



Ubrzanje kemijskih otkrića pomoću strojnog učenja – ‘RoboChem’

Znanstvenici u Amsterdamu primjenjuju strojno učenje da bi ubrzali proces ostvarenja novih kemijskih otkrića u farmaceutskoj industriji.

Tim kemičara sa Sveučilišta u Amsterdamu razvio je autonomnog robota za kemijsku sintezu opremljenog integriranom jedinicom temeljenom na strojnom učenju. Ovaj robot, nazvan RoboChem, predstavlja uređaj koji služi za iterativno određivanje optimalnih, specifičnih uvjeta fotokemijskih procesa unutar skalabilnog sustava. RoboChem, prvi robot takve vrste, ima potencijal ubrzati potragu za novim spojevima u farmaceutskoj i brojnim drugim industrijama. Rezultati njegove aktivnosti objavljeni su u časopisu *Science* (<https://doi.org/10.1126/science.adj1817>).

RoboChem

Profesor Timothy Noël i njegov tim s Van 't Hoff Instituta za molekularne znanosti na Sveučilištu u Amsterdamu razvili su RoboChem. Njihova studija pokazuje da RoboChem može izvesti različite reakcije uz minimalno stvaranje otpada. Noël ističe: “Za samo jedan tjedan, možemo optimirati sintezu između deset i dvadeset molekula, što bi inače zahtijevalo nekoliko mjeseci rada jednog doktoranda.” Robot ne samo da optimira uvjete reakcije, već i definira parametre za *scale-up* proces. To znači da se mogu proizvesti količine relevantne dobavljačima farmaceutskih industrija.

Kako RoboChem radi?

Znanstvenici koji su razveli RoboChem, eksperti su u protočnoj kemiji (engl. *flow chemistry*). Kod RoboChem robotika igla prikuplja početne materijale i miješa ih u malim količinama (nešto više od pola mililitra). Nakon toga nastale smjese prolaze kroz cijevni sustav prema reaktoru. U reaktoru, svjetlost LED dioda potiče konverziju molekula aktivirajući fotokatalizator u reakcijskoj smjesi. Protok se nastavlja prema NMR spektrometru koji detektira transformirane molekule. Podatci se u stvarnom vremenu vraćaju računalu koji upravlja RoboChemom. Računalno primjenom algoritma strojnog učenja obrađuje pristigle informacije te autonomno određuje koje će se reakcije provesti. Sustav uvijek teži optimalnom ishodu i neprestano usavršava svoje razumijevanje kemije. RoboChem platforma pri optimizaciji koristi Bayesov algoritam. Funkcionira autonomno, što uklanja potrebu za dubokim poznavanjem fotokatalize ili procesa skaliranja da bi se postigli optimalni rezultati. To RoboChem čini korisnom platformom, prikladnom za bilo koji laboratorij za sintetsku organsku kemiju, neovisno o korisnikovu poznavanju fotokatalize.

Grupa je uložila mnogo truda u potvrdu rezultata RoboChem. Sve molekule uključene u znanstveni rad u časopisu *Science* bile su izolirane i ručno provjerene. Noël kaže da ga je sustav impre-



sionirao svojom inventivnošću: “Radim na fotokatalizi već više od desetljeća. Ipak, RoboChem je pokazao rezultate koje ne bih mogao predvidjeti. Na primjer, identificirao je reakcije koje zahtijevaju vrlo malo svjetla. Ponekad sam morao veoma intenzivno razmišljati da bih shvatio što je RoboChem učinio. Tad se pitate: bismo li to napravili na isti način? U retrospektivi, vidite logiku RoboChem. Ali sumnjam da bismo sami postigli iste rezultate. Ili barem ne tako brzo.”

Replikacija prethodnih rezultata

Primjenjivost RoboChem ispitana je i kroz repliciranje prethodnih istraživanja objavljenih u četiri nasumično odabrana članka. Tim je procijenio jesu li rezultati koje je postigao RoboChem bili jednaki ili bolji od originalnih. Noël je izjavio: “U otprilike 80 % slučajeva, sustav je postigao bolje rezultate. U preostalih 20 %, rezultati su bili slični. To me uvjerava da će pristup ostvarenju kemijskih otkrića uz pomoć umjetne inteligencije biti primjenjiv u najširem smislu.”

Prekretnice u kemiji uz pomoć umjetne inteligencije

Prema Noël, važnost RoboChem i drugih “računaliziranih” kemijskih sustava leži u generiranju visokokvalitetnih podataka, što će koristiti budućoj upotrebi umjetne inteligencije. U tradicionalnom kemijskom istraživanju samo nekoliko molekula temeljito se istražuje, a rezultati se zatim ekstrapoliraju na naizgled slične molekule. RoboChem generira sveobuhvatni skup relevantnih podataka za svaku molekulu.

Sustav također bilježi “negativne” podatke. U trenutnoj znanstvenoj praksi, većina objavljenih podataka odnosi se samo na uspješne eksperimente. “Neuspjeli eksperiment također pruža relevantne podatke”, kaže Noël. “Ali ti se podatci mogu pronaći samo u bilješkama istraživača napisanim ručno u laboratoriju, koji nisu objavljeni i stoga nisu dostupni za kemijske procese potpomognute umjetnom inteligencijom. RoboChem će to također promijeniti. Nema sumnje da ako želite postići prekretnice u kemiji uz pomoć umjetne inteligencije, trebat ćete takvu vrstu robota.”

Izvori: <https://www.innovationnewsnetwork.com>
<https://aihub.org>