Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева»

Факультет цифровых технологий и химического инжиниринга

Кафедра информационных компьютерных технологий

ОТЧЕТ

«Поиск научных работ и патентов по теме: применение искусственного интеллекта в химии»

Ведущий преподаватель, к.т.н. Зубов Д.В.

СТУДЕНТКА группы КС-30 Плюснина В.В.

Москва

2024

Оглавление

Оглавление 2

Реферат 4

Введение 5

Русскоязычный поиск 6

Статьи 6

Авторы 7

Выводы по русскоязычному поиску 7

Англоязычный поиск 8

Статьи 8

Авторы 9

Журналы 9

Выводы по англоязычному поиску 10

Заключение 11

Список литературы 12

Реферат

(Отчет 12 с., 11 источников.)

Поиск научных работ и патентов: использование искусственного интеллекта в химии.

***Цель работы**:* выявить актуальность темы “Использование искусственного интеллекта в химии”.

В ходе исследования были изучены такие материалы как научные статьи, специализированные журналы и зарегистрированные патенты в русских и английских источниках, посвящённые теме применения искусственного интеллекта и машинного обучения в разных областях химии. Была проанализирована актуальность данной темы, её развитие в последние годы и области применения.

Объектом исследования являются публикации об использовании машинного обучения и искусственного интеллекта в химии.

В ходе выполнения НИР получены следующие результаты:

1. Определены области применения искусственного интеллекта в химических исследованиях.
2. Определены ключевые слова для поиска по теме.
3. Проведен поиск публикаций, журналов и патентов в русскоязычных источниках.
4. Проведен поиск публикаций, журналов и патентов в англоязычных источниках.
5. Сделаны частные выводы по результатам русскоязычного и англоязычного поиска, а также глобальный вывод о значимости темы исследования.

Введение

В современном мире информационные технологии активно проникают в различные сферы, оказывая значительное влияние как на повседневную жизнь, так и на научные исследования. Эти технологии нередко играют ключевую роль в открытии новых феноменов и достижении научных прорывов. Одной из наиболее актуальных технологий сегодня является машинное обучение, которое находит применение в самых разных областях. В науке машинное обучение может быть использовано для предсказания и моделирования различных процессов, свойств веществ и систем.

Химия сегодня является одной из наиболее динамично развивающихся наук, и это развитие во многом обусловлено использованием современных технологий. Они позволяют моделировать, создавать и исследовать различные вещества и реакции, оптимизируя и упрощая многие процессы. В данной работе рассматривается применение машинного обучения в различных областях химии и актуальность данной тематики.

Русскоязычный поиск

Тема исследования: Использование искусственного интеллекта в химии

Ключевые слова: Искусственный интеллект, машинное обучение, нейронные сети, химия

Поиск по ключевым словам: Всего найдена 131 публикация.

Статьи

1. **Баскин И.И.** Искусственный интеллект в синтетической химии: достижения и перспективы / Баскин И.И., Маджидов Т.И., Антипин И.С., Varnek A.A. // Успехи химии. – 2017 – №11 – с. 1127-1156. – ISSN 0042-1308, eISSN 1817-5651
2. **Глебов М.Б.** Применение нейронных сетей в химии и химической технологии / Глебов М.Б., Галушкин А.И. // Нейрокомпьютеры: разработка, применение. – 2003. – № 3-4. – С. 66-107. – ISSN 1999-8554.
3. **Губанова С.А.** Машинное обучение, искусственный интеллект и химия: как интеллектуальные алгоритмы меняют моделирование и лабораторию / Губанова С.А. // Реформирование и развитие естественных и технических наук: сборник материалов XVI-ой международной очно-заочной научно-практической конференции. – Москва, 2023. – С. 106-112. – УДК: 004.838.2. – Издательство: Научно-издательский центр "Империя".
4. **Измоденов Д.В.** Машинное обучение в квантовой химии / Измоденов Д.В., Лейбин И.В., Озеров Г.К., Безруков Д.С., Синицкий А.В. // Химия, физика, биология: пути интеграции: Сборник тезисов докладов VIII Всероссийской научной молодежной школы-конференции. – Москва, 2020. – С. 19. – Издательство: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук.

5. **Ширяева А.А.** Совершенствование процесса подбора реагентов промышленной химии с использованием методов машинного обучения / Ширяева А.А., Пасечников В.В., Диденко В.Ю. // Основы инновационных технологий нефтяной и газовой промышленности: Сборник трудов Всероссийской научной конференции с международным участием, посвященной 35-летию ИПНГ РАН. – Москва, 2022. – С. 165-166. – Издательство: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем нефти и газа Российской академии наук.

Авторы

1. Антипин Игорь Сергеевич; число публикаций в РИНЦ – 424, индекс Хирша – 32
2. Баскин Игорь Иосифович; число публикаций в ядре РИНЦ – 212, индекс Хирша – 32
3. Маджидов Тимур Исмаилович; число публикаций в ядре РИНЦ – 80, индекс Хирша – 17
4. Сенько Олег Валентинович; число публикаций в ядре РИНЦ – 137, индекс Хирша – 10

Выводы по русскоязычному поиску

На данную тему найдено по ключевым словам «искусственный интеллект, химия» была найдена 131 статья, что является удовлетворительным количеством. Это означает, что тема сформулирована не слишком обширно и не слишком узко. Статьи по теме применения машинного обучения в химии входят в РИНЦ, из чего можно заключить, что это направление актуально. Так же по данной теме были найдены патенты, тоже входящие в РИНЦ. Большая часть статей и патентов была опубликована за последние пять лет, что показывает актуальность данного направления и растущий к нему интерес и спрос.

Англоязычный поиск

Тема: Application of artificial intelligence in chemistry

Ключевые слова: Artificial intelligence, machine learning, chemistry

Поиск: 28203 статьи

Статьи

1. **Matheus C. Colaço.** Supramolecular Chemistry: Exploring the Use of Electronic Structure, Molecular Dynamics, and Machine Learning Approaches / Matheus C. Colaço, Vinícius A. Glitz, Amanda K. Jacobs, Vinícius C. Port, Giovanni F. Caramori // European Journal of Organic Chemistry. – 2024. – Vol. 27. – Issue 27.
2. **Lei He.** Applications of computational chemistry, artificial intelligence, and machine learning in aquatic chemistry research / Lei He, Lu Bai, Dionysios D. Dionysiou, Zongsu We, Richard Spinney, Chu Chu, Zhang Lin, Ruiyang Xiao // Chemical Engineering Journal. – 2021 – Vol. 426.
3. **Luwei Miao.** Progress toward adsorption mechanism exploration method for capacitive deionization: Experimental, mathematical model, computational chemistry and machine learning / Luwei Miao, Ming Gao, Weilong Xiao, Yuchen Kang, Ran Li, Hao Kong, Haiyan Mou, Wenqing Chen, Tianqi Ao // Desalination. – 2024 – Vol. 586.
4. **Haripriya Thalla.** Supervised Machine-Learning Algorithm using Low Data Sets: Flow Chemistry Optimization of the Key Urea Moiety Construction in Larotrectinib / Haripriya Thalla, Varshini Uma Jayaraman, Maheshkumar Uppada, Vishnuvardhan Reddy Eda, Saikat Sen, Rakeshwar Bandichhor, Srinivas Oruganti // Organic Process Research & Development. – 2024.
5. **Markus Meuwly.** Machine Learning for Chemical Reactions / Markus Meuwly // Chemical Reviews. – 2021 – Vol. 121. – Issue 16.

6. **John A. Keith.** Combining Machine Learning and Computational Chemistry for Predictive Insights Into Chemical Systems / John A. Keith, Valentin Vassilev-Galindo, Bingqing Cheng, Stefan Chmiela, Michael Gastegger, Klaus-Robert Müller, Alexandre Tkatchenko // Chemical Reviews. – 2021 – Vol. 121. – Issue 16.

Авторы

1. Lin Zhang, H-index 76, 439 публикаций, 20548 цитирований.
2. Caramori Giovanni Finoto, H-index 24, 134 публикаций, 1890 цитирований.
3. Markus Meuwly, H-index 51, 230 публикаций, 10248 цитирований.
4. Ao Tianqi, H-index 24, 129 публикаций, 1694 цитирований.
5. Bandichhor Rakeshwar, H-index 22, 134 публикаций, 2312 цитирований.

Журналы

1. Chemical Engineering Journal, H-index 309, Q1.
2. Chemical Reviews, H-index 833, Q1.
3. European Journal of Organic Chemistry, H-idex 173, Q1.
4. Desalination, H-index 231, Q1.
5. Organic Process Research and Development, H-idex 127, Q1.

Выводы по англоязычному поиску

Поиск на английском языке дал намного больше источников и статей, причём в самых разных отраслях химии. По ключевым словам artificial intelligence + chemistry на ScienceDirect нашлось почти 30 тысяч результатов. Есть огромное многообразие статей и журналов, которые имеют очень высокие индексы и которые хоть и не направлены по своей тематике конкретно на применение искусственного интеллекта в химии, но публиковали статьи по этой тематике, а так же немалое количество авторов с довольно высоким h-индексом, занимающихся или интересующихся этой темой. За рубежом использование машинного обучения в химии является более востребованным и актуальным вопросом, нежели чем у нас, и это демонстрируют количество статей, журналов и авторов.

Можно заключить, что по данной тематике лучше проводить поиск на английском, а так же что эта тема является крайне актуальной и исследуемой в настоящее время.

Заключение

В ходе исследования было установлено, что данная тема больше актуальна за рубежом, нежели чем в России: поиск в англоязычных источниках дал намного больше статей и авторов, причём большинство статей были опубликованы за последние годы. Это подчёркивает актуальность и востребованность данной темы, а так же интерес многих авторов и научных журналов к ней. У нас применение машинного обучения в химии не настолько развито, но интерес к этой теме есть: были найдены статьи, выложенные за последние годы, как и найдены авторы, заинтересованные в этой теме, и можно предполагать, что в будущем данное направление будет лишь расти.

Список литературы

1. **Баскин И.И.** Искусственный интеллект в синтетической химии: достижения и перспективы / Баскин И.И., Маджидов Т.И., Антипин И.С., Varnek A.A. // Успехи химии. – 2017 – №11 – с. 1127-1156. – ISSN 0042-1308, eISSN 1817-5651
2. **Глебов М.Б.** Применение нейронных сетей в химии и химической технологии / Глебов М.Б., Галушкин А.И. // Нейрокомпьютеры: разработка, применение. – 2003. – № 3-4. – С. 66-107. – ISSN 1999-8554.
3. **Губанова С.А.** Машинное обучение, искусственный интеллект и химия: как интеллектуальные алгоритмы меняют моделирование и лабораторию / Губанова С.А. // Реформирование и развитие естественных и технических наук: сборник материалов XVI-ой международной очно-заочной научно-практической конференции. – Москва, 2023. – С. 106-112. – УДК: 004.838.2. – Издательство: Научно-издательский центр "Империя".
4. **Измоденов Д.В.** Машинное обучение в квантовой химии / Измоденов Д.В., Лейбин И.В., Озеров Г.К., Безруков Д.С., Синицкий А.В. // Химия, физика, биология: пути интеграции: Сборник тезисов докладов VIII Всероссийской научной молодежной школы-конференции. – Москва, 2020. – С. 19. – Издательство: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук.
5. **Ширяева А.А.** Совершенствование процесса подбора реагентов промышленной химии с использованием методов машинного обучения / Ширяева А.А., Пасечников В.В., Диденко В.Ю. // Основы инновационных технологий нефтяной и газовой промышленности: Сборник трудов Всероссийской научной конференции с международным участием, посвященной 35-летию ИПНГ РАН. – Москва, 2022. – С. 165-166. – Издательство: Федеральное

государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем нефти и газа Российской академии наук.

6. **Matheus C. Colaço.** Supramolecular Chemistry: Exploring the Use of Electronic Structure, Molecular Dynamics, and Machine Learning Approaches / Matheus C. Colaço, Vinícius A. Glitz, Amanda K. Jacobs, Vinícius C. Port, Giovanni F. Caramori // European Journal of Organic Chemistry. – 2024. – Vol. 27. – Issue 27.
7. **Lei He.** Applications of computational chemistry, artificial intelligence, and machine learning in aquatic chemistry research / Lei He, Lu Bai, Dionysios D. Dionysiou, Zongsu We, Richard Spinney, Chu Chu, Zhang Lin, Ruiyang Xiao // Chemical Engineering Journal. – 2021 – Vol. 426.
8. **Luwei Miao.** Progress toward adsorption mechanism exploration method for capacitive deionization: Experimental, mathematical model, computational chemistry and machine learning / Luwei Miao, Ming Gao, Weilong Xiao, Yuchen Kang, Ran Li, Hao Kong, Haiyan Mou, Wenqing Chen, Tianqi Ao // Desalination. – 2024 – Vol. 586.
9. **Haripriya Thalla.** Supervised Machine-Learning Algorithm using Low Data Sets: Flow Chemistry Optimization of the Key Urea Moiety Construction in Larotrectinib / Haripriya Thalla, Varshini Uma Jayaraman, Maheshkumar Uppada, Vishnuvardhan Reddy Eda, Saikat Sen, Rakeshwar Bandichhor, Srinivas Oruganti // Organic Process Research & Development. – 2024.
10. **Markus Meuwly.** Machine Learning for Chemical Reactions / Markus Meuwly // Chemical Reviews. – 2021 – Vol. 121. – Issue 16.
11. **John A. Keith.** Combining Machine Learning and Computational Chemistry for Predictive Insights Into Chemical Systems / John A. Keith, Valentin Vassilev-Galindo, Bingqing Cheng, Stefan Chmiela, Michael Gastegger, Klaus-Robert Müller, Alexandre Tkatchenko // Chemical Reviews. – 2021 – Vol. 121. – Issue 16.