



ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ ПРИ РАСЧЁТЕ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ В БИОХИМИЧЕСКИХ АНАЛИЗАХ

Ешимбетова Юлдуз, Студентка ТГМУ, 2-курс химия

Преподаватель Доцент PhD Курбонова Мохира Абдувахобовна

Аннотация. В данной статье рассматриваются возможности применения искусственного интеллекта при расчёте и анализе электрохимических параметров в биохимических исследованиях. Особое внимание уделяется использованию современных алгоритмов машинного обучения для обработки экспериментальных данных, полученных в электрохимических системах. Применение методов искусственного интеллекта позволяет значительно повысить точность расчётов, ускорить интерпретацию результатов и оптимизировать процессы анализа биологических образцов. В работе также обсуждаются перспективы внедрения интеллектуальных вычислительных систем в лабораторную диагностику, медицинскую химию и биохимические исследования.

Ключевые слова: искусственный интеллект, электрохимия, биохимический анализ, электрохимические параметры, машинное обучение, лабораторная диагностика, обработка данных, медицинская химия.

Abstract. This article discusses the potential application of artificial intelligence in calculating and analyzing electrochemical parameters in biochemical analyses. Particular attention is given to modern machine learning algorithms used for processing experimental data obtained from electrochemical systems. The implementation of artificial intelligence methods significantly improves calculation accuracy, accelerates data interpretation, and optimizes the analysis of biological samples. The study also highlights the prospects of integrating intelligent



computational systems into laboratory diagnostics, medical chemistry, and biochemical research.

Keywords: artificial intelligence, electrochemistry, biochemical analysis, electrochemical parameters, machine learning, laboratory diagnostics, data processing, medical chemistry.

Биохимические анализы, которые измеряют содержание веществ (белка, сахара, кислорода и т.д.) в крови и моче, широко используются для диагностики заболеваний и определения методики лечения. Деятельность каждого органа в организме влияет на один или несколько конкретных биохимических показателей. Поэтому определение концентрации и сравнение биохимических показателей в компонентах крови может помочь врачам диагностировать многие заболевания, такие как болезни печени, гепатит, диабет, фиброз, атеросклероз, инфаркт миокарда и другие патологии.[1]

Электрохимия занимает особое место в развитии современных медицинских технологий, обеспечивая создание высокочувствительных, миниатюрных и биосовместимых устройств для диагностики, мониторинга и терапии. Настоящий обзор посвящен анализу применения электрохимических принципов в биомедицинских системах, с акцентом на сенсоры, имплантируемые устройства и клиническое оборудование. Электрохимические биосенсоры, включая ферментативные и неферментативные варианты, существенно улучшили возможности экспресс-диагностики и непрерывного контроля, в частности, мониторинга глюкозы при сахарном диабете, достигая высокой чувствительности и селективности благодаря интеграции наноматериалов (графен, проводящие полимеры) и искусственного интеллекта для обработки сигналов.[2]

К электрохимическим методам анализа относятся: потенциометрия, кулонометрия, кондуктометрия, вольтамперометрия.[3]



Электрохимические биосенсоры

С помощью электрохимических сенсоров можно обнаруживать и определять не только концентрацию ионов в растворах, но и различных органических молекул, вирусов, микробов. С этой целью используют природные ферменты, которые распознают интересующую молекулу или тело-аналит, и содействуют ее химическому взаимодействию с другими ионами или молекулами. природные ферменты, выступающие в роли специфического катализатора, называют также энзимами, а сенсоры, в которых используются такие вещества, называются биосенсорами. Для "распознавания" аналита в электрохимических сенсорах, кроме ферментов, могут быть применены также и другие биологические структуры, называемые «биоселекторами»: нуклеиновые кислоты, антитела, живые клетки и даже готовые живые рецепторы. Имобилизованный (т.е. осажденный и закрепленный) на электроде или на мембране биоселектор, при наличии в контролируемой среде аналита, вступает с ним (и только с ним) в специфическое взаимодействие. Биоселектор подбирают так, чтобы в результате взаимодействия с аналитом возникали (или, наоборот, расходовались) электрохимически активные продукты (ионы, аммиак, перекись водорода, фтор, и т.п.). Изменение их концентрации улавливает селективно чувствительный к ним электрохимический элемент, вырабатывая соответствующий электрический сигнал. Этот сигнал усиливается и обрабатывается в электронном блоке.

Искусственный интеллект (ИИ) — это интеллект, демонстрируемый машинами, в отличие от естественного интеллекта, демонстрируемого животными, включая людей. Ведущие учебники ИИ определяют эту область как изучение интеллектуальных агентов — любая система, которая воспринимает свое окружение и предпринимает действия, максимизирующие его шанс на достижение своих целей". [4]



Искусственный интеллект (ИИ) активно проникает в различные области науки. В интервью с учеными и специалистами из разных областей мы обсудили ключевые достижения и перспективы применения ИИ, а также возникающие вопросы и вызовы. Эти технологии уже кардинально изменяют научный процесс, однако до конца еще не решены вопросы доверия к результатам. Ведущие российские эксперты рассказывают, как искусственный интеллект помогает, и в чем он все еще нуждается в доработке. [5]

Интеграция искусственного интеллекта: Современные интеллектуальные биохимические анализаторы используют алгоритмы глубокого обучения, обученные на миллионах наборов данных образцов. Например, алгоритм искусственного интеллекта компании Ozelle был отмечен на Всемирной конференции по искусственному интеллекту (WAIC) в 2022 году и обучен на более чем 40 миллионах клинических образцов, что обеспечивает беспрецедентную точность идентификации и классификации клеток.



Технология машинного зрения: Системы визуализации высокого разрешения фиксируют детальные клеточные структуры с точностью позиционирования менее 1 микрометра. Использование специализированных линз SwissOptic® с 4-мегапиксельным разрешением и частотой 50 кадров в секунду обеспечивает кристально четкую визуализацию сформированных элементов, включая эритроциты (RBC), лейкоциты (WBC) и тромбоциты (PLT).



Автоматизированная обработка: Полная автоматизация рабочего процесса исключает ручное вмешательство, сокращая количество человеческих ошибок и время выполнения заказа. Весь процесс - от сбора образцов и окрашивания до анализа и составления отчетов - беспрепятственно организуется интеллектуальными системами.

Многопараметрический анализ: Умные анализаторы не просто подсчитывают клетки - они классифицируют их по подробным категориям, выявляют аномальные клетки и проводят одновременное тестирование нескольких типов образцов, обеспечивая всестороннюю клиническую картину на одной платформе.

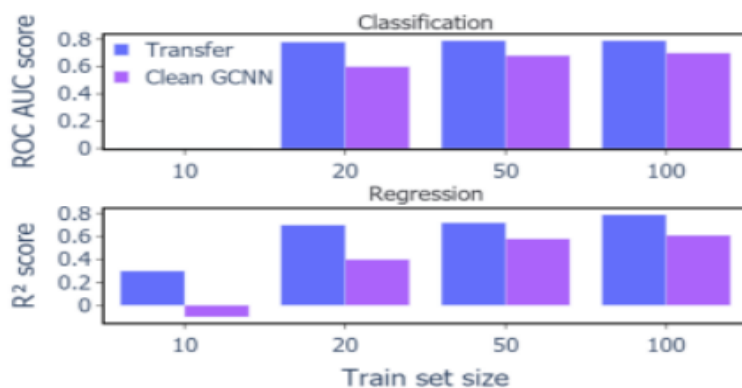


Рисунок 1. Пример расчета свойств органических молекул с помощью трансферного метода.



На рисунке 1. показан пример такой работы, где показали, что можно предсказать свойство органической молекулы при этом, модель тренировали на нескольких десятках молекул, хотя обычно речь идет о тысяче молекул.[6]

Применение методов искусственного интеллекта в химии. Краткий список того, что успели осветить в данном курсе:

- python3
- Анализ данных
- Методы машинного обучения
- Представление структур
- Нейронные сети
- Алгоритмы глобальной оптимизации
- Генеративные модели
- Оптимизация кода

Применение алгоритмов:

- Анализ данных
- QSAR/QSPR/QS...R
- Планирование экспериментов/оптимизация технологических процессов
- Оптимизация геометрии
- De novo design
- Создание новых численных методов (квантово-химические, атомистические, etc.)
- Обработка данных (спектральные, другие приборные, etc.)
- Автоматизированный сбор данных (NLP)
- Реакции, условия синтеза, ретросинтетический анализ, обход патентов
- Quantum machine learning



Российские математики и материаловеды разработали систему искусственного интеллекта, способную выявлять энергоёмкие и пожаробезопасные электролиты, а также подбирать оптимальные защитные покрытия для электродов твердотельных аккумуляторов. Создание этой нейросети поможет учёным быстрее подобрать замену для литий-ионных батарей.

Исследователи выяснили, что эти расчёты можно значительно ускорить при помощи разработанной ими системы искусственного интеллекта, построенной на базе графовых нейросетей. Для её обучения российские материаловеды подготовили обширную базу данных, включающую данные по устройству и результаты точных квантово-химических расчётов движения ионов лития через большое число материалов. Работу этой нейросети учёные проверили при изучении свойств перспективного твердотельного электролита — вещества $\text{Li}_{10}\text{GeP}_2\text{S}_{12}$, состоящего из лития, германия, фосфора и серы. ИИ-система помогла материаловедам выявить несколько перспективных защитных материалов, которые должны заметно повысить долговечность и безопасность твердотельных батарей. Схожим образом можно изучать и улучшать другие электролиты. [7]

Применение ИИ в медицинской биологии открывает новые горизонты для диагностики, прогноза заболеваний, анализа больших данных и разработки персонализированных методов лечения. В данной работе рассматриваются основные направления внедрения искусственного интеллекта в медицинскую биологию, его преимущества и ограничения, а также перспективы дальнейшего развития. Анализируются современные алгоритмы машинного обучения и нейросетей, их роль в обработке геномных данных, создании моделей болезней и автоматизации лабораторных исследований. Особое внимание уделяется влиянию ИИ на повышение эффективности и точности диагностики, а также на оптимизацию научных



исследований в области биомедицины. Работа демонстрирует, что интеграция искусственного интеллекта в медицинскую биологию способствует значительному прогрессу в понимании механизмов заболеваний и разработке инновационных методов терапии. [8]

Использование ИИ прогнозируется во множестве направлений синтетической химии, при этом некоторые из них уже сегодня частично реализованы. Например, технологии ИИ, такие как обработка слов и распознавание изображений, уже активно используются для извлечения из литературы информации о методах химического синтеза, свойствах и реакционной способности. Это позволило значительно снизить затраты на привлечение большого числа квалифицированных химиков для извлечения информации из большого количества опубликованной литературы и регистрации ее в базах данных.

В будущем искусственный интеллект будет отвечать за регулярный просмотр и анализ огромного количества опубликованной литературы по химическому синтезу и химическим свойствам. У химиков появятся «интеллектуальные помощники», которые смогут отвечать на вопросы, возникающие в их работе, например, как лучше синтезировать химические вещества или какие вещества следует синтезировать для той или иной цели. Инструменты ИИ уже внедрены в такие области, как синтетическая химия, фармацевтика, биоинформатика, материаловедение и робототехника. В перспективе это может привести к значительному повышению эффективности разработки новых лекарств и материалов, причем ИИ будет не только планировать, но и осуществлять обычный химический синтез. В более отдаленном будущем ИИ станет важным инструментом для планирования и проведения химических исследований при помощи хемоинформатики. Также данные технологии будут способствовать снижению рутинной нагрузки на



специалистов-химиков и позволят сделать работу химиков более творческой и продуктивной.

Особую эффективность от внедрения ИИ в синтетическую химию ожидают в решении проблемы, известной как «проектирование с нуля». Так с помощью ИИ разработана технология, с помощью которой происходит производство молекул с заданными характеристиками. В основе процедуры лежит обработка ИИ специально выбранной молекулы, которая помещается в нейронную сеть. [9]

Современные исследования всё чаще используют методы машинного и глубокого обучения для анализа многомерных физиологических данных. Применение этих подходов в планировании научных экспериментов, обработке данных и создании прогнозирующих моделей значительно улучшает понимание адаптационных механизмов человеческого организма при гипоксии и открывает новые пути для изучения влияния других факторов внешней среды. Текущие разработки демонстрируют значительный потенциал дальнейшего прогресса в этой области, способствуя повышению эффективности исследовательских процедур через оптимизацию статистического анализа, обработку результатов и проектирование экспериментальных схем. Важным направлением является изучение адаптивных возможностей человека, где создание классификационных моделей для идентификации групп с различной устойчивостью к стрессу представляет интерес для различных областей медицины, биологии и психологии. Разработка моделей прогнозирования толерантности к гипоксии может найти применение как в совершенствовании методов машинного обучения, так и в решении практических задач клинической, авиационной и космической медицины. Однако существует ряд ограничений, затрудняющих применение ИИ в изучении адаптации: сложности в получении достаточного количества данных, недостаточное качество биосенсоров, отсутствие

Таким образом, искусственный интеллект в современной химии имеет множество направлений применения. Его значимость и необходимость обнаруживается как в области производства нового знания, исследовании свойств новых химических соединений и материалов, так и создании современных химических технологий и эффективных производств на их основе. Применение ИИ позволит обеспечить прорыв в медицинской химии (фармацевтике), строительстве, разработке новых материалов в химической промышленности, космической отрасли, биохимии и других отраслях.

1. https://klinika-naedine.ru/medical_dictionary/biohimiya-krovi

- Часть-68 Том-5 Мая-2026**



<https://myseldon.com/ru/news/index/342822855>

7. <https://myseldon.com/ru/news/index/342822855>
8. Маликов И.Р. Значение искусственного интеллекта в медицинской биологии. 2025.
9. И. А. Гусаров Кузбасский государственный технический университет им. Т.Ф. Горбачева, Кемерово, Россия. УДК 001.891.34.
10. Балунов И.О., Михалищина А.С., Венерин А.А., Глазачев О.С. Технологии искусственного интеллекта в медико-биологических исследованиях адаптации и дезадаптации человека к различным факторам среды // Экология человека. 2025. Т. 32, № 1. С. 7–19. DOI: 10.17816/humeco643537 EDN: WCVHEG