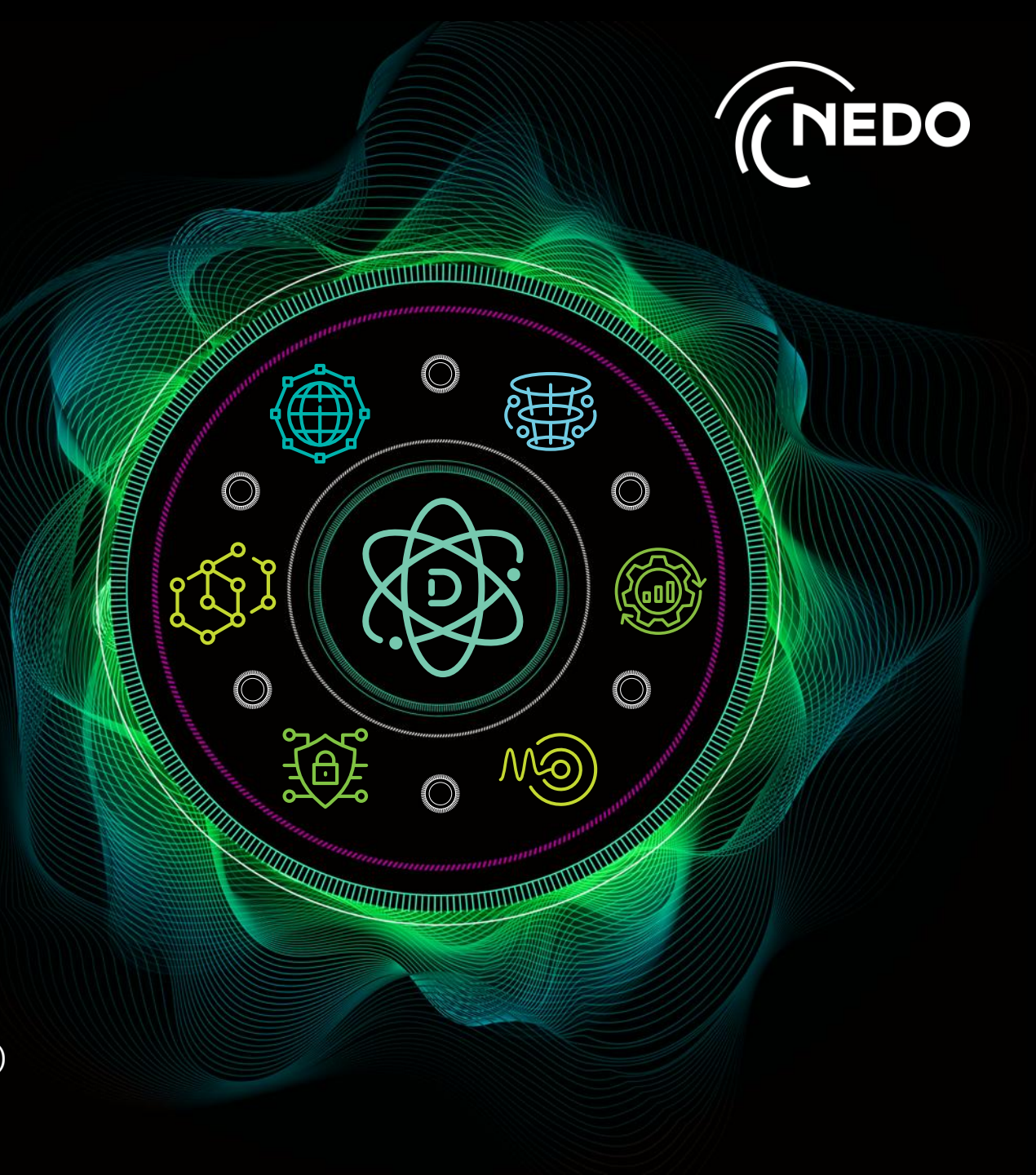
量子コンピューティング ユースケース集

量子・AIハイブリッドによる創薬向け大規模Virtual Screening法の開発

東芝デジタルソリューションズ、
アヘッド・バイオコンピューティング、東京科学大学



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）

東芝デジタルソリューションズ、アヘッド・バイオコンピューティング、東京科学大学：量子・AIハイブリッドによる創薬向け大規模Virtual Screening法の開発【2026/3】 1／3

検証

産業領域：創薬・医療
プロセス：リード探索・最適化
手法：組み合わせ最適化
技術分類：イジング*

取組の背景

- 創薬上流のヒット化合物探索では、多数の候補化合物から標的タンパク質への結合が期待される（薬剤の種になることが期待される）化合物を計算機上で選抜する**Virtual Screening (VS)**が活用される
- 近年、Generative AI等により仮想化合物の生成が進み、候補化合物数は10^9以上のオーダーに拡大している。一方、従来のVS手法は候補化合物ごとに評価計算を行う逐次処理であり、**候補化合物数に比例して計算時間・計算資源・コストが増大してしまう**
- そのため、膨大な候補化合物情報を十分に活用したVSは、大規模計算資源を調達できる一部の企業・研究機関に限られやすく、**製薬企業にとって 探索範囲の拡大と計算コストの両立 が大きな課題**となっている
- そのため、**大規模な候補化合物集合に対して現実的な時間・コストで処理できる新しい大規模VS手法が求められている**

解決したい課題・モチベーション

- 解決したい課題は、大規模な候補化合物集合に対して、**従来のVS手法と同等程度の精度を維持しつつ、計算時間を大幅に短縮 した手法を実現**すること
  - ✓ それによりVSに要するコストの削減、創薬プロセスの効率化を図る
- 本取組では**化合物をその部分構造である フラグメントの組み合わせとして捉え、VSを組合せ最適化問題 として定式化**
- 候補化合物数に比べてそこに含まれるフラグメント種類数は相対的に少なくなるため、フラグメント配置の良い組み合わせを探索することで、**膨大な化合物空間を直接すべて評価せずに有望候補を絞り込める**
- さらに、組合せ最適化問題ソルバーとして用いる疑似量子アニーラSQBM+は多数の準最適解、すなわち最適解に近い多様な候補を高速に出力できるため、単一の最適解ではなく多様な候補化合物を提示する必要があるVS に適している

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）
量子インスパイアード最適化ソリューション SQBM+ | 東芝（https://www.global.toshiba/jp/products-solutions/ai-iot/sbm.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。

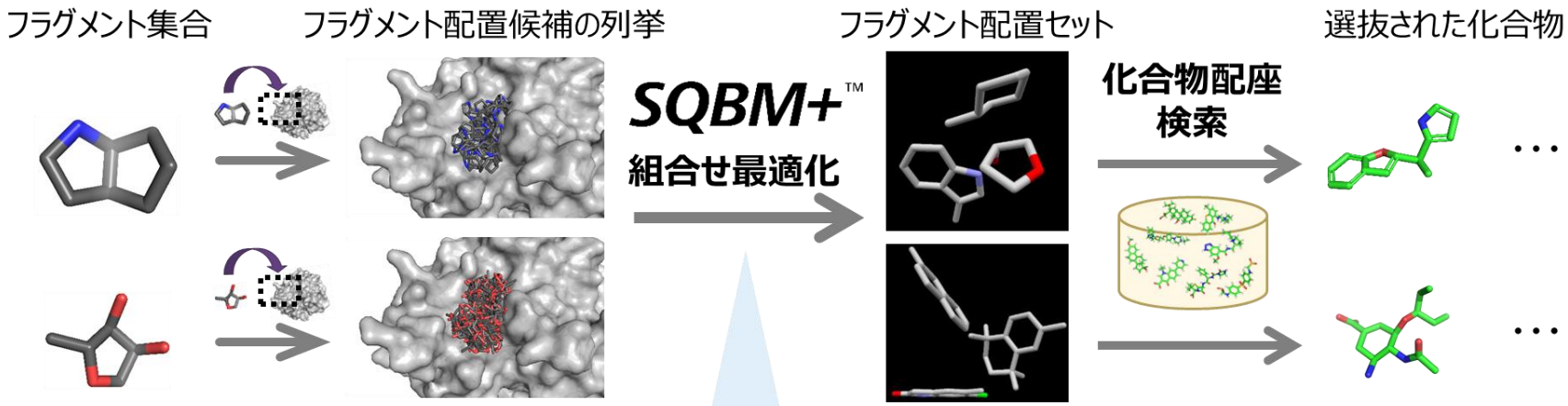
東芝デジタルソリューションズ、アヘッド・バイオコンピューティング、東京科学大学：量子・AIハイブリッドによる創薬向け大規模Virtual Screening法の開発【2026/3】　2 ／ 3

検証

産業領域　創薬・医療
プロセス　リード探索・最適化
手法　組み合わせ最適化
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

- 標的タンパク質の結合ポケット（薬剤化合物が結合し効果を発揮する領域）の周辺に列挙した**多数のフラグメント配置候補から、化合物として自然で、結合が期待される組み合わせを選択する**問題として定式化
- この組み合わせと類似した化合物を化合物ライブラリから検索することで、**有望な化合物を高速に絞り込む新規手法Frasco-VSを開発**



$$H = A\sum_{i,j}\frac{\Delta G_{ij}}{\sqrt{HAC}}x_{ij} + B\sum_{i,j,k,l} b_{ij,kl}x_{ij}x_{kl} + C\sum_{i,j,k,l} c_{ij,kl}x_{ij}x_{kl} + \frac{D}{2}\sum_{i}^{F}\left(\sum_{j} x_{ij} - 0\right)^2 + \frac{E}{2}\left(\sum_{i,j} x_{ij} - K\right)^2$$

フラグメントドッキングスコア	フラグメント間の共有結合可能性に対する加点	フラグメント間衝突に関する減点	選ばれるフラグメントの多様性向上	化合物が大きくならないようにする合計配置数の制限

Frasco-VSの処理フロー

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。

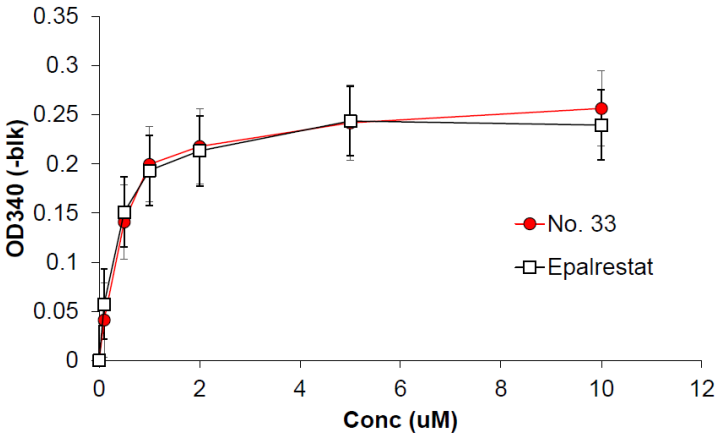
東芝デジタルソリューションズ、アヘッド・バイオコンピューティング、東京科学大学：量子・AIハイブリッドによる創薬向け大規模Virtual Screening法の開発【2026/3】　3／3

検証

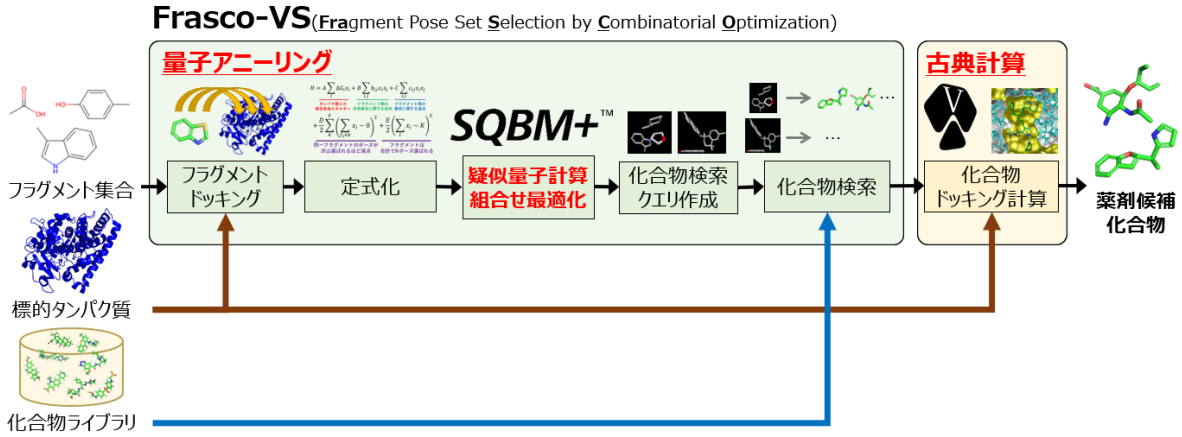
産業領域　創薬・医療
プロセス　リード探索・最適化
手法　組み合わせ最適化
技術分類　イジング*

期待されるビジネス効果

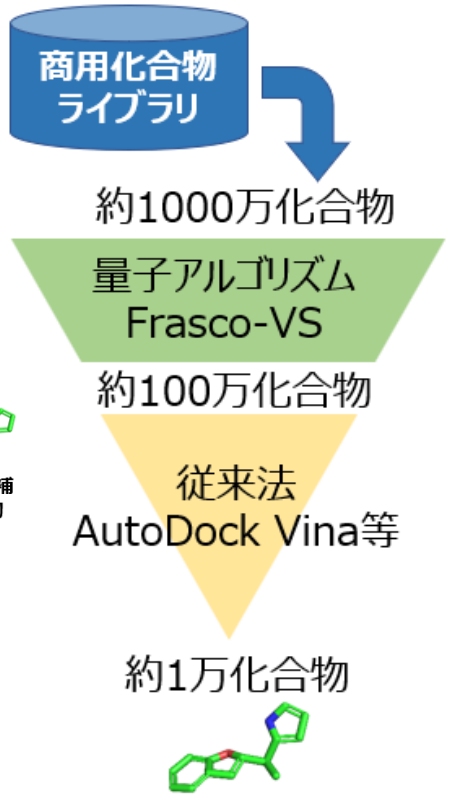
- 創薬の上流工程で行われるヒット化合物探索の時間短縮とコスト削減：対象化合物ライブラリが大型化するほど既存法に比べて有利となる
- 糖尿病に関係する標的タンパク質ALDRを標的とした実証実験では、**従来手法比 約10倍の速度向上を達成**
  また***in-vitro* 試験により既存薬Epalrestatに匹敵する阻害能を示す新規化合物1件を発見**し、提案手法の有効性を確認した
- 第一段階はFrasco-VSにより候補化合物を大まかに絞り込み、第二段階の古典計算でより厳しく絞り込む**ハイブリッド手法**
- 汎用クラウド環境AWS、および産業技術総合研究所のABCI-Q上で動作するシステムとして構築済み
  自社で大規模サーバーを保有しない企業・研究機関でも、大規模候補化合物群を対象としたVSが実施可能に



当手法で発見したALDR標的の新規阻害化合物



Frasco-VSと古典計算によるハイブリッド手法の構成



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 産業技術総合研究所 G-QuAT 量子・古典融合計算基盤 ABCI-Q（https://unit.aist.go.jp/g-quat/HowToUse/abci_q/index.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。