ВСТУП

Автоматизована ідентифікація багатоатомних молекул за допомогою методів машинного розпізнавання інфрачервоних (ІЧ) спектрів є важливим напрямком досліджень і використання в різних галузях, таких як хімія, фармація, біологія та матеріалознавство. Застосування методів машинного розпізнавання дозволяє ефективно обробляти великі обсяги даних ІЧ спектрів, покращуючи швидкість і точність ідентифікації молекул. Автоматизована обробка даних також спрощує інтеграцію цих методів у виробничі та лабораторні процеси, роблячи їх більш доступними та ефективними.

Метод ІЧ спектроскопії дозволяє отримувати характеристичні вібраційні спектри для різних хімічних з'єднань. Автоматизована обробка цих спектрів за допомогою алгоритмів машинного навчання дозволяє точно ідентифікувати хімічні сполуки у зразках.