

2025年7月3日

ニュースリリース

## Alvascience社ソフトウェア マイナーアップデートのお知らせ

株式会社アフィニティサイエンス

平素より、弊社商品ならびにサービスをご愛顧頂きまして、誠にありがとうございます。

この度、Alvascience Srl.社の、分子が持つ化学的情報を数多くの特徴量に変換する定量化ツール『alvaDesc』をはじめとするソフトウェア群が一斉にマイナーアップデートされました。

alvaDesc、分子データセットのキュレーションツール alvaMolecule、alvaDesc で計算された特徴量に基づいて QSAR/QSPR モデルを適用する alvaRunner に於いては、分子記述子や分子データセットを MDL 形式でファイルに保存する際、暗示的水素をエクスポートするオプションが追加され、その他の改善・修正も行われています。

このほか、alvaDesc で計算された特徴量に基づいて QSAR/QSPR モデルを作成する alvaModel、分子の特徴量や構造に基づく条件を満たす新分子を生成するツール alvaBuilder でも改善・修正が行われています。

更新内容等の詳細は製品ページをご確認ください。

alvaDesc	: <a href="https://www.affinity-science.com/alvadesc/">https://www.affinity-science.com/alvadesc/</a>
alvaMolecule	: <a href="https://www.affinity-science.com/alvamolecule/">https://www.affinity-science.com/alvamolecule/</a>
alvaModel/alvaRunner	: <a href="https://www.affinity-science.com/alvamodel-alvarunner/">https://www.affinity-science.com/alvamodel-alvarunner/</a>
alvaBuilder	: <a href="https://www.affinity-science.com/alvabuilder/">https://www.affinity-science.com/alvabuilder/</a>

本件に関するお問合せ先：

株式会社アフィニティサイエンス

電子メール： (営業関連) [sales@affinity-science.com](mailto:sales@affinity-science.com)

(技術関連) [help@affinity-science.com](mailto:help@affinity-science.com)

WEB フォーム：<https://www.affinity-science.com/contact/>