

Economic Microsoft zet met UvA kunstmatige intelligentie in

Slim lab zoekt moleculen

Microsoft zet in op kunstmatige intelligentie om het gedrag van moleculen te onderzoeken. De techgigant komt naar Amsterdam voor nieuwe kennis over klimaatkwesties, medicijnproductie en chemie.

Herman Stil

AMSTERDAM

“Met kunstmatige intelligentie, zelflerende algoritmes en machineren kunnen we het onderzoek naar het gedrag van moleculen enorm versnellen,” zegt Max Welling, hoogleraar machine learning aan de Universiteit van Amsterdam. “Zo kunnen we veel sneller de eigenschappen van moleculen vaststellen. Daarmee kan je chemische en biologische processen beter simuleren.”

Met die informatie kunnen ook nieuwe moleculen voor bepaalde toepassingen worden bedacht. “Hoe meer je begrijpt, hoe beter je kan simuleren, hoe meer toepassingen er mogelijk zijn. Ik hoop dat we op termijn een voorspellend systeem opzetten dat ook in staat is om moleculen met bepaalde elementen digitaal te ontwerpen.”

Het Amsterdamse Microsoft Research Lab begint in september met een tiental onderzoekers. Welling zal het onderzoekscentrum, waarvoor nog een goede plek wordt gezocht, leiden. Welling blijft daarnaast onder meer betrokken bij het mede door hem opgezette AM-lab, dat zich met 50 onderzoekers bezighoudt met onderzoek naar kunstmatige intelligentie en hij blijft actief als hoogleraar.

De Amerikanen hebben voor Amsterdam gekozen vanwege de goede naam die het onderzoek naar kunstmatige intelligentie in de hoofdstad heeft opgebouwd. Volgens onderzoek van McKinsey is de stad na Londen en Stockholm het belangrijkste Europese centrum op het gebied van kunstmatige intelligentie en onderscheidt de stad zich vooral op innovatie.

Google Brain en Qualcomm vestigden al eerder onderzoekslabs voor het vakgebied in Amsterdam en bigdataonderzoeker Databricks opende twee jaar geleden zijn Europese hoofdkantoor hier.

Talent

“Er is enorm veel talent op dit vlak in Amsterdam,” zegt Welling. “UvA, VU, HvA en het CWI hebben vroeg ingezien dat dit een belangrijk vakgebied is en de overheid heeft vroeg ingezet

op het onderwerp. Bovendien is er al veel samenwerking tussen wetenschap, overheid en bedrijfsleven op het gebied van kunstmatige intelligentie.”

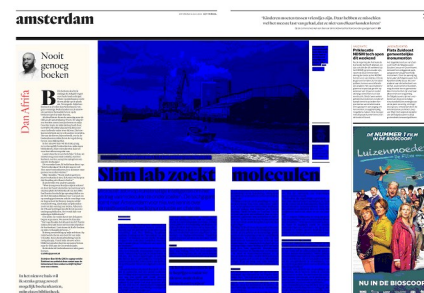
Welling is ook een van de grondleggers van innovatiecentrum Icai, waar onder meer onderzoek op het gebied van kunstmatige intelligentie wordt gedaan voor bedrijven als Elsevier, Booking, Ahold Delhaize en TomTom. Doel is op basis van grote hoeveelheden data en voorspellende algoritmes hun activiteiten te ondersteunen. “Er zit ook een hoop farmaonderzoek in de stad sinds medicijnagentschap EMA hier is gevestigd.”

Welling (52) heeft een achtergrond in theoretische natuurkunde maar is al twintig jaar een autoriteit op het gebied van kunstmatige intelligentie en de toepassing ervan in verschillende vakgebieden. De laatste jaren zette hij voor Qualcomm in Amsterdam hun AI-lab op voor toepassingen in communicatietechnologie en computerchips, nadat Welling in 2017 het onder meer door hem opgerichte AI-onderzoeksbureau Scyfer aan de Amerikanen had verkocht.

“Ik miste de natuurwetenschappen. In de tweede helft van mijn carrière wil ik daar meer mee bezig gaan, met een focus op klimaattechnologie. Ik ga nu terug naar mijn wortels en combineer dat met kunstmatige intelligentie.”

Klimaat

Het Amsterdamse lab sluit aan op moleculair onderzoek dat Microsoft in het Engelse Cambridge doet. “Dat richt zich meer op moleculair onderzoek op het gebied van biologie en toepas-



singen voor medicijnontwikkeling. Wij op klimaat. Maar het fundament is hetzelfde.” Zo was Cambridge betrokken bij de ontwikkeling van covid-tests.

Door op basis van grote hoeveelheden gegevens en statistiek met zelflerende, begrijpende en zelfstandig opererende algoritmes eigenschappen van moleculen te meten en analyseren, kan het onderzoek naar toepassingen enorm worden versneld.

“Moleculen zijn ongelofelijk ingewikkeld. Je kunt hun eigenschappen nabootsen op basis van de wetten van de natuurkunde. Maar als je dat met klassieke computersoftware doet, worden simulaties ontzettend duur en traag. Met traditioneel onderzoek raken we nu aan grenzen.”

Het is volgens Welling nog te vroeg om specifieke toepassingen van de onderzoeksuitkomsten te bepalen. “Ik hoop over tien jaar moleculen beter te begrijpen zodat we nieuwe materialen kunnen ontwerpen om de groene economie te voeden, nieuwe medicijnen ontwikkelen voor ziektes die we nu niet kunnen genezen, of chemische processen verbeteren.”

Milieuvriendelijk plastic

Zo zou het onderzoek kunnen helpen bij het produceren van milieuvriendelijker plastics. Of

een minder energieslurpende productiemethode van waterstof als milieuvriendelijk alternatief voor fossiele brandstoffen. “Water splitsen in waterstof en zuurstof kost met elektrolyse nu enorm veel stroom. Als je een katalysator vindt om die energiebehoefte te verminderen, vergroot je de mogelijkheid om waterstof in feite als batterij te gebruiken.”

“Je kunt ook denken aan toepassingen om kooldioxide uit de lucht te halen of schonere kunstmest te maken. Die processen zijn verouderd, kosten veel energie, en je produceert er veel CO₂ mee. Daar kunnen we met dit lab betere chemische processen voor ontwikkelen.”

Aan voorspellingen waagt hij zich niet graag. “We zullen continu horizonnen verleggen. Moleculen helemaal begrijpen zou mooi zijn, maar daar zijn we nog wel twintig jaar mee bezig. En hun gedrag helemaal voorspellen, zal ons nooit lukken. Dat kan alleen de natuur zelf.”

‘Ik hoop moleculen beter te begrijpen zodat we nieuwe materialen kunnen ontwerpen’



Max Welling

Hoogleraar machine learning aan de UvA en VP Technologies bij Qualcomm.



→ **Productie van kunstmest, zoals hier in de haven, kan in de toekomst mogelijk met minder CO₂-uitstoot.** FOTO

BERLINDA VAN DAM/HH