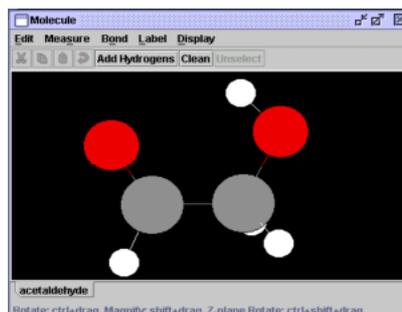
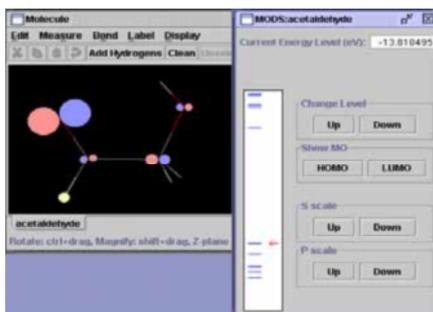
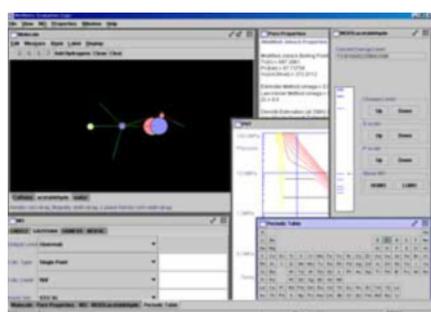
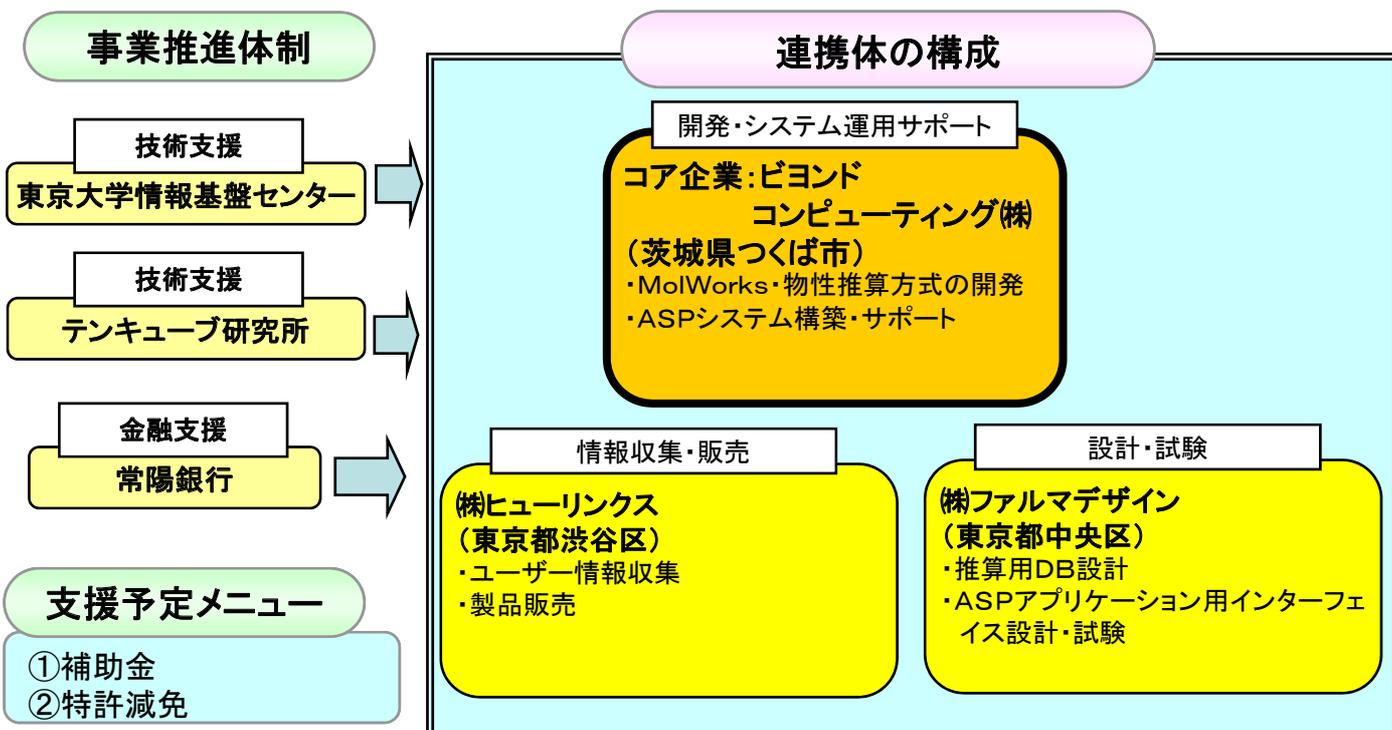


地域	茨城県つくば市	認定日	平成21年2月23日	3-20-136
事業分類	情報通信	テーマ分類	IT	

事業名：新規物質の発掘・開発支援システムの事業化

○事業概要(新規性、市場性等)

- ・身の回りには、様々なモノ(食品、薬品、化粧品など)があふれ、各用途に合わせた研究開発が進められている。新製品開発には、製品材料となる分子の物性情報が必須となるが、従来は、研究者の経験やノウハウをベースにして候補物質を選定し、コンピューターを利用した量子化学計算による物性予測を行い、さらに分子を合成して物性測定を行うという開発プロセスを、試行錯誤的に繰り返すため、多大な時間とコストがかかっていた。
- ・本事業は、人工知能と呼ばれるニューラルネットワーク法により構築した物性推算式を使ったデータマイニングにより、候補物質の探索を自動化すると共に、膨大な時間を必要とする量子化学計算による物性予測をASPにて行なうことにより従来と比較し、計算時間を100分の1以下に、コストを10分の1程度に削減できる。
- ・化学工業および創薬業界関連の研究施設および研究者を対象として販売を行なう。



統合型分子設計支援システムMolWorksの画面例