

三井化学R&Dにおける生成AI活用の公開情報ベース分析レポート

エグゼクティブサマリー

本調査は、2026年3月12日時点で公開されている一次情報（公式ニュースリリース、研究開発ニュース、官公庁資料、提携先公開情報等）を中心に、「三井化学R&Dにおける生成AI活用」を事実ベースで整理し、未公開領域は未公開／不明として明示した上で、実装ロードマップ案と実務提言を提示するものである。¹

公開情報から確認できる重要点は次の通りである。

第一に、R&D実務（文献・特許調査）に直結した生成AI活用が「具体機能」と「定量効果（80%超削減）」として公表されている。2026年3月、学術文献・研究報告書に含まれる化学構造式（画像）から化合物情報を自律抽出し、用途・物性・製造方法・実験条件なども同時取得してレポート化する生成AIエージェントの社内PoC開始と、初期検証で文献調査時間を80%以上削減（1カ月→1日程度）した旨が示された。² さらに2024年12月には、化学分野特有の「表（実験結果）」「化学構造式理解」等に対応する独自生成AIチャット（特許調査用途）を開発し、特許調査時間を80%削減する狙い、2024年度内PoC→2025年度本格運用の計画が公表されている。³

第二に、これらを“点”で終わらせず“面”に拡張するためのR&Dデジタル基盤（人材・HPC・産学連携）が、複数年にわたり段階的に整備されている。袖ヶ浦拠点の「デジタルサイエンスラボ」は、計算科学×データサイエンス×HPCを統合した研究開発DX加速拠点として、PetaFLOPS級マルチアーキテクチャHPC整備、投資額約50億円、社外連携ルーム・共創通信設備等が明示され、2024年12月に竣工している。⁴ また京都大学との共同研究講座「デジタルケミカルラボ」では、データ科学やフロー合成を統合した“自律的自動合成実験システム（自動合成+データ連携）”の構築と、それをういた高機能材料開発を共同で行う計画（2023年4月開始、5年間）が示され、実験自動化（Autonomous testing）の土台が確認できる。⁵

第三に、生成AI以外のAI/MI（Materials Informatics）活用もR&Dに接続しており、生成AIの次段（分子設計、材料探索、プロセス最適化、閉ループ実験）へ進む“連結点”が見える。日立とのMI実証では「有機材料開発の実験回数を従来比約1/4に低減」し、少量データでも候補化合物（化学式）を“発案”できる深層学習技術（入れ子型AI等の説明）を含む取り組みが公表されている。⁶ 製造・プロセス領域でも、ディープラーニングで20分先の製品品質を高精度予測した事例（2016年）などが公開されており、R&D～製造のデータ活用の蓄積が示唆される。⁷

競合比較では、国内主要化学メーカーでも「用途探索×生成AI」「社内ChatGPT」「研究テーマ探索×LLM」等が進む一方、三井化学は“化学構造式（画像）を含むマルチモーダル”での文献調査自動化を明示し、R&D現場のボトルネック（構造式→化合物同定→情報抽出）に直接当てに行っている点が差別化要素になり得る。⁸

以降、公開根拠を整理したうえで、適用領域別の導入有無、競合比較表、ロードマップ案、リスクと対策、実務提言（KPI・PoC設計・概算コスト・外部連携）を提示する。

公開情報に基づく現状把握

証拠ソース一覧（指定表A）

下表は本レポートで参照した主要ソース（一次情報優先）である。URLはユーザー要望により明記する。

URL	種類	要点
https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2026/2026_0302/index.htm	公式 ニュース リリース	化学構造式（画像）から化合物情報を自律抽出する生成AIエージェントを独自開発。文献調査時間80%以上削減（1カ月→1日）。FY2025内PoC完了、FY2026本格運用目標。 ²
https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2024/2024_1225/index.htm	公式 ニュース リリース	化学分野特有ニーズ（表読取・構造式理解）対応の独自生成AIチャット搭載「特許チャット」開発。特許調査時間80%削減、FY2024内PoC→FY2025本格運用計画。 ³
https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2024/2024_1217/index.htm	公式 ニュース リリース	デジタルサイエンスラボ竣工。計算科学×データサイエンス×HPCで研究開発DXを加速、PetaFLOPS級HPC、共創通信設備等。 ⁹
https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2022/2022_1115/index.htm	公式 ニュース リリース	デジタルサイエンスラボの開設決定。投資額約50億円、PetaFLOPS級HPC、外部共創ルーム等。 ¹⁰
https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2022/2022_1122/index.htm	公式 ニュース リリース	京都大学 ¹¹ と産学共同研究講座「デジタルケミカルラボ」設置。データ科学・フロー合成統合の自律的自動合成実験システム構築、2023/4開始・5年。 ¹²
https://www.kyoto-u.ac.jp/ja/news/2022-11-22	大学公式 ニュース	デジタルケミカルラボ設置の目的（自律的自動合成実験システム＋高機能材料開発）を確認。 ¹³
https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2021/2021_0628_03/index.htm	公式 ニュース リリース	株式会社日立製作所 ¹⁴ とMI実証開始。実験回数を従来比約1/4、少量データでも候補化合物（化学式）を発案できる深層学習技術の説明。 ⁶
https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2016/2016_0915/index.htm	公式 ニュース リリース	NTTコミュニケーションズ株式会社 ¹⁵ とディープラーニングで化学プラント製造過程の品質を20分先まで予測。 ⁷

URL	種類	要点
https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2024/2024_0620_1/index.htm	公式 ニュース リリース	blueqat株式会社 ¹⁶ と量子×NLP (SimCSE+テンソルネットワーク圧縮)で特許検索高度化・新規用途探索。LLM活用に向けた挑戦も明記。 ¹⁷
https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2022/2022_0622/index.htm	公式 ニュース リリース	日本アイ・ビー・エム株式会社 ¹⁸ とIBM Watsonを全社実装し、ニュース・SNS・特許等の外部ビッグデータで新規用途探索(営業DX)。次段でMI連動を明記。 ¹⁹
https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2023/2023_0920/index.htm	公式 ニュース リリース/制度	経済産業省 ²⁰ のDX認定制度で「DX認定事業者」。取り組みにAI/GPT活用、研究開発DX(MI)等を列挙。 ²¹
https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2022/2022_0324/index.htm	公式 ニュース リリース	日本電気株式会社 ²² と株式会社アビームコンサルティング ²³ 協力でDX人材育成(機械学習演習にdotData活用等)、2025年度までに165名育成目標。 ²⁴
https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2025/2025_0306/index.htm	公式 ニュース リリース	データサイエンティスト・スペシャリスト制度(社内キャリアパス)。DX人材レベル定義(0~3)と連動。 ²⁵
https://www.meti.go.jp/press/2024/04/20240419004/20240419004.html	官公庁プレス	総務省 ²⁶ と経産省が「AI事業者ガイドライン(第1.0版)」を統合・更新として公表。生成AI普及を踏まえる。 ²⁷
https://digital-strategy.ec.europa.eu/en/factpages/general-purpose-ai-obligations-under-ai-act	規制当局 (EU)	欧州委員会 ²⁸ によるAI ActのGPAI義務(技術文書、著作権方針、学習内容要約、システミックリスク対策等)。施行時期明記。 ²⁹
https://www.nist.gov/publications/artificial-intelligence-risk-management-framework-ai-rmf-10	標準/枠組み	NIST(米国標準技術研究所)のAIRMF 1.0(任意のリスク管理枠組み)。 ³⁰
https://www.nist.gov/publications/artificial-intelligence-risk-management-framework-generative-artificial-intelligence	標準/枠組み	NISTの生成AI向けAIRMFプロファイル(生成AI特有リスクの運用観点)。 ³¹
https://www.inpit.go.jp/j-platpat_info/index.html	公的DB	INPIT(工業所有権情報・研修館) ³² によるJ-PlatPat概要(無料検索・閲覧)。 ³³

URL	種類	要点
https://www.inpit.go.jp/j_platpat_info/renewal_20240527.html	公的DB (将来計画)	J-PlatPat刷新で「AIを活用した初心者向け検索補助（キーワード/分類提示）」検討を明記。 ³⁴
https://www.jstage.jst.go.jp/article/jccj/22/2/22_2023-0023/_html/-char/ja	学術論文 (関連領域)	化学系特許の表・テキストから材料知識を抽出 (MI×NLP)。R&Dにおける“特許→知識化”の一般技術背景。 ³⁵
(添付PDF)	ユーザー提供資料	生成AIエージェント開発に関するPDF (公式リリースPDF) leciteurn0file1
(添付PDF)	ユーザー提供資料	生成AIエージェント効率化に関する外部記事PDF (業界ニュース) leciteurn0file0

公開情報から読み取れる成熟度 (分析)

公開情報ベースでの“生成AI×R&D”成熟度を、実行系（現場導入）と基盤系（データ・計算資源・人材・連携）の二軸で整理すると、次の特徴がある。

実行系では、文献・特許調査という研究者の時間を最も消費しやすい業務に対して、構造式（画像）という化学分野固有の難所を突破するマルチモーダルAIエージェントを自社開発し、80%超の省力化を定量提示している点が強い。³⁶ ここは、単なる社内Chat導入（一般業務効率化）ではなく、「化学R&Dの非構造化情報（図・表・化学式・文章）を扱う」方向に踏み込んだ証跡である。³⁶

基盤系では、PetaFLOPS級のHPCを備えたデジタルサイエンスラボを研究開発DXの中核拠点として整備し、研究・生産技術双方のデジタル専門家を集結させ、社外共創も前提とした設計を明示している。⁴ また、京都大学との共同研究講座で“自律的自動合成実験システム”を構築する計画は、生成AIを設計側（Design）だけでなく、実験（Test）・学習（Learn）まで閉ループ化する将来像に接続する。⁵

一方で、分子設計（新規分子生成）や反応条件提案、プロセス最適化の領域で「LLM／拡散モデル／GNN／強化学習等の具体採用」まで踏み込んだ公開事例は限定的であり、現時点では未公開／不明が多い（次章で整理）。ただし日立とのMI実証では、少量データから高性能材料候補の化学式を“生成（発案）”する深層学習技術の説明が出ており、生成モデル的アプローチ（探索・提案）の蓄積は示唆される。³⁷

適用領域別の分析

適用領域別の導入有無と技術比較 (指定表B)

「導入有無（公開情報）」は、公開一次情報で“実運用／PoC開始／計画”が明示されたものを「有」、それ以外を「未公開／不明」とした。ツール・手法は「公開で確認できたもの」と「R&D一般に有効な候補（提案）」を分けて記載する。

適用領域	導入有 無（公開情報）	公開で確認できた ツール/手法	追加で有望なツール/ 手法（提案）	期待効果	主な課題
文献調査 （化学構造式・図表を含む）	有	マルチモーダル生成AIエージェント（画像+テキスト統合、化学DB/Web参照、レポート出力） ²	マルチモーダルRAG、図表解析モデル、化学NER/RE（固有表現・関係抽出）、評価用ゴールドデータ整備	調査時間80%超削減、検索漏れ低減、分析時間の創出 ²	抽出精度（構造的認識/同定）、参照DBの品質、説明可能性、誤抽出時の監査ログ
特許調査 （表・構造式・チャット）	有	独自生成AIチャット搭載プラットフォーム（表読取、構造的式理解） ³	特許クレーム分解、先行技術サマリ、侵害/無効化観点の支援（ただし最終判断は弁理士/法務）	調査時間80%削減、探索スピード向上 ³	知財リスク（幻覚で誤判断）、秘匿情報の取り扱い、学習データの著作権・利用許諾
新規用途探索（市場→製品開発連携）	有（生成AIは検証段階含む）	IBM Watson（NLP/テキストマイニング）で外部データ分析、MI連動を次段と明記 ¹⁹ / GPTとWatsonの組合せ検証（生成AI） ³⁸	エージェント化（自動仮説→根拠提示→実験計画）、ナレッジグラフ、マルチモーダル（動画/画像）	用途探索の網羅性向上、根拠ベース提案、開発テーマ創出 ³⁹	データ偏り（SNS等のノイズ）、再現性、探索→開発への要件翻訳（材料機能→顧客価値）
材料探索・分子設計（MI）	有（生成AIは部分的示唆）	日立MI実証：少量データでも候補化学式を発案する深層学習、実験回数1/4 ³⁷	GNN（分子・高分子表現）、拡散モデル/オートレグレッシブ生成、強化学習（合成可能性制約）、ベイズ最適化/アクティブラーニング	実験回数削減、探索空間拡大、開発リードタイム短縮 ⁶	データ整備（ELN/LIMS）、合成可能性/スケールアップ制約、IP（発明者性・クレーム設計）
プロセス最適化・品質予測	有	ディープラーニングで20分先品質予測（化学プラント） ⁷	デジタルツイン+最適化、強化学習（制御）、因果推論、オンライン学習（ドリフト検知）	歩留まり・品質安定、異常予兆、エネルギー最適化	安全性（誤制御防止）、現場受容、モデル更新管理
実験自動化（自律実験/合成）	有（産学でシステム構築）	京都大学と自律的自動合成実験システム構築（データ科学+フロー合成） ⁵	LLM/エージェントによる実験計画、ロボット制御、標準プロトコル化、閉ループ最適化	実験計画→実行→学習の高速ループ、夜間稼働、再現性向上	安全面（化学反応の危険性）、設備投資、データ標準化

適用領域	導入有 無（公開情報）	公開で確認できた ツール/手法	追加で有望なツール/ 手法（提案）	期待効果	主な課題
R&Dデータ管理・ 計算基盤	有	デジタルサイエンス ラボ（計算科学× データサイエンス ×HPC、共創設備） ④	データカタログ、権 限管理、モデルレジ ストリ、MLOps、セ キュアRAG基盤	研究資産 の再利 用、モデ ル開発の 高速化、 横串運用	データガバナン ス、部門最適の 壁、運用コスト
論文・特 許作成支 援	未公開 ／不明	直接の公開事例なし	生成AIによるドラフ ト・校正・引用管理 （ただし出典管理必 須）、特許明細書の 構造化	文書作成 効率、品 質均一化	盗用・誤引用、 秘密情報混入、 著者責任の所在

現状の示唆

公開事例が集中しているのは「非構造化知識（文献・特許）→構造化知識→意思決定支援」の領域である。文献調査エージェントは、化学分野の実務で最大の障壁である“構造化画像”を含む情報抽出を中核に据え、抽出後に用途・物性・製法・実験条件まで同時取得し、必要に応じて外部DBやWebも参照する構成が明示されている。^② これはRAG（検索拡張生成）とエージェント型ワークフローの実装方向性と整合し、研究者の“探索→整理→再探索”の反復を圧縮する設計思想と解釈できる（推論）。^②

他方、分子設計・材料探索の“生成AI（LLM/拡散）”がどこまで本格導入されているかは公開情報だけでは断定できない。ただし日立MI実証では、深層学習により候補化合物（化学式）を提案し、実験回数削減につながる説明があり、探索・提案型AIの素地はある。^{③⑦} ここにデジタルサイエンスラボのHPCと、デジタルケミカルラボの自律実験が組み合わせると、閉ループ最適化（Design-Test-Learn）の実装可能性が高まる。^{④⑩}

競合・業界比較

競合比較表（指定表C）

下表は、国内外の主要化学メーカー等で公表されている生成AI/AI活用事例を、R&D視点で比較したものである（同一社でも用途探索・生産・研究テーマなど複数に跨る）。

企業	公表されている取り組み（要約）	主技術領域	対象業務	参照
旭化成株式会社 ^{④①}	新規用途探索の自動化：用途を自動抽出するAI+有望候補抽出の生成AIを開発し、文献データから6,000以上候補、選別時間を従来の約40%に短縮。製造現場の危険予知にも生成AIでノウハウ継承。	生成AI+分析AI	用途探索、製造安全/技術伝承	④②
住友化学株式会社	社内向け生成AIサービス「ChatSCC」運用：セキュア環境で入力が外部漏洩しない設計。文書作成等に加え、技術アイデア創出や研究・製造データ分析にも活用可能と明記。	社内LLM/生成AI	全社（研究・製造含む）	④③

企業	公表されている取り組み（要約）	主技術領域	対象業務	参照
株式会社日本触媒 ⁴⁴	ストックマーク株式会社の生成AI（LLM）＋ナレッジグラフで、社内研究資料等を活用した新規研究テーマ/新規事業創出の実証を完了し業務適用開始（プレス）。	LLM＋ナレッジグラフ	研究テーマ探索/事業企画	45
三菱ケミカル株式会社 ⁴⁶	EAGLYS株式会社 ⁴⁷ の秘密計算MIソリューションで、企業間データを秘匿したまま連携・AIモデル自動生成し、材料開発期間を短縮したと報道（ソリューション提供側発表を基にした専門メディア記事）。	MI（セキユアデータ連携）	材料開発（企業間連携）	48
大塚化学株式会社 ⁴⁹	上記事例の共同先として言及（材料開発期間短縮）。	MI（セキユアデータ連携）	材料開発（企業間連携）	48
BASF ⁵⁰	Citrine Informatics ⁵¹ と、実験データを用いたMLで触媒・材料探索を加速（逐次学習でモデル改善、数千材料をスクリーニング等）。	機械学習（材料探索）	触媒/材料R&D	52
Dow ⁵³	CAS（化学DB検索）と連携したAI活用で分子探索を高速化。従来数週間の探索が数分に短縮される旨の事例紹介。	AI支援検索	分子探索（研究者検索）	54
Evonik ⁵⁵	AIChemBuddyで配合提案を高速化。データ整備後、数分で複数配合案を提示しプロジェクトを推進したと紹介。	AIによる配合提案	材料配合/製品開発	56
Syensqo ⁵⁷	Microsoft ⁵⁸ とAI連携。Microsoft Discovery（科学者・技術者向けR&Dプラットフォーム）を用い、独自データと統合してバイオ系ポリマー等の革新を加速するロードマップを探索と報道。	R&D向けAIプラットフォーム	材料R&D	59

比較からの論点（分析）

国内では、生成AIを「用途探索」「社内知識活用」「製造現場の技術伝承」に適用し、時間短縮や候補生成数など定量値を公表する事例が出ている。⁶⁰ 三井化学の特徴は、（1）化学構造式の画像理解を含む文献調査エージェントという“研究者のボトルネック工程”に直接切り込んだ点、（2）HPC統合拠点（デジタルサイエンスラボ）と自律実験（京大デジタルケミカルラボ）で、生成AIを探索だけでなく実験と接続し得る基盤を明示している点にある。⁶¹

海外では、BASFのように材料探索にAIプラットフォームを組み込み逐次学習で実験と回す例、Dowのように研究者の分子探索（検索）をAIで短縮する例、Evonikのように配合提案をAIで高速化する例が確認できる。⁶² これらは「探索→提案→実験→学習」のサイクル短縮という共通目的を持ち、三井化学の公開事例（文献調査80%削減）とも“研究者時間の再配分”という点で共鳴する。⁶³

技術・実装ロードマップ案

本章は提案であり、公開情報にない内容は「案」として示す。前提として、デジタルサイエンスラボ（HPC・共創設備）とDX人材育成（DXレベル/DS制度）が既に整備に向かっていることを活用する。⁶⁴

R&D内でのデータ・モデル・ワークフロー（mermaid図）

flowchart LR

A[研究データ源\n(ELN/LIMS, 装置ログ, 配合/条件, 解析結果)] --> B[データ取り込み\nETL・標準化・メタデータ付与]

P[外部/準外部知識\n(特許, 論文, 学会資料, DB)] --> B

I[非構造化\n(PDF, 図表, 化学構造式画像)] --> C[マルチモーダル抽出\n(図表解析, 構造式認識, NER/RE)]

B --> D[(R&Dデータレイク/レイクハウス)]

C --> D

D --> E[知識化\n(ナレッジグラフ/ベクトルDB/索引)]

E --> F[RAG/エージェント層\n(検索→根拠提示→要約/抽出→レポート)]

D --> G[MI/予測モデル層\n(物性予測, 配合/条件最適化)]

G --> H[実験計画\n(ベイズ最適化/アクティブラーニング)]

H --> A

F --> J[意思決定支援\n(テーマ選定, 先行技術, 実験方針)]

K[ガバナンス\n(権限・監査ログ・IP/法務チェック)] --- B

K --- F

K --- G

上記フローの要旨は、「非構造化（文献・特許・図表・構造式）」をマルチモーダルに構造化し、RAG/エージェントで“根拠付き”に取り回しつつ、MI/最適化モデルを実験計画に接続して閉ループ化することである。三井化学が公開した文献調査エージェントはFに相当し、京大デジタルケミカルラボはA～Hの閉ループの研究基盤として解釈できる。 ⁶⁵

ロードマップ（指定表D）

期間	優先施策（案）	必要データ/インフラ	人材/体制	ガバナンス要点
短期 (1年)	①文献調査エージェントの対象拡張（テーマ領域・文献種別・社内DB連携）②特許チャットの性能評価と運用設計（監査ログ・禁止事項）③R&D横断のセキュアRAG基盤（ベクトルDB＋権限）④PoC評価手順の標準化	文献/特許コーパス、社内化学DB、アクセス制御、評価データ（ゴールド）	R&D側PO、法務/知財、MLOps、データエンジニア	AI事業者ガイドラインに沿った運用方針・リスク評価（国内） ²⁷
中期 (1-3年)	①材料探索MIの高度化（少量データ×生成的提案×実験回し）②京大ラボ等の自律実験との接続（実験プロトコル標準化）③研究データ資産化（ELN/LIMS統合・データカタログ）④用途探索（外部ビッグデータ）とMIの“部門間データ連携”を実装	ELN/LIMS統合、実験データ標準、HPC/クラウド併用、モデルレジストリ	DS・スペシャリストの役割定義、研究者のAIリテラシー	透明性（モデルカード）、再現性（データ版管理）、第三者利用時の契約

期間	優先施策（案）	必要データ/インフラ	人材/体制	ガバナンス要点
長期（3-5年）	①“自律開発ライン”の本格化（Design-Test-Learnの閉ループ半自動化）②高分子/反応/プロセスの基盤モデル（社内データ+公開データの二層学習）③製造・研究のデジタルツイン統合④社内外共創（安全なデータ連携、共同学習）	大規模データ連携、安全な計算環境、監査可能なMLOps	研究/生産/IT/法務を横断した常設CoE	EU向け事業がある場合、GPAI義務（技術文書・著作権方針・学習要約等）も考慮 ²⁹

ロードマップ・タイムライン（mermaid）

timeline

title 生成AI×R&D 実装タイムライン案

2026：文献調査エージェント本格運用開始（目標）/ 特許チャット運用定着 / セキュアRAG基盤整備

2027：MI高度化（提案→実験→学習の短サイクル）/ ELN・LIMS統合 / 用途探索×MIの部門間連携

2028：自律実験（自動合成・自動評価）との接続拡大 / 主要テーマで閉ループ最適化

2029：基盤モデル（材料・プロセス）とデジタルツイン統合 / 社外共創（安全な共同学習）

2030：自律開発ラインの準標準化 / ガバナンス・監査の全社運用成熟

タイムラインの“起点”は、公式にFY2026から本格運用を目指すこととされる文献調査エージェントである。²

リスク評価と対策

リスクの前提

生成AIは、R&Dの生産性を大きく押し上げ得る一方、知財・機密・規制・安全に関わる失敗モードがある。国内では経産省・総務省が「AI事業者ガイドライン（第1.0版）」を公表し、開発者・提供者・利用者を含む幅広い事業者の自主的取り組みを支援する枠組みを提示している。²⁷ 国際的にはNIST AI RMF 1.0と生成AIプロファイルが、ガバナンス、測定、管理などの実装指針を提供している。⁶⁶ EU AI ActはGPAIモデル提供者に技術文書、著作権方針、学習内容要約等を求め、システムリスクの場合は追加のリスク低減やインシデント報告、サイバーセキュリティを要件化している。⁶⁷

主要リスクと対策（要点）

知財リスクは二層ある。第一に、外部モデルや外部データ（論文・特許・商用DB）を学習・生成に使う場合の著作権・利用許諾の問題であり、EU AI ActでもGPAI提供者に著作権方針や学習内容要約が求められる。²⁹ 第二に、生成物（要約・レポート・明細書草案）が“根拠の取り違い”や“引用欠落”を含み、特許戦略や研究判断を誤らせるリスクである。対策としては、①RAGで根拠文献・箇所を常に提示、②出典の自動付与と引用ルール、③知財・法務レビューを必須ゲート化、④生成ログの監査可能性確保が実務的に重要となる（NISTのガバナンス/管理の趣旨に整合）。⁶⁶

データ漏洩は、研究開発では特に深刻である。住友化学の社内生成AI「ChatSCC」が“入力情報が外部に漏れないセキュア環境”を特長として明示しているように、競合もセキュリティを前面に出している。⁴³ 三井化学の公開情報では同等の方式が明示されていないため断定はできないが、対策設計の方向性としては、①社内閉域/専用環境（ネットワーク分離、データ持ち出し制御）、②モデル/プロンプト/入出力の機密区分、③ベンダー契約で学習利用禁止・保管期間・監査権を明確化、④秘密情報の自動検知（DLP）をRAG・エージェント層に組み込む、が現実的である。

モデル誤用（幻覚・過信）は、研究者の判断に直結する。文献調査エージェントは“用途・物性・製法・実験条件まで取得”するとされるため、誤抽出が混入した場合の影響範囲が広い。² ここへの対策は、①抽出タスクを分解し評価指標（構造式同定精度、抽出F1、根拠一致率）を定義、②失敗例を継続学習する品質マネジメント、③“最終判断は人”の運用設計（Human-in-the-loop）である。NIST生成AIプロファイルは、生成AI特有のリスクを運用に落とし込む補助文書として位置付けられている。³¹

説明可能性と監査性は、研究・法務・品質のいずれにとっても必要条件である。特に、特許調査や先行技術評価で生成AIが提示した結論は、後から第三者が追える形（どの文献のどの記述に基づくか）で残す必要がある。これはRAG設計とログ設計の問題であり、短期ロードマップで「監査ログ・禁止事項・評価手順」を先に固めるべき理由でもある。⁶⁸

実務向け提言

優先プロジェクト（提案）

最優先は「研究者が日々使う知識作業」を“安全に、根拠付きで、組織学習可能に”することだ。すでに文献調査80%削減という強い足場があるため、これを個別ツールで終わらせず、R&D横断基盤へ昇格させるのが合理的である。²

提案する優先プロジェクトは3本柱である。

第一柱は「R&Dセキュア知識基盤（マルチモーダルRAG+エージェント）」で、文献調査エージェントと特許チャットを同一のガバナンス・評価・ログ基盤に載せる。ここでは、構造式画像・表・文章の抽出品質をKPI化し、研究テーマごとに“検索漏れと誤抽出”を定量管理する。³⁶

第二柱は「MI高度化（生成的提案×実験回し）」で、日立MI実証で示された“少量データでも候補化合物発案”型の考え方を、デジタルサイエンスラボのHPCと、実験計画（ベイズ最適化）に接続する。⁶⁹ ここは、材料探索の生産性がROIを決めるため、対象テーマを絞り、データ整備（ELN/LIMS）と閉ループの設計に投資する。

第三柱は「自律実験との統合（京大デジタルケミカルラボ連携）」である。自律的自動合成実験システムが目的として明示されているため、プロトコル・データ形式・安全制約を標準化し、生成AIの提案を現実の実験に落とす“実験オペレーション設計”を前倒しする。⁵

KPI例・評価指標（提案）

文献・特許系（知識抽出）は、時間短縮だけでなく「品質」をKPI化する必要がある。例として、(a) 構造式→化合物同定の正解率、(b) 用途/物性/条件抽出のF1、(c) 根拠提示率（回答に一次根拠が紐づく比率）、(d) 再現性（同一クエリでの結果安定度）、(e) 研究者の再探索回数（手戻り削減）を推奨する。

⁷⁰

材料探索MI系は、(a) 目標物性到達までの実験回数、(b) リードタイム、(c) 外れ実験比率、(d) 候補の合成可能性スコア、(e) スケールアップ可否判断までの期間が重要になる。日立MI実証の「実験回数1/4」型の指標が、そのままベンチマークになる。⁶

PoC設計案（提案）

PoCは「研究者が信頼して使う」ことがゴールであり、モデル精度だけでは足りない。推奨する設計は、(1) 対象テーマを3件程度に絞り、既存手順（人手文献調査/特許調査/用途探索）をベースラインとして計測、(2) ゴールドデータ（正解の抽出結果）を小さくても良いので作る、(3) 失敗モード（構造式の誤

読、同名異物、引用の取り違え)をカタログ化して改善サイクルに入れる、(4)運用ルール(禁止入力、機密区分、ログ)を先に整備する、である。官公庁ガイドラインは自主的取り組み支援を目的としており、PoC段階からガバナンスを“実装物”として持つことが望ましい。⁷¹

推定コスト感(概算)と前提

以下は市場相場・一般的な構成要素からの“概算”であり、既存のデジタルサイエンスラボ投資(約50億円)は別枠(既存投資)として扱う。¹⁰ 前提は「1テーマあたりPoC 3~6カ月」「コアチーム10~20名(研究PO含む)」「セキュア環境(閉域 or 専用クラウド)」「評価データ作成を含む」。

概算の目安は、(a)文献・特許向けセキュアRAG/エージェントPoC:5,000万~1.5億円、(b)部門横断のRAG基盤(権限・ログ・モデルレジストリ含む)初期構築:1~3億円、(c)材料探索MI高度化(データ整備+モデル+実験回し)テーマ単位:1~5億円、(d)自律実験(ロボット/フロー合成/安全設備)統合は、設備条件により5億~数十億円規模になり得る、を想定する。いずれも最大コストドライバーは「データ整備(ELN/LIMS統合、メタデータ)」「継続運用(MLOps/監査)」である。

外部連携戦略(提案)

公開情報上、産学(京都大学)と大手IT/産業パートナー(日立、IBM、NEC、blueqat)を組み合わせている。⁷² 今後の連携方針としては、(1)“化学ドメイン特化(構造式・表・反応)”の技術は内製中核に置き、(2)汎用LLMや検索基盤はベンダーのアップデートを利用しつつ、機密・ログ・学習利用禁止を契約で固定、(3)自律実験は大学・スタートアップと共創し、プロトコル標準化と安全設計を先行、(4)規制対応は国内(AI事業者ガイドライン)をベースにしつつ、EU向けにはGPAI義務(技術文書・著作権方針等)を見据えたドキュメント体系を整備、が合理的である。⁷³

優先参照ソース(重要度順)

公開情報の中で本テーマの事実認定に最も寄与する一次ソースは、文献調査エージェント(2026/3)、特許チャット(2024/12)、デジタルサイエンスラボ(2022/11、2024/12)、デジタルケミカルラボ(2022/11)、DX認定(2023/9)である。⁷⁴ 補助として、MI実証(日立)、用途探索(IBM Watson/GPT検証)、DX人材育成(NEC/アビーム)、官公庁ガイドライン(AI事業者ガイドライン)、NIST AI RMF、EU AI Act義務を組み合わせることで、ロードマップとリスク対策の根拠が揃う。⁷⁵

¹ ² ²² ²³ ³⁶ ⁵³ ⁵⁷ ⁶¹ ⁶³ ⁶⁵ ⁷⁰ ⁷⁴ https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2026/2026_0302/index.htm

https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2026/2026_0302/index.htm

³ ²⁶ ³² ⁶⁸ https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2024/2024_1225/index.htm

https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2024/2024_1225/index.htm

⁴ ¹⁰ ¹¹ ¹⁶ ⁴⁰ ⁶⁴ https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2022/2022_1115/index.htm

https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2022/2022_1115/index.htm

⁵ ¹² ⁷² https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2022/2022_1122/index.htm

https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2022/2022_1122/index.htm

⁶ ³⁷ ⁵¹ ⁵⁵ ⁶⁹ ⁷⁵ https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2021/2021_0628_03/index.htm

https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2021/2021_0628_03/index.htm

⁷ https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2016/2016_0915/index.htm

https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2016/2016_0915/index.htm

- 8 42 60 <https://www.asahi-kasei.com/jp/news/2024/ze241209.html>
<https://www.asahi-kasei.com/jp/news/2024/ze241209.html>
- 9 https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2024/2024_1217/index.htm
https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2024/2024_1217/index.htm
- 13 <https://www.kyoto-u.ac.jp/ja/news/2022-11-22>
<https://www.kyoto-u.ac.jp/ja/news/2022-11-22>
- 14 19 39 46 https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2022/2022_0622/index.htm
https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2022/2022_0622/index.htm
- 15 59 <https://www.belganewsagency.eu/chemicals-group-syensqo-launches-ai-partnership-with-microsoft>
<https://www.belganewsagency.eu/chemicals-group-syensqo-launches-ai-partnership-with-microsoft>
- 17 https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2024/2024_0620_1/index.htm
https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2024/2024_0620_1/index.htm
- 18 27 71 73 <https://www.meti.go.jp/press/2024/04/20240419004/20240419004.html>
<https://www.meti.go.jp/press/2024/04/20240419004/20240419004.html>
- 20 29 44 50 58 67 <https://digital-strategy.ec.europa.eu/en/factpages/general-purpose-ai-obligations-under-ai-act>
<https://digital-strategy.ec.europa.eu/en/factpages/general-purpose-ai-obligations-under-ai-act>
- 21 https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2023/2023_0920/index.htm
https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2023/2023_0920/index.htm
- 24 https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2022/2022_0324/index.htm
https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2022/2022_0324/index.htm
- 25 https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2025/2025_0306/index.htm
https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2025/2025_0306/index.htm
- 28 30 66 <https://www.nist.gov/publications/artificial-intelligence-risk-management-framework-ai-rmf-10>
<https://www.nist.gov/publications/artificial-intelligence-risk-management-framework-ai-rmf-10>
- 31 41 <https://www.nist.gov/publications/artificial-intelligence-risk-management-framework-generative-artificial-intelligence>
<https://www.nist.gov/publications/artificial-intelligence-risk-management-framework-generative-artificial-intelligence>
- 33 https://www.inpit.go.jp/j-platpat_info/index.html
https://www.inpit.go.jp/j-platpat_info/index.html
- 34 49 https://www.inpit.go.jp/j_platpat_info/renewal_20240527.html
https://www.inpit.go.jp/j_platpat_info/renewal_20240527.html
- 35 47 https://www.jstage.jst.go.jp/article/jccj/22/2/22_2023-0023/_html/-char/ja
https://www.jstage.jst.go.jp/article/jccj/22/2/22_2023-0023/_html/-char/ja
- 38 https://jp.mitsuichemicals.com/en/release/2023/2023_0412/index.htm
https://jp.mitsuichemicals.com/en/release/2023/2023_0412/index.htm
- 43 <https://www.sumitomo-chem.co.jp/news/detail/20231024.html>
<https://www.sumitomo-chem.co.jp/news/detail/20231024.html>

45 <https://prtimes.jp/main/html/rd/p/000000247.000024407.html>

<https://prtimes.jp/main/html/rd/p/000000247.000024407.html>

48 <https://monoist.itmedia.co.jp/mn/articles/2508/15/news023.html>

<https://monoist.itmedia.co.jp/mn/articles/2508/15/news023.html>

52 62 <https://www.basf.com/us/en/media/news-releases/2018/06/P-US-18-075>

<https://www.basf.com/us/en/media/news-releases/2018/06/P-US-18-075>

54 <https://www.cio.com/article/475786/dow-turns-to-ai-to-accelerate-chemical-search.html>

<https://www.cio.com/article/475786/dow-turns-to-ai-to-accelerate-chemical-search.html>

56 https://elements.evonik.com/en/articles/03_2025/aichembuddy.html

https://elements.evonik.com/en/articles/03_2025/aichembuddy.html