量子コンピューティング ユースケース集

機能タンパク質最適化技術

東北大学



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）

東北大学：機能タンパク質最適化技術　【2026/7】　1 ／ 2

検証

産業領域	製造・プロセス
プロセス	素材探索
手法	AI
技術分類	イジング*

取組の背景

- タンパク質は、医薬分野を中心に食品、環境、材料分野などへの利用が試みされているが、**目的の特性(機能・特性)をもつ設計が難しく、開発費が高いため、新しい有効な薬・酵素の開発速度が上がらない**
- その中で、機械学習と実験的操作を組み合わせることで、実験的操作では探索しきれない配列空間内中に含まれる目標タンパク質の発見確率を向上させるアミノ酸配列最適化プロセスを開発してきた
- 更に、**量子アニーリングも適用することによって、従来の機械学習手法では対応できないより大規模な配列空間を対象にしたアミノ酸配列最適化プロセスを開発し、パートナー企業の機能タンパク質の開発を支援していくプラットフォーム事業とともに、自ら創薬開発をおこなうパイプライン事業もおこなう社会実装**を目指す

解決したい課題・モチベーション

- 天然タンパク質よりも、触媒活性・安定性が共に2倍以上に向上した酵素の変異体を取得する
- 抗原への結合機能が解離平衡定数でnMレベル、熱変性中点が60°C以上の特性を示す抗体を取得する
- **実験的操作のみで取得したリード分子よりも、抗原への結合機能が10倍以上高く、安定性などの物性も向上しているリード分子を取得する**

参考：国立研究開発法人 新エネルギー・産業総合開発機構 AI・ロボット部：「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」（https://www.nedo.go.jp/content/800030349.pdf）
*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。

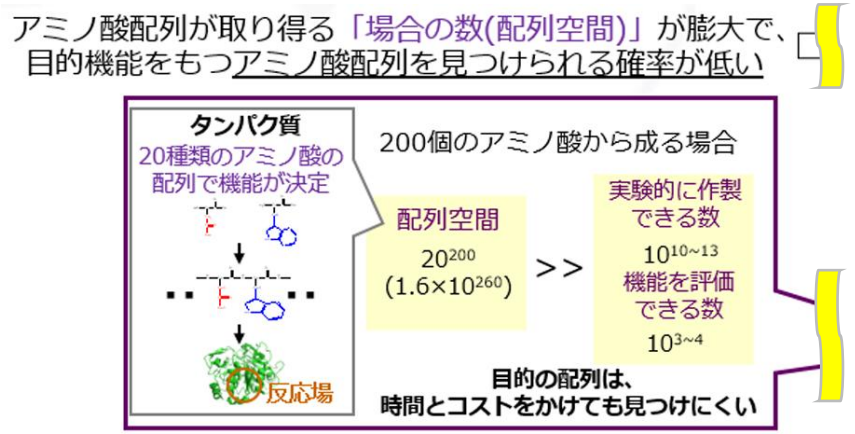
東北大学：機能タンパク質最適化技術　【2026/7】　2 ／ 2

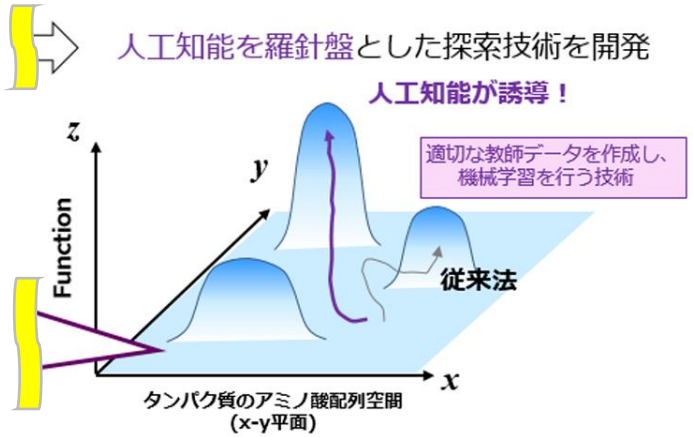
検証

産業領域	製造・プロセス
プロセス	素材探索
手法	AI
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

- 機械学習を取り入れたタンパク質のアミノ酸配列の設計は世界的におこなわれているが、**探索できるアミノ酸配列の組み合わせ数(配列空間の規模)には限界があるため、探索対象となるタンパク質や特性(機能・物性)が配列空間設計の精度に依存**してしまう
- **量子アニーリングを利用すること**でその限界を拡張し、配列空間の精度に依存することなく幅広いタンパク質・特性へ対応することできる技術を構築する





期待されるビジネス効果

- すでに設立しているスタートアップ企業(レボルカ)により、パートナー企業が希望する機能タンパク質の創出を支援するプラットフォーム事業と自社で創薬開発をおこなうパイプライン事業を行う

参考：国立研究開発法人 新エネルギー・産業総合開発機構 AI・ロボット部：「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」（https://www.nedo.go.jp/content/800030349.pdf）
国立研究開発法人 新エネルギー・産業総合開発機構 AI・ロボット部：「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」（https://www.nedo.go.jp/content/800030348.pdf）

*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。