Министерство образования, науки и молодежной политики Нижегородской области

Государственное бюджетное профессиональное образовательное учреждение

«Кстовский нефтяной техникум имени Бориса Ивановича Корнилова»

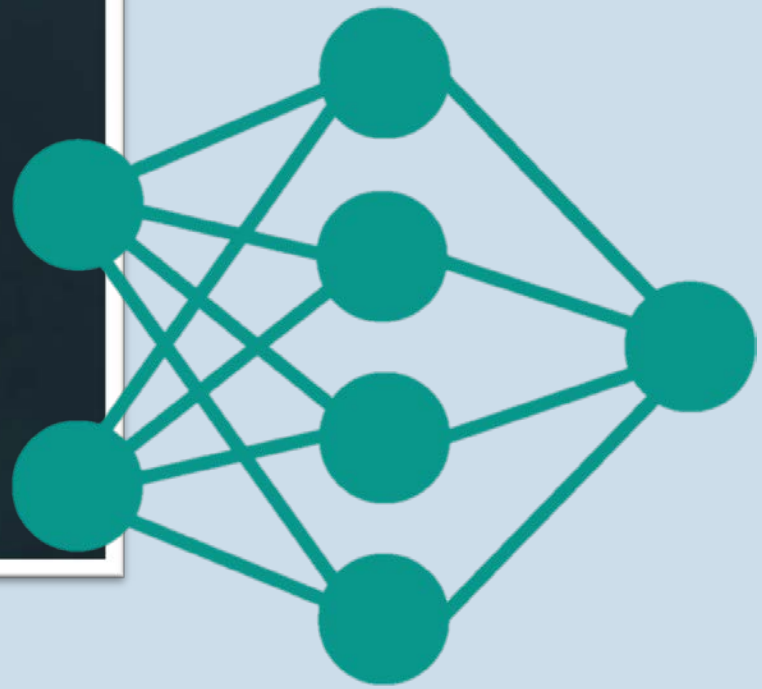
Девятые научно-практические Чтения 2021 года
Исследовательская работа
Направление работы: Информационные технологии: перспективы и проблемы
Название работы: Применение искусственного интеллекта в синтетической химии

Выполнила:
Голычева Ольга Сергеевна,
студентка 2 курса, специальность Технология аналитического контроля химических соединений

Руководитель:
Архипова Наталья Анатольевна, преподаватель дисциплины Электротехника и электроника

ЧТО ТАКОЕ ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ

Искусственный интеллект (сокращённо ИИ) – это технология создания компьютеров, компьютер-контролируемых роботов или программ, способных обучаться, принимать решения и выполнять действия, свойственные человеческому интеллекту.



ЧТО ТАКОЕ ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ

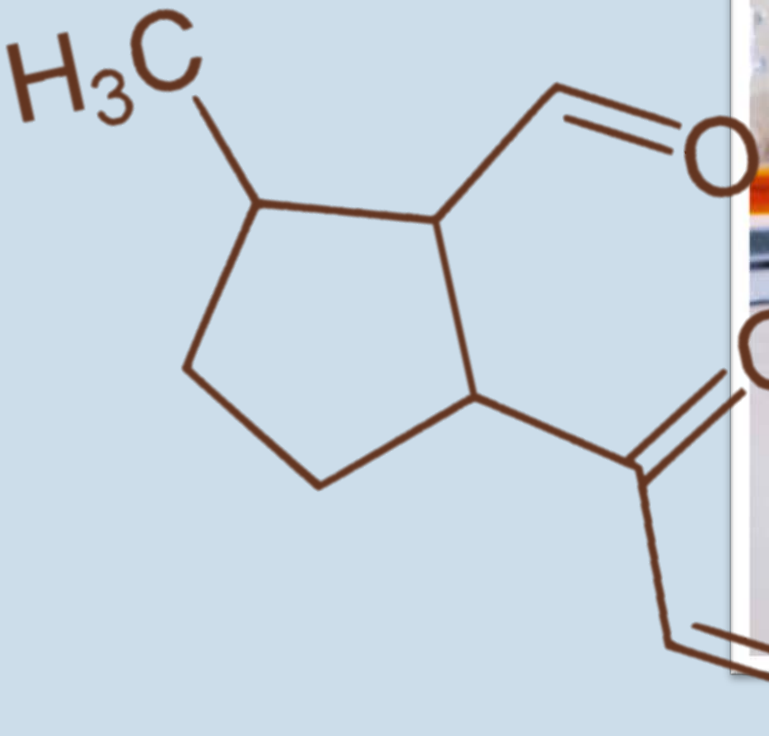
Искусственные нейронные сети создавались как математическая модель человеческого мозга.

В искусственной сети нейроны принято делить на три типа:

- **входные** – это нейроны, которые первые получают элементы исходной информации;
- **промежуточные** – это нейроны, которые обрабатывают информацию;
- **выходные** – это нейроны, которые выдают результат по той или иной задаче.

ОСНОВНЫЕ ЗАДАЧИ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА В СИНТЕТИЧЕСКОЙ ХИМИИ

Наиболее важными направлениями ИИ являются применение методов распознавания образцов в аналитических целях и предсказание возможности синтеза конкретного соединения, а также его свойств.



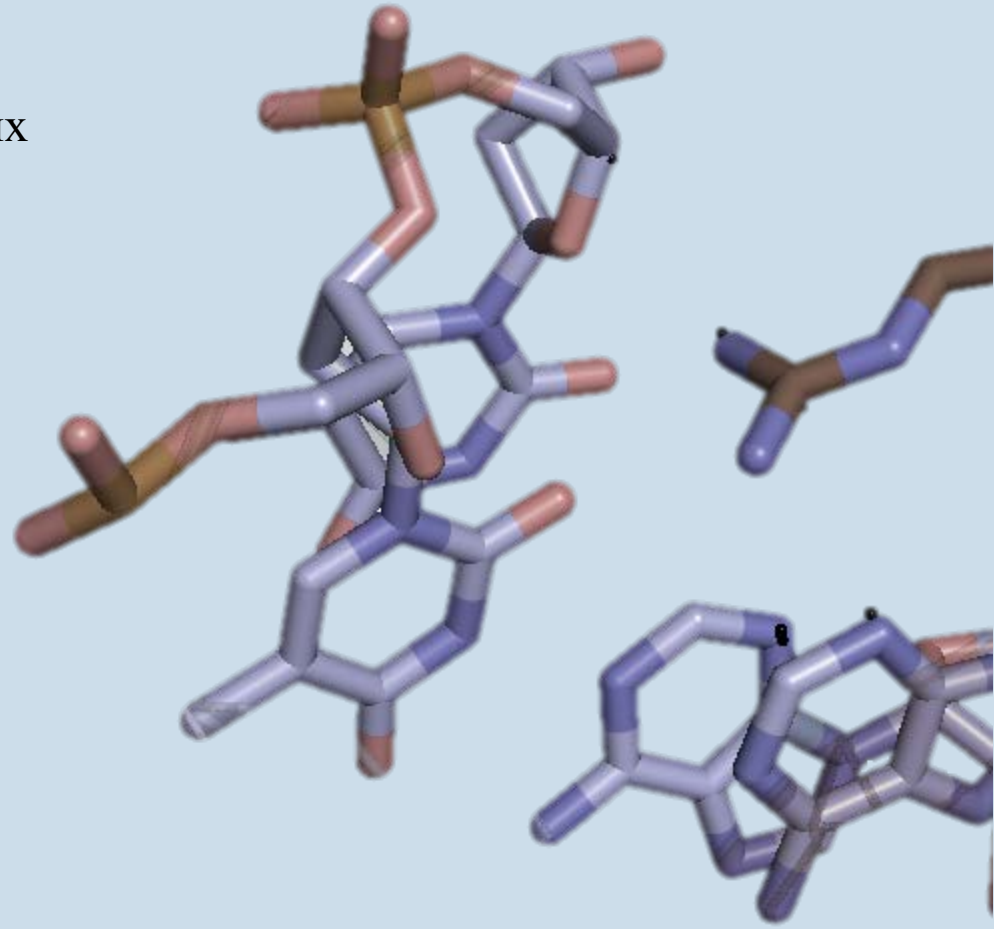
ОСНОВНЫЕ ЗАДАЧИ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА В СИНТЕТИЧЕСКОЙ ХИМИИ

Внедрение и использование искусственного интеллекта в анализе информации по химическим реакциям позволяет в течении малого времени получить ответы на следующие актуальные для химиков-синтетиков вопросы:

- как синтезировать заданное химическое соединение из доступных реагентов;
- как синтезировать химическое соединение, обладающее заданной активностью;
- что получится в результате реакции, если смешать заданные химические соединения в заданных условиях;
- в каких условиях следует проводить заданную реакцию;
- и др.

ОСНОВНЫЕ ЗАДАЧИ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА В СИНТЕТИЧЕСКОЙ ХИМИИ

Также, следует отметить, что одним из наиболее необходимых направлений применения искусственного интеллекта в синтетической химии является предсказание синтетической доступности органических соединений и использование различного рода данных в биохимии и структурной молекулярной биологии.

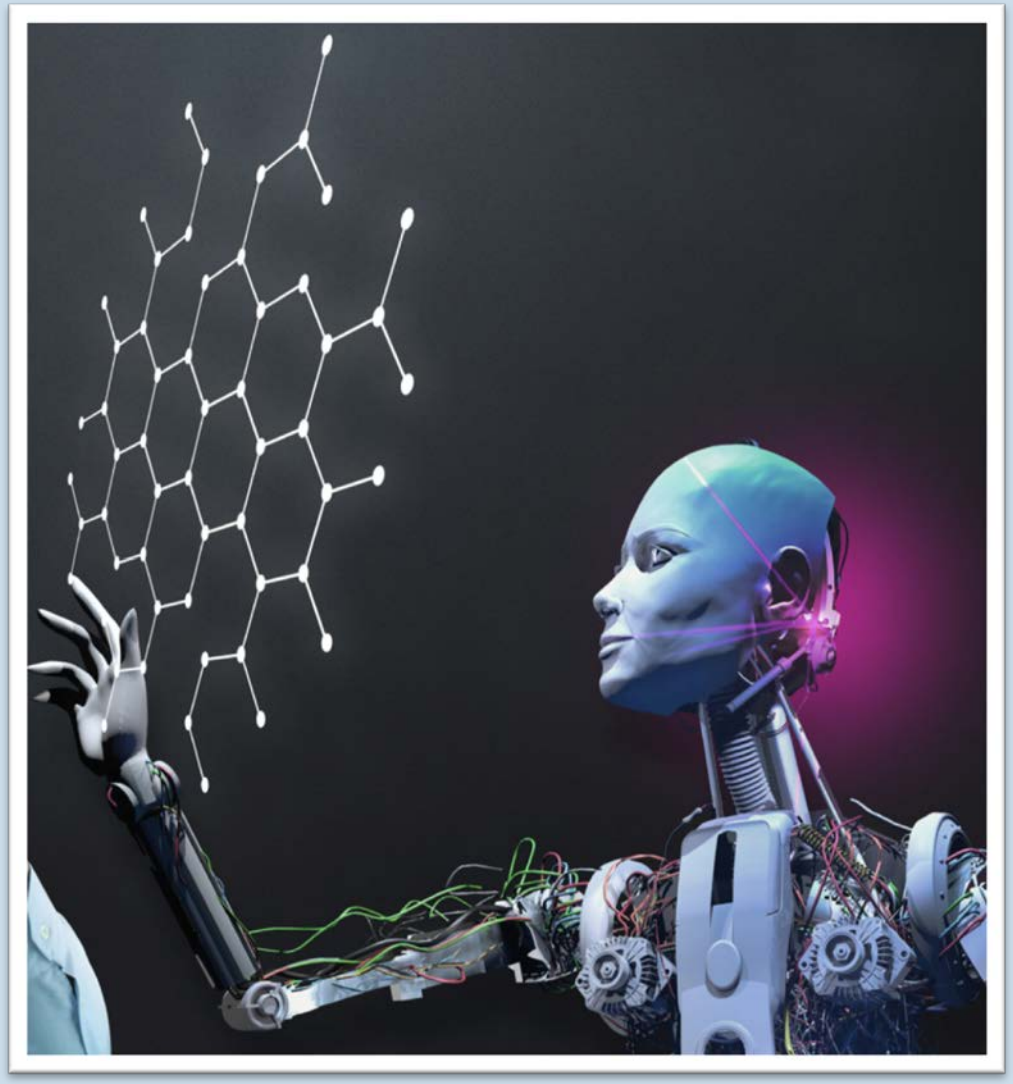


ПРОБЛЕМЫ РЕАЛИЗАЦИИ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА

Задачи искусственного интеллекта в синтетической химии велики и обширны, отсюда и вытекают проблемы реализации искусственного интеллекта.

Одной из ключевых проблем, возникающих при работе с базами данных, содержащими информацию о химических реакциях, является наличие в них ошибок, которые обусловлены следующим:

- проблемами, связанными с подготовкой исходных данных;
- неправильной аннотацией данных;
- некорректной автоматической обработкой информации о реакциях.



ПРОБЛЕМЫ РЕАЛИЗАЦИИ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА

Также большая сложность применения нейронных сетей, как и любого другого метода машинного обучения, для поиска соотношений между структурой и свойствами химических веществ заключается в том, что они должны моделировать реальную природу

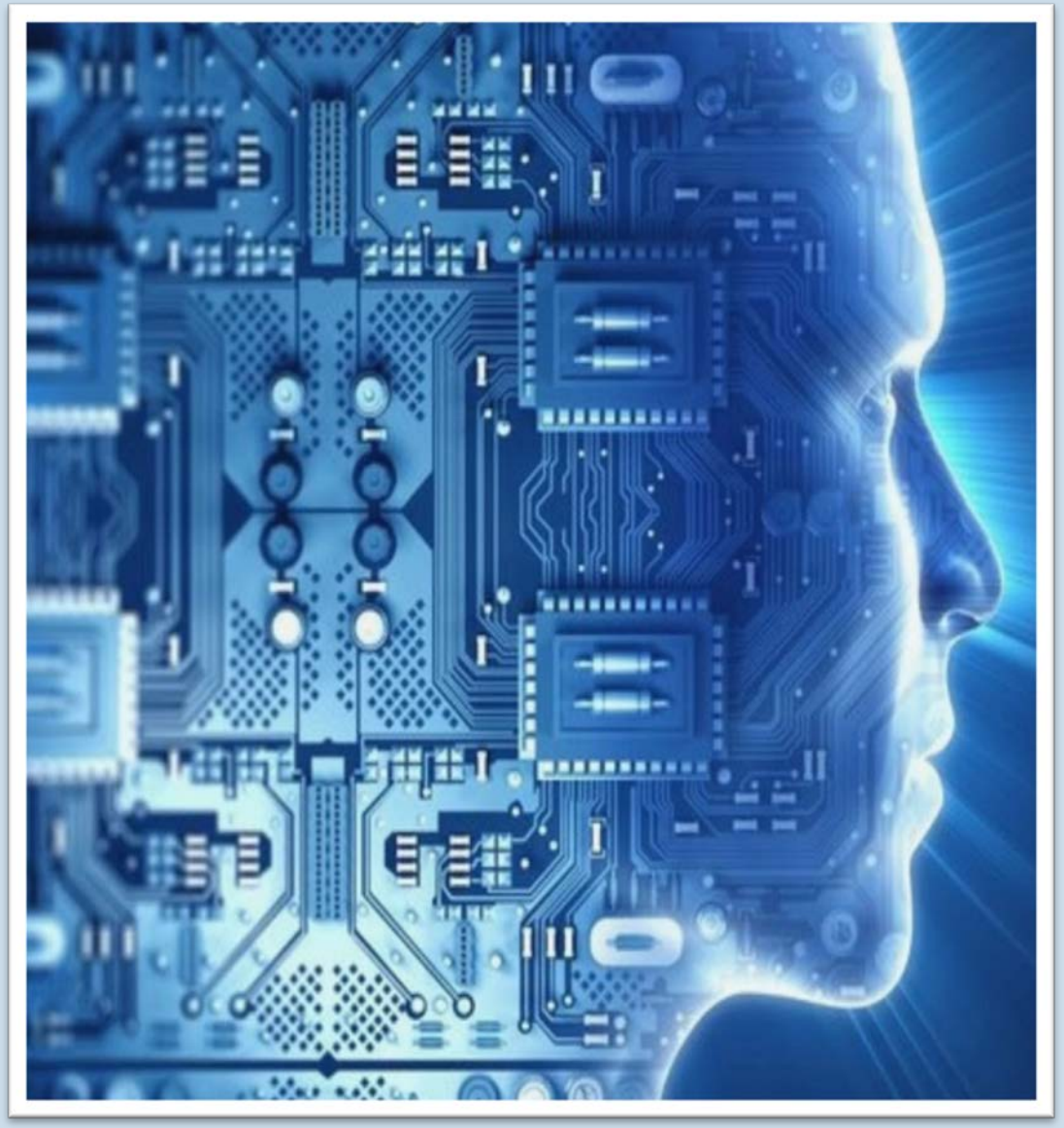
ПРОБЛЕМЫ РЕАЛИЗАЦИИ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА

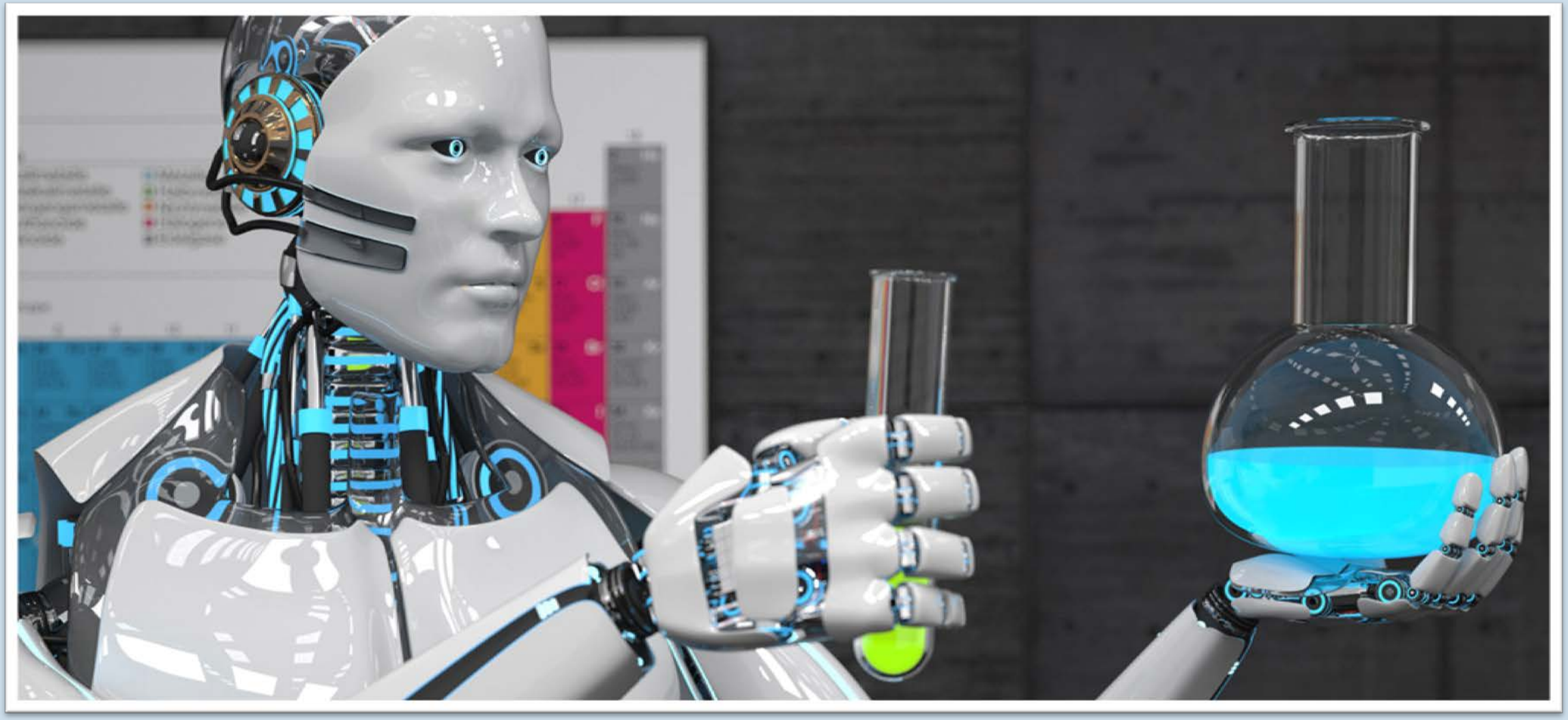
Несмотря на то, что разработано много инструментов для планирования стратегии синтеза химического соединения, до недавнего времени практически не существовали подходы для прогнозирования оптимальных условий проведения химический реакций. И даже сейчас существует несколько подходов к этой задаче, которые не являются полностью оптимальными для синтеза.

ПЕРСПЕКТИВЫ ВНЕДРЕНИЯ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА

На данный момент некоторые методы искусственного интеллекта уже используются, например, методы ИИ для обработки текстов и распознавания изображений из литературы и других информационных источников.

В будущем искусственный интеллект будет использоваться для регулярного просмотра и анализа огромного объёма публикуемой литературы по химическому синтезу и свойствам химических веществ.



ПЕРСПЕКТИВЫ ВНЕДРЕНИЯ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА

В области синтетической химии искусственный интеллект избавит людей от рутинной работы, которая занимает большую часть времени, и сделает работу химиков значительно более творческой и продуктивной.