



Marga van Zundert

De fantastische wetenschap

Een laboratorium gerund door zelflerende robots

Kunstmatige intelligentie duikt overal op, ook in de wetenschap. Algoritmen checken razendsnel hartfilmpjes op afwijkingen. En dat doen ze al zeker zo nauwkeurig als cardiologen. AI meet de omvang van ijsbergen in de oceanen voor klimaatwetenschappers en herkent probleemgokkers in sociaal onderzoek.

We noemen het kunstmatige intelligentie of AI, maar een betere term is *machine learning*. Na het zien van miljoenen hartfilmpjes met het label 'gezond' of 'afwijkend', oordeelt een algoritme in welke categorie een nieuw filmpje het best past. Het populaire ChatGPT schrijft indrukwekkende artikelen, maar ze inhoudelijk snappen, doet het algoritme niet. Het voorspelt vooral uitstekend welk antwoord bij een vraag past, na het lezen van een gigantische hoeveelheid teksten. AI redeneert niet, maar berekent wat bij wat hoort.

In sciencefiction is dat anders. Daar is AI vaak echt intelligent.

Of en wanneer het zelflerende lab een succes is, blijft nog even de vraag

Computerbreinen en robots assisteren niet alleen, ze zijn volwaardig wetenschapper. In de serie *Star Trek* figureert 'Data', een bleke, wat houderige androïde. Data redt meer dan eens zijn onderzoeksteam dat het heelal doorkruist op zoek naar buitenaards leven. De robot merkt als eerste gevaar op, of afwijkend gedrag. Data beschikt bovendien over gigantisch veel kennis en herprogrammeert zo nodig razendsnel een apparaat. In 2001: *A Space Odyssey of Aurora* leidt AI zelfs onderzoekexpedities. Dat loopt echter minder goed af; het kunstbrein keert zich tegen de onderzoekers.

Maakt AI al snel de stap naar zelfstandig onderzoeker? In de chemie, mijn originele vak, is er zowel groot enthousiasme als veel scepsis. De chemie is bezig met een enorme switch. Nu is aardolie nog veruit de belangrijkste grondstof. Er worden medicijnen uit gemaakt, plastics en ingrediënten voor batterijen, zonnecellen en computerchips. Maar over dertig jaar moet alles uit groene, hernieuwbare grondstoffen komen en heel wat duurzamer zijn. Robots die dag en nacht

zelfstandig experimenteren zouden een grote hulp zijn.

In de scheikunde zijn de organisch chemici de 'koks'. Zij pluizen uit hoe je een stof kunt maken: de synthese. Dikke studieboeken zijn er over vol geschreven. Maar of een idee voor een nieuwe stof werkt, of stof A met B inderdaad C of toch D oplevert, blijft uitproberen. Chemie laat zich niet altijd voorspellen.

Tijdens mijn afstuderen op het lab in Eindhoven bracht Jef vaak uitkomst. Een chemicus met een indrukwekkende schat aan ervaringskennis in synthese. Wanneer het niet lukte, ging je bij Jef langs. 'Heb je al aan een Diels-Alder route gedacht?' 'Voeg een procentje ethylacetaat toe, dan lost het wellicht wel op.'

De Poolse chemicus Bartosz Grzybowski, hoogleraar bij het Zuid-Koreaanse Center for Algorithmic and Robotized Synthesis, heeft 'Jef' inmiddels gedigitaliseerd. Grzybowski verzamelde meer dan vijftigduizend 'regels' voor synthese. Die kun je raadplegen in het programma Synthia. Zeg welke stof je wilt maken en er rolt de waarschijnlijk meest efficiënte syntheseroute uit, inclusief nog wat tips voor alternatieven. Ook zijn er AI-tools beschikbaar die je helpen om in korte tijd de optimale reactietemperatuur, oplosmiddel of grondstofverhoudingen voor je reactie te vinden.

Combineer je alle chemie-AI met robots die kunnen pipetteren, mengen, roeren, opzuiveren, en analyseren, dan heb je een zelflerend lab dat autonoom en razendsnel syntheseonderzoek doet, zo is het idee. Hoogleraar Energietechniek Christoph Bräbe bouwde in Erlangen, Duitsland, al een robotsysteem dat op eigen houtje de samenstelling van een zonnecel optimaliseert wanneer je er een nieuwe component aan toevoegt. En dat doet het AI-systeem binnen veertig tests, terwijl een menselijke collega er duizend nodig heeft.

Google Deep Mind en Lawrence Berkeley National Laboratory bouwden een eerste 'zelflerend lab', het A-lab (A van Autonoom). Dat leek een succes. Ze meldden in *Nature* veertig nieuwe materialen. Maar er kwam al snel zware kritiek. De analyses klopten niet, aldus collega's. Er was feitelijk niets nieuws ontdekt.

Of en wanneer het zelflerende lab een succes is, blijft dus nog een vraag. ChatGPT denkt desgevraagd dat het in tien tot twintig jaar is gepiept. Maar het zou kunnen dat het algoritme wat veel sciencefiction heeft gelezen.