



دانشجویان علوم پایه ایران 4th International Conference of Iranian Basic Science Students

هوش مصنوعی در شیمی تجزیه: دگرگونی تحلیل داده‌ها، چالش‌ها و چشم‌اندازهای آینده

مهرشید نوروزی زرمهری^{۱,*}

۱- دانشجوی شیمی تجزیه دانشگاه تهران - تهران - ایران

Mehrshid.norouzi.zar@gmail.com

خلاصه

هوش مصنوعی و به‌طور خاص، فناوری‌هایی مانند یادگیری ماشین و شبکه‌های عصبی، اساساً نحوه تحلیل داده‌های پیچیده و ایجاد روش‌های تحلیلی جدید را متحول کرده‌اند. هسته اصلی این دگرگونی، توانایی هوش مصنوعی در پردازش و درک حجم عظیمی از داده است که قبلاً یک مانع بزرگ به حساب می‌آمد. اتوماسیون تحلیل داده‌ها به وسیله هوش مصنوعی، نه تنها سرعت کار را به شکل چشمگیری بالا برده، بلکه باعث دقیق‌تر و قابل اعتمادتر شدن نتایج نیز شده است. یکی از قابلیت‌های کلیدی هوش مصنوعی، استخراج سریع و مؤثر اطلاعات از داده‌های درهم و پیچیده است؛ برای مثال، می‌تواند به سرعت طیف‌های سخت را در طیف‌سنجی تفسیر کرده و مواد تشکیل‌دهنده یک ترکیب را شناسایی کند. با این وجود، استفاده از هوش مصنوعی در شیمی تجزیه بدون چالش نیست. مشکلاتی مانند غیرقابل درک بودن عملکرد برخی مدل‌ها (پدیده جعبه سیاه) و نیاز به داده‌های آموزشی حجیم و باکیفیت، از موانع اصلی در این مسیر محسوب می‌شوند. این مقاله، به طور مروری پیشرفت‌ها، مشکلات و آینده این حوزه را بررسی می‌کند.

کلمات کلیدی: هوش مصنوعی در شیمی تجزیه، یادگیری ماشین، طیف‌سنجی، کروماتوگرافی، تحلیل داده، جعبه سیاه

مقدمه

در چند سال گذشته تا الان، شاهد ظهور یک پدیده جدید در علم بوده‌ایم: هوش مصنوعی (AI)[†]. این فناوری اکنون به شیمی تجزیه و علوم دیگر، راه یافته و نحوه رویکرد به تحلیل داده‌های پیچیده و توسعه روش‌های تحلیلی جدید را دگرگون ساخته است. هسته این تحول، توانایی هوش مصنوعی، به ویژه از طریق تکنیک‌های یادگیری ماشین (ML)[‡] و شبکه‌های عصبی، در تفسیر حجم عظیمی از داده است؛ چالشی که همواره در شیمی تجزیه وجود داشته است. اتوماسیون تحلیل‌های داده نه تنها کارایی را به طور تصاعدی افزایش می‌دهد، بلکه دقت و قابلیت اطمینان نتایج را نیز بهبود می‌بخشد [۱]. فراتر از تحلیل، هوش مصنوعی با بهینه‌سازی روش‌های تجربی، نوآوری در این زمینه را به طور قابل توجهی تسریع می‌کند [۲].

[†] artificial general intelligence

[‡] Machine learning



دانشجویان علوم پایه ایران 4th International Conference of Iranian Basic Science Students

یکی از نقاط عطف هوش مصنوعی، مدیریت داده‌های ناهمگن و پیچیده است. در گذشته، تحلیل چنین داده‌هایی نیازمند تخصص گسترده و صرف زمان قابل توجهی بود. اما امروزه، الگوریتم‌های هوش مصنوعی قادرند اطلاعات مرتبط را به سرعت و با کارایی بالا استخراج کنند [۳]. برای نمونه، در حوزه طیف‌سنجی، از هوش مصنوعی برای تفسیر طیف‌های پیچیده استفاده می‌شود که پیشرفت شگرفی در شناسایی ترکیبات محسوب می‌شود [۴]. با این حال، این ادغام با چالش‌هایی نیز همراه است. مسائل مربوط به تفسیر مدل‌های هوش مصنوعی (معمولاً به عنوان جعبه سیاه شناخته می‌شوند)، نیاز به مجموعه داده‌های بزرگ برای آموزش و ادغام داده‌ها از منابع متنوع، از جمله موانعی هستند که باید بر آنها غلبه کرد [۵]. این مقاله با نگاهی جامع و مروری به بررسی پیشرفت‌ها، چالش‌ها و چشم‌اندازهای آینده این همگرایی قدرتمند می‌پردازد.

۱. هوش مصنوعی و کمومتریکس*

برای درک عمیق‌تر نقش هوش مصنوعی، تمایز و ارتباط بین مفاهیم کلیدی ضروری است:

هوش مصنوعی (AI): این مفهوم فراگیر به شاخه‌ای از علوم کامپیوتر اشاره دارد که هدف آن ایجاد سیستم‌هایی است capable of انجام وظایفی که معمولاً به هوش انسانی نیاز دارند، از جمله استدلال، یادگیری و ادراک. در شیمی تجزیه، هوش مصنوعی می‌تواند برای اتوماسیون فرآیندهای تفسیر داده، بهینه‌سازی آزمایش‌ها و حتی کنترل ابزارهای تحلیلی به کار رود [۶].

یادگیری ماشین (ML): به عنوان زیرمجموعه‌ای از هوش مصنوعی، بر توسعه الگوریتم‌هایی متمرکز است که می‌توانند از داده‌ها بیاموزند و عملکرد خود را بدون برنامه‌ریزی صریح برای هر کار بهبود بخشند. یادگیری ماشین اغلب برای تحلیل مجموعه داده‌های بزرگ در شیمی تجزیه، مانند داده‌های طیف‌سنجی یا کروماتوگرافی، برای شناسایی الگوها و پیش‌بینی خواص استفاده می‌شود [۷].

یادگیری عمیق (DL): این زیرشاخه از یادگیری ماشین مبتنی بر شبکه‌های عصبی مصنوعی با چندین لایه است. این شبکه‌ها می‌توانند بازنمایی‌های سطح بالای داده را از طریق یک ساختار سلسله‌مراتبی یاد بگیرند که برای مدیریت داده‌های بسیار پیچیده و حجیم مانند تصاویر، صدا و متن ایده‌آل است. در شیمی تجزیه، حد تشخیص برای بازگشایی طیف‌های پیچیده و تفسیر داده‌های تصویری به کار رفته است [۸].

کمومتری (Chemometrics): این علم، که پیش از هوش مصنوعی رایج شد، با استفاده از روش‌های ریاضی و آماری به استخراج اطلاعات از داده‌های شیمیایی می‌پردازد. از آن به طور گسترده برای طراحی آزمایش، بهینه‌سازی فرآیند و اعتبارسنجی روش استفاده می‌شود و شامل تکنیک‌هایی مانند تحلیل رگرسیون، تحلیل مؤلفه‌های اصلی (PCA) و تحلیل خوشه‌ای است [۹، ۱۰].

رابطه بین این مفاهیم کلیدی است. هوش مصنوعی به طور طبیعی الگوریتم‌های پیشرفته‌ای را ارائه می‌دهد که می‌توانند از داده‌ها یاد بگیرند و با تجربه بهبود یابند. در حالی که کمومتری بر مدل‌های آماری قابل تفسیر مبتنی بر فرضیات واضح متمرکز است، هوش مصنوعی و یادگیری ماشین می‌توانند مدل‌های پیچیده‌تر و غیرخطی را که تفسیر آنها دشوارتر است،

* Chemometrics

† Principal component analysis



دانشجویان علوم پایه ایران 4th International Conference of Iranian Basic Science Students

مدیریت کنند [۱۱]. آینده کمومتری در شیمی تجزیه احتمالاً با یک رویکرد ترکیبی مشخص خواهد شد. هوش مصنوعی و DL در کنار کمومتری استفاده خواهند شد و هر کدام محدودیت‌های دیگری را جبران خواهند کرد. برای مثال، کمومتری می‌تواند روش‌های پایدار شده برای اعتبارسنجی مدل را ارائه دهد، در حالی که هوش مصنوعی می‌تواند بینش‌های جدیدی از داده‌های بسیار پیچیده استخراج کند [۱۲، ۱۳].

۲. طیف‌سنجی نوین (ارتقای کیفی با هوش مصنوعی)

کاربرد هوش مصنوعی در تفسیر داده‌های طیف‌سنجی به دلیل توانایی آن در استخراج اطلاعات معنادار از مجموعه داده‌های پیچیده، به سرعت در حال گسترش است. طیف‌سنجی، که به اندازه‌گیری و تفسیر برهمکنش بین ماده و تابش الکترومغناطیسی می‌پردازد، حجم عظیمی از داده تولید می‌کند که تحلیل دستی آن اغلب چالش‌برانگیز و زمان‌بر است. در اینجا، هوش مصنوعی به عنوان یک متحد قدرتمند ظاهر شده است.

- طیف‌سنجی مرئی-فرابنفش (UV-Vis): در این تکنیک نسبتاً ساده، هوش مصنوعی دقت را به سطح جدیدی می‌رساند. از روش‌هایی مانند یادگیری ماشین و DL برای دستیابی به دقت بالا در شناسایی و تحلیل‌های کمی، از جمله تشخیص ترکیبات در غلظت‌های بسیار کم استفاده می‌شود. مزایای شامل تحلیل سریع‌تر، حساسیت بالا و داده‌های قابل اطمینان است. برای مثال، از هوش مصنوعی برای کنترل کیفیت فرمالدهید در محصولات صنعتی [۱۴] و پایش آمونیاک در نمونه‌های آب محیطی [۱۵] استفاده شده است.
- طیف‌سنجی مادون قرمز (IR): هوش مصنوعی امکان تحلیل طیفی دقیق‌تر، تشخیص دقیق ترکیبات و شناسایی سریع مواد ناشناخته را فراهم می‌کند. این امر منجر به تفسیر بهبودیافته، تحلیل کارآمد و شناسایی ترکیباتی می‌شود که ممکن است با روش‌های سنتی به راحتی تشخیص داده نشوند. کاربردهای قابل توجه شامل تشخیص ردپای نفت از راه دور در خاک [۱۶] و تمایز پودرهای تمشک بر اساس ترکیب شیمیایی آنها [۱۷] است.
- طیف‌سنجی رزونانس مغناطیسی هسته‌ای (NMR): این تکنیک قدرتمند برای تعیین ساختار مولکولی، به طور سنتی نیازمند تخصص و زمان قابل توجهی برای تفسیر است. هوش مصنوعی با خودکارسازی تخصیص رزونانس، تحلیل ساختاری دقیق و تفسیر طیف‌های پیچیده، انقلابی در این حوزه ایجاد کرده است. نتیجه، تحلیل‌های سریع‌تر، دقت بیشتر و داده‌های جزئی‌تر است. برای نمونه، از هوش مصنوعی برای تحلیل خودکار پروتئین‌ها [۱۸] و کمی‌سازی متابولیت‌های مغز انسان در مطالعات پزشکی [۱۹] استفاده شده است.
- طیف‌سنجی جرمی (Mass Spectrometry): در این تکنیک، هوش مصنوعی برای شناسایی دقیق جرم، تحلیل کمی دقیق و تشخیص حساس ترکیبات به کار می‌رود. مزایای آن شامل تحلیل سریع نمونه، دقت بالا و شناسایی ترکیبات ناشناخته در مخلوط‌های پیچیده است. این قابلیت در زمینه‌های مختلفی از جمله تشخیص داروها در نمونه‌های خون [۲۰] و شناسایی و طبقه‌بندی سریع و عینی سرطان بر اساس پروفایل‌های متابولیتی است [۲۱].
- یکی دیگر از پیشرفت‌های عمده هوش مصنوعی، کاربرد آن در طیف‌سنجی فلورسانس است. الگوریتم‌های یادگیری ماشین برای بازگشایی سیگنال‌های فلورسانس از چندین فلوروفور استفاده شده‌اند، کاری که به دلیل همپوشانی طیف‌ها، همواره چالش‌برانگیز بوده است [۲۲].



دانشجویان علوم پایه ایران 4th International Conference of Iranian Basic Science Students

- به طور مشابه، تکنیک‌های پیشرفته‌تری مانند طیف‌سنجی فوتوالکترون اشعه ایکس (XPS) و طیف‌سنجی اتلاف انرژی الکترون (EELS) که برای تحلیل سطوح و nanostructures crucial هستند، از ادغام هوش مصنوعی بهره برده‌اند. الگوریتم‌های هوش مصنوعی برای استخراج اطلاعات دقیق در مورد ترکیب شیمیایی و ساختارهای الکترونی مواد از داده‌های طیف‌سنجی به کار رفته‌اند [۲۳]. حتی پراش اشعه ایکس (X-ray Diffraction)، روشی بنیادی برای تعیین ساختارهای کریستالی، متحول شده است. تکنیک‌های یادگیری ماشین برای تحلیل الگوهای پراش به کار رفته‌اند که امکان شناسایی سریع فازهای کریستالی و تحلیل ساختارهای مواد پیچیده را فراهم می‌کند [۲۴].

۳. بهینه‌سازی و تحلیل در کروماتوگرافی

ادغام هوش مصنوعی در تکنیک‌های کروماتوگرافی پیشرفت قابل توجهی در تحلیل شیمیایی و بیوشیمیایی محسوب می‌شود. یکی از اصلی‌ترین کاربردهای هوش مصنوعی در این حوزه، تفسیر داده و تحلیل است.

- کروماتوگرافی گازی (GC): هوش مصنوعی به ویژه در تفسیر داده‌های پیچیده، مانند داده‌های حاصل از کروماتوگرافی گازی-طیف‌سنجی جرمی (GC-MS) مفید است. الگوریتم‌های یادگیری ماشین برای شناسایی الگو در کروماتوگرام‌ها به کار می‌روند و در شناسایی پیک و کمی‌سازی اجزا کمک می‌کنند. این امر منجر به شناسایی سریع‌تر و دقیق‌تر ترکیبات در مخلوط‌های پیچیده می‌شود [۲۵]. از هوش مصنوعی برای طبقه‌بندی اجزای پیرولیز [۲۵] و پیش‌بینی کیفیت بنزین [۲۵] استفاده شده است.
- کروماتوگرافی مایع با کارایی بالا (HPLC): هوش مصنوعی، اتوماسیون انتخاب فاز متحرک و ثابت و بهینه‌سازی گرادیان شویش برای به حداکثر رساندن کارایی جداسازی را ممکن می‌سازد. علاوه بر این، با استفاده از شبکه‌های عصبی و الگوریتم‌های یادگیری عمیق، هوش مصنوعی می‌تواند در تفسیر الگوهای پیچیده در داده‌های کروماتوگرافی کمک کند و دقت را در شناسایی پیک و کمی‌سازی آنالیت افزایش دهد [۲۵]. برای مثال، از هوش مصنوعی برای پیش‌بینی زمان‌های بازداری* بر اساس ترکیب فاز متحرک استفاده شده است [۲۵].

کاربرد دیگر هوش مصنوعی در کروماتوگرافی، بهینه‌سازی روش و فرآیند است. الگوریتم‌های هوش مصنوعی می‌توانند بهترین شرایط کروماتوگرافی برای جداسازی ترکیبات خاص، مانند انتخاب ایده‌آل فاز متحرک و پارامترهای دمایی را پیش‌بینی کنند. این امر نه تنها زمان و منابع را با کاهش آزمایش‌های سعی و خطا ذخیره می‌کند، بلکه کارایی و تکرارپذیری تحلیل‌های کروماتوگرافی را افزایش می‌دهد [۲۵]. هوش مصنوعی همچنین در توسعه روش‌های کروماتوگرافی جدید، از جمله ایجاد سیستم‌های کروماتوگرافی ترکیبی که در آن هوش مصنوعی مستقیماً در دستگاه برای کنترل خودکار فرآیند جداسازی و تنظیم پارامترها در زمان واقعی (real-time) برای بهینه‌سازی عملکرد ادغام شده است، استفاده می‌شود.

* retention times



دانشجویان علوم پایه ایران 4th International Conference of Iranian Basic Science Students

۴. نمونه‌هایی کاربردی یادگیری ماشینی در شیمی تجزیه

کاربرد الگوریتم‌های یادگیری ماشین در شیمی تجزیه فراتر از تکنیک‌های خاص، طیف وسیعی از موارد استفاده مهم را در بر می‌گیرد:

- طبقه‌بندی نمونه (Sample Classification): در این زمینه، از یادگیری ماشین برای دسته‌بندی نمونه‌های شیمیایی در گروه‌های مجزا بر اساس ویژگی‌های آن‌ها استفاده می‌شود. این امر به ویژه در تحقیقات زیست‌پزشکی برای تشخیص بیماری‌ها [۲۱] یا در مطالعات محیطی برای پایش کیفیت آب یا هوا [۲۵] بسیار مفید است. یادگیری ماشین می‌تواند الگوهای پنهان در داده‌های پیچیده را که برای چشم انسان قابل تشخیص نیستند، شناسایی کند.
- پیش‌بینی خواص (Property Prediction): از الگوریتم‌های یادگیری ماشین برای پیش‌بینی خواص فیزیکی، شیمیایی یا بیولوژیکی ترکیبات استفاده می‌شود. این کاربرد به ویژه در صنعت داروسازی بسیار ارزشمند است، جایی که می‌تواند فعالیت بیولوژیکی داروهای جدید یا حلالیت ترکیبات را پیش‌بینی کند؛ فاکتورهایی که برای توسعه فرمولاسیون‌های دارویی موثر هستند. این امر روند کشف دارو را به طور قابل توجهی تسریع می‌کند [۲۵].
- تشخیص ناهنجاری (Anomaly Detection): تشخیص الگوهای غیرعادی برای اطمینان از کیفیت و ایمنی در فرآیندهای شیمیایی ضروری است. یادگیری ماشین به طور قابل توجهی در فرآیندهای تولید، به ویژه برای شناسایی انحرافات، ناخالصی‌ها و خطاها در داده‌های تجربی به کار رفته است. برای مثال، از شبکه‌های عصبی برای شناسایی خودکار ناخالصی‌ها در تصاویر تجربی به دست آمده از میکروسکوپ تونل‌زنی روبشی (STM) استفاده شده است [۲۵]. این رویکرد، دقت و سرعت کنترل کیفیت در مقیاس نانو را افزایش می‌دهد.

۵. افق و چالش‌های پیش رو

۱) چالش‌ها

علیرغم پتانسیل زیاد، پیاده‌سازی هوش مصنوعی در شیمی تجزیه با چالش‌های متعددی روبرو است که برای بهره‌برداری مؤثر از این فناوری باید مورد توجه قرار گیرند.



دانشجویان علوم پایه ایران 4th International Conference of Iranian Basic Science Students

- تفسیرپذیری مدل‌های هوش مصنوعی*: این شاید بزرگترین چالش باشد. بسیاری از مدل‌های پیشرفته هوش مصنوعی، به ویژه مدل‌های یادگیری عمیق، به عنوان جعبه سیاه در نظر گرفته می‌شوند، به این معنی که فرآیند تصمیم‌گیری آن‌ها برای کاربران انسانی قابل درک نیست. این امر می‌تواند اعتماد به نتایج را کاهش دهد و پذیرش آن را در بین شیمی‌دانان، که نیاز به درک چرایی یک نتیجه دارند، با مشکل مواجه کند. توسعه مدل‌های هوش مصنوعی توضیح‌پذیر می‌تواند گزینه مناسبی باشد.
 - مدیریت حجم عظیم داده (Managing Large Volumes of Data): آموزش مدل‌های هوش مصنوعی قدرتمند و قابل اعتماد به مجموعه‌داده‌های بسیار بزرگ، باکیفیت و برچسب‌گذاری شده نیاز دارد. ذخیره‌سازی، پردازش و مدیریت این داده‌ها یک چالش زیرساختی و محاسباتی بزرگ است.
 - کیفیت و صحت داده (Data Quality and Trust): صحت و قابلیت اطمینان داده‌های مورد استفاده برای آموزش مدل، برای اطمینان از خروجی قابل اعتماد ضروری است. اجرای روش‌های اعتبارسنجی قوی برای تضمین کیفیت داده ضروری است.
- در کنار همه مواردی که گفته شد حتما نظارت انسان می‌تواند در کاهش این چالش‌ها کمک کننده باشد. در ادامه به آینده هوش مصنوعی در شیمی اشاره شده است.

۲) افق‌های جدید برای شیمی تجزیه

- پیش‌بینی‌ها در مورد توسعه آینده هوش مصنوعی و تأثیر آن بر شیمی تجزیه وسیع و امیدوارکننده است. انتظار می‌رود که هوش مصنوعی نحوه انجام آزمایش‌ها، تحلیل داده‌ها و توسعه مواد جدید توسط شیمی‌دانان را متحول کند.
- افزایش دقت و سرعت: استفاده از الگوریتم‌های پیشرفته‌تر و یادگیری ماشین به طور قابل توجهی دقت و سرعت تحلیل‌های شیمیایی را افزایش خواهد داد و منجر به کشف‌های سریع‌تر و نوآورانه‌تر در شناسایی ترکیبات و درک واکنش‌های پیچیده خواهد شد.
 - ادغام عمیق‌تر با تکنیک‌های تحلیلی: هوش مصنوعی به طور فزاینده‌ای در درون تکنیک‌هایی مانند کروماتوگرافی و طیف‌سنجی برای بهبود تفسیر داده‌های پیچیده و شناسایی الگوهای غیرقابل تشخیص به صورت دستی جاسازی خواهد شد.
 - توسعه حسگرهای هوشمند و سیستم‌های جمع‌آوری داده خودکار: این فناوری‌ها، که توسط هوش مصنوعی تقویت می‌شوند، پایش پیوسته نمونه‌ها در تحلیل محیطی و زیست‌پزشکی را متحول خواهند کرد. تصور کنید شبکه‌ای از سنسورها که به طور مداوم کیفیت آب یک رودخانه را پایش کرده و آلودگی را بلافاصله شناسایی و گزارش می‌کنند.

نتیجه‌گیری

* Interpretability



دانشجویان علوم پایه ایران 4th International Conference of Iranian Basic Science Students

هوش مصنوعی در شیمی تجزیه به دستیار تبدیل خواهد شد که قابلیت‌های انسانی در تفسیر داده و نوآوری روش‌شناختی را پشت سر می‌گذارد. این انقلاب دیجیتال در شیمی تجزیه وعده عصری جدید از کارایی، دقت و بینش را می‌دهد که توسط یادگیری ماشین و شبکه‌های عصبی از حل پیچیدگی مجموعه داده‌هایی که قبلاً غیرقابل تفسیر بودند، هدایت می‌شود. از طیف‌های پیچیده تا کروماتوگرام‌های مبهم، هوش مصنوعی در حال تبدیل سیگنال‌های خام به اطلاعات شیمیایی معنادار با سرعتی بی‌سابقه است. با این حال، این مسیر به سوی ادغام کامل هوش مصنوعی، چالش‌های قابل توجهی را به همراه دارد. تفسیرپذیری مدل‌های هوش مصنوعی، اخلاقیات در مدیریت داده، امنیت سایبری و نیاز به داده‌های باکیفیت و حجیم، مسائل بحرانی هستند که نیاز به توجه مستمر دارند. برای آینده، ضروری است که توسعه و کاربرد هوش مصنوعی در شیمی تجزیه توسط یک چارچوب اخلاقی و نظارتی سختگیرانه هدایت شود. امید است این پژوهش گامی موثر در شناخت و کاربرد هوش مصنوعی در حوزه شیمی تجزیه برداشته باشد.

مراجع

1. Xu, Y., Liu, X., Cao, X., Huang, C., Liu, E., Qian, S., ... & Zhang, J. (2021). Artificial intelligence: A powerful paradigm for scientific research. *The Innovation*, 2(4).
2. Houhou, R., & Bocklitz, T. (2021). Trends in artificial intelligence, machine learning, and chemometrics applied to chemical data. *Analytical Science Advances*, 2(3-4), 128-141.
3. Himeur, Y., Elnour, M., Fadli, F., Meskin, N., Petri, I., Rezgui, Y., ... & Amira, A. (2023). AI-big data analytics for building automation and management systems: a survey, actual challenges and future perspectives. *Artificial intelligence review*, 56(6), 4929-5021.
4. Zhang, Z., Zhao, Y., Liao, X., Shi, W., Li, K., Zou, Q., & Peng, S. (2019). *Deep learning in omics: a survey and guideline*. *Brief Funct Genomics* 18: 41–57.
5. Lussier, F., Thibault, V., Charron, B., Wallace, G. Q., & Masson, J. F. (2020). Deep learning and artificial intelligence methods for Raman and surface-enhanced Raman scattering. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, 124, 115796.
6. Wang, H., Fu, T., Du, Y., Gao, W., Huang, K., Liu, Z., ... & Zitnik, M. (2023). Scientific discovery in the age of artificial intelligence. *Nature*, 620(7972), 47-60.
7. Russell, S., Norvig, P., & Intelligence, A. (1995). A modern approach. *Artificial Intelligence*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 25(27), 79-80.
8. Jordan, M. I., & Mitchell, T. M. (2015). Machine learning: Trends, perspectives, and prospects. *Science*, 349(6245), 255-260.
9. LeCun, Y., Bengio, Y., & Hinton, G. (2015). Deep learning. *nature*, 521(7553), 436-444.
10. Lavine, B., & Workman, J. (2008). Chemometrics. *Analytical chemistry*, 80(12), 4519-4531.
11. Joshi, P. B. (2023). Navigating with chemometrics and machine learning in chemistry. *Artificial Intelligence Review*, 56(9), 9089-9114.
12. Brereton, R. G., Jansen, J., Lopes, J., Marini, F., Pomerantsev, A., Rodionova, O., ... & Tauler, R. (2018). Chemometrics in analytical chemistry—part II: modeling, validation, and applications. *Analytical and bioanalytical chemistry*, 410(26), 6691-6704.



دانشجویان علوم پایه ایران 4th International Conference of Iranian Basic Science Students

13. Kırboğa, K. K., Abbasi, S., & Küçüksille, E. U. (2023). Explainability and white box in drug discovery. *Chemical Biology & Drug Design*, 102(1), 217-233.
14. Loh, H. C., Chong, K. W., & Ahmad, M. (2007). Quantitative analysis of formaldehyde using UV-VIS spectrophotometer pattern recognition and artificial neural networks. *Analytical letters*, 40(2), 281-293.
15. Galán-Freyte, N. J., Ospina-Castro, M. L., Medina-González, A. R., Villarreal-González, R., Hernández-Rivera, S. P., & Pacheco-Londoño, L. C. (2020). Artificial intelligence assisted mid-infrared laser spectroscopy in situ detection of petroleum in soils. *Applied Sciences*, 10(4), 1319.
16. Zimmerman, D. E., Kulikowski, C. A., Huang, Y., Feng, W., Tashiro, M., Shimotakahara, S., ... & Montelione, G. T. (1997). Automated analysis of protein NMR assignments using methods from artificial intelligence. *Journal of molecular biology*, 269(4), 592-610.
17. Streun, G. L., Elmiger, M. P., Dobay, A., Ebert, L., & Kraemer, T. (2020). A machine learning approach for handling big data produced by high resolution mass spectrometry after data independent acquisition of small molecules—Proof of concept study using an artificial neural network for sample classification. *Drug testing and analysis*, 12(6), 836-845.
18. Howarth, A., Ermanis, K., & Goodman, J. M. (2020). DP4-AI automated NMR data analysis: straight from spectrometer to structure. *Chemical science*, 11(17), 4351-4359.
19. Pomyen, Y., Wanichthanarak, K., Pounsombat, P., Fahrmann, J., Grapov, D., & Khoomrung, S. (2020). Deep metabolome: Applications of deep learning in metabolomics. *Computational and Structural Biotechnology Journal*, 18, 2818-2825.
20. Xu, R. Z., Cao, J. S., Feng, G., Luo, J. Y., Feng, Q., Ni, B. J., & Fang, F. (2022). Fast identification of fluorescent components in three-dimensional excitation-emission matrix fluorescence spectra via deep learning. *Chemical Engineering Journal*, 430, 132893.
21. Zheng, H., Lu, X., & He, K. (2022). In situ transmission electron microscopy and artificial intelligence enabled data analytics for energy materials. *Journal of Energy Chemistry*, 68, 454-493.
22. Suzuki, Y. (2022). Automated data analysis for powder X-ray diffraction using machine learning. *Synchrotron Radiation News*, 35(4), 9-15.
23. Fan, X., Xu, Z., Zhang, H., Liu, D., Yang, Q., Tao, Q., ... & Lu, H. (2022). Fully automatic resolution of untargeted GC-MS data with deep learning assistance. *Talanta*, 244, 123415.
24. Mouellef, M., Vetter, F. L., Zobel-Roos, S., & Strube, J. (2021). Fast and versatile chromatography process design and operation optimization with the aid of artificial intelligence. *Processes*, 9(12), 2121.
25. Rial, R. C. (2024). AI in analytical chemistry: Advancements, challenges, and future directions. *Talanta*, 274, 125949.