# CÓMO EL APRENDIZAJE AUTOMÁTICO ESTÁ REVOLUCIONANDO LA CIENCIA DE LOS MATERIALES

La investigación en ciencia e ingeniería de los materiales es crucial para el desarrollo de materiales que puedan ayudar a resolver algunos de los mayores retos de la sociedad. En los últimos años, este campo ha empezado a aprovechar el potencial del aprendizaje automático y ya nos está ayudando a entender de mejor manera las propiedades de los materiales y de cómo podemos descubrir y diseñar nuevos materiales. El **profesor Dane Morgan** y el **Dr. Ryan Jacobs**, de la **Universidad de Wisconsin-Madison** (EE.UU.), investigan las oportunidades y los retos que plantean estos avances.





Profesor Dane Morgan

Catedrático de Ingeniería Harvey D. Spangler



Dr. Ryan Jacobs

Personal científico de investigación

Materiales computacionales, Departamento de Ciencia e Ingeniería de los Materiales, Facultad de Ingeniería, Universidad de Wisconsin-Madison, EE.UU.

#### Ámbito de investigación

Ciencia e Ingeniería de los Materiales (MS&E)

## Proyecto de investigación

Investigar las oportunidades y los retos del aprendizaje automático en el ámbito de la MS&E

#### **Financiadores**

Fundación Nacional de la Ciencia de EE.UU. (US National Science Foundation – NSF), Departamento de Energía de EE.UU. (US Department of Energy - DOE), Laboratorio de Investigación del Ejército de EE.UU. (US Army Research Lab), Agencia de Proyectos de Investigación Avanzados de Defensa (Defense Advanced Research Projects Agency - DARPA)

# HABLE COMO UN ...

### CIENTÍFICO E INGENIERO DE MATERIALES

## Inteligencia artificial (IA) —

sistemas informáticos capaces de realizar tareas que normalmente requieren inteligencia humana

**Compuesto** — mezcla de dos o más elementos

Aprendizaje automático (ML) — sistemas informáticos capaces de aprender y adaptarse sin seguir instrucciones específicas

Ciencia e ingeniería de los materiales (MS&E) — el estudio de las composiciones y propiedades

de los materiales, y el desarrollo de materiales para cumplir funciones específicas

Procesamiento del lenguaje natural (PLN) — técnicas informáticas capaces de analizar y sintetizar el lenguaje humano natural

**Datos cualitativos** — datos que describen los atributos o propiedades de algo

**Datos cuantitativos** — datos que expresan una propiedad mensurable de algo

I aprendizaje automático (ML) es un potente campo emergente que implica la programación de ordenadores que "aprenden" sobre la marcha. Forma parte de la inteligencia artificial y busca patrones en conjuntos de datos existentes que utiliza para tomar sus propias decisiones o hacer predicciones. "El aprendizaje automático ha experimentado un crecimiento asombroso de sus capacidades en las dos últimas décadas", afirma el profesor Dane Morgan, de la Facultad de Ingeniería de la Universidad de Wisconsin-Madison. "Estas nuevas capacidades están repercutiendo en casi todos los aspectos de la vida. Además, en el estudio de los materiales no es una excepción. Ahora, el reto consiste en averiguar cómo utilizarlas de la manera más eficaz", explica.

El profesor Dane y el Dr. Ryan Jacobs, se centran en comprender las capacidades del ML y explorar cómo pueden aprovecharse en la ciencia e ingeniería de los materiales (MS&E). La ciencia y la ingeniería de materiales consiste en estudiar las propiedades de los materiales y crear otros

nuevos para fines específicos basados en estas relaciones. "El uso del ML en la MS&E está en sus primeras fases, aunque está evolucionando con rapidez ", afirma Ryan. "Hemos visto su poder en otros campos. Un ejemplo es que, por ejemplo, ha ganado a los mejores jugadores profesionales de ajedrez o póker del mundo. Otro ejemplo es que está permitiendo tecnologías potencialmente transformadoras como los vehículos autónomos. Así pues, está claro que el ML está impulsando los avances en ciencia y tecnología", concluye.

### Abundancia digital

Todas las áreas de la ciencia se han beneficiado del auge de la informática e Internet. "Hoy en día podemos acceder fácilmente a documentos y datos, como, por ejemplo, enormes bases de datos digitales que recopilan la estructura y las propiedades de innumerables compuestos", afirma Dane. "A esto se suman potentes capacidades informáticas y de modelización que facilitan en gran medida la exploración y predicción de complejas relaciones entre la



estructura de los materiales, su composición y sus propiedades", explica.

La mayor parte de esta potencia de cálculo procede de software de código abierto. "Los algoritmos fundamentales del ML están a disposición de todo el mundo de forma gratuita", afirma Dane. "Esto incluye herramientas desarrolladas por grandes corporaciones como Facebook y Google, así como paquetes desarrollados por otros investigadores de la MS&E". Esta accesibilidad elimina barreras y fomenta la exploración y el desarrollo de nuevas herramientas y hallazgos.

#### **Correlaciones ocultas**

El ML es capaz de encontrar patrones en grandes conjuntos de datos que serían imposibles de percibir para los humanos. "El ML puede identificar relaciones extremadamente complejas entre la estructura, las propiedades y el rendimiento de los materiales", explica Ryan. "Extrae información a partir de los datos para formar vínculos entre la composición de un material (los tipos y cantidades de elementos que contiene) y su estructura (posiciones de los átomos en el espacio) con propiedades o funciones concretas", prosigue. Dane pone el ejemplo de cómo la fragilidad del acero, cuando se expone a determinadas condiciones, se ve afectada por el tipo y la distribución de los átomos dentro de su estructura. El ML puede utilizarse para evaluar en profundidad estas relaciones, lo que resulta muy útil para seleccionar un tipo de acero que rinda lo suficientemente bien en funciones importantes, como, por ejemplo, dentro de un reactor nuclear.

Además de probar materiales ya existentes, estas relaciones también pueden ampliarse utilizando el ML para predecir relaciones estructurapropiedades-rendimiento en materiales que aún no existen. "Las simulaciones a escala molecular se utilizan habitualmente para comprender las propiedades previstas antes de realizar experimentos en el mundo real y son una parte fundamental del proceso de descubrimiento y diseño", afirma Ryan. "El ML puede aprender cómo los átomos de un material interactúan entre sí basándose en los datos existentes. Además, utiliza este conocimiento para calcular las propiedades de materiales novedosos". Por ejemplo, se está utilizando el ML para descubrir qué materiales pueden utilizarse para fabricar paneles solares de la manera más eficiente posible, prediciendo cómo afectan los cambios estructurales

del material absorbente de una célula solar a su capacidad de convertir la luz solar en electricidad.

#### Procesamiento del lenguaje natural

Aunque muchos de los datos existentes sobre la MS&E son cuantitativos, o sea, basados en cifras que pueden compararse con relativa facilidad, otros muchos son cualitativos, lo que resulta más difícil de comparar o incluso de encontrar dado el gran número de trabajos de investigación existentes sobre la MS&E. "El ML se está convirtiendo en un medio eficaz de recopilación de datos mediante el procesamiento del lenguaje natural (PLN)", afirma Ryan. "Buscar de forma manual los conocimientos relevantes en los documentos existentes lleva mucho tiempo, pero los métodos del PLN pueden extraer información mucho más rápidamente", explica. El PLN consiste en utilizar técnicas del ML para que los ordenadores aprendan las distintas formas en que pueden presentarse los datos cualitativos en los artículos científicos. Por ejemplo, una técnica de preparación podría decir "la mezcla se agita rápidamente", y recopilar estos datos en un formato que los científicos puedan utilizar.

A medida que estas tecnologías se hacen cada vez más potentes, crece la necesidad de que los investigadores de la MS&E se adapten para utilizarlas con eficacia. "Las nuevas capacidades del ML para comprender el lenguaje y establecer conexiones complejas aún no se utilizan de forma generalizada en la MS&E", afirma Dane. "Es necesario integrar las herramientas del ML en nuestros flujos de trabajo actuales para que así nuestra investigación sea más rápida, de mejor calidad y más rentable", concluye.

#### Visión por ordenador

Gran parte de los datos de caracterización de la MS&E se presentan en forma de imágenes. "En los últimos años, la escala y la complejidad de los datos de microscopía electrónica han aumentado exponencialmente y en parte gracias a la mejora de la tecnología de los detectores", explica Ryan. Los investigadores suelen estar interesados en determinar qué fases están presentes en una micrografía, o en encontrar objetos individuales en una imagen, como átomos ausentes o defectos extendidos como bucles de dislocación o huecos. Los conjuntos de datos de gran tamaño y complejos requieren el uso de métodos de visión por ordenador de ML para automatizar este enfoque.

Los algoritmos de visión por ordenador de ML codifican

las complejas relaciones presentes en las imágenes, como los cambios de contraste o la presencia de bordes alrededor de un objeto, lo que permite al algoritmo "aprender" qué aspecto puede tener una microestructura o un defecto concreto. "Una vez entrenados adecuadamente, hemos comprobado que los métodos de visión por ordenador pueden detectar objetos en imágenes con aproximadamente la misma eficacia que los expertos humanos, ¡pero en una fracción del tiempo!", afirma Ryan.

#### La era de los robots

Como ocurre con todos los campos científicos, la MS&E incluye inevitablemente tareas tediosas y lentas, como mezclar cientos de combinaciones de distintos elementos para comprobar sus propiedades. Cada vez se desarrollan más robots capaces de realizar estas tareas, lo que ahorra a los investigadores mucho tiempo, esfuerzo y capital humano y financiero. "Se están desarrollando laboratorios autónomos enteros que pueden fabricar y caracterizar multitud de materiales sin apenas intervención humana, lo que permite explorar rápidamente sus propiedades", afirma Dane. "El ML es excelente a la hora de realizar la toma de decisiones que implica este proceso al elegir qué materiales explorar y en qué orden, basándose en los datos que recibe a medida que avanzan los experimentos", explica.

Dane predice que el auge de estos laboratorios autónomos podría cambiar radicalmente la naturaleza de la MS&E. "A medida que el ML y la robótica se abaraten y sean más eficaces, los investigadores se centrarán más en construir y perfeccionar los entornos autónomos y menos en los experimentos y cálculos detallados en sí", afirma. "Esto cambiará las habilidades que necesitan los investigadores de la MS&E", concluye.

Ryan está entusiasmado con la naturaleza cambiante de la MS&E y de la ciencia en su conjunto. "Me entusiasma la perspectiva de que el ML alcance la madurez suficiente para contribuir con casi todas las tareas de investigación", afirma Ryan. "Creo que cada paso del proceso científico, desde la generación de hipótesis hasta la la extracción de conocimientos existentes en la bibliografía, pasando por la lanificación y ejecución de experimentos y simulaciones, o el análisis de los resultados, se verá facilitado por el ML. Esta relación hombre-máquina permitirá con toda posibilidad que la investigación avance a un ritmo y con una precisión que hoy son inalcanzables", explica.

# ACERCA DE LA CIENCIA E INGENIERÍA DE LOS MATERIALES

La MS&E es un campo en constante crecimiento que aprovecha cada vez más el aumento de la potencia de cálculo y otras oportunidades. Dane y Ryan nos explican más sobre lo que les gusta de su línea de trabajo.

"Los materiales importan", afirma Dane. "Están en el núcleo de las principales tecnologías avanzadas. Hay ejemplos por todas partes: las células solares que nos ayudan a abandonar los combustibles fósiles, los transistores a nanoescala que hacen funcionar los ordenadores o que hacen que la ropa no se arrugue".

"El desarrollo de nuevos materiales está en la vanguardia de la solución de nuestros problemas sociales más acuciantes", afirma Ryan. "Me resulta muy gratificante ver que la investigación realizada por científicos de materiales tiene un impacto positivo y nos hace avanzar colectivamente como especie".

"La MS&E tiene una maravillosa combinación de problemas fundamentales, pero también una fuerte

conexión con el mundo real", explica Dane. "A mí me parece un lugar estupendo para aunar mi amor por el pensamiento científico con las aplicaciones prácticas para marcar la diferencia en el mundo".

"Las generaciones futuras interactuarán con datos a una escala y con una amplitud que nunca estuvieron al alcance de sus predecesores", afirma Ryan. "Además, los nuevos científicos participarán en modalidades transversales de investigación que integrarán teoría, computación y experimentación a gran escala".

"La MS&E es un campo en rápido crecimiento con oportunidades increíbles", afirma Dane. "Ahora podemos ver y ordenar átomos individuales, predecir el comportamiento atómico mediante simulaciones e integrar estos métodos con IA avanzada para analizar datos, predecir comportamientos y guiar descubrimientos mucho más rápido de lo que jamás podrían hacerlo los cerebros humanos. Se producirán nuevos avances en muchísimas áreas".

# **Explore las carreras en** ciencia e ingeniería de los materiales

- Dane recomienda informarse sobre la Sociedad de Investigación de Materiales (Materials Research Society). Ofrece charlas, actividades y exposición de posibles trayectorias profesionales en este campo: www.mrs.org.
- El departamento de Dane y Ryan ofrece una serie de oportunidades y eventos de divulgación, como el Teen Science Cafe, experiencias de investigación y participación en festivales científicos: mrsec.wisc.edu
- Informatics Skunkworks involucra a estudiantes universitarios de STEM en habilidades científicas prácticas y en equipo basadas en la informática, como el ML. Dane y Ryan forman parte del grupo y dicen que está ayudando a los futuros investigadores de la MS&E a adquirir las habilidades necesarias para trabajar en la interfaz del ML, ciencia e ingeniería: skunkworks.engr.wisc.edu

# **De la escuela a la** ciencia e ingeniería de los materiales

- Ryan sugiere la física y la química como las asignaturas más relevantes para la MS&E. También recomienda aprender lenguajes de programación como Python.
- Dane señala que no existen muchas licenciaturas específicas de MS&E, pero dice que, además de la ciencia de los materiales, los cursos de ingeniería mecánica, ingeniería química, química o física suelen ser muy útiles.
- Para los crecientes aspectos del ML en dicho campo, los conocimientos de informática, codificación y matemáticas son muy útiles.

# ¿Cómo se convirtió Dane en científico e ingeniero de materiales?

Mi padre enseñaba ciencias y matemáticas, por lo que nuestra casa estaba llena de libros de ciencias. Mi madre era profesora de inglés y consultora de telecomunicaciones, por lo que también conocía mucho el tema. Ellos me inculcaron la creencia de que la ciencia es algo grandioso de lo que formar parte, y, a día de hoy sigo estando de acuerdo. También leía muchos cómics y siempre quise tener superpoderes: ¡en mi opinión la ciencia es lo más parecido a los superpoderes y la magia!

Mi vida como científico ha estado marcada por cientos de pequeños momentos. Recuerdo que de niño leía a Isaac Asimov y Steven Weinberg y me asombraba la inmensidad de sus conocimientos. Tenía excelentes conversaciones sobre pruebas matemáticas con mis increíbles profesores de matemáticas de primaria y solía ir mucho al museo de ciencias de Boston. Poder haber compartido mi camino con numerosos profesores, amigos y mentores que han sido increíbles ha sido esencial.

No tienes por qué hacer ciencia como los demás. A algunas personas se les puede dar muy bien solucionar problemas, a otras el trabajar en equipo y otras tienen una gran visión de los resultados potenciales. En mi caso, son dos las cosas que me han ayudado muchísimo en mi carrera: interesarme por la ciencia y aprender sobre ella fuera de la escuela. Ambas cosas me han ayudado a alcanzar el éxito académico. Rodearme de grandes científicos y otras personas con talento me ha expuesto a una serie de enfoques y ejemplos que me han ido formando durante todo el proceso.

En el futuro, me encantaría descubrir un nuevo material que tenga un impacto significativo en el bienestar humano: quizá un combustible mejor o un acero más resistente. También quiero compartir mis conocimientos sobre cómo enfocar la ciencia y utilizarla para lograr cambios positivos. Espero poder involucrar a tantos jóvenes brillantes como pueda para que se unan a esta visión.

# Los mejores consejos de Dane

- Haga muchas cosas científicas cuando no esté en la escuela. Asegúrese de que estás adquiriendo las destrezas del pensamiento técnico y la práctica.
- Hable con los demás sobre sus trayectorias profesionales y asegúrese de que conoce las opciones que tiene a su disposición a lo largo de su desarrollo, como campamentos, concursos, programas y oportunidades profesionales.
- 3. Averigüe qué es lo que le gusta y dedíquese a ello. Aportamos mucho más al mundo cuando creemos en lo que hacemos.

# ¿Cómo se convirtió Ryan en científico e ingeniero de materiales?

De pequeño me fascinaban los planetas y el espacio exterior. Recuerdo haber sacado un libro de la biblioteca de mi escuela de primaria sobre cada planeta. Aunque no esté explícitamente relacionado con la MS&E, este asombro por la naturaleza es importante para los científicos. A menudo nos preocupamos por descubrir y comprender los misterios del mundo natural.

Provengo de una familia de ingenieros y decidí seguir la tendencia. También me inspiré en conocidos divulgadores científicos como Carl Sagan, ya que me atraía mucho su talento para inculcar el asombro científico en las mentes más jóvenes.

Los profesores de la universidad me hicieron sentir mi pasión por la ciencia y, en particular, por la MS&E. Mi orientador de la universidad me animó a plantearme la posibilidad de cursar estudios de posgrado, algo que no me había planteado hasta entonces. La combinación del interés por un tema con el apoyo de un orientador influyó en mi formación como científico.

La determinación y el trabajo en equipo me han ayudado a tener éxito. El fracaso es una parte inevitable de la ciencia, por lo que es esencial tener la determinación de seguir intentando cosas nuevas, atacar creativamente un problema desde nuevos ángulos y dejar que los demás te ayuden. La ciencia es muy colaborativa, así que rodearse de buenas personas con valores similares te ayudará a tener éxito.

En el futuro, me gustaría alejarme de la comunicación técnica de la ciencia en revistas técnicas para intentar centrarme en escribir sobre la MS&E de una forma más accesible para el gran público

## Los mejores consejos de Ryan

- Mantenga la mente abierta con respecto a sus intereses y objetivos. A medida que conozca gente nueva y se exponga a cosas nuevas, podrá llegar a interesarse por cosas antes desconocidas.
- ¡Sea curioso en todo momento! Mantener el sentido de la curiosidad y hacer preguntas le conducirá a resultados interesantes y gratificantes. Hay muchísimas cosas que no entendemos sobre el universo y que está esperando a que las descubramos.

