ppt0310.md 3/10/2023

Essay1:通过实验数据对甲烷反应氧化偶联中的反应网络进行数据驱动的识别

author

核心算法:

作者使用了一种基于图形的数据可视化技术,将实验数据中的所有可能的反应物、中间体和产物表示为节点,将它们之间的相关性表示为边123。然后,作者使用了一种基于随机森林的机器学习算法,对每个节点进行打分,以评估它们在OCM反应中的重要性123。最后,作者根据机器学习提供的分数和实验数据,筛选出最有可能参与OCM反应的节点,并将它们连接起来形成一个反应网络模型

一些其他知识点: 甲烷氧化偶联反应(OCM)是一种将甲烷转化为乙烯等C2+碳氢化合物的反应

亮点:

- In particular, the proposed reaction map not only contains the chemical compound but also contains experimental conditions.
- Here, data science is implemented to reveal the reaction mechanism of oxidative coupling of methane (OCM) based on trends and patterns within OCM experimental data.

都有哪些数据呢: +

Essay1:通过实验数据对甲烷反应氧化偶联中的反应网络进行数据驱动的识别

- author
- .