量子コンピューティング ユースケース集

量子生成AIを用いた抗がん剤候補の作成

Zapata AI



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）

Zapata AI：量子生成AIを用いた抗がん剤候補の作成 【2024/2】 1／2

検証

産業領域	創薬・医療
プロセス	研究開発
手法	AI
技術分類	ゲート*

取組の背景

- Zapata AIはハーバード大学をスピンアウトする形で量子アルゴリズム開発のソフトウェア会社として始まり、**その後主に生成AIへ事業領域を移した**
  - ✓ 量子プロセッサープロバイダのIonQと協業し、**量子生成AI技術に関して戦略的提携を締結**
  - ✓ ただし、その後Zapata AIは倒産している（2024年10月12日）
- Zapata AIは業界特化生成AIに取り組んでおり、**時間とコストのかかる医薬品の研究開発に量子生成AIの適用**を試みた

期待されるビジネス効果

- VQCを用いた量子GANは、**従来のベンチマークより優れた特性を持つ物理化学的特性と性能を持った分子の生成に成功**した
- 加えて、パラメータ数も少ないことから、**表現力における量子優位性を観察できた**
- この研究は**量子コンピューターによる創薬支援の実用的な可能性**を示した

解決したい課題・モチベーション

- **医薬品の研究開発には時間とコストがかかる**
- **量子生成AIが現実の問題を効果的に解決することを実証する**

参考：QKAI「Zapata AI (ZPTA) がNASDAQ上場。量子分野からピボットし生成AI会社としてAndretti Acquisition Corporationとの経営統合を完了。2024年4月1日から取引開始」（https://www.qcrjp.com/post/zapata-ai-zpta-nasdaq-go-public、QKAI「Zapata AI 倒産についての日本市場での解釈とその影響」（https://www.qcrjp.com/post/zapata-ai-form8k?utm_source=twitter&utm_medium=blog.post-promoter&utm_campaign=efa0e2ed-a78a-4f84-aa0a-ac0e2b9dae5c）、ACS「Exploring the Advantages of Quantum Generative Adversarial Networks in Generative Chemistry」（https://pubs.acs.org/doi/full/10.1021/acs.jcim.3c00562）
*ゲート（gate-based）= 量子ビットに対して順に演算を適用することで計算を行う方式。通常のコンピュータにおける論理回路に近い考え方で、幅広い問題に対応可能。

Zapata AI：量子生成AIを用いた抗がん剤候補の作成 【2024/2】 2／2

検証

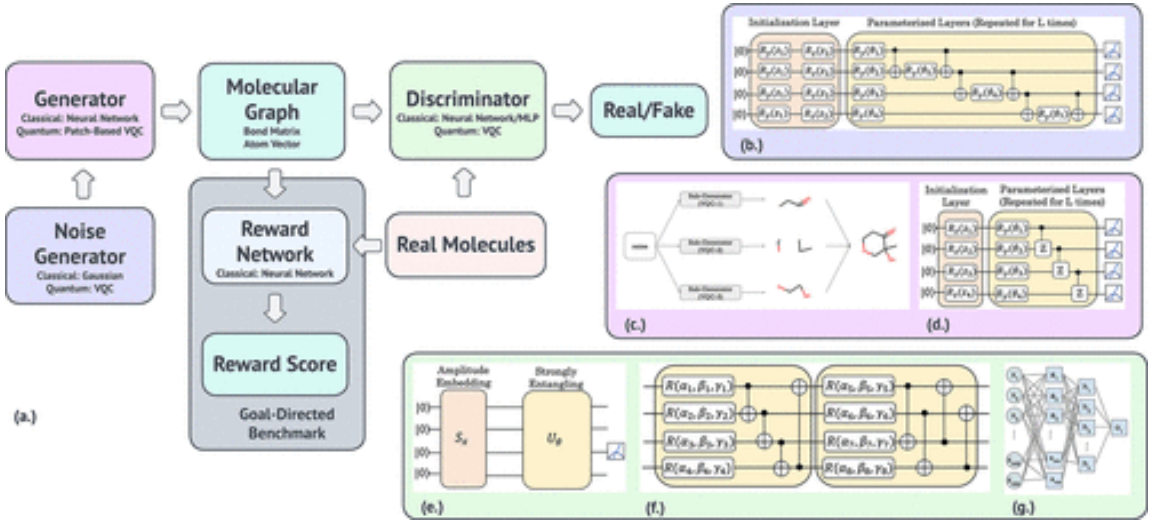
産業領域 創薬・医療
プロセス 研究開発
手法 AI
技術分類 ゲート*

量子コンピューターとしての問題設定

- 低分子化合物の発見に向けて、量子-古典ハイブリットGAN*1を活用した
- **GANの各要素を変分量子回路（VQC*2）に置き換えて、創薬における量子の利点を実証**した
- 本取組では16量子ビットのIBM量子コンピューターを活用した

*1：GANはDiscriminatorとGeneratorを交互に競合させながら学習を進めることで、本物に近いデータの生成を可能にするネットワーク

*2：VQCは量子古典ハイブリッド計算方式を実装する量子回路を指す



本取組の全体像

参考：ACS「Exploring the Advantages of Quantum Generative Adversarial Networks in Generative Chemistry」（https://pubs.acs.org/doi/full/10.1021/acs.jcim.3c00562）
*ゲート（gate-based）= 量子ビットに対して順に演算を適用することで計算を行う方式。通常のコンピュータにおける論理回路に近い考え方で、幅広い問題に対応可能。

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。