

課題名

有機固体MIのWebプラットフォーム開発

プロジェクトの概要

材料開発にデータ科学を活用した技術(マテリアルズインフォマティクス、MI)により、有機固体開発の効率化、製薬の安定性予測、および機械学習の信頼性を向上させるためのWebプラットフォームを開発する。研究代表者はこれまで有機固体材料の物性予測を行う機械学習モデルを構築しており、ブラウザ上でユーザーが新規化合物情報を入力すると学習済みモデルに基づき物性予測値を出力するプラットフォームを開発し、材料・薬剤開発を効率化することを目指す。ユーザーとしては、材料素材メーカーおよび製薬企業の研究部門やアカデミアの研究者を想定している。

ビジネスモデル(申請時)

ユーザーとしては、材料素材メーカーおよび製薬企業の研究部門やアカデミアの研究者を想定している。サービス利用にあたっては月額契約または年間契約のサブスクリプションモデルを想定する。利用料金や契約体系は活動期間中の市場調査を通して判断する。また、ユーザーの希望するMIアルゴリズムの受託開発やデータの受託解析を行うことも想定する。

活動計画(申請時)

- 学習済みモデルをブラウザから利用できるWebプラットフォームの試作版(β版)を開発する。
- 新規物性に対応した機械学習モデルの構築し、プラットフォームを通してモデル提供し、実験的検証を行う。
- 市場調査として身近なアカデミア研究者にサービスβ版を利用してもらい、フィードバックを通してプラットフォームUIや機械学習モデルの改善を行う。

