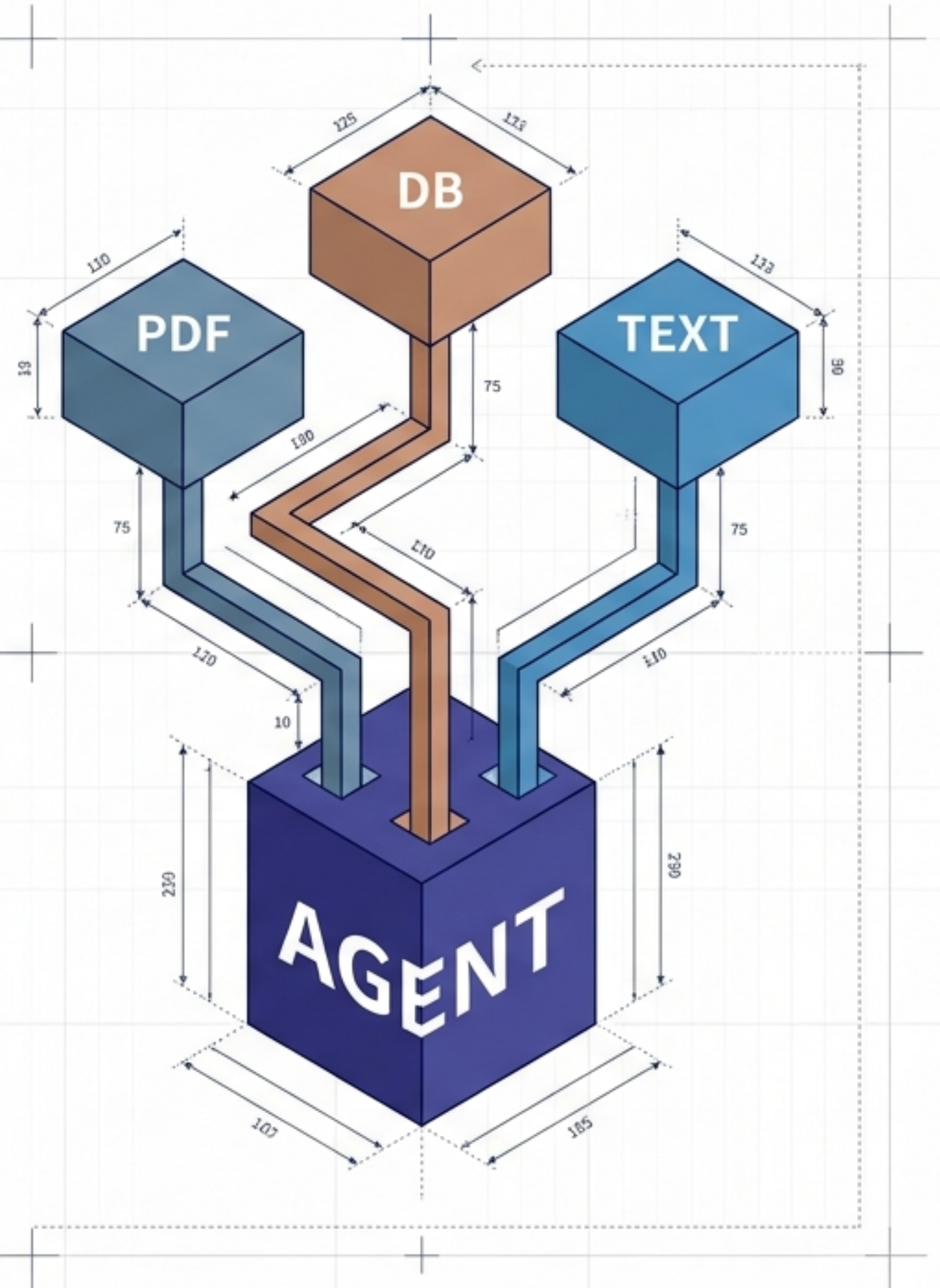


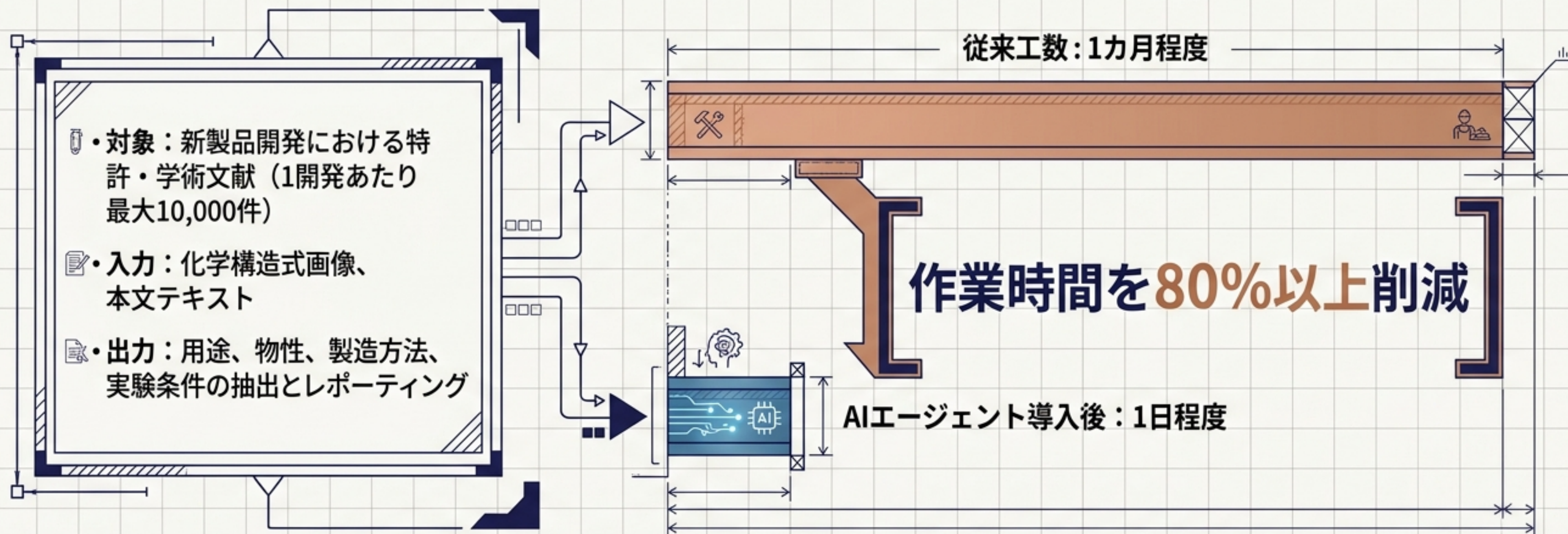
# 三井化学AIショックの解説と「統合のブループリント」

構造式文献調査における「検索」から「自律型エージェント」へのパラダイムシフトと、R&D・知財部門のための実践的実装ガイド

[CONFIDENTIAL / EXECUTIVE BRIEFING]



# 事象：三井化学「文献調査AIエージェント」の本格稼働（2026年4月）



単なる「AI検索ツール」の導入ではなく、1万件規模の文献確認・外部DB参照・レポート作成を『一気通貫の業務ワークフロー』として実用化した点に本質がある。

# 誤解と現実：従来サービスは「性能が悪かった」のか？

## 【神話】 (Myth)

AIが初めて「化学構造式を検索」  
できるようになった。

既存の特許・文献データベースは  
読解性能が劣っていた。

三井化学は画期的な「万能AIモデル」  
を単独開発した。

## 【現実】 (Reality)

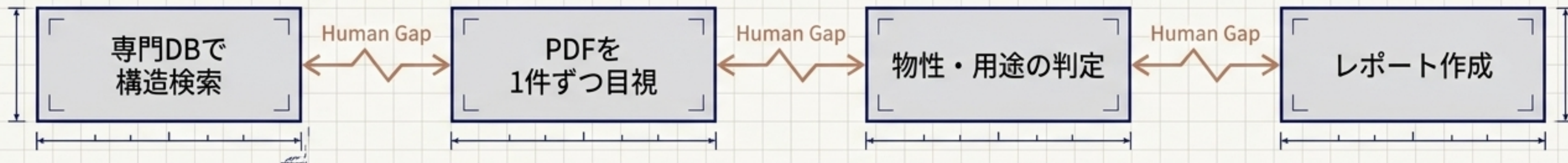
構造検索自体は新規ではない。CAS、  
Derwent等は昔から強力な専門索引と  
マーカッシュ検索を提供している。

検索性能は高い。しかし、「文脈を読み、  
比較し、レポート化する」工程がシステム  
外（人間）に取り残されていた。

画像認識+本文読解+外部DB参照+レポート  
生成を、自社のR&D業務フローに合わせて  
自律処理（エージェント化）した「統合  
の勝利」である。

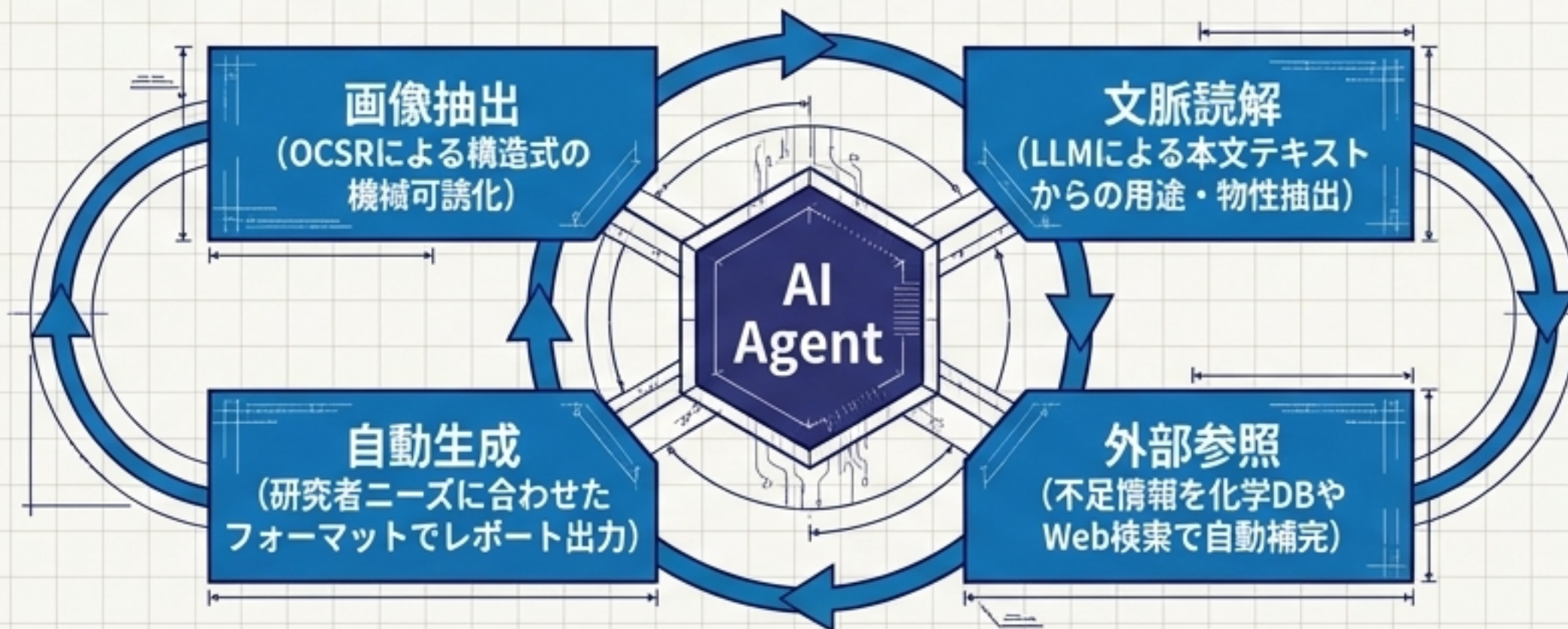
# 「検索エンジン」から「ワークフロー・エージェント」へ

## 従来型：分断されたプロセス



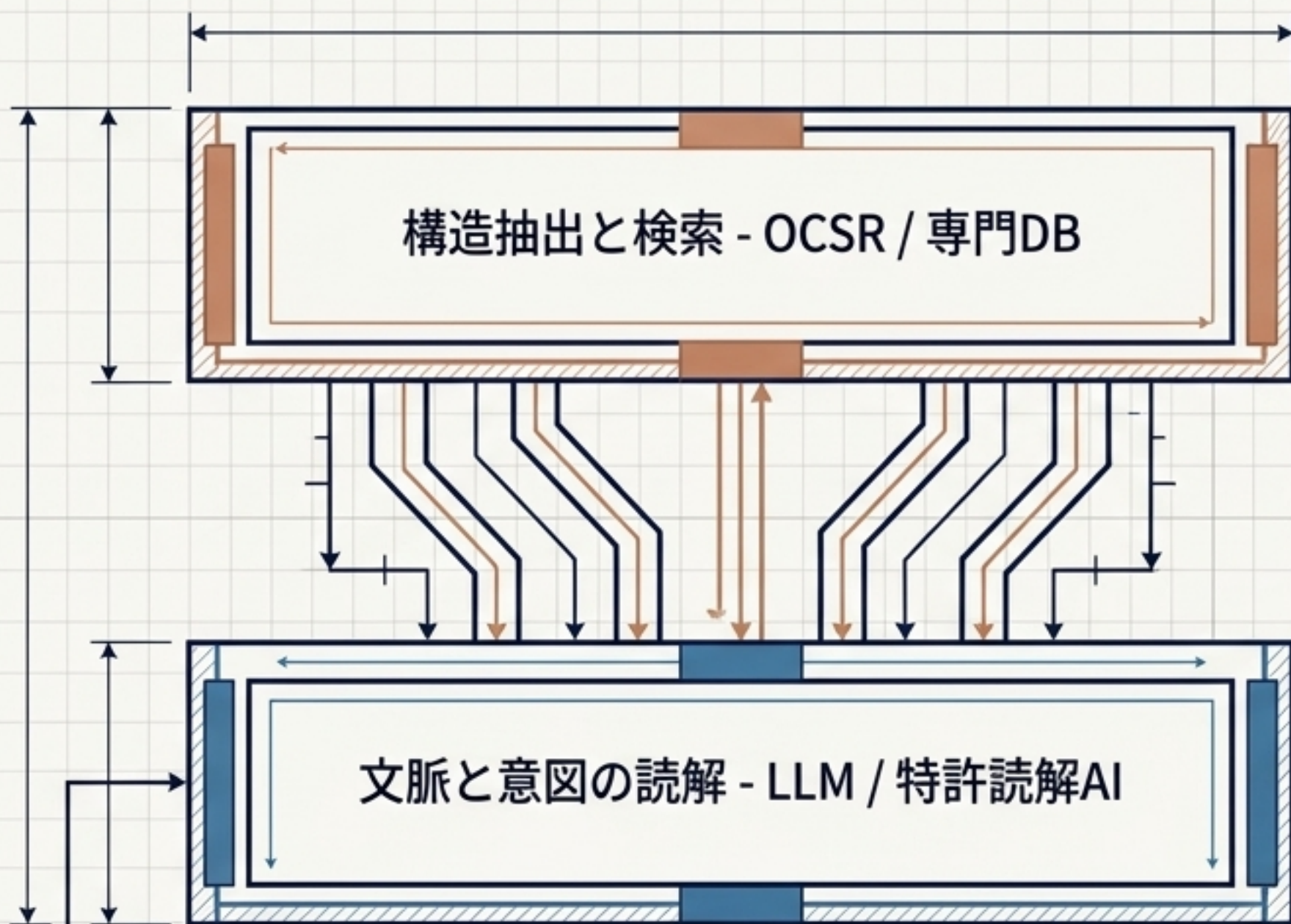
検索は強力だが、読解・統合・出力は「人間の専門家」に依存。

## 三井化学型：自律エージェント・ループ



人間は「指示」と「最終確認」のみ。  
工程間の摩擦をゼロ化。

# 技術的障壁：「構造式を読む」と「文献を読む」は全く別の能力である

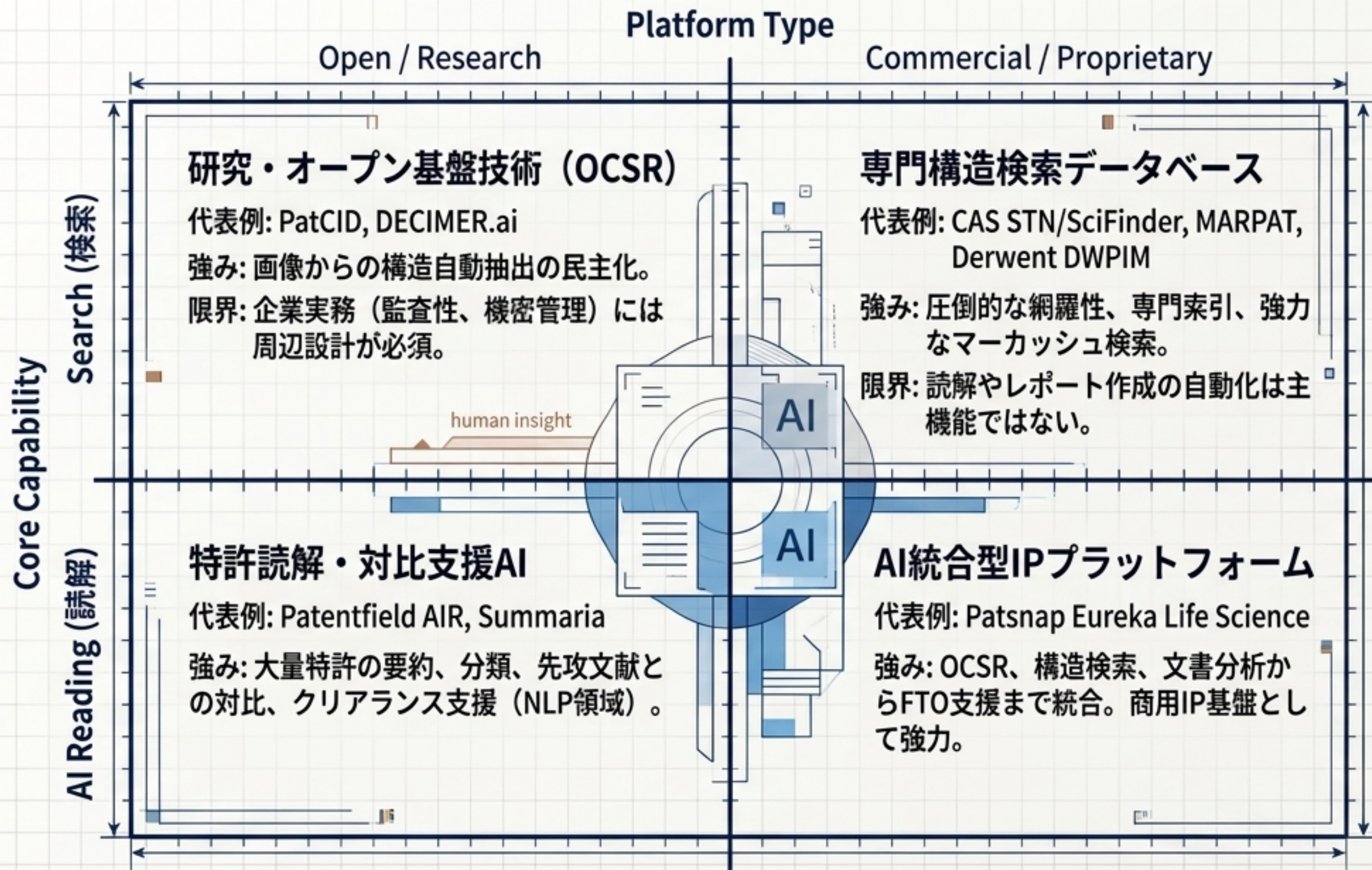


Target	画像、SMILES、マーカッシュ構造、ポリマー
The Difficulty	ノイズ、スキャン品質、手書き図面、複雑な置換基表や曖昧表現（マーカッシュ範囲）の正確な解釈。
Key Tech	CAS, Derwent, DECIMER.ai, PatCID

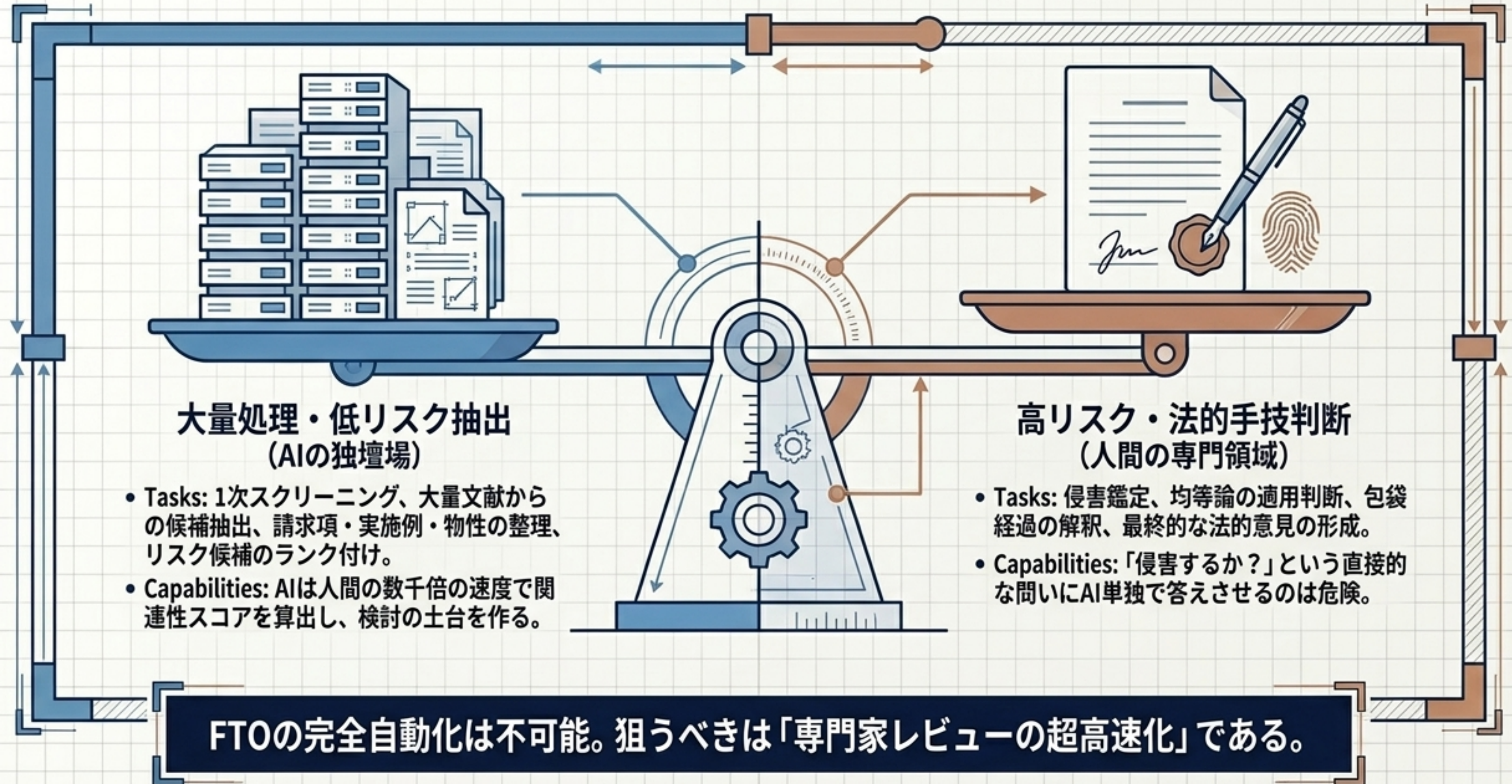
Target	用途、物性、製造方法、実施例、SAR（構造活性相関）
The Difficulty	表や図と本文の紐付け、実験条件の抽出、否定表現の理解、特有の専門文脈（特許クレーム等）の正確な解釈。
Key Tech	Patentfield AIR, Summaria, Patsnap Document Analyzer

これら2つの異なる能力（視覚的抽出と意味的理解）を橋渡ししたことが、エージェント型システムの真の価値である。

# ケミカルIP・文献調査ツールの市場ランドスケープ（2026年現在）



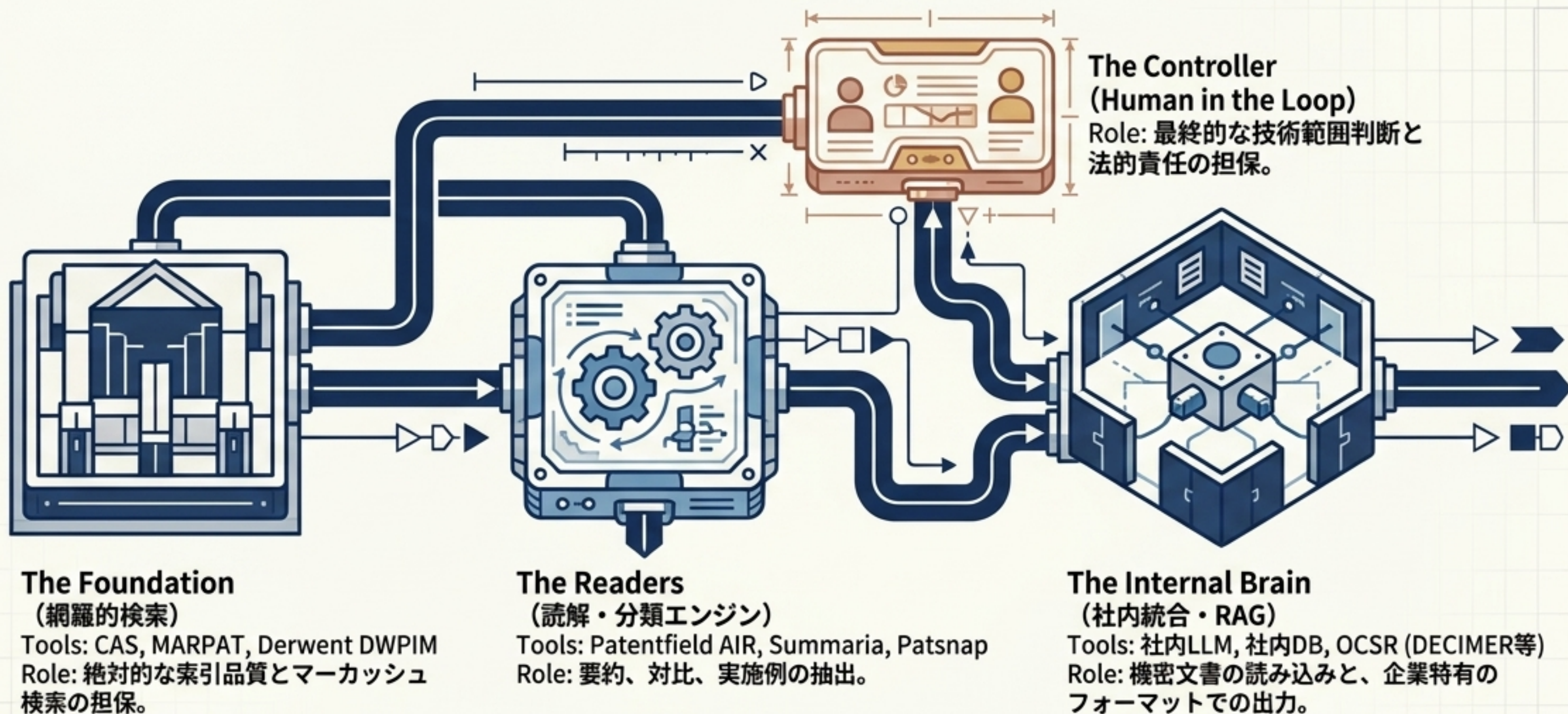
# FTO（侵害予防調査）の現実：AIは「裁判官」ではなく「証拠整理係」



# 侵害判断プロセスのAI代替性ヒートマップ

FTO Steps	AI適性	推奨ツール	人間の必要性
対象化合物・用途の定義	 中	LLM, 社内テンプレート	高 (前提が誤ると全工程が崩壊)
構造・マーカッシュ検索	 高	CAS, Derwent, Patsnap	中 (検索式・包含範囲の設計)
文献・請求項の一次読解	 高	Patsnap, Patentfield AIR, Summaria	中 (出典確認・誤読チェック)
リスク分類	 中～高	生成AI, ルールベース	高 (分類はあくまで補助判断)
侵害鑑定・法的意見	 低	AIは資料作成補助のみ	必須 (弁理士・知財部による最終判断)

# 統合のブループリント：最適解（Best-of-Breed）によるエージェントの構築



**Core Message:** 単一の「魔法のAI」は不要。検索DB+特許読解AI+社内LLMを自社のワークフローで「結線」することで、三井化学の8割の効果は再現可能である。

# 結論と次の一手：専門家の「拡張」へ



## 検索からエージェントへ

今後の知財・R&D調査は、個別の検索ツール利用から、複数ツールを統合した「AIエージェント型」へ不可逆的に移行する。



## 完全自動化の罠を避ける

AIに「侵害の有無」を直接問う設計は失敗する。AIには「構成要件の抽出」や「マーカッシュ包含の可能性」など、事実と証拠（出典）の整理を命じるべきである。



## 実装への第一歩

まず自社のR&D・知財ワークフローを分解し、「専門DBが担う検索」「AIが担う読解」「人間が担う判断」の境界線を再定義することから始める。

AIの最大価値は、**専門家を置き換えること**ではない。専門家が見るべき候補を絞り、根拠を揃え、**判断の「質と速度」**を劇的に引き上げることにある。