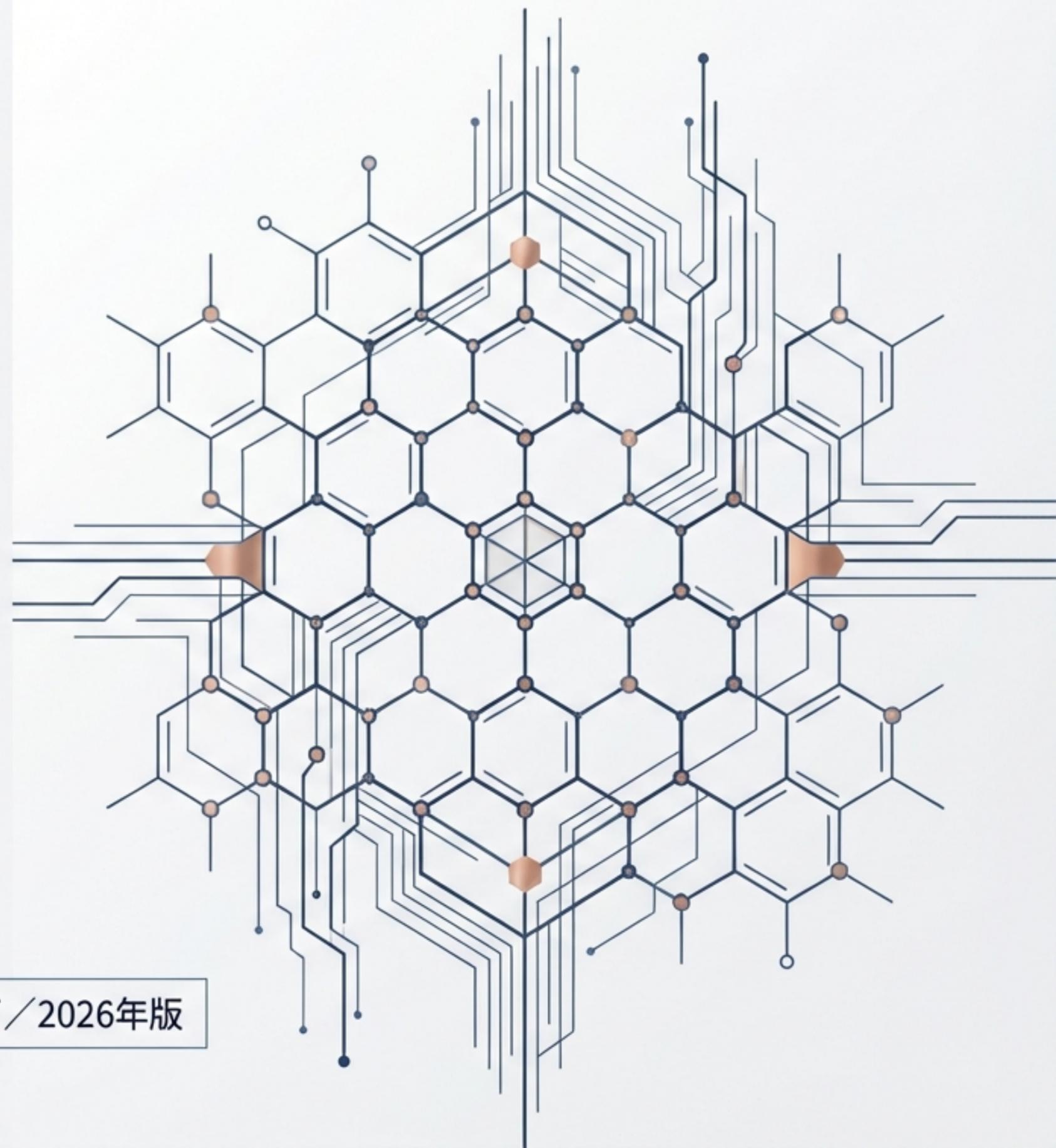


三井化学が切り拓く 「AIネイティブな 化学R&D」の現在地 と未来

文献調査の劇的進化から
自律型AIエージェントへの
パラダイムシフト

経営陣・ステークホルダー向けエグゼクティブ・ブリーフィング / 2026年版



EXECUTIVE SUMMARY: 3つのハイライト



1. 劇的な時間短縮と自律化

80%減

調査時間を「1ヶ月から1日」へ圧縮。画像とテキストを統合解析する自律型AIエージェントが、化学R&Dのボトルネックを打破。



2. 1,000億円規模のDX投資

VISION 2030

元IBMのCDO主導体制のもと、PetaFLOPS級の計算基盤と1万人規模の階層的DX人材育成が結実し、全社基盤化。

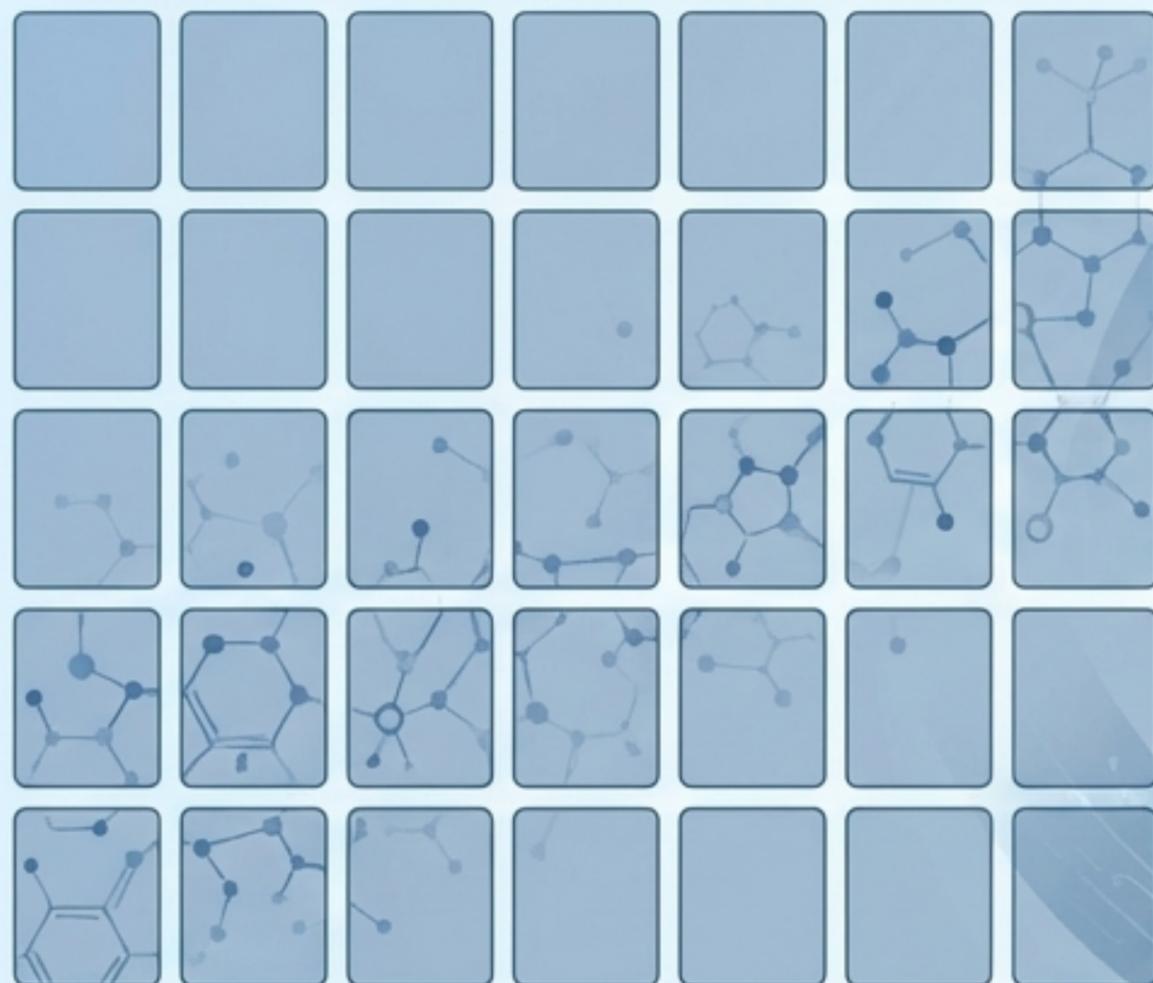


3. スクリーニングから生成へ

第3波

従来型のMIを超え、自律型実験室と逆設計のパラダイムシフトへ。世界の生成AI×化学トレンドの最前線を走る。

従来: 約1ヶ月



複雑な化合物の構造式を目視確認し、用途・物性・製造方法の調査を行う膨大な手作業。

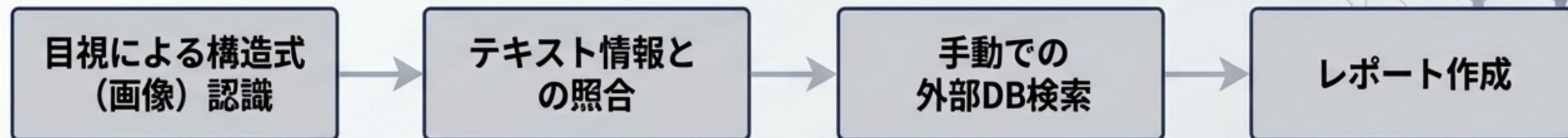
作業時間
80%
以上削減

AIエージェント: 約1日



2026年3月発表。自律的にDBやWebへアクセスし、特定化合物に特化したカスタマイズレポートを自動生成。

従来の直列処理（人間によるボトルネック）



マルチモーダルAIによる並列パイプライン（2026年版）



THE EVOLUTION: 8年にわたる戦略的AI実装の系譜

**Step 1: 効率化と予測
(2018-2021)**

- MI開発推進室設立。深層学習により有機材料開発の実験回数を1/4に削減。

**Step 2: 探索の高度化
(2022-2023)**

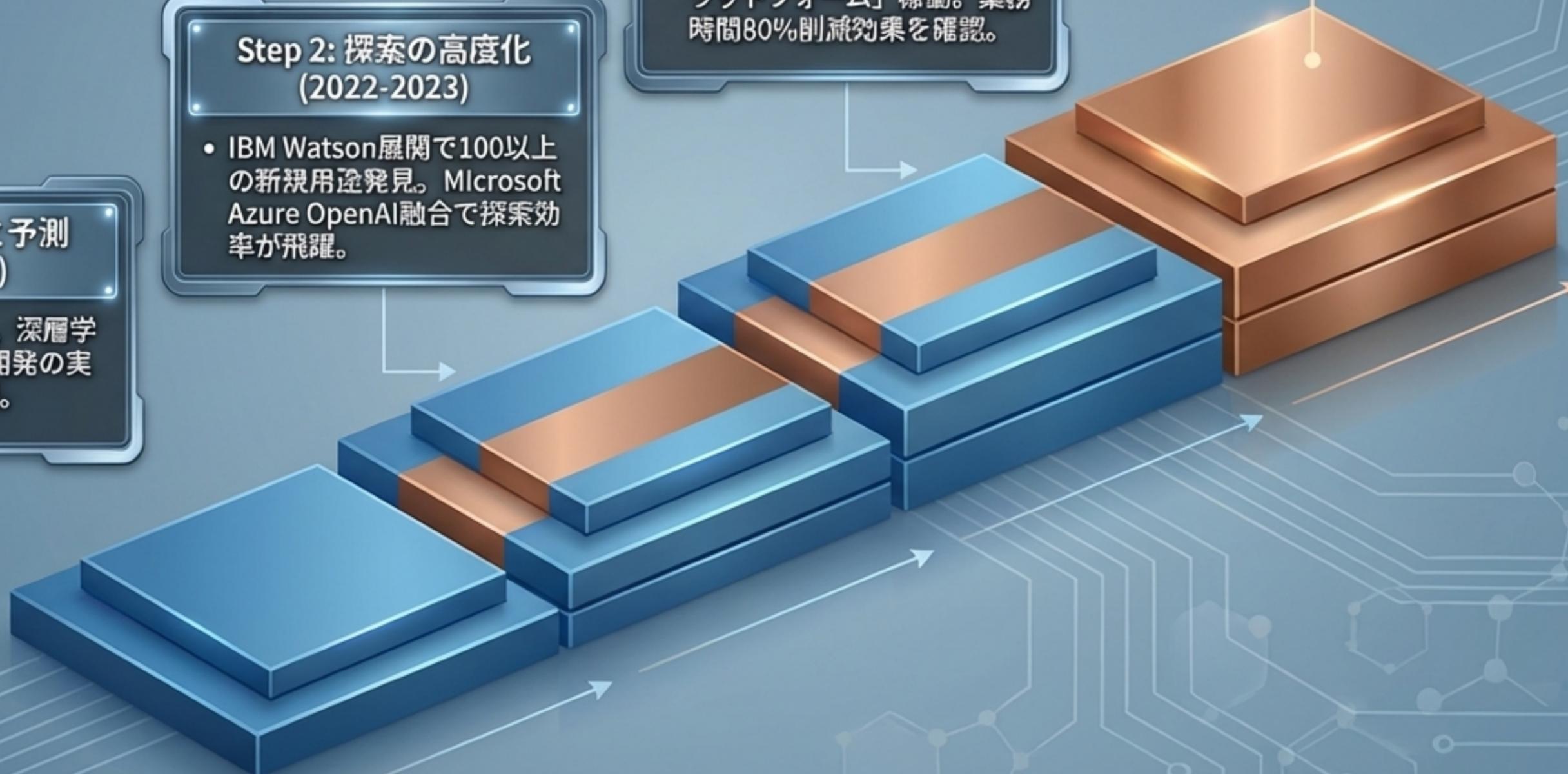
- IBM Watson展開で100以上の新規用途発見。Microsoft Azure OpenAI融合で探索効率が飛躍。

**Step 3: 特定業務の自動化
(2024)**

- 生成AI搭載「特許チャットプラットフォーム」稼働。業務時間80%削減効果を確認。

**Step 4: 自律的実行
(2026~)**

- 文献調査「自律型AIエージェント」発表。パイロットから本格運用へ向けたシフト。



BUSINESS IMPACT: 「効率化」から「トップライン成長」へのパラダイムシフト

コスト削減・効率化

トップライン成長・
新規用途探索

辞書作成数

約**10**倍

新規用途
抽出効率

3倍

新規用途
発見数

約**2**倍

※2023年4月からのIBM Watson × Azure OpenAI統合によるわずか4ヶ月の検証成果

「従来のAI活用は生産性・効率性が中心だったが、Watson活用で売上拡大に貢献するトップライン成長にAIが寄与し始めた」—— 三瓶雅夫氏 (CDO)

THE FOUNDATION: 「VISION 2030」を支える組織と経営コミットメント

事業層:現場起点での推進

各事業本部に「DXチャンピオン(課長級)」を配置し、現場主導のDXを制度化。

統括層:専門組織とリーダーシップ

全社横断の「DX推進本部」。元日本IBMでAI事業を30年率いた三瓶雅夫氏をCDOに招聘。

経営層:VISION 2030

DXを全5戦略の「基礎・基盤」と定義。2030年までに1,000億円のDX投資、営業利益2,500億円の目標へコミット。

INFRASTRUCTURE: デジタルと化学が交差する「デジタルサイエンスラボ」

竣工

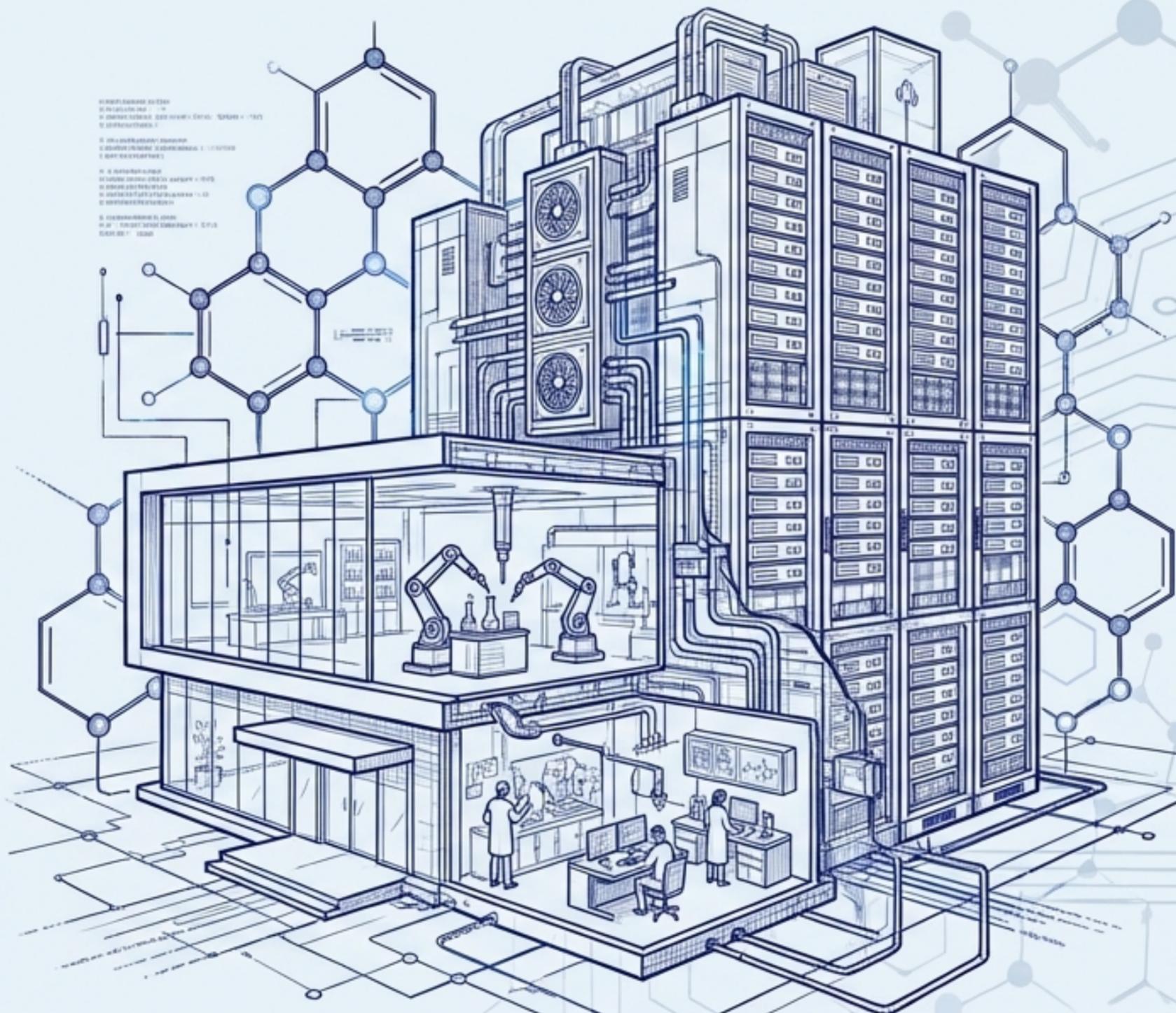
2024年12月 (千葉県袖ヶ浦市)

計算能力

PetaFLOPS (ペタフロップス) 級の
ハイパフォーマンス・コンピューティング
環境を配備。

ミッション

計算科学とデータサイエンスを統合し、
大規模分子シミュレーションと自律実験へ
向けたR&D DXの中核拠点として機能。



HUMAN CAPITAL: 1万人を巻き込む「DX人材育成ファネル」



対象：約10,000人(全社員・役員)
DXリテラシー基礎教育(2021年度完了)



対象：年間約1,000人
営業・マーケティング系社員向けの
データ分析基本知識



目標：165人(2025年度まで)
高度な社内データサイエンティスト(専門人材)

NEC・アビームコンサルティングと
共同策定した、化学業界特化型の
独自研修コンテンツを内製化。

ECOSYSTEM: 高度専門人材の定着と多層的な外部パートナーシップ

組織学習システム

200以上のDX事例を統一フォーマットで共有するリファレンスブック。

三井化学
DS・スペシャリスト制度
(2025年2月開始)

トップタレント・産学連携

向田志保氏(DX推進本部)。
信州大・東北大・阪大兼任教授として結節点として機能。

特化型AIベンチャー連携

CrowdChem(NLP材料探索) /
blueqat(量子×AI)

コアテクノロジーパートナー

IBM(Watson+GPT) / 日立製作所(MI) /
NEC(需要予測・育成)

INDUSTRY BENCHMARK: 国内主要メーカーのAI戦略比較

三井化学 (R&D特化型)

【コアの強み】
化学構造式解析など、
R&D固有課題に対する
独自AIツールの開発力。

【代表的成果】
文献調査AIエージェント、
特許チャット
プラットフォーム。

旭化成 (MI成熟度特化)

【コアの強み】
ほぼ全ての材料開発プロ
セスへのマテリアルズイ
ンフォマティクス適用。

【代表的成果】
低燃費タイヤ用ポリマー
開発を数年から約半年に
短縮。

花王 (全社浸透・汎用型)

【コアの強み】
グローバル規模でのAI
セントリックな組織風土
と汎用ツールの展開。

【代表的成果】
16,000人が利用、
「2027年までにDXという
言葉をなくす」目標。

THE MACRO SHIFT: 化学業界の「AIパラダイムシフト」

従来型R&D

- アプローチ: 既存候補を順次評価・選別する「順方向」
- 所要時間: 年単位の長期サイクル
- 人間の役割: 手作業による実験の実行者

スクリーニングから
生成(逆設計)へ

AIネイティブR&D

- アプローチ: 目標特性を指定し新分子を直接生成する「逆設計」
- 所要時間: 週間単位での高速サイクル
- 人間の役割: AIエージェントの監督者・戦略策定

GLOBAL CONTEXT: 「AIエージェント×化学」という世界的トレンドの第3波

三井化学の現在地

2026年3月の「自律型文献調査AIエージェント」は、専門ツールを統合した自律実行エージェントという世界的メガトレンドの最前線に位置する。

第1波: 予測とMIの普及

第2波: LLMによる知識抽出と生成

第3波: 自律的実験とエージェント (2025年～)

SYNTHESIS & OUTLOOK: AI戦略を推進する「三位一体」と次なる地平

R&D特化の実践的
ツール開発力

経営・技術の一体化
(CDO・VISION 2030)

重層的な人材基盤
(1万人育成～トップタレント)

The Next Horizon

デジタルサイエンスラボの計算環境 (PetaFLOPS) を最大限に活用し、「大規模分子シミュレーション」と「自律実験 (Autonomous Labs)」の連携へ。

R&D特化AIの強みを、トップライン成長と新材料創出のさらなる加速へ結実させる。