

# 生成AIで新材料を開発する国際ネットワーク「AI Materials Foundry」と三井化学参画の調査報告

## エグゼクティブサマリー

2026年7月31日にYahoo!ニュースへ転載されたEE Times Japanの記事「生成AIで新材料を開発する国際ネットワーク、三井化学が参画」は、三井化学が英国ケンブリッジ発のAI企業CuspAI主導の「AI Materials Foundry」に創設メンバーとして参加したことを報じたものである。Yahoo!ニュース上の掲載時刻は2026年7月31日17時30分、元記事は同日13時30分公開、記者は馬本隆綱氏である。記事の直接的な一次情報は、2026年7月28日付の三井化学ニュースリリースと、CuspAIが配信したFoundry発足リリースである。<sup>1</sup>

本件の本質は、単なる生成AIソフトウェアの導入ではない。CuspAIのエージェント型材料探索基盤「MIRA」を中核に、①実験・結晶構造・文献データ、②NVIDIAなどの計算資源、③大学・研究機関・高スループット実験企業の設備、④素材・半導体・エネルギー企業の専門知識を束ね、候補生成から物性予測、合成経路設計、実験先への割り振り、結果の再学習までを閉ループ化しようとする国際共同基盤である。CuspAIは米国、欧州、アジア太平洋に地域ハブを設け、半導体、クリーンエネルギー、先端製造を重点領域としている。<sup>2</sup>

公表名簿を数えると、Foundryには創設パートナー31組織、ラボネットワーク15組織、データパートナー3組織の計49組織が明示されている。運営主体CuspAIを加えると50組織に相当する。「45を超える」という公式表現と矛盾するものではなく、発表文中に実名掲載された組織を本報告で再集計した結果である。日本からは三井化学のほか、富士フイルム、日立ハイテック、JSR、キオクシア、レゾナック、島津製作所、ソフトバンク、東京エレクトロンの計9社が掲載されており、国別では米国11、日本9、オランダ7、英国5、ドイツ4などとなる。国別分類は各組織の本社・主要拠点を基準とした本報告上の整理であり、Foundryの公式分類ではない。<sup>3</sup>

三井化学について公式に確認できる役割は「創設メンバー」であり、目的は、AI技術・知見の獲得、研究開発力の強化、新材料を起点とする新事業探索、グローバル共創、先端技術の社内取り込みである。一方、投入するデータ、研究設備、研究員数、具体的な共同研究テーマ、担当部署、参加費、出資額、CuspAIへの株式投資の有無は、2026年8月2日時点で**未公表**である。CuspAIが同時期に実施した4億5,000万ドルの資金調達について、開示された投資家一覧に三井化学は含まれておらず、Foundry参加とCuspAIへの出資を同一視する根拠はない。<sup>4</sup>

技術的には、拡散モデル、変分オートエンコーダー、グラフニューラルネットワーク、等変ニューラルネットワーク、汎用原子間ポテンシャル、密度汎関数理論、バイズ最適化、能動学習、自律実験ロボットを統合する方向にある。GNoME、MatterGen、A-Labなどの査読研究は、探索候補数や実験速度を大幅に向上させられることを示す一方、「計算上安定」な材料が合成可能、量産可能、安全、低コストであるとは限らないことも明確にしている。<sup>5</sup>

三井化学にとっての短期的な最重要課題は、ネットワーク参加自体ではなく、どの事業課題をFoundryへ持ち込み、どのデータをどの権利条件で共有し、候補から量産・規制適合までの成果をどの指標で測るかを定義することである。特に半導体材料、機能性ポリマー、触媒、循環材料など、既存データと実験評価系を持つ限定テーマで閉ループ実証を始めることが合理的である。

## 指定記事の検証と一次情報

### 記事の書誌情報とリンク

| 項目             | 確認結果                                                          |
|----------------|---------------------------------------------------------------|
| Yahoo!ニュース記事   | <a href="#">生成AIで新材料を開発する国際ネットワーク、三井化学が参画</a>                 |
| Yahoo!ニュース掲載日時 | 2026年7月31日17時30分                                              |
| 配信元            | EE Times Japan                                                |
| 元記事            | <a href="#">EE Times Japan「生成AIで新材料を開発する国際ネットワーク、三井化学が参画」</a> |
| 元記事公開日時        | 2026年7月31日13時30分                                              |
| 記者             | 馬本隆綱                                                          |
| 三井化学発表         | <a href="#">三井化学「AI Materials Foundry」に創設メンバーとして参画</a>        |
| 三井化学発表日        | 2026年7月28日                                                    |
| Foundry発足原文    | <a href="#">CuspAI Launches “AI Materials Foundry”</a>        |

Yahoo!ニュースの本文ページは外部クローラーからの直接取得が制限されているが、Yahoo! JAPAN内の関連記事欄で記事タイトル、配信元、掲載時刻を確認でき、Yahoo!リアルタイム検索でも該当Yahoo!ニュースURLと同一タイトルが確認できる。記事内容、著者、元の公開時刻についてはEE Times Japanの原記事で照合した。<sup>6</sup>

### 記事の主要事実

指定記事の要旨は、次の通りである。

三井化学は、生成AIによる材料探索を目的とする国際ネットワーク「AI Materials Foundry」に創設メンバーとして参加した。ネットワークは英国ケンブリッジを拠点とするCuspAIが主導し、NVIDIA、Meta、Samsung、Henkel、Applied Materials、東京エレクトロン、Lam Researchなど45を超える企業・研究機関が参加する。中核基盤MIRAに、参加組織の学習データ、ハードウェア・ソフトウェア計算資源、実験設備、専門知識を統合し、初期探索、候補設計、評価、実験検証を一気通貫で処理する構想である。<sup>7</sup>

記事は三井化学CTOの表利彦氏について、「AI駆動の材料発見により、研究開発のスピードと新事業創出の成功率が大きく向上し、**具体的な事業価値がもたらされることを期待している**」と紹介している。この発言は三井化学の公式リリースに基づくものであり、同社は参画を「競争優位性を構造的に強化する機会」と位置付けている。<sup>7</sup>

### 原記事と一次情報の差分

EE Times Japan記事は三井化学のリリースを正確に要約しているが、CuspAIの原文発表に含まれる次の重要情報は省略または簡略化されている。

| CuspAI原文にある追加情報                                    | 分析上の意味                               |
|----------------------------------------------------|--------------------------------------|
| MIRAは候補生成だけでなく、物性予測、合成経路設計、実験設備へのルーティング、結果の再学習まで担当 | 単体の生成モデルではなく、研究工程全体のオーケストレーション基盤である  |
| パートナー向けにプライベートFoundryインスタンスを設ける                    | 機密データを共有基盤上で扱う設計意図がある。ただし契約・技術仕様は未公表 |
| NVIDIAが計算インフラを提供                                   | GPU計算・大規模シミュレーション層の主要構成主体が明確         |
| Meta FAIRのUMAを利用                                   | 原子間相互作用を広範な元素・系に適用する基盤モデルを活用         |
| CCDC、ICSD/FIZ Karlsruhe、Wileyがデータ・文献を提供            | 実験構造データと査読文献がモデル学習・推論の基盤となる          |
| 米国、欧州、アジア太平洋に地域ハブ                                  | 国際分散型の計算・実験ネットワークを意図                 |
| A*STARとの複数年プロジェクトが開始済み                             | Foundryが構想段階だけでなく、個別研究へ移行している        |
| Kemira案件で300兆候補を探索、20候補を6か月で検証したとの企業発表             | 商業案件の先行実績。ただし査読論文による独立検証ではない         |

これらの追加情報から、AI Materials Foundryは「共同研究コンソーシアム」というより、CuspAIが制御層を担う国際的な材料R&Dプラットフォームまたは市場基盤に近いと評価できる。<sup>2</sup>

## 三井化学の参画内容と関連実績

### 公表事項と未公表事項

| 論点              | 2026年8月2日時点の確認結果                          |
|-----------------|-------------------------------------------|
| 参画資格            | 創設メンバー                                    |
| 公式な参画目的         | AI技術・関連知見の獲得、R&D力強化、新材料による新事業機会探索、グローバル共創 |
| 経営責任者として公表された人物 | 表利彦 CTO・常務執行役員                            |
| 主要協業先として言及      | CuspAI、NVIDIA、Meta                        |
| 三井化学の正式な担当部署    | 未公表                                       |
| 実務担当者・研究責任者     | 未公表                                       |
| 投入する社内データの種類・量  | 未公表                                       |
| 提供する実験設備        | 未公表                                       |
| 個別の共同研究テーマ      | 未公表                                       |
| 対象製品・材料群        | 未公表。公式文では先端産業、とりわけ半導体を例示                  |

| 論点               | 2026年8月2日時点の確認結果 |
|------------------|------------------|
| 参加費・会費           | 未公表              |
| Foundryへの資金提供額   | 未公表              |
| CuspAIへの株式出資     | 未公表              |
| 成果知財の帰属条件        | 未公表              |
| 成果の独占利用権         | 未公表              |
| プロジェクト期間・マイルストーン | 未公表              |

三井化学の発表は、AI・知見を「獲得」し、最先端技術を「社内に取り込む」ことを強調している。この表現からは、同社が単にデータ提供者となるのではなく、Foundryで得た探索技術を自社R&Dへ移植する能力構築を重視していると読める。ただし、どの程度のモデルアクセス、ソースコードアクセス、技術移転、研究者派遣が含まれるかは明らかにされていない。<sup>8</sup>

CuspAIはFoundry発表と同時期に4億5,000万ドルのシリーズBを実施し、評価額は26億ドルと報じられた。公表投資家にはKleiner Perkins、NEA、英国政府系ファンド、Bezos Expeditions、AMD Venturesなどが含まれ、CuspAI自身は累計調達額を6億5,000万ドル超としている。しかし、開示された投資家一覧に三井化学の名称はない。したがって、「三井化学がFoundryへ参画した」ことは確認できるが、「CuspAIへ出資した」「Foundryへ特別な資金提供を行った」と判断することはできない。<sup>9</sup>

## 過去の関連プロジェクトとの比較

| 発表時期       | 相手先・案件               | 技術・対象                       | 公表された成果または目標                     | 今回との関係                  |
|------------|----------------------|-----------------------------|----------------------------------|-------------------------|
| 2021年6月    | 日立製作所とのMI実証          | 有機材料データ、AI・マテリアルズ・インフォマティクス | 従来のMIに比べ、必要な実験試行回数を約4分の1に低減したと発表 | 自社材料データと外部AIを結合する先行例    |
| 2021年12月   | シグマアイ                | 量子アニーリング、ブラックボックス最適化        | 少量データ下での化合物探索・配合最適化を実証           | 探索・組合せ最適化能力の高度化         |
| 2022～2023年 | IBM Watsonと生成AI      | 特許・ニュース・SNSを用いた新規用途探索       | 20以上の事業部門で活用し、100以上の新規用途を発見したと発表 | 分子生成ではなく、市場・用途の意味探索     |
| 2024年6月    | blueqat              | SimCSE、テンソルネットワーク、量子×AI     | 特許調査・新規用途探索向けモデルを圧縮し、将来の量子実行も想定  | 言語・知財データを対象とするAI基盤整備    |
| 2025年10月   | 萩原工業、丸喜産業、NEC        | 再生プラスチック粘度データとMI            | 品質安定化、製造時間25%削減を目標               | 材料探索から製造プロセス最適化への拡張     |
| 2026年7月    | AI Materials Foundry | 生成設計、原子シミュレーション、合成計画、国際ラボ網  | 個別成果は未公表                         | データ、計算、実験設備を国際規模で統合する段階 |

三井化学は、少なくとも2021年以降、材料組成の探索、実験回数削減、量子最適化、特許・市場テキスト分析、再生材料の製造制御を段階的に試してきた。今回のFoundry参加は、これらの個別技術を、生成モデル、原子シミュレーション、合成計画、実験設備まで含む国際閉ループへ拡張する試みと位置付けられる。

10

一方で、過去案件には三井化学自身が提供したデータで実験回数削減を検証した例や、事業部門別に用途探索を展開した例があるのに対し、Foundry案件では対象テーマと定量目標が公表されていない。外部から事業価値を評価するには、今後、候補発見までの日数、必要実験数、予測適中率、特許出願数、スケールアップ到達率などの開示が必要になる。

## 国際ネットワークの構成

以下の組織名と「創設パートナー」「ラボネットワーク」「データパートナー」の区分はCuspAIの公式発表に基づく。国・地域は各組織の本社または主要拠点を基準とした便宜的整理であり、多国籍企業や国際研究組織について唯一の法的所在を示すものではない。公式発表で個別担当が明示されていない組織については、推測を避け「未公表」とした。<sup>3</sup>

| 区分      | 組織                                 | 国・地域の便宜分類 | 公表された役割・貢献領域                                 |
|---------|------------------------------------|-----------|----------------------------------------------|
| 運営主体    | CuspAI                             | 英国        | Foundryの設計・運営、MIRA、生成設計、合成計画、実験ルーティング、再学習ループ |
| 創設パートナー | 3M                                 | 米国        | 材料科学、先端製造、スケールアップへの貢献を表明                     |
| 創設パートナー | AMD                                | 米国        | 個別担当は未公表                                     |
| 創設パートナー | Applied Materials                  | 米国        | 半導体プロセス技術の専門知識                               |
| 創設パートナー | ASMPT                              | シンガポール    | 個別担当は未公表                                     |
| 創設パートナー | Caelux                             | 米国        | 個別担当は未公表                                     |
| 創設パートナー | 富士フイルム                             | 日本        | 次世代材料開発と産業課題への応用を表明。具体的担当は未公表                |
| 創設パートナー | The Goodyear Tire & Rubber Company | 米国        | 個別担当は未公表                                     |
| 創設パートナー | Henkel                             | ドイツ       | 個別担当は未公表                                     |
| 創設パートナー | 日立ハイテク                             | 日本        | 個別担当は未公表                                     |
| 創設パートナー | Hyundai Motor Group                | 韓国        | 持続可能な次世代モビリティ向け材料課題への貢献を表明                   |

| 区分      | 組織                      | 国・地域の便宜分類 | 公表された役割・貢献領域                    |
|---------|-------------------------|-----------|---------------------------------|
| 創設パートナー | Johnson Matthey         | 英国        | 個別担当は未公表                        |
| 創設パートナー | JSR Corporation         | 日本        | 個別担当は未公表                        |
| 創設パートナー | Kemira                  | フィンランド    | 先行顧客。水多消費産業向けの持続可能材料を想定         |
| 創設パートナー | キオクシア                   | 日本        | 半導体メモリー材料の可能性に言及                |
| 創設パートナー | Lam Research            | 米国        | 半導体製造プロセス知識を通じ、発見と製造の橋渡し        |
| 創設パートナー | LG CNS                  | 韓国        | 個別担当は未公表                        |
| 創設パートナー | Merck                   | ドイツ       | 個別担当は未公表                        |
| 創設パートナー | Meta／FAIR               | 米国        | 汎用原子モデルUMAを開発・提供                |
| 創設パートナー | 三井化学                    | 日本        | AI知見獲得、R&D強化、新事業探索。具体的研究テーマは未公表 |
| 創設パートナー | NVIDIA                  | 米国        | GPUを中心とする計算インフラ、ALCHEMI連携       |
| 創設パートナー | Oxford PV               | 英国        | 高性能太陽電池・先端光起電材料の専門知識            |
| 創設パートナー | Qnity Electronics, Inc. | 米国        | 先端電子材料の発見・商業化への貢献を表明            |
| 創設パートナー | レゾナック                   | 日本        | 持続可能・高性能材料に関する材料企業側の知見          |
| 創設パートナー | Samsung                 | 韓国        | 個別担当は未公表                        |
| 創設パートナー | 島津製作所                   | 日本        | 個別担当は未公表                        |
| 創設パートナー | ソフトバンク                  | 日本        | AI、データ、計算、科学知識の融合を支持。具体的担当は未公表  |
| 創設パートナー | 東京エレクトロン                | 日本        | Foundry型協業への参加。個別の資源提供内容は未公表    |
| 創設パートナー | Topsoe                  | デンマーク     | 個別担当は未公表                        |

| 区分       | 組織                                              | 国・地域の便宜分類 | 公表された役割・貢献領域               |
|----------|-------------------------------------------------|-----------|----------------------------|
| 創設パートナー  | Umicore                                         | ベルギー      | 個別担当は未公表                   |
| 創設パートナー  | Universal Display Corporation                   | 米国        | OLED・有機電子材料、計算手法、プロセス最適化   |
| 創設パートナー  | VisionPower Semiconductor Manufacturing Company | シンガポール    | 個別担当は未公表                   |
| ラボネットワーク | A*STAR                                          | シンガポール    | 複数年共同研究、自律合成、半導体・炭素回収・先端電子 |
| ラボネットワーク | AMOLF                                           | オランダ      | 実験ラボ網。個別テーマは未公表            |
| ラボネットワーク | ATLANT 3D                                       | デンマーク     | 実験ラボ網。個別テーマは未公表            |
| ラボネットワーク | Avantium                                        | オランダ      | 実験・高スループット研究網。個別テーマは未公表    |
| ラボネットワーク | Big Chemistry                                   | オランダ      | 実験ラボ網。個別テーマは未公表            |
| ラボネットワーク | University of Cambridge                         | 英国        | 大学研究・実験網。個別テーマは未公表         |
| ラボネットワーク | DIFFER                                          | オランダ      | エネルギー基礎研究・実験網。個別担当は未公表     |
| ラボネットワーク | Eindhoven University of Technology              | オランダ      | 大学研究・実験網。個別テーマは未公表         |
| ラボネットワーク | Henry Royce Institute                           | 英国        | 先端材料研究インフラ。個別テーマは未公表       |
| ラボネットワーク | hte                                             | ドイツ       | 高スループット実験能力。個別テーマは未公表      |
| ラボネットワーク | imec                                            | ベルギー      | 半導体実験インフラ、材料・AI、計算技術の知見    |
| ラボネットワーク | Technical University of Denmark                 | デンマーク     | 大学研究・実験網。個別テーマは未公表         |
| ラボネットワーク | Tyndall National Institute                      | アイルランド    | デバイス・CMOS等の材料モデリング知見       |
| ラボネットワーク | University of Amsterdam                         | オランダ      | 大学研究・実験網。個別テーマは未公表         |
| ラボネットワーク | VSParticle                                      | オランダ      | 実験ラボ網。個別テーマは未公表            |

| 区分       | 組織                 | 国・地域の便宜分類 | 公表された役割・貢献領域                                 |
|----------|--------------------|-----------|----------------------------------------------|
| データパートナー | CCDC               | 英国        | Cambridge Structural Databaseの構造化学データ        |
| データパートナー | ICSD／FIZ Karlsruhe | ドイツ       | Inorganic Crystal Structure Databaseの無機結晶データ |
| データパートナー | Wiley              | 米国        | 査読論文・材料科学コンテンツ                               |

個別役割のうち、NVIDIA、Meta、Applied Materials、A\*STAR、imec、Kemira、Wiley、CCDCなどは公式発表で具体的な貢献が説明されている。他方、名簿掲載のみで担当資源や研究テーマが明らかにされていない企業も多く、全参加企業が自社データを共同プールへ無条件提供する、または全成果を共有するとは解釈できない。CuspAIはパートナー別のプライベート環境を用意するとしており、データと成果の共有範囲は個別契約で分離される可能性が高い。後半は公開情報を基にした推論である。<sup>11)</sup>

## 国別分布

運営主体CuspAIを除く49組織を、本社・主要拠点ベースで分類すると次のようになる。

| 国・地域   | 組織数 | 構成比の概算 |
|--------|-----|--------|
| 米国     | 11  | 22.4%  |
| 日本     | 9   | 18.4%  |
| オランダ   | 7   | 14.3%  |
| 英国     | 5   | 10.2%  |
| ドイツ    | 4   | 8.2%   |
| シンガポール | 3   | 6.1%   |
| 韓国     | 3   | 6.1%   |
| デンマーク  | 3   | 6.1%   |
| ベルギー   | 2   | 4.1%   |
| フィンランド | 1   | 2.0%   |
| アイルランド | 1   | 2.0%   |
| 合計     | 49  | 100%   |

この分布には三つの特徴がある。第一に、AI・GPU・半導体装置を持つ米国勢が最大である。第二に、日本が9社と大きく、素材、計測、半導体メモリー、製造装置、通信という異なる層から参加している。第三に、オランダ、ベルギー、ドイツ、デンマーク、英国に研究機関・高スループット実験企業・データ機関が集ま

り、欧州が実験・知識基盤を厚く提供する構造である。これは、米国の計算資本、アジアの製造基盤、欧州の研究・データ基盤を接続する構成と評価できる。組織分類に基づく本報告上の分析である。 12

生成AI材料開発の技術基盤

想定される閉ループ

MIRAについてCuspAIは、ユーザーが目標物性を指定し、生成モデルが候補を作り、数百万候補を物性予測で選別し、利用可能な設備に合わせて合成経路を設計し、能力・地域・処理量に応じて実験先を割り当て、実験結果をモデルへ戻すとしている。シミュレーション層ではCuspAIとNVIDIA ALCHEMIが開発するオープンソースのkUPSと、MetaのUMAを利用する構想である。 13



代表的なアルゴリズム

| 技術層       | 代表手法                            | 材料開発での機能                  | 主な限界                          |
|-----------|---------------------------------|---------------------------|-------------------------------|
| 材料表現      | 結晶グラフ、分子グラフ、SMILES、三次元原子座標、周期セル | AIが組成・結合・空間構造を扱える形式に変換    | 表現方法によって対称性、欠陥、非晶質、混合状態が失われ得る |
| 生成モデル     | VAE、拡散モデル、自己回帰モデル、フローモデル        | 目標物性を満たす未知候補を逆設計          | 学習分布外の元素組合せや希少な配位構造に弱い        |
| 物性予測      | GNN、メッセージパッシング、等変ニューラルネットワーク    | 形成エネルギー、バンドギャップ、力、応力などを予測 | 訓練データの偏り、予測不確実性、境界付近の誤判定      |
| 原子間ポテンシャル | 汎用機械学習ポテンシャル、UMA等               | DFTより高速に原子間エネルギー・力を近似     | 反応、欠陥、極端条件に対する転用性の検証が必要       |
| 物理計算      | DFT、分子動力学、モンテカルロ法               | 安定性、電子状態、動力学、熱挙動を検証       | 計算コスト、近似汎関数、有限温度・乱れの表現        |
| 探索最適化     | ベイズ最適化、能動学習、強化学習、Pareto最適化      | 少ない実験で次候補を選別、多目的条件を両立     | 初期データが少ない場合の不安定性、局所解          |
| 合成計画      | 文献言語モデル、反応予測、経路探索               | 原料、温度、圧力、時間、工程の候補を提示      | 文献に成功例が偏り、失敗条件や暗黙知が不足         |
| 自律実験      | ロボティクス、インライン計測、XRD解析            | 合成・評価・再学習を高速反復            | 設備間差、校正、例外処理、安全停止、量産との差       |

GNoMEでは、結晶を原子ノードと原子間距離に基づくエッジで表し、GNNでエネルギーを予測し、有望候補をDFTで再計算して学習データへ戻す能動学習ループが用いられた。論文は従来データに対して安定と予測される構造を220万件見だし、そのうち38万1,000件が更新後の凸包上に残ったと報告している。また736構造が独立した実験データと一致した。ただし、220万件すべてが新製品候補または実験合成済みであるという意味ではない。 14

MatterGenは、原子種、原子座標、格子を同時に生成する拡散モデルで、目的物性や組成条件へ追加学習できる。従来モデルに比べて「安定・固有・新規」な構造を生成する確率が2倍超、局所エネルギー最小構造への近さが10倍超になったと報告され、一つの生成候補について目標物性から20%以内の値を実験で確認した。学習にはMaterials ProjectとAlexandriaを基に再計算した60万7,683構造が用いられた。 <sup>15</sup>

自律実験のA-Labは、計算材料データ、文献から学習した合成レシピ、ロボット、X線回折、能動学習を統合し、17日間で57目標中36材料を合成した。しかし、試した353レシピのうち目標物を生じたのは30%であり、成功試料にも副生成物を含む場合があった。これは、候補発見の高速化と、純度・再現性・合成条件の確立が別問題であることを示す。 <sup>16</sup>

必要なデータ

高性能な材料生成AIには、単なる論文PDFや分子式だけでなく、次のデータを結び付ける必要がある。

| データ群     | 具体例                                | 重要な品質条件                |
|----------|------------------------------------|------------------------|
| 構造データ    | 組成、結晶格子、原子座標、対称性、欠陥、分子配座           | 単位、温度、圧力、測定法、構造同定精度    |
| 計算データ    | エネルギー、力、応力、電子状態、DFT設定              | 汎関数、基底、収束条件、擬ポテンシャルの統一 |
| 物性データ    | 強度、耐熱性、誘電率、バンドギャップ、触媒活性            | 試験規格、試料形状、ばらつき、測定不確実性  |
| プロセスデータ  | 原料、配合、温度、時間、圧力、雰囲気、装置              | ロット、設備、操作履歴、校正状態       |
| 失敗データ    | 未反応、副生成物、低収率、装置異常                  | 成功データと同等の記録粒度          |
| 商業・制約データ | 原料価格、入手性、特許、毒性、CO <sub>2</sub> 、規制 | 更新日、地域差、ライセンス、根拠情報     |
| 来歴・権利情報  | データ作成者、契約、利用許諾、秘密区分                | 学習可否、再配布可否、成果モデルへの権利   |

FoundryがCCDC、ICSD/FIZ Karlsruhe、Wileyとの契約を重視するのは、材料AIの性能が大規模かつ信頼できる実験データに左右されるためである。CuspAIはCSDおよびICSDについてAI学習権を確保し、Wileyの材料科学コンテンツをライセンス利用すると説明している。一方、データベースの利用権が、生成物、埋め込み表現、派生モデル、顧客成果にどの範囲まで及ぶかは公開されていない。 <sup>17</sup>

成功事例の比較

| 事例        | 段階     | 公表成果                                  | エビデンス上の注意                  |
|-----------|--------|---------------------------------------|----------------------------|
| GNoME     | 計算探索   | 220万の安定候補、38万1,000の新たな凸包構造、736の独立実験一致 | 査読論文。合成可能性・用途・量産性は別途評価     |
| MatterGen | 条件付き生成 | 安定・新規候補率を大幅改善、一候補を合成し目標物性の20%以内       | 査読論文。ただし実験実証は限定的           |
| A-Lab     | 自律合成   | 17日で57目標中36を実現                        | 査読論文。353レシピの成功率は30%、純度問題あり |

| 事例            | 段階   | 公表成果                        | エビデンス上の注意                   |
|---------------|------|-----------------------------|-----------------------------|
| CuspAI-Kemira | 企業案件 | 300兆の分子構造空間を探索し、6か月で20候補を検証 | CuspAI発表。査読論文、候補構造、評価基準は未公開 |
| 三井化学-日立       | 企業実証 | 従来MI比で実験回数を約4分の1に低減         | 企業発表。対象データ・外部再現性は非公開        |

企業発表の数値は有望だが、査読論文と同等の再現性証拠として扱うべきではない。Foundryの評価では、探索した仮想候補数よりも、ブラインド条件での予測的中率、独立ラボでの再現率、スケールアップ成功率、規制・コスト条件を満たした候補数を重視する必要がある。 18

## 産業的影響とリスク評価

### 期待される産業・経済効果

| 領域        | 期待効果                                | 成立条件                 |
|-----------|-------------------------------------|----------------------|
| 研究開発期間    | 仮想候補の生成と高速選別により、初期探索を短縮             | 予測モデルと実験結果の継続的な較正    |
| 実験コスト     | 有望候補へ実験を集中し、無効な試作を削減                | 不確実性評価と能動学習が適切に機能    |
| 新事業成功率    | 既知材料の改良だけでなく、用途起点の逆設計が可能            | 顧客要求、コスト、規制を初期条件に含める |
| 半導体競争力    | レジスト、誘電体、封止、接着、熱材料、成膜・洗浄材料などの探索を高速化 | 装置・プロセス企業との共同評価      |
| 脱炭素・エネルギー | 触媒、炭素回収材、電池、太陽電池などの候補探索             | ライフサイクル排出量と資源制約の評価   |
| サプライチェーン  | 希少・高価・規制対象原料の代替材を設計                 | 調達可能性を目的関数へ明示的に組み込む  |
| 知識資産      | 実験結果が次のモデル精度を高めるデータフライホイル           | 標準化、データ来歴管理、権利確保     |
| 設備利用      | 各地域・各ラボの能力に応じて実験を配分                 | 試験法の相互校正、試料輸送、輸出管理対応 |

Foundryの最大の経済的可能性は、AIモデル単体ではなく、データ、計算、実験、製造知識を結ぶことによる「探索から検証までの待ち時間」の削減にある。材料研究では、計算候補を出すことより、合成条件の確立、純度確認、再現試験、顧客工程への適合に時間を要する。MIRAが公表通り実験設備への自動ルーティングまで実現すれば、計算部門と実験部門の分断を緩和できる。 13

競争優位はネットワーク効果から生じる可能性がある。成功・失敗を含む検証結果がモデルへ戻れば、参加回数が多い企業ほど、より精度の高い探索能力を得られる。しかし、基盤モデル、データ権、実験結果の集約をCuspAI側が握る場合、参加企業は自社R&Dを高速化する一方で、長期的にプラットフォームへ依存する可能性もある。どの改善が共通モデルへ入り、どの改善が企業専用モデルへ残るかが、価値配分を左右する。これは公開されたプライベートインスタンス構想から導かれる分析である。 19

## 技術的限界

第一の限界は、学習分布外への外挿である。モデルは既存データに近い組成・構造を補間する能力には優れていても、希少元素系、特殊配位、非平衡相、欠陥、界面、非晶質、高温高压条件などでは信頼性が下がり得る。

第二は、熱力学的安定性と合成可能性の差である。0ケルビンのDFT凸包で安定でも、有限温度のエントロピー、反応速度、揮発、前駆体反応、準安定相への捕捉により合成できない場合がある。Matbench Discoveryの評価研究も、小さな単位胞、動的安定性の欠落、安定・不安定境界付近の誤分類を重要な限界としている。<sup>20</sup>

第三は、候補から製品までの「ラストマイル」である。グラムスケールで得られた材料が、キログラム・トンスケールで同じ相、粒径、純度、分散性、耐久性を保つとは限らない。材料単体の物性が良くても、加工設備、接着対象、顧客工程、保管安定性、品質保証、廃棄工程に適合しなければ商業化できない。

## データ共有と知的財産

国際Foundryで最低限明確にすべき知財区分は、参加前に保有していた背景知財、プロジェクト中に生成された前景知財、共同改良されたモデル、生成候補、合成条件、失敗データ、顧客・用途情報である。

特に問題となるのは、モデルが複数社の機密データを直接開示しなくても、予測・生成結果に他社の知見を統計的に反映し得る点である。プライベート環境だけでは、モデル更新時の情報流出、勾配・埋め込みからの推測、メンバー脱退後のモデル利用、派生モデルの権利を自動的に解決しない。

推奨される契約条件には、データの学習可否と目的制限、共通モデルへの更新可否、成果物の独占期間、発明者・出願主体、第三者への再許諾、監査権、削除・脱退手順、サイバー事故時の通知、モデル出力による第三者特許侵害への責任分担が含まれる。

## 国際協力上の懸念

半導体、先端計算、触媒、エネルギー材料には経済安全保障上の重要性がある。したがって、データ、モデル重み、GPUアクセス、試料、合成装置、設計ノウハウが輸出管理、制裁、投資審査、技術移転規制の対象になり得る。ネットワーク参加国が友好国だけで構成されていても、子会社、クラウド配置、研究者の国籍、試料の移送先によって適用法は変わる。

さらに、Foundryが事実上の標準的材料探索基盤となった場合、特定のクラウド、GPU、データベース、モデル提供者への集中が進む。参加条件や成果アクセスに差があると、競争法上の情報交換、排他的取引、標準必須データへのアクセスといった論点も生じる可能性がある。

## 規制・倫理課題

AIシステムについては、日本の「AI事業者ガイドライン第1.2版」が2026年3月に公表され、AIの開発・提供・利用を通じたガバナンス、安全性、公平性、透明性、セキュリティなどの基本的行動を示している。米国NISTの生成AIプロファイルも、AI RMFに沿ったライフサイクル全体のリスク管理を求める。<sup>21</sup>

EU AI Actは2024年8月1日に発効し、汎用AIモデル関連義務は2025年8月2日から適用され、2026年8月2日からEU AI Officeと加盟国当局による本格的な実施・監督段階に入った。ただし、材料研究AIが直ちに「高リスクAI」に該当するとは限らず、用途、提供形態、規制製品への組み込み方によって判断される。<sup>22</sup>

生成された材料そのものには、AI規制とは別に、化学物質登録、毒性、安全データ、環境残留性、労働安全、輸送、製品別規制が適用される。EUではREACH登録や高懸念物質規制への対応が必要になり得る。AIが新規構造を生成したからといって、安全性試験や登録義務が免除されるわけではない。 <sup>23</sup>

倫理面では、性能だけを目的関数とすると、希少資源依存、難分解性、毒性、エネルギー多消費型の合成経路を選ぶ恐れがある。したがって、毒性、残留性、生物蓄積、原料由来、炭素排出量、リサイクル可能性、労働安全、供給国リスクを生成・選別の初期段階から多目的制約として扱うべきである。

## 今後の展望と推奨ロードマップ

以下は公式計画ではなく、公開情報と材料R&Dの技術成熟度を基にした三井化学向けの分析・提案である。

| 期間        | 推奨アクション                          | 主要成果物                                      | 判断指標                      |
|-----------|----------------------------------|--------------------------------------------|---------------------------|
| 短期：今後12か月 | Foundry参加ガバナンスを確立し、1〜2件の限定テーマを選定 | データ台帳、知財条件、セキュリティ設計、実験ベースライン               | 候補到達時間、予測適中率、実験数、データ準備コスト |
| 短期：今後12か月 | 既存手法との前向き比較試験を行う                 | AI使用群と従来MI・専門家群の比較                         | ブラインド評価での改善率              |
| 中期：1〜3年   | 社内ラボまたは参加ラボと閉ループ実験を接続            | 自動データ取得、再学習、再現性試験                          | 実験サイクル時間、独立再現率、失敗からの改善率   |
| 中期：1〜3年   | 性能以外の目的関数を統合                     | コスト、CO <sub>2</sub> 、毒性、調達リスク、特許性を含む多目的モデル | Pareto候補数、規制不適合による脱落率     |
| 中期：1〜3年   | AI for Materialsの社内中核組織を整備       | 材料科学、計算科学、データ、知財、安全、事業の横断チーム               | モデル内製率、テーマ再利用率、人材定着       |
| 長期：3〜7年   | 探索から量産までのデジタルスレッドを構築             | 研究、パイロット、工場、顧客評価をつなぐデータモデル                 | スケールアップ成功率、上市期間、粗利益       |
| 長期：3〜7年   | 顧客・サプライヤーとの共同逆設計へ拡張              | 用途要求を直接入力する共同開発環境                          | 顧客採用率、共同特許、供給契約           |
| 長期：3〜7年   | プラットフォーム依存を定期評価                  | 代替モデル、データ移行計画、退出手順                         | ベンダー集中度、移行時間、継続コスト        |

短期テーマは、三井化学が既に実験データと評価設備を持ち、12か月以内に合否判定できるものに限定すべきである。半導体プロセス用機能性材料、ポリマー配合、触媒、リサイクル樹脂などが候補となり得るが、Foundryで扱う具体的テーマは現時点で未公表であり、これらはあくまで推奨例である。

評価指標は「何件生成したか」では不十分である。最低限、次を一貫して測定する必要がある。

| 評価領域 | 推奨KPI           |
|------|-----------------|
| 探索効率 | 要求定義から検証候補までの日数 |

| 評価領域    | 推奨KPI                          |
|---------|--------------------------------|
| 実験効率    | 有効候補1件当たりの実験数・計算量・費用           |
| 予測精度    | 前向きブラインド試験での適中率、校正誤差           |
| 新規性     | 既知データとの距離、先行特許との差、専門家評価        |
| 合成可能性   | 合成成功率、純度、収率、反復再現率              |
| 移管性     | 別設備・別拠点での再現率                   |
| スケールアップ | グラムからキログラム以降への成功率              |
| 事業価値    | 特許、顧客評価、売上見込み、上市期間短縮           |
| 持続可能性   | CO <sub>2</sub> 、水、毒性、希少元素、循環性 |
| ガバナンス   | 来歴付きデータ比率、権利確認率、事故・例外件数        |

最も重要な戦略判断は、「共通モデルへ何を提供し、専用モデルに何を残すか」である。一般公開データや低機密の基礎実験結果は共通モデル改善へ活用できる一方、顧客別配合、製造条件、失敗原因、長期耐久性など競争力の源泉となるデータは、専用環境、フェデレーテッド学習、アクセス制御、差分プライバシー等の適用可能性を検討すべきである。

また、AI候補を研究者が単に採否判断するだけでなく、なぜ候補が選ばれたか、どの訓練データ領域から外れているか、どの計算・実験が不確実性を最も減らすかを表示する「人間参加型」の設計が必要である。A-Labの結果が示す通り、反応速度、揮発、副相、測定解釈などでは専門家の介入が引き続き重要である。 <sup>16</sup>

## 総合評価

AI Materials Foundryは、材料生成モデル、GPU、構造・文献データ、半導体・化学企業、高スループット実験設備を一つの運用系へまとめようとする、規模・構成ともに注目度の高い国際イニシアチブである。三井化学の参加は、同社が従来進めてきたMI、量子最適化、用途探索、製造プロセスAIを、国際的な生成・実験閉ループへ拡張する戦略的布石と評価できる。 <sup>24</sup>

ただし、現段階の発表は参加目的とネットワーク構想が中心であり、三井化学の具体的テーマ、費用、投入資源、成果指標、知財条件は未公表である。したがって、「新材料開発が直ちに短縮される」と結論付けるのは早い。今後の評価点は、①前向きな実験成功率、②独立ラボでの再現性、③量産・顧客工程への移管、④環境・規制制約を含む候補設計、⑤参加企業とCuspAI間のデータ・知財価値配分である。

## 参考となる一次情報

### 公式発表・企業資料

| 情報源                                                    | 内容・位置付け                                                    |
|--------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------|
| <a href="#">三井化学「AI Materials Foundry」に創設メンバーとして参画</a> | 三井化学の役割、目的、CTOコメントを確認する最重要の日本語一次情報。 <sup>25</sup>          |
| <a href="#">CuspAI Launches “AI Materials Foundry”</a> | 全参加組織、MIRA、地域ハブ、データ、計算、ラボ構成を示すFoundry側の一次発表。 <sup>12</sup> |

| 情報源                                        | 内容・位置付け                                 |
|--------------------------------------------|-----------------------------------------|
| <a href="#">EE Times Japan元記事</a>          | Yahoo!ニュース転載元。公開日時、記者名、記事本文の確<br>認用。 26 |
| <a href="#">三井化学・日立 MI実証</a>               | 有機材料開発における実験回数削減の先行事例。 27               |
| <a href="#">三井化学・シグマアイ 量子アニーリング<br/>実証</a> | 化合物探索・組成配合最適化の先行事例。 28                  |
| <a href="#">三井化学 IBM Watson・生成AI用途探索</a>   | 20以上の事業部門、100以上の用途発見という社内AI活用実<br>績。 29 |
| <a href="#">三井化学・blueqat 量子×AI</a>         | 特許データ、SimCSE、テンソルネットワークの活用例。<br>30      |
| <a href="#">三井化学・NEC等 再生プラスチックMI</a>       | MIを製造品質・粘度制御へ適用する事例。 31                 |

## 代表的な学術論文

| 論文                                                                                     | 主な示唆                                    |
|----------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------|
| <a href="#">MatterGen: A generative model for inorganic materials design, Nature</a>   | 拡散モデルによる条件付き無機材料生成と限定的な実験検証。 32         |
| <a href="#">Scaling deep learning for materials discovery, Nature</a>                  | GNoME、GNN、DFT、能動学習による大規模結晶探索。 33        |
| <a href="#">An autonomous laboratory for accelerated synthesis, Nature</a>             | ロボット、文献モデル、XRD、能動学習による自律合成と失敗要因。 16     |
| <a href="#">UMA: A Family of Universal Models for Atoms</a>                            | Meta FAIRが開発し、Foundryが活用予定の汎用原子モデル群。 34 |
| <a href="#">A framework to evaluate machine learning crystal stability predictions</a> | 結晶安定性モデルの偽陽性、評価指標、DFTワークフローの限界。 20      |

## ガバナンス・規制資料

| 資料                                            | 利用目的                               |
|-----------------------------------------------|------------------------------------|
| <a href="#">経済産業省「AI事業者ガイドライン第1.2版」</a>       | 日本におけるAI開発・提供・利用のガバナンス設計。 35       |
| <a href="#">NIST Generative AI Profile</a>    | 生成AIリスクをライフサイクル全体で管理する枠組み。 36      |
| <a href="#">European Commission—EU AI Act</a> | EUでのAI提供・利用時の適用時期、監督、汎用AI義務の確認。 22 |
| <a href="#">ECHA／REACH情報</a>                  | 新規化学物質の登録、危険有害性、規制状況の確認。 37        |

navlist AI Materials FoundryとCuspAIをめぐる直近報道 turn4news24,turn4news22

1 6 資金調達の傾向をサクッと把握！「BLITZ Portal Snapshot 〔農業・フード編〕 vol.2」 - Yahoo! JAPAN

<https://article.yahoo.co.jp/detail/29bdc1c70a85d8616f2cd288f5316f4740803d8d>

2 3 9 11 12 13 17 18 19 CuspAI Launches ‘AI Materials Foundry’ a Global Network to Accelerate Breakthrough Discoveries

<https://www.businesswire.com/news/home/20260716196996/en/CuspAI-Launches-AI-Materials-Foundry-a-Global-Network-to-Accelerate-Breakthrough-Discoveries>

4 8 24 25 三井化学、生成AIで新材料開発を加速する「AI Materials Foundry」に創設メンバーとして参画 | ニュースリリース | 三井化学株式会社

[https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2026/2026\\_0728/index.htm](https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2026/2026_0728/index.htm)

5 15 32 A generative model for inorganic materials design | Nature

<https://www.nature.com/articles/s41586-025-08628-5>

7 26 生成AIで新材料を開発する国際ネットワーク、三井化学が参画：CuspAIやNVIDIAらと協業 - EE Times Japan

<https://eetimes.itmedia.co.jp/ee/articles/2607/31/news036.html>

10 27 三井化学と日立が材料開発を高速化するMI技術の実用化に向けた実証試験を開始 | ニュースリリース | 三井化学株式会社

[https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2021/2021\\_0628\\_03/index.htm](https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2021/2021_0628_03/index.htm)

14 33 Scaling deep learning for materials discovery | Nature

<https://www.nature.com/articles/s41586-023-06735-9>

16 An autonomous laboratory for the accelerated synthesis of inorganic materials | Nature

<https://www.nature.com/articles/s41586-023-06734-w>

20 A framework to evaluate machine learning crystal stability predictions | Nature Machine Intelligence

<https://www.nature.com/articles/s42256-025-01055-1>

21 35 AI事業者ガイドライン

[https://www.meti.go.jp/shingikai/mono\\_info\\_service/ai\\_shakai\\_jisso/20260331\\_report.html?utm\\_source=chatgpt.com](https://www.meti.go.jp/shingikai/mono_info_service/ai_shakai_jisso/20260331_report.html?utm_source=chatgpt.com)

22 AI Act | Shaping Europe's digital future

<https://digital-strategy.ec.europa.eu/en/policies/regulatory-framework-ai>

23 QA: QnA Management

[https://qnapublic.echa.europa.eu/?utm\\_source=chatgpt.com](https://qnapublic.echa.europa.eu/?utm_source=chatgpt.com)

28 三井化学とシグマアイ社 量子アニーリング技術を使い化合物探索等の応用実証研究を開始 | ニュースリリース | 三井化学株式会社

[https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2021/2021\\_1223\\_01/index.htm](https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2021/2021_1223_01/index.htm)

29 三井化学、生成AIとIBM Watsonの融合による新規用途探索の高精度化と高速化の実用検証スタート | ニュースリリース | 三井化学株式会社

[https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2023/2023\\_0412/index.htm](https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2023/2023_0412/index.htm)

30 三井化学とblueqat社、量子×AI技術を新規用途発見に適用開始 | ニュースリリース | 三井化学株式会社

[https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2024/2024\\_0620\\_1/index.htm](https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2024/2024_0620_1/index.htm)

31 三井化学・萩原工業・丸喜産業・NEC、マテリアルズ・インフォマティクスの技術を活用し、再生プラスチックの品質安定化と製造工程の大幅な効率化に向けて協業を開始 | ニュースリリース | 三井化学株式会社

[https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2025/2025\\_1007/index.htm](https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2025/2025_1007/index.htm)

34 [2506.23971] UMA: A Family of Universal Models for Atoms

<https://arxiv.org/abs/2506.23971>

36 Artificial Intelligence Risk Management Framework: Generative Artificial Intelligence Profile | NIST

<https://www.nist.gov/publications/artificial-intelligence-risk-management-framework-generative-artificial-intelligence>

37 ECHA CHEM

<https://chem.echa.europa.eu/100.000.621/dossier-list/reach>