

Подводные камни ИИ в современной химии и молекулярном моделировании



**Медведев
Михаил
Геннадьевич,
к.ф.-м.н.**

Институт органической химии
им. Н.Д. Зелинского РАН
(руководитель группы),
Университет ИТМО
(заведующий лабораторией)

Краткая биография

В 2016 году окончил РХТУ им. Д.И. Менделеева (ВХК РАН) и поступил в аспирантуру в ИНЭОС РАН. В 2017-м опубликовал статью в журнале Science, где было показано, что многие из популярных на тот момент методов теории функционала плотности являлись переобученными и могли привести к большим ошибкам на системах, далёких от тех, которые использовались для их обучения. В том же 2017-м начал собирать свою научную группу, а в 2018-м защитил диссертацию к.ф.-м.н. в МГУ имени М.В. Ломоносова. В 2020-м году выиграл конкурс на создание собственного подразделения в ИОХ РАН и стал руководителем Группы теоретической химии №24 в нём. В 2023-м году заключил договор о проекте с Samsung (первый официальный коммерческий проект для Группы), к реализации которого я привлёк команду Александра Шапеева из Сколтеха. В 2024-м году в дополнение к руководству Группой в ИОХ РАН стал заведующим Лабораторией цифровой химии в НИУ ИТМО. В настоящий момент Группа теоретической химии объединяет около 90 сотрудников из Москвы, Питера и Тулы.

Краткое описание доклада

В 1929 знаменитый физик Пол Дирак написал: "Фундаментальные законы, необходимые для предсказания большей части физики и всей химии, полностью известны, и трудность заключается только в том, что применение этих законов приводит к уравнениям, которые слишком сложны для решения." С тех пор прошло практически 100 лет, но данная ситуация не изменилась: во многих случаях мы всё ещё не можем моделировать интересующие нас реальные химические системы из первых принципов. Тут-то нам и приходит на помощь искусственный интеллект (ИИ): благодаря нему нам удаётся использовать принципы физики для ответов на вопросы химии и предсказания физических свойств химических соединений. Однако, как и любой интеллект, ИИ склонен выбирать кратчайший путь достижения требуемых от него показателей, поэтому для создания ценных моделей ИИ необходимо внимание эксперта и научный подход.