

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 (株式会社東芝、アヘッド・バイオコンピューティング株式会社、国立大学法人東京科学大学)

TOSHIBA

会社名	株式会社東芝	アヘッド・バイオコンピューティング株式会社	国立大学法人東京科学大学
所在地	神奈川県川崎市	神奈川県川崎市	東京都目黒区
設立年	1875年	2018年	2024年
代表者	島田 太郎 社長執行役員 CEO	大上 雅史 代表取締役社長	大竹 尚登 理事長
事業領域・分野	ヘルスケア		
事業年度	2023年度～2025年度		

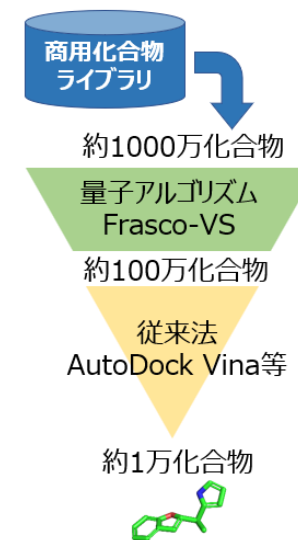
<事業概要>

創薬におけるヒット化合物探索では、近年のGenerative AIの進展もあって候補化合物の個数が飛躍的に増加しており、従来の逐次的な化合物選抜（Virtual Screening）では計算時間が膨大になる課題があります。本事業では、化合物を構成するフラグメントに着目し、量子関連技術を活用した組合せ最適化アプローチを採用することにより、大規模な化合物ライブラリから有望な薬剤候補化合物を効率よく選抜する新たなVirtual Screening手法を開発しました。

<得られた成果と活用イメージ>

フラグメントベースのVirtual Screeningを組合せ最適化問題として定式化し、疑似量子アニーラSQBM+を活用したFrasco-VS法を開発しました。本技術を従来法と組み合わせることで、酵素ALDR※1に対する1000万化合物規模のVirtual Screeningにおいて、従来法と同等の精度を維持しながら約10倍の高速化を実現しました。またその後の実証実験において、活性阻害を示す新規候補化合物を発見し、本技術の有効性を確認しました。さらに、クラウドやABCI-Q※2上で利用可能な実証システムを構築しました。これらの成果により、ヒット化合物探索に要する時間と計算コストの大幅な削減や、自社で大規模な計算設備を保有しない企業や研究機関における大規模Virtual Screeningの活用、それによる新規薬剤候補化合物の発見加速への貢献が期待されます。

※1:糖尿病の合併症に関与すると考えられている創薬標的
※2:産業技術総合研究所が運用する量子・古典融合計算基盤



▼本成果に興味をもたれた方はこちらへ

事業者へのお問い合わせ窓口：株式会社 東芝 <https://www.global.toshiba/jp/products-solutions/ai-iot/sbm/question.html>

NEDOへのお問い合わせ窓口: ai-robo_followup@ml.nedo.go.jp