NEWS RELEASE

四国化成ホールディングス株式会社
〒763-8504 香川県丸亀市土器町東 8-537-1
TEL 0877-22-4111(代表)

2026 年 10 月 26 日

各 位

AI を活用し、化学物質における安全性予測の誤差を約半減
― 新規化学物質の研究開発に活用、CBI 学会でポスター発表 ―

四国化成ホールディングス㈱〔本社：香川県丸亀市、代表取締役社長：渡邊充範〕のグループ会社で化学品事業を展開する四国化成工業㈱〔本社：香川県丸亀市、代表取締役社長：濱﨑誠〕は AI・ケモインフォマティクス*1 技術を活用し、化学物質の安全性を予測する AI モデルを開発しました。新たに開発した AI モデルは、化学物質が生物の体内にどの程度蓄積するか（生体蓄積性）を予測するものです。従来のモデルと比較して予測誤差を約半分に低減し、精度の向上を確認しました。本 AI モデルは当社の新規化学物質の研究開発に導入し、すでに活用を開始しています。

安全性予測の高度化・効率化を図ることで、新規化学物質開発の迅速化に寄与し、事業競争力の向上につなげてまいります。

■開発した AI モデルについて

本 AI モデルは、化学物質の分子構造データをケミカルスペース*2 の観点から解析し、その知見をもとに開発した当社独自の AI モデルです。開発の初期段階で生体蓄積性を予測し、求められる特性だけでなく安全性の観点からも有望な新規化合物候補を絞り込むことが可能となり、効率的な化学物質の構造設計を実現します。

■オープンイノベーションにより約 10 カ月で実用化

本 AI モデルは、滋賀大学データサイエンス・AI イノベーション研究推進センターの協力のもと、同大学の学術的知見と当社が培ってきた化学物質の構造や安全性に関する知見を融合させるオープンイノベーションにより開発を進めました。これにより、構想から約 10 カ月という短期間でモデル開発および社内への導入を実現しました。

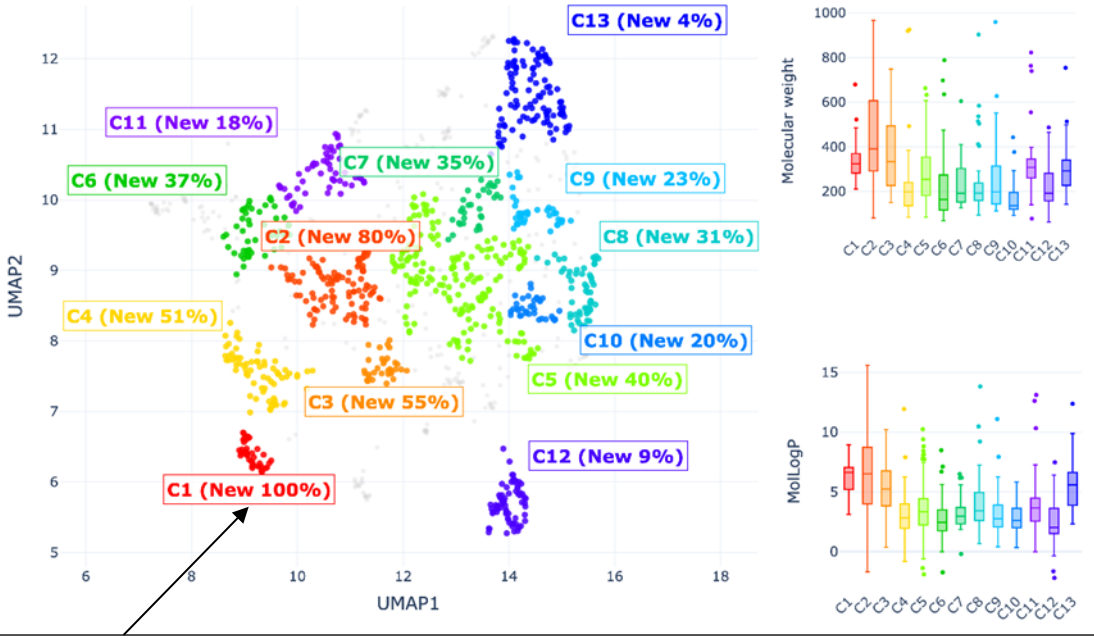
当社は DX 戦略の一環として、社内データサイエンティストを始めとする DX 人材の計画的な育成を進めています。今後も、DX 人材の育成とオープンイノベーションを推進してまいります。AI やケモインフォマティクス技術の活用領域をさらに拡大し、研究開発プロセス全体の大幅なスピードアップと効率化を図ることで、より迅速で強靭な研究開発体制の構築を進めてまいります。

*1　ケモインフォマティクス：化学物質の構造や性質に関するデータを、情報科学や統計解析などを用いて分析・活用する研究分野。

*2　ケミカルスペース：化学物質を分子構造や性質の類似性・違いに基づいて整理した、仮想的な地図のような空間のこと

なお、本 AI モデルに関する開発成果について、2026 年 10 月 26 日から開催される CBI 学会 2026 年大会にて、ポスター発表を行う予定です。

本発表では、化学物質の分子構造データを解析し、新規化学物質のデータを追加することで学習データがカバーするケミカルスペースを拡張し、AI モデルの予測性能を向上させた成果について報告します。



図中の一つひとつの点は化学物質を表し、分子構造の特徴が似た化学物質をグループ（クラスター）ごとに色分けしています。
（New〇%）はクラスター中の新規化学物質の割合を表しています。
AI の学習に使用する化学物質のデータ件数を増やし、図中に示す化学物質の分布をより拡張したことが精度の向上につながりました。

図： 分子構造に基づく化学物質の分類および各分類の新規化学物質の割合と特性の関係

【学会発表の概要】

- 学会名： CBI 学会 2026 年大会
- タイトル： Improvement in Bioaccumulation QSAR Model Performance through Expansion of Chemical Space
- 発表者： 四国化成工業㈱ 研究開発本部 研究企画部 市橋 祐紀

以 上

このリリースに関するお問い合わせは
四国化成ホールディングス㈱ 経営企画室まで TEL. 0877-21-4119