

# **Generatiivisen tekoälyn hyödyntäminen materiaalitieteessä**

TkK-tutkielma  
Turun yliopisto  
Materiaalitekniikan laitos  
Teknillinen tiedekunta  
2025  
Sanni Grönroos

Turun yliopiston laatujärjestelmän mukaisesti tämän julkaisun alkuperäisyys on tarkastettu Turnitin OriginalityCheck -järjestelmällä.

Kandidatutkielma

**Oppiaine:** Materiaalitekniikka

**Tekijä:** Sanni Grönroos

**Otsikko:** Generatiivisen tekoälyn hyödyntäminen materiaalitieteessä

**Ohjaaja:** FM Matilda Sipilä

**Sivumäärä:** 20 sivua

**Päivämäärä:** 5.5.2025

Tekoäly on yksi nykyajan tietotekniikan keskeisimmistä sovelluksista, jota hyödynnetään yhä useammalla tieteenalalla ja teollisuuden sektorilla. Viime vuosina erityisesti generatiivinen tekoäly on noussut merkittävään rooliin, sillä se kykenee tuottamaan uutta sisältöä suurten tietoaaineistojen perusteella. Tässä kandidaatintutkielmassa tarkastellaan generatiivisen tekoälyn (*engl.* generative artificial intelligence, GenAI) mahdollisuuksia ja haasteita materiaalitieteessä. Generatiivinen tekoäly viittaa tekoälymalleihin, jotka kykenevät tuottamaan uutta sisältöä suurista tietomassoista oppimansa perusteella.

Tutkielman tavoitteena on selvittää, millä tavoin generatiivista tekoälyä voidaan hyödyntää uusien materiaalien suunnittelussa, rakenteiden mallintamisessa ja laskennallisessa simuloinnissa ja millaisia vaikutuksia sillä voi olla materiaalitutkimuksen tehokkuuteen, kustannuksiin ja kestävyYTEEN. Tutkielma on kirjallisuuskatsaus, jossa analysoidaan ajankohtaista tutkimusaineistoa sekä esitetään esimerkkitapauksia alan sovelluksista.

Työssä tarkastellaan tekoälyn toimintaperiaatteita, erityisesti transformer-pohjaisia malleja kuten GPT ja niiden soveltamista materiaalitieteen kontekstissa. Esimerkkitapauksissa esitetään, miten generatiivista tekoälyä on hyödynnetty esimerkiksi muodonmuistipolymeerien, bioinspiroitujen rakenteiden ja korkean entropian metalliseosten suunnittelussa. Lisäksi tarkastellaan, kuinka tekoälyä voidaan käyttää CIF-tiedostojen luomiseen kiteisten materiaalien rakenteiden mallintamiseksi. Tulokset osoittavat, että tekoäly voi tuottaa merkittäviä parannuksia materiaalien ominaisuuksiin, kuten esimerkiksi vetolujuuteen. Tekoäly myös nopeuttaa materiaalikehitystä ilman fyysisiä kokeita.

Tutkimusten mukaan generatiivinen tekoäly voi merkittävästi täydentää perinteisiä tutkimusmenetelmiä ja toimia tehokkaana suunnittelutyökaluna erityisesti datalähtöisissä sovelluksissa. Samalla havaitaan useita haasteita, kuten koulutusaineiston laadun ja laajuuden merkitys, tekoälymallien läpinäkyvyyden puute, sekä ympäristölliset ja eettiset kysymykset. ChatGPT:n kaltaiset mallit voivat tukea materiaalitutkijoita esimerkiksi koodin kirjoittamisessa tai alustavien rakenteiden luonnissa, mutta niiden käyttö vaatii asiantuntijan ohjausta ja kriittistä arviointia. Tämän perusteella generatiivinen tekoäly tarjoaa lupaavan, mutta vielä kehittyvän työkalun materiaalitieteen tutkimukseen ja tuotekehitykseen.

**Avainsanat:** generatiivinen tekoäly, materiaalitiede, uusien materiaalien kehitys, tekoälyn sovellukset, rakennesuunnittelu

# Sisällysluettelo

<b>1</b>	<b>Johdanto</b>	<b>4</b>
<b>2</b>	<b>Generatiivinen tekoäly</b>	<b>6</b>
2.1	Määritelmä	6
2.2	Toimintaperiaate	7
2.3	Historia	8
2.4	Sovelluskohteet eri aloilla	10
<b>3</b>	<b>Transformer-mallit ja ChatGPT</b>	<b>12</b>
3.1	Neuroverkot	12
3.2	Transformer-neuroverkot	13
3.3	ChatGPT	14
<b>4</b>	<b>Esimerkkejä generatiivisen tekoälyn käytöstä materiaalitieteessä</b>	<b>16</b>
4.1	Uusien materiaalien kehittäminen	16
4.2	CIF-tiedostot	18
4.3	Mekaaninen ja bioinspiroitu suunnittelu	19
<b>5</b>	<b>Päätelmät ja pohdinta</b>	<b>21</b>
	<b>Lähteet</b>	<b>24</b>

# 1 Johdanto

Tekoäly (*engl.* artificial intelligence, AI) on viime vuosikymmeninä noussut keskeiseksi teknologiseksi edistysaskeleeksi, joka vaikuttaa laajasti eri tieteenaloihin ja teollisuuden sektoreihin. Tekoäly viittaa järjestelmiin, jotka kykenevät suorittamaan tehtäviä, jotka perinteisesti vaatisivat inhimillistä älykkyyttä, kuten oppimista, ongelmanratkaisua ja päättelyä. Tekoälyteknologiat vaihtelevat koneoppimisalgoritmeista sääntöpohjaisiin järjestelmiin ja niiden sovelluskohteet ulottuvat esimerkiksi lääketieteestä eri teollisuuden aloihin.

Yksi tekoälyn kehittyneimmistä osa-alueista on generatiivinen tekoäly (*engl.* generative AI, GenAI), joka pystyy tuottamaan uutta sisältöä oppimalla datan rakenteita ja ominaisuuksia suurista tietoaaineistoista. Generatiivinen tekoäly on osoittautunut tehokkaaksi työkaluksi erityisesti tekstin, kuvien ja äänen tuottamisessa, mutta sen potentiaali ulottuu merkittävästi myös luonnontieteiden sovellusalueille, kuten materiaalitieteeseen.

Materiaalitiede on monitieteinen tutkimusala, joka yhdistää fysiikkaa, kemiaa, konetekniikkaa ja muita aloja tutkiakseen materiaalien ominaisuuksia, rakenteita ja käytännön sovelluksia. Se on myös esimerkki tutkimusalasta, jossa tekoäly voi tarjota merkittäviä etuja ja hyötyjä. Materiaalitutkimuksessa pyritään esimerkiksi kehittämään kevyempiä ja vahvempia materiaaleja, parantamaan energiatehokkuutta, löytämään vaihtoehtoja kriittisille raaka-aineille ja edistämään kiertotaloutta kestäväen kehityksen tavoitteiden mukaisesti. Nykypäivän haasteita materiaalitieteessä ovat muun muassa uusien energiateknologioiden materiaalitarpeet sekä ilmastonmuutoksen hillintään tähtäävien ratkaisujen kehittäminen.

Perinteisesti materiaalitieteen tutkimus ja materiaalien kehitys ovat pitkälti perustuneet kokeellisiin menetelmiin sekä laskennallisiin simulaatioihin, jotka vaativat runsaasti resursseja ja aikaa. Generatiivisen tekoälyn hyödyntäminen voi tarjota uudenlaisen lähestymistavan materiaalien suunnitteluun ja optimointiin, mikä voi nopeuttaa innovaatioita ja parantaa materiaalien suorituskykyä, tehden materiaalien suunnittelusta ja optimoinnista entistä tehokkaampaa.

Aihe on ajankohtainen, koska tekoälyn kehitys on juuri nyt siirtynyt vaiheeseen, jossa sen soveltaminen tieteelliseen tutkimukseen ja käytännön ongelmien ratkaisemiseen on mahdollista aiempaa laajempaa ja tehokkaampaa. Erityisesti generatiivisen tekoälyn tarjoamat

mahdollisuudet voivat nopeuttaa ja tehostaa materiaalien kehittämistä ja siten edesauttaa vastaamaan globaalin kestävän kehityksen haasteisiin.

Tässä tutkielmassa tarkastellaan, generatiivisen tekoölyn mahdollisuuksia materiaalitieteessä. Työssä käsitellään, kuinka tekoölyä voidaan hyödyntää esimerkiksi uusien materiaalien suunnittelussa, CIF-tiedostojen automaattisessa luonnissa sekä bioinspiroitujen rakenteiden optimoinnissa ja lisätyn valmistuksen kehittämisessä. Tavoitteena on osoittaa, miten generatiivinen tekoöly voi täydentää perinteisiä materiaalitutkimuksen menetelmiä, sekä tukea materiaalitieteen kehitystä kohti kestävämpiä ja innovatiivisempia ratkaisuja. Työssä on käytetty ChatGPT-tekoölysovellusta apuna lähdeaineiston kääntämisessä suomen kielelle sekä tekstin kielellisen sujuvuuden tarkistamisessa.

## 2 Generatiivinen tekoäly

### 2.1 Määritelmä

Vaikka tekoälyä on tutkittu laajasti, sille ei ole olemassa yhtä yleisesti hyväksyttyä määritelmää. Se yhdistetään kuitenkin usein automaatioon ja digitalisaatioon, ja sekoitetaan helposti robotiikkaan. Pohjimmiltaan kuitenkin kyseessä on vain ohjelmisto ilman fyysistä muotoa, vaikka sitä voidaan hyödyntää robottien ohjaamisessa. [1]

Tekoälyä pidetään yleisesti tietojenkäsittelytieteen osana ja sen tavoitteena on kehittää ohjelmistoja suorittamaan tehtäviä, jotka tavallisesti edellyttävät inhimillistä älykkyyttä: kuvantunnistusta, puheen ymmärtämistä, päätöksentekoa ja kielten kääntämistä. Richin (1986) mukaan tekoäly on tutkimusala, jossa keskitytään luomaan monimutkaisia ongelmia ratkaisevia järjestelmiä [2]. Nämä järjestelmät kykenevät käsittelemään ja jäsentämään tietoa tehokkaasti, usein ihmisten kognitiivisia prosesseja jäljittelemällä.

Toisaalta Konga (2023) määrittelee tekoälyä tietokoneeksi tai ohjelmaksi, jotka voivat suorittaa älykkäitä tehtäviä, missä vaaditaan ihmisten kaltaisia oppimis- ja ongelmanratkaisukykyjä [1]. Toisin kuin perinteinen automaatio, tekoäly pyrkii jäljittelemään ihmisälyä algoritmien ja datalähtöisen oppimisen avulla, hyödyntäen monimutkaisia ohjelmistorakenteita ja edistynyttä teknologiaa.

Valtioneuvoston (2018) määritelmän mukaan tekoäly mahdollistaa sen, että koneet, laitteet, ohjelmistot, järjestelmät ja palvelut voivat toimia tilanteeseen ja tehtävään sopivalla loogisella tavalla. Tämä määritelmä ei edellytä ihmismäistä ajattelua tai tietoisuutta, vaan ainoastaan ulkoa päin katsottua järkevää toimintaa. Jotta tekoälyä voidaan pitää älykkäänä, sen on kyettävä havaitsemaan ympäristön muutoksia ja reagoitava niihin asianmukaisesti sekä kyettävä oppimisen avulla itsenäisesti ratkaisemaan erilaiset ongelmat. [3]

Tekoäly voidaan luokitella eri tavoin sen toimintaperiaatteiden ja käyttötarkoitusten perusteella. Yksi tapa on jakaa tekoäly kapeaan, vahvaan ja supertekoölyyn. Kapea tai heikko tekoäly (*engl.* weak, below human-level AI) on suunniteltu suorittamaan tiettyjä tehtäviä tehokkaasti, mutta se ei kykene mukautumaan uusiin tilanteisiin. Vahva tekoäly (*engl.* strong human-level AI) pyrkii saavuttamaan ihmisen tasoisen älykkyyden ja mukautumaan eri tehtäviin itsenäisesti. Supertekoäly (*engl.* artificial super intelligence, above human level AI) puolestaan ylittäisi ihmisen älykkyyden ja pystyisi ratkaisemaan äärimmäisen monimutkaisia

ongelmia itsenäisesti. Nykyiset tekoölyratkaisut perustuvat kuitenkin edelleen niin sanottuun heikkoon tekoölyyn [1]. Heikot tekoölyjärjestelmät on ohjelmoitu toimimaan vain tietyissä ennalta määrätyissä tehtävissä ja tiettyjen raamien sisällä, eivätkä ne kykene soveltamaan osaamistaan muihin tehtäviin [1]. Esimerkiksi puheentunnistukseen kehitetty tekoöly ei osaa analysoida lääketieteellisiä kuvia, eikä itseohjautuvaa ajoneuvoa ohjaava tekoöly pysty luomaan realistisia tekstikäännöksiä. Samoin yleisimpiin kysymyksiin kehitetty asiakaspalveluchatbot ei pysty optimoimaan tuotantoprosesseja tehtaassa tai hallitsemaan toimitusketjun logistiikkaa.

Generatiivinen tekoöly tarkoittaa yhtä tekoölymalliluokkaa, jossa mallit on suunniteltu tuottamaan uutta sisältöä. Ero generatiivisen tekoölyn ja perinteisen tekoölyn välillä on, että perinteinen tekoöly ei yleensä luo uutta sisältöä, vaan analysoi ja tekee päätöksiä valmiiden sääntöjen ja algoritmien perusteella, keskittyy erityisesti luokitteluun, ennustamiseen ja tunnistamiseen. Generatiivinen tekoöly luo opittujen mallien rakenteiden pohjalta omaperäistä uutta sisältöä suurista data-aineistoista. Se pystyy tuottamaan esimerkiksi tekstiä ja ääntä, luomaan kuvia ja videoita sekä kirjoittamaan koodia. Se toimii käyttäen koneoppimistekniikkaa, erityisesti syväoppimista ja neuroverkkoja. [4]

## 2.2 Toimintaperiaate

Tekoölymallien kehittyminen edellyttää suuria aineistoja, joiden avulla ne oppivat tunnistamaan kuvioita ja yhteyksiä. Generatiivinen tekoöly hyödyntää esimerkiksi vahvistusoppimista (*engl.* reinforcement learning, RL) ja multimodaalisia lähestymistapoja parantaakseen kykyään tuottaa uutta dataa. Sen toiminta perustuu suurista tietomassoista oppimiseen ja todennäköisimpien seurausten ennustamiseen, esimerkiksi tekstin jatkamisessa tai kuvan muodostamisessa. Kun tekoöly saa syötteen, kuten tekstikehotteen tai kuvan, se analysoi sen taustalla olevan tarkoituksen ottaen huomioon asiayhteyden, jotta se voi määrittää tavoitellun lopputuloksen. Generatiiviset tekoölymallit koulutetaan aluksi laajoilla aineistoilla, jolloin ne oppivat tunnistamaan monimutkaista informaatiota ja tuottamaan sisältöä ihmismäisellä tavalla. Prosessissa tekoöly hyödyntää opittuja malleja ja todennäköisyyslaskentaa ennustaakseen seuraavan sanan tai kuvapikselin, luoden näin asiayhteyden sopivaa sisältöä.

Generatiivisen tekoölyn kehitykseen liittyy useita haasteita, kuten laajojen ja monimuotoisten koulutusaineistojen saatavuus ja niiden laadun varmistaminen. Lisäksi laskennalliset resurssivaatimukset sekä niin sanottu tilan romahdus (*engl.* mode collapse) -ongelma on yksi

generatiivisen tekoälyyn liittyvistä haasteista, jossa malli ei onnistu tuottamaan riittävän monipuolista sisältöä [4]. Käytännössä tämä tarkoittaa, että vaikka malli olisi koulutettu laajoilla aineistoilla, sen tuottama sisältö voi silti olla vain yksipuolista ja toistaa samoja tiettyjä kaavoja ja tyylejä. Myös generatiivisten mallien tulosten tulkittavuus ja läpinäkyvyys ovat suuria haasteista, erityisesti kriittisillä sovellusalueilla [4].

Kehittyneimpien tekoälymallien kouluttamiseen käytetään vahvistusoppimista, joka auttaa mallia optimoimaan lopputulostensa laatua palautteen perusteella [5]. Se havainnoi ympäristöä, valitsee ja suorittaa toiminnon sekä etenee seuraavaan tilanteeseen joko palkkion saadessaan tai ilman sitä. Prosessia toistamalla se oppii siihen, mitkä toiminnot tuottavat eniten palkintoja ja sitä kautta parhaan lopputuloksen. Vahvistusoppimisen tavoitteena on löytää tehokkain toimintamalli, joka maksimoi palkkiot pitkällä aikavälillä [6].

Nykyaikaiset tekoälymallit yhdistävät ja käyttävät useita eri tietotyyppisiä, jolloin ne pystyvät luomaan tekstin lisäksi myös kuvia, ääntä ja videoita. Tällainen useita tietotyyppisiä yhdistävä multimodaalinen tekoäly on lähestymistapa parantaa mallin kykyä tuottaa monipuolista sisältöä. Multimodaalinen tekoäly voi esimerkiksi analysoida ensin kuvaa ja tuottaa siitä tekstiä tai luoda äänen perusteella vastaavasti siitä visuaalisen esityksen.

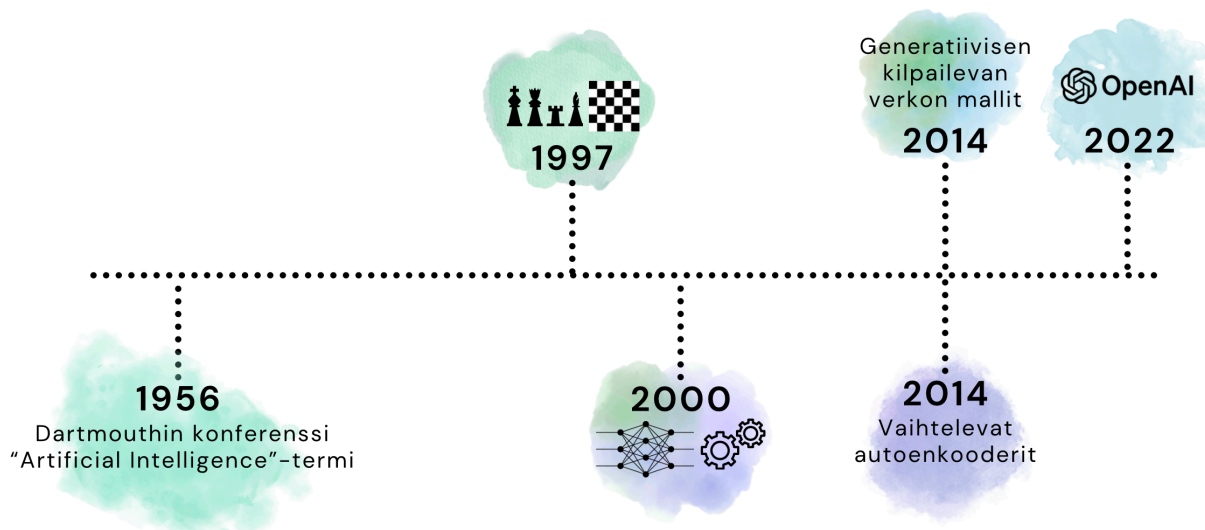
Jotta tekoälymallit voisivat tehokkaasti sopeutua muuttuviin olosuhteisiin ja käsittelemään reaali maailman haasteita, niiden on kyettävä jatkuvaan oppimiseen (*engl.* continual learning) ja sovellettava tietoa. Jatkuva oppiminen mahdollistaa tekoälyä sopeutumaan ja kehittymään ajan mittaan, mikä tarkoittaa tiedon lisäämistä ja mukauttamista ilman, että aikaisemmin opitut tiedot menetetään. Kuitenkin yksi suurimmista haasteista on niin sanottu katastrofaalinen unohtaminen (*engl.* catastrophic forgetting), jossa uusien taitojen oppiminen heikentää vanhojen taitojen suorituskykyä. Ratkaisuna tähän on kehitetty erilaisia menetelmiä, kuten tietojen uudelleenkäyttö (*engl.* replay-based approach), vakiointiin perustuvat menetelmät (*engl.* regularization-based approach) ja arkkitehtuuriratkaisut (*engl.* architecture-based approach). [7]

## 2.3 Historia

Tekoälyn tutkimuksen voidaan sanoa alkaneen vuonna 1956 Dartmouthin konferenssissa, Yhdysvalloissa. Tapahtumaa pidetään tekoälyn synnynpaikkana, sillä konferenssissa otettiin käyttöön termi Artificial Intelligence. Konferenssin tutkijat kehittivät ensimmäisen tekoälyohjelman, nimeltään Logic Theorist, jonka tarkoituksena oli todistaa matemaattisia



lausekkeita. Ohjelma ei saanut konferenssissa odotetunlaista huomiota, sillä ajatus itsenäisesti ajattelevasta koneesta herätti tuohon aikaan paljon epäilyksiä ja vieroksuntaa. [1] Kuvassa 1 esitetään tekoälyn keskeisiä tapahtumia.



Kuva 1. Tekoälyn kehityksen keskeisiä tapahtumia: Dartmouthin konferenssi (1956), Deep Blue voittaa shakin maailmanmestarin (1997), neuroverkkojen ja koneoppimisen kehitys edistyi huomattavasti 2000-luvulla, generatiivisen kilpailevan verkon mallit ja vaihtelevat autoenkooderit (2014), OpenAI:n ChatGPT julkaistiin yleisön käyttöön (2022).

Useat konferenssin johtavat tutkijat ennustivat koneiden saavuttavan ihmisälykkyyden yhden sukupolven aikana [8]. Esimerkiksi Herbert Simon ennusti vuonna 1958, että tietokoneesta tulisi shakin maailmanmestari kymmenen vuoden kuluessa. Tämä toteutui kuitenkin vasta vuonna 1997, kun tekoäly Deep Blue kukisti shakin maailmanmestarin ensimmäistä kertaa [8]. Samoin vuonna 1965 Simon arvioi, että 20 vuoden kuluessa koneet suorittaisivat kaikki ihmisen tehtävät [8]. Näistä korkeista odotuksista huolimatta ensimmäisiä tekoälyohjelmia rajoittivat niiden laitteistorajoitukset, kuten laskentateho sekä muisti [1]. Tekoälytutkimus hiljeni hetkeksi näiden rajoitusten vuoksi ja vasta 2000-luvulle siirryttäessä alettiin saada vahvempia näyttöjä tekoälystä ja sen mahdollisuuksista. Tekoälytutkimus nopeutui koneoppimisen ja neuroverkkojen kehittymisen myötä [8]. Parannellut algoritmit, lisääntynyt laskennallinen teho ja suurempi datan saatavuus mahdollistivat läpimurrot luonnollisen kielen käsittelyssä, tietokonenäössä ja robotiikassa [1].

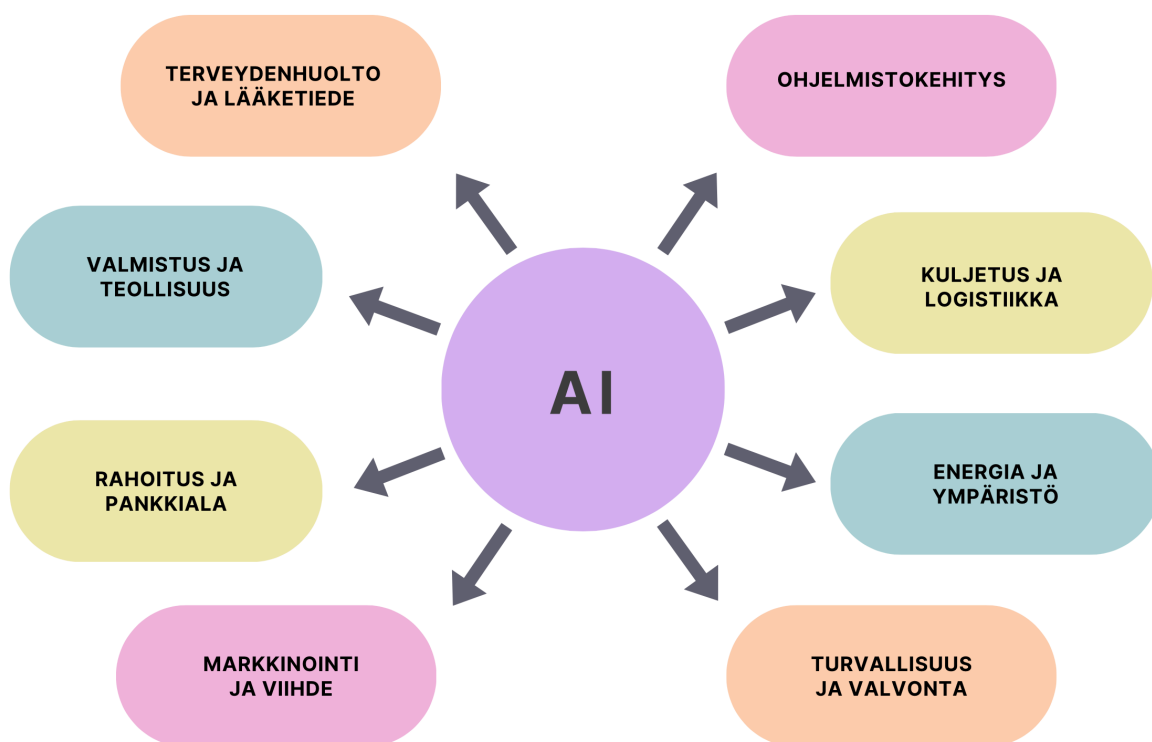
Ensimmäiset generatiiviset tekoälyt perustuivat tilastollisiin menetelmiin kuten Markovin piilomalleihin ja Bayesin verkkoihin, joita käytettiin erityisesti luonnollisen kielen käsittelyssä ja kuvantunnistuksessa. Neuroverkot alkoivat yleistyä 1980-luvulta lähtien generatiivisissa

tehtävissä ja autoenkooderit (*engl.* autoencoders, AE) sekä rajoitetut Boltzmannin koneet (*engl.* restricted Boltzmann machine, RBM) toimivat perustana myöhemmille malleille. [5]

Ian Goodfellow esitteli 2010-luvulla generatiivisen kilpailevan verkon mallit (*engl.* generative adversarial networks, GANs), jotka loivat uuden standardin korkealaatuisten kuvien ja datan synteetille. Samoihin aikoihin kehittyivät myös vaihtelevat autoenkooderit (*engl.* variational autoencoders, VAEs), jotka toivat mukanaan todennäköisyyksiin perustuvia lähestymistapoja ja mahdollistivat monimuotoisemman datan generoinnin. Viime vuosina diffuusiomallit ovat nousseet esiin parantaen generatiivisten mallien laatua ja monikäyttöisyyttä. Samalla suuret kielimallit, kuten OpenAI:n GPT ja Googlen BERT, ovat laajentaneet generatiivisen tekoälyn sovelluksia erityisesti kielen prosessoinnissa. [5]

## 2.4 Sovelluskohteet eri aloilla

Generatiivisesta tekoälystä on tullut mullistava teknologia useilla eri toimialoilla, kuten esimerkiksi terveydenhuollossa, teollisuudessa, rahoitusalaalla, viihteessä, markkinoinnissa ja ohjelmistokehityksessä. Kuvassa 2 esitetään tekoälyn keskeiset sovelluskohteet eri toimialoilla.



Kuva 2. Tekoälyn keskeiset sovelluskohteet eri toimialoilla.

Terveydenhuollossa tekoälyä käytetään esimerkiksi klinisen dokumentaation automatisointiin, mikä tukee hoitoprosessien hallintaa. Terveydenhuollon ammattilaiset, jotka joutuvat usein käyttämään runsaasti aikaa muistiinpanojen tekemiseen, voivat hyödyntää tekoälyä luonnosten laatimiseen klinisistä muistiinpanoista nopeasti ja tarkasti [9]. Generatiiviset mallit eivät ainoastaan tuota luonnoksia klinisistä muistiinpanoista, vaan voivat myös parantaa niiden laatua tunnistamalla keskeisiä tietoja ja korostamalla potilaan hoidon kannalta olennaisia asioita [10]. Näin tekoäly vähentää manuaalisen korjauksen tarvetta ja vapauttaa ammattilaisten aikaa keskittymään potilastyöhön [10]. Esimerkiksi tekoälyä terveydenhuollon aloilla hyödyntävä yritys Nuance tunnetaan erityisesti klinisistä puheentunnistus- ja tekoälyratkaisuksistaan, jotka on suunniteltu parantamaan dokumentaation tarkkuutta, keventämään hallinnollista kuormitusta ja tehostamaan potilashoitoa [9].

Autoteollisuudessa tekoälyä käytetään itseajavien autojen kehityksessä, kuten kuvantunnistuksessa ja ajotilanteiden simuloinnissa. Esimerkiksi DriveGPT parantaa päätöksentekoa autonomisissa ajoneuvoissa ja valmistavassa teollisuudessa tekoäly nopeuttaa suunnittelua ja tarkastuksia. CAD-ohjelmat voivat tuottaa automaattisesti alustavia malleja, joita insinöörit viimeistelevät. NASA on hyödyntänyt tekoälyä avaruuslaitteiden suunnittelussa keventääkseen rakenteita ja parantaakseen energiatehokkuutta. Vaikka generatiivisen tekoälyn laajamittainen soveltaminen voi aiheuttaa huolta hiilijalanjäljestä, se myös tukee positiivisesti yrityksiä hiilineutraalisuustavoitteiden saavuttamisessa. Energia-alalla tekoäly auttaa optimoimaan tuuli- ja aurinkovoimaloiden suunnittelua sekä ennustamaan yritysten hiilidioksidipäästöjä. Esimerkiksi C3.ai-yritys on kehittänyt tekoälyratkaisun, joka tukee yritysten kestävän kehityksen tavoitteita tuottamalla ESG-vastuullisuusraportteja (*engl.* environmental, social and governance). [11]

Generatiivista tekoälyä hyödynnetään yhä enemmän myös rahoitusosalalla, missä se tukee sijoituspäätöksiä ja markkinaennusteita. Erityisesti generatiiviset mallit, kuten ehdolliset generatiiviset vastustavat verkot (*engl.* conditional generative adversarial networks, cGAN), ovat osoittautuneet tehokkaiksi rahoitusmarkkinoiden monimutkaisten dynamiikkojen mallintamisessa ja tulevien hintaliikkeiden ennustamisessa. Näiden mallien avulla voidaan analysoida laajoja tietomääriä, tunnistaa piileviä markkinatrendejä ja optimoida sijoitusstrategioita. Lisäksi tekoäly rahoitusosalalla auttaa riskienhallinnassa tarjoamalla tarkempia arvioita markkinoiden kehityksestä. [12]

### 3 Transformer-mallit ja ChatGPT

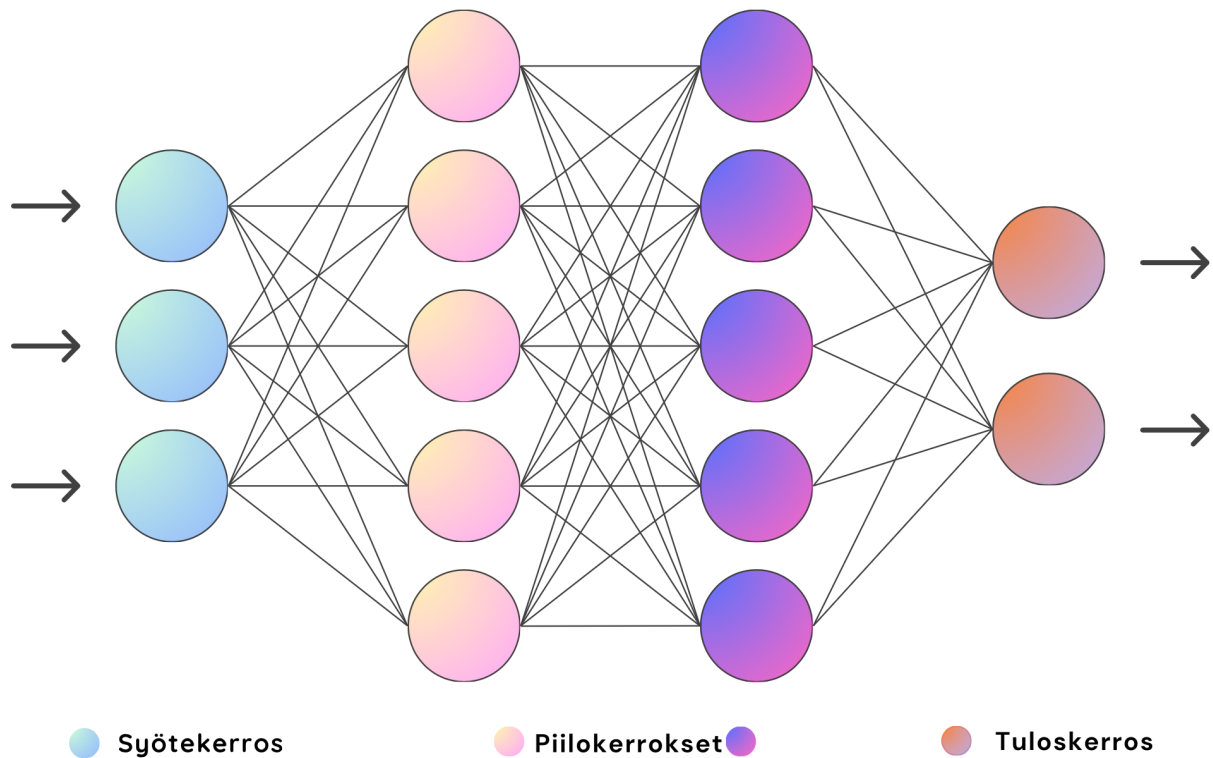
Suosituimpia esimerkkejä generatiivisista tekoälymalleista ovat OpenAI-yhtiön GPT (*engl.* generative pre-trained transformer), kuvanluontiin tarkoitettu DALL-E ja DeepMind AlphaCode, joka on suunniteltu ohjelmointitehtävien ratkaisuun. Nämä mallit kykenevät tuottamaan laadukkaita, ihmismäisiä tuotoksia hyödyntämällä valtavia määriä dataa ja laskentatehoa. Kaikki nämä mallit perustuvat neuroverkkoihin, erityisesti transformers-arkkitehtuurin mukaisiin neuroverkkoihin.

#### 3.1 Neuroverkot

Neuroverkot ovat algoritmeja, joiden rakenne mallintaa nisäkkäiden aivoja. Toisin kuin biologisissa aivoissa, joissa on miljardeja neuroneja mahdollistamassa monimutkaista vuorovaikutusta, keinotekoisissa neuroverkoissa taas on yleensä vain satoja tai tuhansia prosessiyksiköitä. [13] Tyypillisesti neuroverkko koostuu useista toisiinsa kytketyistä solmuista, jotka toimivat keinotekoisina hermosoluina, joita kutsutaan neuroneiksi [13]. Neuroneiden välillä on liitoksia, jotka vastaavat biologisten hermosäikeiden eli synapsien toimintaa. Neuroverkoissa tiedon käsittely tapahtuu aktivaation etenemisenä neuronilta toiselle näiden liitosten kautta eri kerroksissa [1]. Kuvassa 3 on mallinnettu yksinkertainen neuroverkko.

Nämä kerrokset on rakennettu suorittamaan monimutkaisia yhteyksiä syöte- ja tulosignaalien välillä ja niiden kerroksittainen rakenne mahdollistaa datan vaiheittaisen käsittelyn ja ohjaamisen. Neuroverkko koostuu syötekerroksesta, useammasta piilokerroksesta sekä tuloskerroksesta [13]. Syötekerros toimii datan sisääntulopisteenä, jossa syötetiedot – kuten numeeriset arvot, teksti tai kuvat – käsitellään ensimmäisen kerran. Tämän jälkeen käsitelty data välitetään seuraavalle kerrokselle jatkokäsittelyä varten.

Syötekerroksen jälkeen data siirtyy piilokerrokseen, joita voidaan pitää verkon ytimenä. Näissä kerroksissa neuronit käsittelevät tietoa matemaattisten muunnosten ja aktivointifunktioiden avulla, poimien syötetiedoista kuvioita ja monimutkaisia ominaisuuksia. Piilokerroksia voi olla useita ja data kulkee kerroksesta toiseen noudattaen samaa prosessia. Lopulta tieto etenee tuloskerrokseen, joka tuottaa verkon lopullisen tuloksen.



Kuva 3. Neuroverkon rakenne koostuu syötekerroksesta, piilokerroksista ja tuloskerroksesta.

### 3.2 Transformer-neuroverkot

Transformer-malli on neuroverkkoarkkitehtuuri, joka on suunniteltu käsittelemään tehokkaasti etenkin järjestyksessä etenevää dataa, kuten esimerkiksi kääntämään, tuottamaan ja tiivistämään tekstiä [14]. Se eroaa perinteisistä neuroverkoista siinä, että sen lisäksi ovat huomiointimekanismit [14]. Tämä tekee siitä nopeamman ja tehokkaamman, koska transformer-neuroverkko pystyy käsittelemään tietoa myös rinnakkain, toisin kuin aikaisemmat mallit [15].

Transformer-mallin keskeisiin osiin kuuluu itsehuomiointi (*engl.* self-attention), monipäinen huomiointi (*engl.* multi-head attention) ja paikkakoodaus (*engl.* positional encoding) [14]. Itsehuomiointilla tarkoitetaan mallia, joka tarkastelee jokaisen tekstin osan, kuten esimerkiksi sanan yhteyttä kaikkiin muihin tekstin osiin ja antaa niille tärkeysarvon. Itsehuomiointi auttaa hahmottamaan sanojen välisiä yhteyksiä. Monipäinen huomiointi tarkoittaa sitä, että malli käyttää useita huomiointimekanismeja samanaikaisesti [15]. Koska transformer-malli ei käsittele dataa järjestyksessä kuten perinteinen neuroverkkomalli, se tarvitsee erillisen menetelmän hahmottamaan sanojen tai tietojen järjestyksen. Tämän tehtävän hoitaa paikkakoodaus, joka auttaa mallia ymmärtämään, missä kohtaa tekstissä mikäkin sana tai tieto

sijaitsee. Transformer-mallit hyödyntävät myös koodaaja-dekoodaaja-rakennetta (*engl.* encoder-decoder architecture), jossa koodaaja muuntaa syötetyn datan yksinkertaistetuksi ja tiivistetyksi versioksi [14]. Dekoodaaja puolestaan käyttää tätä tiivistettyä tietoa tuottaakseen halutun lopputuloksen, esimerkiksi käännetyn tekstin. Transformer-malli tehokkuus perustuu sen kykyyn käsitellä dataa rinnakkain ja samanaikaisesti, mikä nopeuttaa tekoälyn oppimista ja mahdollistaa suurten tietomäärien tehokkaan käsittelyn.

Transformer-arkkitehtuuri on mullistanut luonnollisen kielen käsittelyn (*engl.* natural language processing, NLP) ja on nykyään keskeisessä roolissa esimerkiksi malleissa kuten BERT, GPT ja T5. Näitä malleja käytetään laajasti tekstinkäsittelyyn liittyvissä tehtävissä, kuten tekstin luokittelussa ja keskustelumallinnuksissa [15].

BERT (*engl.* bidirectional encoder representations from transformers) on malli, joka on suunniteltu ymmärtämään tekstin merkityksiä tarkasti hyödyntämällä molempiin suuntiin etenevää dataa. BERT-mallia käytetään esimerkiksi hakukoneiden parantamisessa, jossa malli auttaa ymmärtämään käyttäjien tekemien hakujen merkityksiä tarkemmin. GPT-mallit (*engl.* generative pre-trained transformer) -mallit keskittyvät tekstin tuottamiseen esimerkiksi keskustelurobottien yhteydessä tai asiakaspalveluchateissa. GPT-mallit ovat myös erityisen tehokkaita luonnollisen kielen luovassa generoinnissa kuten tarinoiden tai artikkelien kirjoittamisessa. T5 (*engl.* text-to-text transfer transformer) puolestaan perustuu yksinkertaiseen ideaan, jossa kaikki NLP-tehtävät muunnetaan tekstistä tekstiksi -muotoon. T5-mallia hyödynnetään erityisesti kielen kääntämisessä tai automaattisissa tekstin tiivistämisympäristöissä, jotka auttavat esimerkiksi uutisten nopeassa tiivistämisessä tai raporttien sisällön kiteyttämisessä. [15]

### 3.3 ChatGPT

ChatGPT perustuu aiemmin mainittuun GPT-malliin ja se hyödyntää transformer-arkkitehtuuria. ChatGPT on OpenAI:n kehittämä edistyksellinen tekoälymalli, joka on suunniteltu erityisesti tekstin generointiin ja vuorovaikutukseen. Se keskittyy erityisesti lauseiden jatkamiseen ja kontekstiin perustuvaan tekstin luomiseen. ChatGPT:n GPT-sarja on kehittynyt useiden iteraatioiden kuten GPT-1:n, GPT-2:n, GPT-3:n ja GPT-4:n myötä. Jokainen näistä versioista on tuonut mukanaan parannuksia muun muassa suorituskykyyn, tiedonkäsittelyyn ja toiminnallisiin ominaisuuksiin. ChatGPT:n merkittävät ominaisuudet johtuvat edellä mainituista edistysaskelista, erityisesti vahvistusoppimisen integroinnista ihmisen palautteeseen, mikä parantaa vuorovaikutusta käyttäjän kanssa. [16]

ChatGPT on koulutettu laajoilla tietoaaineistoilla, jotka sisältävät tekstiä esimerkiksi kirjoista, verkkosivustoista tai artikkeleista. Altistus kattaviin aineistoihin antaa mallille mahdollisuuden kehittää syvää ymmärrystä kielestä, kieliopista ja sanojen kontekstuaalisesta merkityksestä. Malli on esikoulutettu käyttäen autoregressiivistä kehystä, joka ennustaa tokeneita (yksittäisiä yksiköitä datasta, kuten sanoja, merkkejä tai muita informaation osia) peräkkäin aiemman syötteen perusteella. Yksi keskeinen ominaisuus on niin sanottu sisäinen oppiminen (*engl.* in-context learning), jonka ansiosta ChatGPT kykenee omaksumaan ohjeita ja esimerkkejä suoraan keskustelun aikana ilman erillistä mallin hienosäätöä. Toisin sanoen, kun käyttäjä antaa ohjeita tai esittää mallille tiettyjä tapoja vastata, malli oppii nämä esimerkit osana käynnissä olevaa vuorovaikutusta ja mukauttaa vastauksiaan sen mukaisesti. Aiemmin sivuttu vahvistusoppiminen ihmispalautteen avulla muodostaa olennaisen osan ChatGPT:n kehitysprosessia. Tässä menetelmässä kouluttajat arvioivat mallin vastauksia, ja tämän palautteen pohjalta mallia ohjataan tuottamaan entistä osuvampia ja käyttäjälähtöisempiä tuloksia.

ChatGPT on tehokas työkalu, jolla on monia erilaisia käytännön käyttötarkoituksia. Yksi suurimmista vahvuuksista on sen kyky tuottaa selkeää ja luonnollista kieltä. Tätä ominaisuutta voidaan hyödyntää esimerkiksi luovassa kirjoittamisessa, sisällön tuottamisessa ja ideoinnissa. [16]. Generatiivisen tekoälyteknologian kehittymisen myötä, malli voi auttaa ihmisiä tai jopa korvata heidät kokonaan saavuttaakseen suurimman osan sisällönluentityöstä tulevaisuudessa [16]. Se osaa käsitellä tehokkaasti esimerkiksi sähköposteja tai raportteja, joka tehostaa ajankäyttöä [16]. ChatGPT voi myös tuottaa ja selittää koodia useilla eri ohjelmointikielillä. Lisäksi tieteellisestä näkökulmasta tarkasteltuna ChatGPT tarjoaa monia mahdollisuuksia tutkimuksen ja kehitystyön tueksi.

## 4 Esimerkkejä generatiivisen tekoälyn käytöstä materiaalitieteessä

Tieteellisestä näkökulmasta tarkasteltuna generatiivinen tekoäly tarjoaa monia mahdollisuuksia tutkimuksen ja kehitystyön tueksi. Erityisesti materiaalitieteessä se avaa uusia tapoja lähestyä suunnittelua ja analyysia datalähtöisesti, mikä voi nopeuttaa innovaatioita ja vähentää kokeellisen työn tarvetta. Seuraavissa alaluvuissa esitellään konkreettisia esimerkkejä siitä, miten generatiivisia malleja hyödynnetään materiaalien kehittämisessä ja rakenteiden mallintamisessa.

### 4.1 Uusien materiaalien kehittäminen

Uusien materiaalien kehittäminen on keskeisessä roolissa monilla teollisuudenaloilla, kuten esimerkiksi ilmailussa, rakentamisessa, bioteknologiassa ja autoteollisuudessa. Kehittyneemmät materiaalit voivat tuoda mukanaan parempia ominaisuuksia, pienempiä valmistuskustannuksia ja vähemmän ympäristövaikutuksia. Perinteinen materiaalien kehitysprosessi on kuitenkin hidas ja kallis, sillä se edellyttää paljon manuaalista työtä. Sekä suunnittelu- että testausvaiheet vaativat asiantuntijoiden panosta ennen kuin materiaali voidaan ottaa käyttöön tuotannossa. [17]

Artikkeli "Generative AI designs the next generation of smart materials from pixels to products" (Shafiq M. ym. 2025) esittelee tutkimuksen siitä, miten generatiivista tekoälyä voidaan hyödyntää uusien älymateriaalien suunnittelussa. Tutkijoiden keskeinen tavoite oli kehittää ja testata monivaiheisen tekoälykehityksen eli erään transformer-mallin avulla toimiva järjestelmä, joka voi suunnitella täysin uusia ja suorituskyvyltään parempia materiaaleja. [18]

Vuoden 2023 artikkelissa "The use of generative models to speed up the discovery of materials" (Gregores Coto ym. 2023) tutkijat esittelevät, miten tekoälyä, erityisesti generatiivisia malleja, voidaan käyttää uusien materiaalien kehityksen nopeuttamiseen [17]. Perinteisesti uusien materiaalien kehitys on perustunut tutkijoiden kokeelliseen tutkimukseen ja virheistä oppimiseen, alkaen yleensä tieteellisestä hypoteesista tai aiempaan tutkimukseen pohjautuvasta ideasta [17,18]. Yksi suurimmista haasteista on valtava määrä mahdollisia yhdistelmiä, joita eri alkuaineista tai lähtöpolymeereistä voidaan muodostaa [17]. Tällaisen aineiston manuaalinen läpikäynti olisi käytännössä mahdotonta ilman laskennallista apua [17].

Shafiqin tutkimuksessa kehitetty transformer-malli hyödyntää kolmea kehittyntä koneoppimismallia: tekstistä-rakenteeseen-kääntäjää, vaihtelevia autoenkodereita ja



generatiivisen kilpailevan verkon malleja. Tämä transformer-malli edustaa täysin uudenlaista lähestymistapaa materiaalien suunnitteluun, sen sijaan, että prosessi alkaisi jo tunnetusta rakenteesta, tekoäly kykenee lähtemään liikkeelle halutuista ominaisuuksista ja rakentamaan niihin sopivan materiaalin. [18]

Toisessa tutkimuksessa hyödynnettiin CTGAN-mallia (*engl.* conditional tabular generative adversarial network), joka pystyy luomaan uusia yhdistelmiä olemassa olevien tietojen perusteella. CTGAN-malli koulutetaan tunnetuilla materiaaleilla ja niiden ominaisuuksilla, minkä jälkeen se pystyy tuottamaan synteettisiä materiaaliehdokkaita, jotka muistuttavat oikeita, mutta ovat uusia. [17]

Jotta tekoälyn luomat rakenteet olisivat realistisia ja valmistuskelpoisia, voidaan transformer-malliin lisätä myös fysiikkaan perustuvia rajoitteita. Esimerkiksi lasisiirtymälämpötila arvioitiin automaattisesti laskennallisesti tunnetun Flory-Fox-yhtälön avulla, jolloin pystyttiin tarkistamaan, pysyivätkö tulokset fysikaalisesti järkevissä rajoissa. Malli arvioi myös muita ominaisuuksia, kuten mekaanista ja lämpöteknistä käyttäytymistä, jotta syntyvät materiaaliehdotukset olisivat toteutuskelpoisia. Rakenteet, jotka eivät täyttäneet näitä reunaehtoja, jätettiin pois valituista ehdotuksista. [18]

Lisäksi tekoälylle voidaan opettaa tulkittavuutta. Tutkijat ovat käyttäneet visualisointeja ja tietokaavioita, joiden avulla voidaan ymmärtää, mitkä molekyyli-rakenteet vaikuttavat mihinkin ominaisuuteen [18]. Tämä mahdollistaa paitsi suunnittelun myös uusien tieteellisten löytöjen tekemisen. Ensimmäisessä tutkimuksessa testattiin kehitettyä transformer-mallin toimivuutta käytännössä esimerkiksi muodonmuistipolymeerien ja itsestään korjautuvien materiaalien kehittämisessä [18]. Näillä materiaaleilla on tärkeä rooli esimerkiksi biolääketieteessä, pehmeässä robotiikassa ja kuluttajatuotteissa [18]. CTGAN-malli taas onnistui tuottamaan TiZrCuNiBe-yhdisteen, joka on tunnettu korkean entropian seos, vaikka se ei ollut mukana opetusdatassa [17]. Tutkimuksissa luodut materiaaliehdotukset tarkistettiin avoimista materiaalitietokannoista sekä laskennallisilla menetelmillä, kuten CALPHAD-simuloinneilla (faasidiagrammien laskennallinen mallinnus) [17]. Lisäksi arvioitiin mekaaninen kestävyys, myrkyttömyys ja valmistuskustannukset [17].

Tekoälyn suunnittelemat materiaalit osoittautuivat useilla mittareilla paremmiksi kuin tämänhetkinen huipputekniikka. Esimerkiksi lasisiirtymälämpötila kasvoi jopa 11,8 %, vetolujuus parani 15,4 %, palautuminen alkuperäiseen muotoon tehostui 10,2 %, ja itsekorjautuvuuden tehokkuus nousi 8,2 %, samalla kun korjaantumisaika lyheni 41,8 %. Nämä

parannukset saavutettiin ilman fyysisiä kokeita eli ainoastaan tekoälyn avulla luoduilla ja analysoiduilla rakenteilla. [18]

Tutkimukset osoittavat selkeästi, että generatiivinen tekoäly voi merkittävästi nopeuttaa uusien materiaalien kehittämistä. [17,18] CTGAN-malli pystyy tuottamaan satoja lupaavia materiaaliehdotuksia muutamassa sekunnissa, mikä tekee siitä erittäin tehokkaan työkalun materiaalitutkimuksessa [17]. Tulevaisuudessa tekoälymalleja voidaan hyödyntää laajemmin eri materiaaliluokkien kehityksessä ja yhdistää ne teollisuuden vaatimukseen. Tekoäly voi esimerkiksi ottaa huomioon resurssien (eli raaka-aineiden) saatavuuden materiaalien suunnittelussa [17].

## 4.2 CIF-tiedostot

Useat tutkimukset, kuten esimerkiksi Liu ym. (2023) ja Deb ym. (2024), osoittavat, että generatiivisilla malleilla on potentiaalia tukea materiaalien suunnittelua, rakenteiden mallintamista ja laskennallista simulointia [19,20]. Mallien soveltaminen voi paitsi nopeuttaa tutkimusprosesseja, myös tarjota uusia lähestymistapoja materiaalien rakenteiden luomiseen erityisesti silloin, kun käytössä on niukasti kokeellista dataa.

Malleja kuten GAN ja VAE on sovellettu materiaalien suunnitteluun, datan lisäämiseen ja uusien materiaalien löytämiseen [20]. Yksi keskeinen sovellusalue on CIF-tiedostojen (*engl.* crystallographic information file) luominen, joita käytetään kuvaamaan kiteisten materiaalien rakennetta [19,20]. CIF-tiedosto sisältää tietoa atomien koordinaateista, hilavakioista, avaruusryhmistä ja atomien välisistä sidoksista [20]. Tiedostomuoto on standardi, jota käytetään laajasti erityisesti laskennallisessa materiaalitieteessä ja kiinteän olomuodon kemiassa [19,20]. CIF-tiedostojen avulla voidaan mallintaa aineiden kolmiulotteinen rakenne ja syöttää se edelleen simulaatio-ohjelmille [19].

CIF-tiedostoihin liittyvissä tutkimuksissa on testattu ChatGPT:n kykyä tuottaa CIF-tiedostoja eri materiaaleille, kuten  $\text{NaZr}_2(\text{PO}_4)_3$ , grafeeni, gamma-grafyyini ja 2D MXene [19,20]. Tulokset osoittavat, että vaikka ChatGPT kykenee luomaan CIF-tiedostoja, niissä esiintyy usein virheitä, kuten esimerkiksi vääriä avaruusryhmiä tai puutteellisia atomikoordinaatteja [19,20] Esimerkiksi grafeenin tapauksessa ChatGPT onnistui tuottamaan oikean rakenteen hilaparametreineen ja avaruusryhmineen [19]. Toisaalta gamma-grafyyinin ja MXene-materiaalien kohdalla mallin tuottamat tulokset olivat aluksi virheellisiä tai keskeneräisiä [19]

ChatGPT:n kyky parantaa suoritustaan lisätiedon avulla nousi esiin molemmissa tutkimuksissa, sillä tarkemmat ohjeet ja lähtötiedot paransivat merkittävästi tulosten laatua [19,20]. Esimerkiksi, kun mallille annettiin sääntöjä atomien paikoista ja oikeasta avaruusryhmästä, se tuotti realistisempia rakenteita [20]. MXene-materiaalin tapauksessa ChatGPT tuotti ensin Python-koodin CIF-tiedoston luontiin, jonka jälkeen tarkennetut tiedot mahdollistivat oikean rakenteen muodostamisen [19].

CIF-tiedostoja koskevissa tutkimuksissa korostetaan, että ChatGPT:ltä puuttuu syvä ymmärrys kiderakenteiden periaatteista ja symmetriasta, mikä voi johtaa rakenteisiin, jotka ovat epärealistisia tai fysikaalisesti mahdottomia [19,20]. ChatGPT:n vastaukset eivät ole aina johdonmukaisia ja se voi antaa eri kerroilla erilaisia vastauksia samaan kysymykseen. Lisäksi malli ei tarkista tietoja vertaamalla niitä todellisiin tietokantoihin, minkä vuoksi se saattaa tuottaa virheellistä tai keksittyä sisältöä [19]. Tästä huolimatta sen kyky generoida alustavia CIF-tiedostoja nopeasti voi nopeuttaa tutkimusprosessia merkittävästi [19,20]. Erityisesti perusrakenteiden luonnissa ChatGPT voi toimia hyödyllisenä apuvälineenä asiantuntijan tukena [19].

Tulevaisuudessa, kun GAI-malleihin integroidaan syvempää materiaalitieteen asiantuntemusta ja tarkempaa rakennedatua, voidaan saavuttaa tarkempia ja suoraan käyttökelpoisia rakenteita [20]. Tällöin GAI-mallit voivat toimia tehokkaana yhteistyökumppanina materiaalitutkijoille uusien materiaalien kehittämisessä [19,20]. ChatGPT:llä on jo nyt lupaava rooli CIF-tiedostojen luomisessa, mutta sen käyttö edellyttää edelleen asiantuntijan ohjausta ja tuotettujen tietojen huolellista tarkistamista [19,20].

### **4.3 Mekaaninen ja bioinspiroitu suunnittelu**

Artikkeli "Enhancing mechanical and bioinspired materials through generative AI approaches" (2024) esittelee useita sovelluskohteita, joissa generatiivista tekoälyä hyödynnetään materiaalitieteessä perinteisten tutkimusmenetelmien tukena. Näitä sovelluksia ovat muun muassa mekaanisten rakenteiden optimointi, bioinspiroitujen materiaalien suunnittelu sekä lisätyn valmistuksen (*engl.* additive manufacturing, AM) prosessien kehittäminen.

Yksi artikkelin merkittävä sovelluskohde on luonnosta inspiroitunut suunnittelu eli bioinspiroitujen materiaalien kehitys, jossa generatiivisia malleja hyödynnetään luonnonmuotojen, kuten lehtisuoniston tai hämähäkinseittien rakenteiden matkimisessa. Tutkimuksessa GAN-malli koulutettiin lehtien kuvilla, minkä jälkeen malli kykeni tuottamaan

uusia 3D-rakenteita, jotka jäljittelevät lehtisuonien geometriaa ja toiminnallisuutta. Näitä rakenteita optimoitiin geneettisen algoritmin avulla, jolloin saavutettiin korkea elastisuusmoduuli ja pieni tiheys. Tuloksena syntyneet kevyet mutta vahvat rakenteet valmistettiin 3D-tulostamalla ja niiden mekaaniset ominaisuudet arvioitiin kokeellisesti. Lähestymistapa osoitti, että GAN- ja geneettisten algoritmien yhdistäminen mahdollistaa tehokkaan ja toiminnallisen rakenteellisen suunnittelun, jota voidaan hyödyntää esimerkiksi pehmeässä robotiikassa ja biolääketieteellisissä sovelluksissa. [21]

Toinen lähestymistapa artikkelissa liittyy menetelmään, jossa yhdistettiin GAN ja transformer-arkkitehtuuri 2D-kuviin perustuvaan 3D-rakenteiden suunnitteluun. Tutkimuksessa kehitetty transformer-tekoälymalli koulutettiin suurilla määrillä kaksiulotteista visuaalista dataa, kuten valokuvilla ja rakennekuvilla, joiden avulla se oppi tunnistamaan kuvien geometrian ja kolmiulotteisia muotoja kuvaavia rakenteellisia ominaisuuksia. Malli kykeni tämän jälkeen tuottamaan 3D-mikrorakenteita, jotka eivät olleet pelkästään visuaalisia esityksiä, vaan ne sisälsivät myös rakenteellista ja mekaanista toiminnallisuutta. Menetelmä poikkesi perinteisestä tietokoneavusteisesta suunnittelusta (*engl.* computer-aided design, CAD) siten, että suunnittelu ei edellyttänyt eksplisiittistä mallinnusta tai geometrian käsin määrittelyä. Sen sijaan tekoäly loi rakenteet automaattisesti suoraan 2D-kuvamateriaalista. Tämä mahdollisti kompleksisten orgaanisten muotojen ja funktionaalisesti optimoitujen rakenteiden luomisen huomattavasti nopeammin ja vähemmällä suunnitteluresursseilla kuin tavanomaisilla menetelmillä. Tuloksena syntyneet rakenteet olivat valmistuskelpoisia ja ne pystyttiin 3D-tulostamaan suoraan ilman tarvetta lisämallinnukselle. [21]

Mekaanisissa testeissä nämä generatiivisesti luodut rakenteet osoittivat erinomaista suorituskykyä, erityisesti jäykkyyden ja kestävyuden osalta. Kuitenkin pidempien ja monimutkaisempien rakenteiden kohdalla havaittiin pieniä eroja tekoälyn ennustaman käyttäytymisen ja todellisen, kokeellisesti mitatun suorituskyvyn välillä. Tämä viittaa siihen, että mallit ovat lupaavia, mutta niiden tarkkuus saattaa heikentyä monimutkaisemmissa sovelluksissa, ellei niitä hienosäädetä tarkemmilla syöteparametreilla tai lisäkoulutuksella. [21]

## 5 Päätelmät ja pohdinta

Generatiivinen tekoäly on herättänyt viime vuosina laajaa kiinnostusta monilla tieteenaloilla ja sen soveltaminen materiaalitieteessä vaikuttaa myös erityisen lupaavalta. Tutkielmassa esitettiin, miten generatiivinen tekoäly voi tuoda merkittäviä muutoksia materiaalitutkimukseen, erityisesti uusien materiaalien kehittämiseen, laskennalliseen simulointiin ja rakenteiden mallintamiseen. Tällaiset sovellukset voivat tulevaisuudessa vähentää merkittävästi materiaalikehityksen kestoa ja/tai kustannuksia, kun perinteiset kokeelliset menetelmät saavat rinnalleen tehokkaan sekä monipuolisen työkalun – tekoälyn.

Materiaalitieteessä generatiivisen tekoälyn käyttö ei rajoitu pelkästään uusien yhdisteiden löytämiseen, vaan sillä on myös potentiaalia parantaa olemassa olevien materiaalien ominaisuuksia esimerkiksi korroosionkeston tai mekaanisten kestävyyksien osalta. Tekoälyn avulla voidaan optimoida koostumuksia ja rakenteita, jotka olisivat manuaalisesti lähes mahdottomia suuren parametrijoukon vuoksi. Lisäksi tekoälyä on hyödynnetty nanomateriaalien tutkimuksessa, joissa pienetkin rakenteelliset muutokset voivat merkittävästi vaikuttaa materiaalin suorituskykyyn.

Yksi keskeisistä havainnoista tutkielmassa oli, että generatiivinen tekoäly voi auttaa suunnittelemaan materiaaleja niin, että ensin määritellään halutut ominaisuudet ja vasta sen jälkeen tekoäly ehdottaa niihin sopivaa rakennetta. Tällainen lähestymistapa eroaa merkittävästi perinteisestä suunnitteluprosessista, jossa materiaalien kehitys alkaa useimmiten tietyn jo olemassa olevan rakenteen muokkauksesta. Ajatus siitä, että tekoäly voi itsenäisesti suunnitella esimerkiksi bioinspiroituja rakenteita ilman fyysistä testausta tuntuu kovin futuristiselta, mutta jo nyt tutkimustulokset osoittavat mallien olevan ainakin osittain käyttökelpoisia. Lisäksi tutkielmassa nousi esiin, miten generatiivista tekoälyä voidaan yhdistää muihin kehittyviin teknologioihin materiaalitieteessä. Esimerkiksi 3D-tulostukseen tai CAD-suunnitteluun yhdistettäessä tekoäly voi luoda uusia innovatiivisia ratkaisuja tuottamalla monimutkaisia rakenteita. Bioinspiroitujen ratkaisujen kehityksessä hyödynnettiin kilpailevan verkon malleja ja geneettisiä algoritmeja. Näin niiden avulla voitiin luoda orgaanisia ja ei-lineaarisia muotoja, joita olisi ollut vaikea saavuttaa perinteisin menetelmin. Tämä avaa uusia mahdollisuuksia esimerkiksi kevyiden, mutta mekaanisesti kestävien rakenteiden suunnitteluun. Tutkimuksissa on myös tärkeää huomioida, että tekoälyn avulla tuotetut mallit perustuvat usein olemassa oleviin tietokantoihin ja valmiiksi simuloituihin

aineistoihin. Jos lähdeaineistossa on puutteita voi lopputulos myös heijastaa näitä virheitä. Siksi on oleellista tarkastella kriittisesti sitä, millä datalla tekoälymallit on opetettu.

Monipuolisista ominaisuuksista huolimatta generatiivisen tekoälyn käyttöön liittyy myös haasteita. Se voi toisinaan tuottaa virheellistä tai harhaanjohtavaa tietoa, mikä johtuu usein puutteellisesta tai epätarkasta koulutusaineistosta. Mallien sisäinen logiikka ei ole läpinäkyvä, mikä vaikeuttaa vastausten todentamista. Näiden tekijöiden seurauksena tekoälyä voidaan pitää epäluotettavana, erityisesti tilanteissa, joissa tarkkuus on ratkaisevan tärkeää esimerkiksi lääketieteessä tai erittäin kriittisissä tehtävissä kuten esimerkiksi siltojen lujuuslaskennassa.

Lisäksi CIF-tiedostojen generoinnissa tuli esille se, että vaikka ChatGPT ja muut mallit voivat luoda uusia rakenteita nopeasti, tulokset eivät aina ole fysikaalisesti realistisia tai virheettömiä. Tällöin pitää korostaa asiantuntijan roolia tekoälyn rinnalla; mallit voivat toimia avustajina, mutta eivät vielä voi täysin korvata asiantuntijan kokonaisvaltaista ymmärrystä. Esimerkiksi ChatGPT:n antamat vastaukset eivät aina ole samanlaisia, vaikka kysymys olisi sama. Vastaukset voivat esimerkiksi muuttua eri päivinä tai eri keskustelukerroilla. Lisäksi malli ei välttämättä tarkista, ovatko sen antamat tiedot oikeita verrattuna olemassa oleviin tieteellisiin tietokantoihin, joten se saattaa keksiä tietoja, joita ei ole oikeasti olemassa.

On myös tärkeää tarkastella tieteellisiä tutkimuksia kriittisesti: kuka tutkimuksen on tehnyt, ja onko tutkimuksen mahdollisella tilaajalla tai rahoittajalla intressejä, jotka voisivat vaikuttaa johtopäätöksiin. Esimerkiksi yritysten tai kaupallisten toimijoiden rahoittamat tutkimukset voivat sisältää erinäisiä painotuksia, jotka ohjaavat tuloksia haluttuun suuntaan. Tämä pätee myös tekoälyyn liittyviin sovelluksiin materiaalitieteessä, sillä läpinäkyvyys ja riippumattomuus ovat keskeisiä tieteellisen luotettavuuden kannalta.

Väistämättä tekoälyratkaisujen yleistyessä nousee esiin useita ympäristöön liittyviä kysymyksiä. Tekoäly voi merkittävästi tehostaa resurssien käyttöä, edistää kiertotaloutta, optimoida suunnitteluprosesseja ja jopa tarjota ratkaisuja ilmastokriisiin kaltaisiin haasteisiin. Samalla sen oma energiankulutus voi olla tähtitieteellistä. Nousee esiin siis ristiriita, joka korostuu entisestään, kun otetaan huomioon, että tekoälyä käytetään usein enemmän niin sanottuihin kevyisiin ja viihteellisiin tarkoituksiin sen sijaan, että sitä hyödynnettäisiin ensisijaisesti kriittisten ongelmien ratkaisemiseen. Lisäksi tekoälymallien kehittäminen ja ylläpito vaatii myös merkittäviä taloudellisia investointeja sekä laskennallisia resursseja. Korkea energiakulutus tekoälymallien koulutuksessa ja käytössä nostaa esiin ympäristövaikutuksia, joita ei voida jättää huomiotta.

Ympäristöasioiden lisäksi immateriaalioikeuksiin liittyvät huolenaiheet tekoälystä ovat herättäneet keskustelua, sillä vastauksiin saattaa tahattomasti sisältyä tekijänoikeudella suojattua sisältöä. Esimerkiksi ChatGPT:n kyky tuottaa ihmismäistä sisältöä on lisännyt huolta eettisestä väärinkäytöstä, erityisesti ammatillisissa- tai koulutusympäristöissä. Tekoälyn generoiman sisällön omistajuus ja sen vastuu ovat vielä kehittyviä oikeudellisia kysymyksiä. Jos esimerkiksi tekoäly tuottaa uuden materiaalin tai tiedon, kuka omistaa sen – tekoälymallin kehittäjä, loppukäyttäjä vai koulutusdatan alkuperäinen omistaja? Lisäksi mallin käyttö saattaa tahattomasti rikkoa tekijänoikeuksia, jos se käyttää tekijänoikeuksilla suojattua materiaalia, esimerkiksi joitain kirjoja tai kuvia. Eettisesti herättää myös kysymyksiä se, miten paljon päätöksentekoa voidaan ulkoistaa tekoälylle ilman ihmisen kriittistä arviointia. Näiden haasteiden mahdollinen ratkaisu edellyttää tekoälyn jatkuvaa kehittämistä sen läpinäkyvyyden parantamiseksi, jotta sen toimintaperiaate on helpommin ymmärrettävissä. On myös tärkeää kehittää ja ylläpitää vastuullisia käyttötapoja, jotka ohjaavat tekoälyn hyödyntämistä eettisesti hyväksyttävällä tavalla. Samalla on tärkeää korostaa ympäristön kestävyyttä tekoälyn suunnittelussa ja sen toteutuksessa, jotta niiden kehitys ja käyttö voidaan toteuttaa mahdollisimman ympäristöystävällisesti.

Yhteenvedona voidaan todeta, että generatiivinen tekoäly on mullistava teknologia, joka voi tulevaisuudessa nopeuttaa ja tehostaa materiaalitieteen tutkimusta sekä tuotekehitystä. Sen avulla voidaan kehittää uusia materiaaleja, optimoida rakenteita ja vähentää resurssien käyttöä. Siirtyminen kokeellisesta ja laskennallisesta lähestymistavasta kohti datalähtöistä ja oppivaa suunnittelua on jo käynnissä, mutta samalla tarvitaan kriittistä tarkastelua. Tekoäly ei vielä osaa kaikkea, eikä sen tuottamaa tietoa voida pitää aukottomana ilman asiantuntijan arviointia. Jotta teknologian potentiaali voidaan hyödyntää, tarvitaan jatkuvaa tutkimusta, eettisiä periaatteita kehityksen tueksi sekä monialaista asiantuntijayhteistyötä. Teknologian kehityksessä on tärkeää säilyttää tasapaino: tekoälyn tarjoamia mahdollisuuksia voidaan hyödyntää, mutta samalla on tunnistettava sen rajat ja velvollisuus toimia vastuullisesti.

## Lähteet

- [1] Anssi Konga, ”Tekoäly sosiaalisen kestävyuden muodostumisessa”, Lappeenranta–Lahden teknillinen yliopisto LUT, diplomityö, 2023.
- [2] R.R. E. Rich, ”Artificial intelligence” E. Rich, 1986, 119–121. doi.org/10.1016/0004-3702(86)90034-2.
- [3] H. Ailisto, E. Heikkilä, H. Helaakoski, A. Neuvonen, T. Seppälä, ”Tekoälyn kokonaiskuva ja osaamiskartoitus”, Valtioneuvosto, 2018
- [4] A. Bandi, P.V.S.R. Adapa, Y.E.V.P.K. Kuchi, ”The Power of Generative AI: A Review of Requirements, Models, Input–Output Formats, Evaluation Metrics, and Challenges”, 2023, doi.org/10.3390/fi15080260.
- [5] Y. Cao, S. Li, Y. Liu, Z. Yan, Y. Dai, P.S. Yu, L. Sun, ”A Comprehensive Survey of AI-Generated Content (AIGC): A History of Generative AI from GAN to ChatGPT”, 2023
- [6] G. Li, R. Gomez, K. Nakamura, B. He, ”Human-Centered Reinforcement Learning: A Survey”, IEEE Trans Hum Mach Syst 49, p.337–349, 2019, doi.org/10.1109/THMS.2019.2912447.
- [7] L. Wang, X. Zhang, H. Su, J. Zhu, ”A Comprehensive Survey of Continual Learning: Theory, Method and Application”, IEEE Trans Pattern Anal Mach Intell 46, p. 5362–5383, 2023
- [8] Matti Pietikäinen, ”Tekoälyn haasteet - Koneoppimisesta ja konenäöstä tunnetekoälyyn”, Oulun yliopisto, 2019.
- [9] P. Zhang, M.N. K. Boulos, ”Generative AI in Medicine and Healthcare: Promises, Opportunities and Challenges”, 2023, doi.org/10.3390/fi15090286.
- [10] C.E. Haupt, M. Marks, ”AI-Generated Medical Advice—GPT and Beyond”, JAMA 329, 1349–1350, 2023, doi.org/10.1001/JAMA.2023.5321.
- [11] X. Yafei, Y. Wu, J. Song, Y. Gong, P. Lianga, ”Generative AI in Industrial Revolution: A Comprehensive Research on Transformations, Challenges, and Future Directions”, Journal of Knowledge Learning and Science Technology ISSN: 2959-6386, 2024, doi.org/10.60087/JKLST.VOL.3N2.P20.
- [12] C. Che, Z. Huang, C. Li, H. Zheng, X. Tian, ”Integrating generative AI into financial market prediction for improved decision making”, 2024. doi.org/10.54254/2755-2721/64/20241376.



- [13] S. Sharma, A. Anidhya, "Activation Functions in Neural Networks", *International Journal of Engineering Applied Sciences and Technology*, 2020
- [14] A. Vaswani, N. Shazeer, N. Parmar, et al., "Attention Is All You Need", *Adv Neural Inf Process Syst*, 2017
- [15] A. Gillioz, J. Casas, E. Mugellini, O.A. Khaled, "Overview of the Transformer-based Models for NLP Tasks", 2020, [doi.org/10.15439/2020F20](https://doi.org/10.15439/2020F20).
- [16] T. Wu, S. He, J. Liu, et al., "A Brief Overview of ChatGPT: The History, Status Quo and Potential Future Development", *IEEE/CAA Journal of Automatica Sinica*, 2023, [doi.org/10.1109/JAS.2023.123618](https://doi.org/10.1109/JAS.2023.123618).
- [17] A. Gregores Coto, C.E. Precker, T. Andersson, A. Laukkanen, T. Suhonen, P.R. Rodriguez, S. Muñios-Landín, "The use of generative models to speed up the discovery of materials", *Computer Methods in Material Science*, 2023, [doi.org/10.7494/CMMS.2023.1.0802](https://doi.org/10.7494/CMMS.2023.1.0802).
- [18] M. Shafiq, K. Thakre, R. Pandurangan, R.V.S. Lalitha, "Generative AI designs the next generation of smart materials from pixels to products", *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 2025, [doi.org/10.1007/S00170-025-14999-W/FIGURES/11](https://doi.org/10.1007/S00170-025-14999-W/FIGURES/11).
- [19] J. Deb, L. Saikia, K.D. Dihingia, G.N. Sastry, "ChatGPT in the Material Design: Selected Case Studies to Assess the Potential of ChatGPT", *J Chem Inf Model* 64, 2024, [doi.org/10.1021/ACS.JCIM.3C01702/SUPPL\\_FILE/CI3C01702\\_SI\\_001.PDF](https://doi.org/10.1021/ACS.JCIM.3C01702/SUPPL_FILE/CI3C01702_SI_001.PDF).
- [20] Y. Liu, Z. Yang, et al., "Generative artificial intelligence and its applications in materials science: Current situation and future perspectives", *Journal of Materiomics* 9, 2023, [doi.org/10.1016/J.JMAT.2023.05.001](https://doi.org/10.1016/J.JMAT.2023.05.001).
- [21] S. Badini, S. Regondi, R. Pugliese, "Enhancing mechanical and bioinspired materials through generative AI approaches", *Next Materials* 6, 2025, [doi.org/10.1016/J.NXMATE.2024.100275](https://doi.org/10.1016/J.NXMATE.2024.100275).