

## PL-6

**ХЕМОИНФОРМАТИКА И ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ  
В СИНТЕТИЧЕСКОЙ ХИМИИ: ОТ МОДЕЛИРОВАНИЯ ДО  
РОБОХИМИКА****Т. И. Маджидов<sup>1</sup>, И. С. Антипин<sup>1</sup>, А. Варнек<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>*Химический институт им. А. М. Бутлерова, Казанский (Приволжский) федеральный университет, Россия, 420008, г. Казань, ул. Кремлёвская, 18;*

<sup>2</sup>*Университет Страсбурга, 67081, Франция, г. Страсбург, ул. Блеза Паскаля, 4.  
E-mail: Timur.Madzhidov@kpfu.ru*

К настоящему времени в химии накоплен огромный массив данных по химическим реакциям, в базах данных собрана информация более чем о 100 миллионах химических реакций. Анализ этих данных может быть использован для создания инструментов, которые химики смогут использовать при планировании синтеза, поиске и анализе информации о химических реакциях. Продуктивность работы с данными такого большого объема при решении практических задач химии может быть обеспечена не только производительностью компьютеров, но и эффективностью методов искусственного интеллекта, лежащих в основе используемых программных средств. Если раньше об искусственном интеллекте писали главным образом философы, писатели-фантасты и сценаристы, то в настоящее время искусственный интеллект является объектом интенсивных научных исследований, быстро входит в повседневную жизнь и становится ведущим фактором в научно-техническом, экономическом и даже культурном развитии человечества.

Доклад посвящен использованию средств хемоинформатики и искусственного интеллекта для решения задач синтетической химии, позволяющих получить ответ на актуальные для химиков-синтетиков вопросы: (1) Как синтезировать заданное соединение? (2) Какие условия (катализатор, растворитель, набор добавок, температура и т. д.) требуются для проведения данной реакции наиболее регио/хемо/стереоселективно и с наибольшим выходом? (3) Каковы будут скорость / выход / время проведения данной реакции? (4) Образование какого основного/побочных продуктов можно ожидать при проведении данной реакции при заданных условиях? (5) Как найти в коммерческой либо свободно доступной базе данных реакцию, похожую на заданную (чтобы получить представление о методике синтеза)? При работе с базами данных реакций нередко встают еще вопросы (6): Какие типы реакций собраны в данной базе данных, имеется ли достаточно примеров реакции интересующего типа?

Уровень развития этой области таков, что создание «робосинтетиков», способных самостоятельно проводить синтез интересующих соединений – это задача, которая уже перешла из области фантастики в поле практической реализации. Это вселяет оптимизм в будущее методов искусственного интеллекта в химии, способных коренным образом изменить существующие подходы к получению новых соединений и материалов с заданными свойствами.

*Работа финансируется в рамках проекта, поддержанного Министерством образования молодежи и спорта Чешской Республики, соглашение MSMT-5727/2018-2, а также Министерством науки и высшего образования РФ, соглашение 14.587.21.0049 (уникальный идентификатор проекта RFMEFI58718X0049).*