

Artificial Intelligence (AI) in Chemical Analysis for Food Safety: Current Applications, Challenges and Future Perspectives

Vu Van Du^{1,*}, Vu Hong Son², Le Duc Anh¹, Vu Thi Thu Thuy^{1,2}, Le Sy Phan Anh^{1,2}, Tran Thi Thanh Thuy¹, Nguyen Chau Anh¹, Pham Hoang Linh¹, Vu Thi Thanh³, Dao Van Minh⁴

¹ *Reference Testing and Agrifood Quality Services Center (RETAQ), Ministry of Agriculture and Environment, Hanoi, Vietnam*

² *School of Chemistry and Life Sciences, Hanoi University of Science and Technology, Hanoi, Vietnam*

³ *National Authority for Agro-Forestry-Fishery Quality, Processing and Market Development Center 1 (NAFIQPM-Center 1), Ministry of Agriculture and Environment, Haiphong, Vietnam*

⁴ *National Academy for Advanced Technology and Innovation, Ministry of Science and Technology, Hanoi, Vietnam*

Abstract

Artificial intelligence (AI) can support chemical analysis for food safety, but strong predictive performance alone does not establish suitability for routine laboratory use. Drawing on a literature review and bibliometric analyses covering 2015–2025, this presentation examines analytical applications, barriers to transfer, and requirements for controlled implementation.

Applications include prediction from spectroscopic data, authenticity assessment using elemental and isotope fingerprints, and screening supported by liquid chromatography–high-resolution mass spectrometry. Published studies illustrate these roles while distinguishing model outputs from defensible analytical conclusions. Key considerations include representative data, independent evaluation, variation in matrices and instruments, interpretability, and uncertainty.

The review proposes a cumulative four-level maturity framework: predictive, robust, interpretable and uncertainty-aware, and validation-ready. This framework organizes evidence requirements beyond performance metrics, linking a defined operating domain and evaluation under relevant variation with traceable reporting and controlled use. It is a proposed framework, not an accreditation standard. ISO/IEC 17025 and Eurachem guidance provide the broader laboratory-competence and method-validation context.

A practical starting point is a narrowly defined task, a credible baseline, predefined acceptance criteria, independent testing, and comparison with the existing workflow before controlled use. Future opportunities in multimodal learning, foundation models, and AI assistants require evaluation for their intended applications. The central contribution is an evidence-oriented pathway connecting predictive capability with results that laboratories can review, explain, and use within a defined scope.

Keywords: *Artificial intelligence; Food safety; Chemical analysis; Method validation; explainable AI.*

*Corresponding author: Vu Van Du

E-mail: vydu@mae.gov.vn / yuvandubk@gmail.com;

Phone: (+84) 989002548

Trí tuệ nhân tạo trong phân tích hóa học phục vụ an toàn thực phẩm: Các ứng dụng hiện nay, thách thức và triển vọng tương lai

Vũ Văn Du^{1,*}, Vũ Hồng Sơn², Lê Đức Anh¹, Vũ Thị Thu Thủy^{1,2}, Lê Sỹ Phan Anh^{1,2}, Trần Thị Thanh Thủy¹, Nguyễn Châu Anh¹, Phạm Hoàng Linh¹, Vũ Thị Thanh³, Đào Văn Minh⁴

¹ Trung tâm Kiểm nghiệm Kiểm chứng và Dịch vụ Chất lượng (RETAQ), Bộ Nông nghiệp và Môi trường, Hà Nội, Việt Nam

² Trường Hóa và Khoa học Sự sống, Đại học Bách khoa Hà Nội, Hà Nội, Việt Nam

³ Trung tâm Chất lượng, Chế biến và Phát triển thị trường vùng 1 (NAFIQPM 1), Bộ Nông nghiệp và Môi trường, Hải Phòng, Việt Nam

⁴ Viện Đổi mới sáng tạo Quốc gia, Bộ Khoa học và Công nghệ, Hà Nội, Việt Nam

Tóm tắt

Trí tuệ nhân tạo (AI) hỗ trợ phân tích hóa học phục vụ an toàn thực phẩm, nhưng dự đoán tốt chưa đủ để sử dụng thường quy. Dựa trên tổng quan tài liệu và phân tích trách lượng thư mục giai đoạn 2015–2025, báo cáo xem xét ứng dụng, trở ngại chuyển giao và điều kiện triển khai có kiểm soát.

Các ứng dụng gồm dự đoán từ dữ liệu phổ, đánh giá tính xác thực bằng dấu vân tay nguyên tố và đồng vị, sàng lọc bằng sắc ký lỏng–khối phổ phân giải cao. Nghiên cứu đã công bố minh họa sự khác biệt giữa đầu ra mô hình và kết luận phân tích có căn cứ. Những yếu tố cần xem xét gồm tính đại diện của dữ liệu, đánh giá độc lập, biến thiên nền mẫu và thiết bị, khả năng giải thích và độ không đảm bảo.

Báo cáo đề xuất thang trường thành tích lũy bốn bậc: dự đoán; ổn định trước biến thiên; có khả năng giải thích và đánh giá độ không đảm bảo; sẵn sàng xác nhận giá trị sử dụng. Khung này tổ chức yêu cầu bằng chứng, từ phạm vi áp dụng đến truy xuất kết quả và kiểm soát sử dụng; không phải tiêu chuẩn công nhận. ISO/IEC 17025 và hướng dẫn Eurachem cung cấp nền tảng tham chiếu.

Phòng kiểm nghiệm nên chọn tác vụ hẹp, phương án đối chứng, tiêu chí chấp nhận trước kiểm tra độc lập và đối chiếu quy trình hiện hành. Học đa phương thức, mô hình nền tảng và trợ lý AI cần đánh giá theo mục đích sử dụng. Đóng góp chính của ứng dụng AI/ML hiện nay là kết nối dự đoán với kết quả có thể giải trình trong phạm vi xác định.

Từ khóa: Trí tuệ nhân tạo; An toàn thực phẩm; Phân tích hóa học; Xác nhận giá trị sử dụng; AI diễn giải.

*Corresponding author: Vu Van Du

E-mail: vydu@mae.gov.vn / yuvandubk@gmail.com;

Phone: (+84) 989002548