

AI 支援発明における発明者地位に関する事例 ～機械分野の事例と、化学分野の事例～

2024年4月10日

河野特許事務所
所長弁理士 河野英仁

1. 概要

米国特許商標庁(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¹。

発明者ガイダンスでは、判例により確立した Panuu ファクターにより発明者地位を判断すべきとされ、また審査官の判断を容易にすべく具体的な 5 つの指導原則を列挙している。

本稿では発明者ガイダンスと共に公表された機械分野及び化学分野の発明者地位の判断事例を紹介する。

2. 機械分野の事例～リモートコントロールカー用のトランスアクスル～

(1)背景

XYZ Toy Company 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 Toy Company 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。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がかか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。プロンプトには、「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」と記載されている。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、

¹ USPTO 官報 : <https://www.federalregister.gov/documents/2024/02/13/2024-02623/inventorship-guidance-for-ai-assisted-inventions>

解説は拙稿 <https://www.knpt.com/contents/cafc/2024.03.08.pdf> 参照

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であることに同意した。

(2)シナリオ 1

追加のシナリオ 1 の事実

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。

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。

分析

特許出願で発明者として指名されるには、自然人が発明に多大な貢献をしなければならない。Pannu ファクターでは、次の場合に、その人は発明に大きく貢献したとみなされる。

- (1)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。
- (2)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。
- (3)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。

指導原則 2

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。

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システムに問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、問題を認識していることを示している。ただし、問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問題を再表明したものすぎない。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問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た。そして、そのデザインがRCカーに適しているべきであることに同意した。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、問題を認識し、AIシステムにその問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。ルースとモーガンは発明創作プロセスに他に何の貢献もしていないため、どちらも発明の着想に重大な貢献をしていない。裁判所は、**Pannu** ファクターのいずれかを満たさない場合、その人物は発明者として指名されることができないと認定したため、ルースとモーガンはクレーム1の主題の適切な発明者ではない。

(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。

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、参照によりクレーム 1 のすべての限定が組み込まれている。したがって、クレーム 2 の分析では、クレーム 1 と 2 の両方に記載されているすべての限定を評価する必要がある。シナリオ 1 で説明したのと同じ理由で、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ルとモーガンの貢献は顕著ではない。

指導原則 3

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。

第 1 の **Pannu** ファクターに関しては、モーガンは **Puerto5** によって提供された回路図を使用してトランスアクスルを構築し、ケーシングの構築材料を選択することで発明に貢献した。トランスアクスルの構築に関しては、人間が他人によって考案された発明の実施化に多大な貢献をしたというだけでは、発明者としての資格を構成するのに十分ではない。

モーガンは、**Puerto5** が作成した回路図に従って変更を加えずにトランスアクスルを単純に構築しただけである。したがって、モーガンのトランスアクスルの構造は、本発明の着想に何ら貢献しなかった。モーガンが発明を実施化しただけでは十分ではない。

クレーム 2 の発明者地位を確立しても、上記のシナリオ 1 で対処された欠陥は引き続き適用される。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、モーガンは構築材料を選択する必要がある。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、およ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。

裁判所は、Panuu ファクターのいずれかを満たさない場合、その人物は発明者として指名されることができないと認定した。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

シナリオ 3 の追加事実

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。

ルースとモーガンは、請求項 3 に係る発明の正当な発明者である。

分析

指導原則 1

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。

第 1 の Panuu 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 Panuu 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 Panuu 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

追加事実

シナリオ 3 のモデルが完成した後、モーガンは Puerto5 に、新しく作成した設計の詳細

細と、Puerto5 に製造上の提案を提供するという一般的な要求をプロンプトした。Puerto5 は、コンピュータ数値制御（CNC）ルーティングマシンを使用してアルミニウムからケーシングをフライス加工できるという提案を出力した。モーガンは、CNC ルーティングマシンが従来の製造ツールであり、Puerto5 の提案に従ってトランスアクスルケーシングを容易に構築できることを認識している。

クレーム 4 は以下の通りである。

4.前記ケーシングはアルミニウム製であることを特徴とするクレーム 3 に記載のトランスアクスル。

モーガンとルースは、クレーム 4 に係る発明の正当な発明者である。

分析：

指導原則 1

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。

第 1 の Panuu ファクターに関して、シナリオ 3 で詳しく説明したように、ルース及びモーガンは発明の構想に多大な貢献をした。彼らは、Puerto5 が出力した代替デザインに変更を加え、完全に新しいデザインに到達した。AI システムがアルミニウムを使用するという提案を行っても、発明者地位としての判断は変わらない

第 2 の Panuu ファクターに関しては、クレーム 4 の全範囲に照らして判断すると、ルースとモーガンの貢献は大きい。クレーム 4 はクレーム 3 に従属しているため、参照によりクレーム 3 のすべての限定が組み込まれている。したがって、クレームの分析は、クレーム 3 と 4 の両方に記載されているすべての限定を評価する必要がある。

シナリオ 3 で説明されているように、ルースとモーガンは新しいデザインを作成することで、クレーム 3 の要素の多くに貢献した。クレーム 4 は、ケーシングがアルミニウム製であるという追加の限定を規定している。Puerto5 によって示唆されているこの追加の限定にもかかわらず、クレームの全範囲を考慮すると、ルースとモーガンとの貢献は重要ではないとはいえない。彼らの貢献は依然としてクレーム発明に不可欠である。

追加の機能は従来のものであり、日常的な実験で達成可能である。この限定は、ルー

スが提供した他のクレーム限定を覆い隠すほど重大なものではない。
ケーシング材料としてのアルミニウムの追加元素は、発明に対するルースとモーガンの
貢献の重要性を否定するものではない。

最後に、第3の Panuu ファクターに関しては、シナリオ3で説明したように、本発
明のプロセスに対するルースとモーガンの貢献は、現在の最先端技術やよく知られた概
念を説明した結果ではない。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4の主題の正当な発明者である。

(6)シナリオ5

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を設計およ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。

マーベリックはクレーム1~4の発明者ではない。

分析

指導指針5

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、その人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システム的设计、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いたり、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、トランスアクスの作成に使用された **Puerto5** を作成およ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の着想に重要な貢献はしていない。少なくとも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。裁判所は、**Panuu** ファクターのいずれかを満たさない場合、その人物は発明者として指名されることができないと認定したため、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。

3. 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

研究計画

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および乳がんは主にアンドロゲン受容体遺伝子およ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、骨の合併症などの、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 専門家ラグーに相談し、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。マリサ教授はラグーに、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。

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 (つまり、薬物化合物とその標的の間の結合の強さ) を予測できる **ready to use** なシステムである。DTIP は薬物と標的 **drug-target** 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。

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 のメンテナンスを監督し、システムのパフォーマンスの期待を満たすために定期的なチューニングと更新を実行する。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) コードおよ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 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。

(2)シナリオ1

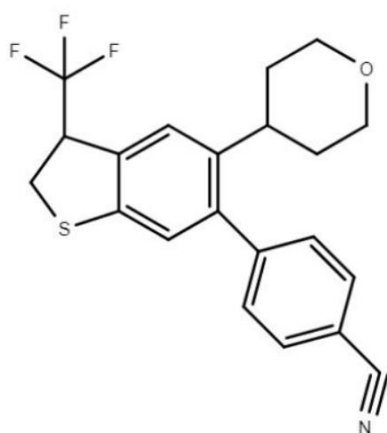
ウェットラボ実験を使用した薬剤の最適化

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、変異および非変異 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、それが変異および非変異 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。

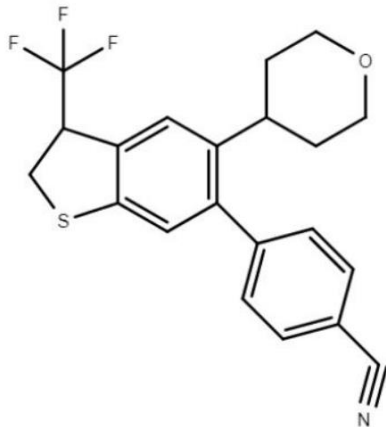
新規化合物 CID_1-mod の構造は次のとおりである。



UCR は、薬剤化合物 CID_1 から CID_6 を識別するための 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. 前立腺癌を治療するためのリード薬剤化合物を特定およ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ー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。



分析：

クレーム 1：マリサとナズはクレーム 1 の共同発明者である。

特許出願では、発明に大きく貢献した（つまり、Pannu ファクターを満たした）自然人を発明者として指名する必要がある。

第 1 の Panuu 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、および修飾 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 への構造修飾を決定し、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

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の使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、構想を完成させた。

第 2 の Panuu 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。上述したように、その後、彼らは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。彼らの貢献は、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 Panuu 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、周知の概念およ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および開発するための新しい方法の作成に大きく貢献した。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 Panuu 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 Panuu 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クリプトを実行しただけからである。

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、前立腺癌を治療するための

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。ラグーの唯一の貢献は、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。ラグーの貢献は、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、ラグーの貢献は、第 2Panuu 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。

ローレンは通常、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 Panuu 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般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。ラグーとローレンは Panuu ファクターの少なくとも 1 つを満たしていないため、クレーム 1 の発明者ではない。

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。

指導指針 3

クレーム 1 で詳細に説明したように、第 1 の Panuu 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、請求項に係る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、ターゲット通りの副作用が制限されら。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、構想を完成させた。

第 2 の Panuu 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。彼らは、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、周知の概念および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、ラゲーとローレンはクレーム 2 の適切な発明者ではない。

(3)シナリオ 2

Molecule Optimizer を使用した薬剤の最適化

上記の「背景」セクションをシナリオ 2 の設定として使用する。シナリオ 2 の事実はシナリオ 1 の事実に追加されるものではない。

DTIP での過去の経験に基づいて、ラゲーとマリサは一般に入力された標的との結合親和性が良好な薬物化合物のほとんどが、吸収、分布、代謝、排泄および毒性 (ADMET) に関連する望ましくない特性を持っていたため、前臨床試験および臨床試験中に失敗すると判断した。したがって、彼らは、変異 AR に対する十分な結合親和性と、望ましい ADMET 関連特性を有する化合物の同定と合成に着手した。

ラゲーは、新しい生成ニューラルネットワークベースの AI システムである **Molecule Optimizer (MO)** を開発した。このシステムは、薬剤化合物の **SMILES** 表現を入力と

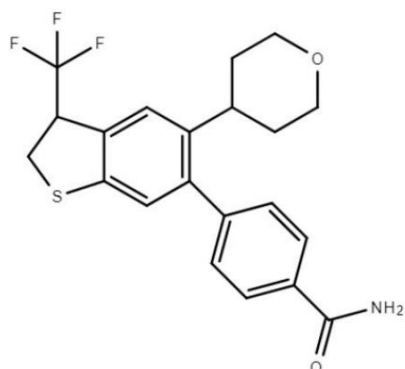
して受け入れ、アンドロゲン受容体標的療法用に最適化された薬剤化合物（未合成）を SMILES 形式で生成する。マリサは、十分な結合親和性を持ち、前臨床試験および臨床試験で成功する候補薬剤化合物に期待される 5 つの ADMET 関連特性（望ましい特性）とその最適な数値範囲を特定した。彼女は、これらの望ましい特性の最適範囲に基づいてスカラー目的関数を定義した。次にラグーは、分子の多次元ベクトル表現を考慮して、その分子の目的関数の値を予測するニューラルネットワーク回帰モデルをトレーニングした。

ラグーは 3 段階で動作する MO を開発した。第 1 段階では、入力された薬物化合物の SMILES 表現を多次元ベクトル表現に変換する。第 2 段階では、ベクトル表現の非凸最適化を実行して、ニューラル ネットワーク回帰モデルで近似したスカラー目的関数を最大化する。第 3 段階では、薬物化合物のこの最適化されたベクトル表現を SMILES 形式に変換する。

ラグーは、食品医薬品局によって審査および承認されたがん関連薬を含むデータセットの実例に基づいて MO をトレーニングした。これらのデータセットには、合成された薬物の ADMET 関連特性に対応するアノテーションが、薬物の合成/最適化に使用される出発化合物とともに、すぐに利用可能である。ラグーは、薬物化合物の SMILES 入力を受け入れ、薬物化合物のベクトル表現から望ましい特性値を予測するように MO をトレーニングした。マリサは、これらの出力に基づいて薬物化合物のサブセットを合成し、これらの薬物化合物の特性を評価してテストすることによって、これらの化合物のサブセットの出力を検証した。ラグーはこれらの観察に基づいてモデルをファインチューニングした。

トレーニングとファインチューニングが完了すると、ラグーは、DTIP を使用して特定された（DTIP 予測に基づく）最も高い結合親和性スコアを持つ 6 つの薬物化合物（CID_1 から CID_6 まで）の SMILES 形式を MO に入力し、構造的に変更されたバージョンを出力した。薬物化合物はそれぞれ CID_1 から CID_6、MID_1 から MID_6 である。マリサは、研究室で MID_1 から MID_6 までを合成して特性評価し、MO によって出力された MID_1 が前立腺がんの治療に最も有効な治療薬化合物候補であると判断した。CID_1 の構造的に変更されたバージョンを表す MO の出力は MID_1 であった。

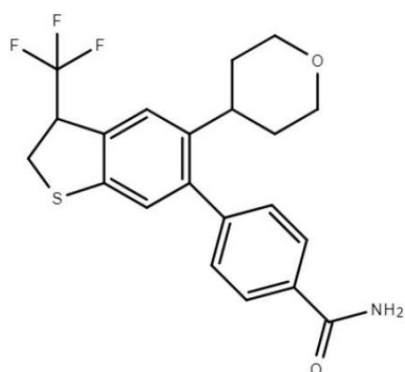
新規化合物 MID_1 の構造は以下に示すとおりである。



UCR は、MO が提出したこの新規薬剤化合物の特許を取得するために、次のクレームを伴う特許出願を申請した。

クレーム 3

以下の構造式を有する化合物。



およびその任意の薬学的に許容される塩。

ラグーとマリサはクレーム 3 の発明者である。

分析

指導原則 4

第 1 の Pannu ファクターの下で、ラグーとマリサは、DTIP によって出力された薬物化合物を直接使用して薬物を合成する場合の問題点を特定し、変異 AR に対する選択的結合親和性と望ましい ADMET の関連するプロパティの両方を備えた薬物化合物を合成するための特別な解決策を見つけることに着手した。ラグーとマリサは協力して MO を訓練し、Marisa によって合成され、前立腺がんの治療に使用できる可能性のある、入力された薬剤化合物の合成サンプルを生成した。たとえば、ラグーは、MO に入力された薬物化合物の構造を最適化するために 3 段階にわたって動作する MO を開発

した。また、MO をトレーニングするための特定のデータセットを特定し、マリサと協力して MO をファインチューニングした。Marisa は 5 つの ADMET 関連の特性を特定し、これらの特性に基づいてスカラー目的関数を開発した。

彼女はまた、トレーニング中に MO をファインチューニングするのに役立ち、MID_1 が癌治療の良い候補であると判断するために、MO の出力に基づいて薬剤化合物を合成した。彼らの多大な貢献により、MO が誕生した。次に、MO は、変異 AR との選択的結合親和性と望ましい ADMET 関連特性を有する新規薬剤化合物 MID_1 を生成した。ラグーとマリサは、特定の問題（つまり、既存の化合物の望ましくない特性）を考慮して、特定の問題を持たない新規の特定の薬剤化合物を生成する MO を開発した。したがって、MO は、主張されている MID_1 の開発にとって不可欠な構成要素である。したがって、ラグーとマリサは、クレーム 3 に記載の化合物の構想に大きく貢献した。

マリサは、MO が出力した薬剤化合物 CID_1 を合成したものである MID_1 が前立腺がんの治療薬化合物として利用できることを認識した。したがって、マリサはクレーム 3 に記載の発明を同時に認識し評価し、構想を完成させた。

第 2 の Pannu ファクター下で、マリサは、合成医薬品化合物がスカラー目的関数を最大化するように、望ましい特性の最適範囲に基づいてスカラー目的関数を開発した。ラグーは入力された薬物化合物を複数の段階にわたって合成する MO を開発し、マリサと一緒に MO をトレーニングし、ファインチューニングした。MO の設計、開発、トレーニングに対する彼らの貢献により、クレームされている化合物である MID_1 が作成された。MO の開発に対する彼らの貢献がなければ、MID_1 は生成され得なかった。

第 3 の Pannu ファクターを考慮すると、ラグーとマリサの本発明への貢献は、周知の概念および/または現在の技術水準の単なる説明以上のものである。その代わりに、ラグーとマリサは、前立腺がんの治療に使用できる新規薬剤化合物 MID_1 の開発に大きく貢献した。

ラグーとマリサは本発明に多大な貢献をしており、クレーム 3 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、ローレンはクレーム 3 の適切な発明者ではない。

以上