

نوآوری مبتنی بر هوش مصنوعی در الکترولیت‌های پیل سوختی: مروری بر کاربردهای یادگیری عمیق و یادگیری ماشین

سید محمد قاضی عسگر^{۱*}، آرمان شریف نتاج^۲

۱- دانشکده مهندسی انرژی و منابع پایدار، دانشکدگان علوم و فناوری‌های میان‌رشته‌ای، دانشگاه تهران،

m.ghaziasgar1999@ut.ac.ir

۲- دانشکده شیمی، دانشکدگان علوم، دانشگاه تهران، arman.sharif@ut.ac.ir

خلاصه

توسعه‌ی الکترولیت‌های پیل سوختی کارآمد و بادوام برای پذیرش گسترده‌ی این فناوری انرژی پاک، حیاتی است. روش‌های سنتی برای کشف و بهینه‌سازی مواد الکترولیت اغلب زمان‌بر و نیازمند منابع زیاد هستند. این مقاله مروری، پیشرفت‌های اخیر در به‌کارگیری الگوریتم‌های یادگیری عمیق و یادگیری ماشین را به منظور سرعت بخشیدن به توسعه‌ی الکترولیت‌های نوین پیل سوختی بررسی می‌کند. این مقاله اصول بنیادین پیل‌های سوختی و چالش‌های خاص مرتبط با مواد الکترولیت آن‌ها را مورد واکاوی قرار می‌دهد. مقاله به تفصیل الگوریتم‌های مختلف هوش مصنوعی/یادگیری ماشین به‌کار گرفته شده در این حوزه، از جمله شبکه‌های عصبی، ماشین‌های بردار پشتیبان، جنگل‌های تصادفی و الگوریتم‌های ژنتیک را شرح می‌دهد. از طریق تحلیل مطالعات موردی در انواع مختلف پیل‌های سوختی مانند پیل‌های سوختی غشاء پلیمری (PEMFC)، پیل‌های سوختی اکسید جامد (SOFC) و پیل‌های سوختی قلبیایی (AFC) این مرور، بهبودهای کمی عملکرد به دست آمده از طریق رویکردهای مبتنی بر هوش مصنوعی/یادگیری ماشین را برجسته می‌سازد. علاوه بر این، این مقاله چالش‌ها و محدودیت‌های استفاده از AI/ML در این زمینه، مانند در دسترس بودن داده‌ها و تفسیرپذیری مدل را مورد بحث قرار می‌دهد و مسیرهای آینده، از جمله یکپارچه‌سازی با غربالگری با توان بالا (high-throughput screening) و پتانسیل کشف مستقل (خودکار) مواد را کاوش می‌کند. پتانسیل تحول‌آفرین هوش مصنوعی در ایجاد انقلابی در توسعه‌ی الکترولیت پیل سوختی برای آینده‌ی انرژی پایدار، مورد تأکید قرار گرفته است.

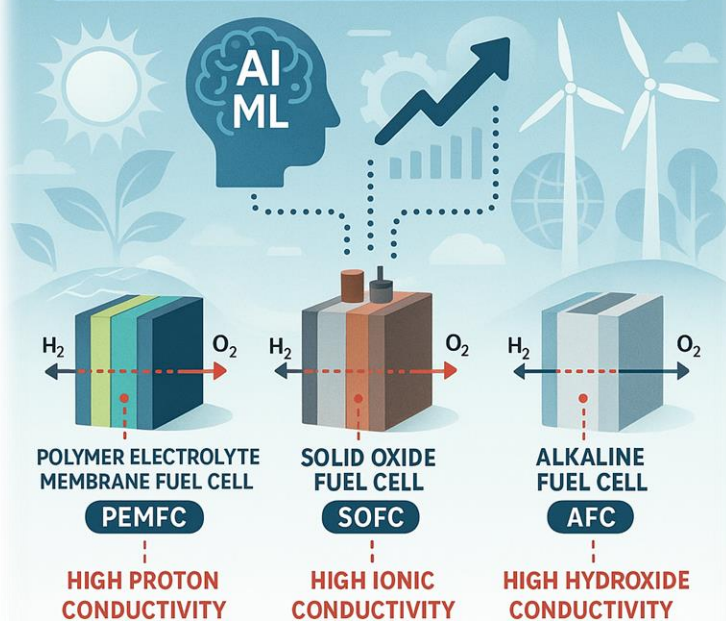
کلمات کلیدی: یادگیری ماشین، یادگیری عمیق، یادگیری ماشین، پیل سوختی، الکترولیت.

۱. مقدمه

پیل‌های سوختی یک فناوری تبدیل انرژی امیدوارکننده محسوب می‌شوند که انرژی شیمیایی یک سوخت، معمولاً هیدروژن، را مستقیماً از طریق یک واکنش الکتروشیمیایی به الکتریسیته تبدیل می‌کنند [۱]. راندمان بالا و آلاینده‌گی صفر یا پایین آن‌ها، این فناوری را به عنوان جایگزین‌های جذاب برای منابع انرژی سنتی مطرح می‌کند و به ایجاد چشم‌انداز انرژی پاک‌تر و پایدارتر کمک می‌کند. علی‌رغم این مزایا، تجاری‌سازی گسترده‌ی پیل‌های سوختی همچنان به دلیل محدودیت در طول عمر سرویس‌دهی، هزینه و عملکرد کلی با موانعی روبرو است. یک جزء حیاتی تأثیرگذار بر این عوامل، الکترولیت است که به عنوان محیط رسانای یون و عایق الکترود در داخل پیل سوختی عمل می‌کند. عملکرد و دوام انواع مختلف پیل‌های سوختی، از جمله پیل‌های سوختی غشاء پلیمری (PEMFCs)، پیل‌های سوختی اکسید جامد (SOFCs) و پیل‌های سوختی قلیایی (AFCs)، ذاتاً به خواص الکترولیت‌های مخصوص به خودشان مرتبط است. به عنوان مثال، PEMFCها به الکترولیت‌هایی با رسانایی پروتونی بالا و دوام بالا نیاز دارند [۲]، در حالی که SOFC ها نیازمند الکترولیت‌هایی هستند که رسانایی یونی بالا، به‌ویژه در دماهای کاری پایین‌تر، و پایداری طولانی‌مدت از خود نشان دهند. همچنین، AFC ها به الکترولیت‌هایی با رسانایی هیدروکسیدی بالا و پایداری قلیایی مقاوم متکی هستند [3]. (شکل ۱)

در سال‌های اخیر، هوش مصنوعی (AI) و به طور دقیق‌تر یادگیری ماشین (ML) به عنوان ابزاری قدرتمند ظهور کرده است که در حال ایجاد تحول در رشته‌های مختلف علمی و مهندسی، از جمله علم مواد، هستند. این تکنیک‌ها راه‌حل‌های نوآورانه‌ای برای بهبود کارآمدی خواص مواد و بهینه‌سازی کنترل سیستم در پیل‌های سوختی ارائه می‌دهند. کاربرد یادگیری ماشین این پتانسیل را دارد که به طور قابل توجهی کشف، طراحی و بهینه‌سازی مواد غشایی را که به عنوان الکترولیت‌های رسانای یون در پیل‌های سوختی عمل می‌کنند، تسریع بخشد. این رویکرد نویدبخش چرخه‌های توسعه مواد سریع‌تر و مقرون‌به‌صرفه‌تر در مقایسه با روش‌های تجربی سنتی است. الگوریتم‌های مختلف یادگیری ماشین می‌توانند از قدرت محاسباتی و مجموعه داده‌های عظیم برای پیش‌بینی خواص مواد مانند رسانایی یونی و پایداری، غربالگری فضاهای وسیع مواد و بهینه‌سازی فرآیندهای تولید بهره ببرند که در نهایت منجر به بهبود عملکرد پیل سوختی می‌شود. علاوه بر این، توانایی یادگیری ماشین در تجزیه و تحلیل برهم‌کنش‌های پیچیده در هر دو سطح میکروسکوپی و ماکروسکوپی، آن را به‌ویژه برای فائق آمدن بر چالش‌های مرتبط با توسعه‌ی الکترولیت مناسب می‌سازد [۴].

FUEL CELLS AND ELECTROLYTES



شکل ۱- انواع پیل‌های سوختی و حوزه‌های قابل ارتقا توسط هوش مصنوعی.

هدف کلی این مقاله مروری، ارائه‌ی یک چشم‌انداز جامع از پیشرفت‌های اخیر در به‌کارگیری الگوریتم‌های یادگیری عمیق و یادگیری ماشین برای توسعه‌ی الکترولیت‌های نوین پیل سوختی در میان فناوری‌های مختلف پیل سوختی است. به‌طور جزئی‌تر، اهداف این مقاله عبارتند از:

- بررسی مفاهیم بنیادی پیل‌های سوختی و چالش‌های الکترولیت آن‌ها؛
- کاوش نقش و پتانسیل یادگیری ماشین در پرداختن به این چالش‌ها؛
- شرح الگوریتم‌ها و روش‌شناسی‌های خاص یادگیری ماشین به‌کارگرفته‌شده در توسعه‌ی الکترولیت؛
- تحلیل مطالعات موردی شاخص و بهبودهای کمی گزارش‌شده در عملکرد؛
- بحث پیرامون چالش‌ها، محدودیت‌ها و جهت‌گیری‌های آتی در این حوزه؛
- در نظر گرفتن پیامدهای اقتصادی و پایداری نوآوری در الکترولیت با راهبری یادگیری ماشین.

۲. پیش زمینه

پیل‌های سوختی بر اساس اصل تبدیل الکتروشیمیایی عمل می‌کنند و انرژی شیمیایی ذخیره شده در یک سوخت را مستقیماً به انرژی الکتریکی تبدیل می‌نمایند. این فرآیند معمولاً شامل اکسیداسیون یک سوخت (مانند هیدروژن) در آند و کاهش یک اکسیدان (مانند اکسیژن) در کاتد است، در حالی که جریان یون‌ها بین الکترودها توسط الکترولیت تسهیل می‌شود. الکترولیت یک جزء حیاتی است که به طور انتخابی

یون‌ها را هدایت می‌کند و در عین حال از جریان الکترون‌ها جلوگیری می‌کند و آن‌ها را مجبور می‌سازد تا از طریق یک مدار خارجی حرکت کنند و بدین ترتیب الکتریسیته تولید شود. پیل‌های سوختی عمدتاً بر اساس نوع الکترولیتی که به کار می‌گیرند، طبقه‌بندی می‌شوند. سه نوع اصلی مرتبط با این مرور عبارتند از: پیل‌های سوختی غشاء پلیمری (PEMFCs)، پیل‌های سوختی اکسید جامد (SOFCs) و پیل‌های سوختی قلیایی (AFCs).

PEMFCها در دماهای نسبتاً پایین، معمولاً زیر ۱۰۰ درجه سانتی‌گراد، کار می‌کنند و از یک غشاء پلیمری جامد، اغلب اسید پرفلئوروسولفونیک (PFSA) مانند نفیون، به عنوان الکترولیت استفاده می‌کنند. این پیل‌های سوختی با چگالی توان بالا و زمان راه‌اندازی سریع مشخص می‌شوند، که آن‌ها را برای کاربرد در صنعت خودروسازی و دستگاه‌های قدرت قابل حمل مناسب می‌سازد. الکترولیت در PEMFCها انتقال پروتون‌ها (H^+) از آند به کاتد را تسهیل می‌کند [۵].

SOFCها در دماهای به مراتب بالاتر، معمولاً در بازه‌ی ۶۰۰ تا ۱۰۰۰ درجه سانتی‌گراد کار می‌کنند، و تحقیقات کنونی بر این نوع از پیل‌های سوختی، شامل بازیابی حرارتی و همچنین تلاش در راستای کاهش دمای عملیاتی آن‌ها می‌باشد. آن‌ها از یک ماده سرامیکی جامد، مانند زیرکونیای پایدار شده با ایتریا (YSZ)، به عنوان الکترولیت استفاده می‌کنند. SOFCها به دلیل راندمان الکتریکی بالا و انعطاف‌پذیری سوخت شناخته شده‌اند و قادر به استفاده از سوخت‌های مختلف از جمله هیدروژن، گاز طبیعی و بیوگاز هستند، که آن‌ها را برای کاربردهای تولید برق ثابت مناسب می‌سازد. الکترولیت در SOFCها یون‌های اکسید (O^{2-}) را از کاتد به آند هدایت می‌کند [۳].

پیل‌های سوختی قلیایی (AFCs) معمولاً در دماهای پایین‌تر، در بازه‌ی ۲۷ تا ۷۰ درجه سانتی‌گراد، کار می‌کنند و از یک محلول قلیایی (مانند هیدروکسید پتاسیم) یا یک غشاء تبادل آنیون (AEM) به عنوان الکترولیت استفاده می‌کنند [۶]. AFCها مزایایی مانند سینتیک سریع کاهش اکسیژن و پتانسیل استفاده از کاتالیزورهای فلزی غیر نجیب را ارائه می‌دهند که می‌تواند هزینه‌ها را در مقایسه با PEMFCها کاهش دهد. الکترولیت در AFCها انتقال یون‌های هیدروکسید (OH^-) از کاتد به آند را تسهیل می‌کند.

عملکرد هر نوع پیل سوختی به شدت به خواص الکترولیت آن وابسته است. رسانایی یونی بالا برای به حداقل رساندن مقاومت در برابر جریان یون ضروری است، در حالی که رسانایی الکترونی پایین از اتصال کوتاه در داخل سلول جلوگیری می‌کند. الکترولیت همچنین باید تحت شرایط عملیاتی پیل سوختی، پایداری شیمیایی و حرارتی از خود نشان دهد و باید نسبت به گازهای سوخت و اکسیدان نفوذناپذیر باشد تا از مخلوط شدن آن‌ها جلوگیری شود. تفاوت‌های اساسی در دماهای عملیاتی، مواد الکترولیت و یون‌های منتقل شده در این انواع پیل سوختی، الزامات و چالش‌های متنوع در توسعه‌ی الکترولیت مربوط به هر کدام را برجسته می‌کند. این مهم، بهره‌گیری از ابزار پیشرفته نظیر الگوریتم‌های یادگیری ماشین و عمیق را به یک نیاز جدی در این زمینه تبدیل کرده است.

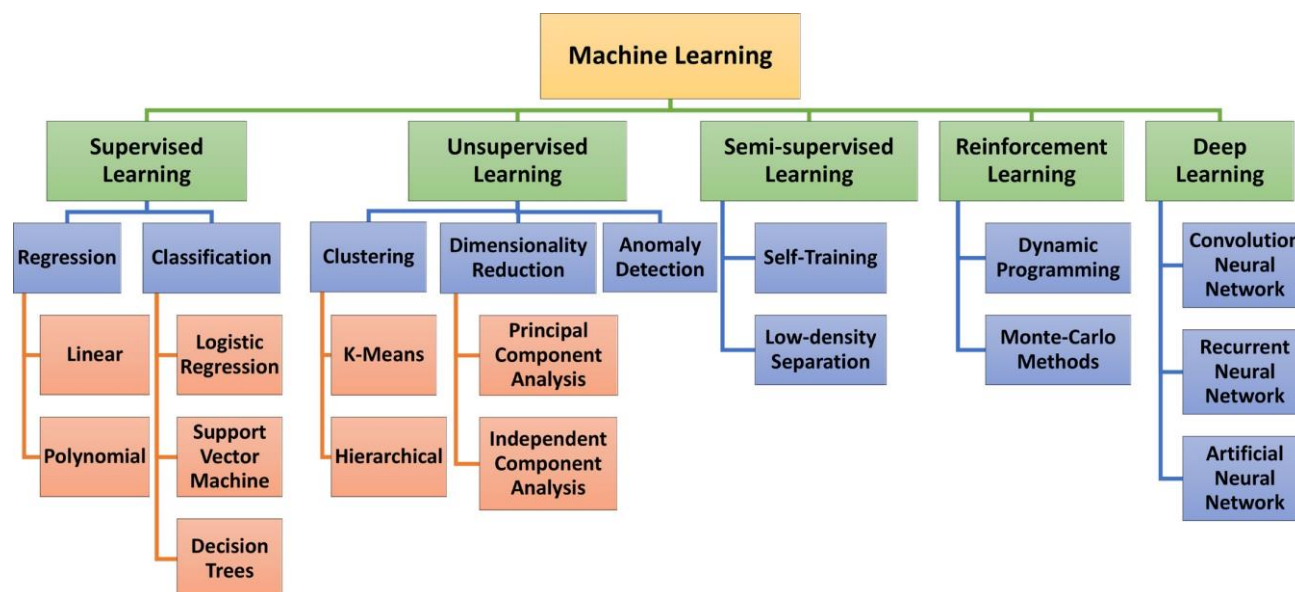
روش‌های سنتی برای توسعه مواد الکترولیت عمدتاً بر رویکردهای تجربی تکیه داشته‌اند. این روش‌ها معمولاً شامل سنتز و آزمایش طیف گسترده‌ای از ترکیبات و ساختارهای مواد در یک فرآیند آزمون و خطای تکراری است. در حالی که این روش‌های تجربی منجر به توسعه مواد الکترولیت موجود شده‌اند، از چندین محدودیت ذاتی رنج می‌برند. گستردگی فضای شیمیایی و مواد، کاوش تجربی تمام ترکیبات ممکن مواد را غیرعملی می‌سازد. علاوه بر این، فرآیند سنتز مواد، مشخصه‌یابی و ساخت پیل سوختی می‌تواند بسیار زمان‌بر

و پرهزینه باشد. روش‌های سنتی همچنین اغلب در ارائه درک بنیادی از روابط بین ترکیب و ساختار یک ماده و عملکرد الکتروشیمیایی حاصل از آن، با مشکل مواجه هستند و مانع طراحی منطقی (یا هوشمندانه) مواد می‌شوند [۷]. دستیابی به بهینه‌سازی چندهدفه خواص الکترولیت، مانند دستیابی همزمان به رسانایی بالا، پایداری و هزینه پایین، با استفاده از روش‌های تجربی تکراری سنتی، چالشی قابل توجه است. بنابراین، رویکرد سنتی به توسعه الکترولیت به دلیل ناکارآمدی در کاوش امکانات گسترده مواد و دشواری در برقراری روابط واضح بین خواص مواد و عملکرد، گلوگاه مهمی در پیشبرد فناوری پیل سوختی محسوب می‌شود.

مواد الکترولیت فعلی، در حالی که عملکرد پیل سوختی را امکان‌پذیر می‌کنند، هنوز با چالش‌های کلیدی روبرو هستند که عملکرد و پذیرش گسترده آن‌ها را محدود می‌کند. در بسیاری از موارد، بده‌بستان‌های (trade-offs) ذاتی بین خواص مطلوب وجود دارد. به عنوان مثال، بهبود رسانایی یونی ممکن است پایداری شیمیایی طولانی‌مدت ماده را به خطر اندازد. الکترولیت‌های PEMFC، مانند نفیون، با چالش‌هایی در حفظ رسانایی پروتونی کافی در طیف وسیعی از شرایط عملیاتی، به‌ویژه در دماهای متوسط و بالا و رطوبت کم، مواجه هستند. عبور سوخت (fuel crossover)، که در آن سوخت از طریق غشاء نفوذ می‌کند، و تخریب غشاء در طول زمان نیز نگرانی‌های قابل توجهی هستند. برای SOFCها، یک چالش عمده دستیابی به رسانایی بالای یون اکسیژن در دماهای عملیاتی کاهش‌یافته (زیر ۸۰۰ درجه سانتی‌گراد) به منظور به حداقل رساندن تخریب مواد، کاهش هزینه‌های سیستم و بهبود دوام است. اطمینان از سازگاری با مواد الکتروود و حفظ یکپارچگی مکانیکی تحت چرخه‌ی حرارتی نیز حیاتی است. AFCها با چالش توسعه غشاءهای تبادل آنیون با رسانایی بالای یون هیدروکسید و پایداری عالی در محیط‌های بسیار قلیایی برای دوره‌های طولانی مواجه هستند [۸]. به حداقل رساندن تورم غشاء و جلوگیری از تشکیل کربنات به دلیل واکنش یون‌های هیدروکسید با دی‌اکسید کربن موجود در هوا نیز ملاحظات مهمی هستند. علاوه بر این، هزینه و کمیابی برخی مواد الکترولیت با کارایی بالا، مانند فلزات گروه پلاتین که به عنوان کاتالیزور در برخی از انواع پیل‌های سوختی استفاده می‌شوند، کاوش جایگزین‌های مقرون‌به‌صرفه‌تر را ضروری می‌سازد. غلبه بر این محدودیت‌ها و بده‌بستان‌های ذاتی در مواد الکترولیت فعلی برای نسل بعدی پیل‌های سوختی حیاتی است و AI/ML یک جعبه‌ابزار قدرتمند برای مقابله با این چالش‌های پیچیده و چندوجهی ارائه می‌دهد.

۳. الگوریتم‌های مورد استفاده

کاربرد الگوریتم‌های یادگیری ماشین و یادگیری عمیق در حوزه‌ی توسعه‌ی الکترولیت پیل سوختی به طور فزاینده‌ای رایج شده است. طیف متنوعی از الگوریتم‌ها، که هر کدام نقاط قوت منحصر به فردی دارند، برای پرداختن به جنبه‌های مختلف این چالش پیچیده به کار گرفته می‌شوند (شکل ۲).



شکل ۲- دسته بندی انواع الگوهای یادگیری ماشین و الگوریتم های آن [۹].

شبکه های عصبی مصنوعی (ANNs) مدل های محاسباتی الهام گرفته از ساختار و عملکرد مغز انسان هستند. آن ها در مدل سازی روابط پیچیده ی غیرخطی بین پارامترهای ورودی، مانند ترکیب مواد یا شرایط عملیاتی، و ویژگی های خروجی، مانند رسانایی یونی یا عملکرد کلی پیل سوختی، برتری دارند. از شبکه های عصبی مصنوعی با موفقیت برای پیش بینی عملکرد پیل سوختی، تخمین عمر سرویس دهی و تشخیص خطا استفاده شده است. به عنوان مثال، از ANNs برای تخمین رابطه ی بین جریان و دما در پیل های سوختی استفاده شده که تطابق خوبی با داده های تجربی نشان داده است [۱].

ماشین های بردار پشتیبان (SVMs) مجموعه ی قدرتمند دیگری از الگوریتم های یادگیری نظارت شده هستند که هم برای وظایف طبقه بندی و هم رگرسیون استفاده می شوند. در زمینه ی پیل های سوختی، از SVM ها برای پیش بینی عملکرد، تخمین عمر سرویس دهی و تشخیص خطا، به ویژه در سناریوهایی که شامل روابط غیرخطی می شوند، استفاده شده است. مدل های رگرسیون SVM دقت بالایی در پیش بینی مشخصه های دینامیکی غیرخطی SOFC ها و در تشخیص خطا برای PEMFC ها [۱۰] نشان داده اند.

جنگل های تصادفی و سایر روش های مبتنی بر درخت، تکنیک های یادگیری گروهی (ensemble learning) هستند که در پیش بینی خواص مواد و برای انتخاب ویژگی در طراحی مواد پیل سوختی مؤثر بوده اند. این روش ها به ویژه برای توسعه ی مدل های قابل تفسیر مفید هستند. به عنوان مثال، از جنگل های تصادفی و الگوریتم های بوستینگ برای پیش بینی غلظت پروتون هیدراته اکسیدها به منظور غربالگری سریع مواد آندی امیدوارکننده برای SOFC ها استفاده شده است [۱۱].

الگوریتم های ژنتیک (GAs) الگوریتم های بهینه سازی الهام گرفته از فرآیند انتخاب طبیعی هستند. در تحقیقات پیل سوختی، از GA ها برای بهینه سازی ترکیب مواد، پارامترهای عملیاتی و حتی معماری شبکه های عصبی استفاده شده است. از GA ها برای پیش بینی پایداری چارچوب های نانوذرات آلیاژی برای

کاتالیزورهای PEMFC، شناسایی پیکربندی‌های بسیار پایدار [۳]، و برای بهینه‌سازی عملکرد SOFCها تحت قیود مختلف [۱۲] استفاده شده است.

یادگیری عمیق (DL) شامل شبکه‌های عصبی با چندین لایه (شبکه‌های عصبی عمیق) است که می‌توانند الگوهای پیچیده را از مقادیر زیادی داده یاد بگیرند. معماری‌های مختلف DL در توسعه‌ی الکترولیت پیل سوختی استفاده می‌شوند. شبکه‌های عصبی کانولوشنی (CNNs) به‌ویژه برای تجزیه و تحلیل داده‌های مبتنی بر تصویر، مانند ریزساختارهای مواد، مفید هستند. شبکه‌های عصبی بازگشتی (RNNs) برای تجزیه و تحلیل داده‌های متوالی (دنباله‌ای) مناسب هستند. شبکه‌های عصبی عمیق (DNNs) برای مدل‌سازی پیچیده‌ی غیرخطی در پیش‌بینی عملکرد پیل سوختی و تجزیه و تحلیل تخریب به کار گرفته شده‌اند. مدل‌های پتانسیل عمیق (DP) با ارائه‌ی تعادل بین دقت و کارایی محاسباتی برای مطالعه‌ی مواد الکترولیت در سطح اتمی، انقلابی در شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی ایجاد کرده‌اند [۷]. همچنین این الگوریتم‌ها می‌تواند در پیش‌بینی تخریب پذیری مواد پیل‌های سوختی نیز به کار رود. در این زمینه شی و همکاران [۱۳] یک رویکرد پیش‌بینی ترکیبی مبتنی بر فیلتر ذرات و شبکه حافظه طولانی کوتاه‌مدت (LSTM) پیشنهاد کردند. این رویکرد می‌تواند به طور موثر عمر مفید باقیمانده و تخریب کوتاه‌مدت پیل‌های سوختی را پیش‌بینی کند. همچنین ژو و همکاران [۱۴] یک مدل شبکه عصبی بازگشتی (RNN) مبتنی بر توجه گزارش کردند که می‌توانست تخریب ولتاژ خروجی پیل‌های سوختی PEM را بر اساس داده‌های اصلی آزمون دوام چرخه بارگذاری دینامیکی بلندمدت به دقت پیش‌بینی کند. LSTM مبتنی بر توجه و واحد بازگشتی گیت‌دار (GRU) مبتنی بر توجه، دقت پیش‌بینی بالاتری نسبت به LSTM و GRU نشان دادند. ویشارد و همکاران [۱۵] نتایج یک آزمون دوام بلندمدت انجام شده بر روی یک سیستم پیل سوختی کاتد باز را ارائه کردند که به مدت ۵۰۰۰ ساعت تحت شرایط عملیاتی خاص کار می‌کرد. سپس از یک مدل تخریب مبتنی بر شبکه حالت اکو (ESN) برای پیش‌بینی تکامل عملکرد استفاده شد. نتایج نشان داد که این مدل می‌تواند به پیش‌بینی دقیق عملکرد برای بیش از ۲۰۰۰ ساعت دست یابد.

مدل‌های هوش مصنوعی مولد (Generative AI)، مانند شبکه‌های مولد تخصصی (GANs) و خودرمزگذارهای متغیر (VAEs)، به عنوان ابزارهای قدرتمندی برای طراحی ریزساختارهای نوین مواد و تسریع کشف مواد الکترولیت جدید با خواص مطلوب در حال ظهور هستند [۱۶]. موفقیت این الگوریتم‌های هوش مصنوعی/یادگیری ماشین به شدت به در دسترس بودن داده‌های متنوع و با کیفیت بالا متکی است. این داده‌ها از منابع مختلفی به دست می‌آیند، از جمله مجموعه داده‌های تجربی به دست آمده از آزمایش پیل‌های سوختی تحت شرایط مختلف، داده‌های شبیه‌سازی محاسباتی تولید شده با استفاده از روش‌هایی مانند نظریه تابعی چگالی (DFT) و دینامیک سیالات محاسباتی (CFD)، و پایگاه‌های داده مواد که حاوی اطلاعاتی در مورد ترکیبات شیمیایی، ساختارهای کریستالی و خواص هستند. حتی داده‌های متنی از ادبیات علمی را می‌توان از طریق تکنیک‌های متن‌کاوی مورد استفاده قرار داد [۱۷]. داده‌های به دست آمده قبل از استفاده برای آموزش مدل‌های AI/ML، معمولاً تحت چندین مرحله پیش‌پردازش قرار می‌گیرند تا از کیفیت و مناسب بودن آن‌ها اطمینان حاصل شود. این مراحل شامل پاک‌سازی داده‌ها برای رسیدگی به مقادیر گمشده و نویز [۱۸]، نرمال‌سازی و مقیاس‌بندی داده‌ها برای همسان‌سازی ویژگی‌های مختلف به یک محدوده مشترک [۱۹]، پرداختن به مسئله مجموعه

داده‌های نامتعادل [۲۰]، و اعمال تکنیک‌های مختلف تبدیل داده‌ها است. مهندسی ویژگی نقش حیاتی در انتخاب و تبدیل داده‌های خام به ویژگی‌های مرتبط ایفا می‌کند که می‌توانند به طور مؤثر روابط زیربنایی مربوط به خواص و عملکرد الکترولیت را ثبت کنند. این ممکن است شامل استفاده از توصیف‌گرهای فیزیکی یا شیمیایی، پارامترهای ریزساختاری یا شرایط عملیاتی به عنوان ویژگی‌های ورودی باشد [۱۲]. تکنیک‌های کاهش ابعاد، مانند تحلیل مؤلفه‌های اصلی (PCA)، نیز می‌توانند برای کاهش تعداد ویژگی‌ها ضمن حفظ مهم‌ترین اطلاعات به کار گرفته شوند.

برای اطمینان از قابلیت اطمینان و تعمیم‌پذیری مدل‌های AI/ML توسعه‌یافته، از روش‌های اعتبارسنجی دقیق استفاده می‌شود. مجموعه داده معمولاً به مجموعه‌های آموزش، اعتبارسنجی و آزمون تقسیم می‌شود تا ارزیابی شود که مدل چقدر روی داده‌های دیده‌نشده خوب عمل می‌کند. از تکنیک‌های اعتبارسنجی متقابل، مانند اعتبارسنجی متقابل k -لایه (k-fold cross-validation)، برای به دست آوردن تخمین استوارتری از عملکرد مدل استفاده می‌شود. عملکرد مدل‌ها با استفاده از معیارهای مرتبط ارزیابی می‌شود. برای وظایف رگرسیون، معیارهای رایج شامل ریشه میانگین مربعات خطا (RMSE)، میانگین قدر مطلق خطا (MAE) و ضریب تعیین (R-squared) است. برای وظایف طبقه‌بندی، از معیارهایی مانند دقت (accuracy)، پرسیژن (precision)، بازیابی (recall) و امتیاز F1 استفاده می‌شود [۲۱]. نکته حیاتی اینکه، اعتبارسنجی تجربی برای تأیید پیش‌بینی‌ها و طرح‌های تولید شده توسط مدل‌های AI/ML در سیستم‌های واقعی پیل سوختی ضروری است. این شامل سنتر الکترولیت‌های طراحی شده به صورت محاسباتی و آزمایش عملکرد آن‌ها در پیل‌های سوختی واقعی برای اعتبارسنجی بینش‌های حاصل از AI/ML است.

کاربرد موفق AI/ML در توسعه‌ی الکترولیت پیل سوختی بر اکوسیستم قدرتمندی از چارچوب‌ها و ابزارهای محاسباتی متکی است. زبان برنامه نویسی پایتون به دلیل کتابخانه‌های گسترده‌اش برای تجزیه و تحلیل داده‌ها و یادگیری ماشین، یک زبان برنامه‌نویسی غالب است. کتابخانه‌ها و چارچوب‌های کلیدی AI/ML در پایتون، مانند TensorFlow، PyTorch و Scikit-learn، ابزارهای لازم را برای ساخت، آموزش و ارزیابی مدل‌های مختلف AI/ML فراهم می‌کنند. بسته‌های نرم‌افزاری شبیه‌سازی محاسباتی مانند COMSOL Multiphysics، ANSYS Fluent و OpenFOAM برای تولید داده‌های مصنوعی از طریق مدل‌سازی مبتنی بر فیزیک (مانند CFD، مدل‌سازی الکتروشیمیایی) استفاده می‌شوند که می‌توانند برای آموزش مدل‌های AI/ML یا برای اهداف اعتبارسنجی به کار روند. امکانات محاسبات با عملکرد بالا (HPC) و پلتفرم‌های رایانش ابری اغلب برای مدیریت نیازهای محاسباتی قابل توجه آموزش مدل‌های پیچیده AI/ML بر روی مجموعه داده‌های بزرگ ضروری هستند [۲۲]. علاوه بر این، نرم‌افزارها و پلتفرم‌های تخصصی برای انفورماتیک مواد و کموانفورماتیک ابزارهایی برای مدیریت داده‌ها، تولید ویژگی و توسعه مدل ارائه می‌دهند که به طور خاص برای کاربردهای علم مواد طراحی شده‌اند [۲۳].

۴. کاربردها و مطالعات موردی

تکنیک‌های هوش مصنوعی/یادگیری ماشین کاربردهای چشمگیری در توسعه‌ی الکترولیت‌های نوین برای انواع مختلف پیل‌های سوختی یافته‌اند که به بهبودهای قابل توجهی در عملکرد منجر شده است.

در قلمروی پیل‌های سوختی غشاء پلیمری (PEMFCs)، هوش مصنوعی/یادگیری ماشین در پیش‌بینی پایداری و عملکرد مواد کاتالیست نقشی اساسی ایفا کرده است. به عنوان مثال، یک برنامه‌ی یادگیری ماشین ژنتیک نیچ فیزیکی (PNG) پایداری چارچوب‌های نانوذرات آلیاژ پلاتین-نیکل (Pt-Ni) را با حاشیه‌ی خطای کمتر از ۰.۱۳ الکترون‌ولت (eV) به دقت پیش‌بینی کرد [۳]. این امر منجر به شناسایی پیکربندی‌های بسیار پایدار، مانند $Pt_{43}Ni_{142}$ ، از میان مجموعه‌ی وسیعی از گزینه‌های نامزد شد. علاوه بر این، استراتژی‌های غربالگری مبتنی بر هوش مصنوعی (AI) برای شناسایی کاندیداهای پلیمری جایگزین امیدوارکننده برای غشاهای تبادل پروتون (PEMs) و آینومرها از پایگاه‌های داده‌ی گسترده‌ی پلیمری به کار گرفته شده‌اند [۲۴]. این استراتژی‌ها رسانایی پروتونی بالاتری را برای ۴۸ کاندیدای جدید PEM، ۱۰ کاندیدای جدید آینومر آند و ۲ کاندیدای جدید آینومر کاتد پیش‌بینی کردند. همچنین، چارچوب‌های هوش مصنوعی (AI) که ترکیبی از مدل‌های جایگزین داده‌محور و الگوریتم‌های بهینه‌سازی تصادفی هستند، به منظور دستیابی به بهینه‌سازی سراسری چندمتغیره برای افزایش حداکثر چگالی توان PEMFCها توسعه یافته‌اند [۲۵]. این مدل‌های جایگزین دقت بالایی از خود نشان دادند، به طوری که خطای پیش‌بینی آن‌ها در مقایسه با مدل‌های فیزیکی تنها ۱.۳۹۵٪ بود. مدل‌های یادگیری ماشین، مانند ANFIS (سیستم استنتاج فازی-عصبی تطبیقی)، برای شبیه‌سازی و بهینه‌سازی چگالی توان خروجی PEMFCها از طریق در نظر گرفتن عواملی مانند فشار، رطوبت نسبی و فشردگی غشاء، مورد استفاده قرار گرفته‌اند که منجر به مقادیر پارامتر بهینه‌سازی شده و بهبود عملکرد شده است [۲۶].

برای پیل‌های سوختی اکسید جامد (SOFCs)، هوش مصنوعی/یادگیری ماشین نقشی حیاتی در طراحی و کشف مواد الکترولیت جدید با رسانایی یونی افزایش یافته ایفا کرده است. از یک مدل یادگیری ماشین برای پیش‌بینی مقاومت ویژه سطح (ASR) مواد SOFC بر اساس توصیف‌گرهایی مانند قدرت اسید لوئیس یونی استفاده شد [۳]. این امر منجر به سنتز موفقیت‌آمیز چهار اکسید پروسکایت (perovskite) با عملکرد بالا گردید و محاسبات نظریه تابعی چگالی (DFT) مکانیسم زیربنایی فعالیت ردوکس (کاهش-اکسایش) افزایش یافته را روشن ساخت. الگوریتم‌های یادگیری ماشین، از جمله جنگل تصادفی (Random Forest) و XGBoost، برای پیش‌بینی غلظت پروتون آب‌پوشیده (هیدراته) اکسیدها به منظور غربالگری سریع مواد امیدوارکننده برای SOFCها به کار گرفته شده‌اند [۱۱]. شبکه‌های عصبی نیز برای پیش‌بینی عملکرد SOFCهای آند-پشتیبان (anode-supported) بر اساس متغیرهای مختلف ساختاری و عملیاتی به کار گرفته شده‌اند، که دقت بالاتری در مقایسه با مدل‌های ریاضی سنتی نشان داده‌اند [۲۷]. علاوه بر این، شبکه‌های عصبی بهینه‌شده با الگوریتم ژنتیک برای شبیه‌سازی عملکرد SOFC تحت ترکیبات سوخت و پارامترهای عملیاتی متغیر توسعه یافته‌اند، که به دقت بالایی در پیش‌بینی رفتار قطبش (پلاریزاسیون) دست یافته‌اند، به طوری که خطای RMS (ریشه میانگین مربعات) برای یکی از این مدل‌ها در فاز آزمایش ۰.۶۷٪ بوده است [۲۸].

در زمینه‌ی پیل‌های سوختی قلیایی (AFCs)، هوش مصنوعی/یادگیری ماشین برای طراحی غشاهای تبادل آنیون (AEMs) مقرون به صرفه و بادوام به کار گرفته شده است. مدل‌های پیش‌بینی‌کننده و فیلترهای ابتکاری برای غربالگری میلیون‌ها کاندیدای کوپلیمری نوین بدون فلوئور برای AEMها به کار گرفته شدند، که منجر به شناسایی بیش از ۴۰۰ کاندیدای امیدوارکننده با رسانایی هیدروکسیدی بالا (بیشتر از ۱۰۰ میلی‌زیمنس بر سانتی‌متر)، جذب آب کم و نسبت تورم پایین گردید [۶]. مدل‌های بهینه‌سازی با استفاده از الگوریتم‌های تقویت گرادیان (gradient boosting)، مانند XGBoost، برای پیش‌بینی عملکرد پیل‌های سوختی مایع قلیایی تحت شرایط عملیاتی مختلف توسعه یافته‌اند [۲۹]. چارچوب‌های هوش مصنوعی مولد عمیق (Deep generative AI)، مانند GLIDER، برای جستجوی کارآمد

نانوساختارهای بهینه‌ی لایه کاتالیست در پیل‌های سوختی قلیایی، بر اساس عملکرد الکتروشیمیایی آن‌ها، به کار گرفته شده‌اند [۳۰].

در حالی که تمرکز اصلی بر روی پیل‌های سوختی غشاء پلیمری (PEMFCs)، پیل‌های سوختی اکسید جامد (SOFCs) و پیل‌های سوختی قلیایی (AFCs) بوده است، تکنیک‌های هوش مصنوعی/یادگیری ماشین نیز پتانسیل توسعه‌ی الکترولیت‌ها برای انواع دیگر پیل‌های سوختی را دارند. به عنوان مثال، الگوریتم‌های ژنتیک در توسعه‌ی میدان‌های نیرو (force fields) برای الکترولیت‌های پیل سوختی کربنات مذاب (MCFC) به کار گرفته شده‌اند [۳۱]. که نشان‌دهنده‌ی کاربرد وسیع‌تر هوش مصنوعی/یادگیری ماشین در این حوزه است.

۵. چالش‌ها و محدودیت‌ها

علی‌رغم پیشرفت‌های قابل توجه، کاربرد هوش مصنوعی/یادگیری ماشین در توسعه‌ی الکترولیت پیل سوختی با چندین چالش و محدودیت روبرو است. یکی از موانع اصلی، کمبود مجموعه داده‌های بزرگ، با کیفیت بالا و استاندارد شده است که به طور خاص به مواد الکترولیت پیل سوختی اختصاص داشته باشند. این کمبود، مانع آموزش مدل‌های هوش مصنوعی/یادگیری ماشین مقاوم و قابل تعمیم می‌شود. ناهمگونی داده‌های موجود، که از تفاوت‌ها در تنظیمات آزمایشگاهی، پروتکل‌های اندازه‌گیری و استانداردهای گزارش‌دهی ناشی می‌شود، استفاده‌ی مؤثر از داده‌های منابع گوناگون را بیشتر پیچیده می‌کند. به دست آوردن داده‌های کافی که به طور جامع طیف گسترده‌ای از ترکیبات مواد، ساختارها و شرایط عملیاتی مرتبط با الکترولیت‌های پیل سوختی را پوشش دهد، همچنان یک چالش محسوب می‌شود. قابلیت اطمینان و دقت پیش‌بینی‌های هوش مصنوعی/یادگیری ماشین منوط به در دسترس بودن مجموعه داده‌های مدیریت‌شده (curated) و به خوبی شرح‌داده‌شده (well-annotated) است.

یکی دیگر از نگرانی‌های مهم، به قابلیت تفسیرپذیری مدل‌های پیچیده‌ی هوش مصنوعی/یادگیری ماشین، به‌ویژه معماری‌های یادگیری عمیق، مربوط می‌شود. ماهیت «جعبه سیاه» این مدل‌ها، درک دلایل بنیادین پیش‌بینی‌های آن‌ها در علم مواد را چالش‌برانگیز می‌کند. قابلیت تفسیرپذیری مدل برای به دست آوردن بینش‌های علمی در مورد روابط ساختار-ویژگی مواد الکترولیت و برای هدایت تلاش‌های طراحی منطقی مواد، حیاتی است. بنابراین، توسعه و کاربرد تکنیک‌های هوش مصنوعی قابل توضیح برای فراهم کردن شفافیت و قابلیت تفسیرپذیری برای مدل‌های پیچیده‌ی هوش مصنوعی/یادگیری ماشین در این حوزه ضروری است.

نیازمندی‌های منابع محاسباتی برای به‌کارگیری تکنیک‌های پیشرفته‌ی هوش مصنوعی/یادگیری ماشین در علم مواد نیز می‌تواند قابل توجه باشد. آموزش مدل‌های پیچیده، به‌ویژه معماری‌های یادگیری عمیق، بر روی مجموعه داده‌های بزرگ، نیازمند قدرت پردازش، حافظه و فضای ذخیره‌سازی قابل توجهی است. دسترسی به زیرساخت‌های محاسبات با عملکرد بالا (HPC) و ابزارهای نرم‌افزاری تخصصی اغلب ضروری است، موضوعی که ممکن است برای همه‌ی محققان و مؤسسات به آسانی در دسترس نباشد و به طور بالقوه موانعی برای ورود به این حوزه ایجاد کند. علاوه بر این، تولید خود داده‌های آموزشی از طریق شبیه‌سازی‌های مقیاس بزرگ، مانند نظریه تابعی چگالی (DFT) یا دینامیک مولکولی، نیز می‌تواند از نظر محاسباتی پرهزینه باشد.

۶. مسیر آینده

تحقیقات آتی در زمینه‌ی کاربرد هوش مصنوعی/یادگیری ماشین برای توسعه‌ی الکترولیت پیل سوختی احتمالاً بر روی چندین روند نوظهور متمرکز خواهد شد. یکپارچه‌سازی دانش و محدودیت‌های مبتنی بر فیزیک در مدل‌های هوش مصنوعی/یادگیری ماشین از طریق یادگیری ماشین آگاه از فیزیک (PIML) در حال شتاب گرفتن است و هدف آن ارتقاء دقت، قابلیت تفسیرپذیری و قابلیت تعمیم‌پذیری این مدل‌ها در علم مواد است. همچنین انتظار می‌رود استفاده از شبکه‌های عصبی گراف (GNNs) افزایش یابد، زیرا این مدل‌ها برای نمایش و یادگیری از اطلاعات ساختاری پیچیده‌ی مواد به خوبی مناسب هستند و به طور بالقوه منجر به پیش‌بینی‌های بهتر خواص الکترولیت می‌شوند. استراتژی‌های یادگیری فعال برای انتخاب هوشمندانه‌ی آموزنده‌ترین نقاط داده به منظور آموزش مدل‌های هوش مصنوعی/یادگیری ماشین نویدبخش هستند، که می‌تواند نیاز به مجموعه‌داده‌های عظیم را کاهش داده و فرآیند کشف مواد را تسریع بخشد. توسعه‌ی مدل‌های هوش مصنوعی چندوجهی (multi-modal) که قادر به یکپارچه‌سازی داده‌ها از منابع متنوع، مانند نتایج تجربی، داده‌های شبیه‌سازی و اطلاعات متنی از مقالات علمی هستند، می‌تواند درک جامع‌تری از مواد الکترولیت فراهم کند.

یکپارچه‌سازی هم‌افزای هوش مصنوعی/یادگیری ماشین با تکنیک‌های غربالگری محاسباتی و تجربی با توان بالا (HTS) استراتژی قدرتمندی را برای تسریع شناسایی کاندیداهای الکترولیت امیدوارکننده از میان کتابخانه‌های وسیع مواد ارائه می‌دهد. هوش مصنوعی/یادگیری ماشین می‌تواند با اولویت‌بندی موادی که بالاترین پتانسیل پیش‌بینی‌شده را برای سنتز و آزمایش تجربی دارند، تلاش‌های HTS را هدایت کند و بدین ترتیب تعداد آزمایش‌های مورد نیاز را کاهش دهد. یک فرآیند تکراری حلقه‌بسته، که در آن پیش‌بینی‌های هوش مصنوعی/یادگیری ماشین از طریق آزمایش‌های با توان بالا تأیید می‌شوند و داده‌های حاصل به مدل‌های AI/ML بازخورده می‌شوند، برای بهبود مداوم دقت و قدرت پیش‌بینی‌کننده‌ی آن‌ها حیاتی است. حوزه‌ی کشف مستقل (خودکار) مواد، که شامل یکپارچه‌سازی هوش مصنوعی/یادگیری ماشین با سیستم‌های رباتیک و ابزارهای سنتز و شناسایی خودکار برای ایجاد آزمایشگاه‌های خودگردان (SDLs) است، یک جهت‌گیری آتی تحول‌آفرین را نشان می‌دهد. انتظار می‌رود هوش مصنوعی/یادگیری ماشین با هدایت طراحی آزمایش، انتخاب پارامترهای سنتز، جهت‌دهی به تلاش‌های شناسایی و تجزیه و تحلیل داده‌های حاصل به منظور کشف و بهینه‌سازی تکراری الکترولیت‌های نوین پیل سوختی با خواص مطلوب، نقش محوری در SDLها ایفا کند. این رویکرد پتانسیل آن را دارد که به طور قابل توجهی سرعت نوآوری در فناوری الکترولیت پیل سوختی را تسریع بخشد.

۷. نتیجه گیری

این مقاله مروری، پتانسیل تحول‌آفرین الگوریتم‌های یادگیری عمیق و یادگیری ماشین را در ایجاد انقلابی در توسعه‌ی الکترولیت‌های نوین پیل سوختی برجسته کرده است. هوش مصنوعی/یادگیری ماشین با غلبه بر محدودیت‌های روش‌های تجربی سنتی، پیشرفت‌های قابل توجهی را در پیش‌بینی خواص مواد، بهینه‌سازی عملکرد و طراحی مواد الکترولیت جدید برای انواع مختلف پیل‌های سوختی، از جمله PEMFCها، SOFCها و AFCها، امکان‌پذیر ساخته است. به‌کارگیری الگوریتم‌های متنوع هوش مصنوعی/یادگیری ماشین

، همراه با تکنیک‌های پیشرفته‌ی جمع‌آوری، پیش‌پردازش و اعتبارسنجی داده‌ها، منجر به بهبودهای کمی قابل توجهی در عملکرد فناوری پیل سوختی شده است.

علی‌رغم این موفقیت‌ها، چالش‌هایی در این زمینه باقی مانده است، به‌ویژه در مورد در دسترس بودن و کیفیت داده‌ها، قابلیت تفسیرپذیری مدل‌های پیچیده‌ی هوش مصنوعی/یادگیری ماشین، و منابع محاسباتی قابل توجه مورد نیاز برای تحلیل‌های پیشرفته. پرداختن به این محدودیت‌ها برای بهره‌برداری کامل از پتانسیل هوش مصنوعی/یادگیری ماشین در تسریع کشف و بهینه‌سازی مواد برای پیل‌های سوختی، حیاتی است. با نگاه به آینده، چندین جهت‌گیری آتی امیدوارکننده در حال ظهور هستند. یکپارچه‌سازی یادگیری ماشین آگاه از فیزیک، شبکه‌های عصبی گراف، یادگیری فعال و مدل‌های هوش مصنوعی چندوجهی، نویدبخش ارتقاء دقت و قابلیت تفسیرپذیری هوش مصنوعی/یادگیری ماشین در این حوزه است. هم‌افزایی میان هوش مصنوعی/یادگیری ماشین و غربالگری با توان بالا، رویکردی قدرتمند برای شناسایی و اعتبارسنجی سریع کاندیداهای الکترولیت نوین ارائه می‌دهد. علاوه بر این، ظهور پلتفرم‌های کشف مستقل (خودکار) مواد، این پتانسیل را دارد که سرعت نوآوری در فناوری الکترولیت پیل سوختی را به طور چشمگیری تسریع بخشد. تحقق کامل پتانسیل هوش مصنوعی/یادگیری ماشین در این حوزه‌ی میان‌رشته‌ای، نیازمند همکاری قوی میان دانشمندان مواد، دانشمندان کامپیوتر، شیمی‌دانان و مهندسان است. این متخصصان با همکاری مشترک، می‌توانند از قدرت هوش مصنوعی/یادگیری ماشین برای غلبه بر چالش‌های موجود بهره ببرند و توسعه‌ی نسل بعدی الکترولیت‌های پیل سوختی را به پیش برانند، و بدین ترتیب راه را برای ساخت پیل‌های سوختی کارآمدتر، بادوام‌تر و مقرون‌به‌صرفه‌تر هموار سازند که به آینده‌ی انرژی پایدار و پاک‌تر کمک می‌کنند.

۸. منابع و مراجع

- [۱] D. Su, J. Zheng, J. Ma, Z. Dong, Z. Chen, and Y. Qin. (2023, Application of Machine Learning in Fuel Cell Research. *Energies* 16(11).
- [۲] R. Kaiser, C.-Y. Ahn, Y.-H. Kim, and J.-C. Park, "Towards Reliable Prediction of Performance for Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cells via Machine Learning-Integrated Hybrid Numerical Simulations," *Processes*, vol. 12, p. 1140, 2024.
- [۳] H. Liu, H. Guo, Z. Gao, H. Pan, J. Zhen, J. Linghu, *et al.*, "Applications of artificial intelligence in materials research for fuel cells," *AI & Materials*, vol. 1, pp. 1-50, 2025.
- [۴] Y. Wang, B. Seo, B. Wang, N. Zamel, K. Jiao, and X. C. Adroher, "Fundamentals, materials, and machine learning of polymer electrolyte membrane fuel cell technology," *Energy and AI*, vol. 1, p. 100014. ۲۰۲۰/۰۱/۰۸/۲۰۲۰.
- [۵] M. M. Tellez-Cruz, J. Escorihuela, O. Solorza-Feria, and V. Compañ, "Proton Exchange Membrane Fuel Cells (PEMFCs): Advances and Challenges," *Polymers (Basel)*, vol. 13, Sep 10 2021.



- [۶] S. William, S. Shivank, S. Abhishek, R. Reanna, O. Mohammed Al, S. Janani, *et al.*, "AI-driven design of fluorine-free polymers for sustainable and high-performance anion exchange membranes," *Journal of Materials Informatics*, vol. 5, p. 5, 2025.
- [۷] M. Mahmoud Nasef and M. H. Habaebi, "Machine Learning for Accelerating Development of Ion Conducting Membranes for Fuel Cell Applications," *Journal of Applied Membrane Science & Technology*, vol. 29, pp. 19-40, 03/27 2025.
- [۸] B. Ramasubramanian, R. P. Rao, V. Chellappan, and S. Ramakrishna. (2022, Towards Sustainable Fuel Cells and Batteries with an AI Perspective. *Sustainability* 14.(۲۳)
- [۹] M. Batool, O. Sanumi, and J. Jankovic, "Application of artificial intelligence in the materials science, with a special focus on fuel cells and electrolyzers," *Energy and AI*, vol. 18, p. 100424, 2024/12/01/ 2024.
- [۱۰] E. Tsalapati, C. W. D. Johnson, T. W. Jackson, L. Jackson, D. Low, B. Davies, *et al.*, "Enhancing polymer electrolyte membrane fuel cell system diagnostics through semantic modelling," *Expert Systems with Applications*, vol. 163, p. 113550, 2021/01/01/ 2021.
- [۱۱] Y. Baoyin, Z. Xiaohan, T. Chunmei, W. Ning, and Y. Siyu, "How AI guided the development of green hydrogen production: in the case of solid oxide electrolysis cell?," *Journal of Materials Informatics*, vol. 5, p. 25, 2025.
- [۱۲] M. Szemer, S. Buchaniec, T. Prokop, and G. Brus, "Topology-informed machine learning for efficient prediction of solid oxide fuel cell electrode polarization," *Energy and AI*, p. 100495, 2025.
- [۱۳] R. Xie, R. Ma, S. Pu, L. Xu, D. Zhao, and Y. Huangfu, "Prognostic for fuel cell based on particle filter and recurrent neural network fusion structure," *Energy and AI*, vol. 2, p. 100017, 2020.
- [۱۴] J. Zuo, H. Lv, D. Zhou, Q. Xue, L. Jin, W. Zhou, *et al.*, "Deep learning based prognostic framework towards proton exchange membrane fuel cell for automotive application," *Applied Energy*, vol. 281, p. 115937, 2021.
- [۱۵] L. Vichard, F. Harel, A. Ravey, P. Venet, and D. Hissel, "Degradation prediction of PEM fuel cell based on artificial intelligence," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 45, pp. 14953-14963, 2020.
- [۱۶] Y. Liu, Z. Yang, Z. Yu, Z. Liu, D. Liu, H. Lin, *et al.*, "Generative artificial intelligence and its applications in materials science: Current situation and future perspectives," *Journal of Materiomics*, vol. 9, pp. 798-816, 2023/07/01/ 2023.
- [۱۷] T. Lombardo, M. Duquesnoy, H. El-Bouysidy, F. Årén, A. Gallo-Bueno, P. B. Jørgensen, *et al.*, "Artificial Intelligence Applied to Battery Research: Hype or Reality?," *Chemical Reviews*, vol. 122, pp. 10899-10969, 2022/06/22 2022.
- [۱۸] L. A. Briceno-Mena, G. Venugopalan, J. A. Romagnoli, and C. G. Arges, "Machine learning for guiding high-temperature PEM fuel cells with greater power density," *Patterns*, vol. 2, 2021.
- [۱۹] M. H. Golbabaee, M. Saeidi Varnoosfaderani, A. Zare, H. Salari, F. Hemmati, H. Abdoli, *et al.*, "Performance Analysis of Anode-Supported Solid Oxide Fuel Cells: A Machine Learning Approach," *Materials*, vol. 15, p. 7760, 2022.
- [۲۰] E. Melo, J. Peñafiel, J. Barzola-Monteses, and M. Espinoza-Andaluz, "An Initial Approach About Data Preprocessing Techniques Applied to Polymer Electrolyte

- Fuel Cells: A Case Study," in *Communication, Smart Technologies and Innovation for Society*, Singapore, 2022, pp. 53-64.
- [۲۱] G. D'Silva, E. Mahmood, R. Jervis, and S. Zhou, "Generalised Fault Diagnostics of Polymer Electrolyte Fuel Cells Using Machine Learning," 2025.
- [۲۲] S. Zhang, S. Hess, H. Marschall, U. Reimer, S. Beale, and W. Lehnert, "openFuelCell2: A new computational tool for fuel cells, electrolyzers, and other electrochemical devices and processes," *Computer Physics Communications*, vol. 298, p. 109092, 2024/05/01/ 2024.
- [۲۳] B. Elmegreen, H. F. Hamann, B. Wunsch, T. Van Kessel, B. Luan, T. Elengikal, *et al.*, "MDLab: AI frameworks for carbon capture and battery materials," *Frontiers in Environmental Science*, vol. 11, p. 1204690, 2023.
- [۲۴] H. Tran, K.-H. Shen, S. Shukla, H.-K. Kwon, and R. Ramprasad, "Informatics-Driven Selection of Polymers for Fuel-Cell Applications," *The Journal of Physical Chemistry C*, vol. 127, pp. 977-986, 2023/01/19 2023.
- [۲۵] B. Wang, B. Xie, J. Xuan, and K. Jiao, "AI-based optimization of PEM fuel cell catalyst layers for maximum power density via data-driven surrogate modeling," *Energy Conversion and Management*, vol. 205, p. 112460, 2020/02/01/ 2020.
- [۲۶] R. M. Ghoniem, T. Wilberforce, H. Rezk, S. As'ad, and A. Alahmer, "Boosting Power Density of Proton Exchange Membrane Fuel Cell Using Artificial Intelligence and Optimization Algorithms," *Membranes*, vol. 13, p. 817, 2023.
- [۲۷] M. H. Golbabaei, M. Saeidi Varnoosfaderani, A. Zare, H. Salari, F. Hemmati, H. Abdoli, *et al.*, "Performance Analysis of Anode-Supported Solid Oxide Fuel Cells: A Machine Learning Approach," *Materials (Basel)*, vol. 15, Nov. ۲۰۲۲ ۳
- [۲۸] A. Baldinelli, L. Barelli, G. Bidini, F. Bonucci, and F. C. Iskenderoğlu, "Regarding Solid Oxide Fuel Cells Simulation through Artificial Intelligence: A Neural Networks Application," *Applied Sciences*, vol. 9, p. 51, 2019.
- [۲۹] J. Park and J. Lee, "Performance Prediction of Alkaline Fuel Cell Via Gradient Boosting Algorithm," *ECS Meeting Abstracts*, vol. MA2022-01, p. 1508, 2022/07/07 2022.
- [۳۰] Z. Niu, W. Zhao, H. Deng, L. Tian, V. J. Pinfield, P. Ming, *et al.*, "Generative Artificial Intelligence for Designing Multi-Scale Hydrogen Fuel Cell Catalyst Layer Nanostructures," *ACS Nano*, vol. 18, pp. 20504-20517, 2024/08/06 2024.
- [۳۱] A. Mondal, J. M. Young, T. A. Barckholtz, G. Kiss, L. Koziol, and A. Z. Panagiotopoulos, "Genetic Algorithm Driven Force Field Parameterization for Molten Alkali-Metal Carbonate and Hydroxide Salts," *Journal of Chemical Theory and Computation*, vol. 16, pp. 5736-5746, 2020/09/08 2020.