

知財情報フェアにおける生成 AI と化学構造式

2026 年と 2025 年の展示発表の比較調査

調査基準日 2026 年 9 月 22 日

GPT-6 Astra

2026 年の主な変化は、化学構造式を扱う生成 AI の用途が具体化し、画像を入口とする検索、化学式を用いた特許文書の作成、構造式の描画と出力、検索過程の検証へと広がったことである。2025 年にも Markush クレーム作成支援や化学式に対応する生成 AI の発表があり、2026 年を化学分野への初進出と位置付けることはできない。以下では、両年の公式出展情報、講演要旨、出展企業の発表資料を比較し、確認できる変化と評価上の限界を整理する。

1 調査対象と根拠の扱い

比較対象は、2026 年 9 月 16～18 日に東京ビッグサイト東 3 ホールで開催された第 35 回知財・情報フェア&コンファレンスと、2025 年 9 月 10～12 日に同西 3・4 ホールで開催された第 34 回である。[1] [2]

2025 年は公式の出展者プレゼンテーション資料、2026 年は公式来場者ポータルの出展者情報とセミナー要旨を軸に、各社の公式情報を照合した。本文中の番号は文末の参考文献に対応する。同じ資料を複数箇所でする場合も同じ番号を用いる。[3] [4] [5]

展示・講演の予定を示す公式案内、実施状況を伝える企業の報告、会期前後に公開された製品機能の説明は、証拠の性質が異なる。製品に存在する機能を、そのまま会場で実演された機能と扱わず、現行マニュアルの仕様を 2025 年当時の仕様へ遡及させない。以下の考察は公開資料の比較に基づくものである。

2 主要な展示と発表の比較

表 1 主要 6 系統の比較

企業と製品	2025 年に確認できる内容	2026 年に確認できる内容
Patsnap Eureka	Markush クレーム作成補助と知財・研究開発向け AI エージェント。[3] [6]	Analytics・Eureka に加え、MCP による外部連携と Agent Skills による業務連携を訴求。[7]
Wert Intelligence keywert Chemistry	同製品の化学構造式検索について、2025 年の出展・発表との直接比較を裏付ける資料は限定的。	構造式画像と自然言語による特許検索を前面に出し、初日の実演を企業が報告。[4] [8] [9]
アイビーリサーチ 特許専用生成 AI	ローカル CPU で動く特許専用 LLM と明細書の段落生成。[3] [10]	図面・化学式から請求項や実施形態を生成する機能を明示。[4] [5]
パテント・インテ グレーション サマリア	図面・化学構造式を考慮した読解は 2024 年から案内。2025 年の講演は生成 AI 機能全般。[3] [11]	会期直前に SMILES から構造式を描画し、Word や PNG へ出力する機能を公表。[12] [13]

企業と製品	2025 年に確認できる内容	2026 年に確認できる内容
化学情報協会 CAS	化学情報検索サービスと、化学物質表記に対応する翻訳・生成 AI 校正を案内。 [14] [15]	CAS Newton と CAS IP Finder を中心に、AI 検索の過程や根拠の可視化を訴求。 [5] [16] [17]
TTDC AI Samurai	swimy の生成 AI エージェントが化学式や数値範囲にも対応すると発表。 [3] [18]	生成 AI を活用した知財業務支援、新サービス、コンサルティングへ展開。化学機能の個別差分は不明。 [19]

3 各社の展示と発表の詳細

3.1 Patsnap の Markush クレーム作成と業務連携

2025 年 9 月 11 日の P39 では、Eureka による新規性の検討と Markush Claim 作成補助が公式要旨に記載されていた。9 月 12 日の P69 も、知財・研究開発・創薬を対象とする AI エージェントを扱っている。化学構造とクレーム作成の接続は、2025 年の比較基準に含める必要がある。2025 年 6 月 9 日の Eureka LS の公式紹介にも、化学データを用いた Markush クレーム作成支援が記載されている。 [3] [6]

Markush 形式は、共通の骨格と置換基の選択肢によって化合物群を表現する方法である。現行の Patsnap マニュアルは、分子データの入力、共通骨格と R 基の定義、クレーム文章の生成、対象構造の包含確認、DOC や SDF への出力を説明する。ただし、同マニュアルは FTO・先行技術検索のワークフローをまだ統合していないと明記する。この仕様説明は、2025 年の実演内容をそのまま再現する証拠ではない。 [20]

2026 年の公式出展案内では、Patsnap Analytics と Eureka の紹介に加え、MCP を使った外部 AI ツールとの連携、Agent Skills による AI ワークフローの構築・連携が示された。9 月 16 日の講演も、13 時 45 分からの AI 戦略と 14 時 55 分からの Analytics の AI 機能を中心としている。 [7]

比較すると、2025 年に既に提示されていた個別の化学・知財支援機能を、2026 年には既存業務や外部ツールへつなぐ方向が強まったと解釈できる。一方、2026 年のフェアで Markush 機能そのものが初公開された、あるいは精度が何ポイント向上したという結論は導けない。

3.2 keyword Chemistry の構造式画像による検索

Wert Intelligence の 2026 年出展情報は、化学構造式の画像と自然言語を使う特許検索を明示している。画像だけでなく、一般名や IUPAC 名、SMILES、InChIKey などの表現を扱い、物質名に加えて用途・工程まで検索する構想である。出展小間は 3-L26。9 月 17 日 11 時 25 分からの P4-08 は、Wegofair との共同講演で化学・製薬分野の特許検索を扱った。 [4] [5]

9 月 9 日の企業発表では、化学分野に特化した LLM の開発と、特許中の化合物を認識・検索する実演が案内された。9 月 17 日の企業報告には、初日である 16 日にブースで実演したことで、来場者が自身の化合物データを入力して結果を確認したことが記されている。予定と実施報告の両方があるため、2026 年の具体的な展示例として位置付けられる。 [8] [9]

意味のある変化は、文献の要約にとどまらず、構造式の画像を検索の入口にした点である。化合物名が分からない場合や、名称と構造式が混在する資料を調べる場合の利用場面が明確になった。ただし、企業による実演報告は独立した精度評価ではない。「日本初」などの表現も企業の訴求として読む必要があり、全ての汎用 AI の認識能力や他社製品に対する優位性を立証するものではない。[8] [9]

3.3 アイビーリサーチの化学式からの特許文書生成

2025 年の公式講演と同社メールマガジンは、ローカル CPU で動作する特許専用 LLM による実施形態・明細書の生成を紹介していた。クラウドへ接続せず、特許文書の段落を順に生成し、分野別の公報を用いた RAG も利用する構成である。2025 年の講演要旨は化学構造式画像の入力を明示していない。[3] [10]

2026 年には、図面・化学式などを入力として請求項や実施形態を生成する機能が、公式出展者情報と講演要旨の双方で前面に出ている。公開要旨は、オフライン動作と企業内情報を用いる RAG を組み合わせ、具体例や変形例の作成を支援する構成を説明する。[4] [5]

表 2 アイビーリサーチの 2026 年公式講演枠

日付	時間	講演番号
9 月 16 日	12 時 35 分～13 時 20 分	P1-03
9 月 17 日	10 時 15 分～11 時 00 分	P4-07
9 月 18 日	12 時 35 分～13 時 20 分	P2-15

各枠は、特許専用生成 AI と RAG を用いて図面・化学式から請求項・実施形態を生成する内容として掲載されている。出展者ページの商品名は「AIPs」、講演要旨は「A-Ipat」と異なるため、名称や版の完全な一致までは断定しない。[4] [5]

2025 年から 2026 年への差分は、文章の生成に、化学式を含む視覚情報の入力が明確に加わった点にある。ただし、化学式から文章を作れることと、Markush 構造の全範囲を正しく解釈できること、化合物の性質を科学的に実証できることは別の能力である。

3.4 サマリアの構造式読解と描画出力

サマリアでは、2024 年 9 月 17 日の公式更新情報が、図面、化学構造式、表、数式を考慮した読解を案内していた。構造式同士の比較や、構造式と表の関係を踏まえた質問応答などが対象である。したがって、2026 年の機能紹介をもって、同製品が初めて化学構造式を扱ったとするのは正確ではない。2025 年のフェアの P70 は、特許実務向けの生成 AI 機能全般を扱う内容だった。[11] [3]

2026 年 8 月 20 日の更新は明細書作成支援の大型アップデートと会期に向けた開発計画を示し、9 月 9 日の更新は Agent 機能で複雑な化学式を本文中に記載する機能を具体的に説明した。AI が作成した SMILES を smiles-drawer で描画し、Word や特許庁提出用の PNG 形式に出力する仕組みである。同じ更新情報にフェアへの出展案内も掲載されている。[12] [13]

ここでの進展は、既存文書内の構造式を読む機能に加え、構造式を文書の成果物として描画・出力する工程が具体化したことである。SMILES は分子構造を文字列で記述する形式であり、描画に成功し

ても、目的に合う分子を発明したことや、その効果・合成可能性が証明されたことを意味しない。また、公開更新情報だけでは、この機能が会場のどの実演で使われたかまでは確認できない。[13]

3.5 化学情報協会と CAS の検索過程の可視化

2025 年の化学情報協会の出展案内は、CAS STNext などの科学技術情報検索、化学物質表記を扱う JACCI AutoTrans、生成 AI を利用した翻訳文の校正支援などを紹介していた。公式出展者情報には CAS SciFinder も含まれている。化学情報データベースの活用と生成 AI による文章処理が、同じ展示の中に並ぶ構成だった。[14] [15]

2026 年は、CAS Newton を搭載する CAS IP Finder と CAS SciFinder が主要なデモ対象として案内された。9 月 18 日 10 時 15 分からの P3-13 では、AI 検索の戦略、処理過程、根拠が見える形で示す方針が中心に置かれた。[16] [5]

CAS IP Finder の公式製品説明は、化学構造検索や文献中の化合物の確認を支える機能と、CAS Newton による自然言語での探索を説明している。AI の回答を既存の化学情報基盤へ接続し、検索・確認作業を支援する構成と捉えられる。これは製品の機能説明であり、全機能が当日のデモに含まれたことを意味しない。[17]

2026 年の出展案内は、網羅的な調査設計やクレーム解釈などに専門家が関与する調査サービス SHIPS も併記している。検索の入口が自然言語になっても、知財判断まで無条件に自動化されたわけではない。公開要旨にある「嘘のない AI」などの表現も、誤りが一切発生しないことを示す実証結果としては扱えない。[16] [5]

3.6 TTDC と AI Samurai の化学分野への対応

2025 年の TTDC の P42 と P77 は、swimy の生成 AI エージェントを扱い、アイデアからの発明提案や技術概要からの分析に加え、化学式や数値範囲への対応を明記している。同年の企業出展案内も、swimy を生成 AI を用いた知財業務支援ツールとして示していた。[3] [18]

2026 年は AI Samurai との共同出展で、生成 AI を用いた知財業務支援の新機能・サービスや、知財戦略・分析等の支援を案内した。公開案内からは対象業務の広がりを読み取れるが、化学構造式の認識精度、Markush 処理、構造検索の網羅性について、2025 年と比較できる具体的な改善値は得られない。[19]

この事例は、2025 年にも化学式対応を明示する出展があったことを裏付ける。同時に、生成 AI 全般のサービス拡充と、化学構造式処理そのものの進歩を区別する必要性を示している。

3.7 周辺企業の扱い

Questel の 2026 年案内は Qthena などの AI 支援と知財業務全体の効率化を、Clarivate の公式講演要旨は知財管理を通じた一連の業務支援を紹介している。今回の比較では、化学構造式と生成 AI を直接結び付ける具体的な展示・発表を裏付けられた事例を中心に据えた。両社の AI 展示が存在しないという意味ではない。Reaxys についても、当該フェアでの該当展示を結び付ける確実な資料を得られず、主要比較には含めていない。[21] [5]

4 変化の考察

4.1 2026 年に具体化した作業

各社の資料を横断すると、2026 年は化学構造式を扱う用途と、その前後の作業を明示する出展が目立つ。以下は共通の性能試験に基づく順位ではなく、公開された機能・展示テーマから読み取れる変化の整理である。

表 3 2025 年から 2026 年への変化の読み取り

比較軸	2025 年を含む従来の到達点	2026 年で目立つ具体化
入力	文章に加え、化学式への対応や図面読解も既に存在。	構造式画像を検索・起案の入口として明示。 [4] [5] [8]
出力	要約、発明提案、Markush クレームの作成補助。	構造式を含む文書と、Word・PNG への出力工程を具体化。[20] [13]
検索基盤	化学情報データベースと生成 AI の活用が併存。	自然言語や画像入力を、専門データや検索機能へ接続。[8] [17]
業務連携	個別のエージェントや支援機能を紹介。	MCP・Agent Skillsなどで、既存ツールや前後の作業と連携。[7] [13]
検証	生成文の品質や利便性を主に訴求。	検索過程、根拠、構造と文章の整合性の確認が重要になる。[5] [16]

第一に、2026 年の変化は、化学への対応が始まったことよりも、利用者が何を入力し、何を受け取り、次の業務へどう渡すかが見えやすくなった点にある。2025 年の Markush クレーム支援と swimy の化学式対応、さらに 2024 年からのサマリアの図面読解を比較の出発点に置くと、この差が明確になる。[3] [6] [11]

第二に、単独の文章生成から、専門データ、構造式処理、文書出力を組み合わせる構成への移行が進んでいると考えられる。Patsnap の外部連携、サマリアの描画出力、CAS の検索基盤への接続は異なる製品設計だが、前後の作業をつなぐという共通の方向を示す。[7] [13] [17]

4.2 化学構造式を扱う能力の区別

「生成 AI が化学構造式を扱える」という説明は、処理の種類を分けて評価する必要がある。検索、読解、起案、描画は、それぞれ異なる検証を要する。表 4 の区分は、各社の訴求を比較するための整理である。

表 4 同一視すべきでない処理と確認事項

処理	具体的な作業	主な確認事項
構造式画像の認識	画像から原子・結合・構造表現を取り出す。	立体化学、電荷、略記、低解像度画像での誤認識。
化合物表現の対応付け	一般名、系統名、SMILES 等を対応させる。	同じ物質を指すか、塩や異性体等をどう扱うか。

処理	具体的な作業	主な確認事項
構造検索	同一構造、部分構造、化合物群を検索する。	検索方式、収録範囲、見落としと誤検出。
Markush の読解と起案	共通骨格と置換基条件を解釈・記述する。	R 基の定義、包含・除外条件、例外の整合性。
文書中の描画と出力	構造データを図にし、文書へ組み込む。	構造データ、図、本文、請求項の一致。
新規分子の提案と評価	新しい構造を提案し、性質等の評価する。	生成の新規性、科学的妥当性、実験的な裏付け。

特に、構造式を自然な文章で説明できることは、その構造を網羅的に検索できることと同義ではない。画像を Word に描画できることも、化合物の効果を立証することと同義ではない。公開された展示内容を読む際には、実際に示された処理の範囲に評価をとどめる必要がある。

4.3 Markush と FTO の評価は別に行う

Markush クレームの作成支援があっても、対象化合物が他社の権利範囲に入るかを調べる FTO、すなわち事業実施の自由に関する調査まで自動的に完結するとは限らない。Patsnap の現行マニュアルが FTO・先行技術検索の未統合を明示することは、この区別を具体的に示している。[20]

実務への適用を評価する際は、R 基の選択枝、置換位置、条件付きの組合せ、除外規定などについて、包含すべき例と除外すべき例を用意する必要がある。その上で、検索結果とクレーム解釈を確認する。今回の公開資料には、全社共通のデータセットによる Markush 包含判定や FTO の網羅性の比較試験はなく、製品間の性能順位は付けられない。

4.4 成果物全体の整合性が評価の中心になる

化学式画像を入力して文書を生成し、構造式を描画して出力する工程がつながるほど、個々の出力の読みやすさに加え、構造データ、図、説明文、請求項の一致が重要になる。見た目が整った構造式や自然な文章でも、置換位置や結合が変われば、意味する化合物は変わり得る。

そのため、導入効果は生成に要した時間だけでなく、誤りの発見・修正や根拠確認を含む総作業時間で評価すべきである。CAS の検索過程の可視化は、この確認作業を支える設計として位置付けられるが、利用者による確認が不要になることを実証したものではない。[16] [17]

5 導入評価への示唆と調査の限界

比較検討では、自社が扱う文献と化合物を用い、対象作業ごとに試験することが有効である。表 5 は本調査から導く評価項目であり、各社がこれらの性能を公表・保証しているという意味ではない。

表 5 化学系知財業務での評価項目

評価対象	実際に確かめる内容
画像の認識	略記、立体化学、電荷、低画質や複雑な構造を含む画像で、正しい構造データを得られるか。

評価対象	実際に確かめる内容
検索の再現性	既知の関連特許を取り出せるか。入力表現を変えても結果が安定し、見落としを追跡できるか。
Markush の包含判定	包含する例と除外する例を使い、R 基、数値範囲、条件や例外を正しく処理できるか。
文書と構造の整合性	構造式、SMILES、図番号、実施例、請求項、説明文が相互に一致しているか。
作業全体の効率	生成、検索、根拠確認、修正を合計した時間と、レビュー後の品質を比較できるか。

公開資料から確かめられるのは、機能の提供・紹介、講演で掲げられた内容、および一部の企業が報告した実演である。全講演の録画や実演ログを用いた再現試験ではなく、製品横断の共通ベンチマークもない。そのため、画像認識率、Markush の完全な包含判定、FTO の網羅性、総作業時間の削減率を定量比較することはできない。

2026 年は、化学構造式の画像から検索や起案へ進み、文書の構造式を出力・検証するまでの利用場面が具体化した年と評価できる。一方、分子の創出から実験、権利範囲の判断までが一貫して自律的に完了する段階に達したという証拠は、今回の展示・発表資料からは得られない。2025 年までの到達点を踏まえ、2026 年の変化を作業単位で評価することが妥当である。

参考文献

全資料の最終閲覧日 2026 年 9 月 22 日。企業のプレスリリースは当該企業による発表として参照した。動的に更新される公式ポータルと現行マニュアルは、閲覧時点の内容を示す。

- [1] 知財・情報フェア&コンファレンス事務局. 第 35 回 2026 知財・情報フェア&コンファレンス 公式サイト. 2026 年.
<https://pifc.jp/2026/>
- [2] 知財・情報フェア&コンファレンス事務局. 第 34 回 2025 知財・情報フェア&コンファレンス 公式サイト. 2025 年.
<https://pifc.jp/2025/>
- [3] 知財・情報フェア&コンファレンス事務局. 出展者プレゼンテーションタイムテーブル 知財・情報フェア&コンファレンス 2025. 2025 年.
PDF 全 3 ページ。P25・P44・P93 (アイビーリサーチ)、P39・P69 (Patsnap)、P42・P77 (TTDC)、P70 (サマリア) 等を参照。
https://pifc.jp/2025/wp-content/uploads/2025/08/pifc2025presen_v5.pdf
- [4] 知財・情報フェア&コンファレンス事務局. 2026 知財・情報フェア&コンファレンス 出展者一覧. 2026 年. 公式来場者ポータル. Wert Intelligence、アイビーリサーチ、化学情報協会等の出展者・製品紹介。
<https://portal.aimeet.jp/events/pifc2026/exhibitors>
- [5] 知財・情報フェア&コンファレンス事務局. 2026 知財・情報フェア&コンファレンス 出展者プレゼンテーション. 2026 年. 公式来場者ポータル. P1-03・P4-07・P2-15、P4-08、P3-13、P4-13 等の要旨。
<https://portal.aimeet.jp/events/pifc2026/seminars?cat=exhibitor-presentation>
- [6] Patsnap. Hiro-LS Evolves into Patsnap Eureka LS - The Era of Biopharma AI Agents Begins Now. 2025 年 6 月 9 日.
<https://synapse.patsnap.com/blog/hiro-ls-has-been-fully-upgraded-to-eureka-ls>
- [7] Patsnap. 「第 35 回 2026 知財・情報フェア&コンファレンス」に出展いたします. 2026 年.
<https://www.patsnap.jp/event/pif2026>
- [8] Wert Intelligence Co., Ltd.. ウォートインテリジェンス、日本最大の知財展示会「PIFC 2026」に出展－アジア IP 市場への進出を本格化. 2026 年 9 月 9 日.
<https://prtimes.jp/main/html/rd/p/000000006.000188610.html/>
- [9] Wert Intelligence Co., Ltd.. ワートインテリジェンス、日本の PIFC 初日から「keywert Chemistry」に注目が集まる. 2026 年 9 月 17 日.
<https://prtimes.jp/main/html/rd/p/000000007.000188610.html>
- [10] アイビーリサーチ株式会社. 特許業務支援ソフト「特許ストーリー」メールマガジン 第 34 号. 2025 年 9 月号.
「初公開」「2025 知財情報フェア発表」「特許専用 LLM で革新する実施形態・生成 AI ツール」の記事。アーカイブ内の当該号を参照。
https://www.ibr.co.jp/contact_mailmaga.html
- [11] パテント・インテグレーション株式会社. 日本特許・図面収録の拡充、図面も考慮して解析できるようになりました. 2024 年 9 月 17 日.
https://patent-i.com/summaria/manual/R_20240917

- [12] パテント・インテグレーション株式会社. 明細書作成支援機能の大型アップデート 今後の開発ロードマップのご案内. 2026 年 8 月 20 日.
https://patent-i.com/summaria/manual/R_20260820
- [13] パテント・インテグレーション株式会社. 新機能「ファミリー用語ペア抽出」・サマリア MCP の改良 第 305 回 知財実務オンライン登壇のご案内. 2026 年 9 月 9 日.
https://patent-i.com/summaria/manual/R_20260909
- [14] 一般社団法人化学情報協会. 知財・情報フェア&コンファレンス 出展のお知らせ (9/10-12) . 2025 年.
<https://www.jaici.or.jp/schedule/2025/2025-09-10/>
- [15] 一般社団法人化学情報協会. 2025 知財・情報フェア&コンファレンス 出展者紹介. 2025 年.
https://www.expo-form.com/united2025/usr_detail.php?ucd=35
- [16] 一般社団法人化学情報協会. 知財・情報フェア&コンファレンス 出展のお知らせ (9/16-18) . 2026 年 9 月 15 日.
<https://www.jaici.or.jp/news/info/2026/2026-09-15/>
- [17] CAS. Comprehensive IP search with CAS IP Finder. 公開・更新日記載なし.
閲覧時点の製品説明。化学構造検索と CAS Newton による探索。
<https://www.cas.org/solutions/stn-ip-protection-suite/ip-finder>
- [18] トヨタテクニカルディベロップメント株式会社. 「2025 知財・情報フェア&コンファレンス」に出展. 2025 年 8 月 29 日.
https://www.toyota-td.jp/news/files/2025_062.pdf
- [19] トヨタテクニカルディベロップメント株式会社. 「2026 知財・情報フェア&コンファレンス」に出展します. 2026 年 8 月 28 日.
<https://prtimes.jp/main/html/rd/p/000000046.000070679.html>
- [20] Patsnap Help Center. Markush Claim Drafting. 公開・更新日記載なし.
閲覧時点の現行機能と制限。FTO・先行技術検索ワークフローの未統合を含む。
<https://help.patsnap.com/hc/en-us/articles/27611243629981-Markush-Claim-Drafting>
- [21] Questel. 知財・情報フェア&コンファレンス 2026 出展に関する公式投稿. 2026 年.
公式 LinkedIn ページの日本向け出展案内。Qthena 等の紹介。投稿一覧は更新される。
<https://www.linkedin.com/company/questel/>