

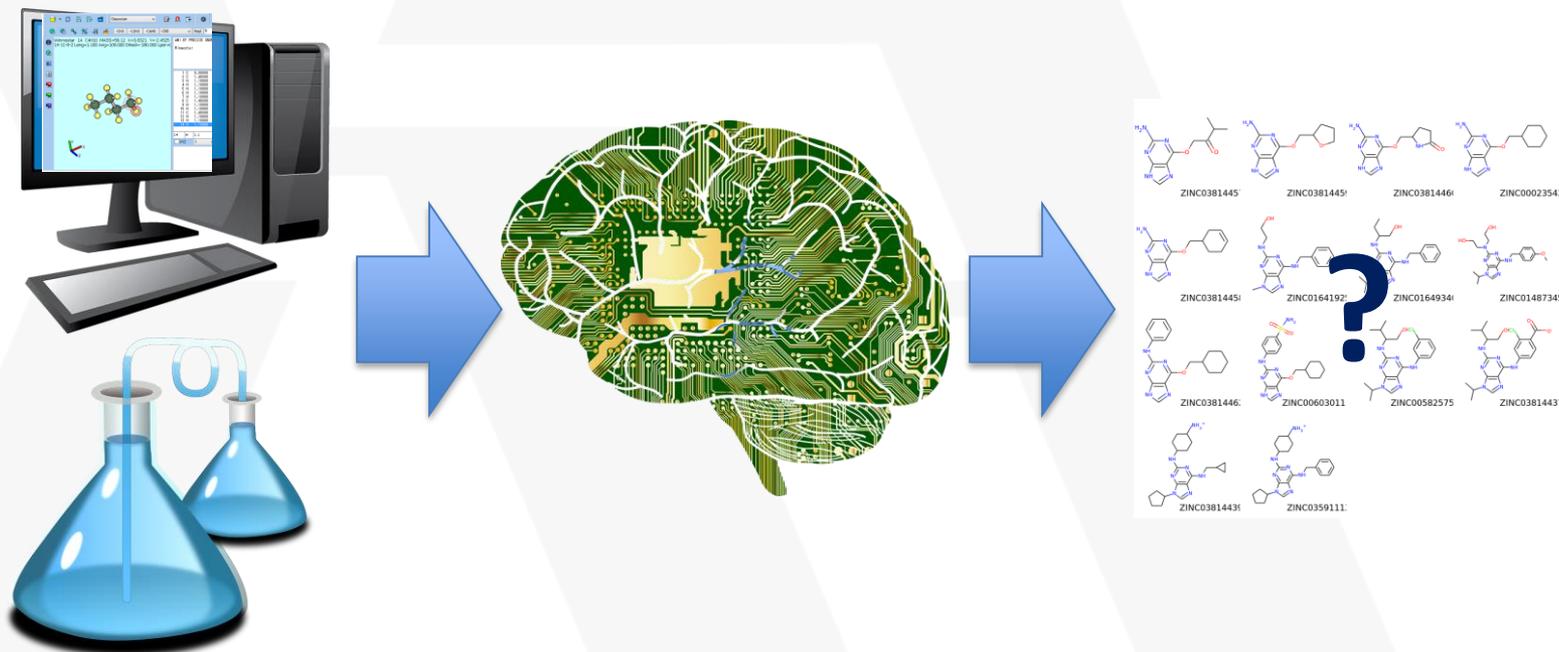
インフォマティクス ソリューションのご案内

株式会社クロスアビリティ

2019年7月19日

インフォマティクスソリューションの概要

- **人工知能 (AI) 技術**によりシミュレーション・実験データ解析を高度化する、**マテリアルズインフォマティクス/ケモインフォマティクス**のソリューションです。
- コンサルティング、教師データの収集、学習・推論プログラムの開発、解析の受託、レポートの作成などを行います。



開発事例 (民間企業案件除く)

【物性などの予測】

- 高度化されたグラフ畳み込み手法 (GCN) を用いた薬理活性・物性・毒性予測深層学習モデルの作成・検証 (～2018年、理化学研究所)
- 原子団寄与法+ニューラルネットワークを用いたQSPRモデルのGUI作成 (Winmostarアドオンとして販売中)

【特徴抽出など】

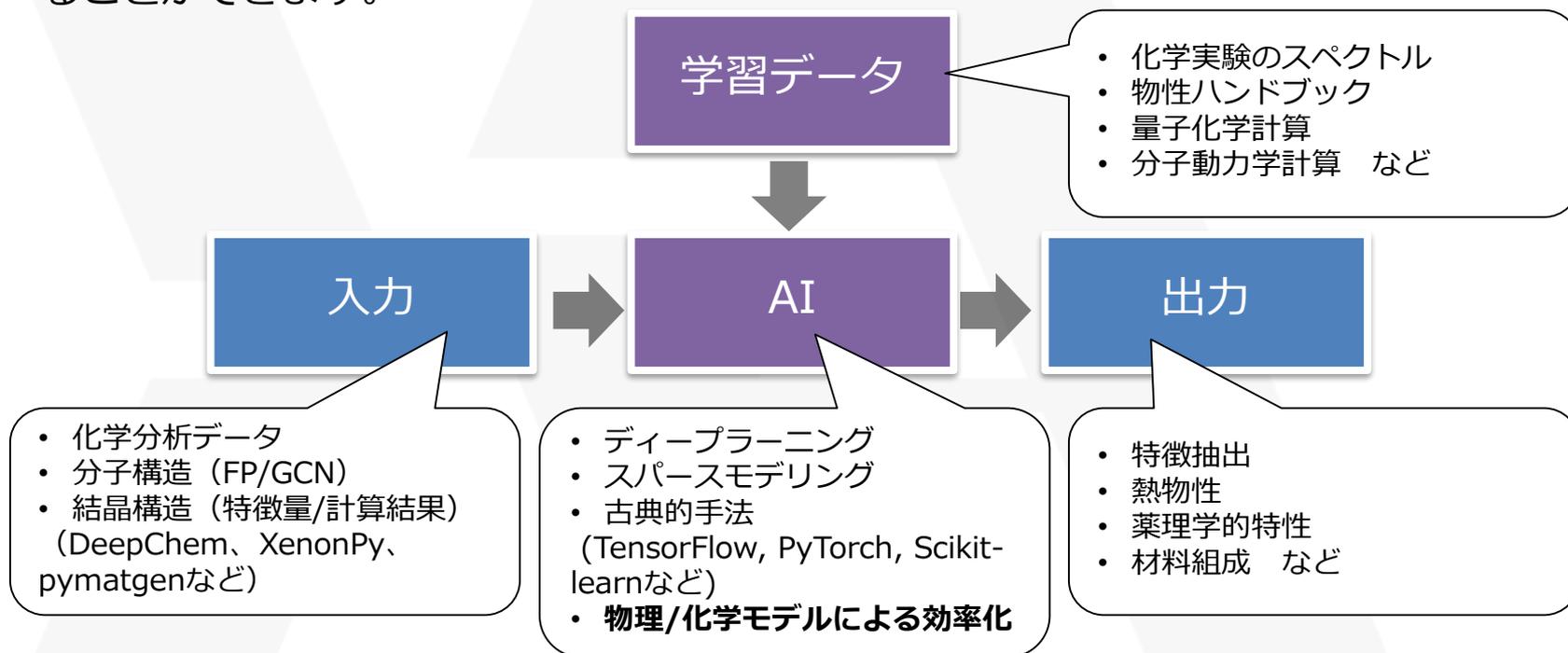
- オートエンコーダを用いた分子動力学の深層学習システム開発・検証 (～2019年、理化学研究所)
- 最大エントロピーモデルによる中性子準弾性散乱スペクトルの運動モード自動抽出プログラム作成 (～2019年、J-PARCセンター)

【AIインフラの整備、その他】

- 第一原理計算を教師データとしたニューラルネットワークカ場の構築 (～2017年、大学)
- 高分子材料物性予測AI用データベースのWebシステム構築 (～2018年、大学)

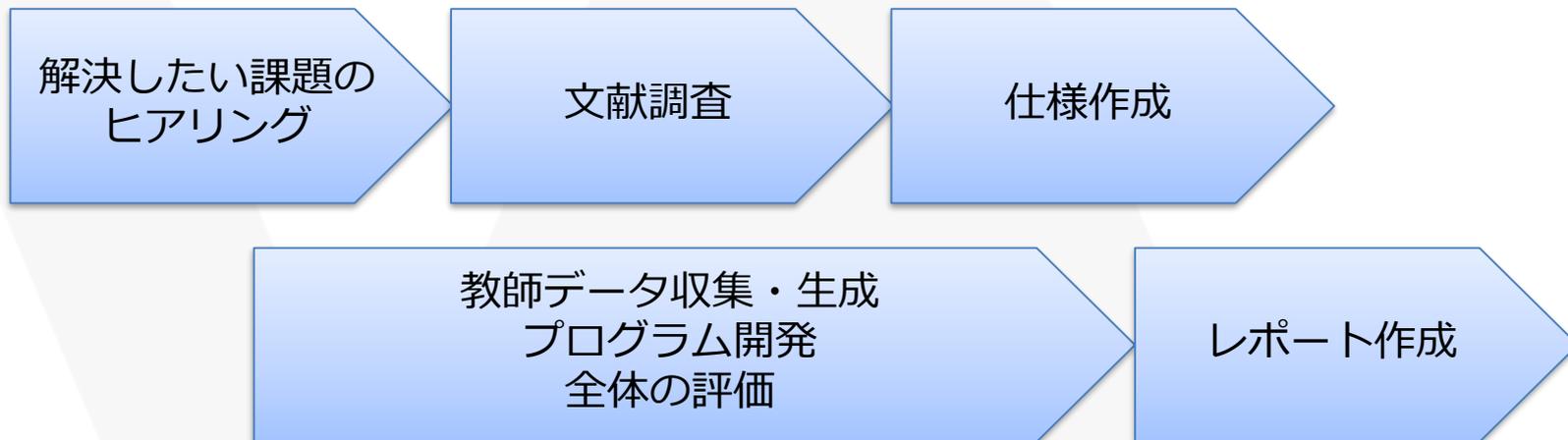
開発可能なAI

- 以下の内容の他、論文のトレースや、お客様自身のアイデアの実装が可能です。
- 弊社スタッフの提案する**適切な物理・化学モデルを併用**することで学習効率を上げることができます。



主な導入先：理化学研究所、産業総合研究所、先端医療振興財団、創薬関連コンソーシアム、東北大学、医薬品メーカー、化学系メーカー、電機系メーカー

開発の流れ、お問合せ・見積依頼



※ 教師データを公共のデータベースなどとすることで、お客様の社外秘のデータを使わずに初期の開発を行い、(汎化)性能を向上させる段階で、最終的に使う予定のデータを使用する、ということも可能です。

- **メーカーの現場で必要な化学・実験・シミュレーションを知識を持つ弊社のスタッフが担当致します。**
- AI開発の全体または一部の開発を委託頂くことが可能です。

お問合せ・見積依頼先

<https://x-ability.co.jp/>

お問合せフォーム