

# Multi-Sigma™ を利用したケモインフォマティクス

## AIが化学研究に革命をもたらす

#Inorganic #Organic #Chemical #Material Science #Material Informatics

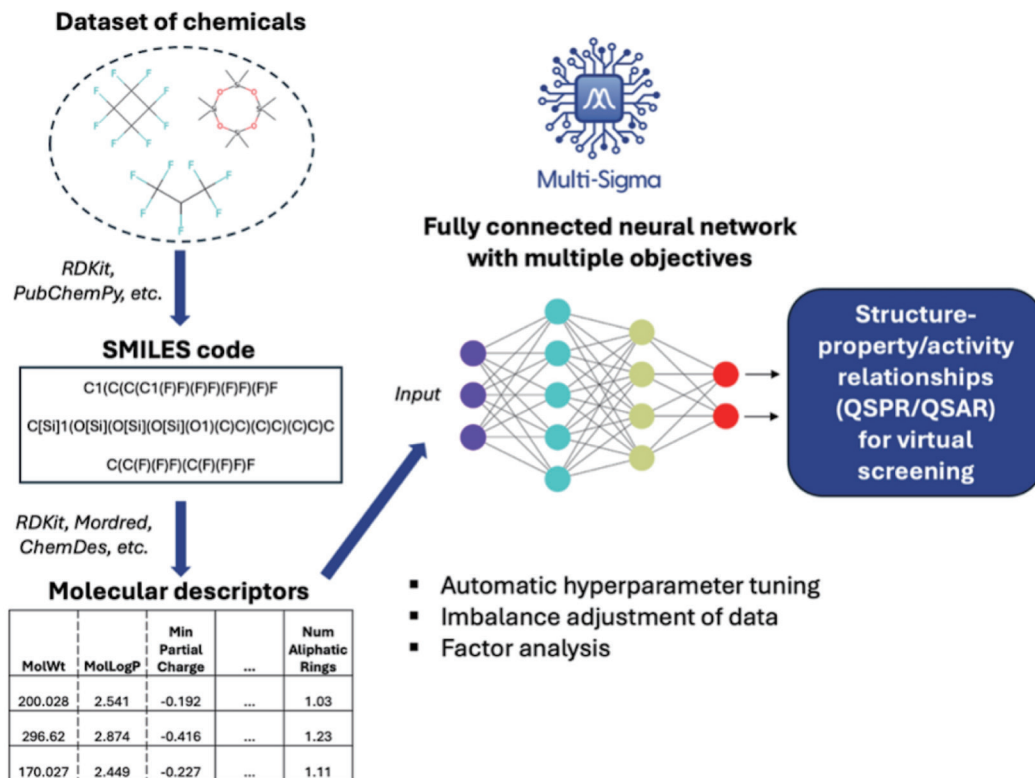
Multi-Sigma™ は、研究者が定量的構造物性相関/活性相関 (QSPR/QSAR) をモデル化するための強力なAIプラットフォームである。

### 【課題:Challenge】

大規模なデータセットの取り扱いと複雑な化学的相互作用のモデリングは困難であり、従来のモデルでは手作業によるプロセスもあり、予測精度も低くなっていた。

### 【ソリューション:Solution】

Multi-Sigma™ は、高度なニューラルネットワークアーキテクチャを有し、RDKit、Mordred、ChemDesなどのオープンソースパッケージで化学構造から生成された分子記述子を用いて、複雑な構造物性相関/活性相関を正確にマッピングする。Multi-Sigma™ を活用することで、正確な化学的性質の予測が可能になるだけでなく、非常に効率的なバーチャルスクリーニングが容易となる。



株式会社エイゾスは、Multi-Sigma™、AIコンサルティング、条件出し支援、受託研究開発などのAIサービスを提供しています。Multi-Sigma™ は、研究開発向けのクラウドAIソフトウェアで、実験の手間を大幅に削減し、最小限の実験データセットで研究者の実際の問題に対する革新的な解決策を見出す支援を可能とします。

#### Contact Us

〒305-0031 茨城県つくば市吾妻1-5-7

<https://aioth.com/service/multi-sigma/>

✉ [info@aioth.com](mailto:info@aioth.com)

