

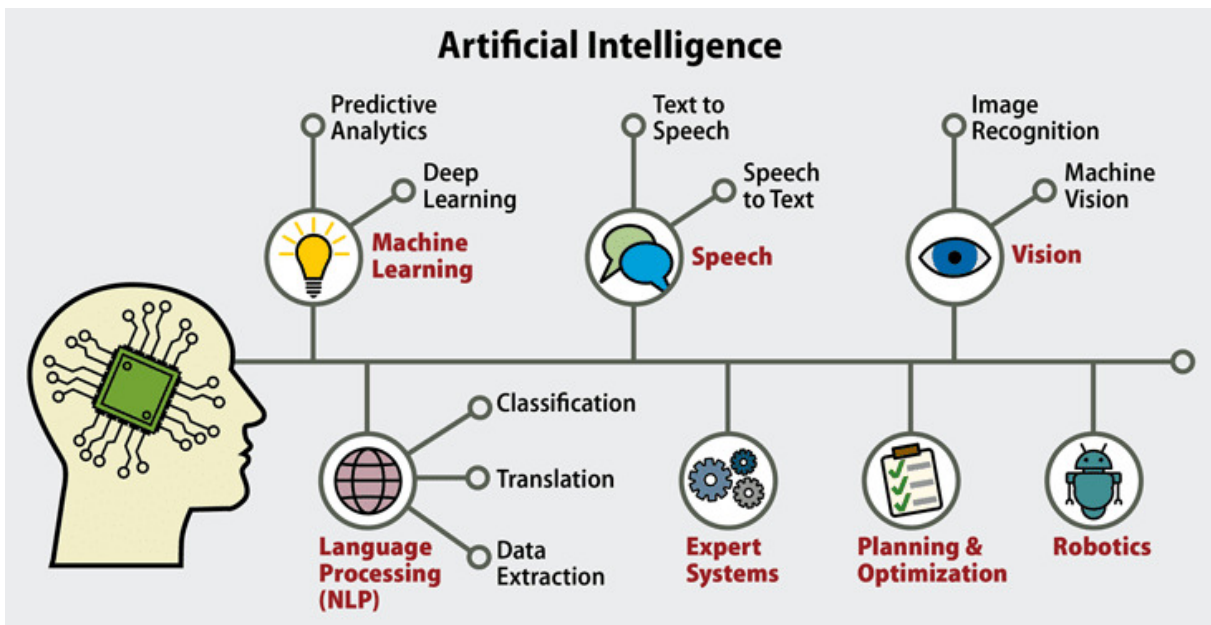
## บทบาทของปัญญาประดิษฐ์ ในงานวิจัยทางเคมี

วรินดา เฟื่องชูบุษ นักวิทยาศาสตร์  
 ประภัสสร ศิลปศาสตร์ดำรง นักวิทยาศาสตร์ชำนาญการ  
 เกศมณี คำแห่งพล นักวิทยาศาสตร์  
 กองเคมีภัณฑ์และผลิตภัณฑ์อุปโภค



ปัจจุบันเทคโนโลยีเปลี่ยนแปลงอย่างรวดเร็วด้วยระบบปัญญาประดิษฐ์ (Artificial Intelligence: AI) AI ไม่ใช่เพียงหุ่นยนต์ที่สามารถเลียนแบบพฤติกรรมของมนุษย์ได้เท่านั้น แต่เป็นสิ่งประดิษฐ์ที่สามารถคิดและโต้ตอบกับมนุษย์ได้โดยไม่ต้องมีรูปร่างหรือหน้าตาเหมือนมนุษย์เสมอไป แต่อาจมีฟังก์ชันการทำงานบางอย่างคล้ายมนุษย์ เช่น การคิด การพูดคุย หรือการเลียนแบบพฤติกรรมต่าง ๆ ของมนุษย์ เป็นต้น เราสามารถพบเห็นความสามารถของ AI ที่ได้นำมาใช้กันในปัจจุบัน ได้แก่ การเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning: ML) คือ การทำให้ระบบคอมพิวเตอร์เรียนรู้ด้วยตนเอง โดยอาศัยการป้อนข้อมูลเพื่อให้คอมพิวเตอร์

ทำความเข้าใจกับข้อมูลนั้นแล้วแสดงผลผ่าน AI การประมวลผลภาษาธรรมชาติ (Natural Language Processing: NLP) ซึ่งนำมาสอดแทรกอยู่ในบริการที่เราใช้ในชีวิตประจำวันทั่วไป ไม่ว่าจะเป็นการปลดล็อกโทรศัพท์ด้วยใบหน้า แชทบอท (Chatbots) การใช้จ่ายผ่าน แอปพลิเคชัน (application) ต่าง ๆ และ กูเกิล แมพ (Google Maps) ที่มีการประมวลผลข้อมูลจราจรแบบทันทีเพื่อหาเส้นทางที่ดีที่สุดในการไปถึงจุดหมายปลายทาง (รูปที่ 1) ทั้งหมดนี้ล้วนเป็นเทคโนโลยีที่มีเทคโนโลยีปัญญาประดิษฐ์ทำงานอยู่เบื้องหลัง และหลายคนอาจจะคาดไม่ถึงว่า AI สามารถบูรณาการร่วมกับวิทยาศาสตร์เคมีได้อีกด้วย



รูปที่ 1 ความสามารถของ AI ที่ใช้อยู่ในปัจจุบัน

ที่มา: muhammadamadbutt00. What Is Artificial Intelligence? [ออนไลน์]. 2022 [อ้างถึงวันที่ 13 กรกฎาคม 2566]. เข้าถึงจาก: [https://ssaven.com/2022/08/12/what-is-artificial-intelligence/?fbclid=IwAR1b18\\_Bvickf1Mwm67-2zGIPMvj\\_LyXI0tX1OWtnSGC72TTdoPCazQMEs](https://ssaven.com/2022/08/12/what-is-artificial-intelligence/?fbclid=IwAR1b18_Bvickf1Mwm67-2zGIPMvj_LyXI0tX1OWtnSGC72TTdoPCazQMEs)

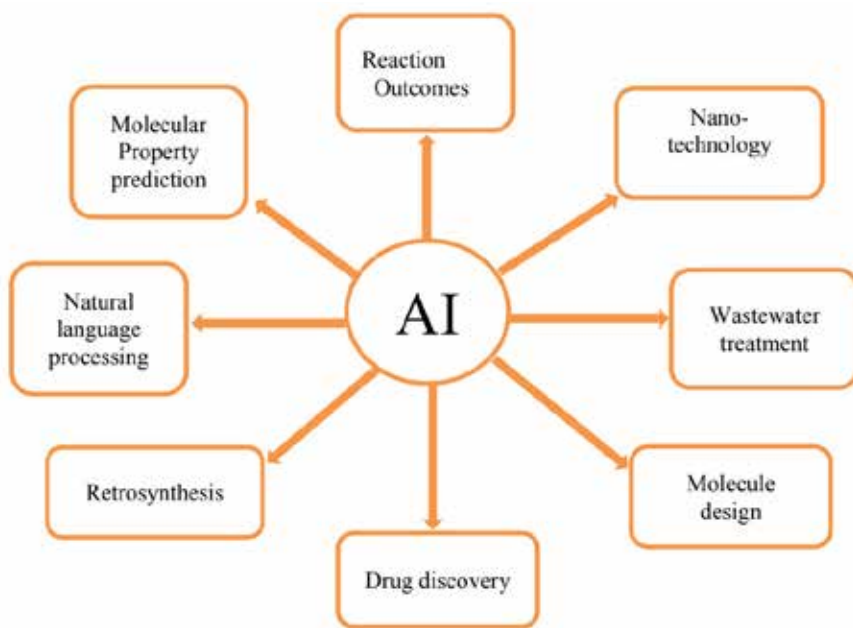
วิทยาศาสตร์เคมี มีบทบาทสำคัญในการเป็นศูนย์กลางของวิทยาศาสตร์สาขาอื่น ๆ เพราะเป็นศาสตร์ที่มีการศึกษาเกี่ยวกับโครงสร้าง คุณสมบัติของสสาร ระบุหรือจำแนกปฏิกิริยาเคมีที่เปลี่ยนสารตั้งต้นให้เป็นสารอื่น ๆ ที่ต้องการ ดังนั้น วิทยาศาสตร์เคมี จึงเป็นศาสตร์หรือสาขาทางวิทยาศาสตร์ที่มีข้อมูลจำนวนมากมหาศาล ซึ่งเป็นข้อมูลที่มีความซับซ้อนและได้จากการทดลองที่มีมาอย่างยาวนาน เช่น ในชุดข้อมูลรหัสสารเคมี Chemical Abstract Services ได้รวบรวมสารอินทรีย์ และอนินทรีย์ที่มีลักษณะเฉพาะมากกว่า 183 ล้านรายการ รวมถึงโลหะผสม สารประกอบโคออร์ดิเนชัน แร่ธาตุ สารผสมพอลิเมอร์ และอื่น ๆ รวมทั้งมีการเพิ่มสารใหม่อีกหลายพันรายการในทุกวัน ความซับซ้อนของสารประกอบที่หลากหลายนี้แสดงให้เห็นว่าเหตุใดงานวิจัยทางเคมียังคงเป็นงานที่ยากและต้องใช้เวลาในการนำ AI เข้ามาประยุกต์ใช้จึงเป็นตัวเลือกที่ดีในการจัดการกับระดับความซับซ้อนของข้อมูลจำนวนมากมหาศาลนั้น

ทั้งนี้มีการนำ AI มาใช้กับงานวิจัยทางเคมีที่หลากหลาย ได้แก่ การค้นพบยา (drug discovery) ระบบบำบัดน้ำเสีย (wastewater treatment) การออกแบบโมเลกุล (molecule design) รวมถึงการให้ AI รวบรวมความรู้ทางเคมีที่มีอยู่ในวรรณกรรมทางเคมีจำนวนมากให้โดยอัตโนมัติและอื่น ๆ (รูปที่ 2)

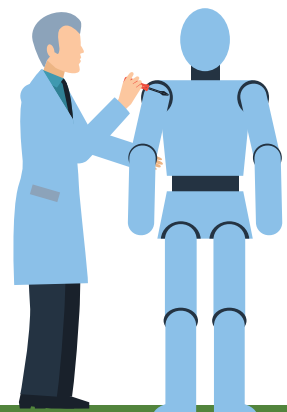
งานวิจัยทางเคมีอินทรีย์ที่ศึกษาเกี่ยวกับโครงสร้าง คุณสมบัติและปฏิกิริยาของโมเลกุลที่มีคาร์บอนเป็นโครงสร้างพื้นฐาน การสังเคราะห์สารอินทรีย์ที่มีความจำเพาะและมีความซับซ้อน ต้องอาศัยการค้นคว้า เรียนรู้ และการทดลองในห้องปฏิบัติการเป็นจำนวนมาก ส่งผลให้ใช้เวลานานและสิ้นเปลืองทรัพยากร ปัญหาดังกล่าวสามารถแก้ไขได้โดยการนำ AI เข้ามาใช้ในการงานวิจัย รูปที่ 3 เป็นตัวอย่างการสังเคราะห์โมเลกุลเป้าหมายด้วย AI ที่มีขั้นตอน ดังนี้

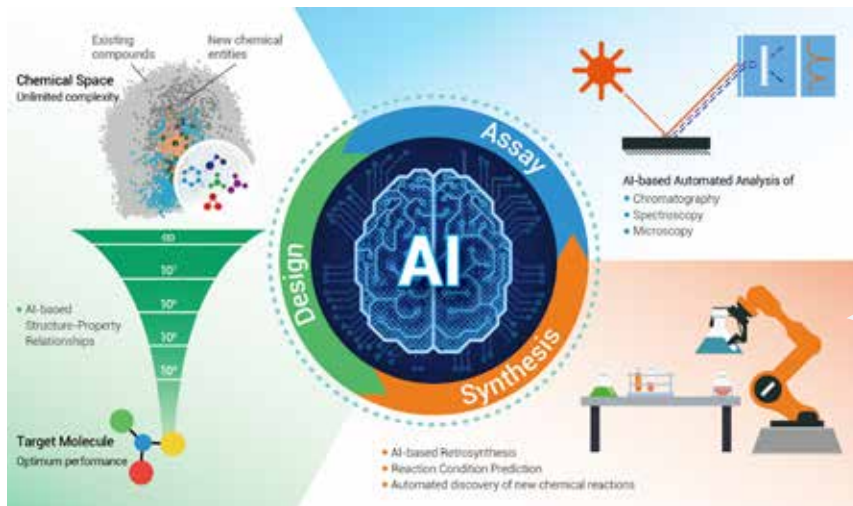
1. AI จะออกแบบ (design) วิธีการหรือกระบวนการในการผลิตโมเลกุลที่ต้องการหรือโมเลกุลเป้าหมายด้วยข้อมูลทางเคมีทั้งหมด (chemical space) โดยอาศัยความสัมพันธ์ทางโครงสร้างและคุณสมบัติที่กำหนดขึ้นโดยใช้การเรียนรู้แบบมีผู้สอน (Supervised Learning)

2. เมื่อพบวิธีการที่สามารถผลิตโมเลกุลเป้าหมายได้แล้ว AI จะสั่งการให้หุ่นยนต์ (robotics) ทำนายสมภาวะปฏิกิริยาที่เหมาะสมและผลิตโมเลกุลดังกล่าว ด้วยอัลกอริทึมทางเทคนิคของ ML ซึ่งต้องอาศัยข้อมูลมหาศาล (big data) ในการเรียนรู้ เมื่อได้ข้อมูลเหล่านั้น AI จะทำหน้าที่สังเคราะห์และวิเคราะห์ข้อมูล ประสิทธิภาพในการทำงานของ AI จะพัฒนาขึ้นเรื่อย ๆ เมื่อประสบการณ์การเรียนรู้เพิ่มมากขึ้น



รูปที่ 2 การประยุกต์ใช้ปัญญาประดิษฐ์ในงานวิจัยทางเคมี ที่มา: Neeru., R. Sharmab and R. Bhartia. Role of Artificial Intelligence in Chemistry. Materials Today: Proceeding. 2021; 48: 1527-1533





รูปที่ 3 การสังเคราะห์โมเลกุลเป้าหมายด้วย AI  
ที่มา: Xu, Y., et al. Artificial intelligence: A powerful paradigm for scientific research. The innovation. 2021; 2(4)

3. เมื่อ AI สามารถสังเคราะห์โมเลกุลที่ต้องการได้แล้ว AI จะทำการทดสอบ (assay) และวิเคราะห์คุณสมบัติของโมเลกุลอย่างอัตโนมัติโดยใช้เทคนิคต่าง ๆ เช่น โครมาโทกราฟี (Chromatography) สเปกโทรสโคปี (Spectroscopy) เป็นต้น

อย่างไรก็ดี การพัฒนาอย่างก้าวกระโดดของเทคโนโลยี AI ได้สร้างความกังวลใจแก่นักเคมีและนักวิทยาศาสตร์สาขาต่าง ๆ ในด้านที่อาจส่งผลกระทบต่อ การประกอบวิชาชีพ แต่หากพิจารณาอีกแง่มุมหนึ่ง AI ก็เป็นสิ่งที่ช่วยส่งเสริมให้นักเคมีหรือนักวิทยาศาสตร์พัฒนาทักษะเฉพาะด้านที่ AI ยังไม่สามารถดำเนินการด้วยตนเองได้ เทคโนโลยี AI จึงไม่ได้มีการพัฒนาขึ้นมาเพื่อทำงานแทนที่นักเคมี แต่ได้พัฒนาขึ้นมาเพื่อช่วยแบ่งเบาภาระลดระยะเวลาและความซับซ้อนในการทำงาน และยังช่วยลดปัญหาจากข้อจำกัดของนักวิจัย เช่น การทำงานต่อเนื่องเป็นระยะเวลานาน ความเบื่อหน่ายจากการทำงานซ้ำ ความผิดพลาดจากการทำงานซึ่งเกิดจากมนุษย์ (human error) เป็นต้น เมื่อผนวกความรู้ทักษะและประสบการณ์ของนักวิจัยกับความสามารถในการประมวลผลของ AI เข้าด้วยกันแล้ว จะช่วยให้ นักวิจัยสามารถสร้างสรรค์ผลงานวิจัยที่มีประสิทธิภาพและประสิทธิผลยิ่งขึ้น

ดังนั้น AI จึงมีบทบาทสำคัญและประโยชน์สำหรับงานวิจัยทางเคมีในด้านการสังเคราะห์โมเลกุลใหม่ที่มีคุณสมบัติและโครงสร้างตามที่ต้องการจากปฏิกิริยาเคมีที่ซับซ้อน โดย AI จะช่วยให้การออกแบบโมเลกุลใหม่เป็นเรื่องที่ง่ายขึ้น สะดวกขึ้น ประหยัดเวลาและทรัพยากรในการสังเคราะห์ รวมถึง AI ยังสามารถรวบรวมข้อมูลจากการทบทวนวรรณกรรมที่มีแหล่งข้อมูลจำนวนมากได้อย่างรวดเร็วด้วย

## เอกสารอ้างอิง

1. ปรีชาพล ชูศรี จีรณาน น้อยมณี เกษม พันธุ์สิน. เทคโนโลยีปัญญาประดิษฐ์สำหรับการบริหารงานและการบริการภาครัฐ. พิมพ์ครั้งที่ 1. บริษัท ส.พีจิตรการพิมพ์ จำกัด; 2562
2. ยุวเรศมศุทธิ์ สิทธิชาญบัญชา. ปัญญาประดิษฐ์ Artificial intelligence (AI) กับการใช้ประโยชน์ทางการแพทย์และเวชศาสตร์ฉุกเฉิน. วารสารการแพทย์ฉุกเฉินแห่งประเทศไทย. 2562; 1: 91-104
3. muhammadmjadbutt00. What Is Artificial Intelligence? [ออนไลน์]. 2022 [อ้างถึงวันที่ cited 13 กรกฎาคม 2566]. เข้าถึงจาก: [https://csaven.com/2022/08/12/what-is-artificial-intelligence/?fbclid=IwAR1b18\\_Bvickf1Mwm67-2zGIPMvj\\_LyX-l0tX1OWtnSGC72TTdoPCazQMEs](https://csaven.com/2022/08/12/what-is-artificial-intelligence/?fbclid=IwAR1b18_Bvickf1Mwm67-2zGIPMvj_LyX-l0tX1OWtnSGC72TTdoPCazQMEs)
4. Neeru., R. Sharmab and R. Bhartia. Role of Artificial Intelligence in Chemistry. Materials Today: Proceeding. 2021; 48: 1527-1533
5. Xu, Y., X. Liu, X. Cao, C. Huang, E. Liu, S. Qian, X. Liu, Y. Wu, F. Dong, C. Qiu, J. Qiu, K. Hua, W. Su, J. Wu, H. Xu, Y. Han, C. Fu, Z. Yin, M. Liu, R. Roepman, S. Dietmann, M. Virta, F. Kengara, Z. Zhang, L. Zhang, T. Zhao, J. Dai, J. Yang, L. Lan, M. Luo, Z. Liu, T. An, B. Zhang, X. He, S. Cong, X. Liu, W. Zang, J. Lewis, J. Tiedje, Q. Wang, Z. An, F. Wang, L. Zhang, T. Huang, C. Lu, Z. Cai, F. Wang and J. Zhang. Artificial intelligence: A powerful paradigm for scientific research. The innovation. 2021; 2:100179