



総合サービス案内 | All Service Lineup

AI
で材料開発に革新を
マテリアルズ・インフォマティクス



製品情報サイト



製品demoのご予約





Polymerize Labs 素材開発

「PolymerizeLabs」は、材料開発のプロフェッショナルによって設計された、シームレスなデータ管理とプログラミング知識不要なAI活用を可能にする、業界で唯一のオールインワン・マテリアルズ・インフォマティクスプラットフォームです。様々な材料開発データの整理・AI活用に特化したデータ管理基盤と、多種多様な機械学習アルゴリズムを備えた柔軟性の高いAIエンジンをベースに、様々な材料分野においてデータドリブンな開発プロセスを提供します。あらゆる研究開発部門が直面するリソース不足、高コスト体質や、環境規制対応、サプライチェーンのボトルネック解消、そして市場変化への迅速な対応と、企業競争力の向上に寄与し、AI時代の新たな研究開発プロセスのスタンダードを構築します。

データ管理基盤とAIエンジンを備えた統合プラットフォームで 研究開発プロセス全体をデジタル化



1 実験・材料データの一元管理

電子実験ノート+データ管理基盤 / 社内に散らばったデータの統合 / マスタ管理による表記揺れ解消 / すぐにAI活用可能なデータモデル / 分析・可視化機能による業務効率化 / 過去実験データの横断検索・活用

2 ノーコードAIで重要な特徴量・変数を特定

多様性のある9種類のモデルが利用可能 / 自動機械学習ベースでプログラミング知識不要 / 少量データからも高精度なAIモデルを生成 / 特徴量の寄与度を解析し可視化 (SHAP)

3 AIによる特性・推奨実験条件の予測

AI予測結果の分析可視化 / 現実的な実験条件の絞り込み / 実験計画法(DoE)の活用 / AI画像解析・生成AIの統合

4 追加学習に向けたデータ拡充・AI予測に基づく実験計画

前方予測 (順問題)

指定した原料配合・
工程条件から得られる
特性を予測



$$y = f(x)$$



後方予測 (逆問題)

目標とする特性を満たす、
原料配合・工程条件を
予測



$$y = f(x)$$



の未来を切り拓く、統合型マテリアルズ・イン

様々な材料・アプリケーションに対し

基礎研究から製品開発、量産化まで幅広い領域で適用可能

原材料合成

機能付与

処方設計
・評価

加工

用途展開

PP

UV安定剤

材料選定

押出成形

塗料

PS

発泡剤

実験設計

射出成形

コーティング剤

PE

顔料

混練・分散

圧縮成形

粘着剤

エポキシ樹脂

補強剤

電流化

インフレーションフィルム成形

フィルム

ポリアミド

脱脂剤

テスト

コーティング加工

接着剤・バインダー

ポリアクリル

カップリング剤

絶縁材

EPDM

可塑剤

バリア材

オールインワン・MIプラットフォームとして

研究開発プロセス全体をデジタルに統合、DXを実現



実験データ管理基盤
分析・可視化機能



実験データの検索
フィルター・ソート



原材料メタデータ
マスタ管理



Polymerize Model
独自のエンジン



ノーコードAI予測
(順解析・逆解析)



SMILES分析
化学描画ツール



実験計画法
(DOE)



AI画像解析
特徴量抽出



データセキュリティ



役割に応じた
アクセス権限設定



世界8ヶ国語対応

インフォマティクスプラットフォーム

実際のマテリアルズ・インフォマティクス活用事例

(ゴムメーカーA社様)



目的

- ・高温でのエラストマーシールの性能を最大化。
- ・破断点伸びを維持しながら、圧縮永久歪みを最小限に抑える。



アプローチ

- ・25件の実験データと目標の製品特性をお客様から提供。
- ・様々な炭素化合物、硬化剤、添加剤の組成を変更し、目標の特性を目指す。
- ・AIが提示した5つの実験のうち4つで、求める性能に合致。
- ・提示された条件にて検証実験を計画、実行。



成果

検証実験の結果

複数の目標特性を
同時に達成

知見の発見

将来の製品開発期間に活用可能な
最適な原料の配合と
工程条件の発見

期間の短縮

12週間
↓
3週間

開発コスト削減

1プロジェクトあたり
1/4

グローバル市場で急速にカバレッジを拡大中



Trusted by Global industrial leaders —

artience



maxell
Within the Future

MERAXIS



+80 more

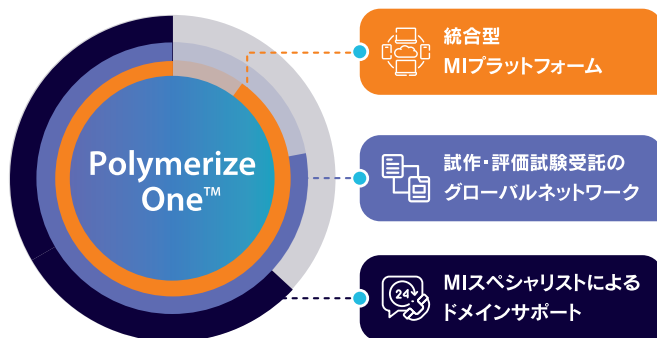
All-in-One材料開発支援サービス

Polymerize One™

データ生成・AIモデル構築・検証実験までを一貫して実施
迅速かつ効率的なプロセスを支援

「Polymerize One™」は、Polymerizeが提供する All-in-One型の材料開発支援サービスです。

MIプラットフォーム、試作・試験受託、プロフェッショナル支援の3つの要素を組み合わせることで、迅速かつ効率的な材料開発を実現します。



Polymerize Labs を活用

当社提携研究機関での試作や評価が可能になり、自社に実験設備や試験環境がない企業様でも、実験データを生成し、MIのワークフローを推進。

プロジェクト全体を通して、MI駆動型開発を進めるためのアプローチの立案や、プロジェクトマネジメントなど、目標達成のための技術コンサルティングを提供。材料開発およびMIの専門家のサポートを受けることで、より迅速かつ精度の高い材料開発が可能に。

「Polymerize One™」が解決したい材料開発における課題

弊社のMIプラットフォーム「Polymerize Labs」の活用に加え、試作・試験受託、そしてプロフェッショナル支援の要素を組み合わせることで、新規材料開発における左記のようなボトルネックを解消し、迅速かつ効率的な材料開発を実現します。



サービス適用イメージ

- 1 提携研究機関にて試作・評価試験を実施し、MI活用を前提とした実験データを生成
- 2 上記にて取得したデータを基に、当社プラットフォーム「Polymerize Labs」を用いてデータ分析、予測モデルを構築
新たな原理原則を特定し、目標特性を満たす実験条件を逆解析
- 3 解析から導出された条件をもとに再度提携研究機関にて実験を行い、プラットフォーム上にデータを蓄積、モデルを改善
- 4 目標特性を満たした材料を、材料メーカー様にて最終評価
- 5 蓄積されたデータとAIモデルによって解析された原理原則は、資産としてその後の開発にも継続活用が可能

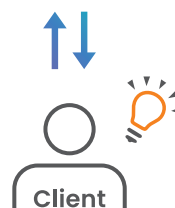


Polymerize

試作・試験による
データ収集・分析

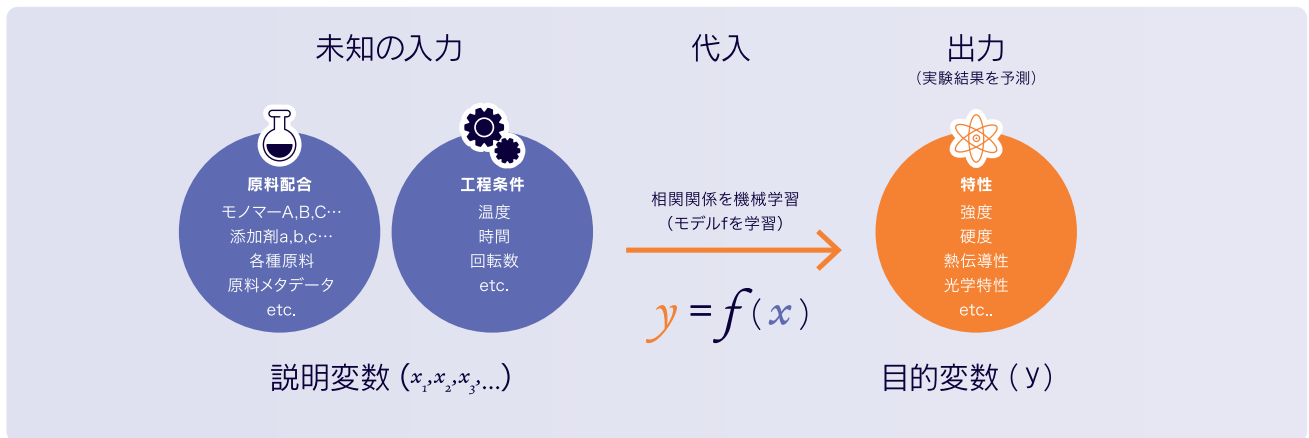
予測モデルの
構築・改善

目標特性の予測、
最適条件の提案

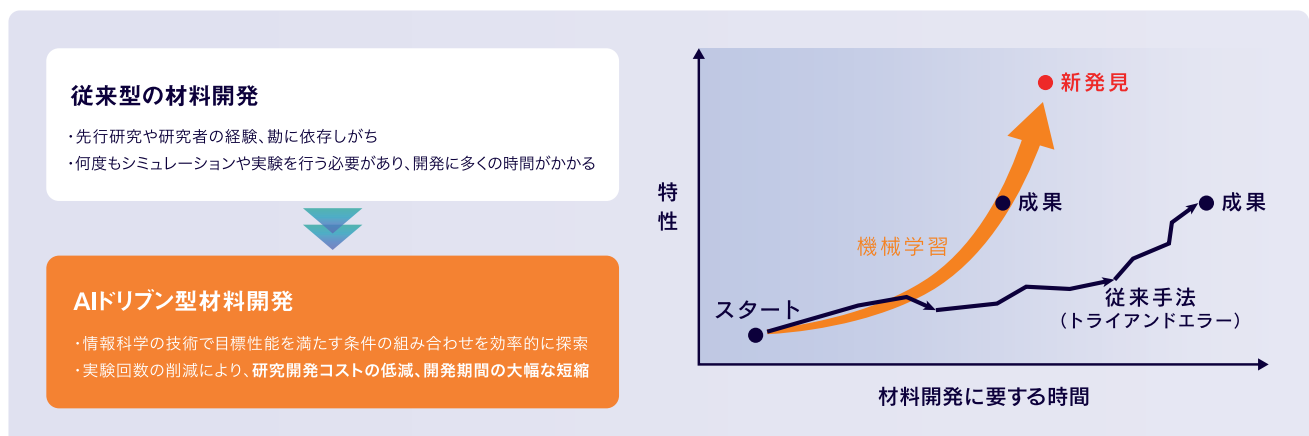


マテリアルズ・インフォマティクスとは？

マテリアルズ・インフォマティクス（Materials Informatics）とは、AIやビッグデータ解析などの情報科学技術を材料開発に応用し、新素材の探索や既存材料の性能向上を効率的に行う手法です。



従来手法とマテリアルズ・インフォマティクスの比較



マテリアルズ・インフォマティクスが企業にもたらす価値

