



ПОДСЕКЦИЯ «Искусственный интеллект в химии»

ПРОГРАММА ЗАСЕДАНИЙ

Регламент: устные доклады – до 8 мин, ответы на вопросы – до 7 мин.

20 апреля, понедельник

Кафедра радиохимии МГУ, ауд. 308 (Ленинские горы 1с10)

Ведущий: к.х.н., доцент Митрофанов Артем Александрович

13:00–13:15	Определение способности катионов к образованию 1D-галогенометаллат(III)-анионов и рациональный дизайн гибридных галогенометаллатов методами искусственного интеллекта Быков Андрей Викторович, аспирант, 4 год обучения <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
13:15–13:30	Комбинированная графовая сверточная - полносвязная нейронная сеть для предсказания редокс-потенциалов органических молекул в растворе с использованием multifidelity learning Смирнов Максим Вадимович, аспирант, 2 год обучения <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
13:30–13:45	Применение машинного обучения для прогнозирования противораковой активности комплексов переходных металлов на основе обширной экспериментальной базы данных Маликов Дмитрий Иванович, студент, 6 курс специалитета <i>Институт общей и неорганической химии имени Н. С. Курнакова Российской Академии Наук, Москва, Россия, Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия, Школа анализа данных Яндекса, Москва, Россия</i>
13:45–14:00	Применение трансферного обучения для предсказания устойчивости комплексов UO_2^{2+} с органическими лигандами Пикулин Иван Сергеевич, студент, 6 курс специалитета <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
14:00–14:15	Прогнозирование растворимости органических соединений с использованием гибридной графовой нейронной сети Сидорова Элина Сергеевна, студент, 4 курс специалитета <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
14:15–14:30	Прогнозирование химических сдвигов ЯМР ядер для комплексов переходных металлов ^{55}Mn и ^{57}Fe с помощью машинного обучения Ковалев Алексей Евгеньевич, аспирант, 1 год обучения <i>Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук, Иваново, Россия</i>





14:30–14:45	Использование методов машинного обучения для предсказания химических сдвигов ^{93}Nb, ^{95}Mo, ^{205}Tl ЯМР в комплексах редких и переходных металлов Исаев Ярослав Игоревич, студент, 2 курс магистратуры <i>Институт химии растворов имени Г.А. Крестова РАН, Иваново, Россия</i>
14:45–15:00	Физически-информированное предсказание спектров поглощения органических молекул методами машинного обучения Ильин Егор Александрович, аспирант, 2 год обучения <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
15:00–15:15	Перерыв
15:15–15:30	Разработка мультиагентной системы для проектирования наноструктурированных материалов: связь научной литературы и лабораторного эксперимента Кротков Никита Алексеевич, аспирант, 1 год обучения <i>НИУ ИТМО, Научный центр инфохимии, Санкт-Петербург, Россия</i>
15:30–15:45	Применение химических языковых моделей для прогнозирования синтетической доступности новых функциональных материалов Рубцов Иван Дмитриевич, аспирант, 2 год обучения <i>Институт перспективных исследований проблем искусственного интеллекта и интеллектуальных систем МГУ имени М. В. Ломоносова, Москва, Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
15:45–16:00	Применение методов искусственного интеллекта для прогнозирования радиолитической стойкости органических соединений Никифоров Дмитрий Николаевич, студент, 6 курс специалитета <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
16:00–16:15	Проектирование стратегий неорганического синтеза с помощью генеративных моделей, дополненных механизмами извлечения знаний Горбунова Анастасия Александровна, студент, 2 курс магистратуры <i>Университет ИТМО, центр искусственного интеллекта в химии, Санкт-Петербург, Россия</i>
16:15–16:30	Создание реляционных баз данных магнитных материалов с использованием методов ИИ Шандыбо Максим Алексеевич, студент, 1 курс магистратуры <i>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Москва, Россия</i>
16:30–16:45	Автоматизированная расшифровка молекулярных структур по данным масс-спектрометрии с помощью методов машинного обучения Бабаскина Мария Михайловна, студент, 1 курс магистратуры <i>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Москва, Россия</i>
16:45–17:00	Prediction of thiacalix[4]crown-ethers aggregate morphology with feature selection guided Machine Learning algorithms Makarova Taisia Alekseevna, student, 1st year of Master's degree <i>Infochemistry Scientific Center, ITMO University, St. Petersburg, Russia</i>





21 апреля, вторник

Кафедра радиохимии МГУ, ауд. 308 (Ленинские горы 1с10)

Ведущий: к.х.н., доцент Митрофанов Артем Александрович

13:00–13:15	Использование машинного обучения в анализе зависимостей состав-свойства эрозионностойких лакокрасочных материалов Кирпаль Юлия Германовна, аспирант, 2 год обучения <i>Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия</i>
13:15–13:30	Прогнозирование характеристик ПКМ Шоничев Иван Дмитриевич, аспирант, 2 год обучения <i>МГТУ имени Н.Э. Баумана, факультет «Специальное машиностроение», кафедра СМ13 «Ракетно-космические композитные конструкции», Москва, Россия</i>
13:30–13:45	Генеративный дизайн антиокислительных присадок для смазочных масел методами машинного обучения Дещеня Владимир Игоревич, аспирант, 2 год обучения <i>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Долгопрудный, Россия</i>
13:45–14:00	Исследование новых соединений и присадок в химической промышленности с помощью искусственного интеллекта Ческий Даниил Александрович, студент, 5 курс специалитета <i>Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, Институт двигателей и энергетических установок, Самара, Россия</i>
14:00–14:15	Ускоренные испытания аккумуляторных батарей и прогнозирование деградации на основе физического моделирования и машинного обучения Рахимов Платон Тимурович, студент, 4 курс бакалавриата <i>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Долгопрудный, Россия</i>
14:15–14:30	Предсказание концентрации и температуры электронов в емкостном ВЧ разряде с помощью модели машинного обучения Зиганшин Илья Ильнурович, студент, 1 курс <i>Школа анализа данных Яндекса, Москва, Россия</i>
14:30–14:45	Топологически направленный поиск морфологий диблок-сополимеров с использованием байесовской оптимизации Белкина Кристина Артемовна, аспирант, 1 год обучения <i>Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Московская область, Долгопрудный, Россия, Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской академии наук, Москва, Россия</i>
14:45–15:00	Поиск конформеров органических молекул при помощи тензорных сетей Маллаев Руслан Абдурагимович, студент, 2 курс магистратуры <i>Московский физико-технический институт, ЛФИ, Москва, Россия, Terra Quantum AG, Санкт-Галлен, Швейцария</i>
15:00–15:15	Перерыв
15:15–15:30	Оценка воспроизводимости электростатического потенциала локальными моделями частичных атомных зарядов на основе машинного обучения Зверев Денис Вадимович, студент, 2 курс магистратуры <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>





15:30–15:45	MolWeaver: фрагментационно-ориентированный пайплайн scaffold hopping с ANN-поиском в пространстве ядер Кларос Роберто, студент, 2 курс магистратуры Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Москва, Россия, ООО «ХимПар», Москва, Россия
15:45–16:00	Количественная оценка правдоподобности механизмов на основе генеративного моделирования потоков электронов Семакин Григорий Алексеевич, студент, 2 курс бакалавриата Институт органической химии имени Н.Д. Зелинского РАН, Москва, Россия, Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», факультет химии, Москва, Россия
16:00–16:15	Физически-обоснованные атомные эмбединги на основе модели COSMO-RS для графовых нейронных сетей Карпушкина Ирина Александровна, студент, 4 курс бакалавриата Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия
16:15–16:30	Сравнение подходов по предсказанию кислотно-основных свойств органических соединений в водном растворе Вандышев Георгий Константинович, студент, 2 курс магистратуры Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Долгопрудный, Россия
16:30–16:45	Исследование центров нуклеации алмазной фазы в разориентированном биграфене с водородной функционализацией поверхности Буйлова Марианна Александровна, студент, 1 курс магистратуры Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Москва, Россия, Лаборатория цифрового материаловедения, Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»
16:45–17:00	Расчёт термических свойств супергидридов при экстремальных условиях методом молекулярной динамики с помощью машиннообучаемого потенциала Алексеев Даниил Сергеевич, студент, 1 курс магистратуры Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия

22 апреля, среда

химический факультет МГУ, холл 2 этажа (Ленинские горы 1с3)

12:30–15:00	Стендовая сессия
-------------	-------------------------

22 апреля, среда

химический факультет МГУ, Южная химическая аудитория (ЮХА) (Ленинские горы 1с3)

15:00–15:30	Технологическое предпринимательство: точки опоры и источники финансирования Корнюшина Екатерина Александровна CEO AiNeuroChem aiDeepFake
15:30–16:00	Топовые вычислительные системы для суперкомпьютинга и ИИ Егоршев Валерий Вадимович CEO «Когнитар»





16:00–16:30	Новая образовательная программа «Искусственный интеллект в естественно-научных исследованиях» от Школы Анализа Данных Яндекса, старт второго набора к.т.н. Щирый Андрей Олегович <i>Руководитель научного трека ШАД Яндекс</i>
16:30–16:45	Перерыв
16:45–17:15	Виды моделирования и их роль в исследовании к.х.н., с.н.с. Шульга Дмитрий Александрович <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
17:15–17:45	ИИ в химии за пределами ChatGPT к.х.н., доцент Митрофанов Артем Александрович <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>
17:45–18:00	Подведение итогов. Награждение авторов лучших докладов. Закрытие подсекции. к.х.н., доцент Митрофанов Артем Александрович <i>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия</i>