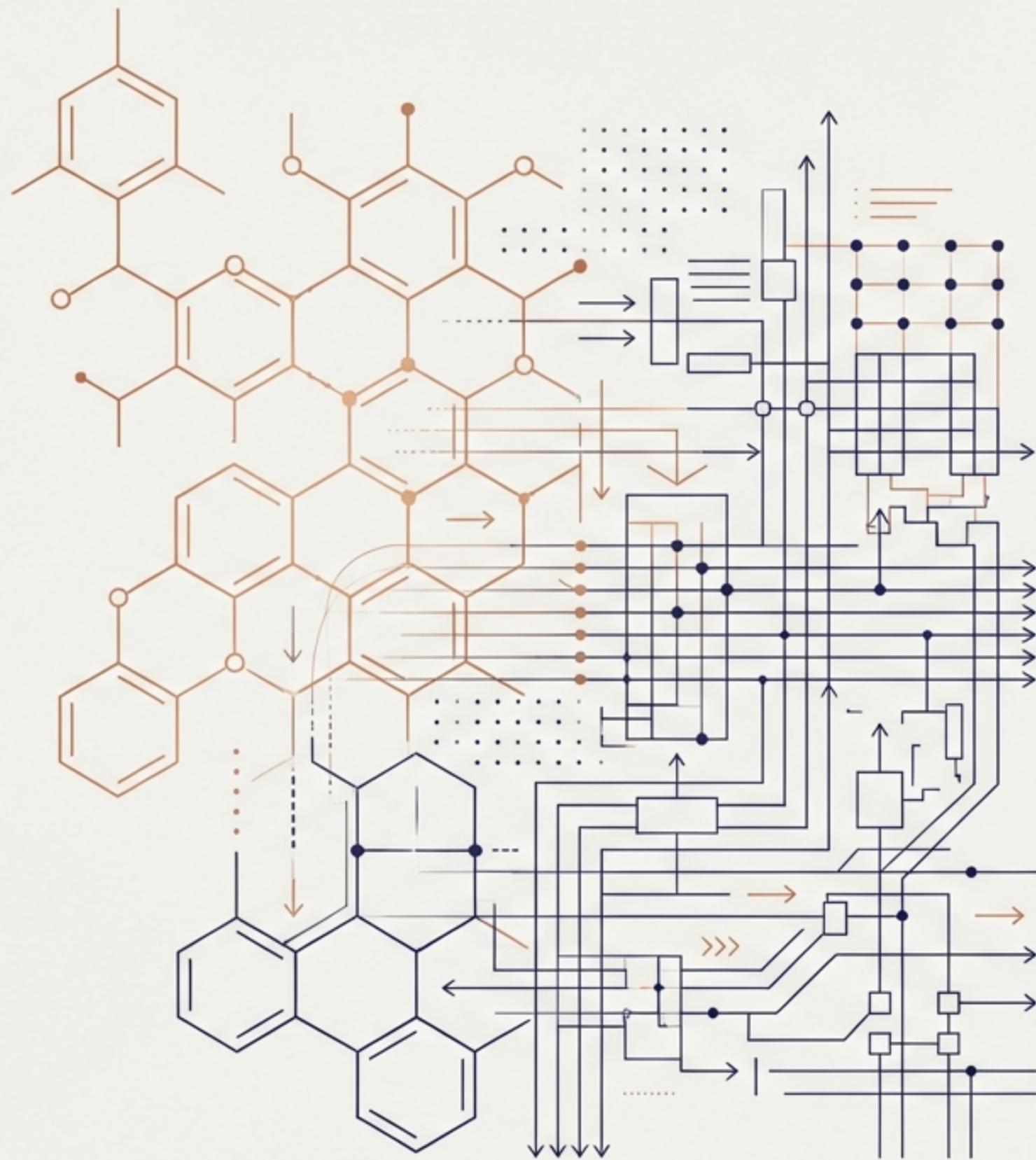

結びつく化学空間：三井化学が主導するR&Dの不可逆的パラダイムシフト

生成AI、マテリアルズ・インフォマティクス、量子コンピューティングの融合がいかにして「経験と勘」を凌駕し、化学産業のトップラインを再定義するのか。



限界を迎えた伝統的な「総当たり型」 R&Dアプローチ

現代の化学・素材産業は、複雑な課題に直面しています。しかし、新たな機能性材料の創は、依然として研究者の個人的な力量やアナログ実験回数に強く依存しており、これが決定的なボトルネックとなっています。

製品ライフサイクルの短期化

サステナビリティ対応

高度化する顧客ニーズ



課題の核心：

人間の想像力と物理的な実験回数の限界が、市場の変化スピードに追いつけない。

VISION 2030：コスト削減ツールから「攻めの経営戦略」への転換

三井化学は、デジタルトランスフォーメーション（DX）を単なる業務効率化とは見なしていません。長期経営計画において、DXは「トップライン（売上高）向上」に直結する企業変革の要です。

守りのDX（従来型）



- バックオフィスの業務効率化
- 残業時間の削減（コストカット）
- 既存プロセスの維持

攻めのDX（VISION 2030）



- アイデア創出プロセスの抜本的加速
- 既存製品の新規用途開拓（市場機会拡大）
- マーケットシェアを牽引するAI駆動型アプローチ

三井化学のR&Dを駆動する自律的イノベーション・エンジン

単一の技術導入ではなく、データ・人材・AIモデルが三位一体となってR&Dプロセス全体を書き換える「AI Factory構想」のエコシステム全体像。

ビジネスインパクト (Business Impact)

① 自律的文献解析
(インプットの革新)

② 新規用途探索
(ビジネスモデルの革新)

③ 逆問題的分子設計
(アウトプットの革新)

コア技術レイヤー (Core AI Technologies)

マルチモーダル
AIエージェント

ハイブリッドAI
(Watson + GPT)

SMILES/グラフLLM
(MI)

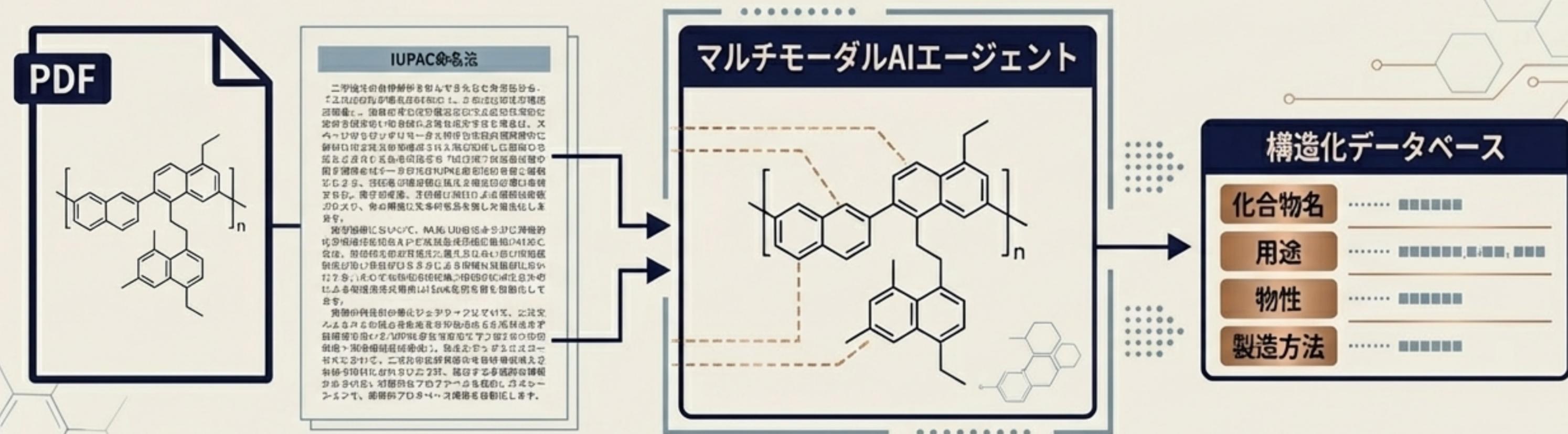
基盤レイヤー (AI Factory Foundation)

「新築」アプローチの統合データ基盤

全社リスキリングによるドメイン専門人材

技術的障壁の突破：マルチモーダルAIによる2D構造式の意味理解

化学論文の自律解析を阻んできた最大の壁である「二次元の化学構造式画像」。独自のマルチモーダルAIエージェントが、画像とテキストを統合解釈し、手作業で1ヶ月を要したデータベース構築を自動化します。



インサイト：画像とテキストを別々に処理するのではなく「紐付けて解釈」することで、散在する多面的な情報から網羅的なプロフィールを自動構築。

調査時間の80%削減がもたらす「研究者の創造性解放」

特許チャットプラットフォームと独自エージェントの導入により、文献調査・特許探索にかかる時間が従来比で80%以上削減されました。

従来の人手による調査（約1ヶ月）

目視による画像確認

Excelへの手入力

外部DBの個別検索

AIエージェントによる自律処理（約1日）

PDF取
り込み

自律的
抽出

レポート
生成

浮いた認知リソースをシフト：
創造的な仮説構築とイノベーションの探求

単なるコスト削減ではなく、人間でなければ不可能な高度な研究活動への
「戦略的オーグメンテーション（拡張）」です。

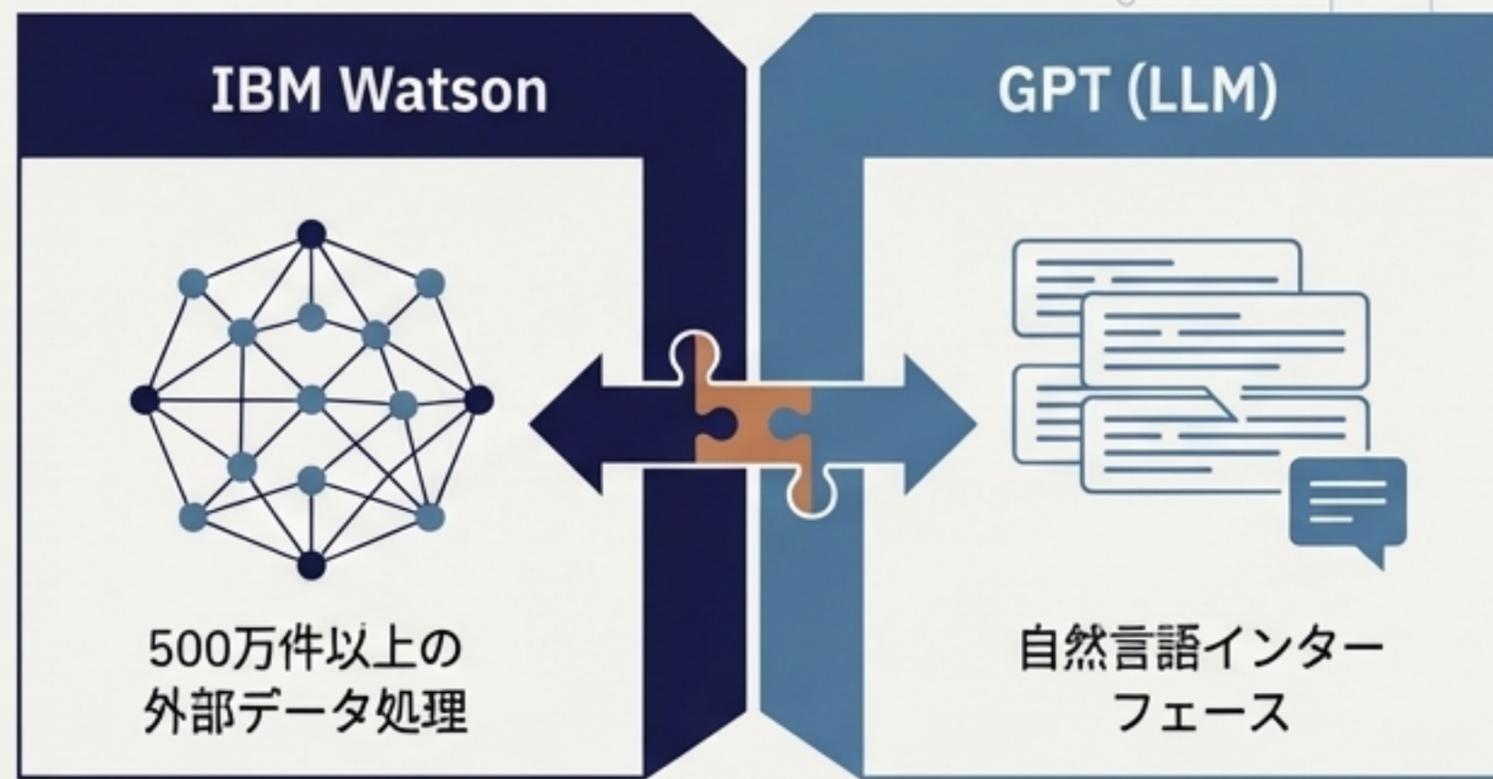
「素材提供型」から「能動的ソリューション提案型」への転換

企業のトップラインを持続的に成長させるため、三井化学は既存素材の「新規用途開拓」にAIをエクスペローラーとして活用。ビジネスモデルを根底から覆しています。

	伝統的な素材メーカー	三井化学のAI駆動型R&D
営業スタイル	受動的（要求仕様を待ち、素材を提供する）	能動的（潜在ニーズを先読みし、ソリューションを提案）
知見の扱い	個人の経験と勘（暗黙知）に依存	知識グラフ化されたデジタル資産
探索空間	人間の想像力と既存ネットワークの範囲内	AIによる事実上無限の化学空間からの「隠れた繋がり」の発見

戦略的ハイブリッドAI： エンタープライズAIと LLMの完全な役割分担

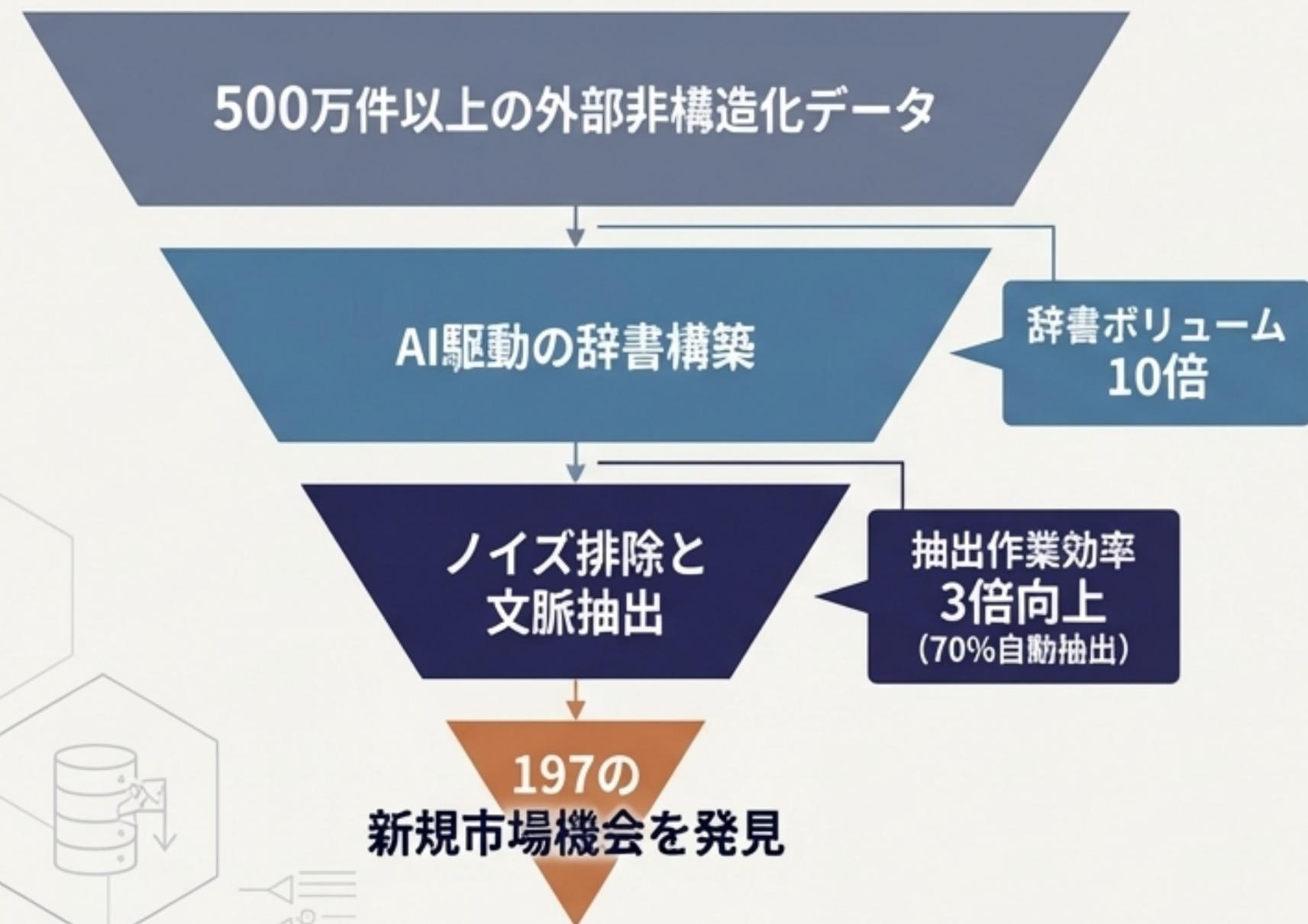
単一のモデルに依存しない堅牢なアーキテクチャ。500万件以上の非構造化ビッグデータから「隠れた繋がり」を発見するエンジンと、高度な文脈理解を担う推論レイヤーを融合。



		IBM Watson (知識処理エンジン)	GPT (高度推論レイヤー)
1	得意領域	固有辞書に基づく網羅的検索、 複雑な関係性のネットワーク可視化	文脈を捉えた意味抽出、高度な翻訳、 プロンプトの洗練化
2	役割	人間の認知バイアスを排除した 「事実と繋がり」の抽出	膨大なノイズからの文脈解釈と 対話型インターフェース

ハイブリッドAIが創出した197の新規市場機会

辞書構築プロセスの飛躍的効率化と、ノイズ抽出の高精度化が相乗効果を生み、有望な新規用途の発見数が単独システム運用時の「約2倍」へと倍増しました。



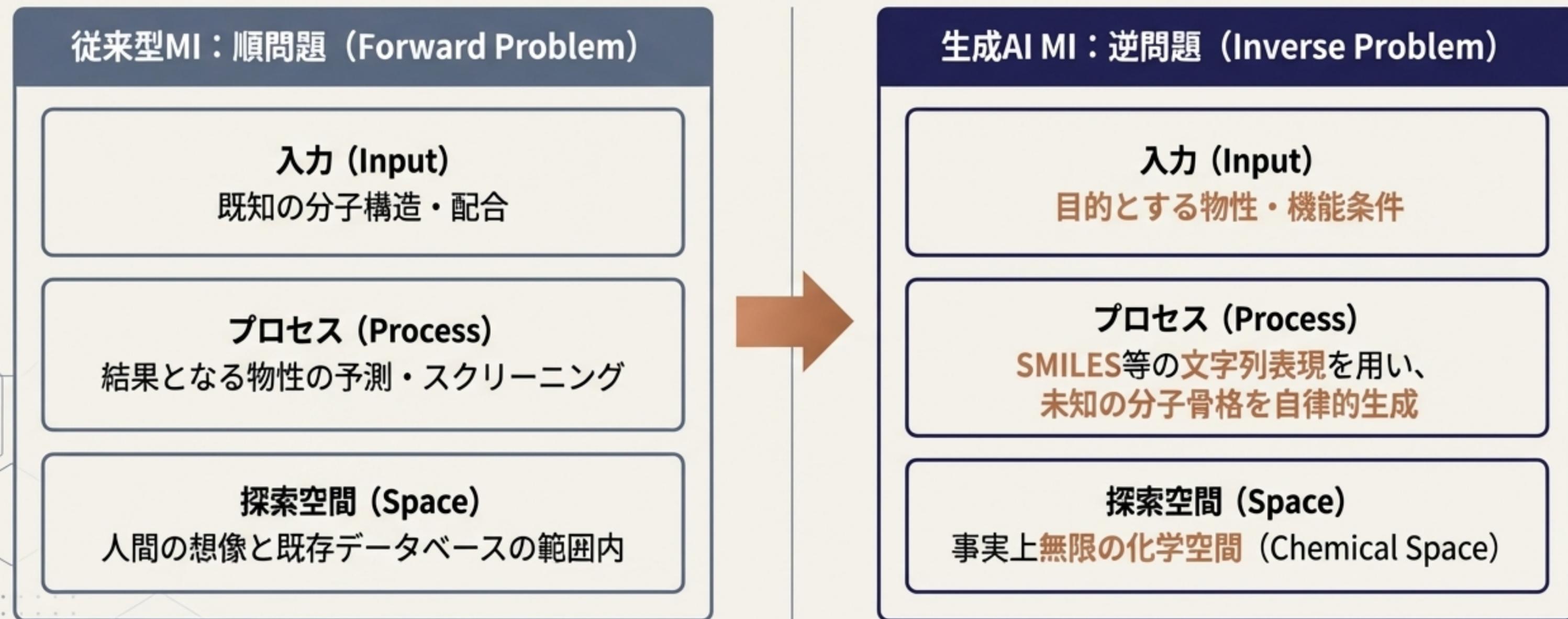
【知識グラフによるブレイクスルー事例】

SNS上の「ローカル鉄道がかび臭い」というニッチな不満データと、三井化学の「防カビ剤」がAI空間上で結びつき、新たなソリューション営業へと直結。

また「食品包材」用素材が全く異なる「電子部品」に適用可能である等、人間の認知バイアスを完全に超える発見が相次いで事業化パイプラインへ移行中。

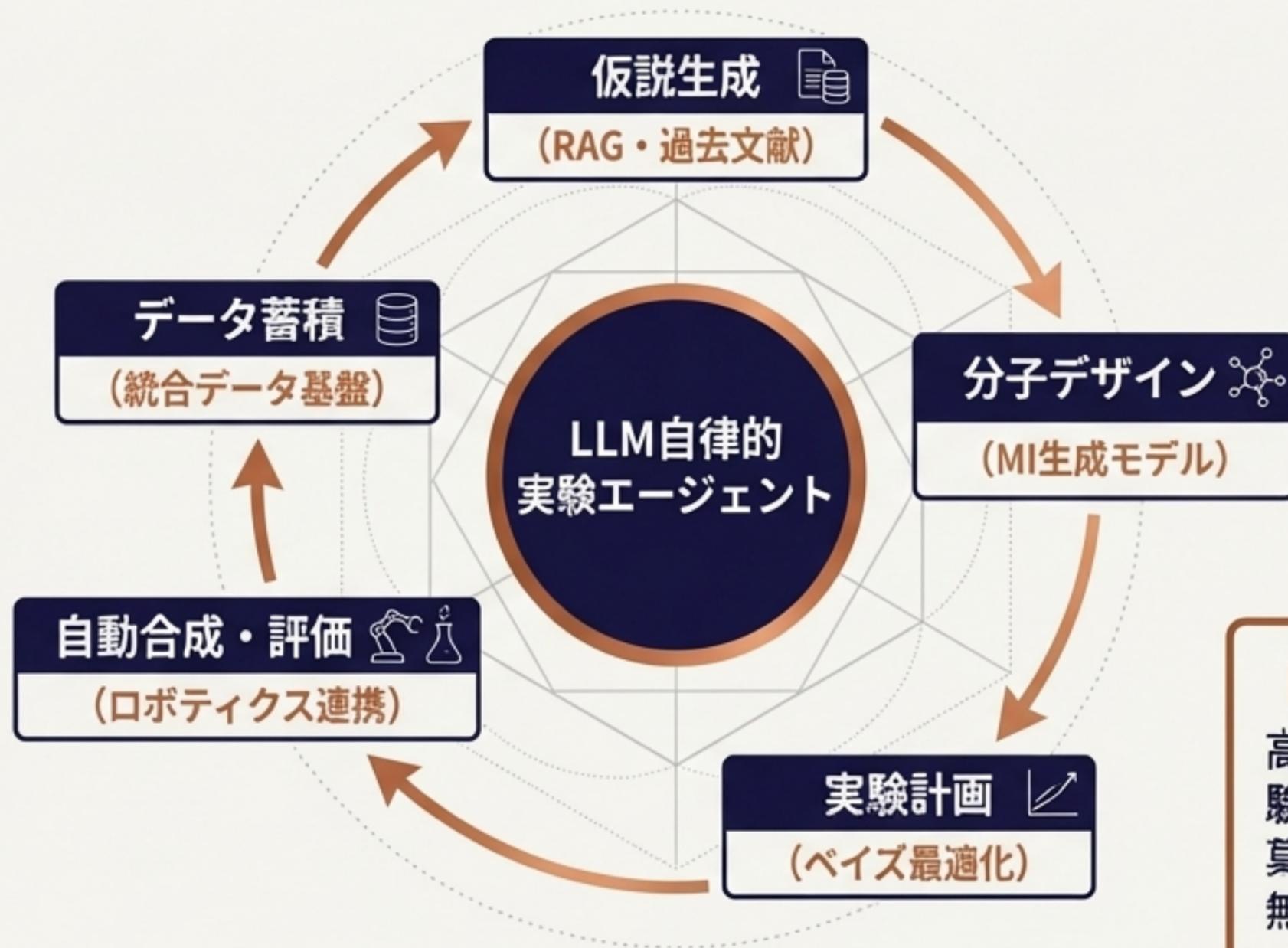
MIのパラダイムシフト：「順問題」から「逆問題（ゼロからの生成）」へ

既存のデータベースの枠内に依存する従来型のMIから、目的の物性を満たす未知の分子構造をAI自身に「言語として」描かせる次世代MIへの移行。



究極の競争優位：完全自律型クローズドループの実現へ

生成AIは単なる「分子の形状デザイン」にとどまりません。過去のデータからドメイン知識を抽出し、次に試すべき最適なパラメータを自律的に提案し続ける「実験エージェントの頭脳」として機能します。



【日立製作所との協業実証】
高性能な新材料開発に必要な「実験試行回数を4分の1に削減」。莫大なリソースと時間を圧縮し、無人探索サイクルを見据える。

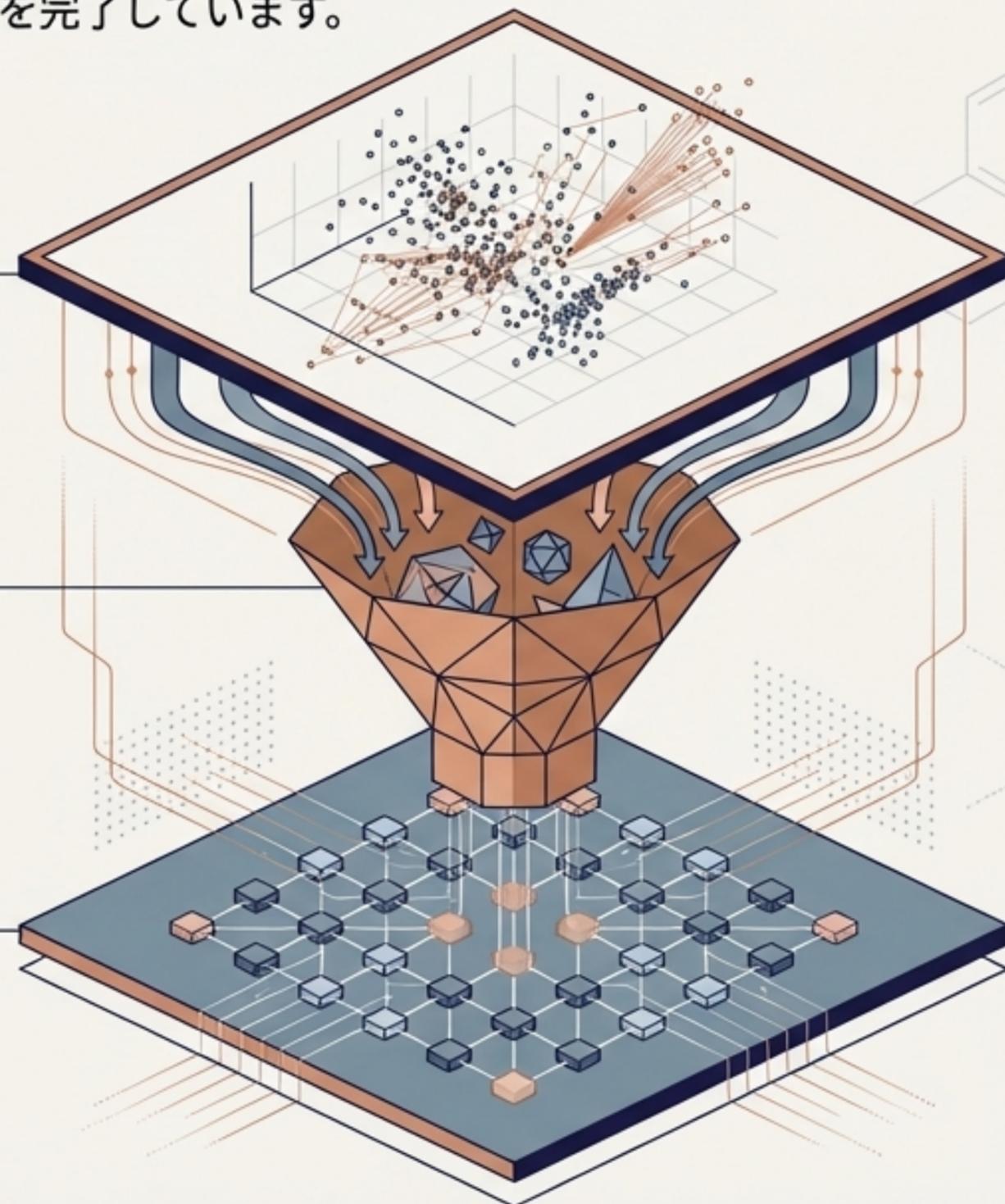
次世代計算基盤への布石：量子互換アーキテクチャの構築

生成AIが提示する無限に近い「組み合わせ爆発」を制するため、古典コンピュータ上でAIを動かしながら、将来の量子回路への移植を見据えた設計を完了しています。

特許文書データ
(SimCSEモデルによるベクトル化)

テンソルネットワーク技術
(モデル最適化・圧縮)

量子回路互換性
(将来の直接実行基盤)

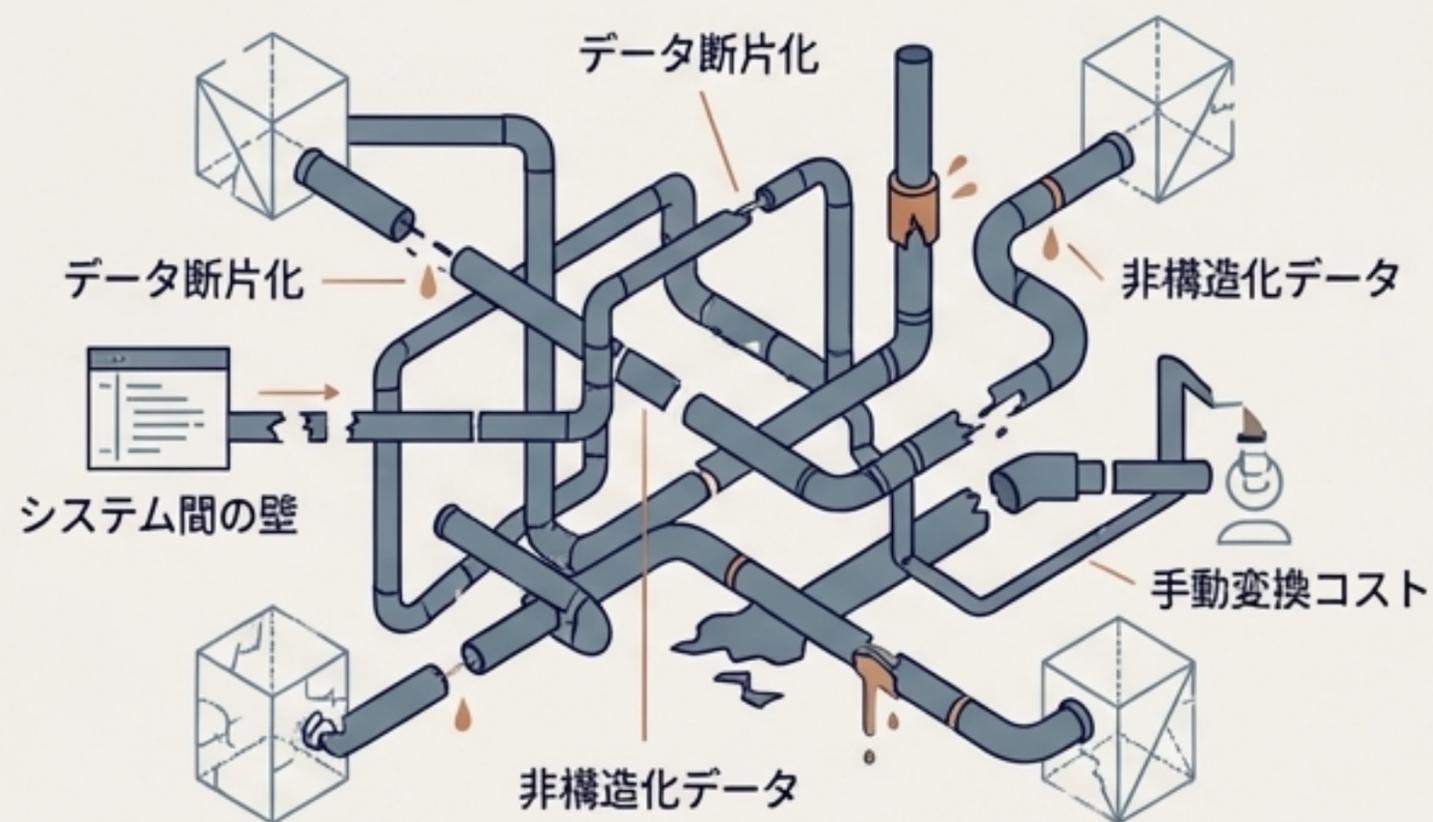


インサイト：特許文書を精緻なベクトル空間にマッピングし、テンソルネットワークで圧縮。現在稼働するAIモデルに、次世代ハードウェアへの「互換性」をすでに備えさせています。

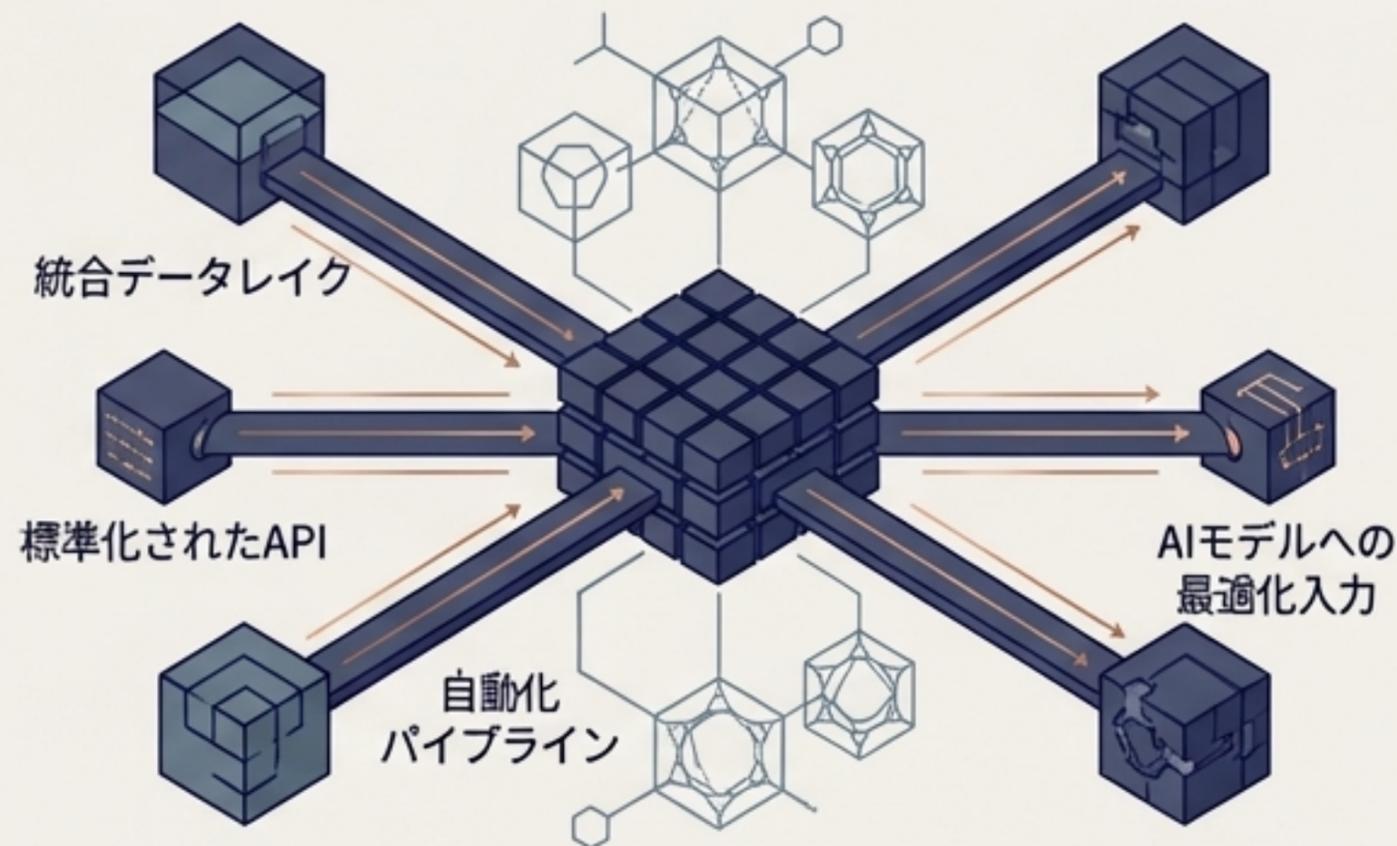
AIの命綱を握る「新築」アプローチの統合データ基盤

どれほど高度なAIモデルも、入力データが整理されていなければ機能しません。三井化学は、既存システムを「改築」するのでなく、ゼロベースで「新築」する強力な経営判断を下しました。

改築アプローチ (ツギハギの罫)



新築アプローチ (ゼロベースの中央集権設計)



戦略的ポイント: 事業部ごとにサイロ化していた数十年の実験履歴を標準化。AIのハルシネーションを防ぐ「グラウンディング (根拠付け)」の源泉であり、後発企業が決して模倣できない巨大な参入障壁。

現場知見×デジタルの融合：全社リスクリングによる内製化エコシステム

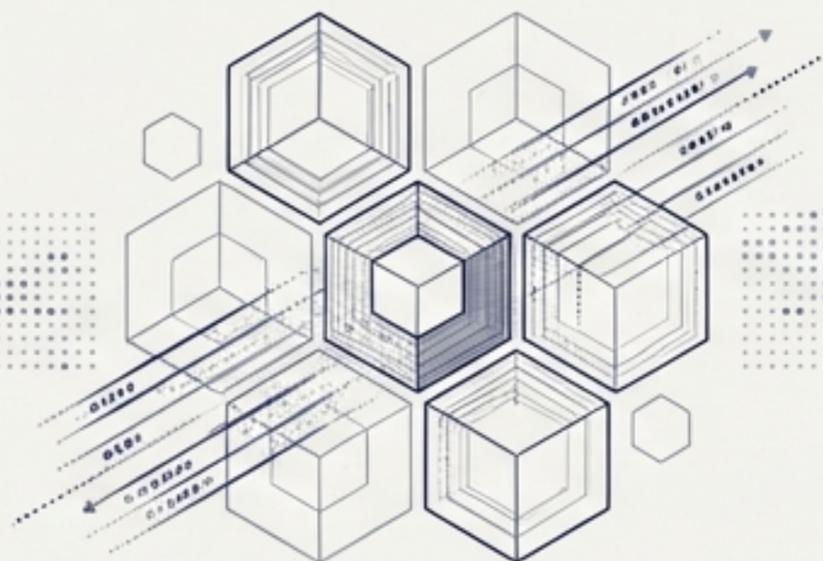
AIの出力を実ビジネスの文脈で評価できるのは、化学の複雑な現象を理解している専門家だけです。外部採用に依存せず、既存社員をリスクリングする独自プログラムを展開しています。



企業カルチャーの変容

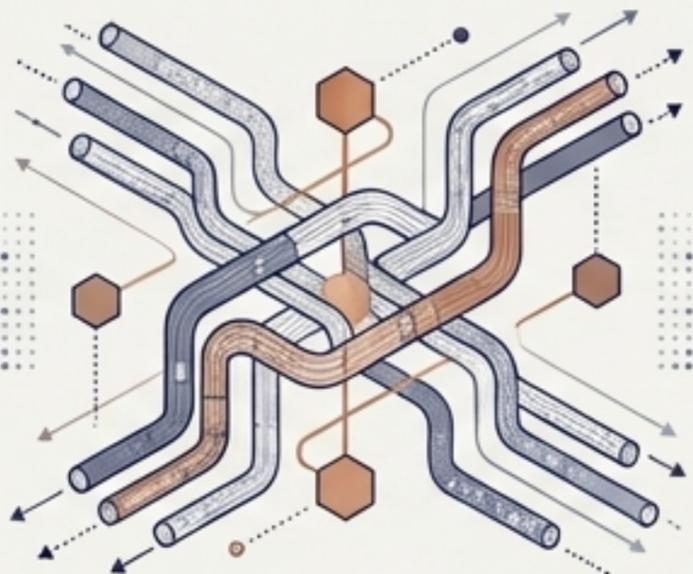
ルールベースの受動的な業務から、現場主導で自律的にデータを活用する「データ駆動型組織」へ。

結論：生成AIが再定義する化学産業の競争優位性



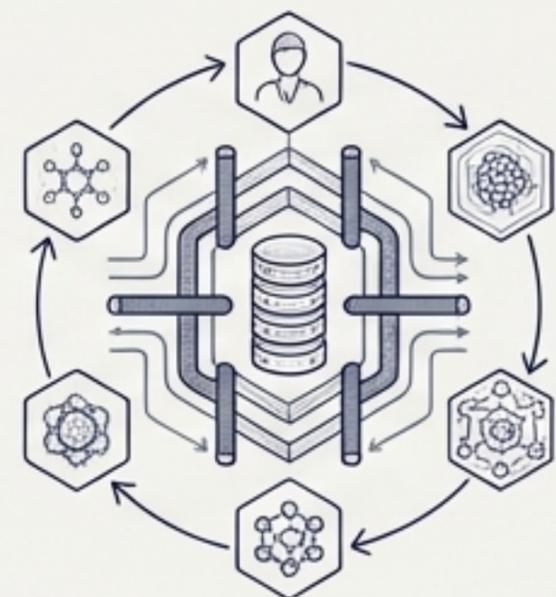
暗黙知のデジタル資産化

属人的な「経験と勘」からの脱却。マルチモーダルAIにより、紙に死蔵されていた知見を再利用可能な構造化データへと変換し、研究者の創造性を解放。



ビジネスモデルの再定義

「言われたものを作る」受動的モデルからの脱却。ハイブリッドAIによる197件の新規用途発見が示す、プロアクティブソリューションプロバイダーへの進化。



自律的イノベーション基盤

人間の限界からの脱却。逆問題的分子設計、量子互換計算、そして強固な「新築」データ基盤とリスクリング人材が織りなすクローズドループの確立。

三井化学のAI Factory構想は、単なるツールの導入ではない。高度な物理的制約を伴う素材産業において、テクノロジーがいかに人間の知的能力を拡張し、企業のトップラインを牽引するかを示すグローバルなベストプラクティスである。