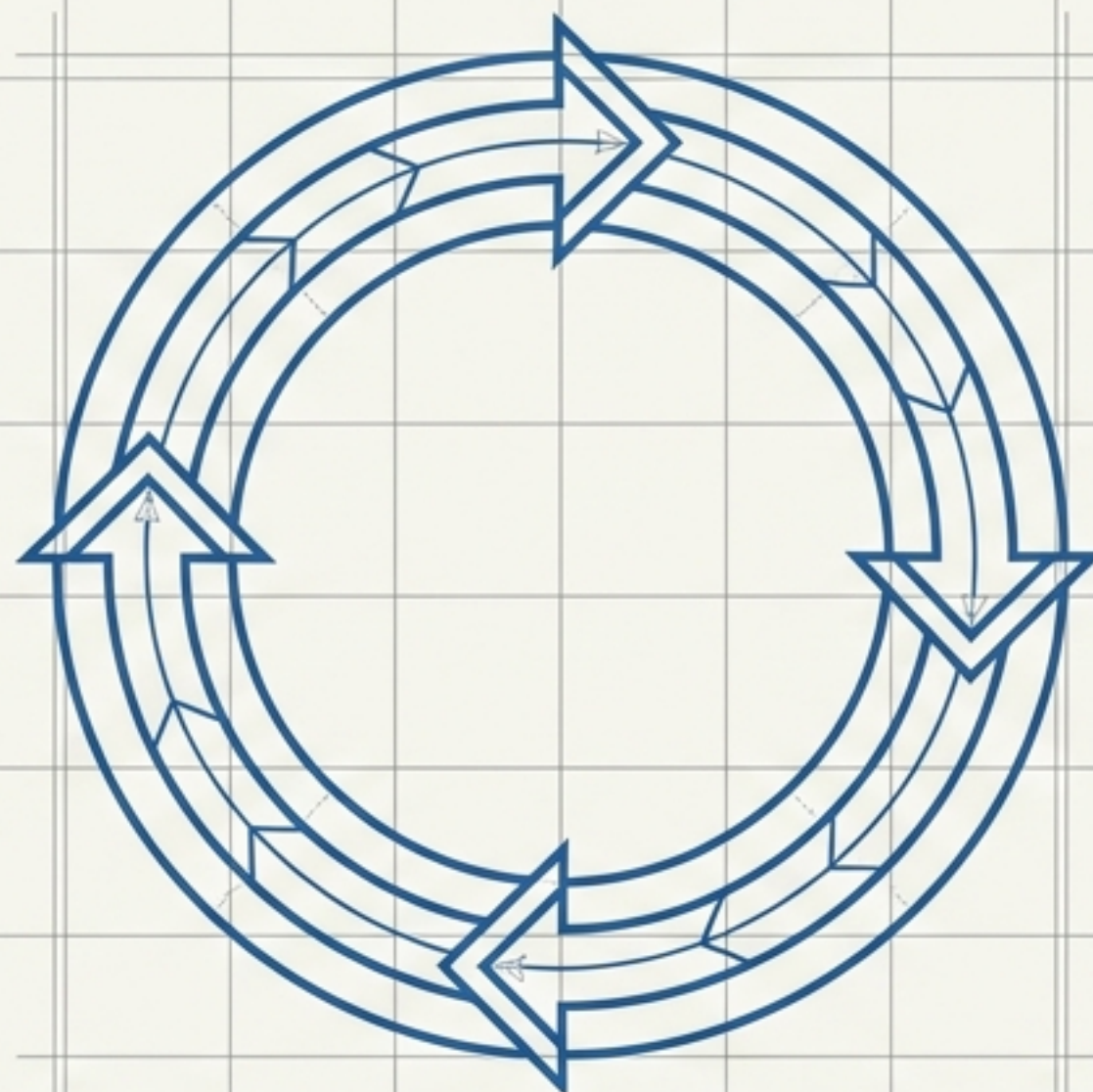




AI Materials Foundryの実像と三井化学の戦略的要請

300兆の仮想候補から量産への「ラストマイル」をどう制するか

戦略分析ブリーフィング

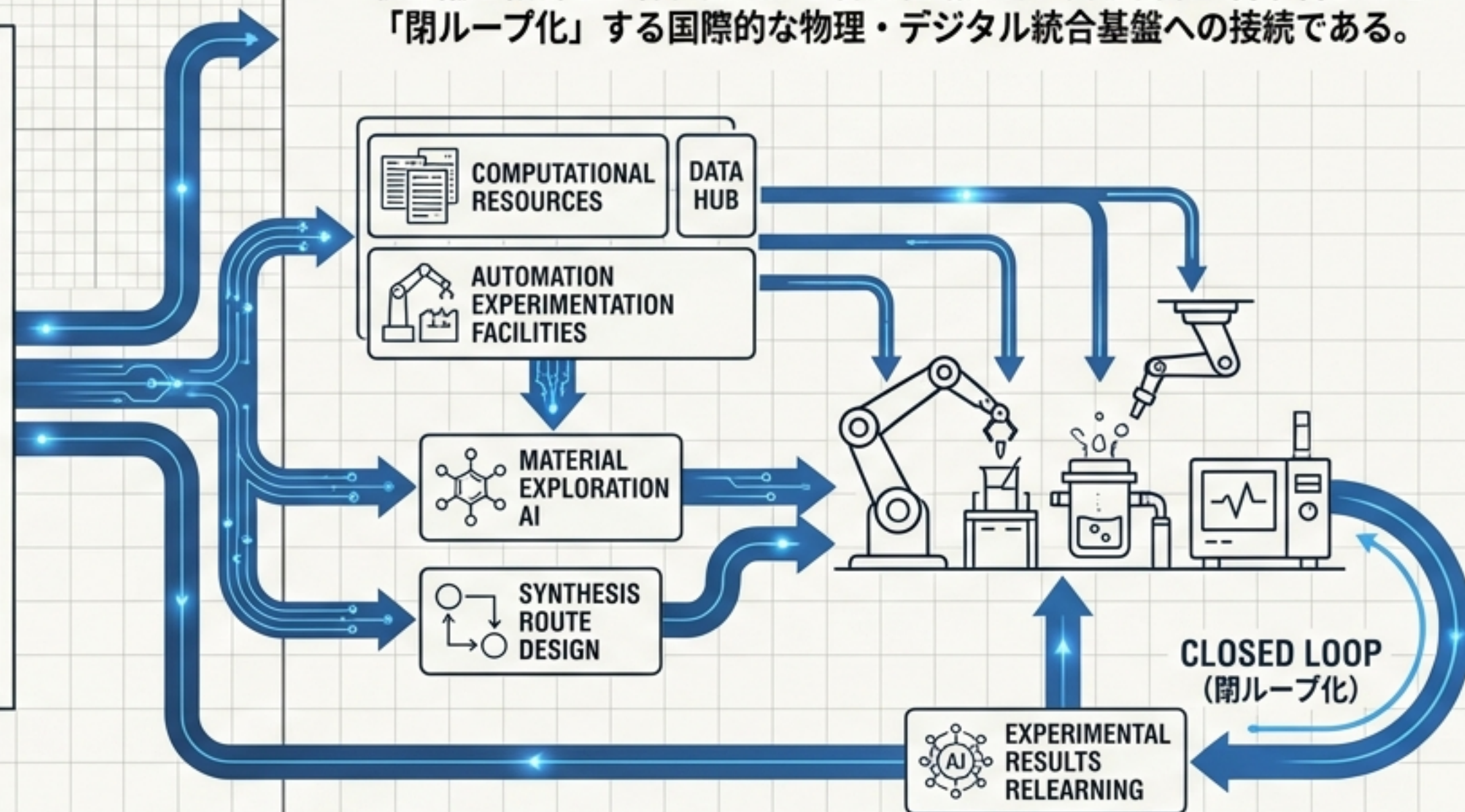
表面的な事象

2026年7月28日、三井化学が英国CuspAI主導の「AI Materials Foundry」に創設メンバーとして参画を発表。

	49の参加組織
	CuspAIによる4億5,000万ドルの資金調達（※三井化学の直接出資は未確認）
	MIRAプラットフォームの導入

戦略的本質

単なる生成AIソフトウェアの導入ではない。計算資源、データ、自動化実験設備を結合し、材料探索から合成経路設計、実験結果の再学習までを「閉ループ化」する国際的な物理・デジタル統合基盤への接続である。



公表されているのは「参画」という事実のみ。投入データ、対象製品、知財条件などのコア戦略は依然としてブラックボックス（未公表）である。

グローバル地政学的ケイパビリティマップ



■ **覇権の構造:** 米国の計算インフラ (GPU) と欧州の知識基盤 (Lab/Data) を、アジアの製造基盤へ接続する多極的エコシステム。

時期

パートナー

技術
スコープ

戦略的
意味合い

2021

日立製作所 /
シグマアイ

有機材料データ・
量子アニーリング



「実験回数の削減
(約1/4へ)と配合最適化」
- 単一プロセスの最適化

2022-2023

IBM Watson



「20以上の事業部門で
特許・文献から100以上
の新規用途を発見」
- 市場・意味の探索

2024-2025

blueqat /
萩原工業・NEC



「再生プラスチックの
品質安定化、製造時間
25%削減」
- 製造プロセスへの拡張

2026 (Now)

AI Materials
Foundry



単一最適化を超えた
完全な閉ループ

「個別最適 (Point
Optimization)」
から「国際的な
閉ループ生成
(International
Closed-Loop
Generation)」
へのパラダイム
シフト。

Layer 4: 自律的統合・合成

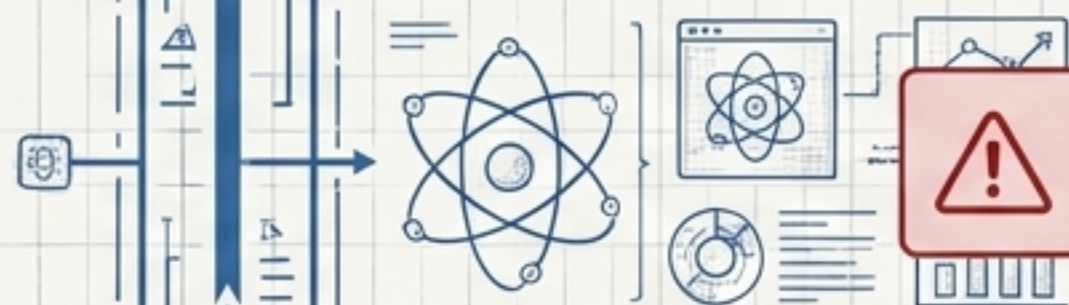
MIRA routing validated candidates to high-throughput labs (e.g., autonomous robotics) for synthesis and characterization.



Friction: hardware variability and yield

Layer 3: 物理検証

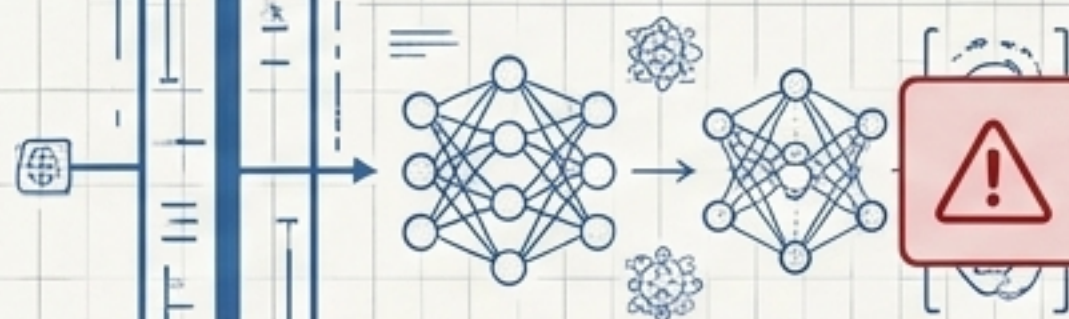
Meta's UMA (Universal Models for Atoms), NVIDIA kUPS, DFT (Density Functional Theory) for stability verification.



Friction: computational cost vs. accuracy

Layer 2: 生成モデル

GNNs, Diffusion models (MatterGen), producing millions of hypothetical compositions.



Friction: out-of-distribution hallucinations

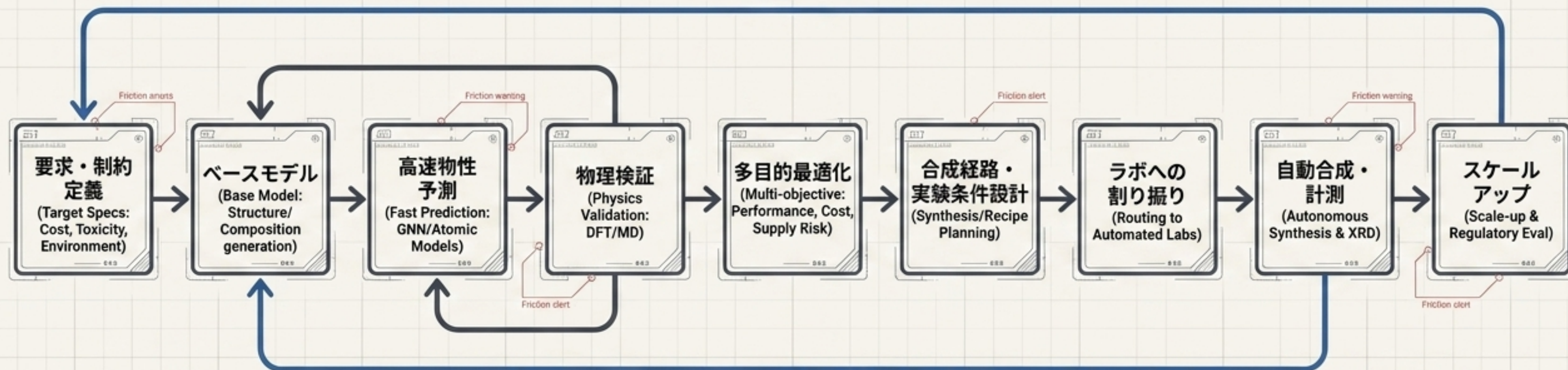
Layer 1: データ基盤

Experimental, structural (CCDC/ICSD), literature (Wiley), failure logs.



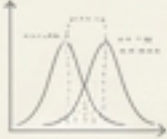
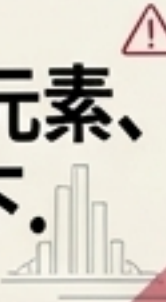
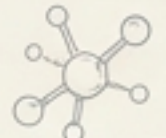
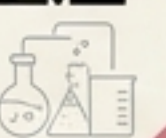
統合材料開発ワークフロー: 自律的閉ループ最適化

能動学習



能動学習

AI材料開発における技術的監査と制約要因

アルゴリズム	材料開発での機能	主な限界・ボトルネック
拡散モデル / VAE 	目的物性を満たす未知候補の逆設計 	限界: 学習データ分布外（希少元素、特殊構造）での極端な精度低下. 
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 	限界: 反応、欠陥、極端条件への転用性に未検証の領域. 
密度汎関数理論 (DFT) 	安定性、電子状態、熱挙動の最終検証 	限界: 莫大な計算コスト、有限温度や乱れの表現不足. 
能動学習 / 自律実験ロボット 	合成・評価・再学習の高速反復 	限界: 設備間差、例外処理、量産プロセスとの乖離. 

AIの探索能力は向上したが、物理法則とハードウェアの制約をバイパスできるわけではない。

プロセス・失敗データ & 制約データ

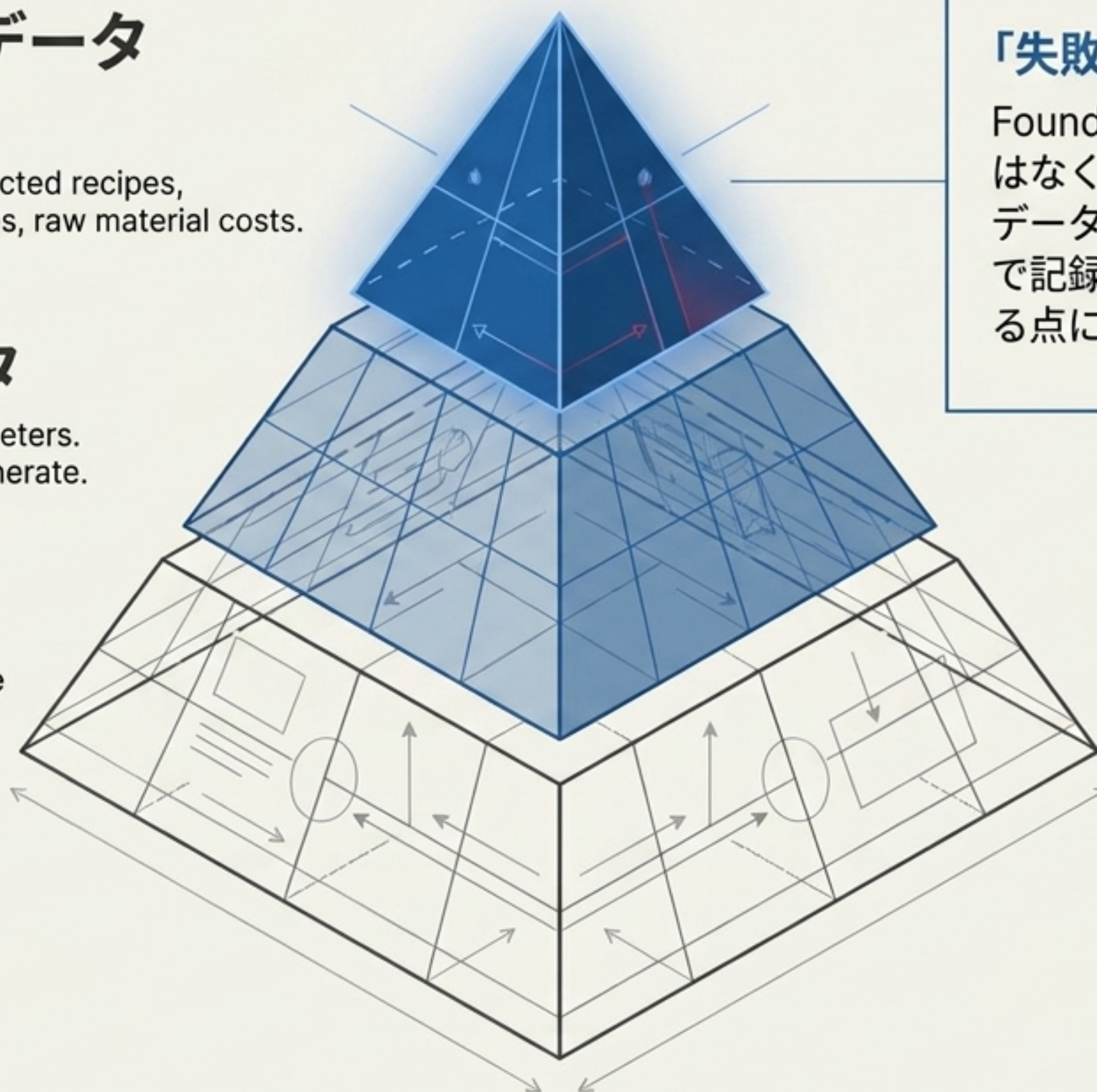
The Apex. Scarcest asset. Unreacted recipes, byproducts, equipment anomalies, raw material costs.

計算・物性データ

DFT outputs, specific test parameters. Requires internal compute to generate.

構造・文献データ

Foundational. Publicly accessible or licensed (CCDC, ICSD, Wiley). High volume, low differentiation.

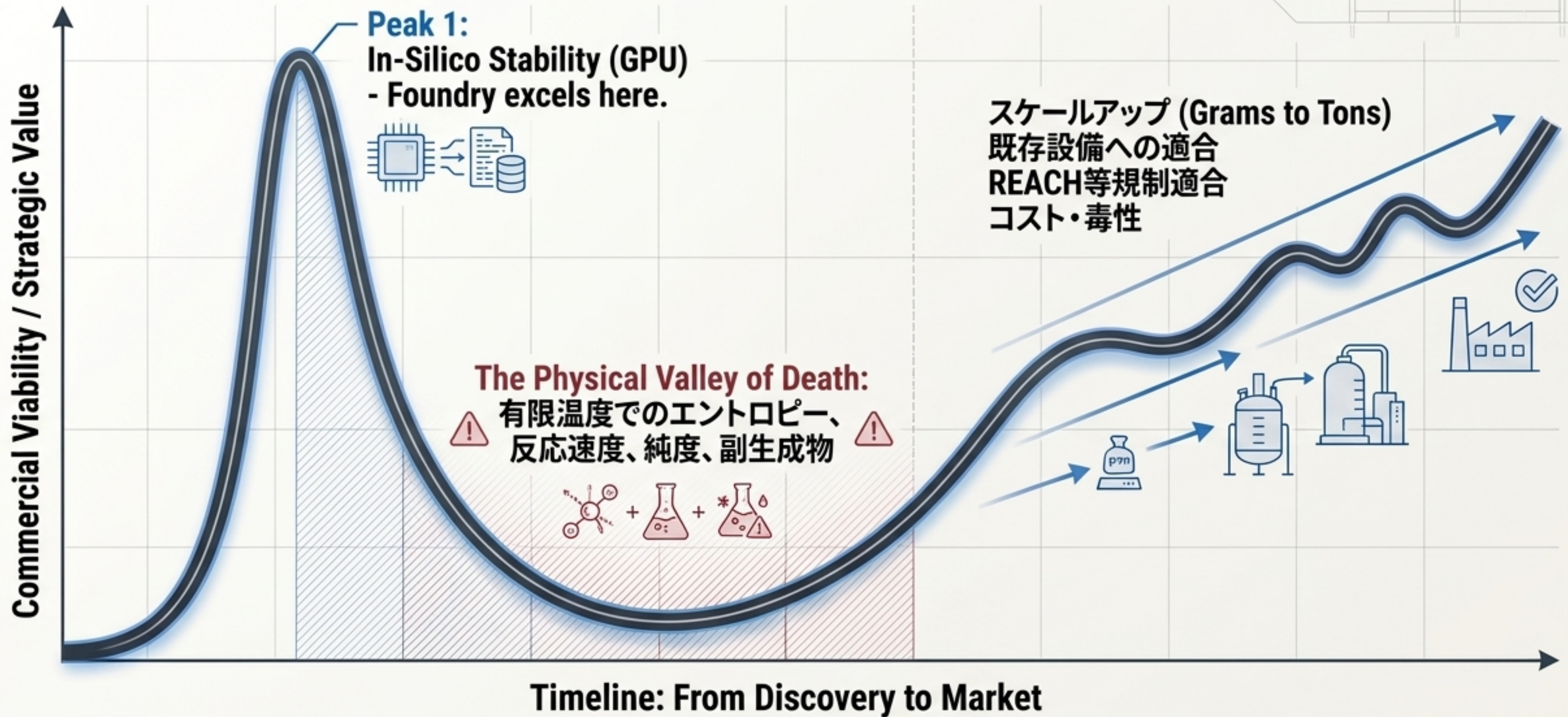


「失敗データ」の非対称性:

Foundryの真の価値は成功事例ではなく、人間が記録しない『失敗データ』をロボットが同等の粒度で記録し、モデルの精度を補正する点にある。

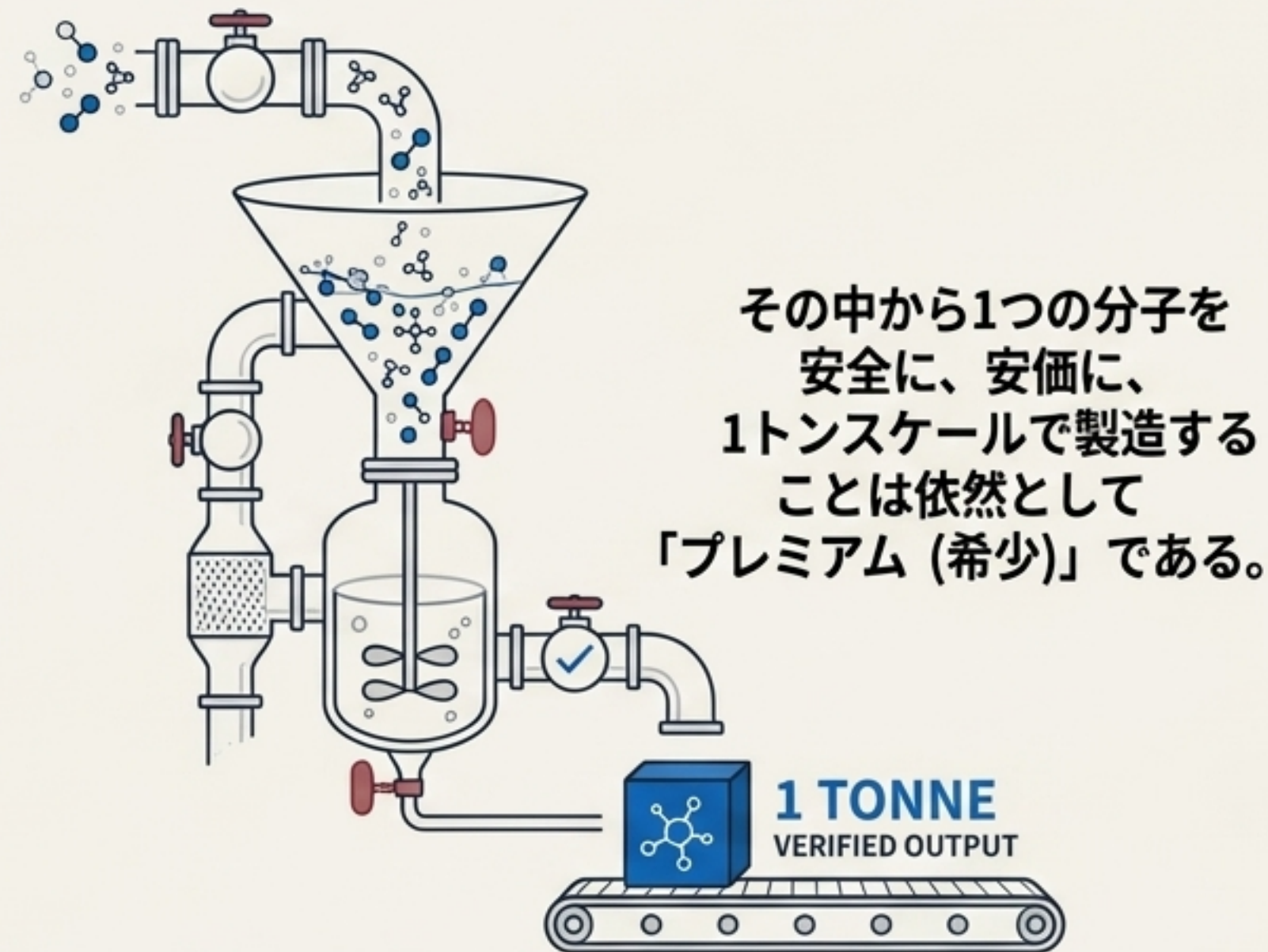
ハード・リアリティ：宣伝上のマイルストーン vs 実証的限界

	↗ 公表成果	⚠ エビデンス上の注意
GNoME (DeepMind)	● 220万の安定候補発見、736の独立実験一致。	○ 「計算上（0ケルビン環境）の安定」であり、実際の合成可能性や量産性、毒性評価は担保されていない。
MatterGen (Microsoft/Meta)	● 条件付き生成率の大幅改善、1候補を目標物性の20%以内で合成。	○ 実験実証は極めて限定的。
A-Lab (Berkeley)	● 17日で57目標中36材料を自律合成。	○ 試行した353レシピのうち目標物生成は30%のみ。副生成物や純度の課題が残存。
CuspAI / Kemira	● 300兆の空間探索、6ヶ月で20候補検証。	○ 企業発表のみ。査読論文による独立検証、候補構造、評価基準は全て非公開。



AIは「**最初の1マイル**」を劇的に短縮するが、**商業化のボトルネック**は依然として「**物理的なスケールアップ**」に存在する。

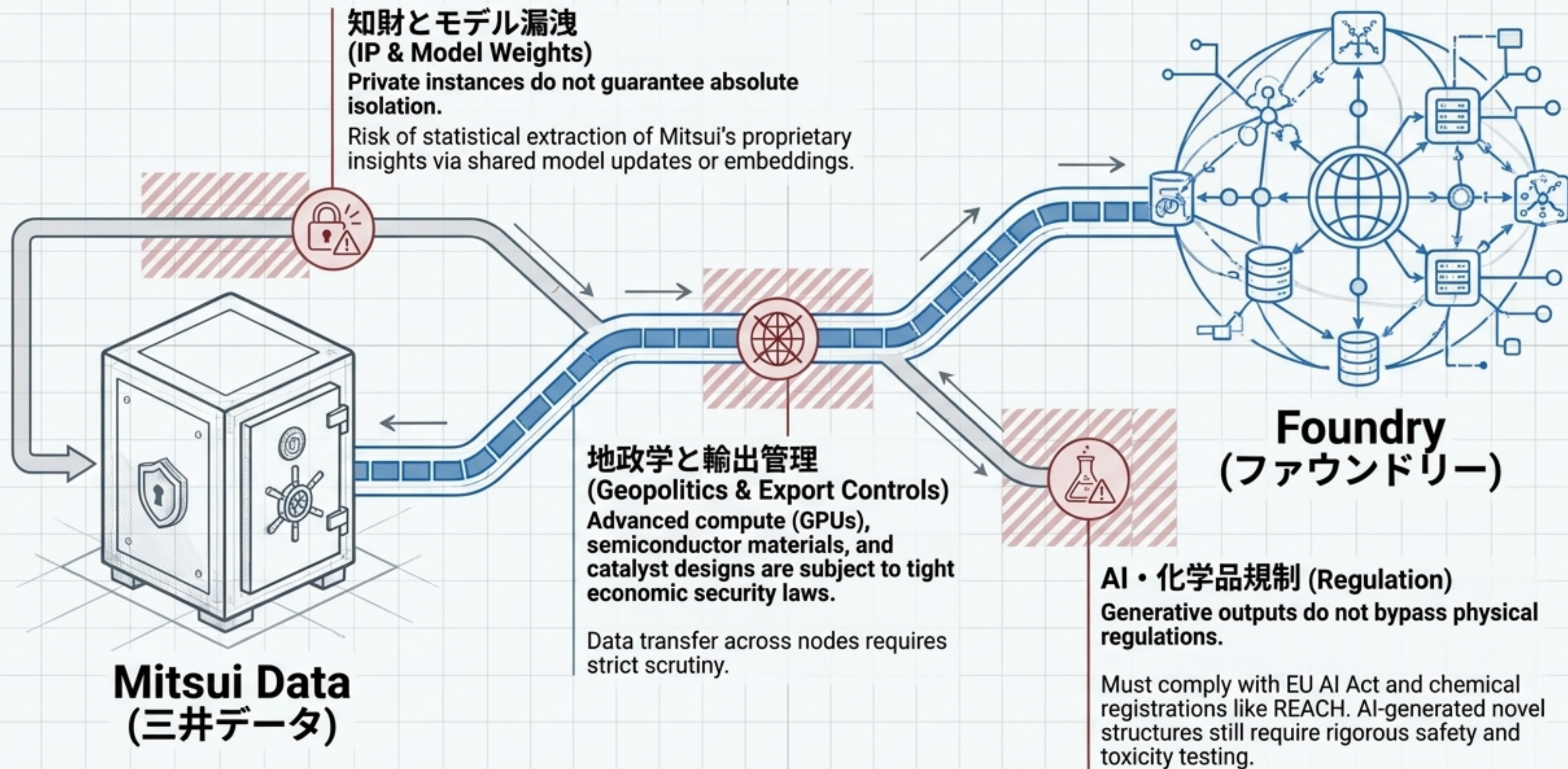
ラストマイルとプラットフォームのパラドックス



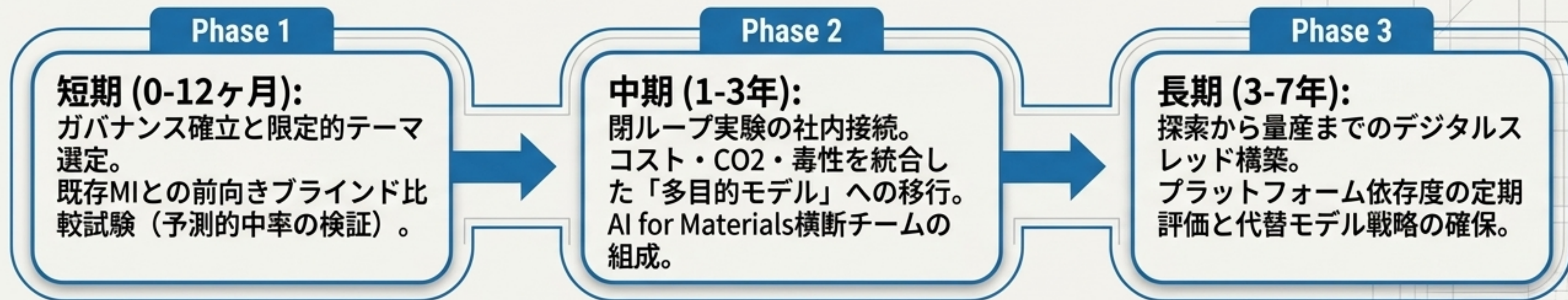
Strategic Imperative: 三井化学の競争優位性は、Foundryの「AIへのアクセス」自体からは生まれない。AIの出力結果を自社の「量産化エンジニアリング」「顧客統合」「コンプライアンス（規制対応）」とどう結びつけるかに懸かっている。

⚠ Warning: 価値の源泉をCuspAIに依存する「単なるデータ提供者（Dumb Pipe）」への転落を防がねばならない。

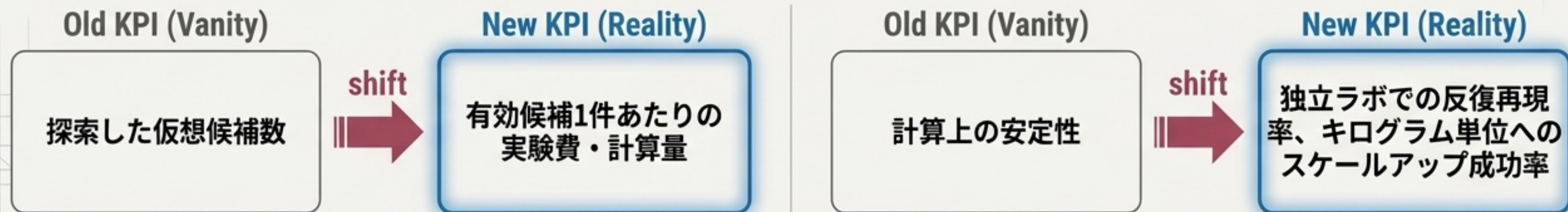
データ共有とフリクションポイント (Data Sharing & Friction Points)



推奨ロードマップ



評価指標の転換 (KPI Shift)



AI Materials Foundryへの参画はゴールではない。
物理的制約を克服する「自社固有の閉ループ」を完成させるための始点である。