

	Серов Никита Сергеевич к.х.н.
Научные интересы	✓ Прикладной искусственный интеллект ✓ Хемоинформатика ✓ Молекулярная биология ✓ Структурная биология
Отличительные особенности программы	Программа позволит приобрести навыки применения науки о данных и искусственного интеллекта для решения таких химических задач как планирование синтеза, дизайн лекарственных и диагностических молекул, моделирование свойств многокомпонентных систем и разведывание химических пространств для нахождения молекулярных систем с заданным набором свойств и активностей.
Перечень исследовательских проектов потенциального научного руководителя (участие/руководство)	✓ Генеративный дизайн РНК аптамеров с высокой аффинностью к малым органическим молекулам ✓ Граф знаний биополимеров для перепрофилирования, прогнозирования свойств и генерации биосенсоров ✓ Гибридный подход на основе ИИ и молекулярной динамики для генерации first-in-class биосенсоров антибиотиков на основе циклических пептидов ✓ Модель-трансформер для условной генерации аптамеров, связывающих белки, посредством трансфера знаний из домена антител ✓ Алгоритм эволюционной оптимизации на основе модели мета-регрессора для дизайна высокоэффективных химически модифицированных миРНК для нокдауна генов ✓ Генерация проникающих в клетку пептидов для таргетной доставки лекарственных молекул с учетом типов клеточных линий ✓ Физически информированная модель полного цикла для in silico разработки каталитических центров ДНКзимов с повышенной активностью ✓ Модель для повышения качества результатов рентгеноструктурного анализа для разрешения трудно кристаллизуемых белковых структур ✓ Обучение совместных представлений белков на основе химических, спектральных и структурных данных ✓ Модель BiLSTM-AE с контрастным обучением для формирования не зависящих от задачи, стабильных и интерпретируемых эмбедингов пептидов ✓ In silico разработка аптамеров с высокой аффинностью и селективностью по отношению к белковым токсинам в биологических жидкостях

Перечень возможных тем для исследования	✓ Физическое информирование нейросетей для моделирования биомакромолекул в условиях дефицита качественных данных ✓ Интерпретируемые алгоритмы для направленного дизайна биосенсоров и терапевтических биомакромолекул ✓ Разработка стратегий transfer learning для моделирования редких и малоизученных систем ✓ Алгоритмы обучения с подкреплением для оптимизации свойств и активностей биополимеров ✓ Разработка универсальных математических представлений биомакромолекулярных систем
Количество публикаций в журналах, индексируемых в базах данных Web of Science, Scopus, RSCI, за последние 5 лет	16
Основные публикации	1. Eremeyeva, M., Din, Y., Shirokii, N., & Serov, N. (2025). SequenceCraft: machine learning-based resource for exploratory analysis of RNA-cleaving deoxyribozymes. BMC bioinformatics, 26(1), 2 2. Shirokii, N., Din, Y., Petrov, I., Seregin, Y., Sirotenko, S., Razlivina, J., ... & Vinogradov, V. (2023). Quantitative prediction of inorganic nanomaterial cellular toxicity via machine learning. Small, 19(19), 2207106 3. Gubina, N., Dmitrenko, A., Solovev, G., Yamshchikova, L., Petrov, O., Lebedev, I., ... & Vinogradov, V. (2024). Hybrid generative AI for de novo design of co-crystals with enhanced tabletability. Advances in Neural Information Processing Systems, 37, 84606-84644 4. Jyakhwo, S., Serov, N., Dmitrenko, A., & Vinogradov, V. V. (2024). Machine learning reinforced genetic algorithm for massive targeted discovery of selectively cytotoxic inorganic nanoparticles. Small, 20(6), 2305375 5. Serov, N., & Vinogradov, V. (2022). Artificial intelligence to bring nanomedicine to life. Advanced Drug Delivery Reviews, 184, 114194
Наиболее значимые результаты интеллектуальной деятельности	✓ На данный момент производится регистрация РИД, касающихся разработанной в лаборатории модели SeQuant для формирования стабильных интерпретируемых эмбедингов пептидов
Требования, предъявляемые к аспиранту	✓ личное присутствие ✓ участие в жизни лаборатории и Центра ✓ готовность и способность вести магистрантов ✓ обязательность и грамотный менеджмент своего времени
Наименование научных специальностей для зачисления аспиранта	1.4.4 Физическая химия 1.4.5 Хемоинформатика