

КемПрофет

цифровой сервис на основе хемоинформатики и
искусственного интеллекта для ускорения разработки
реагентов для добычи нефти и газа





Нефть и Химия

0,5 млн. тонн

годовая потребность химии в нефтедобыче в РФ

Полный цикл добычи **1 тонны нефти** требует применения до **1 кг реагентов**

8%

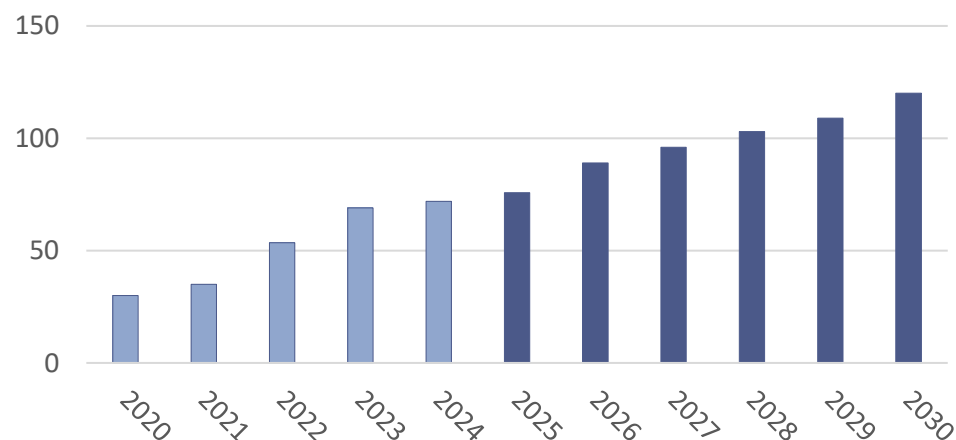
совокупный среднегодовой темп **роста рынка**

- Увеличение объемов применения химии с учетом ухудшения структуры запасов
- Импортозамещение химии (доля импорта по некоторым направлениям > 80%)
- Разработка новой эффективной химии под специфические условия РФ

2



Мировой объем рынка реагентов для нефтедобычи, \$B





Нефть и Химия

Перспективы 2025-2036

Применение химических методов увеличения нефтеотдачи (ХМУН)

Естественное старение фонда, увеличение КИН до 40-45%

Увеличение доли трудноизвлекаемой нефти (ТРИЗ)

К 2030 году до 45% мировой добычи будет приходиться на ТРИЗ

Развитие шельфовой и глубоководной добычи

Увеличение инвестиций в шельфовые проекты и Арктики

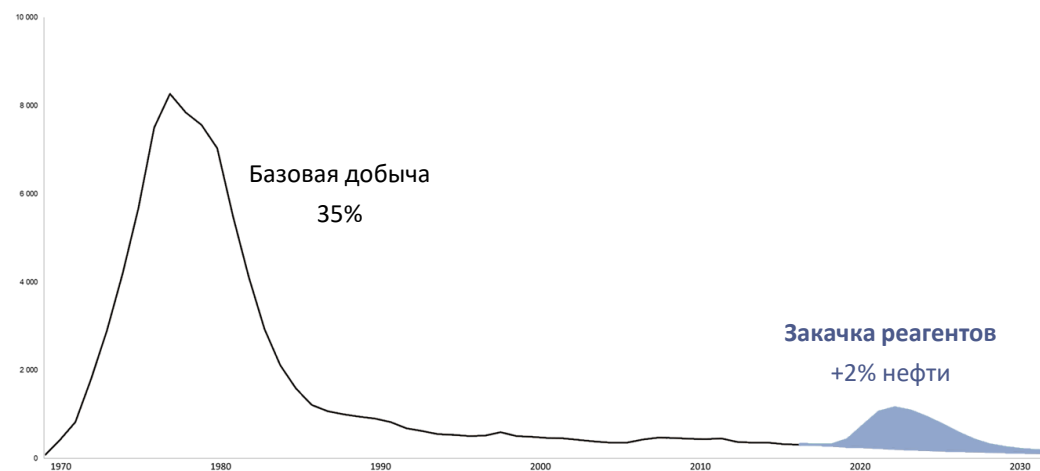
Экологические требования

Запреты на токсичные реагенты, рост рынка «зеленой химии»

Технологические инновации

Умные реагенты (наночастицы, термочувствительные полимеры), цифровизация (хемоинформатика, оптимизация дозировок реагентов)

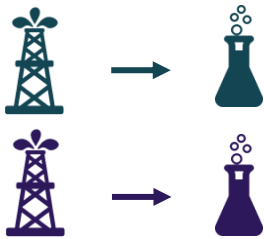
Пример применения ХМУН на нефтяном месторождении





ВЫЗОВЫ

- сокращение **времени** разработки
- **локализация** и импортозамещение
- «**персонализация**» под каждый объект



Уникальный объект –
уникальный реагент



Ограничения рынка
прекурсоров и химии



Долгий цикл от разработки
до применения



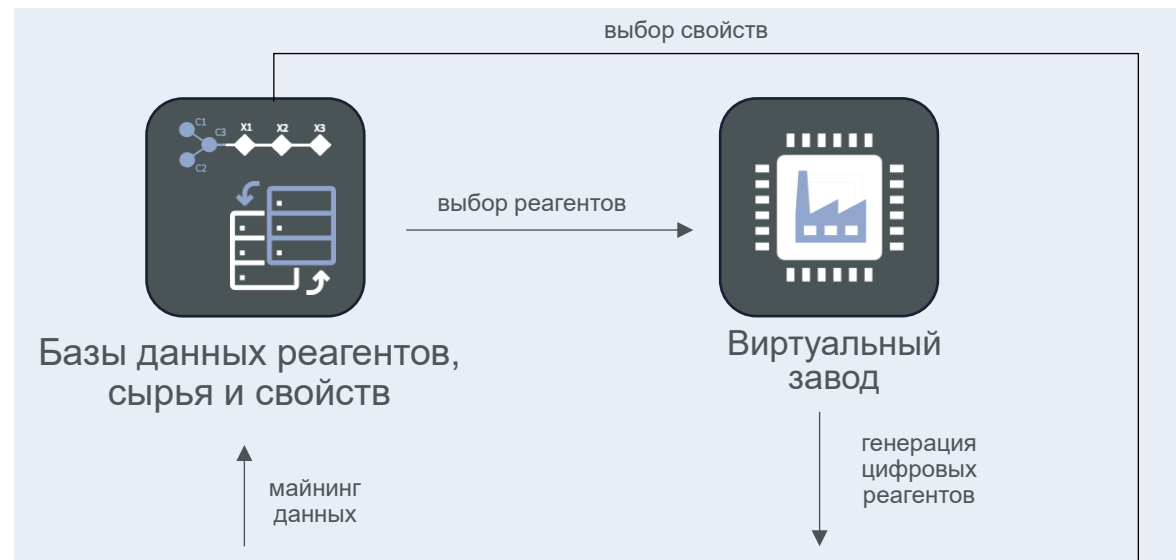
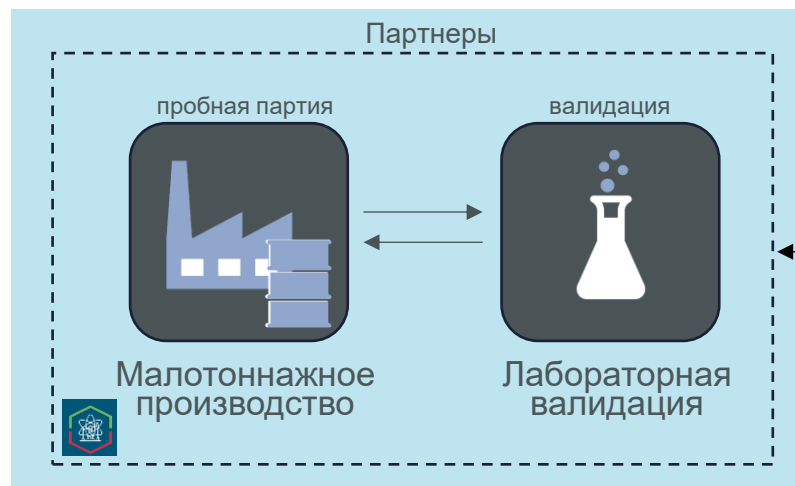


Цифровой дизайн
химии

Технология

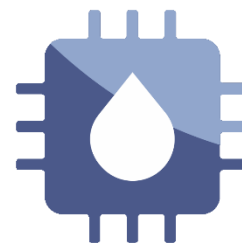
5

Физическая
реализация



Клиент

задача
результат

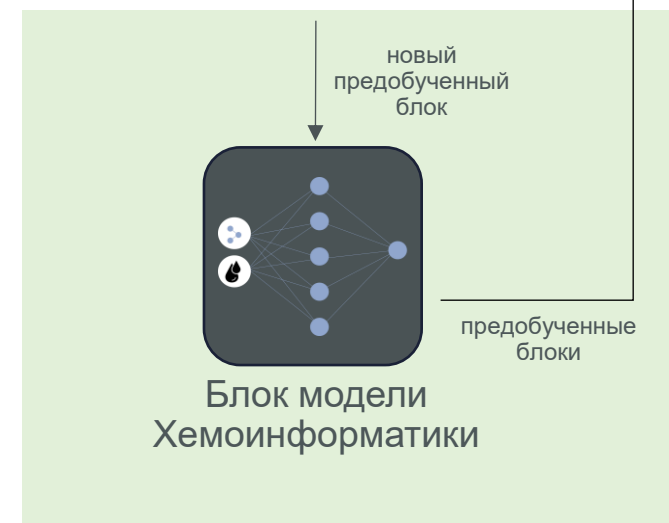


CHEMPROPNET

новые модели
предсказание



Персонализированное
ИИ-решение



Предсказание
эффективности

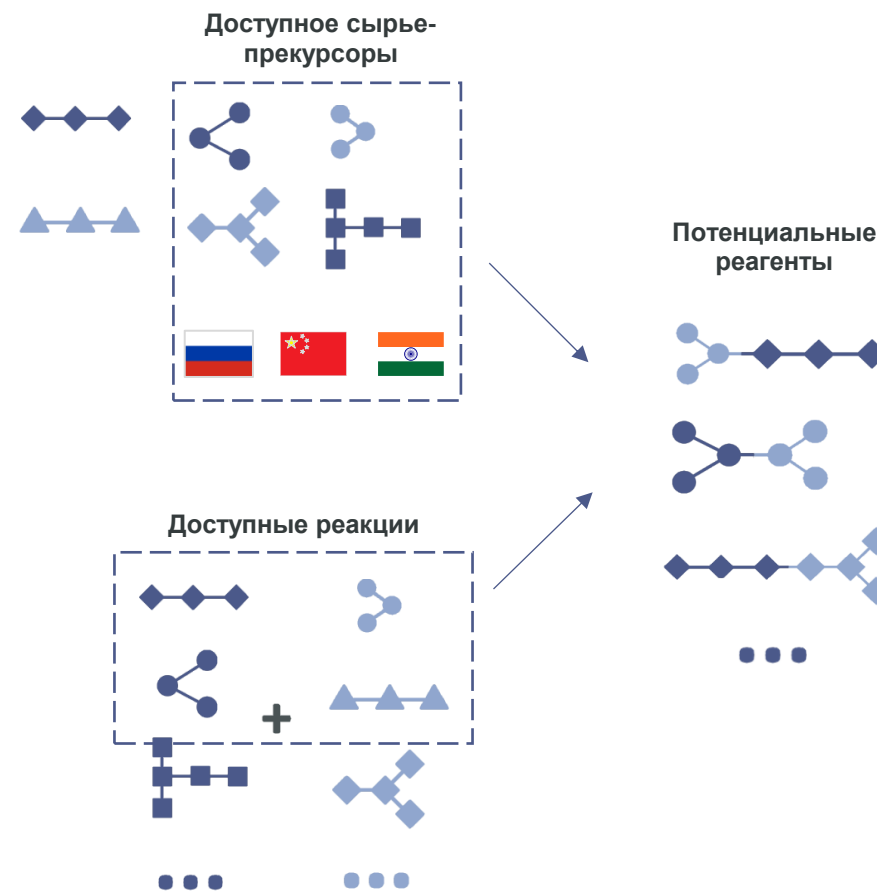


Новый подход. Виртуальный завод



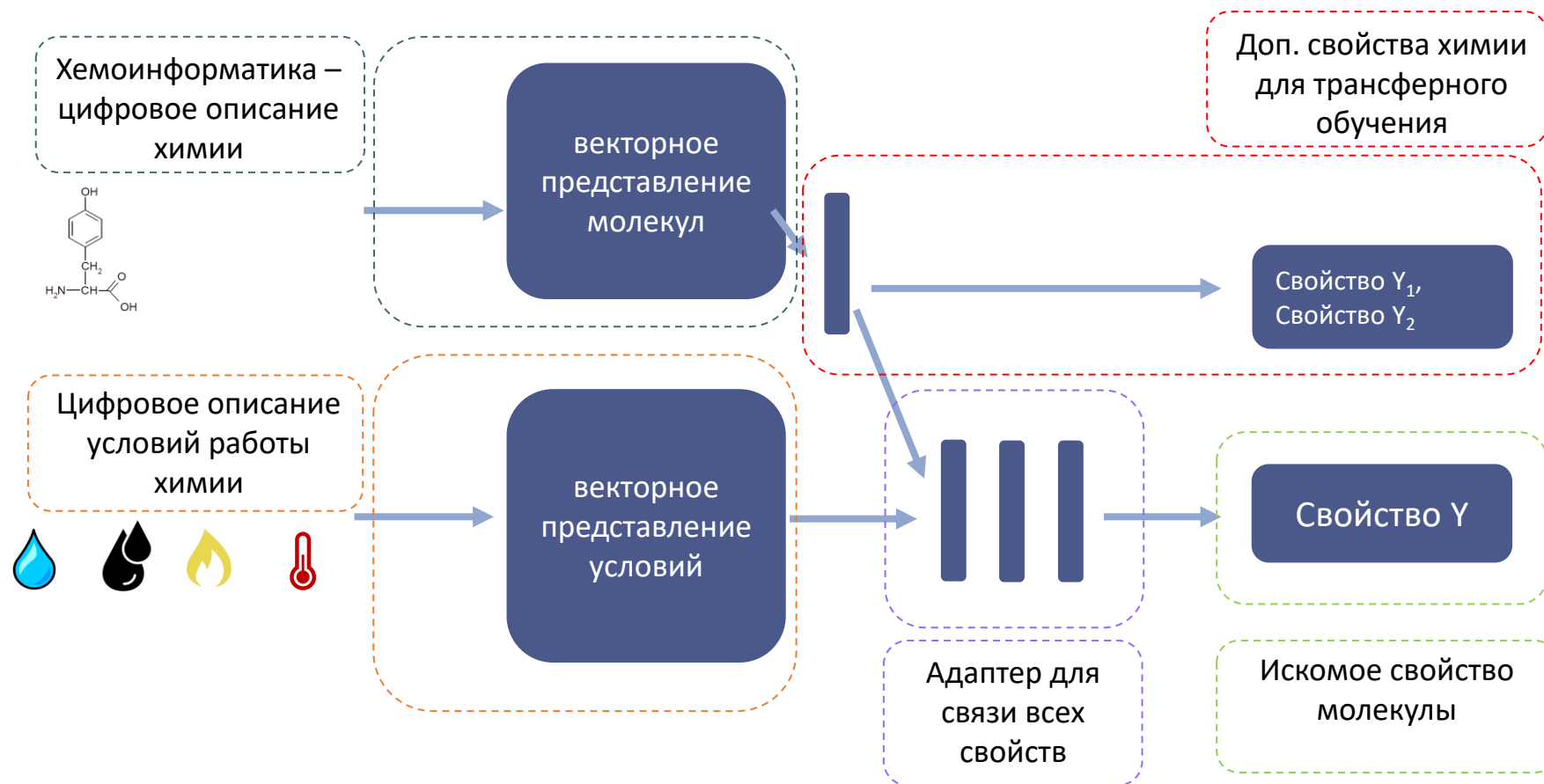
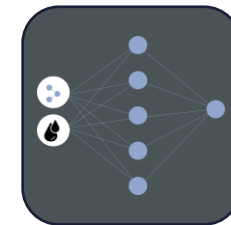
Алгоритм «Виртуальный завод» - **экономическая рентабельность** реагентов:

- локальное сырье-прекурсоры
- доступные одностадийные реакции
- доступные для производства и экономически рентабельные реагенты





Новый подход. Модели ИИ-хемоинформатики





Новый подход. Алгоритм работы

Виртуальный
завод



Модели
ИИ-хемоинформатики



Лабораторная
валидация



+10 000

всех возможных реагентов из
доступных/локальных
прекурсоров

Топ-100

реагентов по
предсказанию свойств
под ГФХ

Топ-5

Реагентов для синтеза и
валидации



Подходы к подбору реагентов

Рыночный подход

Производитель химии

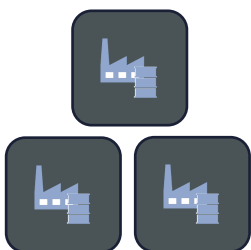


5-10 реагентов

- **Зависимость** от уникального поставщика
- **Скрытая** рецептура
- **Низкий** шанс (~30%) подбора под уникальные условия
- **Прямые поставки** готовых реагентов
- **Быстрый подбор** реагентов (6 мес.)

Лабораторный подход

Производители химии



20-30 реагентов

Лабораторные исследования



2-3 реагента

- **Возможность выбирать** поставщика
- **Открытая** рецептура
- **Средний** шанс (~40%) подбора под уникальные условия
- **Долгий подбор** реагентов (14 мес.)
- **Необходимость масштабирования** «от пробирки»

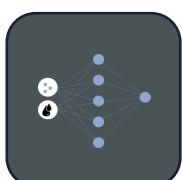
Подход с хемоинформатикой и ИИ

Виртуальный завод



+10000
реагентов

Модель хемоинформатики



100
реагентов

Лабораторные исследования



1-3
реагента

- **Возможность выбирать** поставщика
- **Открытая** рецептура
- **Высокий** шанс (~90%) подбора под уникальные условия
- **Быстрый подбор** реагентов (6 мес.)
- **Необходимость масштабирования** «от пробирки»

Накопление



Пилотный проект. Разработка поверхностно-активных веществ (ПАВ)



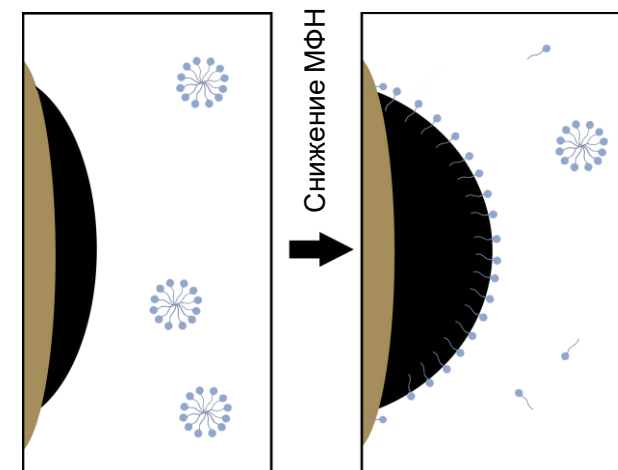
Цель – разработка ПАВ с низким межфазным натяжением (МФН) из российского сырья под условия месторождения

Пластовые условия месторождения X

Свойство	Значение
Пластовая температура, °C	71
Пластовое давление, бар	196
Плотность нефти при $T_{пл}$, г/см ³	0,855
Динамическая вязкость нефти при $T_{пл}$, мПа·с	4,23
Общая минерализация воды, г/л	16,7
Содержание ионов Na^+ в воде, г/л	9,4
Содержание ионов Ca^{2+} в воде, г/л	1,4
...	...



Молекула ПАВ

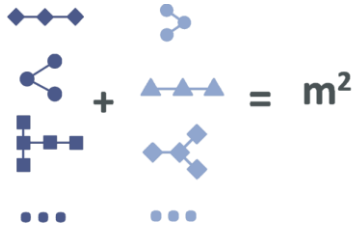


Принцип действия ПАВ в пласте

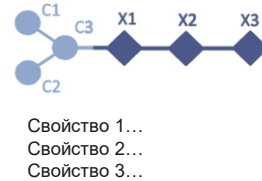


Пилотный проект. Пайплайн проекта

Виртуальный
завод



Модели
ИИ-хемоинформатики



Лабораторная
валидация



5 731 молекул

Генерация структур ПАВ из
доступных/локальных
прекурсоров

Топ-100

ПАВ с низким МФН под
пластовые условия

Топ-4

ПАВ для синтеза и
валидации



Пилотный проект. Результаты

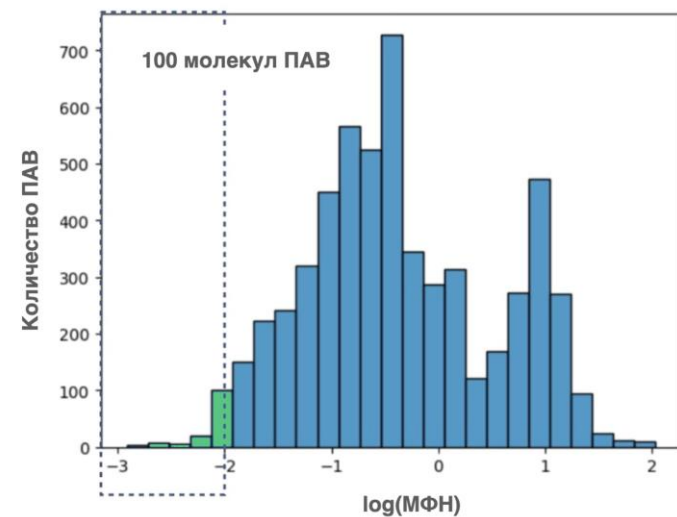
Виртуальный завод

Количество прекурсоров (сырья) РФ и КНР:
319 молекул

Одностадийные и симметричные реакции:
36 реакций

Результат
5 731 ПАВ

Модели хемоинформатики



Предсказание свойств и выбор топ-100
ПАВ с **наименьшим МФН**



Пилотный проект. Результаты

Предсказанный МФН, мН/м	$1,4 \cdot 10^{-2}$	$1,3 \cdot 10^{-2}$	$6 \cdot 10^{-1}$	$0,9 \cdot 10^{-2}$
Экспериментальный МФН, мН/м	$2,5 \cdot 10^{-2}$	$8,4 \cdot 10^{-2}$	$8 \cdot 10^{-1}$	$5 \cdot 10^{-2}$
Абсолютная ошибка, мН/м	0,011	0,071	0,195	0,041

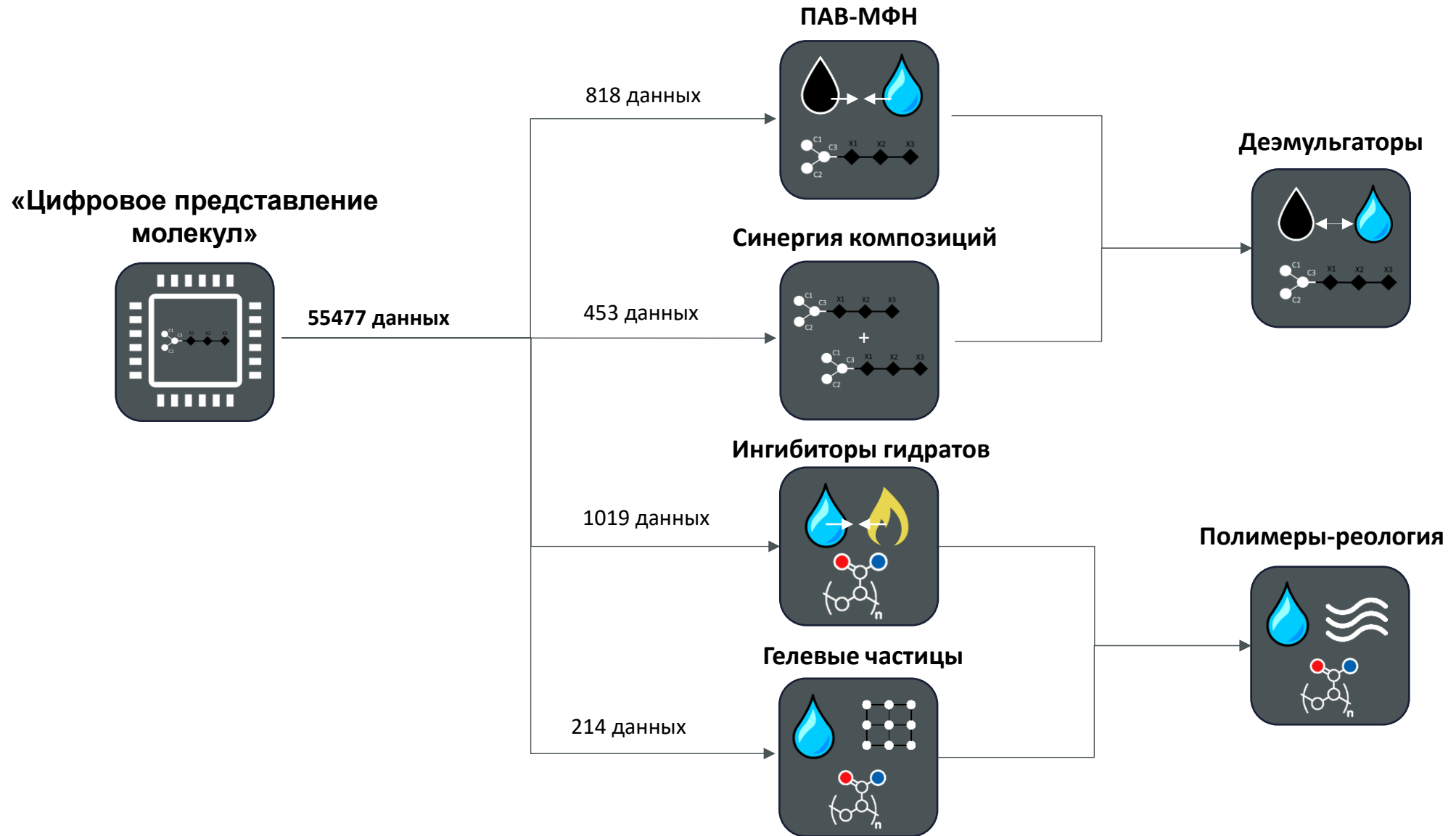
Предсказанные структуры ПАВ были **синтезированы** и **валидированы** в лаборатории.

Цель проекта в разработке ПАВ для снижения МФН с **10 до 0,01** мН/м была **достигнута**.
Ошибка в пределах одного порядка удовлетворительна и относится к ошибке измерения.

*молекула не была целевой, выбор был обоснован интересом компании в проверке модели по предсказанию различных типов ПАВ



Трансферное обучение моделей



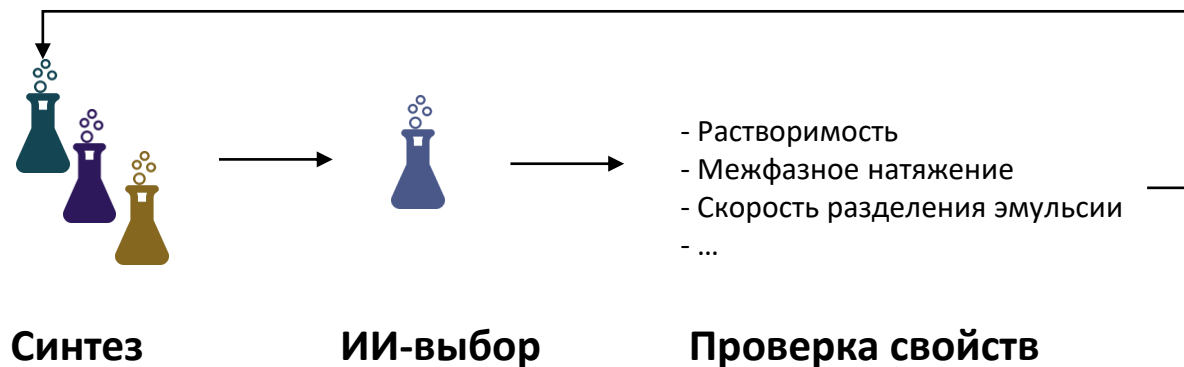


Итеративная разработка модели (Active Learning)

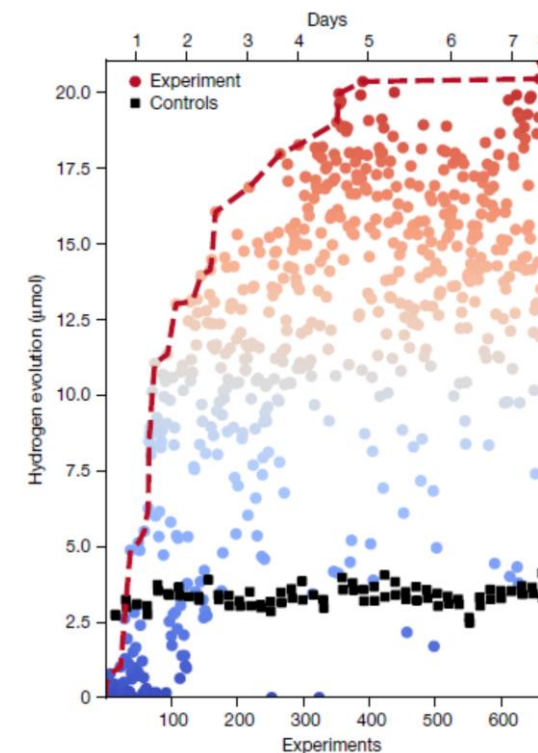
На практике **данных** о реагентах и их свойствах **недостаточно**. Разработка подобных реагентов с **ИИ-навигацией** происходит быстрее и эффективнее.

С навигацией моделей ИИ итерационный поиск реагентов происходит быстрее и позволяет рассмотреть большее количество вариантов.

Предсказание нового
состава композиции



ПРИМЕР



Данные активного роботизированного
поиска фотокаталитической смеси
(688 экспериментов из 98 млн возможных)

Burger B. et al. A mobile robotic chemist //Nature



Преимущества цифрового подхода



Сокращение времени

2 года

6 месяцев



Разнообразие

20-30 реагентов с рынка

+100000 из локального сырья



Выбор

Экспертное мнение

ИИ-навигация

Снижение рисков

Один поставщик

Диверсификация по сырью



Прибыль

Неэффективная добыча

Получение упущенной прибыли



Аккумуляция знаний

Данные в периметре компании

Опыт компаний за периметром

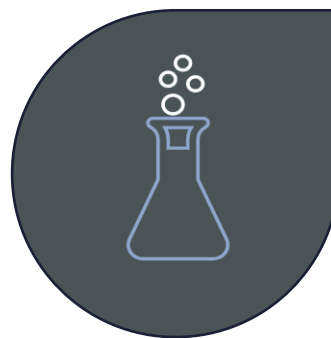




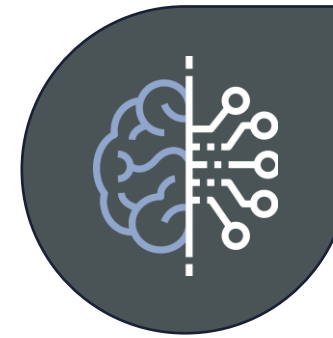
Ценности на уровне государства



Максимизация ценности от энергетического сектора



Локализация материалов и услуг



Развитие цифровой экономики

17



Поручение президента РФ от 18 апреля 2025 года о мерах по обеспечению масштабирования разработки продукции и технологий в сферах микротоннажной и малотоннажной химии в целях использования современных **цифровых технологий**, реализации алгоритмов **искусственного интеллекта** и практического тестирования таких продукции и технологий, в том числе в рамках национального проекта по обеспечению технологического лидерства **«Новые материалы и химия»»**



Команда



Тимур Гимадиев
к.х.н., генеральный
директор, со-основатель



Михаил Варфоломеев
к.х.н., директор по
развитию, со-основатель



Эмиль Сайфуллин
к.т.н., технический
директор, со-основатель

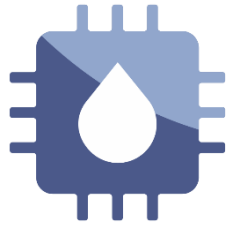


Айгуль Хакимова
старший хемоинформатик,
менеджер проектов



*команда разработчиков и
химиков +5

- Эксперты в области химии, нефтедобыче, хемоинформатики и ИИ
- +500 опубликованных работ и статей в области химии и нефтяной промышленности
- +90 проектов в области химического проектирования для нефтяной и газовой промышленности



CHEMPROPHET

Цифровой подход к разработке реагентов для
нефтедобывающей промышленности

Эмиль Сайфуллин
технический директор

emil_saifullin@chemprophet.com

Тимур Гимадиев
генеральный директор

timur_gimadiev@chemprophet.com



Описание технологии и видео
chemprophet.tech