

4.2 Використання штучного інтелекту при вивченні хімії

Вступ. В даний час студенти вступили в епоху освіти 21-го століття, що відображає значну трансформацію в парадигмі навчання. Викладачі вищих навчальних закладів також стикаються з вимогами завжди бути креативними та інноваційними у викладанні [94]. Досягнення в галузі штучного інтелекту (ШІ), створення великих баз даних Інтернету принесли нові можливості в сферу інформаційно-комунікаційних технологій [94, 95]. ШІ став головним каталізатором кардинальної трансформації в різних галузях науки і освіти. ШІ може зробити революцію в освіті, вирішуючи ключові проблеми та покращуючи людський інтелект. Можна виділити *три основні аспекти ШІ в освіті*: використання інструментів ШІ для вирішення освітніх проблем, зміна освіти з метою зосередження уваги на людському інтелекті у світі, керованому ШІ, та навчання людей ШІ для безпечного та ефективного використання [96].

Інструменти ШІ, такі як адаптивні шляхи навчання, автоматична оцінка та персоналізований зворотний зв'язок, можуть допомогти викладачам у вирішенні таких проблем, як залучення студентів, освітня нерівність та тимчасові обмеження.

Дуже важливим є розвиток освіти для розвитку людського інтелекту поряд з ШІ. Необхідний розвиток міждисциплінарного академічного інтелекту, метакогнітивного інтелекту та самоефективності, що сприймається для підготовки студентів до майбутнього, орієнтованого на ШІ.

Стратегії навчання ШІ повинні включати підвищення обізнаності студентів, забезпечення навчання викладачів, стратегічне планування, нарощування потенціалу та етичних міркувань під час впровадження ШІ до вищих навчальних закладів [96].

Основні ролі, які бере на себе ШІ є наступні [97]:

- Двигун можливостей. ШІ генерує альтернативні способи вираження ідеї.
- Опонент. ШІ виступає як опонент для розробки аргументу.

- Тренер із співпраці. ШІ допомагає групам досягати та вирішувати проблеми.
- Планувальник навчальних занять. ШІ допомагає викладачу у плануванні заняття чи додаткового заходу.
- Генератор тестів. ШІ допомагає викладачу створювати тести з кількома варіантами відповідей.
- Персональний репетитор. ШІ навчає студентів та дає негайний зворотний зв'язок.
- Динамічний оцінювач. ШІ надає педагогам профіль кожного студента.
- Дизайнер. ШІ допомагає протягом усього процесу проектування.
- Інструментарій. ШІ надає інструменти для виявлення, вивчення та інтерпретації даних.

У контексті хімії ШІ відкрив двері для значних змін у тому, як ми розуміємо, аналізуємо та застосовуємо знання про молекулярну структуру, реакційну здатність і дизайн хімічних речовин. Застосування ШІ у навчанні хімії містить кілька важливих аспектів. Одним із них є передбачення молекулярних властивостей, він надає можливості прогнозувати хімічні властивості на основі молекулярної структури. Це має великий вплив на структуру нових молекул, розробку ліків і дизайн матеріалів, які мають бажані властивості. ШІ зробив більш ефективним моделювання молекулярних структур [95]. Другим аспектом є те, що використання ШІ в хімії передбачає аналіз великих об'ємів даних, що дозволяє отримувати цінну інформацію про властивості молекул або хімічні взаємодії. Ще одним аспектом є кращий доступ студентів-хіміків до вдосконалених та персоналізованих інструментів навчання, складних прогностичних моделей для розуміння молекулярних властивостей речовин, симуляції хімічних реакцій, вони можуть передбачити експериментальні результати з високим ступенем точності [98].

Мета дослідження. Основною метою дослідження є аналіз попередніх досліджень про застосування ШІ при вивченні хімії та ознайомлення з власним досвідом використання Chat GPT. Дане дослідження також спрямоване на

висвітлення невирішених питань та проблемних моментів при використанні генеративного ШІ у вищій школі.

Новизна задачі. Показано можливості використання генеративного ШІ у вищій освіті, а саме при вивченні дисципліни «Хімія» при проведенні навчальних занять і на вищому науковому рівні при проведенні наукових досліджень. Новизна одержаних результатів полягає у висвітленні позитивних та негативних аспектів при застосуванні ШІ в освіті, виявлено проблемні моменти використання ШІ при навчанні хімії та невирішені питання.

Методи дослідження: описово-якісний метод, теоретичний та методологічний аналіз наукової та навчально-методичної літератури. Збір даних здійснювався із джерел, які відповідають темі дослідження, а саме застосування ШІ в освіті та у навчанні хімії.

Результати

Використання генеративного ШІ на навчальних заняттях з дисципліни «Хімія». Ми застосовували ШІ у навчальному процесі в різних якостях. Найчастіше Chat GPT використовувався студентами для надиктування тексту з аналізом контексту, як інструмент для створення ілюстративного ряду, презентацій для докладів студентів при захисті рефератів, на студентських конференціях різних рівнів.

Крім того, ШІ використовувався групами студентів як потужний інструмент моніторингу для більш точної аналітики, для визначення певної проблеми. Наприклад, за допомогою Chat GPT студенти створювали узагальнену модель явища (процесу, властивостей хімічних сполук) у вигляді схеми чи ілюстрації. При цьому кожен із студентів привносив щось своє. Правильність побудови моделі перевірялася за наявністю всіх компонентів явища, послідовності перебігу процесу з досягненням кінцевого результату тощо.

Штучний інтелект також міг виступати як *опонент*: поспілкувавшись із ШІ в рамках певної теми, студенти повинні були написати аргументоване есе та подати його у форумі за певним розділом в електронному курсі-ресурсі. Це дуже важливо на заключному етапі вивчення певного розділу дисципліни під час

навчання. Це допомагало студентам вибрати необхідний матеріал, відсіяти все непотрібне, класифікувати процеси, властивості речовин, дотриматись логічної послідовності у викладі суті проблеми.

Переваги ІІІ у вивченні хімії при проведенні наукових досліджень. Значна частина студентів цікавиться проведенням наукових досліджень із ранніх курсів навчання, тому доцільно розглядати аспекти використання ІІІ студентами на більш глибокому науковому рівні.

ІІІ може прогнозувати молекулярні властивості з високою точністю на основі молекулярної структури. Це дозволяє точніше прогнозувати реакційну здатність, стабільність або інші властивості молекули. У роботі [99] показано розвиток штучної нейронної мережі Chemception, яка призначена для прогнозування молекулярних властивостей з вищою продуктивністю, ніж у традиційних моделей.

Моделювання молекулярної структури. Використовуючи методи машинного навчання та нейронні мережі, ІІІ може пришвидшити процес моделювання молекулярних структур, забезпечуючи ефективнішу розробку нових молекул. У статті [100] показано використання підходу нейронно-символічного машинного навчання для прогнозування хімічних реакцій ретросинтезу, який є ключовим процесом в органічній хімії. Автори поєднали методи машинного навчання з символічними представленнями в органічній хімії. Це може мати серйозні наслідки для розуміння та розробки процесів молекулярного синтезу.

Аналіз великих баз хімічних даних. ІІІ здатний швидко обробляти й аналізувати великі об'єми хімічних даних, допомагаючи витягувати приховані закономірності, зв'язки та тенденції. У роботі [101] створено платформу для тестування та порівняння різних підходів до машинного навчання для прогнозування властивостей молекул. Метою було забезпечення надійних і послідовних стандартів оцінювання для дослідників, які займаються розробкою алгоритмів і машинним навчанням у хімії. Це вносить важливий внесок у зміцнення бази знань про ефективність методів машинного навчання для

прогнозування молекулярних властивостей і є дуже корисним довідковим матеріалом у порівнянні ефективності різних алгоритмів у хімічному контексті.

Прогнозування хімічної реактивності та властивостей речовин. ШІ дозволяє точніше прогнозувати хімічну реакційну здатність, дозволяючи розробляти нові технічні матеріали зі спеціальними властивостями, більш ефективні хімічні каталізатори і нові ліки. У роботі [95] обговорюється використання підходу багатозадачного глибокого навчання в контексті фармацевтичної промисловості. Використовуючи глибокі методи навчання, ця стаття намагається інтегрувати та вивчати кілька завдань одночасно, наприклад, прогнозування біологічної активності або молекулярних властивостей хімічних сполук.

Зменшення залежності від експерименту. Завдяки високим можливостям прогнозування ШІ може допомогти зменшити кількість повторюваних експериментів, заощадивши час і ресурси в хімічних дослідженнях. Це твердження узгоджується з висновками статті [102], у якій знайдено підхід до автоматичного молекулярного проектування з використанням безперервного представлення молекул на основі даних. Підхід спрямований на автоматичне створення нових молекул із бажаними властивостями на основі безперервного представлення молекулярної структури, що дозволяє ефективно моделювати будову молекул та використовувати методи машинного навчання для прогнозування властивостей або функцій отриманих молекул. Такі підходи створюють міцну основу для більш автоматизованих та інноваційних підходів до молекулярного дизайну в хімії.

Інновації в хімічних дослідженнях. Застосування ШІ в хімії відкриває двері для проривів, прискорює відкриття нових хімічних речовин і забезпечує глибше розуміння молекулярних властивостей. Автори статті [103] обговорюють застосування техніки машинного навчання в молекулярній і матеріалознавчій сферах. Показано, що машинне навчання стало дуже корисним інструментом для прогнозування, аналізу, та проектування властивостей нових молекул і матеріалів. Автори пояснюють різні застосування машинного навчання для

прогнозування властивостей матеріалів і пошуку бажаних молекулярних структур, а також ілюструють, як ця технологія прискорила прогрес у галузі хімії та дослідження матеріалів.

Оптимізація хімічного процесу. Завдяки кращим можливостям прогнозування та моделювання ІІІ може допомогти оптимізувати хімічні процеси та підвищити ефективність виробництва та якість продукції.

Власний досвід при використанні ІІІ при проведенні наукових досліджень спільно зі студентами полягав у вивченні нами методів синтезу та властивостей мідно-цинкових феритів. Ми використовували комбінацію таких функцій генеративного ІІІ, як аналіз даних, прогнозування та створення узагальненої моделі. За допомогою Chat GPT ми проаналізували існуючі підходи та методи синтезу феритів, вибрали найбільш оптимальну стратегію для синтезу фериту із вмістом міді та цинку. Далі студентами за допомогою ІІІ була створена узагальнена модель можливих властивостей феритів як корисних технічних матеріалів, обрані властивості феритів найцікавіші для нашого дослідження та методи їх дослідження. Синтезовані мідно-цинкові ферити проявили себе як фотокаталізатори, окислювачі, сорбенти, у них виявлено суперпарамагнітні властивості.

Проблеми, з якими стикаються під час впровадження ІІІ у навчання хімії

- *Якість і кількість відповідних хімічних даних* часто є проблемою, доступні бази даних обмежені в охопленні або різноманітності, що може вплинути на точність і узагальнення побудованих моделей. Доступність даних обмежується мовою, на якій робиться запит. Найбільш розширена база даних ІІІ англійською мовою. Тому при поганому володінні студентами цією мовою, при некоректно або неправильно сформульованому питанні можна отримати спрощену відповідь або взагалі її відсутність.

- *Перевірка моделі.* Складні моделі часто важко інтерпретувати. Це може бути проблемою в хімії, де важливість розуміння молекулярної структури та взаємодій є ключовою.

- *Етика та безпека.* Конфіденційні дані в хімічних дослідженнях необхідно зберігати в безпеці, особливо під час використання методів ШІ, які потребують доступу до конфіденційних даних або цінних експериментів. Використання ШІ під час вивчення хімії також викликає етичні питання щодо відповідального використання цієї технології, особливо під час розробки нових ліків або біологічно-активних хімічних речовин.

- *Алгоритмічні та обчислювальні обмеження.* Алгоритми ШІ не є досконалими та все ще мають обмеження в розумінні складних моделей у хімічних даних. Використання технології ШІ в хімії вимагає потужної обчислювальної інфраструктури для обробки та аналізу великих об'ємів даних, що може стати перешкодою для деяких дослідників.

- *Інтеграція зі знаннями домену.* Розуміння результатів ШІ в хімічному контексті та їх інтеграція з наявними хімічними знаннями є додатковим викликом.

- *Майбутні виклики.* Постійне розширення хімічних знань і технологій ШІ вимагає постійного оновлення існуючих моделей, що вимагає додаткових досліджень.

Вирішення цих проблем вимагатиме співпраці між хіміками, комп'ютерниками та експертами зі ШІ, щоб подолати обмеження, покращити інтерпретацію та забезпечити безпеку та етику застосування ШІ у навчанні хімії.

Невирішені загальні питання використання ШІ, що напряду пов'язані з освітою. Існує нове соціально-психологічне явище у вигляді *формування певної залежності від ШІ*, яке треба вивчати з погляду різних міжкультурних відмінностей особистості. Зареєстрований прихований негативний вплив Chat GPT на когнітивне функціонування особистості учнів, студентів, дорослих. У цьому плані нами було проведено наступне дослідження: групу студентів розділили на дві підгрупи, одній із яких дозволили вільно користуватися Chat GPT при відповідях на заняттях. Їх відповіді були більш розгорнутими та аргументованими. Однак при кінцевому тестуванні, проведеному у традиційному вигляді за допомогою тестових завдань різних типів та рівнів

складності, студенти цієї підгрупи показали нижчий рівень знань та вмінь. Це ще раз наголошує на тому, що використання генеративного ШІ в освіті має невирішені проблеми та ризики соціального значення.

Залишаються невирішеними питання *використання згенерованих ШІ текстів*. Оскільки вони вперше створені, то системи антиплагіату не фіксують їх як плагіат і в той же час цей текст не є продуктом розумової діяльності самого студента. Тому можлива *заміна істинного процесу навчання штучним інтелектом*, а не його використання як допоміжного інструменту. Також відомо, що ШІ може вигадувати не лише посилання, а й самі факти. Тобто існує ризик, що, використовуючи Chat GPT в якості репетитору, студенти можуть дізнатися щось, відмінне від істинних фактів, явищ і процесів або від того, що їм належить знати.

Залишаються відкритими *питання інформаційної безпеки* при використанні ШІ, так як Chat GPT спирається на весь масив інформації, що існує у світі, включаючи дані засобів масової інформації, що особливо небезпечно в період військової агресії по відношенню до України. Так, залежно від мови спілкування із ШІ суттєво змінюються відповіді, які дає ШІ, зокрема, що стосуються політики, військових дій, належності територій тощо.

Висновки

Проаналізовано значущість інтеграції ШІ в освіту та його основні ролі.

Показано, що ШІ може ефективно використовуватися як під час проведення навчальних занять з хімії, так і в наукових дослідженнях спільно зі студентами, наголошено на перевагах такого підходу. ШІ може швидко обробляти й аналізувати великі хімічні дані, дозволяючи виділяти приховані закономірності, зв'язки та тенденції зі складних наборів даних. Застосування ШІ у вивченні хімії відкриває двері для проривів, прискорює відкриття нових хімічних речовин і забезпечує глибше розуміння молекулярних властивостей. ШІ не тільки покращує процес навчання хімії, але також вносить серйозні зміни в те, як проводяться хімічні дослідження та розробки. Це надає можливості для

подальших інновацій у галузі хімії та забезпечує міцну основу для майбутнього прогресу.

Виявлено проблеми, з якими стикаються під час впровадження технологій ІІІ під час навчання хімії, а також невирішені загальні питання використання ІІІ в освіті.