

Expert Insights

ライフサイエンス 分野での量子 コンピューティング のユースケースの 探求

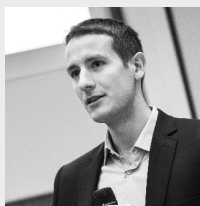
ゲノム、医薬品、タンパク質に
隠された秘密の解読



IBM Institute for
Business Value



専門家



Frederik Flöther博士

ライフサイエンスおよびヘルスケア、
リーダー
IBM Quantum Industry Consulting
IBM Services
[linkedin.com/in/frederikfloether](https://www.linkedin.com/in/frederikfloether)
frederik.floether@ch.ibm.com

Frederik Flötherは、IBM Quantum Industryのコンサルタントであり、ライフサイエンスおよびヘルスケア分野の取り組みをグローバルに牽引している。また、IBM Academy of Technologyのメンバーであり、シニア・インベンターも務めている。量子コンピューティングとAIに関して深い専門性があり、これら次世代テクノロジーによる価値の創造にお客様とともに取り組んでいる。これまでに20件以上の特許案、審査済み文献、ホワイト・ペーパーを執筆している。



Christopher Moose

ライフサイエンスおよびヘルスケア、
パートナー
IBM Services
[linkedin.com/in/chrismoose](https://www.linkedin.com/in/chrismoose)
chris.moose@us.ibm.com

Christopher Mooseは、IBMのヘルスケアおよびライフサイエンス関連業界のパートナーである。20年にわたり40カ国以上で企業にアドバイスを提供し、その運営を支えてきたグローバルな経験を持つ。非営利の児童福祉団体の理事長を務めることで、ヘルスケア事業の提供に直接的にかかわった経験もある。



Ivano Tavernelli

量子シミュレーション先進アルゴリズム、
グローバル・リーダー
IBM Research
[linkedin.com/in/tavernelli-ivano-1b788086](https://www.linkedin.com/in/tavernelli-ivano-1b788086)
ITA@zurich.ibm.com

Ivano Tavernelliは、2014年からIBM Research—Zurichのコグニティブ・コンピューティングおよび業界ソリューション部門の研究スタッフ・メンバーを務めている。2018年に、量子シミュレーション先進アルゴリズムのIBMグローバル・リーダーに着任した。化学、物理学、材料科学、最適化の問題における量子シミュレーションと量子アプリケーションを担当している。また、IBMのソフトウェア・プラットフォーム、Qiskit Aqua Chemistry and Physicsの開発リーダーも務める。超電導回路に基づく最先端の量子デバイス用の効率的な量子アルゴリズムの設計に重点的に取り組んでいる。

本レポートの作成にあたり、ご協力いただいたPanagiotis Barkoutsos博士、Wendy Cornell博士、Kayla Lee博士の各氏に感謝いたします。

量子コンピューティングの特長はその計算速度だけではない。各問題に異なるアプローチで取り組み、すべてではないにしろ、現時点で不可能と思われることを可能にしてしまうことである。

要点

困難とされる問題を解決する

量子コンピューティングは今後、かつては解決不可能と考えられていた数々の問題を解決するために、新しい分野の専門家とアプリケーション開発者によって広く利用されるようになるだろう。

ライフサイエンスにおける革新的なユースケース

ライフサイエンス産業における量子コンピューティングの適用可能性として、ゲノムとアウトカム(遺伝子に起因する変化、出力、遺伝子産物、容態)とを結び付け、創薬を促進し、タンパク質立体構造予測を改善することで、幅広い革新的なユースケースを実現することが期待されている。

今こそ行動のとき

量子コンピューティングはライフサイエンスに大きく貢献する可能性がある。しかし、量子コンピューティングの初期の知的財産の多くが独占される可能性を見据えて、パートナーやエコシステムとの協力を進めることが重要になっている。

不可能を可能に

周知の事実ではあるが、量子コンピューターは、古典コンピューターよりも効率的な処理ができる。量子コンピューターは、それほど重要な事業インパクトをもたらすことができるのか? また、そもそもなぜ量子コンピューターのような先進的なコンピューターの適用が必要なのか?

ライフサイエンスにおける主要な課題には、遺伝子配列、遺伝子構造、遺伝子機能間の関係性と、生体高分子間および生体高分子もしくは低分子(元来体内に存在するタンパク質や医薬品に含まれる成分など)間の相互作用メカニズムの解明がある。これらの問題は複雑な計算を必要とし、ゲノム解析、医薬品設計、タンパク質立体構造予測の中核を為すテーマである。

医薬品設計を例に挙げる。例えば、たった10種類の原子を50個組み合わせると構成される分子は、およそ 10^{50} 通りとなる。¹ 室温で採取可能な分子の立体配置と立体配座も考慮に入れる場合、医薬品の有効な構成要素となりうる分子の総数は約 10^{80} 個とされており、観測可能な宇宙に存在する原子の数を何十倍も上回る。これほど高い水準の複雑な世界に対応するには、古典コンピューターの演算能力ではとても及ばないが、量子コンピューターの活用で活路を見出せる可能性がある。

有名な物理学者Richard Feynmanは1980年代に「自然のシミュレーションを行おうとするなら、量子力学的に行った方がよいだろう。」と提案した。² 量子コンピューティングは、それぞれの問題に古典コンピューターとは異なる方法で取り組み、すべてではないにしろ、不可能と思われることを可能にするとされている。

洞察: ビットと量子ビット

量子コンピューターは、従来のコンピューターとは根本的に異なる方法で情報を処理する。集積回路などのこれまでのコンピューター・テクノロジーの進歩はより高速な計算を可能にしたが、それらはいずれも古典的な情報処理に基づいていた。量子コンピューターは量子ビットを操作する。0または1として情報を格納する古典ビットとは違い、量子ビットは、もつれなどの量子固有の特長を利用できる。その結果として、量子的現象を利用することができない古典コンピューターに比べて、優位性を持つ量子アルゴリズムを構築することが可能となる。

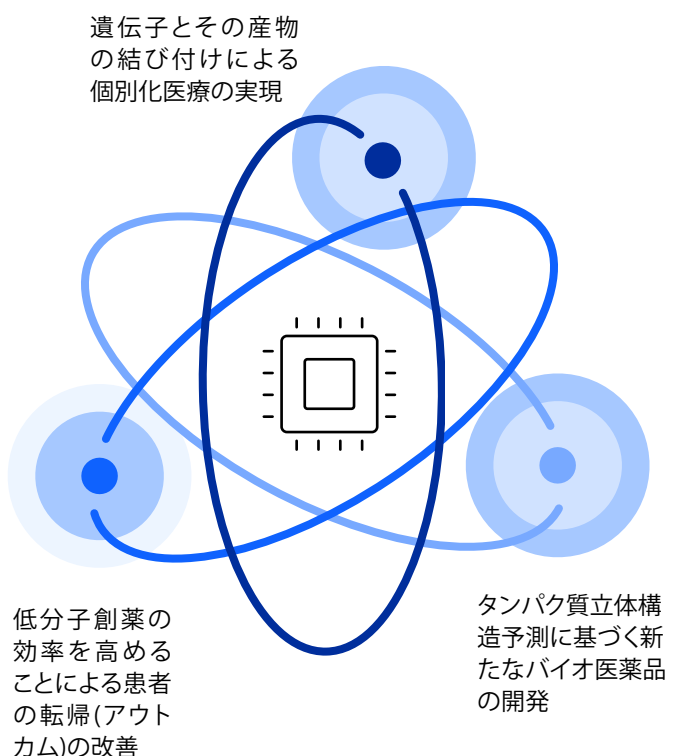
量子コンピューターは、以下が関与する問題に取り組むうえで特に有用となり得る。

- 化学、機械学習/人工知能、最適化、シミュレーションなどのタスク。実際に、機械学習は量子コンピューティングによって強化される可能性を示しており、既に量子の進歩を助けている⁴
- 内部で多くの電子の相互作用が起きている分子構造体のような、強固につながった多数の要素間の複雑な関連性と相互依存性に関するタスク
- 関連する古典的アルゴリズムに内在する量的な限界。例えば、古典的アルゴリズムのリソース必要量は、問題の規模に応じて指数関数的に増加する可能性がある。量子系の時間発展をシミュレーションする場合はその例である。⁵

こうした状況・背景に基づき、業界の垣根を越えた、量子アプリケーションをゴールとするレースが今始まっている。5年以内に、かつては解決不可能と考えられていた問題を解決するために、新しい分野の専門家とアプリケーション開発者によって量子コンピューティングが広く利用されるようになる可能性がある。³ ライフサイエンス業界では、既存の常識を打ち破るようなさまざまなユースケースが、量子コンピューティングにより可能になると期待されている。そうしたユースケースには、次のようなものがある。

1. ゲノムとアウトカム(治療/予防などの医学的介入から得られる成果)の結び付けによる個別化医療の実現
2. 低分子創薬の効率を高めることによる患者の転帰(アウトカム)の改善
3. タンパク質立体構造予測に基づく新たな生物学的製剤の開発(図1を参照)

図1: 量子コンピューターには、相互作用的に好循環を生み出す、3つの重要なライフサイエンス業界のユースケースを実現する可能性がある



研究の焦点は、いかにしてゲノム配列が機能を発現するようになるかをより詳細に解明するために、新しい演算ツールである量子コンピューティングの利点を活用することにシフトしている。

ユースケース1: 遺伝子とその産物の結びつけによる個別化医療の実現

ヒトゲノムの正確な配列の解析に15年の歳月と27億ドルの投資が費やされ、後に配列解析にかかるコストが下がったことは、「〜ミクス」時代の到来をもたらした。⁶ その結果、ゲノムの一次配列を理解することはもはや科学者にとって大きな制約ではなくなった。代わりに、研究の焦点は、ゲノム配列からタンパク質の機能を推定しより深く理解できるよう、新しい演算ツールの利点を活用することにシフトしている。しかし、ヒトゲノムの規模(およそ30億のDNA塩基対)、個体群の中に存在する多様性、健康状態(アウトカム)が広範囲を表す指標のため、従来のアプローチによる研究は限界があるとされている。⁷

ゲノミクスと量子コンピューティングの関わりとして、次のような機会があると考えられる。⁸

- モチーフの発見と予測⁹: DNA、RNA、アミノ酸の配列はすべて選択圧を通じて形成されてきた。生物情報科学の課題の1つとして、これらの配列中のモチーフ(遺伝子発現を活性化または抑制するパターンなど)を特定し、それによって、遺伝子調節のメカニズムを解き明かそうというものだ。モチーフを特定するための古典的なアルゴリズムは計算コストが高い。その理由として、これらのアルゴリズムでは、存在するゲノムの長さの中で考えられるあらゆる配列をしらみつぶしに調べていかなければならないからだ。

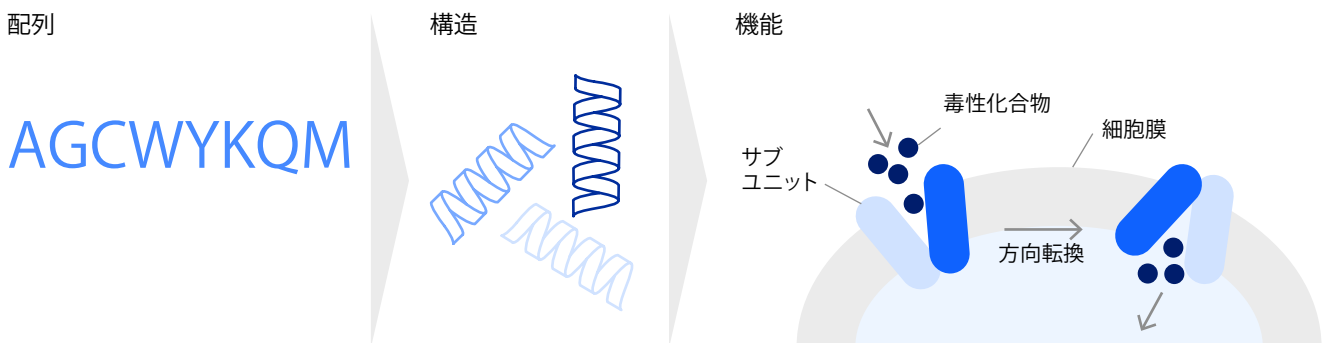
量子コンピューティングから得られる新たな洞察は、転写因子結合とDe Novoアセンブリに対する理解をさらに深めてくれるだろう。

- ゲノムワイド関連解析(GWAS: Genome-wide association studies)¹⁰: GWASの目的は、特定の形質または疾病とDNA内で起きる特定の変異の間の関連性を発見することである。現在、その性質上高次元なデータ解析を必要とするものであり、計算の実行が困難である。そこで、量子コンピューティングの可能性に注目が集まっている。実験にて検証が必要とされる遺伝子の候補数は一般に膨大とされているが、この候補数を量子コンピューティングによって大幅に絞り込める可能性が期待されている。量子コンピューティングは、遺伝子調節ネットワーク解析とグラフ構造の分野にも発展をもたらす可能性がある。
- De Novo構造予測¹¹: ゲノム配列解析情報や関連技術の飛躍的な進歩に伴い、ゲノム配列から分子構造、さらには機能への翻訳過程、ますます複雑さを増している(図2参照)。ホモロジー・モデルなどの洗練されたアプローチは存在しているが、De Novo構造を予測する古典的なアプローチの多くは、実際の解析に対する適応が難しいとされている。¹² 例えば、理論的に存在しうるタンパク質構造の探索空間は、タンパク質の大きさによって指数関数的に増加する(ユースケース3を参照)。量子コンピューティングはRNA分子、タンパク質、DNA-タンパク質複合体などの構造予測精度を劇的に向上させる可能性を秘めている。

—

図2:

タンパク質の配列-構造-機能は、生物学研究の根幹をなす原理原則である



量子コンピューティングには、 創薬にてこれまでにない多くの アプリケーションをもたらす 可能性がある。

こうした進歩によって、いずれは強力なデジタル・ツイン・モデルのビジョンを実現できる可能性がある。¹³ 特定の薬剤に対して個人の長期的反応を予測するような、個別化医療の発展へと寄与するために、薬理遺伝学検査にて有機体を表すデジタル・ツインが使用されるようになるかもしれない。さらに、作業手順、必要人員数、設備配置、機材などの諸条件を考慮した、ストレステストを通じた研究施設や医療施設の活動全体を最適化するために、無生物のデジタル・ツインが作成されることも考えられる。医療チームが患者に「あなたのゲノムによれば、あなたの治療結果は具体的にはこうなるはずです」と言える日が来るということも、まったく実現不可能な話とはそのうち思われなくなるだろう。

ユースケース2: 低分子創薬の効率を高めることによる患者の転帰(アウトカム)の改善

低分子医薬品設計と低分子創薬は、常に複雑な最適化を必要とするプロセスである。その目標は、疾病に関連する標的に対して活性を持つ新しい分子を設計しつつ、副作用と危険な毒性の回避を目的とした体内の何千という他の標的に対する活性の低減により、患者の転帰(アウトカム)を改善することにある。この目標に向かって、通常は200,000個~10⁶個以上の化合物が実験と演算シミュレーションの過程にて一次スクリーニングされ、数千個の化合物が生産された後、必要とされている試験一式を行う。¹⁴ 主にこの領域では、スクリーニングと詳細な3D構造に活用される分子構造の類似度算出/分類のアプローチと、標的ベースの分子化合物設計に活用される精緻な分子エネルギー計算にて、古典コンピューターが長年にわたり利用されてきた。

量子コンピューティングには、創薬にてこれまでにない多くのアプリケーションをもたらす可能性がある。¹⁵ 量子コンピューティングの活用によって多くの薬の候補に相当する分子をより評価し、例えばリード化合物の発見やオフターゲットのスクリーニングに適用されている分類方式を使用して、上記に相当する候補分子をより精緻な評価できる可能性がある」と期待

されている。リード化合物発見のハイスループット・タスクやリード化合物最適化におけるオフターゲットのモデリングに関連した分類、および、3Dタンパク質構造単位での最適なモデル探索/選択(リード化合物の最適化)にて活用されるモデリング及び分類にも効果をもたらすのではないかと期待されている。

候補として考えられる低分子は膨大な数に上るため、より多くの分子を探索する能力が重要となる。通常はごく一部の低分子だけが検討される。実際、生体に近い分子量を持つとされる炭素系化合物の総数は10⁶⁰個程になる。¹⁶ こうした化学的環境の効果的な探索は、大きな可能性を秘めている。それは、現在「オンデマンド(古典コンピューター)」合成で獲得可能な巨大な有機低分子化合物のライブラリをより正しく評価できるようになる。¹⁷

タンパク質リガンド複合体の分子動力学シミュレーションを通じて、分子化合物の評価の精緻化が実現されると期待されている。このような領域にて、量子コンピューティングは、量子力学/分子力学の併用・応用と、古典的コンピューター上に存在する基本パラメーターの導出のための強力な武器となり得るであろう。さらに、リード化合物の最適化にも、成長分野である計算化学(医薬品製造での生体触媒作用に資する酵素反応性と立体選択性のモデリングなどに活用)への応用も期待されている。¹⁸

ユースケース3: タンパク質立体構造予測に基づく新たなバイオ医薬品の開発

低分子医薬品とは対照的に、バイオ医薬品ではタンパク質などの高分子が薬剤となる。抗体、インシュリン、および多くのワクチンなどのバイオ医薬品が数十年にわたって使用されてきた。¹⁹ 近年は、複数の疾病の治療を見据えて、バイオ医薬品に着目する製薬会社が増えてきている。バイオ医薬品の3D構造設計は、分子作用、分子の選択性、分子の安定性にとって重要な役割を担っている。²⁰

Levinthalのパラドックスで説明されているように、実世界のタンパク質モデリングのケースでは、理論上存在する膨大な数の構造パターンの探索が必要となる(図3を参照)。²¹ 理論上存在する配座の数はタンパク質の鎖の長さによって指数関数的に増加し、その構造を古典コンピューター上で特定することは難しいとされている。例えば、1つのモデルで、20個のアミノ酸の鎖に存在する配座は 10^9 通りであり、60個のアミノ酸の鎖と100個のアミノ酸の鎖で存在する配座はそれぞれ 10^{28} 通りと 10^{47} 通りである。²² しかも、FDAのバイオ医薬品の定義によれば、タンパク質は40個以上のアミノ酸で構成されている必要がある。²³

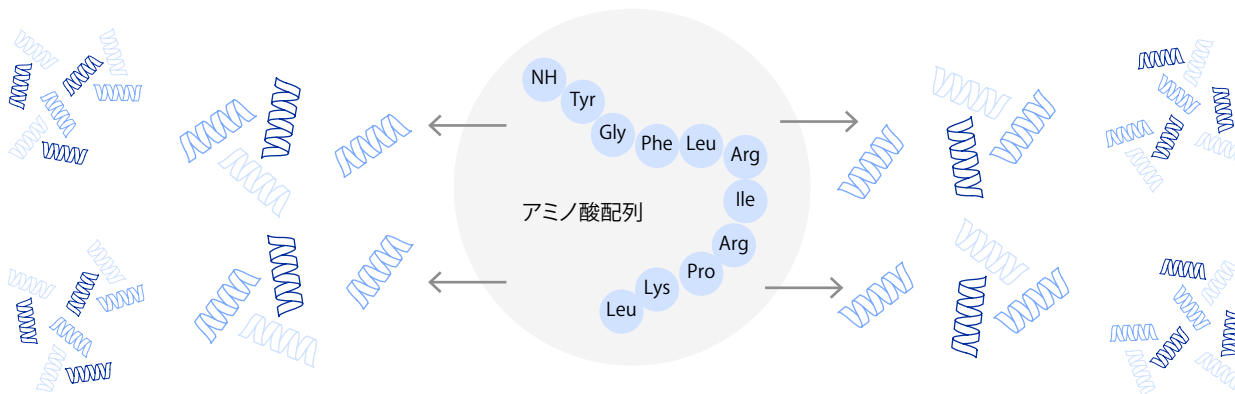
多くのタンパク質は既知のタンパク質構造との類似性に基づき的確にモデリングできるが、バイオ医薬品の設計が困難とされながらも、重要な標的は、抗体の相補性決定領域におけるH鎖のH3ループ構造(H鎖は可変構造をとる)である。このループには通常3~20個、あるいはそれ以上の残基が含まれ

るが、こうした残基の分子構造をいかに正確に表現するかが既存研究において一つの大きなテーマとなってきた。²⁴

量子コンピューティングは、タンパク質立体構造予測における計算上の課題を克服する可能性がある。そうした課題とは、例えば、理論上存在する膨大なタンパク質の候補の中から、各タンパク質の構造をスコアリングすることで、最も確からしいタンパク質構造を特定することなどが挙げられている。また、最近の文献では、格子状にある2つの一般的な配座(α ヘリックスと β シート)のペプチドを量子コンピューティングによってスコアリングできることが証明され、タンパク質構造の探索に量子アルゴリズムの活用可能性が示唆されている。²⁵ 併せて、この文献には、量子コンピューティングがタンパク質の力場計算を劇的に向上させる可能性があることも示されている。²⁶ 今後、Quantum Volume(量子ボリューム)の増加に伴い、より多くの配座のスコアリングを行うための量子コンピューティングの能力は向上すると期待されている。²⁷

図3:

Levinthalのパラドックス – アミノ酸の数がわずか100個のタンパク質でさえ、それに考えられる配座はおよそ 10^{47} 通りにも及ぶ。にもかかわらず、現実世界では数秒のうちに多くのタンパク質がそれぞれの構造に自然と折り畳まれる。



本レポートで取り上げた、今後実現が期待されている量子コンピューティングのあらゆるアプリケーションと同様に、量子コンピューティングは直接関係を持たない他分野にて新たなユースケースを実現させる可能性がある。例えば、バイオ医薬品は低分子薬剤よりも遥かに不安定な分子構造を有する傾向にある。バイオ医薬品のサプライ・チェーン、つまり、製造～出荷～薬局・病院・家庭への配送という物流での最適化は複雑なプロセスになるが、これもまた量子コンピューティングの適用によって最適化が実現される可能性がある。²⁸

基礎研究から臨床研究で期待されている多様な量子コンピューティングの活用可能性

ライフサイエンス業界では、量子コンピューティングから大きな恩恵を受ける可能性がある。低コストで効率的なシーケンス解析の普及といったトレンドと「～ノミクス」時代の到来により、ライフサイエンス業界の企業は、多様性を有する新たなデータ・ソースの活用を模索している。さらに、様々な業界の中でもライフサイエンス業界は、将来の量子コンピューティングの活用により、人類が最も恩恵を受ける可能性が高い領域の1つとされている。

量子コンピューティングのユースケースの探求と実装は、ハードウェアと量子アルゴリズムの一層の科学的進歩と相まって、今後数年のうちに可能性レベルから現実で活用可能なレベルに変わるのではないかと期待されている。大手のライフサイエンス企業や製薬会社などは、クオンタムアドバンテージを目指す取り組みを既に着手している。

推奨アプローチ

ライフサイエンス業界における量子コンピューティングのユースケースの探求

量子コンピューティングには、今までの古典コンピューターとは異なる考え方、強く求められている新しいスキル・セット、特別なITアーキテクチャー、新しい企業戦略が必要である。本レポートで説明されている能力と恩恵の一部を、有力競合他社が手に入れたとしたらどうなるか想像してほしい。というのも、特に量子コンピューティングの初期の知的財産の多くは特許化などで独占される可能性がある。これこそが、様々な標準も戦略もユースケースもエコシステムもまだ開発中である今から、量子コンピューティング活用に向けた取り組みに着手しなければならない理由である。

では、ライフサイエンス組織はどのように量子コンピューティングを開始できるか? 重要な最初の手順は次の3つである。

1.アプリケーションの探求

まず、社内の量子コンピューティングに最も詳しい人物を見つけ、その人に実際の量子コンピューターを試用させ、自社事業に活用可能な量子コンピューティングのアプリケーションを探索させる。量子コンピューティングの責任者を、事業部長、技術部門長(イノベーション/技術活用の責任者)および企画/販売戦略担当者から構成される量子コンピューティング・ステアリングコミッティに帰属させ、最も重要な問題に取り組めるよう支援する。

2.ユースケースの事業上の優先順位付け

量子コンピューティングの各ユースケースで事業優位性の獲得可能性を見極めて、各ユースケースに優先順位を付ける。事業優位性の評価においては、組織が注力している疾患領域、組織の事業戦略、関連する顧客価値提供、将来の成長計画を踏まえる。量子アプリケーション開発の進行状況を管理して、すぐにでも実用化可能なユースケースを特定する先駆者であり続ける。

3.エコシステムの活用

最後に、研究所、学術機関、技術プロバイダー、アプリケーション開発者、スタートアップ企業などが参加する新たな量子コンピューティングのエコシステムとパートナーを組むことが重要である。自社のニーズに固有な量子アルゴリズムの開発・実行するため、可能な量子コンピューティングのあらゆる技術スタックに即座にアクセスできるようにする。これによって、エコシステム・パートナー側と適切な連携を図りながら、量子コンピューティング関連技術のブレイクスルーの探索・研究が可能となる。

注釈および出典

- 1 Bohacek, Regine S., Colin McMartin, Wayne C. Guida. "The art and practice of structure-based drug design: A molecular modeling perspective." *Medicinal Research Reviews*. January 1996. https://azevedolab.net/resources/The%20art%20and%20practice%20of%20structure-based%20drug%20design_%20A%20molecular%20modeling%20perspective.pdf
- 2 Feynman, Richard P. "Simulating Physics with Computers." *International Journal of Theoretical Physics*. May 7, 1981. <https://catonmat.net/ftp/simulating-physics-with-computers-richard-feynman.pdf>
- 3 "5in5: Five innovations that will change our lives within five years." IBM. 2019. <https://www.research.ibm.com/5-in-5/quantum-computing>
- 4 Havlíček, Vojtěch, Antonio D. Córcoles, Kristan Temme, Aram W. Harrow, Abhinav Kandala, Jerry M. Chow, Jay M. Gambetta. "Supervised learning with quantum-enhanced feature spaces." *Nature*. March 13, 2019. <https://arxiv.org/pdf/1804.11326.pdf>; Carleo, Giuseppe, Matthias Troyer. "Solving the Quantum Many-Body Problem with Artificial Neural Networks." *Science*. February 10, 2017. <https://arxiv.org/pdf/1606.02318.pdf>
- 5 Montanaro, Ashley. "Quantum algorithms: an overview." *Nature*. January 12, 2016. <https://www.nature.com/articles/npjqi201523>
- 6 Tirrell, Meg. "Unlocking my genome: Was it worth it?" *CNBC*. December 14, 2015. <https://www.cnbc.com/2015/12/10/unlocking-my-genome-was-it-worth-it.html>; Kandpal, Raj P., Beatrice Saviola, Jeffrey Felton. "The era of 'omics unlimited." *Future Science*. April 25, 2018. <https://www.future-science.com/doi/full/10.2144/000113137>
- 7 Copeland, Libby. "You Can Learn a Lot About Yourself From a DNA Test. Here's What Your Genes Cannot Tell You." *Time*. March 2, 2020. <https://time.com/5783784/dna-testing-genetics>
- 8 Emani, Prashant S., Jonathan Warrell, Alan Anticevic, Stefan Bekiranov, Michael Gandal, Michael J. McConnell, Guillermo Sapiro, Alán Aspuru-Guzik, Justin Baker, Matteo Bastiani, Patrick McClure, John Murray, Stamatis N. Sotiropoulos, Jacob Taylor, Geetha Senthil, Thomas Lehner, Mark B. Gerstein, Aram W. Harrow. "Quantum Computing at the Frontiers of Biological Sciences." 2019. <https://arxiv.org/ftp/arxiv/papers/1911/1911.07127.pdf>
- 9 Zambelli, Federico, Graziano Pesole, Giulio Pavesi. "Motif discovery and transcription factor binding sites before and after the next-generation sequencing era." *Briefings in Bioinformatics*. April 19, 2012. <https://academic.oup.com/bib/article/14/2/225/208333>
- 10 "Genome-Wide Association Studies Fact Sheet." National Human Genome Research Institute August 27, 2015. <https://www.genome.gov/about-genomics/fact-sheets/Genome-Wide-Association-Studies-Fact-Sheet>
- 11 Das, Rhiju, David Baker. "Automated de novo prediction of native-like RNA tertiary structures." *PNAS*. September 11, 2007. <https://www.pnas.org/content/pnas/104/37/14664.full.pdf>
- 12 Muhammed, Muhammed Tilahun, Esin Aki-Yalcin. "Homology modeling in drug discovery: Overview, current applications, and future perspectives." *Chemical Biology & Drug Design*. September 6, 2018. <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1111/cbdd.13388>

- 13 Fuller, Aidan, Zhong Fan, Charles Day, Chris Barlow. "Digital Twin: Enabling Technology, Challenges and Open Research." *Deep AI*. October 29, 2019. <https://arxiv.org/pdf/1911.01276.pdf>
- 14 Hughes, JP, S Rees, SB Kalindjian, KL Philpott. "Principles of early drug discovery." *British Journal of Pharmacology*. November 22, 2010. <https://bpspubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1111/j.1476-5381.2010.01127.x>
- 15 Cao, Yudong, Jhonathan Romero, Alán Aspuru-Guzik. "Potential of quantum computing for drug discovery." *IBM Journal of Research and Development*. November–December 1, 2018. <https://ieeexplore.ieee.org/document/8585034>
- 16 Dobson, Christopher M., "Chemical space and biology." *Nature*. December 15, 2004. <https://www.nature.com/articles/nature03192>
- 17 Lyu, Jiankun, Sheng Wang, Trent E. Balius, Isha Singh, Anat Levit, Yurii S. Moroz, Matthew J. O'Meara, Tao Che, Enkhjargal Algaa, Kateryna Tolmacheva, Andrey A. Tolmachev, Brian K. Shoichet, Bryan L. Roth, John J. Irwin. "Ultra-large library docking for discovering new chemotypes." *Nature*. February 6, 2019. <https://www.nature.com/articles/s41586-019-0917-9>
- 18 Cao, Yudong, Jonathan Romero, Jonathan P. Olson, Matthias Degroote, Peter D. Johnson, Maria Kieferova, Ian D. Kivlichan, Tim Menke, Borja Peropadre, Nicolas P. D. Sawaya, Sukin Sim, Libor Veis, Alan Aspuru-Guzik. "Quantum Chemistry in the Age of Quantum Computing." *Chemical Reviews*. August 30, 2019. <https://arxiv.org/pdf/1812.09976.pdf>
- 19 Middaugh, C.R., R. Pearlman. "Proteins as Drugs: Analysis, Formulation and Delivery." *Novel Therapeutics from Modern Biotechnology. Handbook of Experimental Pharmacology*, vol 137. https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-642-59990-3_3
- 20 Johnston, Sarah L. "Biologic therapies: what and when?" *Journal of Clinical Pathology*. March 2007. <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC1860592>
- 21 Levinthal, Cyrus, "How to fold graciously." *Mössbaun Spectroscopy in Biological Systems Proceedings*. 1969. https://www.cc.gatech.edu/~turk/bio_sim/articles/proteins_levinthal_1969.pdf
- 22 Zanzig, Robert, Attila Szabo, Biman Bagchi. "Levinthal's paradox." *Proceedings of the National Academy of Science*. October 7, 1991. <https://www.pnas.org/content/pnas/89/1/20.full.pdf>
- 23 Mezher, Michael. "FDA Finalizes 'Biological Product' Definition Ahead of BPCIA Transition." *Regulatory Focus*. February 20, 2020. <https://www.raps.org/news-and-articles/news-articles/2020/2/fda-finalizes-biological-product-definition-aea>
- 24 Marks, C., C.M. Deane. "Antibody H3 Structure Prediction." *Computational and Structural Biotechnology Journal*. January 24, 2017. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2001037016301118>
- 25 Robert, Anton, Panagiotis Kl. Barkoutsos, Stefan Woerner, Ivano Tavernelli. "Resource-Efficient Quantum Algorithm for Protein Folding." August 6, 2019. <https://arxiv.org/pdf/1908.02163.pdf>
- 26 Mishra, Anurag, Alireza Shabani. "High-Quality Protein Force Fields with Noisy Quantum Processors." October 29, 2019. <https://arxiv.org/pdf/1907.07128.pdf>
- 27 Chow, Jerry, Jay Gambetta. "Quantum Takes Flight: Moving from Laboratory Demonstrations to Building Systems." *IBM*. January 8, 2020. <https://www.ibm.com/blogs/research/2020/01/quantum-volume-32>
- 28 "Transparency19: The future of freight is here." *Shipwell*. May 14, 2019. <https://shipwell.com/company-news/transparency-2019-wrap-up>

日本語翻訳監修

櫻井亮

日本アイ・ビー・エム株式会社 戦略コンサルティング & デザイン統括
コンサルタント

IBM Quantum Ambassador

専門は、事業戦略策定、新規事業構想、テクノロジー・アナリティクスを活用した新規事業の実行支援。これまでに、製造(自動車、総合電機、機械、素材)、ヘルスケア(製薬)、金融業界における、デジタル化に係る事業戦略策定、新規事業構想、業界横断のビジネスアレンジメント、テクノロジー・アナリティクスを活用した新規事業の各種実行支援等のプロジェクトに参画。

特に、事業戦略と最先端テクノロジーの融合を興味領域として、高い専門性を発揮している。そのため、直近は、量子コンピューティングの業界ごとの適用可能性評価、量子コンピューティングを活用したユースケース検討、ロードマップの策定 等をテーマにしたプロジェクトを中心に参画している。工学士(B.Eng)。

連絡先: Ryo.Sakurai1@ibm.com

西林泰如

日本アイ・ビー・エム株式会社 戦略コンサルティング & デザイン統括
アソシエイト・パートナー

IBM Quantum Senior Ambassador / IBM Quantum CoC Japan Lead

総合電機メーカーR&D、米国系戦略コンサルティングファーム・グローバル戦略部門を経て、IBMへ参画。専門はビジネスとテクノロジー両輪に関する、経営企画・経営戦略、事業開発・事業戦略、提携・投資/M&A、海外進出(米国シリコンバレー、シンガポールでの5年超の駐在経験)、情報通信・インターネット技術(日米120 件超の特許筆頭発明)。IBMでは、Global Enterprise Strategy Group、および、Global Quantum CoC(Center of Competency)に所属。量子コンピューティングを中心に、IBMがリードする破壊的テクノロジーによる革新をテーマに、経営戦略・事業戦略、デジタル戦略、オペレーション戦略、組織チェンジ・マネージメント、テクノロジー・データ戦略 業務に従事している。工学修士(MEng)、および、経営管理修士(MBA)。

連絡先: yasuyuki.nishibayashi@ibm.com

橋本光弘

日本アイ・ビー・エム株式会社 戦略コンサルティング & デザイン統括
シニア・マネージング・コンサルタント

IBM Quantum Senior Ambassador / IBM Quantum CoC Japan
Co-Lead

日本学術振興会特別研究員(DC1)、国内大手電機メーカー研究員(中央研究所、米国研究所他)としてストレージ・デバイスの研究開発に従事。その後、米系戦略コンサルティング・ファームおよびIBMにて、電機・機械・エネルギー・金融業界のコンサルティング・プロジェクトに参画。専門領域は全社戦略(中期経営計画、ポートフォリオ戦略、シナリオ・プランニング)、新規事業戦略、M&A(ビジネス・デューデリジェンス、PMI)、オペレーション改革、組織再編。近年は、特にIoT・AI・ブロックチェーン等のテクノロジーを活用した新規事業戦略策定やオペレーション改革をテーマにしたプロジェクトを多数手掛けている。博士(工学)。

連絡先: hashimit@jp.ibm.com

土居遼太郎

日本アイ・ビー・エム株式会社 戦略コンサルティング & デザイン統括
コンサルタント

IBM Quantum Ambassador

専門は、事業戦略策定、新規事業立案、先端技術活用。これまでに、製造(自動車、総合電機)、ヘルスケア(製薬、医療機器)、金融、保険業界における、デジタル化に係る事業戦略策定、新規事業立案、業界横断のビジネスアレンジメント、実証実験推進支援等のプロジェクトに参画。近年は、量子コンピューティングを活用した業界ごとのユースケース検討、ロードマップ策定 等をテーマにしたプロジェクトを手掛けている。工学修士(MEng)。

連絡先: Ryotaro.Doi1@ibm.com

Expert Insightsについて

Expert Insightsは、ニュース価値の高いビジネスや関連テクノロジーのトピックについて、ソートリーダーの見解を伝えるレポートです。世界中の該当分野の優れた専門家との対話をもとに作成されます。詳しくは、IBM Institute for Business Value iibv@us.ibm.comまでお問い合わせください。

© Copyright IBM Corporation 2020

IBM Corporation
New Orchard Road
Armonk, NY 10504

Produced in the United States of America
April 2020

IBM、IBM ロゴ、ibm.comは、世界の多くの国で登録された International Business Machines Corp.の商標です。他の製品名およびサービス名等は、それぞれIBMまたは各社の商標である場合があります。現時点でのIBMの商標リストについては、www.ibm.com/legal/copytrade.shtml(US)をご覧ください。

本書の情報は最初の発行日の時点で最新ですが、予告なしに変更される場合があります。すべての製品が、IBM が営業を行っているすべての国において利用可能ではありません。

本書に掲載されている情報は特定物として現存するままの状態を提供され、第三者の権利の不侵害の保証、商品性の保証、特定目的適合性の保証および法律上の瑕疵担保責任を含むすべての明示もしくは黙示の保証責任なしで提供されています。IBM製品は、IBM 所定の契約書の条項に基づき保証されます。

本レポートは一般的なガイダンスを目的としています。入念な調査または専門家による判断の代用となることを意図していません。IBM は本資料に依拠する組織や個人によるいかなる損害についても責任を負いません。

本レポートで使用されているデータは、第三者を情報源とする場合があります。IBM はかかるデータを個別に検査、検証、または監査しません。かかるデータの使用による結果は現状のまま提供され、IBMはあらゆる明示または黙示の保証責任を負いません。

本書は英語版「Exploring quantum computing use cases for life sciences」の日本語訳として提供されるものです。