



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

Development of large-scale virtual screening method for quantum/AI hybrid drug discovery

アヘッド・バイオコンピューティング(株)

研究開発の概要 Overview of research and development

■背景 Background

創薬向けの Virtual Screening では、候補化合物数の急増 (10の6乗から、9乗オーダーへ) に対応するために、高速なプレ・スクリーニング (一次選抜) 手法が求められています。

In virtual screening for drug discovery, a high-speed pre-screening method is required to handle the rapid increase in the number of candidate compounds, from millions to billions.

■研究開発内容・成果

Research and development activities and results

多くの化合物に共通する部分構造 (フラグメント) のドッキング結果に基づき、疑似量子コンピュータ上の組合せ最適化計算により、迅速に候補化合物群を選抜することが可能です。

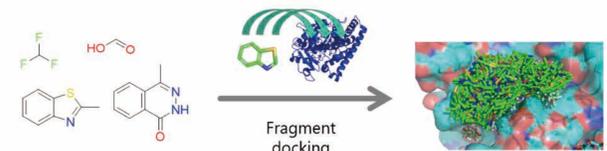
Based on the docking results of common substructures (fragments) shared by many compounds, it is possible to rapidly select candidate compounds using combinatorial optimization solved on a quantum-inspired computing system.

■今後の展望 Future outlook

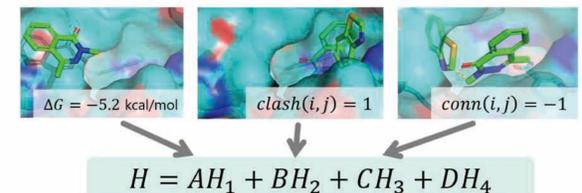
疑似量子計算によるプレ・スクリーニングで迅速に候補化合物群を絞り、さらに既存の Virtual Screening 法で詳細に選抜を行えるワークフローをクラウド上などで構築する予定です。

We plan to develop a cloud-based workflow that quickly narrows down candidate compounds using quantum-inspired computing, followed by further selection with existing screening methods.

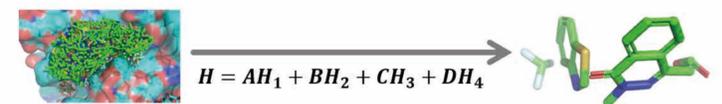
(1) Enumeration of fragment placements



(2) Formulation of a Hamiltonian



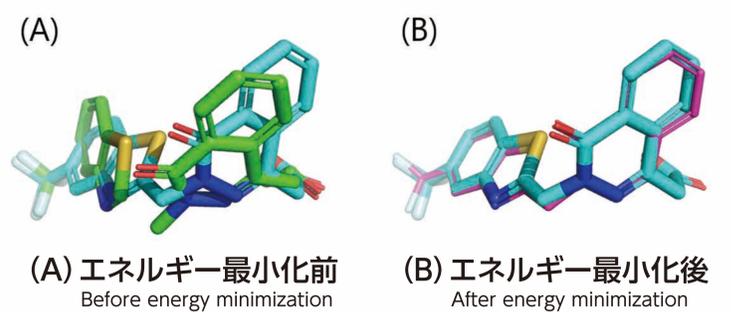
(3) Combinatorial optimization with simulated quantum annealer



(4) Re-construction of a ligand structure



ドッキングのワークフロー Docking workflow



Yanagisawa K, et al. Entropy 26(5), 397, 2024.

来場者へ向けて For visitors

大規模な Virtual Screening のワークフロー構築に興味のある方、量子コンピューティングや AI 技術による加速に興味のある方、お声がけください。当社は、分子シミュレーション、深層学習、量子コンピューティングに強い大学発ベンチャー企業です。

If you are interested in building large-scale virtual screening workflows or accelerating drug discovery with quantum computing and AI technologies, please feel free to contact us. We are a university-based startup with strong expertise in molecular simulation, deep learning, and quantum computing.

関連サイト紹介

Related website

アヘッド・バイオコンピューティング(株)
<https://ahead-biocomputing.co.jp/>

NEDO 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/activities/ZZJP_100249.html



NEDOプロジェクト名

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

お問い合わせ先

アヘッド・バイオコンピューティング(株) 研究開発部
contact@ahead-biocomputing.co.jp

お手元のスマホでも
ご覧いただけます。

