

生成AIと化学構造式の現在地

PIFC 2025/2026 比較調査から 読み解く知財実務のパラダイムシフト

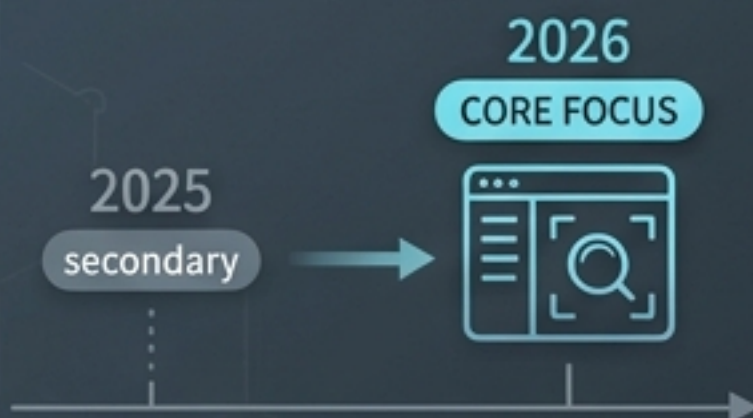
知財部門・R&Dマネージャー・プロダクト責任者向け
エグゼクティブ・ブリーフィング

Executive Summary: 3つの核心的インサイト



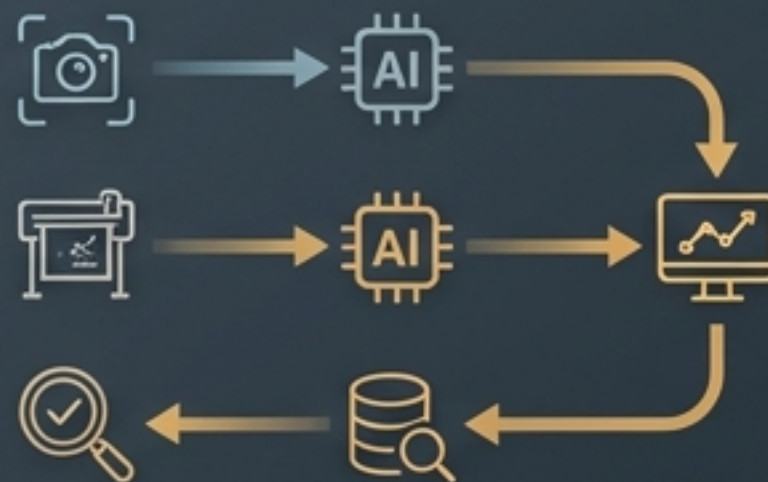
「一機能」から「主役」へ

2025年の「化学式対応」という付記的扱いから、2026年は構造式画像認識と検索が展示の中心へと劇的に変化。



進化の3方向

「入口（画像起案）」「出口（描画出力）」「検証（根拠遡及）」へとAIの介在モデルが実務ワークフロー上に具体化。



二層構造の融合と残された壁

専用検索基盤と生成AIが接近・融合しつつある一方、Markush包括クレームとFTO判断は依然として専門家の介入が必須。



Context: 規模と熱量の推移 (PIFC 2025 vs 2026)

第34回 (2025年)

2025年9月10日～12日 (西3・4ホール)



出展: 158社 / 328小間



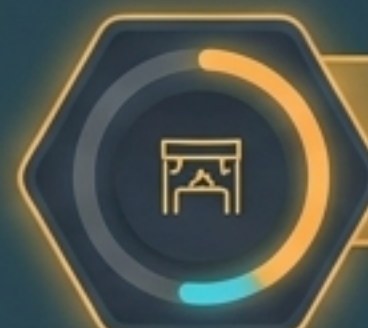
来場者: 15,207人



プレゼン: 86テーマ

第35回 (2026年)

2026年9月16日～18日 (東3ホール)



出展: 171社 / 367小間 (過去最大)



来場者: 15,502人



プレゼン: 108テーマ (過去最多)

Takeaway: 規模と熱量は維持されつつも、AIの焦点は「汎用的な機能アピール」から「特定ドメイン (化学) の深掘り」へとシフトした。

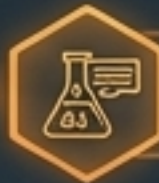
2025 Baseline: 分断されていた二層構造

汎用生成AIレイヤー

コンセプト: 「化学式にも対応」という一機能としての位置づけ



swimy (数値範囲・化学式対応)



Eureka (Markush Claim作成補助)



サマリア (既存の構造式画像読解)

厳密構造検索レイヤー

コンセプト: 構造式・Markush検索の本流を担う非生成AI型の基盤



化学情報協会 / CAS STNext
(機械翻訳等はあるも
検索自体は従来型)



Key Insight: 生成AIは流行期にあったが、化学構造式へのアプローチはテキスト・補助機能にとどまり、検索本流とは別系統であった。

2026 Breakthrough: 「化学構造式」が主役へ躍り出た年

Wert Intelligence keywert Chemistry

日本初実演。来場者の自社化合物を直接入力して体験。特許ドメイン特化「PlutoLM」による構造式認識・検索。



化学情報協会 / CAS CAS Newton

科学特化型エージェントAI。高品質データとプロセス可視化による「検証可能なAI知財調査」。



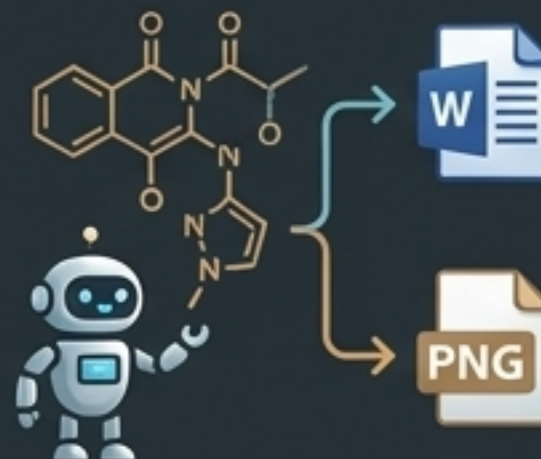
アイビーリサーチ AIPs

ローカルCPU駆動。図面・化学式などの画像を元に、オフライン環境で請求項・実施形態のドラフトを生成。



パテント・インテグレーション サマリア

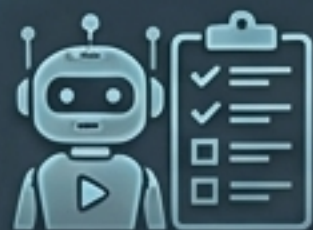
Agent機能による複雑な化学式の文書内記載。SMILESを解釈してWord/PNGへ直接描画出力。



The Shift Matrix: 2025 vs 2026 パラダイムシフト

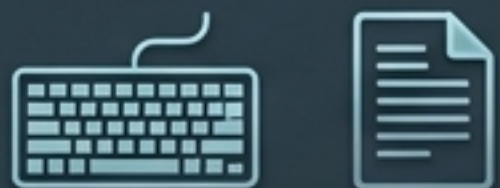
Before (2025)

主題と
位置づけ



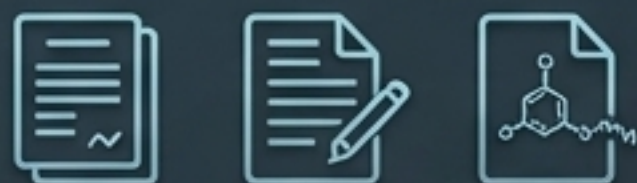
生成AIツールの
「対応項目」の一つ

入力
(Input)



テキスト中心（画像は一部機能）

出力
(Output)



要約、発明提案書、Markush作成「補助」

信頼性と
検証



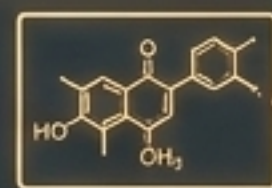
生成文の品質と利便性を訴求



After (2026)



構造式検索や画像起案など、
展示の「メインテーマ」

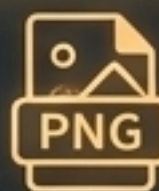
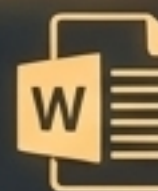
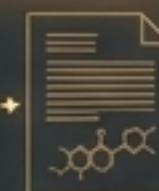
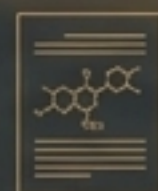
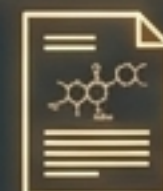


SMILES

Search



構造式画像・SMILES等を検索・起案の明確な起点へ



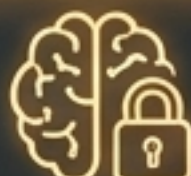
構造式を含む明細書ドラフト、Word/PNGへの直接「描画出力」



「検証可能」



「ハルシネーションなし」



「学習非利用」



「オフライン」

「検証可能」「ハルシネーションなし」
「学習非利用」「オフライン」を前面に

Framework: 進化の3つのベクトル

アクション:

構造式画像・SMILESからの検索・起案

実務シーン:

化合物名が不明な資料の調査、
自社化合物からの権利化着手

アクション:

構造式の描画と文書化

実務シーン:

複雑なベンゼン環等の特許庁提出用
PNG生成、明細書への直接挿入



アクション:

構造式画像・SMILESからの検索・起案

実務シーン:

化合物名が不明な資料の調査、
自社化合物からの権利化着手

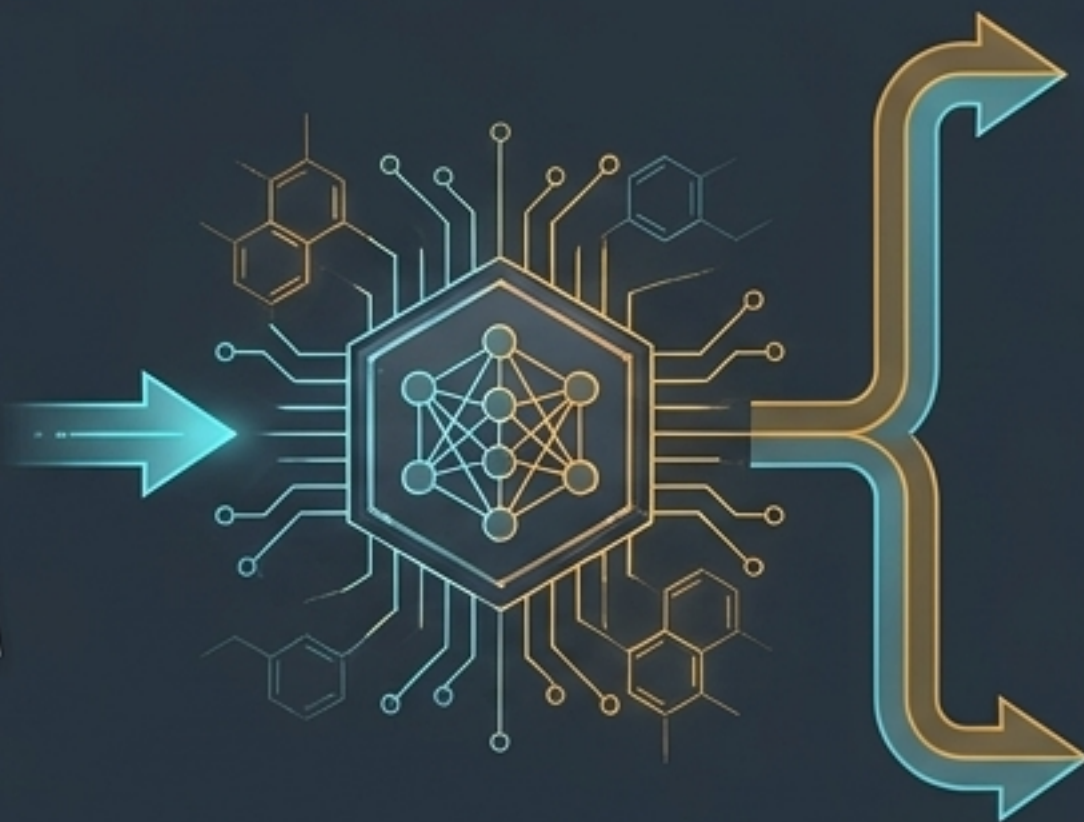
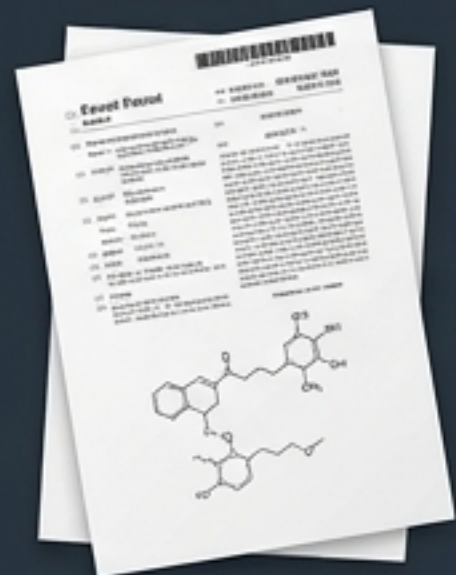
アクション:

精査データへの根拠選及

実務シーン:

一次スクリーニングの出典確認、
ハルシネーションの排除

Vector 1: 入口 (Entry) – 画像起点のメカニズム



検索クエリ
(Search Query)



明細書ドラフト
(Draft Document)

Keyword Chemistry のアプローチ

1億7,000万件の特許と3,000億件の文書を学習した「PlutoLM」基盤。

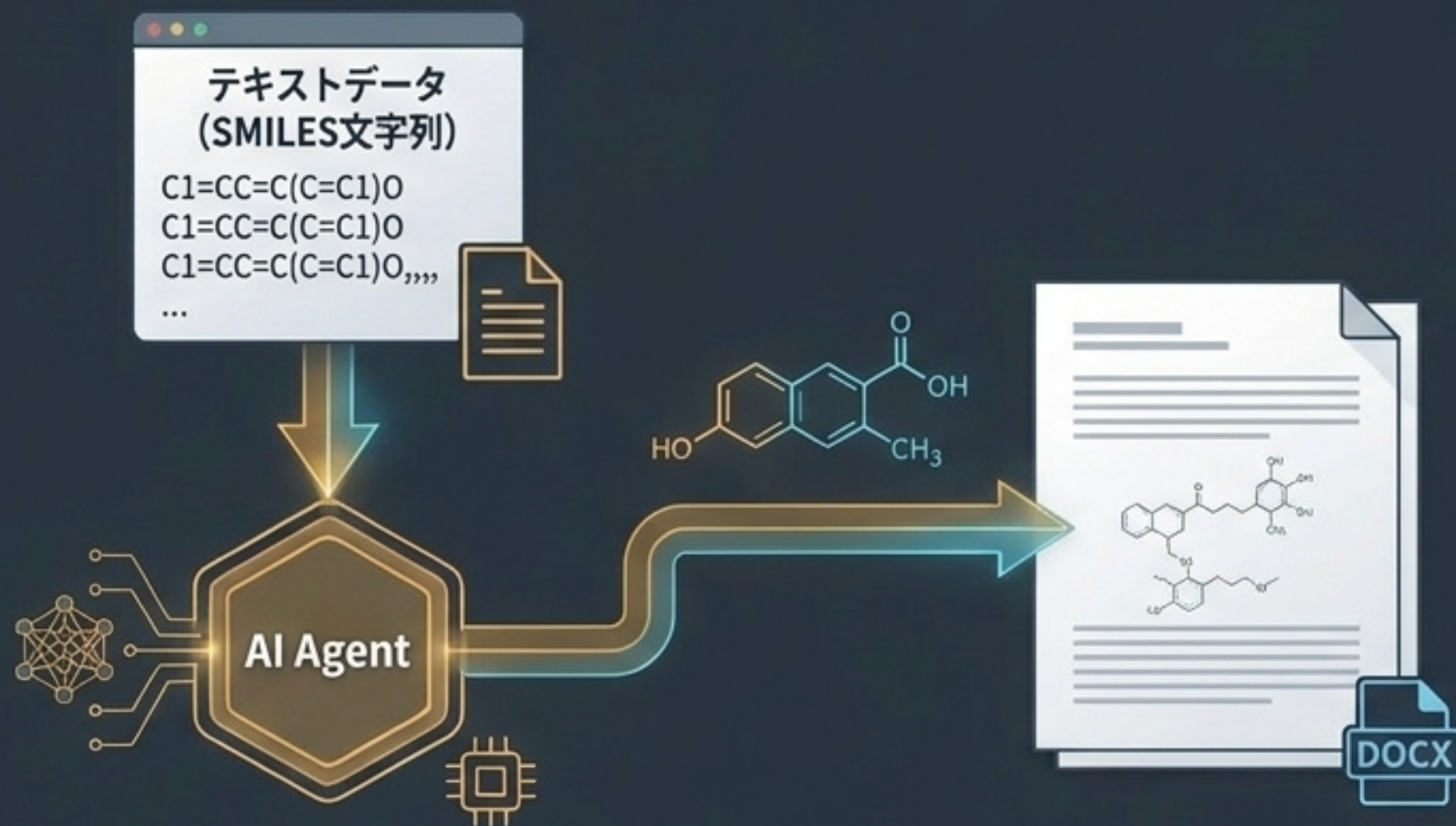
化学ドメインのLLMをゼロから構築し、汎用AIが苦手とする物質名・合成条件・物性データの混在を構造化。

AIPs (アイビーリサーチ) のアプローチ

特許公報のみ数万件を学習した特許専用LLM。

図面や化学式などの「画像」を直接解釈し、請求項や実施形態の文章を自動生成。

Vector 2: 出口 (Exit) - 構造式の直接描画と文書化



サマリア (パテント・インテグレーション) の実装

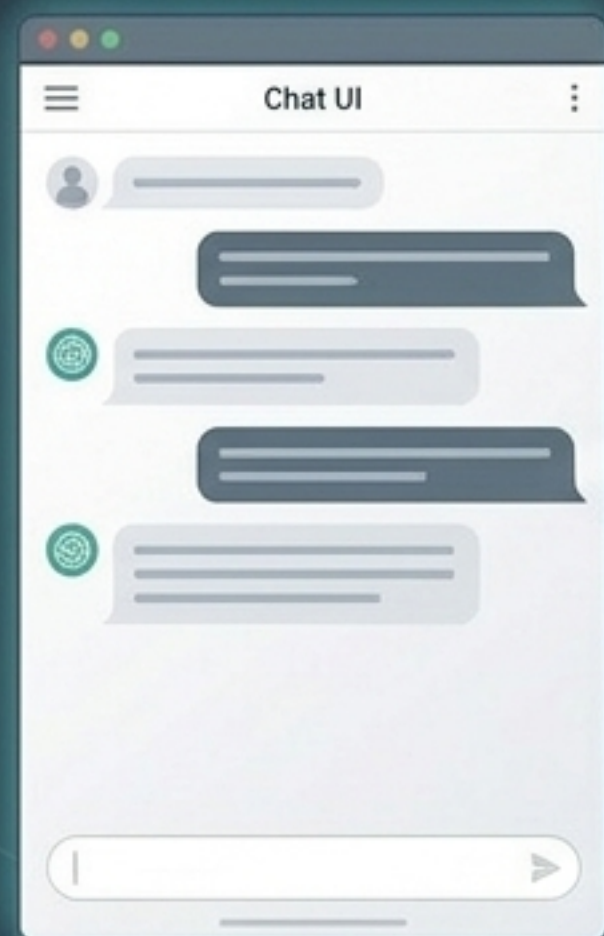
Agent機能の進化により、複雑な化学式もAIが明細書本文中に直接記載可能に。

AIが生成したSMILES形式のデータを「smiles-drawer」で自動描画。

特許庁提出フォーマット (PNG形式) や Word形式での出力をシームレスに実現。

Takeaway: 出願実務において、化学構造式を「テキスト解釈」する段階から、そのまま「成果物として出力」する段階へ実用性が向上。

Vector 3: 検証 (Verification) - ハルシネーションなき根拠遡及



学習への
非利用



信頼の基盤

150年以上の蓄積と科学者が精査した「CAS Content Collection」のみを参照。外部Web情報は検索対象外。

根拠遡及

自然な日本語対話から導かれたすべての回答に対し、出典元へワンクリックで遡及可能（ハルシネーションの排除）。

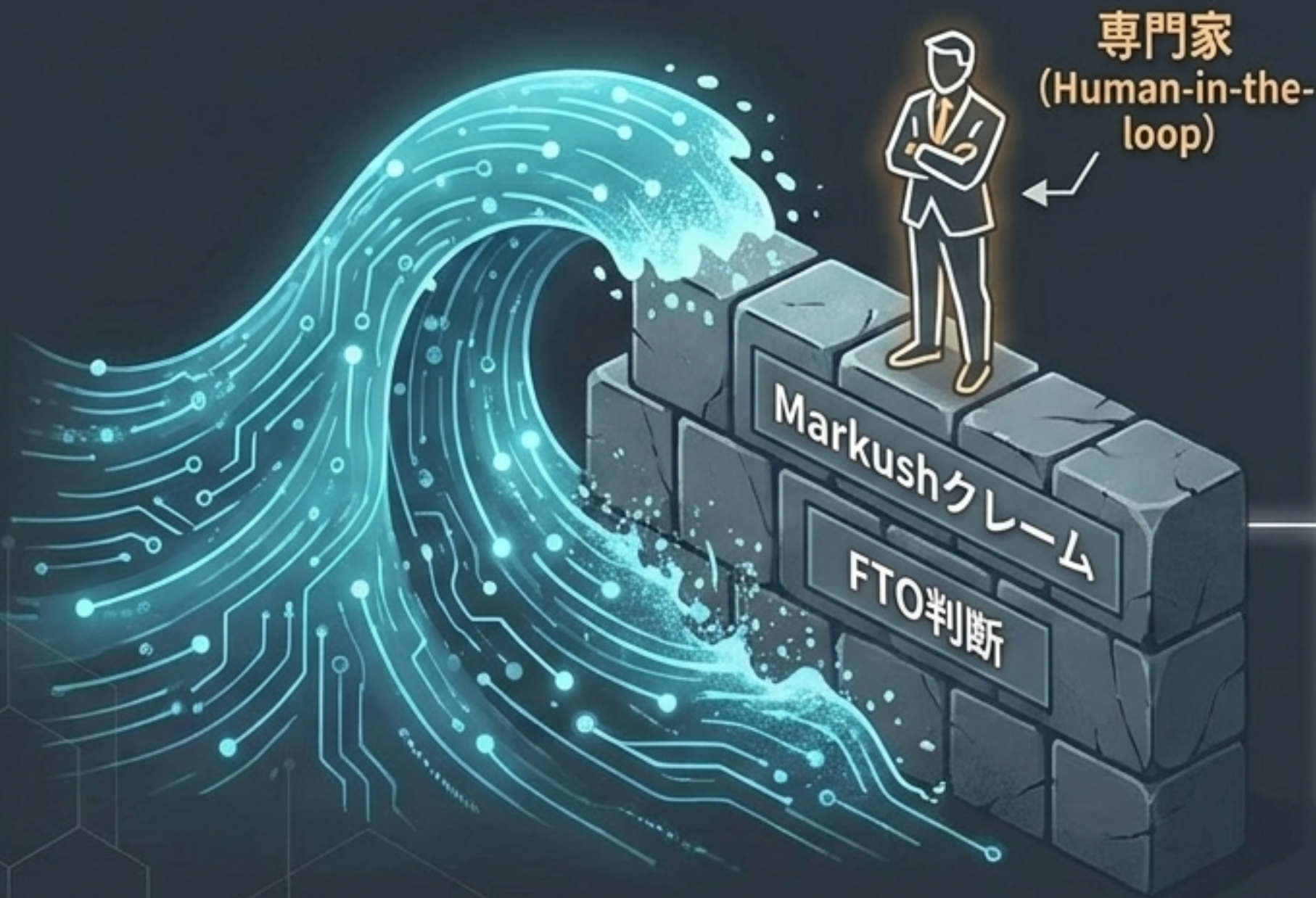
機密保持

入力情報をAIの学習に一切利用しないエンタープライズ要件への適合。

The Synthesis: 融合する「二層構造」



The Unsolved: まだAIが越えられない壁



変わらない壁 (The Unsolved)

Markush包括クレームの論理解釈：一般式、置換基定義、複雑な除外条件の全範囲をAIが自動完結・包含判定できる証拠はまだない（ベンダーの主張は自己申告にとどまる）。

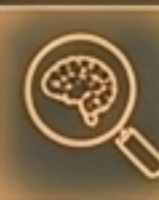


FTO（侵害予防）の網羅性判定：FTOの最終判断を生成AIに完全に委ねることは依然として不可能。



専門家の必須性

境界領域の権利解釈や、網羅的な検索式设计には専門調査員・弁理士の介入が必須（例：CASもSHIPSによる徹底サポートを明示）。



IP Strategy 1: インフラの選択と使い分け

公開済み特許・マクロ調査



クラウド型AIアーキテクチャ

特徴: 大規模データ学習による網羅的探索。
代表例: keyword Chemistry, CAS IP Finder (CAS Newton)

※必須条件: 入力データがAI学習に利用されないこと（オプトアウト/契約確約）。

対象化合物の
機密ステータスは？

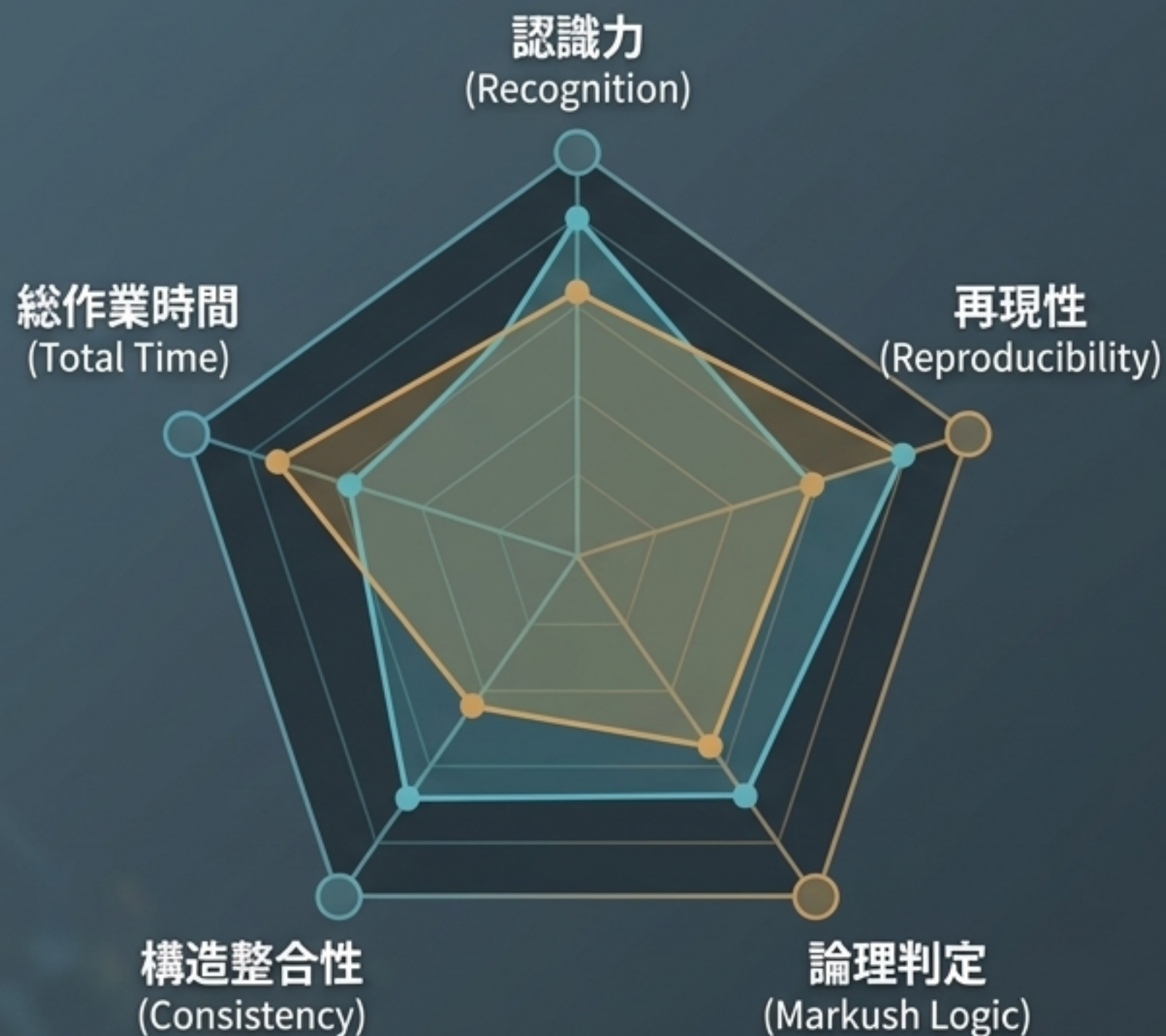


オフライン完結型AI

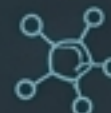
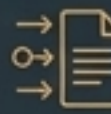
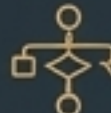
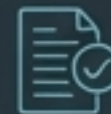
特徴: インターネット非接続。PC/ローカルCPU駆動で完全に閉じた環境での起案。
代表例: AIPs（特許専用ローカル生成AI）

出願直前・未公開自社化合物

IP Strategy 2: 自社データによる5つの評価指標



AI導入評価の5つの検証ステップ

- ☒ 1. 認識力 (Recognition): 略記、立体化学、電荷、低画質画像での構造認識精度は十分か。
- ☒ 2. 再現性 (Reproducibility): 入力表現 (SMILES, 画像, IUPAC名) を変えても、既知の関連特許を同じように抽出できるか。
- ☐ 3. 論理判定 (Markush Logic): 包含例と除外例を明確に区別し、Markush領域の判定を誤らないか。
- ☐ 4. 構造整合性 (Consistency): 構造式、図、請求項、本文間で、置換位置や結合の同一性が保たれているか。
- ☒ 5. 総作業時間 (Total Time): 生成時間だけでなく、誤りの発見・根拠確認・修正を含めた「人間の総作業時間」は削減されているか。

Future Outlook 2027: 今後の展望と観測ポイント



第三者評価の確立 (Benchmarks)

ベンダーの自己申告精度から、ユーザー企業による共通データセットを用いた検証報告が現れるか。

エージェント融合の深度 (Agent Integration)

CAS NewtonのようなエージェントAIが、検索式设计やクレーン解釈の領域へどこまで自律的に踏み込むか (Human-in-the-loopの境界の移動)。

化学専門プレイヤーの動向 (Industry Shifts)

ChemAxon, Reaxysなど化学構造専門データベースが、PIFCなどの場で生成AIとの直接統合をどう打ち出してくるか。

Closing Takeaway: 化学構造式という「専門言語」と生成AIの融合は、実証段階から実務適用段階へ移行した。自社データによる評価を直ちに開始すべきである。