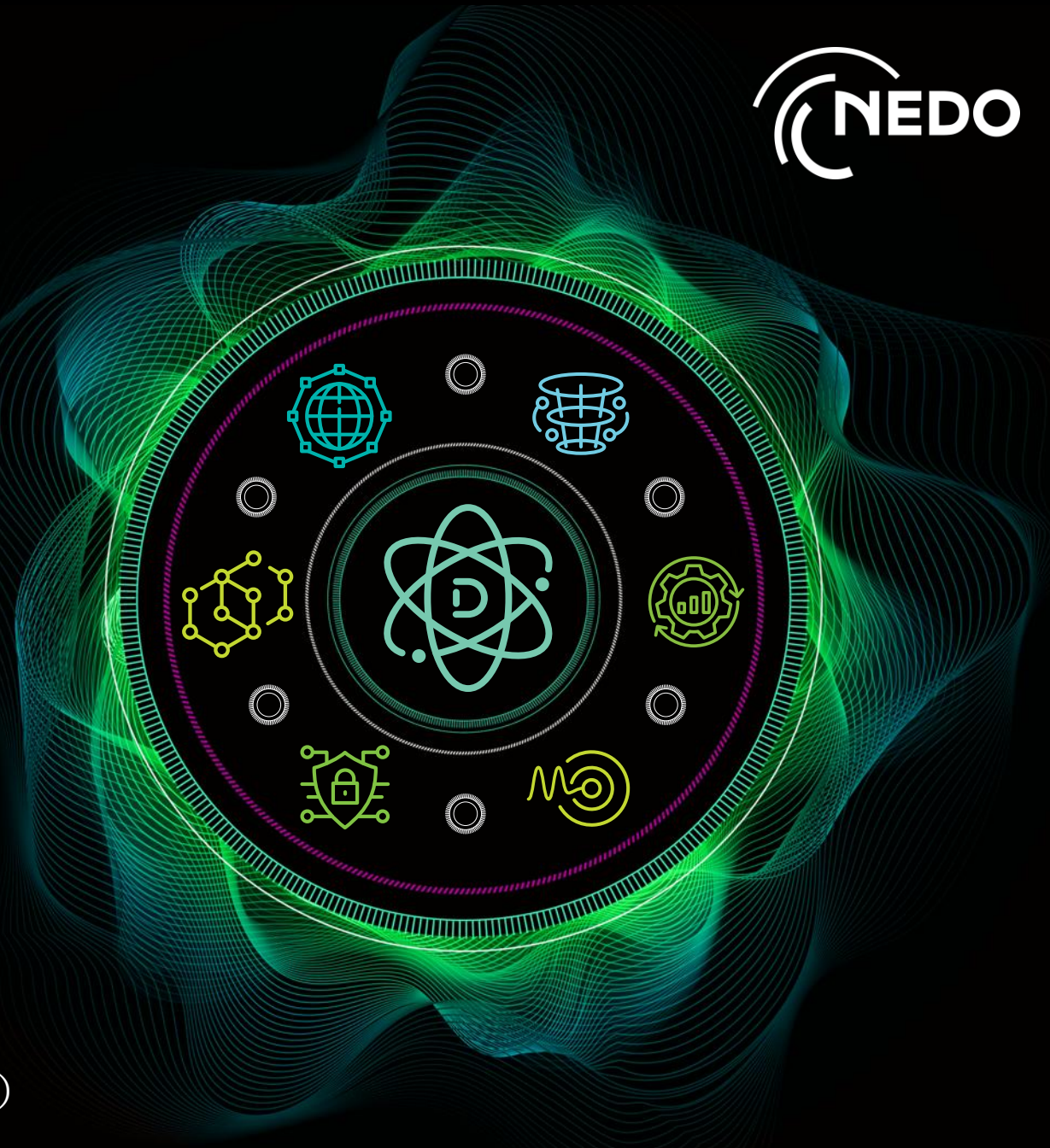
量子コンピューティング ユースケース集

量子AI創薬プロセスの概念実証

JT



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）

JT：量子AI創薬プロセスの概念実証 【2024/10】 1／2

構想

産業領域	創薬・医療
プロセス	研究開発
手法	AI
技術分類	イジング*

取組の背景

- 生成AIは学習可能なデータがWeb上に大量に存在するため急速に普及した。一方、**創薬ではヒトのデータが必要であるため、AIに学習させるための膨大なデータ自体を生成する必要がある点が発展における壁**となっている
  - ✓ シミュレーションを実行し、得られたデータをAIに学習させることで創薬AIを構築
- **JT（日本たばこ産業株式会社）では現在化合物創出プロセスに力点を置いている**が、AI技術は、**トランスレーショナルリサーチなどを含む全ての創薬プロセスにおいて革新的な変化をもたらすポテンシャルがある**と考えている
- AI創薬を発展させていく中で、JTは**量子コンピューターの処理速度および得られるデータの質の両面でその革新性に注目**している
  - ✓ 量子シミュレーション技術の世界的トップリーダーであるQsimulateと**低分子創薬技術の開発において戦略的パートナーシップを締結**
- JTはD-Waveと共同で、**AIと量子コンピューターを活用した革新的な創薬技術の開発を目指す本取組を発表**した

解決したい課題・モチベーション

- **製薬会社は新薬開発における難しさ、不確実性、期間の課題に対応しながら競争力を維持する必要がある**
- **First in Class（画期的）な低分子化合物を発見するプロセスを加速**すると共に、**創薬の様々なプロセスにおける質の向上**を創り出す

量子コンピューターとしての問題設定

- JTでは独自の先端的AI創薬技術の開発を進めており現在実装段階。**特に基本原理による物理シミュレーションとAIとを有機的かつ密接に連動・同期させた技術開発を重要視している**
- 本取組では**D-Waveのアニーリング型量子コンピューター**をJT 独自のAI技術に活かし、**創薬のためのAIの開発と応用をスピード・質・適用範囲において拡張する**ことを目指している

参考：D-WAVE「日本たばこ産業と D-Wave、AIと量子コンピューターを活用した革新的な創薬技術の開発を目指した共同プロジェクトを発表」（https://dwavejapan.com/%E6%97%A5%E6%9C%AC%E3%81%9F%E3%81%B0%E3%81%93%E7%94%A3%E6%A5%AD%E3%81%A8-d-wave%E3%80%81ai%E3%81%A8%E9%87%8F%E5%AD%90%E3%82%B3%E3%83%B3%E3%83%94%E3%83%A5%E3%83%BC%E3%82%BF%E3%82%92%E6%B4%BB%E7%94%A8/）

*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。

JT：量子AI創薬プロセスの概念実証 【2024/10】 2／2

構想

産業領域	創薬・医療
プロセス	研究開発
手法	AI
技術分類	イジング*

期待されるビジネス効果

- 量子AIを活用することで、**低分子化合物の探索空間の質および地平を拡大するための新しい先端技術確立を目指す**
- 概念実証プロジェクトの後、JTの医薬事業部は「**量子AI創薬**」**技術の創出を進め、量子コンピューターを現実の分子設計に運用するステージに移行する**ことを計画している

参考：D-WAVE「日本たばこ産業と D-Wave、AIと量子コンピューターを活用した革新的な創薬技術の開発を目指した共同プロジェクトを発表」（https://dwavejapan.com/%E6%97%A5%E6%9C%AC%E3%81%9F%E3%81%B0%E3%81%93%E7%94%A3%E6%A5%AD%E3%81%A8-d-wave%E3%80%81ai%E3%81%A8%E9%87%8F%E5%AD%90%E3%82%B3%E3%83%B3%E3%83%94%E3%83%A5%E3%83%BC%E3%82%BF%E3%82%92%E6%B4%BB%E7%94%A8/）

*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。