

知財情報フェアにおける化学構造式生成AIの進化と実務実装の分水嶺

Gemini 3.8 Flash

知的財産・情報フェア & コンファレンスにおいて、「生成AIと化学構造式」を取り巻くソリューションは、2025年の自然言語処理によるテキスト表記揺れ吸収から、2026年には構造式画像を直接解読・検証するマルチモーダル自律エージェントへと決定的な質的転換を果たしました¹。2025年開催（第34回）では、特許公報のテキスト要約やクレームドラフト支援が会場を席巻したものの、化学分野における化合物処理は、アイ・ピー・ファインによる「JAICI AutoTrans」連係に見られるようなIUPAC名や慣用名の正規化・翻訳支援にとどまり、構造式そのものを幾何学的・トポロジ的に解釈する生成AIは実用化されていませんでした²。

これに対し、2026年開催（第35回）では、特許公報中の化学構造式画像を直接認識・ベクトル化して検索・分析する技術や、精査済みデータベースと直結してハルシネーションを排除した科学特化型エージェントAIが実機デモを伴って相次いで披露されました¹。韓国ワートインテリジェンス（Wert Intelligence）による特許特化LLM基盤の「keywert Chemistry」の日本初公開や³、化学情報協会（JAICI）と米CASによる科学特化型エージェント「CAS Newton」を搭載した「CAS IP Finder」「CAS SciFinder」の実演展示は、その象徴的な事例です¹。

この変化の核心は、汎用言語モデルに特有の「確率のもっともらしさ」に依存した文章生成から脱却し、化学構造式という厳密な科学データを「完全なエビデンス遡及性」と「専門家による検証体制」のもとで処理する業務インフラの確立にあります¹。化学・製薬企業の知財部門において、生成AIは単なる文書作成の補助輪から、構造式データをハブとして研究開発（R&D）と権利化戦略を一気通貫で統合する「IP-AX（知財デジタルトランスフォーメーション）」の実行基盤へと進化を遂げました¹。

2026年展示における構造式認識とエージェントAIの技術実装

2026年9月16日から18日にかけて東京ビッグサイト東3ホールで開催された「2026知財・情報フェア & コンファレンス」（累計来場者数15,502名）では¹、化学知財実務の最難関領域であった化合物構造式の機械処理に対し、実践的な解法を提示する展示が際立ちました¹。

ワートインテリジェンスが日本市場で初公開した「keywert Chemistry」（ブース：3-L26）は、世界106カ国の特許1億7,000万件および特許文章3,000億件を学習した独自特化型LLM「PlutoLM」を基盤に据えています³。従来の汎用AIでは、特許明細書に埋め込まれた二次元構造式画像やMarkush（マルクーシュ）形式の包括的構造定義を正確に識別できず、置換基の結合位置や立体化学の脱落が頻発していました³。これに対しkeywert Chemistryは、光学式化学構造認識（OCSR）技術と特許構文解析を統合し、公報画像内の構造式をマシンリーダブルな分子グラフ構造へと高精度に復元します³。ブース内の実機デモでは、来場者が自社の保有化合物データ（SMILES、Molfile、構造式画像等）を直接入力し、瞬時に関連特許群をスクリーニングするプロセスを実演しました³。さらに、先行技術調査から競合分析、発明届出書の骨子生成、明細書ドラフト作成までを一貫して支援する「IP-AXワークフロー」を提示し、調査・出願の作業時間を抜本的に短縮できる現実解を示しました³。一方、一般社団法人化学情報協会（JAICI）と米CASの出展（ブース：3-C24、9月18日 P3会場プレゼンテーション）では、科学調査特化型エージェントAI「CAS Newton」を組み込んだ「CAS IP Finder」および「CAS SciFinder」が中核を担いました¹。CAS Newtonの技術的本質は、CASの専任科学者が

150年以上にわたり精査・蓄積してきた世界最大規模の統制データ「CAS Content Collection」を直接参照する決定論的アーキテクチャにあります⁵。自然な日本語による対話型クエリに対し、化学構造、官能基の反応性、物性データ、スペクトル情報を統合した精確な科学的要約を導き出します⁵。Web上の不特定多数のテキストを学習ソースとせず、CASの精査データのみをバックエンドとするため、虚偽情報（ハルシネーション）を根本的に遮断し、提示された回答のすべてに原典となる特許公報や学術文献への追跡リンクが付与されます⁵。また、クエリデータの追加学習利用を完全に排除した高秘匿性環境を担保している点も、企業知財の実務要件に直結しています⁵。プレゼンテーションにおいてJAICIは、AIによる検索プロセスの効率化を認めつつも、最終的な法的判断には専門家（SHIPS等）による検証を組み合わせる「Human-in-the-loop」運用の重要性を提唱しました¹。クラウド型プラットフォームの高度化と並行して、機密保持を物理的に完結させるアプローチとして注目されたのが、アイビーリサーチによる特許専用生成AI「AIPs」です¹。外部ネットワークから完全に遮断されたローカルCPU環境で動作し、特許図面や化学式・数式データを直接読み込ませた上で、請求項や実施形態のドラフトを自動生成する機能を実演しました¹。未公開の創薬リード化合物や先端材料の配合組成など、クラウドへのアップロード自体が厳格に禁止されている極秘データの知財化において、セキュアなオンプレミス選択肢を提示しました¹。

2025年展示における言語中心アプローチと構造式処理の限界

2025年9月10日から12日に東京ビッグサイト西3・4ホールで開催された「2025知財・情報フェア&コンファレンス」（出展158社・団体、来場者15,207名）は、参加者から「AI、AI、AI！ AIを使ったサービスだらけ」と形容されるほど、生成AIツールの一大普及期として記録されました²。しかし、そこで展開された機能の大半は特許公報の言語処理に偏重しており、化学構造式という特殊な情報モダリティに対しては大きな技術的空白が残されていました²。

2025年フェアにおいて化学分野の出展として実用面で高い評価を得ていたのは、アイ・ピー・ファイン株式会社による特許検索環境とJAICIの専門翻訳エンジン「JAICI AutoTrans」との連係展示でした²。化学特許における最大の調査障壁の一つは、同一の化学物質であってもIUPAC体系名、慣用名、CAS登録番号、出願人独自の化合物コードなど、多様なテキスト表現が存在することによる検索漏れです²。アイ・ピー・ファインは、辞書連係および機械翻訳の高度化によって「文字列レベルの表記揺れ」を吸収し、外国語公報の日本語化精度を向上させるアプローチを軸に据えていました²。また、同社が披露した「THE調査力AI（AIワーカー）」や「R&DランドスケープIIC」も、公報の背景技術や請求項テキストをクラスタリング・要約し、研究開発と知財の意思決定を支援するテキストマイニングの延長線上に位置していました²。

当時、画像認識技術の知財適用は商標の図形商標検索や意匠特許の意匠分類照合（Patsnap、Fovea、Markify等）が中心であり、明細書中に埋め込まれた化学構造式を光学的にデコードしてデータベースと直接突き合わせる実用ツールは会場に見当たりませんでした¹³。生成AIモデル（GPT-4等）を化学知財に適用しようとする試み自体は存在したものの、構造式をSMILESやInChIといった文字列表現に変換してプロンプト入力すると、原子価（価数）規則の破綻、芳香環の閉環エラー、不斉炭素の立体配置の欠落といったハルシネーションが頻発しました。さらに、特許特有のMarkush包括クレームが包含する膨大な数の仮想化合物を論理展開する推論能力も不足しており、実務で要求される先行技術調査や特許性判断に耐えうる水準には達していませんでした。アイビーリサーチが2025年に予告・初公開した「特許専用LLM」も、まずは自然言語による実施形態生成

の信頼性とセキュリティ担保に主眼が置かれており、化学構造式の画像処理やトポロジー操作への本格対応は翌2026年への課題として持ち越されていました¹。

2025年と2026年の比較分析から見る知財実務の質的転換

2025年と2026年の展示・発表内容を詳細に対比すると、生成AIの適用範囲が単なるテキストの表層処理から、構造式画像を含むマルチモーダル推論、エビデンス追跡型のエージェント、さらには組織内のR&D・知財プロセス統合へと進化している実態が浮き彫りになります¹。

比較評価の軸	2025年フェア(第34回)の実態	2026年フェア(第35回)の実態	実務への影響と技術的転換
主要参入プレイヤー	アイ・ピー・ファイン、アイビーリサーチ、汎用AI検索・翻訳ベンダー群 ²	ワートインテリジェンス、化学情報協会／米CAS、アイビーリサーチ ¹	特許特化AIベンダーの台頭と世界的科学データ機関による基幹AI統合 ⁵
化合物情報の処理形態	テキスト表記処理(IUPAC名、慣用名、コード番号の辞書連係・翻訳) ²	マルチモーダル認識(公報画像・SMILES・Molfileからの構造式自動抽出・ベクトル照合) ³	「文字列」による間接検索から「分子骨格・部分構造」の直接幾何検索へ進化 ³
基盤アーキテクチャ	汎用言語モデル(プロンプトによる要約)＋外部専門辞書・機械翻訳 ²	特許特化型LLM(PlutoLM等)＋150年蓄積の精査済み科学データ(CAS Newton) ³	汎用モデルの構造的限界を特化型モデルと統制データベースの結合で解決 ³
ハルシネーション対策	プロンプトエンジニアリングによる出力制約、人手による全量ファクトチェック ¹¹	出典(原典公報・文献番号・DOI)への完全な遡及リンク、精査データのための参照制約 ⁵	「生成文の目視確認」から「システムによる根拠データの即時反証・監査」へ移行 ¹
業務スコープと統合度	単発の公報要約、クレームドラフトの初期補助、検索式の拡張 ²	先行技術調査、FTO分析、発明届出書自動生成、明細書ドラフトの一貫型ワークフロー ¹	点としての業務支援から、R&Dと知財をつなぐエンドツーエンドのIP-AXへ進展 ¹
セキュリティ・動作環境	クラウド利用に対する漠然とした漏洩懸	学習非利用を保証するセキュア商用ク	公開情報調査と自社未公開化合物の秘

	念と、ローカルLLM 構想の胎動 ¹¹	ラウドと、完全隔離 ローカルCPU環境の 棲み分け ⁵	匿出願に応じたイン フラ選択基準の確立 ¹
--	-----------------------------------	--	--

両年の差異において最も顕著な進歩は、入力モダリティの変革です²。2025年における調査アプローチは、公報テキストに記載された物質名を手がかりに検索クエリを生成する手法にとどまっていた²。しかし、化学特許の実務において重要な先行技術や侵害候補化合物は、明細書中の「反応スキーム図」や「実施例の構造式画像」としてのみ開示され、テキスト中にIUPAC名が併記されていないケースが珍しくありません。2026年にkeywert Chemistryが実演した構造式OCRと分子グラフ変換技術は、これまでテキスト検索の網から抜け落ちていた「画像埋め込み化合物」をダイレクトに補足可能とし、化学調査の網羅性を根本から塗り替えました³。

もう一つの決定的な転換は、ハルシネーションに対するアプローチのパラダイムシフトです¹。2025年時点では、生成AIの出力に対して「もっともらしい虚偽が混ざるため、最終的には専門家が全文を読み直す必要がある」という注意喚起にとどまっていた¹⁴。これに対し、2026年にCASとJAICIが示したCAS Newtonの設計思想は、AIモデルの出力根拠を150年蓄積の「CAS Content Collection」に厳密に縛り付け、回答に含まれるすべての構造式、物性値、合成プロトコルに原典文献の追跡リンクを埋め込むというものでした⁵。この決定論的なエビデンス遡及性の確立によって、特許の無効資料調査やクリアランス(FTO)調査といった、わずかな事実誤認が巨額の訴訟リスクにつながるシビアナ知財法務への実務導入が可能となりました¹。

さらに、業務プロセスの統合度も大幅に向上しました¹。2025年までは、検索は検索ツール、明細書作成は作成支援ソフトというように、知財実務の各工程が分断されていました²。2026年フェアで提示されたIP-AXワークフローでは、研究者がスケッチャーで新規化合物を描画した瞬間から、AIが先行公報との同一・類似構造を瞬時に照合し、特許網の空白領域(ホワイトスペース)を抽出した上で、新規性・進歩性を主張するための発明届出書から明細書草案までを連続的に出力します³。構造式データを共通言語とすることで、研究開発現場と知財部門の間に存在していた情報伝達の壁が取り払われつつあります¹。

化学知財実務への定着に向けた構造的課題と運用の境界線

2026年フェアで示された技術的飛躍の一方で、これらの「生成AI×化学構造式」システムを企業の実務インフラとして恒常的に定着させるためには、なお克服すべき3つの技術的・組織的課題が存在します¹。

第1の課題は、包括的請求項(Markush構造)の論理展開と権利侵害(FTO)判定の厳密性です。特定の一化合物(実施例化合物)の照合精度が向上したとはいえ、特許クレーム特有の「一般式にお

いて R_1 は置換されていてもよい炭素数1~6のアルキル基またはヘテロアリール基を表し.....」といった複雑な条件分岐を含む包括構造に対し、自社化合物が法的に抵触するか否かをAIが100%の確度で自動判定することは極めて困難です。置換基の定義が明細書内の複数ページに分散している場合、文脈の係り受け解析の微小な誤差が権利範囲の誤認を招きます。したがって、CAS Newtonのプレゼンテーションで言及された通り、AIによる高速な候補化合物の絞り込みを「一次スクリーニング」とし、境界領域の権利解釈は専門調査員や弁理士が介在して確定させるハイブリッド体制(Human-in-the-loop)の維持が不可欠です¹。

第2の課題は、過去の低解像度スキャン公報に対する構造式認識のノイズ耐性です。1990年代以

前の紙面スキャン公報や新興国の公報では、印刷のかすれ、裏写り、画像の歪みによって、単結合と二重結合の判別や、立体配置を示すくさび形結合（ウェッジ・ハッシュ線）の誤認識が発生しやすくなります。誤った構造抽出は、無効資料の探索漏れや不必要な出願断念といった重大な判断ミスにつながるため、OCSRエンジンが認識結果とともに「確信度スコア」を明示し、確信度の低い構造に対しては即座に人間の再確認を促すインターフェース設計が求められます¹。

第3の課題は、未出願化合物の秘匿管理と計算インフラの最適な使い分けです。CAS Newtonのように「入力クエリを追加学習に使用しない」高セキュリティな商用クラウドが整備されたとはいえ、製薬企業の最前線パイプライン化合物や先端半導体材料の分子設計データは、社内ポリシー上クラウド環境への投入自体が厳格に禁止されているケースが存在します⁵。このため、公開済みの特許網を対象としたマクロな先行技術調査や競合動向分析にはクラウド型の「keywert Chemistry」や「CAS IP Finder」を活用し、出願直前の未公開化合物に基づく発明相談・明細書ドラフト作成にはアイビーリサーチの「AIPs」のようなローカルCPU完結型AIを適用するといった、機密区分に応じたインフラの多層運用が現実的な解となります¹。

2025年の知財・情報フェアが「自然言語処理の進化による生成AIブームの黎明期」であったとすれば、2026年は「化学構造式というドメイン特有の難関に対し、マルチモーダル認識、統制データベース、エビデンス追跡機構を掛け合わせ、真の実務インフラへと着地させた成熟の転換点」として位置付けられます¹。知財戦略を企業価値の創出に直結させるためには、AIが生成する滑らかなテキストに依存する段階を脱し、構造式データの認識精度、出典への完全な追跡可能性、そして専門家による検証プロセスを適切に統合したシステムを戦略的に選定・運用していく組織能力が問われています¹。

引用文献

1. 2026 知財・情報フェア & コンファレンス 閉幕後の調査と考察,
<https://yorozuipsc.com/uploads/1/3/2/5/132566344/f11ba3fa144644253c3c.pdf>
2. 2025 知財・情報フェア & コンファレンスに出展します,
<https://ipfine.jp/event-seminar/2025-%E7%9F%A5%E8%B2%A1%E3%83%BB%E6%83%85%E5%A0%B1%E3%83%95%E3%82%A7%E3%82%A2%EF%BC%86%E3%82%B3%E3%83%B3%E3%83%95%E3%82%A1%E3%83%AC%E3%83%B3%E3%82%B9%E3%81%AB%E5%87%BA%E5%B1%95%E3%81%97%E3%81%BE/>
3. <https://prtimes.jp/main/html/rd/p/000000007.000188610.html>
4. 知財情報フェア2025の評判総合レポート,
<https://yorozuipsc.com/uploads/1/3/2/5/132566344/a184f4e5179e0bceea1f.pdf>
5. CAS Newton in CAS SciFinder - 科学特化型エージェント AI,
<https://www.jaici.or.jp/cas-scifinder-discovery-platform/cas-scifinder/cas-newton/>
6. NEWS | 生成AI×知財ベンダーカオスマップ 2026年9月版 ... - LeXi/Vent,
<https://lexi2vent.com/posts/JgxK0nXy>
7. 「PIFC」に関するプレスリリース一覧 - PR TIMES,
<https://prtimes.jp/topics/keywords/PIFC>
8. 2026 知財・情報フェア & コンファレンス, <https://pifc.jp/2026/index.html>
9. 日本最大の知財展示会「PIFC 2026」に出展 — アジアIP市場への,
https://news.livedoor.com/pr_topics/detail/32285670/
10. 講習会・イベント - 化学情報協会, <https://www.jaici.or.jp/workshop-events/>

11. 特許業務支援ソフト『特許ストーリー』メールマガジン,
https://www.ibr.co.jp/contact_mailmaga.html
12. 2025知財・情報フェア & コンファレンス 徹底調査レポート,
<https://yorozuipsc.com/uploads/1/3/2/5/132566344/f6dd341e3cff15206ac3.pdf>
13. 知財情報フェアにおける意匠関連展示と発表の比較,
<https://yorozuipsc.com/uploads/1/3/2/5/132566344/1fb1224cc001fd63d69c.pdf>
14. 第34回 2025知財・情報フェア & コンファレンスの評価・評判,
<https://yorozuipsc.com/uploads/1/3/2/5/132566344/c615a21fdac7910e6430.pdf>
15. 2026 知財・情報フェア & コンファレンス - AiMeet Portal,
<https://portal.aimeet.jp/events/pifc2026/exhibitors>