítása, valamint a rendszerfelügyelet fejlesztése.<sup>98</sup> A mesterséges intelligencia segítségével akár új anyagokat is találhatunk az energiatároló akkumulátorok vagy anyagok számára, és elnyelhetjük a CO<sub>2</sub> a légkörből.<sup>99</sup> Bár a hagyományos fosszilis tüzelőanyag-műveleteket már évezredek óta széles körben használják, a mesterséges intelligencia technikák segítségével feltárják a potenciálisabb fenntartható energiaforrások fejlesztését a fejlődés számára (pl. fúziós technológia).<sup>100</sup>

Az energiaszerkezetek éghajlatváltozás miatti kiigazítása mellett (ami a földtudományi rendszerek központi része) egy második, kevésbé nyilvánvaló lépés is megtehető az üvegházhatású gázok kibocsátásának csökkentése érdekében: az AI felhasználása az inefficiens célzására. A Lawrence Livermore Nemzeti Laboratórium kapcsolódó statisztikai jelentése rámutatott, hogy az Egyesült Államokban megtermelt energia mintegy 68%-át célszerűbb lenne célzott tevékenységekre, például villamosenergia-termelésre vagy közlekedésre felhasználni, ehelyett azonban hozzájárul a környezeti terhekhez.<sup>101</sup> A mesterséges intelligencia alkalmas arra, hogy csökkentse a jelenlegi atomerőművek és fosszilis tüzelőanyag-üzemeltetés ezen inefficienciáit, valamint javítsa a megújuló hálózati erőforrások hatékonyságát.<sup>102</sup> A mesterséges intelligencia például fontos szerepet játszhat a nap- és szélenergia-üzemeltetésében és optimalizálásában, hogy ezek a megújuló energiát hasznosító rendszerek sokkal hatékonyabbá tegyék a villamos energia termelését.<sup>103</sup> A mesterséges intelligencia segíthet a villamos energia szállításában és elosztásában jelentkező energiaveszteségek csökkentésében is.<sup>104</sup> Egy európai elosztórendszer-üzemeltető a mesterséges intelligenciát a terhelés, a feszültség és a hálózati elosztási adatok elemzésére használta, hogy segítsen az "üzemeltetőknek felmérni a rendszerben rendelkezésre álló kapacitást és megtervezni a jövőbeli igényeket".<sup>105</sup> A mesterséges intelligencia lehetővé tette az elosztórendszer-üzemeltető számára, hogy meglévő és új erőforrásokat alkalmazzon az energiaeszközök elosztásának könnyebben elérhetővé és flexibilisebbé tételében. A Nemzetközi Energiaügynökség pro- posztja szerint az energiahatékonyság az

energiarendszerek reformjának központi eleme, és kulcsszerepet fog játszani abban, hogy a globális energiaigény növekedése 2040-re a jelenlegi szint egyharmadára csökkenjen.

### A mesterséges intelligencia mint a geotudományok fejlődését elősegítő építőelem

A Föld rendszere jelentős tudományos érdeklődésre tart számot, és az élet minden területére hatással van. A mesterséges intelligencia által nyújtott kihívások, problémák és ígéretes irányok definitívan nem kimerítőek, hanem inkább azt hivatottak szemléltetni, hogy nagy lehetőségek rejlenek a jövőbeli mesterséges intelligencia kutatásában ezen a fontos figyelmen kívül hagyott területen. A mesterséges intelligencia megközelítések prosperálása, fejlesztése és népszerűsítése a geotudományokban általában egy feltett scientific kérdésen alapul, és a sikerhez a legjobb út az, ha a mesterséges intelligencia kutatói a kutatás minden szakaszába szorosan együttműködnek a geotudósokkal. A geotudósok ugyanis jobban megérthetik, hogy melyik sci-entifik kérdés fontos és újszerű, melyik mintavételi eljárás mutathatja ki ésszerűen a benne rejlő erősségeket, mely adatkészletek és paraméterek használhatók a kérdés megválaszolásához, és milyen előfeldolgozási műveleteket végeznek, például szezonális ciklusok eltávolítását vagy simítást. Hasonlóképpen, a mesterséges

intelligencia kutatói jobban alkalmasak annak eldöntésére, hogy mely adatelemzési megközelítések megfelelőek és elérhetőek az adatokhoz, milyen előnyei és hátrányai vannak ezeknek a megközelítéseknek, és mit szereznek meg a megközelítések ténylegesen. Az értelmezhetőség szintén fontos cél a földtudományokban, mert ha megértjük az adatokból kinyert modellek, minták vagy összefüggések mögött álló alapvető érvelést, akkor azok építőelemként használhatók a tudományos ismeretek feltárásában. Ezért a kutatók közötti gyakori kommunikációval elkerülhetők a hosszú távú hibák, és biztosítható, hogy az elemzési eredmények valóban hasznosak legyenek mind a geotudósok, mind a mesterséges intelligencia kutatói számára.

### AI AZ ÉLETTUDOMÁNYOKBAN

A mesterséges intelligencia és az élettudományok fejlődése összefonódik. A mesterséges intelligencia végső célja az emberhez hasonló intelligencia elérése, mivel az emberi agy képes többfeladatú munkavégzésre, minimális felügyelet mellett tanulni és a megtanult készségeket általánosítani, mindezt nagy hatékonysággal és alacsony energiaköltséggel.



718 The Innovation 2, 100179, 2021. november 28.



**Sponge City**  
Urban pipe network management



**Natural disaster management**  
Natural disaster prediction



**Water conservancy project**  
Automatic control of water storage and drainage

www.cell.com/the-innovation

## Kölcsönös inspiráció a mesterséges intelligencia és az idegtudományok között

Az elmúlt évtizedekben az idegtudományi koncepciókat bevezették az ML algoritmusokba, és döntő szerepet játszottak a mesterséges intelligencia számos fontos előrelépésének elindításában. Például a DL-módszerek eredete közvetlenül az idegtudományban keresendő,<sup>5</sup> ami tovább ösztönözte az RL filozófiájának kialakulását.<sup>108</sup> A jelenlegi legkorszerűbb CNN-ek a neurális számítás számos jellemzőjét tartalmazzák, beleértve a nemlineáris átvitelt, a megosztó normalizálást és a bemenetek maximális alapú összevonását,<sup>109</sup> amelyeket közvetlenül az emlősök vizuális kéregében a vizuális bemenet egyedi feldolgozása inspirált.<sup>110</sup> Az agy figyelmi mechanizmusainak bevezetésével egy új hálózatról kimutatták, hogy a hagyományos CNN-ekhez képest nagyobb pontosságot és számítási hatékonyságot produkál a diffikult, több tárgyat felismerő feladatokban.<sup>111</sup> Más idegtudományi figyelmelek, beleértve a munkamemória, az epizodikus memória és a neurális plaszticitás alapjául szolgáló mechanizmusokat, olyan AI-algoritmusok fejlesztését inspirálták, amelyek a mély hálózatok számos kihívását kezelik.<sup>108</sup> Ezek az algoritmusok közvetlenül megvalósíthatók az agy-gép interfész és a neuroprotézisek tervezésében és refinementálásában.

Másrészt a mesterséges intelligencia-kutatásból származó felismerések új lehetőségeket kínálhatnak az emberi és más fajok agyának intelligenciájának alapjairól. A hagyományos idegtudósokkal ellentétben a mesterséges intelligencia kutatói kvantitatív nyelven formalizálhatják az idegi mechanizmusok fogalmait, hogy kivonják azok hasznosságát és az intelligens viselkedéshez való alkalmasságát. Az ilyen csere fontos illusztrációja az RL modellekben az időbeli különbség (TD) módszerek kifejlesztése és a TD-formájú tanulás hasonlósága az agyban.<sup>112</sup> Ezért a China Brain Project mind a megismerés alapkutatását, mind az agyi betegségekkel kapcsolatos transzlációs kutatást és az agy által inspirált intelligencia-technológiát magában foglalja.<sup>113</sup>

## AI az omics nagy adatelemzéshez

Jelenleg a mesterséges intelligencia néhány jól definiált feladatban, például az omikai adatok elemzésében és az intelligens mezőgazdaságban jobban teljesít, mint az ember. A big data <sup>korszakában</sup><sup>114</sup> sokféle adat létezik (sokféleség), az adatok mennyisége nagy, és az adatok generációja (sebesség) gyors. Az adatok nagy változatossága, nagy volumene és gyors sebessége miatt az adatok birtoklása nagy értéket képvisel, de az adatok elemzése is diffizívá teszi. A hagyományos, statisztikán alapuló módszerekkel ellentétben a mesterséges intelligencia könnyen kezelheti a nagy mennyiségű adatot, és feltárhatja a rejtett összefüggéseket.

A genetikai tanulmányokban a mesterséges intelligenciának számos sikeres alkalmazása létezik.<sup>115</sup> Az egyik kulcskérdés annak meghatározása, hogy egyetlen aminosav polimorfizmusa káros-e.<sup>116</sup> Volt már szekvencia konzerváció alapú SIFT117 és hálózat alapú <sup>SySAP</sup><sup>118</sup>, de mindezek a módszerek bot- tönkrementek és nem továbbfejleszthetők. Sundaram és munkatársai kifejlesztették a Prima- teAI-t, amely DNN alapján képes megjósolni a mutáció klinikai kimenetelét.<sup>119</sup> Egy másik probléma az, hogy hogyan lehet a másolati számváltozásokat, amelyek fontos szerepet játszanak a különböző rákos megbetegedésekben, megnevezni.<sup>120,121</sup> Glessner és munkatársai javasoltak egy DL-alapú eszközt, a DeepCNV-t, amelyben a receiver operating characteristic (ROC) görbe alatti terület 0,909 volt, ami sokkal magasabb, mint más ML-módszereké.<sup>122</sup> Az epigenetikus vizsgálatokban az m6A modifikáció az egyik legfontosabb mechanizmus.<sup>123</sup> Zhang et al. kifejlesztett egy ensemble DL prediktort (EDLm6APred) az mRNS m6A helyének előrejelzésére.<sup>124</sup> Az EDL- m6APred ROC-görbe alatti területe 86,6% volt, ami magasabb, mint a meglévő m6A metilációs helyek predikciós modelljei. Számos más DL-alapú omikai eszköz is létezik, például a DeepCpG125 a metilációra, a DeepPep126 a proteomikára, az AtacWorks127 a transzpozázssal hozzáférhető kromatin vizsgálatára nagy áteresztőképességű szekvenálással, és a deepTCR128 a T-sejt receptorok szekvenálására.

Egy másik újonnan megjelenő alkalmazás az egycsejtű szekvenálási adatok DL-je. Ellentétben a

ömlesztett adatok, amelyekben a minta mérete általában sokkal kisebb, mint a teljes halmazé, az egycsejtű adatokban lévő sejtek

mintamérete is nagy lehet a gének számához képest. Ez teszi a DL algoritmust alkalmazhatóvá a legtöbb egycsejtű adatra. Mivel az egycsejtű adatok ritkák és sok nem mért hiányzó értékkel rendelkeznek, a DeepImpute pontosan imputálni tudja ezeket a hiányzó értékeket a nagy gén 3 sejt mátrixban.<sup>129</sup> Az egycsejtű adatok minőségellenőrzése során fontos, hogy az autoencoder segítségével eltávolítsuk a doublet szülő beágyazott sejteket, majd építsünk egy előrecsatolt neurális hálózatot a doublet azonosítására.<sup>130</sup> Az egycsejtű gradiensek alapjául szolgáló potenciális energia használt gener-

atívn modellezés a mögöttes differenciálódási tájkép megismerésére az egyséjtes RNS-szekvenálási adatokból. <sup>131</sup>

In protein structure prediction, the DL-based AlphaFold2 can accurately predict the 3D structures of 98.5% of human proteins, and will predict the structures of 130 million proteins of other organisms in the next few months.<sup>132</sup> It is even considered to be the second-largest breakthrough in life sciences after the human genome project<sup>133</sup> and will facilitate drug development among other things.

#### Az AI intelligenssé teszi a modern mezőgazdaságot

A mezőgazdaság a negyedik forradalom, az úgynevezett mezőgazdaság 4.0 vagy intelligens mezőgazdaság előtt áll, amely a nagy adatmennyiségek korszakának beköszöntével, valamint számos fejlett technológia, különösen az ML, a modern információs és kommunikációs technológiák gyors fejlődésének köszönhetően. <sup>134,135</sup> A DL, az információs és érzékelési technológiák mezőgazdasági alkalmazásai a mezőgazdasági termelés teljes szakaszára kiterjednek, beleértve a nemesítést, a termesztést és a betakarítást.

A hagyományos nemesítés általában a genetikai változásokat használja ki a természetes variáció vagy a mesterséges mutagenézis segítségével. Mindkét módszerrel azonban nehéz a teljes mutációs spektrumot feltárni. A meglévő variánsokon képzett DL-modellek segítségével előrejelzések készíthetők több egyazon génlokuszra vonatkozóan. <sup>136</sup> Például egy ML-módszert, a multi-kritériumos rizs reprodukciós géntípust fejlesztettünk ki és alkalmaztunk a rizs reprodukciós folyamataihoz kapcsolódó kódoló és lincRNS gének előrejelzésére. <sup>137</sup> Továbbá, a jól tanulmányozott genomikai adatokkal rendelkező fajokon (például *Arabidopsis* és rizs) kiképzett modellek más, korlátozott genominformációval rendelkező fajokra (például vadszalmabogyó és szójabab) is alkalmazhatók. <sup>138,1</sup> legtöbb esetben a genotípusok és a phe-notípusok közötti kapcsolatok bonyolultabbak, mint vártuk. Egy gén általában több fenotípusra is reagálhat, és egy tulajdonság általában több gén és többféle fejlődés közötti szinergizmus terméke. Emiatt multi-traits DL modelleket fejlesztettek ki, és lehetővé tették a genomikai szerkesztést a növénynemesítésben. <sup>139,140</sup>

Köztudott, hogy a termények dinamikus és pontos nyomon követése a teljes növekedési időszak létfontosságú a precíziós mezőgazdaság

számára. A mezőgazdaság új szakaszában a távérzékelés és a DL egyaránt nélkülözhetetlen szerepet játszik. A távérzékelés (beleértve a proximális érzékelést is) földi, légi és űrbe telepített platformok segítségével nagy mennyiségű agrárkultúrális adatot állíthat elő, amelyek egyedülálló módon képesek gazdaságos megközelítést kínálni a termésfigyeléshez és -gazdálkodáshoz szükséges roncsolásmentes, időszerű, objektív, szinoptikus, hosszú távú és több léptékű információkhoz, ezáltal nagyban segítve az öntözésre, tápanyagokra, betegségekre, kártevőkre és termésre vonatkozó precíziós döntések meghozatalát. <sup>141,142</sup> A DL lehetővé teszi a tudás egyszerű, hatékony és pontos feltárását a hatalmas és bonyolult adatokból, különösen a távérzékelési nagy adatok esetében, amelyeket többszörös tér-idő-spektrális információ jellemez, köszönhetően a jellemző reprezentáció erős képességének és a megfigyelési adatok és az agronómiai paraméterek vagy termésjellemzők közötti lényeges kapcsolat megragadásában való kiválóságának. <sup>135,143</sup> A DL és a nagy adatok integrálása a mezőgazdaság számára a legmegbontóbb erőt bizonyította, olyan nagy, mint a zöld forradalom. Amint a 7. ábrán látható, az intelligens agrárkultúra forgatókönyvének lehetséges alkalmazásához több forrásból származó műholdas távérzékelési adatokat lehet gyűjteni különböző geo-és rádiometriai információkkal, valamint az UV, a látható és a rövidhullámú infravörös tartományoktól a mikrohullámú tartományokig terjedő spektrális információk bőségével. Ezen túlmenően a fejlett repülőgép-rendszerek, például a fedélzeti multi/hiperspektrális kamerákkal ellátott pilóta nélküli légi járművek és az okostelefon-alapú hordozható eszközök is felhasználhatók lesznek a multi/hiperspektrális adatok megszerzésére a speciális filmekben. Az összes adattípust DL-alapú fúziós technikákkal lehet integrálni különböző célokra, majd megosztani az összes felhasználó számára a felhőalapú számítástechnika számára. A felhőalapú számítástechnikai platformon az adatvezérelt ML-módszerek és fizikai modellek kombinációjával kifejlesztett különböző mezőgazdasági távérzékelési modelleket telepítenek és alkalmaznak a növények számos biofizikai és biokémiai paraméterének megszerzésére, amelyeket egy döntéshozatali és előrejelző rendszer tovább elemez, hogy megkapja az aktuális víz-/tápanyagstresszt, a növekedési állapotot, és megjósolja a jövőbeli fejlődést. Ennek eredményeképpen egy automatikus vagy interaktív felhasználói szolgáltatási platform érhető el, hogy egy integrált irrigációs és trágyázási rendszeren keresztül megfelelő döntéseket hozhassanak a megfelelő intézkedésekhez.

## 7. ábra. A mesterséges intelligencia és a távérzékelés integrációja az intelligens mezőgazdaságban

Továbbá a DL egyedülálló előnyöket kínál speciális mezőgazdasági alkalmazásokban, például sűrű jeleneteknél, amelyek növelik a mesterséges ültetés és betakarítás nehézségeit. A jelentések szerint a képi adatokkal képzett CNN-eket és Autoencoder-modelleket egyre gyakrabban használják fenotipizálásra és termésbecslésre,<sup>144</sup> például gyümölcsösökben a gyümölcsök megszámlálására, gabona felismerésére és osztályozására, betegségszűrésre stb.<sup>145-147</sup> Következésképpen ez nagymértékben felszabadíthatja a munkaerőt.

A DL alkalmazása a mezőgazdaságban még csak most kezdődik. A DL-technológia jövőbeli fejlődése még mindig számos problémát és kihívást tartogat. Úgy gondoljuk, hogy a tömeges adatok folyamatos gyűjtésével és az algoritmusok optimalizálásával a DL-nek jobb kilátásai lesznek a mezőgazdasági termelésben.

### MESTERSÉGES INTELLIGENCIA A FIZIKÁBAN

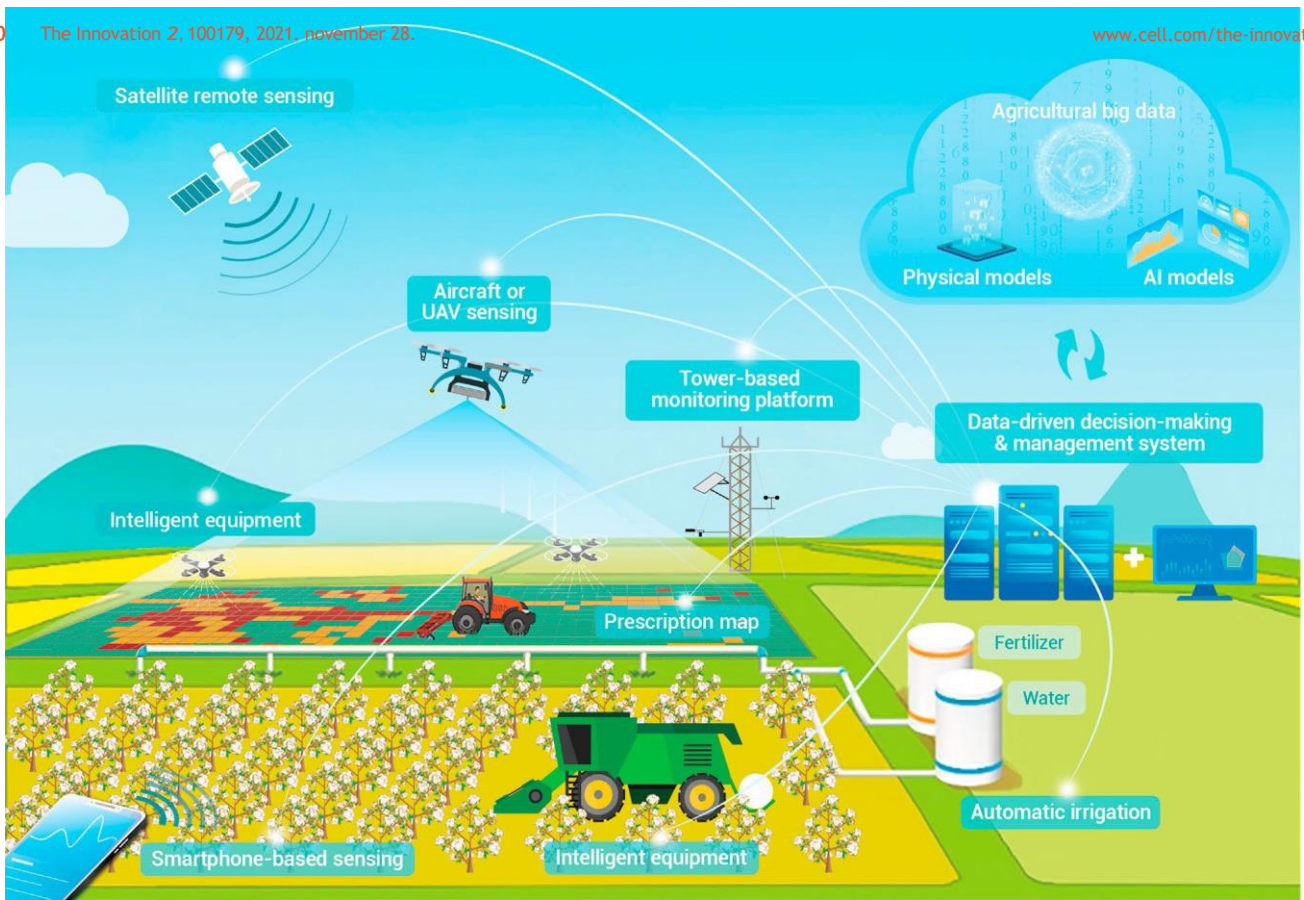
A modern fizika skálája a neutron méretétől az Univerzum méretéig terjed (8. ábra). A skála szerint a fizika négy kategóriára osztható: a részecskefizika a neutronok méretarányában, az atomfizika az atomok méretarányában, a kondenzált anyagfizika a molekulák méretarányában és a kozmikus fizika az Univerzum méretarányában. A mesterséges intelligencia, más néven ML, fontos szerepet játszik a különböző léptékű fizikában, mivel a mesterséges intelligencia algoritmusok használata lesz a fő trend az adatelemzésekben, például a képek rekonstrukciójában és elemzésében.

#### A szimulációk felgyorsítása és a részecskék azonosítása mesterséges intelligenciával

A részecskefizikában a mesterséges intelligenciának számos alkalmazása vagy alkalmazási lehetősége van. Itt nem tudunk mindegyikre kitérni, csak a rácsos kvantumkromodinamikát (LQCD) és a pekingi spektrométeren (BES) és a nagy hadronütköztetőn (LHC) végzett kísérleteket használjuk fel arra, hogy bemutassuk az ML erejét mind a teoretikus, mind a kísérleti részecskefizikában.

Az LQCD a QCD nemperturbatív tulajdonságait vizsgálja Monte Carlo-szimulációk segítségével szuperszámítógépeken, hogy segítsen megérteni az erős kölcsönhatást, amely a kvarkokat nukleonokká köti össze. Az LQCD-ben általánosan használt Markov-lánc Monte-Carlo-szimulációk topológiai befagyástól és kritikus lassulástól szenvednek, ahogy a szimulációk közelítenek a valós világ valós helyzetéhez. A DL segítségével új algoritmusokat javasolnak és tesztelnek e nehézségek leküzdésére.<sup>148,149</sup> Fizikai megfigyeléseket az LQCD-adatokból vonják ki, amelyek jel-zaj viszonya exponenciálisan deteriorálódik. A nem-Abel-féle gauge-elméletek, például a QCD esetében az LQCD-adatok varianciájának csökkentése érdekében a kompatibilis kontúrdeformációk ML segítségével optimalizálhatók. Két dimenzióban elvi alkalmazásokat vizsgáltak.<sup>150</sup> az ML az LQCD-adatok előállításának idő költségét is csökkentheti.<sup>151</sup>

Kísérleti oldalról a részecske-azonosítás (PID) fontos szerepet játszik a szerep. A közelmúltban néhány PID-algoritmust fejlesztettek ki a BES-III-ra, és az ANN152 az egyik ilyen. Az extrém gradiens boostingot is használták a többdimenziós eloszlás újrasúlyozására, a müon-identifikációra és a klaszterrekonstrukcióra, és javíthatja a müon-identifikációt. Az U-Net egy konvolúciós hálózat a pixel-szintű szemantikus szegmentációhoz, amelyet széles körben használnak a CV-ben. Ezt alkalmazták a BES-III-on a többfordulós görbületi pálya figyelemzésének megoldására a fő sodródási kamra esetében. Az átlagos hatékonyság és tisztaság a första kanyar találataihoz körülbelül 91%, a 0,85-ös küszöbérték mellett. A jelenlegi (és jövőbeli) részecskefizikai kísérletek hatalmas mennyiségű adatot termelnek. A gépi támogatást arra lehet használni, hogy megkülönböztessük a jelet és a túlsúlyos háttéreseményeket. Példák az LHC-n végzett adatelemzésekre, supervised ML használatával, egy 2018-as kollaborációban találhatók.<sup>153</sup> A kvantumszámítógépek potenciális előnyeinek továbbvitelére kvantum ML módszereket is vizsgálnak, lásd például Wu et al.<sup>154</sup> és az ottani hivatkozásokat a proof-of-concept vizsgálatokról.



## 8. ábra. A fizika léptéke

Hubbard U

**A mesterséges intelligencia nagy teljesítményűvé teszi a nukleáris fizikát**

A kozmikus sugárzású müon-tomográfia (muográfia)<sup>155</sup> egy olyan képalkotó gráf-technológia, amely a természetes kozmikus sugárzású müon-sugárzást használja a művi sugárzás helyett a veszélyek csökkentése érdekében. Előnye, hogy ez a technológia képes a magas Z-értékű anyagok roncsolás nélküli kimutatására, mivel a müon érzékeny a magas Z-értékű anyagokra. A Classification Model Algorithm (CMA) algoritmus a felügyelt tanulás és a szürke rendszerelmélet classificationján alapul, és a müonpálya bemenetével egy kétszintű classifier tervező és döntési függvényt generál, a kimenet pedig azt jelzi, hogy az anyag létezik-e az adott helyen. A mesterséges intelligencia segít a felhasználónak javítani a müonokkal történő letapogatási idő efficienciáját.

A nukleáris detektáláshoz a Cs<sub>2</sub> LiYCl<sub>6</sub>:Ce (CLYC) jel szintén képes reagálni mind az elektronokra, mind a neutronokra impulzusjelet létrehozva, és ezért alkalmazható mind a neutronok, mind az elektronok detektálására,<sup>156</sup> de a két részecske azonosítására a hullámok alakjának elemzésével, azaz n-g ID-vel van szükség. A hagyományos módszer a PSD (pulse shape discrimination) módszer volt, amely az impulzusinformáció eloszlásának - például amplitúdó, szélesség, emelési idő, esési idő - elemzésével választja szét a két részecske hullámát, és a két részecske elválasztható, ha az eloszlás két különálló Gauss-eloszlással rendelkezik. A hagyományos PSD csak inkább egyimpulzusú, mint többimpulzusú hullámokat elemez, amikor két részecske szorosan reagál a CLYC-vel. De megoldható a hat kategória (n,g,n + n,n + g,g + n,g) osztályozására szolgáló ANN-módszer alkalmazásával. Emellett számos olyan paraméter van, amelyet az AI felhasználhat a rekonstrukciós algoritmus nagy efficienciával és kisebb hibával történő javítására.

**Mesterséges intelligenciával támogatott kondenzált anyag fizika**

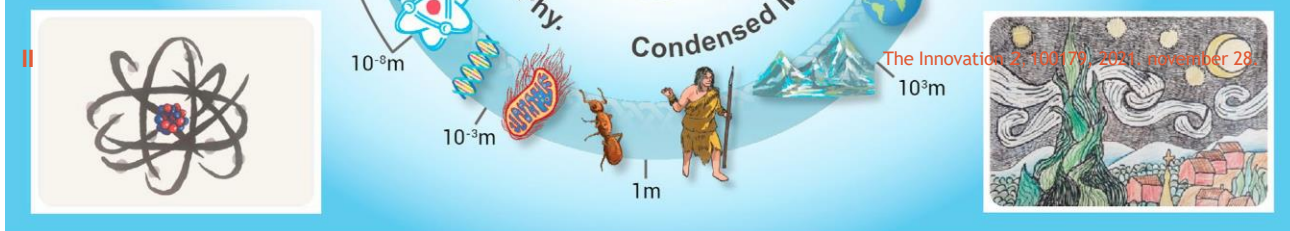
A mesterséges intelligencia új utat nyit a természettudományok előtt, különösen akkor, ha adathalmaz áll rendelkezésre. A legújabb munkák azt mutatják, hogy az ML hasznos segítséget nyújt a sűrűségfunkcionál-elmélet (DFT) javításához, amelyben a Kohn-Sham-séma egyelektronos képe a soktestes rendszerek csere- és korrelációs hatásainak figyelembevételével nem tud érvényesülni. Yu és munkatársai Bayes-féle optimalizációs algoritmust javasoltak a

paramétert, és az új módszer képes az optimális Hubbard U-t egy önkonzisztens folyamat révén jó hatékonysággal figyelembe venni a lineáris válaszmódszerhez képest,<sup>157</sup> és a pontosságot közel hibrid-funkcionális szintre növelni. Snyder et al. egy ML sűrűségfüggvényt dolgozott ki egy 1D-s, nem kölcsönható, nem spin-polarizált fermionrendszerre, hogy jelentősen javított kinetikus energiát kapjon.<sup>23</sup> Ez a módszer lehetővé tette egy kvantumrendszer kinetikus energiájának közvetlen közelítést, és felhasználható az orbitális nélküli DFT-modellezésben, sőt, még a Kohn-Sham-egyenlet megoldását is megkerülheti - a kvantumkémiai szintre vonatkozó pontosság megtartása mellett, ha erős korrelációs terminust is tartalmaz. Nemrégiben a FermiNet megmutatta, hogy a soktestű kvantummechanikai egyenletek megoldhatók mesterséges intelligencián keresztül. A mesterséges intelligencia modellek az atomok közötti erő figyelem megragadásának előnyeit is megmutatják. 2010-ben a Gauss-közelítő potenciált (GAP) mint egy erős atomok közötti erő figyelmeztetést vezettek be az atomok közötti kölcsönhatások leírására. A GAP kernel regressziót és invariáns soktestű reprezentációkat használ, és elég jól per-

formál. Például az amorf kristályok nagy nyomás alatti kristályosodását meglehetősen pontosan tudja szimulálni. Az atompozíciós kernel (SOAP) alkalmazásával<sup>159</sup> a potenciál pontossága tovább növelhető, ezért a SOAP-GAP az AI molekuladinamikai szimulációhoz vezetett módszerének tekinthető. Számos más, jól kidolgozott mesterséges intelligencia-technológiás interatom potenciál is létezik, pl. a kristálygráf CNN-ek széles körben alkalmazható módját nyújtják a kristályos vonalú anyagok vektorizálásának; a SchNet a folytonos-filteres konvolúciós rétegeket ágyazza be a DNN-jeibe a molekuladinamikai szimuláció megkönnyítésére, mivel a potenciálok térbeli folytonosságúak; a DimeNet az irányított üzenetátviteli neurális hálózatot úgy építi fel, hogy a jó pontosság elérése érdekében nem csak az atomok közötti kötőhosszat, hanem a kötésszöveget, a diéderszöveget és a nem kapcsolt atomok közötti kölcsönhatásokat is hozzáadja a modellhez.

### A mesterséges intelligencia segít felfedezni az univerzumot

A mesterséges intelligencia az egyik legújabb technológia, míg a csillagászat az egyik legrégebbi tudomány. Amikor a kettő találkozik, gyakran új lehetőségek nyílnak meg a tudományos áttörések számára. A megfigyelések és az adatelemzés központi szerepet játszik a



csillagászat. A modern távcsövek által gyűjtött adatok mennyisége soha nem látott méreteket öltött, még a legalapvetőbb feladat, a katalógus összeállítása is kihívást jelent a hagyományos forráskereső eszközökkel.<sup>160</sup> A csillagászok DL-alapú, automatizált és intelligens forrás-figyelő eszközöket fejlesztettek ki, amelyek nemcsak a működési sebességben nyújtanak jelentős előnyöket, hanem az Univerzum átfogó megértését is elősegítik azáltal, hogy olyan objektumok különleges formáit azonosítják, amelyeket a hagyományos szoftverekkel és vizuális vizsgálattal nem lehet észlelni.<sup>160,161</sup>

Több mint egy évtizeddel ezelőtt egy "Galaxy Zoo" nevű polgári tudományos projektet javasoltak, amelynek célja, hogy a Sloan Digital Sky Survey (SDSS) által gyűjtött egymillió galaxisról készült képek online közzétételével és önkéntesek toborzásával segítsen felcímkézni a galaxisokat.<sup>162</sup> A már működő vagy építés alatt álló nagyobb optikai teleszkópok az SDSS-nél nagyságrendekkel több adatot szolgáltatnak. A beérkezett hatalmas adatmennyiséget még önkéntesek bevonásával sem lehet elemezni. Az ML előnyei nem korlátozódnak a forrásmeghatározásra és a galaxisok osztályozására. Valójában sokkal szélesebb körű alkalmazással rendelkezik. A CNN például fontos szerepet játszik a gravitációs hullámjelek valós idejű detektálásában és dekódolásában, 2 ms alatt rekonstruálja az összes paramétert, míg a hagyományos algoritmusoknak több napra van szükségük ugyanennek a feladatnak az elvégzéséhez.<sup>163</sup> Ilyen DL-rendszereket használtak már transz-szensek automatikus riasztására, valamint aszteroidák és más gyorsan mozgó földközeli objektumok követésére is, ami több nagyságrenddel javítja az észlelési hatékonyságot. Emellett az asztrofizikusok vizsgálják a neurális hálózatok alkalmazását galaxishalmazok mérésére és az Univerzum fejlődésének tanulmányozására.

Az elképesztő sebesség mellett úgy tűnik, hogy a neurális hálózatoknak mélyebb a vártnál jobban megérti az adatokat, és összetettebb mintákat képes felismerni, ami azt jelzi, hogy a "gép" fejlődik, nem pedig csak megtanulja a bemeneti adatok jellemzőit.

## AI A KÉMIABAN

A kémia fontos "központi" szerepet játszik a többi tudományban<sup>164</sup>, mivel az anyag szerkezetének és tulajdonságainak vizsgálatával foglalkozik, és azonosítja azokat a kémiai reakciókat, amelyek során az anyagok más anyagokká alakulnak át. Ennek megfelelően a kémia egy olyan adatgazdag tudományág, amely évszázados kísérletekből és újabban évtizedes számítógépes elemzésekből származó komplex információkat tartalmaz. Ez a hatalmas adathalmaz leginkább a Chemical Abstract Services-ben látható, amely több mint 183 millió egyedi szerves és szervetlen anyagot gyűjtött össze, beleértve az ötvözeteket, koordinációs vegyületeket, ásványokat, keverékeket, polimereket és sokat, és naponta több ezer új anyaggal bővül.<sup>165</sup> Az anyagi vegyületek változatosságának korlátlan bonyolultsága magyarázza, hogy a kémiai kutatás még mindig munkaigényes feladat. A kémia összetettségi szintje és hatalmas adatmennyisége kiváló lehetőséget biztosít arra, hogy a mesterséges intelligencia alkalmazásával jelentős áttöréseket érjünk el. Először is, az atomokból felépíthető molekulák típusa szinte korlátlan, ami korlátlan kémiai teret eredményez<sup>166</sup>; a molekulák összekapcsolódása a tényezők minden lehetséges kombinációjával, például a hőmérséklettel, a szubsztrátokkal és az oldószerekkel, elsősorban nagy, ami korlátlan reakcióteret eredményez.<sup>167</sup> A korlátlan kémiai tér és reakcióter feltárása, és a kívánt tulajdonságokkal rendelkező optimális felé navigálás így gyakorlatilag lehetetlen pusztán emberi erőfeszítésekből. Másodszor, a kémiában a molekulák hatalmas választéka és a külső környezettel való kölcsönhatásuk a komplexitás új szintjét hozza magával, amelyet nem lehet egyszerűen előre megjósolni a fizikai törvények segítségével. Míg sok fogalmat, szabályt és elméletet a triviális (azaz egyetlen komponensből álló) rendszerek tanulmányozásából származó évszázados tapasztalatok alapján általánosítottak, a nem triviális komplexitások egyre valószínűbbek, mivel Philip Warren Anderson, amerikai fizikus és Nobel-díjas fizikus szavaival élve "a több más".<sup>168</sup> A nem-triviális komplexitások akkor jelentkeznek majd, amikor a skála megváltozik, és a szimmetria megtörik a nagyobb, egyre bonyolultabb rendszerekben, és a szabályok a kvantitatívra a kvalitatívra változnak. A makroszkopikus anyagok szerkezeteire, tulajdonságaira és átalakulásaira vonatkozó szisztematikus és analitikus

elmélet hiánya miatt a kémiai kutatást így - helytelenül - a korábbi évszázadok során felhalmozott heurisztikák és töredékes szabályok irányítják, és csak próbálgatással és tévedéssel halad előre. Az ML felismeri a mintákat a nagy mennyiségű adatból; ezáltal a...

A komplexitás kezelésének eddig példa nélküli módját kínálja, és az adatok felhasználásának forradalmasításával átalakítja a kémiai kutatást. Jelenleg a kémia minden részterülete alkalmazza a mesterséges intelligencia valamilyen formáját, beleértve a kémiai kutatás és adatgenerálás eszközeit, mint például az analitikai kémia és a számítási kémia, valamint a szerves kémiában, a katalízisben és az orvosi kémiában való alkalmazást, amelyeket itt tárgyalunk.

#### A mesterséges intelligencia áttöri a manuális funkcióválasztási módszerek korlátait

Az analitikai kémiában az információ kinyerése hagyományosan nagymértékben támaszkodik a jellemzőválasztási technikákra, amelyek az előzetes emberi tapasztalatokon alapulnak. Sajnos ez a megközelítés nem hatékony, hiányos és gyakran elfogult. A mesterséges intelligencián alapuló automatizált adatelemzés a nagy mennyiségű adatból való tanulással áttöri a manuális változóválasztási módszerek korlátait. A DL-algoritmusok segítségével történő jellemzőkiválasztás lehetővé teszi az információ kinyerését az NMR, a kromatográfia, a spektroszkópia és más analitikai eszközök adathalmazából,<sup>169</sup> ezáltal javítva az elemzés modell-előrejelzési pontosságát. Ezek az ML-megközelítések nagymértékben felgyorsítják az anyagok elemzését, ami új molekulák vagy anyagok gyors felfedezéséhez vezet. A Raman-szórás például az 1920-as években történt felfedezése óta széles körben alkalmazott, nagy teljesítményű rezgésspektroszkópiai technológia, amely képes az analiteknek saját rezgés-fingerlenyomatokat szolgáltatni, lehetővé téve ezzel a molekulák azonosítását.<sup>170</sup> A közelmúltban ML módszereket képeztek ki a Raman (vagy SERS) spektrumok jellemzőinek felismerésére az analit azonosítása érdekében DL-hálózatok, köztük ANN, CNN és teljesen konvolúciós hálózat alkalmazásával a jellemző- engineeringhez.<sup>171</sup> Leong és munkatársai például egy gépi tanulással vezérelt "SERS-kódtolót" terveztek, hogy egyszerre több receptorból származó hasznos rezgésinformációkat hasznosíthassanak a fíve bor flavor molekulák ppm-szintű, fokozott multiplex profilingjéhez. A különböző mértékű helyettesítésű alkoholok megkülönböztetésére főkomponens-elemzést alkalmaznak, és vektoros gépi diszkriminancia-elemzéssel kiegészítve az összes flavorit mennyiségi osztályozását 100%-os

pontossággal végzik.<sup>172</sup> Összességében a mesterséges intelligencia technikák a spektrális adatelemzés univerzális módszerének első reménysugara, amely gyors, pontos, objektív és definitív, és az alkalmazások széles körében vonzó előnyökkel jár.

#### A mesterséges intelligencia javítja a pontosságot és az efficienciát a számítási elmélet különböző szintjei esetében

Az analitikai eszközöket kiegészítve a számítógépes kémia hatékony megközelítésnek bizonyult a kémiai tulajdonságok szimulációval történő megértéséhez, azonban a pontosság kontra hatékonyság dilemmával szembesül. Ez a dilemma nagymértékben korlátozza a számítógépes kémia alkalmazását a valós kémiai problémákra. E dilemma leküzdése érdekében az ML és más mesterséges intelligencia módszereket alkalmaznak a pontosság és az efficencia javítására a különböző idő- és hosszskálákon, a kémiai reakciók több skáláján fellépő hatások leírására használt elmélet különböző szintjein.<sup>173</sup> A számítási kémia számos nyitott kihívása megoldható ML-eljárásokkal, például a Schrödinger-egyenlet megoldása,<sup>174</sup> atom- istikus<sup>175</sup> vagy durva szemcsés<sup>176</sup> potenciálok kidolgozása, reakciókoordináták konstruálása,<sup>177</sup> reakciókinetikai modellek kidolgozása,<sup>178</sup> és a számítható tulajdonságok kulcsfontosságú leírójának azonosítása.<sup>179</sup> Az analitikai kémián és a számítási kémián kívül a kémia több tudományága is beépítette a mesterséges intelligencia technológiát a kémiai problémákba. A szerves kémia, a katalízis és az orvosi kémia területeit tárgyaljuk példaként, ahol az ML jelentős hatást gyakorolt. A kémia más részterületeiről is számos példa található az irodalomban, és a mesterséges intelligencia továbbra is áttörést fog felmutatni a kémiai alkalmazások széles skáláján.

#### A mesterséges intelligencia lehetővé teszi a molekulák szintézisének automatizálására képes robotikát

A szerves kémia a szénalapú molekulák szerkezetét, tulajdonságait és reakcióit tanulmányozza. A kémiai és reakciótér komplexitása egy adott tulajdonság esetében korlátlan számú potenciális molekulát jelent, amelyeket a kémikusok szintetizálhatnak. További bonyodalmakkal jár, amikor azzal a problémával szembesülünk, hogy hogyan szintetizáljunk egy adott molekulát, mivel a folyamat nagymértékben támaszkodik a heurisztikára és a fáradságos tesztelésre. A kihívásokat a kutatók a mesterséges intelligencia segítségével oldották meg. Elegendő adat birtokában bármely

9. ábra. Zárt hurkú munkafolyamat a szerves kémiai molekulák automatikus és intelligens tervezésének, szintézisének és vizsgálatának lehetővé tételére a mesterséges intelligencia segítségével.

egy molekula érdekes tulajdonságai megjósolhatók a molekulaszervezetnek a megfelelő tulajdonságra való leképezésével, felügyelt tanulás, fizikai törvények alkalmazása nélkül. Az ismert molekulák mellett új molekulák is tervezhetők a kémiai térből történő mintavételezéssel<sup>180</sup> módszerek, mint például az autoencoderek és a CNN-ek segítségével, amelyek a molekulákat szekvenciaként vagy gráfként kódolják. A retroszintézis, a szintetikus útvonalak tervezése, amely korábban művészetnek számított, ma már sokkal egyszerűbbé vált az ML algoritmusok segítségével. A Chemetica rendszer,<sup>181</sup> például ma már képes szintetikus útvonalak autonómikus tervezésére, amelyekről később laboratóriumban bebizonyosodik, hogy működnek. Ha a célmolekulák és a szintézis útvonala meg van határozva, a megfelelő reakciókörülményeket ML-technikák segítségével meg lehet jósolni vagy optimalizálni.<sup>182</sup>

Ezeknek a mesterséges intelligencia-alapú megközelítéseknek a robotikával való integrációja lehetővé tette a teljesen mesterséges intelligencia-vezérelt robotikát, amely képes kis szerves molekulák szintézisének automatizálására emberi beavatkozás nélkül [9.183. ábra](#).<sup>184</sup>

#### A mesterséges intelligencia segít a hatalmas katalizátor-tervezési terek közötti keresésben

A katalitikus kémia a vegyiparban alkalmazott katalizátor-technológiákból ered, amelyek célja a vegyi anyagok és üzemanyagok hatékony és fenntartható előállítás. Eddig még mindig nagy kihívást jelent az új heterogén katalizátorok jó teljesítményű (azaz stabil, aktív és szelektív) előállítása, mivel egy katalizátor teljesítménye számos tulajdonságtól függ: összetétel, hordozó, felületi termináció, részecskeméret, részecskemorfológia, atomi koordinációs környezet, pórusszerkezet és a reakció során a reaktor. A katalízis eredendő összetettsége miatt a kívánt tulajdonságokkal rendelkező katalizátorok felfedezése és kifejlesztése inkább a megérzésre és a kísérletekre támaszkodik, ami költséges és időigényes. Az olyan mesterséges intelligencia-technológiák, mint az ML, kombinálva a kombinatorikus katalizátorkönyvtárak kísérleti és *in silico* nagy áteresztőképességű szűrésével, segíthetik a katalizátorok felfedezését azáltal, hogy segítenek a hatalmas tervezési terekben való keresésben. Egy jól definiált szerkezet és szabványosított adatok, köztük reakcióeredmények és *in situ* jellemzési eredmények segítségével a katalitikus szerkezet és a

katalitikus teljesítmény közötti összetett összefüggést az AI fogja feltárni.<sup>185,186</sup> A molekulák, a molekuláris aggregációs állapotok és a molekuláris transzport katalizátorokra gyakorolt hatásának pontos leírását is lehetne

megjósolták. Ezzel a megközelítéssel a kutatók virtuális laboratóriumokat hozhatnak létre új katalizátorok és katalitikus eljárások kifejlesztésére.

### Az AI lehetővé teszi a vegyi anyagok szűrését a toxikológiában minimális kémiai Space-ok mellett

A kémia egy bonyolultabb részterülete az orvosi kémia, amely az egzotikus alrendszer és az élő rendszerben rejlő kémia közötti összetett kölcsönhatások miatt kihívást jelentő terület. A toxikológia például, mint tág terület, olyan anyagok (pl. gyógyszerek, természetes termékek, élelmiszerek és környezeti szubsztanciák) előrejelzésére és eltávolítására törekszik, amelyek károsíthatják az élő szervezetet. Az élő szervezetek már eleve összetettek, szinte bármely ismert anyag elég nagy expozíció esetén toxikus hatású lehet, mivel az élő szervezetekben már eleve benne rejlő komplexitás miatt. Ezen túlmenően a toxicitás számos egyéb tényezőtől függ, beleértve a szervezet méretét, fajtát, korát, nemét, genetikáját, táplálkozását, más vegyi anyagokkal való kombinációját, általános egészségi állapotát és/vagy környezeti körülményeit. Tekintettel a toxicitási problémák nagyságrendjére és összetettségére, a mesterséges intelligencia

valószínűleg az egyetlen reális megközelítés lesz a szabályozó hatóságok által a vegyi anyagok (beleértve a keverékeket is) szűrésére, rangsorolására és kockázatértékelésére vonatkozóan támasztott követelmények teljesítésére, ami forradalmasítja a toxikológia területét.<sup>187</sup> Összefoglalva, az AI a kémia egy munkaigényes tudományágból egy rendkívül intelligens, szabványosított és automatizált filággá alakul át, és az emberi munka korlátozottságához képest sokkal többet lehet elérni. Az új fogalmakkal, szabályokkal és teóriákkal alátámasztott tudás várhatóan az AI-algoritmusok alkalmazásával fejlődik. A következő évtizedekben az új kémiai ismeretek jelentős áttörésekhez vezető nagy része várhatóan az AI-alapú kémiai kutatásból származik majd.

### KÖVETKEZTETÉSEK

Ez a tanulmány átfogó áttekintést nyújt a mesterséges intelligencia fejlődéséről és alkalmazásáról az alaptudományok széles skáláján, beleértve az információs tudományokat, a matematikát, az orvostudományt, az anyagtudományt, a geotudományt, az élettudományokat, a fizikát és a kémiát. Annak ellenére, hogy a mesterséges intelligenciát az alkalmazások széles körében alkalmazzák, még mindig létezik az ML biztonsága

AI-based Automated Analysis of

- Chromatography
- Spectroscopy



The Innovation 2, 100179, 2021, november 28.

723

- AI-based Retrosynthesis
- Reaction Condition Prediction
- Automated discovery of new chemical reactions



az adatok és az ML-modellek mint támadási célpontok kockázatai mind a képzési, mind a végrehajtási fázisban. Először is, mivel egy ML-rendszer teljesítménye nagymértékben függ a képzéséhez használt adatoktól, ezek a bemeneti adatok döntő fontosságúak az ML-rendszer biztonsága szempontjából. Például a rosszindulatú bemeneti adatokat biztosító ellenséges példátámadások 188 gyakran vezetnek oda, hogy az ML-rendszer az ember számára észrevehetetlen kis perturbációkkal téves ítéleteket (előrejelzéseket vagy kategorizálásokat) hoz; a nyers, képzési vagy tesztelési adatok szándékos manipulálásával történő adatmérgezés a modell pontosságának csökkenését eredményezheti, vagy más hibaszpecifikus támadási célokhoz vezethet. Másodsor, az ML-modell támadások közé tartoznak a DL, a CNN és a szövetségi tanulás elleni backdoor támadások, amelyek közvetlenül manipulálják a modell paramétereit, valamint a modelllopási támadás, a modell inverziós támadás és a tagsági következtetési támadás, amelyek ellophatják a modell paramétereit vagy kiszivárogtathatják az érzékeny képzési adatokat. Miközben számos védekezési technikát javasoltak e biztonsági fenyegetések ellen, folyamatosan jelennek meg új támadási modellek, amelyek az ML-rendszereket célozzák. Ezért szükséges az ML biztonságának problémájával foglalkozni, és olyan robusztus ML-rendszereket fejleszteni, amelyek a rosszindulatú támadások ellenére is hatékonyak maradnak.

Az ML-módszer adatvezérelt jellege miatt a képzés jellemzői a képzési és a vizsgálati adatokat ugyanabból az eloszlásból kell meríteni, amit a gyakorlatban nehéz garantálni. Ennek az az oka, hogy a gyakorlati alkalmazásban az adatforrás eltérhet a képzési adathalmazban szereplő adatoktól. Ezenkívül az adatok jellemzőinek eloszlása idővel eltolódhat, ami a modell teljesítményének csökkenéséhez vezet. Ráadásul, ha a modellt csak új adatokkal képezzük, az a modell katasztrofális "felejtéséhez" vezet, ami azt jelenti, hogy a modell csak az új jellemzőkre emlékszik, és elfelejti a korábban megtanult jellemzőket. E probléma megoldása érdekében egyre több tudós fordít figyelmet arra, hogyan lehet a modellt az élethosszig tartó tanulás képességével ellátni, azaz a számítástechnikai paradigma megváltoztatásával az "offline tanulás + online következtetés" helyett "online folyamatos tanulás", és így a modellnek az emberhez hasonlóan az élethosszig tartó tanulás képességével kell rendelkeznie.

## HIVATKOZÁSOK

1. Turing, A. (1995). Számítógépek és intelligencia (American Association for Artificial Intelligence).
2. McCorduck, P. (2004). Gondolkodó gépek, második kiadás (W.h.freeman & Company).
3. Hinton, G.E., Osindero, S. és Teh, Y.-W. (2006). Egy gyors tanulási algoritmus mély hit hálók. *Neural Comput.* 18, 1527-1554.
4. Hinton, G.E. és Salakhutdinov, R.R. (2006). Az adatok dimenzionalitásának csökkentése neurális hálózatokkal. *Science* 313, 504-507.
5. Lecun, Y., Bengio, Y., and Hinton, G. (2015). Mélytanulás. *Nature* 521, 436-444.
6. Nadkarni, P.M., Ohno-Machado, L., and Chapman, W. (2011). Természetes nyelvi feldolgozás: (Journal of the American Medical Informatics Association Jamia), 18., pp. 544-551.
7. Ji, S., Pan, S., Cambria, E., et al. (2021). A survey on knowledge graphs: representation, acquisition, and applications. *IEEE Trans. Neural Networks Learn. Syst.* 1-21.
8. Parisi, G.I., Kemker, R., Part, J.L., et al. (2019). Folyamatos élethosszig tartó tanulás neurális hálózatokkal: A Review, 113. (*Neural Networks*), pp. 54-71.
9. Abadi, M., Barham, P., Chen, J., et al. (2016). Tensorflow: egy rendszer a nagyméretű gépi tanuláshoz. In 12th USENIX Symposium on Operating Systems Design and Implementation (OSDI 16). <https://doi.org/10.1109/TNLS.2021.3070843>.
10. Paszke, A., Gross, S., Massa, F., et al. (2019). Pytorch: egy imperatív stílusú, nagy teljesítményű mélytanulási könyvtár. *Adv. Neural Inf. Process. Syst.* 32, 8026-8037.
11. Harris, C.R., Millman, K.J., van der Walt, S.J., et al. (2020). Többös programozás a NumPy-vel. *Nature* 585, 357-362.
12. Chen, Y., Chen, T., Xu, Z., et al. (2016). DianNao család: energiatakarékos hardveres gyorsító gépi tanuláshoz. *Commun. ACM* 59, 105-112.
13. Stanley, K.O. és Miikkulainen, R. (2002). Neurális hálózatok fejlesztése topológiák bővítésével. *Evol. Comput.* 10, 99-127.
14. Zoph, B. és Le, Q.V. (2016). Neurális architektúra keresés megerősítéses tanúlással (Science of the Total Environment).
15. Real, E., Moore, S., Selle, A., et al. (2017). A képosztályozók nagyléptékű evolúciója. In International Conference on Machine Learning (PMLR), pp. 2902-2911.
16. Tan, M. és Le, Q. (2019). Efficientnet: a modell skálázásának újragondolása konvolúciós neurális hálózatokhoz. In Nemzetközi konferencia a gépi tanulásról (PMLR),

pp. 6105-6114.

17. Wang, Q., Liu, J., Jaffrès-Runser, K., et al. (2021). INCdeep: intelligens hálózati kódolás mély megerősítő tanúlással. In IEEE INFOCOM 2021-IEEE Conference on Computer Communications (IEEE), pp. 1-10.

18. Wang, J., Tang, J., Xu, Z., et al. (2017). Tér-időbeli modellezés és előrejelzés a cellahálózatokban: egy nagy adatokkal támogatott mélytanulási megközelítés. In IEEE INFOCOM 2017-IEEE Conference on Computer Communications (IEEE), pp. 1-9.
19. Liu, J., Wang, Q., He, C., et al. (2020). QMR: Q-tanuláson alapuló többcélú optimalizáló útválasztási protokoll flying ad hoc hálózatokhoz. *Comput. Commun.* 150, 304-316.
20. Yu, N., Genevet, P., Kats, M.A., et al. (2011). Fényterjedés fázisdiszkontinuitásokkal: a fénytörés és a fénytörés általánosított törvényei. *Science* 334, 333-337.
21. Dong, F. és Chu, W.J.A.M. (2019). Többcsatorna-független információ kódolása optikai metafelületek. *Adv. Mater.* 31, 1804921.
22. Xuan, Z., Li, J., Liu, Q., et al. (2019). Artifikai szerkezeti színek és alkalmazások. *Innovation* 2, 100081.
23. Lin, X., Rivenson, Y., Yardimci, N.T., et al. (2018). All-optikai gépi tanulás diffraktív mély neurális hálózatok segítségével. *Science* 361, 1004-1008.
24. Sajedian, I., Kim, J., Rho, J.J.M. és a nanotechnológia. (2019). Plazmonikus struktúrák optikai tulajdonságainak megtalálása képfeldolgozással, konvolúciós neurális hálózatok és rekurrens neurális hálózatok kombinációjának felhasználásával. *Microsyst. Nanoeng.* 5, 1-8.
25. So, S., Badloe, T., Noh, J., et al. (2020). Mélytanulással támogatott inverz tervezés a nanofotonika. *Nanophotonics* 9, 1041-1057.
26. An, S., Zheng, B., Tang, H., et al. (2021). Többfunkciós metafelület tervezése generatív adverzális hálózattal. *Adv. Opt. Mater.* 9, 2001433.
27. Sajedian, I., Badloe, T. és Rho, J.J. (2019). Dielektromos nanoszerkezetek szingenerálásának optimalizálása megerősített tanulással. *Opt. Express* 27, 5874-5883.
28. Qian, C., Zheng, B., Shen, Y., et al. (2020). Mélytanulással támogatott önadaptív mikrohullámú köpeny emberi beavatkozás nélkül. *Nat. Photon.* 14, 383-390.
29. John-Herpin, A., Kavungal, D., von Muëcke, L., és Altug, H.J. (2021). Infravörös metaszur- a biomolekulák minden fontosabb osztálya közötti dinamika nyomon követésére szolgáló mélytanulással kiegészítve. *Adv. Mater.* 33, 2006054.
30. Zhang, J. és Tao, D.J. (2020). A dolgok intelligenciával való felruházása: áttekintés a dolgok mesterséges intelligenciájának fejlődéséről, kihívásairól és lehetőségeiről. *IEEE Internet Things J.* 8, 7789-7817.
31. Wang, F., Xu, Y., Zhu, L., et al. (2018). LAMANCO: egy könnyűsúlyú, anonim kölcsönös hitelesítési rendszer az N-szeres számítási offloading IoT-ben. *IEEE Internet Things J.* 6, 4462-4471.
32. Cover, T. és Hart, P.J. (1967). Legközelebbi szomszédos mintaosztályozás. *IEEE Trans. Inf. Theory* 13, 21-27.
33. Cortes, C. és Vapnik, V.J. (1995). Támasz-vektor hálózatok. *Mach. Learn.* 20, 273-297.
34. Freund, Y. és Schapire, R.E. (1996). Kísérletek egy új Boosting algoritmussal (ICML).
35. McCulloch, W.S. és Pitts, W.J. (1943). Az idegi tevékenységben rejlő gondolatok logikai számítása. *Bull. Math. Biophys.* 5, 115-133.
36. Mnih, V., Kavukcuoglu, K., Silver, D., et al. (2013). Playing atari with deep reinforcement learning. *arXiv*, 1312.5602.
37. Goodfellow, I., Pouget-Abadie, J., Mirza, M., et al. (2014). Generatív adverzális hálók. *Adv. Neural Inf. Process. Syst.* 27, 1-9.
38. Shuford, E.H. (1963). Néhány Bayes-féle tanulási folyamat. *Műszaki dokumentációs jelentés. Egyesült Államok. Légierő. Rendszerparancsnokság. Elektron. Syst. Division* 86, 1-39.
39. Cybenko, G. (1989). Approximáció egy szigmoidális függvény szuperpozícióival. *Math. Control Signals Syst.* 2, 303-314.
40. Bach, F. (2017). A kernel kvadratúra szabályok és a véletlenszerű jellemzőbővítések egyenértékűségéről. *J. Mach. Learn. Res.* 18, 714-751.
41. EW, M.C. és Wu, L. (2019). A populációs kockázat a priori becslése kétrétegű neurális hálózatokhoz. *Commun. Math. Sci.* 17, 1407-1425.
42. Wojtowitsch, S. (2020). A többretegű relu-hálózatokhoz kapcsolódó banach terekéről: Function representation, approximation theory and gradient descent dynamics. *arXiv*, 2007.15623. <https://doi.org/10.4208/csiam-am.20-221>.
43. He, J. és Xu, J. (2019). MgNet: a multigrad és a konvolúciós neurális hálózat egységes keretrendszere. *Sci. China Math.* 62, 1331-1354.
44. Goodfellow, I.J., Vinyals, O., and Saxe, A.M. (2014). Qualitatively characterizing neural network optimization problems. *arXiv*, 1412.6544.
45. Sun, R., Li, D., Liang, S., et al. (2020). A neurális hálózatok globális tájképe: áttekintés. *IEEE Signal. Process. Mag.* 37, 95-108.
46. Cui, Y., He, Z. és Pang, J.-S. (2020). Többkomponensű nemkonvex optimalizálás mély neurális hálózatok képzéséhez. *SIAM J. Optimization* 30, 1693-1723.
47. Liu, W., Liu, X. és Chen, X. (2021). Lineárisan korlátozott nem sima optimalizálás autoencoderek képzéséhez. *arXiv*, 2103.16232.
48. Vapnik, V.N., and Chervonenkis, A.Y. (2015). Az események relatív gyakoriságának egyenletes konvergenciájáról a valószínűségeikhez. In *Measures of Complexity* (Springer), pp. 11-30.
49. Srivastava, N., Hinton, G., Krizhevsky, A., et al. (2014). Kiesés: egy egyszerű módszer a neurális hálózatok túlzottfitting előtti szellőztetésére. *J. Mach. Learn. Res.* 15, 1929-1958.
50. Sun, Q., Tao, Y. és Du, Q. (2018). Stochastic training of residual networks: a differential equation viewpoint. *arXiv*, 1812.00174.
51. Chua, I.S., Gazieli-Yablowitz, M., Korach, Z.T., et al. (2021). Artifikai intelligencia az onkológiában: út a megvalósításhoz. *Cancer Med.* 10, 4138-4149.

52. Ginsberg, J., Mohebbi, M.H., Patel, R.S., et al. (2009). Influenza-járványok felderítése keresőmotorok lekérdezési adatainak felhasználásával. *Nature* 457, 1012-1014.
53. Wu, L., Wang, L., Li, N., et al. (2020). A kínai COVID-19 járvány modellezése több forrásból származó információk fúziójával. *Innovation* 1, 100033. <https://doi.org/10.1016/j.xinn.2020.100033>.
54. Huang, Y., Wu, Q., Wang, P., et al. (2020). Kínában a COVID-19 fertőzés elkerülése érdekében tett intézkedések: internetalapú, keresztmetszeti felmérés tanulmány. *J. Med. Internet Res.* 22, e18718.
55. Shen, B., Yi, X., Sun, Y., et al. (2020). A COVID-19 beteg szérumainak proteomikai és metabolizomikai jellemzése. *Cell* 182, 59-72. e15. e15.
56. Taliaz, D., Spinrad, A., Barzilay, R., et al. (2021). Az antidepresszáns gyógyszerekre adott válasz előrejelzésének optimalizálása gépi tanulás és integrált genetikai, klinikai és demográfiai adatok felhasználásával. *Transl. psychiatry* 11, 1-9.
57. Liu, J., Lichtenberg, T., Hoadley, K.A., et al. (2018). Egy integrált TCGA pán-rák klinikai adatforrás a kiváló minőségű túlélési eredményelemzéshez. *Cell* 173, 400-416. e411.
58. Freeman, K., Dinnes, J., Chuchu, N., et al. (2020). Algoritmusalapú okostelefon-alkalmazások a bőrrák kockázatának felmérésére felnőtteknél: a diagnosztikai pontossági vizsgálatok szisztematikus áttekintése. *BMJ* 368, m127.
59. AlQuraishi, M. (2019). AlphaFold a CASP13-on. *Bioinformatics* 35, 4862-4865.
60. Zhavoronkov, A., Ivanenkov, Y.A., Aliper, A., et al. (2019). A mélytanulás lehetővé teszi a hatékony DDR1 kináz inhibitorok gyors azonosítását. *Nat. Biotechnol.* 37, 1038-1040.
61. T. Thompson, B.H., Woodruff, J.D., Davis, H.J., et al. (1972). Citopatológia, hisztopatológia és kolposzkópia a méhnyak daganatainak kezelésében. *Am. J. Obstet. Gynecol.* 114, 329-333.
62. Bao, H., Sun, X., Zhang, Y., et al. (2020). Az artifizikail intelligenciával támogatott citológiai diagnosztikai rendszer a nagyszabású méhnyakrákszűrésben: egy 0,7 millió nőn végzett populáció-alapú kohorszvizsgálat. *Cancer Med.* 9, 6896-6906.
63. Wang, Q., Zhang, L., Yan, Z., et al. (2019). OScC: online túlélési elemzés webservice a biomarkerek prognosztikai értékének értékelésére a méhnyakrákban. *Future Oncol.* 15, 3693-3699.
64. Wei, J., Chu, X., Sun, X.Y., et al. (2019). Gépi tanulás az anyagtudományban. *InfoMat* 1, 338-358.
65. Friederich, P., Fediai, A., Kaiser, S., et al. (2019). Útban az újszerű anyagok tervezése felé szerves elektronika. *Adv. Mater.* 31, 1808256.
66. Mahmood, A. és Wang, J.-L. (2021). Gépi tanulás a nagy teljesítményű szerves napelemekhez: jelenlegi forgatókönyv és jövőbeli kilátások. *Energy Environ. Sci.* 14, 90-105.
67. Yuan, R., Liu, Z., Balachandran, P.V., et al. (2018). A nagy elektromos feszültségek gyorsított felfedezése BaTiO<sub>3</sub>-alapú piezoelektrikákban aktív tanulással. *Adv. Mater.* 30, 1702884.
68. Lu, S., Zhou, Q., Ouyang, Y., et al. (2018). Stabil ólommentes hibrid szerves-szervetlen perovszkitek gyorsított felfedezése gépi tanulással. *Nat. Commun.* 9, 1-8.
69. Paterson, L., May, F. és Andrienko, D. (2020). Stabil és effciens OLED-ek számítógépes tervezése. *J. Appl. Phys.* 128, 160901.
70. Gorai, P., Stevanovic, V., and Toberer, E.S. (2017). Számítással irányított felfedezés termoelektromos anyagok. *Nat. Rev. Mater.* 2, 1-16.
71. Greenaway, R.L. és Jelfs, K.E. (2021). A számítási és kísérleti munkaflokk integrálása a szerves anyagok gyorsított felfedezéséhez. *Adv. Mater.* 33, 2004831.
72. Pollice, R., dos Passos Gomes, G., Aldeghi, M., et al. (2021). Adatvezérelt stratégiák a gyorsított anyagtervezéshez. *Acc. Chem. Res.* 54, 849-860.
73. Tagade, P.M., Adiga, S.P., Pandian, S., et al. (2019). Attribútumvezérelt inverz anyagtervezés mélytanulással Bayes-féle keretrendszer használatával. *npj Comput. Mater.* 5, 1-14.
74. Correa-Baena, J.-P., Hippalgaonkar, K., van Duren, J., et al. (2018). A materiális fejlesztés felgyorsítása automatizálással, gépi tanulással és nagy teljesítményű számítástechnikával. *Joule* 2, 1410-1420.
75. Zhang, T., Jiang, Y., Song, Z., et al. (2019). A topológiai elektronikus mátrixok katalógusa. *Nature* 566, 475-479.
76. Vergniory, M., Elcoro, L., Felser, C., et al. (2019). A kiváló minőségű, teljes katalógus topológiai anyagok. *Nature* 566, 480-485.
77. Tang, F., Po, H.C., Vishwanath, A., and Wan, X. (2019). Átfogó keresés topológiai anyagok után szimmetriaindikátorok segítségével. *Nature* 566, 486-489.
78. Chen, X.-Q., Liu, J. és Li, J. (2021). Topológiai fononikus anyagok: számítás és adatok. *Innovation* 2, 100134. <https://doi.org/10.1016/j.xinn.2021.100134>.
79. <https://atomly.net/>.
80. Liang, Y., Chen, M., Wang, Y., et al. (2021). Egy univerzális modell a szervetlen vegyületek képződési energiájának előrejelzésére. *arXiv*, 2108.00349.
81. Chang, C.-Z., Zhao, W., Kim, D.Y., et al. (2015). Zéró-field disszipációmentes királis peremtranszport és a disszipáció természete a kvantum anomális Hall-állapotban. *Phys. Rev. Lett.* 115, 057206.
82. Kates, R.W., Clark, W.C., Corell, R., et al. (2001). Fenntarthatósági tudomány. *Science* 292, 641-642.
83. Press, F. (2008). Földtudomány és társadalom. *Nature* 451, 301-303.
84. Zhang, X., Chen, N., Chen, Z., et al. (2018). Geospatial sensor web: kiber-fizikai infrastruktúra a földtudományi kutatáshoz és alkalmazáshoz. *Earth Sci. Rev.* 185, 684-703.
85. Karpatne, A., Ebert-Uphoff, I., Ravela, S., et al. (2018). Machine learning for the geosciences: challenges and opportunities. *IEEE Trans. Knowledge Data Eng.* 31, 1544-1554.
86. Lary, D.J., Alavi, A.H., Gandomi, A.H., and Walker, A.L. (2016). Machine learning in geosciences and remote sensing. *Geosci. Front.* 7, 3-10.
87. Imperatore, P. és Riccio, D. (2010). Földtudományok és távérzékelés: Új eredmények (BoD-Books on Demand).
88. Cnudde, V. és Boone, M.N. (2013). Nagyfelbontású röntgenszámítógépes tomográfia a földtudományokban: a jelenlegi technológia és alkalmazások áttekintése. *Earth Sci. Rev.* 123, 1-17.
89. Lee, S., Suh, J. és Choi, Y. (2018). Az okostelefonos alkalmazások áttekintése a geotudományban: jelenlegi helyzet, korlátok és jövőbeli kilátások. *Earth Sci. Inform.* 11, 463-486.
90. Toms, B.A., Barnes, E.A. és Ebert-Uphoff, I. (2020). Fizikailag értelmezhető neurális hálózatok a geotudományok számára: alkalmazások a földi rendszer változékonyságára. *J. Adv. Model. Earth Syst.* 12, e2019MS002002.
91. Chelton, D.B., Schlax, M.G., Samelson, R.M., and de Szoeke, R.A. (2007). A nagy óceáni örvények globális megfigyelései. *Geophys. Res. Lett.* 34. <https://doi.org/10.1029/2007GL030812>.
92. Sambridge, M. (2016). Idősorok és bizonytalanságuk rekonstruálása univerzális zajjal rendelkező megfigyelésekből. *J. Geophys. Res. Solid Earth* 121, 4990-5012.
93. Qiu, Q., Xie, Z., Wu, L., és Li, W. (2019). Földtudományi kulcsifejlesztés-kivonási algoritmus továbbfejlesztett szóbeágyazás segítségével. *Expert Syst. Appl.* 125, 157-169.
94. Pérez-Suay, A. és Camps-Valls, G. (2018). Okozati következtetés a földtudományokban és a távérzékelésben megfigyelési adatokból. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sensing* 57, 1502-1513.
95. Xiang, X., Li, Q., Khan, S. és Khalaf, O.I. (2021). Városi vízkészletgazdálkodás a fenntartható környezettervezéshez artifizikail intelligencia technikák alkalmazásával. *Environ. Impact Assess. Rev.* 86, 106515.
96. Knuessel, B., Zumwald, M., Baumberger, C., et al. (2019). A nagy adatok alkalmazása a nagy adatokon túl kis problémák az éghajlatkutatásban. *Nat. Clim. Change* 9, 196-202.
97. Salcedo-Sanz, S., Cuadra, L., and Vermeij, M.J. (2016). A korlátokkal kapcsolatos alkalmazásokban alkalmazott számítási intelligencia technikák áttekintése. *Ecol. Inform.* 32, 107-123.
98. Rolnick, D., Donti, P.L., Kaack, L.H., et al. (2019). Tackling climate change with machine learning. *arXiv*, 1906.05433.
99. Hengstler, M., Enkel, E., and Duelli, S. (2016). Alkalmazott artifizikail intelligencia és bízalom az autonóm járművek és az orvosi segédeszközök esete. *Technol. Forecast. Soc. Change* 105, 105-120.
100. Dhar, P. (2020). A mesterséges intelligencia szén-dioxid-kibocsátásának hatása. *Nat. Mach. Intell.* 2, 423-425.
101. Lawrence Livermore Nemzeti Laboratórium (2018). Charting the Complex Relationships Among Energy, Water, and Carbon. <https://www.llnl.gov/news/us-energy-use-rises-highest-level-ever>.
102. Hanna, B., Son, T.C. és Dinh, N. (2021). AI-alapú érvelésen alapuló operátortámogató rendszer az atomerőművek irányításához. *Ann. Nucl. Energy* 154, 108079.
103. Chang, J. és Jia, S.-Y. (2009). Szél-energiatermelő rendszer modellezése és alkalmazása a multiügynök-technológián alapulva. In 2009 International Conference on Machine Learning and Cybernetics, 3 (IEEE), pp. 1754-1758.
104. Bughin, J., Hazan, E., Ramaswamy, S., et al. (2017). Artificial intelligence: the next digital frontier? (Információbiztonság és kommunikációs adatvédelem).
105. Wei, J., Sanborn, S. és Slaughter, A. (2019). Digitális innováció. A jövő hasznosságának megteremtése. <https://www2.deloitte.com/us/en/insights/industry/power-and-utilities/digital-transformation-utility-of-the-future.html>.
106. Steffen, W., Richardson, K., Rockström, J., et al. (2020). A földrendszertudomány kialakulása és fejlődése. *Nat. Rev. Earth Environ.* 1, 54-63.
107. Poo, M.-M. (2018). Towards Brain-Inspired Artificial Intelligence (Oxford University Press).
108. Hassabis, D., Kumaran, D., Summerfield, C., and Botvinick, M. (2017). Idegtudományilett artifizikail intelligencia. *Neuron* 95, 245-258.
109. Yamins, D.L., and DiCarlo, J.J. (2016). Célvezérelt mélytanulási modellek használata az érzékelő kéreg megértéséhez. *Nat. Neurosci.* 19, 356-365.
110. Hubel, D.H. és Wiesel, T.N. (1962). Receptív filmek, binokuláris interakció és funkcionális architektúra a macska látókéregben. *J. Physiol.* 160, 106-154.
111. Ba, J., Mnih, V., and Kavukcuoglu, K. (2014). Multiple object recognition with visual attention. *arXiv*, 1412.7755.
112. O'Doherty, J.P., Dayan, P., Friston, K., et al. (2003). Időbeli különbség modellek és jutalommal kapcsolatos tanulás az emberi agyban. *Neuron* 38, 329-337.
113. Poo, M.-m., Du, J.-L., Ip, N.Y., et al. (2016). Kínai agyprojekt: alapvető idegtudományok, agyi betegségek és az agy által inspirált számítástechnika. *Neuron* 92, 591-596.
114. Huang, T., Lan, L., Fang, X., et al. (2015). A nagy adatfeldolgozás ígéretei és kihívásai az egészségtudományokban. *Big Data Res.* 2, 2-11.



115. Eraslan, G., Avsec, Z., Gagneur, J., and Theis, F.J. (2019). Mélytanulás: új számítógépes modellezési technikák a genomika számára. *Nat. Rev. Genet.* 20, 389-403.
116. Telenti, A., Lippert, C., Chang, P.-C., and DePristo, M. (2018). Genomi variációk és szabályozási hálózati adatok mélytanulása. *Hum. Mol. Genet.* 27, R63-R71.
117. Ng, P.C. és Henikoff, S. (2003). SIFT: a protein funkciót befolyásoló aminosavváltozások előrejelzése. *Nucleic Acids Res.* 31, 3812-3814.
118. Huang, T., Wang, C., Zhang, G., et al. (2012). SySAP: a deletériáns egyetlen aminosav polimorfizmusok rendszerszintű előrejelzője. *Protein Cell* 3, 38-43.
119. Sundaram, L., Gao, H., Padigepati, S.R., et al. (2018). Az emberi mutáció klinikai hatásának előrejelzése mély neurális hálózatokkal. *Nat. Genet.* 50, 1161-1170.
120. Zhang, S., Pan, X., Zeng, T., et al. (2019). A másolatszám-variációs mintázat a vastagbélrák altípusainak MACROD2 állapotainak megkülönböztetésére. *Front. Bioeng. Biotechnol.* 7, 407.
121. Pan, X., Hu, X., Zhang, Y.-H., et al. (2019). Az emlőrák altípusainak kópiaszám-variáns biomarkereinek azonosítása. *Mol. Genet. Genomics* 294, 95-110.
122. Glessner, J.T., Hou, X., Zhong, C., et al. (2021). DeepCNV: mélytanulási megközelítés a kópiaszám-változások hitelesítésére. *Brief. Bioinform.* 22, bbaa381.
123. Gu, C., Shi, X., Dai, C., et al. (2020). RNS m6A modifikáció a rákban: molekuláris mechanizmusok és lehetséges klinikai alkalmazások. *Innováció* 1, 100066. <https://doi.org/10.1016/j.xinn.2020.100066>.
124. Zhang, L., Li, G., Li, X., et al. (2021). EDLM6APred: ensemble deep learning megközelítés az mRNS m6A helyének előrejelzésére. *BMC Bioinformatics* 22, 1-15.
125. Angermueller, C., Lee, H.J., Reik, W., and Stegle, O. (2017). DeepCpG: az egysejtű DNS-metilációs állapotok pontos előrejelzése mély tanulással. *Genome Biol.* 18, 1-13.
126. Kim, M., Eetemadi, A., and Tagkopoulos, I. (2017). DeepPep: deep proteome inference from peptide profiles. *PLoS Comput. Biol.* 13, e1005661.
127. Lal, A., Chiang, Z.D., Yakovenko, N., et al. (2021). Epigenomikai adatok mélytanuláson alapuló javítása az AtacWorks segítségével. *Nat. Commun.* 12, 1-11.
128. Sidhom, J.-W., Larman, H.B., Pardoll, D.M. és Baras, A.S. (2021). A DeepTCR egy mélytanulási keretrendszer a T-sejt repertoárookban lévő szekvenciafogalmak feltárására. *Nat. Commun.* 12, 1-12.
129. Arisdakessian, C., Poirion, O., Yunits, B., et al. (2019). DeepImpute: pontos, gyors és skálázható mély neurális hálózati módszer egysejtes RNS-seq adatok imputálására. *Genome Biol.* 20, 1-14.
130. Bernstein, N.J., Fong, N.L., Lam, I., et al. (2020). Solo: doublet identification in single-cell RNA-Seq via semi-supervised deep learning. *Cell Syst.* 11, 95-101. e105.
131. Yeo, G.H.T., Saksena, S.D. és Gifford, D.K. (2021). Egysejtes idősorok generatív modellezése a PRESCIENT segítségével lehetővé teszi a sejtek pályájának előrejelzését. *Nat. Commun.* 12, 1-12.
132. Tunyasuvunakool, K., Adler, J., Wu, Z., et al. (2021). Nagy pontosságú fehérjeszerkezet-előrejelzés a humán proteomra. *Nature* 596, 590-596.
133. Jun, Y. és Songnian, H. (2021). A humán genom végső figyelemvonalán Projekt. *Innováció* 2, 100133. <https://doi.org/10.1016/j.xinn.2021.100133>.
134. Walter, A., Finger, R., Huber, R., and Buchmann, N. (2017). Vélemény: Az intelligens gazdálkodás a fenntartható mezőgazdaság fejlesztésének kulcsa. *Proc. Natl. Acad. Sci. U S A* 114, 6148-6150.
135. Yuan, Q., Shen, H., Li, T., et al. (2020). Mélytanulás a környezeti távérzékelésben: eredmények és kihívások. *Remote Sensing Environ.* 241, 111716.
136. Wang, H., Cimen, E., Singh, N. és Buckler, E. (2020). Deep learning for plant genomics and crop improvement. *Curr. Opin. Plant Biol.* 54, 34-41.
137. Golicz, A.A., Bhalla, P.L., and Singh, M.B. (2018). MCRiceRepGP: keretrendszer a rizs szexuális szaporodásához kapcsolódó gének azonosítására. *Plant J.* 96, 188-202.
138. Chachar, S., Liu, J., Zhang, P., et al. (2021). A modellnövényekből származó DNS N6-metiladenozinra vonatkozó jelenlegi ismeretek hasznosítása a nem modellnövények számára. *Front. Genet.* 12. <https://doi.org/10.3389/fgene.2021.668317>.
139. Montesinos-López, O.A., Montesinos-López, A., Crossa, J., et al. (2018). Multi-trait, multi-environment deep learning modeling for genomic-enabled prediction of plant traits. *G3 (Bethesda)* 8, 3829-3840.
140. Montesinos-López, O.A., Martín-Vallejo, J., Crossa, J., et al. (2019). Új mélytanuláson alapuló genomikai alapú előrejelzési modell több tulajdonságra bináris, ordinális és folytonos fenotípusokkal. *G3 (Bethesda)* 9, 1545-1556.
141. Atzberger, C. (2013). A mezőgazdaság távérzékelésének fejlődése: a kontextus leírása, a meglévő operatív monitoringrendszerek és a főbb információs igények. *Távérzékelés* 5, 949-981.
142. Mulla, D.J. (2013). Húsz év távérzékelés a precíziós mezőgazdaságban: legfontosabb eredmények és fennmaradó tudáshiányok. *Biosyst. Eng.* 114, 358-371.
143. Reichstein, M., Camps-Valls, G., Stevens, B., et al. (2019). Mélytanulás és folyamatmegértés az adatvezérelt földrendszertudomány számára. *Nature* 566, 195-204.
144. Zhang, Q., Liu, Y., Gong, C., et al. (2020). A mélytanulás alkalmazásai a sűrű jelenetek elemzéséhez a mezőgazdaságban: áttekintés. *Sensors* 20, 1520.
145. Afonso, M., Fonteijn, H., Fiorentin, F.S., et al. (2020). Paradicsomgyümölcsök felismerése és számlálása üvegházakban mély tanulással. *Front. Plant Sci.* 11, 1759.
146. Wu, W., Liu, T., Zhou, P., et al. (2019). Képelemzésen alapuló felismerés és kvantitatív

147. Saleem, M.H., Potgieter, J., and Arif, K.M. (2019). Növényi betegségek észlelése és osztályozása. *fikáció mélytanulással. Növények* 8, 468.
148. Foreman, S., Jin, X.-Y. és Osborn, J.C. (2021). Deep learning Hamiltonian Monte Carlo. *arXiv*, 2105.03418.
149. Kanwar, G., Albergo, M.S., Boyda, D., et al. (2020). Equivariáns flow-alapú mintavételezés a rácsos mérőelméletre. *Phys. Rev. Lett.* 125, 121601.
150. Detmold, W., Kanwar, G., Lamm, H., et al. (2021). Útintegrál kontúrdeformációk megfigyelhetőkre az  $SU(N)$  gauge theory-ban. *Phys. Rev. D* 103, 094517.
151. Zhang, R., Fan, Z., Li, R., et al. (2020). Gépi tanulással történő előrejelzés a kváziparton disz-tribúciós függvény mátrixelemek számára. *Phys. Rev. D* 101, 034516.
152. Wang, L.-L., Wen, S.-P., Wu, L.-H., et al. (2008). Részecske-azonosítás mesterséges neurális hálózatok segítségével a BES-en. *Chin. Phys. C* 32. <https://doi.org/10.1088/1674-1137/32/1/001>.
153. Sirunyan, A.M., Tumasyan, A., Adam, W., et al. (2018). A  $t\bar{t}H$  termelés megfigyelése. *Phys. Rev. Lett.* 120, 231801.
154. Wu, S.L., Sun, S., Guan, W., et al. (2021). A kvantum gépi tanulás alkalmazása a kvantum kernel algoritmussal az LHC nagyenergiás fizikai elemzésére. *arXiv*, <https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.3.033221>.
155. Nomura, Y., Nemoto, M., Hayashi, N., et al. (2020). Kísérleti tanulmány a muográfiával történő kitérés-előrejelzésről konvolúciós neurális hálózat segítségével. *Sci. Rep.* 10, 1-9.
156. Ruta, F.L., Swider, S., Lam, S., and Feigelson, R.S. (2017). A fázisegyenlőség és a szegregáció megértése a  $Cs_2LiYCl_6$  szcintillátor Bridgman-növekedésében. *J. Mater. Res.* 32, 2373-2380.
157. Yu, M., Yang, S., Wu, C. és Marom, N. (2020). A Hubbard U paraméter gépi tanulás DFT+U-ban Bayes-optimalizálással. *npj Comput. Mater.* 6, 1-6.
158. Bartók, A.P., Payne, M.C., Kondor, R. és Csányi, G. (2010). Gauss-közelítő potenciálok: a kvantummechanika pontossága, elektronok nélkül. *Phys. Rev. Lett.* 104, 136403.
159. Bartók, A.P., Kondor, R. és Csányi, G. (2013). A kémiai környezetek ábrázolásáról. *Phys. Rev. B* 87, 184115.
160. Lao, B., An, T., Wang, A., et al. (2021). Artifikiai intelligencia az égi objektumok összeírásához: a legújabb technológia találkozik a legrégebbi tudománnyal. *Sci. Bull.* 66, 2145-2147.
161. Wu, C., Wong, O.I., Rudnick, L., et al. (2019). Radio Galaxy Zoo: CLARAN-a deep learning classifier for radio morphologies. *MNRAS* 482, 1211-1230.
162. Raddick, M.J., Bracey, G., Gay, P.L., et al. (2010). Galaxis állatkert: a civil tudományos önkéntesek motivációjának feltárása. *Astron. Educ. Rev.* 9, 010103.
163. George, D. és Huerta, E. (2018). Deep neural networks to enable real-time multimes-senger astrophysics. *Phys. Rev. D* 97, 044039.
164. Brown, T.L., LeMay, H.E., Bursten, B.E. és Brunauer, L.S. (1997). *Kémia: The Central Science*, tizenharmadik kiadás (Prentice Hall).
165. CAS Registry (2021). <https://www.cas.org/cas-data/cas-registry>.
166. Llanos, E.J., Leal, W., Luu, D.H., et al. (2019). A kémiai tér és három történelmi rezsímjének feltárása. *Proc. Natl. Acad. Sci. U S A* 116, 12660-12665.
167. (1992). A 14. fejezet a reakciótér. In *Adatkezelés a tudományban és a technológiában*, R. Carlson, szerk. (Elsevier), 331-336. o. [https://doi.org/10.1016/S0922-3487\(08\)70261-2](https://doi.org/10.1016/S0922-3487(08)70261-2).
168. Anderson, P.W. (1972). A több más. *Science* 177, 393-396.
169. Ayres, L.B., Gomez, F.J., Linton, J.R., et al. (2021). Ugrás az analitikai kémia és a mesterséges intelligencia között: oktatói áttekintés. *Anal. Chim. Acta* 1161, 338403.
170. Cong, S., Liu, X., Jiang, Y., et al. (2020). Felületi megerősített Raman-szórás, amelyet a határfelületi töltésátviteli átmenetek mutatnak ki. *Innovation* 1, 100051. <https://doi.org/10.1016/j.xinn.2020.100051>.
171. Weng, S., Yuan, H., Zhang, X., et al. (2020). Mélytanuló hálózatok a felületerősített Raman-spektroszkópia felismerésére és kvantálására. *Analyst* 145, 4827-4835.
172. Leong, Y.X., Lee, Y.H., Koh, C.S.L., et al. (2021). Felület-megerősített Raman-szórás (SERS) kódtoló: gépi tanulással vezérelt multireceptoros platform a bor fizamatainak multiplex profiljéhez. *Nano Lett.* 21, 2642-2649.
173. Westermayr, J., Gastegger, M., Schuett, K.T. és Maurer, R.J. (2021). Perspective on a gépi tanulás integrálása a számítógépes kémiába és az anyagtudományba. *J. Chem. Phys.* 154, 230903.
174. Hermann, J., Schaeetzle, Z. és Noé, F. (2020). Az elektronikus Schrödinger-egyenlet mély-ideghálós megoldása. *Nat. Chem.* 12, 891-897.
175. Unke, O.T., Chmiela, S., Sauceda, H.E., et al. (2021). Gépi tanulási erő figyelem. *Chem. Rev.* 121, 10142-10186.
176. Wang, J., Olsson, S., Wehmeyer, C., et al. (2019). A durva szemcséjű molekuladinamikai erő figyelem gépi tanulás. *ACS Cent. Sci.* 5, 755-767.
177. Tavazde, P., Avendaneo Franco, G., Ren, P., et al. (2018). Gépi vezérlésű vadászat az azobenzol fotoizomerizáció globális reakciókoordinátáira. *J. Am. Chem. Soc.* 140, 285-290.
178. Staszak, M. (2021). Artifikiai intelligencia a kémiai reakciók ki-netikai modellezésében. In *Theoretical and Computational Chemistry (De Gruyter)*, pp. 159-180.
179. Coley, C.W., Jin, W., Rogers, L., et al. (2019). Egy gráf-konvolúciós neurális hálózati modell a kémiai reaktivitás előrejelzésére. *Chem. Sci.* 10, 370-377.





Publikációs statisztikák megtekintése