

ВИКОРИСТАННЯ ШТУЧНОГО ІНТЕЛЕКТУ ПРИ ВИВЧЕННІ ХІМІЇ У ВИЩИХ НАВЧАЛЬНИХ ЗАКЛАДАХ

Досягнення в галузі штучного інтелекту (ШІ), наявність великих баз даних Інтернету принесли нові можливості в сферу інформаційно-комунікаційних технологій. У контексті вивчення хімії ШІ вніс зміни у аналіз та застосування знань про молекулярну структуру, реакційну здатність і дизайн хімічних речовин [1]. Застосування ШІ у навчанні хімії містить кілька важливих аспектів. Одним із них є передбачення молекулярних властивостей, він надає можливості прогнозувати хімічні властивості на основі молекулярної структури. Це має великий вплив на структуру нових молекул, розробку ліків і дизайн матеріалів, які мають бажані властивості. ШІ зробив більш ефективним моделювання молекулярних структур [2]. Другим аспектом є те, що використання ШІ в хімії передбачає аналіз великих даних, що дозволяє отримувати цінну інформацію з великих баз даних про властивості молекул або хімічні взаємодії. Ще одним аспектом є кращий доступ студентів-хіміків до вдосконалених та персоналізованих інструментів навчання, складних прогностичних моделей для розуміння молекулярних властивостей, симуляції хімічних речовин реакцій, вони можуть передбачити експериментальні результати з високим ступенем точності [3].

Метою роботи є аналіз попередніх досліджень про застосування ШІ при вивченні хімії.

Переваги ШІ у вивченні хімії:

1. **ШІ може прогнозувати молекулярні властивості** з високою точністю на основі молекулярної структури. Це дозволяє точніше прогнозувати реакційну здатність, стабільність або інші властивості молекули. У роботі [4] показано розвиток штучної нейронної мережі Chemserption, яка призначена для прогнозування молекулярних властивостей з вищою продуктивністю, ніж у традиційних моделей.

2. **Моделювання молекулярної структури.** Використовуючи методи машинного навчання та нейронні мережі, ШІ може пришвидшити процес моделювання молекулярних структур, забезпечуючи ефективнішу розробку нових молекул. У статті [5]

показано використання підходу нейронно-символічного машинного навчання для прогнозування хімічних реакцій ретросинтезу, які є ключовим процесом в органічній хімії. Автори поєднали методи машинного навчання з символьними представленнями в органічній хімії. Це може мати серйозні наслідки для розуміння та розробки процесів молекулярного синтезу.

3. Аналіз великих хімічних даних. ШІ здатний швидко обробляти й аналізувати великі об'єми хімічних даних, допомагаючи витягувати приховані закономірності, зв'язки та тенденції. У роботі [6] створено платформу для тестування та порівняння різних підходів до машинного навчання для прогнозування властивостей молекул. Метою було забезпечення надійних і послідовних стандартів оцінювання для дослідників, які займаються розробкою алгоритмів і машинним навчанням у хімії. Це вносить важливий внесок у зміцнення бази знань про ефективність методів машинного навчання для прогнозування молекулярних властивостей і є дуже корисним довідковим матеріалом у порівнянні ефективності різних алгоритмів у хімічному контексті.

4. Прогнозування хімічної реактивності та використання. ШІ дозволяє точніше прогнозувати хімічну реакційну здатність, дозволяючи розробляти нові ліки, матеріали зі спеціальними властивостями або більш ефективні хімічні каталізатори. У роботі [2] обговорюється використання підходу багатозадачного глибокого навчання в контексті фармацевтичної промисловості. Використовуючи глибокі методи та глибоке навчання, ця стаття намагається інтегрувати та вивчати кілька завдань одночасно, наприклад, прогнозування біологічної активності або молекулярних властивостей хімічних сполук.

5. Зменшення залежності від експерименту. Завдяки високим можливостям прогнозування ШІ може допомогти зменшити кількість повторюваних експериментів, заощадивши час і ресурси в хімічних дослідженнях. Це твердження узгоджується з висновками статті [7], у якій знайдено підхід до автоматичного молекулярного проектування з використанням безперервного представлення молекул на основі даних. Підхід спрямований на автоматичне створення нових молекул із бажаними властивостями на основі безперервного представлення молекулярної структури, що дозволяє ефективно моделювати молекулярні структури та використовувати методи машинного навчання для прогнозування властивостей або функцій отриманих молекул. Такі підходи створюють міцну основу для більш автоматизованих та інноваційних підходів до молекулярного дизайну в хімії.

6. Інновації в хімічних дослідженнях. Застосування ШІ в хімії відкриває двері для проривів, прискорює відкриття нових хімічних речовин і забезпечує глибше розуміння молекулярних властивостей. Автори статті [8] обговорюють застосування техніки машинного навчання в молекулярній і матеріалознавчій сферах. Показано, що машинне навчання стало дуже корисним інструментом для прогнозування, аналізу, та проектування властивостей нових молекул і матеріалів. Автори пояснюють різні застосування машинного навчання для прогнозування властивостей матеріалів і пошуку бажаних молекулярних структур, а також ілюструють, як ця технологія прискорила прогрес у галузі хімії та дослідження матеріалів.

7. Оптимізація хімічного процесу. Завдяки кращим можливостям прогнозування та моделювання ШІ може допомогти оптимізувати хімічні процеси та підвищити ефективність виробництва та якість продукції.

Проблеми, з якими стикаються під час впровадження ШІ у навчанні хімії:

- **Якість і кількість відповідних хімічних даних** часто є проблемою, доступні бази даних обмежені в охопленні або різноманітності, що може вплинути на точність і узагальнення побудованих моделей.

- **Перевірка моделі.** Складні моделі часто важко інтерпретувати. Це може бути проблемою в хімії, де важливість розуміння молекулярної структури та взаємодій є ключовою.

- **Етика та безпека.** Конфіденційні дані в хімічних дослідженнях необхідно зберігати в безпеці, особливо під час використання методів ШІ, які потребують доступу до конфіденційних даних або цінних експериментів. Використання ШІ під час вивчення хімії також викликає етичні питання щодо відповідального використання цієї технології, особливо під час розробки нових ліків або хімічних речовин.

- **Алгоритмічні та обчислювальні обмеження.** Алгоритми ШІ не є досконалими та все ще мають обмеження в розумінні складних моделей у хімічних даних. Використання технології ШІ в хімії вимагає потужної обчислювальної інфраструктури для обробки та аналізу великих об'ємів даних, що може стати перешкодою для деяких дослідників.

- **Інтеграція зі знаннями домену.** Розуміння результатів ШІ в хімічному контексті та їх інтеграція з наявними хімічними знаннями є додатковим викликом.

• **Майбутні виклики.** Постійне розширення хімічних знань і технологій ІІІ вимагає постійного оновлення існуючих моделей, що вимагає додаткових досліджень.

Вирішення цих проблем вимагатиме співпраці між хіміками, комп'ютерниками та експертами зі ІІІ, щоб подолати обмеження, покращити інтерпретацію та забезпечити безпеку та етику застосування ІІІ у навчанні хімії.

Література:

1. Akbar, J. S., Djakariah, D. (2024). Application Of Artificial Intelligence (AI) In Learning Chemistry. *Journal of Education and Social Science* 1(2), 41–45. <https://jurnal.devitara.or.id/index.php/pendidikan>
2. Ramsundar, B., Liu, B., Wu, Z., Verras, A., Tudor, M., Sheridan, R. P., ... & Pande, V. (2017). Is multitask deep learning practical for pharma? *Journal of Chemical Information and Modeling*, 57(8), 2068–2076. DOI: 10.1021/acs.jcim.7b00146
3. Akbar, J. S., Dasna, I. W., Wonorahardjo, S. (2019). The effect of guided inquiry-based practicum learning and prior knowledge on learning outcomes and science process skills of high school students on solubility and solubility products. *Jurnal Pendidikan Sains*, 7(3), 80–84.
4. Goh, G. B., Siegel, C., Vishnu, A., Hodas, N. O. (2017). Chemception: A Deep Neural Network with Minimal Chemistry Knowledge Matches the Performance of Expert-developed QSAR/QSPR Models. *arXiv preprint arXiv:1706.06689*. DOI: 10.48550/arXiv.1706.06689
5. Segler, M. H., Waller, M. P. (2017). Neural-symbolic machine learning for retrosynthesis and reaction prediction. *Chemistry – A European Journal*, 23(25), 5966–5971. DOI: 10.1002/chem.201605499
6. Wu, Z., Ramsundar, B., Feinberg, E. N., Gomes, J., Geniesse, C., Pappu, A. S., ... & Pande, V. (2018). MoleculeNet: a benchmark for molecular machine learning. *Chemical science*, 9(2), 513–530. DOI: 10.1039/c7sc02664a
7. Gómez-Bombarelli, R., Wei, J. N., Duvenaud, D., Hernández-Lobato, J. M., Sánchez-Lengeling, B., Sheberla, D., ... & Aspuru-Guzik, A. (2016). Automatic chemical design using a data-driven continuous representation of molecules. *ACS Central Science*, 4(2), 268–276. DOI: 10.48550/arXiv.1610.02415
8. Butler, K. T., Davies, D. W., Cartwright, H. *et al.* Machine learning for molecular and materials science. *Nature*, 559, 547–555 (2018). DOI: 10.1038/s41586-018-0337-2