

ВЛИЯНИЕ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА НА РАЗВИТИЕ ХИМИИ

научный руководитель: к. филос. н., доцент, кафедра истории,
философии и социальных наук М. Ю. Яцевич

Рассматриваются вопросы возможностей использования искусственного интеллекта в различных областях химического знания. Подчеркивается, что с течением времени количество задач, решаемых искусственным интеллектом, интенсивно увеличивается, а именно: прогнозирование физических свойств соединений, замена методов квантовой химии, мониторинг химических реакций, процессы распознавания образов в электронной микроскопии и сигналов в масс-спектрометрии и т.д.

Ключевые слова: искусственный интеллект, программное обеспечение, чат-бот, прогнозирование, химические реакции.

Искусственный интеллект – это сложный комплекс научных технологий, включающий математику, биологию, психологию и кибернетику. Эти технологии используются для написания «умных» программ и обучения компьютеров самостоятельному решению проблем. Основная задача искусственного интеллекта – имитация человеческого разума.

Наиболее распространенными языками для написания программ машинного обучения сегодня являются Python, Scala и Julia. Эти языки поддерживаются многими интегрированными средами разработки, в частности R-Studio, R-Brain, Visual Studio, Eclipse, PyCharm, Spyder, IntelliJ IDEA, Jupyter Notebooks и Juno [Федоров, 2019; Одерски, Спун, Веннерс, 2021]

В настоящее время ИИ можно упростить до конструктора, состоящего из трех основных компонентов:

- 1) данные – базы данных, содержащие числа, текст, видео, фотографии, текст и аудио;
- 2) программное обеспечение – благодаря работе ученых и программистов сейчас существуют готовые библиотеки машинного обучения, которые в основном используются как черные ящики без необходимости глубокого понимания того, как они работают.

3) вспомогательные технологии (например, камеры, карты GPU, сенсоры, роботы) [Как устроен, 2021]

Автопилоты, чат-боты и распознавание лиц становятся все более распространенными. Компании уже интегрируют ИИ во все свои продукты и используют его для обработки больших объемов данных. Такие крупные компании как Google, Microsoft и Apple, создали собственные голосовые помощники, которые обрабатывают всю информацию о пользователе, помогают в решении повседневных задач и даже могут давать советы и рассказывать анекдоты [Сизов, 2020].

В настоящее время искусственный интеллект используется практически во всех областях химии, в том числе в разработке химических технологий. Использование методов машинного обучения в химии началось около десяти лет назад. Одним из наиболее перспективных направлений применения ИИ в данной отрасли является медицинская химия, в основе которой лежит исследование корреляции между структурой и биологической активностью органических молекул. В 1980-х годах для этого использовалась классическая линейная регрессия, а структура кодировалась с использованием определенных функций, например, в матричном представлении молекулярных диаграмм [Голосовые, 2021]. Сегодня классические алгоритмы машинного обучения и методы глубокого обучения проникают во все области химии, включая органическую химию, неорганическую химию, катализ, медицинскую химию, аналитическую химию и материаловедение. Количество задач, решаемых искусственным интеллектом, интенсивно увеличивается. К ним относятся прогнозирование физических свойств соединений, замена методов квантовой химии, требующих больших вычислительных затрат, моделями машинного обучения, мониторинг химических реакций, процессы распознавания образов в электронной микроскопии и сигналов в масс-спектрометрии.

В современных химических исследованиях особое значение имеет использование искусственного интеллекта для прогнозирования химических ре-

акций и многостадийного химического синтеза. Искусственный интеллект может обработать существующие многочисленные данные о химических реакциях, проанализировать и предсказать их результаты. Эта область развивается очень быстро и требует использования самых современных алгоритмов. Хотя сегодня метод имеет свои недостатки, качество прогностической модели улучшается год от года. Поэтому неудивительно, что в ближайшем будущем искусственный интеллект будет предсказывать реакции и химический синтез точно так же, как опытные химики [Как используют, 2022].

При этом одной из главных проблем в химии является трудность поиска взаимосвязи между структурой и свойствами химических веществ так их необходимо уметь хорошо имитировать. Это полностью отличается от стандартных задач, решаемых естественными нейронными сетями, таких как распознавание образов. Например, рисование цифры 6 в виде двух последовательных кругов – это не результат действия законов природы, а просто человеческий компромисс, зависящий от идеологических конструкций [Яцевич, 2020] и целей технологического, например – уменьшение экологических рисков [Михайлов, Бугрова, 2012; Митченков, Баумгартэн, Михайлов, Тайлакова, Сарапулова, 2013; Золотухин, 2013; Zolotukhin, Yazevich, Zolotukhina, Kozyreva, 2023], развития. Так в римской традиции для обозначения данного числа использовался знак – VI. Эти протоколы разработаны для удобства, поэтому способ выбора формы заключается в том, чтобы естественная нейронная сеть в человеческом разуме могла легко распознать ее на подсознательном уровне. Поэтому считается, что в некоторых случаях искусственные нейронные сети имитируют обработку информации в человеческом сознании и просты в использовании.

В последнее десятилетие был достигнут большой прогресс в предсказании кристаллической структуры материалов, что долгое время казалось почти безнадежным. С помощью эволюционного алгоритма USPEX удалось открыть множество новых стабильных химических веществ, на которые раньше химики не обращали внимания [Валиева, 2016].

Эволюционные методы (особенно генетические алгоритмы) активно используются в хемоинформатике уже более 25 лет и считаются традиционным методом стохастической оптимизации. Большинство известных алгоритмов для молекулярного докинга (процесс «стыковки» молекул органического соединения в полость «биологической мишени») основаны на нем [Пронкин, Сорокина, Ботнар, 2009].

Генетические алгоритмы также часто используются для выбора дескрипторов при построении моделей для предсказания химических свойств и для поиска оптимальных значений параметров для методов машинного обучения. Генетические алгоритмы также часто используются для создания карт пространства химических веществ и реакций.

Важным моментом является то, что химические структуры также легко записываются в виде строк, поэтому используется кодировка SMILES. В этом случае созданное латентное пространство хорошо подходит для представления химических образцов для использования при построении моделей «структура-свойство». Более того, когда обученная таким образом рекуррентная нейронная сеть запускается в генеративном режиме, генерируются новые структуры соединений. Это может, например, решить проблему молекулярного дизайна новых лекарств [Нейн, Иванцова, 2020].

Использование ИИ прогнозируется во множестве направлений синтетической химии, при этом некоторые из них уже сегодня частично реализованы. Например, технологии ИИ, такие как обработка слов и распознавание изображений, уже активно используются для извлечения из литературы информации о методах химического синтеза, свойствах и реакционной способности. Это позволило значительно снизить затраты на привлечение большого числа квалифицированных химиков для извлечения информации из большого количества опубликованной литературы и регистрации ее в базах данных [Патент, 2018]

В будущем искусственный интеллект будет отвечать за регулярный просмотр и анализ огромного количества опубликованной литературы по химиче-

скому синтезу и химическим свойствам. У химиков появятся «интеллектуальные помощники», которые смогут отвечать на вопросы, возникающие в их работе, например, как лучше синтезировать химические вещества или какие вещества следует синтезировать для той или иной цели. Инструменты ИИ уже внедрены в такие области, как синтетическая химия, фармацевтика, биоинформатика, материаловедение и робототехника. В перспективе это может привести к значительному повышению эффективности разработки новых лекарств и материалов, причем ИИ будет не только планировать, но и осуществлять обычный химический синтез. В более отдаленном будущем ИИ станет важным инструментом для планирования и проведения химических исследований при помощи хемоинформатики. Также данные технологии будут способствовать снижению рутинной нагрузки на специалистов-химиков и позволят сделать работу химиков более творческой и продуктивной.

Особую эффективность от внедрения ИИ в синтетическую химию ожидают в решении проблемы, известной как «проектирование с нуля». Так с помощью ИИ разработана технология, с помощью которой происходит производство молекул с заданными характеристиками. В основе процедуры лежит обработка ИИ специально выбранной молекулы, которая помещается в нейронную сеть. Компьютер обрабатывает выбранную молекулу и генерирует серию чисел. Полученные числа помещаются в другую нейронную сеть, которая воспроизводит те же молекулы. Когда последовательность чисел заменяется новым вектором, дешифратор производит новую молекулу [Роботы-лаборанты, 2023]. В результате получается нейронная сеть, которая может предсказывать молекулы, и все, что нужно сделать технологу, – это сознательно настроить ее на вектор, соответствующий определенной биологической активности.

Одним словом, существует множество способов производства молекул. Однако с практической точки зрения нам по-прежнему необходимо их синтезировать на основе диалектического [Золотухин, Золотухина, 2007] взаимодействия. Для этого требуется много информации, включая стратегии синтеза, усло-

вия реакции, параметры синтеза и формулы реакции. Поэтому необходима модель, способная предсказать все синтетические параметры для конкретной формы молекулы. Чтобы создать полноценного химического робота требуется устройство, способное выполнять все вышеперечисленные функции. Поэтому ожидается, что появятся роботизированные фермы, выполняющие простые синтезы без непосредственного участия человека.

Таким образом, искусственный интеллект в современной химии имеет множество направлений применения. Его значимость и необходимость обнаруживается как в области производства нового знания, исследовании свойств новых химических соединений и материалов, так и создании современных химических технологий и эффективных производств на их основе. Применение ИИ позволит обеспечить прорыв в медицинской химии (фармацевтике), строительстве, разработке новых материалов в химической промышленности, космической отрасли, биохимии и других отраслях.

Библиографический список

1. Валиева М. Е. Лаборатория компьютерного дизайна материалов: что может дать USPEX? Биомолекула от 03.07.2016. . [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://biomolecula.ru/articles/laboratoriia-kompiuternogo-dizaina-materialov-chto-mozhet-dat-uspex> (дата обращения 14.05.2023).
2. Голосовые помощники: как они появились, распространенные заблуждения о них. – Текст: электронный // БЛОГ Web Программиста. 25.02.2021. [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://juice-health.ru/technology/962-golosovye-pomoshchniki> (дата обращения 14.05.2023).
3. Золотухин В. М., Золотухина Н. А. Философские вопросы химии: проблемы и методологические основания // Вестник Кузбасского государственного технического университета. 2007. – № 2 (60). – С. 115–118.
4. Золотухин В. М. Социокультурные и правовые аспекты экологической безопасности. / В сборнике: Безопасность жизнедеятельности предприятий в промышленно развитых регионах. Материалы X Международная научно-практическая конференция. 2013. – С. 187–190.
5. Как используют искусственный интеллект в химии 10.11.2022. [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://dzen.ru/a/Y2ymTcdU2G3jfWFW> (дата обращения 14.05.2023).
6. Как устроен искусственный интеллект. Дзен [сайт]. [Электронный ресурс]. Режим доступа: 05.03.2021. - URL: <https://dzen.ru/a/YEI98J6aVzXBa5zW> (дата обращения 14.05.2023).
7. Михайлов В. Г., Бугрова С. М. Проблемы управления отходами химических производств на примере переработки полимерного вторичного сырья. // В мире научных открытий. 2012. – № 8-1 (32). – С. 170–189.
8. Митченков И. Г., Баумгартэн М. И., Михайлов В. Г., Тайлакова А. А., Сарапулова Т. В. Использование ВЕБ-технологий для реализации методики оценивания экологических

проблем. // Вестник Кузбасского государственного технического университета. 2013. – № 4 (98). – С. 136–139.

9. Нейн Ю. И., Иванцова М. Н. Компьютерное представление химической информации : учебное пособие: под общ. ред. М. Ф. Костериной. – Екатеринбург : Изд-во Урал. ун-та, 2020. – 142 с.

10. Одерски М., Спун Л., Веннерс Б. Профессиональное программирование. 4-е изд. Scala. – СПб.: Питер, 2021. – 720 с. [Электронный ресурс]. Режим доступа: https://coderbooks.ru/books/scala/scala_professionalnoe_programmirovaniye_4_izd_oderski_2021/ (дата обращения: 14.05.2023).

11. Патент № 2017118756 Российская Федерация – Чулинин Ю. Г. распознавание символов с использованием искусственного интеллекта RU2661750C1. – 2018.07.19.

12. Пронкин П. Г., Сорокина О.Н., Ботнарь Ю.В. Эволюция средств и методов информатики в практической и фундаментальной химии. // Прикладная информатика. – 2009. – № 1 (19). – С. 69-74.

13. Роботы-лаборанты, разработка лекарств и не только: какие задачи искусственный интеллект уже помогает решать химикам. – 03.03.2023. [Электронный ресурс]. Режим доступа: https://news.itmo.ru/ru/science/life_science/news/13095/ (дата обращения 14.05.2023).

14. Сизов, А. Что такое машинное обучение? Методы, типы, задачи и примеры машинного обучения. // «Майнинг Криптовалюты» [сайт]. 2020. [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://mining-cryptocurrency.ru/mashinnoe-obuchenie-metody-tipy/> (дата обращения 14.05.2023).

15. Яцевич М. Ю. Особенности и факторы взаимодействия феноменов науки и идеологии. // В сборнике: Социальные коммуникации: философские, политические, культурно-исторические измерения. сборник статей I Всероссийской научно-практической конференции с международным участием. Кемеровский государственный университет. – Кемерово, 2020. – С. 262–267.

16. Федоров Д. Ю. Программирование на языке высокого уровня Python : учебное пособие для прикладного бакалавриата. – 2-е изд., перераб. и доп. – Москва : Издательство Юрайт, 2019. – 161 с. [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://urait.ru/bcode/437489> (дата обращения: 14.05.2023).

17. Zolotukhin V., Yazevich M., Zolotukhina N., Kozyreva M. The problems of legal regulation of the environmental policy of the resource-producing region E3S Web of Conferences Volume 376, 2023. 05052. <https://doi.org/10.1051/e3sconf/202337605052>.

I. A. Gusarov

T.F. Gorbachev Kuzbass State Technical University, Kemerovo, Russia

THE INFLUENCE OF ARTIFICIAL INTELLIGENCE ON THE DEVELOPMENT OF CHEMISTRY

Scientific supervisor: Ph.D., Associate Professor, Department of History, Philosophy and Social Sciences M. Y. Yatsevich

The questions of the possibilities of using artificial intelligence in various fields of chemical knowledge are considered. It is emphasized that over time, the number of tasks solved by artificial intelligence increases intensively, namely: prediction of the physical properties of compounds, replacement of quantum chemistry methods, monitoring of chemical reactions, pattern recognition processes in electron microscopy and signals in mass spectrometry, etc.

Keywords: artificial intelligence, software, chatbot, forecasting, chemical reactions.