

# 「素材産業におけるAI活用の現実と課題 データ・人材・組織の壁」

三井化学株式会社



ELSEVIER

Advancing human progress together

三井化学では、素材・材料開発を中心に、材料インフォマティクス(MI)や計算化学、CAE/流体解析、画像解析/AIアプリ開発、さらに放射光等の先端分析までを含む領域で研究開発DXを推進。デジタルサイエンスラボ(DSL)も建設し、新たなHPC導入・活用と研究系・プロセス系DX人材を糾合、研究本部長直下の単独組織化として飛躍している。

#### AIに対する課題（現実の壁を率直に可視化）

- 研究開発費率が低い：ROI、投資判断が難しい
- 医薬品向けツールの転用が難しい：課題構造・データ特性が異なる
- 社内のデータリテラシー不足と部門間のデータ共有の壁：研究・生産・技術・企画などサイロ化
- ネガティブデータ取得へのハードル：失敗・不合格がデータとして蓄積しない

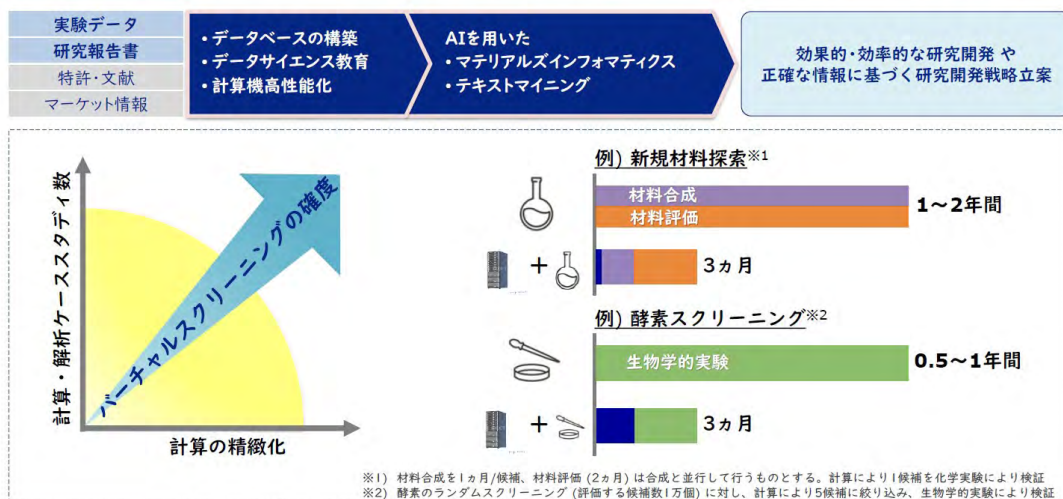
データ・人・組織がそれぞれ動きDXが「部分最適の導入」に留まるリスクが生じる状況がある

#### 具体的な取り組み事例（設立背景／保有技術／HPC活用）

1. デジタルサイエンスラボ（DSL）設立：人・組織を“共創空間”へ集約・設計
2. 保有技術：HPCを中核に、計算化学・MI・CAE・画像解析・先端分析を集積化
3. AI/MI・HPCの活用：研究開発プロセスの短縮と高効率化



バーチャルスクリーニングレベルを向上させて化学実験や生物学的実験等を効率化、研究開発が大幅加速



Copyright © 2026 Mitsui Chemicals, Inc.

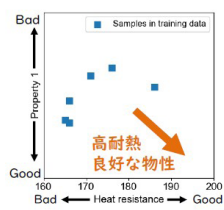
## MI解析事例

MIで解析していなければ、開発方針の修正ができなかったという。成果をコスト化できないと投資判断ができない中、MI解析を実施したからこそ開発方針修正を前倒しできたことは大きな成果である。ネガティブデータの取得はコストがかかり消極的になる実情をよく理解しているからこそ、探索の無駄を減らし、早期に良品側へ寄せる努力をされている。

### MI解析事例：高耐熱で良好な物性を持つ材料の開発

Mitsui Chemicals  
(26/30)

#### ①目標設定・データ確認



#### ②各成分の量・物性から記述子設計

| 組成     | 記述子      | 物性a      |
|--------|----------|----------|
| A: 70% | A B C    | 加重平均 ... |
| B: 20% |          |          |
| C: 10% |          |          |
|        | 70 20 10 | 5 ...    |

- Good Point
- 通常、半年程度かかるデータ採取をMIにより2か月程度で完了
  - 開発方針修正を前倒し

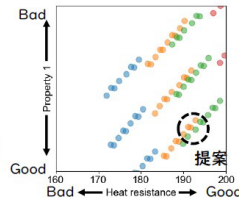
#### ③物性予測モデル構築

Property 1 =  $f_1$ (記述子)  
Heat resistance =  $f_2$ (記述子)

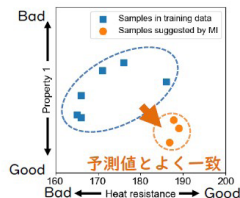
#### ④ランダムサンプリング

候補組成の抽出・性能予測

#### ⑤実験条件の提案



#### ⑥実験結果



- 「MIなかりせば」の研究コストの算出が難しい  
→ 成果の見える化(省力化、省コスト化)として表しにくい

### <科学的根拠のあるデータや論文情報の重要性>

査読を経て掲載される論文のデータ・情報は、根拠情報として非常に重要である。IT技術の進展に端を発して、電子媒体の増加、論文購読方法の主流も変化し、論文雑誌自体も急増している。更にはオープンアクセスジャーナルの増加やpreprintを掲載するサイトの出現など、ここ10年ほどで状況が急速に変わってきており、ユーザー側もキャッチアップするべく、努力が必要と感じている。

## <結論>

素材産業において、分子生成や特性予測など、材料や条件により予測が難しい課題が多い中、AI活用で“鍵になる点”は、単にAIモデルを入れるのではなく、必要な要素となるセットを持つことが重要と考える。

### 鍵となる点：



#### データセット

Digitization（電子化）  
とDigitalization  
（研究DBの構築・拡充）



#### スキルセット

AI・MI・IT・IoT  
に連なる実装・  
運用スキルの獲得



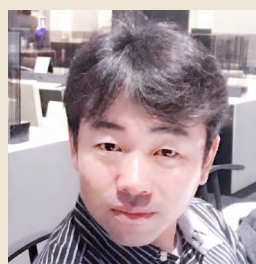
#### マインドセット

利活用を推進  
する意識・文化  
（組織変革）

常に変化する状況で正解を特定することは困難だが、先行事例の成功・失敗要因を分析し、自社状況に落とし込むことが不可欠である。そして、生成AIや自動・自律実験が当たり前になる未来を見据えると、企業が越えるべき組織的壁：データ共有・投資判断・人材育成を、研究開発DXの設計として扱うことが、成果につながる共通項になるのではないだろうか。

“素材・材料エンジニアとAI開発者の共創によってこそ素材DXという新たな価値創造の文化が生まれる”

### People in this project:



三井化学  
デジタルサイエンスラボ ラボ長  
岩壁 幸市 様