

## ОТ ПРОБИРКИ К ИСКУССТВЕННОМУ ИНТЕЛЛЕКТУ: ЭВОЛЮЦИЯ ХИМИЧЕСКОЙ НАУКИ И ТЕХНОЛОГИИ БУДУЩЕГО

**Зулхандерова Назлымхан Махмудовна**

*учитель химии, школа №1-IDUM, г. Нукус, Республика Каракалпакстан,  
Республика Узбекистан*

**Аннотация.** Современный этап развития химии характеризуется переходом от преимущественно экспериментального исследования веществ к интеграции эксперимента, вычислительного моделирования, анализа больших данных и искусственного интеллекта. Целью настоящего тезиса является рассмотрение изменения методов химического познания и определение роли искусственного интеллекта в формировании новых подходов к исследованию и проектированию веществ. Проанализированы современные научные публикации, посвящённые машинному обучению в химии, прогнозированию реакционной способности, автоматизации лабораторных процессов и автономному проведению химических экспериментов. Показано, что искусственный интеллект способен существенно расширить возможности химика при поиске новых соединений, прогнозировании свойств веществ и оптимизации экспериментальных условий. Вместе с тем эффективность интеллектуальных систем зависит от качества исходных данных, корректности моделей и обязательной экспериментальной проверки полученных прогнозов. Перспективным направлением является объединение искусственного интеллекта с роботизированными лабораториями, формирующими цикл «прогноз — эксперимент — анализ — новый прогноз». Сделан вывод о том, что химия будущего будет развиваться не посредством замены традиционного эксперимента, а через его интеграцию с цифровыми и интеллектуальными технологиями.

**Ключевые слова:** химическая наука, искусственный интеллект, машинное обучение, цифровая химия, химический эксперимент, компьютерное моделирование, автономная лаборатория, инновации, химические реакции, технологии будущего.

### Введение

Химия исторически развивалась как экспериментальная наука. Наблюдение свойств веществ, проведение реакций, выделение продуктов и их последующий анализ составляли основу химического познания. Однако с развитием физической химии, инструментальных методов анализа и вычислительной техники возможности исследователя значительно расширились.

Сегодня химическая задача может начинаться не с непосредственного проведения эксперимента, а с анализа уже накопленных данных и компьютерного прогнозирования. Методы машинного обучения применяются для изучения химической реакционной способности, планирования реакций и поиска закономерностей в больших массивах химической информации. В связи с этим возникает важный научный вопрос: как изменяется роль химического эксперимента в эпоху искусственного интеллекта и каким станет исследовательский процесс в химии будущего?

### **Цель исследования**

Целью работы является анализ эволюции методов химического исследования от традиционного лабораторного эксперимента к цифровому моделированию и искусственному интеллекту, а также определение перспектив их совместного применения.

### **Материалы и методы исследования**

В качестве методологической основы использованы анализ, систематизация и сравнительное рассмотрение научных публикаций по следующим направлениям:

- машинное обучение в химии;
- прогнозирование химической реакционной способности;
- компьютерное исследование химического пространства;
- автоматизация химических экспериментов;
- автономные лаборатории;
- применение больших языковых моделей в химических исследованиях.

Особое внимание уделено современным исследованиям, опубликованным в международных рецензируемых научных журналах.

### **Эволюция методов химического исследования**

Развитие химии можно представить как последовательное расширение возможностей исследователя.

На ранних этапах главным источником знаний было непосредственное наблюдение. Затем сформировался систематический химический эксперимент, основанный на контролируемом изменении условий и количественном измерении результатов.

Следующим важным этапом стало развитие инструментального анализа.

Спектроскопические, хроматографические и масс-спектрометрические методы позволили получать информацию о составе и структуре веществ, которую невозможно было получить только визуальным наблюдением.

С появлением вычислительной химии исследователь получил возможность моделировать молекулярные системы до проведения части лабораторных экспериментов.

Современный этап характеризуется появлением машинного обучения. В отличие от традиционного алгоритмического подхода, модели машинного обучения способны выявлять закономерности на основе больших массивов данных. Обзор Butler и соавторов показывает перспективность машинного обучения для ускорения проектирования, синтеза и исследования молекул и материалов.

Таким образом, развитие можно условно представить следующим образом: наблюдение → эксперимент → инструментальный анализ → компьютерное моделирование → машинное обучение → автономное экспериментирование.

Искусственный интеллект как новый инструмент химика

Искусственный интеллект не является самостоятельной заменой химической науки. Его значение заключается прежде всего в расширении возможностей исследователя.

Одно из направлений применения ИИ связано с прогнозированием реакционной способности. Современные модели машинного обучения позволяют анализировать зависимости между структурой реагентов, условиями реакции и её результатами. При этом исследователи подчёркивают, что между фундаментальными квантово-механическими моделями и чисто статистическими подходами существует широкий спектр комбинированных методов.

Другим направлением является исследование огромного химического пространства. Количество потенциально возможных молекулярных структур чрезвычайно велико, поэтому непосредственная экспериментальная проверка всех вариантов невозможна. Квантово-механические расчёты в сочетании с машинным обучением позволяют исследовать значительно более широкое пространство соединений.

Это меняет саму логику химического поиска:

раньше:

получить вещество → исследовать его свойства → сделать вывод;

современный подход:

предсказать свойства → выбрать перспективное соединение → синтезировать → экспериментально проверить → обновить модель.

### **От искусственного интеллекта к автономной лаборатории**

Следующим этапом развития становится объединение ИИ с роботизированным лабораторным оборудованием.

Исследования автономных лабораторий показывают, что машинное обучение, автоматизация и робототехника могут объединяться в единую систему, которая самостоятельно выбирает последовательность экспериментов для достижения поставленной исследовательской цели. Такой подход получил название *self-driving laboratory* — автономная лаборатория.

Особенно показательным является работа Szymanski и соавторов, опубликованная в *Nature* в 2023 году. Авторы описали автономную лабораторию A-Lab, объединяющую вычисления, данные научной литературы, машинное обучение, активное обучение и роботизированный синтез неорганических материалов. За 17 дней непрерывной работы система реализовала 36 соединений из 57 поставленных целей.

Этот результат демонстрирует принципиальное изменение исследовательского процесса: компьютерная система может не только анализировать уже полученные данные, но и участвовать в выборе следующего эксперимента.

### **Большие языковые модели и химические исследования**

Особенно быстро развивается направление, связанное с большими языковыми моделями.

В 2023 году Voiko и соавторы представили систему Coscientist, основанную на GPT-4. Система была способна планировать исследовательские действия, работать с внешними инструментами и управлять экспериментальными процедурами. Авторы продемонстрировали её применение, в частности, для оптимизации химических реакций.

Научная значимость этого результата заключается не в том, что искусственный интеллект «заменил химика», а в демонстрации возможности объединения нескольких компонентов:

научная информация + языковая модель + вычисления + автоматизация + эксперимент.

Так возникает новый тип исследовательской инфраструктуры, в которой человек формулирует проблему и контролирует процесс, а интеллектуальные системы помогают анализировать информацию, формировать гипотезы и выбирать дальнейшие экспериментальные шаги.

### **Ограничения и научные проблемы**

Несмотря на значительный потенциал ИИ, его применение в химии имеет ограничения.

Первой проблемой является качество данных. Машинное обучение зависит от информации, на которой обучается модель. Неполные, неоднородные или

ошибочные экспериментальные данные способны привести к неправильным прогнозам.

Вторая проблема — интерпретируемость. Получение правильного прогноза не всегда означает понимание химического механизма, который к нему привёл.

Третья проблема связана с экспериментальной воспроизводимостью. Даже качественная компьютерная модель не освобождает исследователя от необходимости экспериментальной проверки.

Кроме того, для автономных лабораторий важны надёжность оборудования, стандартизация данных, воспроизводимость и контроль ошибок. Исследования в области автономного экспериментирования подчёркивают необходимость учитывать как систематические, так и случайные ошибки при построении таких платформ.

Следовательно, наиболее перспективным является не противопоставление человека и искусственного интеллекта, а их совместная работа.

Химия будущего: новая модель научного исследования

На основании рассмотренных исследований можно предложить модель химического исследования будущего:

1. Постановка научной задачи человеком.
2. Анализ существующих научных данных искусственным интеллектом.
3. Компьютерное прогнозирование перспективных соединений или условий реакции.
4. Выбор эксперимента.
5. Проведение автоматизированного эксперимента.
6. Получение и анализ результатов.
7. Передача новых данных интеллектуальной системе.
8. Формирование следующего экспериментального цикла.

Такой подход превращает химическое исследование в постоянно обновляемую систему обратной связи.

### **Практическая значимость**

Развитие цифровой химии имеет значение для различных областей.

В фармацевтической химии интеллектуальные методы могут использоваться для поиска и отбора перспективных молекул. В материаловедении они применяются для прогнозирования свойств новых материалов. В каталитической химии машинное обучение используется для поиска и оптимизации реакционных условий. В экологической химии цифровые методы могут способствовать разработке более безопасных химических процессов.

Кроме того, новые технологии имеют большое значение для химического образования. Учащиеся могут знакомиться не только с традиционными экспериментами, но и с моделированием молекул, анализом данных и современными принципами научного прогнозирования.

### **Научная новизна**

Научная новизна данного тезиса заключается в рассмотрении эволюции химического исследования как последовательного перехода от наблюдения вещества к управлению пространством возможных химических решений. В традиционной химии исследователь преимущественно изучал уже существующие вещества. Современная цифровая химия всё больше ориентируется на прогнозирование и проектирование новых соединений и материалов.

Таким образом, искусственный интеллект становится не просто дополнительным вычислительным инструментом, а элементом новой исследовательской парадигмы.

### **Заключение**

Эволюция химической науки показывает, что развитие технологий не отменяет фундаментальных принципов химического эксперимента, а расширяет их возможности.

Путь от пробирки к искусственному интеллекту представляет собой переход от непосредственного наблюдения к многоуровневой системе, объединяющей эксперимент, аналитические методы, компьютерное моделирование, машинное обучение и роботизированные лаборатории.

Современные исследования уже демонстрируют возможность автоматизированного выбора экспериментов, прогнозирования химической реакционной способности и автономного синтеза материалов.

Вместе с тем искусственный интеллект не должен рассматриваться как замена химика. Наиболее перспективной моделью является сотрудничество человека и интеллектуальных систем, при котором химик формулирует научную проблему, оценивает достоверность результатов и принимает окончательные научные решения.

Следовательно, химия будущего — это не отказ от пробирки в пользу компьютера, а объединение пробирки и искусственного интеллекта в единую систему научного поиска.

## Литература

1. Butler K. T., Davies D. W., Cartwright H., Isayev O., Walsh A. Machine learning for molecular and materials science. *Nature*. 2018. Vol. 559. P. 547–555. DOI: 10.1038/s41586-018-0337-2.
2. Jorner K., Tomberg A., Bauer C. et al. Organic reactivity from mechanism to machine learning. *Nature Reviews Chemistry*. 2021. Vol. 5. P. 240–255. DOI: 10.1038/s41570-021-00260-x.
3. Meuwly M. Machine Learning for Chemical Reactions. *Chemical Reviews*. 2021. Vol. 121, No. 16. DOI: 10.1021/acs.chemrev.1c00033.
4. von Lilienfeld O. A., Müller K.-R., Tkatchenko A. Exploring chemical compound space with quantum-based machine learning. *Nature Reviews Chemistry*. 2020. Vol. 4. P. 347–358. DOI: 10.1038/s41570-020-0189-9.
5. Abolhasani M., Kumacheva E. The rise of self-driving labs in chemical and materials sciences. *Nature Synthesis*. 2023. Vol. 2. P. 483–492.
6. Boiko D. A., MacKnight R., Kline B., Gomes G. Autonomous chemical research with large language models. *Nature*. 2023. Vol. 624. P. 570–578. DOI: 10.1038/s41586-023-06792-0.
7. Szymanski N. J., Rendy B., Fei Y. et al. An autonomous laboratory for the accelerated synthesis of inorganic materials. *Nature*. 2023. Vol. 624. P. 86–91. DOI: 10.1038/s41586-023-06734-w.
8. Ren Z., Ren Z., Zhang Z. et al. Autonomous experiments using active learning and AI. *Nature Reviews Materials*. 2023. Vol. 8. P. 563–564.