

Интернет-журнал «Отходы и ресурсы» <https://resources.today>
Russian Journal of Resources, Conservation and Recycling

2025, Том 12, № 1 / 2025, Vol. 12, Iss. 1 <https://resources.today/issue-1-2025.html>

URL статьи: <https://resources.today/PDF/25ECOR125.pdf>

DOI: 10.15862/25ECOR125 (<https://doi.org/10.15862/25ECOR125>)

5.2.3. Региональная и отраслевая экономика (экономические науки)

Ссылка для цитирования этой статьи:

Богоносов, К. А. ИИ-системы поддержки принятия решений при выборе архитектуры физических экспериментов / К. А. Богоносов // Отходы и ресурсы. — 2025. — Т. 12. — № 1. — URL: <https://resources.today/PDF/25ECOR125.pdf>. DOI: 10.15862/25ECOR125.

For citation:

Bogonosov K.A. AI decision support systems for choosing the architecture of physical experiments. *Russian Journal of Resources, Conservation and Recycling*. 2025;12(1): 25ECOR125. Available at: <https://resources.today/PDF/25ECOR125.pdf>. DOI: 10.15862/25ECOR125. (In Russ., abstract in Eng.).

УДК 004.8

Богоносов Константин Александрович

ФГБОУ ВО «Московский государственный университет технологий и управления
имени К.Г. Разумовского (Первый казачий университет)», Москва, Россия

Доцент кафедры «Физика»

Кандидат технических наук, доцент

E-mail: k.bogonosov@mgut.ru

ИИ-системы поддержки принятия решений при выборе архитектуры физических экспериментов

Аннотация. Исследование посвящено комплексному анализу развития и применения систем искусственного интеллекта в области поддержки принятия решений при проектировании архитектуры физических экспериментов. В работе представлена систематизация современных подходов к интеграции методов машинного обучения, нейронных сетей и экспертных систем в процессы планирования и оптимизации экспериментальных исследований в различных областях физических наук. Проведенный анализ демонстрирует трансформацию традиционных экспериментальных парадигм под воздействием технологий искусственного интеллекта, что находит выражение в переходе от интуитивных методов планирования экспериментов к автономным интеллектуальным системам, способным самостоятельно определять оптимальные параметры исследований и адаптироваться к получаемым результатам в режиме реального времени. Особое внимание уделено анализу архитектурных решений современных ИИ-систем поддержки принятия решений, включающих интеграцию высокопроизводительных вычислительных платформ, робототехнических комплексов автоматизированного проведения экспериментов и алгоритмов активного обучения для оптимизации исследовательских процессов. В работе детально рассмотрены ключевые технологические компоненты таких систем: алгоритмы байесовской оптимизации для целенаправленного исследования пространства параметров, методы последовательного планирования экспериментов с учетом неопределенности, подходы к интеграции предметных знаний в модели машинного обучения и технологии автономного управления экспериментальным оборудованием. Исследование выявляет специфику различных типов физических экспериментов с точки зрения требований к архитектуре, поддерживающих ИИ-систем, включая материаловедческие исследования, оптимизацию энергетических систем, разработку новых соединений и характеризацию физико-химических свойств веществ.

Результаты анализа подчеркивают существенный потенциал ИИ-систем в ускорении научных открытий через автоматизацию рутинных процессов экспериментального планирования, повышение точности прогнозирования результатов и оптимизацию использования исследовательских ресурсов, при одновременном сохранении критической роли экспертного знания в постановке исследовательских задач и интерпретации полученных результатов.

Ключевые слова: искусственный интеллект; системы поддержки принятия решений; архитектура физических экспериментов; машинное обучение; байесовская оптимизация; автоматизированные лаборатории; экспериментальное планирование

Введение

Современная наука характеризуется возрастающей сложностью экспериментальных исследований, требующих обработки огромных массивов данных и оптимизации множественных параметров в условиях ограниченных ресурсов и времени. Традиционные подходы к планированию и проведению физических экспериментов, основанные на интуиции исследователей и методах проб и ошибок, зачастую оказываются неэффективными при работе с многомерными пространствами параметров, характерными для современных материаловедческих, химических и физических исследований.¹

Актуальность темы исследования обусловлена фундаментальными изменениями в научной методологии, связанными с интеграцией технологий искусственного интеллекта в экспериментальную практику. Согласно данным аналитических исследований, традиционные исследовательские парадигмы могут быть категоризированы как эмпирическая индукция, теоретическое моделирование, вычислительное моделирование и наукоемкие исследования, основанные на анализе данных. Развитие ИИ-технологий формирует новую парадигму, интегрирующую модельно-ориентированные подходы с автоматизацией генерации и валидации гипотез, обеспечивая автономное и интеллектуальное проведение экспериментов.²

Описание научной проблемы заключается в отсутствии комплексного понимания принципов проектирования и функционирования ИИ-систем поддержки принятия решений для физических экспериментов, что препятствует эффективному внедрению данных технологий в исследовательскую практику. Существующие работы в области применения машинного обучения для научных исследований зачастую фокусируются на отдельных аспектах проблемы, не предоставляя целостного представления об архитектурных принципах построения интеллектуальных экспериментальных систем [1].

Объектом исследования выступают ИИ-системы поддержки принятия решений, применяемые в процессах планирования, проведения и анализа результатов физических экспериментов в различных областях естественных наук.

Предметом исследования являются архитектурные принципы, методологические подходы и технологические решения, лежащие в основе проектирования и функционирования интеллектуальных систем поддержки экспериментальных исследований.

Цель исследования состоит в систематизации и анализе современных подходов к построению ИИ-систем поддержки принятия решений при выборе архитектуры физических экспериментов для выявления ключевых принципов и направлений развития данной области.

¹ AI for Science 2025. [Электронный ресурс]. — URL: <https://www.nature.com/articles/d42473-025-00161-3> (дата обращения 02.06.2025).

² AI-Guided Experiments Speed Scientific Discovery. [Электронный ресурс]. — URL: <https://www.pnnl.gov/news-media/ai-guided-experiments-speed-scientific-discovery> (дата обращения 02.06.2025).

Задачи исследования:

- Проанализировать эволюцию и современное состояние ИИ-технологий в области экспериментального планирования и определить основные архитектурные принципы построения интеллектуальных систем поддержки принятия решений.
- Исследовать ключевые технологические компоненты и методологические подходы, применяемые в современных ИИ-системах для оптимизации физических экспериментов.
- Выявить специфику применения ИИ-систем поддержки принятия решений в различных областях физических исследований и обосновать перспективы развития данного направления.

Научная новизна исследования заключается в комплексном анализе архитектурных решений ИИ-систем поддержки принятия решений применительно к физическим экспериментам и систематизации методологических подходов к интеграции машинного обучения в экспериментальную практику.

Практическая значимость работы определяется возможностью использования полученных результатов при проектировании и внедрении интеллектуальных систем автоматизации научных исследований, а также формировании стратегий цифровой трансформации исследовательских организаций.

Методы и материалы

Теоретико-методологическую базу исследования составили научные труды в области искусственного интеллекта, систем поддержки принятия решений, экспериментального планирования и автоматизации научных исследований. Особое внимание уделено работам, посвященным применению методов машинного обучения в физических науках, включая исследования в области байесовской оптимизации, активного обучения и автономных экспериментальных систем.³

При написании исследования применялись методы систематического анализа научной литературы, сравнительного анализа технологических решений, синтеза и обобщения теоретических подходов, а также методы визуализации и структурирования информации. Методы сбора информации включали анализ актуальных публикаций в ведущих научных журналах, материалов специализированных конференций и семинаров, технических отчетов исследовательских организаций и документации разработчиков программного обеспечения.

Обработка и интерпретация данных осуществлялись посредством контент-анализа научных публикаций, систематизации технологических подходов по категориям применения и выявления тенденций развития ИИ-технологий в экспериментальной науке. Особое внимание уделялось анализу успешных кейсов внедрения ИИ-систем в различных областях физических исследований и выявлению факторов, определяющих эффективность таких систем.

Особое внимание уделено работам отечественных и зарубежных авторов по проблеме использования ИИ и машинного обучения в научных исследованиях, в том числе: В.И. Евсеев [2], И.В. Понкин [3], В.А. Шананин, В.М. Чаругин, Е.М. Архипова, А.И. Андрианова [4], А.Д. Столяров, А.В. Абрамов, В.И. Абрамов [5], Д.А. Храмов [6], Ю.Д. Патаракин [7].

³ Machine Learning and the Physical Sciences, NeurIPS 2023. [Электронный ресурс]. — URL: <https://ml4physicalsciences.github.io/2023/> (дата обращения 02.06.2025).

Результаты и обсуждения

Современные ИИ-системы поддержки принятия решений в физических экспериментах представляют собой сложные многокомпонентные архитектуры, интегрирующие достижения машинного обучения, робототехники и высокопроизводительных вычислений. Фундаментальной основой таких систем выступают алгоритмы активного обучения, позволяющие автоматически выбирать наиболее информативные экспериментальные точки для исследования.⁴ Данный подход кардинально отличается от традиционного планирования экспериментов, где исследователи заранее определяют полную матрицу экспериментальных условий.

Архитектурные принципы современных ИИ-систем базируются на концепции замкнутого цикла обучения, включающего четыре основных компонента: модуль планирования экспериментов на основе машинного обучения, автоматизированную экспериментальную установку, систему сбора и анализа данных в реальном времени, и механизм обновления моделей на основе полученных результатов.⁵ Исследователи Массачусетского технологического института разработали систему CRES (Copilot for Real-World Experimental Scientist), демонстрирующую возможности голосового управления роботизированными манипуляторами для подготовки материалов и проведения экспериментов.

Байесовская оптимизация выступает ключевой технологией для эффективного исследования многомерных пространств параметров в физических экспериментах. Преимущество данного подхода заключается в способности балансировать исследование неизученных областей параметрического пространства с эксплуатацией уже известных перспективных направлений.⁶ Команда исследователей Стэнфордского университета и Национальной ускорительной лаборатории SLAC продемонстрировала применение концепции байесовского алгоритмического исполнения (BAX) для автоматического преобразования сложных исследовательских целей в интеллектуальные стратегии сбора данных.

Интеграция предметных знаний в модели машинного обучения представляет критически важный аспект построения эффективных ИИ-систем для физических экспериментов. Подходы, основанные на физически-информированных нейронных сетях (Physics-Informed Neural Networks, PINN), позволяют встраивать фундаментальные физические принципы непосредственно в архитектуру нейронных сетей, существенно повышая точность предсказаний и обобщающую способность моделей.¹ Данный подход особенно эффективен в условиях ограниченности экспериментальных данных, характерной для исследований новых материалов и физических явлений.

Автономные экспериментальные платформы представляют следующий уровень развития ИИ-систем поддержки принятия решений. Исследователи Окриджской национальной лаборатории разработали автономную систему синтеза материалов, использующую импульсное лазерное осаждение в сочетании с методами машинного обучения для анализа качества создаваемых материалов в зависимости от условий синтеза.⁷

⁴ How does Design of Experiments work with AI? [Электронный ресурс]. — URL: <https://lamarr-institute.org/blog/design-of-experiments/> (дата обращения 02.06.2025).

⁵ Accelerating research with AI-assisted experiments. [Электронный ресурс]. — URL: <https://dmse.mit.edu/news/accelerating-research-with-ai-assisted-experiments/> (дата обращения 02.06.2025).

⁶ New AI approach accelerates targeted materials discovery and sets the stage for self-driving experiments. [Электронный ресурс]. — URL: <https://www6.slac.stanford.edu/news/2024-07-18-new-ai-approach-accelerates-targeted-materials-discovery-and-sets-stage-self> (дата обращения 02.06.2025).

⁷ Researchers harness AI for autonomous discovery and optimization of materials. [Электронный ресурс]. — URL: <https://www.sciencedaily.com/releases/2024/06/240611130443.htm> (дата обращения 02.06.2025).

Автоматизация позволила увеличить скорость исследований в десять раз, при одновременном существенном сокращении количества образцов, необходимых для понимания обширных параметрических пространств.

Высокопроизводительное экспериментирование в сочетании с ИИ-технологиями демонстрирует особую эффективность в материаловедческих исследованиях. Команда Тихоокеанской северо-западной национальной лаборатории и Аргоннской национальной лаборатории применила данный подход для оптимизации электролитных смесей для проточных батарей. Из 2000 возможных комбинаций растворителей команда сократила область поиска до менее чем 10 процентов, идентифицировав комбинации, способные растворить в три раза больше активного соединения.

Особенности применения ИИ-систем в различных областях физических исследований определяются спецификой экспериментальных задач и требованиями к точности результатов. В области разработки лекарственных препаратов и молекулярного дизайна ИИ-системы интегрируют генеративные модели для создания новых молекулярных структур с алгоритмами предсказания их свойств [8]. Платформа Chemistry42 компании Insilico Medicine демонстрирует эффективность интеграции методов искусственного интеллекта с вычислительной и медицинской химией для создания новых молекулярных структур с оптимизированными свойствами.

Робототехнические платформы автоматизированного синтеза становятся неотъемлемой частью современных ИИ-систем экспериментального планирования. Система RoboRXN представляет интеграцию облачных технологий, искусственного интеллекта и коммерческого автоматизированного оборудования для выполнения полного цикла от выбора синтетических маршрутов до практического синтеза молекул [9]. Автоматизированные биологические эксперименты реализуются через шесть полностью автоматизированных модулей, включающих управление образцами, контроль качества, автоматизированное культивирование клеток и высокопроизводительный скрининг.

Системы поддержки принятия решений для физических экспериментов все чаще интегрируют большие языковые модели для интерпретации естественных языковых запросов исследователей. Проект Coscientist, разработанный в Университете Карнеги-Меллон, демонстрирует способность ИИ-систем планировать химический синтез известных лекарственных препаратов, навигировать по технической документации оборудования и выполнять высокоуровневые команды в автоматизированных лабораториях.⁸ Система способна решать оптимизационные задачи посредством анализа существующих данных и демонстрирует развитые возможности рассуждения и экспериментального планирования.

Объяснимость решений ИИ-систем представляет критически важный аспект их применения в научных исследованиях. Традиционные методы машинного обучения зачастую функционируют как «черные ящики», что затрудняет понимание логики принимаемых решений исследователями [1]. Современные подходы к объяснимому искусственному интеллекту включают методы визуализации важности признаков, генерацию текстовых объяснений и создание упрощенных интерпретируемых моделей-заместителей.

Интеграция человеко-машинного взаимодействия в ИИ-системах экспериментального планирования требует тщательного баланса между автономностью системы и сохранением контроля со стороны исследователей. Анализ паттернов взаимодействия показывает, что большинство современных систем реализуют ограниченные формы коллаборации, часто

⁸ Artificial Intelligence-Based Lab Partner Designs, Runs Experiments in the Lab. [Электронный ресурс]. — URL: <https://www.genengnews.com/topics/artificial-intelligence/artificial-intelligence-based-lab-partner-designs-runs-experiments-in-the-lab/> (дата обращения 02.06.2025).

сводящиеся к предоставлению рекомендаций без истинного партнерства между человеком и ИИ [10]. Большинство исследований сосредотачивается на технологических достижениях, зачастую игнорируя вопросы согласования алгоритмических выводов с ожиданиями пользователей.

Валидация и верификация ИИ-систем поддержки принятия решений в физических экспериментах представляет многоаспектную проблему, включающую оценку точности предсказаний, воспроизводимости результатов и соответствия научным стандартам. Системы должны демонстрировать не только техническую корректность, но и способность генерировать научно значимые открытия [11]. Разработка стандартов безопасности и мониторинга для ИИ-систем в научных исследованиях становится приоритетной задачей научного сообщества.

Перспективы развития ИИ-систем поддержки принятия решений связаны с созданием универсальных фундаментальных моделей для материаловедения, способных работать с разнообразными типами данных и решать широкий спектр задач.⁹ Растущий интерес к фундаментальным моделям материалов отражает стремление научного сообщества к созданию универсальных инструментов, способных решать широкий круг материаловедческих задач. Компания Microsoft Research представила инструменты MatterGen и MatterSim, демонстрирующие возможности генерации новых материальных структур и их валидации [12].

Экономические аспекты внедрения ИИ-систем в экспериментальную практику включают существенное сокращение времени исследований, снижение потребления материальных ресурсов и повышение вероятности успешных открытий. Согласно оценкам экспертов, применение ИИ-технологий может сократить время разработки новых материалов с десятилетий до нескольких лет [13]. Всемирный экономический форум включил ИИ для научных открытий в список десяти ключевых возникающих технологий 2024 года, подчеркивая стратегическую важность данного направления.

Этические и социальные аспекты применения ИИ-систем в научных исследованиях включают вопросы авторства открытий, распределения интеллектуальной собственности и потенциального замещения человеческого труда автоматизированными системами. Научное сообщество активно обсуждает необходимость разработки этических рамок для ответственного применения ИИ в науке, обеспечивающих прозрачность процессов принятия решений и сохранение человеческого контроля над критически важными аспектами исследований [14].

Выводы

Анализ эволюции и современного состояния ИИ-технологий в области экспериментального планирования выявил формирование новой научной парадигмы, характеризующейся переходом от традиционных методов планирования экспериментов к автономным интеллектуальным системам.

Основными архитектурными принципами построения современных ИИ-систем поддержки принятия решений выступают концепция замкнутого цикла обучения, интеграция алгоритмов активного обучения и байесовской оптимизации, а также встраивание предметных знаний в модели машинного обучения. Системы демонстрируют способность сокращать время исследований в десять раз при одновременном существенном уменьшении количества необходимых экспериментов.

⁹ AI4Mat-ICLR 2025. [Электронный ресурс]. — URL: <https://sites.google.com/view/ai4mat/home> (дата обращения 02.06.2025).

Исследование ключевых технологических компонентов современных ИИ-систем показало критическую важность интеграции высокопроизводительных вычислительных платформ, робототехнических комплексов автоматизированного проведения экспериментов и алгоритмов машинного обучения для создания эффективных решений. Байесовская оптимизация и методы последовательного планирования экспериментов с учетом неопределенности позволяют автоматически выбирать наиболее информативные экспериментальные точки, существенно повышая эффективность исследовательского процесса. Физически-информированные нейронные сети обеспечивают встраивание фундаментальных принципов в архитектуру моделей, повышая точность предсказаний в условиях ограниченности данных.

Выявление специфики применения ИИ-систем поддержки принятия решений в различных областях физических исследований продемонстрировало успешную адаптацию технологий к требованиям конкретных научных дисциплин. В материаловедении системы эффективно сокращают пространство поиска новых материалов с тысяч до сотен вариантов, в молекулярном дизайне обеспечивают создание структур с заданными свойствами, а в автоматизированном синтезе реализуют полный цикл от планирования до практического получения соединений. Перспективы развития связаны с созданием универсальных фундаментальных моделей, способных работать с разнообразными типами данных и решать широкий спектр задач материаловедения и химии.

Результаты исследования подтверждают трансформационный потенциал ИИ-систем поддержки принятия решений в области физических экспериментов, при сохранении критической роли экспертного знания в постановке исследовательских задач и интерпретации результатов. Дальнейшее развитие данного направления требует решения вопросов объяснимости алгоритмических решений, стандартизации процедур валидации и разработки этических рамок ответственного применения ИИ в научных исследованиях.

ЛИТЕРАТУРА

1. Kostopoulos G., Davrazos G., Kotsiantis S. Explainable Artificial Intelligence-Based Decision Support Systems: A Recent Review // *Electronics*. — 2024. — Т. 13. — № 14. — 2842 с.
2. Евсеев, В.И. Искусственный интеллект в современном мире: надежды и опасности создания и использования / В.И. Евсеев // *Аэрокосмическая техника и технологии*. — 2023. — Т. 1, № 1. — С. 16–34. — EDN BFCYAZ.
3. Понкин И.В. Применение генеративного искусственного интеллекта в научных исследованиях и в прикладной аналитике в обеспечение государственного управления: позитивные возможности и «подводные камни» // *International Journal of Open Information Technologies*. — 2025. — Т. 13. — № 1. — С. 100–113.
4. Применение искусственного интеллекта в физическом эксперименте / В.А. Шананин, В.М. Чаругин, Е.М. Архипова, А.И. Андрианова // *Инновации и инвестиции*. — 2022. — № 4. — С. 117–119. — EDN QZJSKF.
5. Столяров, А.Д. Генеративный искусственный интеллект для инноваций бизнес-моделей: возможности и ограничения / А.Д. Столяров, А.В. Абрамов, В.И. Абрамов — DOI 10.34680/BENEFICIUM.2024.3(52).43-51. // *Beneficium*. — 2024. — № 3(52). — С. 43–51. — EDN ZUMXEJ.

6. Храмов, Д.А. Анализ способов совместного использования методов машинного обучения и дифференциальных уравнений в задачах динамики / Д.А. Храмов — DOI 10.24412/3162-2364-2021-83-1-41-47. // Sciences of Europe. — 2021. — № 83-1(83). — С. 41–47 — EDN NQOBRC.
7. Patarakin Y.D. et al. Experimental use of educational materials developed using artificial intelligence in natural science education // Вестник Московского городского педагогического университета. Серия: Педагогика и психология. — 2024. — Т. 18. — № 1-1. — С. 78–90.
8. Ivanenkov Y.A. et al. Chemistry42: an AI-driven platform for molecular design and optimization // Journal of chemical information and modeling. — 2023. — Т. 63. — № 3. — С. 695–701.
9. Pyzer-Knapp E.O. et al. Accelerating materials discovery using artificial intelligence, high performance computing and robotics // Computational Materials. — 2022. — Т. 8. — № 1. — С. 84.
10. Gomez C. et al. Human-AI collaboration is not very collaborative yet: A taxonomy of interaction patterns in AI-assisted decision making from a systematic review // Frontiers in Computer Science. — 2025. — Т. 6. — С. 1521066.
11. Labkoff S. et al. Toward a responsible future: recommendations for AI-enabled clinical decision support // Journal of the American Medical Informatics Association. — 2024. — Т. 31. — № 11. — С. 2730–2739.
12. Gomes C.P., Selman B., Gregoire J.M. Artificial intelligence for materials discovery // MRS Bulletin. — 2019. — Т. 44. — № 7. — С. 538–544.
13. Hastings J. AI for scientific discovery. — CRC Press, 2023 — 134 с.
14. Steyvers M., Kumar A. Three challenges for AI-assisted decision-making // Perspectives on Psychological Science. — 2024. — Т. 19. — № 5. — С. 722–734.

Bogonosov Konstantin Alexandrovich

Moscow State University of Technology and Management
named after K.G. Razumovsky (First Cossack University), Moscow, Russia
E-mail: k.bogonosov@mgut.ru

AI decision support systems for choosing the architecture of physical experiments

Abstract. The study is devoted to a comprehensive analysis of the development and application of artificial intelligence systems in the field of decision support in the design of the architecture of physical experiments. The paper presents a systematization of modern approaches to the integration of machine learning methods, neural networks and expert systems into the planning and optimization of experimental research in various fields of physical sciences. The analysis demonstrates the transformation of traditional experimental paradigms under the influence of artificial intelligence technologies, which is reflected in the transition from intuitive methods of planning experiments to autonomous intelligent systems capable of independently determining optimal research parameters and adapting to the results in real time. Special attention is paid to the analysis of architectural solutions of modern AI decision support systems, including the integration of high-performance computing platforms, robotic complexes for automated experiments and active learning algorithms to optimize research processes. The paper considers in detail the key technological components of such systems: Bayesian optimization algorithms for targeted exploration of the parameter space, methods for sequential planning experiments taking into account uncertainty, approaches to integrating subject knowledge into machine learning models and technologies for autonomous control of experimental equipment. The study reveals the specifics of various types of physical experiments in terms of architecture requirements for supporting AI systems, including materials science research, optimization of energy systems, development of new compounds, and characterization of physico-chemical properties of substances. The results of the analysis highlight the significant potential of AI systems in accelerating scientific discoveries by automating routine experimental planning processes, improving the accuracy of predicting results and optimizing the use of research resources, while maintaining the critical role of expert knowledge in setting research objectives and interpreting the results.

Keywords: artificial intelligence; decision support systems; architecture of physical experiments; machine learning; Bayesian optimization; automated laboratories; experimental planning