



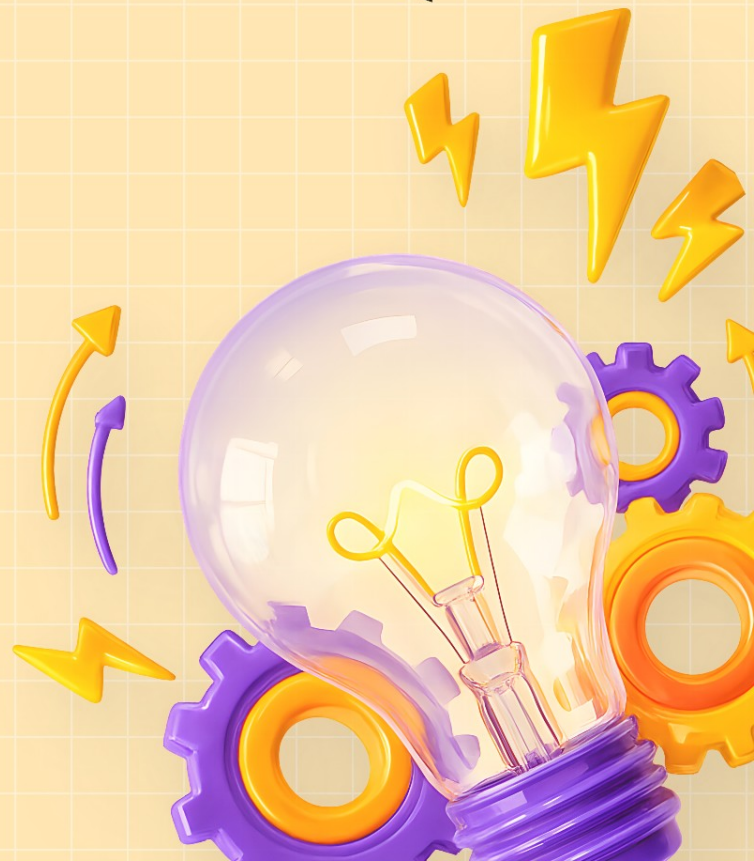
ПРОГРАММНЫЕ ИНСТРУМЕНТЫ РОЗ «СТРУКТУРА-СВОЙСТВО»

Проект направлен на создание программного инструмента для исследования зависимостей между структурой вещества и его свойствами, примененного в материаловедении, химии, фармацевтике и смежных областях науки и промышленности. Помогает сократить время на разработку целевого вещества с заданными свойствами

Максимов Леонид Сергеевич,
leomaxcer@ya.ru, УУНиТ

20.35
УНИВЕРСИТЕТ

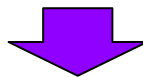
20.35
НАЦИОНАЛЬНАЯ
ТЕХНОЛОГИЧЕСКАЯ
ИНИЦИАТИВА



АКТУАЛЬНОСТЬ ИДЕИ

По данным Statistics MRC рынок материаловедческого софта в 2024 году он оценивался в \$158,1 млн, а к 2030 году прогнозировался на уровне \$416,2 млн при CAGR около 17,5%. В госпрограмме «Развитие промышленности» заявлен **дефицит инструментов in silico оценки свойств новых веществ.**

Задача входит в **перечень критических технологий РФ** (п. 8 «Новые материалы»).

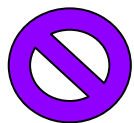


Импортозамещение – создание отечественных технологий

Польза отрасли:

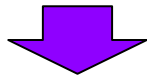
- Создание инжинирингового центра материаловедческого ПО (привлечение заказов от заводов региона)
- Ускорение импортозамещения в авиа-, металлургии и фармацевтике.
- Сокращение издержек дорогостоящих натуральных экспериментов до 60%.

ПРОБЛЕМА

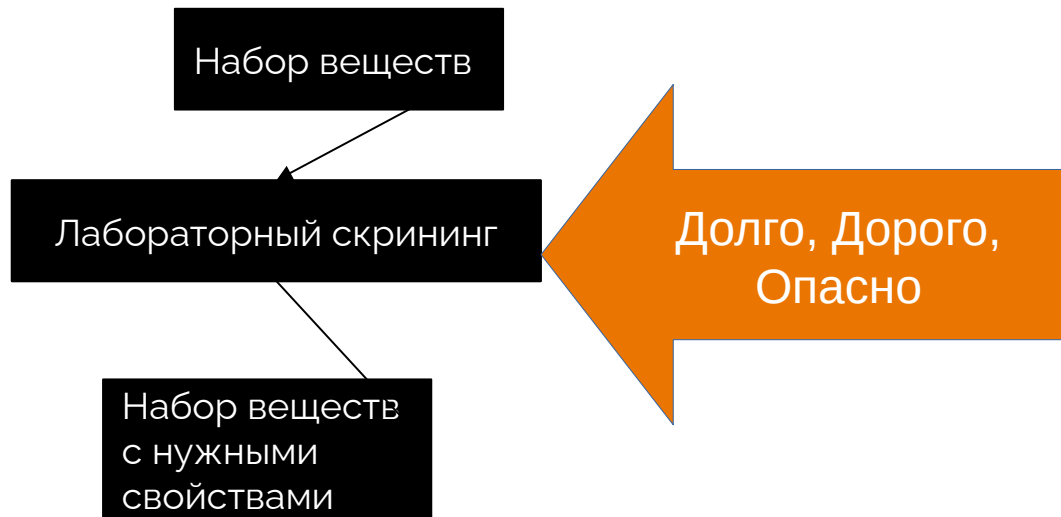


Традиционный подход к разработке химических соединений опирается на последовательный перебор, эмпирические правила и экспериментальные итерации, что делает процесс поиска веществ с заданными свойствами нелинейно затратным по времени, ресурсам и компетенциям.

Как решается сейчас:



Нет промышленного, интуитивного и быстрого инструмента, который строит прогноз «структура <-> свойство»



ЦЕЛЕВАЯ АУДИТОРИЯ

Наш клиент: промышленные R&D-центры и производственные лаборатории

Сегменты рынка:

- ★ **НИИ и академические институты**
- ★ **Крупная промышленность:** металлургические комбинаты (черная/цветная металлургия), химические холдинги, производители полимеров и композитов, катализаторные производства;
- ★ **Инжиниринговые центры, материаловедческие стартапы, производители спецхимии;**

Глубинные интервью (институты, нефгаз, фарма)
Подтвердили проблему

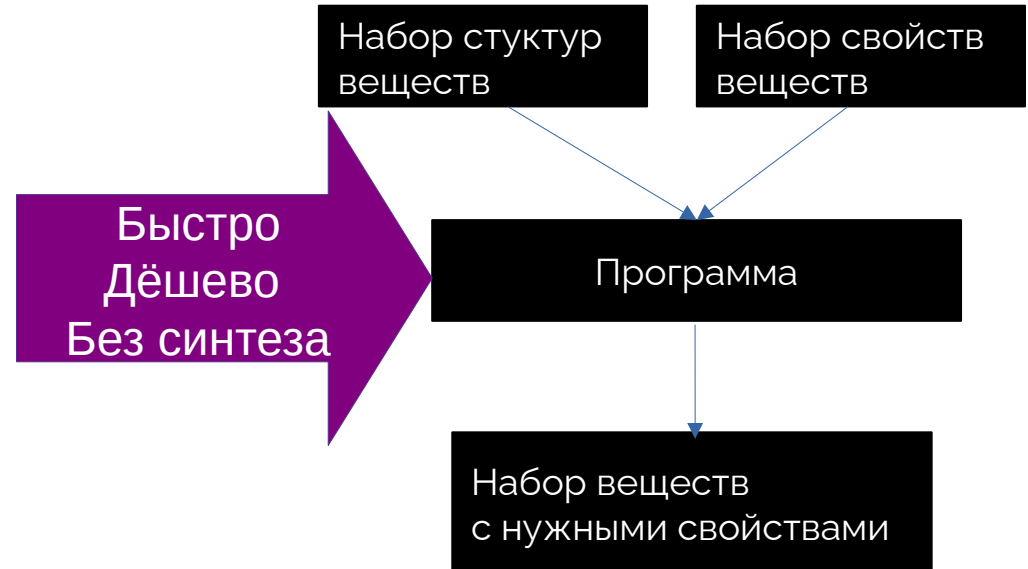
РЕШЕНИЕ

Заменяем месяцы лабораторной работы на
минуты расчетов

**Программный инструмент,
который по свойствам определяет
структуру.**

Решение: объединяющие
генеративные методы,
калиброванное предсказание
свойств и структуры, проверку
синтезируемости и
многокритериальную оптимизацию
в едином, воспроизводимом
пайплайне.

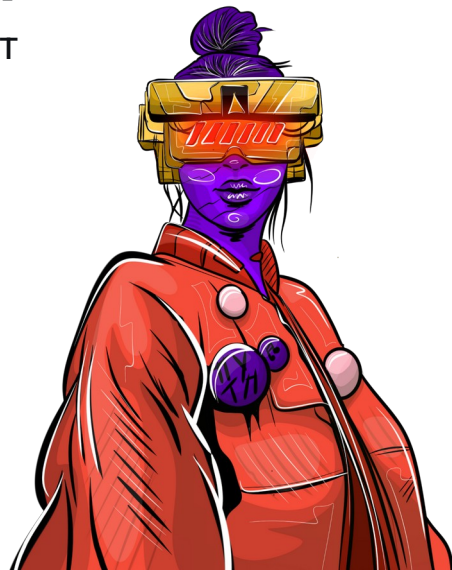
Решение на стадии прототипа



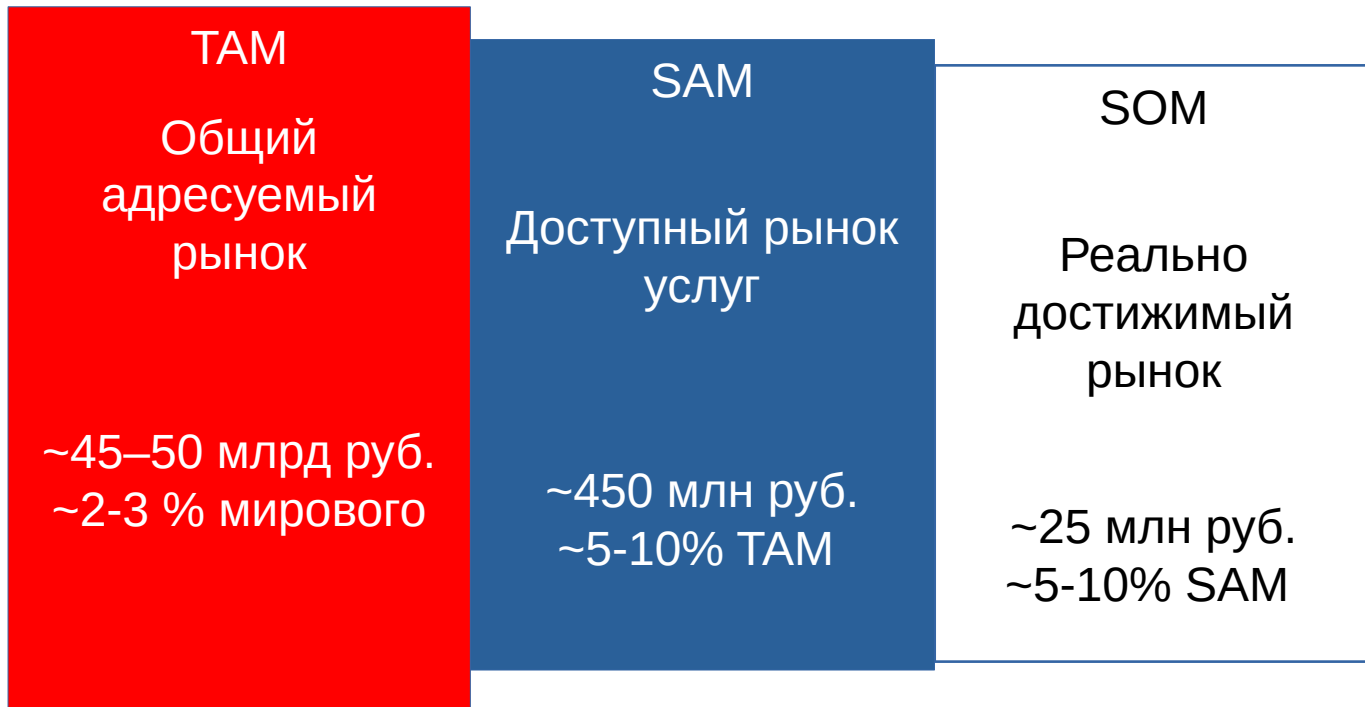
ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЕ ЯДРО ПРОЕКТА

Используются модели, обученные на массивах экспериментальных данных о связи «структура вещества → свойства».

Наше решение автоматически извлекает значимые признаки из 3D-структуры молекулы или кристаллической решётки, что обеспечивает высокую точность прогноза даже для новых классов веществ.



ОПИСАНИЕ РЫНКА (в рублях)



Фактор	Характер влияния	Оценка воздействия
Импортозамещение ПО	Рост спроса на отечественные аналоги ушедших платформ (Schrödinger, BIOVIA)	↑ Высокий положительный
Господдержка ИИ и НТИ	Увеличение бюджетов через гранты, субсидии, госзаказы	↑ Высокий положительный
Сокращение циклов R&D	Экономическая мотивация внедрения in silico-инструментов (экономия до 60% бюджета)	↑ Средний-высокий положительный
Дефицит кадров	Нехватка специалистов на стыке хемоинформатики, ИИ и domain-экспертизы	↓ Ограничивающий фактор
Консерватизм заказчиков	Предпочтение традиционных методов «проб и ошибок»	↓ Умеренный негативный
Развитие отечественной ИТ-инфраструктуры	Возможность локального развёртывания, работа с гостайной	↑ Средний положительный
Цикличность рынка	Зависимость от сезона(грантов)	≡ Нейтральный

БИЗНЕС МОДЕЛЬ

Сегмент	Периоды активности	Особенности
B2B (корпорации)	<ul style="list-style-type: none"> • Октябрь–декабрь: формирование бюджетов на следующий год • Март–май: запуск пилотных проектов 	Длинные циклы согласования (3–9 мес.), необходимость демо и ТЗ
B2G (Госзакупки)	<ul style="list-style-type: none"> • Январь–июнь: публикация тендеров • Июль–декабрь: исполнение контрактов 	Жёсткие требования к реестру отечественного ПО, квалификация поставщика
B2D (Академический сегмент)	<ul style="list-style-type: none"> • Весна: конкурсы Минобрнауки, Фонда содействия инновациям • Осень: защита отчётности, планирование новых грантов 	Бюджеты привязаны к грантовым циклам, важна публикационная активность
B2P (Стартапы и инжиниринговые центры)	Равномерно в течение года, с пиками после отраслевых конференций	Гибкие решения, быстрый старт пилотов, чувствительность к цене

КОНКУРЕНТЫ И АНАЛОГИ

Характеристики продукта	РОЗ «Структура — Свойство»	Конкурент №1 Schrödinger, США 🇺🇸	Конкурент №2 BIOVIA / Dassault Systèmes, Франция 🇫🇷
Решение обратной задачи «свойство → структура»	Полная поддержка, генеративные модели	Есть, но ограниченный функционал в базовых лицензиях	Частично, требует дополнительных модулей
Генеративные модели для дизайна молекул	Собственные модели, калибровка на экспериментальных данных	Есть (ML-based de novo design)	Есть (в составе 3DEXPERIENCE)
Модель ценообразования	Подписка + модули + custom-проекты (гибкая)	Высокая стоимость лицензий, недоступна в РФ	Высокая стоимость лицензий + модульная наценка, недоступна в РФ



ПРОГРАММНЫЕ ИНСТРУМЕНТЫ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ СТРУКТУРА-СВОЙСТВО В ДИЗАЙНЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Резюме

Максимов Леонид Сергеевич,
leomaxcer@ya.ru, УУНиТ

20.35 **20.35**
УНИВЕРСИТЕТ НАЦИОНАЛЬНАЯ
ТЕХНОЛОГИЧЕСКАЯ
ИНИЦИАТИВА

