

ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ ҒЫЛЫМ ЖӘНЕ ЖОҒАРЫ БІЛІМ МИНИСТРЛІГІ

«Л.Н. ГУМИЛЕВ АТЫНДАҒЫ ЕУРАЗИЯ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІ» КЕАҚ

**Студенттер мен жас ғалымдардың
«GYLYM JÁNE BILIM - 2024»
XIX Халықаралық ғылыми конференциясының
БАЯНДАМАЛАР ЖИНАҒЫ**

**СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ
XIX Международной научной конференции
студентов и молодых ученых
«GYLYM JÁNE BILIM - 2024»**

**PROCEEDINGS
of the XIX International Scientific Conference
for students and young scholars
«GYLYM JÁNE BILIM - 2024»**

**2024
Астана**

УДК 001

ББК 72

G99

«GYLYM JÁNE BILIM – 2024» студенттер мен жас ғалымдардың XIX Халықаралық ғылыми конференциясы = XIX Международная научная конференция студентов и молодых ученых «GYLYM JÁNE BILIM – 2024» = The XIX International Scientific Conference for students and young scholars «GYLYM JÁNE BILIM – 2024». – Астана: – 7478 б. - қазақша, орысша, ағылшынша.

ISBN 978-601-7697-07-5

Жинаққа студенттердің, магистранттардың, докторанттардың және жас ғалымдардың жаратылыстану-техникалық және гуманитарлық ғылымдардың өзекті мәселелері бойынша баяндамалары енгізілген.

The proceedings are the papers of students, undergraduates, doctoral students and young researchers on topical issues of natural and technical sciences and humanities.

В сборник вошли доклады студентов, магистрантов, докторантов и молодых ученых по актуальным вопросам естественно-технических и гуманитарных наук.

УДК 001

ББК 72

G99

ISBN 978-601-7697-07-5

**©Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия
ұлттық университеті, 2024**

Қолданылған әдебиеттер тізімі

1. Антони Пардала Информатизация как стимулятор современного математического образования // Информатизация образования и методика электронного обучения: материалы II Междунар. науч. конф. Красноярск, 25 - 28 сентября 2018 г.: в 2 ч. Ч. 1 / под общ. ред. М. В. Носкова: Сиб. федер.ун-т, 2018. С. 51-56.
2. Тестов В.А. Математическое образование в условиях сетевого пространства // Образование и наука. 2013. No 2 (101). С. 111–120.
3. Тумашева О.В., Шашкина М.Б. Средства формирования и оценивания метапредметных результатов обучающихся поколения Z // Азимут научных исследований: педагогика и психология. 2020. Том 9. No 1 (30). С. 285–290.

ӘОК 004.89

ЗАМАНАУИ ХИМИЯ САЛАСЫНДА НЕЙРОНДЫҚ ЖЕЛІЛЕР МҮМКІНДІКТЕРІН ПАЙДАЛАНУ

Төлеуханова Әсел Ерназарқызы

asel.toleuhanova@mail.ru

Л.Н. Гумилев атындағы ЕҰУ 2 курс магистранты, Астана, Қазақстан
Ғылыми жетекшісі - А. Абылайхан

Химиялық білімнің әртүрлі салаларында жасанды интеллектті пайдалану мүмкіндіктері мәселелері қаралады. Уақыт өте келе жасанды интеллект шешетін міндеттер саны қарқынды түрде артады, атап айтқанда: қосылыстардың физикалық қасиеттерін болжау, квантты химия әдістерін ауыстыру, химиялық реакциялар мониторингі, электрондық микроскопиядағы бейнелерді және масс-спектрометриядағы сигналдарды тану процестері және т.б.

Кілт сөздер: жасанды интеллект, бағдарламалық қамтамасыз ету, медицина, дәрі-дәрмек, химиялық реакциялар.

Химияда жасанды интеллектті пайдаланудың негізгі артықшылықтарының бірі деректердің үлкен көлемін өңдеу және олардағы заңдылықтарды іздеу мүмкіндігі болып табылады. Бұл жаңа заттарды ашу және химиялық реакцияларды оңтайландыру процесін жеделдетуге мүмкіндік береді.

Ежелгі заманда, теориялық таным қалыптасқанға дейін, адамдар эксперименттер негізінде қоршаған құбылыстар туралы қорытындылар жасаған. Адамзат қандай да бір оқиғалар қандай заңдар бойынша болып жатқанын білмеді, сондықтан қалған нәрсе - құбылыстарды байқау және болып жатқан оқиғадан қандай да бір өзара байланысты табуға тырысу [1].

Біртіндеп, білімнің жинақталуына қарай, адамдар сандық тәсілді пайдалана отырып, себеп-салдарлық байланыстарды анықтай бастады. Бірақ әрдайым қолмен жасау ұзақ болды, сондықтан технологияның дамуымен ғалымдар шынайы жүйелерді компьютер ішіндегі нақты симуляциялар арқылы сипаттауға болатын модельдеу тұжырымдамасына келді.

Бірақ бұл тәсілдің де проблемалары бар. Іс жүзінде кез келген табиғат құбылысы біз ойлағаннан да күрделі болып шығады, сондықтан зерттеушілерге әрқашан белгілі бір жорамалдар мен жеңілдіктер жасауға тура келеді. Мысалы, маймылдардың мінез-құлқын зерттеу үшін ғалымдар сүтқоректілердің барлық тобын бірден зерттемейді, оның орнына олар белгілі бір аумақта тұратын маймылдардың нақты түрлерін сипаттайды. Қазіргі заманғы ғылымның проблемасы осында жатыр - ол неғұрлым жалпы санаттарға әкелуі мүмкін емес өте тар және нақты тақырыптарды сипаттайды.

Бұл проблемаларды шешуге үлкен деректер көмектеседі. Оларды пайдалану кезінде жүйенің күрделілігі іс жүзінде маңызды емес. Бұл ретте молекулаларды, маймылдарды немесе архитектураны зерттегеніміз маңызды емес, себебі бұл әмбебап әдіс болып табылады. Ғалымдар деректердің көмегімен қандай да бір мәселенің жеке шешімін тапқанда, бізге бұл

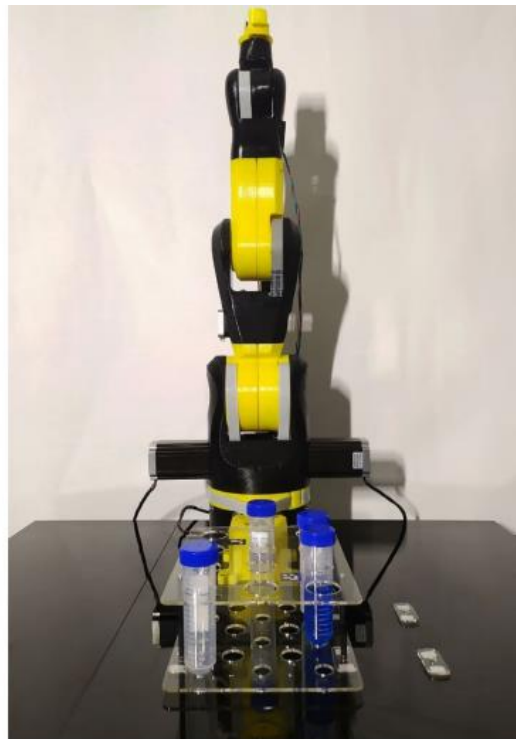
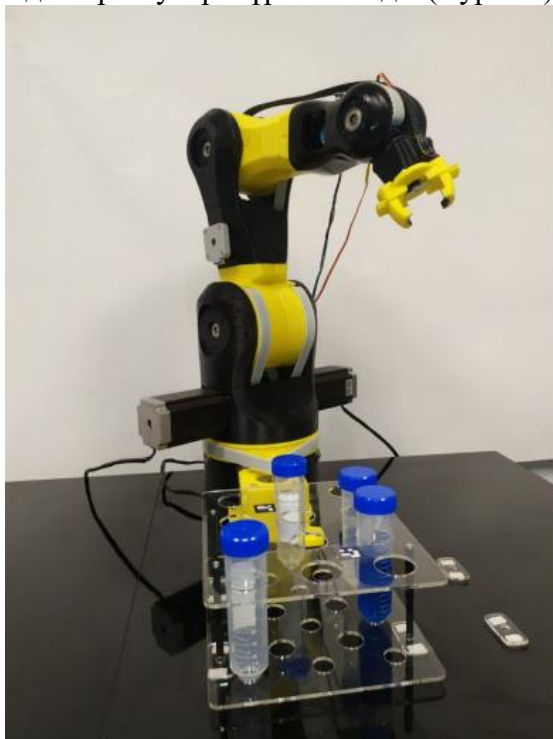
білімді әртүрлі салаларда пайдалануға болады.

Қазіргі заманғы ғылым жеке эксперименттерден бас тартуға ұмтылады - қазір ғалымдар деректердің көп санын жинақтауға мүмкіндік беретін ыңғайлы құралдар бойынша жұмыс істеуде.

Мамандарға қандай да бір өнеркәсіптік катализатор табу керек болса олар оның негізінде иридий ионы болуы тиіс екенін біледі, бірақ оны қандай органикалық молекулаларға қосуға болатыны белгісіз - жүздеген мыңдаған нұсқалар бар. Егер классикалық экспериментатор мұндай іздестіруді қолмен жүргізсе, ол бірнеше жылға созылады, ал зерттеушілердің тұтас тобына жұмыс істеуге тура келеді. Бұл ретте әртүрлі адамдардан алынған деректер әртүрлі болуы мүмкін.

Үлкен деректерге, қымбатқа негізделген автоматтандырылған жүйелер нәтижені жылдар ішінде емес, апталар ішінде алуға мүмкіндік береді және алынған нәтижелерді әлдеқайда жақсы көрсетеді. Осындай жүйелердің арқасында мыңнан астам катализаторға қол жеткізілді және бірнеше апта ішінде оңтайлы нұсқалар табылды. Өз кезегінде, катализаторлардың көп санын тексергеннен кейін, ғалымдар жаңа деректер жинады. Осы деректердің негізінде зерттеушілер катализатордың құрылымы оның жылдамдығын қалай анықтайтынын жоғары дәлдікпен анықтай алды, яғни енді бұл жүйенің қалай жұмыс істейтіндігі туралы толыққанды теорияларды алға тарта алады және басқа да тапсырмалар түрлеріне, мысалы, жаңа диагностикалық жүйелерді әзірлеуге арналған жаңа катализаторларды тезірек әзірлей алады [2].

ИТМО университетінің мамандары адам араласуынсыз барлық күнделікті жұмысты орындай алатын химиялық зертханаларда технологиялық көмекшілер құрумен айналысуда. Қарапайым манипуляцияларды пысықтайтын алғашқы прототиптер жасалды. Болашақта «робот-химиктер» үлкен көлемдегі деректерді жинау және оларды бастапқы талдау бойынша толыққанды зерттеулер жүргізе алады (Сурет 1).



Сурет 1 ИТМО университетіндегі робот-химиктің тәжірибе жасау сәті

Химиялық эксперименттер жүргізу және оларды талдау ғалымдарда уақыттың көп бөлігін алады. Реагенттерді кез келген химик араластыра және еріте алады, бірақ кейбір зерттеулер мен эксперименттер үшін пропорциялардың дәлдігін сақтай отырып, бір манипуляцияны жүздеген рет қайталау қажет.

Оның үстіне, көптеген күштер реагенттердің өзара үйлесіміне және алынған нәтижелерді бекітуге жұмсалады. Бұл процестердің барлығы ұқсас, олар ауыспалылардың шамалы айырмашылығымен бір әрекетті қайталауды талап етеді.

ИТМО мамандары сынамаларды алып жүретін, реагенттердің концентрациясын белгілейтін, алынған реакцияларды тіркейтін, оларды талдайтын және ықтимал нәтижелерді болжайтын химиялық автономды платформаның көмегімен осы процестердің кейбіреулерін техникаға беруге шешім қабылдады.

Бұдан басқа, бүгінде химияда ғылыми және өндірістік цикл бойы зертханада адамды алмастыруға қабілетті роботтар пайдаланылады. Робот-химиктер тәулік бойы үлгілерді өлшеп, ерітінділерді титрлей алады, көптеген табиғи шағын молекулаларды синтездей алады, сондай-ақ алғашқы тәжірибелердің нәтижелеріне сүйене отырып, өз бетінше гипотезалар жасап, оларды тексере алады. Мысалы, осындай роботтардың бірі сегіз күннің ішінде 700-ге жуық эксперимент жасап, он бес есе тиімді катализаторлар алды. Мұндай жүйелердің бірегейлігі оларға нақты іс-қимылдардың бірізділігін қоюдың қажеті жоқ - олар міндеттерді орындауға қарай алынған тәжірибе негізінде өз алгоритмдерін жетілдіре алады.

Химиктер жасанды интеллект қолданатын тағы бір қолданбалы бағыт - дәрі-дәрмектерді әзірлеу. Әдетте мұндай процесс 10-15 жылға созылады, ал алгоритмдер жұмысты бірнеше есе жылдамдатуға мүмкіндік береді.

Дәстүрлі әдістермен препараттарды әзірлеу кезінде әдетте процесс былайша көрінеді: химиялық-органикалық қандай да бір молекуланы синтездеп, оны зерттеп, белгілі бір обьект жасушаларын өлтіретінін білетін биологқа «жатқызады». Осы молекуланың негізінде ғалымдар көптеген жақын тектес молекулаларды шығарады, оларға қандай өзгерістер енгізетінін көру үшін кішкене өзгерістер енгізеді. Содан кейін мыңдаған молекула-кандидаттарды қатерлі ісік жасушаларына қатысты белсенділікке тексереді.

Препараттар ешқашан адамдарға бірден тестіленбейді - бұған дейін мамандар әрқашан клиникалық зерттеулердің бірнеше сатысынан өтуі қажет. Кейде дәрілерді сынау үшін арнайы жасушалық банкілерден алынған адам жасушаларының үлгілері қолданылады.

Бірақ олармен бәрі оңай емес: бұл жасушалардың көбі жүз жыл бұрын және қазір түпнұсқаға және жалпы адам жасушасына ұқсамайды. Сондықтан, дәрі нақты жасушалардың үлгілерінде жұмыс істесе де, ол нақты адамда жұмыс істейді дегенді білдірмейді.

Осылайша, қазіргі заманғы химияда жасанды интеллект мүмкіндіктерін пайдалану зерттеулер жүргізудің тиімділігі мен дәлдігін едәуір жақсартады, жаңа материалдар мен дәрілік препараттарды әзірлеу үшін жаңа перспективалар ашады. Болашақта ғылым мен технологияны дамытуда одан да маңызды рөл атқарады, күрделі міндеттерді шешуге және әлемді жақсырақ әрі қауіпсіз етуге көмектеседі.

Қолданылған әдебиеттер тізімі

1. Золотухин В. М., Золотухина Н. А. Философские вопросы химии: проблемы и методологические основания // [Вестник Кузбасского государственного технического университета - тета](#). 2007. – № 2 (60). – С. 115–118.
2. Как устроен искусственный интеллект. Дзен [сайт]. [Электронный ресурс]. Режим доступа: 05.03.2021. - URL: <https://dzen.ru/a/YEI98J6aVzXBa5zW> (дата обращения 14.05.2023).

ӘОК 004.855.5

БІЛІМ БЕРУ ВАРИУМЫ ҚАШЫҚТАН ОҚЫТУ РЕСУРСЫ

Төрөмұратова Н. М.

naziraturem@gmail.com

Қ.Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік университеті, Ақтөбе, Қазақстан

Ғылыми жетекшісі – Наурызова Н. К., магистр, аға оқытушы