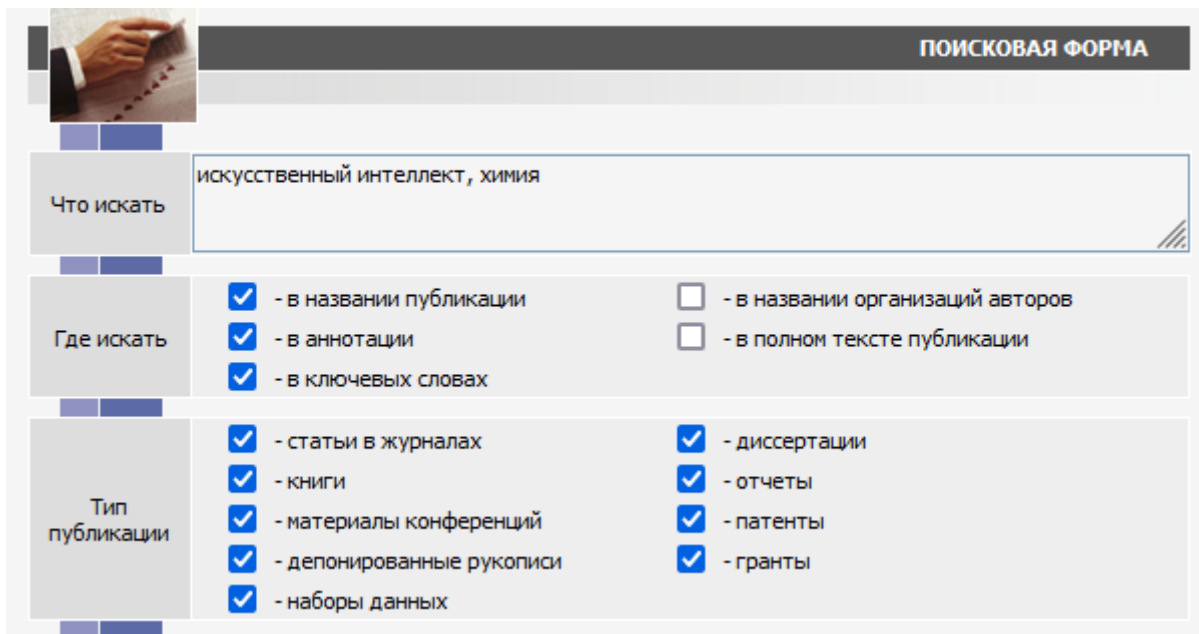


Тема: Использование искусственного интеллекта в химии

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

Поиск:



ПОИСКОВАЯ ФОРМА

Что искать
искусственный интеллект, химия

Где искать

☒ - в названии публикации	☐ - в названии организаций авторов
☒ - в аннотации	☐ - в полном тексте публикации
☒ - в ключевых словах	

Тип публикации

☒ - статьи в журналах	☒ - диссертации
☒ - книги	☒ - отчеты
☒ - материалы конференций	☒ - патенты
☒ - депонированные рукописи	☒ - гранты
☒ - наборы данных	



РЕЗУЛЬТАТЫ ПОИСКОВОГО ЗАПРОСА

ВСЕГО НАЙДЕНО ПУБЛИКАЦИЙ: 131 из 59600622

№	Публикация	Цит.
1 ☐ 	ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ В СИНТЕТИЧЕСКОЙ ХИМИИ: ДОСТИЖЕНИЯ И ПЕРСПЕКТИВЫ <i>Баскин И.И., Маджидов Т.И., Антипин И.С., Varnek A.A.</i> Успехи химии. 2017. Т. 86. № 11. С. 1127-1156.	43
2 ☐ 	СИНТЕЛЛИ - ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС ХЕМОИНФОРМАТИКИ НА БАЗЕ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ОРГАНИЧЕСКОЙ И МЕДИЦИНСКОЙ ХИМИИ <i>Соснин С.Б., Хохлов И.С., Буянов А.Ю., Краснов Л.В., Федоров М.В.</i> Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ RU 2021662325, 26.07.2021. Заявка № 2021619554 от 20.06.2021.	0
3 ☐	ВЛИЯНИЕ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА НА РАЗВИТИЕ ХИМИИ <i>Гусаров И.А.</i> В сборнике: ПРОБЛЕМЫ ЭКОНОМИКИ И УПРАВЛЕНИЯ: СОЦИОКУЛЬТУРНЫЕ, ПРАВОВЫЕ И ОРГАНИЗАЦИОННЫЕ АСПЕКТЫ. Сборник статей магистрантов и преподавателей КузГТУ. Кузбасский государственный технический университет имени Т.Ф. Горбачева. Кемерово, 2023. С. 406-412.	0
4 ☐	ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ В СИНТЕТИЧЕСКОЙ ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ: УСКОРЕНИЕ СИНТЕЗА И НОВЫЕ ПЕРСПЕКТИВЫ <i>Базуев Р.Д.</i> В сборнике: Потенциал устойчивого инновационного развития: концепции, модели и практическое приложение. сборник статей по итогам Международной научно-практической конференции. Стерлитамак, 2024. С. 123-130.	0
5 ☐ 	ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ И АДДИТИВНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В МИКРОТОННАЖНОЙ И МАЛОТОННАЖНОЙ ХИМИИ <i>Анаников В.П.</i> В книге: Малотоннажная химия: Разработки, производство, аналитический контроль. Сборник тезисов научно-практической конференции. Новосибирск, 2024. С. 11.	0
6 ☐	ХИМИЯ, ФИЗИКА, БИОЛОГИЯ: ИНТЕГРАЦИЯ ЧЕРЕЗ ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ <i>Медведев М.Г.</i> В книге: Химия, физика, биология: пути интеграции. Сборник тезисов докладов X Всероссийской научной молодежной школы-конференции. Москва, 2024. С. 16.	0
7 ☐ 	МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ, ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ И ХИМИЯ: КАК ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫЕ АЛГОРИТМЫ МЕНЯЮТ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ЛАБОРАТОРИЮ <i>Губанова С.А.</i> В сборнике: Реформирование и развитие естественных и технических наук. сборник материалов XVI-ой международной очно-заочной научно-практической конференции. Москва, 2023. С. 106-112.	2
8 ☐ 	КЛЮЧЕВЫЕ ФАКТОРЫ УСПЕШНОГО ВЛИЯНИЯ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА НА РАЗВИТИЕ И ОБУЧЕНИЕ ДЕТЕЙ <i>Курьян С.М., Петрушкевич М.А., Петрушкевич Н.В.</i> В сборнике: Современные информационные технологии в образовании, науке и промышленности. Сборник трудов. XXVIII Международная конференция. XXVI Международный конкурс научных и научно-методических работ. Всероссийский конкурс проектов «Научное творческое сообщество». Москва, 2024. С. 61-67.	3
9 ☐ 	ПРИМЕНЕНИЕ НЕЙРОСЕТЕЙ В ПРОЦЕССЕ ОБУЧЕНИЯ ХИМИИ <i>Галкина Е.Н.</i> Мир науки. Педагогика и психология. 2024. Т. 12. № 2. С. 39.	0
10 ☐	ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИЙ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА В РАЗРАБОТКЕ ЭФФЕКТИВНЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЛНЕЧНЫХ БАТАРЕЙ С ВЫСОКОЙ РАДИАЦИОННОЙ СТАБИЛЬНОСТЬЮ ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В КОСМОСЕ <i>Трошин П.А.</i> НИР: грант № 22-43-04427. Российский научный фонд. 2022.	0
11 ☐ 	АНАЛИЗ ДАННЫХ - ОСНОВА BIG DATA <i>Алексеев Е.В.</i> В сборнике: Актуальные аспекты модернизации российской экономики. Материалы IX Всероссийской заочной научно-практической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых.	0

ПОИСКОВАЯ ФОРМА

Что искать

машинное обучение, химия

Где искать

☒ - в названии публикации

☐ - в названии организаций авторов

☒ - в аннотации

☐ - в полном тексте публикации

☒ - в ключевых словах

Тип публикации

☒ - статьи в журналах

☒ - диссертации

☒ - книги

☒ - отчеты

☒ - материалы конференций

☒ - патенты

☒ - депонированные рукописи

☒ - гранты

☒ - наборы данных

РЕЗУЛЬТАТЫ ПОИСКОВОГО ЗАПРОСА

ВСЕГО НАЙДЕНО ПУБЛИКАЦИЙ: 103 из 59600622

№	Публикация	Цит.
1	MACHINE LEARNING METHODS FOR QUANTUM CHEMISTRY PROBLEM <i>Stepanov I.</i> Студенческий. 2024. № 21-9 (275). С. 15-17.	0
2	ПРОГРАММА МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ В ОБЛАСТИ ПРОМЫСЛОВОЙ ХИМИИ С ЦЕЛЬЮ ПОВЫШЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПОДБОРА ХИМИЧЕСКИХ РЕАГЕНТОВ <i>Ширяева А.А., Ширяева М.А., Пасечников В.В., Диденко В.Ю.</i> Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ RU 2023619474, 11.05.2023. Заявка № 2023618171 от 27.04.2023.	0
3	СОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПОДБОРА РЕАГЕНТОВ ПРОМЫСЛОВОЙ ХИМИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ <i>Ширяева А.А., Пасечников В.В., Диденко В.Ю.</i> В сборнике: Фундаментальный базис инновационных технологий нефтяной и газовой промышленности. Сборник трудов Всероссийской научной конференции с международным участием, посвященной 35-летию ИПНГ РАН. Москва, 2022. С. 165-166.	0
4	МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ, ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ И ХИМИЯ: КАК ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫЕ АЛГОРИТМЫ МЕНЯЮТ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ЛАБОРАТОРИЮ <i>Губанова С.А.</i> В сборнике: Реформирование и развитие естественных и технических наук. сборник материалов XVI-ой международной очно-заочной научно-практической конференции. Москва, 2023. С. 106-112.	2
5	06.11-19A.50 ФУНКЦИЯ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ В ПРЕПОДАВАНИИ ХИМИИ РЖ 19АБ-1. Общие вопросы химии. Физическая химия (Строение молекул). 2006. № 11.	0
6	МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ В КВАНТОВОЙ ХИМИИ <i>Измоденов Д.В., Лейбин И.В., Озеров Г.К., Безруков Д.С., Синицкий А.В.</i> В книге: Химия, физика, биология: пути интеграции. Сборник тезисов докладов VIII Всероссийской научной молодежной школы-конференции. 2020. С. 19.	1
7	МЕТОДЫ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ В ЗАДАЧАХ КВАНТОВОЙ ХИМИИ <i>Пякилла Б.И.</i> В сборнике: МОЛОДЕЖЬ И СОВРЕМЕННЫЕ ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ. Сборник трудов XVIII Международной научно-практической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых. Томск, 2021. С. 84-85.	0
8	МЕТОДЫ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ МНОГЧАСТИЧНЫХ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ <i>Федоров А.К.</i> Отчет о НИР № 19-71-10092. Российский научный фонд. 2021.	0
9	ПРИМЕНЕНИЕ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА И МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ В РАЗВИТИИ НОВЫХ МЕТОДОВ СИНТЕЗА И ПРОГНОЗИРОВАНИЯ СВОЙСТВ ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ <i>Яковлева К.П.</i> В сборнике: Инновационные научные исследования: теория, методология, тенденции развития. Сборник научных статей по материалам XIII Международной научнопрактической конференции. Уфа, 2024. С. 12-15.	0
10	МЕТОДЫ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ МНОГЧАСТИЧНЫХ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ <i>Федоров А.К.</i> НИР: грант № 22-71-41009. Российский научный фонд. 2022.	0
11	ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ КОЛИЧЕСТВЕННЫХ СВОЙСТВ НА ОСНОВЕ ОБОБЩЕННОГО ДЕРЕВА <i>Сенько О.В., Докучаев А.А., Дмитриев Л.А.</i> Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ RU 2023686351, 05.12.2023. Заявка от 12.10.2023.	0
12	РАЗВИТИЕ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В ОБЛАСТИ ХИМИИ <i>Зарудских М.А., Безносик С.А.</i> В сборнике: Приоритетные направления развития науки и технологий. Сборник XXXIV Международной научно-практической конференции. Тула, 2024. С. 95-98.	0
13	МЕТОДЫ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ МНОГЧАСТИЧНЫХ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ	



ПОИСКОВАЯ ФОРМА

Что искать

нейронные сети, химия

Где искать

☒ - в названии публикации

☐ - в названии организаций авторов

☒ - в аннотации

☐ - в полном тексте публикации

☒ - в ключевых словах

Тип публикации

☒ - статьи в журналах

☒ - диссертации

☒ - книги

☒ - отчеты

☒ - материалы конференций

☒ - патенты

☒ - депонированные рукописи

☒ - гранты

☒ - наборы данных

РЕЗУЛЬТАТЫ ПОИСКОВОГО ЗАПРОСА		
ВСЕГО НАЙДЕНО ПУБЛИКАЦИЙ: 104 из 59600622		
№	Публикация	Цит.
1	СТРУКТУРИРОВАНИЕ И ОБУЧЕНИЕ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ С ПРИМЕНЕНИЯМИ К ЗАДАЧАМ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ И МЕДИЦИНЫ Филимонов А.В. автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук / Ивановский государственный университет. Иваново, 2004	0
2	СТРУКТУРИРОВАНИЕ И ОБУЧЕНИЕ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ С ПРИМЕНЕНИЯМИ К ЗАДАЧАМ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ И МЕДИЦИНЫ Филимонов А.В. диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук / Иваново, 2004	2
3	О ПРИМЕНЕНИИ ИСКУССТВЕННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ В ХИМИИ И ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ Патракеев Д.С., Дербишер Е.В., Дербишер В.Е. В сборнике: Академическая наука - проблемы и достижения. Материалы V международной научно-практической конференции. 2014. С. 108.	0
4	ПРИМЕНЕНИЕ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ В ХИМИИ И ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ Глебов М.Б., Галушкин А.И. Нейрокомпьютеры: разработка, применение. 2003. № 3-4. С. 66-107.	5
5	РАЗРАБОТКА РЕЦЕПТУР ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ПИЩЕВЫХ ПРОДУКТОВ С БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫМИ ДОБАВКАМИ Сладкова Е.Г. В сборнике: Материалы IV Ежегодных международных научно-практических чтений Ставропольского института кооперации (филиала) БУКЭП. Сборник IV международных конференций профессорско-преподавательского состава и аспирантов Ставропольского института кооперации (филиала) БУКЭП. Под общей редакцией В.Н. Глаза, Д.А. Кузьмина. 2018. С. 218-221.	0
6	05.19-19Н.53 ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТЕЙ ПАКЕТА MATLAB ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ НЕЙРОННОЙ СЕТИ РЕАКТОРА ОКИСЛИТЕЛЬНОГО ПИРОЛИЗА ПРИРОДНОГО ГАЗА РЖ 19Н. Технология органических веществ. 2005. № 19.	0
7	МЕТОДЫ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ МНОГОЧАСТИЧНЫХ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ Федоров А.К. Отчет о НИР № 19-71-10092. Российский научный фонд. 2021.	0
8	ИСПОЛЬЗОВАНИЕ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ДОБАВОК В РЕЦЕПТУРНЫХ КОМПОЗИЦИЯХ ПРОДУКТОВ ПИТАНИЯ Метелева М.Е., Алхатиб Р. В сборнике: Экономика и социальные исследования в современном обществе: ключевые проблемы и новые перспективы. Материалы международной студенческой научно-практической конференции. Краснодар, 2024. С. 162-167.	0
9	ПРИМЕНЕНИЕ НЕЙРОСЕТЕЙ В ПРОЦЕССЕ ОБУЧЕНИЯ ХИМИИ Галкина Е.Н. Мир науки. Педагогика и психология. 2024. Т. 12. № 2. С. 39.	0
10	ПРИМЕНЕНИЕ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ АКТИВНОСТИ АМИННЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ В РЕАКЦИИ ПРИСОЕДИНЕНИЯ CO2 К ЭПОКСИДАМ Антипин В.Е., Вихарева И.Н., Енижеева Д.Б., Кручинина П.А. В сборнике: Современные материалы и методы решения экологических проблем постиндустриальной агломерации. Сборник материалов I всероссийской научно-практической конференции. Челябинск, 2024. С. 143-146.	0
11	АНАЛИЗ ПРИМЕНЕНИЯ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ В ХИМИЧЕСКОМ ОБРАЗОВАНИИ Таджибаев Р.Р., Кокорин П.С., Космодемьянская С.С. В сборнике: Вопросы развития современной науки и техники. Сборник статей Международной научно-практической конференции. Саратов, 2023. С. 557-565.	2
12	ИСПОЛЬЗОВАНИЕ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ НА ОСНОВЕ МНОГОСЛОЙНОГО ПЕРСЕПТРОНА ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ УСЛОВИЙ ПРОТЕКАНИЯ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ Стрелец А.И., Протопопова Ю.Д., Тоичкин Д.В., Ключникова Б.В.	0

Статьи:

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

eLIBRARY ID: 30543198 EDN: ZSJULV DOI: 10.1070/RCR4746

ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ В СИНТЕТИЧЕСКОЙ ХИМИИ: ДОСТИЖЕНИЯ И ПЕРСПЕКТИВЫ

БАСКИН И.И.¹, МАДЖИДОВ Т.И.², АНТИПИН И.С.², VARNEK A.A.²

¹ Московский государственный университет им.М.В.Ломоносова
² Казанский (Приволжский) федеральный университет, Химический институт им. А.М.Бутлерова

Тип: статья в журнале - научная статья Язык: английский
Том: 86 Номер: 11 Год: 2017 Страницы: 1127-1156

ЖУРНАЛ:
УСПЕХИ ХИМИИ
Учредители: Издательство Журнала "Успехи химии"
ISSN: 0042-1308 eISSN: 1817-5651

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:
ИСКУССТВЕННЫЙ, ИНТЕЛЛЕКТ, СИНТЕТИЧЕСКИЙ, ХИМИЯ, КОМПЬЮТЕРНЫЙ, КОДИРОВАНИЕ, ХИМИЧЕСКИЙ, РЕАКЦИЯ, АНАЛИЗ, ВИЗУАЛИЗАЦИЯ, ПРОГНОЗИРОВАНИЕ, КАТАЛИЗАТОР

АННОТАЦИЯ:
Обзор посвящен достижениям в анализе информации о химических реакциях с использованием методов машинного обучения. Он очерчивает четыре больших области, в которых активно используются данные методы: компьютерные методы планирования синтеза, анализ и визуализация данных по реакциям, прогнозирование количественных характеристик реакций, компьютерный дизайн катализаторов. Библиография - 346 ссылок.

БИБЛИОМЕТРИЧЕСКИЕ ПОКАЗАТЕЛИ:

Входит в РИНЦ: да	Цитирований в РИНЦ: 43
Входит в ядро РИНЦ: да	Цитирований из ядра РИНЦ: 36
Рецензии: нет данных	Процентиль журнала в рейтинге SI: 1

ТЕМАТИЧЕСКИЕ РУБРИКИ:

Рубрика OECD:	Chemical sciences
Рубрика ASJC:	нет
Рубрика ГРНТИ:	нет
Специальность ВАК:	нет

АЛЬТМЕТРИКИ:

Просмотров: 207 (94)	Загрузок: 58 (29)	Включено в подборки: 168
Всего оценок: 0	Средняя оценка:	Всего отзывов: 0

СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ:

1. I.V.Tetko, O.Engkvist, U.Koch, J.-L.Reymond, H.Chen. Mol. Inf., 35, 615 (2016).
2. D.Che, M.Safran, Z.Peng. In Database Systems for Advanced Applications: Proceedings of the 18th International Conference, DASFAA 2013, International Workshops: BDMA, SNSM, SeCoP, Wuhan, China, 2013. (Eds B.Hong, X.Meng, L.Chen, W.Winiwarter, W.Song). Springer, Berlin; Heidelberg, 2013. P. 1-15.
3. А.Н.Аверкин, М.Г.Гаазе-Рапопорт, Д.А.Поспелов. Толковый словарь по искусственному интеллекту. Радио и связь, Москва, 1992.
4. E.J.Corey, W.T.Wipke. Science, 166, 178 (1969). EDN: IDHKQF [Контекст](#)
5. E.J.Corey. Pure Appl. Chem., 14, 19 (1967).

[Показать весь список литературы \(всего ссылок: 346\)](#)

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.

ПРИМЕНЕНИЕ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ В ХИМИИ И ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

ГЛЕБОВ М.Б.¹, ГАЛУШКИН А.И.

¹ Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, 125047, г.Москва, Миусская пл., 9

Тип: статья в журнале - научная статья Язык: русский

Номер: 3-4 Год: 2003 Страницы: 66-107

ЖУРНАЛ:

НЕЙРОКОМПЬЮТЕРЫ: РАЗРАБОТКА, ПРИМЕНЕНИЕ

Учредители: ООО "Издательское предприятие редакции журнала "Радиотехника"

ISSN: 1999-8554

БИБЛИОМЕТРИЧЕСКИЕ ПОКАЗАТЕЛИ:

- | | |
|-------------------------|--------------------------------------|
| Входит в РИНЦ: да | Цитирований в РИНЦ: 5 |
| Входит в ядро РИНЦ: нет | Цитирований из ядра РИНЦ: 5 |
| Рецензии: нет данных | Процентиль журнала в рейтинге SI: 36 |

ТЕМАТИЧЕСКИЕ РУБРИКИ:

- | | |
|--------------------|---|
| Рубрика OECD: | Computer and information sciences |
| Рубрика ASJC: | нет |
| Рубрика ГРНТИ: | Автоматика. Вычислительная техника / Программное обеспечение вычислительных машин, комплексов и сетей |
| Специальность ВАК: | нет |

АЛЬТМЕТРИКИ:

- | | | |
|---------------------|-----------------|-------------------------|
| Просмотров: 45 (15) | Загрузок: 0 (0) | Включено в подборки: 42 |
| Всего оценок: 0 | Средняя оценка: | Всего отзывов: 0 |

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".

МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ, ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ И ХИМИЯ: КАК ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫЕ АЛГОРИТМЫ МЕНЯЮТ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ЛАБОРАТОРИЮ

ГУБАНОВА С.А.¹

¹ Новосибирский государственный университет экономики и управления "НИНХ", г. Новосибирск

Тип: статья в сборнике трудов конференции Язык: русский Год издания: 2023

Страницы: 106-112

УДК: 004.838.2

ИСТОЧНИК:

РЕФОРМИРОВАНИЕ И РАЗВИТИЕ ЕСТЕСТВЕННЫХ И ТЕХНИЧЕСКИХ НАУК
сборник материалов XVI-ой международной очно-заочной научно-практической конференции.
Москва, 2023
Издательство: Научно-издательский центр "Империя" (Москва)

КОНФЕРЕНЦИЯ:

РЕФОРМИРОВАНИЕ И РАЗВИТИЕ ЕСТЕСТВЕННЫХ И ТЕХНИЧЕСКИХ НАУК
Москва, 25 января 2023 года

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:

АНАЛИТИЧЕСКАЯ ХИМИЯ, ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ, ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ ХИМИЯ, МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ, ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

АННОТАЦИЯ:

Машинное обучение и искусственный интеллект приобретают все большее значение благодаря анализу изображений, языковой обработке и автоматизации, и это лишь некоторые из приложений. Машинное обучение также вносит глубокие изменения в химию. От пересмотра старых аналитических методов с целью создания более качественных калибровочных кривых до помощи и ускорения традиционных симуляций до автоматизации целых научных рабочих процессов и использования в качестве подхода к выводу физических явлений, лежащих в основе необъяснимых химических явлений, машинное обучение и искусственный интеллект изменяют химию, ускоряют научные открытия и понимание. В этой статье представлен обзор машинного обучения и искусственного интеллекта и основное внимание уделяется ряду примеров использования этих подходов в вычислительной химии и в лаборатории.

БИБЛИОМЕТРИЧЕСКИЕ ПОКАЗАТЕЛИ:

- | | |
|---|---|
|  Входит в РИНЦ: да |  Цитирований в РИНЦ: 2 |
|  Входит в ядро РИНЦ: нет |  Цитирований из ядра РИНЦ: 0 |
|  Рецензии: нет данных | |

ТЕМАТИЧЕСКИЕ РУБРИКИ:

- | | |
|--|--|
|  Рубрика OECD: | Electrical engineering, electronic engineering |
|  Рубрика ASJC: | нет |
|  Рубрика ГРНТИ: | нет |
|  Специальность ВАК: | нет |

АЛЬТМЕТРИКИ:

- | | | |
|---|---|---|
|  Просмотров: 74 (38) |  Загрузок: 34 (10) |  Включено в подборки: 49 |
|  Всего оценок: 0 |  Средняя оценка: |  Всего отзывов: 0 |

Измоденов Д.В. Машинное обучение в квантовой химии / Измоденов Д.В., Лейбин И.В., Озеров Г.К., Безруков Д.С., Сеницкий 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.

МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ В КВАНТОВОЙ ХИМИИ

ИЗМОДЕНОВ Д.В.¹, ЛЕЙБИН И.В.¹, ОЗЕРОВ Г.К.², БЕЗРУКОВ Д.С.^{1,2}, СЕНИЦКИЙ А.В.³

¹ Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

² Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия

³ Университет Стэнфорд, Калифорния, США

Тип: тезисы доклада на конференции Язык: русский Год издания: 2020

Страницы: 19

ИСТОЧНИК:

ХИМИЯ, ФИЗИКА, БИОЛОГИЯ: ПУТИ ИНТЕГРАЦИИ
Сборник тезисов докладов VIII Всероссийской научной молодежной школы-конференции.
2020

Издательство: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук (Москва)

КОНФЕРЕНЦИЯ:

ХИМИЯ, ФИЗИКА, БИОЛОГИЯ: ПУТИ ИНТЕГРАЦИИ
Москва, 22–24 апреля 2020 года

БИБЛИОМЕТРИЧЕСКИЕ ПОКАЗАТЕЛИ:

- | | |
|----------------------------------|--------------------------------------|
| ❓ Входит в РИНЦ: да | ❓ Цитирований в РИНЦ: 1 |
| ❓ Входит в ядро РИНЦ: нет | ❓ Цитирований из ядра РИНЦ: 0 |
| ❓ Рецензии: нет данных | |

ТЕМАТИЧЕСКИЕ РУБРИКИ:

- | | |
|----------------------|---------------------------------|
| ❓ Рубрика OECD: | Physical sciences and astronomy |
| ❓ Рубрика ASJC: | нет |
| ❓ Рубрика ГРНТИ: | нет |
| ❓ Специальность ВАК: | нет |

АЛЬТМЕТРИКИ:

- | | | |
|-----------------------------|--------------------------|----------------------------------|
| ❓ Просмотров: 17 (8) | ❓ Загрузок: 0 (0) | ❓ Включено в подборки: 15 |
| ❓ Всего оценок: 0 | ❓ Средняя оценка: | ❓ Всего отзывов: 0 |

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.

**СОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПОДБОРА РЕАГЕНТОВ
ПРОМЫСЛОВОЙ ХИМИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДОВ МАШИННОГО
ОБУЧЕНИЯ**

ШИРЯЕВА А.А.¹, ПАСЕЧНИКОВ В.В.¹, ДИДЕНКО В.Ю.¹

¹ АО «ВНИИнефть» им. акад. А.П. Крылова

Тип: статья в сборнике трудов конференции Язык: русский Год издания: 2022
Страницы: 165-166

ИСТОЧНИК:

**ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЙ БАЗИС ИННОВАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ НЕФТЯНОЙ И ГАЗОВОЙ
ПРОМЫШЛЕННОСТИ**

Сборник трудов Всероссийской научной конференции с международным участием,
посвященной 35-летию ИПНГ РАН. Москва, 2022

Издательство: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт
проблем нефти и газа Российской академии наук

КОНФЕРЕНЦИЯ:

**ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЙ БАЗИС ИННОВАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ НЕФТЯНОЙ И ГАЗОВОЙ
ПРОМЫШЛЕННОСТИ**

Москва, 17–19 октября 2022 года

Организаторы: Институт проблем нефти и газа РАН

БИБЛИОМЕТРИЧЕСКИЕ ПОКАЗАТЕЛИ:

Входит в РИНЦ: да

Цитирований в РИНЦ: 0

Входит в ядро РИНЦ: нет

Цитирований из ядра РИНЦ: 0

Рецензии: нет данных

ТЕМАТИЧЕСКИЕ РУБРИКИ:

Рубрика OECD: Earth and related environmental sciences

Рубрика ASJC: нет

Рубрика ГРНТИ: нет

Специальность ВАК: нет

АЛЬТМЕТРИКИ:

Просмотров: 3 (2)

Загрузок: 0 (0)

Включено в подборки: 14

Всего оценок: 0

Средняя оценка:

Всего отзывов: 0

Патенты:

eLIBRARY ID: 46484018

EDN: BOYYMH



СИНТЕЛЛИ - ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС ХЕМОИНФОРМАТИКИ НА БАЗЕ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ОРГАНИЧЕСКОЙ И МЕДИЦИНСКОЙ ХИМИИ

СОСНИН С.Б., ХОХЛОВ И.С., БУЯНОВ А.Ю., КРАСНОВ Л.В., ФЕДОРОВ М.В.

Тип: свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ
Номер свидетельства: RU 2021662325 Патентное ведомство: Россия Год публикации: 2021
Номер заявки: 2021619554 Дата регистрации: 20.06.2021 Дата публикации: 26.07.2021

Язык программирования: Python Объем: 28 МБ

Правообладатели: ОБЩЕСТВО С ОГРАНИЧЕННОЙ ОТВЕТСТВЕННОСТЬЮ "СИНТЕЛЛИ"

АННОТАЦИЯ:

Программный комплекс могут использовать специалисты химии для: 1) ввода молекулярных структур в память ЭВМ с использованием графического интерфейса либо путем преобразования из химических нотаций; 2) прогнозирования физико-химических, биологических, токсикологических свойств органических соединений; 3) расчета синтетической доступности молекулярных структур; 4) визуализации больших баз данных молекулярных структур в виде точечных проекций на двумерную плоскость, а также навигации в химическом пространстве; 5) генерации структур органических соединений с заранее заданными пользователем свойствами; 6) прогнозирования спектральных данных; 7) экспорта молекулярных структур и рассчитанных значений в стандартные форматы данных, используемые в химии. Тип ЭВМ: онлайн-платформа, размещенная в сети Интернет, возможно развертывание на серверах в локальной сети Заказчика.

БИБЛИОМЕТРИЧЕСКИЕ ПОКАЗАТЕЛИ:

Входит в РИНЦ: да

Входит в ядро РИНЦ: нет

Цитирований в РИНЦ: 0

Цитирований из ядра РИНЦ: 0

ТЕМАТИЧЕСКИЕ РУБРИКИ:

Рубрика OECD: нет

Рубрика ASJC: нет

Рубрика ГРНТИ: нет

Специальность ВАК: нет

АЛЬТМЕТРИКИ:

Просмотров: 45 (20)

Всего оценок: 0

Загрузок: 20 (4)

Средняя оценка:

Включено в подборки: 33

Всего отзывов: 0

ПРОГРАММА МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ В ОБЛАСТИ ПРОМЫСЛОВОЙ ХИМИИ С ЦЕЛЬЮ ПОВЫШЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПОДБОРА ХИМИЧЕСКИХ РЕАГЕНТОВ

ШИРЯЕВА А.А., ШИРЯЕВА М.А., ПАСЕЧНИКОВ В.В., ДИДЕНКО В.Ю.

Тип: свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ
Номер свидетельства: RU 2023619474 Патентное ведомство: Россия Год публикации: 2023
Номер заявки: 2023618171 Дата регистрации: 27.04.2023 Дата публикации: 11.05.2023

Язык программирования: Python Объем: 280 КБ

Правообладатели: Акционерное общество «Всероссийский нефтегазовый научно-исследовательский институт имени академика А.П. Крылова»

АННОТАЦИЯ:

Программа позволяет увеличить скорость процесса определения эффективности деэмульгаторов на нефтепромысле. Программа предоставляет алгоритм работы в программе с целью внедрения машинного обучения на нефтепромысле. Разработанная модель способствует отсеиванию неподходящих деэмульгаторов, а также включает перечень параметров реагентов, которые будут эффективны для исследуемого объекта. В программе строится тренд зависимости качества продукта от плотности деэмульгатора, представляются графики плотности ядра распределения, которые позволяют сузить поле для подбора наиболее эффективного деэмульгатора. Тип ЭВМ: IBM PC-совмест. ПК; ОС: Windows 7/8/10.

БИБЛИОМЕТРИЧЕСКИЕ ПОКАЗАТЕЛИ:

- Входит в РИНЦ: да
- Входит в ядро РИНЦ: нет
- Цитирований в РИНЦ: 0
- Цитирований из ядра РИНЦ: 0

ТЕМАТИЧЕСКИЕ РУБРИКИ:

- Рубрика OECD: Environmental engineering
- Рубрика ASJC: нет
- Рубрика ГРНТИ: нет
- Специальность ВАК: нет

АЛТМЕТРИКИ:

- Просмотров: 12 (8)
- Загрузок: 6 (5)
- Включено в подборки: 9
- Всего оценок: 0
- Средняя оценка:
- Всего отзывов: 0

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ КОЛИЧЕСТВЕННЫХ СВОЙСТВ НА ОСНОВЕ ОБОБЩЕННОГО ДЕРЕВА

СЕНЬКО О.В., ДОКУКИН А.А., ДМИТРИЕВ Л.А.

Тип: свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ
Номер свидетельства: RU 2023686351 Патентное ведомство: Россия Год публикации: 2023
Дата регистрации: 12.10.2023 Дата публикации: 05.12.2023

Язык программирования: C++, python Объем: 190 КБ

Правообладатели: Федеральное государственное учреждение «Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук»

АННОТАЦИЯ:

Программный комплекс реализует методы регрессионного анализа, предназначенные для прогнозирования количественных свойств объектов в различных областях знания, как то медицина, химия, экономика, на основе машинного обучения. Реализованные методы: TreeRegressor - обобщенное регрессионное дерево, оптимизирующее в процессе обучения функционал $\sum_j C_j * \sum_j (G_{(j)} - e_j)^2$, где i - номер целевого вектора G_j , и соответствующего коэффициента C_j , j - номер объекта, e_j - величина прогноза. Например, при $C_1=1$ и $C_2=-\mu$, $G_1=y$ и $G_2=\sum_k A_k(X)/K$, где X , y - обучающая выборка, A_k - элементы произвольного ансамбля из K алгоритмов, μ - положительный коэффициент, метод строит дерево, аппроксимирующее целевую переменную, при этом отстоящее от элементов ансамбля. RandomForestMSE - решает задачу регрессии за счет построения разреженного ансамбля деревьев. Реализация базового метода TreeRegressor на C++ обеспечивает ускорение по сравнению с программой (Сенько, Докукин, № 2022668102) в 50-100 раз. GradientBoostingMSE - решает задачу регрессии методом градиентного бустинга с адаптивным шагом оптимизации. Тип ЭВМ: ПК на основе процессоров X86 или X84; ОС: Windows (7 и старше), Linux и аналоги.

БИБЛИОМЕТРИЧЕСКИЕ ПОКАЗАТЕЛИ:

- Входит в РИНЦ: да
- Входит в ядро РИНЦ: нет
- Цитирований в РИНЦ: 0
- Цитирований из ядра РИНЦ: 0

Авторы:

Баскин Игорь Иосифович

Название показателя	Значение
Число публикаций на elibrary.ru	264
Число публикаций в РИНЦ	262
Число публикаций, входящих в ядро РИНЦ	212
Число цитирований из публикаций на elibrary.ru	6380
Число цитирований из публикаций, входящих в РИНЦ	6291
Число цитирований из публикаций, входящих в ядро РИНЦ	5774
Индекс Хирша по всем публикациям на elibrary.ru	34
Индекс Хирша по публикациям в РИНЦ	33
Индекс Хирша по ядру РИНЦ	31
Число публикаций, процитировавших работы автора	4433
Число ссылок на самую цитируемую публикацию	1249
Число публикаций автора, процитированных хотя бы один раз	235 (89,7%)
Среднее число цитирований в расчете на одну публикацию	28,73
Индекс Хирша без учета самоцитирований	32
Индекс Хирша по ядру РИНЦ без учета самоцитирований	29
Индекс Хирша с учетом только статей в журналах	33
Год первой публикации	1985
Число самоцитирований	753 (12,0%)
Число цитирований соавторами	2186 (34,7%)
Число соавторов	305
Число статей в зарубежных журналах	108 (41,2%)
Число статей в российских журналах	133 (50,8%)
Число статей в российских журналах из перечня ВАК	128 (48,9%)
Число статей в российских переводных журналах	92 (35,1%)
Число статей в журналах с ненулевым импакт-фактором	203 (77,5%)
Число цитирований из зарубежных журналов	4758 (75,6%)
Число цитирований из российских журналов	1077 (17,1%)
Число цитирований из российских журналов из перечня ВАК	1040 (16,5%)
Число цитирований из российских переводных журналов	633 (10,1%)
Число цитирований из журналов с ненулевым импакт-фактором	5164 (82,1%)
Средневзвешенный импакт-фактор журналов, в которых были опубликованы статьи	2,472
Средневзвешенный импакт-фактор журналов, в которых были процитированы статьи	4,326
Число публикаций в РИНЦ за последние 5 лет (2019-2023)	29 (11,1%)
Число публикаций в ядре РИНЦ за последние 5 лет	24 (82,8%)
Число ссылок из РИНЦ на работы, опубликованные за последние 5 лет	535 (8,5%)
Число ссылок из ядра РИНЦ на работы, опубликованные за последние 5 лет	515 (8,2%)

ОБЩИЕ ПОКАЗАТЕЛИ	
Название показателя	Значение
Число публикаций на elibrary.ru	224
Число публикаций в РИНЦ	213
Число публикаций, входящих в ядро РИНЦ	137
Число цитирований из публикаций на elibrary.ru	2002
Число цитирований из публикаций, входящих в РИНЦ	1941
Число цитирований из публикаций, входящих в ядро РИНЦ	1321
Индекс Хирша по всем публикациям на elibrary.ru	14
Индекс Хирша по публикациям в РИНЦ	13
Индекс Хирша по ядру РИНЦ	10
Число публикаций, процитировавших работы автора	1460
Число ссылок на самую цитируемую публикацию	565
Число публикаций автора, процитированных хотя бы один раз	132 (62,0%)
Среднее число цитирований в расчете на одну публикацию	6,77
Индекс Хирша без учета самоцитирований	11
Индекс Хирша по ядру РИНЦ без учета самоцитирований	7
Индекс Хирша с учетом только статей в журналах	11
Год первой публикации	1993
Число самоцитирований	412 (21,2%)
Число цитирований соавторами	836 (43,1%)
Число соавторов	250
Число статей в зарубежных журналах	26 (12,2%)
Число статей в российских журналах	134 (62,9%)
Число статей в российских журналах из перечня ВАК	119 (55,9%)
Число статей в российских переводных журналах	38 (17,8%)
Число статей в журналах с ненулевым импакт-фактором	127 (59,6%)
Число цитирований из зарубежных журналов	694 (35,8%)
Число цитирований из российских журналов	763 (39,3%)
Число цитирований из российских журналов из перечня ВАК	668 (34,4%)
Число цитирований из российских переводных журналов	252 (13,0%)
Число цитирований из журналов с ненулевым импакт-фактором	1276 (65,7%)
Средневзвешенный импакт-фактор журналов, в которых были опубликованы статьи	0,965
Средневзвешенный импакт-фактор журналов, в которых были процитированы статьи	3,678
Число публикаций в РИНЦ за последние 5 лет (2019-2023)	65 (30,5%)
Число публикаций в ядре РИНЦ за последние 5 лет	40 (61,5%)
Число ссылок из РИНЦ на работы, опубликованные за последние 5 лет	124 (6,4%)
Число ссылок из ядра РИНЦ на работы, опубликованные за последние 5 лет	74 (3,8%)
Число ссылок на работы автора из всех публикаций за последние 5 лет	623 (32,1%)

Название показателя	Значение
Число публикаций на elibrary.ru	165
Число публикаций в РИНЦ	108
Число публикаций, входящих в ядро РИНЦ	48
Число цитирований из публикаций на elibrary.ru	736
Число цитирований из публикаций, входящих в РИНЦ	640
Число цитирований из публикаций, входящих в ядро РИНЦ	278
Индекс Хирша по всем публикациям на elibrary.ru	8
Индекс Хирша по публикациям в РИНЦ	8
Индекс Хирша по ядру РИНЦ	6
Число публикаций, процитировавших работы автора	550
Число ссылок на самую цитируемую публикацию	370
Число публикаций автора, процитированных хотя бы один раз	57 (52,8%)
Среднее число цитирований в расчете на одну публикацию	5,74
Индекс Хирша без учета самоцитирований	7
Индекс Хирша по ядру РИНЦ без учета самоцитирований	4
Индекс Хирша с учетом только статей в журналах	6
Год первой публикации	1981
Число самоцитирований	103 (16,1%)
Число цитирований соавторами	168 (26,3%)
Число соавторов	68
Число статей в зарубежных журналах	0 (0,0%)
Число статей в российских журналах	64 (59,3%)
Число статей в российских журналах из перечня ВАК	47 (43,5%)
Число статей в российских переводных журналах	26 (24,1%)
Число статей в журналах с ненулевым импакт-фактором	57 (52,8%)
Число цитирований из зарубежных журналов	50 (7,8%)
Число цитирований из российских журналов	352 (55,0%)
Число цитирований из российских журналов из перечня ВАК	298 (46,6%)
Число цитирований из российских переводных журналов	95 (14,8%)
Число цитирований из журналов с ненулевым импакт-фактором	356 (55,6%)
Средневзвешенный импакт-фактор журналов, в которых были опубликованы статьи	0,557
Средневзвешенный импакт-фактор журналов, в которых были процитированы статьи	0,643
Число публикаций в РИНЦ за последние 5 лет (2019-2023)	36 (33,3%)
Число публикаций в ядре РИНЦ за последние 5 лет	17 (47,2%)
Число ссылок из РИНЦ на работы, опубликованные за последние 5 лет	26 (4,1%)
Число ссылок из ядра РИНЦ на работы, опубликованные за последние 5 лет	13 (2,0%)
Число ссылок на работы автора из всех публикаций за последние 5 лет	209 (32,7%)

Маджидов Тимур Исмаилович

ОБЩИЕ ПОКАЗАТЕЛИ	
Название показателя	Значение
Число публикаций на elibrary.ru	143
Число публикаций в РИНЦ	141
Число публикаций, входящих в ядро РИНЦ	80
Число цитирований из публикаций на elibrary.ru	1332
Число цитирований из публикаций, входящих в РИНЦ	1312
Число цитирований из публикаций, входящих в ядро РИНЦ	1136
Индекс Хирша по всем публикациям на elibrary.ru	18
Индекс Хирша по публикациям в РИНЦ	18
Индекс Хирша по ядру РИНЦ	17
Число публикаций, процитировавших работы автора	953
Число ссылок на самую цитируемую публикацию	305
Число публикаций автора, процитированных хотя бы один раз	80 (56,7%)
Среднее число цитирований в расчете на одну публикацию	8,56
Индекс Хирша без учета самоцитирований	15
Индекс Хирша по ядру РИНЦ без учета самоцитирований	14
Индекс Хирша с учетом только статей в журналах	17
Год первой публикации	2007
Число самоцитирований	271 (20,7%)
Число цитирований соавторами	510 (38,9%)
Число соавторов	237
Число статей в зарубежных журналах	59 (41,8%)
Число статей в российских журналах	28 (19,9%)
Число статей в российских журналах из перечня ВАК	27 (19,1%)
Число статей в российских переводных журналах	17 (12,1%)
Число статей в журналах с ненулевым импакт-фактором	79 (56,0%)
Число цитирований из зарубежных журналов	922 (70,3%)
Число цитирований из российских журналов	228 (17,4%)
Число цитирований из российских журналов из перечня ВАК	223 (17,0%)
Число цитирований из российских переводных журналов	124 (9,5%)
Число цитирований из журналов с ненулевым импакт-фактором	1059 (80,7%)
Средневзвешенный импакт-фактор журналов, в которых были опубликованы статьи	3,091
Средневзвешенный импакт-фактор журналов, в которых были процитированы статьи	5,467
Число публикаций в РИНЦ за последние 5 лет (2019-2023)	70 (49,6%)
Число публикаций в ядре РИНЦ за последние 5 лет	38 (54,3%)
Число ссылок из РИНЦ на работы, опубликованные за последние 5 лет	295 (22,5%)
Число ссылок из ядра РИНЦ на работы, опубликованные за последние 5 лет	256 (19,5%)

Антипин Игорь Сергеевич

ОБЩИЕ ПОКАЗАТЕЛИ	
Название показателя	Значение
Число публикаций на eLibrary.ru	717
Число публикаций в РИНЦ	662
Число публикаций, входящих в ядро РИНЦ	424
Число цитирований из публикаций на eLibrary.ru	5581
Число цитирований из публикаций, входящих в РИНЦ	5532
Число цитирований из публикаций, входящих в ядро РИНЦ	4746
Индекс Хирша по всем публикациям на eLibrary.ru	34
Индекс Хирша по публикациям в РИНЦ	34
Индекс Хирша по ядру РИНЦ	32
Число публикаций, процитировавших работы автора	2768
Число ссылок на самую цитируемую публикацию	139
Число публикаций автора, процитированных хотя бы один раз	456 (68,9%)
Среднее число цитирований в расчете на одну публикацию	8,51
Индекс Хирша без учета самоцитирований	29
Индекс Хирша по ядру РИНЦ без учета самоцитирований	26
Индекс Хирша с учетом только статей в журналах	33
Год первой публикации	1977
Число самоцитирований	1727 (31,2%)
Число цитирований соавторами	3855 (69,7%)
Число соавторов	781
Число статей в зарубежных журналах	196 (29,6%)
Число статей в российских журналах	273 (41,2%)
Число статей в российских журналах из перечня ВАК	268 (40,5%)
Число статей в российских переводных журналах	157 (23,7%)
Число статей в журналах с ненулевым импакт-фактором	419 (63,3%)
Число цитирований из зарубежных журналов	2895 (52,3%)
Число цитирований из российских журналов	2091 (37,8%)
Число цитирований из российских журналов из перечня ВАК	2014 (36,4%)
Число цитирований из российских переводных журналов	1170 (21,1%)
Число цитирований из журналов с ненулевым импакт-фактором	4669 (84,4%)
Средневзвешенный импакт-фактор журналов, в которых были опубликованы статьи	1,955
Средневзвешенный импакт-фактор журналов, в которых были процитированы статьи	3,303
Число публикаций в РИНЦ за последние 5 лет (2019-2023)	238 (36,0%)
Число публикаций в ядре РИНЦ за последние 5 лет	105 (44,1%)
Число ссылок из РИНЦ на работы, опубликованные за последние 5 лет	509 (9,2%)
Число ссылок из ядра РИНЦ на работы, опубликованные за последние 5 лет	364 (6,6%)

Вывод:

На тему «искусственный интеллект, химия» было найдено 131 статья, что свидетельствует о достаточном количестве материалов. Это указывает на то, что тема не слишком широкая и не слишком узкая. Статьи, посвященные применению машинного обучения в химии, включены в РИНЦ, что подчеркивает актуальность этого направления. Также по данной теме были обнаружены патенты, которые также входят в РИНЦ. Большинство статей и патентов были опубликованы в последние пять лет, что демонстрирует актуальность и растущий интерес к этому направлению.