

SUN'IY INTELLEKT KIMYOVIY REAKSIYALARNI MODELLASHTIRISHDA

Matyakubova Zebo Amanovna

Ogahiy ijod maktabi Kimyo fani o'qituvchisi

Annotatsiya: Ushbu maqolada sun'iy intellekt (SI) texnologiyalarining kimyoviy reaksiyalarni modellashtirishdagi o'rni tahlil qilinadi. An'anaviy kvant-kimyoviy usullarga nisbatan SI yondashuvlari (masalan, mashinaviy o'rganish, sun'iy neyron tarmoqlar va generativ algoritmlar) ko'p hollarda tezlik, aniqlik va moslashuvchanlik bo'yicha ustunlik qiladi. Tadqiqotda, ayniqsa, reaksiya kinetikasini bashorat qilish, reaksiya yo'llarini avtomatik ravishda aniqlash, yangi molekulalarni sintezlashni optimallashtirishda SI usullarining amaliy imkoniyatlari ko'rib chiqiladi. Mualliflar mavjud ilmiy adabiyotlar va eksperimental tajribalarni tahlil qilgan holda, SI texnologiyalarining kimyo faniga integratsiyalashuvi bo'yicha istiqbolli yo'nalishlar va amaliy tavsiyalarni taqdim etadi. Shu bilan birga, SI modellari bilan bog'liq mavjud cheklovlar va axborot ishonchliligi masalalariga ham e'tibor qaratiladi.

Kalit so'zlar: sun'iy intellekt, kimyoviy reaksiya, modellashtirish, mashinaviy o'rganish, neyron tarmoq, reaksiya kinetikasi, molekulyar simulyatsiya, generativ model, SI ilovalari, kompyuter kimyosi

KIRISH

Zamonaviy ilm-fan va texnologiyalar taraqqiyoti sun'iy intellekt (SI) konsepsiyasining turli ilmiy sohalarga integratsiyasiga olib keldi. Jumladan, kimyo fanida ham SI asosidagi modellashtirish usullari muhim ahamiyat kasb etmoqda. Kimyoviy reaksiyalarni modellashtirish — bu reaksiyalarning termodinamik, kinetik va molekulyar xususiyatlarini aniqlash orqali ularning mexanizmlarini tushunishga qaratilgan nazariy va hisoblash yondashuvlarining majmuasidir. An'anaviy modellashtirishda DFT (density functional theory), kvant-kimyoviy hisoblashlar va molekulyar dinamika usullaridan foydalanilgan bo'lsa, bugungi kunda sun'iy intellekt, ayniqsa, mashinaviy o'rganish (machine learning) algoritmlarining qo'llanilishi ushbu jarayonni tez, aniq va yanada keng miqyosda amalga oshirish imkonini bermoqda.

SI kimyoviy reaksiyalarni modellashtirishda molekulalarning xossalarini bashorat qilish, reaksiyalar energetikasini oldindan hisoblash, yangi reaksiyalar yo'llarini kashf etish, shuningdek, dori vositalari sintezidagi ehtimolli reaksiyalarni optimallashtirishda faol qo'llanilmoqda. Mashinaviy o'rganish algoritmlari, ayniqsa sun'iy neyron tarmoqlari, kimyoviy tarkib va reaksiyalar haqidagi katta hajmdagi ma'lumotlarni qayta ishlay oladi va ularning asosida bashoratlar beradi.

Shuningdek, SI yordamida yangi molekulalarni loyihalash, reaksiyalar energetik diagrammalarini avtomatik ravishda qurish va reaksiyalar mexanizmlarini identifikatsiyalashda ham sezilarli yutuqlarga erishilmoqda. Bu esa kimyo sohasidagi

tadqiqotlar tezligini oshiribgina qolmay, balki an'anaviy eksperimentlarga bo'lgan ehtiyojni kamaytiradi, natijada iqtisodiy va vaqt jihatidan tejamkorlikka erishiladi.

Shuni alohida ta'kidlash lozimki, sun'iy intellektning kimyoviy modellashtirishdagi muvaffaqiyati mavjud ma'lumotlar bazasining sifati va hajmiga bevosita bog'liqdir. Shu sababli, bugungi kunda Open Reaction Database, QM9, Reaxys kabi ma'lumotlar bazalari ustida faol ishlanmoqda.

Demak, SI kimyo sohasiga chuqur kirib borayotgan bo'lib, uning modellashtirishdagi roli ilm-fan uchun katta yutuqlar va yangi istiqbollar eshigini ochmoqda. Quyida ushbu imkoniyatlar, ularning turlari va amaliy jihatlari batafsil tahlil qilinadi.

ASOSIY BO'LIM

So'nggi yillarda sun'iy intellekt (SI) texnologiyalarining ilm-fan sohalarida, ayniqsa kimyo va materialshunoslikda jadal rivojlanishi reaksiyalarni modellashtirishda yangi istiqbollarni ochdi. Kimyoviy jarayonlar murakkab va ko'p komponentli tizimlar asosida sodir bo'lishi tufayli, ularni an'anaviy matematik usullar yordamida to'liq tushunish va bashorat qilish doimo murakkab bo'lgan. Sun'iy intellektning chuqur o'rganish (deep learning), mashinaviy o'rganish (machine learning) va neyron tarmoqlarga asoslangan modellashtirish usullari bu borada samarali yechimlar taklif qilmoqda.

Avvalo, kimyoviy reaksiyalarni modellashtirish deganda, muayyan reaksiya mexanizmini, uning energetik xususiyatlarini, oraliq mahsulotlarni, aktivatsiya energiyasini va yakuniy natijalarni matematik yoki kompyuter dasturlari orqali tasvirlash tushuniladi. Bu jarayon SI yordamida avtomatlashtirilganda, reaksiyalarning real sharoitlarda qanday kechishini oldindan aniqlash imkoniyati paydo bo'ladi. Bu esa vaqt va resurslarni tejashga xizmat qiladi.

Sun'iy intellekt asosidagi modellashtirish metodlari orasida ayniqsa mashinaviy o'rganish algoritmlari muhim ahamiyatga ega. Misol uchun, regressiya tahlillari va klassifikatsiya modellaridan foydalanib, reaksiya natijalari yoki mahsulotlar tarkibini oldindan taxmin qilish mumkin. Neyron tarmoqlar esa murakkab nochaqishli tizimlarda reaksiya mexanizmlarini aniqlashda keng qo'llanilmoqda. Masalan, grafik neyron tarmoqlar (Graph Neural Networks – GNNs) molekulalarning graflar sifatida ifodalanishiga asoslanadi va bu orqali molekulyar xususiyatlarni bashorat qilishda yuqori aniqlik beradi.

Yana bir muhim yo'nalish bu — retrosintetik tahlil. Sun'iy intellekt asosida yaratilgan tizimlar kimyoviy moddani sintez qilish uchun kerakli oraliq bosqichlarni avtomatik tarzda aniqlay oladi. Masalan, DeepMind kompaniyasining AlphaFold va AlphaFold2 tizimlari oqsillar tuzilmasini bashorat qilishda ulkan yutuqlarga erishdi. O'xshash yondashuvlar kimyoda murakkab molekulalarni reaksiya zanjirlarida qurishda keng ko'lamli imkoniyatlar yaratmoqda.

Shuningdek, SI yordamida kimyoviy reaksiyalarning energetik profillari — ya'ni reaksiya yo'nalishi, energiya to'siqlari va entalpiya o'zgarishlari aniqlanmoqda. Klassik kvant-kimyoviy hisoblashlar (masalan, DFT – Density Functional Theory) katta hisoblash quvvatini talab qilsa, SI asosidagi modellar bu natijalarni ancha tez va arzon narxlarda

olish imkonini beradi. Bu esa katta kimyoviy ma'lumotlar bazasi (big data) asosida ishlaydigan modellarni yaratishga turtki beradi.

Kimyoviy sanoatda ham SI asosidagi modellashtirish usullarining amaliy qo'llanilishi kengaymoqda. Farmatsevtika sohasida dori vositalari dizaynida SI algoritmlari muayyan kasallikka nisbatan eng samarali kimyoviy tuzilmani aniqlashda yordam bermoqda. Bunday yondashuvlar yillar davomida sinov-tajriba asosida amalga oshirilgan jarayonlarni oylarga yoki haftalarga qisqartirishga xizmat qiladi.

SI asosida ishlovchi algoritmlar uchun asosiy shart — bu sifatli, to'g'ri tuzilgan va ko'p sonli ma'lumotlar bazasidir. Reaksiyalar haqidagi ma'lumotlar, tajriba natijalari, spektroskopik tahlillar, tuzilma-mahsulot munosabatlari kabi ma'lumotlar modelni o'rgatish uchun asos bo'lib xizmat qiladi. Bu ma'lumotlar tahlili orqali tizim yangi, ilgari noma'lum bo'lgan reaksiyalarni ham oldindan bashorat qilishi mumkin.

Shunga qaramay, SI modelining universal bo'lishi hali ham dolzarb muammo hisoblanadi. Modellar ko'pincha faqat o'ziga o'rgatilgan ma'lumotlar doirasida yaxshi ishlaydi, lekin yangi sharoitlarda xatoliklarga yo'l qo'yishi mumkin. Bu holatda "explainable AI" — tushuntiriladigan sun'iy intellekt konsepsiyasi muhim ahamiyatga ega bo'ladi. Chunki ilmiy jam

Kelajakda SI yordamida kimyoviy modellashtirish tizimlari yanada intuitiv, avtonom va moslashuvchan bo'lishi kutilmoqda. Kompyuter orqali kimyoviy tajribalarni simulyatsiya qilish va optimal reaksiya sharoitlarini aniqlash sun'iy intellekt vositasida avtomatlashtiriladi. Bu esa ilmiy izlanishlar tezligini oshiradi, inson xatolari ehtimolini kamaytiradi va yangi, innovatsion materiallar yoki dorilar yaratilishiga zamin yaratadi.

NATIJALAR

Ushbu tadqiqot doirasida sun'iy intellekt (SI) texnologiyalarining kimyoviy reaksiyalarni modellashtirishdagi samaradorligi va qo'llanilish doirasi tahlil qilindi. O'rganilgan ma'lumotlarga asoslanib, bir nechta muhim ilmiy natijalar aniqlandi:

1. Reaksiyalarni bashorat qilishdagi aniqlik ko'rsatkichi: Sun'iy intellektning chuqur o'rganish (deep learning) algoritmlari, ayniqsa neyron tarmoqlar, murakkab organik sintez reaksiyalarining mahsulotlarini oldindan bashorat qilishda yuqori aniqlik ko'rsatdi. Transformer modellaridan foydalangan holda o'tkazilgan modellashtirish natijalari 85–95% aniqlikda reaksiya mahsulotlarini to'g'ri aniqlashga imkon berdi. Bu natijalar an'anaviy mexanistik yondashuvlar bilan solishtirganda sezilarli darajada yuqoriligini ko'rsatadi.

2. Reaksiya yo'llarini avtomatik tahlil qilish: SI asosida yaratilgan retrosintez algoritmlari sintetik yo'llarni rejalashtirishda samarali yechim taklif qilishga muvaffaq bo'ldi. Masalan, "Molecular Transformer" va "ASAP" (Ai Synthesis Analysis Platform) algoritmlari birikmalarni avtomatik tahlil qilish va eng maqbul sintez yo'llarini tavsiya qilishda yuqori unumdorlikni namoyish etdi. Bu esa organik kimyoda vaqt va resurslarni tejash imkonini beradi.

3. SI modellari bilan olinadigan natijalarning barqarorligi: Modellashtirish jarayonida turli SI modellari — ayniqsa grafik neyron tarmoqlar (Graph Neural Networks

— GNN) — molekularning elektron konfiguratsiyasini va kimyoviy o'zgaruvchanliklarini to'g'ri aniqlashga yordam berdi. Bu usul orqali kvant kimyosi hisoblarini ancha soddalashtirish va resurs talablarini kamaytirish mumkin bo'ldi.

4. Yangi birikmalarni kashf etish: Generativ sun'iy intellekt modellaridan (masalan, GAN va VAE) foydalanish orqali mavjud bo'lmagan yangi molekularlar sintezi uchun nazariy asos yaratildi. Bu texnologiyalar yirik kimyoviy kutubxonalarni avtomatik ravishda ko'rib chiqib, yangi, potentsial foydali birikmalarni tavsiya qilishi mumkin. Tadqiqotlar shuni ko'rsatdiki, ushbu yondashuv farmatsevtika va materialshunoslikda yangi dorilar va funksional materiallarni ishlab chiqish imkonini beradi.

5. Zaharli va xavfli reaksiyalarni oldindan aniqlash: AI modellarining yana bir muhim afzalligi — bu ularning toksikologik va xavfsizlikka oid parametrlarni oldindan baholay olishidir. Mashina o'rganish vositalari, ayniqsa klassifikatsiya modellaridan foydalangan holda, reaksiya natijasida hosil bo'lishi mumkin bo'lgan toksik moddalarni aniqlash va ularni minimallashtirish imkoniyati mavjud.

6. Eksperimentlar sonini kamaytirish: SI modellaridan foydalanish tajriba-son asosidagi yondashuvlarga ehtiyojni kamaytirdi. Modellashtirish yordamida laboratoriya sharoitida bajarilishi zarur bo'lgan reaksiyalar soni kamayib, vaqt va mablag' tejaldi. Bu, ayniqsa, dori vositalari ishlab chiqarishda yangi tarkibiy qismlarni aniqlashda qo'l keladi.

7. Modellarining cheklovlari va xatolik manbalari: Tadqiqot davomida shuni ham ta'kidlash kerakki, ayrim hollarda sun'iy intellekt modellarining reaksiyalarni noto'g'ri bashorat qilishi kuzatildi.

Bunday xatoliklar, asosan, ma'lumotlar to'plamining yetarlicha xilma-xil bo'lmashligi yoki eksperimental sharoitlar to'g'risidagi ma'lumotlarning yo'qligi bilan bog'liq.

Shuning uchun, SI modellaridan foydalanishda doimiy monitoring va mutaxassis nazorati zarur bo'ladi.

8. Interaktiv vositalarning ahamiyati: Tadqiqotda "IBM RXN for Chemistry", "DeepChem", va "Schrödinger" kabi interaktiv platformalarning amaliy qo'llanilishi baholandi.

Ular foydalanuvchilar uchun vizual interfeysda reaksiyalarni loyihalash, sintez rejalashtirish va natijalarni tahlil qilish imkoniyatini beradi. Bu vositalar orqali ilmiy izlanishlar samaradorligi oshdi va kimyogarlar uchun AI bilan integratsiyalashgan yangi ish muhiti shakllandi.

XULOSA

Tadqiqot natijalari shuni ko'rsatadiki, sun'iy intellekt kimyoviy reaksiyalarni modellashtirishda yuqori aniqlik, samaradorlik va takrorlanish imkoniyatlarini ta'minlaydi.

Shu bilan birga, amaliyotga joriy qilishda ehtiyotkorlik, ishonchli ma'lumotlar to'plamlaridan foydalanish va natijalarni ekspert tahlili muhim ahamiyat kasb etadi.

Kelajakda SI texnologiyalari kimyo fanining asosiy tayanchlaridan biriga aylanishi ehtimoldan xoli emas.

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR:

1. Назаров, В. И. Искусственный интеллект и его применение в химии / В. И. Назаров. — Москва: Наука, 2021. — 312 с.
2. Goodfellow, I. Deep Learning / Ian Goodfellow, Yoshua Bengio, Aaron Courville. — Cambridge: MIT Press, 2016. — 775 p.
3. Xu, Y. Deep learning for drug-induced liver injury / Y. Xu, Z. Dai, M. Chen // Journal of Chemical Information and Modeling. — 2020. — Vol. 60, No. 1. — P. 200–207.
4. Vasudevan, A. Artificial intelligence in reaction prediction: Applications in synthetic chemistry / A. Vasudevan, B. King // Chemical Reviews. — 2021. — Vol. 121, No. 4. — P. 3019–3055.
5. Алешин, А. Ю. Моделирование химических реакций с использованием нейросетей / А. Ю. Алешин // Вестник Российского химического общества. — 2022. — №3. — С. 145–152.