

# 生成 AI を用いた AI 支援発明に対する 実務上の注意点



会員 河野 英仁

## 要 約

近年の AI (Artificial Intelligence) 技術の急速な進化により生成 AI を活用した製品及びサービスの開発が行われるようになってきている。生成 AI の今後の更なる進化に伴い、生成 AI による支援を受けた AI 支援発明 (AI-assisted inventions) の特許出願数も増加するであろう。

このような AI 支援発明に対し、どのような形で特許出願すべきか、記載要件上どのような点に注意すべきか、また発明の着想と AI の支援の程度により一体誰が発明者地位 (Inventorship) を有するのか等、様々な問題が生じることが想定される。

本稿では化学及び機械分野における AI 支援発明の特許出願及びビジネス事例を紹介すると共に、記載要件及び発明者地位を検討する上での注意点を解説する。

## 目次

- はじめに
- AI 支援発明の出願方式
  - 化学分野の AI 支援発明
  - 機械分野の AI 支援発明
- AI 支援発明の特許出願のタイミングと記載要件上の注意点
  - AI 支援発明の特許出願のタイミング
  - 記載要件上の注意点
- 発明者地位
  - DABUS 事件
  - USPTO によるガイダンス
- 発明者地位事例
  - 機械分野の事例～リモートカー用トランスアクスル～
  - 化学分野の事例～癌を治療するための治療化合物の開発～
- おわりに

## 1. はじめに

人工知能機械「DABUS」を発明者として記載した特許出願が米国及び日本を含む各国に特許出願された事件を契機に、GPT (Generative Pretrained Transformer) 等の生成 AI をベースとする AI 支援発明の発明者は AI なのか、人間なのか、あるいは、AI と人間との共同発明になるのかを巡り、大きな議論を巻き起こした。

生成 AI 技術の進化により、化学及びバイオの分野では新規医薬品または化合物の開発のために生成 AI を取り入れ、さらには電気及び機械の分野においても最適構造または最適プロセス探索のために生成 AI を開発に取り組む試みがなされている。また GPT との対話によりアイデア出しを行う試みも行われている。

このような AI 支援発明が増加するにつれて問題となるのが、どのような形で特許出願するのか、記載要件上、特別注意する必要があるのか、さらには発明者地位も問題となる。

本稿では化学及び機械分野の双方の観点から、AI 支援発明の特許事例を通じて、どのような形で権利化すべき

かを解説し、また権利化対象により相違する記載要件上の注意点について言及し、最後に米国特許商標庁 (USPTO : United States Patent and Trademark Office) が公表した発明者地位に関するガイダンスの内容について紹介する。

## 2. AI 支援発明の出願方式

AI による支援を得て発明行為を行った場合、一般には2つの出願方式が考えられる。一つは AI による支援を得て得られたモノまたはプロセス等の生成物を対象とする特許出願である。もう一つは当該生成物を生成するための AI 利用方法を対象とする特許出願である。

### (1) 化学分野の AI 支援発明

IBM は AI を用いた抗菌ペプチドの開発を行っており、生成物の特許として米国特許第 11174289 (289 特許) を取得しており、生成方法として US2021/0366580 (580 公開特許) の特許出願を行っている。図 2-1 は AI 設計分子のスクリーニング手法を示す説明図である。

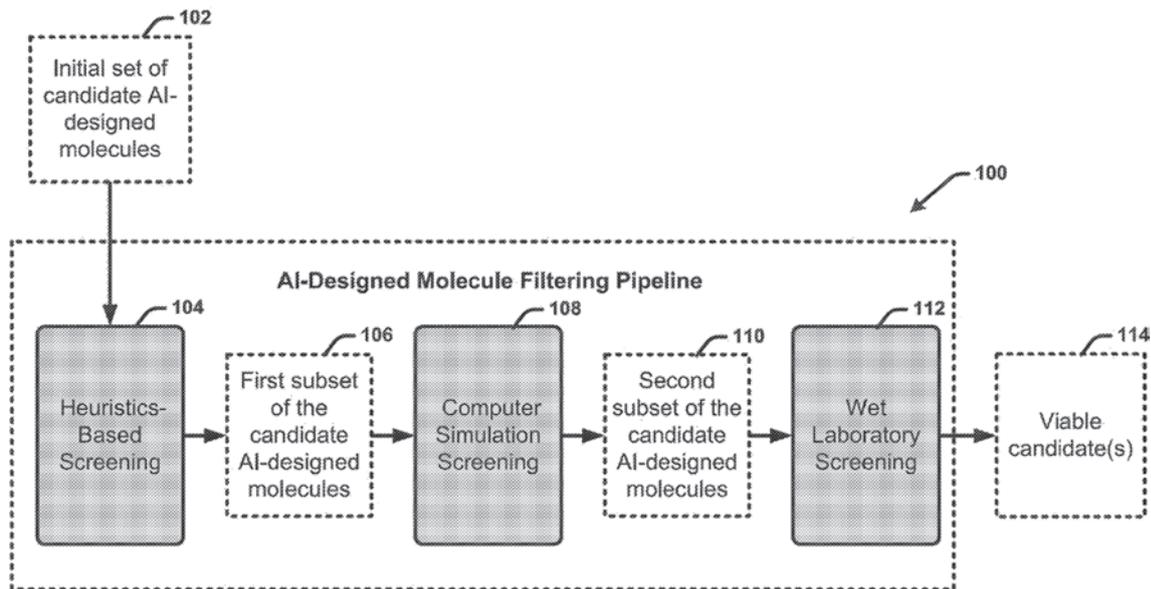


図 2-1 AI 設計分子のスクリーニング手法を示す説明図

図 2-1 に示すように、候補 AI 設計分子の初期セット 102 が大量に生成され、ヒューリスティックベースのスクリーニングフェーズ 104 により AI 分類器を用いて抗菌機能等のターゲット特徴を有する候補分子が選ばれる。次にコンピュータシミュレーションスクリーニングフェーズ 108 により候補分子の分子動力学が評価され候補分子がさらに絞り込まれ、その後ウェットラボスクリーニングが行われる。289 特許及び 580 公開特許の内容から、特許出願人は AI を用いた抗菌ペプチドの設計手法と、本設計手法を用いて生成された抗菌ペプチド自体の双方を網羅的に権利化しようとしていることが理解できる。下記に 289 特許のクレーム及び 580 公開特許のクレームを記載する。289 特許のクレーム 8 では AI 技術を用いてクレーム 1 の抗菌ペプチドが生成される点も記載している点が注目すべき点である。

#### 289 特許

1. 長さ 12 個の天然アミノ酸及びアミノ酸配列 YLRLIRYMAKMI (SEQ ID NO : 1) (配列番号 1) を含む合成ペプチドであって、抗菌活性を有する合成ペプチド。

8. クレーム 1 の合成ペプチドにおいて、該合成ペプチドは、1 つまたは複数の人工知能技術を使用して設計された。

#### 580 公開特許

1. システムにおいて、…

1つまたは複数の分類器を使用して人工知能（AI）で設計された分子のセットを評価し、AIで設計された分子の第1のサブセットを候補医薬品として選択する、ヒューリスティックベースのスクリーニングコンポーネントと、候補医薬品と1つまたは複数の生物学的標的との間の分子相互作用の1つまたは複数のコンピュータシミュレーションを使用して候補医薬品を評価し、ウェットラボ試験用の候補医薬品の第2のサブセットを選択するシミュレーションベースのスクリーニングコンポーネントとを備える。

特許出願の際には、ビジネス及び権利行使面を考慮して様々な出願方式を採用し得るが、289 特許及び第5章で説明する化学事例のように AI 生成物及び AI 方法の双方を一つにまとめるハイブリッド型もコスト面で有利である。

## （2） 機械分野の AI 支援発明

Callaway Golf はゴルフクラブの設計に AI を活用しており、米国特許第 11083937 号（937 特許）では、ゴルフクラブヘッド内に設けられるプレートの厚さについて人工知能または機械学習を用いて設計できる点を開示している。また、生成物自体ではないが、ゴルフクラブヘッドの製造方法の特許として US2024/0075354（354 公開特許）を出願している。図 2-2 は、クラブヘッドの内部構造を示す説明図である。

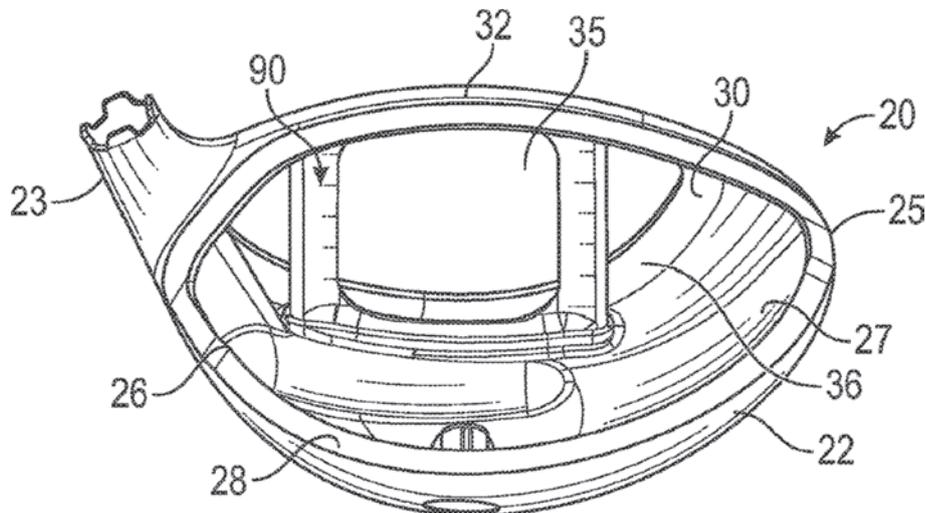


図 2-2 クラブヘッドの内部構造を示す説明図

937 特許のクレームには「プレートは、0.020 インチから 0.160 インチの範囲の可変の厚さを有し」と記載され、また明細書には「クラブヘッドの打撃面 30 の後方には開口 35 を有する矩形上のプレート 90（補強部材）が設けられている。補強部材は、可変厚パターンのプレート 90 である。可変厚パターンは、人工知能または機械学習技術を使用して設計できる。」と記載されている。937 特許及び 354 公開特許から明らかなように、機械分野においても AI 支援発明が活用されており、AI による設計方法及び AI により設計されたクラブヘッドの製造方法について権利化を狙っており、さらにはプレートの厚さについて数値限定したモノの特許も権利化することは可能であろう。

## 3. AI 支援発明の特許出願のタイミングと記載要件上の注意点

### （1） AI 支援発明の特許出願のタイミング

多くの企業では自社単独で AI システムの全てを構築することは少なく、IT ベンダーに AI システムの開発を委託することとなる。この場合、具体的な開発委託を行う前に、自社内でアイデア発掘会を行い、できるだけ自社単独で先に特許出願を行うことが大事である。共同開発が進んでしまうと開発途中でなされた発明が自社の発明か IT ベンダー側の発明かの見極めが困難となってくる。共同出願となる或いは IT ベンダー側が権利化してしまう可能性もあるため早めに単独で出願しておくことが大事である。

また AI 自体の特許出願については、アイデアがある程度固まった段階でできるだけ早期に特許出願することが大事である。AI モデルの精度が向上していない、あるいは、AI 生成物が未完成だとしても、AI 自体の特許出願

はソフトウェア特許プラクティスと同様であるから、ある程度実現の可能性があれば早期の出願日を確保すべく素早く特許出願すべきである。一方、AI 生成物の特許出願に関しては、以下に述べる記載要件の関係上、通常のモノの特許出願と同じく、そのモノを実際に製造し、各種データを取りまとめたうえで出願する必要がある。従って通常は、先に AI 自体の特許出願を先行させ、その後に AI 生成物の特許出願を別途行うか、あるいは優先権を主張してハイブリッド型の特許出願を行うことになる。

## (2) 記載要件上の注意点

AI 自体の特許出願に関しては通常のソフトウェア関連出願と同じプラクティスに従い明細書を記載すれば十分である。具体的にはどのようなモデルを使用するのか、どのようなデータを用いてトレーニングするのか等を記載すればよく、記載要件上の問題はそれほど発生しない。一方、AI 生成物の特許出願に関しては、2024 年 3 月 13 日に特許庁より公表された AI 関連技術に関する特許審査事例 5<sup>(1)</sup>の「蛍光発光性化合物」に記載されているように、AI により推定されたモノを列記するだけでは不十分で、請求項に記載したモノを当業者が製造できるように明細書を記載しなければ記載要件違反となるリスクが高まるため十分注意が必要である。ただし、化学及びバイオ分野と異なり、機械構造の分野では上記ゴルフクラブの例のように AI が推定した寸法を有するモノは比較的容易に当業者が製造することができるため、化学及びバイオ分野の記載要件よりも緩やかな記載要件が課されるであろう。

## 4. 発明者地位

### (1) DABUS 事件

AI 支援発明に関し、AI マシン自体が発明者としての地位を有さないことは DABUS 事件を通じて主要国での共通認識となっている。DABUS 事件は各国特許庁及び裁判所で争われたが、上述した発明者地位に関するガイドラインを発行した USPTO の見解が最も先進的であると筆者は判断し、本稿では米国での発明者地位に関する取り扱いを説明する。最初に DABUS 事件について概説する。

Stephen Thaler 氏は、2019 年「食品コンテナ」と称する米国特許出願 No16/524350 (350 出願) 及び「注目を集めるデバイス」と称する米国特許出願 No16/524532 (532 出願) を USPTO に申請した。出願人は Thaler 氏であるが、発明者の欄には AI マシンの名称である DABUS を記載していた。

USPTO 及び裁判所は共に AI マシンは発明者地位を有しないと判断した。CAFC (Court of Appeals for the Federal Circuit) は、米国特許法は「発明者」を「個人 (Individual)、または共同発明の場合は、発明の主題を発明または発見した個人の集合体」と定義しており (米国特許法第 100 条 (f))、また発明者に宣誓書または宣言書を提出することを要求していること (米国特許法第 115 条) 等の理由により、AI マシンは発明者としての地位を有しないと判決を下した<sup>(2)</sup>。

### (2) USPTO によるガイダンス

これを受けて USPTO は 2024 年 2 月 13 日「AI 支援発明に関する発明者ガイダンス (Inventorship Guidance for AI-Assisted Inventions)」を公表した<sup>(3)</sup>。生成 AI の普及に伴い、AI を活用した AI 支援発明が増加しているが、特許出願に際しては発明者地位が問題となる。このガイダンスでは AI 支援発明であったとしても発明着想に貢献した自然人は発明者であること、及び、発明者地位を判断する上で確立した Pannu ファクターを明らかにすると共に、発明者地位を審査官が判断する際の 5 つの指導原則を明確にしている。以下に発明者ガイダンスの内容を解説する。

1) AI 支援発明は、不適切な発明者地位であることを理由に、絶対に特許を取得できないわけではない

AI システムを含む特定のツールを使用して自然人によって創作された発明は、不適切な発明者地位をもたらすか、または特許を取得できないという立場を支持する条項は米国特許法に存在しない。米国特許法は、AI システムやその他の高度なシステムによって提供された貢献に関係なく、クレーム発明を発明または発見した自然人の名

前のみを要求している。したがって、発明を創作するために使用された AI システムを共同発明者として挙げることができないからといって、その発明が不適切な発明者であることを理由に特許対象外となるわけではない。

## 2) Pannu ファクター

米国特許法では、特許の少なくとも 1 つのクレームに貢献したすべての発明者の名前を記載することが求められている。発明者を決定する際の基準となる質疑は、発明の着想に誰が貢献したかということである。発明の着想への貢献に関しては、Pannu 事件<sup>(4)</sup>において判示された以下の 3 つの Pannu ファクターを考慮する必要がある。

(第 1 要素) 各発明者は、発明の着想または実施化に何らかの重要な貢献をしなければならない。

(第 2 要素) その貢献が発明全体の大きさに対して評価される場合、各発明者は、クレームに記載された発明に対して、品質において少なからぬ貢献をしなければならない。

(第 3 要素) 各発明者は、実際の発明者によく知られている概念及び／または現在の技術水準を説明するだけでは不十分である。

裁判所は、上記 Pannu ファクターのいずれかを満たさない場合、その人物は発明者ではないと判示した。

Pannu ファクターの第 1 要素で注意すべきは「発明の着想または実施化に何らかの重要な貢献」の部分である。この記載では「または」とあるため、発明の実施化だけでも貢献があれば発明者地位を有するように読めるが、着想が必須であり、着想の代替にはならないことに注意すべきである。つまり、各発明者は発明の着想に多大な貢献をしなければならない、少なくとも 1 人の発明者が認識と評価を得る必要がある。ある人間が、他の人が考え出した発明の実施に大きく貢献したという事実だけでは、発明者としての資格を構成するのに十分ではない。

第 1 の Pannu ファクターは「発明の着想または実施化」に言及しているが、裁判所は「着想と実施化への同時実施の原則」に関する以前の連邦巡回裁判所の判決を引用してそうしたにすぎない。

その法理によれば、「場合によっては、発明者は、成功した実験を通じて実施化を指摘することによってのみ着想を確立できる場合がある」。着想と実施化を同時に行うというこの概念は、たとえば発明者がクレーム発明を生み出すという合理的な期待を持っていない場合など、予測不可能な技術分野に関連することがある。

このような状況では、実施化されるまで、特定の化合物の着想は生まれない。したがって、第 1 の Pannu ファクターにおける実施化への言及は、この法理の単なる承認であり、実施化が発明に十分である、または着想の代替であることを意味するものではない。

## 3) 5 つの指導原則

実務上、AI 支援発明における Pannu ファクターの適用を判断するのは困難であることから、USPTO はその判断に資するため 5 つの指導原則を提供している。

(指導原則 1) AI 支援発明をなす際に自然人が AI システムを使用しても、発明者としてのその人の貢献が否定されるわけではない。自然人が AI 支援発明に大きく貢献した場合、その自然人を発明者または共同発明者として記載することができる。

(指導原則 2) 単に問題を認識したり、追求すべき一般的な目標や研究計画を持っているだけでは、着想のレベルには達しない。AI システムに問題を提示するだけの自然人は、AI システムの出力から特定される発明の適切な発明者または共同発明者ではない可能性がある。ただし、AI システムから特定の解決策を引き出すために、特定の問題を考慮してプロンプトを作成する方法によって、重要な貢献が示される可能性がある。

(指導原則 3) 発明を実施化するだけでは、発明者地位のレベルにまで到達するほどの大きな貢献にはならない。したがって、AI システムの出力を発明として認識し評価するだけの自然人、特に出力の特性と有用性が当業者にとって明らかな場合、必ずしも発明者であるとは限らない。ただし、AI システムの出力を受け取り、その出力に大きく貢献して発明を生み出す人は、適切な発明者である可能性がある。あるいは、特定の状況では、AI システムの出力を使用して実験を成功させた人は、発明が実用化されるまで着想を確立できなかったとしても、その人が発明に多大な貢献をしたことを証明できる可能性がある。

(指導原則 4) クレーム発明の由来となる必須の構成要素 (essential building block) を開発した自然人は、たとえその人物が、クレーム発明の着想につながった各活動に、その場にいなかった、あるいは参加していなかったと

しても、クレーム発明の着想に重大な貢献をしたとみなされる場合がある。状況によっては、特定の解決策を導き出すために、特定の問題を考慮して AI システムを設計、構築、またはトレーニングする自然人が発明者になる可能性がある。ここでは、当該 AI システムの設計、構築、またはトレーニングが、AI システムで生み出された発明への多大な貢献をなしている。

(指導原則 5) AI システムに対する「知的支配 “intellectual domination”」を維持すること自体は、その人が AI システムの使用を通じて生み出された発明の発明者になるわけではない。したがって、発明の着想に重大な貢献をせず、発明の創作に使用される AI システムを単に所有または監督しているだけでは、その人は発明者とはならない。

なお、以上の指導原則は意匠特許及び植物特許についても同様に適用される。

## 5. 発明者地位事例

USPTO は発明者ガイダンスの理解をより深めるため、機械分野及び化学分野における事例を公表している。以下に各事例の要点を解説する。

### (1) 機械分野の事例～リモートカー用トランスアクスル～

#### 1) 背景

XYZ Toy Company (XYZ 社) は最近、リモートコントロール (RC) カーに事業を拡大した。XYZ 社のエンジニアであるルースとモーガンは、新しい RC カーの開発を任された。図 5-1 は開発状況を示す説明図である。

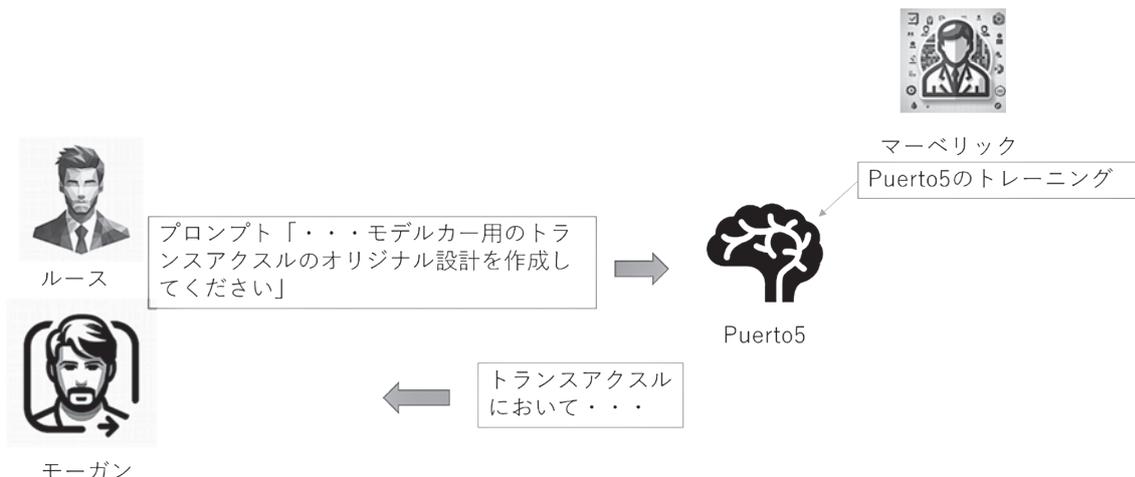


図 5-1 開発状況を示す説明図

ルースとモーガンは、車を設計する際に、RC カーにはトランスアクスルが必要であることを認識した。同社はトランスアクスルの開発には慣れていないため、トランスアクスルを一から作成するには時間とコストを要することを認識している。ルースとモーガンは、AI システムを使用して、ホリデーラッシュに間に合うように製造を開始するための予備設計を作成することにした。彼らは最近、自然言語プロンプトを入力として受け取り、テキスト、画像、その他のメディアを出力として生成する Puerto5 と呼ばれる無料で公開されている生成 AI システムに関するいくつかのニュース記事を読んだ。

ルースとモーガンは、トランスアクスルの予備設計を引き出すための一般的なプロンプトを Puerto5 に提供した。プロンプトは、「トランスアクスルの回路図と説明を含むモデルカー用のトランスアクスルのオリジナル設計を作成してください」である。Puerto5 からの出力には、ケーシング、ケーシング内に取り外し可能に取り付けられ締結具で固定されるトランスミッション、ケーシングから伸びるアクスルシャフトで構成されるトランスアクスルの予備設計が含まれている。予備設計のケーシングは、垂直面に沿って分離可能な 2 つの要素で構成されている。ルースとモーガンは出力を確認し、その設計が RC カーで機能するはずと判断した。

## 2) シナリオ 1

XYZ 社は、ルースとモーガンの支援を受けて特許出願を準備している。この出願には、Puerto5 が出力したトランスアクスルに関するクレーム 1 が含まれている。

## クレーム 1

トランスアクスルにおいて、

ケーシングと、

トランスミッションとを備え、

前記トランスミッションは、前記ケーシングから分離され、前記ケーシング内に取り外し可能に取り付けられ、車軸は前記ケーシングから延びており、

前記ケーシングは、前記トランスアクスルの 2 つの分離可能なケーシング要素によって画定され、

トランスミッションを前記分離可能なケーシング要素の 1 つに取り外し可能に取り付けられる前記トランスミッション上の締結具を備える。

シナリオ 1 において、ルースとモーガンはクレーム 1 の適切な発明者ではない。指導原則 2 では「単に問題を認識したり、追求すべき一般的な目標や研究計画を持っているだけでは、着想のレベルには達しない。」としている。AI システムに問題を提示するだけの自然人は、AI システムの出力から特定される発明の適切な発明者または共同発明者ではない可能性がある。ただし、AI システムから特定の解決策を引き出すために、特定の問題を考慮してプロンプトを作成する方法によって、重要な貢献が示される可能性がある。

ルースとモーガンは、RC カーにトランスアクスルの必要性があることを認識して発明プロセスに参加した。AI システムに課題を解決するよう促し、AI システムの出力を確認した。モーガンとルースは、RC カーにはトランスアクスルが必要であることを認識しており、課題を認識していることを示している。ただし、課題の認識や一般的な目標を持つだけでは、着想のレベルには達しない。

ルースとモーガンは、AI のプロンプトをさらに構築した。彼らは、RC カーにトランスアクスルが必要であることを認識しており、そのプロンプトは単にその一般的な課題を再表明したものにすぎない。具体的には、ルースとモーガンは、トランスアクスルや RC カーに関する特定の課題をより広範に解決しようとしているわけではない。彼らは、AI システムから特定の解決策を取得するためにプロンプトを構築する方法に関して、何らの発明的な貢献もしていない。最後に、ルースとモーガンは Puerto5 の出力をレビューし、そのデザインが RC カーに適しているべきであると判断した。しかしながら、クレームに記載された発明の着想に重大な貢献をせずに発明を認識し評価するだけでは、発明者としての資格としては十分ではない。したがって、彼らの貢献は、課題を認識し、AI システムにその課題の解決を依頼することに相当する。これらの理由により、ルースとモーガンの貢献は発明の着想に対して重大な貢献ではない。

## 3) シナリオ 2

モーガンは、Puerto5 によって作成された回路図を使用して、クレーム 1 のトランスアクスルを構築した。モーガンは、回路図に正確に従い、設計を変更しなかった。スチールは、RC カー業界でトランスアクスルを構築するために使用される一般的な材料である。同社には大量の鋼材が供給されており、モーガンはそれをケーシング要素の製造に選択した。

## クレーム 2

2. 前記ケーシングはスチールであることを特徴とするクレーム 1 に記載のトランスアクスル。

シナリオ 2 において、モーガンはクレーム 2 の正当な発明者ではない。クレーム 2 はクレーム 1 に従属しているため、シナリオ 1 と同じ理由により、課題を特定し、Puerto5 にその課題の解決するためにプロンプトすることに対するルースとモーガンの貢献は顕著ではない。指導原則 3 では、「発明を実施化するだけでは、発明者地位のレベルにまで到達するほどの大きな貢献にはならない。」としている。ケーシングを構築するためにスチールを使用するという選択によると、これは、第 1 の Pannu ファクターに基づく本発明の着想に大きく寄与するものではない。設計を実施化に移すために、モーガンは材料を選択する必要があった。トランスアクスルを構築するために RC

カー業界で使用される一般的な材料の選択は、当業者の単なる実行であり、重要な貢献ではない。

これは、第 2 の Pannu ファクターに基づいて貢献を評価することによって示される。シナリオ 1 で説明したように、独立クレームに記載されている予備設計は、全体が Puerto5 によって作成された。モーガンの発明への唯一の貢献は、ケーシングを構築するためにスチールを使用したことである。クレーム 2 の全範囲が、ケーシング、トランスミッション、アクスルシャフト、及び締結具を含むトランスアクスル、ならびにこれらの部品が一体化される方法を考慮すると、ケーシングの材料は全範囲に比べて最小限である。ケーシングの材質は、本発明全体に実質的な利益をもたらすものではなく、予備設計のいかなる特定の問題にも対処するものではない。したがって、モーガンの貢献は、本発明の全範囲に照らして評価すると、質の点で重要ではない。

これらの理由と上記のシナリオ 1 で説明した理由により、ルースとモーガンはクレーム 2 の主題の適切な発明者ではない。

#### 4) シナリオ 3

Puerto5 による予備設計の最初の出力に続いて、ルースとモーガンはさらに Puerto5 に代替トランスアクスル設計を提供するようプロンプトを入力した。Puerto5 は、ケーシング要素を水平面に沿って分離できる代替トランスアクスル設計を出力した。ルースとモーガンは、水平方向に分離されたこのデザインを構築することにした。彼らは、ケーシング内に水平方向の分離を備えた動作可能なトランスアクスルを作成するには、追加の修正と大幅な実験が必要であることを発見した。彼らはこれらの実験を実施し、ケーシングを長くし、ケーシングの上 3 分の 1 に水平方向の分離を設ける必要があると判断した。さらに、ルースとモーガンは、アクスルシャフトとトランスミッションをケーシングの下 3 分の 2 に配置する必要があることを発見した。モーガンはさらに、従来の留め具は扱いにくいと判断し、トランスミッションをケーシングに取り外し可能に取り付けるためのクリップ留め具を設計した。

クレーム 3 は以下のとおりである。

3. トランスアクスルにおいて、  
細長いケーシングと、  
トランスミッションとを備え、

前記トランスミッションは前記ケーシングから分離され、前記ケーシングの下 3 分の 2 内に取り外し可能に取り付けられ、

車軸は、前記ケーシングの下側 3 分の 2 から延びており、

前記ケーシングは、2 つの分離可能なケーシング要素によって画定され、前記ケーシング要素の分離は、車軸に平行な水平面に沿っており、

前記ケーシング要素は、前記ケーシングの上 3 分の 1 以内の位置で分離可能であり、

トランスミッションを前記分離可能なケーシング要素の 1 つに取り外し可能に取り付ける前記トランスミッション上のクリップファスナを備える。

シナリオ 3 において、ルースとモーガンは、クレーム 3 に係る発明の正当な発明者である。指導原則 1 は、「AI 支援発明をなす際に自然人が AI システムを使用しても、発明者としてのその人の貢献が否定されるわけではない。」としている。自然人が AI 支援発明に大きく貢献した場合、その自然人を発明者または共同発明者として記載することができる。第 1 の Pannu ファクターに関しては、ルースとモーガンが発明の着想に大きく貢献した。ルースとモーガンは、実験の直接の結果として代替デザインに大幅な変更を加えた。具体的には、ケーシングを長くし、水平方向のセパレーションをケーシングの上 3 分の 1、アクスルシャフトを下 3 分の 2 に配置するという新しいデザインを生み出した。さらに、モーガンは、トランスミッションをケーシングに取り外し可能に取り付けるためのクリップファスナを設計することによって、本発明にさらに貢献した。これらの貢献は、単に代替設計を実施化に移した結果ではなく、発明の着想に大きく貢献している。AI システムの出力を利用し、その出力に大きく貢献して発明を生み出す人は、適切な発明者である。さらに、自然人が AI 支援発明を作成する際に AI システムを使用することは、発明者としてその人の貢献を否定するものではない。

第 2 の Pannu ファクターに関しては、水平方向に分離されたケーシングの一般的なアイデアに関するルースと

モーガンの実験により、ケーシング要素とクリップファスナの特定の配置を含む予備設計が大幅に変更された。これらの要素はクレーム 3 の発明に不可欠である。ルースとモーガンの貢献は、クレーム 3 で定義されているように、完全な発明の次元と照らし合わせて評価した場合、質の点で重要でないとはいえない。

第 3 の Pannu ファクターに関しては、本発明のプロセスに対するルースとモーガンの貢献は、現在の技術水準やよく知られた概念を説明した結果ではなかった。それどころか、彼らの貢献は新しいデザインにつながった。

ルースとモーガンは両方とも本発明に多大な貢献をしたので、ルースとモーガンはクレーム 3 の主題の正当な発明者である。

#### 5) シナリオ 4<sup>(5)</sup>

マーベリックは、Puerto5 の作成とトレーニングを監督したリード AI エンジニアである。Puerto5 は、標準的な教師あり学習方法で、さまざまな分野のドキュメントのコレクションを用いてトレーニングされた。マーベリックが Puerto5 を設計及びトレーニングしたとき、RC カーのトランスアクスルに関連する特定の問題については何も知らなかった。

シナリオ 4 において、マーベリックはクレーム 1~3 の発明者ではない。指導原則 5 は「AI システムに対する「知的支配」を維持すること自体は、その人が AI システムの使用を通じて生み出された発明の発明者になるわけではない。」としている。

したがって、発明の着想に重大な貢献をせずに、発明の創作に使用される AI システムを単に所有または監督しているだけでは、その者は発明者とはならない。

第 1 の Pannu ファクターに関しては、マーベリックの貢献は、標準的な学習テクニックと一般化された知識を使用した Puerto5 の作成とトレーニングに限定されている。しかしながら、これは本発明の着想に大きく貢献するものではない。

AI システムに対する「知的支配」を維持することだけでは、その人が AI システムの使用を通じて生み出された発明の発明者になるわけではない。

場合によっては、特定の課題を考慮して解決策を導き出すべく、AI システムをトレーニングし、設計、構築、または開発を行う自然人は、発明者になる可能性がある。この場合、AI システムの設計、構築、トレーニングは、AI システムで作成された発明に大きく貢献する。ただし、Puerto5 は一般知識の課題を解決するために開発された。これは、特定の課題を念頭に置き、課題に対する特定の解決策を導き出すために設計されたものではない。マーベリックは、トランスアクスルの作成に使用された Puerto5 を作成及び保守している人物にすぎず、クレームされているトランスアクスルの着想に重要な貢献はしていない。これらの理由により、マーベリックはクレーム 1 から 4 の発明のいずれにも大きく貢献しなかったことから、マーベリックはクレームされた発明の正当な発明者ではない。

#### 6) 考察

シナリオ 1 とシナリオ 3 との対比により、単に課題を AI に与えて、AI が出力した回答をクレームするだけでは発明への貢献が十分でなく発明者地位を有さない。その一方で、AI からの出力をヒントに課題を解決すべく、さらなる改良を加えた場合、発明への貢献が十分に大きく発明者地位を有することとなる。シナリオ 3 では、AI を開発ツールとして使用しているものの、AI からの出力を元に改良を加えていることから、発明の着想に大きな貢献をなしており、発明者地位を有することとなる。さらに指導原則 3 にあるように、AI からより良い解決策を出力させるためにプロンプトの作成を試行錯誤し最終的に AI から得た解決策をクレームした場合も発明者地位を有する可能性がある。

またその貢献を判断する上で、シナリオ 2 で「スチール」を採用したように、一般的な技術を付加する程度では発明者地位を有さないということになる。

実務上は LLM から発明のヒントは得られるが、LLM からの出力そのものでクレームを作成して出願することは少ないと考える。実際には、ビジネス上の競争力、ユーザビリティ、先行技術との関係、及び、コスト等を考慮して、得られたヒントからシナリオ 3 のように再検討してプロンプトを作成し、また LLM の出力に加えて更なる

改良を加えるはずであり、この一連の創意・工夫を独立クレームから従属クレームに展開して特許出願することとなる。ただし LLM の性能が今後飛躍的に向上した場合、人間の関与が徐々に減少しシナリオ 1 のような状況にも陥る可能性もある。その際は、そのままでは発明者地位を有さないことに注意すべきである。

シナリオ 4 で LLM (Puerto5) を開発したマーベリックは、LLM 自体がトランスアクスルに特化したものではないため、トランスアクスル自体の発明者とはなり得ないことは明らかであろう。しかしながら、マーベリックは、汎用 LLM 自体の発明者として LLM アイデアの特許出願することは可能であり、またトランスアクスルの設計を行うために LLM をファインチューニングした場合、その AI 設計手法に係るクレームについての発明者として特許出願することも可能である。

## (2) 化学分野の事例～癌を治療するための治療化合物の開発～

### 1) 背景

がん研究大学 (UCR) の教授であるマリサは、前立腺がんの治療薬の開発を研究している。特定の種類の前立腺がん及び乳がんは主にアンドロゲン受容体遺伝子及びタンパク質の変異によって引き起こされるため、マリサは、前立腺がんを治療できる標的通りの副作用 (すなわち、骨の合併症等の、他の組織における生理学的アンドロゲン受容体機能の破壊) を制限する、新しいアンドロゲン受容体を標的とした治療法の開発に着手した。

マリサは、変異したアンドロゲン受容体タンパク質 (AR) を選択的に標的とする前立腺がん治療用のリード薬剤化合物を特定したいと考えている。マリサは、UCR の AI 専門家ラゲーに相談し、創薬を加速し、従来のウェットラボ実験の必要性を制限するために、インシリコでの薬物標的相互作用 (DTI) 予測手法を試したいと説明した。マリサ教授はラゲーに、アンドロゲン受容体標的療法に使用できる主要薬剤化合物を特定するよう依頼した。

### 2) 薬物標的相互作用予測ツールを使用した予測

UCR は、Drug Target Interaction Predictor (DTIP) と呼ばれるディープニューラルネットワーク (DNN) ベースの予測モデルをホストしており、大学のデータサイエンティストが創薬中にこれを使用する。DTIP は、薬物と標的のペアの相互作用の強さ (薬物化合物とその標的の間の結合の強さ) を予測できるシステムである。DTIP は薬物と標的のペアを入力として受け取り、そのペアの結合親和性を表す数値を出力する。図 5-2 は開発経緯を示す説明図である。

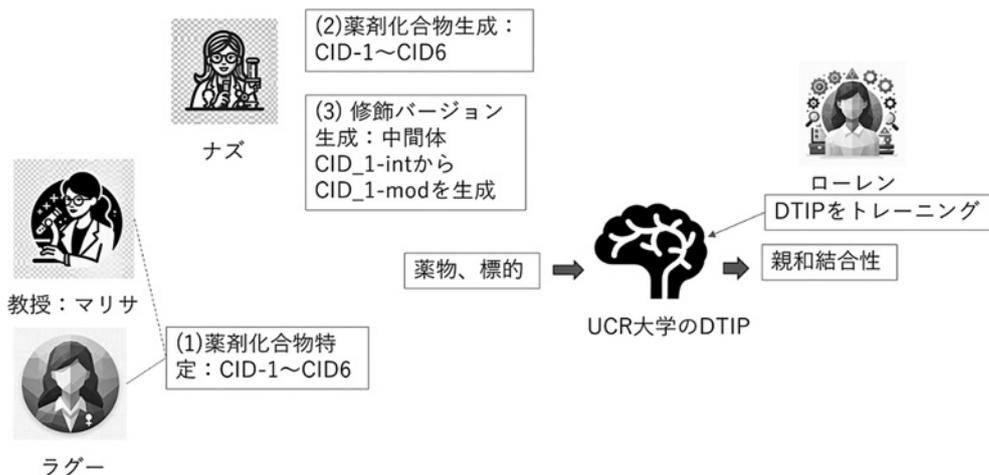


図 5-2 開発経緯を示す説明図

UCR の主任データサイエンティストであるローレンは、UCR の研究者が以前に実施した薬物標的の実験から得られたさまざまな化合物と標的のセットについて DTIP を訓練した。ローレンは DTIP のメンテナンスを行い、システムのパフォーマンスを向上させるために定期的なチューニングを実行する。DTIP は、薬物化合物とタンパク質配列の両方について ASCII 文字の文字列のみを受け入れる。これらの文字列は、薬物化合物のよく知られた一般に利用可能な SMILES (簡易分子入力ライン入力システム) コード及びタンパク質のアミノ酸配列から生成できる。

ラグーは、DTIP を使用して、変異した AR に対して高結合親和性を持つ薬剤化合物を予測した。これを行うために、マリサは、化合物情報として国立がん研究所が提供するよく知られたがん関連化合物データセット（約 20,000 化合物）を使用し、唯一の標的タンパク質として変異 AR を使用することをラグーに提案した。薬物化合物の入力については、ラグーは薬物化合物の ASCII 字列表現を使用した。変異した AR のアミノ酸配列の ASCII 文字列表現がターゲット入力として使用された。これらの入力に基づいて、DTIP システムは各薬物化合物について、変異 AR に対する薬物化合物の結合親和性を表す 0~1 の数値を出力した。ラグーは出力を降順に並べ替えた。

マリサは、上位 6 つの薬物化合物 CID\_1 から CID\_6 が、高い結合親和性を表す最高の数値（0.67 より大きい）を持つものとして特定した。計算された高い結合親和性に基づいて、マリサは CID\_1 から CID\_6 までが前立腺がんの治療に有効である可能性が高いと仮説を立てた。マリサは、さらなるウェットラボ実験と特性評価のために、これらの潜在的な候補薬剤化合物を選択した。CID\_1 は結合親和性を表す最も高い数値を持つ。

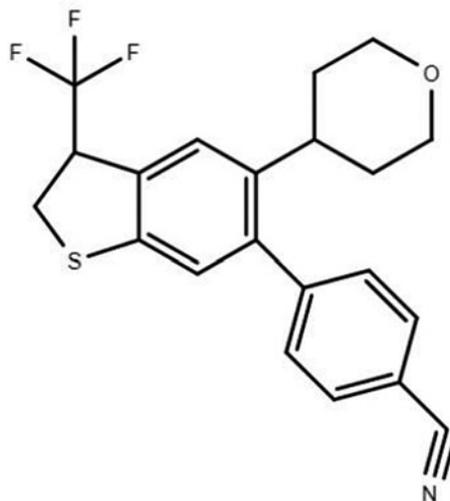
### 3) シナリオ 1<sup>(6)</sup> ウェットラボ実験を使用した薬剤の最適化

マリサの博士研究員であるナズは、CID\_1 から CID\_6 を合成した。6 つの薬物化合物すべてを合成し、変異及び非変異 AR への薬物化合物の結合を特徴づけた後、ナズは、薬物化合物 CID\_1 が、治療効果が最も期待できると同定したが、それが変異及び非変異 AR の両方に対して高度の結合を示すことを発見した。

非変異 AR への結合は、オンターゲット副作用の量の増加と相関している。変異 AR へのより高い選択的結合は、より強力な抗腫瘍効力と前立腺がん治療における有効性の向上と相関している。マリサとナズはこの問題について話し合い、変異 AR の形態に基づいて、CID\_1 薬物化合物の構造を変更すると変異 AR へのより選択的な結合が得られる可能性があるかと判断した。一連の実験を通じて、マリサとナズは CID\_1 の潜在的な構造修飾を特定し、合成プロセスを開始した。ナズは、CID\_1 の合成調製においていくつかの中間体を調製し、中間体の 1 つ（CID\_1-int）が他の中間体よりも安定であり、この特性がリード医薬品化合物の大規模生産に役立つことを発見した。

マリサは、CID\_1-int から合成された CID\_1 の修飾バージョン（CID\_1-mod）が、変異した AR に対してより選択的な結合を示すだけでなく、十分な抗腫瘍効力も示すことを発見した。

これは、前立腺がんの治療効果が向上し、副作用が限定的であることを示している。CID\_1-mod の作成に基づいて、マリサはまた、DTIP とその後のウェットラボ実験の併用が、リード医薬品化合物を合成する貴重な方法であることを高く評価した。新規化合物 CID\_1-mod の構造は次のとおりである。



UCR は、薬剤化合物 CID\_1 から CID\_6 を特定するための DTIP の使用を説明する明細書を含む特許出願を提出した。この出願には 2 つのクレームがある。

#### クレーム

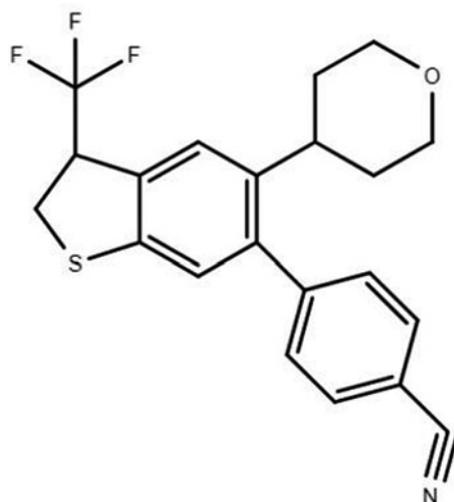
1. 前立腺がんを治療するためのリード薬剤化合物を特定及び合成する方法であって、化合物情報と変異アンドロゲン受容体タンパク質（AR）配列情報の入力を、事前にトレーニングされたディ-

プニューラルネットワーク (DNN) に提供し、DNN は、薬物化合物と変異 AR との間の結合親和性を表す数値を出力し、

DNN の出力から、変異 AR に対する高い結合親和性を示す数値を有する選択された薬剤化合物を特定し、  
選択された薬物化合物の安定な中間体を合成し、

安定な中間体に構造修飾を導入してリード医薬品化合物を合成する。

2. 下記構造式で表される化合物。



#### 4) 分析

クレーム 1 に関し、マリサとナズはクレーム 1 の共同発明者である。第 1 の Pannu ファクターに基づき、マリサは、新しいアンドロゲン受容体を標的とした治療法を開発し、関連する特定のデータセットと DTIP への入力用の標的タンパク質の配列を特定し、上位のタンパク質を特定することにより、前立腺がんの治療法を開発することを決定し、さらなるウェットラボ実験のための潜在的な候補として DTIP から出力された Top6 つの薬剤化合物候補を出力し、選択的結合親和性を向上させるための CID\_1 の構造修飾を決定し、構造修飾 CID\_1 を調製するための方法論を特定 (試薬の特定を含む) し、修飾 CID\_1、CID\_1-mod を合成することで、発明に貢献した。

ナズは、CID\_1 を有望な治療候補として特定するための最も高い結合親和性スコアを持つ 6 つの薬物化合物に対しウェットラボ実験を実施し、薬物化合物を特徴付け、変異 AR への CID\_1 の選択的結合を改善する CID\_1 への修飾構造を決定し、治療薬の調製のための方法論を特定 (試薬の特定を含む) し、CID\_1 を構造的に修飾し、未修飾型よりも選択的な結合親和性を示す CID\_1-mod をもたらす中間体を調製するための合成方法を実施することで貢献した。

これらの貢献の中には、単純に問題を特定したり、実施化のための DTIP の出力を削減したりすることとして特徴付けられるものもあるが、マリサとナズは本発明の構想に多大な貢献をした。つまり、マリサとナズは、DTIP の出力から候補として特定された薬剤化合物を合成し、これらの薬剤化合物の特性を評価し、リード薬剤化合物を構造的に改変して新しい治療薬化合物を作成した。したがって、マリサとナズの両者は、クレーム発明の着想に大きく貢献した。さらに、マリサは、CID\_1-mod に基づいて、DTIP と後続のウェットラボ実験がリード医薬品化合物を合成する貴重な方法であることを特定した。したがって、マリサはクレーム 1 に記載された発明を同時に認識し、評価し、着想を完成させた。

第 2 の Pannu ファクターに関しては、ナズは CID\_1 が有望な治療候補であることを特定した。マリサとナズは共同で、より選択的な結合親和性を得るために CID\_1 を変更すると、ターゲット通りの副作用が少なくなるであろうと判断した。その後、構造的に修飾された薬物化合物を合成するために必要な手順を実行して、この新規薬物化合物を作成した。マリサとナズの貢献は、クレームに記載されている本発明に不可欠である。このクレームにおける唯一の追加の限定は、親和結合値を出力するために事前トレーニングされた DNN に入力を提供することある。この追加のステップは、マリサとナズの貢献が重要であることを示している。発明全体の規模に照らして考慮する

と、マリサとナズの貢献は質の点で重要でないとはいえない。

第3の Pannu ファクターを考慮すると、マリサとナズの本発明への貢献は、周知の概念及び現在の技術水準の単なる説明以上のものである。むしろ、彼らの貢献は、前立腺がんを治療するための薬剤化合物を同定及び開発するための新しい方法の作成に大きく貢献した。以上のとおりマリサとナズは両方とも本発明に多大な貢献をしており、クレーム1の適切な発明者である。

ラゲーとローレンは、クレーム1発明の発明者ではない。第1の Pannu ファクターを考慮すれば、ラゲーは、利用可能な薬剤化合物から、6つの最も可能性の高い治療薬化合物に絞り込むために、受け入れ可能な形式で DTIP に入力を提供した。これらの薬剤は、マリサとナズによって薬剤開発プロセスの次の段階で使用された。この貢献はクレームに明示的に記載されており、着想への重要な貢献と考えることができる。ラゲーの貢献を第2の Pannu ファクターに基づいて分析すると、これらの貢献は発明全体の規模と比較して質の点で重要ではない。これは、ラゲーが、DTIP が受け入れる唯一許容可能な入力形式（つまり、ASCII 文字列）で DTIP に入力を提供し、マリサが提案したデータベースを選択し、DTIP 出力を降順にソートするという当業者に期待される通常のスキルを実行しただけであるからである。

これらの活動は、クレーム1の発明に対するラゲーの貢献が質の点で重要ではないことを示唆している。クレームには、選択された薬物化合物を、前立腺がんを治療するための薬物化合物として同定するステップと、選択された薬物化合物の修飾バージョンを合成するステップも記載されている。ラゲーの唯一の貢献は、DTIP に薬物化合物のグループの結合親和性を特定するよう促したことである。ラゲーの貢献は、新規薬剤化合物の創出につながったマリサとナズが開発した方法の他のステップと比較すると、クレームされた発明の着想レベルに達していない。したがって、ラゲーの貢献は、第2の Pannu ファクターに基づいて、クレーム発明の全範囲と比較した場合、重要ではない。

ローレンは、UCR の研究者が実施した以前の薬物標的実験から得られた多様な薬物化合物と標的のセットについて DTIP をトレーニングした。第1の Pannu ファクターの下では、ローレンの DTIP の一般的なトレーニングとシステムの一時的なメンテナンスは、クレーム1の発明の着想にとって大きな貢献とはいえない。

これらの貢献は、特定の課題（つまり、新しいアンドロゲン受容体を標的とした治療法を策定するマリサの研究計画）を念頭に置いてなされたものではなく、またこの課題を解決するために DTIP から特定の種類の出力を引き出すものでもない。さらに、発明の着想に大きく貢献せず、発明の創作に使用される AI システムを単に所有または監督するだけの者は発明者ではない。したがって、ローレンはクレーム1に記載の発明の発明者ではない。

#### 5) クレーム2

マリサとナズは、クレーム2に記載された発明の共同発明者である。指導原則3によれば、「発明を実施化するだけでは、発明者地位のレベルにまで到達するほどの大きな貢献にはならない」。クレーム1で詳述したように、第1の Pannu ファクターに基づいて、マリサは、新しいアンドロゲン受容体を標的とした治療法を開発することにより前立腺がんの治療法を開発することを決定し、CID\_1 を構造的に修飾することを決定し、方法論（含む）を特定することにより、本発明に貢献した。構造的に修飾された CID\_1 を調製し、合成プロセスを実行するための試薬を同定した。ナズは、CID\_1 を有望な治療候補として特定し、CID\_1 への構造修飾が CID\_1 の選択的結合親和性を向上させると判断し、構造修飾された CID\_1 を調製するための方法論（試薬の同定を含む）を特定することで貢献した。したがって、マリサとナズは両方とも、CID\_1 を構造的に修飾することでその選択的結合能力が向上することを認識し、クレームに記載されている薬剤化合物を合成するための措置を講じた。これらは、クレーム1に係る発明の着想に対する重要な貢献である。着想が成立するには、クレーム発明が同時に認識され評価されなければならない。マリサは、安定な中間体から生じる修飾された CID\_1 が必要な特性（すなわち、より選択的な結合親和性により、前立腺がんを治療するための強力な抗腫瘍効力と十分な有効性）を示しながら、副作用を制限した。したがって、マリサはクレーム2に記載の発明を同時に認識し評価し、着想を完成させた。

第2の Pannu ファクターに関しては、ナズは CID\_1 が有望な治療候補であることを特定し（ただし、選択的結合親和能力に問題があった）、マリサとナズは共同で、CID\_1 を修飾することでより選択的結合能力を備えた薬

剤化合物が得られる可能性がある」と判断した。マリサとナズは、構造的に修飾された薬物化合物を合成し、この新規薬物化合物を作成するために必要な手順を踏んだ。これらの貢献は、クレームされた医薬品化合物の創出に不可欠である。発明全体の規模に照らして測定すると、マリサとナズのこれらの貢献は、質の点で重要でないとはいえない。

第3の Pannu ファクターを考慮すると、クレームされた発明に対するマリサとナズの貢献は、周知の概念または現在の技術水準の単なる説明以上のものである。むしろ、彼らの貢献は、前立腺がんを治療するための新しい薬剤化合物の創出に大きく貢献した。

マリサとナズはどちらもクレーム発明に多大な貢献をしており、クレーム2の適切な発明者である。最後に、少なくともクレーム1に関して論じた理由により、ラグーとローレンはクレーム2の適切な発明者ではない。

#### 6) 考察

クレームの記載内容が、CID\_1~CID\_6 であれば、マリサと共に標的に対し高い親和結合性を有する薬剤化合物を発見すべく DTIP を活用し、そして最終的に CID\_1~CID\_6 を特定したラグーもその貢献から共同発明者としての地位を有していたであろう。しかしながら、事例で挙げられたクレーム1は抗腫瘍効力と前立腺がん治療における有効性を高めるべくマリサとナズが特定した修飾バージョン CID\_1-mod が記載されていたため、ラグーは発明者としての地位を有さないこととなる。

薬物化合物と標的を入力し、親和結合性を出力する汎用的な DTIP をトレーニングしたにすぎないローレンは、機械事例のマーベリックと同じくモノであるクレーム発明への貢献はなく発明者としての地位を有さない。しかしながら、汎用的な学習モデルをクレームに記載されたモノを生成するために特別にファインチューニングした場合、発明者地位を有することとなる。本稿では紙面の都合上割愛したが、化学事例のシナリオ2では、薬剤化合物の SMILES 表現を入力した場合に、アンドロゲン受容体標的療法用に最適化された薬剤化合物（未合成）を SMILES 形式で生成する汎用的な学習モデルを、ファインチューニングし、DTIP から出力された薬物化合物から、学習モデルを用いて前立腺がんの治療に最も有効な治療薬化合物を生成したラグーも発明者地位を有することが記載されている。

以上述べたように、機械分野及び化学分野共にクレームの記載内容、プロンプトの内容、AIにより生成されるモノとそのモノに対する改良、及び、AIへの当該モノに関するトレーニングの程度により、発明の着想への貢献がそれぞれ評価され、発明者地位の有無が決定されることとなる。

発明者が適切に記載されていない場合、米国特許法第101条（発明は特許を受けることができる）及び同法115条（出願人の宣誓）規定に違反し拒絶されることとなる。実務上、発明に至るまでの経緯を知らない審査官は、発明者地位について具体的に判断することはできないが、出願人及び実務家には USPTO に対し、率直かつ誠実に対応する義務が求められている。この義務には特許性にとって重要な既知の情報を全て開示する義務が含まれており<sup>(7)</sup>、この義務に違反した場合、権利の有効性に問題が生じるほか、権利行使の際にも影響を及ぼすこととなる。現状 USPTO は AI 支援発明であるからといって特別な開示義務を要求していないが、本ガイダンスに従って出願人自身が適切な発明者を決定する必要がある。

## 6. おわりに

本稿で解説した DABUS 事件第1審において判事は最後に、「技術の進化に伴い、AIが発明者の意味を満足させるほど洗練されたレベルに達する時が来るかもしれない。しかしながら、その時はまだ到来しておらず、もしそうなら、どのように特許法の範囲を拡大するのかを決定するのは議会次第である。」と述べた。

現状はその「レベル」にまで達していないが、急速にそのレベルに向かっている過渡期にあるといえる。そのような状況において、AIマシンと複数人間とが関わる発明者の地位をどのように考えるか、出願するタイミングと方式をどのように決定するか、さらに記載要件上注意すべき点は何かについて特許事例、判例及び USPTO ガイダンスに従い解説を行った。本稿が生成 AI の特許実務に携わる方の参考となれば幸いである。

以上

(注)

- (1) 特許庁 審査第一部 調整課 審査基準室「AI 関連技術に関する事例の追加について」2024 年 3 月 13 日
- (2) *STEPHEN THALER, v. KATHERINE K. VIDAL*, No. 2021-2347
- (3) USPTO “Inventorship Guidance for AI-Assisted Inventions” 2024 年 2 月 13 日
- (4) *Pannu v. Iolab Corp.*, 155 F.3d 1344, 1351 (Fed. Cir. 1998)
- (5) USPTO ガイダンスではシナリオ 1-5 まで存在するが、本稿では誌面の関係上シナリオ 4 を省略し、シナリオ 5 をシナリオ 4 に繰り上げて説明した。
- (6) USPTO の事例ではシナリオ 2 も存在するが誌面の関係上シナリオ 1 のみ解説する。
- (7) MPEP 2157

(原稿受領 2024.4.26)