

Устные доклады научной конференции-школы «**Искусственный интеллект в химии и материаловедении**» ("Artificial Intelligence in Chemistry and Materials Science"), 18-20 декабря 2023 г

1. Агликов Александр Сергеевич, асп. (ИТМО) «Топологический анализ данных наноразмерной шероховатости полиионных сборок с использованием методов машинного обучения»
2. Александров Евгений Викторович, д.х.н. (МНИЦТМ) «Топологические методы анализа и дизайна полимерных сеток»
3. Бегларян Бабкен Гагикович (МГУ) «Оценка качества предсказания ИК-спектров полициклических ароматических углеводородов с использованием нейронных сетей»
4. Бородина Ольга Сергеевна, асп. (ЮУрГУ) «Автоматизация направленного поиска предреакционных комплексов в реакции хиральных индукторов с бензальдегидом»
5. Бухтеева Екатерина Олеговна (СамГТУ) «Топологический подход к реконструктивным твердофазным переходам и его применение для моделирования новых материалов»
6. Зайцев Роман Геннадиевич (ЮРГПУ) «Модели машинного обучения в задачах анализа упорядоченности размещения частиц на многослойной поверхности»
7. Злобин Иван Сергеевич (ИНЭОС РАН) «Предсказание теплофизических свойств полимеров при помощи искусственного интеллекта»
8. Иваненко Тимур Юрьевич, асп. (ИХХТ СО РАН) «Применение элементов глубокого машинного обучения для прогнозирования фотолюминесцентных свойств комплексных соединений структуры типа перовскитов»
9. Ишмухаметов Ильнур Ринатович, асп. (КПФУ) «Диагностика нанокерамики в клетках млекопитающих с использованием корреляционной микроскопии и машинного обучения»
10. Карпов Кирилл Викторович, асп. (МГУ) «Дизайн комплексообразователей для переработки отработанного ядерного топлива с использованием глубокого машинного обучения»
11. Козлов Константин Сергеевич (МГУ) «Автоматический масс-спектрометрический поиск помогает открывать новые реакции»
12. Комаров Павел Вячеславович, д.ф.-м.н. (ИНЭОС РАН) «Применение подхода *in silico* для поиска новых полимерных материалов»
13. Королев Вадим Викторович, к.х.н. (МГУ) «Нейронные сети на огрубленном кристаллическом графе как инструмент для дизайна нанопористых материалов»
14. Кудияров Виктор Николаевич, к.т.н. (ТПУ) «Разработка композитов на основе гидрида магния и наноразмерных добавок для высокоэффективного хранения водорода»
15. Ларионов Кирилл Павлович, асп. (ИК СО РАН) «Предсказание свойств металл-органического каркаса UiO-66 методами машинного обучения»
16. Левченко Ирина Николаевна (РНИМУ, МГУ) «Моделирование микровязкости мембраны в окружении зонда активированной кумаринами  $C_{525}$ ,  $C_{314}$  хемилюминесценции под действием природного апоптогена  $CytC - CL$ , как гетерогенного катализатора»

17. Лифарь Михаил Сергеевич (ЮФУ) «Применение машинного обучения с подкреплением к задаче оптимального управления реакцией окисления CO на Pd»
18. Мануковская Диана Владимировна (ИХТРЭМС КНЦ РАН) «Автоматизация получения фрактальной размерности уровней освещенности фотоиндуцированного рассеяния света в фоторефрактивных монокристаллах ниобата лития с помощью программы в языковой среде Python для распознавания оптических свойств монокристаллов»
19. Мареев Евгений Игоревич, к.ф.-м.н. (МГУ) «Самоюстирующиеся оптические системы на основе машинного обучения с подкреплением»
20. Мирзаева Сабина Элмаг-кызы (МГУ) «Использование языковых моделей и методов обработки данных для оптимизации научных исследований»
21. Митрофанов Артем Александрович, к.х.н. (МГУ) «О применении метода байесовской оптимизации в химии»
22. Мулашкина Татьяна Игоревна, асп. (МГУ) «Определение активации субстрата в активном центре фермента с использованием нейронной сети»
23. Муравьев Никита Вадимович, к.т.н. (ФИЦ ХФ РАН) «Машинное обучение в термическом анализе: Первые опыты»
24. Никитина Анна Анатольевна, к.х.н. (ИТМО) «Роботизация процесса синтеза мембраны на основе оксида графена»
25. Осипов Владислав Тимофеевич (СамГТУ) «Машинное обучение для высоковоспроизводительного поиска новых материалов для металл-ионных аккумуляторов»
26. Панкин Илья Андреевич, к.ф.-м.н., PhD Chemistry and material science (ЮФУ) «Интерпретация спектров рентгеновского поглощения для single-site катализаторов на основе цеолитов с помощью молекулярной динамики и машинного обучения»
27. Пикулин Иван Сергеевич (МГУ) «Предсказание константы устойчивости комплексов металлов с помощью графовой нейронной сети»
28. Попов Илья Сергеевич, к.х.н. (УрО РАН) «Разработка машиннообучаемых потенциалов межатомного взаимодействия в системе Nb-O»
29. Поташников Александр Александрович (МГУ) «Досинтетическая оценка термодинамической стабильности кристаллических соединений методами машинного обучения»
30. Проценко Богдан Олегович (МИИ ИМ ЮФУ) «PyFitIt: Интерпретируемое Машинное Обучение для Спектроскопии на Пути к Простоте и Удобству»
31. Романчук Сергей Петрович, к.ф.-м.н. (СГТУ) «Применение вычислительного интеллекта и теории эффективной среды для моделирования структуры нанокomпозиционного материала»
32. Рубцов Иван Дмитриевич (МГУ) «Применение методов машинного обучения при поиске перспективных матриц для иммобилизации циркония»
33. Русалев Юрий Владимирович (ЮФУ) «Тренировка потенциала ReaxFF для AuPd»

34. Рылов Александр Валерьевич, асп. (МГУ) «Предсказание параметров межзвёздной пыли по данным ИК-фотометрии с помощью нейросетей»
35. Рыльцев Роман Евгеньевич, д.ф.-м.н. (УрО РАН) «Межатомные потенциалы на основе нейронных сетей для атомистического моделирования металлургических расплавов»
36. Серов Никита Сергеевич, асп. (ИТМО) «Дизайн бионаноматериалов с заданными свойствами и активностями методами искусственного интеллекта»
37. Синельников Артем Николаевич (МФТИ) «Сенсоры «электронный язык» для анализа биологических смесей методами машинного обучения»
38. Смирнова Анастасия Андреевна, к.х.н. (МГУ) «Использование сверточных нейронных сетей и трансферного глубокого обучения для обработки XAS-спектров»
39. Степанюк Роман Алексеевич, асп. (МГУ) «Применение методов машинного обучения для предсказания значений изменения дипольного момента при электронном возбуждении в флуоресцентных белках на основе данных из молекулярно-динамических расчетов»
40. Толбин Александр Юрьевич, д.х.н., проф. РАН (ИФАВ РАН) «Новый способ прогнозирования эффективности оптических лимитеров без проведения эксперимента»
41. Усачёв Максим Николаевич, к.х.н. (ХТБАСМиОХ РТУ МИРЭА) «Применение автоматизированного алгоритма *de novo* идентификации продуктов химического синтеза методом жидкостной хромато-масс-спектрометрии высокого разрешения»
42. Щелкачев Николай Михайлович, д.ф.-м.н. (ИФВД РАН) «Глубокое машинное обучение, структурная наследственность и дизайн функциональных материалов на основе металлических сплавов»
43. Щетинкина Мария Александровна (ЮУрГУ) «Автоматизация расчетов метадинамики при изучении ацилирования энантиомеров 2-метилпиперидина»
44. Яблонский Максим Денисович (МГУ) «Конформационный поиск для малых органических молекул в газовой и твердой фазе с помощью алгоритма пчелиной колонии»