

富士通とペプチドリーム、高速かつ高精度に 中分子医薬候補化合物の探索を実現

～「デジタルアニーラ」活用で創薬プロセスを飛躍的に短縮、新型コロナウイルス感染症の
治療薬開発への適用を目指す～



株式会社富士通研究所

デジタルアニーラ・ユニット

ユニット長

岩井 大介

The Fujitsu logo, consisting of the word "FUJITSU" in a white, sans-serif font, with a stylized infinity symbol above the "i".

FUJITSU

shaping tomorrow with you

デジタルアニーラ

デジタルアニーラとは

量子コンピューティング

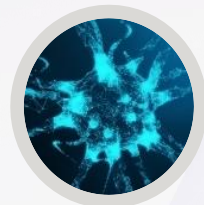
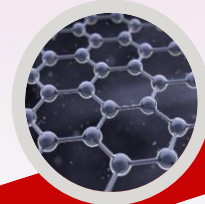
FUJITSU

- 量子現象に着想を得たデジタル回路による新アーキテクチャ
- 組合せ最適化問題に能力を発揮

汎用コンピューティング



今使えて、
発展し続ける
コンピューティング
デジタルアニーラ



脳型コンピューティング

組合せ最適化問題適用分野



物流・製造分野



創薬・材料分野



金融分野

実問題求解に向けた技術ロードマップ

FUJITSU

適用分野



県域配送



全国配送



中分子医薬



金融ポートフォリオ



要員計画

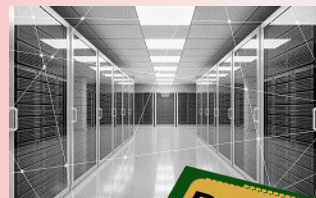
規模 > 1M変数

大規模実問題対応

- ・規模 100kbit
- ・実問題の制約に対応

第2世代
規模 8192bit

第1世代
規模 1024bit



~2017年度

2018年度

2019年度

2020年度

2021年度~

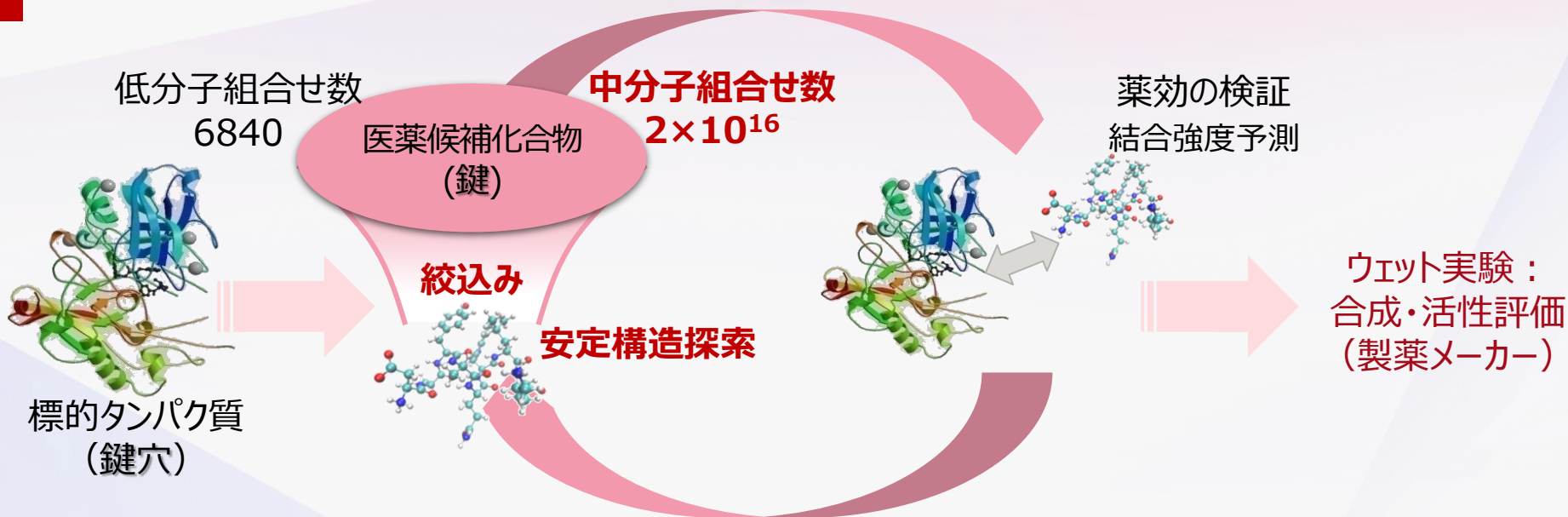
デジタルアニーラ： 中分子創薬への活用

IT創薬：創薬分野へのITの活用

- IT創薬：コンピュータ上で仮想的に医薬候補を設計・評価
- 低分子医薬において、IT創薬活用が進む



IT創薬のプロセスと課題



■ 低分子医薬(アミノ酸2～4個)から副作用のリスクが低い中分子医薬(アミノ酸5～50個)へシフト

■ 中分子医薬候補の安定構造探索は、**計算量の爆発的な増加により、困難**

低分子：天然のアミノ酸3個の配列種類は：4200

中分子：天然のアミノ酸15個の配列種類は： $\sim 1.6 \times 10^{19} = 1,600$ 京



デジタルアニーラで
高速な安定構造探索ができるか？！

デジタルアニーラによる安定構造探索

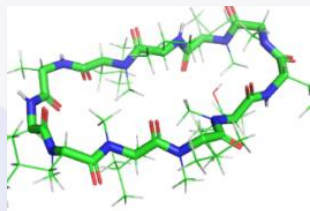
～中分子環状ペプチド（中分子医薬候補）の絞込み～

■粗視化モデル^{*})を用いたデジタルアニーラによる安定構造探索（粗い絞込み）

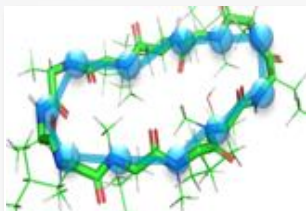
アミノ酸間の相互作用をモデル化、DAで安定構造探索

■デジタルアニーラで絞り込まれた粗視化モデルを全原子モデルに自動変換するしHPCで構造探索

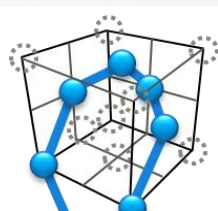
*:粗視化モデル：複数の原子を1つの粒子でまとめて表現する分子モデル



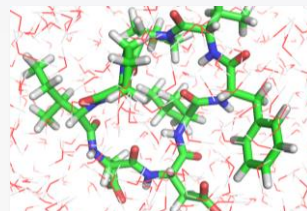
環状ペプチドの
アミノ酸配列情報



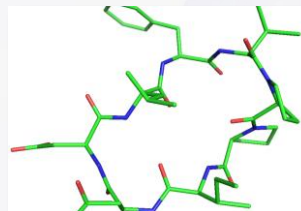
アミノ酸で纏めた
粗視化



デジタルアニーラ
による構造探索
(格子モデル)



HPCによる
構造探索

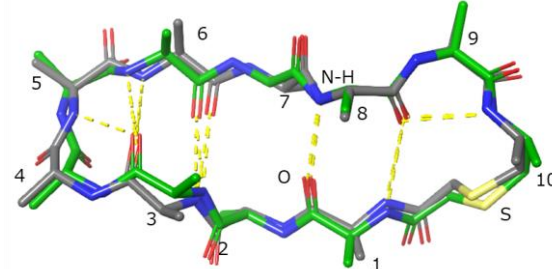


安定構造

デジタルアニーラとHPCの連携計算により
高速かつ高精度な中分子安定構造探索を実現

不可能であった中分子創薬の 計算を高精度で実現！

- ✓ **驚異的な精度**で実験構造と計算構造を一致させることに成功。中分子医薬候補探索の飛躍的な効率化を実現
- ✓ 環状ペプチドの安定構造を、**一晩で高精度に計算**することに成功
- ✓ ペプチドリームの**新型コロナウイルス感染症治療薬**の開発に適用し、**新薬の開発を加速**。医療分野における社会問題の早期解決に貢献



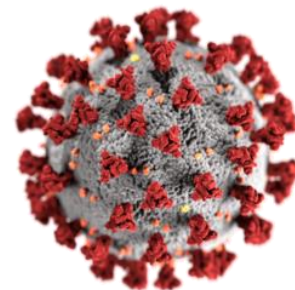
FUJITSU

緑色：計算結果
灰色：実験結果

環状ペプチドの実験構造と計算構造の比較

**RMSD : 0.73 Å の驚異的な精度で
実験構造と計算構造が一致**

RMSD(Root Mean Square Deviation)：平均二乗偏差



**新型コロナウイルス感染症治療薬を
含む、新薬の開発を加速**

デジタルアニーラで不可能を可能に

FUJITSU

創薬・材料

中分子医薬
安定構造探索

材料探索
(電池、混合物)

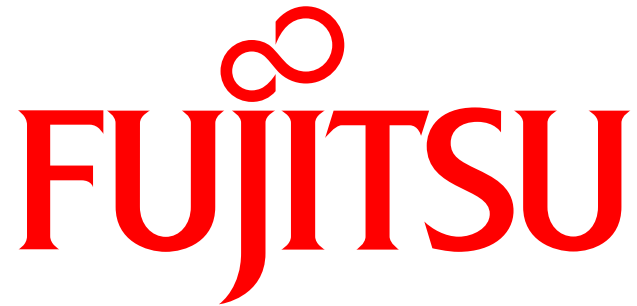
デジタルアニーラ

デジタルアニーラで不可能を可能に

社会課題の解決を目指して



デジタルアニーラ



shaping tomorrow with you