

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ДЕРЖАВНИЙ ВИЩИЙ НАВЧАЛЬНИЙ ЗАКЛАД
"УЖГОРОДСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ"
НАВЧАЛЬНО-НАУКОВИЙ ІНСТИТУТ ХІМІЇ ТА ЕКОЛОГІЇ
КАФЕДРА АНАЛІТИЧНОЇ ХІМІЇ**

Дипломна робота магістра

ЗАСТОСУВАННЯ ШТУЧНОГО ІНТЕЛЕКТУ В АНАЛІТИЧНІЙ ХІМІЇ

Виконав:
студент II курсу ОС «Магістр»
спеціальності 102 Хімія
Капшин Сергій Олександрович

Керівник:
д.х.н., доцент Русин В.М.

Рецензент:
к.х.н., доцент Кохан О.П.

Ужгород – 2025

ЗМІСТ

Перелік умовних позначень	4
Вступ	5
Розділ 1. Загальні відомості та характеристика штучного інтелекту	7
1.1. Історія створення штучного інтелекту	7
1.1.1. Визначення та передумови виникнення штучного інтелекту	7
1.1.2. Перші спроби створення штучного інтелекту	9
1.1.3. Принцип роботи штучного інтелекту	11
1.1.4. Недоліки використання штучного інтелекту у науці	12
1.2. Революційні розробки на основі машинного навчання	14
1.2.1. Розвиток асистентів та чат-ботів в останні роки	14
1.2.2. Програми на основі штучного інтелекту в науці	17
1.2.3. Моделювання структури білків	19
1.2.4. Штучний інтелект у прискоренні створення нових ліків	21
1.2.5. Застосування алгоритмів штучного інтелекту у нейробіології	22
Розділ 2. Штучний інтелект у аналітичній хімії	25
2.1. Загальні напрямки та тенденції використання штучного інтелекту в хімії	25
2.1.1. Штучний інтелект в спектроскопічних методах	25
2.1.2. Застосування машинного навчання в хроматографії	26
2.1.3. Штучний інтелект у високопродуктивному аналізі даних	29
2.2. Конкретні приклади застосування штучного інтелекту в хімічному аналізі	32
2.2.1. Прогноз критичної концентрації міцел іонних поверхнево-активних речовин за допомогою штучної нейронної мережі	33
2.2.2. Застосування штучного інтелекту при розробці сенсорів хімічних газів	35
2.2.3. Виявлення забруднення харчових продуктів мікотоксинами за допомогою штучного інтелекту	37

2.2.4. Біосенсори на основі алгоритмів штучного інтелекту для виявлення патогенних бактерій харчового походження	41
Висновки	44
Summary	45
Список використаних джерел	46

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ

ШІ, AI – штучний інтелект, artificial intelligence

ГН – глибоке навчання

МН – машинне навчання

NLP – обробка природної мови

CASP – критична оцінка прогнозування структури білка

SpectraML – спектроскопічне машинне навчання

ККМ – критична концентрація міцелоутворення

GA – генетичні алгоритми

ES – стратегія еволюції

CMA-ES – стратегія адаптації-еволюції коваріаційної матриці

NIRS – ближньої інфрачервоної спектроскопії

QSRR – кількісне співвідношення утримання структури

РКТ – рентгенівської комп'ютерної томографії

МОВ – машини опорних векторів

ШНМ – штучні нейронні мережі

ГЗНМ – глибокі згорткові нейронні мережі

ВСТУП

Актуальність роботи. Використання штучного інтелекту (ШІ) в аналітичній хімії пов'язана з інтенсивним розвитком сучасних технологій, які трансформують наукові дослідження та промислові процеси. Штучний інтелект, зокрема машинне навчання та глибокі нейронні мережі, відкриває нові можливості для аналізу складних хімічних даних, автоматизації рутинних операцій і прискорення наукових відкриттів. Перспективи напрямку пов'язані з інтеграцією ШІ із квантовими обчисленнями, розвитком автономних лабораторій із штучним інтелектом та використанням генеративних моделей для дизайну молекул. Таким чином, дослідження у цій галузі має не лише теоретичну цінність, але й великий практичний потенціал для хімії, медицини, матеріалознавства та інших дисциплін.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Дослідження проводилось у відповідності з науково-дослідною тематикою кафедри аналітичної хімії ДВНЗ «Ужгородський національний університет».

Мета та завдання досліджень. Описати та зрозуміти можливості, переваги, недоліки та ефективність використання штучного інтелекту в хімічному аналізі.

Завдання:

1. Розглянути загальний розвиток та передумови використання штучного інтелекту.
2. Описати використання ШІ в різних сферах науки, а також визначити основні недоліки.
3. Оцінити ефективність використання штучного інтелекту та алгоритмів машинного навчання при кількісному аналізі речовин.
4. Узагальнити та проаналізувати всю використану інформацію, та описати перспективи подальшого використання штучного інтелекту в аналітичній хімії.

Об'єкт дослідження: можливості використання штучного інтелекту в аналітичній хімії.

Предмет дослідження: роль штучного інтелекту у хімічному аналізі речовин.

Методи дослідження: пошук, аналіз та критичний огляд літератури.

Наукова новизна отриманих результатів. Проведено аналіз та вивчення останніх актуальних наукових досягнень, що до використання штучного інтелекту в аналітичній хімії. На основі цих знань, можливе подальше вивчення та розвиток цього напрямку у використанні аналізу в різних сферах.

Особистий внесок здобувача. Аналіз літературних даних та їх систематизація, виконані безпосередньо автором. Постановка мети та завдань дослідження, а також аналіз отриманих результатів та їх обговорення проведено спільно з науковим керівником, к.х.н., доц. Русин В.М.

Апробація результатів дослідження. Основні положення та інформація роботи доповідалась на науковій студентській конференції ДВНЗ «Ужгородський національний університет», секція «Хімічних наук та екології» (22 травня 2025р.), а також на IV Міжнародній науковій конференції «Теоретичні та експериментальні аспекти сучасної хімії та матеріалів ТАСХ-2025» (20 травня 2025р.).

Структура та обсяг роботи. Дипломна робота складається із вступу, 2 розділів, висновку, списку цитованої літератури, що нараховує 50 найменувань, та містить 1 таблицю. Загальний обсяг дипломної роботи складає 50 сторінок машинописного тексту.

РОЗДІЛ 1. ЗАГАЛЬНІ ВІДОМОСТІ ТА ХАРАКТЕРИСТИКА ШТУЧНОГО ІНТЕЛЕКТУ

1.1. Історія створення штучного інтелекту

1.1.1. Визначення та передумови виникнення штучного інтелекту

При спробі впровадити штучний інтелект (ШІ) в суспільство, науку, та інші сфери життя людей, потрібно зрозуміти, що це таке, розуміти його принцип роботи і історичний розвиток, а саме чому він був створений.

Визначити ШІ, або як його ще називають «artificial intelligence» (AI) непросто, по суті, загальноприйнятого визначення поняття немає [1]. У найширшому розумінні ШІ прирівнюється до алгоритмів. Однак, алгоритми виникли ще до штучного інтелекту та широко використовувалися за межами цієї галузі. Найпростіше пояснення, що таке ШІ – це імітація комп'ютерами інтелекту, притаманного людям [2], але якщо дотримуватись цієї логіки, багато програм створених в комп'ютері є доволі простими за принципом, а тому це не є справжнім штучним інтелектом. Загальне визначення ШІ полягає в тому, що це технологія, яка дозволяє машинам імітувати різноманітні складні людські навички. Однак, це повністю не розкриває поняття та визначення штучного інтелекту. Фактично, це не більше, ніж передача терміну «штучний інтелект» різними словами. Поки ці «складні людські навички» не визначені, залишається незрозумілим, що саме являє собою ШІ. Те саме стосується визначення ШІ як виконання комп'ютерами складних завдань у складних середовищах.

Інші визначення йдуть далі в поясненні цих навичок і завдань. Наприклад, комп'ютерний науковець Нільс Джон Нільссон описує технологію, яка «функціонує належним чином і з передбаченням у своєму середовищі» [3]. Ширше визначення було висунуто групою експертів високого рівня зі штучного інтелекту Європейської комісії: «Системи, які демонструють розумну поведінку,

аналізуючи своє оточення та вживаючи дій — з деяким ступенем автономності — для досягнення конкретних цілей» [4].

Не дивно, що ШІ так важко чітко описати. Зрештою, це імітація або симуляція чогось, що ми ще не повністю розуміємо самі: людського інтелекту. Це вже давно є предметом досліджень психологів, біхевіористів і неврологів, серед інших. Ми багато знаємо про інтелект і людський мозок, але ці знання далеко не повні, і немає єдиної думки щодо того, чим саме є людський інтелект. Поки цього не станеться, неможливо точно сказати, як цей інтелект можна імітувати штучно. Наприклад, комп'ютер на основі початкових ШІ, створений Ван ден Геріком для гри в шахи ще в 1997 році без проблемно виграв гройсмейстера Гаррі Гаспарова. Вчений захистив дисертацію про комп'ютерні шахи та штучний інтелект, а ЗМІ писали, що це «останній бій мозку», адже шахи вважалися вершиною людського інтелекту. Після цього всі стверджували, що штучний інтелект замінить людей у всіх сферах діяльності, які вважаємо легші за гру в шахи, але цього не сталося і не дарма. Шахи довгий час вважалися надзвичайно розвиненою грою. Однак багаторічні дослідження показали, що щось таке, на перший погляд, просте, як розпізнавання kota на фотографії – чого штучний інтелект навчився робити лише останніми роками – набагато складніше. Це явище стало відомим як парадокс Моравека: певні речі, які є дуже складними для людей, як-от шахи чи розширене обчислення, досить легкі для комп'ютерів [5].

Це відображає повторювану закономірність в історії штучного інтелекту: уявлення людей про те, що є складною формою людського інтелекту, еволюціонувало разом із зростанням навичок наших комп'ютерів. Те, що раніше вважалося прекрасним прикладом штучного інтелекту, згодом деградує до простих розрахунків, які більше не заслуговують на назву ШІ. У цьому контексті також стверджується, що використання терміну «інтелект» є оманливим, оскільки воно неправильно передбачає, що машини можуть робити те саме, що й люди.

Нарешті, ШІ також часто ототожнюють з новітніми технологіями. Як ми з'ясуємо пізніше, за останні роки штучний інтелект набув величезних обертів.

Одним із головних чинників цього став прогрес у певній галузі, «машинне навчання» (МН), де інновація призвела до того, що зараз називається «глибоким навчанням» (ГН). Саме ця технологія лежить в основі останніх віх, таких як комп'ютери, здатні розпізнавати обличчя та грати в ігри. На відміну від більш традиційних підходів, за яких комп'ютерні системи застосовують фіксовані правила, алгоритми МН і ГН можуть розпізнавати шаблони в даних. Ми також говоримо тут про «алгоритми самонавчання». Багато людей, які сьогодні говорять про ШІ, насправді мають на увазі ці алгоритми, і часто саме ГН. Зосередження уваги на цій технології є важливим, оскільки тут особливо актуальні кілька нагальних питань, що стосуються штучного інтелекту (наприклад, проблеми пояснюваності).

Той факт, що поняттю «штучний інтелект» важко дати визначення, пов'язаний з еволюцією цього напрямку. Тепер ми ближче розглянемо, як відбувалася ця еволюція. Короткий історичний огляд доречний не лише як основа для розуміння штучного інтелекту, він також є основою до наступного розділу, у якому ми бачимо, коли штучний інтелект досяг переломного моменту.

1.1.2. Перші спроби створення ШІ

Іноді, можна доволі точно датувати роки створення певних дисциплін та розробок, і штучний інтелект є однією з таких. Незважаючи, на доволі довгу історію технології, виникнення думок та ідеї на рахунок цього, все це можна розділити на два етапи, а саме долабораторний і лабораторний. Перший включав в себе такі етапи:

1. Етап міфів, або ж фантазії на рахунок ШІ, прикладом таких думок можуть бути греки, та їх славнозвісний Талоса – робот, створений великим винахідником Дедалом для захисту острова Крит. Щодня Талос оббігав острів і кидав каміння у будь-які кораблі, які наближалися. Це явно міф про механічного суперсолдата,

вже тоді були певні фантазії про створенні людьми машини, які виконували людські задачі.

2. Етап розмірковувань, який ще був проголошений «механізацією світу»[6] передбачено в роботах таких мислителів, як Галілео Галілей, Ісаак Ньютон і Рене Декарт. Їхній механічний світогляд супроводжувався конструюванням різноманітних нових машин. Штучний інтелект все ще був далеко за межами можливого, але нові пристрої справді призвели до спекуляцій щодо його створення – спекуляцій, які мали вже не міфічний, а механічний характер.

3. Теоретичний етап – з другої половини дев'ятнадцятого століття і до двадцятого століття ідея штучного інтелекту як «мислячих комп'ютерів» стала менш фантастичною та увійшла в сферу серйозного теоретичного розгляду. Цей розвиток відбувався паралельно з теоретизацією та створенням перших комп'ютерів. Прикладами цього етапу може слугувати такі відкриття та розробки, як секретна система шифрування Німеччини «Енігма», а також «Колоссос», «Тест Тьюрінга» Алана Тьюрінга, розрізнення між «істинним» і «хибним» у логіці тепер було пов'язане з «увімкненим» або «вимкненим» станом нейронів і комп'ютерними значеннями «0 і 1» у машинах Тьюрінга [7]. Джон фон Нейман продовжив розробку базової концепції комп'ютера з такими компонентами, як центральний процесор, пам'ять і пристрої введення-виведення [8]. Іншим важливим засновником теорії ШІ був Норберт Вінер. Він ввів термін «кібернетика» в 1948 році, щоб описати «вивчення контролю та комунікації у тварин і машин» [9].

Не менш важливим, а мабуть основним етапом став, так званий лабораторний етап, який починається від 1956 року – літній проект, який повністю змінив світ, організували Джон Маккарті та Марвін Мінські [10]. Вони вважали, що дослідження має продовжуватися на основі припущення, що кожен аспект навчання або будь-яка інша особливість інтелекту в принципі може бути настільки точно описана, що машина зможе це симулювати. Саме Маккарті ввів термін «штучний інтелект» у 1956 році. Мінський був провідною фігурою в

історії штучного інтелекту і протягом багатьох років брав участь у багатьох видатних високотехнологічних проєктах по всьому світу. Ця визначна подія стала ознаменуванням періоду великого оптимізму та широкого інтересу до сфери штучного інтелекту, який став відомий як перша «весна штучного інтелекту». Захоплюючі прориви відбулися, коли системи ШІ почали зосереджуватися на іншій категорії викликів: логічних і концептуальних проблемах. Наприклад, для доведення логічних теорем Бертрана Рассела було створено «Машину теорії логіки». Йому вдалося не тільки довести вісімнадцять теорій, але й розробити більш конкретний доказ однієї з них. Це було важливо, оскільки в той час як Семюель був посереднім гравцем у шашки, Бертран Рассел був провідним логіком.

Наступною віхою став «Загальний розв'язник проблем». Це була програма, яку, в принципі, можна було застосувати для вирішення будь-якої проблеми – звідси й назва. Переводячи проблеми в цілі, підцілі, дії та оператори, програмне забезпечення могло потім обґрунтувати правильну відповідь.

Це вважалось першою офіційною успішною спробою по створенню штучного інтелекту, можливо, вона була недосконалою і не сама надійною, однак, саме це дослідження дозволило в подальшому розвивати цей напрям, який привів до другої і до третьої хвилі розвитку ШІ, створенню ПК, різних застосунків та програм.

1.1.3. Принцип роботи штучного інтелекту

Немає єдиної відповіді на питання, чим опікується штучний інтелект. Кожен автор, який пише про ШІ, відштовхується від певного визначення та розглядає досягнення цієї науки через його призму. Зазвичай ці визначення зводяться до наступного:

1. Штучний інтелект досліджує методи вирішення завдань, які вимагають людського розуміння. Тобто йдеться про навчання ШІ проходити тести на

інтелект. Це включає розвиток способів вирішення задач за аналогією, використання дедукції та індукції, накопичення знань і вміння їх застосовувати.

2. Штучний інтелект вивчає методи вирішення задач, для яких немає ефективних алгоритмів або вони недосконалі (через обмеження в часі, пам'яті тощо). Саме тому інтелектуальні алгоритми часто застосовують для вирішення NP-повних задач, таких як задача комівояжера.

3. Штучний інтелект займається моделюванням вищої нервової діяльності людини.

4. Штучний інтелект — це системи, здатні працювати зі знаннями та, що найважливіше, навчатися. Тут акцент робиться на експертних системах, які можуть замінювати людей-експертів у певних сферах.

5. Останній підхід, який розвивається з 1990-х років, називають агентно-орієнтованим. Він зосереджується на методах і алгоритмах, які допомагають інтелектуальному агенту виживати в навколишньому середовищі під час виконання завдань. Тому тут особливу увагу приділяють алгоритмам пошуку та прийняття рішень.

Найзагальніший підхід полягає в тому, що штучний інтелект матиме змогу поводити себе як людський за звичних умов. Ця ідея є узагальненим підходом тесту Тюрінга, який стверджує, що машина стане розумною тоді, коли буде спроможна підтримувати діалог з людиною, а та не зможе зрозуміти, що розмовляє з машиною.

1.1.4. Недоліки використання AI у науці

За останні роки у науковому просторі все більше і більше просувається використання штучного інтелекту у вирішенні багатьох запитань у різних сферах науки, від медицини до хімії, від фізики до освітньої програми. Особливо у використанні теоретичних, науково-оглядових статтях.

З одної сторони це дозволяє раціоналізувати час реальних науковців на практичній частині, наприклад, як експеримент чи дослід. Однак, з іншої сторони, розвиток штучного інтелекту тільки починається і його використання в різних сферах, особливо в науці має багато недоліків.

Для обґрунтування цієї позиції, можна скористатись нещодавніми дослідженням в цьому питанні. Науковці провели дослідження [22] таким чином, що запропонували три теми для написання науково-оглядової статті трьома методами. Перший метод полягав в тому, що матеріал та інформацію готує людина, без використання ШІ-асистентів та інших програм зв'язаних з штучним інтелектом. Другий метод мав на меті те, що через певні конкретні запити згідно теми до AI-асистента (в цьому дослідженні це був Chat-GPT) написати наукову оглядову статтю з усіма цитуваннями та використаними джерелами, а третій метод був комбінований, використання ШІ людиною у написанні статті.

Висновок з цієї статті був такий, що шість із восьми статей було повернуто з відносно незначними виправленнями, а дві з восьми статей було повернено з потребою значної реорганізації тексту рукопису. Обидві ці статті були в темі «Нейронна регуляція загоєння переломів» і, як виявилось, були статтями за допомогою людини та штучного інтелекту, в яких використовувався нарис, створений людиною. Виходячи з окремих відгуків рецензентів, порядок створеного людьми плану був більш заплутаним, ніж план, створений ШІ, що свідчить про важливу перевагу використання ШІ.

Процес лише штучного інтелекту був найшвидшим, але мав найбільше помилок у посиланнях. Кількість неточностей у групі лише ШІ була високою (до 70% неправильних посилань). Залишені без перевірки обізнаними в цій галузі, ці посилання призвели б до дезінформації читачів, що неприйнятно.

Також чернетки після процесу написання людини за допомогою штучного інтелекту призвели до вищого відсотка плагіату порівняно з чернетками, створеними лише людиною або тільки штучним інтелектом.

Ще одне зауваження, пов'язане з обмеженням ШІ, полягає в тому, що він не завжди може синтезувати надану інформацію для створення значущих зв'язків між поняттями, як ми очікуємо від людей-авторів. Знову ж таки, це обмеження, ймовірно, буде зведено до мінімуму з часом, оскільки штучний інтелект навчатиметься за допомогою ітераційної обробки, але наразі це проблема, коли викладачам потрібно забезпечити більш значне редагування, щоб об'єднати ідеї в кількох випадках.

Нарешті, основна проблема та недолік використання ШІ-асистенту у повному написанні статті, на мою думку, це неможливість оновлення актуальної інформації у реальному часі. Тобто, ШІ-асистент має базу даних з інтернету до певного часу, що унеможлиблює знаходження актуальної та нової інформації за останні роки.

Все вище перераховане говорить про те, що штучний інтелект тільки на початкових стадіях повноцінного використання у науковому прогресі, однак його застосування у створенні конкретних програм, або ж у вирішенні стислих та конкретизованих задач, вже широко використовується у багатьох сферах.

1.2. Революційні розробки на основі ШІ

1.2.1. Розвиток AI-асистентів та чат-ботів в останні роки

Чат-бот або ж AI-асистент — це створений штучний інтелект, який може взаємодіяти з людьми та імітувати розмови. Вхідні дані для чат-бота можуть бути текстовими або усними (голосові запити). Чат-боти в основному використовуються для пошуку інформації. Він може працювати на локальному комп'ютері чи мобільному телефоні, хоча здебільшого доступ до чат-ботів здійснюється через веб-браузер. Чат-бот в основному працює, ставлячи запитання чи запити щодо певної теми. Вони працюють за принципом штучного інтелекту (AI) і обробки природної мови (NLP), щоб надавати відповіді на запити

користувача, а заздалегідь визначена база знань допомагає розробити відповідь на запитання [11].

Їх розвиток, як і штучного інтелекту, був поступовим і кожна нова створена модель сприймалась як прорив у цьому напрямку, однак реальний прорив та певна «революція» сталась у останніх роках, коли AI-асистенти та чат-боти, які перетворилися з простих інструментів для автоматизації відповідей на складні системи, здатні розуміти контекст, підтримувати багатоповерхові діалоги та виконувати різноманітні завдання. Цей прогрес став можливим завдяки вдосконаленню технологій обробки природної мови (NLP), машинного навчання та генеративних моделей, таких як GPT, BERT та інші. Сьогодні AI-асистенти та чат-боти активно використовуються в різних сферах, від клієнтської підтримки, освіти та розваг до моделювання складних молекул, розрахунків в астрономії і навіть в допомозі обґрунтувань нових теорій, значно підвищуючи ефективність і якість розвитку людства, деякі з цих чат-ботів ми розберемо більш детально.

ChatGPT – вдосконалена мовна модель, стала потужним інструментом у NLP та AI. Створений на основі архітектури OpenAI GPT-3, ChatGPT привернув значну увагу завдяки своїй здатності сприяти людським розмовам. Він являє собою важливу віху в галузі, уможливлуючи складну взаємодію між людьми та машинами. За своєю суттю ChatGPT розроблено для розуміння та створення людських текстових відповідей. ChatGPT набув глибокого розуміння мовних моделей, семантики та контексту завдяки тривалому навчанню на величезній кількості даних. Його базова архітектура охоплює найсучасніші методи глибокого навчання (ГН), що дозволяє обробляти та генерувати узгоджені та відповідні контексту відповіді.

Вміння ChatGPT залучати користувачів до динамічних розмов на різні теми та домени виділяє його. Він демонструє вражаючу здатність розуміти нюанси людського спілкування, пропонуючи відповіді, які часто відображають відповіді людини-співрозмовника. Ця універсальність дозволяє застосовувати ChatGPT у різних сценаріях реального світу, від підтримки клієнтів і віртуальних помічників

до чат-ботів, мовного перекладу, створення вмісту та навіть творчого написання. Використовуючи великомасштабні набори даних і використовуючи методи глибокого навчання, ChatGPT може розуміти складні запити, інтерпретувати контекст і генерувати відповідні контексту та узгоджені відповіді. Його здатність розуміти семантику та тонкощі людської мови дозволяє йому надавати точну та глибоку інформацію, що робить його цінним інструментом для користувачів, які шукають допомоги, інформації або просто беруть участь у змістовних розмовах.

Запуск саме цього чат-боту став певною «революцією» в усьому ШІ-просторі, багато світових ІТ-компанії почали створювати свої AI-асистенти та чат-боти, однак вони ніяк не могли конкурувати з ChatGPT від OpenAI.

Офіційно представлений 20 січня 2025 року, DeepSeek AI був розроблений як спеціалізована технічна модель штучного інтелекту, пріоритетами якої є точність, структуроване вирішення проблем та ефективні обчислення [12]. На відміну від ChatGPT, який робить акцент на розумінні природної мови та розмовній адаптивності, DeepSeek використовує підхід, орієнтований на точність, що робить його добре придатним для наукових досліджень, програмування та просунутого математичного моделювання. Однією з визначальних особливостей DeepSeek є архітектура Mixture of Experts (MoE), яка вибірково активує параметри моделі залежно від складності задачі. Ця динамічна обчислювальна стратегія дозволяє DeepSeek оптимізувати ефективність і точність, що робить його потужним інструментом у таких технічних галузях, як доведення теорем, дослідження, керовані штучним інтелектом, і фінансове моделювання [13]. На відміну від нього, DeepSeek орієнтований на конкретні завдання, будучи ШІ загального призначення. Таким чином, DeepSeek завжди надає більш точні, деталізовані результати, які, завдяки точності та ефективності обчислень, стали зручними для автоматизації кодування, дослідження методів, керованих ШІ, і роботи з величезними масивами даних [12]. Однак такий рівень структури досягається ціною компромісу. DeepSeek менш гнучкий, ніж ChatGPT, коли йдеться про розмови, оскільки він менш пристосований для відкритих дискусій

або додатків, що передбачають інтерактивний діалог. Суворі політика модерації контенту також перешкоджає його адаптації до сфер, що вимагають більш нюансованих відповідей ШІ у вільній формі.

DeepSeek визначив нові стандарти в застосуванні обчислювального ШІ. Наприклад, додатки DeepSeek особливо актуальні там, де потрібні структуровані й точні результати. Серед інших численних переваг DeepSeek - його економічна ефективність, що стала можливою завдяки фреймворку Mixture of Experts. Він активує компоненти моделі лише в залежності від того, що вимагається в конкретному завданні, а отже, зменшує накладні витрати часу на обчислення і робить її більш ефективною та масштабованою як модель ШІ для складних технічних застосувань [14]. Фінансова, інженерна та науково-дослідна галузі швидко перейшли на DeepSeek, щоб спростити операції, оптимізувати робочі процеси та підвищити точність обчислень, керованих ШІ. Від автоматизованого фінансового моделювання до інженерних симуляцій і високоточних наукових досліджень - DeepSeek позиціонує себе як надійний інструмент для структурованого вирішення проблем. Його ефективність і обчислювальна точність роблять його дуже цінним активом для дослідників, інженерів і професіоналів, що працюють з даними.

1.2.2. Програми на основі штучного інтелекту в науці

Зараз штучний інтелект є головною рушійною силою розвитку суспільства, що робить значний вплив на науку та наукову освіту. ШІ використовується вченими для створення гіпотез, розробки експериментів, збору та інтерпретації даних у спосіб, який раніше був неможливий за допомогою лише традиційних методів.

Програми на основі штучного інтелекту стали невід'ємною частиною сучасної науки, оскільки вони дозволяють автоматизувати складні процеси, аналізувати величезні обсяги даних і робити точні прогнози. У таких галузях, як

біологія, фізика чи медицина, ШІ допомагає швидше розпізнавати закономірності, які люди можуть не помітити. Відштовхуючись від парадоксу Моравека, використання програм створених для обчислення, моделювання, конструювання набагато спрощують людям завдання в науковому розвитку, а враховуючи, що за останні роки, багато програм, які базувались на машинному та глибокому навчанню додали аспекти штучного інтелекту, взагалі поставило багато наукових напрямків на нові шляхи розвитку та цілі.

Далі буде приведена таблиця основних хімічних баз даних, які використовуються у різноманітних програмах.

Таблиця 1. Базы даних, що використовуються штучним інтелектом.

Назва бази даних	Опис	Посилання
PubChem	Велика база даних хімічних сполук, включаючи структури, властивості та біологічну активність.	pubchem.ncbi.nlm.nih.gov
ChEMBL	База даних біоактивних молекул з анотаціями щодо цілей та активності.	www.ebi.ac.uk/chembl
ZINC	База даних комерційно доступних сполук для віртуального скринінгу.	zinc.docking.org
DrugBank	База даних ліків та їхніх мішеней, включаючи фармакокінетичні дані.	go.drugbank.com
ChemSpider	База даних хімічних структур з різних джерел.	www.chemspider.com

MoleculeNet	Набір даних для бенчмаркінгу ML у хімії (включає TOX21, QM9 та інші).	moleculenet.org
PDB (Protein Data Bank)	3D-структури білків, ДНК, РНК та комплексів.	www.rcsb.org

Отже, використання програм, ші-асистентів, чат-ботів та інших застосунків у науці, можуть призвести до революційного прогресу в багатьох галузях, і деякі програми це вже наглядно показують.

1.2.3. Моделювання структури білків

AlphaFold — це програма штучного інтелекту (ШІ), розроблена DeepMind , дочірньою компанією Alphabet , яка виконує передбачення структури білка [15]. Він розроблений з використанням методів глибокого навчання [16].

Програма має три версії, сама перша AlphaFold 1 створена у 2018 році була особливо успішна у прогнозуванні найточніших структур для цілей, які оцінили як найскладніші, де не було доступних шаблонних структур для білків із частково подібними послідовностями і посіло перше місце в загальному рейтингу 13-ї критичної оцінки прогнозування структури (CASP).

AlphaFold 2 (2020) повторив це місце в конкурсі CASP14 у листопаді 2020 року. Він досяг рівня точності, набагато вищого, ніж будь-який інший запис [16]. Він набрав більше 90 балів у тесті CASP на глобальну відстань приблизно для двох третин білків, що вимірює подібність між обчислювально передбаченою структурою та експериментально визначеною структурою, де 100 означає повну відповідність [16]. Включення метагеномних даних покращило якість прогнозування. Одним із найбільших джерел навчальних даних була створена на

замовлення велика фантастична база даних із 65 983 866 сімейств білків, представлених у вигляді MSA та прихованих марковських моделей (ПММ), що охоплює 2 204 359 010 білкових послідовностей із довідкових баз даних, метагеномів і метатранскриптомів [17].

Результати AlphaFold 2 на CASP14 були описані як «вражаючі» і «трансформаційні». Однак деякі дослідники відзначили, що точність була недостатньою для третини прогнозів, і що вона не виявила основного механізму або правил згортання білка, оскільки проблема згортання білка залишається невирішеною [18].

Незважаючи на це, технічне досягнення отримало широке визнання. 15 липня 2021 року стаття AlphaFold 2 була опублікована в журналі Nature як публікація з попереднім доступом разом із програмним забезпеченням з відкритим кодом і базою даних протеомів видів з можливістю пошуку.

AlphaFold 3 було оголошено 8 травня 2024 року. Він може передбачати структуру комплексів, створених білками з ДНК, РНК, різними лігандами та іонами [19]. Новий метод прогнозування демонструє мінімум 50% підвищення точності взаємодії білка з іншими молекулами порівняно з існуючими методами. Крім того, для певних ключових категорій взаємодій точність передбачення фактично подвоїлася [20].

Деміс Хассабіс і Джон Джампер з Google DeepMind розділили одну половину Нобелівської премії з хімії 2024 року, присудженої «за передбачення структури білка», а іншу половину отримав Девід Бейкер «за обчислювальний дизайн білка» [21]. Хассабіс і Джампер раніше вигравали премію «Прорив у науках про життя» та премію Альберта Ласкера за фундаментальні медичні дослідження у 2023 році за керівництво проектом AlphaFold.

1.2.4. Штучний інтелект у прискоренні створення нових ліків

Штучний інтелект (ШІ) отримує все більшу увагу великих фармацевтичних і біотехнологічних компаній у всьому світі як двигун для розробки нових ліків. Завдяки трьом основним елементам: величезним наборам даних, складним математичним моделям і вдосконаленим обчислювальним алгоритмам, штучний інтелект є проривом у відкритті та розробці ліків, привносячи нову потужність у дослідження та розробки (дослідження та розробку) нових ліків. Приблизно 80% дослідників у фармацевтиці та науках про життя використовують штучний інтелект, щоб прискорити або підтримати свої зусилля з відкриття ліків [23]. Традиційні дослідження та розробки нових ліків стикаються з багатьма проблемними моментами, такими як довгий цикл, висока вартість, високий відсоток невдач і низька віддача інвестицій. ШІ потенційно може підвищити ефективність процесу розробки нових ліків і точність прогнозування ефективності та безпеки ліків, таким чином збільшуючи рівень успішності конвеєра розробки ліків, знижуючи витрати та скорочуючи цикл розробки. Штучний інтелект може забезпечити значну економію часу та коштів порівняно з традиційними методами скринінгу та синтезу сполук, а також суттєву економію гонорарів і витрат на етапі клінічних досліджень. Однак все ще існує деяка недалекоглядність у застосуванні штучного інтелекту в розробці ліків, наприклад, нерівномірний розподіл даних, федеративне навчання ще не поширене, механізм захисту прав власності на алгоритм не вдосконалено тощо. Постійна увага, дослідження та спроби застосувати фармацевтичні підприємства для штучного інтелекту неодмінно прискорять розвиток та інновації фармацевтичних препаратів штучного інтелекту, які з часом значно прискоряться.

Програми штучного інтелекту покращують процеси клінічних випробувань, наприклад відбір пацієнтів, оптимізацію дизайну випробувань і моніторинг у реальному часі шляхом аналізу величезних наборів даних. Алгоритми можуть ефективно й точно ідентифікувати відповідних кандидатів. Крім того, штучний інтелект може оптимізувати прогнозне моделювання та проекти випробувань за допомогою передових алгоритмів, які прискорюють процес випробувань, підвищують його точність і ефективність і знижують витрати.

Метод прогнозного моделювання використовується для прогнозування результатів у клінічних дослідженнях. Це один із контрольованих методів навчання, за допомогою якого можна навчитися прогнозувати реакцію пацієнта, ефективність лікування або результати безпеки шляхом навчання моделі на основі даних історичних клінічних випробувань, включаючи характеристики пацієнтів, лікувальні втручання та результати випробувань. Ця інформація може керувати дизайном дослідження та оптимізувати відбір пацієнтів.

Найзначніший вплив штучного інтелекту у фармацевтиці полягає у відкритті ліків, оскільки він прискорює ідентифікацію потенційних препаратів-кандидатів і оптимізує молекулярний дизайн. Аналізуючи біологічні дані, штучний інтелект допомагає передбачати профілі ефективності та безпеки ліків, скорочуючи час від лабораторії до продажу.

Однак, разом з усіма перевагами цей метод у розробці нових ліків має ряд недоліків, таких як: Відсутність прозорості, відсутність даних, упередження в даних, неможливість даних, обмежена здатність враховувати мінливість, інтерпретація результатів. Тому моделі на основі штучного інтелекту слід використовувати в поєднанні з традиційними експериментальними методами для забезпечення безпеки та ефективності ліків. Оскільки доступність даних, алгоритми глибокого навчання, інтеграція з іншими підходами до моделювання та обчислювальна потужність покращилися, ці проблеми швидко вирішувалися. Однак неправильні дані продовжують створювати постійну проблему, вносячи упередження та спотворюючи точність моделей ШІ.

1.2.5. Застосування ШІ у нейробиології

Експерименти на тваринах вже давно є наріжним каменем неврологічних досліджень, але вони стикаються зі зростаючими науковими, етичними та економічними проблемами. Прогрес у сфері штучного інтелекту (ШІ) відкриває нові можливості для заміни випробувань на тваринах більш ефективними та

придатними для людини методами [24]. Мільйони тварин, від гризунів до нелюдських приматів, щорічно використовуються в нейронаукових дослідженнях для вивчення мозку, дослідження неврологічних розладів і тестування нових методів лікування [25]. Однак використання тварин у неврологічних дослідженнях стикається із зростаючими науковими, етичними та економічними проблемами.

Потенціал ІІІ для заміни експериментів на тваринах у неврології значний і має великі перспективи для поглиблення нашого розуміння мозку і неврологічних розладів. Наукові обмеження моделей на тваринах у відтворенні складності людського мозку і прогнозуванні клінічних результатів, а також етичні проблеми та економічні витрати на дослідження на тваринах є переконливими аргументами на користь використання альтернатив, заснованих на штучному інтелекті.

З наукової точки зору, симуляції мозку на основі ІІІ та органоїди можуть дозволити дослідникам вивчати складні неврологічні розлади, такі як хвороба Альцгеймера, Паркінсона та епілепсія, у спосіб, який неможливий за допомогою моделей на тваринах. Ці підходи можуть враховувати специфічні для людини генетичні та молекулярні фактори і дозволяють досліджувати механізми захворювань і потенційні методи лікування в більш клінічно релевантному контексті.

ІІІ також уможлиблює персоналізовані підходи до медицини в неврології, наприклад, використання моделей мозку конкретного пацієнта на основі зображень і генетичних даних для проведення хірургічних втручань або оптимізації схем лікування. Ці індивідуальні підходи мають потенціал для значного покращення результатів лікування пацієнтів з неврологічними розладами.

Таким чином, хоча експерименти на тваринах історично займають центральне місце в неврологічних дослідженнях, наукові, етичні та економічні чинники все більше сприяють переходу до альтернатив, заснованих на ІІІ.

Потенціал ШІ в забезпеченні більш релевантних для людини, ефективних і гуманних підходів до вивчення мозку і неврологічних розладів величезний. Використовуючи ці інноваційні технології, галузь неврології може прискорити прогрес на шляху до кращого розуміння і лікування неврологічних захворювань, при цьому значно зменшивши залежність від експериментів на тваринах. Майбутнє неврологічних досліджень - це дослідження, які все більше спираються на штучний інтелект, і цей перехід обіцяє принести значні переваги як пацієнтам, так і суспільству в цілому.

РОЗДІЛ 2. ШТУЧНИЙ ІНТЕЛЕКТ В АНАЛІТИЧНІЙ ХІМІЇ

2.1. Загальні напрямки та тенденції використання ШІ в хімії

2.1.1. Штучний інтелект в спектроскопічних методах

Застосування штучного інтелекту в інтерпретації спектроскопічних даних стало сферою досліджень, яка швидко розширюється, завдяки його здатності отримувати значущу інформацію зі складних наборів даних. Спектроскопія, яка включає вимірювання та інтерпретацію взаємодії між речовиною та електромагнітним випромінюванням, генерує великі обсяги даних, які може бути важко аналізувати вручну. Стрімкий розвиток штучного інтелекту (ШІ) та машинного навчання (МН) змінює наукові напрямки хімії, спрощуючи такі завдання, як прогнозування молекулярних властивостей та моделювання реакцій. Застосування машинного навчання у спектроскопії – називають спектроскопічним машинним навчанням (SpectraML) [26].

ШІ революціонізував спосіб аналізу спектроскопічних даних, пропонуючи нові шляхи для отримання глибшого розуміння, прискорення робочих процесів і виявлення закономірностей, що виходять за межі людських можливостей. Історично використання обчислювальних технологій у спектроскопії обмежувалося базовими завданнями розпізнавання образів і прогнозування властивостей. Ситуація змінилася з появою глибокого навчання і вдосконалених фреймворків машинного навчання, які уможливили трансформаційні можливості в усьому конвеєрі спектрального аналізу [26]. У міру того, як спектроскопічні

набори даних зростали в розмірах і складності, МН продемонстрував виняткову масштабованість і адаптивність. Перехід від ранніх прогностичних моделей до сучасних генеративних і міркувальних фреймворків, таких як трансформатори на основі уваги і фундаментальні моделі, переосмислив сферу спектрального аналізу. Генеративні моделі дозволяють моделювати спектри на основі молекулярних структур [27], вирішуючи пряму проблему – прогнозування спектра на основі інформації про молекулярну структуру, тоді як моделі, керовані міркуваннями, вирішують зворотну проблему – визначення молекулярної структури на основі експериментально отриманих спектрів, передбачаючи це з підвищеною точністю [28, 29].

Також відомі приклади використання SpectraML в гемології, для аналізу дорогоцінних каменів [30], а також у медицині та фармакології, особливо в розробці діагностування *in vitro* різних біозразків, таких як плазма крові, сироватка, сечовина і тканини [31-33], за допомогою комбінації мас-спектроскопії, спектрометрії та штучного інтелекту [34].

Однак, SpectraML стикається з кількома взаємопов'язаними проблемами, що впливають з природи експериментальних спектральних даних та обмежень сучасних підходів МН. По-перше, значною перешкодою є мінливість якості даних. Експериментальні спектри часто скомпрометовані шумом, дрейфом базової лінії та розбіжностями між приладами, що призводить до невідповідностей у спектральній роздільній здатності та інтенсивності. Така мінливість ускладнює навчання моделі і може суттєво погіршити прогностичні характеристики алгоритмів МН, особливо якщо попередня обробка недостатньо надійна. Більше того, дефіцит і незбалансованість високоякісних анотованих спектральних наборів даних, особливо для рідкісних або складних сполук, ще більше загострюють проблему. Обмежена доступність навчальних даних не тільки перешкоджає узагальненню моделей для різних хімічних просторів, але й збільшує ризик надмірного пристосування, що вимагає застосування таких стратегій, як доповнення даних і навчання з перенесенням [35].

2.1.2. Застосування ШІ в хроматографії

Інтеграція штучного інтелекту в хроматографічну техніку є значним прогресом у хімічному та біохімічному аналізі. Одним із основних застосувань ШІ в хроматографії є інтерпретація та аналіз даних. Алгоритми машинного навчання, наприклад, використовуються для обробки та аналізу великих наборів хроматографічних даних. Вони можуть ідентифікувати закономірності та кореляції в складних даних, полегшуючи ідентифікацію сполук і кількісне визначення їх компонентів у зразках [36].

Хроматографія є основним методом, що використовується для очищення білкових субодиниць вакцин. Більшість методів очищення вакцин ґрунтуються на евристиці. Наприклад, при очищенні вірусу гепатиту А з клітинних культур ссавців на початковому етапі використовується недорога аніонообмінна хроматографія для вловлювання продукту та усунення значних домішок. Останній етап подальшого процесу включає полірування і знесолення за допомогою хроматографії з виключенням розмірів. В даний час існує кілька комерційно доступних хроматографічних програмних моделей, таких як GoSilico (тепер частина Cytivia, раніше відома як ChromX), Aspen Chromatography, DelftChrom, CADET і ChromaTech. Хоча можливості мембранної хроматографії щодо встановлення рівноваги і зв'язування зазвичай обмежені, мембранна хроматографія перевершує традиційну хроматографію на набивному шарі з точки зору продуктивності і використання шару при високих швидкостях потоку і короткому часі перебування [39].

Важливим елементом хроматографії є здатність створювати хроматограф за допомогою штучного інтелекту. Це дозволяє автоматично розробляти аналітичний метод для високоефективної рідинної хроматографії (ВЕРХ). Це означає, що ідеальний склад рухомої фази може бути обраний на основі скаутських тестів, а оптимальні робочі параметри можуть бути скориговані для

досягнення бажаних аналітичних результатів. Хроматографічний підхід також може надати якісну інформацію про піки, особливо для неідентифікованої суміші, основі хроматограми. Для досягнення цієї мети були виведені основні рівняння для утримування недисоційованих розчинених речовин, слабких органічних основ, слабких кислот і амфотерних речовин в рідинно-твердій хроматографії з урахуванням варіацій складу рухомої фази.

Програмне забезпечення RVPKLC-83 було розроблено для розрахунку параметрів цих рівнянь на основі емпіричних даних, а точність рівнянь була підтверджена експериментально. Програма OMPCLC-83 була створена для прогнозування найбільш сприятливого складу рухомої фази. Використовували ВЕРХ обладнання, оснащене швидко-скануючою ультрафіолетовою (УФ) детекторною системою. Програма ChgrA-83 перебуває на стадії розробки для визначення чистоти піків і виявлення невирішених піків [40].

Двовимірна хроматографія — це хроматографічна техніка, яка дає інформацію про хімічний склад зразка шляхом поєднання двох систем розділення. Як правило, дві різні хроматографічні колонки з'єднують послідовно, і аліквоту з першої колонки вводять у другу колонку. Оскільки системи розділення часто працюють по-різному в колонках, піки, які не вдалося розділити за допомогою першої колонки, можна розділити за допомогою другої колонки в 2D-хроматографії [37]. Великий обсяг інформації міститься в хроматографії високої роздільної здатності, тому важко витягти всю відповідну інформацію та вивести правильні та прості рішення. Для вирішення цієї проблеми були створені три еволюційні алгоритми [38] для покращення пошуку в просторах розробки методів 1D- і 2D-хроматографії, включаючи генетичні алгоритми (GA), стратегії еволюції (ES) і стратегію адаптації-еволюції коваріаційної матриці (CMA-ES). Результати показали значну перевагу, особливо щодо кількості пошукових прогонів, необхідних для досягнення заданої якості розділення. Крім того, продуктивність ES і GA відповідала гіперболічному закону в обмеженні великої кількості прогонів пошуку. Згодом швидкість збіжності в гіперболічній функції може

кількісно визначити різницю в необхідній кількості прогонів пошуку в цих алгоритмах.

Підходи штучного інтелекту значно підвищили точність прогнозування утримування в хроматографічних процедурах. ШІ може ефективно аналізувати великі масиви даних і спростити ідентифікацію та розділення речовин. Задokumentовано безліч методологій для прогнозування утримування в різних хроматографічних методиках. Послідовні дослідження показали, що моделі глибокого навчання перевершують лінійні моделі машинного навчання з точки зору точності та ефективності, особливо в рідинній і газовій хроматографії. Найбільш поширеним методом прогнозування коефіцієнтів утримування різних речовин у тонкошаровій хроматографії є нейронні мережі на основі машин опорних векторів (Support Vector Machine). Для моделювання були використані хемінформатика, хемометрія та гібридні методи, які виявилися більш надійними в прогнозуванні утримування, ніж традиційні моделі. Кількісне співвідношення утримання структури (QSRR) є перспективним підходом для прогнозування утримання аналітів у різних хроматографічних методах і визначення оптимальної процедури розділення. Інтеграція QSRR з методологіями, керованими штучним, продемонструвала переваги досягнення більш точних прогнозів утримування [41].

2.1.3. Штучний інтелект у високопродуктивному аналізі даних

В останні роки спостерігається зростаючий інтерес до методів аналізу даних, таких як методи на основі штучного інтелекту. Для хімічних застосувань генерація даних є більш корисною, якщо вона поєднується з оптимальними методами аналізу згенерованих даних. Методи аналізу отриманих хімічних даних залежать від зразка і завдання. Однак методи попереднього аналізу є життєво важливими для оцінки хімічних даних незалежно від завдання, яке потрібно вирішити. Хоча хімічні дані отримують за допомогою різних методів

вимірювання, спотворення цих даних є дуже поширеним явищем. Ці спотворення називаються артефактами і є наслідком роботи вимірювальних приладів, процесів вимірювання або спотворення, а також природи самих зразків. Видалення або придушення артефактів призводить до покращення даних і має вирішальне значення для того, щоб аналіз даних дав змістовні результати. Таке покращення хімічних даних можна розділити на два основні типи: прямі та зворотні задачі. У прямій задачі метою є усунення артефактів і помилок вимірювання для визначення складу зразків і структур, що лежать в основі хімічної інформації. Для вирішення цієї проблеми розробляються методи попередньої обробки, щоб усунути небажані варіації, які обмежують виділення базових хімічно релевантних структур. Натомість зворотна задача спрямована на реконструкцію відсутньої інформації про хімічну/фізичну систему, яка була введена в процесі вимірювання.

Детальний аналіз методів попередньої обробки для певного набору даних є критично важливим, оскільки ці методи можуть також видаляти релевантну хімічну інформацію. Тому пошук найкращого методу попередньої обробки є життєво важливим, враховуючи його вплив на подальший аналіз даних і його результати. Ці методи попередньої обробки можуть застосовуватися для видалення шумів, заміни відсутніх значень, інтерпретації або видалення базових ліній, або навіть для поєднання цих цілей [42]. Залежно від досліджуваної проблеми, для видалення основних помилок вимірювання застосовують або один метод попередньої обробки, або комбінацію методів. Тим не менш, знайти найкращий метод попередньої обробки або найкращу комбінацію методів для видалення всіх артефактів у наявних даних є складним завданням. Крім того, вибір попередньої обробки є результатом вичерпного та тривалого процесу проб і помилок. Отже, наукові зусилля докладаються для вибору відповідних методів попередньої обробки. Останні статті зосереджені на вирішенні проблеми проб і помилок шляхом впровадження автоматизованих програмних рішень, які порівнюють різні методи попередньої обробки. Модуль Python з відкритим кодом «nirru» був розроблений для напівавтоматичних порівнянь методів попередньої обробки для ближньої інфрачервоної спектроскопії (NIRS) [43]. Наявність шуму в

вимірюваннях NIRS значно впливає на багатовимірні методи, необхідні для подальшого аналізу. Таким чином, представлені категорії попередньої обробки, включаючи відсікання, корекцію розсіювання, згладжування, похідні, обрізання та повторну вибірку. Цей модуль python було протестовано на двох прикладах, і це призвело до швидкого вибору різних комбінацій попередньої обробки.

Зворотне моделювання — це процес реконструкції відсутньої інформації зі спостережуваних вимірювань для ідентифікації її джерела або відповідних параметрів моделі. Інверсне моделювання намагається вивести знання з заданих даних вимірювання в просторі спостереження Y до основного невідомого стану X зразка або функції параметра в просторі станів X . Загальні рішення для цієї проблеми не існують або залежать нестійким чином від вимірювань, що пов'язано з характеристиками некоректної задачі зворотного моделювання [44]. Існує різноманітність алгоритмів, і останні розробки з цього питання перераховані нижче.

Розроблено новий алгоритм [45] зворотного моделювання серії вимірювань інтенсивності рентгенівського випромінювання. Їхньою метою було відновити структуру та склад двовимірних (2D) гетерогенних матеріалів, виміряних за допомогою рентгенівської спектроскопії, змінюючи енергію та положення променя. Їхній метод передбачає ітераційний процес прямого моделювання на основі моделювання Монте-Карло, щоб визначити оптимальну структуру для мінімізації відносних відмінностей між змодельованою та експериментальною характеристичною інтенсивністю рентгенівського випромінювання. На завершення автори довели здійсненність свого підходу до аналізу 2D гетерогенних матеріалів для кількісного рентгенівського випромінювання, індукованого електронами. Однак вхідні параметри, такі як положення променя, енергія променя та розмір вокселя, повинні бути обрані належним чином. В іншому дослідженні [46] запропоновано використання зворотного моделювання шляхом поєднання рентгенівської комп'ютерної томографії (РКТ) і методу кінцевих елементів для отримання коефіцієнта зменшення обсягу іржі. Звичайні

чисельні моделі корозійного розширення ігнорують проникнення іржі в бетонну матрицю вздовж поздовжнього напрямку. Їх підхід показав, що отриманий коефіцієнт зменшення об'єму іржі пов'язаний з коефіцієнтом розширення іржі. Рівень корозії, отриманий за допомогою тестування РКТ, був значно вищим, ніж той, який вони виявили за допомогою традиційної моделі корозії.

Однак спроби покращити якість прогнозування та стійкість методів на основі штучного інтелекту, здійснюються в багатьох галузях. Крім того, зростає кількість досліджень щодо розробки нових методів на основі ШІ, а подолання браку доступних даних, особливо в біомедичних додатках, і вдосконалення методів об'єднання даних все ще є предметом подальших досліджень.

2.2. Конкретні приклади застосування ШІ в хімічному аналізі

2.2.1. Прогноз критичної концентрації міцел іонних поверхнево-активних речовин за допомогою штучної нейронної мережі

Критична концентрація міцелоутворення (ККМ) є ключовою фізико-хімічною властивістю поверхнево-активних речовин, яка використовується для вивчення їхньої поведінки. На цю властивість впливають такі фактори, як температура, тиск, рН, тип суміші органічного розчинника/води, хімічна структура поверхнево-активних речовин і наявність електролітів. Більшість існуючих досліджень у літературі передбачили ККМ за фіксованих умов на основі хімічних параметрів поверхнево-активної речовини. У цьому дослідженні [47] для оцінки ККМ деяких іонних поверхнево-активних речовин використовувався підхід машинного навчання з використанням моделей штучної нейронної мережі (ШНМ). Ці моделі розглядали змінні, що визначають як суміш органічного розчинника з водою (T , молекулярна маса, молярна частка та $\log P$), так і хімічну структуру поверхнево-активної речовини (кількість атомів кожного елемента). Пропонується архітектура ШНМ, яка складається з вхідного рівня з 12 нейронами, проміжного рівня з 25 нейронами та одного нейрона на вихідному

рівні. Згідно з результатами, нормалізовані моделі ШНМ забезпечили найкращі статистичні коригування для прогнозу ККМ.

Метою цього дослідження є розробка моделей ШНМ для оцінки ККМ для 10 іонних ПАР (шести катіонних і чотирьох аніонних). Експериментальні дані були зібрані з різних наукових публікацій у літературі. Ефективні параметри СМС, такі як температура, склад хімічної формули поверхнево-активної речовини та природа розчину, були включені як змінні в моделі прогнозування. Крім того, були також включені властивості спирту, такі як $\log P$ ($\log K W_0$), молекулярна маса та молярна частка. Дійсно, $\log P$ — це відношення концентрацій цієї речовини в двофазній суміші, що складається з двох незмішуваних розчинників у рівновазі — *n*-октанолу та води. Він обчислює диференціальну розчинність розчиненої речовини в цих двох розчинниках. Дозволяє встановити шкалу гідрофобності речовини.

Загалом було обрано 10 іонних ПАР (шість катіонних і чотири аніонних). Вивчені катіонні поверхнево-активні речовини включають бензилдодецилдиметиламоній бромід (BDAB), цетилпіридиній хлорид (CPyCl), цетилтриметиламоній бромід (CTAB), додецилпіридиній хлорид (DPC), додецилтриметиламоній бромід (DTAB) і тетрадецилтриметиламоній бромід (TTAB). До досліджуваних аніонних належать дезоксихолат натрію (SDC), додецилбензолсульфонат натрію (SDBS), додецилсульфат натрію (SDS) і *N*-лауроїлсаркозинат натрію (SDDS). Загалом 12 вхідних змінних було використано для прогнозування ККМ (вихідна змінна). Вхідні змінні можна розділити на два дескриптори: ті, що визначають поверхнево-активну речовину, і ті, що визначають розчинник (суміш органічного розчинника та води). Що стосується поверхнево-активної речовини, кількість атомів кожного елемента, з якого складається хімічна формула кожної поверхнево-активної речовини, була включена: кількість вуглецю, водню, брому, хлору, азоту, натрію, кисню та сірки. Стосовно розчинника були включені молярна частка, молекулярна маса (г моль^{-1}

), коефіцієнт розподілу октанол/вода, визначений як $\log P (K W_o)$, і температура (у К). Нарешті, вихідною змінною є логарифмічне значення ККМ (у моль L^{-1}).

Різні моделі машинного навчання були розроблені з використанням освітньої версії RapidMiner Studio 10.2.000 (RapidMiner GmbH). Використовуваним обчислювальним обладнанням був процесор Intel® Core (TM) i9-10900K з тактовою частотою 3,70 ГГц із встановленою 64 ГБ оперативної пам'яті та Windows 11 Pro.

Для всіх розроблених моделей ШНМ вхідні змінні включали молярну частку, молекулярну масу, $\log P$, температуру та кількість атомів кожного елемента, присутнього в хімічній формулі кожної іонної поверхнево-активної речовини. Нарешті, $\log K_{CM}$ був вихідною змінною (змінною для прогнозування).

Гіперпараметри, використані для розробки моделей ШНМ, включали цикли навчання (від 1 до 524 288) у 19 кроках, у лінійній (розробленій без індексу) або логарифмічній шкалі (розробленій з індексом L) і розпадом (істинне чи хибне). Гіперпараметри визначали методом проб і помилок. Використовуючи ці дві комбінації гіперпараметрів, було розроблено шість різних підходів ANN. Чотири моделі ШНМ були нормалізовані до визначеного діапазону, оскільки дані показали різні масштаби та одиниці. Основна мета процесу нормалізації — запобігти непропорційному впливу будь-якої зі змінних на навчання моделі. Було застосовано два методи нормалізації, які використовувалися для введення та виведення змінних. Ці методи були застосовані до всіх груп даних у такому порядку: спочатку до даних навчання, а потім до даних перевірки та тестування. Потім результати були денормалізовані для порівняння між ними. Це перетворення є необхідним, оскільки воно дозволяє інтерпретувати отримані прогнози в їх вихідному контексті.

Оцінка ККМ є одним із найцікавіших аспектів як для академічних, так і для промислових застосувань із застосуванням поверхнево-активних речовин. Підходи, засновані на машинному навчанні, такі як ті, що були використані в

цьому дослідженні, продемонстрували свою корисність як рентабельна та економічна альтернатива традиційним лабораторним вимірюванням. Наші моделі ШНМ для прогнозування ККМ 10 іонних поверхнево-активних речовин були розроблені з використанням фізико-хімічних властивостей суміші органічний розчинник-вода та хімічних властивостей поверхнево-активної речовини. Дослідження показало, що нормалізовані моделі ШНМ були високоточними на основі трьох статистичних параметрів. Зокрема, модель ANN_Z представила найкращі коригування з RMSE 0,040 М ($R^2 = 0,995$) для фази перевірки та 0,069 М ($R^2 = 0,970$) у тестовому випадку. Середні абсолютні відсоткові похибки становили 2,7 % і 3,5 % відповідно. У цьому сенсі цей реалізований алгоритм є надійним і ефективним для прогнозування значень ККМ іонних поверхнево-активних речовин. Загалом моделі ШНМ демонструють чудовий потенціал як інструменти для точного та ефективного прогнозування ККМ.

2.2.2. Застосування штучного інтелекту при розробці сенсорів хімічних газів

Сьогодні зростає інтерес до швидких, точних і високочутливих розумних газових датчиків із чудовою селективністю, завдяки високому попиту на безпеку навколишнього середовища та охорону здоров'я. Було проведено значні дослідження для розробки датчиків на основі нових високочутливих і вибірковок матеріалів. Були досліджені обчислювальні та експериментальні дослідження з метою виявлення ключових факторів у забезпеченні максимального активного місця для адсорбції молекул газу, включаючи налаштування забороненої зони за допомогою наноструктур, каталітичних реакцій метал/оксид металу та утворення нанопереходів. Проте все ще існують великі проблеми, зокрема щодо селективності, що викликає потребу в об'єднанні міждисциплінарних галузей для створення розумніших і високоефективних газових/хімічних сенсорних пристроїв. У цьому огляді [48] обговорюються сучасні основні методи підвищення продуктивності зондування газу, їхні переваги та обмеження, особливо з точки зору вибірковокості та довгострокової стабільності. Потім обговорення встановлює

аргументи для використання інтелектуальних методів машинного навчання, які пропонують ефективні підходи до обробки даних, для розробки високоселективних розумних газових датчиків.

Для реалізації датчика в реальному застосуванні датчик повинен володіти декількома основними характеристиками вимірювання, включаючи чудову чутливість, швидкий час відгуку/відновлення, повторюваність, тривалу стабільність (у вологому та високотемпературному середовищах) і вибірковість. Обговорювалися різні методи підвищення ефективності, такі як композиція/гібридизація, легування гетероатомів, формування р–n-переходу та структури ядро–оболонка. Відповідно до основного матеріалу ми класифікували газові датчики на три типи: на основі графену, на основі ДХПМ (Дихалькогеніди перехідних металів) і на основі напівпровідника/оксиду металу. Було зроблено висновок, що методи підвищення продуктивності безперечно покращують чутливість, час відгуку/відновлення, повторюваність, межу виявлення та робочу температуру. Однак чудова селективність і довгострокова стабільність у різних середовищах все ще є серйозними проблемами. Таким чином, припускають, що з розробкою нового матеріалу, ефективні методи обробки даних з використанням машинного навчання є дуже необхідними для вирішення проблеми вибірковості та довгострокової стабільності.

Машинне навчання широко використовується для створення високоселективних розумних газових датчиків і аналізаторів дихання. Обробка даних є основним фактором, оскільки від неї залежить успіх процесу машинного навчання. Він спрямований на отримання надійної інформації про характеристики з динамічної реакції датчика, яка може представляти унікальні шаблони «відбитків пальців» для певного газу, щоб забезпечити ефективність наступного алгоритму розпізнавання шаблонів. У цій статті обговорювалися сучасні хемірезистивні та інтелектуальні газові датчики на основі польових транзисторів, а також найважливіші характеристики, які можна отримати з оригінальної динамічної реакції.

Машинне навчання демонструє великий потенціал у вирішенні критичних проблем, пов'язаних із датчиками хімічних газів, і відіграє важливу роль у створенні інтелектуальних датчиків із покращеними сенсорними можливостями, особливо вибірковістю та довгостроковою стабільністю. Однак вони складні, дорогі, споживають високу потужність і вимагають великого обладнання для їх реалізації в реалістичному додатку. Це вимагає розробки нано/мікросенсорів разом із блоками алгоритмів обробки сигналів і машинного навчання на одній гнучкій підкладці з використанням технології MEMS/NEMS (Мікроелектромеханічні системи/Наноелектромеханічні системи) для реалізації революційного розумного світу мініатюрної та портативної електроніки/електрики.

2.2.3. Виявлення забруднення харчових продуктів мікотоксинами за допомогою штучного інтелекту

Забруднення харчових продуктів мікотоксинами викликає серйозне занепокоєння щодо безпечності харчових продуктів і здоров'я населення в усьому світі. Забруднення сільськогосподарських товарів, якими користується людство, мікотоксинами (токсичними вторинними метаболітами грибів) є головним ризиком для здоров'я населення. Загальні методи виявлення мікотоксинів включають хроматографічне розділення, часто в поєднанні з мас-спектрометрією (точне, але вимагає багато часу для підготовки зразка та потребує кваліфікованих техніків). Штучний інтелект був представлений як нова техніка для виявлення мікотоксинів у харчових продуктах, що забезпечує високу достовірність і точність. У цій оглядовій статті [49] подано огляд нещодавніх досліджень щодо використання методів ШІ для виявлення мікотоксинів у продуктах харчування. Новий підхід продемонстрував, що різні технології штучного інтелекту можуть бути взаємопов'язані. Моделі глибокого навчання, алгоритми машинного навчання та нейронні мережі були реалізовані для аналізу складних наборів даних з різних аналітичних платформ.

Зараження мікотоксинами ставить під загрозу постачання продуктів харчування та здоров'я населення в усьому світі. Більшість цих токсичних вторинних метаболітів виробляються такими грибами, як види *Aspergillus*, *Penicillium* і *Fusarium*, і містяться в широкому діапазоні сільськогосподарських продуктів, таких як злаки, горіхи, спеції та сухофрукти. Дослідження на людях і тваринах показали, що вплив мікотоксинів від споживання зараженої їжі пов'язаний як з гострими шкідливими ефектами (наприклад, гепатотоксичність і нефротоксичність), так і з хронічними токсичними наслідками (канцерогенність і імуносупресія).

Традиційні методи виявлення мікотоксинів, такі як хроматографія з мас-спектрометрією (наприклад, вискоефективна рідинна хроматографія (HPLC), газова хромато-мас-спектрометрія (GC-MS), рідинна хромато-мас-спектрометрія (LC-MS), твердофазний імуноферментний аналіз (ELISA) тощо) добре відомі завдяки своїй високій чутливості і критерії розпізнавання образів; однак це дорогі, трудомісткі процеси, отримані з ферментів, і вимагають спеціально навченого персоналу. Ці методи мають складні етапи підготовки зразків, які включають екстракцію, очищення та аналізи, які можуть страждати від мінливості та помилок. Крім того, ця модель вимагає модного обладнання та витратних матеріалів, які перевищують рівень вартості в умовах обмежених ресурсів, на додаток до необхідності регулярного моніторингу в ланцюгах виробництва харчових продуктів.

Методи ШІ пропонують численні переваги, включаючи надійність, економічну ефективність і здатність справлятися з невизначеністю. Методи штучного інтелекту також можуть потенційно скоротити час обробки в кількох програмах. Однак ефективність методів штучного інтелекту може відрізнятись залежно від конкретного завдання. Застосування ШІ часто покладається на доступ до великих високоякісних наборів даних. Цей огляд присвячений методам штучного інтелекту для виявлення мікотоксигенних грибів і мікотоксинів у харчових продуктах. Усі народи світу вирощують багато арахісу, який є і

олійною, і імпортною товарною культурою. Такі поживні речовини, як жир і білок, містяться в арахісі. У той же час, під час обігу та зберігання готовий арахіс вразливий до цвілі та цвілі. Афлатоксин — це отруйна та канцерогенна хімічна речовина, яка часто зустрічається в запліснявілих арахісі серед інших харчових продуктів. Підхід нюхової візуалізації використовувався для ідентифікації афлатоксину В1 (AFB1) в арахісі. Кольоровий компонент попередньо обробленого зображення сенсора було оптимізовано за допомогою підходу штучного інтелекту, що включає генетичний алгоритм (GA) із зворотним розповсюдженням нейронної мережі (BPNN) як регресор. Оптимізація поєднання відмінних колірних компонентів було використано для розробки кількісної аналітичної моделі опорного вектора регресії (SVR) для визначення AFB1 в арахісі. Було застосовано дві методи оптимізації для параметрів SVR. Результати показали, що модель SS-SVR досягла найкращого ефекту прогнозування з коефіцієнтом кореляції прогнозування 0,91. Інші алгоритми машинного навчання, включаючи штучну нейронну мережу (ANN) і адаптивну нейронечітку систему висновку (ANFIS), використовували для ефективного виявлення афлатоксину та афлатоксигенних грибів у насінні арахісу. Зображення насіння арахісу були отримані з використанням кількох джерел освітлення (світлодіодні, ультрафіолетові та флуоресцентні лампи) на двох фонах (чорному та білому) через 0, 48 та 72 години після інокуляції. Результати дослідження показують, що використання світлодіодного світла та білого фону разом із штучною нейронною мережею (ШНМ) дозволило досягти 99,7% точності визначення розвитку грибка на арахісі через 72 години. В іншому дослідженні чотири алгоритми МН (МОВ, багатошаровий перцептрон (MLP) і лінійний дискримінантний аналіз (LDA)) були використані для виявлення грибів (*A. flavus*, *A. niger*, *Penicillium* sp. і *Rhizopus* sp.) на насінні арахісу. Мультиспектральні зображення були використані для класифікації грибів, а алгоритми машинного навчання досягли виняткової точності в автономній ідентифікації здоров'я насіння (від 90 до 100%). МОВ і глибока згортова нейронна мережа (ГЗНМ) були використані для виявлення афлатоксину на арахісі за допомогою оптичних когерентних томографічних

зображень, демонструючи, що запропоновані методи можуть точно ідентифікувати арахіс, уражений цвіллю, з точністю близько 85% і 96% відповідно. Остання техніка ШІ, а саме алгоритм трансформатора, також ефективно ідентифікувала мікотоксини в арахісі.

Пшениця є важливою культурою для світової продовольчої безпеки. Однак ця культура піддається атаці різноманітних біотичних і абіотичних факторів стресу, що призводить до значного зниження врожайності та якості. Фузаріоз колоса (FHB), який здебільшого викликається *Fusarium graminearum* Schwabe, є одним із найпоширеніших і найруйнівніших грибкових захворювань пшениці. Використовуючи метод ГН, ШНМ ефективно передбачив інфекцію пшениці, використовуючи звичайні зображення камери RGB. Використовуючи архітектуру низької складності з оптимізацією гіперпараметрів, моделі досягли точності 97% у ідентифікації FHB у насінні та точності 99% (рис. 5). Інше дослідження продемонструвало ефективність глибокої згорткової нейронної мережі (ГЗНМ) з перенесенням навчання в оцінці FHB на пшениці [60]. Модель досягла середньої точності 0,92 на наборі даних тестування з використанням кольорових зображень (зняті камерою Canon EOS Rebel T6i, Нью-Йорк, Нью-Йорк, США). Також була доведена ефективність структури CNN у виявленні AFB1 у пшениці. Дані були зібрані за допомогою пристрою виявлення мікрохвиль, щоб перевірити ефективність моделі CNN. Якісний аналіз показав, що модель Fusion CNN досягла ідеальних результатів у 100% для точності, точності, запам'ятовування та оцінки F1 під час створення прогнозів. Пшеницю перевіряли на наявність дезоксиніваленолу, зеараленону, Т-2 токсину, НТ-2 токсину, фумонізинів, афлатоксинів і охратоксину за допомогою методу МН. Для проведення досліджень використовували дані про фенологію посівів і погоду, а також супутникові фотографії. Модель показала чудові результати з точки зору передбачень, з точністю внутрішньої та зовнішньої перевірки 99% і 90% відповідно. Щоб знайти швидкий, точний і недорогий спосіб ідентифікації зразків пшениці, забруднених дезоксиніваленолом, дослідники хотіли перевірити, чи може бути корисним електронний ніс (e-nose, біосенсор). Для збору зразків

використовувався портативний електронний ніс під назвою «AIR PEN 3» (Airsense Analytics GmbH, Шверин, Німеччина) з десятима датчиками оксиду металу для різних категорій легких хімічних речовин. Класифікація даних за допомогою техніки машинного навчання «дерева класифікації та регресії» (CART) досягла точності 83%. Кілька інших досліджень також показали ефективність моделей МН, ГН і трансформаторів у виявленні мікотоксинів у пшениці.

На завершення можна сказати, що застосування методів штучного інтелекту в харчовій промисловості для виявлення мікотоксинів відповідає значному прогресу в інспекції та безпеці харчових продуктів. Результати цього дослідження підкреслюють розширення використання методів штучного інтелекту (AI), таких як машинне навчання (МН) і глибоке навчання (ГН) для розпізнавання та кількісного визначення мікотоксинів у різних категоріях харчових продуктів. Кількість публікацій у цій галузі експоненціально зросла за останнє десятиліття, демонструючи зрілість досліджень і зростання інтересу. Протягом останнього десятиліття різні методи штучного інтелекту (ШІ), включаючи алгоритми машинного навчання, такі як машини опорних векторів (МОВ), штучні нейронні мережі (ШНМ) і глибокі згорткові нейронні мережі (ГЗНМ), змогли з високою точністю та ефективністю виявляти мікотоксини в багатьох видах сільськогосподарських культур, таких як арахіс, пшениця, кукурудза, рис і ячмінь. Деякі з цих мікотоксинів включають афлатоксини, дезоксиніваленол і фумонізину. Використання вдосконаленої гіперспектральної фотографії, електронних носіїв і біосенсорів у поєднанні з глибокими моделями штучного інтелекту значно покращило ефективність методів виявлення.

2.2.4. Біосенсори на основі алгоритмів штучного інтелекту для виявлення патогенних бактерій харчового походження

Виявлення харчових патогенів є критично важливим аспектом безпеки харчових продуктів, що вимагає швидких, точних та надійних методів виявлення. Хоча традиційні технології біосенсорики досягли значного прогресу, вони все ще стикаються з проблемами чутливості, точності та адаптивності, особливо у складних харчових матрицях. Інтеграція алгоритмів штучного інтелекту, зокрема методів машинного навчання та глибокого навчання, демонструє великі перспективи у подоланні цих проблем та значному покращенні продуктивності біосенсорів.

Стаття [50] детально досліджує інноваційний підхід до виявлення харчових патогенів за допомогою біосенсорів, посилених алгоритмами штучного інтелекту. Традиційні методи виявлення бактерій (наприклад, культивування або ПЛР) зазвичай вимагають 24-72 години, тоді як AI-асистовані біосенсори можуть скоротити цей час до 30-60 хвилин при межі виявлення 10-100 КУО/мл. Найбільш перспективними виявилися електрохімічні біосенсори, які у поєднанні з алгоритмами машинного навчання демонструють чутливість 85-95% і специфічність 90-98% для таких патогенів як *Salmonella* та *E. coli*.

Оптичні біосенсори, особливо ті, що використовують поверхневий плазмонний резонанс, показали вражаючі результати у виявленні *Listeria monocytogenes* з точністю до 97% при концентраціях від 1 КУО/мл. Глибоке навчання, зокрема згорткові нейронні мережі, значно покращує аналіз спектральних даних, зменшуючи кількість хибнопозитивних результатів до 2-5%. Однак ці технології все ще стикаються з проблемою високої вартості обладнання (від 10 000 до 50 000 доларів) та складністю обробки даних у реальних умовах.

Паперові мікрофлюїдні біосенсори з AI-аналітикою пропонують дешевшу альтернативу (вартість тесту 0.1-0.5 долара) з прийнятною точністю 80-88%. Вони особливо ефективні для виявлення *Staphylococcus aureus*, але їх чутливість різко знижується при концентраціях нижче 100 КУО/мл. Інтеграція зі смартфонами дозволяє здійснювати аналіз на місці з похибкою 10-15%, проте такі системи часто потребують додаткового калібрування для різних типів зразків.

Однією з найбільших переваг AI-біосенсорів є їхня здатність аналізувати складні харчові матриці. Наприклад, моделі на основі Random Forest досягають 92% точності при виявленні патогенів у молочних продуктах, незважаючи на високий вміст жирів. Проте їхня ефективність може знижуватись на 15-20% при аналізі м'ясних продуктів через високу концентрацію білків, що заважає сигналу.

Майбутній розвиток галузі пов'язаний із створенням мультиплексних систем, здатних одночасно виявляти 5-10 патогенів. Попередні дослідження показали, що комбінація масивів ДНК-сенсорів з AI може досягати селективності 95% для таких сумішей, але вартість аналізу при цьому зростає до 5-10 доларів за тест. Також перспективним є використання квантових точок для підвищення чутливості до 0.1-1 КУО/мл, хоча стабільність таких сенсорів поки обмежена 2-3 тижнями.

Головними недоліками AI-біосенсорів залишаються залежність від якості навчальних даних (потрібні тисячі маркованих зразків) та складність адаптації до нових штамів бактерій. Деякі моделі показують падіння точності на 20-30% при зустрічі з мутантними формами патогенів. Крім того, впровадження цих технологій у промислових масштабах вимагає значних інвестицій у обладнання та підготовку персоналу.

Незважаючи на обмеження, AI-біосенсори демонструють значний потенціал для революції у галузі харчової безпеки. Найближчі 5-10 років, ймовірно, принесуть зменшення вартості аналізу до 0.5-1 долара за тест і підвищення точності до 99% завдяки розвитку нових алгоритмів і матеріалів. Проте для досягнення цих цілей необхідно подолати технічні та регуляторні виклики, пов'язані з валідацією методів і стандартизацією процедур.

Висновок

У даній дипломній роботі було розглянуто використання штучного інтелекту в аналітичній хімії, що є перспективним напрямком у сучасній науці. Дослідження показало, що ШІ, маючи потужні можливості для обробки великих масивів даних, моделювання складних процесів та прогнозування результатів, стає незамінним інструментом у хімічному аналізі.

Перший розділ роботи був присвячений загальним аспектам штучного інтелекту, його історії, принципам функціонування та революційним розробкам у різних наукових галузях. Було встановлено, що, незважаючи на певні недоліки, такі як залежність від якості даних та складність інтерпретації результатів, ШІ активно впроваджується в наукові дослідження, включаючи біологію, медицину та хімію.

Другий розділ продемонстрував загальне використання в хімії та конкретні приклади застосування ШІ в аналітичній хімії. Використання штучних нейронних мереж у спектроскопії, а також у хроматографії набуло широкого застосування, завдяки машинному навчанню, для прогнозування критичної концентрації міцел, розробці газових сенсорів із залученням глибокого та машинного навчання, а

також автоматизація виявлення мікотоксинів та патогенних бактерій у харчових продуктах підтверджують застосування методів за використання ШІ у підвищенні точності, швидкості та ефективності хімічного аналізу.

Отже, інтеграція штучного інтелекту в аналітичну хімію відкриває нові можливості для наукових досліджень, дозволяючи автоматизувати рутинні процеси, оптимізувати експерименти та отримувати більш надійні результати. Майбутнє цього напрямку пов'язане з подальшим вдосконаленням алгоритмів, розширенням спектру застосувань та подоланням існуючих обмежень, що робить ШІ ключовим інструментом у розвитку сучасної хімічної науки.

Summary

This thesis considered the use of artificial intelligence in analytical chemistry, which is a promising direction in modern science. The study showed that AI, having powerful capabilities for processing large data sets, modeling complex processes and predicting results, is becoming an indispensable tool in chemical analysis.

The first section of the work was devoted to the general aspects of artificial intelligence, its history, principles of operation and revolutionary developments in various scientific fields. It was found that, despite certain shortcomings, such as dependence on data quality and the complexity of interpreting results, AI is actively being implemented in scientific research, including biology, medicine and chemistry.

The second section demonstrated the general use in chemistry and specific examples of the application of AI in analytical chemistry. The use of artificial neural networks in spectroscopy, as well as in chromatography, has become widely used, thanks to machine learning, to predict the critical concentration of micelles, the development of gas sensors using deep and machine learning, as well as the automation of mycotoxin and pathogenic bacterias detection in food products confirm the

application of methods using AI in increasing the accuracy, speed and efficiency of chemical analysis.

Thus, the integration of artificial intelligence into analytical chemistry opens up new opportunities for scientific research, allowing to automate routine processes, optimize experiments and obtain more reliable results. The future of this direction is associated with further improvement of algorithms, expanding the range of applications and overcoming existing limitations, which makes AI a key tool in the development of modern chemical science.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Russell, S., & Norvig, P. Artificial Intelligence: A modern approach (4th ed.). Pearson. 2020.
2. Sheikh, H., Prins, C., Schrijvers, E. Artificial Intelligence: Definition and Background. In: Mission AI. Research for Policy. Springer, Cham. 2023.
3. Nilsson, N. The Quest for Artificial Intelligence. Cambridge University Press. 2009.
4. High-Level Expert Group on Artificial Intelligence. A definition of AI: Main capabilities and scientific disciplines. European Commission. 2019.
5. Moravec, H. Mind Children: The future of robot and human intelligence. Harvard University Press. 1988.
6. Dijksterhuis, Eduard Jan. The Mechanization of the World Picture. Science and Society 35 (2):232-238. 1961.
7. von Neumann, J. The Computer and the Brain. Yale University Press. 2012 [1958].

8. Freeman, C., & Louçã, F. *As time Goes By: From the industrial revolutions to the information revolution*. Oxford University Press. 2001.
9. Wiener. *Cybernetics: Or control and communication in the animal and the machine*. MIT Press. 2019 [1965].
10. Bostrom, N. *Superintelligence: Paths, Dangers, Strategies*. Oxford University Press. 2016.
11. T. Lalwani, S. Bhalotia, A. Pal, V. Rathod and S. Bisen. "Implementation of a chatbot system using AI and NLP", *Int. J. Innov. Res. Comput. Sci. Technol. (IJIRCST)*, vol. 6, no. 3, pp. 26-30, 2018.
12. Albuhairey, M. M. *DeepSeek vs. ChatGPT: Comparative Efficacy in Reasoning for Adults' Second Language Acquisition Analysis Introduction: 44, 865–883, 2025.*
13. Noguera, M. *The Mathematics of DeepSeek-R1: Theoretical Foundations and Comparative Analysis. 1–8, 2025.*
14. Krause, D. *DeepSeek and FinTech: The Democratization of AI and Its Global Implications. 1–16, 2025.*
15. "AlphaFold". Deepmind. Archived from the original on 19 January 2021. Retrieved 30 November 2020.
16. "DeepMind's protein-folding AI has solved a 50-year-old grand challenge of biology". MIT Technology Review. Archived from the original on 2021-08-28. Retrieved 2020-11-30.
17. Jumper, J., Evans, R., Pritzel, A. et al. Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold. *Nature* 596, 583–589 (2021).
18. Stephen Curry, No, DeepMind has not solved protein folding Archived 2022-07-29 at the Wayback Machine, Reciprocal Space (blog), 2 December 2020

19. "AlphaFold 3 predicts the structure and interactions of all of life's molecules". Google. 2024-05-08. Archived from the original on 2024-05-09. Retrieved 2024-05-09.
20. "Beyond AlphaFold 3: Navigating Future Challenges in Protein Structure Prediction". 2024-05-10. Retrieved 2024-11-29.
21. "Press release: The Nobel Prize in Chemistry 2024". The Royal Swedish Academy of Sciences. 9 October 2024. Retrieved 29 November 2024.
22. Kacena, M.A., Plotkin, L.I. & Fehrenbacher, J.C. The Use of Artificial Intelligence in Writing Scientific Review Articles. *Curr Osteoporos Rep* 22, 115–121 (2024).
23. Varol D. AI in pharma: innovations and challenges, Scilife. Scilife, (accessed 18 February 2025).
24. Rudroff, T. Artificial Intelligence as a Replacement for Animal Experiments in Neurology: Potential, Progress, and Challenges. *Neurol. Int.* 2024, 16, 805-820.
25. Roelfsema, P.R.; Treue, S. Basic neuroscience research with nonhuman primates: A small but indispensable component of biomedical research. *Neuron* 2014, 82, 1200–1204.
26. Elias, J. E., Gibbons, F. D., King, O. D., Roth, F. P., and Gygi, S. P. Intensity-based protein identification by machine learning from a library of tandem mass spectra. *Nature biotechnology*, 22(2):214–219, 2004.
27. Goldman, S., Bradshaw, J., Xin, J., and Coley, C. Prefix-tree decoding for predicting mass spectra from molecules. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 36:48548–48572, 2023.
28. Alberts, M., Zipoli, F., and Vaucher, A. C. Learning the language of nmr: Structure elucidation from nmr spectra using transformer models. 2023.
29. Alberts, M., Laino, T., and Vaucher, A. C. Leveraging infrared spectroscopy for automated structure elucidation. *Communications Chemistry*, 7(1):268, 2024.

30. Shukla, Ashutosh Kumar, *Artificial Intelligence and Spectroscopic Techniques for Gemology Applications*, IOP Publishing, 2022.
31. Reichmuth AM, Kübrich K, Blickenstorfer Y, Frutiger A, Momotenko D, Gatterdam V, Treindl F, Fattinger C, Vörös J. Investigating Complex Samples with Molograms of Low-Affinity Binders. *ACS Sens.* 2021.
32. Pei C, Liu C, Wang Y, Cheng D, Li R, Shu W, Zhang C, Hu W, Jin A, Yang Y, Wan J. FeOOH@Metal-Organic Framework Core-Satellite Nanocomposites for the Serum Metabolic Fingerprinting of Gynecological Cancers. *Angew Chem Int Ed Engl.* 59(27):10831-10835, 2020
33. Li R, Zhou Y, Liu C, Pei C, Shu W, Zhang C, Liu L, Zhou L, Wan J. Design of Multi-Shelled Hollow Cr₂O₃ Spheres for Metabolic Fingerprinting. *Angew Chem Int Ed Engl.* 60(22):12504-12512, 2021
34. Chen, Xiaonan & Shu, Weikang & Zhao, Liang & Wan, Jingjing. Advanced mass spectrometric and spectroscopic methods coupled with machine learning for in vitro diagnosis. *VIEW.* 4. 20220038. 2023.
35. Guo, K., Shen, Y., Gonzalez-Montiel, G. A., Huang, Y., Zhou, Y., Surve, M., Zhang, X. *Artificial Intelligence in Spectroscopy: Advancing Chemistry from Prediction to Generation and Beyond.* arXiv preprint arXiv:2502.09897, 2025.
36. RIAL, Rafael Cardoso. AI in analytical chemistry: Advancements, challenges, and future directions. *Talanta*, 2024, 125949.
37. Kilz P. Two-Dimensional Chromatography as an Essential Means for Understanding Macromolecular Structure. *Chromatographia.* 2004; 59(1): 3-14.
38. Huygens B, Efthymiadis K, Nowé A, Desmet G. Application of evolutionary algorithms to optimise one-and two-dimensional gradient chromatographic separations. *J Chromatogr A.* 2020; 1628:461435.

39. Keulen, Daphne, et al. Recent advances to accelerate purification process development: A review with a focus on vaccines. *Journal of Chromatography A*, 2022, 1676: 463195.
40. Peichang, Lu; Xiaoming, Lu. Development of a high-performance liquid chromatograph with artificial intelligence. *Journal of Chromatography A*, 1984, 292.1: 169-188.
41. Singh, Yash Raj, et al. Advances in AI-Driven retention prediction for different chromatographic techniques: unraveling the complexity. *Critical Reviews in Analytical Chemistry*, 2024, 54.8: 3559-3569.
42. Mishra P, Biancolillo A, Roger JM, Marini F, Rutledge DN. New data preprocessing trends based on ensemble of multiple preprocessing techniques. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*. 2020 Nov 1;132:116045.
43. Torniainen J, Afara IO, Prakash M, Sarin JK, Stenroth L, Töyräs J. Open-source python module for automated preprocessing of near infrared spectroscopic data. *Analytica Chimica Acta*. 2020 Apr 29;1108:1-9.
44. Yuan Y, Demers H, Brodusch N, Wang X, Gauvin R. Inverse modeling for quantitative x-ray microanalysis applied to 2d heterogeneous materials. *Ultramicroscopy*. 2020 Dec 1;219:113117.
45. Yuan Y, Demers H, Brodusch N, Wang X, Gauvin R. Inverse modeling for quantitative x-ray microanalysis applied to 2d heterogeneous materials. *Ultramicroscopy*. 2020 Dec 1;219:113117.
46. Hong S, Qin S, Dong P, Li G, Zhang Y, Xing F, Dong B. Quantification of rust penetration profile in reinforced concrete deduced by inverse modeling. *Cement and Concrete Composites*. 2020 Aug 1;111:103622.
47. Soria-lopez, Anton, et al. Ionic surfactants critical micelle concentration prediction in water/organic solvent mixtures by artificial neural network. *Tenside Surfactants Detergents*, 2024, 61.6: 519-529.

48. Yaqoob, Usman; Younis, Mohammad I. Chemical gas sensors: Recent developments, challenges, and the potential of machine learning—A review. *Sensors*, 2021, 21.8: 2877.
49. Aggarwal, Ashish, et al. Detection of mycotoxin contamination in foods using artificial intelligence: A review. *Foods*, 2024, 13.20: 3339.
50. Deng, Zhuowen, et al. Artificial intelligence algorithms-assisted biosensors in the detection of foodborne pathogenic bacteria: Recent advances and future trends. *Trends in Food Science & Technology* 2025: 105072.