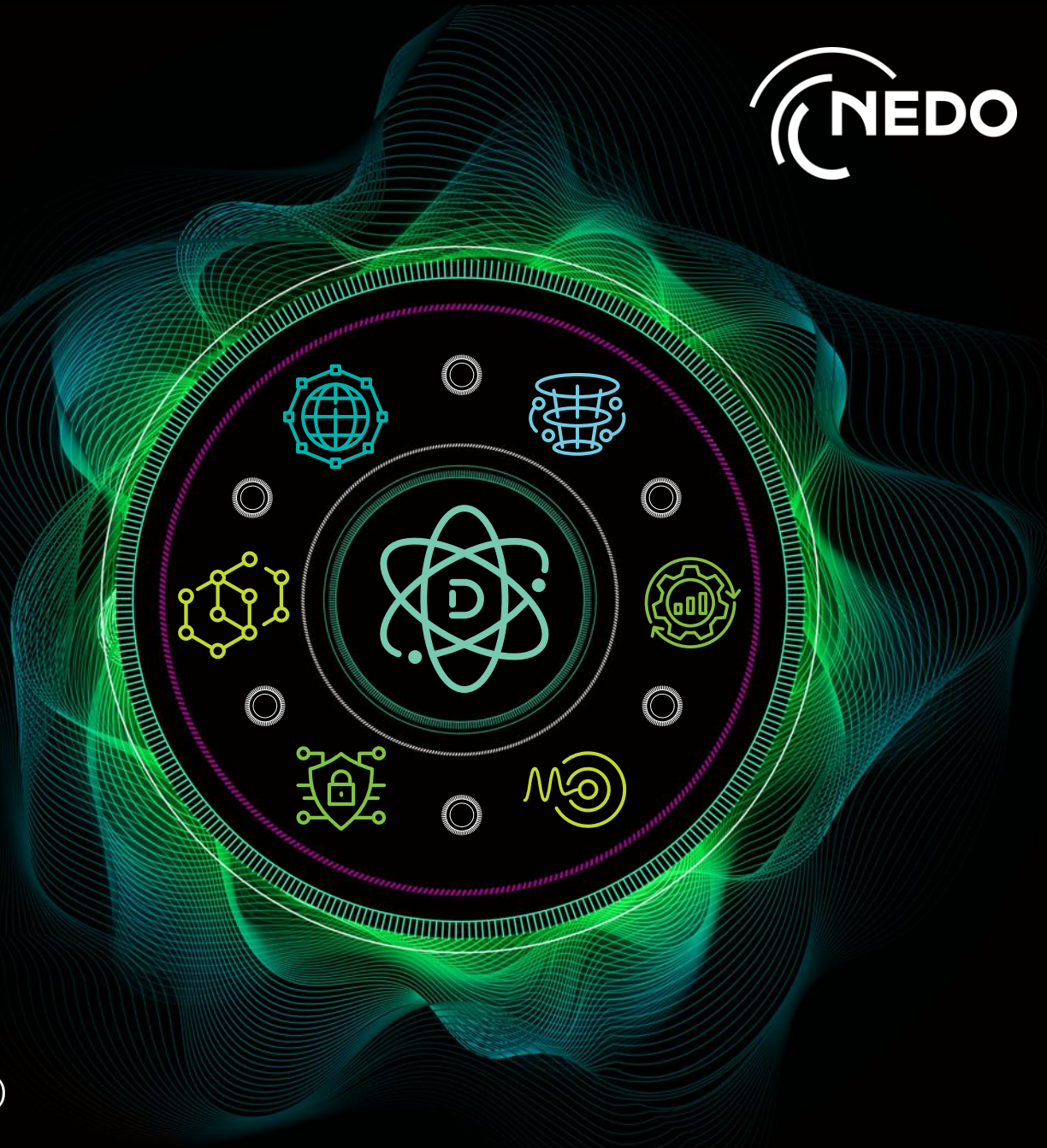
量子コンピューティング ユースケース集

中分子医薬品候補化合物の探索

ペプチドリーム・富士通



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）

ペプチドリーム・富士通：中分子医薬品候補化合物の探索【2020/10】 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

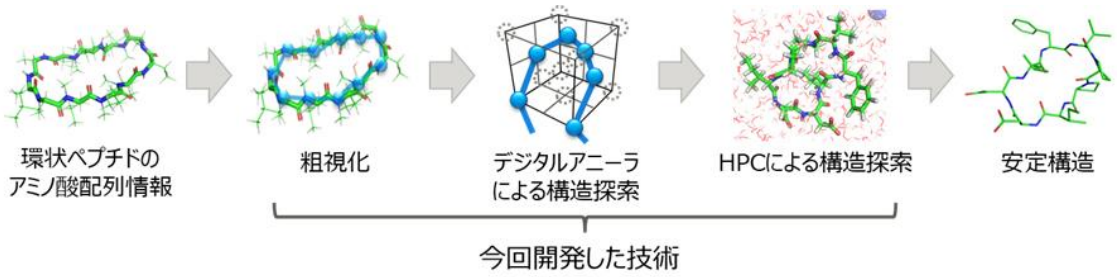
- ペプチドリームでは、**中分子医薬品の候補化合物の開発を数多く進めている**
  - ✓ 中分子医薬品は、分子量が低分子医薬品と抗体医薬品（高分子医薬品）の中間に位置し、コストを比較的抑制した上で、かつ副作用が出にくいという両者の長所を併せ持つことから注目を集めている
- 医薬品の候補化合物の開発において、**数兆種類の化合物ライブラリから候補化合物を絞り込む過程では、従来のコンピューターでは安定構造を探索することが難しく、開発にはかなり多くの時間**を要してしまう

解決したい課題・モチベーション

- 中分子の候補化合物は、**古典コンピューターでは安定構造を探索することが難しく、ウェット実験を繰り返し行う**必要があることから、**一般的に数か月から年の単位で時間を要してしまうことが課題**である
- この課題を解決するために、富士通とペプチドリームは共同研究を開始し、量子技術を活用することで、**創薬の候補化合物となる中分子サイズの環状ペプチドの安定構造探索を高速かつ高精度化する新たな基盤技術の開発を企図**した

量子コンピューターとしての問題設定

- **中分子サイズの環状ペプチド安定構造を探索するために、量子技術と古典コンピューター技術を活用した探索技術を開発**した
  - ✓ 複雑な分子構造を量子技術で高速かつ効率的に計算するために、**分子を粗く捉えた（粗視化）構造を用いて中分子の安定構造を探索する技術**を開発
  - ✓ **量子技術で求めた候補化合物の**粗視化モデルを全原子モデル（全ての原子座標を用いた分子構造を表したモデル）に自動変換する技術**を開発**
- 量子コンピューター技術として、**富士通のデジタルアニーラ**を活用した



開発した中分子サイズの環状ペプチド安定構造探索の流れ

参考：富士通株式会社「富士通とペプチドリーム、高速かつ高精度に中分子医薬品候補化合物の探索を実現」（https://pr.fujitsu.com/jp/news/2020/10/13.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。

ペプチドリーム・富士通：中分子医薬品候補化合物の探索【2020/10】 2／2

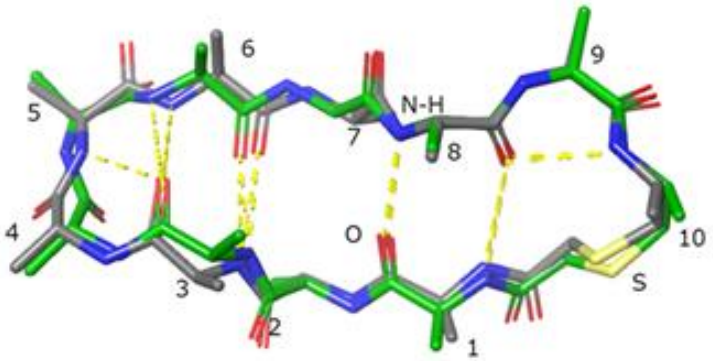
検証

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*

期待されるビジネス効果

- 従来の古典コンピューターを使った計算で求めることが難しいとされた**中分子サイズの環状ペプチドの安定構造の高速な探索について、今回の開発技術を用いることで12時間以内に高精度で実施することに成功**した
- 今回の開発技術で計算した構造と実際の実験で導いた構造を比較すると、**実際の実験とほぼ同等の候補化合物を高精度に探索でき、候補化合物の探索に必要な実験工程を最小化できる可能性**が高まった
  - ✓ 主鎖*のずれが0.73オングストローム（1オングストローム＝0.1ナノメートル）であり、実験と同等の精度
- 研究期間・実験期間を短縮することで、残りの時間を活用して未知の創薬開発にもつなげることも可能となる

*：高分子化合物の構造の骨格をなす分子鎖のこと



実験構造と計算構造の比較
（主鎖部分のみ表示、灰色が実験で求めた構造、緑色が計算で求めた構造）

参考：富士通株式会社「富士通とペプチドリーム、高速かつ高精度に中分子医薬品候補化合物の探索を実現」（https://pr.fujitsu.com/jp/news/2020/10/13.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。