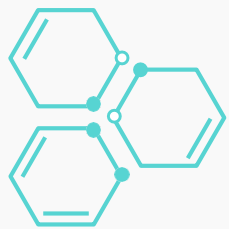
A background image showing a molecular structure with spheres and connecting lines, rendered in a light blue/cyan color scheme. The spheres vary in size and are connected by thin rods, creating a complex network of atoms and bonds.

ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ В ХИМИИ: на пути к цифровой фармакологии

Федоров Максим Валериевич

кфмн, дхн, чл-корр РАН

Научный руководитель,
со-основатель,
компания «Синтелли»



SYNTELLY
BETTER THAN CHEMISTS CAN DO

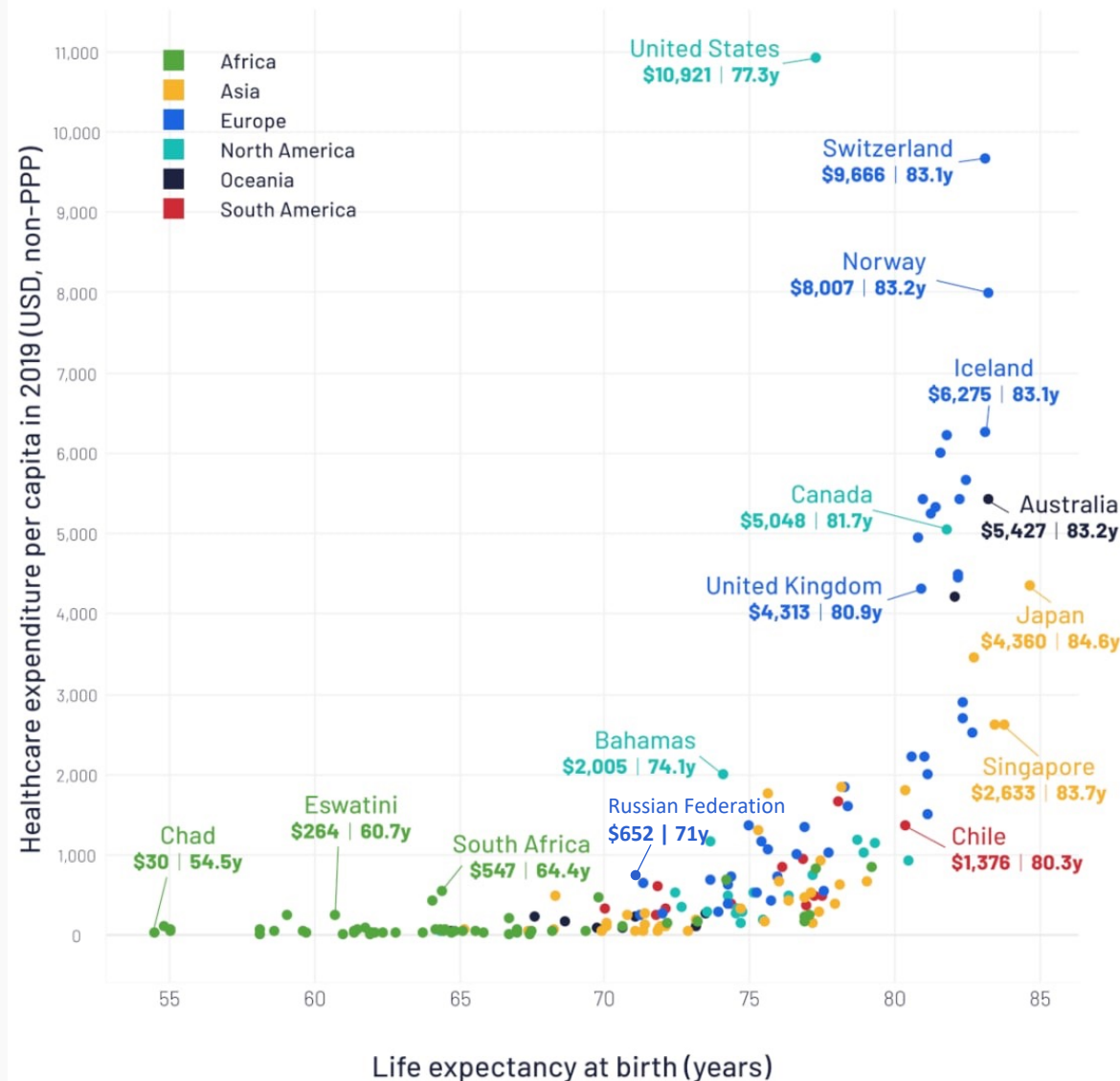
Российская платформа искусственного интеллекта для решения задач органической и медицинской химии

ЗДРАВООХРАНЕНИЕ

Статистика расходов на здравоохранение различных стран в сравнении с продолжительностью жизни. К слову, они не всегда коррелируют — США на здравоохранение тратит больше всех в мире, но люди там живут до 77 лет.

Страна	Расходы в здравоохранении на душу населения (USD, 2019)	Ожидаемая продолжительность жизни (годы, 2020)
Россия	\$653	71

Healthcare expenditure per capita vs life expectancy



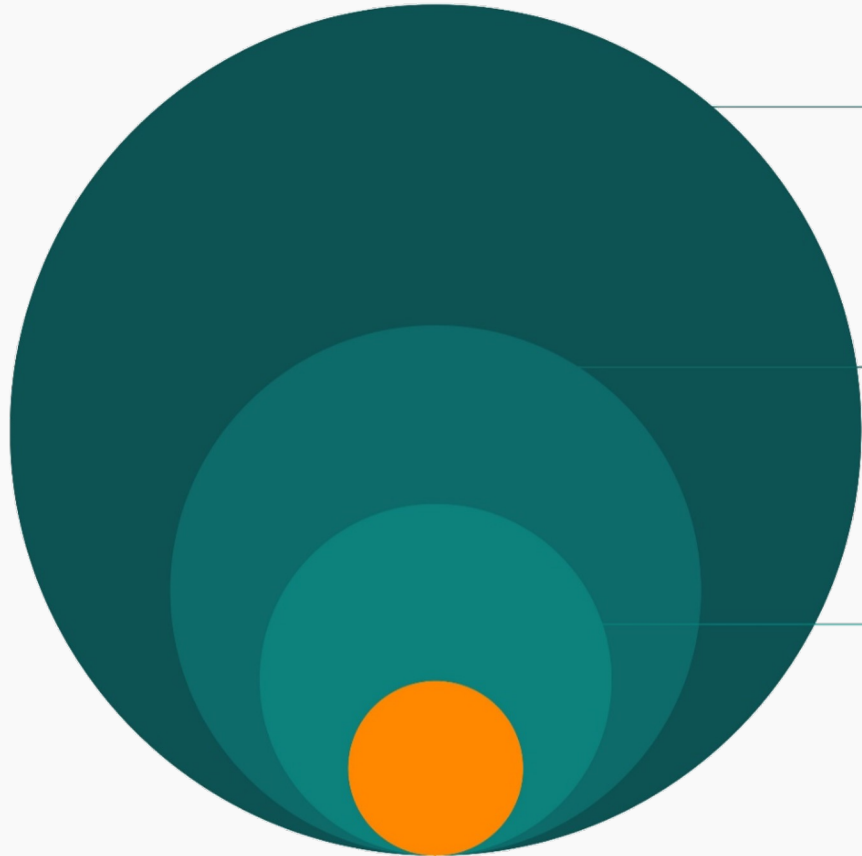
ТЕЛЕМЕДИЦИНА И АДАПТОГЕНЫ



Источник: ГАУ РК ЦИТ

* Оценка размерности шагов варьируется от субъектов и их уточнение требует отдельного исследования

ОБЪЕМ МИРОВОГО ФАРМАЦЕВТИЧЕСКОГО РЫНКА



● **948** млрд €
5 % темп роста

● **270** млрд €
Азия, Африка,
Латинская Америка

● **1,35** млрд €
0,5 % биофармацевтика

● **135** млн €
1 % мирового рынка
биофармацевтики

Развитие мирового фармацевтического рынка

	2014	2015	2016	2017	2018
Total market (billion euros)*	836.03	844.50	878.38	902.22	948.69
Total market (USD bn)	1,055.90	1,066.60	1,109.40	1,139.50	1,198.20
Change compared to previous year in %		1.01	4.01	2.71	6.15

* The figures in euros result from the conversion of market data with underlying values to US dollar (exchange rate: US dollar to euro = 1.263 : 1).

Own presentation BPI based on IQVIA™ – World Review Analyst 2019.

1

Развитие выручки фармацевтических сегментов за счет дополнительных

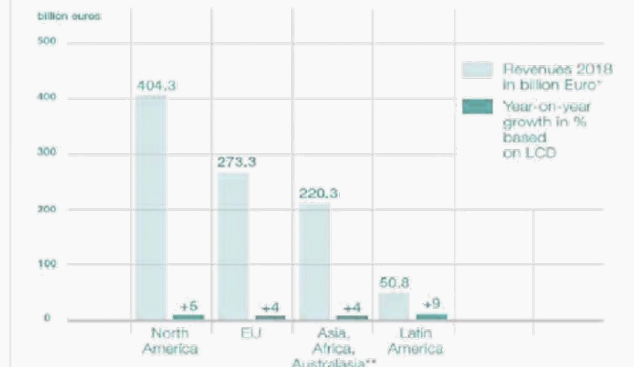
	2015	2016	2017	2018	Change vs. previous year in %	2018	Change vs. previous year in %
Total	30,474.5	31,390.4	32,394.0	33,742.9	4.16	1,571.3	- 0.66
Pharma. for human use	21,651.0	21,929.8	22,433.6	23,142.0	3.16	712.6	0.56
Biopharmaceuticals	6,068.6	6,745.6	7,252.8	7,906.1	9.01	649.7	- 2.11
Others*	953.4	978.3	1,007.9	1,007.1	2.90	150.8	- 1.65
Phytopharmaceuticals	781.8	741.0	750.7	752.7	0.27	44.0	- 3.62
Diagnostics	639.6	635.5	594.4	557.7	- 6.16	13.3	3.98
Homoeopathic pharma.	297.6	298.7	292.1	283.3	- 3.01	0.4	0.00
Anthroposophic pharma.	62.6	63.4	62.5	64.1	2.66		

* Personal and dental hygiene products, injection accessories, disinfectants, peripheral products, drugs, medical devices, chemicals, veterinary medicines, food supplements, dietetics.

Own presentation of the BPI based on data from Insight Health 2019.

2

Мировой фармацевтический рынок по регионам 2018



* The figures in euros result from the translation of market data with underlying values into US dollars (exchange rate: US dollar into euro = 1.263 : 1).

** The region "Asia, Africa, Australasia" contains the values for the submarket "Japan".

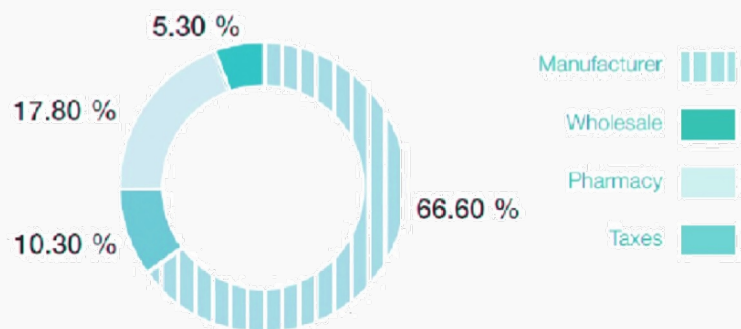
Own presentation BPI based on IQVIA™ – World Review Analyst 2019.

3

ЗДОРОВЬЕСБЕРЕЖЕНИЕ И АКТИВНОЕ ДОЛГОЛЕТИЕ КАК ЧАСТЬ ПРОТОКОЛОВ ПРОФИЛАКТИЧЕСКОЙ МЕДИЦИНЫ

Размен западных препаратов в доле структуры затрат на отечественный программно-аппаратный комплекс

Фармацевтическая промышленность в международной среде



The values represent an unweighted average for Europe.

Own presentation of the BPI based on EFPIA data 2019.

- Плавное замещение реактивных протоколов лечения на западных препаратах на проактивную диагностику и расширение спектра природоподобных препоратов
- Развитие алгоритмов искусственного интеллекта для проактивной телемедицины
- Создание репозитария лучших практик в природоподобных технологиях
- Создание репозитария архивных данных для проведения исследований с применением AI



Институт
Народнохозяйственного
Прогнозирования РАН

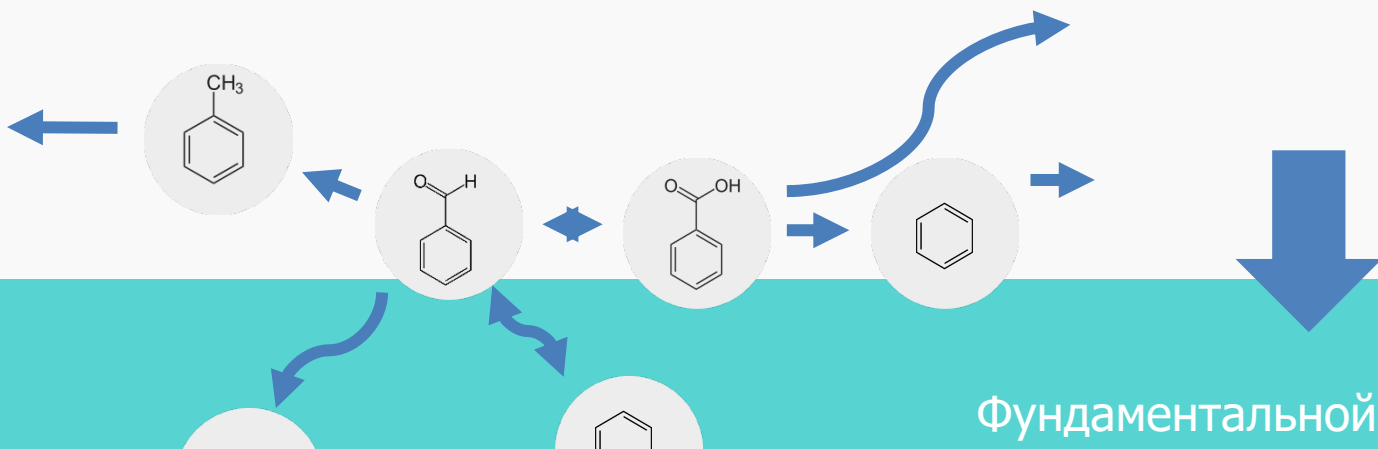
$$\text{ВРП} = 1 * (1 + (1.3 * 0.25) / 100) = 1.00325$$

Общая продолжительность жизни (ОПЖ) на один год привет к росту численности населения в трудоспособном возрасте на 1.3-1.4%. 0.25 прирост ОПЖ в годах

ХИМИЧЕСКОЕ ПРОСТРАНСТВО

Масштабы химического пространства **огромны**.

Необходимы новые инструменты на базе ИИ в качестве инструментов для исследований, особенно в области открытия лекарств.



10^{60}

Расчетное количество синтетически доступных потенциальных кандидатов



Для разработки способов синтеза новых соединений и оценки их свойств требуется высокая квалификация.

Необходимость в долгих экспериментальных поисках методов синтеза исчезает при разработке смоделированного компьютером проекта.



Разработка лекарств



Композиты



Пластмассы



Топливо

- **10^3** новых молекул в день

- **10^8** изученные соединения

- **10^{60}** синтетически доступные молекулы

Фундаментальной химии и материаловедению нужны новые базы данных, а также инструменты для их анализа

ГДЕ НАЙТИ НОВЫЕ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫЕ ВЕЩЕСТВА?

Количество найденных принципиально новых структур лекарственных соединений с каждым годом уменьшается.



Высокая стоимость экспериментального подбора свойств химических соединений (до 1 000 000\$ за соединение) стимулирует к поиску **новых методов** для **автоматизации и компьютерного прогнозирования** в этой области.

ДАННЫЕ - НОВАЯ НЕФТЬ В ЭПОХУ ИИ

Традиционный поиск в журналах

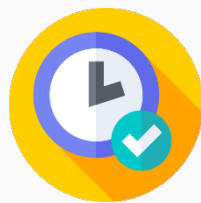


Рабочие дни / часы

Ограничивает российских химиков в использовании вычислительных методов и ИИ в химии.

Возвращение химии в России в докомпьютерную эпоху.

Поиск по базе данных



- Доступно за несколько секунд
- Работает как прочие онлайн-инструменты
- Требуются большие данные

Как Яндекс Такси для таксиста.

Использование ИИ + высокопроизводительных вычислений

Yandex



ОСНОВНЫЕ ПРОБЛЕМЫ, ВЫЯВЛЯЕМЫЕ НА СТАДИИ КЛИНИКИ

1

Токсичность

2

Недостаточная эффективность
молекулы-кандидата

30%

новых кандидатов
в лекарственные препараты
не проходят 1 стадию
клинических испытаний
(небезопасны)

FDA утверждает*

ОТБОР МОЛЕКУЛ-КАНДИДАТОВ ПОХОЖ НА ОТБОР КОСМОНАВТОВ (ВОРОНКА КАНДИДАТОВ)

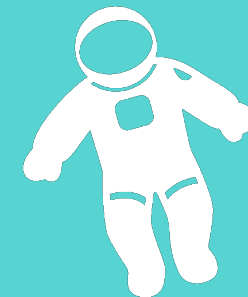
Огромный поток
кандидатов на входе



Отбор



Идеальный кандидат



ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫЙ ПОИСК

в химическом пространстве приведет к ускорению разработок и снижению риска неудач в области химии, фармакологии, нефтяного сектора, новых материалов.



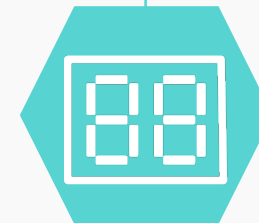
Лекарственные средства



Топливо и масла



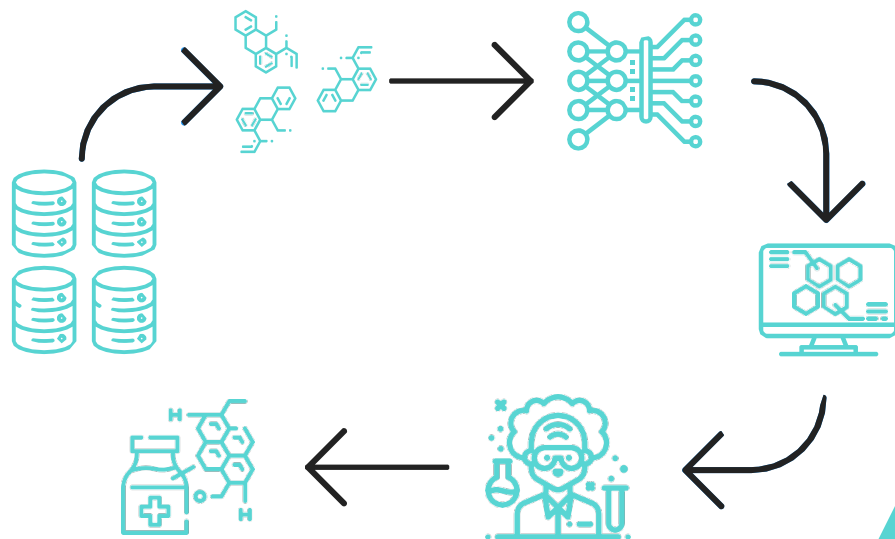
Пластмассы и композиты



Жидкие кристаллы
и OLED-технологии

РЕШЕНИЕ

Платформа искусственного интеллекта Syntelly, которая прогнозирует свойства химических соединений (токсичность, физхимия, биологические свойства) и самостоятельно оценивает молекулы-кандидаты



ПЛАТФОРМА ВКЛЮЧАЕТ В СЕБЯ:

- базу данных свойств для уже изученных соединений (96 миллионов записей)

- прогноztические модели на основе глубоких нейронных сетей

- модули визуализации химического пространства прогноз

- синтез соединений

ПРЕИМУЩЕСТВА



Используем глубокое **обучение**

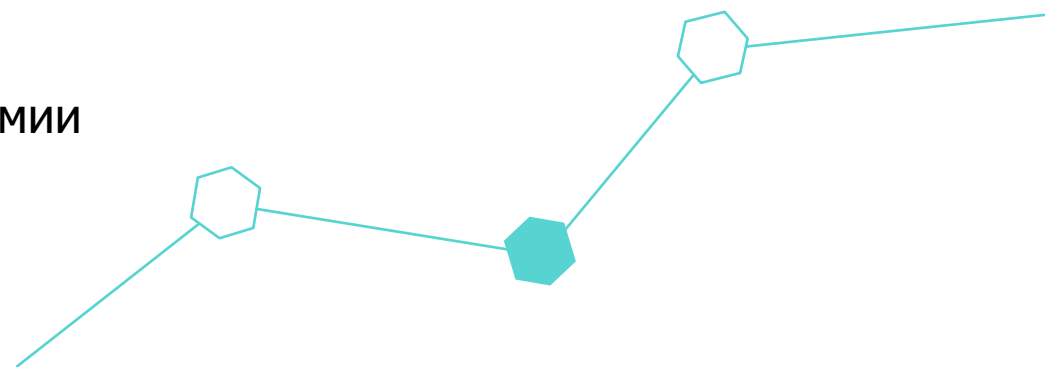


Полностью **облачная платформа** с возможностью как развертывания на инфраструктуре заказчика, так и на высокопроизводительных кластерах для решения масштабных вычислительных задач



Предоставляем удобный программный **интерфейс** для создания плагинов сторонними разработчиками

Конкуренты: «традиционные» платформы компьютерной химии (ACDLabs, Reaxys, SciFinder, ChemAxon, ChemDraw, MNova Mestrelab)



**ИИ
ГЕНЕРАТОР
МОЖЕТ БЫТЬ
ИСПОЛЬЗОВАН...**

для оптимизации
соединений-
лидеров

для обхода
патентных
ограничений (!)

для поиска
в заданной области
химпространства
лучших кандидатов

для изучения
структуры
химического
пространства

ЛИДЕРЫ ПРОЕКТА



МАКСИМ
ФЕДОРОВ

Сооснователь, научный руководитель. специалист в области применений ИИ и математического моделирования в химии (проект был запущен во время работы в Сколтехе, где Максим Федоров работал до октября 2021 на руководящих должностях в области ИИ и математического моделирования).



СЕРГЕЙ
СОСНИН

Сооснователь, СТО. Специализируется на проектах применения методов глубокого обучения для органической и медицинской химии. В качестве разработчика принимал участие в десятках проектов, связанных с машинным обучением (computer vision, predictive models, process mining). Автор и соавтор 15 высоко-импактных публикаций по этой тематике.



СТАНИСЛАВ
АШМАНОВ

Директор по развитию, сооснователь проекта, разработчик умного устройства «Лекси». Специалист по глубоким нейронным сетям и машинному обучению. Разработчик систем распознавания и синтеза изображений, голоса, экспертных и мобильных операционных систем. Основатель компании «Нейросети Ашманова», занимающейся разработкой алгоритмов машинного обучения и анализа данных. С 2018 года - генеральный директор компании «Наносемантика». Руководитель Комитета по ИИ Ассоциации разработчиков программных продуктов.



ПОПРОБУЙТЕ ПЛАТФОРМУ ИИ SYNTELLY

[ПОПРОБОВАТЬ](#)



**Спасибо за
внимание!**

Федоров Максим Валериевич