量子コンピューティング ユースケース集

タンパク質のアロステリック制御予測による創薬ターゲットの拡大



Revorf·東芝デジタルソリューションズ

国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）

Revorf・東芝デジタルソリューションズ：タンパク質のアロステリック制御予測による創薬ターゲットの拡大 【2022/06】 1／2

検証

産業領域	創薬・医療
プロセス	研究開発
手法	組み合わせ最適化
技術分類	イジング*

取組の背景

- 創薬プロセスにおいて、**創薬ターゲット*1の枯渇が課題**になっている
- これに対して、アロステリック制御*2に着目した創薬手法（アロステリック創薬）では、従来、創薬困難とされていたタンパク質を創薬ターゲット候補として見出すことが可能であり、**ターゲットの枯渇という創薬課題の解決に期待**が寄せられている
- タンパク質におけるアロステリック制御部位*3を発見するためには、多大な労力と時間を**要するin vitro実験*4が必要であることから、これを計算によって代替する技術**が求められている

解決したい課題・モチベーション

- タンパク質のアロステリック制御の予測を実験ではなく、計算によって代替するために、**量子技術の活用が期待**されている
- 本検証では、Revorfと東芝デジタルソリューションズが共同で、**アロステリック制御の予測を組合せ最適化問題として解く新たな技術を開発し**、従来手法の計算で特定できていなかった**アロステリック制御部位を計算で予測することを企図**した

期待されるビジネス効果

- 量子技術を活用した今回の手法を用いることで、**従来手法の計算で特定できていなかったアロステリック制御部位を計算で予測することに成功**した
  - ✓ がん遺伝子の1つであるKRASを含む複数のタンパク質に対して、量子技術で計算し予測したアロステリック制御部位と、既知のアロステリック制御部位を比較し、従来の計算手法では特定できていなかった部位を、量子技術による計算でより正確に予測できた
- 本検証により、**計算のみでアロステリック制御部位を発見でき、創薬候補化合物の探索を加速できる可能性**が高まった

*1：疾患の責任分子と想定されるもので、治療薬をデザインする際に標的とするタンパク質のこと
*2：タンパク質に機能的多様性をもたらす立体構造や活性を特異的に調節する機構
*3：タンパク質の活性中心以外の部位で、制御分子（アロステリック因子）が結合する領域
*4：試験管や培養器内で生体内を模倣した環境を人工的に作り実験のこと

参考：東芝デジタルソリューションズ株式会社「量子インスパイアード最適化ソリューション「SQBM+™」を活用し、計算創薬への適用技術を検証」（https://www.global.toshiba/jp/company/digitalsolution/news/2022/0627.html）
*イジング = 主に量子アニーラやイジングモデル専用シミュレータを想定し、問題をイジングモデルで表現してから計算を行う方式。特に、膨大な選択肢の中から最適な組合せを探す問題と親和性が高い。

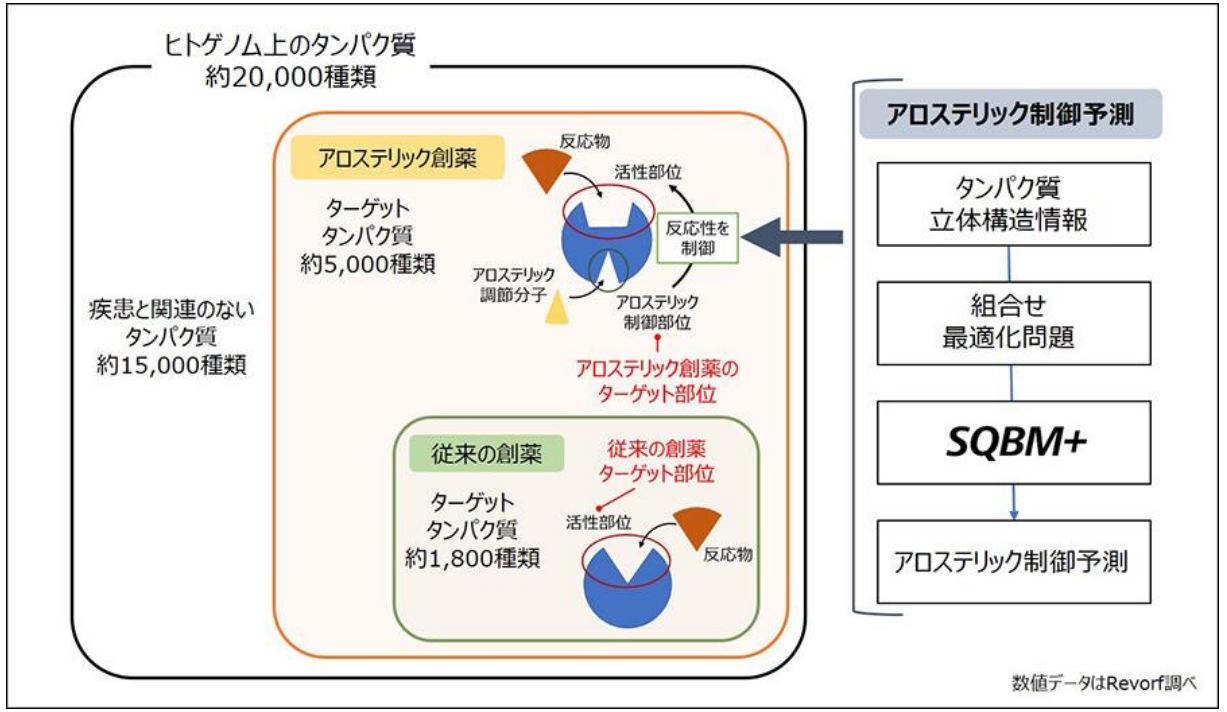
Revorf・東芝デジタルソリューションズ：タンパク質のアロステリック制御予測による創薬ターゲットの拡大 【2022/06】 2／2

検証

産業領域	創薬・医療
プロセス	研究開発
手法	組み合わせ最適化
技術分類	イジング*

量子コンピューターとしての問題設定

- 本検証では、タンパク質の立体構造情報をもとに、**タンパク質のアロステリック制御機構を組合せ最適化問題として定式化し、計算によってアロステリック制御を予測**する
- マシンは、**東芝の量子インスパイアード最適化ソリューションであるSQBM+**を活用した



参考：東芝デジタルソリューションズ株式会社「量子インスパイアード最適化ソリューション「SQBM+™」を活用し、計算創薬への適用技術を検証」
（https://www.global.toshiba/jp/company/digitalsolution/news/2022/0627.html）
*イジング = 主に量子アニーラやイジングモデル専用シミュレータを想定し、問題をイジングモデルで表現してから計算を行う方式。特に、膨大な選択肢の中から最適な組合せを探す問題と親和性が高い。

WEBサイトにて、その他の事例も公開しています。ぜひご覧ください。
https://www.quantum-computing-use-cases.nedo.go.jp

他の事例を見る

国立研究開発法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）
AI・ロボット部（e-mail：quantum_ai@ml.nedo.go.jp）

本ユースケース集は、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術開発機構（NEDO）の委託業務「量子・古典ハイブリッド技術のサイバー・フィジカル開発事業／量子技術に関するユースケース事例調査」および「ポスト５Ｇ情報通信システム基盤強化研究開発事業（量子産業化）／量子コンピュータの産業化促進に向けた包括的調査」の成果として、得られたものです。