

人工智能在分析化验行业的研究

李巧燕

内蒙古君正能源化工集团股份有限公司 内蒙 乌海 016000

摘要：随着科技的飞速发展，人工智能正逐渐渗透到各个行业领域，分析化验行业亦迎来了全新的变革机遇。本文阐述了其背后的技术基础，详细探讨了在数据处理、质量控制、方法开发等多领域的应用表现，指出应用中面临的数据、模型、人才及技术集成等方面挑战，同时也分析了诸如提高效率、增强精度等优势所在。旨在全面呈现人工智能在该行业的现状，为相关从业者更好理解并推动其应用发展提供参考，助力分析化验行业朝着智能化、高效化方向持续迈进。

关键词：人工智能；分析化验；行业研究

引言：分析化验行业在诸多领域都起着关键作用，其结果的准确性与高效性影响深远。随着科技发展，人工智能展现出强大的数据处理与智能决策能力，正逐渐融入分析化验行业，为其带来革新机遇。它能够有效应对海量且复杂的数据，挖掘其中规律，辅助或替代传统人工分析方法。鉴于此，深入研究人工智能在该行业的应用情况、面临挑战及优势等内容具有重要的现实意义，有助于行业更好地把握发展方向。

1 人工智能在分析化验行业中的技术基础

人工智能在分析化验行业的应用依托于多种核心技术。机器学习是关键部分，其中监督学习通过已标记数据训练模型，例如利用已知成分与对应光谱数据训练的模型可预测未知样品成分；无监督学习则能在无标记数据里发现内在结构，像对大量分析数据聚类以挖掘潜在模式。深度学习中的神经网络，如卷积神经网络擅长处理图像类数据，可用于分析化验中的色谱图、光谱图识别；循环神经网络适合处理序列数据，在分析反应过程随时间变化的数据时发挥作用。自然语言处理技术虽在分析化验中不直接处理实验数据，但在实验报告生成、文献资料分析等方面有意义，能将非结构化的文本信息转化为可利用的知识。计算机视觉技术可用于分析化验仪器的可视化监控，例如检测仪器部件的状态、样品的外观特征等。

2 人工智能在分析化验行业的应用领域

2.1 数据处理与分析

传统分析化验会产生大量复杂的数据，如各类光谱、色谱数据。人工智能中的机器学习算法可对这些数据进行高效处理。例如，采用人工神经网络，能够对不同物质的光谱特征进行学习，构建模型后可快速准确地识别未知样品的成分，即使在复杂混合物体系中也能有

效区分各组分。通过对大量数据的深度挖掘，还能发现数据间隐藏的相关性，如环境监测中不同污染物浓度与气象条件之间的关联，为进一步研究提供新的思路。相比传统数据分析方法，人工智能算法能处理更庞大、更复杂的数据量，且具有更高的准确性和灵活性，极大地提高了分析化验数据处理的效率和质量，为各行业的质量控制、科学研究等提供了有力的数据支持^[1]。

2.2 质量控制与预测性维护

在质量控制过程中，它可实时监测分析仪器的运行参数以及分析数据的质量指标。通过对历史数据的学习，建立起异常检测模型，比如利用支持向量机算法判断色谱峰形、保留时间等是否正常。一旦发现数据异常或仪器运行参数偏离标准范围，能及时发出警报并定位可能的问题源。在预测性维护方面，基于深度学习对仪器的长期运行数据进行分析，预测仪器可能出现的故障类型及时间。例如，通过对质谱仪的温度、压力、离子源状态等多参数数据的学习，提前知晓离子源老化、真空系统泄漏等潜在故障，以便提前安排维护，减少因仪器突发故障导致的停机时间，保障分析化验工作的连续性和稳定性，降低维护成本并提高生产效率。

2.3 分析方法开发与优化

传统的分析方法开发往往需要进行大量的实验尝试来确定最佳的实验条件，耗时费力。人工智能技术借助模拟和优化算法改变了这一局面。例如遗传算法可用于高效液相色谱分析方法的开发，它能同时对色谱柱类型、流动相组成、流速、柱温等多个因素进行编码组合，形成不同的实验条件“个体”，并根据预设的目标函数（如分离度、分析时间等）对这些“个体”进行评估、选择、交叉和变异操作，经过多代进化后筛选出最优的分析方法条件组合。这种基于人工智能的优化策略

大大缩短了分析方法开发的周期,提高了成功率,并且能够找到传统实验设计方法难以发现的复杂因素间的协同优化方案,使分析方法在满足准确性要求的同时更加高效快速,适应现代分析化验行业对快速、精准分析的需求。

2.4 仪器故障诊断与自修复

分析化验仪器结构复杂、功能多样,一旦发生故障诊断与修复难度较大,而人工智能提供了解决方案。在故障诊断方面,专家系统是常用技术之一,它将仪器工程师的专业知识和经验转化为计算机可识别的规则和知识库。当仪器出现故障时,通过输入故障现象、仪器状态信息等,专家系统利用知识库进行推理判断,快速确定故障原因,如根据气相色谱仪的压力异常、峰形畸变等现象推断是进样系统堵塞还是检测器故障。在自修复方面,一些智能仪器结合了机器学习与自动化控制技术,当诊断出故障后,依据预设的修复策略尝试自动修复。例如,检测到液相色谱仪的泵压异常升高,仪器可自动执行清洗泵头、调整流速等操作;若某个传感器故障,可切换到备用传感器继续工作,从而提高仪器的可用性和智能化水平,减少因故障停机造成的时间和经济损失,保障分析化验工作的顺利进行。

2.5 物质结构解析与未知物鉴定

物质结构解析与未知物鉴定在化学、医药等领域至关重要,人工智能为此提供了强大助力。在核磁共振波谱解析中,深度学习算法可自动识别化学位移、峰形、峰积分等信息,并与庞大的已知化合物 NMR 数据库进行比对匹配,快速确定未知化合物的可能结构框架。例如在天然产物研究中,面对复杂的有机分子结构,人工智能能迅速筛选出结构相似的已知化合物,为进一步解析提供线索。此外,结合质谱、红外光谱等多模态数据,人工智能通过数据融合技术整合不同谱图信息,弥补单一谱图的局限性,提高未知物鉴定的准确性和可靠性。在药物研发中,对于新合成的化合物或药物代谢产物,人工智能可快速鉴定其结构,加速药物研发进程,为新药发现和开发提供有力的技术支撑,推动相关领域的科学研究和创新发展。

3 人工智能在分析化验行业应用面临的挑战

3.1 数据质量与安全问题

在分析化验行业,数据来源广泛且复杂,不同仪器、实验条件及操作人员都可能导致数据质量参差不齐。数据可能存在噪声、误差、缺失值或异常值,影响人工智能模型训练效果。例如,低质量的光谱数据可能使模型难以准确识别物质成分,分析化验数据往往涉及

企业核心技术、科研机密及个人隐私等敏感信息。数据存储、传输和共享过程面临诸多安全风险,如网络攻击可能导致数据泄露,一旦泄露将给企业带来巨大损失,也可能侵犯个人权益,引发法律纠纷。数据访问权限管理不当也可能造成数据滥用,如何确保数据质量并保障其安全成为人工智能应用的重要挑战^[2]。

3.2 模型可解释性难题

许多先进人工智能模型如深度神经网络,其内部结构复杂且决策过程晦涩难懂。在分析化验行业,对结果准确性和可靠性要求极高,模型可解释性至关重要。例如在药物质量检测中,若人工智能判定药物不合格却无法解释原因,企业难以接受并采取措施。传统的机器学习模型如线性回归等可解释性较强,但复杂模型如深度学习中的卷积神经网络,其多层神经元的复杂交互难以直观呈现决策依据。这使得专业人员难以信任模型结果,在应用推广时面临阻碍,尤其在涉及关键决策如医疗诊断、环境风险评估等方面,模型可解释性不足可能导致决策失误,限制了人工智能在分析化验行业更深入广泛的应用。

3.3 专业人才短缺

分析化验行业人工智能应用需要复合型人才,既懂分析化验专业知识又熟悉人工智能技术,但目前这类人才稀缺。分析化验专业人员对传统分析方法和仪器操作熟练,但对人工智能原理、算法及开发应用了解有限。他们难以将人工智能有效融入日常工作,如不知道如何利用机器学习优化分析方法。而人工智能专业人员缺乏分析化验领域专业背景,不了解行业特殊需求和规范,在设计模型时可能忽略实际因素,如不熟悉分析仪器特性导致数据处理模型与仪器不匹配。高校相关专业课程设置也存在不足,培养的学生难以满足行业需求,人才短缺严重制约了人工智能在分析化验行业的快速发展和创新应用。

3.4 技术集成与系统兼容性

分析化验行业涉及多种仪器设备、分析软件和实验流程,人工智能技术集成与系统兼容性面临挑战。不同厂家仪器设备数据格式、通信接口和控制协议各异,人工智能算法难以与它们无缝对接。例如,一种人工智能图像识别算法可能无法直接读取某品牌显微镜的图像数据。分析软件功能和数据管理方式也不尽相同,整合人工智能功能时可能出现冲突。传统分析化验软件注重数据采集和基本处理,与人工智能软件的智能分析、预测功能整合困难,在用户界面上也难以统一,导致操作不便。此外,实验室信息管理系统(LIMS)与人工智能应用的集成也存在问题,

数据流转和共享不畅,影响整体工作效率,阻碍了人工智能在分析化验行业全面推广应用。

4 人工智能在分析化验行业应用的优势

4.1 提高分析效率

传统分析化验工作中,数据处理和分析环节往往耗时长久,尤其是面对大规模数据时,人工处理极易出现延误。而人工智能算法能够快速对海量数据进行处理,例如在药物高通量筛选中,每天产生数以万计的样品分析数据,人工智能系统可瞬间完成数据清洗、整理与初步分析,快速识别出有潜力的药物候选物,大大缩短了从实验数据获取到结果评估的时间周期,在分析方法开发方面,人工智能通过智能优化算法快速探索多种实验条件组合,相比传统依靠人工逐一尝试的方式,能在更短时间内确定最佳分析方案,从而整体加速了分析化验流程,使研究人员能够在相同时间内完成更多的分析任务,极大提高了工作通量和效率,为相关行业的快速发展提供有力支撑。

4.2 增强分析精度

在分析化验领域,人工智能技术有效增强了分析精度。分析化验常受仪器噪声、基体干扰等因素影响,导致传统方法在痕量物质检测等方面精度受限。人工智能模型通过对大量高质量数据的深度学习,能够精准捕捉数据中的细微特征和复杂关系,从而降低这些不利因素的干扰。例如在环境监测中,对于水样里微量有机污染物的检测,人工智能算法可通过对大量标准样品及实际环境样品数据的学习,建立高度精确的定量分析模型,其检测限和定量限相较于传统方法显著降低,能更准确地测定极低浓度水平的污染物含量。在材料成分分析中,人工智能也能够更精确地解析复杂材料的元素组成与微观结构,为材料性能研究与质量控制提供更为可靠的数据依据,有力推动了分析化验结果准确性和可靠性的提升。

4.3 实现智能化决策

在分析过程中,它不仅能处理数据,还能依据预设规则与学习到的经验对各种情况作出合理判断并决策。例如在质量控制环节,当检测到分析数据异常波动或仪器运行参数偏离正常范围时,人工智能系统可根据历史数据和既定标准,自动判断异常的严重程度,并智能决策是否需要重新测量、调整仪器参数或暂停实验等后

续操作。在复杂实验流程中,人工智能能够根据样品特性、实验进度和资源状况,合理安排实验步骤和仪器使用顺序,实现实验资源的优化配置。这种智能化决策减少了人为判断的主观性和误差,确保分析化验过程始终处于高效、稳定的状态,保障了分析结果的一致性和可靠性,提高了整个分析化验工作的管理水平和质量控制能力。

4.4 促进知识发现与创新

人工智能在分析化验行业有力地促进了知识发现与创新。凭借强大的数据挖掘和分析能力,它能够对海量分析数据进行深度整合与关联分析,挖掘出以往被忽视的信息和规律。在药物研发领域,通过对大量临床前和临床药物代谢数据、药物活性数据以及基因信息等多源数据的综合分析,人工智能可能揭示新的药物作用靶点、药物代谢途径或药物-药物相互作用机制,为创新药物设计提供全新思路和方向。在材料科学中,对不同材料成分、结构与性能数据的挖掘,有助于发现新型材料的设计原则和性能优化策略。此外,人工智能还能从分析化验数据中发现实验条件与结果之间的潜在关系,启发研究人员开发新的分析方法和技术,推动分析化验学科不断向前发展,为相关领域的科学研究和技术创新注入新的活力^[3]。

结束语

随着科技的持续进步,人工智能在分析化验行业的影响力将愈发深远。虽然目前面临数据质量与安全、模型可解释性等诸多挑战,但不可否认其已在提升分析效率、精度,实现智能化决策与促进知识发现等方面展现出巨大潜力。未来,通过跨学科合作培养复合型人才,加强技术研发攻克难题,人工智能必将推动分析化验行业走向智能化、精准化与高效化的新高度,在医药研发、环境监测、食品安全等众多领域持续发挥关键作用,开启行业发展的崭新篇章。

参考文献

- [1]王文华.人工智能在工程咨询行业的应用[J].中国工程咨询,2019,(10):35-38.
- [2]武帅.人工智能在机械电子工程中的应用研究[J].山东工业技术,2019,(8):176-177
- [3]李刚,曹宇鹏.浅谈电气自动化控制中的人工智能的实践[J].通讯世界,2019,26(5):190-191.