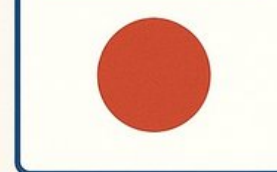
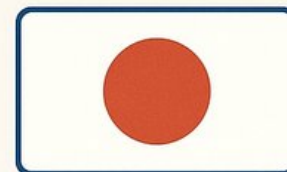
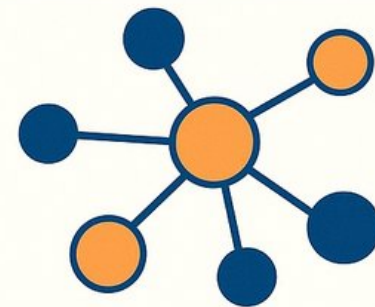
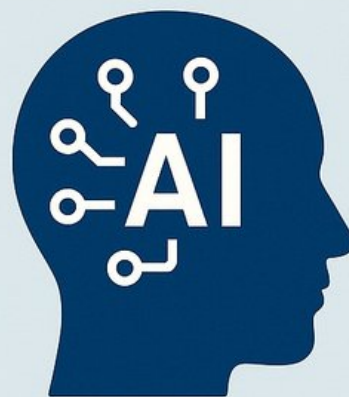


AI-DRIVEN DRUG INVENTION PATENT STRATEGY

AI創薬特許戦略の深掘り

経営層向け特別レポート
グローバル特許戦略×知的財産ガバナンス

AI-DRIVEN DRUG INVENTION PATENT STRATEGY



目次

AI創薬特許戦略の主要構成

1	エグゼクティブサマリー	3	7	社内プロセスと役割定義	9
2	AI創薬を巡る特許戦略の現状課題	4	8	ハイブリッドIP保護戦略（特許＋営業秘密）	10
3	各国特許庁アプローチ比較	5	9	成功企業事例	11
4	AIモデル別の課題と戦略	6	10	将来展望・課題まとめ	12
5	先行技術・学習データの特許リスク	7	11	経営層への推奨アクションプラン	12
6	企業の知財フレームワーク設計	8	12	Q&A	12

エグゼクティブサマリー

AI創薬特許戦略のポイント

3/12

現状の中核的課題

AIの確率論的で「ブラックボックス」的な性質と、人間中心で厳格な既存の特許法理との間に存在する根本的な乖離。この課題を克服することが、AI創薬時代における競争優位性の源泉となる。

グローバル対応の複雑性

米国特許商標庁（USPTO）、欧州特許庁（EPO）、日本国特許庁（JPO）は、この新しい技術パラダイムに対してそれぞれ異なるアプローチを採用。グローバルな事業展開には、「三言語」対応の統合的特許戦略が不可欠。

戦略的必須事項の三つの柱

- ✓ **人間の貢献の証明**：プロンプト設計から評価・改良までの全プロセスを徹底的に文書化し、発明における人間の実質的貢献を立証
- ✓ **ハイブリッドIP保護**：AI生成の最終生成物（化合物・治療法）を特許保護、生成プロセス（AIモデル・学習データ）を営業秘密として保護する二重戦略
- ✓ **積極的な社内IPポリシー**：明確な役割定義、契約管理、発明開示プロセスを含む組織全体での知財戦略の実行体制の構築

成功の鍵：AI創薬時代における成功は、AIの計算能力そのものよりも、その発明を知的財産として適切に保護する法的・組織的な枠組みによって決定される

AI創薬を巡る特許戦略の現状課題

4/12

AI時代の特許法理との乖離がもたらす根本的な障壁

「ブラックボックス」問題

AIの確率論的出力プロセスと再現困難性が、特許法が要求する「記載要件」と「実施可能要件」の充足を阻害

出願時に必要な詳細情報：プロンプト履歴、モデルバージョン、学習データ特性、乱数シード値など

実務上の障壁

同一入力でも異なる出力が生成される可能性があり、審査官が再現性テストを行う際に問題が発生

発明者性の立証責任

AIは法的に発明者として認められず、人間の「多大な貢献」の立証が求められる厳格な審査基準

USPTO「2024発明者ガイダンス」：プロンプト設計、出力評価、改良の具体的証拠が必須

DABUS事件（2024年）

AI自律発明を認めない判断が知財高裁で確定。人間の発明プロセスの網羅的な文書化が重要に

自明性の再定義

AIの予測力向上により、従来の「当業者にとって自明でない」という基準の適用が困難に

対抗戦略：「予測困難な効果」や「予期せぬ用途」を強調した特許請求

In re Cyclobenzaprine事件

予測できない相乗効果が非自明性の根拠として認められた判例を戦略的に活用

各国特許庁アプローチの比較

5/12

グローバル特許戦略に必要な「三言語」対応

USPTO（米国特許商標庁）

- ✓ 「人間による多大な貢献」の証明が必須
- ✓ Alice/Mayoテスト - AIは単なる手段
- ✓ 2024年発明者資格ガイダンス - プロンプト設計や結果評価の証拠化重視

EPO（欧州特許庁）

- ✓ 「技術的效果」が絶対的要件
- ✓ COMVIKアプローチ - 技術的課題解決が焦点
- ✓ アルゴリズムや学習データの詳細開示義務

JPO（日本国特許庁）

- ✓ 「ハードウェアとソフトウェアの協働」重視
- ✓ 「使用方法」形式の記載が有効
- ✓ 実証データ重視 - AI予測だけでは不十分

特許審査アプローチ比較図



「三言語」対応戦略の重要性

グローバルな事業展開には、各法域の要件を同時に満たす特許出願が必要：

USPTO対応： 人間の発明への貢献を明確に証明

EPO対応： 技術的課題解決と効果の具体的記載

JPO対応： ハードウェア連携と具体的実装方法

※これら三極の要件を統合した出願書類作成が、AI創薬時代の権利保護の鍵

AIモデル別の留意点と戦略

6/12

モデルの特性に合わせた特許出願アプローチ

生成AI（GAI）

新規分子設計などの創造的アウトプットを生成するモデル

- 💡 **非自明性の確保**：予測困難な特性や効果を強調し、AIによる単なる予測と区別する
- ⚙️ **用途発明**：新規化合物の予期せぬ治療効果に焦点を当てた請求項構成

参考：2024年キナーゼ阻害剤特許拒絶事例

グラフニューラルネットワーク

分子構造や生体ネットワーク解析向けのGNNモデル

- ⚠️ **予測そのものはNG**：単なる予測は抽象的アイデア/自然法則扱いのリスクが高い
- ✅ **応用発明に重点**：予測を基にした治療方法や投与法など実用的応用に焦点を移す

参考：Ex parte Michalek事件（医療AI特許）

トランスフォーマーモデル

配列予測や新規用途発見に特化したモデル

- 📄 **"使用方法"請求**：AIの予測結果を応用した使用方法として請求項を構成
- 📈 **予期せぬ用途**：既知物質の新規用途発見なら、その効果の非自明性を根拠に

参考：In re Gleave事件（核酸配列発明）

モデル共通の特許戦略ポイント

🛡️ 人間の貢献明示

モデル選択、パラメータ調整、出力評価における人的判断を詳細に記録

🔄 予測と実験の橋渡し

AIの予測に加えて実証データを組み合わせた"ハイブリッド検証"を明細書に

先行技術・学習データの特許リスク

7/12

AI学習データと公衆アクセス可能性の新たな課題

公衆アクセス可能性の拡大

AIの学習に利用された公衆にアクセス可能なデータセットは「先行技術」として認定される可能性が高まっています。これは、AIが学習したデータに基づく発明の新規性や非自明性に影響し、特許無効のリスク要因となります。

データ非対称性問題

USPTOなどの特許審査官は特定のAI学習データセットにアクセスできるのに対し、出願人自身はそれらにアクセスできない「非対称性」の問題が発生。この情報格差により、審査官は出願人が知り得ない先行技術に基づいて拒絶理由を示す可能性があります。

高リスク 2024年の最新判例では、公開AIモデルが生成した化合物の特許出願が、そのモデルの学習データを「先行技術」として拒絶される事例が増加しています。

戦略的対応の要点

-  **学習データの管理強化**：AIモデルに使用する学習データの出所、公開状況、アクセス制限を厳格に管理し記録。特に独自データセットやプロプライエタリデータの価値を最大化
-  **先行技術調査の徹底**：公開APIやモデル、データセットの網羅的な調査と、自社AIモデルが学習したデータとの重複性分析を実施
-  **予期せぬ効果の立証**：AIが生成した候補分子や治療法が、先行技術から予測できない効果を持つことを実験データで積極的に立証することで非自明性を確保

注意点 グローバルでの規制の違いに留意：各国・地域によってAIデータの取扱いルールが異なるため、主要市場（米・欧・日）ごとの対応戦略が必要

企業の知財フレームワーク設計

8/12

効果的なAI創薬IP戦略の組織的実装

発明プロセスの証拠化

AIを活用した発明プロセス全体を文書化し、人間による貢献を明確に証明するための体系的記録システムの構築が不可欠。プロンプト履歴、パラメータ設定、評価基準、改良過程の全てをログとして保存。特に米国特許出願では「Pannu 3要素」に基づく人間の知的貢献を証明する証拠として重要。

役割分担と責任所在の明確化

AI創薬チームにおける各メンバー（研究者、データサイエンティスト、IP専門家）の役割と責任を明確に定義し、契約書および社内ポリシーに明記。特に「発明者」認定基準と知的財産権の帰属ルールを事前に規定することで、後の紛争リスクを回避。

発明開示フローの最適化

- 1 **プロンプト設計・AI実験の自動記録**：AI実験のすべての入力（プロンプト）、パラメータ設定、出力結果を自動記録するシステムの導入
- 2 **人間の評価・分析記録**：AI出力の評価、選択、改良における人間の判断プロセスと根拠の文書化
- 3 **発明提案書の作成**：AI実験と人間の貢献を統合した発明提案書の標準化（発明の技術的效果と具体的実装を強調）
- 4 **知財委員会によるレビュー**：技術部門とIP専門家で構成される知財委員会による特許性評価と保護戦略の決定
- 5 **「三言語」出願戦略の適用**：USPTO・EPO・JPOの各要件を満たす多層的な特許出願書類の準備と提出

注目ポイント：2024年の知財高裁判決（DABUS事件）以降、日本でもAI発明の発明者認定がより厳格化。人間の創造的貢献を示す証拠の保全体制が一層重要になっています。

社内プロセスと役割定義のポイント

AI創薬における発明者性と人的関与の証明

9/12

1. プロンプト設計と管理

- プロンプトバージョン管理システムを導入（GitLab/GitHub形式）
- 設計意図と選択理由を明示的に文書化（"なぜ"の記録）
- AI発明主体性回避プロンプト：「私が思いついた目標分子～を元に」など人間起点の表現

2. 人的評価と改良プロセス

- AI出力の品質・妥当性を評価する人間の関与ポイントを明確化
- 選択・棄却基準の科学的根拠を記録（USPTOの「人間による多大な貢献」立証）
- 改良指示のログ保存と反復プロセスのドキュメント化（DABUS事件の教訓）

3. 技術的実装の詳細記録

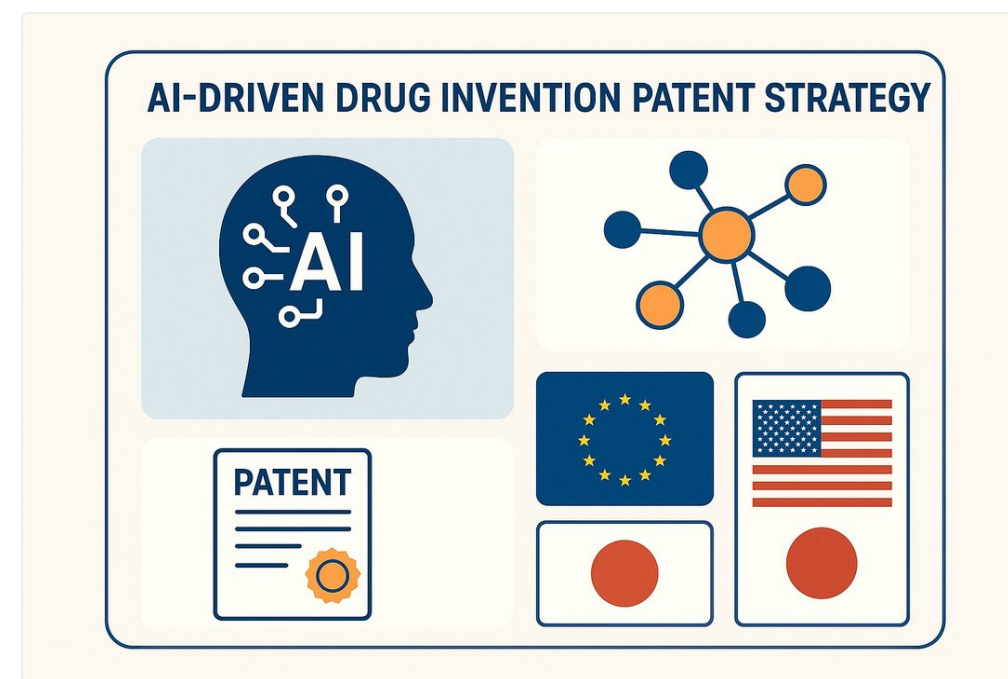
- 使用AIモデルのバージョン、パラメータ設定の詳細保存（再現性のため）
- 乱数シード値の記録（EPO要件：技術的再現性の担保）
- 学習データ由来の開示可能内容とNDAカバー範囲の明確化

重要ポイント：

DABUS事件（Thaler v. Vidal）や令和6年知財高裁判決を踏まえ、「人間による貢献」の立証負担は年々増加。Pannu3要素の明示が2024年USPTO発明者ガイダンスで必須に。

発明プロセスの社内ガバナンス

-  **研究者/発明者**：プロンプト設計、出力評価、改良指示、最終判断
-  **データサイエンティスト**：モデル選定、パラメータ調整、技術実装
-  **知財部門**：発明開示フォーム設計、人的関与証拠保全体制構築



実務導入例：

アストラゼネカ社では、AI創薬プロジェクトごとに「発明ログブック」を導入。プロンプト履歴、判断理由、改良指示を自動記録し、GPT-4でメタデータタグ付け。特許出願時に人間の貢献を容易に立証できる体制を構築。

ハイブリッドIP保護戦略

AIアウトプットと生成プロセスの最適保護

10/12

ハイブリッド戦略の概念

AI創薬プロセスにおいて、**最終生成物（化合物・治療法）は特許で保護し、その生成プロセス（AIモデルアーキテクチャ・学習データ）は営業秘密として秘匿する**という二重保護アプローチ。

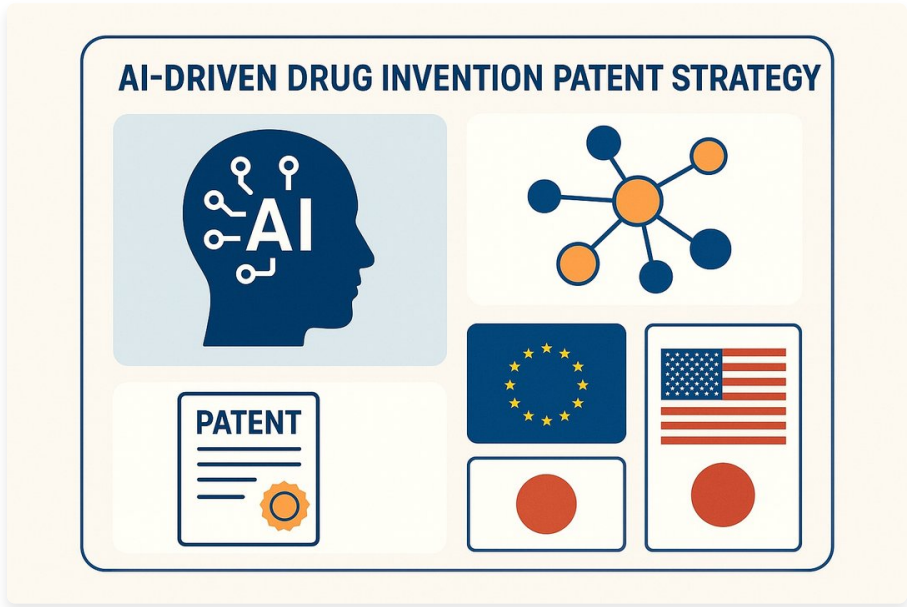
戦略的バランス

特許は20年の独占権を提供するが公開が必要。営業秘密は期限なく保護できるが厳格な秘密管理が必須。AI創薬では両者の長所を組み合わせ、市場での競争力を最大化。

保護形態	保護対象	メリット
特許保護	分子構造、治療法	独占権、第三者排除
営業秘密	AIモデル、学習データ	期限なし、開示不要

実践的なハイブリッド保護の実装

- 特許明細書での適切な開示範囲の設定**：AI創出の化合物構造・効果は詳細に開示するが、モデルの内部アーキテクチャやパラメータ、学習データの詳細は最小限に留める
- 秘密管理体制の構築**：AIモデル・学習データへのアクセス制御、社内外の情報共有ポリシー、NDA締結など、営業秘密としての法的保護要件を満たす管理体制を整備
- 権利分割戦略**：AIプラットフォーム自体と、その出力（化合物等）を分離して出願し、核心技術を秘匿しつつ応用成果を権利化



事例：アストラゼネカは、AI創出の標的タンパク質特異的阻害剤を特許出願する一方、その同定に使用したAIモデルのアーキテクチャとパラメータを営業秘密として管理し、競争優位を確保

成功企業事例・実践例

AI創薬における知財戦略の実装

11/12

アストラゼネカ

AI創薬プラットフォームの特許保護と併せて、AIが発見した分子構造を治療用途特許で保護するハイブリッド戦略を実施。社内IP管理システムでプロンプト履歴と人間の貢献を自動記録し、発明者性の立証を強化。

エクセンシア (Exscientia)

AIシステムと人間の科学者の協働を明確化した「ヒューマン・イン・ザ・ループ」型の発明プロセスを文書化。各国特許庁の要件を満たす三極対応の特許出願戦略を展開し、グローバルな権利保護に成功。

インシリコ・メディシン

独自の学習データセットを営業秘密として保護しつつ、AI予測モデルの「使用方法」として特許出願。発明プロセスにおける人間の実質的な意思決定ポイントを明確に記録・管理する社内体制を構築。

成功要因と共通点

- ✓ **明確な役割定義**：データサイエンティスト、研究者、特許弁理士の連携体制と責任分担を明文化し、AI発明における人的貢献を可視化
- ✓ **プロセス証拠管理**：プロンプト設計から結果評価、改良までの全工程を追跡できるシステムを導入し、発明者性の立証に活用
- ✓ **戦略的開示**：特許出願書類ではAIの技術的効果を強調しつつ、具体的なモデルパラメータや学習データの詳細は営業秘密として管理

実践的アプローチ

- 知財部門とAIチームの定例会議でIP保護対象の優先順位付け
- 各国特許法に精通した外部専門家との継続的な連携体制
- 発明開示フォームにAI関与度と人間の判断ポイントを明記
- 予測困難な効果や新規用途を重視した特許請求戦略

将来展望と推奨アクションプラン

AI創薬時代の知財戦略ロードマップ

12/12

将来展望：規制環境の進化

説明可能AI（XAI）の台頭：ブラックボックス問題解消のための説明可能AIへの技術的・法的シフトが加速

sui generis保護の議論：AIに特化した新たな知的財産権カテゴリーの創設が国際的に検討される可能性

国際調和への動き：三極特許庁（USPTO・EPO・JPO）間の基準調和の試みが増加、知財推進計画2025にも明記

産業構造の変化

AI創薬の普及により研究開発時間が1/10に短縮、特許戦略スピードも重要に

AIプロバイダーと製薬企業の境界が曖昧化、新たな協業・権利分配モデルの構築が必須

2025年以降、伝統的な化学構造中心のパラメータ特許から、AI生成・予測に基づく「用途発明」へのシフトが加速

経営層への推奨アクションプラン

アジリティの強化（即時）

規制・判例の進化に迅速に対応できる柔軟な知財プロセス構築。四半期ごとの知財戦略レビュー制度の導入と専門チームの編成

「三言語」対応体制の整備（3ヶ月以内）

USPTO・EPO・JPOの三極要件を同時充足する特許ドキュメント作成体制の確立。国際法務・特許事務所との戦略的連携体制の構築

発明プロセスの自動記録システム導入（6ヶ月以内）

プロンプト設計から人間の評価・改良までの全工程を自動追跡・記録するシステムの導入。発明者性証明の基盤整備

ハイブリッドIP体制の確立（12ヶ月以内）

AI生成物（特許）とAIプロセス（営業秘密）を統合的に管理する組織体制の構築。法務・R&D・データサイエンスの横断的チーム編成

最重要メッセージ

AI創薬の成否はAIの技術力そのものよりも、法的枠組みに適応し、特許と営業秘密を戦略的に組み合わせる組織の能力にかかっている。「技術×法務」の融合人材の育成が競争優位の鍵となる。