استفاده از هوش مصنوعی و یادگیری ماشین برای طراحی، پیش‌بینی و بهینه‌سازی ریزساختار و خواص نانوکامپوزیت‌های پلیمری

شادی حسن آجیلی*، ریحانه کرمی رباطی* و فاطمه مصفا*

*-دانشکده مهندسی شیمی، نفت و گاز، دانشگاه شیراز، شیراز، ایران

چکیده

نانوکامپوزیت‌های پلیمری، به‌دلیل وابستگی خواص ماکروسکوپی‌شان به برهم‌کنش‌های فصل مشترک در مقیاس نانو، از جمله پیچیده‌ترین مواد مهندسی برای طراحی هدفمند به‌شمار می‌روند. توسعه سنتی این مواد بر آزمون‌وخطای تجربی متکی است؛ رویکردی پرهزینه و زمان‌بر که در برابر ماهیت چندمقیاسی و چندمتغیره این مواد ناکارآمد است. در سال‌های اخیر، هوش مصنوعی و یادگیری ماشین به‌عنوان راهکاری برای عبور از این محدودیت مطرح شده‌اند، اما بخش عمده‌ی مطالعات مروری موجود رویکردی پراکنده و توصیفی اتخاذ کرده و صرفاً به فهرست‌کردن کاربردهای مجزای پیش‌بینی خواص بسنده می‌کنند، بدون آنکه تصویری یکپارچه از این تحول یا معیاری برای سنجش قابلیت اعتماد واقعی این مدل‌ها ارائه دهند؛ دغدغه‌ی اصلی این مقاله نیز همین شکاف است. هدف این مقاله، ارائه دیدگاهی جامع و یکپارچه از تحول زنجیره‌ی «فرآیند ← ریزساختار ← خواص ← بهینه‌سازی» تحت تأثیر هوش مصنوعی است، با تمرکز ویژه بر دو محور: نخست، ادغام فیزیک مواد در معماری یادگیری ماشین (یادگیری ماشین فیزیک‌آگاه) به‌عنوان راهی برای افزایش قابلیت اعتماد و تعمیم‌پذیری مدل‌ها؛ و دوم، کاربرد این مدل‌ها در طراحی معکوس ریزساختار برای دستیابی مستقیم به عملکرد هدف‌محور، به‌جای پیش‌بینی صرف خواص. بررسی نشان می‌دهد مدل‌های ادغامی و فیزیک‌آگاه به دقت‌هایی تا $R^2 = 0.98$ دست یافته‌اند، در حالی که چارچوب‌های طراحی معکوس مانند RAPSIDY 2.0 و پلتفرم PIML توانسته‌اند فضای طراحی را هدفمند جست‌وجو کرده و نیاز به آزمایش تجربی را تا ۸۲٪ کاهش دهند. گذار به پلتفرم‌های کشف خودکار مواد و سامانه‌های حلقه‌بسته نیز مرز میان طراحی محاسباتی و سنتز آزمایشگاهی را کم‌رنگ‌تر کرده است. با این حال، کمبود داده‌های تجربی باکیفیت، ناهمخوانی روش‌های تفسیرپذیری (SHAP و LIME)، فاصله میان دقت آماری و اعتبار تجربی، و هزینه مدل‌سازی چندمقیاسی، همچنان چالش‌های اصلی این حوزه‌اند. نتیجه اصلی مقاله این است که آینده این حوزه نه در الگوریتم‌های پیچیده‌تر، بلکه در توسعه هم‌زمان زیرساخت داده استاندارد، چارچوب‌های فیزیک‌آگاه، و سامانه‌های حلقه‌بسته با اعتبارسنجی تجربی گسترده نهفته است.

کلمات ویژه: نانوکامپوزیت‌های پلیمری؛ یادگیری ماشین؛ طراحی معکوس؛ یادگیری ماشین فیزیک‌آگاه؛ کشف خودکار مواد

۱.مقدمه

۱.۱) اهمیت نانوکامپوزیت‌های پلیمری

نانوکامپوزیت‌های پلیمری[1] از یک ماتریس پلیمری و نانوفیلرهایی (مانند کره‌ها، صفحات یا لوله‌ها) تشکیل شده‌اند که حداقل یکی از ابعاد آن‌ها کمتر از ۱۰۰ نانومتر است. این مواد در مقایسه با کامپوزیت‌های سنتی، ویژگی منحصربه‌فردی دارند: به دلیل مساحت سطح ویژه‌ی بسیار بالای نانوفیلرها، ناحیه فصل مشترک[2] میان فیلر و پلیمر، که ناشی از برهم‌کنش فیزیکی و شیمیایی ذاتی دو فاز است، وسعت چشمگیری پیدا می‌کند. به همین دلیل، خواص ماکروسکوپیک این مواد به‌طور بحرانی به نوع و کیفیت این برهم‌کنش وابسته می‌شود(Borna Ma, 2023) . نانوکامپوزیت‌های پلیمری طیف گسترده‌ای از خواص را بهبود می‌بخشند: افزودن نانولوله‌های کربنی[3] به ماتریس‌های عایق یا کم‌رسانا، آن‌ها را به کامپوزیت‌های پلیمری رسانای الکتریکی[4] تبدیل می‌کند که کاربردهایی نظیر محافظت الکترومغناطیسی، هوافضا، خودرو و ساختارهای خودحس‌گر دارند[5]. رسانایی ماکروسکوپیک این مواد تابعی از کسر حجمی، شکل، نوع نانولوله و رسانایی ذاتی آن‌هاست. از منظر خواص مکانیکی، مدول الاستیسیته و استحکام کششی نانوکامپوزیت به عوامل متعددی وابسته‌اند: اندازه و شکل ذرات، میزان تجمع[6]، و چسبندگی فصل مشترک فیلر/ماتریس. برای نانوذرات با اندازه کمتر از ۱۰۰ نانومتر، کاهش اندازه معمولاً باعث افزایش اثر تقویت‌کنندگی می‌شود، چون نانوذرات کوچک‌تر بهتر در ماتریس پخش شده و می‌توانند تغییرشکل زنجیره‌های پلیمری را مؤثرتر محدود کنند؛ همچنین فصل مشترک بزرگ‌تری ایجاد کرده و انتقال تنش را بهبود می‌بخشند. به‌عنوان نمونه، کاهش اندازه ذرات SiO_2 از ۳۰۰ نانومتر به ۱۰ نانومتر می‌تواند اثر سفت‌کنندگی را تا ۱۵ برابر افزایش دهد. از سوی دیگر، تجمع نانوذرات به‌طور قابل‌توجهی مدول الاستیک مؤثر کامپوزیت را کاهش می‌دهد، زیرا سطح فصل مشترک مؤثر فیلر-ماتریس کاهش می‌یابد؛ همچنین جهت‌گیری[7] نانوفیلرها نسبت به بار اعمالی، سفتی نهایی کامپوزیت را تحت تأثیر قرار می‌دهد (Elizabeth Champa-Bujaico, 2024). دمای انتقال شیشه‌ای[8] نیز یکی دیگر از خواص کلیدی قابل‌تنظیم در PNC ها است. داده‌های تجربی نشان می‌دهند که Tg نانوکامپوزیت‌ها می‌تواند بسته به ترکیب، نوع و هندسه نانوذره، شرایط فرآیندی، وضعیت پخش و شیمی فصل مشترک، تا ۳۰ درجه سانتی‌گراد نسبت به پلیمر خالص افزایش یا کاهش یابد حتی در بارگذاری‌های بسیار پایین نانوفیلر. برهم‌کنش جاذبه‌ای در فصل مشترک معمولاً به افزایش Tg و برهم‌کنش دافعه‌ای به کاهش آن منجر می‌شود؛ این انحراف Tg مستقیماً به دینامیک زنجیره‌های پلیمری در نزدیکی فصل مشترک مرتبط است (Boran Ma,

[1] PNCs
[2] Interface
[3] CNTs
[4] CPNCs
[5] Elaskalany & Behdinan
[6] Agglomeration
[7] orientation
[8] Tg

2023). با این حال، طراحی سنتی این مواد عمدتاً بر پایه‌ی روش‌های آزمون و خطای تجربی[9] صورت گرفته که فرایندی پرهزینه، زمان‌بر و فاقد چارچوب طراحی منطقی[10] است (ChengLin Han, 2023). این محدودیت، همراه با ماهیت چندمقیاسی رفتار PNC ها از سطح مولکولی و مورفولوژی نانوذره تا رفتار ماکروسکوپیک انگیزه‌ی اصلی روی‌آوردن به روش‌های محاسباتی پیشرفته، از جمله شبیه‌سازی‌های عددی (المان محدود، مونت‌کارلو) و در سال‌های اخیر، هوش مصنوعی و یادگیری ماشین، برای کشف روابط ریزساختار-خواص و تسریع فرایند طراحی مواد بوده است.

۲.۱) محدودیت روش‌های سنتی

توسعه PNC ها به‌طور سنتی به آزمون‌وخطای تجربی وابسته است؛ در تقویت‌کنندگی بین‌لایه‌ای، «اغلب طراحی‌ها به‌شدت به آزمون‌وخطای تکراری وابسته‌اند و هیچ چارچوب طراحی منطقی وجود ندارد» (ChengLin Han, 2023). فضای طراحی پلیمرها به‌شدت چندبعدی و غیرخطی است و رویکردهای سنتی را در مواجهه با آن ناکارآمد می‌سازد (Teng Long, 2025). این هزینه‌ها قابل‌سنجش‌اند: در بهینه‌سازی چندهدفه با یادگیری ماشین فیزیک‌آگاه، رویکرد سنتی به ۵۰۰-۲۰۰ آزمایش نیاز داشت، در حالی که چارچوب مبتنی بر ML همان اطمینان را با تنها ۲۵-۱۵ آزمایش به دست آورد کاهش ۶۸ درصدی هزینه توسعه (Gupta, 2025). روش‌های عددی سنتی نیز پرهزینه‌اند: DFT با هزینه محاسباتی سرسام‌آور به سیستم‌های کوچک محدود می‌شود و MD کلاسیک اغلب پدیده‌های الکترونیکی پیچیده را ثبت نمی‌کند (Teng Long, 2025). مدل‌سازی چندمقیاسی تصادفی نانوکامپوزیت‌های گرافن-پلیمر نیز به‌ویژه در اجرای گسترده یا بهینه‌سازی تکراری پرهزینه است (Bokai Liu, 2025)، و همین چالش در نانوکامپوزیت‌های CNT/پلیمر نیز دیده می‌شود (Mostafa Elaskalany, 2024). علاوه بر این، مشخصه‌یابی تجربی ریزساختار به تجهیزات پیشرفته‌ای نیاز دارد که هزینه بالای گردآوری داده را تشدید می‌کند (Wei Ge, 2025). این محدودیت‌های مشترک — ناکارآمدی آزمون‌وخطا، هزینه‌های بالا، و کندی روش‌های عددی — «گلوگاهی» ایجاد کرده‌اند که پژوهشگران را به‌سمت هوش مصنوعی به‌عنوان مدل جانشین سریع و دقیق سوق داده است؛ گذاری که نویدبخش تغییر پارادایم از «آزمایش‌های آزمون‌وخطا» به «طراحی داده‌محور» است (Teng Long, 2025).

۳.۱) ورود هوش مصنوعی و یادگیری ماشین به علم پلیمر

یادگیری ماشین[11] به‌عنوان زیرشاخه‌ای از هوش مصنوعی تعریف می‌شود که در آن سیستم‌ها به‌طور خودکار از طریق تجربه و داده یاد می‌گیرند، بدون آنکه به‌صراحت برای هر وظیفه برنامه‌نویسی شوند (Elizabeth Champa-Bujaico, 2024). ورود ML به علم پلیمر و به‌طور خاص به حوزه نانوکامپوزیت‌های پلیمری، به دلیل توانایی این الگوریتم‌ها در یادگیری روابط پیچیده، غیرخطی و

[9] trial-and-error
[10] rational design framework
[11] ML

چندمتغیره میان ساختار/ترکیب و خواص ماکروسکوپیک، مستقیماً از داده‌های تجربی یا محاسباتی موجود، به یک نقطه عطف در این حوزه تبدیل شده است. این رویکرد جایگزین مناسبی برای مدل‌های تحلیلی سنتی (مانند معادلات هالپین-تسای) است که اغلب بر پایه فرضیات ساده‌کننده استوارند و در ثبت اثرات متقابل پیچیده بین متغیرهای متعدد طراحی (نوع فیلر، کسر حجمی، مورفولوژی، شرایط فرآیندی) ناتوان‌اند.

۱) یادگیری نظارت‌شده: از نمونه‌های برچسب‌دار یاد می‌گیرد؛ شامل رگرسیون و طبقه‌بندی (Wei Ge, 2025). پرکاربردترین شکل ML در PNC ها برای پیش‌بینی Tg، استحکام، مدول و رسانایی؛ الگوریتم‌های رایج شامل SVM، جنگل تصادفی، GPR و ANN.

۲) یادگیری نظارت‌نشده: الگوهای پنهان در داده بدون برچسب را کشف می‌کند؛ شامل خوشه‌بندی و کاهش ابعاد (مانند PCA). در PNC ها برای خوشه‌بندی ریزساختارها و کاهش ابعاد فضای ویژگی پیش از مدل‌سازی نظارت‌شده به‌کار می‌رود (Wei Ge, 2025).

۳) یادگیری عمیق: از معماری‌های چندلایه برای استخراج خودکار ویژگی استفاده می‌کند: پرسپترون (طبقه‌بندی دودویی ساده)، شبکه‌های پیش‌خور (رایج‌ترین برای نگاشت ترکیب/فرایند به خواص)، CNN (تحلیل تصاویر میکروسکوپی، شناسایی پخش و تجمع فیلر) و RNN (داده‌های دنباله‌ای و وابسته به زمان مانند سینتیک پخت) (Elizabeth Champa-Bujaico, 2024).

۴.۱) هدف و نوآوری مقاله مروری

با وجود حجم روبه رشد مطالعات کاربرد یادگیری ماشین در علم پلیمر، بخش قابل‌توجهی از مقالات مروری موجود، رویکردی عمومی و توصیفی نسبت به الگوریتم‌های ML اتخاذ کرده‌اند و عمدتاً به فهرست‌کردن کاربردهای پراکنده پیش‌بینی خواص بسنده می‌کنند. هدف این مقاله مروری، ارائه دیدگاهی جامع و یکپارچه از نحوه‌ی تحول زنجیره‌ی «فرآیند ← ریزساختار ← خواص ← بهینه‌سازی»[12] در نانوکامپوزیت‌های پلیمری، تحت تأثیر هوش مصنوعی و یادگیری ماشین است. به‌جای بررسی سطحی و پراکنده کاربردهای ML، این مرور به‌طور خاص بر مدل‌هایی متمرکز می‌شود که در آن‌ها فیزیک حاکم بر مواد به‌طور صریح در ساختار الگوریتم ادغام شده است، رویکردی که در ادبیات اخیر با عناوینی چون «یادگیری ماشین فیزیک‌آگاه»[13] و «مدل‌سازی چندمقیاسی»[14] شناخته می‌شود. این تمرکز از آن جهت اهمیت دارد که مدل‌های یادگیری ماشین خالص[15] اگرچه در برازش داده‌های موجود عملکرد قابل‌قبولی دارند، اما اغلب فاقد تعمیم‌پذیری فیزیکی هستند و ممکن است در بیرون از محدوده داده‌های آموزشی (خارج از دامنه‌ی برون‌یابی) پیش‌بینی‌های غیرواقع‌بینانه ارائه دهند. در مقابل، چارچوب‌های فیزیک‌آگاه با گنجاندن قیدهای فیزیکی، نظیر قوانین بقای جرم و انرژی، اصول ترمودینامیکی (کمینه‌سازی انرژی آزاد گیبس)، و پایداری فاز، مستقیماً در

[12] Process–Microstructure–Property–Optimization
[13] Physics-Informed Machine Learning
[14] Multiscale Modeling
[15] Purely data-driven

تابع هزینه[16] شبکه عصبی، اطمینان می‌دهند که بازنمایی‌های یادگرفته‌شده با اصول فیزیکی حاکم سازگارند، در حالی که همچنان انعطاف کافی برای ثبت روابط غیرخطی پیچیده موجود در داده‌های تجربی را حفظ می‌کنند (Gupta, 2025). چنین رویکردی نه‌تنها دقت پیش‌بینی افزایش می‌دهد، بلکه قابلیت اعتماد و تفسیرپذیری فیزیکی نتایج را نیز تضمین می‌کند، ویژگی‌ای حیاتی برای پذیرش این ابزارها در طراحی مهندسی واقعی. نوآوری اصلی این کار در تبیین نقش هوش مصنوعی در طراحی معکوس ریزساختار[17] برای دستیابی به عملکرد هدف نهفته است. بر خلاف فرایند طراحی روبه‌جلو[18] که در آن پارامترهای طراحی از پیش تعیین شده و خواص حاصل به‌صورت تجربی یا محاسباتی سنجیده می‌شود، در طراحی معکوس، فرایند از یک هدف عملکردی مشخص آغاز شده و مستقیماً به دنبال طرح‌هایی می‌گردد که آن معیار تعریف‌شده توسط کاربر را برآورده کنند (Vinson Liao, 2025). این رویکرد در نانوکامپوزیت‌های پلیمری با چالش‌های ویژه‌ای همراه است، چرا که خواص ماکروسکوپیک این مواد توسط ویژگی‌هایی در طیف وسیعی از مقیاس‌های طولی از شیمی مونومر و طراحی زنجیره تا ریزساختارهای دامنه‌ای در مقیاس نانومتر تا میکرومتر تعیین می‌شوند و مسائل معکوس اغلب بدفرم[19] بوده و ممکن است راه‌حل یکتایی نداشته باشند. پیمایش هوشمند و کارآمد این فضای طراحی پرابعاد، مستلزم ابزارهای محاسباتی نوینی است که هوش مصنوعی، به‌ویژه از طریق ترکیب یادگیری فعال[20]، بهینه‌سازی بیزی، و مدل‌های تولیدی[21]، آن را فراهم می‌آورد. با تمرکز بر این دو محور یعنی (۱) ادغام فیزیک مواد در معماری الگوریتم‌های یادگیری ماشین، و (۲) کاربرد این مدل‌ها در طراحی معکوس ریزساختار برای دستیابی به عملکرد چندگانه و هدف‌محور این مقاله تلاش می‌کند فراتر از یک مرور توصیفی صرف از کاربردهای ML عمل کند و به‌جای آن، چارچوبی تحلیلی برای درک این ارائه دهد که چگونه هوش مصنوعی، زنجیره‌ی سنتی فرآیند ریزساختار خواص را از یک ابزار پیش‌بینی صرف، به یک موتور طراحی فعال و جهت‌دار برای کشف نانوکامپوزیت‌های پلیمری نسل بعدی تبدیل می‌کند.

۲. مبانی کاربرد AI/ML در نانوکامپوزیت‌های پلیمری

۱.۲) متدولوژی یادگیری ماشین در مواد

به‌کارگیری یادگیری ماشین در حوزه علم مواد، یک فرایند خطی و چندمرحله‌ای است که با دقت در هر مرحله، مستقیماً بر کیفیت مدل نهایی اثر می‌گذارد.

[16] Loss Function
[17] Inverse Design
[18] Forward Design
[19] Ill-posed
[20] Active Learning
[21] Generative Models

الف) جمع‌آوری داده: نخستین و شاید حیاتی‌ترین گام، ساخت پایگاه داده آموزشی است. برای مثال، در توسعه مدل‌های پیش‌بینی چقرمگی بین‌لایه‌ای کامپوزیت‌های تقویت‌شده با فیلر کربنی، نخستین گام، گردآوری ویژگی‌های حوزه‌ای بود که بر عملکرد بین‌لایه‌ای اثر می‌گذارند نظیر نوع ماده چقرمه‌کننده، فرایند شکل‌دهی لایه، چگالی ماده چقرمه‌کننده و تعداد لایه‌ها (ChengLin Han, 2023). به‌طور کلی، داده‌های مربوط به نانوکامپوزیت‌های پلیمری در سه دسته اصلی قرار می‌گیرند: ۱. متغیرهای فرآیندی: دما، زمان پخت یا اختلاط، نرخ برش و شرایط پردازش؛ ۲. متغیرهای ساختاری/ترکیبی: نوع و کسر حجمی نانوفیلر، نسبت ابعادی[۲۲]، سطح ویژه، انرژی سطحی فصل مشترک و وضعیت پخش. ۳. خواص نهایی: مدول الاستیسیته، استحکام کششی، دمای انتقال شیشه‌ای، رسانایی الکتریکی/حرارتی و غیره. در این میان، پایگاه‌های داده تخصصی نقش بی‌بدیلی در تسریع این فرایند ایفا می‌کنند. پایگاه داده NanoMine یکی از دو گره اصلی پایگاه داده Materials Mine منبعی جدید و تخصصی برای گردآوری داده‌های حاشیه‌نویسی‌شده مربوط به نانوکامپوزیت‌های پلیمری است. بر خلاف بسیاری از منابع داده مواد که بر داده‌های محاسباتی متمرکزند، NanoMine عمدتاً بر داده‌های تجربی تمرکز دارد و بیش از ۲۰۰۰ نمونه تجربی حاشیه‌نویسی‌شده را در بر می‌گیرد (Boran Ma, 2023). این پایگاه داده، طبق اصول FAIR، دارای رابط‌های برنامه‌نویسی کاربردی نظیر SPARQL Query برای دسترسی مستقیم کدنویسان به داده، و ابزار ChemProps برای استانداردسازی نام‌گذاری پلیمر و فیلر است که یکنواختی و کامل بودن داده‌های خروجی را در پرس‌وجوها تضمین می‌کند. مزیت کلیدی چنین پلتفرمی نسبت به جست‌وجوی متعارف ادبیات در امکان پرس‌وجوی سریع و ساختاریافته داده‌های ترکیب–خاصیت است.

ب) پیش‌پردازش و انتخاب ویژگی[۲۳]: پس از گردآوری، داده‌ها باید برای حذف خطا، مقادیر پرت[۲۴] و ناسازگاری‌ها پالایش شوند. با توجه به ابعاد بالای فضای ویژگی در سیستم‌های نانوکامپوزیتی، مهندسی ویژگی و انتخاب ویژگی مؤثر به‌ویژه برای داده‌های پرابعاد گامی حیاتی پیش از مدل‌سازی محسوب می‌شود (Wei Ge, 2025). یکی از رایج‌ترین روش‌های سنجش اهمیت ویژگی‌ها، الگوریتم جنگل تصادفی[۲۵] است که اهمیت هر ویژگی را بر پایه مجموع ضرایب جینی[۲۶] محاسبه می‌کند؛ این رویکرد، پس از آموزش مدل، رتبه‌بندی اهمیت ویژگی‌ها را ارائه می‌دهد و به پژوهشگران کمک می‌کند دریابند کدام پارامترهای فرایندی یا ساختاری بیشترین تأثیر را بر عملکرد نهایی دارند (ChengLin Han, 2023). چنین تحلیلی نه‌تنها دقت مدل را بهبود می‌بخشد، بلکه بینشی مستقیم برای هدایت آماده‌سازی مواد جدید فراهم کرده و چرخه توسعه را کوتاه‌تر و هزینه‌ها را کاهش می‌دهد.

[22] Aspect Ratio
[23] Feature Selection
[24] Outliers
[25] Random Forest Algorithm - RFA
[26] Gini

۲.۲) یادگیری عمیق و تحلیل تصاویر ریزساختاری

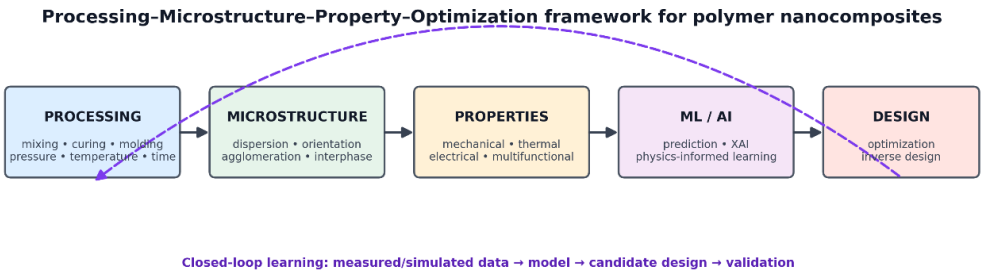
یکی از مؤثرترین حوزه‌های کاربرد یادگیری عمیق در نانوکامپوزیت‌های پلیمری، تحلیل خودکار تصاویر میکروسکوپی الکترونی روبشی و عبوری (SEM/TEM) است. شبکه‌های عصبی کانولوشنی (CNN)، به دلیل توانایی ذاتی خود در استخراج ویژگی‌های فضایی از طریق لایه‌های کانولوشنی و کاهش ابعاد داده، ابزاری قدرتمند برای بازشناسی و طبقه‌بندی الگوهای تصویری به‌شمار می‌روند (Elizabeth Champa-Bujaico, 2024). در زمینه نانوکامپوزیت‌ها، این معماری‌ها برای موارد زیر به‌کار گرفته می‌شوند: بخش‌بندی تصویر برای جداسازی فاز فیلر از ماتریس پلیمری؛ شناسایی خودکار توزیع فیلر در سطح مقطع نمونه؛ تشخیص جهت‌گیری نانوفیلرهای غیرکروی (مانند نانولوله یا صفحات) نسبت به راستای بار یا جریان فرایند؛ کمی‌سازی میزان کلوخه‌شدن ذرات، که پیش‌تر به‌عنوان یکی از عوامل کلیدی افت خواص مکانیکی معرفی شد. ابزارهایی نظیر ماژول مشخصه‌یابی و بازسازی ریزساختار هوشمند[۲۷]، که در پلتفرم NanoMine در دسترس است، نمونه‌ای عملی از این کاربرد است که امکان طبقه‌بندی و مشخصه‌یابی ریزساختار PNC ها را فراهم می‌کند (Boran Ma, 2023). این ابزارها به‌طور مستقیم چالش بنیادین کیفیت پایین یا ناهمگون تصاویر میکروسکوپی که پردازش دستی آن‌ها زمان‌بر، ذهنی و مستعد خطای انسانی است را برطرف می‌کنند و در عوض، داده‌های ساختاری کمی و دقیقی تولید می‌کنند که مستقیماً به‌عنوان ورودی برای آموزش مدل‌های پیش‌بینی خواص در چارچوب‌های PSPP قابل استفاده‌اند. این پیوند میان تحلیل تصویر مبتنی بر یادگیری عمیق و مدل‌های پیش‌بینی ساختار-خاصیت، حلقه‌ای اساسی در اتوماسیون فرایند مشخصه‌یابی مواد محسوب می‌شود؛ چرا که پیش از این، توصیف کمی ریزساختار تنها از طریق تحلیل دستی و زمان‌بر نمونه‌های محدود ممکن بود که برای مشخصه‌سازی جامع پراکندگی در کل مجموعه نمونه‌ها کافی نبود (Boran Ma, 2023).

۳.۲) چارچوب فرآیند ساختار خواص عملکرد

چارچوب فرآیند ساختار خواص عملکرد[۲۸] هسته مفهومی مهندسی مواد مدرن را تشکیل می‌دهد. این چارچوب بیان می‌کند که شرایط فرآیندی (مانند دما، نرخ برش، روش اختلاط یا زمان پخت) به‌طور مستقیم چگونگی شکل‌گیری ریزساختار ماده (شامل وضعیت پخش فیلر، جهت‌گیری، تبلور و مورفولوژی فصل مشترک) را تعیین می‌کند؛ ریزساختار نیز به نوبه خود، خواص ماکروسکوپیک نهایی (مکانیکی، حرارتی، الکتریکی) را رقم می‌زند؛ و در نهایت این خواص، عملکرد ماده را در کاربرد موردنظر مشخص می‌سازند. پیش از ظهور هوش مصنوعی، شناسایی روابط پنهان در این زنجیره چندمرحله‌ای و غیرخطی، به‌شدت به شهود و تجربه پژوهشگر و آزمون‌وخطای گسترده وابسته بود همان محدودیتی که در بخش ۲.۱ به‌تفصیل بحث شد. اکنون، هوش

[27] Intelligent Microstructure Characterization and Reconstruction - MCR
[28] Process-Structure-Property-Performance - PSPP

مصنوعی با یادگیری مستقیم روابط آماری و غیرخطی میان این چهار سطح از داده‌های موجود (چه تجربی، چه محاسباتی)، امکان طراحی هماهنگ در سطوح ساختاری متعدد پلیمرها را فراهم می‌آورد؛ به این معنا که به‌جای بهینه‌سازی مجزای هر مرحله، می‌توان اثر متقابل تغییرات فرآیندی بر ریزساختار و در نهایت بر عملکرد را به‌طور یکپارچه مدل‌سازی و بهینه کرد. این قابلیت به‌ویژه در چارچوب‌های فیزیک‌آگاه (نظیر آنچه در بخش ۴.۱ معرفی شد) برجسته‌تر می‌شود، جایی که مدل به‌جای صرفاً برازش آماری داده‌ها، قیدهای فیزیکی حاکم بر هر یک از این چهار سطح (مانند بقای جرم در سطح فرآیند یا اصول ترمودینامیکی در سطح ریزساختار) را نیز رعایت می‌کند. نتیجه عملی این یکپارچگی، افزایش چشمگیر نرخ موفقیت توسعه مواد جدید و کاهش قابل‌توجه تعداد آزمایش‌های تجربی موردنیاز است روندی که پیش‌تر با شواهد کمی مستند شد (Gupta, 2025). به این ترتیب، چارچوب PSPP از یک مدل مفهومی توصیفی، به یک موتور طراحی عملیاتی و پیش‌بین تبدیل می‌شود که در سراسر این مقاله، مبنای تحلیل کاربردهای اختصاصی‌تر هوش مصنوعی در بخش‌های بعدی قرار خواهد گرفت. برای نمایش بصری این زنجیره و جایگاه هوش مصنوعی در آن، شکل ۱ چارچوب PSPP را به همراه حلقه یادگیری بسته‌ای که هوش مصنوعی ایجاد می‌کند، خلاصه می‌سازد .همان‌گونه که در این شکل مشاهده می‌شود، هوش مصنوعی نه‌تنها هر یک از چهار مرحله را به‌طور مجزا مدل‌سازی می‌کند، بلکه با اتصال مستقیم مرحله فرآیند به مرحله طراحی (خط‌چین بنفش)، امکان بازخورد مستقیم از نتایج طراحی به تنظیمات فرآیندی را نیز فراهم می‌آورد — ویژگی‌ای که در رویکردهای سنتی خطی (بدون بازخورد) وجود نداشت.



شکل ۱. چارچوب فرآیند–ساختار–خواص–بهینه‌سازی (PSPP) برای نانوکامپوزیت‌های پلیمری.

۳. پیش‌بینی خواص نانوکامپوزیت‌های پلیمری با یادگیری ماشین

۱.۳) پیش‌بینی خواص مکانیکی

پیش‌بینی استحکام کششی، مدول الاستیسیته و چقرمگی شکست از اهداف مرکزی طراحی نانوکامپوزیت‌های پلیمری با کمک یادگیری ماشین است، چرا که این خواص مستقیماً با کاربردپذیری سازه‌ای ماده مرتبطاند. مطالعه Han و همکاران (۲۰۲۳) یکی از

نمونه‌های موفق کاربرد رویکردهای ادغامی[29] در این حوزه است (ChengLin Han, 2023). آن‌ها برای پیش‌بینی چقرمگی شکست بین‌لایه‌ای مود دوم[30] در کامپوزیت‌های تقویت‌شده با فیلرهای کربنی، یک مدل ادغامی سه‌لایه ساختند: سه یادگیرنده پایه شامل پرسپترون چندلایه، الگوریتم تقویت گرادیان شدید و درخت تصمیم تقویت گرادیانی، که خروجی آن‌ها توسط یک رگرسیون بیزی به‌عنوان فرایادگیرنده[31] ترکیب می‌شد. این معماری Stacking، با بهره‌گیری هم‌زمان از دقت مدل‌سازی، تفسیرپذیری بالا و قابلیت کاربرد در داده‌های پیچیده، به دقت $R^2 = 0.916$ دست یافت. تحلیل اهمیت ویژگی با الگوریتم جنگل تصادفی نشان داد که فشار پخت، تعداد لایه‌های الیاف، و چگالی سطحی فیلر حیاتی‌ترین پارامترها هستند؛ به‌طوری‌که یافته‌های این مطالعه نشان می‌دهد بهبود فرایند، تأثیر مثبت‌تری نسبت به بهبود خود ماده بر عملکرد نهایی لمینت دارد بینشی که مستقیماً می‌تواند اولویت‌های طراحی تجربی را هدایت کند. مطالعه Champa-Bujaico و همکاران (۲۰۲۴) بر روی نانوکامپوزیت‌های هیبریدی چندمقیاسی بر پایه پلی(۳-هیدروکسی‌بوتیرات)[32] متمرکز بود که با غلظت‌های متفاوتی از نانولوله‌های کربنی چندجداره[33]، نانوصفحات دی‌سولفید تنگستن[34] و نانورس سپیولیت[35] تقویت شده بودند. غلظت هر یک از این فیلرها در محدوده‌ی حدود ۰.۵ تا ۴ درصد وزنی متغیر بود و بار کل فیلر تا ۵ درصد وزنی افزایش می‌یافت که در این نقطه، افزایشی تا ۱۳۲ درصدی در مدول یانگ نسبت به پلیمر خالص مشاهده شد. برای پیش‌بینی این خواص، چهار رویکرد یادگیری ماشین با یکدیگر مقایسه شدند: شبکه عصبی بازگشتی[36]، RNN با الگوریتم بهینه‌سازی لونبرگ[37]، درخت تصمیم و جنگل تصادفی. نتایج نشان داد که بهترین عملکرد برای پیش‌بینی مدول یانگ متعلق به مدل RNN-LV با ۳ لایه پنهان و ۵۰ نورون در هر لایه بود، در حالی که برای پیش‌بینی استحکام کششی، مدل جنگل تصادفی با ترکیب ۱۰۰ درخت تخمین‌زن و حداکثر عمق ۱۰۰ بهترین نتیجه را ارائه داد. جلب توجه است که برای پیش‌بینی ازدیاد طول تا شکست، مدل RNN با ۳ لایه پنهان به دقت بالای $R^2 = 0.964$ دست یافت نشان‌دهنده توانایی این معماری‌ها در ثبت روابط غیرخطی پیچیده میان ترکیب چندجزئی فیلر و رفتار مکانیکی نانوکامپوزیت (Elizabeth Champa-Bujaico, 2024).

۲.۳) پیش‌بینی خواص حرارتی

خواص حرارتی نانوکامپوزیت‌های پلیمری، به‌ویژه رسانایی حرارتی، برای کاربردهای مدیریت حرارتی (نظیر الکترونیک و بسته‌بندی قدرت) اهمیت راهبردی دارند. Liu و همکاران (۲۰۲۵) یک چارچوب یادگیری ماشین قابل‌تفسیر را برای مدل‌سازی چندمقیاسی رسانایی حرارتی در نانوکامپوزیت‌های گرافن-پلیمر[38] توسعه دادند که مدل‌سازی تصادفی چندمقیاسی را با کمی‌سازی عدم قطعیت

[29] Ensemble/Stacking
[30] G_IIC
[31] Meta-learner
[32] P3HB
[33] MWCNTs
[34] WS_2
[35] SEP
[36] RNN
[37] RNN-LV
[38] PGECs

ترکیب می‌کرد. مدل نهایی آن‌ها بر پایه XGBoost به دقت $R^2 = 0.996$ روی داده‌های آموزشی و $R^2 = 0.847$ روی داده‌های تست دست یافت. این مدل با استفاده از تحلیل حساسیت و روش‌های تفسیرپذیر یادگیری، توانست اثرات متقابل پیچیده‌ی پارامترهای ورودی بر رسانایی حرارتی ماکروسکوپیک را شناسایی کند و از مدل‌های جانشین برای کاهش هزینه محاسباتی بالای شبیه‌سازی‌های چندمقیاسی تصادفی بهره برد. (Bokai Liu, 2025)

۳.۳) پیش‌بینی خواص الکتریکی

در حوزه خواص الکتریکی، رسانایی نانوکامپوزیت‌های حاوی فیلرهای رسانا مانند نانولوله‌های کربنی موضوعی پرکاربرد است، به‌ویژه برای طراحی نانوکامپوزیت‌های پلیمری رسانای الکتریکی در کاربردهایی نظیر محافظت الکترومغناطیسی و ساختارهای خودحس‌گر. Elaskalany و Behdinan (۲۰۲۴) با استفاده از یک چارچوب مدل‌سازی چندمقیاسی تصادفی مبتنی بر شبیه‌سازی‌های مونت‌کارلو و المان حجمی نماینده، مجموعه‌داده‌ای برای آموزش مدل‌های یادگیری ماشین ساختند تا رسانایی الکتریکی مؤثر نانوکامپوزیت‌های CNT/پلیمر را با دقت بالا و هزینه محاسباتی به‌مراتب کمتر از شبیه‌سازی مستقیم پیش‌بینی کنند. برای افزایش تفسیرپذیری این مدل‌ها، از هوش مصنوعی تفسیرپذیر و به‌طور خاص روش توضیحات افزایشی شپلی[39] استفاده شد. تحلیل SHAP نشان داد که کسر حجمی CNT ، ارتفاع سد، و رسانایی ذاتی نانولوله‌های کربنی به‌ترتیب تأثیرگذارترین عوامل بر رسانایی الکتریکی مؤثر نانوکامپوزیت هستند. این یافته‌ها اهمیت مضاعف پدیده تونل‌زنی الکترونی در فصل مشترک نانولوله‌ها به‌عنوان مکانیزم غالب انتقال بار در غلظت‌های زیر آستانه نفوذ کامل را برجسته می‌سازد و بینشی مستقیم برای طراحی هدفمند CPNC ها با رسانایی الکتریکی دلخواه فراهم می‌کند. (Mostafa Elaskalany, 2024)

۴. یادگیری ماشین برای تحلیل و طراحی ریزساختار

۱.۴) تحلیل ریزساختار و توصیف‌گرها

ریزساختار پل میان فرمولاسیون و عملکرد است. توصیف‌گرهایی مانند جهت‌گیری فیلر (که مستقیماً بر سفتی کامپوزیت اثر می‌گذارد (Elizabeth Champa-Bujaico, 2024)) و شاخص‌های پراکندگی و کلوخه‌شدن (Bokai Liu, 2025) اطلاعات کمی از چیدمان فیلر در ماتریس ارائه می‌دهند. فراتر از این شاخص‌های آماری، سیستم‌های یادگیری عمیق برای استخراج مستقیم پارامترهای ساختاری از تصویر توسعه یافته‌اند. نمونه‌ای برجسته، سامانه یادگیری عمیق شبکه فیبری است که پارامترهایی نظیر طول کانتور فیبر و توزیع گره‌ها را از تصاویر AFM استخراج می‌کند و با مدل زنجیره کرمی[40] برای محاسبه طول پایداری ترکیب

[39] SHAP
[40] Worm-Chain Model

می‌شود؛ این روش بر نانوفیبرهای فیبروئین ابریشم اعتبارسنجی شده است (Teng Long, 2025). چنین رویکردهایی زمینه‌ساز «طراحی مبتنی بر تصویر» هستند، جایی که تصویر خام میکروسکوپی مستقیماً به بردار توصیف‌گر کمی تبدیل می‌شود.

۲.۴) مدل‌سازی چندمقیاسی[41]

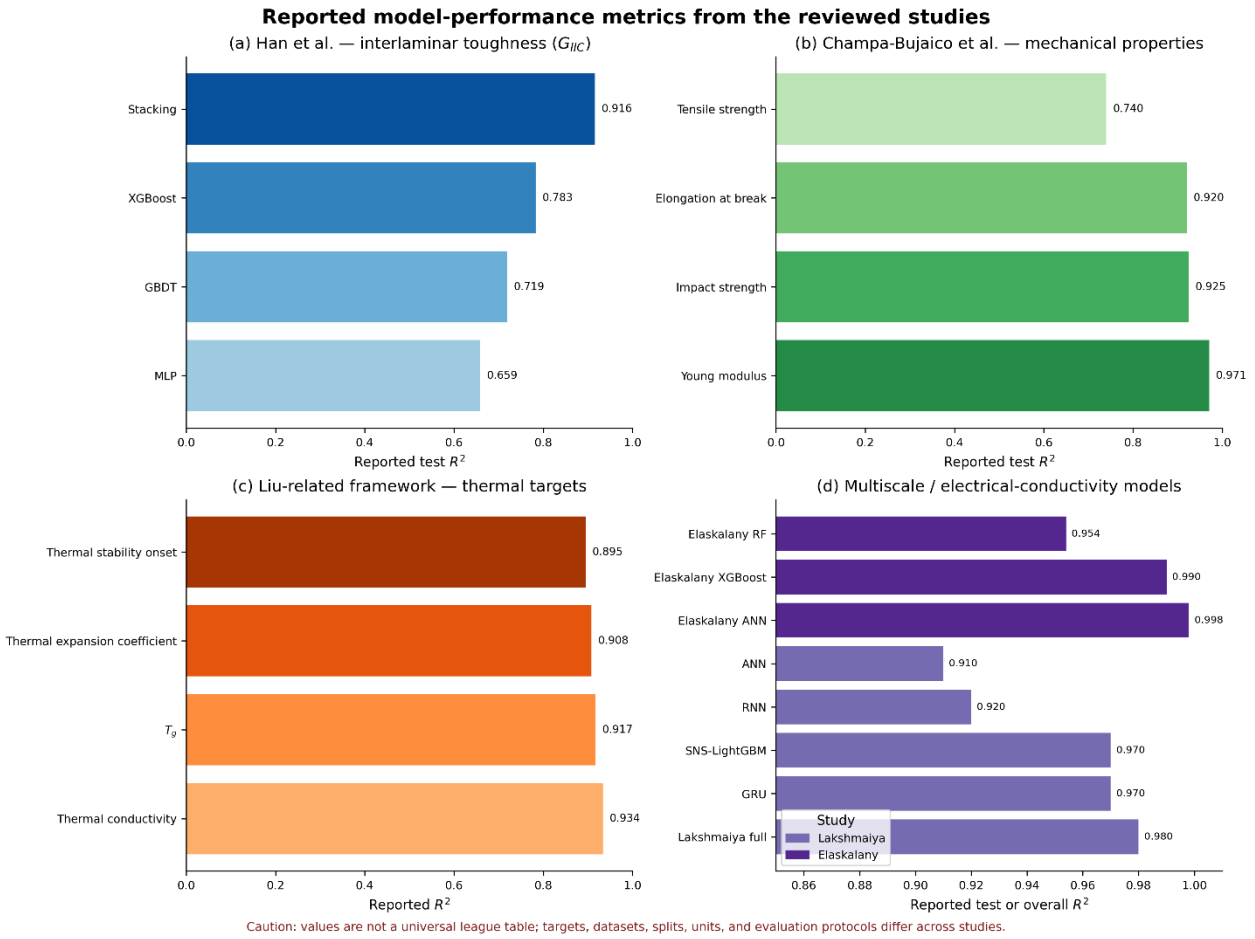
اتصال مقیاس اتمی به مقیاس ماکروسکوپیک یکی از دشوارترین چالش‌های مدل‌سازیPNC هاست. برای غلبه بر این چالش، چارچوب توصیف‌گر سلسله‌مراتبی جامعی توسعه یافته که چهار سطح از اطلاعات را در یک ساختار واحد ادغام می‌کند (Gupta, 2025). در پایین‌ترین سطح، محاسبات مکانیک کوانتومی مبتنی بر DFT قرار دارند که ویژگی‌های الکترونیکی نظیر انرژی‌های HOMO-LUMO، انرژی پیوند و انتقال بار را در بر می‌گیرند. سطح بعدی به شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی[42] اختصاص دارد که ویژگی‌های ساختاری و دینامیکی مانند شعاع ژیراسیون و ضرایب خودانتشاری را استخراج می‌کنند. سطح سوم را توصیف‌گرهای مورفولوژیکی برگرفته از تحلیل تصویر تشکیل می‌دهند که کیفیت پخش فیلر و شبکه‌های نفوذ را ثبت می‌کنند، و در نهایت، پارامترهای فرآیندی نظیر دما، زمان اختلاط و نرخ برش، سطح چهارم این چارچوب را می‌سازند.

۳.۴) چارچوب فیزیک محور Lakshmaiya و همکاران (۲۰۲۶)

Lakshmaiya و همکاران (۲۰۲۶) چارچوبی سه‌گانه ارائه دادند که سه مؤلفه را ترکیب می‌کند: عملگر عصبی فوریه[43] برای یادگیری نگاشت تابع به تابع پاسخ ویسکوالاستیک، خودرمزگذار متغیر کانولوشنی[44] برای تولید بازنمایی نهان از فضای ریزساختار، و بهینه‌سازی جستجوی اتم چندمرحله‌ای فیزیک‌آگاه[45] برای طراحی محدودشده ریزساختار. این ترکیب به دقت $R^2 = 0.98$ دست یافت به‌وضوح بالاتر از RNN (0.92) و ANN (0.91). ریزساختارهای بهینه‌شده حاصل، افزایش دمای انتقال شیشه‌ای تا ۳۱ درجه سانتی‌گراد و مدول ذخیره بیش از ۱.۰۹×۱۰^6 پاسکال نشان دادند نمونه‌ای عملی از کاربرد فیزیک‌آگاهی در طراحی معکوس.

شکل ۲ مقادیر R^2 گزارش‌شده در چهار مطالعه بررسی‌شده در این بخش‌ها را در کنار هم نمایش می‌دهد. مشاهده می‌شود که مدل‌های ادغامی و فیزیک‌آگاه (مانند Stacking در مطالعه Han و چارچوب سه‌گانهLakshmaiya) به‌طور مداوم به دقت‌های بالای ۰.۹ دست یافته‌اند، در حالی که برخی مدل‌های پایه (مانند MLP در پنل الف یا XGBoost به‌تنهایی در پنل ج) عملکرد ضعیف‌تری نشان می‌دهند. با این حال، همان‌طور که یادداشت زیر نمودار تأکید می‌کند، این مقادیر را نباید به‌عنوان یک رتبه‌بندی واحد و قابل‌مقایسه مستقیم تفسیر کرد، چرا که هر مطالعه بر روی سیستم مواد، مجموعه‌داده و پروتکل ارزیابی متفاوتی بنا شده است (Natrayan Lakshmaiya, 2026).

[41] Multiscale Modeling
[42] MD
[43] FNO
[44] CVAE
[45] PG-MS-ASO



شکل ۲ .مقادیر R^2 گزارش‌شده در مطالعات بررسی‌شده برای پیش‌بینی خواص مکانیکی، حرارتی و الکتریکی/چندمقیاسی

۵. هوش مصنوعی تفسیرپذیر (XAI) و یادگیری ماشین فیزیک‌محور

۱.۵) محدودیت مدل‌های جعبه سیاه وXAI

مدل‌های یادگیری ماشین اغلب جعبه سیاه[46] محسوب می‌شوند و درکی از فرایندهای فیزیکی زیربنایی ارائه نمی‌دهند (Bokai Liu, 2025)، که اعتماد پژوهشگران به آن‌ها را محدود می‌کند (Mostafa Elaskalany, 2024). رایج‌ترین راه‌حل، توضیحات افزایشی شپلی[47] است روشی مبتنی بر نظریه بازی‌ها که سهم هر ویژگی در پیش‌بینی نهایی را کمی می‌کند (Mostafa Elaskalany, 2024). با این روش مشخص شد که در نانوکامپوزیت‌های CNT/پلیمر، کسر حجمی فیلر، ارتفاع سد انرژی و رسانایی ذاتی نانولوله

[46] Black-Box
[47] SHAP

مهم‌ترین عوامل رسانایی الکتریکی‌اند، و در نانوکامپوزیت‌های گرافن-پلیمر، شاخص‌های پراکندگی نقش محدودتری نسبت به نسبت ابعادی فیلر دارند XAI. صرفاً تفسیر پس از پیش‌بینی نیست، بلکه با شناسایی پارامترهای پراهمیت، منابع تجربی محدود را به‌طور هدفمند هدایت می‌کند و پلی میان دقت پیش‌بینی و بینش فیزیکی قابل‌اقدام ایجاد می‌کند.

۲.۵) یادگیری ماشین فیزیک محور

شبکه‌های عصبی فیزیک‌آگاه[48] اصول فیزیکی را مستقیماً در فرایند آموزش ادغام می‌کنند، معمولاً از طریق یک تابع هزینه ترکیبی شامل خطای داده تجربی و جریمه نقض قوانین فیزیکی (بقای جرم و انرژی، انرژی آزاد گیبس). برای نمونه، یک PINN چندشاخه‌ای با ۵ لایه پنهان بر روی نزدیک به ۲۴ هزار فرمولاسیون آموزش دیده است (Gupta, 2025).

دو مزیت کلیدی PINN ها نسبت به مدل‌های متعارف:

۱) برون‌یابی مطمئن‌تر با داده کمتر: مدل‌های متعارف[49] در تعمیم فراتر از توزیع آموزشی محدودیت جدی دارند (Natrayan Lakshmaiya, 2026)، در حالی که PINN ها با قید فیزیکی، برون‌یابی مطمئن‌تری در نواحی کم‌داده ارائه می‌دهند.

۲) کمی‌سازی عدم قطعیت: تفکیک عدم قطعیت معرفتی از عدم قطعیت تصادفی در یک مطالعه با سنتز ۴۵ نمونه تکراری اعتبارسنجی شد: عدم قطعیت معرفتی بالا (<۱۵٪) با تغییرپذیری تجربی ۲۳٪ همراه بود، در حالی که عدم قطعیت تصادفی بالا حتی در سنتز یکسان، تغییرپذیری ۱۸٪ نشان داد تمایزی حیاتی برای مدیریت ریسک طراحی (Gupta, 2025).

۶. بهینه‌سازی خواص و ریزساختار با یادگیری ماشین

۱.۶) بهینه‌سازی چندهدفه و جبهه پارتو

بهبود یک خاصیت در PNC ها معمولاً خاصیت دیگر را تضعیف می‌کند، که طراحی چندعملکردی را ذاتاً یک مسئله بهینه‌سازی چندهدفه می‌سازد. الگوریتم NSGA-III با معیار غلبه[50] به مجموعه راه‌حل‌های غیرمغلوب جبهه پارتو همگرا می‌شود؛ کیفیت آن با معیار ابرحجم سنجیده می‌شود. در مطالعه‌ای، غربالگری بیش از ۳.۲ میلیون فرمولاسیون، ۱۸۴۷ ترکیب برتر یافت و عملکرد چندعملکردی ۳۴٪ بالاتر از روش‌های متعارف را با ۸۲٪ کاهش نیاز به اعتبارسنجی تجربی ارائه داد (Gupta, 2025). رویکردهای اخیر معیارهای پایداری زیست‌محیطی (انرژی نهفته، ردپای کربن) را نیز به‌عنوان هدف اضافه می‌کنند: افزودن قید پایداری جبهه

[48] PINNs
[49] RNN ،ANN ،GRU ،LightGBM
[50] Dominance

پارتو را حدود ٪۳۰ کوچک‌تر می‌کند اما ترکیباتی با ٪۹۰-۸۵ عملکرد بیشینه و ٪۵۰-۴۰ اثر زیست‌محیطی کمتر می‌یابد (Gupta, 2025).

۲.۶) طراحی معکوس و مدل‌های زایشی[۵۱]

طراحی معکوس از یک هدف خاصیتی آغاز می‌شود و مستقیماً ساختار یا ترکیبی را جست‌وجو می‌کند که آن هدف را برآورده سازد. سه خانواده اصلی از مدل‌های زایشی در این مسیر به‌کار می‌روند: اتورمزگذار واریشنال[۵۲] که نمونه‌های جدید را از یک فضای نهان بازسازی می‌کند؛ شبکه‌های رقابتی زایشی[۵۳] و انواع تخصصی‌شده آن نظیر ORGAN که با افزودن جزء پاداش هدف‌محور، تولید را به‌سمت خواص مطلوب هدایت می‌کنند؛ و مدل‌های مبتنی بر دنباله و گراف نظیر CharRNN، REINVENT و GraphINVENT. هیچ‌کدام از این مدل‌ها برتری مطلق ندارند: در یک معیارسنجی جامع، CharRNN، REINVENT و GraphINVENT در داده‌های واقعی پلیمری عملکرد بهتری داشتند، در حالی که VAE و AAE برای پلیمرهای فرضی مناسب‌تر بودند (Tianle Yue, 2025). سه مدل برتر سپس با یادگیری تقویتی برای تولید پلیمرهای مقاوم به دما بازآموزی شدند. فراتر از سطح مولکولی، چارچوب RAPSIDY 2.0 با ترکیب دینامیک مولکولی و بهینه‌سازی بیزی مبتنی بر یادگیری فعال، هم‌زمان مورفولوژی نانومقیاسی هدف (مانند ساختار لاملار) و خواص ماکروسکوپیک مطلوب (استحکام، رسانایی حرارتی) را دنبال می‌کند (Vinson Liao, 2025) پاسخی به چالش کوپلینگ چندمقیاسی که مدل‌های مولکولی به‌تنهایی حل نمی‌کنند. آخرین نسل، مدل‌های نفوذ[۵۴] هستند که در کنار GAN و VAE، فضای شیمیایی قابل‌کاوش پلیمرها را گسترش می‌دهند (Victor Ugbetan Agbogo, 2026) و مسیر کشف مواد کاملاً جدید را هموار می‌سازند.

۷. چالش‌ها و محدودیت‌های استفاده از هوش مصنوعی در طراحی و پیش‌بینی نانوکامپوزیت‌های پلیمری

استفاده از روش‌های یادگیری ماشین برای پیش‌بینی خواص و طراحی نانوکامپوزیت‌های پلیمری نتایج امیدوارکننده‌ای داشته است، اما انتقال این مدل‌ها از محیط محاسباتی به شرایط واقعی با محدودیت‌هایی همراه است. بررسی مطالعات مختلف نشان می‌دهد که مسئله فقط انتخاب یک الگوریتم دقیق‌تر نیست؛ کیفیت و حجم داده‌ها، امکان تفسیر خروجی‌ها، تفاوت میان عملکرد آماری و رفتار واقعی ماده و همچنین پیچیدگی چندمقیاسی نانوکامپوزیت‌ها، همگی در میزان قابل‌اعتماد بودن نتایج نقش دارند.

[51] Generative AI
[52] VAE
[53] GAN
[54] Diffusion Models

۱.۷) کمبود، کیفیت و استانداردسازی داده‌ها

یکی از موانع اساسی در به‌کارگیری یادگیری ماشین در علوم پلیمر، محدود بودن داده‌های قابل استفاده است. پایگاه‌های اطلاعاتی مربوط به پلیمرها هنوز از نظر حجم و تنوع داده با پایگاه‌های مربوط به مولکول‌های کوچک فاصله دارند. برای نمونه، PubChem و ChemSpider میلیون‌ها ترکیب را پوشش می‌دهند، در حالی که پایگاه‌هایی مانند PoLyInfo تنها چند ده هزار رکورد دارند (Wei, Ge, 2025). این محدودیت در مورد نانوکامپوزیت‌های پلیمری محسوس‌تر است، زیرا توصیف یک نمونه به ساختار شیمیایی پلیمر محدود نمی‌شود و عواملی مانند مقدار فیلر، شرایط فرآیند و ریزساختار نیز باید در نظر گرفته شوند. داده‌های موجود در NanoMine نمونه روشنی از این مشکل ارائه می‌کنند. از حدود ۲۰۰۰ نمونه گردآوری‌شده، تنها ۸۱۴ نمونه دارای اطلاعات مربوط به دمای انتقال شیشه‌ای بودند و در مطالعه‌ای دیگر، محدودیت ابزار محاسبه انرژی سطحی تعداد نمونه‌های قابل استفاده را به ۱۲۰ مورد کاهش داد (Boran Ma, 2023). مسئله فقط در پایگاه‌های داده تجربی دیده نمی‌شود. در پیش‌آموزش مدل زبانی POLYT5 نیز از حدود صد میلیون ساختار استفاده شد، اما کمتر از ۱۳ هزار ساختار واقعاً سنتزشده و دارای داده تجربی بودند و بخش عمده باقی‌مانده ساختارها به‌صورت فرضی تولید شده بودند (Harikrishna Sahu, 2026). بنابراین، برای آموزش مدل‌های قابل اعتماد، صرف افزایش حجم داده کافی نیست؛ منشأ داده و نسبت اطلاعات تجربی به داده‌های فرضی نیز اهمیت تعیین‌کننده‌ای دارد.

۲.۷) تفسیرپذیری و مشکل جعبه‌سیاه بودن مدل‌ها

افزایش پیچیدگی مدل‌ها معمولاً امکان استخراج الگوهای دقیق‌تر از داده‌ها را فراهم می‌کند، اما در مقابل، ارتباط میان متغیرهای ورودی و خروجی پیش‌بینی‌شده دشوارتر قابل توضیح است. مسئله فقط به این محدود نمی‌شود که یک مدل «جعبه‌سیاه» باشد؛ حتی زمانی که از ابزارهای تفسیرپذیری استفاده می‌شود، ممکن است روش‌های مختلف برداشت یکسانی از اهمیت ویژگی‌ها نداشته باشند. مطالعه Liu و همکاران درباره رسانش حرارتی نانوکامپوزیت‌های گرافنی نمونه مشخصی از این مسئله است. در این مطالعه، SHAP و LIME رتبه‌بندی متفاوتی از اهمیت متغیرها ارائه کردند. LIME کسر حجمی فیلر را مهم‌ترین عامل در نظر گرفت، در حالی که SHAP رسانش حرارتی ماتریس پلیمری را با فاصله در رتبه نخست قرار داد. در نتیجه، استفاده از یک ابزار تفسیرپذیری لزوماً به معنای دستیابی به یک توضیح یکتا و قطعی از رفتار ماده نیست و انتخاب روش تفسیر می‌تواند بر برداشت حاصل از مدل اثر بگذارد. این مسئله در مجموعه‌داده‌های کوچک جدی‌تر می‌شود. وقتی تعداد نمونه‌ها محدود باشد، یک مدل پیچیده ممکن است الگویی را یاد بگیرد که به ویژگی‌های همان مجموعه داده وابسته است و الزاماً بیانگر یک رابطه فیزیکی پایدار نیست. از این منظر، تفسیر خروجی مدل زمانی ارزش بیشتری پیدا می‌کند که در کنار آن از دانش تخصصی حوزه پلیمر نیز استفاده شود؛ صرف انتخاب یک الگوریتم تفسیرپذیر نمی‌تواند اعتبار فیزیکی نتیجه را تضمین کند (Bokai Liu, 2025).

۳.۷) اعتبارسنجی تجربی و قابلیت تعمیم‌پذیری مدل‌ها

عملکرد بالای یک مدل روی مجموعه آزمون، به‌تنهایی مشخص نمی‌کند که همان مدل در مواجهه با مواد جدید نیز قابل اعتماد خواهد بود. اهمیت این موضوع را می‌توان در چارچوب غربالگری مجازی Gupta و همکاران مشاهده کرد. در این مطالعه، پس از اعتبارسنجی محاسباتی، ۱۲۷ ترکیب جدید به‌صورت فیزیکی سنتز و آزمایش شدند و دقت پیش‌بینی مدل در بازه اطمینان ۹۵ درصد برابر ۸۹ درصد تأیید شد. اهمیت این نتیجه در آن است که عملکرد مدل تنها بر اساس شاخص‌های محاسباتی ارزیابی نشد و پیش‌بینی‌ها با نمونه‌های واقعی نیز مقایسه شدند. (Gupta, 2025) در مقابل، نتایج POLYT5 نشان می‌دهد که آموزش یک مدل زبانی روی مجموعه‌ای بسیار بزرگ از ساختارها الزاماً به معنای پیش‌بینی دقیق خواص فیزیکی نیست. در این مورد، دمای انتقال شیشه‌ای اندازه‌گیری‌شده برای یک پلیمر پیشنهادی حدود ۵۸ درجه پایین‌تر از مقدار پیش‌بینی‌شده توسط مدل بود (Harikrishna Sahu, 2026). کنار هم قرار دادن این دو مطالعه تصویر دقیق‌تری از مسئله ارائه می‌دهد: قابلیت اعتماد یک مدل را نمی‌توان تنها از روی اندازه داده آموزشی یا مقدار R^2 تعیین کرد. نوع خاصیت مورد پیش‌بینی، کیفیت داده‌های مورد استفاده و مهم‌تر از همه، وجود یا نبود اعتبارسنجی تجربی، در ارزیابی عملکرد واقعی آن نقش اساسی دارند.

۴.۷) پیچیدگی چندمقیاسی و ارتباط ریزساختار–خواص

رفتار نهایی نانوکامپوزیت‌های پلیمری حاصل برهم‌کنش پدیده‌هایی است که در مقیاس‌های مختلف رخ می‌دهند و همین موضوع مدل‌سازی آن‌ها را دشوار می‌کند. برای نمونه، در مدل‌سازی رسانش الکتریکی نانوکامپوزیت‌های حاوی نانولوله‌های کربنی، فرض توزیع یکنواخت فیلر در حجم نماینده نمی‌تواند پدیده‌هایی مانند کلوخه‌ای‌شدن یا جهت‌گیری غیرتصادفی را به‌طور کامل بازتاب دهد. در مطالعه Elaskalany و Behdinan ، برای دستیابی به پایداری آماری قابل قبول، برای هر کسر حجمی حداقل صد شبیه‌سازی مونت‌کارلو انجام شد. یکی از راه‌های کاهش هزینه پیش‌بینی، استفاده از مدل‌هایی است که پس از آموزش بتوانند رفتار ماده را با سرعت بالا بازسازی کنند. چارچوب فیزیک‌آگاه Lakshmaiya و همکاران، مبتنی بر Fourier Neural Operator ، نمونه‌ای از این رویکرد است که پس از آموزش می‌تواند رفتار ماده را در چند میلی‌ثانیه پیش‌بینی کند. با این حال، سرعت بالای مرحله پیش‌بینی به معنی حذف هزینه محاسباتی کل فرآیند نیست. تولید داده اولیه همچنان می‌تواند به شبیه‌سازی‌های اجزای محدود یا تصویربرداری آزمایشگاهی زمان‌بر وابسته باشد. بنابراین، در چنین چارچوب‌هایی بخشی از هزینه محاسباتی کاهش می‌یابد یا به مرحله دیگری از زنجیره انتقال پیدا می‌کند، نه اینکه لزوماً به‌طور کامل از بین برود. (Mostafa Elaskalany, 2024)

۸. طراحی معکوس و هوش مصنوعی مولد در طراحی نانوکامپوزیت‌های پلیمری

۱.۸) مفهوم طراحی معکوس[55] و چالش‌های نانوکامپوزیت‌های پلیمری

در رویکرد متداول طراحی مواد، مسیر کار از ساختار یا ترکیب ماده آغاز می‌شود و در نهایت به پیش‌بینی خواص آن می‌رسد. این فرآیند معمولاً مستلزم آزمودن گزینه‌های متعدد و بررسی عملکرد هر یک است. در Inverse Design، جهت این رابطه معکوس می‌شود: ابتدا خاصیت یا مجموعه‌ای از خواص موردنظر تعیین می‌شود و سپس الگوریتم تلاش می‌کند ساختار یا ترکیبی بیابد که به آن هدف نزدیک باشد. بر این اساس، نقش یادگیری ماشین در این رویکرد به پیش‌بینی رفتار یک ماده مشخص محدود نمی‌شود، بلکه به انتخاب یا طراحی هدفمند گزینه‌ها در فضای گسترده مواد نیز کمک می‌کند. اجرای این رویکرد در نانوکامپوزیت‌های پلیمری، اما، ساده نیست. در مقایسه با مولکول‌های کوچک آلی، تعداد متغیرهای مؤثر در یک سامانه پلیمری به‌مراتب بیشتر است: وزن مولکولی و توزیع طول زنجیره‌ها، معماری کوپلیمرها، نحوه پراکندگی فیلر، و چگونگی خودآرایی زنجیره‌ها، همگی می‌توانند ساختار نهایی ماده را تحت تأثیر قرار دهند. این خودآرایی ممکن است به شکل‌گیری مورفولوژی‌های گوناگونی در مقیاس نانو منجر شود، از جمله ساختارهای لایه‌ای، استوانه‌ای یا ژیرویید. در نتیجه، فضای طراحی نه‌تنها ابعاد بالایی دارد، بلکه متغیرهای آن به‌شدت به یکدیگر وابسته‌اند. این پیچیدگی زمانی افزایش می‌یابد که این متغیرها در تعامل با یکدیگر خواص ماکروسکوپی ماده را تعیین می‌کنند. رفتار نهایی ماده می‌تواند هم‌زمان از برهم‌کنش‌های فصل مشترک نانوذره-پلیمر در مقیاس بسیار کوچک و هم از مورفولوژی کلی در مقیاس‌های بزرگ‌تر تأثیر بپذیرد. چنین ارتباط چندسطحی موجب می‌شود تغییر یک متغیر واحد لزوماً اثر مستقیم و مستقلی بر خاصیت نهایی نداشته باشد، بلکه جفت‌شدگی غیرخطی میان مقیاس‌های مختلف شکل می‌گیرد. به همین دلیل، طراحی معکوس در این سامانه‌ها به چارچوب‌هایی نیاز دارد که هم‌زمان قادر به جست‌وجوی فضای طراحی و رعایت محدودیت‌های فیزیکی حاکم بر ماده باشند (Vinson Liao, 2025).

نمونه کاربردی: پلتفرم RAPSIDY 2.0

یکی از نمونه‌های برجسته این رویکرد، پلتفرم محاسباتی RAPSIDY 2.0 است که توسط لیائو و جیارامان توسعه یافته است (Vinson Liao, 2025). این چارچوب، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی دانه‌درشت (CG-MD) را با یادگیری فعال مبتنی بر بهینه‌سازی بیزی مقید (cBO) ترکیب می‌کند تا فضای طراحی چندبعدی مخلوط‌های کوپلیمر دی‌بلاک (Ax_1By_1 و Ax_2By_2) را به‌صورت هدفمند جست‌وجو کند. در این روش، به‌جای انتظار برای شکل‌گیری طبیعی مورفولوژی، زنجیره‌ها با استفاده از پتانسیل‌های راهنما مستقیماً به‌سمت مورفولوژی هدف از جمله ساختار لایه‌ای (L)، ژیرویید دوگانه (DG) و استوانه شش‌وجهی (C_6) هدایت می‌شوند. بر اساس نتایج گزارش‌شده، این رویکرد جهت‌دهی ساختاری[56] سرعت اکتشاف را نسبت به خودآرایی طبیعی

[55] Inverse Design
[56] Structural Biasing

بیش از دو برابر افزایش داده است. در چارچوب RAPSIDY 2.0، شاخص پایداری مورفولوژیکی ($V_r \leq 4.5$) به‌عنوان یک قید در فرآیند بهینه‌سازی لحاظ شده است. در کنار این قید، خواصی مانند هدایت حرارتی (k_z) و استحکام کششی (یا مدول یانگ) نیز بررسی شده‌اند. نتایج نشان می‌دهد که سفت‌تر شدن یکی از بلوک‌ها ($K>0$)، همراه با افزایش شعاع ژیراسیون (R_g)، هدایت حرارتی را به‌صورت خطی بهبود می‌بخشد. در این حالت، ترتیب عملکرد مورفولوژی‌ها از نظر هدایت حرارتی به‌صورت $L < DG < C_6$ گزارش شده، در حالی که برای خواص کششی این ترتیب معکوس و به‌صورت $C_6 < DG < L$ بوده است (Vinson Liao, 2025). این تفاوت نشان می‌دهد که هیچ مورفولوژی واحدی برای همه خواص بهینه نیست، و انتخاب هدف طراحی باید متناسب با خاصیت موردنظر صورت گیرد. با وجود این نتایج، وابستگی این چارچوب به شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی به‌ویژه در جست‌وجوی فضاهای ساختاری گسسته هزینه محاسباتی قابل‌توجهی به همراه دارد. یکی از مسیرهای امیدبخش برای توسعه این رویکرد، استفاده از فضاهای پنهان پیوسته با کمک خودرمزگذارهای متغیر (VAE) است؛ رویکردی که می‌تواند فضای طراحی را هموارتر کند و جست‌وجوی گزینه‌های جدید را از حالت بررسی گسسته ساختارها فراتر ببرد.

۹. طراحی معکوس، کشف خودکار مواد و سامانه‌های Closed-Loop

۱.۹) عبور از مدل‌سازی مستقیم به طراحی معکوس

بخش قابل توجهی از مطالعات اولیه در انفورماتیک پلیمر بر مدل‌های پیش‌بینی مستقیم[57] متمرکز بود. در این رویکرد، ساختار اتمی یا ترکیب و شرایط ساخت به مدل داده می‌شود و در نهایت یکی از خواص ماکروسکوپی ماده پیش‌بینی می‌شود. این مدل‌ها برای پاسخ به یک سؤال مشخص، یعنی «اگر ماده‌ای با این مشخصات ساخته شود، چه خواصی خواهد داشت؟»، مفید هستند؛ اما زمانی که هدف، یافتن یک ماده جدید با خواص از پیش تعیین‌شده باشد، مسیر متفاوتی لازم است. جستجوی مستقیم در فضای وسیع ترکیبات و ساختارهای پلیمری با آزمون‌وخطای متوالی، به‌ویژه در سامانه‌هایی با روابط غیرخطی و چندمقیاسی، کارآمد نیست. طراحی معکوس این جهت را تغییر می‌دهد. در اینجا نقطه شروع، خاصیت یا عملکرد مورد نظر است و سیستم تلاش می‌کند ساختار، ترکیب یا معماری ریزساختاری مناسب برای رسیدن به آن را پیدا کند. در این چارچوب، مشخصات عملکردی به‌عنوان هدف یا قید تعریف می‌شوند و الگوریتم می‌تواند مجموعه‌ای از معماری‌های زنجیره‌ای یا ریزساختارهای احتمالی را برای دستیابی به آن‌ها پیشنهاد دهد (Vinson Liao, 2025). اهمیت این تغییر رویکرد در پلیمرها بیشتر به چشم می‌آید، زیرا تعداد متغیرهای مؤثر و برهم‌کنش میان آن‌ها، فضای طراحی بسیار بزرگی ایجاد می‌کند. در چنین شرایطی، یادگیری ماشین می‌تواند از یک ابزار صرفاً پیش‌بینی‌کننده به ابزاری برای هدایت جستجوی مواد تبدیل شود.

[57] Forward Models

۲.۹) جستجوی آبرفضاهای پلیمری به کمک مدل‌های مولد

فضای طراحی پلیمرها تنها با انتخاب نوع مونومر تعیین نمی‌شود. وزن مولکولی، چندپاشیدگی[۵۸]، ترتیب واحدهای سازنده و ویژگی‌های معماری زنجیره نیز می‌توانند بر رفتار ماده اثر بگذارند (Victor Ugbetan Agbogo, 2026). ترکیب این متغیرها فضای طراحی بسیار بزرگی ایجاد می‌کند که بررسی آن با جستجوی دستی یا نمونه‌برداری تصادفی عملاً دشوار است. مدل‌های مولد[۵۹] راه دیگری برای پیمایش این فضا فراهم می‌کنند. این مدل‌ها می‌توانند ویژگی‌های موجود در ساختارهای شناخته‌شده را در یک فضای نهفته نمایش دهند و از این نمایش برای تولید ساختارهای جدید استفاده کنند (Tianle Yue, 2025). در صورت اعمال محدودیت‌های مناسب، کاندیداهای تولیدشده می‌توانند علاوه بر تفاوت با نمونه‌های موجود، از نظر قواعد ساختاری و ویژگی‌های فیزیکی نیز غربال شوند. به این ترتیب، هدف صرفاً تولید یک ساختار جدید نیست؛ مسئله اصلی یافتن ساختاری است که هم از فضای مواد شناخته‌شده فاصله داشته باشد و هم بتواند نیاز عملکردی مشخصی را برآورده کند. ترکیب مدل‌های مولد با یادگیری تقویتی[۶۰] می‌تواند این فرآیند را هدفمندتر کند. در چنین رویکردی، الگوریتم به جای بازتولید صرف الگوهای موجود در داده‌های آموزشی، ساختارهای پیشنهادی را بر اساس یک تابع هدف ارزیابی می‌کند و جستجو را به سمت گزینه‌های مطلوب‌تر هدایت می‌کند. در نتیجه، مدل مولد می‌تواند به ابزاری برای کاوش بخش‌هایی از فضای طراحی تبدیل شود که در پایگاه‌های داده موجود به‌طور مستقیم نمونه‌برداری نشده‌اند (Tianle Yue, 2025).

۳.۹) دستاوردهای کمی در طراحی معکوس کامپوزیت‌ها و پلیمرها

ارزش طراحی معکوس زمانی روشن می‌شود که خروجی آن به چند ساختار فرضی محدود نماند، بلکه بتواند فضای بزرگی از گزینه‌ها را به‌طور نظام‌مند غربال کند. در حوزه کوپلیمرها، پلتفرم RAPSIDY 2.0 با ترکیب شبیه‌سازی دینامیک مولکولی دانه‌درشت و بهینه‌سازی بیزی مقید، پایداری نانومورفولوژی‌های خودآرا و هدایت حرارتی را هم‌زمان بهینه کرد. نتایج نشان داد افزایش سفتی زنجیره بر انتقال حرارت در مورفولوژی‌های مختلف اثر متفاوتی دارد و ترتیب گزارش‌شده به‌صورت لایه‌ای بیش از ژیروئید دوگانه و بیش از استوانه‌ای بود (Vinson Liao, 2025). در مقیاس نانوکامپوزیت، چارچوب یادگیری ماشین فیزیک‌محور توسعه‌یافته توسط گوپتا و همکاران، امکان ارزیابی هم‌زمان ۳.۲ میلیون فرمولاسیون کاندید را فراهم کرد و از میان آن‌ها ۱٬۸۴۷ ترکیب ممتاز با خواص چندمنظوره شناسایی شد؛ این چارچوب نیاز به آزمایش فیزیکی را ۸۲ درصد و هزینه کلی توسعه را ۶۸ درصد کاهش داد (Gupta, 2025). این نتیجه نشان می‌دهد مدل‌های محاسباتی نه فقط برای پیش‌بینی، بلکه برای محدودکردن فضای جست‌وجوی تجربی نیز ارزشمندند. در رویکردی دیگر، فریم‌ورک سلسله‌مراتبی FNO-CVAE با ترکیب Fourier Neural Operator و خودرمزگذار متغیر کانولوشنالی، برای طراحی ریزساختار نانوکامپوزیت‌های سیلیکایی به کار گرفته شد و توانست بدون

[58] Dispersity
[59] Generative AI
[60] Reinforcement Learning

اجرای مستقیم شبیه‌سازی سنگین المان محدود، ریزساختارهایی با افزایش دمای انتقال شیشه‌ای تا ۳۱ درجه سانتی‌گراد و مدول ذخیره بیشتر از ۱.۰۹×۱۰۸۶ پاسکال پیشنهاد کند(Natrayan Lakshmaiya, 2026) . در حوزه مدل‌های زبانی شیمیایی نیز POLYT5 با تولید و غربال چندمرحله‌ای بیش از ۶ میلیون ساختار فرضی، به شناسایی یک پلیمر دی‌الکتریک جدید با دمای انتقال شیشه‌ای بالاتر از ۴۰۰ کلوین و شکاف باندی بزرگ منجر شد؛ سنتز این ماده و انجام آزمون‌های DSC در آزمایشگاه، پیش‌بینی‌های مدل را تأیید کرد(Harikrishna Sahu, 2026) . این نمونه اهمیت یک نکته را آشکار می‌کند: ارزش طراحی محاسباتی زمانی مشخص می‌شود که بتواند به ماده‌ای قابل‌ساخت و قابل‌ارزیابی در آزمایشگاه منتهی شود.

۴.۹) گذار به پلتفرم‌های خودران[61]

وقتی الگوریتم تنها نقش تحلیل‌کننده داده‌های موجود را ندارد و در انتخاب آزمایش بعدی نیز مشارکت می‌کند، مفهوم کشف خودکار مواد شکل می‌گیرد. تفاوت اصلی این رویکرد با کاربردهای معمول یادگیری ماشین در این است که خروجی مدل مستقیماً در برنامه‌ریزی چرخه بعدی آزمایش اثر می‌گذارد. پلتفرم‌های رباتیک مانند Polybot در آزمایشگاه ملی آرگون نمونه‌ای از این مسیر هستند؛ این سامانه با ترکیب تجهیزات خودکار و الگوریتم‌های هوش مصنوعی، فرآیند ساخت و ارزیابی پلیمرهای الکترونیکی و نیمه‌هادی را به شکل خودکار دنبال می‌کند. در چارچوب‌های پیشرفته‌تر، ابزارهای برنامه‌ریزی سنتز معکوس مانند ASKCOS و سامانه‌هایی مانند Chemputer یا IBM RoboRXN نیز می‌توانند در تبدیل مسیرهای پیشنهادی به مراحل اجرایی آزمایشگاهی نقش داشته باشند. در چنین ساختاری، نقش پژوهشگر نیز تغییر می‌کند؛ به‌جای اجرای دستی مجموعه بزرگی از آزمایش‌های مشابه، پژوهشگر اهداف، محدودیت‌ها و معیارهای ارزیابی را تعیین می‌کند و سامانه بر اساس داده‌های جدید مسیر جست‌وجو را به‌روزرسانی می‌کند. البته میزان استقلال واقعی این پلتفرم‌ها به دامنه مواد، نوع واکنش و سطح اتوماسیون تجهیزات وابسته است و نمی‌توان همه سامانه‌های موجود را کاملاً خودران در نظر گرفت (Victor Ugbetan Agbogo, 2026).

۵.۹) گلوگاه‌ها، موانع و چالش‌های فراروی آزمایشگاه‌های خودران

خودکار شدن فرآیند کشف مواد به معنی حذف پیچیدگی‌های فیزیکی و شیمیایی نیست. یکی از موانع مهم، امکان تولید ساختارهایی است که از نظر نمایش محاسباتی معتبرند اما در آزمایشگاه قابل سنتز نیستند؛ یک ساختار ممکن است از نظر قواعد مورد استفاده مدل صحیح به نظر برسد، اما محدودیت‌های فضایی، مسیرهای واکنشی نامناسب یا نبود شرایط و کاتالیزور مناسب، ساخت واقعی آن را دشوار یا غیرممکن کند (Victor Ugbetan Agbogo, 2026). در پلیمرها، این مسئله با پیچیدگی فرآیند سنتز بیشتر می‌شود؛ وزن مولکولی، که یکی از عوامل مؤثر بر خواص ماکروسکوپی است، به شرایط زمانی واکنش و انتقال جرم و حرارت وابسته است و کنترل هم‌زمان این عوامل در یک فرآیند خودکار ساده نیست. بنابراین، طراحی یک ترکیب مناسب لزوماً به معنای توانایی تولید آن با همان مشخصات در شرایط واقعی نیست. از طرف دیگر، اتصال تجهیزات رباتیک به محیط‌های شیمیایی متنوع و

[61] Autonomous Materials Discovery

توسعه روش‌های مشخصه‌یابی درجا[62] نیز چالش‌های مهندسی قابل‌توجهی ایجاد می‌کند؛ این مسئله زمانی پیچیده‌تر می‌شود که سامانه باید بتواند تغییرات ساختاری و مورفولوژیکی مواد را در طول فرآیند تشخیص دهد. در نهایت، عملکرد یک آزمایشگاه خودران به کیفیت داده‌هایی وابسته است که از چرخه‌های آزمایشگاهی وارد سیستم می‌شوند؛ نبود داده‌های استاندارد، تفاوت روش‌های اندازه‌گیری و ناهمگونی شیوه گزارش نتایج می‌تواند آموزش و مقایسه مدل‌ها را دشوار کند. به همین دلیل، توسعه این سامانه‌ها صرفاً یک مسئله الگوریتمی نیست و به همکاری نزدیک میان متخصصان پلیمر، هوش مصنوعی و اتوماسیون نیاز دارد. ایجاد روش‌های استاندارد برای ثبت شرایط فرآیند، مشخصات ماده و نتایج مشخصه‌یابی می‌تواند یکی از پیش‌نیازهای مهم برای حرکت از آزمایشگاه‌های خودکار محدود به سامانه‌های واقعاً حلقه‌بسته باشد (Victor Ugbetan Agbogo, 2026).

۱۰. نتیجه‌گیری

این مرور نشان داد هوش مصنوعی، زنجیره‌ی فرآیند-ریزساختار-خواص-عملکرد را از ابزار پیش‌بینی صرف به موتور طراحی فعال تبدیل کرده است. مدل‌های فیزیک‌آگاه، با ادغام قیدهای فیزیکی در تابع هزینه، هم دقت پیش‌بینی و هم قابلیت تعمیم در نواحی کم‌داده را بهبود بخشیده‌اند. مهم‌تر از آن، مسیر حرکت این حوزه از پیش‌بینی خواص به‌سمت طراحی معکوس در حال شکل‌گیری است؛ پلتفرم‌هایی مانند RAPSIDY 2.0 نشان داده‌اند که ترکیب یادگیری فعال، بهینه‌سازی بیزی و مدل‌های مولد می‌تواند هزینه‌های آزمایش تجربی را به‌طور چشمگیری کاهش دهد. با این‌همه، چالش‌هایی نظیر کمبود و ناهمگونی داده، دشواری تفسیرپذیری فیزیکی، و فاصله میان عملکرد آماری و اعتبار تجربی که نمونه‌اش تفاوت رتبه‌بندی SHAP و LIME یا فاصله ۷۲ درجه‌ای پیش‌بینی و اندازه‌گیری در POLYT5 است، نشان می‌دهند دقت آماری بالا به‌تنهایی تضمینی برای کاربردپذیری واقعی نیست. مسیرهای پیش‌رو شامل توسعه پایگاه‌های داده استاندارد و چندوفاداری، گسترش رویکردهای فیزیک‌آگاه، و حرکت به‌سمت سامانه‌های واقعاً حلقه‌بسته است، مسیری که مستلزم همکاری نزدیک‌تر متخصصان پلیمر، هوش مصنوعی و اتوماسیون است.

[62] In-line Characterization

منابع

Bokai Liu, P. L. (2025). Explainable Machine Learning for Multiscale Thermal Conductivity Modeling in Polymer Nanocomposites with Uncertainty Quantification. *Composite Structures*.

Boran Ma, N. J. (2023). Machine-Learning-Assisted Understanding of Polymer Nanocomposites Composition–Property Relationship: A Case Study of NanoMine Database. *Macromolecules*.

Borna Ma, N. J. (2023). Machine-Learning-Assisted Understanding of Polymer Nanocomposites Composition–Property Relationship: A Case Study of NanoMine Database. *American Chemical Society*.

ChengLin Han, H. Z.-D. (2023). Optimizing Interlaminar Toughening of Carbon-Based Filler/Polymer Nanocomposites by Machine Learning. *Polymer Testing*.

Elizabeth Champa-Bujaico, A. M.-P.-D. (2024). Optimization of Mechanical Properties of Multiscale Hybrid Polymer Nanocomposites: A Combination of Experimental and Machine Learning Techniques. *Universidad de Alcalá*.

Gupta, B. K. (2025). Properties, Physics-Informed Machine Learning Framework for Virtual Screening and MultiObjective Optimization of Polymer Nanocomposites with Tailored Multifunctional Sandeep. *Journal of Applied Science and Technology Trends (JASTT)*.

Harikrishna Sahu, W. X. (2026). POLYT5: An Encoder-Decoder Foundation Chemical Language Model for Generative Polymer Design. *npj Artificial Intelligence*.

Mostafa Elaskalany, K. B. (2024). Stochastic Multiscale Modeling of Electrical Conductivity of Carbon Nanotube Polymer Nanocomposites: An Interpretable Machine Learning Approach. *Advanced Engineering Materials*.

Natrayan Lakshmaiya, N. K. (2026). Physics-Informed AI Framework for Multiscale Design, Discovery, and Optimization of Polymer Nanocomposite Microstructures Using Neural Operators. *Scientific Reports*.

Teng Long, Q. P. (2025). Recent Progress of Artificial Intelligence Application in Polymer Materials. *Polymers*.

Tianle Yue, L. T. (2025). Benchmarking Study of Deep Generative Models for Inverse Polymer Design. *Digital Discovery*.

Victor Ugbetan Agbogo, M. L. (2026). Autonomous Polymer Materials Discovery Artificial Intelligence Architectures for Generative Design and Closed-Loop Engineering. *European Journal of Materials Science and Engineering*.

Vinson Liao, A. J. (2025). Inverse Design of Block Polymer Materials with Desired Nanoscale Structure and Macroscale Properties. *JACS Au*.

Wei Ge, R. D. (2025). Machine Learning in Polymer Research. *Advanced Materials*.