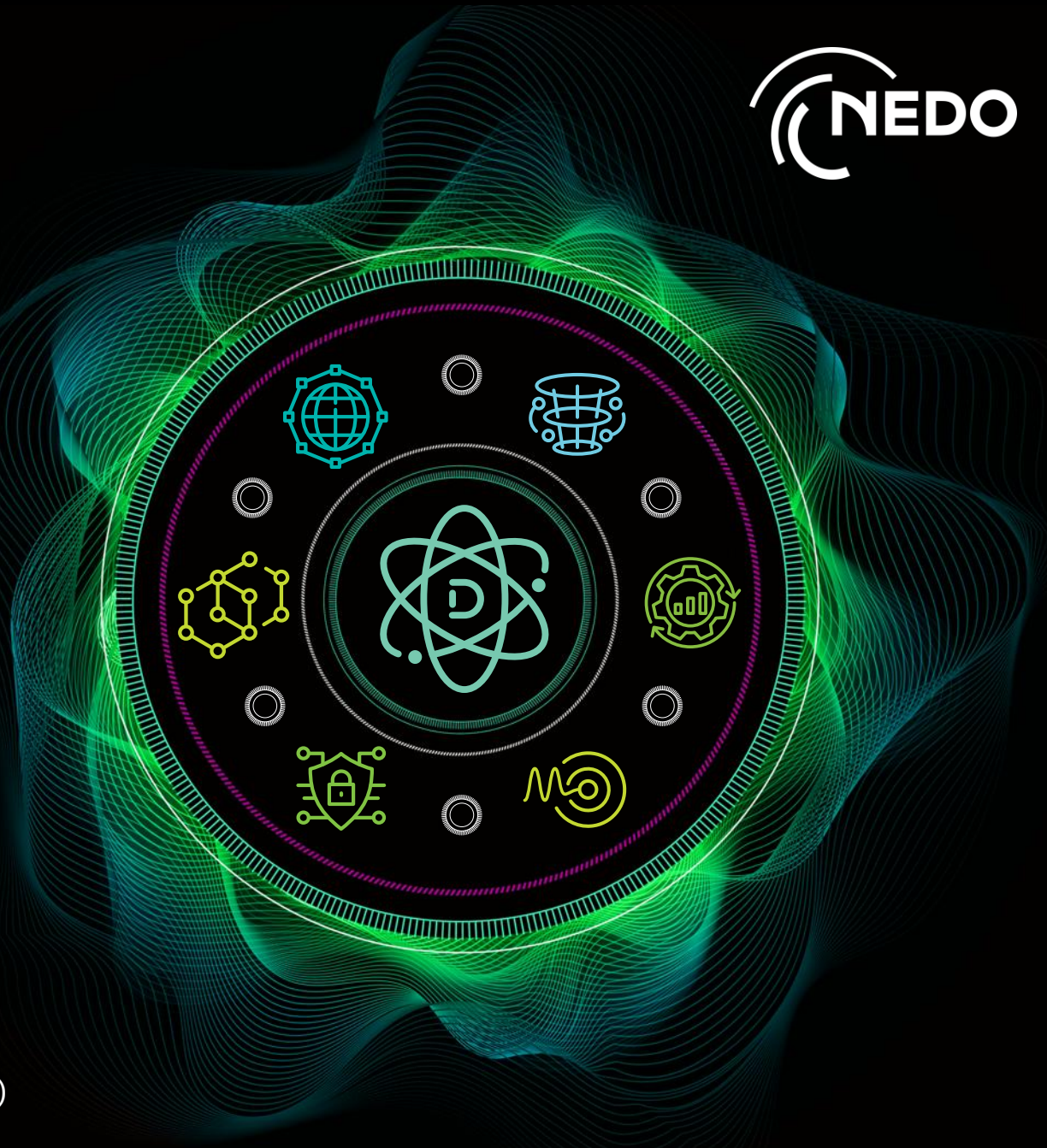
量子コンピューティング ユースケース集

# アルツハイマー病の原因酵素BASE1に対するリード化合物の薬効分析

Roche·Quantinuum



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）

# Roche・Quantinuum：アルツハイマー病の原因酵素BASE1に対するリード化合物の薬効 【2021/10】 1／2

検証

| | |
|---|---|
| 産業領域 | 創薬・医療 |
| プロセス | 研究開発 |
| 手法 | シミュレーション |
| 技術分類 | ゲート* |

## 取組の背景

- 複雑で強相関の化学系のシミュレーションは、標準的な手法が不正確または高コストであるため、量子計算の進展から最も恩恵を受ける分野の一つと広く信じられている
  - ✓ 実際、過去半世紀にわたり、材料シミュレーションのための量子アルゴリズムの研究が爆発的に進展しており、様々な分野で研究が行われている
- 新薬候補の合成には、相当な医薬品化学の取り組みが必要である。**CADD（コンピューター支援創薬設計）において、最も有望な化合物を優先するために、様々なアプローチを用いて候補分子をスクリーニングする**ことで、合成の必要性を制限することができる
  - ✓ CADDにおいて、**量子技術を活用することが期待**されている

## 解決したい課題・モチベーション

- DFT（密度汎関数）およびCC（カプリングクラスター）の手法を用いてタンパク質をシミュレーションできる低スケーリングの量子力学的方法の開発が進行しているが、**大規模シミュレーションのための正確な計算手法**が求められている
- タンパク質-リガンド結合エネルギーの計算を量子エミュレータで行った既存研究があるが、**RocheとQuantinuum（旧Cambridge Quantum Computing）によるチームは、量子コンピューターの実機を活用したタンパク質-リガンド結合エネルギーの計算**に取り組んだ

参考：arXiv「Quantum Computational Quantification of Protein-Ligand Interactions」（https://arxiv.org/pdf/2110.08163）
*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。

# Roche・Quantinuum：アルツハイマー病の原因酵素BASE1に対するリード化合物の薬効 【2021/10】 2／2

検証

| | |
|---|---|
| 産業領域 | 創薬・医療 |
| プロセス | 研究開発 |
| 手法 | シミュレーション |
| 技術分類 | ゲート* |

## 量子コンピューターとしての問題設定

- **アルツハイマー病の病因と関連しているBACE1酵素を対象として、タンパク質-リガンド結合エネルギー**について、量子技術を活用して計算を行った
- エネルギー計算を行うために、強く相関した電子構造問題を解くための数値的手法密度行列埋め込み理論（DMET）埋め込み手法と、分子の電子基底状態を見つけるための変分量子固有値ソルバー（VQE）アプローチを組み合わせた
- マシンは、以下の2つを用いた
  - ✓ **IBMの超伝導型の量子コンピューター**
  - ✓ **Quantinuum（旧 Honeywell Quantum Solutions）のイオントラップ型の量子コンピューター（NISQ）**

## 期待されるビジネス効果

- 従来手法は量子エミュレータを用いていたが、本検証では**実際の量子コンピューターを活用して、タンパク質-リガンド結合エネルギーを初めて計算**することができた
  - ✓ **NISQの量子コンピューター**を利用してタンパク質-リガンド結合エネルギーを計算できることを示した

参考：arXiv「Quantum Computational Quantification of Protein-Ligand Interactions」（https://arxiv.org/pdf/2110.08163）
*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。