

医薬・医療分野の AIに関する技術・知的財産研究

医薬・バイオテクノロジー委員会
第1小委員会*

抄録 近年のAIの目覚ましい発達は、既存産業に多大なインパクトをもたらしている。AIによる影響は、一部の産業のみならず、医薬品・医療業界にも及んできている。当小委員会では、医薬品開発および診断・医療におけるAIの技術動向を調査するとともに、AIを活用したビジネスを行う企業の中でも特色のあるベンチャー企業（創薬AIベンチャー企業、診断AIベンチャー企業）の企業動向および特許出願傾向を調査・分析した。また、医薬品開発および診断・医療でのAIに関する知的財産研究として、AIにより創作された発明またはAIを解決手段として活用した発明に対する特許性（産業上の利用可能性、進歩性、実施可能要件）判断を調査・検討した。

目次

- はじめに
- 医薬品開発および診断・医療におけるAIの技術動向
 - 1 医薬品開発におけるAI
 - 2 診断・医療におけるAI
- 医薬品開発および診断・医療におけるAI活用企業の動向と特許出願傾向
 - 1 AIベンチャーの企業動向
 - 2 創薬AIベンチャーの企業動向と特許出願傾向
 - 3 診断AIベンチャーの企業動向と特許出願傾向
- AIにより創作された医薬発明またはAIを解決手段として活用した医薬分野の発明の特許性
 - 1 発明該当性、発明者適格性(29条1項柱書)
 - 2 産業上の利用可能性(29条1項柱書)
 - 3 進歩性(29条2項)
 - 4 実施可能要件(36条4項1号)
- おわりに

よって、デジタル・ディスラプション（デジタルによる創造的破壊）があらゆる産業で生じている。例えば、Uber（スマートフォンを活用した配車サービスを提供）やAirbnb（AIを活用した、民泊における宿泊者と部屋提供者のマッチングを行うサービスを提供）は既存のタクシー業界やホテル業界に多大なインパクトをもたらしている。次世代デジタル技術による影響は一部の産業だけでなく、医薬品・医療業界にも及んできている。例えば、IT企業がAIを活用して、創薬や診断の領域へ進出すること（例えば、AIに医薬文献情報を学習させて、新規の医薬候補品を予測させることや、患者の病名や治療法を診断すること）が活発化してきている。AI活用の活発化の背景には、(i) ハードウェアの飛躍的進歩と劇的なコストダウン、(ii) 機械学習の深化、(iii) ビッグデータの整備、の三要素が揃ってきたことがある。

2017年に厚生労働省が主催した「保健医療分

1. はじめに

近年、AI等の次世代デジタル技術の発達に

* 2017年度 The First Subcommittee, Medicinal and Biotechnology Committee

野におけるAI活用推進懇談会」¹⁾においては、AI開発を進めるべき重点領域として、医薬品開発、診断・治療支援、画像診断支援等が挙げられており、日本における医薬品開発および診断・医療でのAIの開発が進展していくことが見込まれる。

今後、製薬企業や医療機器企業がデジタル・ディスラプション時代を生き抜いていくためには、次世代デジタル技術（特にAI）が進展した将来像を把握し、その将来像にマッチした知的財産（以下、知財とする）活動を行っていく必要がある。当小委員会では、医薬品開発および診断・医療におけるAIの技術動向を調査するとともに、AIを活用したビジネスを行うベンチャー企業の動向および特許出願傾向を調査・分析した。また、医薬品開発および診断・医療でのAIに関する知財研究として、AIにより創作された発明またはAIを解決手段として活用した発明に対する現時点での特許性判断を調査・検討した。

なお、本論説においては、「学習によって、判断や推論を行うという人間の知能の働きを人工的に実現したもの」をAIと定義し、AI自体が意識を持たずに単なるプログラムを実行するもの（いわゆる弱いAI）を含む範囲で調査を行った。

本論説は、2017年度医薬・バイオテクノロジー委員会第1小委員会、高崎理愛（小委員長、富士フイルム）、海津新（小委員長補佐、日立製作所）、里山雅也（エーザイ）、中田知久（帝人ファーマ）、西尾崇（日東電工）、平田真也（大塚製薬）が担当した。ただし、本論説は、各委員の所属企業、特定の団体の見解を記すものではない。

2. 医薬品開発および診断・医療におけるAIの技術動向

2.1 医薬品開発におけるAI

(1) 背景

近年、医薬品開発への多額の投資にも関わらず、それに見合った新薬の上市が進まず、研究開発型製薬企業の事業環境は厳しい状況となっている。研究開発型製薬企業が今まで以上に効率的に新薬を研究開発していく切り札としてAIの活用が検討されている。

(2) 医薬品開発におけるAI適用領域

医薬品開発は図1に示すようなプロセスで行われており、創薬研究や臨床開発の各ステージでAIの活用が検討されている（以下、これらのAIを「創薬AI」と総称する）。



図1 医薬品開発のプロセス

創薬研究においては、ゲノム情報や医学論文、自社で得た生物科学データ等を学習させたAIを用いた未知の創薬標的探索、創薬標的の情報と化合物の情報を組み合わせ、機械学習を活用した効率的な候補化合物探索、あるいは既存薬や開発中止となった化合物の従来知られていなかった作用や疾患との関連性を見出すドラッグ・リポジショニング等への適用が検討されている。

臨床開発においては、臨床試験の内容と治験対象者とのミスマッチ低減のため、試験条件と対象者の診療情報を学習させたAIにより試験条件に合致した治験対象者を的確に集める取り

表1 創薬AIの適用事例

段階	機能	機関	内容
創薬研究	創薬標的探索～全般	京都大学他	製薬企業、IT企業とコンソーシアムを構成し、創薬から上市までそれぞれの段階で適用可能なAIの開発を推進。
	創薬標的探索	IBM ベイラー医大 (米国)	ベイラー医大と共同でWatsonを用い、既知のキナーゼに関する情報に基づき、高効率に未知のキナーゼの予測に成功。
	候補化合物探索	NEC サイトリミック	サイトリミックがNEC開発のAIと実験を組み合わせ、短時間かつ低コストで、ワクチン候補となるペプチドを高効率に発見。
	候補化合物探索	Numerate (米国)	製薬企業と組み、創薬標的に関する情報を基に機械学習を利用して予測モデルを構築し、様々な構造の候補化合物の有効性を予測。
	創薬標的探索 候補化合物探索	Berg (米国)	遺伝子、タンパク、代謝物等のデータと臨床情報等を独自開発のAIで解析し、医薬品候補化合物を創出、一部は自社で臨床開発を実施。
	ドラッグ・リポジショニング	BenevolentAI (英国)	論文情報に基づきAIにより疾患ごとに関連する遺伝子や化合物の特性を学習し、新規化合物やドラッグ・リポジショニング候補を提示。

表2 診断・医療AIの適用事例

段階	機能	機関	内容
診断	画像診断	LPixel (日本)	東大発ベンチャー。脳のCTスキャン画像から深層学習を用いた画像解析により脳腫瘍を見つける精度向上。放射線治療の効果測定に適用。
	画像診断	Arterys (米国)	GE、シーメンスと提携。MRIの画像を自動で分析し、機械学習を利用して血流を視覚化、定量化できる技術を確立。
	病理診断	IBM 東大医科研	がん遺伝子の変異情報やがん関連の医学文献等を学習したWatson for genomicsにより新規患者のがんの原因となる遺伝子変異を発見。
	総合診断	Deep Genomics (カナダ)	遺伝子解析情報の機械学習によって、脊髄性筋萎縮症や大腸がんの発症に関連がある新しい遺伝子変異群の同定に成功。
	総合診断	富士通	医学文献などのオープンデータと匿名化された過去の患者の医療データをAIが解析し、自殺・アルコール依存・薬物依存などの患者の潜在的なリスクを提示。
医療	治療法 選択	IBM	膨大ながん関連文献を学習させたWatsonにより、患者の属性データを分析し、最適な治療方針や治療方針の優先順位を提示。

組みがなされている。

におけるAIの適用事例の一端を示す。

(3) 創薬AIの適用事例

創薬AIへの取り組み方は、IT企業が製薬企業やアカデミアと提携する形、創薬ベンチャーが自社または製薬企業と提携し医薬品開発を行う形あるいは製薬企業へのサービス提供に焦点を当てた形と多様である。表1に医薬品開発に

2.2 診断・医療におけるAI

(1) 背景

先進国を中心とした高齢化の進展に伴い、医療費は年々増大し医療財政を圧迫する要因となっている。その対策として疾患の早期発見、早期治療が重要であるが、その実施のために必要

な医療スタッフは慢性的に不足している。このような状況を解決する手段の一つとしてAIの適用が検討されている。

(2) 診断・医療におけるAI適用事例

診断・医療においては、画像診断、検体検査および各種データを用いた総合的な観点からの疾患の同定等でAIの適用が検討されている（以下、これらのAIを「診断・医療AI」と総称する）。表2に診断・医療AIの適用事例の一端を示す。診断・医療AIでは、創薬AIと異なり、ベンチャーを含めたIT企業が単独でサービスを提供する形やそれらの企業が医療機関やアカデミアと連携した形の取り組みがみられる。

機械学習、深層学習の発達により、AIによる画像認識の技術は飛躍的に進歩しており、例えば、CTスキャンの画像を疾患（例えば、脳腫瘍）の有無と結びつけて学習させることにより、当該疾患か否かを判断させることができる。この技術は検体の病理診断にも活用することができる。また、検査値等の診断情報と疾患との関連を学習させることにより、ある検査値から特定の疾患の可能性を推測し提示することも可能であり、更に膨大な診療データ（カルテ等）や医学系論文の情報も合わせて学習させることで、症状から疾患を特定するといった総合的な診断を可能にする情報を提示することも可能である。

3. 医薬品開発および診断・医療におけるAI活用企業の動向と特許出願傾向

製薬、医療機器等のライフサイエンス分野においてもAIの活用が進みつつある現在、特許出願も近年増加傾向にあるという報道がなされている²⁾。同報道によれば、2010年から2014年にかけてAIに関する特許出願は全世界でおよそ7割増加しており、依然として米国での特許

出願数が多くを占めているものの、特許出願件数の伸び率は中国が他国を圧倒する状況とのものである。

こうした状況の中、AIを活用しようとする企業動向の例として、製薬企業とIT企業が連携し、AIを医薬品開発のプロセスに適用しようとする動きが活発化している。国内では第一三共とIBMにおける連携³⁾や、より包括的なデジタルトランスフォーメーションを目的とした塩野義製薬とアクセンチュアとの提携⁴⁾など大手企業同士の連携が目立つが、他方国外では大手企業同士の連携に加えて、大手製薬企業とベンチャー企業との連携も加速している。

このような企業連携におけるAIの開発や利用に際しては契約が重要であることはいうまでもないが、学習済みモデルやAIを利用した際の成果物の取り決めのみならず、学習を実施するための加工データの取扱いや開発されたAIの利活用に関する取り決めも重要と考えられる。

特に、製薬企業は自社の優位性を確保する独占的な利用形態を望むことが考えられる一方で、IT企業は他のユーザーへ広く利活用できる形態を望むことが予想され、相反する考え方の中、互いにWin-Winの関係を構築できる条件を導くことが必要であるといえる。このため、企業の知財部においては、秘密保持契約やタムシート締結などの連携初期の段階で介入し、ビジネス戦略を見据えた知財条件の提案を実施していくことが求められる。

3.1 AIベンチャーの企業動向

米国を中心としてさまざまな分野でベンチャー企業が精力的な活動を実施しているところ、AI分野についても、ベンチャー企業の台頭が目覚ましい。また、こうしたベンチャー企業の技術力が評価されつつある状況下で、2012年頃から大手IT企業を中心としてAIベンチャー企業の買収件数が急激に増加してきており、AI

の実用化に向け、企業間の競争が激しくなってきた⁵⁾。ライフサイエンス分野においても、様々な領域でAI活用の可能性が検討され、特色のあるAIベンチャー企業が数多く創設されている。

本章では、AIを取り巻くベンチャーの企業動向に鑑み、ライフサイエンス分野におけるAI、特に創薬AIおよび診断AIに関する技術を開発するベンチャー企業に焦点を当て、当該ベンチャー企業の特許出願に関する傾向を調査・分析した。なお、調査対象としたAIベンチャー企業は、他の調査報告書等⁶⁾を参照し選定した。

3. 2 創薬AIベンチャーの企業動向と特許出願傾向

創薬AIにおいては、先に図1で示した医薬品開発プロセスのどの段階のAIを構築するか、また、どのような指標に基づき解析を実行する

か、AIによるアウトプットを何に設定するかによって、企業ごとにAIの特徴および当該AIを用いた活用形態が異なってくるのが推察される。また、創薬AIの活用については、開発した創薬AIを自社内でのみ活用し、AIによって導きだされた医薬品候補物質等を独占的に利用する形態に加え、創薬AIを基盤ツールとして他者に展開して、多様な成果を創出する形態や、これら双方の利点を活かし、自社の優位性を見出せる活用範囲を設定しつつ、他者とも共同で成果を創出する形態が想定される。事業の本格化に向け、これらの活用形態に応じたビジネスモデルの策定と当該ビジネスモデルに基づく知財戦略の用意が必要であろう。本章では、創薬AIベンチャー企業、計11社を対象としてAIに関連する特許出願（以下、AI出願とする）や物質特許出願の有無、AIに関する記載範囲に関する傾向について調査（期間：各社の創設

表3 創薬AIベンチャーの特許出願傾向

企業名	創設	利用形態	AI用途	AI出願	物質特許出願	物質特許出願中のAI記載程度
Atomwise (米国)	2012	基盤ツール提供	分子間相互作用分析	○	×	—
BenevolentAI (英国)	2013	独自/共同	効果予測・ドラッグ・リポジショニング	×	○	×
Berg (米国)	2006	独自/共同	オミックス・臨床データ解析	○	○	○
Cloud Pharmaceuticals (米国)	2009	独自/共同	結合親和性予測	×	×	—
Envisagenics (米国)	2014	基盤ツール提供	RNA解析	×	×	—
Globavir Biosciences (米国)	2011	独自	化合物探索	×	○	×
Insilico Medicine (米国)	2008	独自/共同	トランスクリプトーム/プロテオーム解析	○	×	—
NuMedii (米国)	2008	独自/共同	ドラッグ・リポジショニング	×	○	△
Numerate (米国)	2007	独自/共同	リガンドベースの予測モデリング	○	○	×
twoXAR (米国)	2014	基盤ツール提供	薬物-疾患モデルを用いた有効性評価	×	×	—
サイトリミック (NEC) (日本)	2016	独自	免疫機能予測	○	○	△

以降、2018年1月まで、国：全世界）を実施し、調査結果を以下の表3にまとめた。なお、表3におけるAI出願有無については、特許請求の範囲に記載の発明のカテゴリー（分析、評価、予測システムまたは方法等）および明細書中におけるAIに関する技術キーワード（機械学習、ニューラルネットワーク等）の存在有無から判断した。また、物質特許出願におけるAIの記載の程度については、当該明細書中に、AIに関するキーワードが見られないものを×、キーワードは見られるが分析等手段の一例としてAIを利用してもよいという程度の記載に留まるものを△、AIに関する具体的な記載が見られるものを○として判断した。

AIに係る出願戦略に関しては、AIの独自性や有用性を示す等の活用を目的として、特許出願を実施し権利を取得する方針が考えられる一方で、他者が実際に利用しているAIの詳細を

特定しづらく侵害判断の検討が難しい点で課題があることや特許出願に係る技術開示と権利取得可能な範囲とのバランスを考慮し、出願せずに秘匿するという方針も考えられる。

今回の創業AIベンチャー企業における調査では、AI出願を行っていた企業は全体の約半数という結果であり、各企業の方針もまちまちであると考えられる。また、あわせて医薬品候補と想定しうる物質特許出願の有無とその出願におけるAIの記載の程度を調査したところ、全体のうち約半数の企業で出願が確認されたものの、化合物等の出願中にAIを詳細に開示している企業はほとんど見られず、AIも分析・予測手法の一例であるという趣旨の記載に留めている出願の方が多数であった。

表4 診断AIベンチャーの特許出願傾向

企業名	創設	AI用途	AI出願	AI記載程度	その他出願
Advenio TecnoSys (インド)	2010	眼底(網膜)・病理画像	×	—	
Arterys (米国)	2007	CT/MRI画像(血管)	○	○	
Behold.ai (米国)	2015	マンモ画像	×	—	
Butterfly Network (米国)	2011	超音波診断	○	○	AIを搭載した診断装置
CureMetrix (米国)	2014	マンモ画像	×	—	
Deep Genomics (カナダ)	2015	検体情報(遺伝子)	×	—	
Enlitic (米国)	2014	CT/MRI画像	×	—	
Entopsis (米国)	2011	検体情報(タンパク)	×	—	独自の診断デバイス
Imagia Cybernetics (カナダ)	2014	CT/MRI画像(がん)	×	—	
Lunit (韓国)	2013	マンモ/X線、病理画像	×	—	
Proscia (米国)	2015	病理画像	○	△	
Smart Health Care (スウェーデン)	2014	総合(がん)	×	—	
VisExcell (米国)	2015	マンモ画像	×	—	
Zebra Medical Vision (イスラエル)	2014	CT/MRI画像(多数)	○	△	
FRONTEOヘルスケア(日本)	2015	総合(がん)	○	○	
エクサイネテリジェンス(日本)	2016	CT/MRI画像(血管)	×	—	
LPixel(東大)(日本)	2014	CT/MRI画像(がん)	○	○	

3. 3 診断AIベンチャーの企業動向と特許出願傾向

診断AIは、主にCT/MRIやマンモグラフィ等で取得した画像の解析を対象とした開発が進んでおり、近年の深層学習技術との親和性も高いため、今後も精度の向上が期待される。診断AIの利用形態においては、医師等の専門家への診断業務支援を目的とするものから、病気の兆候を早期に発見するための自己診断支援を目的とするものまで、多様な利用形態が考えられるが、創薬AIとは異なり、診断AIについてはAI基盤ツールを提供するサービスが主流になると考えられる。

また、調査対象とした診断AIベンチャー企業の中には、診断にかかる一連の流れをワンストップで提供することを目的とし、AIの開発のみならず、独自に開発したデバイスを用いてデータを取得し、当該データについてAIを適用した解析を行うサービスを実施している企業も見受けられた。このように、周辺技術との組み合わせによるサービスモデルの場合には、AIそのものの知財戦略のみならず、デバイス等の周辺技術をも考慮した総合的なオープン、クローズ等の戦略の検討が必要であると思われる。

前頁の表4に本研究で調査（期間：各社の創設以降、2018年1月まで、国：全世界）した診断AIベンチャー企業、計17社の特許出願の傾向を示す。なお、表4におけるAI出願有無については、特許請求の範囲に記載の発明のカテゴリー（診断、解析システムまたは方法等）および明細書中におけるAIに関する技術キーワード（機械学習、ニューラルネットワーク等）の存在有無から判断した。また、AI出願におけるAIの記載の程度については、当該明細書中に、AIに関するキーワードは見られるが解析等手段の一例としてAIを利用してもよいという程度の記載に留まるものを△、AIに関する

具体的な記載が見られるものを○として判断した。

今回調査対象とした企業は創設まもない企業が多く、現時点ではまだ出願が公開されていない可能性も含んでいるが、AI出願が確認された企業は少なかった。一方、AI出願が確認された企業の明細書中のAIの記載の程度に関しては、詳細な記載が多く見られ、創薬AI企業の出願における記載の程度よりも充実している印象を受けた。なお、表4には示していないが、各企業のAI出願におけるクレームの記載も確認したところ、AIアルゴリズムなどの詳細をクレームにまで落としこんでいる出願は少なく、AIに限らない上位概念化された解析手段として組み込んだ診断方法や診断システム、または診断サービスで権利取得しようとするケースが多い状況であることが分かった。

4. AIにより創作された医薬発明またはAIを解決手段として活用した医薬分野の発明の特許性

4. 1 発明該当性、発明者適格性（29条1項柱書）

(1) 問題提起

日本において「産業上利用することができる発明をした者は…特許を受けることができる」（特許法第29条1項柱書）と規定され、「発明をした者」は自然人であると解釈されている。しかし、AIは自然人ではないことから、AIがすべての発明を完成させた場合には「発明をした者」が存在せず、特許法第29条1項柱書に該当しないため、特許を受ける権利が発生しない恐れがある。本節では、これまでに見てきた創薬AIの機能と役割に着目した場合の、医薬品関連発明における発明該当性、発明者適格性について検討を試みた。

近年なされた研究において、AIを活用して

なされた発明等の創作については、完全にAIのみが自律的に生成・創作したものは発明に該当せず保護対象とはならないが、AIを道具として利用した場合には、その利用者等が出願人として現行法上の保護がされ得る、との見解がなされている⁷⁾。また、同研究では、AIを活用した創作を自然人の創作とみなせる場合の判断基準に関するアンケート結果が記載されており、これによれば、ステップ①：課題設定、ステップ②：解決手段候補選択、ステップ③：実効性評価、のステップ①～③のうち、いずれかを自然人が行っていれば、その発明は自然人の創作物に該当する、との意見が多い。

現状の創薬AI利用では、上記のステップ①および②においてAIが自律的に、単独でこれらのステップを実行するのではなく、自然人の助けを借りながら実行することが一般的であり、これらのステップには自然人が介在する。さらに、得られた結果に対して自然人が薬理的な有効性を試験する（上記のステップ③）ことも当然に行われる。すなわち、現状のAIにおいては、基本的に特許を受けることができる発明となり、発明該当性という点では権利化における大きな問題点はないものと思われる。

以下、医薬発明の創作にAIを活用したと考えられる特許出願について、具体的事例を紹介する。

(2) 事例 (特許第5633825号)

1) 発明の名称

細胞傷害性T細胞の誘導剤、およびそれを用いた医薬組成物およびワクチン

2) 研究対象クレーム

【請求項1】

配列番号5の9アミノ酸残基からなるアミノ酸配列で表され、細胞傷害性T細胞の標的となる細胞の表面のHLA-A24型クラスI分子に結合するペプチドを含むことを特徴とする細胞傷

害性T細胞の誘導剤。

3) 明細書の記載

【発明が解決しようとする課題】

【0006】

(以上略) C型肝炎ウイルスに依存した疾病の治療および予防のためには、使用できるアミノ酸配列の候補を増やすべく、さらに細胞傷害性T細胞の誘導能を有するペプチド配列を同定することが望まれている。

【0018】

また、これらアミノ酸配列は、能動学習実験法(特開平11-316754号公報)を用いて得られる仮説により予測された、HLA分子との結合性が、 $-\log K_d$ 値に換算して3以上であるアミノ酸配列の中から、HLA分子との結合実験により、実際にHLA結合性を示すことが確認され、かつ、細胞傷害性T細胞の誘導能が示されたものである。

【0055】

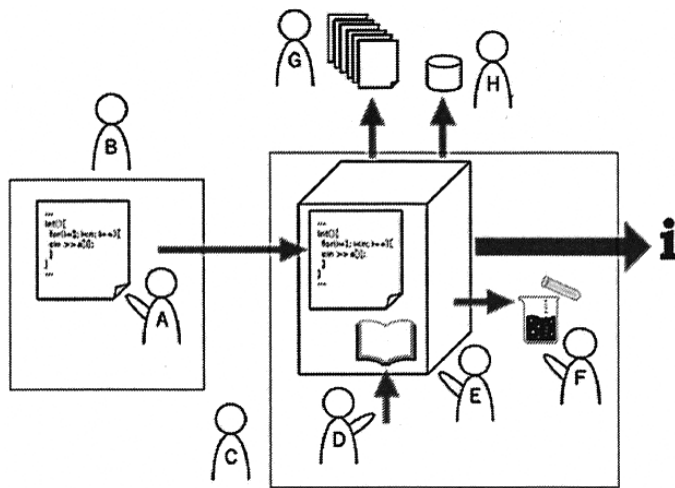
具体的に、本実施例における予測・実験・評価の手順は、WO2006/004182号公報に記載された能動学習実験計画に基づいて行い、全体として次のステップを繰り返してルールを構築した。(以下略)

4) 拒絶理由

特許法第29条1項柱書に係る拒絶理由はなされていない。

5) 考察

本願明細書中では、新規アミノ酸配列を同定するという課題に対して(上記4.1(1)のステップ①に相当)、能動学習実験法を用いて得られる仮説により予測されたHLA分子との結合性が一定以上であるアミノ酸配列の中から(同ステップ②に相当)、HLA分子との結合実験により、実際にHLA結合性を示すことが確認され、かつ、細胞傷害性T細胞の誘導能が示された(同ステップ③に相当)アミノ酸配列について記載がなされている。



- (A) 開発者：AIプラットフォームを開発したプログラマ
- (B) 所有者：AIプラットフォームを提供する者（開発者が所属する企業等）
- (C) 購入者：AIプラットフォームを購入し、事前学習したAIを所有する者
- (D) 教育者：AIプラットフォームに対して事前学習を提供する者
- (E) 利用者：AIを利用し発明を得ようとする者
- (F) 検証者：AIからの出力を検証する者
- (G) ビッグデータの所有者（管理者）
- (H) AIパラメータの所有者（管理者）

引用：齋藤，小林，平塚，「人工知能に係る発明の主体と特許法による保護」，特許ニュース，No.14556
 図2 AIに係る発明に関与する者

上述の判断基準に照らしてみると、本願の場合、少なくともステップ①、③のいずれも自然人により行われたと推察できる。また、ステップ②についても、新規なアミノ酸配列の候補を導き出した主体は「能動学習を経たコンピュータ」であると考えられるものの、明細書中の記載および出願時の技術常識を考慮すると、当該コンピュータの学習を行ったのは自然人であると考えられる。よって、これらの自然人が関与することにより、全体として特許法第29条1項柱書に係る拒絶理由は生じないものと考えられる。

一方、発明の創作に関わるすべての者が発明者適格性を有するかについては、注意が必要である。この点について、AIに係る発明の主体と発明者・特許権者について詳細に検討した論文が存在する⁸⁾。本論文中では、AIの道具としての利用には、AIに係る発明に対して創作意図と創作的寄与を与えることが要件とされていることから、具体的指示の入力を行った者（教育者、利用者）、および事前学習の提供と着想に対する実施可能性の検証を行った者（検証者）全員が共同発明者となることは妥当であるという見解を示している（教育者、利用者、検証者等の定義については図2参照）。本事例に当て

はめてみると、ステップ①、③を行う者には少なくとも利用者、検証者が想定され、ステップ②を行う者を教育者と考えることが可能であり、これらの者が発明者となりうると考えられる。しかしながら、実務的にはさらに各自然人の発明に対する寄与度の評価も必要であり、これは発明の種類、発明の創出に対する自然人の貢献などに応じて個別に認定されるべきものと考えられる。AIを用いない従来の医薬発明、特に新規化合物に係る物質の発明については、発明に関与した者の役割や寄与に応じて発明者適格性について判断された判例があるが⁹⁾、AIを用いたと考えられる本事例についても、本発明が新規アミノ酸配列に係る物質発明および物質発明に基づく医薬用途発明であることを考えると、「検証者」が発明者と認定されるためには、「その測定結果の分析・考察に基づき、新たな化合物の構造の選択や決定の方向性について示唆を与えるなど、化合物の創製に実質的に貢献したと認められることを要する」と思われる。AIを用いた発明では、「利用者」「教育者」の発明の寄与は認められるものの、このような関係者が「実質的に貢献」したとされるにはどのような活動を行えばよいのかについては、発明

の本質とAI技術の動向等により都度検討が必要になるものと思われる。これは、米国法においても同様である¹⁰⁾。このように、発明該当性については、現時点ではAIの存在如何に影響を受けないと思われるものの、AIの技術が発展する過程においては、自然人が発明に「実質的に貢献」できることが少なくなり、その発明への寄与が希薄になってくることで、発明者適格性に課題が生じることが予想された。

4. 2 産業上の利用可能性 (29条 1 項柱書)

(1) 問題提起

日本において、「人間を手術、治療または診断する方法の発明」は産業上の利用可能性の要件を満たさない発明であるとされている（特許・実用新案審査基準第Ⅲ部第1章3.1.1）。当該審査基準には、「人間を手術、治療または診断する方法は、通常、医師（医師の指示を受けた者を含む。以下同じ。）が人間に対して手術、治療または診断を実施する方法であって、いわゆる『医療行為』といわれているものである」ことが記載されており、医療行為の主体は医師（人間）であることが前提とされているが、例えば、医師ではなく、AIが人間を診断する方法の発明の場合に、産業上の利用可能性はどのように判断されるのであろうか。以下の(2)に参考となる事例を紹介する。

(2) 事例 (特表2013-527430)

1) 発明の名称

赤血球生成刺激剤（ESA）の効果を予測し投与量を決定するための方法および装置

2) 研究対象クレーム

【請求項1】

患者はより早期の第1の時点で理論的にまたは実際にある量の赤血球生成刺激剤（ESA）を投与され、その後の第2の時点での当該患者の体液および／またはその体外サンプルにおける

ヘモグロビンの濃度若しくは質量またはその近似値を予測若しくは評価する方法において、修正された当該ヘモグロビン質量または濃度値を得るために、測定されたヘモグロビン濃度値またはその近似値をそれぞれ当該患者の水分過剰に対して修正するステップと、当該修正された質量または濃度値からまたはそれに基づき上記第2の時点でのヘモグロビンの質量または濃度を予測若しくは評価するステップとからなる、ことを特徴とする方法。

3) 拒絶理由と出願人の対応

「請求項1-3に係る発明では、『評価するステップ』を構成することが特定されている。しかしながら、当該評価するステップは、医者等により判断する工程を含み得るものと解されるため、産業上利用することができる発明に該当しない。」との拒絶理由が通知された。また、請求項7-9では『決定する方法』、請求項13では『判定する方法』がクレームされていたが、これらの方法についても、請求項1と同様に、医師等による工程を含み得るものとして拒絶理由が通知された。

これらの拒絶理由に対し、出願人は、「コンピュータが実施する」との要件を追加し、医師等による行為を含まないことを明確にすることで拒絶理由を解消した。

4) 考察

本事例は、AIに限定されないコンピュータを用いた処理によって、ヘモグロビンの濃度等を予測または評価する方法に関するものであるが、AIを用いてこのような予測または評価を行う場合にも、本事例と同様に、医師による行為を含まないことを明確に規定する文言を請求項に記載すれば、産業上の利用可能性の要件を満たすと判断される可能性がある。

4. 3 進歩性 (29条 2 項)

(1) 問題提起

特許性の判断には、特許法第29条1項各号に該当する発明に基づいて当業者が容易に発明できたか否かの判断を要する。

論理づけに最も適した一の引用発明を選択し論理づけを試みる点に変更がないにせよ、AIの進歩は、「技術常識」や「当業者」の基準を再定義するかもしれない。AIを用いることにより革新的な発明の確率が上がる期待がある一方、同時に当業者にとって、情報へのアクセスがより容易となるとともに、情報の分析効率も飛躍的に向上することとなる。結果として、AIが普及することにより、「技術常識」や「当業者」といった進歩性の基準が大きく変わることも考えられる。

本委員会においては、下記のような仮想事例について考察を行った。

(2) 仮想事例

1) 設定

①医学関連文献（大量の学術文献や医薬関連特許等の情報）が入力（学習）されたAIが創薬の現場で日常的に使用され、AIを用いることにより、生体内因子と特定の化合物の結合性や相互作用を容易に把握できるようになった。

甲が、AIを用いて疾患Xの原因因子であるBキナーゼの阻害作用を有する化合物を予測したところ、化合物1が阻害作用を有することを強く示唆する回答が得られた。(ア)化合物1(化合物のみが公知であり、用途等の開示がない)および(イ)疾患XとBキナーゼとの関係は公知であるが、化合物1とBキナーゼの関係については甲の新規性調査の段階では公知でなかった。

②乙が、化合物1がBキナーゼに対する阻害作用を有することを実験の実験を伴う研究で見出し、化合物1を疾患Xの治療剤として特許出願を行った。請求項は「化合物1を含む、疾患X治療剤。」とした。(図3)

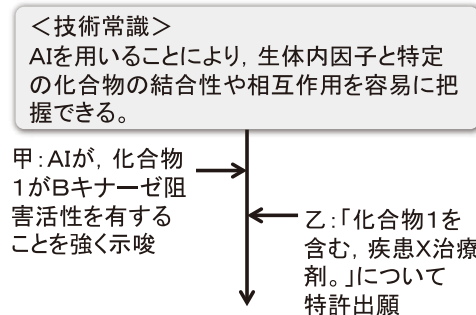


図3 時系列

③乙の出願段階における化合物1とBキナーゼの関係の公知状況については以下の2条件を設定した。

[条件1] 乙の出願時に化合物1とBキナーゼの関係は公知ではないものの、当業者が「AIで予測すれば」、化合物1がBキナーゼの阻害作用を有することを把握できる状況である場合

[条件2] 乙の出願前に、「化合物1がBキナーゼの阻害作用を有する」という結果がAI予測として公表され、公知であった場合

2) 考察

①条件1の場合

本発明は化合物1の医薬用途発明であり、進歩性判断は化合物1をBキナーゼ阻害剤に適用することが予測できるか否かに依存する。現行の審査基準では、進歩性はあくまで、一の引用発明から出発して本発明に容易に到達できたか否かで判断されるため、AIによる予測可能性は進歩性の判断に影響しない。従って、AIがその結果を予測できたとしても、公知文献等にBキナーゼ阻害作用を予測させる記載が全くない場合には論理づけが困難となり、進歩性が認められる可能性がある。

②条件2の場合

条件2の場合には、公知文献等に化合物1の医薬用途について開示があるものの、実際の実験結果については全く開示されていない。現在のAIによる予測は、まだ当業者が確度が高いと認めるレベルにまでは達していないため、いわ

ゆる実施例レベルでは記載がない状況と考えられる。これまでの特許審査の運用においては、医薬用途が一行記載のみで実施例レベルで記載されていない場合、たとえば、実際の実験結果を示すこと等により、選択発明を主張する余地があった。条件2の場合も、医薬用途が一行記載で記載されている場合と同様に、実際の実験結果を示すこと等により、選択発明を主張できる可能性がある。

しかしながら、AIの予測精度の向上と、それに対する当業者の技術常識形成は、進歩性の判断に影響を及ぼし得るとの考え方もある。今後、AIの予測精度は飛躍的に向上することが予想される。たとえば、公知文献にBキナーゼ阻害作用を予測させる記載が全くない場合であっても、「当業者であればAIで予測可能である」との技術常識が存在する場合、または、Bキナーゼの構造からその阻害剤構造をAIが容易に導き出すことができるとの技術常識が存在する場合、本発明は引用発明からの設計変更該当すると認定される恐れがある。ただ、現実的にそれが設計変更であるとしても、特許審査や権利化後の特許無効審判等においてAIが予測できたことを判断／証明するためには、出願当時の技術常識を備えたAIを確保する必要があり、現時点では難しいと考えられる。

4. 4 実施可能要件 (36条4項1号)

(1) 問題提起

審査基準に記載のとおり、特許制度は、新しい技術を開発し、それを公開した者に対し、一定期間、一定条件下に特許権という独占権を付与することにより発明の保護を図り、他方、第三者に対しては、この公開により発明の技術内容を知らせて、その発明を利用する機会を与えるものである。そして、発明のこのような保護および利用は、発明の技術的内容を公開するための技術文献および特許発明の技術的範囲を明

示する権利書としての使命を持つ明細書、特許請求の範囲および図面を介してなされることになる。そのため、明細書が技術的文献としての役割を果たすために規定された、実施可能要件(36条4項1号)等が設けられている。

特に、化学やバイオなどライフサイエンス分野においては、構成と効果の因果関係が不明であることが多く、実際に実験してみないと結果がわからないという技術的特性に基づき、実施可能要件が判断される傾向にある。

一方、AIが創作に関与した発明においては、実際に網羅的な実験を行うまでもなく、AIによる精度の高い予測結果から、発明が完成することがあるが、この場合の明細書の記載内容によっては、実施可能要件の問題が生じることが想定される。

そこで、我々は、以下の仮想事例を設定し、AIが創作に関与した発明に関する実施可能要件の問題点を検討した。

(2) 仮想事例

1) 設定

【請求項】化合物1を含む、疾患X治療剤。

【明細書】化合物1の合成の実施例と、化合物1の疾患X治療効果(具体的には、疾患Xとの関連が公知であるBキナーゼの阻害効果)のインシリコによるシミュレーション結果が記載(薬理評価実験は不実施のため、記載なし)されている。

出願人：疾患Xの治療に有用な化合物として、化合物1の考案(予測)と、合成を行った。疾患X治療効果の薬理評価実験は実施していない。
AI：疾患Xとの関連が公知であるBキナーゼの阻害効果を、シミュレーションのみで評価した。

2) 考察

上記の仮想事例における実施可能要件の判断

に際しては、審査ハンドブック 附属書B 第3章 1.1.1にある通り、「医薬用途を裏付ける実施例として、通常、薬理試験結果の記載が求められる」ことから、原則、実施可能要件を具備しないものと思われる。

しかしながら、今後AIが発展し、AIのシミュレーション結果に対する信頼性が当業者間で十分に高まった場合、実際の薬理評価実験結果を記載しなくても実施可能要件が満たされると判断される可能性は残されている。

また、AI技術の発展の過渡期において、AIのシミュレーション結果が信頼できるとの技術常識を表わす刊行物等を審査過程で示すことは、実施可能要件具備の主張の有効な手段の一つと考えられる。

ここで、特許第6219934号（薬物誘発毒性マーカーを同定するための照合による細胞に基づくアッセイ）の事例においては、薬物誘発心臓毒性を引き起こす薬物同定方法の発明について、明細書中には、AIにより、特定のバイオマーカーが薬物誘発心臓毒性の指標となりうることを示唆されているが、その審査過程において、発明にかかるポリペプチドが薬物誘発心臓毒性を引き起こすバイオマーカーとなり得るかについては実際に検討してみなければ、その関係を把握することが困難であるとして、実施可能要件違反が問われていた。しかしながら、その意見書において、明細書における細胞モデル、データおよびネットワークの妥当性を主張すると共に、AIによって予測したバイオマーカーの一部が実際の実験でバイオマーカーとして機能することを公知情報から示すことで、AIによる予測が実際の実験結果と同等の信頼性をもって、実施可能要件違反を克服して特許査定された。

「バイオマーカーの同定方法」のような方法特許の場合、原則として、方法の発明が明確に説明されており、使用できるように記載されて

いれば、実施可能要件を満たすため（特許・実用新案審査基準 第Ⅱ部 第1章 3.1.2）、特許第6219934号の審査においては実際の薬理試験結果を伴わないAIの予測によるデータを用いた説明によって実施可能要件具備が認められたが、化合物の医薬用途発明の場合には、依然として、審査ハンドブック 附属書B 第3章 1.1.1に記載されるとおり、実際の薬理試験結果の記載が求められると考えられる。

5. おわりに

医薬品開発および診断・医療におけるAIの技術動向調査の結果から、当該分野でのAIの開発には、IT企業と、製薬企業、医療機関またはアカデミアとが提携する形態が多く見られ、製薬企業等は単なるAIのユーザーとしてではなく、開発の段階から関与していることが明らかになった。

また、AIを活用したビジネスを行う企業の動向および特許出願傾向の調査結果から、現時点では診断AIを手掛ける企業の出願割合は創薬AIを手掛ける企業に比べて低いものの、出願されている診断AIの出願明細書においては、創薬AIのそれと比べて、AI自体に関する記載が充実していることが明らかになった。

さらに、AIにより創作された発明またはAIを解決手段として活用した発明に対する特許性判断の考え方について、審査事例および当小委員会での検討結果を交えて紹介したが、製薬、医療機器等のライフサイエンス分野においては現時点ではまだ事例や判断根拠が少なく、判断基準が不確定な部分もあると考えられる。これらの発明の特許性判断、ひいてはこれらの発明の知財保護のあり方については、今後、産業界と政府が協働して検討していくべき事項であろう。

注 記

- 1) 保健医療分野におけるAI活用推進懇談会

本文の複製、転載、改変、再配布を禁止します。

- <http://www.mhlw.go.jp/stf/shingi/other-kousei.html?tid=408914>
- 2) 日経新聞 (アスタミューゼ調べ)
<https://vdata.nikkei.com/newsgraphics/ai-patent/>
 - 3) 日経デジタルヘルス 2016年2月24日
<http://tech.nikkeibp.co.jp/dm/atcl/feature/15/012800017/022100003/?ST=health>
 - 4) シオノギ製薬プレスリリース 2017年12月12日
 - 5) クランチベースニュース 2017年8月9日
<https://news.crunchbase.com/news/ai-startups-take-money-run-big-tech-comes-acquiring/>
 - 6) みずほ産業調査Vol.57
 - 7) 一般財団法人 知的財産研究教育財団 知的財産研究所, 平成28年度 特許庁産業財産権制度問題調査研究報告書, AIを活用した創作や3Dプリンティング用データの産業財産権法上の保護の在り方に関する調査研究報告書 (2017)
 - 8) 齋藤, 小林, 平塚, 特許ニュース, No.14556 (2017)
 - 9) 知財高裁 平成19年3月15日判決 平成18年(ネ)第10074号 (原審: 東京地裁 平成17年(ワ)第14399号)
 - 10) クリス・ミズモト, パテント, Vol.69, No.15, pp.58-60 (2016)
- (URL参照日は全て2018年3月29日)

(原稿受領日 2018年6月4日)

