

<https://doi.org/10.5281/zenodo.17533542>

Doroshuk Hanna,

As. Professor, DrSc. in Economics and Management,
Department of Management and Administration
Education and Research Institute „Karazin Business School“
Kharkiv National University named by V. N. Karazin,
ORCID: 0000-0002-0340-7514, e-mail: doroshuk.anna@gmail.com

AI TOOLS IN SCIENTIFIC DISCOVERY — TRANSFORMING RESEARCH PARADIGMS

ABSTRACT. Artificial intelligence (AI) is increasingly transforming the landscape of scientific research by providing advanced tools and approaches that enhance hypothesis generation, data analysis, and experimental modeling. Despite ongoing concerns regarding AI's broader societal impacts, its application in science offers tangible benefits, enabling researchers to identify patterns in large and complex datasets that are difficult for humans to discern, formulate new hypotheses based on existing studies, and conduct simulations that accelerate the testing and validation of ideas. This study presents a systematic review of scientific literature and AI tool documentation used in research, drawing on data from Scopus, Web of Science, and Semantic Scholar; as well as practical examples of AI system applications across various scientific domains. The analyzed tools include large language models (LLMs) such as ChatGPT, GPT-4, and Claude; Elicit; Scite.ai; ResearchRabbit; and machine learning platforms including Scikit-learn, TensorFlow, and PyTorch. Research methods involve a systematic literature review to identify trends, a comparative analysis of tools in terms of functionality and applicability, and an examination of practical cases of AI use for hypothesis generation, data analysis, and modeling. Results indicate that AI substantially facilitates five key areas: (1) idea generation and hypothesis formulation through literature and citation analysis; (2) detection of patterns and correlations in large datasets; (3) automation of literature review and visualization of scientific networks; (4) AI-driven simulations and generative modeling for predicting outcomes and exploring new experiments; and (5) logical consistency checking of hypotheses against existing data and theoretical frameworks. While AI does not fundamentally redefine the scientific method, it significantly increases research efficiency, broadens the scope of scientific inquiry, and opens new avenues for discoveries previously inaccessible. The rapid evolution of AI tools creates a dynamic environment for their integration into scientific practice, necessitating continuous assessment of their capabilities, limitations, and ethical implications.

KEYWORDS: artificial intelligence, scientific research.

INTRODUCTION. Today, AI contributes to scientific discovery through the analysis of large datasets, the identification of patterns that are difficult for humans to discern, the generation of hypotheses based on existing research, and modeling and simulations that accelerate the testing of ideas. While it cannot be said that AI fundamentally transforms the methodology of science itself, it is clear that it is changing it. The active use of AI tools in scientific research enables achievements that would not be possible without their application.

DATA AND METHODS. Data: Scientific articles and publications on the application of AI in research activities retrieved from bibliometric databases such as Scopus, Web of Science, and Semantic Scholar. Documentation and descriptions of specific AI tools (LLMs, Elicit, Scite.ai, ResearchRabbit, ML platforms, etc.), as well as case studies of their practical use in hypothesis generation, data analysis, and modeling. Methods: A systematic literature review to identify key trends, methods, and areas of AI application in science; comparative analysis of AI tools in terms of functionality, capabilities, and suitability for scientific research.

RESULTS. The use of AI tools in scientific research is transforming methods of hypothesis generation, data analysis, and modeling, thereby expanding the capabilities of scientific methodology and opening new avenues for investigation [1,3]. Hypothesis generation, as a key stage of the innovation process, benefits from AI systems capable of providing more accurate predictions, increasing the likelihood of successful innovation, shortening search duration, and enhancing expected returns [2].

The role of AI tools in research, hypothesis generation, and hypothesis testing is summarized below.

1. **Idea Generation and Hypothesis Formulation.** AI can assist researchers in identifying new research directions and formulating hypotheses based on the analysis of existing literature. Large Language Models (LLMs): ChatGPT, GPT-4, Claude – capable of summarizing scientific articles, suggesting alternative explanations, and formulating conjectures. Elicit (by Ought): A research-oriented tool that helps identify relevant publications and formulate hypotheses based on existing data. Scite.ai: Analyzes citation patterns and the context of scientific publications, revealing trends that may inspire new hypotheses.

2. **Data Analysis and Pattern Recognition.** AI can detect patterns that are difficult to identify using traditional methods. Machine Learning (ML) Platforms: Scikit-learn, TensorFlow, PyTorch – used to identify correlations and predictive models, which can inform new hypotheses. Data-driven Hypothesis Generation: Systems that propose hypotheses based on the analysis of large datasets (e.g., in bioinformatics and genomics).

3. **Literature Review Automation.** Semantic Scholar and Connected Papers: Help uncover relationships between publications and generate new hypotheses based on existing knowledge. ResearchRabbit: Visualizes the development of ideas and citation networks within scientific domains, facilitating the identification of gaps for new hypotheses.

4. **Simulations and Modeling.** AI-driven simulations (e.g., in chemistry or biology) – can predict reactions and effects, suggesting new scientific questions. Reinforcement Learning and Generative Models: Used to generate novel molecules or structures, leading to hypotheses about potential properties and functions.

5. **Automated Logical Consistency Checking.** LLM-based tools can assess whether a hypothesis is consistent with existing data and theory, identifying logical gaps and inconsistencies.

CONCLUSION. The use of large language models, machine learning platforms, and AI-driven simulations demonstrates how modern technologies can influence hypothesis generation, pattern recognition, and model construction. This, in turn, contributes to the development of the theory of the scientific method and enhances our understanding of the role of data and computational tools in research practice. The integration of AI tools into the research process also accelerates the pace of scientific discovery.

REFERENCES

1. Acemoglu, D., Johnson, S. (2023). Power and Progress: Our Thousand-Year Struggle over Technology and Prosperity. Basic Books. [https://samataindia.org.in/data/books/Power-and-Progress-Our-Thousand-Year-Struggle-Over-Technology-and-Prosperity-\(Daron-Acemoglu-Simon-Johnson\)-\(Z-Library\).pdf](https://samataindia.org.in/data/books/Power-and-Progress-Our-Thousand-Year-Struggle-Over-Technology-and-Prosperity-(Daron-Acemoglu-Simon-Johnson)-(Z-Library).pdf)
2. Agrawal, A. K., McHale, J., & Oettl, A. (2024). Artificial intelligence and scientific discovery: A model of prioritized search. *Research Policy* 53(5), 104989. <https://doi.org/10.1016/j.respol.2024.104989>
3. Fu, V. (2025). AI for Science: Opportunities, Challenges, and Future Directions. *Journal of data science: JDS* 24(1), 106-124. <https://doi.org/10.6339/25-JDS1214>

Дорошук Ганна,
доктор економічних наук, доцент,
Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна,
ORCID: 0000-0002-0340-7514, e-mail: doroshuk.anna@gmail.com

ІНСТРУМЕНТИ ШТУЧНОГО ІНТЕЛЕКТУ В НАУКОВИХ ВІДКРИТТЯХ — ТРАНСФОРМУВАННЯ ДОСЛІДНИЦЬКИХ ПАРАДИГМ

АНОТАЦІЯ. Штучний інтелект (ШІ) дедалі більше трансформує ландшафт наукових досліджень, надаючи передові інструменти та підходи, що покращують генерування гіпотез, аналіз даних та експериментальне моделювання. Незважаючи на постійні занепокоєння щодо ширшого впливу ШІ на суспільство, його застосування в науці пропонує відчутні переваги, дозволяючи дослідникам виявляти закономірності у великих та складних наборах даних, які важко розпізнати людині, формувати нові гіпотези на основі існуючих досліджень та проводити моделювання, що прискорює тестування та перевірку ідей. Це дослідження представляє систематичний огляд наукової літератури та документації щодо інструментів ШІ, що використовуються в дослідженнях, спираючись на дані Scopus, Web of Science та Semantic Scholar, а також практичні приклади застосування систем ШІ в різних наукових галузях. Проаналізовані інструменти включають ChatGPT, GPT-4 та Claude; Elicit; Scite.ai; ResearchRabbit; та платформи машинного навчання, включаючи Scikit-learn, TensorFlow та PyTorch. Методи дослідження включають систематичний огляд літератури для виявлення тенденцій, порівняльний аналіз інструментів з точки зору функціональності та застосовності, а також вивчення практичних випадків використання ШІ для генерації гіпотез, аналізу даних та моделювання. Результати показують, що ШІ суттєво сприяє п'яти ключовим напрямкам: (1) генерації ідей та формулюванню гіпотез за допомогою аналізу літератури та цитувань; (2) виявленню закономірностей та кореляцій у великих наборах даних; (3) автоматизації огляду літератури та візуалізації наукових мереж; (4) симуляціям та генеративному моделюванню на основі ШІ для прогнозування результатів та дослідження нових експериментів; та (5) перевірці логічної узгодженості гіпотез з існуючими даними та теоретичними основами. Хоча ШІ принципово не переосмислює науковий метод, він значно підвищує ефективність досліджень, розширює сферу наукового дослідження та відкриває нові шляхи для відкриттів, які раніше були недоступні. Швидка еволюція інструментів ШІ створює динамічне середовище для їх інтеграції в наукову практику, що вимагає постійної оцінки їхніх можливостей, обмежень та етичних наслідків.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: штучний інтелект, наукові дослідження.