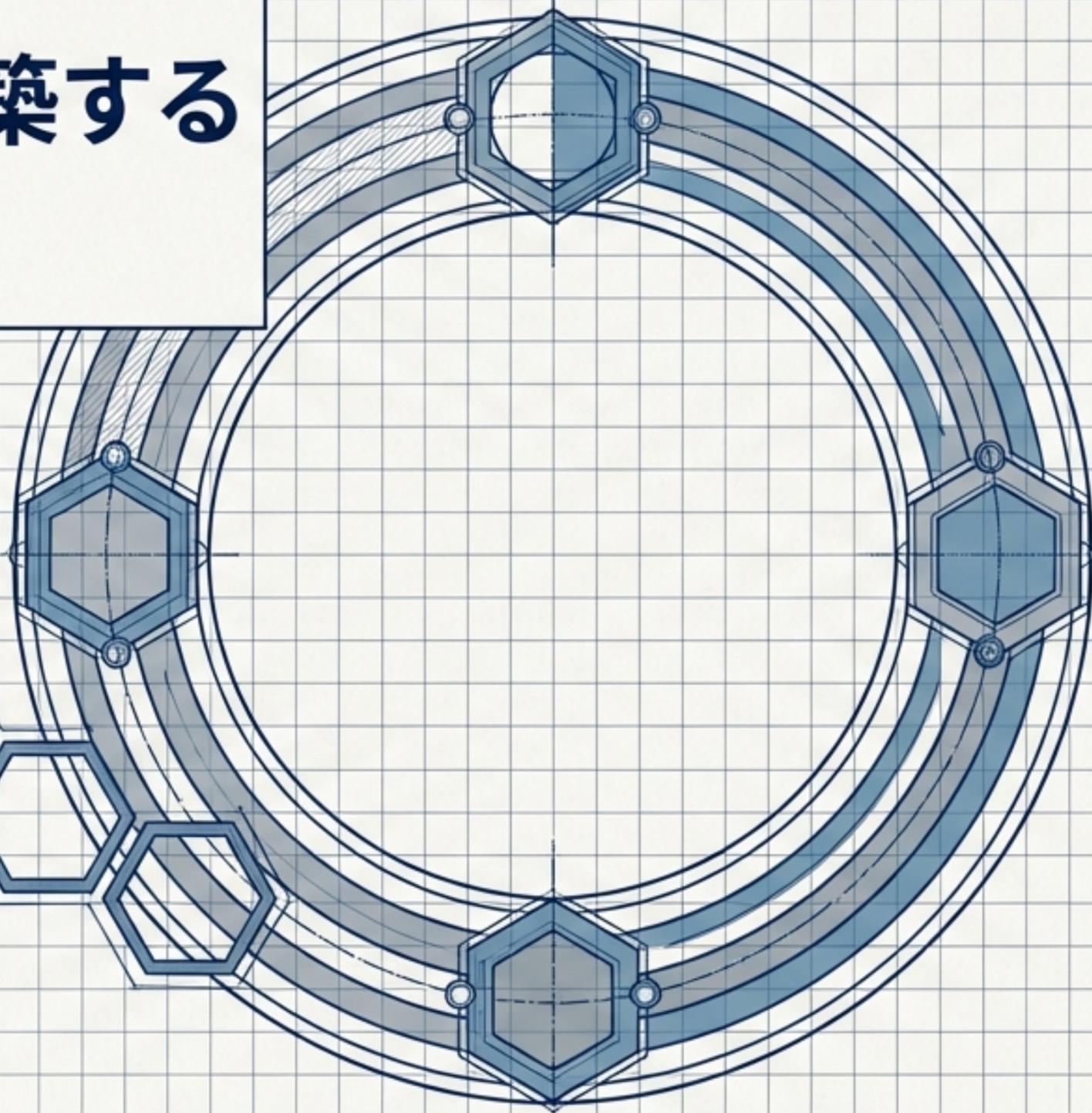
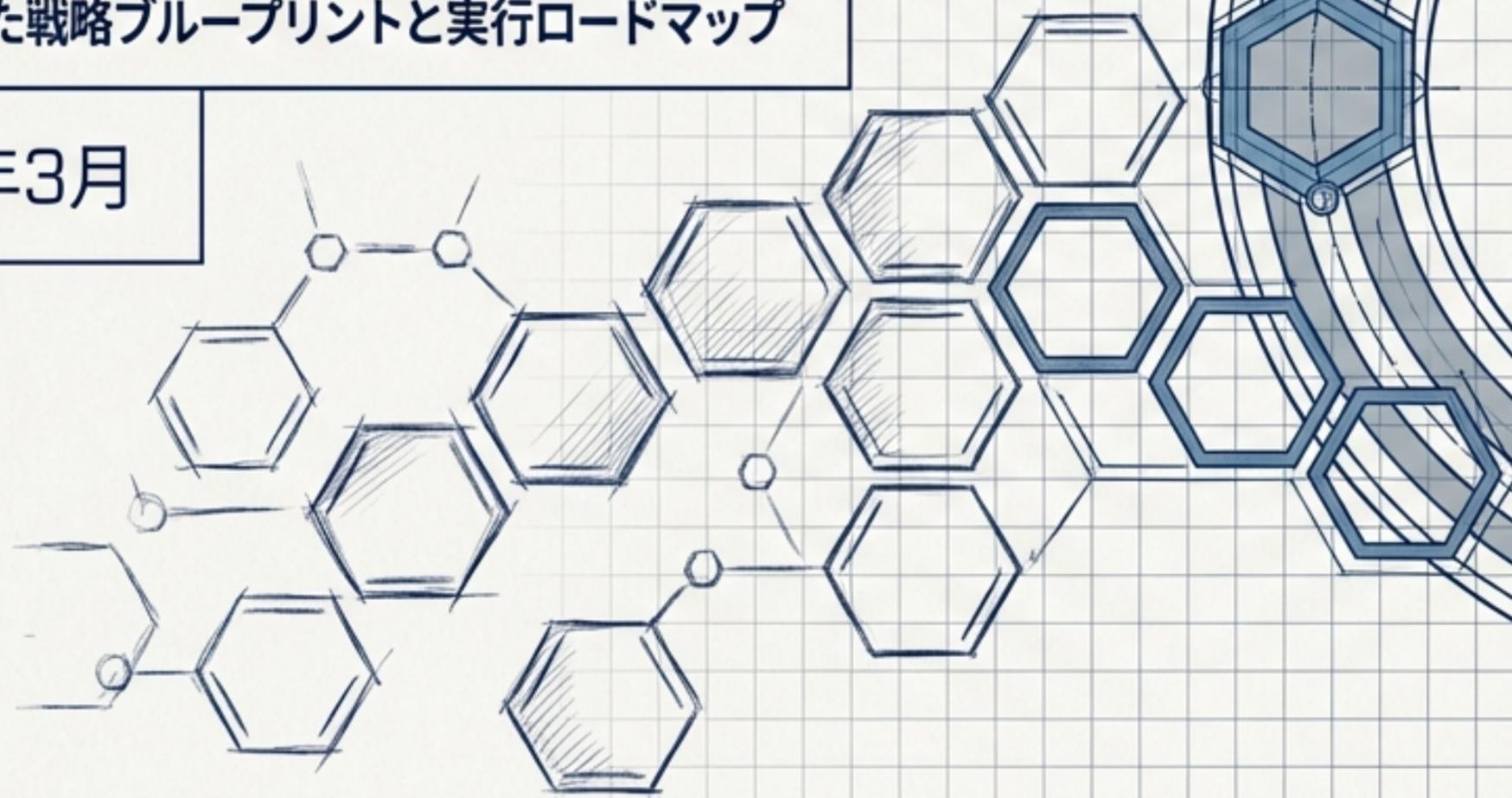


非構造化データの壁を突破し、 自律型R&Dエコシステムを構築する 三井化学の生成AI戦略

公開情報に基づく現状の分析から、
次世代「Closed-Loop Digital Chem-Lab」
実現に向けた戦略ブループリントと実行ロードマップ

2026年3月



三井化学R&Dのデジタルトランスフォーメーションを牽引する「3つの核」

実行 - 点の突破



80%削減

最大の障壁であった「化学構造式や図表」の自律抽出エージェントを独自開発。文献・特許調査の時間を1ヶ月から1日へ大幅圧縮。

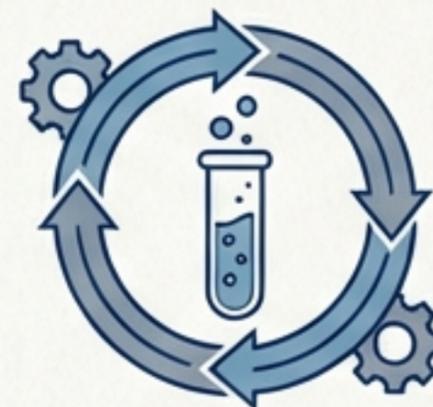
基盤 - 面の展開



50億円投資

PetaFLOPS級マルチアーキテクチャHPCを備えた「デジタルサイエンスラボ」竣工。データ科学と計算科学の専門家を集結。

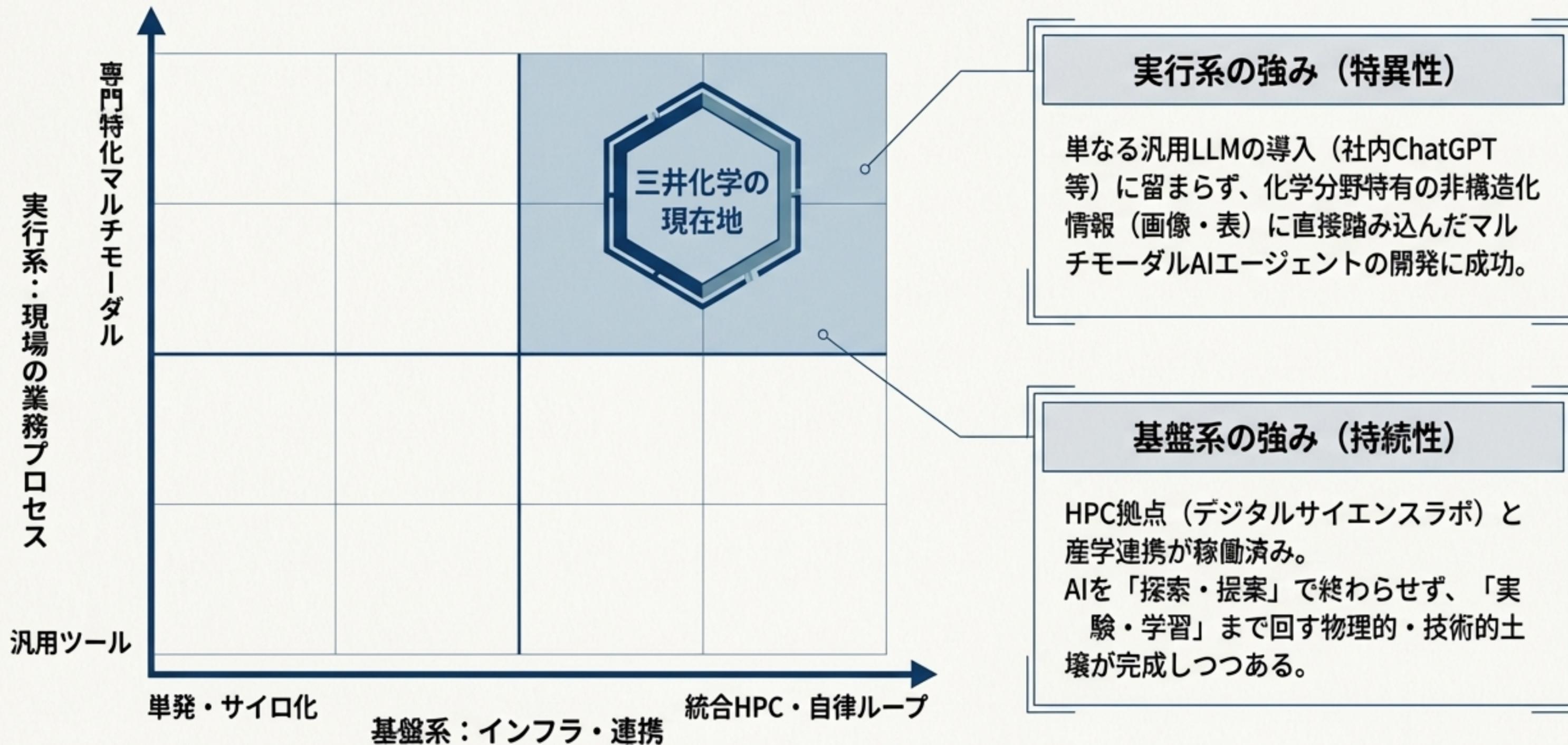
発展 - ループ化



実験回数1/4

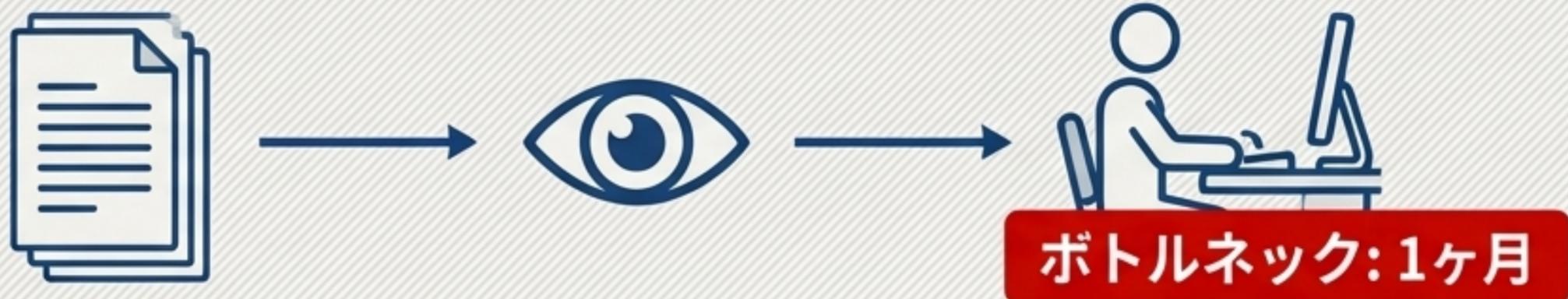
AI/MIから自律実験 (Closed-Loop) への接続。日立とのMI実証や、京大との「自律的自動合成実験」構築を通じたエコシステム化。

「現場の実行力」と「裏側の基盤力」の双方が高い成熟度を示す現状評価



最大のボトルネック「非構造化データの知識化」を打ち破るマルチモーダルAI

[従来の手法]



研究者が山積みの論文から構造式を目視確認し、手動でデータベースに入力。

[マルチモーダル生成AIエージェント]



画像とテキストを同時解析し、化学構造式から化合物情報を自律的に同定・DB化。

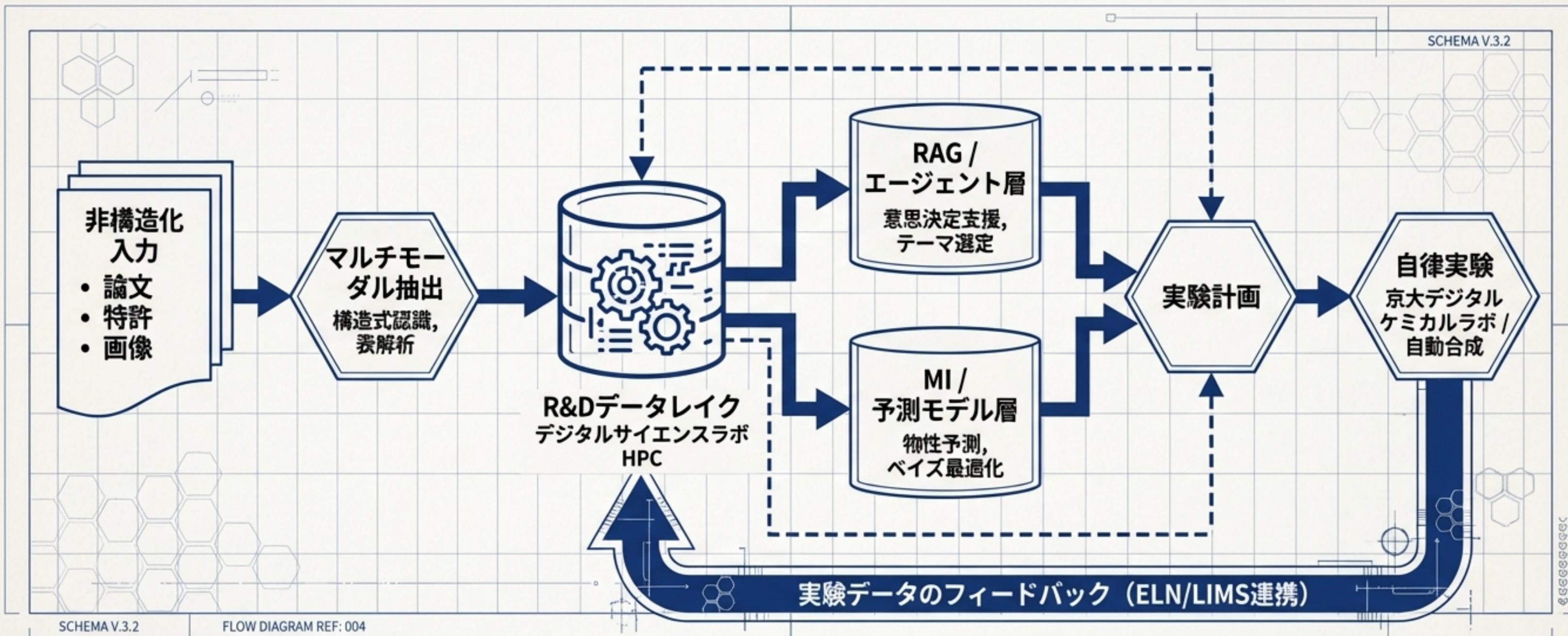
特異性と拡張性：一般的なテキスト検索の枠を超え、化学系実務における最大の障壁「画像からの構造同定」を自律化。外部DBとも連動し、探索の手戻りを劇的に圧縮する。

R&D適用領域ヒートマップ：非構造化データの処理から順次デジタル化が進行

R&D適用領域	実装ステータス	現在の活用技術	有望な発展技術・期待効果
文献・特許調査	実装済 / PoC中	マルチモーダルAI、独自特許チャット	調査時間80%削減、マルチモーダルRAGへの進化
プロセス最適化	実装済 / PoC中	ディープラーニング品質予測	歩留まり安定、デジタルツインとの統合
新規用途探索	実装済 / PoC中	Watson / GPT検証	探索網羅性の向上、自律型エージェント化
材料探索 (MI)	部分的 / 基盤構築中	深層学習 (少量データからの発案)	実験回数1/4へ低減、GNNや拡散モデルの導入
実験自動化	部分的 / 基盤構築中	自律的自動合成システム (京大連携)	実験・学習の高速ループ化
論文・特許作成支援	未公開 / 領域余白	直接の公開事例なし	生成AIによるドラフト作成、引用管理機能の構築

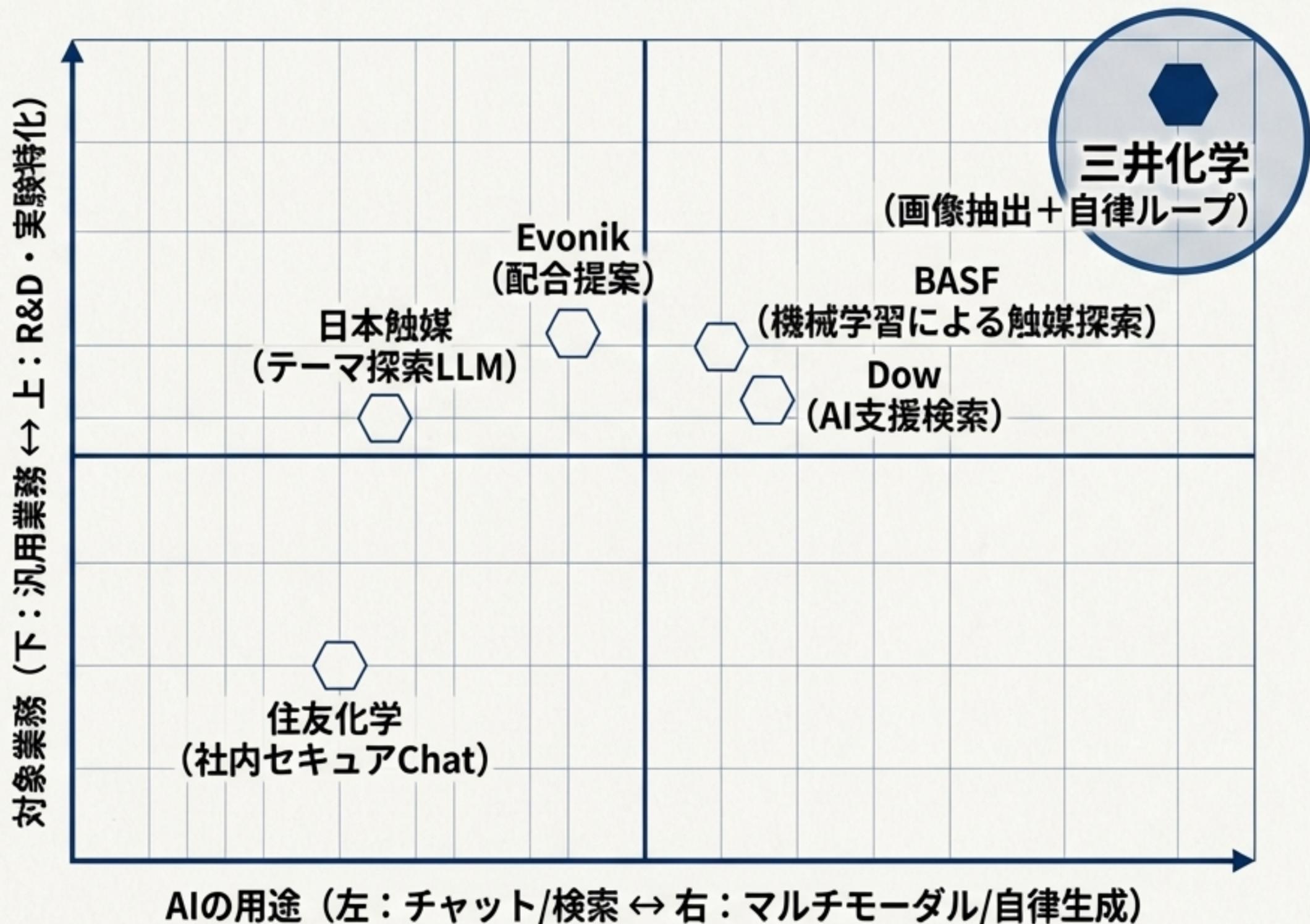
インサイト：現在の成功事例は「非構造化知識→構造化知識」の領域に集中。
次のフェーズはMIと自律実験を組み合わせた「生成・探索領域」の本格稼働へ移行する。

散在する技術を統合する「The Closed-Loop Digital Chem-Lab」の青写真



コア・メッセージ：単なる「便利ツール」の導入ではない。点（AIエージェント）と基盤（MI・HPC）を連結させ、「Design-Test-Learn」のサイクルを自律的に回すR&Dエンジンの構築が最終目標である。

競合・業界比較：マルチモーダル×専門特化という独自のポジショニング



1 汎用効率化の限界

他社は社内LLMによる汎用業務の効率化やテキストベースの検索に注力。

BIZ UDPGothic

2 三井化学の特異点

化学産業のコアである「構造式・実験データのマルチモーダル処理」に資源を集中。

BIZ UDPGothic

3 競争優位性

ボトルネックを直接解消し、独自の差別化要因（エッジ）を確立。

BIZ UDPGothic

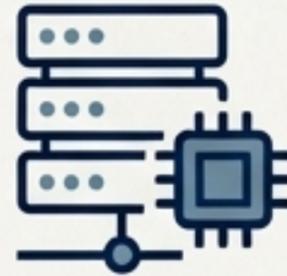
圧倒的なR&Dサイクル短縮を実現する三井化学の「戦略的差別化エッジ」

$$\left[\text{マルチモーダルAI} \right] \times \left[\text{HPC統合拠点} \right] \times \left[\text{自律合成ラボ} \right] = \text{圧倒的なR\&Dサイクル短縮}$$



マルチモーダルAI

ボトルネックの解消。文献調査時間を80%削減し、情報の構造化スピードを極限まで引き上げる。



HPC統合拠点

デジタルサイエンスラボ。PetaFLOPS級の圧倒的計算力で大規模データと予測モデルを高速処理。



自律合成ラボ

京大連携のデジタルケミカルラボ。AIの「提案」を即座に「実験・学習」へと変換し、閉ループ化を実現。

他社が「探索→提案」のフェーズで停滞しがちな中、三井化学はこの3要素の掛け合わせにより、「実験→学習」までのサイクル全体を短縮し、研究者のリソースを高付加価値業務へ再配分する。

生成AI×R&D 実装タイムライン案（2026～2030年）

	短期（2026年）	中期（2027-2028年）	長期（2029-2030年）
AI・モデル	<ul style="list-style-type: none">文献調査エージェント本格運用特許チャット定着	<ul style="list-style-type: none">MI高度化（提案→実験の短サイクル化）用途探索×MI連携	<ul style="list-style-type: none">基盤モデル（材料・プロセス）統合
データ・基盤	<ul style="list-style-type: none">セキュアRAG基盤整備	<ul style="list-style-type: none">ELN・LIMS統合自律実験設備との接続拡大	<ul style="list-style-type: none">デジタルツイン統合
ガバナンス・体制	<ul style="list-style-type: none">AI運用方針・ログ監査定着	<ul style="list-style-type: none">データ連携の標準化プロトコル策定	<ul style="list-style-type: none">自律開発ラインの準標準化社外共創（安全な共同学習）



勝負の分かれ目：2026年の文献エージェント本格運用を「起点」とし、個別ツールの成功をいかに速やかに
全社共通インフラへスケールさせるかが鍵となる。

イノベーションを守り抜く「4大リスク」とその防衛策

知財・著作権

AIガイドラインやEU AI Actを見据えたポリシー策定。
外部モデル利用時の許諾問題への対応。

データ漏洩

機密性の高い化学式の流出防止。社内閉域環境での運用とDLP（データ漏洩防止）機能のRAG組み込み。

幻覚・過信 (Hallucination)

物性や実験条件の誤抽出を防止。
NIST AI RMFに基づく抽出F1スコアのKPI化と、最終判断を人が行うプロセス設計。

監査・説明可能性

特許調査等の根拠追跡の徹底。
RAGにおける常時一次ソース提示機能の実装と、監査ログの保持。



次なる飛躍に向けた「3つの最優先プロジェクト」

Project 01: 知識基盤の全社展開

R&Dセキュア知識基盤の確立

ターゲット:
個別ツールから横断的プラットフォームへの進化。

アクション:
• 文献・特許エージェントを同一ガバナンス下へ統合。
• 構造式画像、表、文章の抽出品質を厳密にKPI管理。



Project 02: MI高度化

生成的提案 × 実験回し

ターゲット:
デジタルサイエンスラボのHPCをフル活用。

アクション:
• 「少量データからの化合物発案」をベイズ最適化等の実験計画へ直結。
• 対象テーマを絞り込んだELN/LIMSデータ整備。



Project 03: 自律実験の統合

AIから実世界ロボティクスへ

ターゲット:
生成AIの提案を現実の実験システムへ完全統合。

アクション:
• 京大ラボを起点とした実験プロトコル・安全制約の標準化。
• AI提案から実験オペレーションへの落とし込み設計の前倒し。



実効性を担保するPoC設計と評価指標（KPI）の最適解

Metrics Dashboard (KPIs)



知識抽出品質

構造式同定正解率
用途/物性抽出F1スコア
根拠提示率



材料探索 (MI)

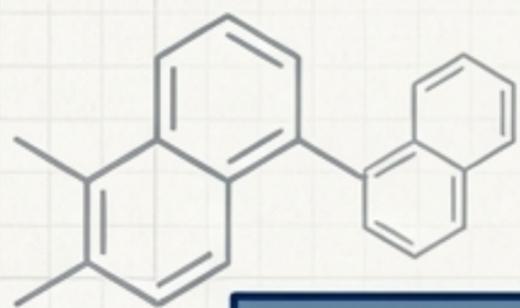
実験回数 (従来比1/4をベンチマーク)
リードタイム短縮率



実用性

候補化合物の合成可能性スコア

PoC Design Principles (成功の鍵)



1. ベースラインの精緻な計測

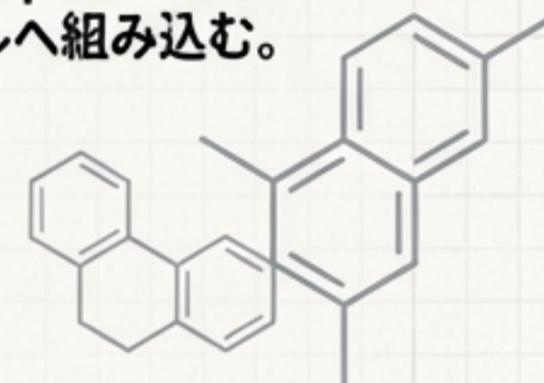
既存の手作業（文献調査等）の所要時間を厳密に計測し、ROIの可視化基盤を作る。

2. ゴールドデータの作成

小規模でも極めて正確な「正解抽出データ」を用意し、モデル精度を定量的に評価する。

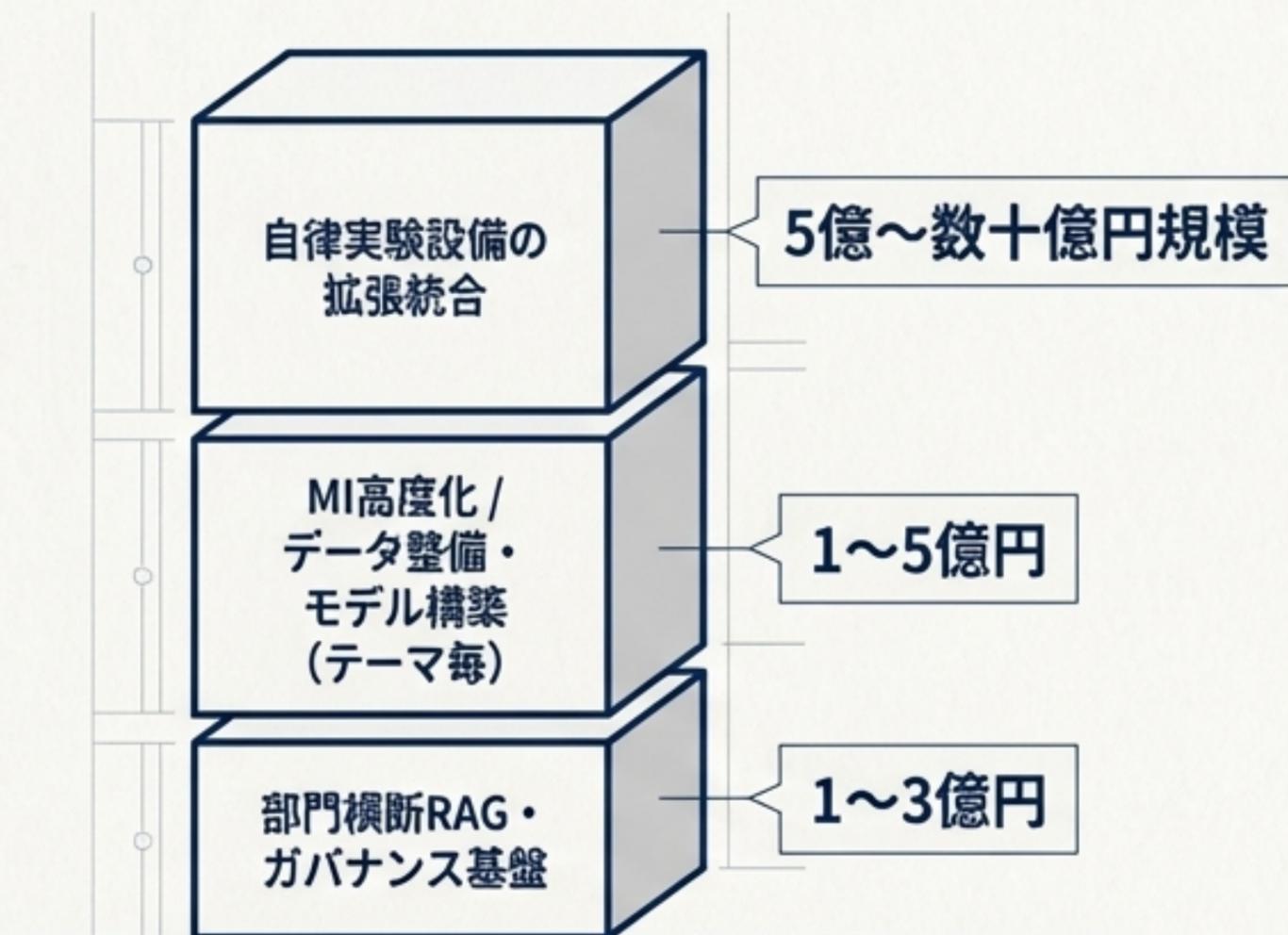
3. 失敗モードのカタログ化

構造式の誤読や同名異物などのエラーを蓄積し、MLOpsによる継続的な改善サイクルへ組み込む。



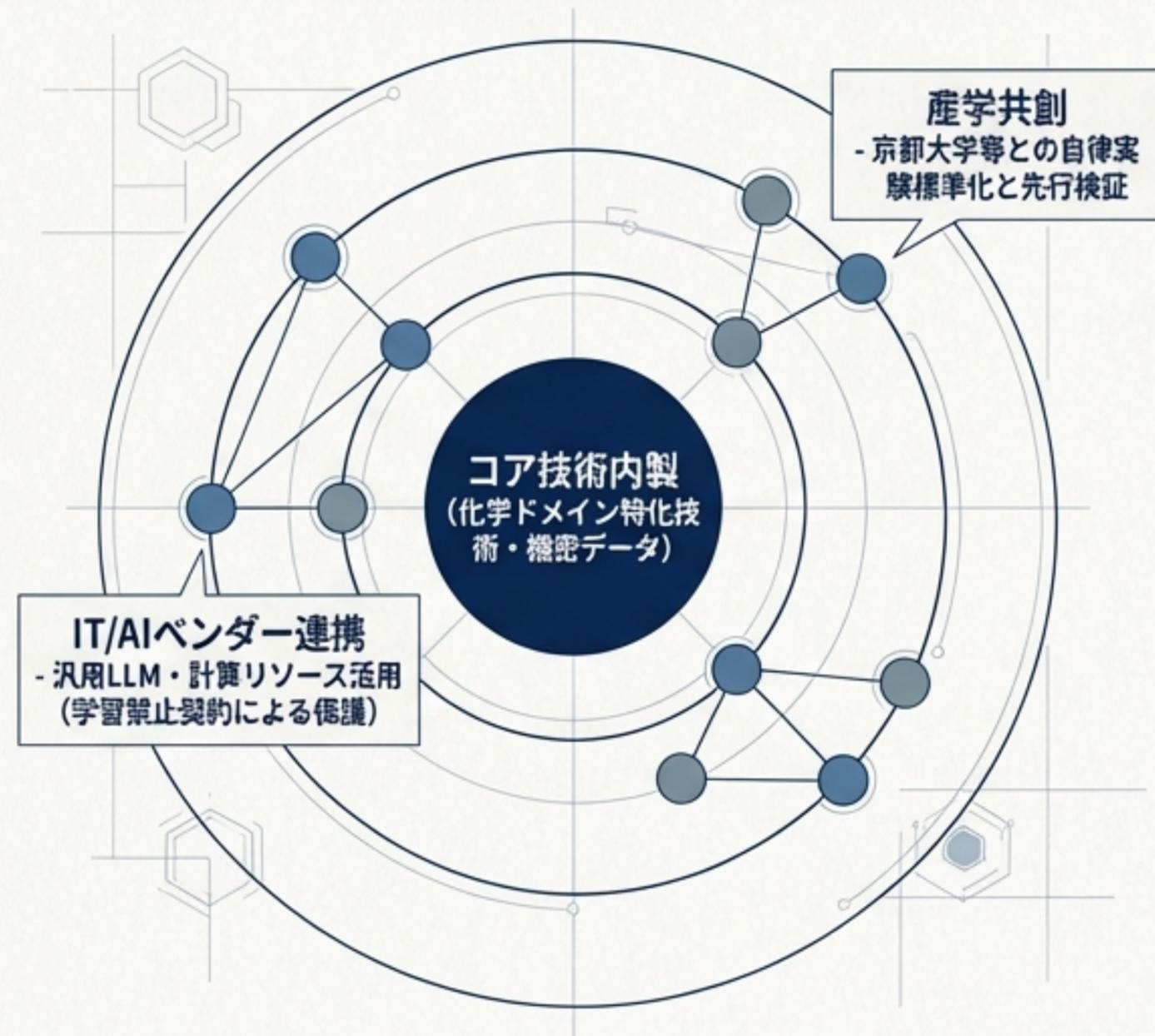
概算投資規模と外部連携（エコシステム）戦略

推定コスト構造（既存HPC投資を除く）

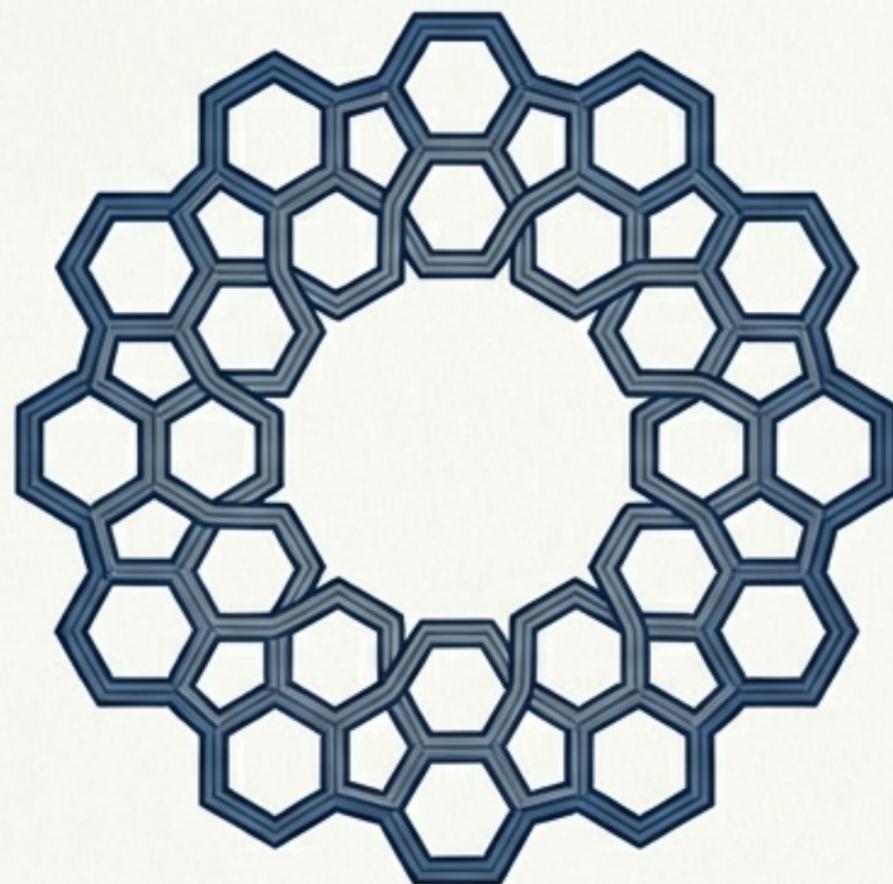


⚠ ※ 最大のコストドライバーは「データ整備（ELN/LIMS連携）」と「継続運用」である。

連携戦略（パートナー・エコシステム）



Conclusion: 「効率化ツール」から「智能化されたエンジン」への昇華



三井化学は、生成AIを単なる業務効率化ツールとしてではなく、化学産業における「智能化されたR&Dエンジン」へと昇華させる明確なアドバンテージを築きつつあります。
最大のボトルネックである非構造化データの壁を突破した今、求められるのは次なる行動です。

このリードを確固たる競争優位性とするためには、短期的な「点」の成功に満足せず、ガバナンスの効いた「面（インフラ）」と「ループ（自律実験）」へのスケールアップを即座に決断し、投資を加速させる必要があります。
未来の化学ラボは、すでに設計図から実装のフェーズへと移行しています。