



V
wet

Deze laborant heeft heel goede ideeën

Kunstmatige intelligentie kan de wetenschap helpen. Of zélf wetenschap bedrijven kan ook. Zoals met een molecuulendroomgenerator.

6/7

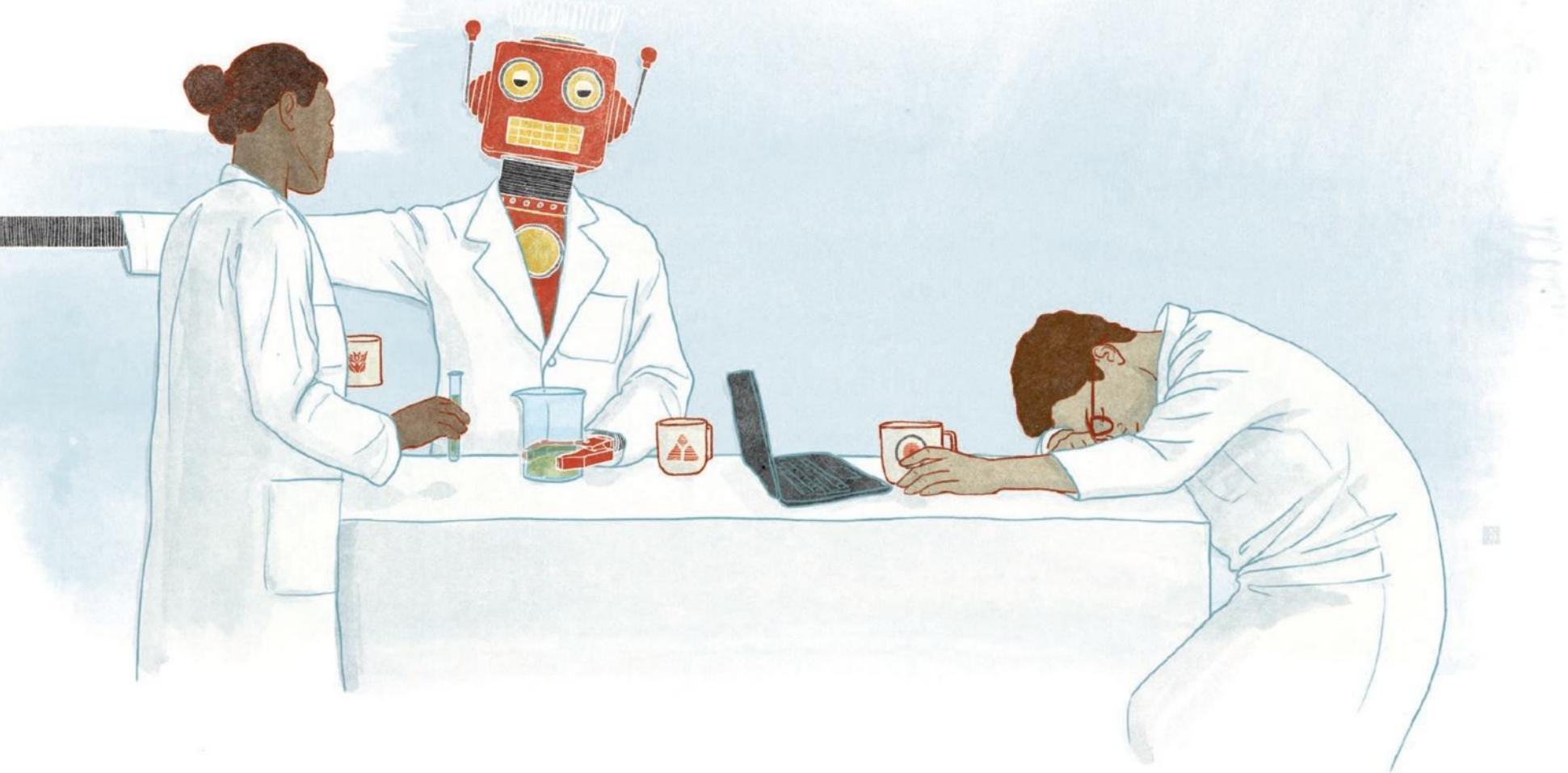
Hee, gezellig,

mijn co-auteur is een robot!

KUNSTMATIGE INTELLIGENTIE

Kunstmatige intelligentie wordt een steeds belangrijker instrument van wetenschappers. Nederlandse onderzoekers werken aan een robot die co-auteur kan zijn van een wetenschappelijk artikel.

Tekst **Bennie Mols** Illustratie **XF&M**



In veel opzichten zie ik kunstmatige intelligentie als analoog aan de Hubble-telescoop: een wetenschappelijk instrument waarmee we verder kunnen kijken en het universum beter kunnen begrijpen. Ik geloof dat wetenschappers in de komende jaren dankzij kunstmatige intelligentie inzichten zullen genereren op een groot aantal gebieden, van het ontwerpen van supergeleiders tot de ontdekking van geneesmiddelen.” Dat zei Demis Hassabis vorig jaar tijdens zijn lezing over *artificial intelligence* (AI) bij de Royal Society in Londen. Hassabis is AI-onderzoeker en mede-oprichter van AI-bedrijf DeepMind. Dat werd beroemd door de ontwikkeling van computer AlphaGo, die in 2016 de beste go-speler van het afgelopen decennium versloeg.

Hassabis vertelde in zijn lezing dat hij van alle AI-toepassingen het meest enthousiast is over AI in de wetenschap.

Daar is alle reden toe. In de afgelopen jaren hebben tal van wetenschappelijke disciplines al AI gebruikt, meestal om patronen te vinden in grote hoeveelheden data. Soms leidde dat tot nieuwe inzichten. Zo ontdekten astronomen in 2017 dankzij machine learning, een onderdeel van AI, een nieuwe exoplanet.

Aan de Universiteit van Manchester heeft hoogleraar informatica Ross D. King robotwetenschapper Eve gebouwd. Eve is uitgerust met robotarmen, camera's, sensoren en pipetten. Zij doet wetenschappelijke experimenten aan gistcellen. Eve genereert ook hypothesen over de functies van genen in een gistcel, ontwerpt vervolgens een simpel experiment om die hypothesen te testen, voert het experi-

ment uit, analyseert de resultaten en kan zelfs een vervollexperiment voorstellen. Uiteindelijk wil King de ontdekking van nieuwe geneesmiddelen robotiseren.

AI wordt dus al gebruikt in de wetenschap om data te analyseren, experimenten te robotiseren en zelfs om eenvoudige hypothesen op te stellen en te testen. Nog een stap verder is het afleiden van wetmatigheden. Ook dat is in een eenvoudige vorm al gedemonstreerd. In 2009 ontwikkelde de Amerikaanse roboticus Hod Lipson de 'Eureka-machine', die uit observaties van de bewegingen van speelgoedautootjes en slingers zelfstandig de bewegingswetten van Newton afleidde.

Toch zijn de mogelijkheden van AI in de wetenschap groter. Een van de wetenschappers die hierin vooroplopen is Alan Aspuru-Guzik, hoogleraar in zowel scheikunde als informatica aan de Universiteit van Toronto. Hij is Mexicaan van geboorte, werkte achttien jaar aan twee top-universiteiten in de VS (Berkeley en Harvard), maar vertrok uit onvrede met het immigratiebeleid van president Trump vorig jaar naar buurland Canada.

Batterijen en zonnecellen

Aspuru-Guzik zoekt naar nieuwe materialen om batterijen en zonnecellen van te maken. Tijdens een interview in Washington DC afgelopen februari vertelde hij over zijn motivatie: „Als soort is de mens groot genoeg gebleken om het klimaat te veranderen. Maar ik geloof dat we ook groot genoeg zijn om klimaatverandering te stoppen door nieuwe materialen uit te vinden waarmee we ons energiegebruik kunnen verduurzamen.”

Het gaat hem echter veel te langzaam. Aspuru-Guzik: „Het duurt tien jaar en het kost tien miljoen dollar om een nieuw materiaal te maken. Ons doel is om een factor tien te winnen. Rond 2025 willen

we in staat zijn om een nieuw materiaal binnen een jaar te ontdekken tegen een kostprijs van slechts een miljoen dollar.”

Het zichtbare universum telt 10⁸² moleculen, vervolgt Aspuru-Guzik. „Daarmee kun je tussen de 10⁶⁰ en 10¹⁸⁰ middelgrote moleculen maken. Veel oplossingen voor betere geneesmiddelen en nieuwe materialen liggen in die enorme ruimte van mogelijkheden. Helaas zijn de meeste moleculen in die zoekruimte waardeloos. Met AI willen we de veelbelovende moleculen veel sneller vinden.”

Aspuru-Guzik noemt zijn concept een „zelfdraaiend laboratorium”. Daarin probeert hij in elke onderzoeksstap AI te introduceren. „Het begint met het automatisch genereren van veelbelovende moleculen voor de start van het experiment. Daarna gaat het zelfdraaiende lab ze testen en selecteert het opnieuw de meestbelovende moleculen. Ook kan het zelfdraaiende lab de omgevingscondities optimaliseren: bijvoorbeeld een iets warmere of koudere omgeving, iets meer of minder van een oplosmiddel, iets meer of minder van de katalysator. Het fysieke werk laten we zoveel mogelijk door een robot doen. Wanneer je alles wat meetbaar is digitaal meet en elk onderdeel van het experimenteel werk digitaliseert, dan kun je in elk onderdeel AI toepassen.”

Voor het selecteren van moleculen om het experiment mee te beginnen, gebruikt de chemicus een variant op de Deep Dream Generator, die Google in 2015 bij toeval ontdekte. Google's droomgenerator wordt getraind om objecten te herkennen in afbeeldingen, bijvoorbeeld dierengezichten. Vervolgens wordt de generator gestimuleerd om nieuwe afbeeldingen te 'dromen'. Elk patroon dat ook maar iets van een kenmerk van een dierengezicht heeft, bijvoorbeeld een patroon dat een beetje op een oog lijkt, gaat

hij versterken. Zo creëert de droomgenerator nieuwe afbeeldingen waarin op allerlei plekken ineens dierengezichten opduiken. Stel dat de generator in een bord spaghetti kenmerken van een vissenkop ziet, dan creëert hij een afbeelding met vissenkoppen in een bord spaghetti. Het lijkt alsof hij hallucineert. Op een vergelijkbare manier gebruikt Aspuru-Guzik AI om nieuwe moleculen te 'dromen', uitgaande van eerder gevonden nuttige moleculen en hun eigenschappen.

Brute aanpak

Het dromen van moleculen blijkt nog te werken ook. Aspuru-Guzik: „We hebben nog geen nieuwe materialen ontdekt, maar we hebben wel al aangetoond dat AI onderdelen van de ontdekkingstocht versnelt. Ons zelfdraaiende lab heeft bijvoorbeeld in één nacht enkele experimentele parameters geoptimaliseerd, iets wat onze getrainde chemici traditioneel enkele maanden kost.” Sommige collega-chemici beschouwen de aanpak van Aspuru-Guzik als brutaal, maar dat kan hem niets schelen: „Het klopt dat we een soort McDonald's van de organische scheikunde ontwikkelen, maar ik vind het fijn om een rebel te zijn.”

De komende jaren wil Aspuru-Guzik een dialoogsysteem ontwikkelen waarin menselijke onderzoekers vragen kunnen stellen aan het 'zelfdraaiende lab'. Vervolgens moet de machine bijvoorbeeld zijn keuzes en antwoorden kunnen uitleggen, zodat de robotwetenschapper geen 'black box' is voor de mens.

Nederlandse onderzoekers willen nog een stap verder gaan: zij willen een robotwetenschapper ontwikkelen die zo'n goede collega wordt dat ze het co-auteurschap verdient van wetenschappelijke artikelen. Frank van Harmelen, hoogleraar kunstmatige intelligentie aan de VU, is

een van de initiatiefnemers. In een consortium van vijf Nederlandse universiteiten heeft hij er een voorstel voor ingediend bij onderzoeksfinancier NWO. Van Harmelen: „Tot nu toe is AI in de wetenschap vooral als een passief instrument gebruikt. Onze robotwetenschapper moet zelf op ideeën kunnen komen en ook met menselijke wetenschappers in discussie kunnen gaan. Ons motto is dat we een hybride intelligentie creëren: een combinatie van menselijke en machine-intelligentie.”

Het voorstel, met een beoogd budget van twintig miljoen euro verspreid over tien jaar, wordt dit jaar beoordeeld door NWO. „We willen een heleboel nog onopgeloste fundamentele problemen uit de AI tegelijk aanpakken,” zegt van Harmelen. „Eigenlijk moeten we de nieuwe AI-aanpak die de afgelopen jaren zo succesvol is gebleken, *machine learning*, combineren met de oude aanpak van AI, gebaseerd op redeneren en kennisrepresentatie.”

Hoe zo'n robotwetenschapper als collega zou kunnen werken, legt Van Harmelen uit aan de hand van zijn samenwerking met historici van het Internationaal Instituut voor Sociale Geschiedenis. „Historici hebben veel data over de economie in Europa van de afgelopen honderden jaren. Hoeveel mensen werkten in bepaalde beroepen? Hoe waren industrietakken verdeeld over verschillende streken? Wat was de opkomst en ondergang van verschillende steden? Historici proberen interessante hypothesen op te stellen en deze te testen. Ons doel is dat de computer patronen in de data leert herkennen en op basis daarvan interessante hypothesen opstelt.”

Tot nu toe zijn computers weliswaar goed gebleken in het vinden van correlaties, maar hebben ze geen idee van de oorzakelijke verbanden. Van Harmelen:

„Onze robot moet zelf op ideeën kunnen komen

Frank van Harmelen
hoogleraar kunstmatige intelligentie

„Een computer kan een verband vinden dat steden met een even aantal letters het economisch goed doen en steden met een oneven aantal letters niet. Jij en ik weten meteen dat dit een zinloze hypothese is, omdat wij veel achtergrondkennis hebben. Onze robotwetenschapper moet dus ook een boel achtergrondkennis hebben en daarover kunnen redeneren.”

Machines met achtergrondkennis

Het succes van IBM's supercomputer Watson, die in 2011 de Amerikaanse tv-quiz *Jeopardy* won van de twee beste menselijke spelers aller tijden, laat zien dat het al mogelijk is om machines te bouwen met veel achtergrondkennis. Lastiger is het om machines te bouwen die deze kennis kunnen abstraheren en generaliseren. Van Harmelen: „De robotwetenschappers van King en Aspuru-Guzik zijn nuttige instrumenten, maar in feite gebruiken ze slimme exploraties van een vooraf gegeven ruimte met hypothesen. Wat eraan ontbreekt zijn causaliteit, abstractie en generalisatie. Dat zijn cruciale ingrediënten van wetenschappelijke kennis. We willen niet alleen weten dat stofje X reageert met stofje Y, maar ook waarom het dat doet. Dat is causaliteit. En eigenlijk willen we ook weten waarom alle stoffen met een of andere eigenschap P reageren met stoffen uit familie Q. Dat is abstractie en generalisatie.”

En er is nog iets cruciaal voor de samenwerking tussen menselijke wetenschappers en de robotwetenschapper: de robot moet een *theory of mind* hebben. Dat wil zeggen dat ze moet weten wat mensen al weten, wat ze niet weten en ook wat ze zouden willen weten. Anders zou de machine dingen gaan uitleggen die mensen al lang weten, of erger nog, dingen niet uitleggen die mensen niet weten. „Menselijke wetenschappers

doen dit onderling automatisch”, zegt Van Harmelen, „maar voor de robotwetenschapper moeten we deze vaardigheden nog ontwikkelen.”

Van Harmelen denkt dat hybride intelligentie meer oplevert dan machine-intelligentie alleen. „Machine-intelligentie zal heel anders zijn dan menselijke intelligentie. Dat zien we nu al wanneer we de sterktes en zwaktes van beide soorten intelligentie vergelijken. Net zoals in de mensenwereld heterogene teams succesvoller zijn, zo zullen in de toekomst teams van mensen en machines succesvoller zijn in de wetenschap dan teams van alleen mensen.”

Hoe denkt chemicus en informaticus Aspuru-Guzik over de toekomst van de robotwetenschapper? Heeft hij menselijke intuïtie straks helemaal niet meer nodig voor het ontdekken van nieuwe materialen? Aspuru-Guzik: „Mensen hebben intuïtie en soms is die nuttig. Maar mensen zitten ook vol met vooroordelen die ontdekkingen alleen maar in de weg zitten. AI helpt ons om onbevooroordeeld te werken. Soms is een gebrek aan kennis juist voordelig om iets nieuws te ontdekken.”

Toch denkt de chemicus net als van Harmelen niet dat AI de mens gaat vervangen uit de wetenschap. „Tot nu toe is AI vooral heel goed in precies omschreven taken met een helder doel; het spelen van schaken, go of het computerspel Starcraft bijvoorbeeld. Ook ik geloof niet in de volledig autonome robotwetenschapper. In mijn visie is de wetenschapper van de toekomst meer zoals de gebruiker van een zelfrijdende auto: de auto doet veel, maar de gebruiker vertelt de auto nog steeds waar hij heen moet, wanneer en met welk doel. Ik zie de wetenschapper van de toekomst als een cyborg: een versmelting van mens en robot.”

Leren

Heel veel voorbeelden

Het vakgebied

machine learning is een onderdeel van het veel grotere wetenschapsgebied kunstmatige intelligentie. Machine learning bestuurt hoe computers en robots nieuwe dingen kunnen leren. Dat leren kan op diverse manieren gebeuren.

In de afgelopen jaren

is het op een computer nabootsen van de manier waarop het menselijk brein leert zeer succesvol geworden: leren aan de hand van een netwerk van kunstmatige neuronen. Deze manier van leren werkt vooral goed wanneer computers veel voorbeelden hebben. Een computer die veel voorbeelden van auto's heeft gezien, kan dan makkelijk een auto op een nieuwe foto herkennen.