

# 三井化学の研究開発(R&D)における生成AI活用と次世代マテリアル創出戦略

Gemini 3.1 pro

## 1. 序論: 化学産業の構造的課題と「VISION 2030」におけるDX戦略

現代の化学・素材産業は、グローバル市場における競争環境の激化、製品ライフサイクルの極端な短期化、さらにはカーボンニュートラルやサーキュラーエコノミーに代表される持続可能性(サステナビリティ)への対応など、極めて複雑かつ多岐にわたる課題に直面している<sup>1</sup>。これまで化学業界を牽引してきた「より高いスペックの素材を開発し、顧客に物性表を提示して販売する」という伝統的なプロダクトアウト型のアプローチは、高度化・多様化する顧客ニーズを捉えきれなくなりつつある<sup>4</sup>。同時に、新しい機能性材料や化合物を創出するための研究開発(R&D)プロセスは、長年にわたり研究者の「経験と勘(暗黙知)」や「膨大な試行錯誤(総当たり実験)」に強く依存しており、開発にかかる時間的・コスト的制約がイノベーションのボトルネックとなっている<sup>5</sup>。

このような構造的な課題を打破するため、三井化学株式会社は長期経営計画「VISION 2030」を策定し、企業変革(コーポレート・トランスフォーメーション: CX)の要としてデジタルトランスフォーメーション(DX)を経営の基本戦略に位置づけている<sup>8</sup>。同社のDX戦略の特筆すべき点は、デジタル技術の導入を単なるバックオフィスの業務効率化やコスト削減のためのツールとして終わらせるのではなく、新製品開発におけるアイデア創出の加速、既存製品の新規用途開拓によるトップライン(売上高)の向上、そしてマーケットシェアの拡大という「攻めの経営戦略」へと直結させている点にある<sup>11</sup>。

この野心的な戦略の中核を担い、R&Dのパラダイムを根本から書き換えつつあるテクノロジーが「生成AI(Generative AI)」と「マテリアルズ・インフォマティクス(MI)」である。三井化学は、大規模言語モデル(LLM)の驚異的な自然言語処理能力やマルチモーダル解析能力と、自社の研究者や技術者が長年蓄積してきた高度な化学的専門知識(ドメインナレッジ)を深く融合させることで、知識の探索、仮説の生成、そして分子設計の各フェーズにおいて劇的なブレイクスルーを達成しつつある<sup>14</sup>。本レポートでは、三井化学のR&D領域における生成AIの活用実態について、独自のAIエージェント開発、外部のAIプラットフォーム(IBM Watson)との戦略的ハイブリッド運用、マテリアルズ・インフォマティクスによる分子創出、量子コンピューティングとの連携、そしてそれらを支えるデータ基盤と人材育成のエコシステム(AI Factory構想)という多角的な観点から包括的に分析・論考を展開する。

## 2. R&Dナレッジマネジメントの革新: マルチモーダル生成AIによる自律的文献解析

化学分野のR&Dにおいて最も初期段階に位置づけられ、かつ極めて重要なプロセスが「文献調査」と「特許分析」である。新規テーマの探索、競合技術のベンチマーク、あるいは自社の知財戦略を策

定する上で、過去の膨大な学術論文や特許文献から目的とする化合物に関する情報を精査し、抽出する作業は不可避である<sup>15</sup>。しかしながら、この領域には自然言語処理技術の単純な適用を阻む、化学産業特有の巨大な障壁が存在していた。

## 2.1 化学構造式解析における技術的障壁の突破

一般的な生成AIや自然言語処理モデルは、テキストデータの文脈理解や要約には卓越した性能を発揮する。しかし、化学論文や特許文書は単純なテキストだけで構成されているわけではない。そこには、画像として描画された「二次元の化学構造式」や「複雑な実験条件・結果を示すデータテーブル」が頻出する<sup>15</sup>。特に、高分子材料や複雑な骨格を持つ有機化合物の場合、専門家であっても構造式の画像を見ただけで直ちに正確な化合物名(IUPAC命名法に基づく名称など)を特定することは極めて困難である<sup>15</sup>。

従来、研究者は膨大なPDFや紙媒体の文献を一つひとつ視認しながら、構造式の画像とテキスト中の化合物名の対応関係を手作業で紐付け、さらにその化合物の「用途」「物性」「製造方法」「実験条件」といった関連データをエクセル等に手入力で整理していく必要があった<sup>15</sup>。これは、研究者の貴重な認知能力と時間を大量に消費する、極めて非生産的な作業の典型であった<sup>15</sup>。

この課題を根本から解決するため、三井化学は2026年3月、学術文献や研究報告書に記載された化学構造式から化合物に関する情報を自律的に調査・整理する、独自の「生成AIエージェントシステム」を開発し、社内での実証実験を開始したことを発表した<sup>15</sup>。このシステムは、これまで技術的に極めて困難とされてきた「AIによる化学構造式の画像読み取りと意味理解」を可能にした画期的なエージェントである<sup>21</sup>。

このAIエージェントは、画像処理モデルと大規模言語モデルを統合したマルチモーダル技術を基盤としている。文献中の画像情報(化学構造式)とテキスト情報を別個に処理するのではなく、これらを統合的に紐付けて解釈することで、対象となる化合物のプロファイルを自律的に判断・抽出する<sup>15</sup>。エージェントは化合物名の特定にとどまらず、文献の各所に散在している用途、物性、製造方法、実験条件などの多面的な関連情報を同時に取得する能力を持つ<sup>16</sup>。さらに、文献内の情報だけで不十分な場合には、必要に応じて外部の化学データベースやWeb検索情報を能動的に参照し、情報の欠落を補完することで、極めて包括的かつ網羅的な化合物情報のデータベースを自動構築する<sup>16</sup>。

## 2.2 特許チャットプラットフォームと高度検索・分析機能の実装

構造式の読み取りが可能なAIエージェントの本格運用(2026年度目標)に先立ち、三井化学は2024年度の段階ですでに、独自の生成AIチャットを搭載したプラットフォームを開発し、事業部やR&D部門での実証実験を展開している<sup>11</sup>。このプラットフォームは、化学分野特有の専門性の高い業務ニーズ、とりわけ特許データの膨大さと複雑さに対応するために設計されており、R&D現場のナレッジマネジメントを飛躍的に高度化する以下の主要機能を提供している。

主要機能名称	ユースケースと提供される価値	処理対象データの特徴
特許分析機能	膨大な特許データ群の中から、研究者の自然言語による質問に対して直接的な回答となる情報を瞬時に探索・抽出する。特定技術の動向分析、競合他社の知財戦略の俯瞰、および自社開発における技術的課題の特定に寄与する <sup>14</sup> 。	大規模な特許文書(テキスト、請求項、明細書)
新規用途検索機能	既存の特許データ群を横断的に解析し、特定の素材や技術が適用可能な「新しい用途候補」を抽出・提案する。アイデア出しを支援し、事業機会の拡大に向けた仮説構築を加速させる <sup>14</sup> 。	特許データ全体(用途関連キーワードや文脈の網羅的解析)
営業提案機能	自社が保有する内部データと、Web上の外部情報を統合的に解析し、市場調査、競合分析、新たな顧客リードの提案など、営業・マーケティング活動に直結する情報を抽出する <sup>14</sup> 。	テキストデータに加え、実験データの表(テーブル)や化学構造式など、多様なフォーマットの統合解析 <sup>11</sup>

これらの機能は、汎用的なチャットボットとは異なり、Retrieval-Augmented Generation(RAG: 検索拡張生成)技術をベースに、化学・素材領域のドメイン知識に特化したチューニングが施されていると推察される。ユーザーの意図を正確に解釈し、信頼性の高い根拠(ソース)に基づいた回答を生成することで、ハルシネーション(もっともらしい嘘)のリスクを低減しながら業務効率を引き上げている。

## 2.3 調査時間の80%削減と研究者の創造性拡張

上述した独自の生成AIエージェントおよび特許チャットプラットフォームの導入は、三井化学のR&D現場に劇的な定量的成果をもたらしている。初期検証および実証実験の結果、研究者が日常的に行っている文献調査や特許探索にかかる時間が、従来比で「80%以上削減」されたことが明確に確認されている<sup>14</sup>。具体的には、複雑な構造を持つ物質に関する詳細な情報抽出において、従来の手作業では約1ヵ月を要していた調査が、AIエージェントの自律的処理によりわずか1日程度にまで短縮された事例も報告されている<sup>16</sup>。さらに、これらのシステムは研究者のニーズに合わせて調査結果

を整理されたレポート形式で出力する機能も備えており、後続の高度なデータ分析や、経営・事業部門における迅速な意思決定プロセスを強力に支援している<sup>16</sup>。

この「80%の調査時間削減」という成果は、単なる業務の効率化や残業時間の削減(コストカット)という矮小な枠組みで捉えるべきではない。AIによって情報の「検索・抽出・整理」という単純かつ反復的な労働から解放された研究者は、その浮いた膨大な時間と認知リソースを、人間でなければ不可能な「創造的な仮説構築」「前例のない複雑な実験計画の立案」、そして「新たなイノベーションの探求」という本来の高度な研究活動に集中的に振り向けることが可能になった<sup>15</sup>。これは、R&Dのワークフローが本質的にアップグレードされ、人間とAIが協働することで知的能力を拡張(オーグメント)する新たなパラダイムへと移行したことを意味している。

### 3. ビジネスモデルの転換: エンタープライズAIとLLMのハイブリッドによる新規用途探索

化学業界において、企業が中長期的な成長を持続するためには、画期的な新素材をゼロから生み出すことと同等以上に、すでに自社が保有・製造している既存素材や中間体の「新しい使い道(新規用途)」を見出し、新たな市場を開拓することが極めて重要である。莫大な設備投資と長いリードタイムを伴う新物質の開発に比べ、既存製品の新規用途開拓は相対的にリスクが低く、迅速なトップライターの成長とマーケットシェアの拡大を見込める戦略だからである。三井化学は、この新規用途探索のプロセスにAIを組み込むことで、ビジネスモデルそのもののトランスフォーメーションを図っている。

#### 3.1 「素材提供型」から「プロアクティブなソリューション提案型」への進化

歴史的に見て、化学素材メーカーのビジネスは受動的(リアクティブ)な性質が強かった。川下産業である自動車メーカーや電子部品メーカーから「このようなスペックや機能を持つ素材が欲しい」という具体的な要望(要求仕様)が提示され、それに対して化学メーカーの研究開発部門が応え、営業担当者が物性表を持参して素材を供給する、という「素材提供型」のビジネスモデルである<sup>4</sup>。

しかし、三井化学の常務執行役員であり最高デジタル責任者(CDO)を務める三瓶雅夫氏は、この伝統的なアプローチからの脱却を提唱している。同社が目指すのは、顧客自身でさえまだ言語化できていない潜在的な課題や、社会構造の変化に伴う将来の需要をデータドリブンで先読みし、素材の新たな活用法を能動的(プロアクティブ)に提案していく「ソリューション型」ビジネスへの転換である<sup>24</sup>。この能動的な提案営業を支える「探索者(エクスプローラー)」として位置づけられているのが、膨大なデータを処理するAIシステムである<sup>24</sup>。

#### 3.2 IBM WatsonとGPTの戦略的融合アーキテクチャ

このビジョンを実現するため、三井化学は2022年6月から全社規模でエンタープライズAI基盤「IBM Watson」を実装し、製品の新規用途探索プロジェクトを開始した<sup>12</sup>。このシステムでは、ニュース、SNSの投稿、特許文献など、社外に存在する500万件以上の非構造化ビッグデータをAIに入力し、自社製品の機能特性に関連する固有の「辞書」と照らし合わせることで、潜在的な市場ニーズや用途候補を効率的に分析・抽出する<sup>12</sup>。

初期の運用から、AIは人間の先入観や既存の知識の枠を超える洞察を提示してきた。例えば、SNS上の投稿を分析する中で「地方のローカル鉄道の車両内がかび臭い」というニッチな生活者の不満が多数抽出された。化学メーカーの研究者や営業担当者が日常業務の中で直接結びつけることが難しいこの事象に対し、AIは三井化学が保有する「防カビ剤」の適用可能性を見出し、それが結果として鉄道会社向けの新たな営業活動とソリューション提供へと繋がったという実績がある<sup>25</sup>。

2023年に入り、生成AI技術が飛躍的な進化を遂げたことを受け、三井化学はこの探索基盤をさらに一段階引き上げる決断を下した。それが、既存のIBM Watsonに、Microsoft Azure OpenAIが提供する大規模言語モデル「GPT」を掛け合わせる（融合させる）というハイブリッド・アーキテクチャの実用検証である<sup>13</sup>。この融合において、両者の役割分担は極めて戦略的に設計されている。

プラットフォーム	システムアーキテクチャ上の役割と得意領域	新規用途探索プロセスへの具体的寄与
<b>IBM Watson</b>	エンタープライズAI分析基盤・知識処理エンジン	三井化学固有の製品辞書をベースとして、特許、ニュース、SNS等の膨大な外部ビッグデータをセキュアかつ網羅的に検索し、情報同士の複雑な関係性をネットワークとして可視化する（知識グラフの構築） <sup>13</sup> 。
<b>GPT (LLM)</b>	自然言語インターフェース・高度推論レイヤー	Watsonの分析能力を補完・拡張する機能群を提供する。大量のテキストからの文脈を捉えた意味抽出、情報の要約、文脈に応じた高度な翻訳機能、および対話型インターフェースによるユーザーからの指示（プロンプト）の洗練化 <sup>13</sup> 。

このハイブリッド・アプローチは、AIモデルの特性を活かした適材適所の配置であり、特定のモデルに過度に依存しない堅牢なシステム設計を示している。

# 生成AI×IBM Watson融合による新規用途探索のパフォーマンス向上



GPTの自然言語処理能力をWatsonの分析基盤に組み込むことで、プロセスの各フェーズにおいて劇的な効率化とアウトプットの倍増を達成した。

Data sources: [三井化学](#), [Mitsui Chemicals \(EN\)](#), [Mitsui Chemicals Group](#)

## 3.3 197の新規市場機会創出がもたらすトップライン拡大のインパクト

GPTとIBM Watsonの融合は、新規用途探索プロセスに目覚ましい改善効果をもたらし、その成果は実証実験を通じて明確な定量データとして示されている。主な改善点は以下の3つに集約される<sup>13</sup>。

第一に、探索の核となる「製品辞書」の作成プロセスにおける飛躍的な効率化である。従来、分析者が手作業で技術資料、論文、ウェブサイト等から情報を収集して辞書の素案を作成していたが、このプロセスにGPTのチャットボット機能を導入し、対話形式で素案を生成する手法に切り替えた。さらに、英語辞書の構築においてはGPTの高度な文脈依存翻訳機能を活用した。その結果、わずか4か月間で作成される辞書のボリュームが、従来手法と比較して「約10倍」に激増した<sup>13</sup>。辞書の網羅性はAIの分析精度の直結するため、この10倍のデータ拡充は極めて重要である。

第二に、ノイズを含むビッグデータからのキーワード抽出効率の向上である。GPTが持つ高度な自然言語理解と抽出機能を活用することで、データの中に明確に「用途」としての記載がある情報の「約70%」を自動で抽出することが可能となった<sup>13</sup>。従来は、Watsonが提示した膨大な用途候補キーワードを人間の目で一つひとつ確認し、ノイズを排除する作業に多大な負荷がかかっていたが、この

工程が自動化されたことで、抽出作業の全体的な効率が「3倍」に向上した<sup>13</sup>。

そして第三に、これら「辞書ボリュームの10倍増」と「抽出作業効率の3倍向上」が相乗効果を生み出した結果、最終的に発見・特定される有望な「新規用途の数」が、単独のシステム運用時に比べて「約2倍(倍増)」するという劇的なアウトプットの向上を達成したのである<sup>13</sup>。

この高度化されたシステムを通じて、これまでに三井化学では「197個」もの新しい用途や市場機会が発見され、それらは順次、実際の事業化パイプラインに載せられ、マネタイズに向けた検討が進められている<sup>24</sup>。例えば、もともと「食品包材」として開発・使用されていた材料が、全く異なる業界である「電子部品関連」の用途にも高い適合性を持つといった発見がなされており、これは人間の認知バイアスを排除し、情報同士の隠れた繋がりを知識グラフとして提示するAIならではの成果である<sup>24</sup>。

三瓶CDOが強調するように、この取り組みにおいて生成AIはもはや単なる効率化ツールではない。AIは、企業のトップラインを伸ばし、事業ポートフォリオの変革を直接的に牽引する強力な「探索者」として機能しているのである<sup>24</sup>。三井化学は今後、この生成AIとWatsonの連携システムを、SFA(営業支援システム)やマーケティング自動化(MA)ツール、さらには後述するマテリアルズ・インフォマティクス(MI)基盤と統合し、R&D部門から事業・営業部門に至るデータの流れをシームレスに結合することで、市場開拓から製品開発までのサイクルタイムを極限まで加速させる構想を描いている<sup>25</sup>。

## 4. マテリアルズ・インフォマティクス(MI)のパラダイムシフト： 生成モデルと自律的実験

用途探索と並び、三井化学のR&D戦略のもう一つの太い柱が「マテリアルズ・インフォマティクス(MI)」である。MIとは、情報科学(インフォマティクス)、機械学習、ビッグデータ解析の手法を用いて、新素材の探索や既存材料の性能向上を効率的に行うアプローチである<sup>5</sup>。同社は「マテリアルズ・インフォマティクス開発推進室」を設置し、MIを一部の先進的な研究グループによる試験的な取り組みにとどめず、競合他社に対する競争優位を決定づける全社的な「経営インフラ」として展開している<sup>34</sup>。

### 4.1 順問題から逆問題への移行とAIによる新規分子デザイン

MIの黎明期において主流であったアプローチは、既知の分子構造や組成比のデータを入力し、その結果として得られる物性(耐熱性、強度、導電性など)を予測するモデルを構築することであった。これは「順問題」の解決、あるいはバーチャルスクリーニングと呼ばれる手法である<sup>35</sup>。国立研究開発法人物質・材料研究機構(NIMS)や他の化学メーカーとの水平連携(化学マテリアルズオープンプラットフォーム)においても、材料の構造情報から強度や脆さを少ない実験回数で高精度に予測する機械学習技術の開発が進められてきた<sup>36</sup>。

しかし、順問題のアプローチには決定的な限界が存在する。それは、探索可能な化学空間(Chemical Space)が、「人間が事前に考案して入力した分子」、あるいは「既存のデータベースに存在する化合物のリスト」の枠内に限定されてしまうことである<sup>35</sup>。真のイノベーションを起こすためには、これまで誰も想像すらしなかった全く新しい分子骨格を発見する必要がある。

ここでゲームチェンジャーとなったのが、LLMに代表される生成AI技術のMIへの応用である。生成AIは、従来のアプローチを逆転させる「逆問題 (Inverse Design)」の解決を可能にしつつある。すなわち、「目的とする物性や機能 (例: 特定の吸水率と耐熱性を兼ね備えた特性)」をプロンプトとしてAIに入力し、その条件を満たすための最適な分子構造や配合レシピを、AI自身にゼロから「生成 (デザイン)」させるというアプローチである<sup>6</sup>。

化学物質をコンピュータに理解させるため、研究者たちはSMILES (Simplified Molecular Input Line Entry System) のようなテキストベースの文字列表現や、原子をノード・結合をエッジとするグラフ構造データを用いている<sup>35</sup>。これにより、LLMは自然言語を用いて流暢な文章を生成するのと同じアルゴリズム的メカニズムを用いて、文法的に正しく (= 化学的に成立し得る)、かつ目的の条件に合致した新しい化合物の記述を生成することができるのである<sup>35</sup>。

三井化学のMI開発推進室で主幹研究員を務め、この分野を牽引する向田志保氏らは、強化学習、GAN (Generative Adversarial Networks: 敵対的生成ネットワーク)、VAE (Variational Autoencoder: 変分オートエンコーダ) といった高度なAI分子生成モデルを用いた新材料開発の研究を積極的に推進している<sup>42</sup>。ただし、生成AIを用いた分子設計には実務的な課題も残されている。AIはしばしば、コンピュータ上 (in silico) では理想的な物性を示すものの、結合の角度が不自然であったり、実際の合成プロセスが極めて複雑・高コストであったりする「合成困難な化合物」を提案してしまうことがある<sup>35</sup>。向田氏らの研究グループは、このような生成構造の局所化問題や合成可能性の課題に対し、合成経路 (レトロシンセシス) の妥当性までを包括的に評価し、現実的に製造可能な分子デザインを導き出すためのモデル最適化に取り組んでおり、MIの実社会実装に向けた重要な知見を蓄積している<sup>35</sup>。

## 4.2 LLMエージェントを核とした自律的材料探索とクローズドループの実現

三井化学におけるMIと生成AIの連携は、単なる「分子の形状デザイン」にとどまらない。最新の材料科学のパラダイムにおいて、LLMは材料探索のプロセス全体を統括する「自律的実験エージェント」の頭脳としての役割を期待されている<sup>34</sup>。

R&Dプロセスにおいては、実験計画の立案と実行がコストの大部分を占める。LLMを組み込んだエージェントは、社内の実験記録、過去の論文、特許文献などの非構造化データからRAG技術を用いて「どのような条件が有望か」「過去にどのような失敗があったか」というドメイン知識を抽出し、自律的に仮説を生成する<sup>6</sup>。そして、ベイズ最適化などの実験計画法アルゴリズムと連携し、「次にどのパラメータ (温度、圧力、触媒の種類、配合比率) で実験を行うべきか」という最適なアクションを提案し続ける<sup>34</sup>。

このアプローチの有効性はすでに実証され始めている。三井化学は日立製作所と協業し、AI技術を活用したMI技術を実際の有機材料開発に適用する実証試験を行っている。過去の材料開発データを基に、AIが特徴量を抽出し、性能に寄与する要素を特定する手法 (主成分分析など) を導入した結果、従来の手法と比較して、同等以上の高性能な新材料を開発するために必要な「実験の試行回数を4分の1にまで削減」できることが確認された<sup>6</sup>。

試行回数が4分の1に減少するという事は、実験や試作にかかる莫大なリソース、時間、およびコス

トが劇的に削減されることを意味する<sup>45</sup>。将来的に、AIエージェントがロボティクス技術(自動合成装置や評価装置)と連携し、「材料候補の選定 → シミュレーション・実験の実行 → 結果の解析 → 次の予測の最適化」という一連のサイクル(クローズドループ)を人間の介入なしに自律的に回し続ける「完全自律型研究システム」の構築が視野に入っている<sup>6</sup>。三井化学は、この化学R&Dの次なるフロンティアの開拓に向けて着実に布石を打っている。

## 5. 次世代計算基盤への布石: 量子コンピューティングと自然言語処理技術の融合

生成AIやMLによって探索すべき「化学空間(Chemical Space)」の広がり、事実上無限に近い。分子の組み合わせや配合のバリエーションは天文学的な数にのぼり、そのすべてを既存の古典コンピュータ(スーパーコンピュータを含む)で計算・シミュレーションすることは、計算資源の物理的な限界から不可能である<sup>48</sup>。この「組み合わせ爆発」という壁を突破するため、三井化学は生成AIアルゴリズムの開発と並行して、究極の並列計算能力を持つとされる「量子コンピューティング」のR&D適用に向けた中長期的な技術開発にも着手している。

### 5.1 特許データとSimCSEモデルによる高精度な文書ベクトル表現の獲得

三井化学は、量子コンピュータのソフトウェア開発を手掛けるスタートアップ企業であるblueqat社と協業し、高度な自然言語処理モデルと量子技術を掛け合わせた先駆的なプロジェクトを展開している<sup>49</sup>。

このプロジェクトにおいて両社は、特許データベースを学習データとして用い、「SimCSE(Simple Contrastive Learning of Sentence Embeddings)」と呼ばれる自然言語処理モデルの事前学習を行った<sup>50</sup>。SimCSEは、単語や文章が持つ複雑な意味合いを多次元の数値配列(ベクトル)へと変換し、異なる文書間の意味的な類似度を高精度に算出することに秀でたモデルである<sup>50</sup>。この技術の特許文書に適用することで、特定の化学技術や化合物の用途に関する情報を、極めて精緻な空間座標上にマッピングし、AIによる高度な情報検索や質問応答システムの基盤を構築している<sup>50</sup>。

### 5.2 テンソルネットワーク技術による量子回路互換性と組み合わせ爆発への対応

この取り組みにおける最大の技術的特長は、自然言語処理の学習モデルを単に古典コンピュータ上で動かすにとどまらず、「テンソルネットワーク」と呼ばれる量子物理学に由来する計算手法を用いて、大規模な機械学習モデルを圧縮・最適化している点にある<sup>48</sup>。

テンソルネットワークによって圧縮された機械学習モデルは、計算リソースの節約に繋がるだけでなく、将来的にハードウェアとしての量子コンピュータが実用化された際に、その「量子回路上で直接実行可能となる互換性」を備えている<sup>49</sup>。すなわち、三井化学は現在の古典コンピュータの枠組みの中でAIモデルを構築しながらも、次世代の計算基盤である量子コンピュータへのスムーズな移行を見据えたアーキテクチャ設計をすでに行っているのである。大規模言語モデルなどの生成AI技術と、組み合わせ最適化問題に圧倒的な優位性を持つ量子技術を融合させることは、新材料の探索や複雑

な化学反応のシミュレーションにおいて、他社に対する決定的な技術的優位性を確立するための重要な戦略的投資であると言える<sup>49</sup>。

## 6. 変革を支える組織・データ基盤とAI Factory構想

どれほど高度な生成AIモデルや量子アルゴリズムを導入したとしても、AIが学習・参照するためのクリーンな「データ」と、テクノロジーをビジネスの文脈で正しく使いこなす「人材」と「組織カルチャー」が欠如していれば、投資に見合う経営インパクトを生み出すことはできない。三井化学の三瓶CDOは、AIの導入を一過性のブームや単発の「PoC(概念実証)の乱立」で終わらせず、全社的なビジネス変革へと昇華させるための強固なエコシステムとして、デロイトトーマツグループ等と連携しながら「AI Factory構想」を推進している<sup>31</sup>。

### 6.1 「新築の発想」による基幹システムの刷新と統合データ基盤の確立

AIは「整ったデータ」を与えられなければ、有意な予測や生成を行うことはできない<sup>34</sup>。歴史の長い化学メーカーの内部には、過去数十年にわたって蓄積された実験履歴、複雑な配合データ、プラントの製法ログ、製品の評価結果といった膨大な知的資産が眠っている。しかし、これらのデータは往々にして事業部や研究室ごとに分断(サイロ化)され、フォーマットも統一されていない状態にあった<sup>34</sup>。

この課題に対し、三井化学は20年以上前に導入された既存の基幹システム(ERP)を、既存システムの継ぎ接ぎによる「増築」や「改築(パッチ当て)」ではなく、「新築」という根本的な発想で刷新する強力な経営判断を下した<sup>31</sup>。業務プロセスをゼロベースで見直し、社内各所に散在するデータを標準化して連携・集約し、組織全体で横断的に可視化・利用できる「統合データ基盤」の構築を進めている<sup>31</sup>。

この強固なデータ基盤の存在こそが、生成AI(特許チャットや用途探索AI)や自律的実験エージェントが、ハルシネーションを起こさずに正確でインパクトのある出力(グラウンディング)を行うための生命線となる<sup>31</sup>。長年にわたる実験結果や失敗データを「AIが読み込める形式」に整備すること自体が、後発企業が容易には模倣できない巨大な参入障壁となり、三井化学の持続的な競争優位の源泉となっているのである<sup>31</sup>。

### 6.2 現場知見とデジタル技術を融合させるリスキリング戦略と人材育成ロードマップ

DXを推進し、データ基盤を活用する主体はあくまで「人」である。三井化学のAI人材戦略の特長は、外部から高給でデータサイエンティストを多数採用するアプローチに依存するのではなく、社内の「化学の専門知(ドメイン知識・現場知見)」をすでに有している既存社員を対象とした大規模な「リスキリング(学び直し)」を徹底している点にある<sup>31</sup>。化学特有の複雑な現象や顧客の真のニーズを理解している人材がデジタル技術を習得することで初めて、AIからの出力を「実ビジネスの文脈」で正しく評価し、真のソリューションへと昇華させることができるからである<sup>31</sup>。

同社は「VISION 2030」の非財務指標(KPI)の一つとしてデジタル人材の育成を掲げ、「2025年度末までに社内のデータサイエンティスト数を165名まで増やす」という明確な目標を設定している<sup>8</sup>。この

目標達成のため、NECやアビームコンサルティングといった外部パートナーと協働し、一般的なIT研修ではない「化学業界の課題解決に特化した独自の研修プログラム」を開発した<sup>58</sup>。

人材育成レベル	習得スキル・役割の定義	全社的な育成目標と進捗
レベル 0~1(基礎層)	AI・データ活用のリテラシー習得。デジタルツールを用いた日常業務の効率化と、データに基づく思考法(Data Driven思考)の理解。	全社員(約1万8000人)への教育を実施。すでに役員を含む1万人以上が入門課程を受講済み <sup>8</sup> 。
レベル 2~3(専門層)	化学プラントの複雑なデータ解析、予測モデルの構築、MI基盤の運用、高度なアルゴリズムの実装を担うデータサイエンティスト。	2025年度までに165名の実践的な専門人材を育成。国内の主要5工場すべてに高度専門人材を配置する計画を推進中 <sup>8</sup> 。

### 6.3 実証実験(PoC)からの脱却と自律的なデータ駆動型カルチャーの醸成

インフラと人材の整備が両輪となって進む中で、組織の意思決定のあり方やカルチャーそのものが変容しつつある。AWS上で生成AI基盤を実装した三井化学(および三井グループ全体)の事例において強調されているように、真のトランスフォーメーションとは、単なるツールの導入ではなく「複雑なルールベースのシステムから、データから自律的に学習する直感的なソリューションへの移行」であり、それに伴う「従業員のマインドセットの根本的な変容」である<sup>62</sup>。

経営層からトップダウンでAIツールを押し付けるのではなく、研修を通じてリテラシーを高めた現場のエンドユーザー自身が、AIの利便性を理解し、主体的に業務プロセスを改善していく「自律的な(self-driven)活用カルチャー」の醸成が行われている<sup>62</sup>。同時に、R&D部門、事業部門、そしてデジタル推進部門の間での人材交流が活発化しており、ビジネス課題とテクノロジーの橋渡し役を担う人材が育っている<sup>31</sup>。これにより、AIの活用方針が現場の局所的な改善にとどまらず、経営陣の戦略的意思決定レベルにまで引き上げられ、グローバルな競争を勝ち抜くための「データ駆動型組織(Data Driven Organization)」への脱皮が着実に進展しているのである。

## 7. 結論: 生成AIが再定義する化学産業の競争優位性

本稿における分析を通じて、三井化学における研究開発(R&D)領域への生成AIの導入は、もはや様子見の「実証(PoC)」フェーズを完全に脱却し、トップラインの成長とビジネスモデルの抜本的改革をもたらす「実戦」のフェーズへと深く浸透していることが明らかとなった。その変革のインパクトは以下の3点に集約される。

1. 暗黙知のデジタル資産化と創造性の解放: これまで専門家の視覚的解釈に依存していた化学構造式を読み解く「マルチモーダルAIエージェント」の開発は、紙やPDFの中に死蔵されていた

過去の膨大な知見を、機械可読で再利用可能な構造化データへと変換する歴史的なブレイクスルーである。これにより、文献調査にかかる時間的コストは80%削減され、研究者は単純作業から解放され、より高付加価値な仮説構築や創造的業務に専念できる体制が確立された。

2. 「探索者(AI)」によるビジネスモデルの再定義: IBM Watsonの分析基盤とGPTの自然言語処理能力の融合によりもたらされた「197件の新規用途発見」は、化学業界の伝統的な「作ってから売り先を探す」「言われたものを作る」という受動的なモデルを破壊した。データドリブンで市場の潜在ニーズを先読みし、新たな市場機会を創出するプロアクティブなソリューションプロバイダーへの転換は、企業価値(PBR)の向上に直結する戦略的成果である。
3. 自律的イノベーション基盤の確立: マテリアルズ・インフォマティクスにおける生成AIを用いた「逆問題的分子設計」、そして将来を見据えた量子コンピューティング(テンソルネットワーク技術)との融合研究は、無限の化学空間から最適解を最短距離で導き出すための次世代R&D基盤である。これを根本で支える「新築の」統合データインフラと、リスキリングによって育成された「化学×デジタル」人材の厚みこそが、三井化学の他社が容易に追従できない強固な競争優位性を形成している。

総括として、三井化学の生成AI戦略は、単一のテクノロジーをスポットで導入するといった局所的な最適化策ではない。VISION 2030という明確な長期経営戦略のもと、データ基盤の再構築、人材のリスキリング、そして組織カルチャーの変革という「コーポレート・トランスフォーメーション(CX)」と緊密に連動して推し進められる包括的かつダイナミックなシステムである。化学という高度に専門的で物理的制約を伴うドメインにおいて、生成AIがいかんにして人間の知的能力を拡張(オーグメント)し、産業のあり方そのものを再定義し得るのか。三井化学の取り組みは、グローバルな素材産業におけるデジタル変革の最良のベストプラクティス(標準モデル)の一つとして評価されるべきである。2025年度の各種実証実験の完了、および2026年度に予定されているAIエージェントの本格稼働に向け、同社が化学業界におけるAI駆動型R&Dのフロンティアをどのように切り拓き続けるのか、その動向は極めて注目される。

## 引用文献

1. 三井化学の知財戦略と分析—サステナビリティ時代の 基盤としての、3月 9, 2026にアクセス、  
<https://www.techno-producer.com/wp-content/uploads/2025/10/%E4%B8%89%E4%BA%95%E5%8C%96%E5%AD%A6%E3%81%AE%E7%9F%A5%E8%B2%A1%E6%88%A6%E7%95%A5.pdf>
2. マテリアルズインフォマティクスと量子コンピュータによる材料, 3月 9, 2026にアクセス、  
<https://pub-mediabox-storage.rxweb-prd.com/exhibitor/products/exh-ecb1be12-9f80-4a76-b4bb-80e1fcb985ea/product-documents/pro-338230d9-3b70-4dfc-b920-447e2a82dd57/cf044877-856f-4e55-becd-f21776225946.pdf>
3. 三井化学レポート 2017 - Mitsui Chemicals, 3月 9, 2026にアクセス、  
[https://jp.mitsuichemicals.com/content/dam/mitsuichemicals/sites/mci/documents/jp/ir/library/ar/pdf/ar17\\_all\\_jp.pdf](https://jp.mitsuichemicals.com/content/dam/mitsuichemicals/sites/mci/documents/jp/ir/library/ar/pdf/ar17_all_jp.pdf)
4. 三井化学レポート 2018 - Mitsui Chemicals, 3月 9, 2026にアクセス、  
[https://jp.mitsuichemicals.com/content/dam/mitsuichemicals/sites/mci/documents/jp/ir/library/ar/pdf/ar18\\_all\\_jp.pdf](https://jp.mitsuichemicals.com/content/dam/mitsuichemicals/sites/mci/documents/jp/ir/library/ar/pdf/ar18_all_jp.pdf)
5. マテリアルズ・インフォマティクス(MI)が切り拓く新規事業開発, 3月 9, 2026にアクセス、

- <https://bizdev.reinforz.co.jp/4649>
6. マテリアルズ・インフォマティクスの発展と今後の展望, 3月9, 2026にアクセス、  
[https://www.jst.go.jp/crds/sympo/20220325/pdf/20220405\\_01.pdf](https://www.jst.go.jp/crds/sympo/20220325/pdf/20220405_01.pdf)
  7. New generative AI method could make drug discovery faster, 3月9, 2026にアクセス、  
<https://www.drugtargetreview.com/news/192515/new-generative-ai-method-could-make-drug-discovery-faster/>
  8. 三井化学、4段階のDX人材育成プランを発表、事業モデル転換策の、3月9, 2026にアクセス、<https://www.imagazine.co.jp/mitsui-chemical-dx/>
  9. 三井化学、DXによる経営判断高度化システム基盤の構築開始, 3月9, 2026にアクセス、[https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2025/2025\\_0819/index.htm](https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2025/2025_0819/index.htm)
  10. 企業変革に向けてDX人材育成計画と研修コンテンツを策定。全社員, 3月9, 2026にアクセス、[https://www.abeam.com/eu/ja/case\\_study/cs140/](https://www.abeam.com/eu/ja/case_study/cs140/)
  11. 三井化学、生成AIを活用した特許チャットを開発 - Mitsui Chemicals, 3月9, 2026にアクセス、[https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2024/2024\\_1225/index.htm](https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2024/2024_1225/index.htm)
  12. 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, 3月9, 2026にアクセス、<https://prtimes.jp/main/html/rd/p/000000359.000046783.html>
  13. 生成AI/GPT活用により、新規用途の発見数が倍増 | ニュースリリース ..., 3月9, 2026にアクセス、[https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2023/2023\\_0913/index.htm](https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2023/2023_0913/index.htm)
  14. Mitsui Chemicals Develops Patent Chat Platform Using Generative AI, 3月9, 2026にアクセス、[https://jp.mitsuichemicals.com/en/release/2024/2024\\_1225/index.htm](https://jp.mitsuichemicals.com/en/release/2024/2024_1225/index.htm)
  15. 三井化学、研究開発の文献調査を革新する生成AIエージェントを開発\_ ニュースリリース\_ 三井化学株式会社.pdf
  16. Mitsui Chemicals Develops AI Agent to Revolutionize Literature, 3月9, 2026にアクセス、[https://jp.mitsuichemicals.com/en/release/2026/2026\\_0302/index.htm](https://jp.mitsuichemicals.com/en/release/2026/2026_0302/index.htm)
  17. 三井化学、研究開発の文献調査を革新する生成AIエージェントを開発, 3月9, 2026にアクセス、[https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2026/2026\\_0302/index.htm](https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2026/2026_0302/index.htm)
  18. 三井化学、生成AIエージェントで化学分野の文献調査を大幅効率化, 3月9, 2026にアクセス、<https://bizzine.jp/news/detail/12787>
  19. 生成AIで文献調査を80%効率化 化学構造式から情報自律抽出, 3月9, 2026にアクセス、<https://casehub.news/category/news/ai80.html>
  20. 三井化学、文献調査を革新する生成AIエージェント開発 研究開発の、3月9, 2026にアクセス、<https://dempa-digital.com/article/710023>
  21. 三井化学、研究開発の文献調査を革新する生成AIエージェント開発, 3月9, 2026にアクセス、<https://greenproduction.co.jp/archives/35543>
  22. 三井化学、研究開発の文献調査を革新する生成AIエージェントを開発, 3月9, 2026にアクセス、<https://gomuhouchi.com/materials/73773/>
  23. 三井化学、研究効率を大幅改善する生成AIエージェントシステムを開発, 3月9, 2026にアクセス、[https://www.j-cast.com/kaisha/provider/atPress\\_kaisha/577766](https://www.j-cast.com/kaisha/provider/atPress_kaisha/577766)
  24. 三井化学とIndeedが壊した「AI活用の壁」“20年来のアドオン地獄, 3月9, 2026にアクセス、<https://enterprisezine.jp/article/detail/23332>
  25. Combining Generative AI with IBM Watson, Mitsui Chemicals Starts, 3月9, 2026にアクセス、  
<https://newsroom.ibm.com/2023-05-25-Combining-Generative-AI-with-IBM-Watson.-Mitsui-Chemicals-Starts-Verifying-New-Application-Discovery-for-Agility->

[and-Accuracy](#)

26. 三井化学、IBM Watsonによる新規用途探索の全社実用をスタート, 3月 9, 2026にアクセス、<https://prtimes.jp/main/html/rd/p/000000257.000046783.html>
27. Double the Number of New Application Discoveries by Utilizing, 3月 9, 2026にアクセス、[https://jp.mitsuichemicals.com/en/release/2023/2023\\_0913/index.htm](https://jp.mitsuichemicals.com/en/release/2023/2023_0913/index.htm)
28. 生成AIとIBMのAIの融合による新規用途探索の高精度化と ... - Biz/Zine, 3月 9, 2026にアクセス、<https://bizzine.jp/news/detail/9073>
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, 3月 9, 2026にアクセス、  
<https://jp.newsroom.ibm.com/2023-04-12-Mitsui-Chemicals-starts-verifying-new-application-discovery-generative-ai-and-IBM-watson>
30. Double the Number of New Application Discoveries by Utilizing, 3月 9, 2026にアクセス、[https://ap.mitsuichemicals.com/mci/mci-news/2023/2023\\_0913/index.htm](https://ap.mitsuichemicals.com/mci/mci-news/2023/2023_0913/index.htm)
31. AI導入による経営効果を「基幹刷新を活用したデータ整備」で加速, 3月 9, 2026にアクセス、  
<https://www.deloitte.com/jp/ja/Industries/technology/perspectives/ai-data-enhancement.html>
32. 三井化学、GPTとIBM Watsonを組み合わせて新規用途探索を高精度, 3月 9, 2026にアクセス、<https://it.impress.co.jp/articles/-/24721>
33. 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, 3月 9, 2026にアクセス、[https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2021/2021\\_0628\\_03/index.htm](https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2021/2021_0628_03/index.htm)
34. 「材料×AI」を知らない製造業ビジネスパーソンは、5年後に置き ..., 3月 9, 2026にアクセス、<https://note.com/mune22/n/nc9b6e2e2d9a7>
35. Generative AI in Molecular Discovery – From Design to Synthesis, 3月 9, 2026にアクセス、  
<https://www.chemcopilot.com/blog/generative-ai-in-molecular-discovery-from-design-to-synthesis>
36. 最少の実験回数で高い予測精度を与える汎用的AI技術を開発 - NIMS, 3月 9, 2026にアクセス、<https://www.nims.go.jp/press/2021/10/202110250.html>
37. 最少の実験回数で高い予測精度を与える汎用的 AI 技術を開発, 3月 9, 2026にアクセス、  
<https://www.asahi-kasei.com/jp/news/2021/ip4ep30000003gie-att/ze211025.pdf>
38. マテリアルズインフォマティクス (MI) とは？ 導入背景と企業の, 3月 9, 2026にアクセス、  
[https://aismiley.co.jp/ai\\_news/mi/](https://aismiley.co.jp/ai_news/mi/)
39. 化学のような、AIと産業の融合。MIなど四つのインフォマティクス, 3月 9, 2026にアクセス、  
<https://laboro.ai/activity/column/laboro/chemical-ai/>
40. 32 examples of LLM applications in materials science and chemistry, 3月 9, 2026にアクセス、  
<https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC12492978/>
41. Generative AI pipeline for target-based molecular design - GitHub, 3月 9, 2026にアクセス、  
<https://github.com/GT4SD/molecular-design>
42. AIによる合成法探索とその記述子設計・スパースモデリング活用, 3月 9, 2026にアクセス、  
<https://www.monodukuri.com/seminars/detail/19553>
43. マテリアルズ・インフォマティクスの基礎と新規材料開発の探索, 3月 9, 2026にアクセス、  
[https://www.rdsc.co.jp/storage/seminar/seminar\\_pamphlet\\_013442.pdf](https://www.rdsc.co.jp/storage/seminar/seminar_pamphlet_013442.pdf)
44. LLMの材料開発における活用事例Part2 - miLab, 3月 9, 2026にアクセス、

- <https://milab.mi-6.co.jp/article/t0035>
45. AI技術の応用で材料開発のコスト大幅削減を見込む実証実験開始, 3月 9, 2026にアクセス、[https://aismiley.co.jp/ai\\_news/hitachi-mitsui-chemicals-mi/](https://aismiley.co.jp/ai_news/hitachi-mitsui-chemicals-mi/)
  46. 三井化学と日立によるAIを活用した新材料開発高速化の実証 | A-side, 3月 9, 2026にアクセス、[https://note.com/aside\\_2023/n/n3f90c6195da3](https://note.com/aside_2023/n/n3f90c6195da3)
  47. マテリアルズインフォマティクス(MI)と生成AIの関係, 3月 9, 2026にアクセス、<https://www.mi-seek.com/knowledge/generative-ai.html>
  48. 複雑な相関から最適解を導く。パターン生成エンジン『blueqat』, 3月 9, 2026にアクセス、<https://zenn.dev/yuichirominato/articles/e06621b611e2aa>
  49. 三井化学とblueqat社、量子×AI技術を新規用途発見に適用開始 ..., 3月 9, 2026にアクセス、[https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2024/2024\\_0620\\_1/index.htm](https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2024/2024_0620_1/index.htm)
  50. 【社会実装】量子×AI技術を新規用途発見 特許,論文,研究成果を, 3月 9, 2026にアクセス、<https://www.kingtech.co.jp/blog/patent/>
  51. 三井化学 量子×AI技術を特許検索の高度化と新規用途発見に適用, 3月 9, 2026にアクセス、<https://yoroziupsc.com/blog/-xai>
  52. 三井化学、blueqat社と量子×AI技術を新規用途発見に適用開始, 3月 9, 2026にアクセス、<https://gomuhouchi.com/materials/60109/>
  53. 量子コンピューター ユースケース事例集 - NEDO, 3月 9, 2026にアクセス、<https://www.nedo.go.jp/content/800020787.pdf>
  54. 量子乱数を活用した「量子コンピュータ耐性AIプラットフォーム」を, 3月 9, 2026にアクセス、<https://prtimes.jp/main/html/rd/p/000000049.000041103.html>
  55. デロイトトーマツ、AIの本格実装を支援する「AI FaaS」開始 共創, 3月 9, 2026にアクセス、<https://www.movin.co.jp/gyoukai/firmlist/general/dtc/lineup.php?id=4123>
  56. デロイトトーマツ、企業のAI本格導入を支援 実装・運用をトータル, 3月 9, 2026にアクセス、<https://bizzine.jp/news/detail/11273>
  57. 三井化学の原動力。 - Mitsui Chemicals, 3月 9, 2026にアクセス、[https://jp.mitsuichemicals.com/content/dam/mitsuichemicals/sites/mci/documents/ir/ar/ar23\\_all\\_web\\_jp.pdf.coredownload.inline.pdf](https://jp.mitsuichemicals.com/content/dam/mitsuichemicals/sites/mci/documents/ir/ar/ar23_all_web_jp.pdf.coredownload.inline.pdf)
  58. 三井化学、2025年度までにDX専門人材165人を育成 - IT Leaders, 3月 9, 2026にアクセス、<https://it.impress.co.jp/articles/-/22890>
  59. 三井化学が生産技術系DX人材育成プログラムを始動、日本IBMが支援, 3月 9, 2026にアクセス、<https://jp.newsroom.ibm.com/2022-10-24-Mitsui-Chemicals-DX-HR-Development-Program>
  60. 三井化学、NEC・アビームコンサルティングと共に企業変革に向け, 3月 9, 2026にアクセス、[https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2022/2022\\_0324/index.htm](https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2022/2022_0324/index.htm)
  61. 三井化学、データサイエンティスト・スペシャリスト制度運用開始, 3月 9, 2026にアクセス、[https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2025/2025\\_0306/index.htm](https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2025/2025_0306/index.htm)
  62. Mitsui cuts document processing time by 80% with generative AI ..., 3月 9, 2026にアクセス、<https://aws.amazon.com/solutions/case-studies/generative-ai-mitsui/>