

Проблемный семинар Института катализа

(с возможностью удаленного подключения)

среда, 14 июня 2023 г.

11-00 конференц-зал ИК СО РАН

Методы машинного обучения для решения задач в области химии

1. Д.ф.-м.н., профессор РАН, директор ИВМиМГ СО РАН

Михаил Александрович Марченко

«Применение методов искусственного интеллекта и машинного обучения для решения задач современной химии»

2. К.х.н., старший научный сотрудник ИК СО РАН

Анна Владимировна Нартова

Соавторы: *А. В. Матвеев, М. Ю. Машуков, Н. Н. Санькова, В. Ю. Кудинов, А. Г. Окунев*

ИК СО РАН, НГУ

«Автоматический поиск и анализ объектов на изображениях с использованием глубокого машинного обучения в изучении нанесенных катализаторов»

3. К.х.н., ведущий научный сотрудник ИК СО РАН

Максим Сергеевич Мельгунов

«Использование машинного обучения в задачах исследования текстуры адсорбентов и катализаторов»

Ссылка для подключения:

<https://events.webinar.ru/57663297/1242301719>

Приглашаются все желающие

Методы искусственного интеллекта для математического моделирования и анализа данных

М.А. Марченко

В докладе даются сведения о современных методах математического моделирования и обработки данных на основе алгоритмов искусственного интеллекта, более конкретно, алгоритмов машинного обучения. Приводится информация о применении такого рода методов для решения задач в области химии. Ставятся вопросы подготовки кадров и переобучения специалистов.



Марченко Михаил Александрович
(фото МШУ СКОЛКОВО)

Директор Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН (ИВМиМГ СО РАН).

Доктор физико-математических наук, профессор РАН. Специалист в области:

- численного решения линейных и нелинейных кинетических уравнений методом численного статистического моделирования;
- параллельных и распределенных вычислений;
- параллельных генераторов псевдослучайных чисел;
- стандартных пакетов прикладных программ численного статистического моделирования;
- машинного обучения.

Автоматический поиск и анализ объектов на изображениях с использованием глубокого машинного обучения в изучении нанесенных катализаторов

А. В. Нартова, А. В. Матвеев, М. Ю. Машуков, Н. Н. Санькова, В. Ю. Кудинов, А. Г. Окунев

Использование искусственного интеллекта для распознавания объектов на изображениях успешно адаптировано для поиска и анализа объектов на изображениях, полученных различными методами микроскопии (электронная микроскопия, зондовая микроскопия, оптическая микроскопия), для задач гетерогенного катализа. На основе предложенного подхода разработаны сервисы, объединенные на платформе iOk (<http://iok.nsu.ru/>): веб-сервис ParticlesNN и Telegram-боты DLgram и No Code ML. Платформа позволяет работать с любыми видами изображений любого качества без предварительных обработок. Пользователи имеют возможность самостоятельно обучать нейронную сеть на своих изображениях. Результат распознавания изображений – объекты, их площадь и размеры, а также положение на изображении. Сервисы находятся в свободном доступе, при этом для их использования навыки программирования не требуются. Опыт использования машинного зрения для обработки данных микроскопий показывает, что предложенный подход, оформленный в виде удобных для пользователей сервисов, является мощным инструментом, сокращающим временные затраты исследователей и повышающим объективность получаемых результатов.

Использование машинного обучения в задачах исследования текстуры адсорбентов и катализаторах

М.С. Мельгунов

В докладе обсуждается роль машинного обучения (МО) в исследовании пористой структуры, в частности в определении из адсорбционных данных вероятности наличия в материалах микропор (пор менее 2 нм) и в выборе наиболее корректного описания распределений мезопор по размерам в диапазоне 2 – 100 нм. При разработке алгоритмов МО «с учителем» использован большой массив экспериментальных данных (до 1000 уникальных изотерм адсорбции), показывающие высокую точность определяемых параметров.