



ИНТЕНСИВ  
**Архипелаг  
2121**

**Reaction Automatic: программный пакет  
для компьютерного моделирования  
химических реакций с использованием  
квантово-химических методологий**

**Штыров Андрей Андреевич  
генеральный директор ООО "РА"**

<https://pt.2035.university/project/reaction-automatic-programmnyj-paket-dla-komputernogo-modelirovaniya-himiceskih-reakcij-s-ispolzovaniem-kvantovo-himiceskih-metodologij>

## Разработка и оптимизация химических процессов в промышленности

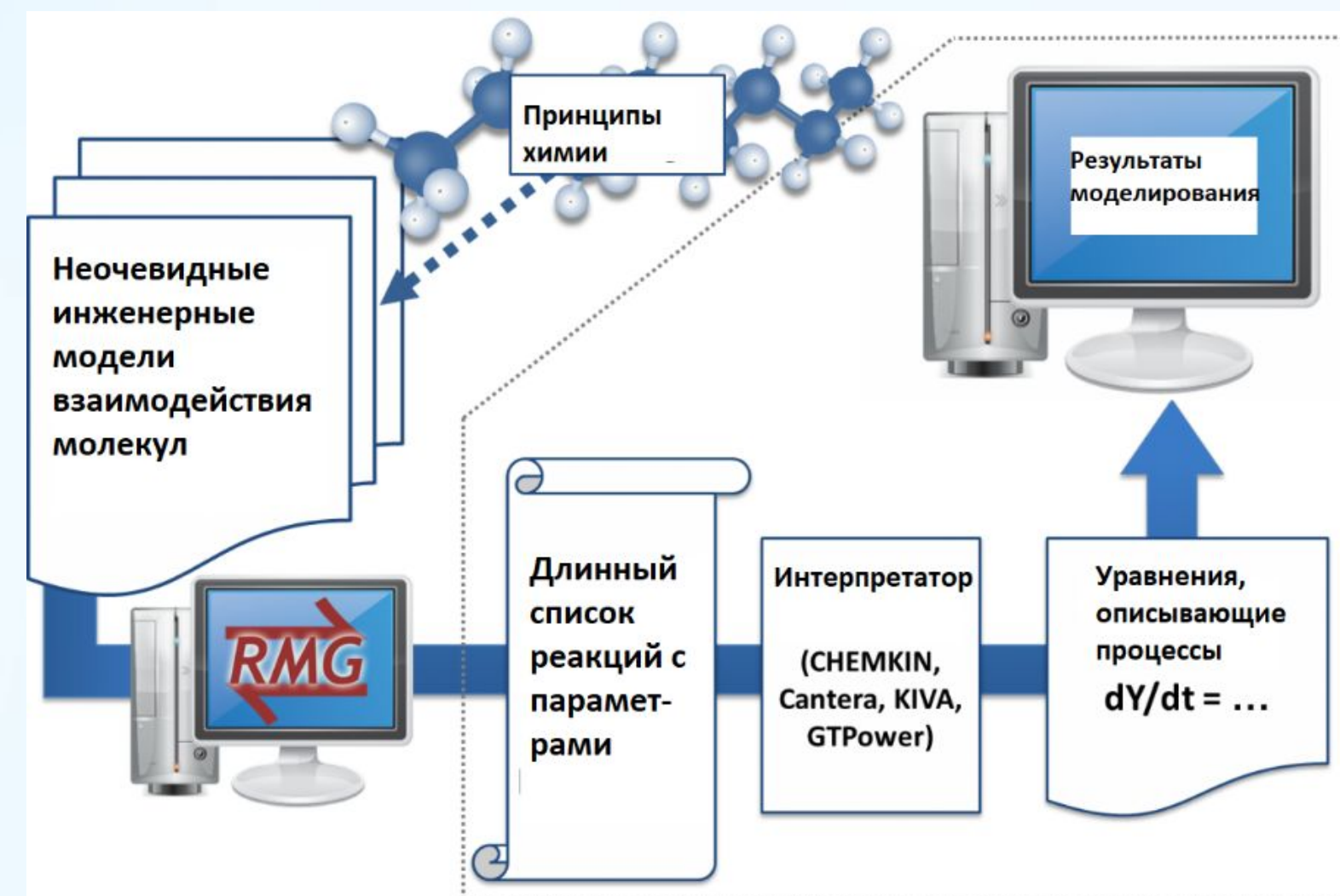
### Экспериментальная



- Долго (несколько недель на синтез 1 варианта)
- Дорого (тысячи USD на реактивы)
- Низкая вероятность, что будет найдено наилучшее решение

**МАЛОЭФФЕКТИВНО**

### Текущие методы компьютерного моделирования



- Быстро (сканируются десятки вариантов за день)
- Недорого (траты только на электроэнергию)
- Текущие модели характеризуются низкой достоверностью

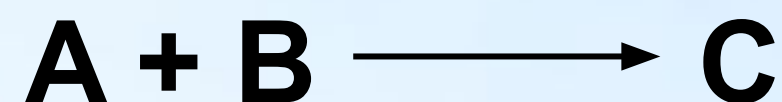
**МАЛОЭФФЕКТИВНО**



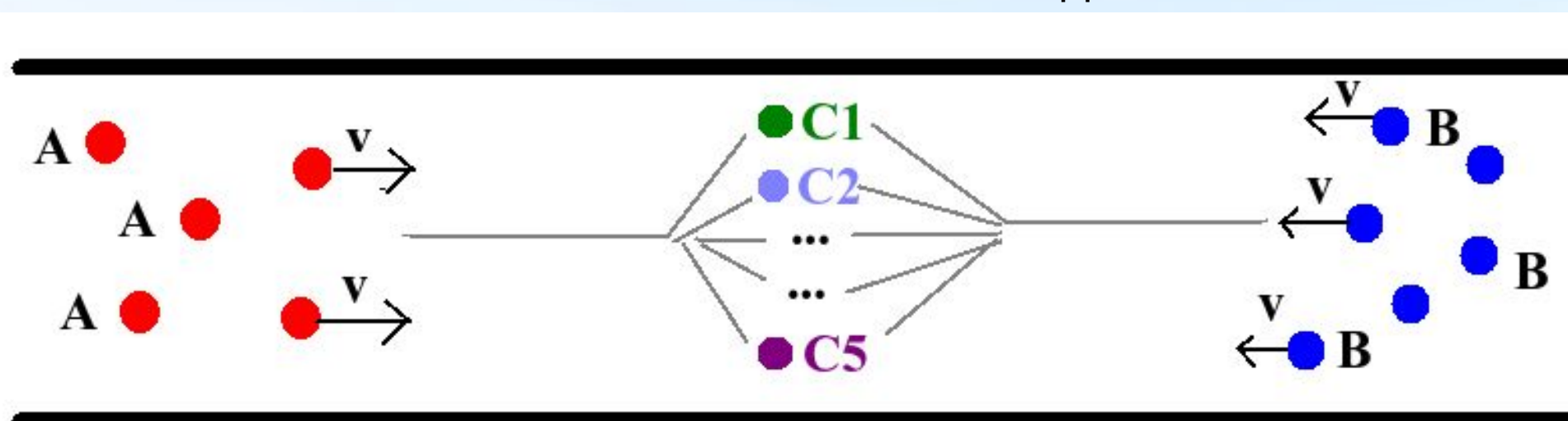
# Проблема

Достоверность около 60%

## Газодинамические и гидродинамические модели



Варианты из баз данных, «подогнанные» параметры для моделирования взаимодействий



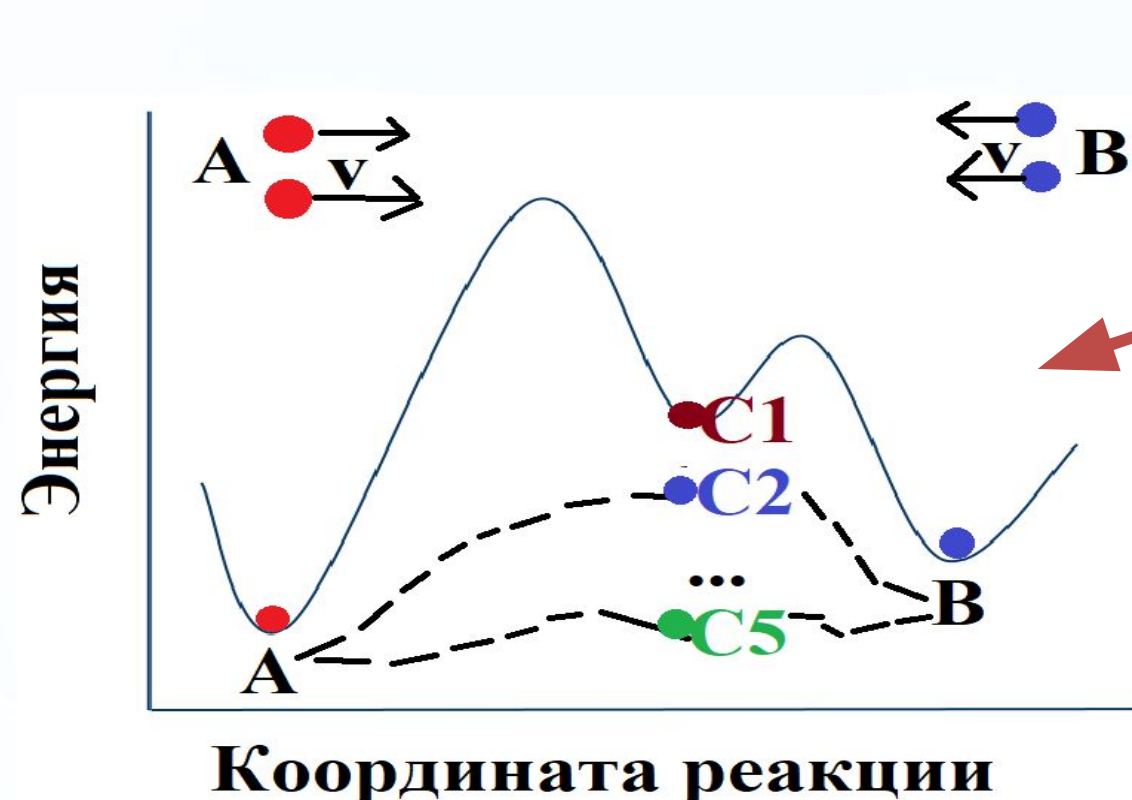
~~Катализатор~~

Результат

————	C1, 30%
————	C2, 10%
————	C3, 20%
————	C4, 11%
————	C5, 1%

1. Слишком низкая достоверность: инженерные модели не имеют отношения к химии.

## Квантово-механическое моделирование



Ручной расчет каждой реакции на основе догадки.

Результат

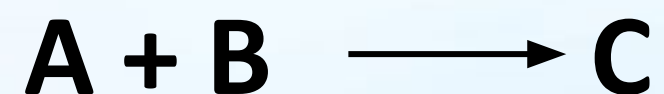
Достоверность до 100%

————	C1, 30%
————	C2, 10%
————	C3, 20%
————	C4, 11%
————	C5, 1%

Уравнение квантовой механики для расчета функции энергии молекул, ее производных + алгоритмы оптимизации.

1. Требуется специалист.
2. Каждая реакция обрабатывается отдельно **вручную**.
3. Требуется начальная догадка о реакции: сложность и субъективизм.

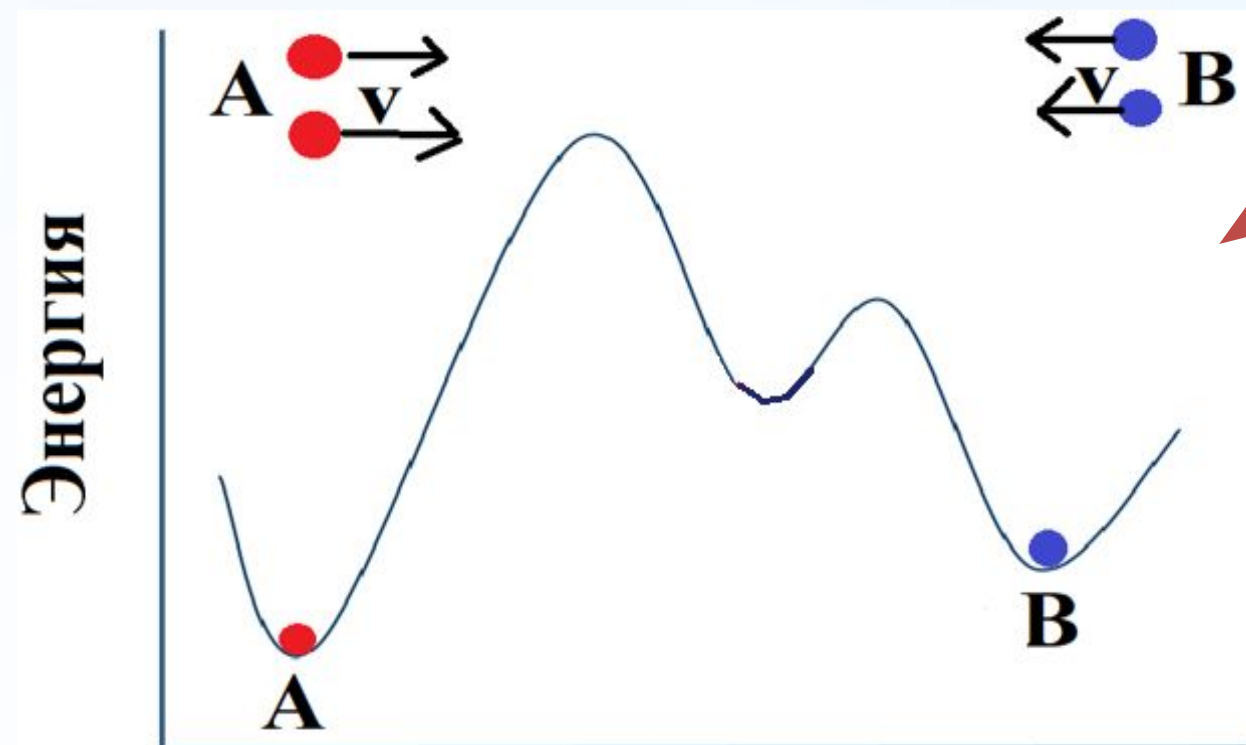
# Решение



Ур. Квант. Механики для расчета функции энергии молекул, ее 1, 2 производных + алгоритмы глобального следования по путям реакций.



Полное исследование топологии + графы реакций.

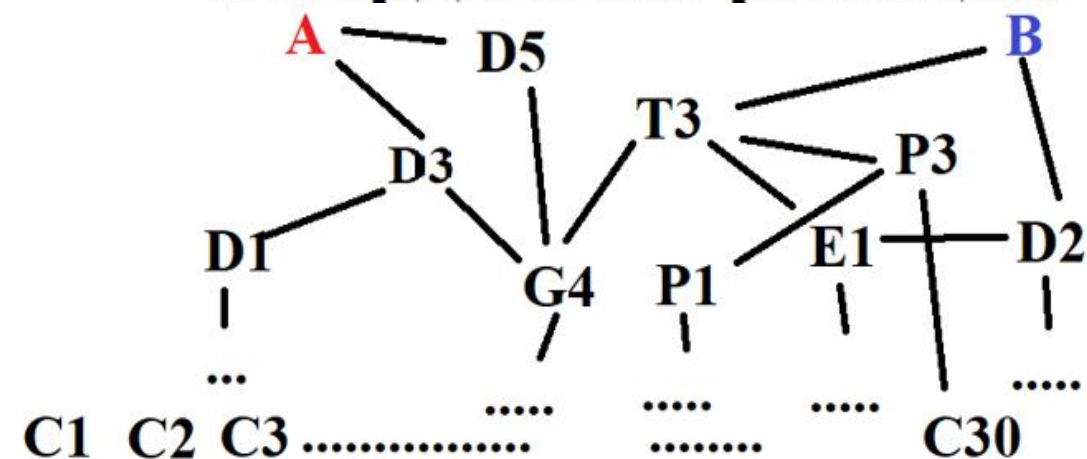


Катализаторы

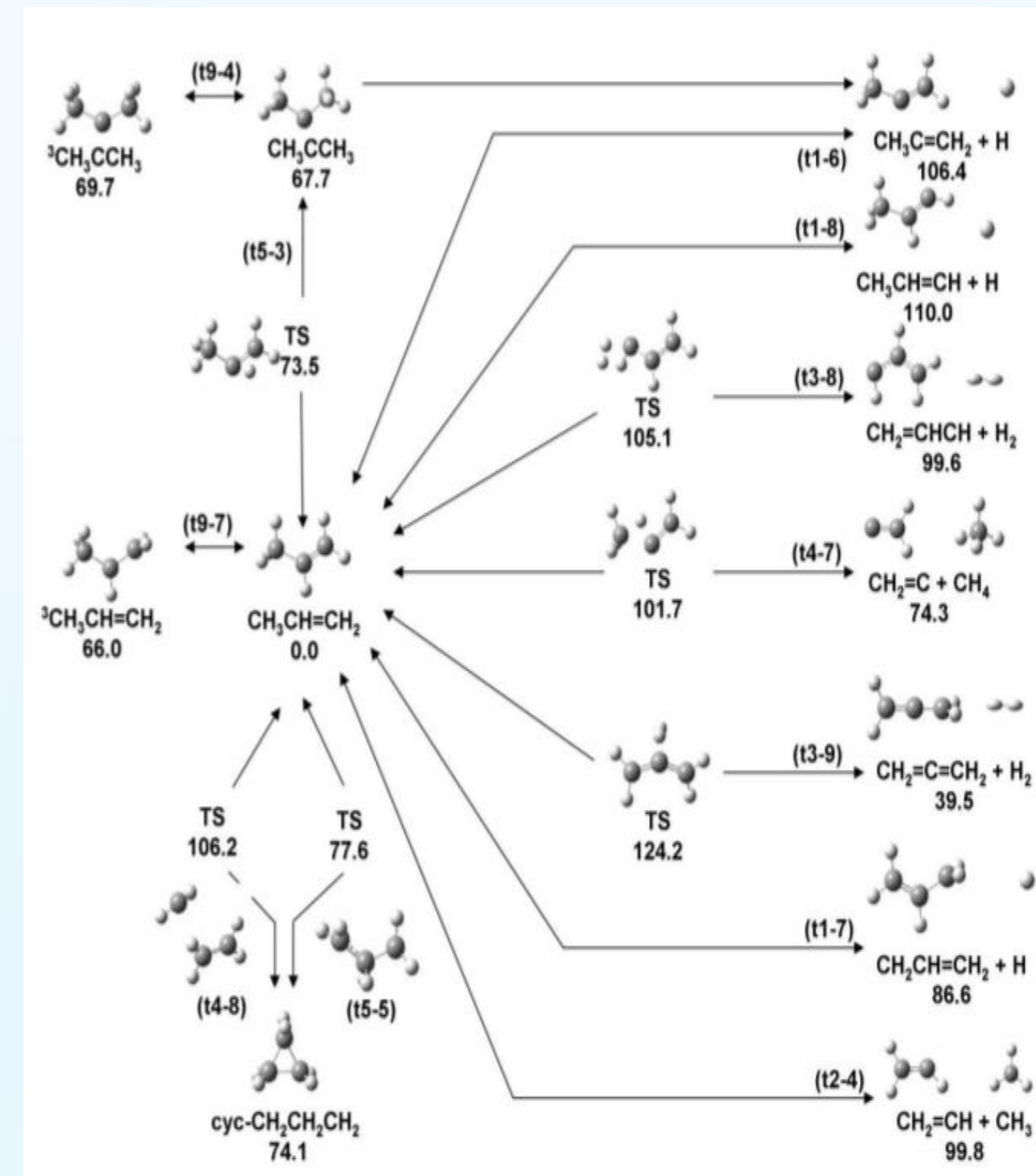
Результат

- Оптимизация энергии молекул в соответствующем пространстве координат ядер (поиск продуктов реакции – минимумов, активных комплексов – максимумов)
- Поиск минимальных путей от одной конфигурации ядер к другой (пути между минимумами функции энергии).

Координата реакции



Достоверность до 96%



1. «Не вручную», **автоматический** поиск всех реакций
2. Трудоемкость меньше традиционной кв. механики в 40-50 раз.
3. Сохраняется качество квантово-химических подходов.

## Reaction Automatic

коробочное решение (лицензия на год, расчеты на серверах пользователя)

SAAS продукт (лицензия на год или на месяц, расчеты на наших серверах)

### Целевая аудитория:

- R&D отделы компаний в области химической, фармацевтической, энергетической индустрий, в области микроэлектроники и нанотехнологий
- научные группы, занимающиеся исследованиями и инженерными разработками в физико-химических областях

### Что дает продукт пользователю:

- Найти наиболее оптимальный способ синтеза нужного вещества, оставив компьютер считать “*на НОЧЬ*”
- Не синтезировать вещество, чтобы проверить его химические свойства, а просто вбить данные в программу
- Получить от компьютера список “*подсказок*”, как оптимизировать химические процессы в производстве

**Пользователь может сконцентрироваться на важном - что он хочет предложить миру. Как реализовать его идею придумает компьютер.**



# Конкуренты

Параметр	Reaction Automatic	ChemKin Pro	ChemCad	ProSim
Способ моделирования	Уравнения <b>квантовой химии</b>	уравнения <b>газо- и гидродинамики</b>	уравнения <b>газо- и гидродинамики</b>	уравнения <b>газо- и гидродинамики</b>
Макс. набор исходных пар-ров	<b>16</b> (P, V, T, 5 в-в + по 1 кин. параметру, катализаторы)	<b>8</b> (P, V, T, кинетика струи, ширина струи, 2-3 вещ-ва)	<b>9</b> (P, V, T, реагенты до 6 штук)	<b>14</b> (P, V, T, кинетические параметры (3), реагенты (8)).
Достоверность, %	<b>Не менее 95%</b>	<b>60-70%</b>	<b>Около 60%</b>	<b>Около 65%</b>
Моделируемые реакции	Молекулярное напыление на подложки; орг. синтез; неорг. синтез, в т.ч. лекарств; реакции горения	нанесения в-в на <b>подложки</b>	синтез <b>лекарств</b>	<b>горения, в двигателях, химических реакторах</b>
Кол-во соединений	любые до 300 атомов (> <b>50 000</b> )	<b>2 700</b>	<b>1 900</b>	<b>2 300</b>
Выход. зависимости	до <b>50</b> + граф реакций	<b>4-5</b>	<b>1-2</b>	<b>2-3</b>
Стоимость	<b>1 600 \$</b> в год Saas (250\$ мес.)	<b>3 500 \$</b> в год, пакет	<b>1 300 \$</b> в год, Saas	<b>1 600 \$</b> пакет, <b>1300\$</b> Saas

## Основные преимущества:

- **единственное** решение на основе уравнений **квантовой химии** (аналоги: уравнения **газо- и гидродинамики**)
- **достоверность** моделирования не менее **95%** (аналоги: до **60%**)
- **количество** возможных для моделирования **соединений** в **20 раз больше** аналогов (более **50 000**, аналоги не более **2 700**)
- **количество** выходных **зависимостей** больше **на порядок** (до **50**, аналоги не более **1-5**).

# РЫНОК

## Оценка рынка компьютерного моделирования хим. реакций

Ёмкость рынка 2021 г. (только химические реакции) **~200 млн \$**

Темп роста рынка **~ 20 %** в год

### Основные игроки



**ANSYS:** более 40 000 покупателей по всему миру, 10.5 млн \$ / год от продажи хим. ПО



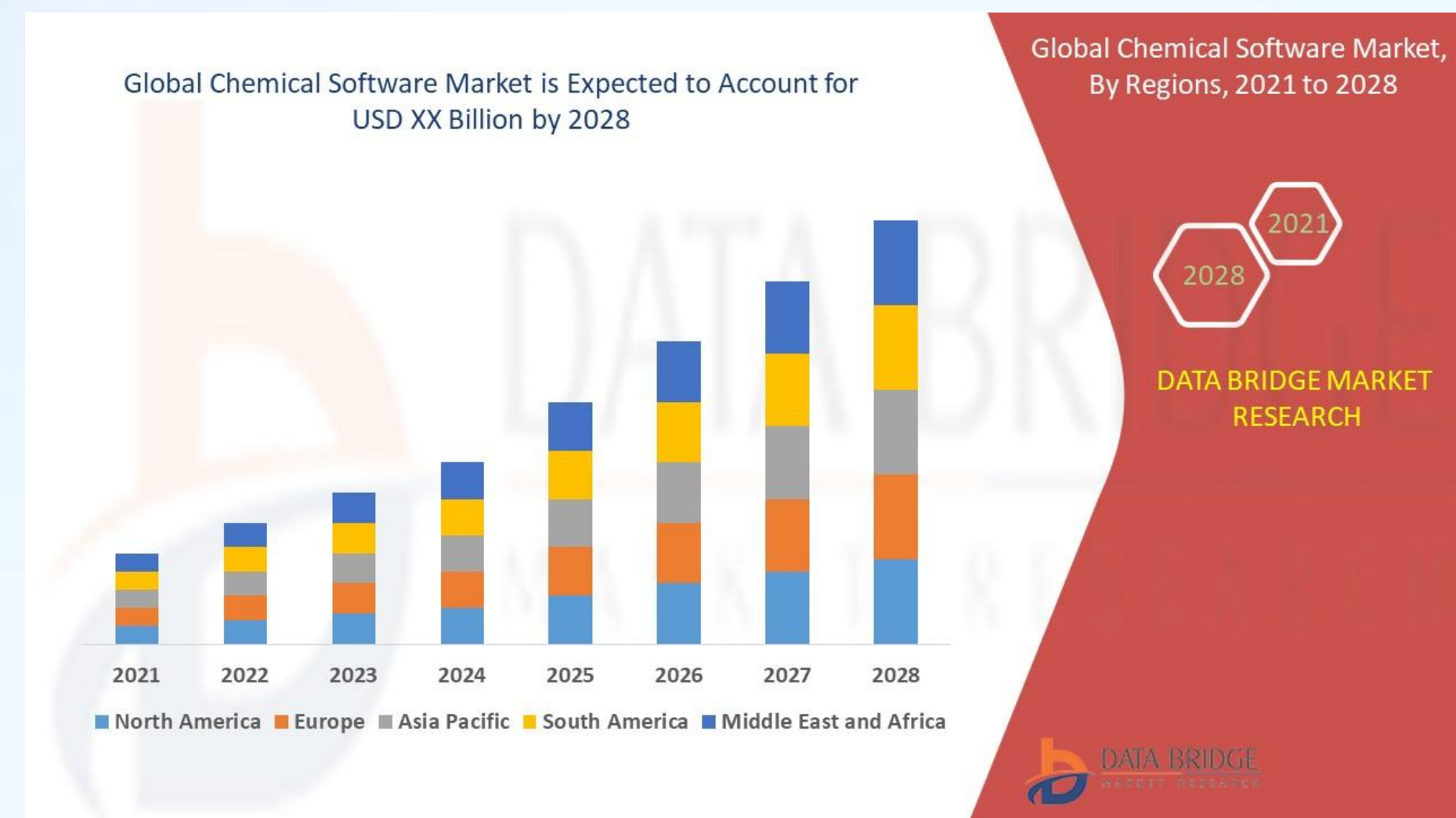
**ProSim:** 830 покупателей в 63 странах, включая Total Petrochemicals, Schlumberger, L'Oreal, ~70 млн \$ / год от продажи хим. ПО



**Chemstations (Chemcad):** 35.6 млн \$ / год от продажи хим. ПО

### Основные сегменты потребители:

1. Компании по производству солнечных панелей, полупроводниковых элементов, интегральных схем.
2. Компании по производству и синтезу новых соединений;
3. Компании в химической, энергетической, фармацевтической индустрии.
4. **Исследовательские группы** по всем вышеуказанным направлениям.



Общий рынок программных пакетов для химической промышленности: **8 млрд USD к 2028 году**

### Оценка продаж нашего продукта к 2029 году только по академическому направлению:

Исследовательские группы: около **15** СПб + около **60** РФ + около **180** Китай + около **360** (США + Европа). В среднем **3** пакета на группу.

Итого: при минимальном ср. чеке 1300 USD/год:  
**2 400 000 USD/год**



# Бизнес-модель

Главная особенность ReactionAutomatic: возможность детального изучения происходящих процессов, что важно для исследователей и инженеров при разработке новых веществ.

**1 круг ЦА:** исследовательские группы химической, физико-химической направленности



**2 круг ЦА:** R&D отделы наиболее наукоёмких компаний



**3 круг ЦА:** R&D отделы компаний в области химической и пр. промышленности

Переход между **ЦА** за счет накопленного портфолио из успешных проектов от предыдущей ЦА - конференции, выставки, акселераторы

**Гибкая ценовая политика:** от 180 USD/год (Student Pack, простейший функционал) до 5000 USD/год (Full Pack, коммерция)

**Создание продуктов по каждому направлению применений:** заточенный под конкретную область функционал и приемлемая цена

**SAAS+:** проведение моделирования “под заказ” нашими специалистами: для академии **50 - 500** USD, для индустрии по оговаривается отдельно

**Средний чек:** 1100 USD/год (академия), 2500 USD/год (индустрия)

↓  
**данные для целой публикации**

**Наши затраты:** 1. разработка ПО (зарплата); 2. тех. поддержка (зарплата); 3. затраты на выход на рынок; 4. аренда серверов для проведения вычислений; 5. покупка и поддержка собственных серверов.



# Текущие результаты

- 1. ПРОДУКТ:** пилотная версия **ReactionAutomatic Decomposition**: моделирование химических реакций, происходящих при нанесении молекулярных слоев на подложку -- продукт выполнен в рамках выполнения **СТАРТ-1**.
- 2. ПРОДУКТ:** бета-версия **ReactionAutomatic Standard Pack 1**: моделирование широкого класса органических и неорганических химических реакций
- 3. КЛИЕНТЫ**, с которыми уже проведены успешные **ПИЛОТЫ**: научные группы из ФТИ им. Иоффе, СПбГУ, Института Силикатов.  
По результатам **ПИЛОТОВ** принято решение о покупке программных пакетов на 300 000 рублей до конца 2021 года; на **5 млн рублей** в 2022 году.
- 4. ИНВЕСТОР:** 3 500 000 рублей (ООО “Аналитприбор”)
- 5. Ссылки** на продукт в научных публикациях в области фармакологии, которые входят в **портфолио** нашего продукта.

## 2021-2022 гг:

- **СТАРТ-2.** В ходе СТАРТ-1 разработано “ядро” программы и частный коммерческий продукт для одного класса реакций.  
*Цель:* расширение моделируемых реакций; расширение функционала под нужды пользователей.  
*Продукт:* ReactionAutomatic Plus: ПО для автоматизированного цифрового проектирования новых химических веществ, используемых в химической промышленности, и путей их синтеза.
- **ИНВЕСТОР:** средства инвестора пойдут на налаживание технической базы (серверов для SAAS), а также на взаимодействие с потребителями из индустрии: понять что нужно клиенту и доработать продукт под эти нужды
- **СКОЛКОВО:** стать резидентом СКОЛКОВО и принять участие в проводимых акселерационных программах

## 2023-2025 гг:

- **ЗАВЕРШИТЬ** этап распространения исключительно на рынке исследовательских групп - плотно закрепиться и заполнить портфолио для перехода к потребителями из индустрии
- **ВЫЙТИ** на коммерческий рынок: участие в специализированных выставках, конференциях, акселераторах, непосредственная работа с индустрией.



# Интеллектуальная собственность



## Планируется защитить в 2022 году:

- ReactionAutomatic Standard Pack 1: программный пакет для автоматического моделирования сетей реакций, происходящих в органическом синтезе
- Уникальные алгоритмы, основанные на машинном обучении, позволяющие с высокой точностью учесть влияние растворителя при моделировании химических реакций



Наименование продукта	Цена, USD/шт.	Объёмы производства и реализации, шт/год				
		2022	2023	2024	2025	2028
ReactionAutomatic Light	150 (student) - 500	10	35	67	150	350
ReactionAutomatic Researcher	800-1000	10	15	70	120	170
ReactionAutomatic Standard Pack 1	1100-1400	17	25	50	80	130
ReactionAutomatic Standard Pack 2	1300-1600 (Acad), 2400-2700 (Commerce)	15	35	50	67	270
ReactionAutomatic Plus	2200-2400 (Acad), 4700-5000 (Commerce)	8	20	35	53	130
<b>ИТОГО</b> выручка:		67 700 \$	140 000 \$	273 500 \$	426 000 \$	1 007 000 \$



# Предложение для инвестора

## 1. Получение **СТАРТ-2**: 7 млн рублей.

Средства необходимы для доработки и вывода на рынок расширенной версии ReactionAutomatic Plus, которая может использоваться компаниями и научными группами широкого спектра, проводящими органический синтез.

## 2. Привлечение стратегического **соинвестора-партнера**: от 3 млн рублей

Средства пойдут на создание “частных” версий ReactionAutomatic, заточенных под нужды определенного сегмента рынка (нефтеперерабатывающей, фармацевтической и пр.). Сегмент, под которую будет создаваться частный продукт, может обсуждаться с инвестором.

Направления затрат:

- исследование конкретных запросов со стороны промышленности к функционалу программного пакета;
- доработка программного пакета под нужды конкретной промышленности;
- расширение отдела взаимодействия с конечными потребителями -- продажи + техническая поддержка;
- создание отдела по распространению продукта по РФ и за рубежом.

# Команда

Член команды	Должность	Роль в проекте	Квалификация
Штыров Андрей Андреевич 	Генеральный директор	отвечает за «химическую» часть разработки, тестирование, распространение продукта, привлечение инвестиций.	Квантовый химик (СПбГУ, 2016, СПбАУ РАН 2019), 8 лет квантово-хим. расчетов для международных групп.  Разработал ASEC-FEG methodology, публикации в лучших журналах по химии (JCTC, JACS, RSC) )
Догонашева Олеся Анатольевна 	Главный инженер	Разработка ПО, оптимизация кода, разработка user-friendly интерфейса, веб-сайта.	ИТМО (2016, Прикл. Мат.); СПбАУ РАН (2020, Прикл. Мат. и Физика), инженер ЦНИИ РТК, р-ка веб-приложений, науч. ПО Разработчик сложных динамических моделей, имитирующих работу нейронов, для применений в робототехнике.
Моцепуро Иван Андреевич	директор по маркетингу и финансам	маркетинг, выход на рынок, продажи	ВШМ СПбГУ (2014), IPE Management School Paris (2016); Singulart (2015-2016); Artomatix (2016-2018). Продакт-менеджер продукта по использованию ИИ для создания 3D-изображений
Ковалева Елизавета Николаевна	программист	СААС-версия, оптимизация кода, user-friendly интерфейс.	СПбГПУ (Прикл. Мат. 2019), разработка кода для робототехники Разработчик робота для поиска дронов на промышленных площадках
Нурпеисова Диана Оразбековна 	программист	Разработка алгоритмов машинного обучения; оптимизация кода; разработка коммерческой версии	НИУ «Московский Энергетический Университет» (2017), ИТМО (2019), Инженер-конструктор в "Альтами" (СПб); "РОМЗ" (Ярославская обл.), инженер в ФТИ им. Иоффе. Специальность: разработка ПО для автоматизации экспериментальных и инженерных процессов.
Губина Дарья Кирилловна 	программист-инженер	настройка и работа вычислительных кластеров: тех. поддержка	Санкт-Петербургский Государственный Университет Аэрокосмического Приборостроения: разработка алгоритмов для автоматизации инженерных процессов; инженер ЦНИИ РТК; разработка алгоритмов для автоматизации инженерных процессов.





ИНТЕНСИВ  
**Архипелаг  
2121**

АГЕНТСТВО  
СТРАТЕГИЧЕСКИХ  
ИНИЦИАТИВ

**20.35**  
УНИВЕРСИТЕТ

ПЛАТФОРМА НТИ



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ  
И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

# Контакты

Сайт

Телефон

**+7 (911) 749-90-40**

email

**reactionautomatic@gmail.com**