ҒТАМР 61.01.77 **https://doi.org/10.58805/kazutb.v.3.28-1197**

НАНОХИМИЯ ЖӘНЕ ЖАСАНДЫ ИНТЕЛЛЕКТ СИМБИОЗЫ

[1]Г.М. Нұрғазина✉, [1]Д.А. Нургалиева, [2]С.Ж. Құдайбергенова

[1]Астана халықаралық университеті, Астана, Қазақстан,
[2]С.Сейфуллин атындағы Қазақ агротехникалық зерттеу университеті, Астана, Қазақстан
✉*Корреспондент-автор: ast.gulnar@mail.ru*

Бұл мақалада жасанды интеллект (ЖИ) пен нанохимияның тоғысындағы жаңа ғылыми бағыттар қарастырылады. Нанохимия атомдар мен молекулалардың наноөлшемдік деңгейдегі құрылымы мен қасиеттерін зерттейтін ғылым саласы ретінде жаңа функционалды материалдарды, катализаторларды және биомедициналық қолданбаларды дамытуға жол ашады. ЖИ болса күрделі деректерді өңдеу, модельдеу және болжау қабілеті арқылы дәстүрлі зерттеу әдістерін толықтырады. Машиналық оқыту алгоритмдері нанобөлшектердің қасиеттерін алдын ала болжауға, синтез процестерін оңтайландыруға мүмкіндік береді. Сонымен қатар, ЖИ деректерді талдау арқылы жаңа наноматериалдардың тұрақтылығын, реакциялық қабілетін бағалауда тиімді құралға айналуда. Нанохимия мен ЖИ симбиозы медицинада дәрі-дәрмек жеткізу жүйелерін жобалауға, энергетикада жоғары тиімді катализаторларды әзірлеуге, ал экологияда қоршаған ортаны қорғауға бағытталған наносорбенттерді таңдауға ықпал етеді. Бұл екі саланың бірігуі болашақта ғылым мен технология дамуының жаңа кезеңін қалыптастыратынын атап өтеді.

Зерттеу жұмысы ғылыми әдебиеттерге шолу, статистикалық деректерді талдау және модельдеу әдістеріне негізделді. Нанохимия мен жасанды интеллекттің тоғысуы ғылыми-зерттеу процесін жаңа деңгейге көтеретіні анықталды. Әдеби шолу мен модельдік талдаулар ЖИ алгоритмдерінің наноматериалдардың қасиеттерін болжауда, синтез процестерін оңтайландыруда және күрделі эксперименттік деректерді өңдеуде тиімді екенін көрсетті.

Түйін сөздер: нанохимия, нанотехнология, жасанды интеллект, нейрожелі, деректерді талдау, экология.

СИМБИОЗ НАНОХИМИИ И ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА

[1]Г.М. Нургазина✉, [1]Д.А. Нургалиева, [2]С.Ж. Кудайбергенова

[1]Международный университет Астана, Астана, Казахстан,
[2]Казахский агротехнический исследовательский университет им. С.Сейфуллина, Астана, Казахстан,
e-mail: ast.gulnar@mail.ru

В данной статье рассматриваются новые научные направления на стыке искусственного интеллекта (ИИ) и нанохимии. Нанохимия как область науки, изучающая структуру и свойства атомов и молекул на наноуровне, открывает возможности для разработки новых функциональных материалов, катализаторов и биомедицинских приложений. Искусственный интеллект, в свою очередь, дополняет традиционные методы исследований благодаря своей способности обрабатывать сложные данные, моделировать и прогнозировать процессы. Алгоритмы машинного обучения позволяют заранее предсказывать свойства наночастиц, оптимизировать процессы синтеза. Кроме того, анализ данных с помощью ИИ становится эффективным инструментом для оценки стабильности и реакционной способности новых наноматериалов. Симбиоз нанохимии и ИИ способствует разработке систем доставки лекарств в медицине, созданию высокоэффективных катализаторов в энергетике, а также подбору наносорбентов, направленных на защиту окружающей среды в экологии. Отмечается, что интеграция этих двух областей формирует новый этап развития науки и технологий.

Исследование основано на обзоре научной литературы, анализе статистических данных и методах моделирования. Установлено, что взаимодействие нанохимии и искусственного интеллекта

выводит исследовательский процесс на новый уровень. Литературный обзор и модельные анализы показали эффективность алгоритмов ИИ в прогнозировании свойств наноматериалов, оптимизации синтеза и обработке сложных экспериментальных данных.

Ключевые слова: нанохимия, нанотехнология, искусственный интеллект, нейросеть, анализ данных, экология.

SYMBIOSIS OF NANOCHEMISTRY AND ARTIFICIAL INTELLIGENCE

[1]G. Nurgazina✉, [1]D. Nurgalieva, [2]S. Kudaibergenova

[1]Astana International University, Astana, Kazakhstan,
[2]S.Seifullin Kazakh Agro Technical Research University, Astana, Kazakhstan,
e-mail: ast.gulnar@mail.ru

This article explores emerging scientific directions at the intersection of artificial intelligence (AI) and nanochemistry. Nanochemistry, as a field that studies the structure and properties of atoms and molecules at the nanoscale, opens pathways for the development of new functional materials, catalysts, and biomedical applications. Artificial intelligence, in turn, complements traditional research methods through its ability to process complex data, perform modeling, and generate predictions. Machine learning algorithms make it possible to forecast nanoparticle properties in advance and optimize synthesis processes. Furthermore, AI-driven data analysis has become an effective tool for evaluating the stability and reactivity of new nanomaterials. The symbiosis of nanochemistry and AI contributes to the design of drug delivery systems in medicine, the development of highly efficient catalysts in energy, and the selection of nanosorbents for environmental protection in ecology. The integration of these two fields is highlighted as forming a new stage in the advancement of science and technology.

The study is based on a review of scientific literature, analysis of statistical data, and modeling methods. It was determined that the convergence of nanochemistry and AI elevates the research process to a new level. Literature review and model-based analyses demonstrated the effectiveness of AI algorithms in predicting nanomaterial properties, optimizing synthesis processes, and processing complex experimental data.

Keywords: nanochemistry, nanotechnology, artificial intelligence, neural network, data analysis, ecology.

Кіріспе. Қазіргі заманда ғылым мен технология қарқынды дамып, қоғамның барлық саласына елеулі өзгерістер енгізуде. Сол өзгерістердің ішінде жасанды интеллект (ЖИ) пен нанотехнологияның, соның ішінде нанохимияның тоғысуы ерекше маңызға ие. Бұл өзара ықпалдастық жаңа буын материалдарын, құрылғыларын және әдістерін жасап, энергетикадан бастап денсаулық сақтауға дейінгі ауқымды мәселелерді шешуге зор мүмкіндік береді.

Нанотехнология мен нанохимия наноөлшемдегі объектілердің қасиеттерін зерттеп, олардың негізінде жаңа функционалды материалдар жасауға бағытталған ғылыми-техникалық бағыттар болып саналады. Наноөлшем ауқымында материалдардың қасиеттері олардың кәдімгі макродеңгейдегі баламаларынан едәуір өзгеше болуы мүмкін. Мысалы, нанобөлшектер, нанотүтіктер мен нанокомпозиттер ерекше физикалық, химиялық әрі биологиялық сипаттарымен ерекшеленеді [1].

Нанохимияның негізгі мақсаты - наноөлшемде жүретін химиялық процестерді, реакцияларды зерттеу, сондай-ақ жаңа наноматериалдарды синтездеу және олардың құрылымын жетілдіру жолдарын табу. Бұл бағыт жаңа функционалды қосылыстарды құрастыруға, инновациялық технологиялардың пайда болуына негіз қалайды [2].

Материалдар мен әдістер. Зерттеу барысында соңғы онжылдықта жарық көрген ғылыми еңбектер мен монографиялар негізгі теориялық

негіз ретінде алынды [1–5]. Сонымен қатар, нанохимиялық тәжірибелерге қатысты BET (азоттың төмен температурада адсорбциясы), инфрақызыл (ИК) спектроскопиясы және атомдық-абсорбциялық спектроскопиядан алынған деректер модельдік талдау үшін пайдаланылды [6]. Жасанды интеллект әдістерінен машиналық оқыту, нейрондық желілер және Big Data талдау тәсілдері қолданылды. Нанохимия мен жасанды интеллекттің өзара ықпалдастығын зерттеу барысында теориялық талдау, аналитикалық тәсілдер және модельдеу әдістері кешенді түрде пайдаланылды.

Жасанды интеллект қазіргі ғылыми парадигмада адамның когнитивтік қабілеттерін модельдеуге арналған пәнаралық зерттеу саласы ретінде қарастырылады. Бұл бағытта алгоритмдер, теориялық негіздер және технологиялар жасалып, ақпаратты қабылдау, деректерді өңдеу мен талдау, тәжірибеден үйрену, болжау, пайымдау және шешім қабылдау сияқты қызметтер жүзеге асырылады [7].

Ғылыми тұрғыдан ЖИ жасырын заңдылықтарды анықтауға, білімді құрылымдауға және бұрын тек адамға тән когнитивтік міндеттерді орындауға мүмкіндік беретін әдістер жиынтығы ретінде сипатталады. Оған машиналық оқыту тәсілдері, нейрожелілік архитектуралар, оңтайландыру алгоритмдері және ақпаратты өңдеу әдістері жатады. Қазіргі таңда ЖИ-дің негізгі бағыттары терең және нығайта оқыту, табиғи тілді өңдеу, компьютерлік көру, эксперттік жүйелер және когнитивтік модельдеу болып табылады. Сондықтан жасанды интеллект тек автоматтандыру құралы емес, сонымен қатар ғылым, білім, өнеркәсіп пен экология салаларында жаңа шешімдер ұсынатын іргелі ғылыми тұжырымдама ретінде бағаланады [8].

Нанохимиялық зерттеулерде BET, ИҚ-спектроскопия, электрондық микроскопия (TEM/SEM) және сорбция әдістері қолданылды. Бұл әдістер мұнай төгінділерін тазалау, катализаторлардың сипаттамаларын болжау және экологиялық таза технологияларды әзірлеу барысында пайдаланылды.

Материалдарды модельдеу және жобалау. Жасанды интеллект наноматериалдардың компьютерлік модельдерін жасап, олардың қасиеттері мен реакциялық қабілеттерін алдын ала болжауға мүмкіндік береді. Мұндай тәсілдер жоғары беріктік, электрөткізгіштік немесе каталитикалық белсенділік сияқты сипаттамалары бар жаңа материалдарды құрастыру үдерісін жылдамдатады [8]. ЖИ арқылы нанокатализаторлар, нанобөлшектер және нанотүтіктердің құрылымдық және электрондық қасиеттері алдын ала есептеліп, олардың реакция жылдамдығына, энергия тиімділігіне және селективтілігіне ықпал ететін болжамдар жасалады [9]. Сонымен бірге, ЖИ үлкен көлемдегі химиялық деректерді талдап, заңдылықтарды айқындайды және реакциялардың тиімді параметрлерін болжайды. Бұл тәсіл синтез процестерін оңтайландыруға, шығындарды азайтуға және экологиялық қауіпсіздікті қамтамасыз етуге мүмкіндік береді.

Автоматтандыру. Наноматериалдарды синтездеу, құрастыру және сипаттау процестері ЖИ көмегімен автоматтандырылып, қателіктер ықтималдығы азаяды, өнімділік артады және дәстүрлі әдістерде мүмкін болмайтын күрделі тәжірибелерді орындауға жол ашылады.

Деректерді талдау. Электрондық микроскопия, спектроскопия және басқа да сипаттау әдістерінен алынған деректердің үлкен көлемін ЖИ тиімді өңдейді. Бұл ғалымдарға наноматериалдардың құрылымдық ерекшеліктерін тереңірек түсінуге мүмкіндік береді. Сонымен қатар, деректерді интеллектуалды талдау жаңа қосылыстарды болжауға және олардың қолданылу мүмкіндіктерін анықтауға жол ашады [10].

Жасанды интеллект қолданыстағы материалдар дерекқорын талдап, ерекше қасиеттерге ие жаңа қосылыстардың пайда болу ықтималдығын айқындайды. Бұл қоршаған ортадағы ластаушы заттарды немесе ауру маркерлерін анықтауға арналған аса сезімтал және дәл құрылғыларды әзірлеуге мүмкіндік береді. Мұндай тәсіл технология мен медицинаның әртүрлі салаларында жаңа материалдар ашуға негіз қалайды [10].

ЖИ энергия саласында да маңызды рөл атқарады. Ол күн сәулесін электр энергиясына тиімдірек түрлендіретін жаңа наноқұрылымды мате-

риалдарды жобалауға мүмкіндік береді. Сонымен қатар, дәрілік препараттардың нанобөлшектермен өзара әрекеттесуін модельдеу арқылы оларды зақымданған тіндерге жеткізудің тиімді әдістері ұсынылады. ЖИ медицинада ауруларды ерте кезеңде анықтауға мүмкіндік беретін нанодиагностикалық деректерді талдау үшін де қолданылады [10–13].

Нәтижелер мен талқылау. Әдеби шолу және контент-талдау. Нанохимия ғылымындағы негізгі бағыттарға – нанобөлшектерді синтездеу әдістері, каталитикалық процестер, наноматериалдардың морфологиясы мен қасиеттерін зерттеу, сондай-ақ олардың биомедициналық қолданылуы жатады. Жүргізілген салыстырмалы шолу нәтижесінде жасанды интеллект құралдарының нанохимиялық зерттеулерде қолданылу мүмкіндіктері айқындалды.

ЖИ негізіндегі модельдер (1-кесте) наноматериалдарды синтездеу жағдайларына сәйкес олардың каталитикалық белсенділігін болжауға қолданылады. Мұндай тәсілдер арқылы нанобөлшектердің өлшемін, бөлшекаралық байланыс энергиясын және меншікті бетінің шамасын есептеуге болады [14].

1 - кесте. ЖИ модельдерінің наноматериалдардың қасиеттерін болжауда қолданылуы

Модель түрі	Қолданылуы	Болжау мүмкіндіктері
ANN (нейрондық желілер)	Нанобөлшектердің морфологиясын болжау	Өлшемі, беткі ауданы
DT (шешім ағаштары)	Синтез шарттарын талдау	Қасиеттерге әсерін болжау
MLR (көптік регрессия)	Параметрлердің тәуелділігін анықтау	Каталитикалық белсенділік
GANs (генеративті модельдер)	Жаңа құрылымдарды болжау	Жаңа наноматериал синтезі

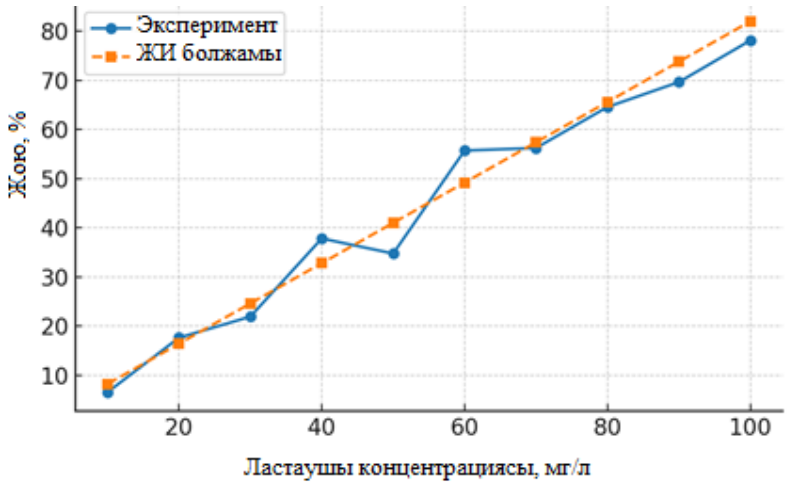
Бұл кестеде ЖИ модельдерінің әрқайсысының артықшылықтары көрсетілген. Мәселен, ANN морфологияны болжауда тиімді болса, шешім ағаштары синтез шарттарының әсерін талдауда қолданылады. GANs жаңа наноқұрылымдарды генерациялауда ерекше әлеуетке ие.

Жасанды интеллект технологиялары синтез нәтижелерінен жиналған үлкен деректерді талдауға мүмкіндік беріп қана қоймай, эксперименттік процестерді оңтайландыруға да жағдай жасайды. Машиналық оқыту алгоритмдері температура, әсер ету уақыты және ортаның pH мәні сияқты негізгі параметрлердің арасындағы күрделі байланыстарды анықтап, олардың ең қолайлы аралығын табуға көмектесті. Бұл тәсіл дәстүрлі эмпирикалық әдістермен салыстырғанда әлдеқайда жылдам әрі дәл болжамдар ұсынады.

Ағынды суларды тазарту процесінде металл нанобөлшектерімен модификацияланған цеолиттердің сорбциялық белсенділігін ЖИ көмегімен болжау мүмкіндігі ерекше назар аудартады [15]. Мұндай тәсіл экологиялық тұрғыдан тиімді шешімдер қабылдауға ықпал етеді, себебі алдын ала болжамдар негізінде адсорбенттердің тиімді құрамын таңдау арқылы су тазарту сапасын арттыруға және шығындарды азайтуға болады.

1-суретте көрсетілген нәтижелер эксперименттік деректер мен ЖИ негізіндегі болжамдардың арасындағы жоғары деңгейдегі сәйкестікті дәлелдейді. Болжамдық модель мен тәжірибелік мәліметтердің арасындағы қателік шамасы аз болғандықтан, жасанды интеллекттің сенімді құрал екендігі айқындалды. Сонымен

бірге, ЖИ модельдері адсорбция үдерісіне әсер ететін жасырын факторларды анықтап, жаңа гипотезалар ұсынуға мүмкіндік береді.



1 - сурет. Эксперименттік нәтижелер мен жасанды интеллект негізіндегі болжаулардың сорбциялық қабілеттерін салыстыру

Бұл нәтижелер ЖИ технологияларын нанохимияда қолданудың болашағы зор екенін көрсетеді. Әсіресе экологиялық проблемаларды шешуде, атап айтқанда ауыр металдармен ластанған суларды тазарту мен сорбенттерді жетілдіруде жасанды интеллект маңызды рөл атқара алады.

Машиналық оқыту алгоритмдерін талдау. Жасанды интеллект әдістерінің ішінде жасанды нейрондық желілер (ANN), шешім ағаштары (DT), көптік сызықтық регрессия модельдері (MLR), кластерлеу тәсілдері және генеративті қарсылас модельдер (GANs) қолданылды. Бұл алгоритмдер наноматериалдардың физика-химиялық сипаттамаларын болжауда, сондай-ақ олардың синтез процестерін оңтайландыруда тиімді екендігін көрсетті [6].

Нанохимиялық деректерді – спектроскопиялық (ИК, УФ-Vis), адсорбциялық (BET) және атомдық-абсорбциялық спектроскопиялық мәліметтерді – ЖИ алгоритмдері арқылы өңдеу әдістемелік тұрғыдан сипатталды. Мұндай тәсілдер материалдардың кристалдық құрылымын, беткі ауданын және сорбциялық қасиеттерін бағалауда нәтижелі қолданылды [6,16]. Мысалы, негізгі компоненттер әдісі (PCA) мен конфигурациялық нейрондық желілер (CNN) спектрлерді талдауда тиімділігін көрсетті: олар сіңіру жолақтарын автоматты түрде бөліп, қолмен өңдеуге қарағанда талдау уақытын 3–5 есеге қысқартты [14].

2 - кесте. Спектрді талдау уақытын салыстыру

Әдістер	Өңдеу уақыты (мин)	Қате (%)
Қолмен өңдеу	45–60	5–7
ML (нейрожелі)	10–12	3–4

Кестеден көрінгендей, ЖИ алгоритмдерін қолдану спектроскопиялық деректерді өңдеу уақытын 3–5 есе қысқартады және қателік деңгейін азайтады. Бұл тәжірибелік деректерді өңдеудің тиімділігін арттырып, зерттеу процестерін жылдамдатады, нәтижелер ЖИ алго-

ритмдерінің уақытты үнемдеу тұрғысынан ғана емес, сондай-ақ болжам дәлдігі бойынша да артықшылықтарын айқындайды.

ЖИ-ті нанохимияға интеграциялау. Жасанды интеллектті нанохимиялық зерттеулерге енгізу материалдардың қасиеттерін жоғары дәлдікпен болжауға, оңтайлы синтез шарттарын жылдам анықтауға және реагенттерді тиімді пайдалануға мүмкіндік береді. Соның нәтижесінде экологиялық ауыртпалық төмендеп, ресурстар үнемделеді.

Салыстырмалы талдау. ЖИ негізінде алынған модельдік деректер дәстүрлі кванттық-химиялық есептеулер мен эксперименттік нәтижелермен салыстырылды. Мұндай тәсіл ЖИ-дің дәстүрлі әдістерді толықтырудағы маңызын көрсетті. Зерттеу барысында модельдеу үшін Python ортасындағы «scikit-learn», «TensorFlow» және «PyTorch» кітапханалары қолданылды. Алынған деректерді визуализациялау «Origin Pro» және «Matplotlib» бағдарламалары арқылы жүзеге асырылды. Әдістердің кешенді түрде пайдаланылуы жаңа материалдарды жобалауды жеделдетуге, синтез процестерін оңтайландыруға және экологиялық тұрғыдан қауіпсіз технологияларды дамытуға негіз болды.

Мұнай өндіру саласындағы қолданылуы. ЖИ мен нанохимиялық тәсілдердің үйлесімі өнеркәсіптік процестерде де тиімділігін көрсетті. Атап айтқанда, мұнай өндіруде цеолит негізіндегі немесе металлоксидті наноқұрылымдар қолданылып, қабаттың өткізгіштігін арттыруға, парафиндік шөгінділерді азайтуға және мұнайдың алыну коэффициентін (КИН) жоғарылатуға ықпал етті. Бұл бағыттағы зерттеулер ЖИ-дің көмегімен тиімді реагент құрамдарын болжау арқылы өндірістік көрсеткіштерді жақсартудың жаңа мүмкіндіктерін ашып отыр.

3 - кесте. Жасанды интеллект пен нанохимияның мұнай өндіруде қолданылуы

Қолдану саласы	**Нанохимия рөлі**	**ЖИ рөлі**	**Нәтиже**
Мұнай өндіруді арттыру (EOR)	Цеолит негізіндегі нанобөлшектер қабат өткізгіштігін жоғарылатады	Машиналық оқыту қабат моделін талдап, оңтайлы енгізу шамасын болжайды	Мұнай өндіру 8–12%-ға өседі
Құбырдағы парафин шөгінділерін азайту	Наноқұрылымды қоспалар парафин кристалдануын тежейді	ЖИ алгоритмдері құбырдың температурасын/қысымын бақылап, тәуекелді алдын ала ескертеді	Құбырдағы бітелулер 20–25%-ға азаяды
Экологиялық мониторинг	Нано-сенсорлар ауыр металдарды, күкірт қосылыстарын анықтайды	ЖИ деректерді өңдеп, ластану деңгейін модельдейді	Қоршаған ортаға әсерін ерте анықтау

Мұнай өнеркәсібінде қабаттың параметрлерін (қысым, температура, қанығу дәрежесі) дәл болжау және оларды басқару өндірістің тиімділігін арттыру үшін маңызды. Бұл тұрғыда жасанды интеллект әдістері, әсіресе машиналық оқыту мен нейрондық желілер, қабаттың динамикасын модельдеуде және өндіріс процесін оңтайландыруда кеңінен қолданылып келеді [7, 15–17]. Сонымен қатар, 3 кестеде көрсетілгендей, нанохимиялық тәсілдер мұнай қабаттарының өткізгіштігін арттыруда, парафин шөгінділерін азайтуда және экологиялық мониторингте айтарлықтай рөл атқарады.

Бұл нәтижелерден көрініп тұрғандай, ЖИ мен нанохимияны үйлестіре қолдану мұнай өндіру саласында үш негізгі бағытта тиімділік береді:

- технологиялық – өндірістің өсуіне ықпал ету;

- операциялық – жабдықтардың жұмыс сенімділігін арттыру;

- экологиялық – қоршаған ортаға түсетін техногендік жүктемені төмендету.

Осылайша, ЖИ мен нанохимияның симбиозы дәстүрлі әдістерді толықтыра отырып, мұнай өндірудің жаңа буын технологияларын қалыптастыруға мүмкіндік береді.

Дәстүрлі әдістер, нанохимия, жасанды интелелекті нанохимиямен үйлестіру негізінде мұнай өндіру көлемінің өзгерістерін салыстыруға болады (сурет 2).



2 - сурет. Мұнай өндіру көлемінің салыстырмалы өзгерісі

Суреттен көрініп тұрғандай, дәстүрлі әдістерге қарағанда нанохимиялық тәсілдер және ЖИ құралдарымен бірлескен модельдер мұнай өндірудің айтарлықтай артуына ықпал етеді.

ЖИ алгоритмдері кен орындарындағы қабат қысымын болжауға, өнімділікті модельдеуге және шығындарды оңтайландыруға кеңінен қолданылады. Сонымен қатар, нанокатализаторлардың енгізілуін жасанды интеллект көмегімен көмірсутектерді қайта өңдеу тиімділігін едәуір арттыруға мүмкіндік беретінің алдын ала анықтайды [18 - 19].

4 - кесте. Наноматериал түріне байланысты тиімділікті салыстыру

Наноматериал түрі	Қолданылу аймағы	Тиімділік (салыстырмалы)
Цеолит негізіндегі катализаторлар	Мұнайды крекинглеу процестері	+25% өнімділік
Нанокөміртек (graphene)	Адсорбция, сүзу	+40% тазарту тиімділігі
Металл нанобөлшектер	Катализ (гидрогендеу)	+30% реакция жылдамдығы

Бұл кестеден көрініп тұрғандай, әртүрлі наноматериалдар мұнай өңдеу және экологиялық процестердің тиімділігін айтарлықтай арттырады. Цеолит негізіндегі катализаторлар мұнайды крекинглеу реакцияларында өнімділікті 25%-ға жоғарылатса, нанокөміртек адсорбциялық және сүзу процестерінде тазарту тиімділігін 40%-ға дейін арттырады. Ал металл нанобөлшектер гидрогендеу сияқты каталитикалық реакцияларда 30%-ға дейін жоғары реакция жылдамдығын

қамтамасыз етеді. Бұл деректер нанохимияның өнеркәсіптік және экологиялық маңызын айқындайды.

Энергетикадағы ЖИ және нанотехнология. ЖИ энергетика саласында үлкен көлемдегі мәліметтерді өңдеу, талдау және болжау арқылы жүйелердің тиімділігін арттыруға мүмкіндік береді. Оның негізгі қолданылу бағыттары 5-кестеде берілген.

5 - кесте. Жасанды интеллектің энергетика саласында қолданылуы

Қолдану саласы	Түсініктеме
Сұранысты болжау	Тарихи және климаттық деректер арқылы сұранысты басқару
Предиктивті қызмет көрсету	Ақауларды ерте анықтау және техникалық қауіпсіздікті қамтамасыз ету
Құрылымды оңтайландыру	Энергетикалық қондырғылардың тиімділігін арттыру
Авариялары анықтау	Инфрақұрылымдағы ақауларды ерте анықтау
Логистика	Ресурстарды басқару және жеткізуді автоматтандыру
Қаржылық тиімділік	Авариялар мен шығындарды азайту

Кестеден байқағандай, ЖИ энергетика саласында көпқырлы қолданысқа ие. Сұранысты болжау арқылы өндіріс пен тұтынуды теңестіруге мүмкіндік берілсе, предиктивті қызмет көрсету құрал-жабдықтардың істен шығуын алдын ала анықтап, қауіпсіздікті арттырады. Құрылымды оңтайландыру энергия қондырғыларының тиімділігін жоғарылатады, ал логистикадағы ЖИ ресурстарды дұрыс үлестіруге жағдай жасайды. Сонымен бірге, қаржылық шығындарды азайтып, апаттық жағдайлардың алдын алуы энергетикадағы ЖИ рөлін стратегиялық маңызды етеді.

ЖИ тарихи деректер мен климаттық шарттарды ескере отырып, энергияға деген сұранысты дәл болжайды, бұл артық өндіру мен шығындарды азайтуға мүмкіндік береді [17,18]. Сонымен қатар, сенсорлық деректер (температура, діріл, қысым) негізінде ЖИ құрал-жабдықтардың істен шығуын алдын ала анықтап, апаттық жағдайлардың алдын алады. Мысалы, Siemens компаниясының ЖИ жүйелері техникалық ақауларды ерте диагностикалауда тиімділігін көрсетті [19].

6 - кесте. Түрлі әдістер арқылы тазарту тиімділігін салыстыру

Әдіс	Уақыт шығыны	Тазарту тиімділігі	Экологиялық әсері
Механикалық жинау	Ұзақ	40–50%	Орташа
Химиялық диспергаторлар	Орташа	60–70%	Теріс
Наносорбенттер + ЖИ	Қысқа	85–90%	Төмен

Мұнай төгінділері экожүйеге үлкен қауіп төндіреді. Бұл мәселені шешуде наносорбенттер тиімді құрал болып табылады. Олар төгінділерді қысқа уақыт ішінде жинауға мүмкіндік береді, ал ЖИ негізіндегі жүйелер дрондар арқылы мұнай дақтарының таралуын бақылап, автоматты тазалау шараларын ұсынады.

Мұнай төгінділерін тазарту әдістерін салы-

стыру көрсеткендей, механикалық жинау баяу және тиімділігі төмен әдіс болып табылады (40–50%). Химиялық диспергаторлар тиімділікті 70%-ға дейін жеткізгенімен, олардың қоршаған ортаға әсері теріс. Ал наносорбенттерді ЖИ технологияларымен бірге қолдану тазарту тиімділігін 85–90%-ға дейін арттырып қана қоймай, экологиялық әсерін де азайтады. Бұл тәсіл экологиялық қауіпсіз әрі уақыт шығыны жағынан да тиімді әдіс ретінде ерекшеленеді.

Қорытынды. Жасанды интеллект пен нанотехнология, соның ішінде нанохимияның интеграциясы ғылым мен техниканың дамуы үшін жаңа мүмкіндіктер ашатын қуатты симбиозды білдіреді. Бұл симбиоз жаһандық мәселелерді шешуге қабілетті жаңа материалдар, құрылғылар мен технологияларды жасауға негіз қалайды.

Алайда, бұл әлеуетті толық жүзеге асыру үшін бірқатар маңызды шарттарды орындау қажет:

Инфрақұрылымды дамыту. Нанохимияда ЖИ-ны тиімді қолдану үшін қуатты есептеу ресурстары, ірі дерекқорлар мен арнайы зертханалық жабдықты қамтитын заманауи инфрақұрылым қажет.

Мамандар даярлау. Жасанды интеллект пен нанотехнология тоғысында жұмыс істей алатын, пәнаралық білім мен дағдысы бар жоғары білікті мамандарды даярлау өзекті мәселе болып табылады.

Этикалық аспектілер. Әсіресе медицина мен биотехнология салаларында ЖИ мен нанотехнологияны қолдану кезінде туындайтын этикалық мәселелерді мұқият қарастыру қажет.

Жасанды интеллект пен нанохимияның бірігуі мұнай, энергетика және экология салаларында жаңа технологияларды дамытуға мүмкіндік береді. Бұл бағыттардың үйлесімді интеграциясы болашақта тұрақты даму мақсаттарына қол жеткізудің, табиғи ресурстарды тиімді пайдаланудың және экологиялық қауіпсіздікті қамтамасыз етудің негізгі тетігіне айналуы ықтимал.

Әдебиеттер

1. Gäbler C., Jeschke J., Dietrich S., Nurgazina, G., Schaarschmidt, D., Georgi, C., Schlesinger, M., Mehring, M., & Lang, H. The effect of PEGylated dendrimers on the catalytic activity and stability of palladium particles in the Suzuki reaction // Catalysis Letters. - 2013. - Vol.143(4). - P.317-323. DOI 10.1007/s10562-013-0967-9.

2. Belay T., Abate L., Bachheti R. K., Joshi A. Nanomaterials: introduction, synthesis, characterization, and applications // Advances in Smart Nanomaterials and Their Applications. - Elsevier. - 2023. - P. 1 - 21. DOI 10.1016/B978-0-323-99546-7.00027-6.

3. Нургалиева Д.А., Нургазина Г.М. Получение экологических наноудобрений для улучшения роста растений // Вестник ЕНУ им. Л.Н. Гумилева. Серия техническая. - 2019. – № 3(128). - С.121-125. DOI 10.32523/2616-6771-2019-128-3-121-125.

4. Gutierrez R. Guiding the next technological revolution: Principles for responsible AI and nanotech progress // Artificial Intelligence in the Age of Nanotechnology. - IGI Global, 2024. - C.210-232. DOI 10.4018/979-8-3693-0368-9.ch011

5. Butler K.T., Davies D.W., Cartwright H., Isayev O., Walsh A. Machine learning for molecular and materials science // Nature. - 2018. -Vol. 559(7715).- P.547-555. DOI 10.1038/s41586-018-0337-2.

6. Roco M.C., Grainger D., Alvarez P.J., Badesha, S., Castranova, V., Ferrari, M., Godwin, H., Grodzinski, P., Morris, J., Savage, N., Scott, N., & Wiesner, M. Nanotechnology environmental, health, and safety issues // Nanotechnology Research Directions for Societal Needs in 2020. – Dordrecht: Springer, 2011. - P.159–220. DOI 10.1007/978-94-007-1168-6_5.

7. Encyclopaedia Britannica. Artificial intelligence [Электронный ресурс]. – Режим доступа: https://www.britannica.com/technology/artificial-intelligence. - Дата обращения: 26.04.2025.

8. Rahman A., Deshpande P., Radue M.S., & Odegard, G. M. A machine learning framework for predicting the shear strength of carbon nanotube-polymer interfaces based on molecular dynamics simulation data//Composites Science and Technology. -2021.-Vol.207:108627. DOI 10.1016/j.compscitech.2020.108627.

9. Darwish M.A., Abd-Elaziem W., Elsheikh A., Zayed A.A. Advancements in nanomaterials for nanosensors: a comprehensive review // Nanoscale Advances.- 2024.-Vol.6(16). - P.4015-4046. DOI 10.1039/D4NA00214H.

10. Bayda S., Adeel M., Tuccinardi T., Cordani M., Rizzolio F. The history of nanoscience and nanotechnology: From chemical–physical applications to nanomedicine // Molecules.- 2020. - Vol.25(1).- P.112. DOI 10.3390/molecules25010112.

11. Mak K.-K., Wong Y.-H., Pichika M.R. Artificial intelligence in drug discovery and development // Drug Discovery and Evaluation: Safety and Pharmacokinetic Assays. – 2024. – P.1461–1498. DOI 10.1007/978-3-031-35529-5_92.

12. Verhelst M., Murmann B. Machine learning at the edge // NANO-CHIPS 2030: On-Chip AI for an Efficient Data-Driven World. -2020.- P. 293–322. DOI 10.1007/978-3-030-18338-7_18.

13. Yao L., Chen Q. Chapter 10- Machine learning in nanomaterial electron microscopy data analysis // Intelligent Nanotechnology. - Amsterdam: Elsevier.- 2023. - P.279–305. DOI 10.1016/B978-0-323-85796-3.00010-X.

14. Sanchez-Lengeling B., Aspuru-Guzik A. Inverse molecular design using machine learning: Generative models for matter engineering // Science. -2018. - Vol.361 (6400). - P.360 - 365. DOI 10.1126/science.aat2663

15. ISO. What is AI? URL: https://www.iso.org. - Қаралған күні: 21.05.2025.

16. Wikipedia. Artificial intelligence. URL: https://en.wikipedia.org .- Қаралған күні: 21.00.2025.

17. Prajapat R., Yadav H., Shaik A.H. A review of the prospects, efficacy and sustainability of nanotechnology-based approaches for marine oil spill remediation // Waste Management Research. -2025. - Vol. 43 (4). - P.507-521. DOI: 10.1177/0734242X241257095.

18. Digital Energy. Искусственный интеллект в электроэнергетике. – 2024. URL: https://www.digital-energy.ru.-Қ аралған күні: 21.05.2025.

19.1AI.gov.ru. Применение ИИ в энергетике в целях устойчивого развития. – 2024. URL: https://ai.gov.ru .- Қаралған күні: 22.05.2025.

References

1. Gäbler C., Jeschke J., Dietrich S., Nurgazina, G., Schaarschmidt, D., Georgi, C., Schlesinger, M., Mehring, M., & Lang, H. The effect of PEGylated dendrimers on the catalytic activity and stability of palladium particles in the Suzuki reaction // Catalysis Letters. - 2013. - Vol.143(4). - P.317-323. DOI 10.1007/s10562-013-0967-9.

2. Belay T., Abate L., Bachheti R. K., Joshi A. Nanomaterials: introduction, synthesis, characterization, and applications // Advances in Smart Nanomaterials and Their Applications. - Elsevier. - 2023. - P. 1 - 21. DOI 10.1016/B978-0-323-99546-7.00027-6.

3. Нургалиева Д.А., Нургазина Г.М. Получение экологических наноудобрений для улучшения роста растений // Вестник ЕНУ им. Л.Н. Гумилева. Серия техническая. - 2019. – № 3(128). - С.121-125.

DOI 10.32523/2616-6771-2019-128-3-121-125.

4. Gutierrez R. Guiding the next technological revolution: Principles for responsible AI and nanotech progress // Artificial Intelligence in the Age of Nanotechnology. - IGI Global, 2024. - C.210-232. DOI 10.4018/979-8-3693-0368-9.ch011

5. Butler K.T., Davies D.W., Cartwright H., Isayev O., Walsh A. Machine learning for molecular and materials science // Nature. - 2018. -Vol. 559(7715).- P.547-555. DOI 10.1038/s41586-018-0337-2.

6. Roco M.C., Grainger D., Alvarez P.J., Badesha, S., Castranova, V., Ferrari, M., Godwin, H., Grodzinski, P., Morris, J., Savage, N., Scott, N., & Wiesner, M. Nanotechnology environmental, health, and safety issues // Nanotechnology Research Directions for Societal Needs in 2020. – Dordrecht: Springer, 2011. - P.159–220. DOI 10.1007/978-94-007-1168-6_5.

7. Encyclopaedia Britannica. Artificial intelligence [Электронный ресурс]. – Режим доступа: https://www.britannica.com. - Дата обращения: 26.04.2025.

8. Rahman A., Deshpande P., Radue M.S., & Odegard, G. M. A machine learning framework for predicting the shear strength of carbon nanotube-polymer interfaces based on molecular dynamics simulation data//Composites Science and Technology. -2021.-Vol.207:108627. DOI 10.1016/j.compscitech.2020.108627.

9. Darwish M.A., Abd-Elaziem W., Elsheikh A., Zayed A.A. Advancements in nanomaterials for nanosensors: a comprehensive review // Nanoscale Advances.- 2024.-Vol.6(16). - P.4015-4046. DOI 10.1039/D4NA00214H.

10. Bayda S., Adeel M., Tuccinardi T., Cordani M., Rizzolio F. The history of nanoscience and nanotechnology: From chemical–physical applications to nanomedicine // Molecules.- 2020. - Vol.25(1).- P.112. DOI 10.3390/molecules25010112.

11. Mak K.-K., Wong Y.-H., Pichika M.R. Artificial intelligence in drug discovery and development // Drug Discovery and Evaluation: Safety and Pharmacokinetic Assays. – 2024. – P.1461–1498. DOI 10.1007/978-3-031-35529-5_92.

12. Verhelst M., Murmann B. Machine learning at the edge // NANO-CHIPS 2030: On-Chip AI for an Efficient Data-Driven World. -2020.- P. 293–322. DOI 10.1007/978-3-030-18338-7_18.

13. Yao L., Chen Q. Chapter 10- Machine learning in nanomaterial electron microscopy data analysis // Intelligent Nanotechnology. - Amsterdam: Elsevier.- 2023. - P.279–305. DOI 10.1016/B978-0-323-85796-3.00010-X.

14. Sanchez-Lengeling B., Aspuru-Guzik A. Inverse molecular design using machine learning: Generative models for matter engineering // Science. -2018. - Vol.361 (6400). - P.360 - 365. DOI 10.1126/science.aat2663.

15. ISO. What is AI? URL: https://www.iso.org. - Date of access: 21.05.2025.

16. Wikipedia. Artificial intelligence. URL: https://en.wikipedia.org.- Date of access: 21.05.2025.

17. Prajapat R., Yadav H., Shaik A.H. A review of the prospects, efficacy and sustainability of nanotechnology-based approaches for marine oil spill remediation // Waste Management Research. -2025. - Vol. 43 (4). - P.507-521. DOI: 10.1177/0734242X241257095.

18. Digital Energy. Искусственный интеллект в электроэнергетике. – 2024. URL: https://www.digital-energy.ru.- Date of access: 21.05.2025

19.1AI.gov.ru. Применение ИИ в энергетике в целях устойчивого развития. – 2024. URL: https://ai.gov.ru .- Date of access: 21.05.2025

Авторлар туралы мәліметтер

Нұрғазина Г.М.- PhD, доцент м.а., Астана халықаралық университеті, Астана, Қазақстан, e-mail: ast.gulnar@mail.ru;

Нургалиева Д.А.- п.ғ.к., доцент, Астана халықаралық университеті, Астана, Қазақстан, e-mail: dnurgalieva60@mail.ru;

Құдайбергенова С.Ж. - х.ғ.к., доцент, С.Сейфуллин атындағы Қазақ агротехникалық зерттеу университеті, Астана, Қазақстан, e-mail: ksg75.75@mail.ru;

Information about authors

Nurgazina G.M. - PhD, Acting Associate Professor , Astana International University, Astana, Kazakhstan, e-mail: ast.gulnar@mail.ru

Nurgaliyeva D.A. - Candidate of Pedagogical Sciences, Associate Professor,Astana International University, Astana, Kazakhstan, e-mail: dnurgalieva60@mail.ru;

Kudaibergenova S.Zh. – Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor, S. Seifullin Kazakh Agrotechnical Research University, Astana, Kazakhstan, e-mail: ksg75.75@mail.ru.