

НАЙПЕРСПЕКТИВНІШІ ТЕХНОЛОГІЇ НА ОСНОВІ ШТУЧНОГО ІНТЕЛЕКТУ В ХІМІЧНІЙ ПРОМИСЛОВOSTІ

Габ А. І., Малишев В. В.
Ліцей 209 «Сузір'я» м. Києва, Україна
lina_gab@ukr.net

ШІ сприяє кардинальному перетворенню хімічної промисловості, аналітики прогнозують, що його вплив перевершить навіть вплив Інтернету. Від алгоритмів, які прискорюють молекулярний дизайн, до автоматизованих лабораторій, які підвищують швидкість і точність експериментів, ШІ трансформує засоби, прийоми та методи, якими хіміки розв'язують складні проблеми. Його вплив поширюється на винайдення нових матеріалів, оптимізацію реакцій та зусилля в напрямку сталого розвитку, що робить його незамінною силою в сучасній хімії. Відповідно до сучасних досліджень можна узагальнити найперспективніші технології на основі ШІ, які в майбутньому здійснять суттєві перетворення в хімії:

- розробка нових лікарських препаратів;
- аналіз значного обсягу даних;
- впровадження автоматизованих лабораторних платформ;
- інтеграція лабораторних приладів та інтернету речей;
- використання ШІ у спектроскопії та розробці аналітичних методів;
- застосування блокчейну для оптимізації ланцюгів постачання;
- використання технологій цифрового двійника;
- доповнена реальність та віртуальні лабораторії;
- обробка природної мови в хімічному просторі;
- розробка прогнозної токсикології;
- використання ШІ у зеленій хімії для захисту навколишнього середовища;
- розробка молекулярного дизайну;
- використання «розумного» управління хімічними процесами;
- прогнозування зв'язків структура-активність за допомогою глибокого навчання;
- експерименти високої пропускної здатності на основі ШІ;
- дизайн цифрових матеріалів та інформатика матеріалів;
- використання ШІ для оптимізації хімічних реакцій;
- запровадження автоматизованого планування синтезу;
- хімічна інформатика для управління великими наборами хімічних даних;
- використання ШІ у квантовій хімії для зменшення обчислювальних витрат та часу з глибшим розумінням фундаментальних.

Використання ШІ хімічними компаніями є природним наслідком їхнього прагнення до Промисловості 4.0, яка передбачає розвиток і злиття автоматизованого виробництва, обміну даних і виробничих технологій в єдину саморегульовану систему, з мінімальним втручанням людини у виробничий процес.

Підсумовуючи, ШІ має потенціал для революціонування хімічної промисловості, але важливо враховувати ризики та проблеми, пов'язані з його впровадженням. До них належать потенційні людські помилки, втрата робочих місць, конфіденційність даних та безпека. Однак, за умови вжиття належних заходів, можна досягти таких переваг, як підвищення ефективності, продуктивності, безпеки та сталого розвитку. Щоб максимізувати переваги та мінімізувати ризики, у хімічній промисловості слід розглянути поетапний підхід до впровадження ШІ, починаючи з пілотних проєктів та поступово збільшуючи масштаби.