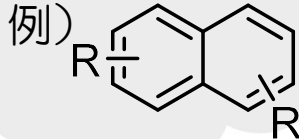


利用事例紹介 11

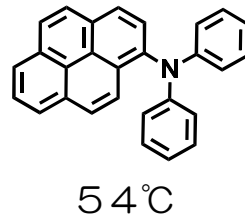
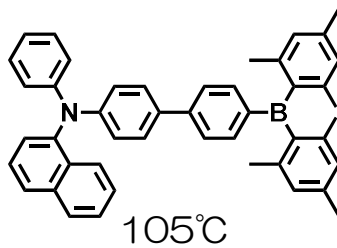
ガラス転移温度 (T_g) の予測モデル作成

この分子の
T_gは何度？

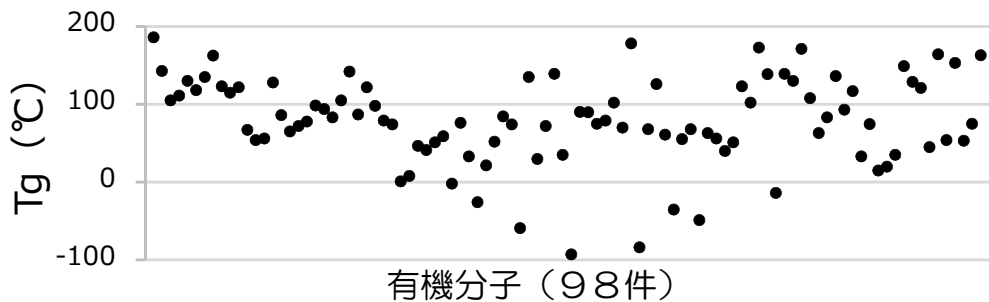


合成せずにT_gが予測できると、非常に便利だと思いませんか？そんな時、機械学習によるQSPR（定量的構造物性相関）の活用がおすすめです。

既存の
T_gデータ



...

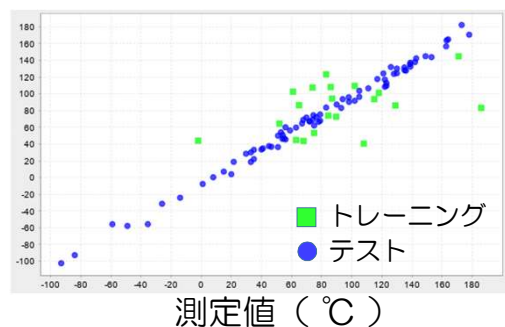


※社内で蓄積されたデータや文献値だけでなく、当センターで用意したデータセットも利用可能です。

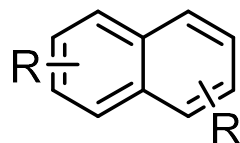


機械学習を用いて
学習モデルを作成
(ソフトウェア上)

予測値 (°C)



T_gを予測したい
「分子の構造」を
入力



➡ 予測値は〇〇度！

学習モデルに、任意の分子構造を入力することで予測値の算出が可能です。
QSPRを活用して研究開発のスピードアップにつなげましょう！