
بررسی جامع هوش مصنوعی و اتوماسیون در توسعه و تحول آینده علوم شیمی

لیلا حیدری^{۱*} و آفرین امیری^۲

۱- مدرس گروه شیمی، ایران، تهران، دانشگاه جامع علمی کاربردی، مرکز آذین خودرو

۲- دانشجوی کارشناسی مهندسی فناوری صنایع شیمیایی، ایران، تهران، دانشگاه جامع علمی کاربردی، مرکز آذین خودرو

چکیده

هوش مصنوعی (AI) قرار است انقلابی در حوزه شیمی ایجاد کند و فرصت‌های بی‌سابقه‌ای برای نوآوری و کارایی ارائه دهد. اهمیت ابزار دقیق و سخت‌افزار در شیمی مبتنی بر هوش مصنوعی بسیار زیاد است و به عنوان حلقه اتصال حیاتی بین مدل‌های نظری و کاربردهای دنیای واقعی عمل می‌کند. ابزار دقیق پیشرفته، مانند دستگاه غربالگری با توان عملیاتی بالا (HT)، طیف‌سنج‌ها و سیستم‌های کروماتوگرافی، امکان جمع‌آوری مجموعه داده‌های وسیعی را فراهم می‌کنند که برای آموزش و اعتبارسنجی الگوریتم‌های هوش مصنوعی ضروری هستند. علاوه بر این، ادغام رباتیک و سخت‌افزار اتوماسیون در آزمایشگاه‌های شیمی امکان اجرای آزمایش‌های پیچیده با دقت و سرعت را فراهم می‌کند و قابلیت‌های هوش مصنوعی را در پیش‌بینی واکنش‌های شیمیایی، طراحی مواد جدید و بهینه‌سازی مسیرهای سنتز، بیشتر افزایش می‌دهد. در نتیجه، هم‌افزایی بین ابزار دقیق پیشرفته و هوش مصنوعی، پیشرفت‌های انقلابی در شیمی را به همراه دارد و منجر به کشف سریع‌تر، کاهش هزینه‌ها و درک عمیق‌تر از پدیده‌های شیمیایی می‌شود.

واژگان کلیدی: هوش مصنوعی، علوم شیمی، اتوماسیون آزمایشگاهی، تحول علمی.

مقدمه

در راستای پیشبرد شیمی مبتنی بر هوش مصنوعی، تحقیقات بر طراحی و بهینه‌سازی ابزارها و سخت‌افزارهای علمی پیشرفته متمرکز شده است. این ابزارها نقش مهمی در امکان‌پذیر کردن ادغام یکپارچه الگوریتم‌های هوش مصنوعی در گردش‌های کاری تحقیقات شیمیایی، تسهیل آزمایش‌های سریع و جمع‌آوری/تحلیل کلان‌داده‌ها ایفا می‌کنند. به عنوان مثال، کار ما منجر به توسعه پلتفرم‌های سنتز رباتیک مبتنی بر هوش مصنوعی و سیستم‌های غربالگری HT شده است. این پلتفرم‌ها فرآیندهای سنتز شیمیایی را خودکار می‌کنند و غربالگری کتابخانه‌های شیمیایی وسیع را با سرعت و کارایی بی‌سابقه‌ای امکان‌پذیر می‌سازند. با ترکیب الگوریتم‌های هوش مصنوعی با ابزارهای پیشرفته، می‌توانیم کشف ترکیبات و مواد جدید با خواص سفارشی را برای کاربردهای مختلف، از کشف دارو گرفته تا علم مواد، تسریع کنیم.

علاوه بر این، ابزارهای مبتنی بر هوش مصنوعی، دقت و قابلیت اطمینان تجزیه و تحلیل شیمیایی را افزایش می‌دهند. با استفاده از الگوریتم‌های هوش مصنوعی برای تجزیه و تحلیل داده‌های طیف‌سنجی پیچیده تولید شده توسط ابزارهایی مانند طیف‌سنج‌های جرمی و طیف‌سنج‌های NMR، می‌توانیم بینش‌های ارزشمندی در مورد ساختارهای مولکولی و واکنش‌های شیمیایی استخراج کنیم. این امر نه تنها سرعت کشف علمی را تسریع می‌کند، بلکه محققان را قادر می‌سازد تا درک عمیق‌تری از سیستم‌ها و پدیده‌های شیمیایی به دست آورند. علاوه بر این، ابزارهای تجزیه و تحلیل داده‌های مبتنی بر هوش مصنوعی، تفسیر نتایج تجربی را تسهیل کرده و جهت‌گیری‌های تحقیقات آینده را هدایت می‌کنند. الگوریتم‌های هوش مصنوعی با خودکارسازی تجزیه و تحلیل مجموعه داده‌های بزرگ و شناسایی همبستگی‌ها و الگوها، محققان را قادر می‌سازد تا تصمیمات آگاهانه‌ای بگیرند و پارامترهای تجربی را به طور مؤثرتری بهینه کنند.

همانطور که به آینده نگاه می‌کنیم، هم‌افزایی بین هوش مصنوعی و ابزارهای پیشرفته علمی همچنان به نوآوری در شیمی دامن خواهد زد. با پیشرفت بیشتر در توسعه ابزارها و سخت‌افزارهای مبتنی بر هوش مصنوعی، می‌توانیم مرزهای جدیدی را در تحقیقات شیمیایی باز کنیم و به برخی از مهم‌ترین چالش‌های پیش روی جامعه، مانند کشف دارو، انرژی‌های تجدیدپذیر و پایداری محیط زیست، بپردازیم.

۱- پیشرفت‌ها و چالش‌های هوش مصنوعی در شیمی سنتزی

هوش مصنوعی در زمینه شیمی سنتزی به سرعت در حال پیشرفت است و کاربردهایی در استخراج خودکار داده‌ها، پیش‌بینی خواص و واکنش‌ها، تجزیه و تحلیل رتروسنتز و سنتز خودکار دارد. ادغام هوش مصنوعی در شیمی سنتزی پتانسیل ایجاد انقلابی در نحوه انجام تحقیقات در دهه‌های آینده را دارد. یکی از جنبه‌های امیدوارکننده هوش مصنوعی در شیمی سنتزی، مفهوم "کمک‌خلبان مصنوعی" است. این کمک‌خلبانان هوشمند می‌توانند جدیدترین انتشارات متناسب با علایق محققان را جمع‌آوری و خلاصه کنند. علاوه بر این، آنها می‌توانند براساس جدیدترین یافته‌ها، پیشنهادهایی برای جهت‌گیری‌های تحقیقاتی جدید به محققان ارائه دهند. آنها همچنین می‌توانند به شیمیدانان در کاوش ایده‌های جدید، مانند طراحی مولکول‌های جدید و مسیرهای مصنوعی، کمک کنند. در آزمایشگاه، دستیاران تجسم یافته می‌توانند آزمایش‌هایی را انجام دهند در حالی که ابزارهای تجزیه و تحلیل آنلاین به طور خودکار نتایج را شناسایی و تجزیه و تحلیل می‌کنند. بدون شک، تمام فرآیندها با دقت تحت نظارت و هدایت تخصص عمیق شیمیدان، ایده‌پردازی خلاقانه، تفکر تخیلی و شهود شیمیایی او قرار خواهند گرفت.

با این حال، علیرغم این پیشرفت‌ها، برای تحقق پتانسیل کامل هوش مصنوعی در شیمی سنتزی، باید به چالش‌های متعددی پرداخته شود. یکی از چالش‌های اصلی، دسترسی به پایگاه‌های داده مصنوعی با کیفیت بالا برای آموزش مدل‌های هوش مصنوعی است. اگرچه الگوریتم‌های استخراج داده‌ها وجود دارند، اما هنوز به سطح پیچیدگی مورد نیاز برای تجزیه معانی پیچیده شیمیایی دست نیافته‌اند. استفاده از مدل‌های زبانی بزرگ^۱ (LLM) برای جمع‌آوری اطلاعات شیمیایی و انتقال آن به یک پایگاه داده ساختار یافته، هدفی بسیار ارزشمند است. علاوه بر این، توسعه مدل‌های چندوجهی که قادر به استخراج تصاویر و ساختارهای مولکولی باشند، برای ساخت یک پایگاه داده متنوع و آموزنده ضروری است. آزمایش‌های با توان عملیاتی بالا^۲ (HTE) نیز داده‌های ارزشمندی را برای آموزش مدل ارائه می‌دهند.

مهندسی ویژگی‌های شیمیایی یکی دیگر از جنبه‌های حیاتی فناوری هوش مصنوعی در شیمی سنتزی است. این شامل نقشه‌برداری از مولکول‌ها و همبستگی آنها با ساختارهای ریاضی انتزاعی است که به عنوان بازنمایی‌های شیمیایی شناخته می‌شوند. با این حال، دستیابی به یک نقشه‌برداری بدون اتلاف چالش برانگیز است. محققان بر روی خواص خاص و پارامترهای قابل محاسبه مولکول‌ها تمرکز می‌کنند تا توصیف‌گرهایی مانند اثر انگشت مولکول، زبان‌های شیمیایی، نمودارهای مولکولی و ابرهای نقطه‌ای را توسعه دهند. اگرچه پیشرفت‌های قابل توجهی حاصل شده است، اما چالش‌هایی در توسعه توصیف‌گرها برای مولکول‌های کایرال و نمایش دقیق واکنش‌های شیمیایی پیچیده و همبستگی‌های پیچیده آنها بین واکنش‌دهنده‌ها، کاتالیزورها، حلال‌ها و شرایط واکنش باقی مانده است. همکاری بین دانشمندان کامپیوتر و شیمیدانان برای طراحی بازنمایی‌های شیمیایی جدید و شبکه‌های واکنش که به این چالش‌ها می‌پردازند، ضروری است.

هم‌افزایی بین مدل‌های هوش مصنوعی، داده‌های واکنش و شیوه‌های تجربی، شیمی سنتزی را متحول می‌کند. مدل‌های متنوع هوش مصنوعی، بهینه‌سازی واکنش، کشف کاتالیزور و سنتز ترکیبات را تقویت کرده و کارایی و دقت را افزایش داده‌اند. با این حال، چالش‌ها از نظر کمبود داده‌ها، قابلیت تفسیر الگوریتم، اعتبارسنجی تجربی قوی، تشخیص و تجزیه و تحلیل دقیق نتایج واکنش و درک پیچیدگی سیستم‌های شیمیایی همچنان ادامه دارد. ادغام هوش مصنوعی با رباتیک و اتوماسیون می‌تواند گردش‌های کاری تجربی را متحول کند. استراتژی‌های نوآورانه مانند یادگیری فعال می‌توانند چرخه کشف و بهینه‌سازی واکنش‌های جدید را به طور قابل توجهی تسریع کنند و راه را برای آزمایشگاه‌های خودگردان آینده هموار سازند.

هوش عمومی مصنوعی^۳ (AGI)، به ویژه LLM‌ها، سهم قابل توجهی در هوش مصنوعی در شیمی داشته است. AGI می‌تواند دانش شیمیایی را درک کند، متون شیمیایی را استخراج و تجزیه و تحلیل کند و خواص یا واکنش‌پذیری شیمیایی را پیش‌بینی کند. علاوه بر این، می‌تواند به محققان در برنامه‌ریزی و انجام آزمایش‌ها کمک کند و زمان و هزینه‌ها را کاهش دهد. دستیاران شیمی هوش مصنوعی که توسط LLM‌ها پشتیبانی می‌شوند، می‌توانند با اتصال به ابزارها و پایگاه‌های داده مختلف شیمیایی، در مورد مسائل پیچیده شیمی استدلال کنند. با این حال، چالش‌های مربوط به قابلیت اطمینان و شایستگی حرفه‌ای باید برای کاربرد گسترده‌تر در تحقیقات شیمیایی مورد توجه قرار گیرند. با پیشرفت فناوری AGI، این فناوری پتانسیل آن را دارد که در وظایف پیچیده شیمیایی مؤثرتر شود و از نقش خود به عنوان "پلی بین انسان و ماشین" فراتر رود.

۲- مهار HTE برای توانمندسازی شیمی سنتزی مبتنی بر هوش مصنوعی

^۱ Leveraging large Language Models

^۲ High-Throughput Experimentation

^۳ Artificial General Intelligence

در سال ۱۸۲۸، شیمیدان آلمانی فریدریش وُهلر^۴ با سنتز اوره به نقطه عطفی دست یافت که آغاز شیمی سنتزی را رقم زد. در طول دو قرن پس از آن، شیمی سنتزی سنگ بنای پیشرفت علمی بوده و به طور قابل توجهی جامعه بشری را شکل داده است. نتایج سنتز معمولاً تحت تأثیر متغیرهای زیادی مانند شرایط واکنش و ساختارهای زیرلایه قرار می‌گیرد. شیمیدانان قصد دارند رابطه پیچیده بین این متغیرها و نتایج را روشن کنند، اما فضای وسیع واکنش، چالش مهمی را ایجاد می‌کند. اگرچه غریزه و شهود انسان، توسعه شیمی سنتزی را هدایت کرده است، اما اساساً یک علم مبتنی بر آزمایش است. شیمی سنتزی مدت‌هاست که با ناکارآمدی‌ها و فرآیندهای پر زحمت همراه بوده است. به عنوان مثال، بهینه‌سازی واکنش‌ها، کشف واکنش‌های جدید و سنتز محصولات طبیعی پیچیده اغلب به ماه‌ها یا حتی سال‌ها کار دقیق شیمیدانان نیاز دارد.

با سرعت به سمت سنتز ۴/۰ حرکت می‌کنیم، که توسط انقلاب صنعتی چهارم به پیش رانده می‌شود، انقلابی که فناوری‌های پیشرفته‌ای مانند اتوماسیون، علم داده و هوش مصنوعی را در شیمی ادغام می‌کند. با پذیرش این تغییر الگو، جامعه شیمی شروع به توسعه شیمی هوش مصنوعی برای پرداختن به چالش‌های شیمیایی مرتبط کرده است. هوش مصنوعی امروزه همه جا حاضر است و همه چیز را از توصیه‌های شخصی‌سازی شده گرفته تا رانندگی خودکار و کشف دارو، تقویت می‌کند. این فناوری به عنوان ابزاری مؤثر برای شناسایی الگوهای پنهان در داده‌ها ظهور کرده است. شیمی سنتزی، تا حدودی، می‌تواند مستلزم تشخیص الگو برای ساخت مولکول‌های هدف باشد. برای افزایش درک و گسترش کاربردهای واکنش‌های مصنوعی، علاقه زیادی در بین شیمیدانان به توسعه مدل‌های مبتنی بر هوش مصنوعی برای پیش‌بینی واکنش وجود داشته است. مجموعه داده‌های واکنش، شامل ساختارهای زیرلایه، شرایط واکنش و نتایج (بازده یا گزینش‌پذیری)، سنگ بنای توسعه مدل‌های مبتنی بر هوش مصنوعی را تشکیل می‌دهد. اگرچه حجم عظیمی از داده‌ها جمع‌آوری شده است، اما مسائلی مانند سوگیری به سمت داده‌های مثبت، ناسازگاری داده‌ها و عدم حاشیه‌نویسی، پایگاه‌های داده عمومی و اختصاصی را آزار می‌دهد. در نتیجه، چندین مدل مبتنی بر هوش مصنوعی برای پیش‌بینی واکنش گزارش شده است، با این حال، وظیفه ساخت مدل‌های پیش‌بینی دقیق همچنان چالش برانگیز و مورد نیاز فوری است. مسئله جمع‌آوری داده‌ها می‌تواند به طور بالقوه از طریق HTE، یک فناوری پیشرفته که از رباتیک برای انجام واکنش‌های متعدد به صورت موازی استفاده می‌کند و مسیری را برای دستیابی به مجموعه داده‌های استاندارد و قابل اعتماد ارائه می‌دهد، مورد توجه قرار گیرد. HTE به دلیل ظرفیت خود در به حداقل رساندن سوگیری به سمت انتخاب نقطه داده، پتانسیل افزایش قابل توجه کیفیت و جامعیت داده‌های جمع‌آوری شده را دارد. HTE از طریق آزمایش‌های سریع و موازی، تولید مجموعه داده‌های قوی را تسهیل می‌کند و در نتیجه تجزیه و تحلیل‌های دقیق‌تر و قابل اعتمادتری را امکان‌پذیر می‌سازد. علاوه بر این، ماهیت استاندارد پروتکل‌های HTE، ثبات در آزمایش‌ها را تضمین می‌کند و قابلیت اطمینان مجموعه داده‌های حاصل را بیشتر تقویت می‌کند. در نتیجه، محققان می‌توانند بینش عمیق‌تری در مورد مکانیسم‌های واکنش به دست آورند، روندها را شناسایی کنند و مدل‌های پیش‌بینی را با اطمینان بیشتری توسعه دهند. در نهایت، ادغام HTE در گردش‌های کاری تحقیقاتی نوپدیدبخش انقلابی در شیوه‌های جمع‌آوری داده‌ها در شیمی و پیشبرد پیشرفت‌ها در زمینه‌های مختلف از کشف دارو گرفته تا علم مواد است.

۳- کشف مواد مبتنی بر داده: ادغام هوش مصنوعی با اتوماسیون

کشف مواد جدید بسیار مهم است زیرا نوآوری را در صنایع و کاربردهای مختلف هدایت می‌کند و به طور قابل توجهی به جامعه ما سود می‌رساند. با این حال، فضای وسیع مواد، مملو از امکانات عظیم ترکیبات و ساختارهای بالقوه، چالش بزرگی را برای شناسایی سریع کاندیداهای امیدوارکننده برای کاربردهای خاص ایجاد می‌کند. روش‌های سنتی کشف مواد به شدت به آزمایش‌های دستی

^۴ Friedrich Wöhler

پرزحمت متکی هستند. محققان آزمایش‌هایی را برای سنتز و توصیف مواد انجام می‌دهند و این فرآیند هم زمان‌بر و هم به منابع زیادی نیاز دارد.

برای غلبه بر این موانع، رویکردهای نوآورانه برای کاوش مؤثر در فضای وسیع شیمیایی ضروری است. کشف مواد مبتنی بر داده، یک الگوی دگرگون‌کننده در علم مواد را نشان می‌دهد که رویکرد طراحی مواد را متحول می‌کند. در این رویکرد، داده‌ها به عنوان منابع ارزشمندی برای استخراج دانش از مجموعه داده‌های مواد شناخته می‌شوند. این الگو با استفاده از ابزارهای پیشرفته مانند پایگاه‌های داده مواد و هوش مصنوعی، قصد دارد امکانات جدیدی را برای تحقیقات مواد فراهم کند و پتانسیل کاوش جامع در فضای مواد را دارد.

با توجه به دامنه وسیع سنتز و آزمایش طیف وسیعی از مواد، ادغام اتوماسیون و رباتیک در این فرآیند می‌تواند حجم موادی را که می‌توانند سنتز و ارزیابی شوند، به طور چشمگیری افزایش دهد، به طور بالقوه تا چندین برابر. فناوری‌های اتوماسیون، مانند ربات‌های سنتز خودکار و سیستم‌های غربالگری HT، می‌توانند وظایف تکراری و پرزحمت را با دقت و سرعت انجام دهند و محققان را آزاد کنند تا بر تجزیه و تحلیل و نوآوری تمرکز کنند. رباتیک می‌تواند پروتکل‌های سنتز پیچیده را انجام دهد، نمونه‌ها را آماده کند و ارزیابی‌های اولیه از خواص مواد را انجام دهد، در حالی که ثبات و تکرارپذیری بالایی را تضمین می‌کند. این پیشرفت نه تنها سرعت کشف را تسریع می‌کند، بلکه طیف وسیعی از موادی را که می‌توانند عملاً مورد کاوش و توسعه قرار گیرند، گسترش می‌دهد.

۴- تقویت آینده اکتشافات شیمیایی و مواد با شیمی خودکار مبتنی بر هوش مصنوعی

شیمی و علوم مواد تحت تأثیر پیشرفت‌های هوش مصنوعی و رباتیک، دستخوش تحول عمیقی شده‌اند. این تغییر دگرگون‌کننده به سمت شیمی خودران، با ادغام الگوریتم‌های پیچیده هوش مصنوعی و سیستم‌های خودکار در تار و پود فعالیت‌های تحقیقاتی روزانه آزمایشگاهی مشخص می‌شود که اساساً نحوه انجام تحقیقات علمی را تغییر می‌دهد. پیشرفت‌های اخیر در هوش مصنوعی، به ویژه در رشته‌های کارشناسی ارشد مدیریت بازرگانی (LLM)، شیمی خودران را تا حد زیادی ارتقا داده است. مدل‌ها و عوامل هوش مصنوعی به بخش جدایی‌ناپذیر از خودکارسازی شیمی تبدیل شده‌اند و در بستن حلقه کشف پیش‌بینی، ساخت، اندازه‌گیری و تفسیر داده‌های علمی نقش مهمی ایفا می‌کنند. سیستم‌های خودگردان مبتنی بر هوش مصنوعی از قابلیت‌های هوشمند خود برای برنامه‌ریزی آزمایش‌ها، تعامل با رباتیک و مدیریت داده‌ها استفاده می‌کنند و به طور قابل توجهی کارایی و دقت آزمایش را بهبود می‌بخشند. در کنار هوش مصنوعی، رباتیک نیز گام‌های قابل توجهی در اتوماسیون آزمایشگاهی برداشته است و سیستم‌های متنوعی را ارائه می‌دهد که برای برآوردن نیازهای پیچیده شیمی خودران طراحی شده‌اند. این سیستم‌ها شامل پلتفرم‌های خودکار HT، بازوهای رباتیک دقیق، ربات‌های متحرک، ربات‌های مشارکتی و موارد دیگر هستند.

شیمی خودگردان در سه مرحله اصلی پیشرفت کرده است که هر کدام با پیشرفت‌های چشمگیری در رویکرد و قابلیت‌های این حوزه مشخص شده‌اند. مرحله اول شامل ایجاد آزمایشگاه‌های خودگردان انفرادی است که برای مقابله با چالش‌های خاص طراحی شده‌اند. این آزمایشگاه‌ها معمولاً به صورت جداگانه فعالیت می‌کنند و بر مشکلات محلی بدون ارتباطات بین آزمایشگاهی یا اشتراک‌گذاری داده‌ها تمرکز دارند. در حال حاضر، اکثر آزمایشگاه‌های خودگردان در سطح جهان در این مرحله هستند، اما به سرعت در حال گذار به مرحله دوم هستند: اتخاذ استراتژی‌های هماهنگ مانند سیستم‌های مبتنی بر ابر برای تحقیقات غیرمستقر و غیرهمزمان. این مرحله شامل توزیع وظایف در یک گردش کار تجربی و هماهنگ‌سازی آنها از طریق هوش مصنوعی، تسهیل یکپارچه‌سازی داده‌ها و منابع در آزمایشگاه‌ها، غلبه بر محدودیت‌های جغرافیایی و زمانی برای گسترش پتانسیل کشف است.

در افق فاز سوم، شبکه‌های پیشرفته سراسری یا جهانی از سیستم‌های دانشمند هوشمند را که مفهوم‌سازی و پیشنهاد شده است، پیش‌بینی می‌کند. این شبکه‌های یکپارچه از سیستم‌های هوشمند را در حال انجام تحقیقات مستقل سرتاسری تصور می‌شوند که با ادغام مدل‌های هوش مصنوعی با فرآیندهای رباتیک، درجه بالایی از ادغام شناختی و عملیاتی را نشان می‌دهند. نکته قابل توجه این است که این فاز با هدف توسعه سیستم‌های مشارکتی انسان و ماشین انجام می‌شود، جایی که هوش شناختی از پیشنهاد و تجزیه و تحلیل مشکلات علمی از طریق ادغام دانش پشتیبانی می‌کند. این فرآیند، سیستم‌های تجربی رباتیک و شبیه‌سازی‌های کامپیوتری را هدایت می‌کند و داده‌های با کیفیتی تولید می‌کند که به مدل‌های هوش مصنوعی بازخورد می‌دهند تا آنها را بهینه و اصلاح کنند و در نتیجه چالش‌های علمی پیچیده را حل کنند. این ادغام، آزمایشگاه‌های مستقل را به نهادهای بسیار متصل و کارآمدی تبدیل می‌کند که از مرزهای تحقیقاتی سنتی فراتر می‌روند و امکان دستیابی به پیشرفت‌های علمی را در مقیاس سراسری یا جهانی فراهم می‌کنند. پیاده‌سازی سیستم‌های دانشمند هوشمند، شامل ایجاد پلتفرم‌های متمرکز خواهد بود که داده‌ها را جمع‌آوری و تجزیه و تحلیل می‌کنند، مدل‌های هوشمند را توسعه می‌دهند و روش‌ها و فناوری‌های علمی را اصلاح می‌کنند. این پلتفرم‌ها، که به عنوان "مغزهای" علمی عمل می‌کنند، امکانات نوآوری توزیع‌شده را هدایت می‌کنند که از کاربران در دستیابی به پیشرفت‌های علمی خاص پشتیبانی می‌کنند. این رویکرد یکپارچه، شکل جدیدی از سازماندهی تحقیقات علمی را پرورش خواهد داد: توسعه و به‌کارگیری متمرکز و منابع محور هوش علمی، عملیات تجربی توزیع‌شده و محلی را برای تسریع نوآوری‌ها هدایت خواهد کرد. این ساختار در نهایت موانع تحقیقات میان‌رشته‌ای و بین‌حوزه‌ای را کاهش می‌دهد و دانشمندان و محققان را در هر دو حوزه دانشگاهی و صنعتی در تمام سطوح قادر می‌سازد تا در آزمایش‌های بسیار تخصصی و تحقیقات علمی شخصی‌سازی‌شده شرکت کنند.

نتایج

در پایان، ادغام هوش مصنوعی با ابزار و سخت‌افزارهای پیشرفته علمی، آینده شیمی را متحول خواهد کرد. با مهار قدرت جمعی هوش مصنوعی و ابزارهای پیشرفته، می‌توانیم اکتشافات علمی را تسریع کنیم، نوآوری را به پیش ببریم و راه را برای جهانی پاک‌تر، سالم‌تر و پایدارتر هموار کنیم.

در نتیجه، هوش مصنوعی با هوشمندتر کردن جنبه‌های مختلف فرآیند تحقیق، پتانسیل تأثیر قابل توجهی بر شیمی سنتزی دارد. اگرچه چالش‌هایی برای غلبه بر آنها وجود دارد، اما تلاش‌های مشترک بین رشته‌های بین رشته‌ای می‌تواند به راه‌حل‌های نوآورانه منجر شود. ادغام داده‌های با کیفیت بالا، مهندسی ویژگی‌های مولکولی پیشرفته، فناوری‌های آزمایشگاهی مستقل و کاربرد هوش مصنوعی عمومی در تحقیقات، یک دوره جدید را برای شیمی سنتزی به ارمغان خواهد آورد.

ادغام اتوماسیون، علم داده و هوش مصنوعی با شیمی سنتزی سنتی، رویکرد ما را در کاوش در فضای شیمیایی و پرداختن به چالش‌های سنتز متحول کرده است. توسعه ابزارهای HTE مؤثر، مقرون به صرفه و کاربرپسند، محور تلاش‌های ما است. سفر ما به شیمی هوش مصنوعی مبتنی بر HTE، نشان‌دهنده یک تغییر الگو در تحقیقات شیمیایی است که فرصت‌های بی‌نظیری را برای کاوش و کشف ارائه می‌دهد.

در آینده، اتوماسیون و هوش مصنوعی آماده‌اند تا برنامه‌های تحقیقاتی تجربی و محاسباتی را به طور قابل توجهی تسریع کنند، به ویژه هنگامی که این فناوری‌ها برای تکمیل یکدیگر ادغام شوند. این هم‌افزایی بین فرآیندهای تجربی خودکار و تحلیل محاسباتی مبتنی بر هوش مصنوعی، یک حلقه بازخورد ایجاد می‌کند که می‌تواند به سرعت فرضیه‌ها و آزمایش‌ها را تکرار و اصلاح کند و در نتیجه کشف و توسعه مواد و فناوری‌های جدید را سرعت بخشد. با پیچیده‌تر شدن روزافزون هوش مصنوعی و اتوماسیون، انتظار می‌رود ادغام آنها منجر به تحقیقات علمی کارآمدتر، نوآورانه‌تر و پربارتر شود.

همزمان با تکامل چشم‌انداز تحقیقات علوم شیمی و مواد، پتانسیل شیمی خودگردان مبتنی بر هوش مصنوعی به طور فزاینده‌ای آشکار می‌شود. گذار از آزمایشگاه‌های خودگردان انفرادی به شبکه‌های گسترده سیستم‌های هوشمند، تغییر انقلابی در نحوه رویکرد به تحقیقات و چالش‌های علمی را تسریع خواهد کرد. این گذار، کارایی و اثربخشی تحقیقات شیمی خودگردان را به حداکثر می‌رساند و توانایی نوآوری در رشته‌های دانشگاهی و صنایع مختلف را دموکراتیک می‌کند. با پیشرفت، تلفیق مداوم و در حال تکامل فناوری‌های پیشرفته هوش مصنوعی و رباتیک با شیمی و علوم مواد، نویدبخش تسریع کشف مواد شیمیایی و مواد برتر با عملکردهای مطلوب است که مزایای قابل توجهی را برای جامعه به ارمغان می‌آورد.

منابع

- ۱- Junyi Zhou, Man Luo, Linjiang Chen, Qing Zhu, Shan Jiang, Fei Zhang, Weiwei Shang, Jun Jiang. A multi-robot-multi-task scheduling system for autonomous chemistry laboratories. Royal Society of Chemistry, Volume ۴, Issue ۳, ۲۹ January ۲۰۲۵, Pages ۶۳۶-۶۵۲.
- ۲- Li-Sheng Wang, Jia-Chen Xiang, An-Xin Wu. Advances in the self-organized total synthesis of natural products. Royal Society of Chemistry, Volume ۶۰, Issue ۸۸, ۱ October ۲۰۲۴, Pages ۱۲۸۰۳-۱۲۸۱۵.
- ۳- Shuai Chen, Robert Pollice. Predicting hydroformylation regioselectivity from literature data via machine learning. Chem Catalysis, Volume ۴, Issue ۹, ۱۹ September ۲۰۲۴, Pages ۱۰۱-۱۱۱.
- ۴- Yeonghun Kang, Wonseok Lee, Taeun Bae, Seunghee Han, Huiwon Jang, Jihan Kim. Harnessing Large Language Models to Collect and Analyze Metal–Organic Framework Property Data Set. Journal of the American Chemical Society, Volume ۱۴۷, Issue ۵, January ۲۱, ۲۰۲۵.
- ۵- Leiyun Zhong, Yiming Xu, Xinghai Li, Peihao Cheng, Shengyang Tao. Production and evaluation of high-throughput reaction data from an automated chemical synthesis platform. Science China Chemistry, ۲۶ May ۲۰۲۵.
- ۶- Benjamin Burger, Phillip M. Maffettone, Vladimir V. Gusev, Catherine M. Aitchison, Yang Bai, Xiaoyan Wang, Xiaobo Li, Ben M. Alston, Buyi Li, Rob Clowes, Nicola Rankin, Brandon Harris, Reiner Sebastian Sprick, Andrew I. Cooper. A mobile robotic chemist. Nature ۵۸۳, ۰۸ July ۲۰۲۰, Pages ۲۳۷-۲۴۱.
- ۷- Tao Song, Man Luo, Xiaolong Zhang, Linjiang Chen, Yan Huang, Jiaqi Cao, Qing Zhu, Daobin Liu, Baicheng Zhang, Gang Zou, Guoqing Zhang, Fei Zhang, Weiwei Shang, Yao Fu, Jun Jiang, Yi Luo. A Multiagent-Driven Robotic AI Chemist Enabling Autonomous Chemical Research On Demand. Journal of the American Chemical Society, Volume ۱۴۷, Issue ۱۵, March ۸, ۲۰۲۵.
- ۸- Yuanzheng Chen, Xuxuan Huang, Yangdong He, Qian Liu, Junmei Du, Wei Yang, Wenhan Wang, Di Zhang, Xue Jia, Hongyan Wang, Yongliang Tang, Qingkai Yu, Seok Ki Kim, Hao Li. Data-Driven Strategies for Designing Multicomponent Molten Catalysts to Accelerate the

Industrialization of Methane Pyrolysis. ACS Catalysis, Volume ۱۵, Issue ۱۳, ۲۰۲۵, Pages ۱۱۰۰۳-۱۱۰۱۲.