

# 量子シミュレーション手法を用いた Wnt シグナルとその 阻害剤における分子間相互作用の理解

令和7年12月12日

JHPC-quantum シンポジウム 2025

東京都 千代田区丸の内 鉄鋼ビルディング

大分大学医学部 ヘルスケア AI・データサイエンス学講座  
佐藤 昇

クオンティニュアム株式会社  
増井 陸、ピーダーセン 珠杏、山本 憲太郎

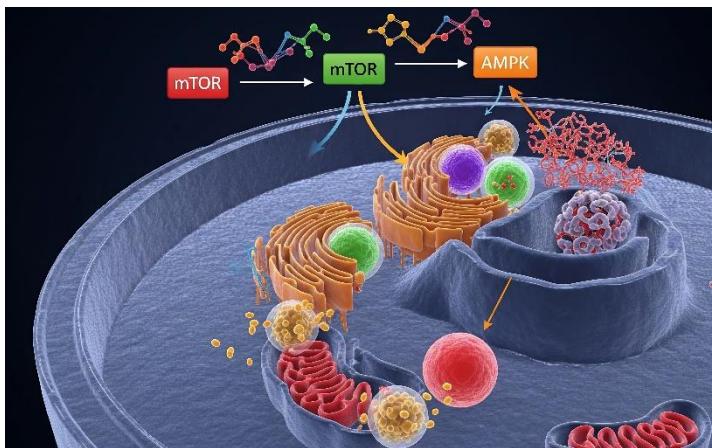
# 生命体を原子レベルで量子シミュレーションする

生体内では複数のシグナル伝達経路が時間・空間的に複雑に影響しあい遺伝子発現を制御する

原子レベルで生体分子を再構築することにより分子間相互作用の量子力学的シミュレーションができるか？

\*  
従来のQM/MM法を**量子コンピューティング/FMO法**として系全体を量子化学的に扱うことで飛躍的精度向上を目指す

疾患病態メカニズムの解明、新規治療法の開発、創薬基盤の確立へと発展させる

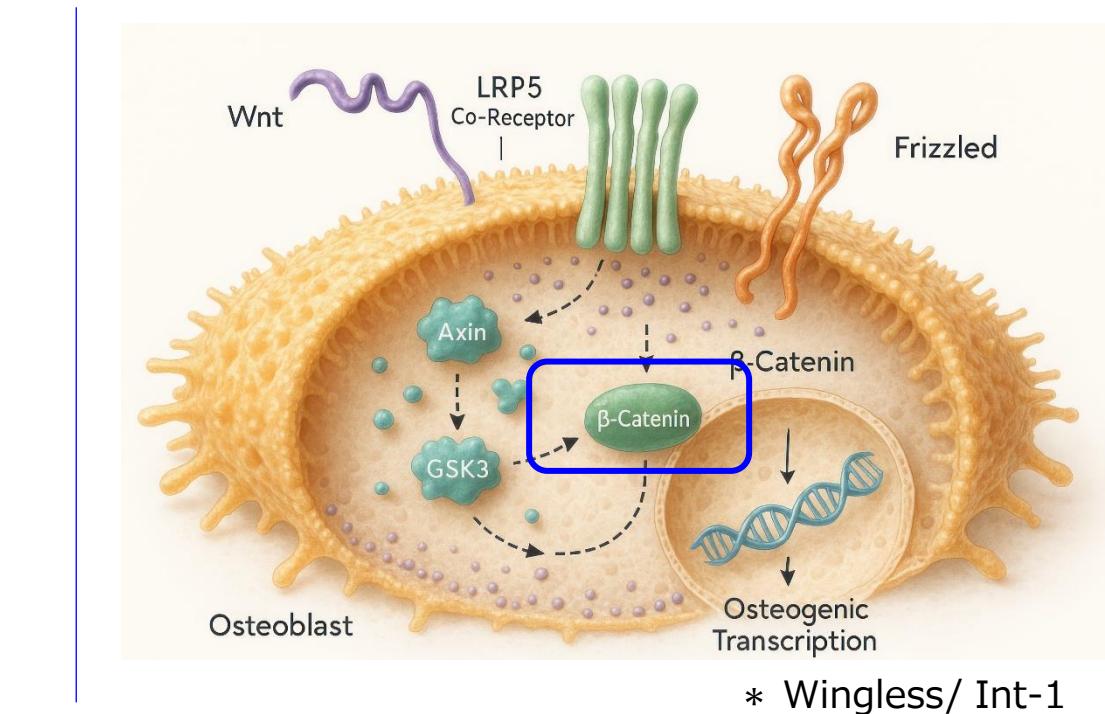
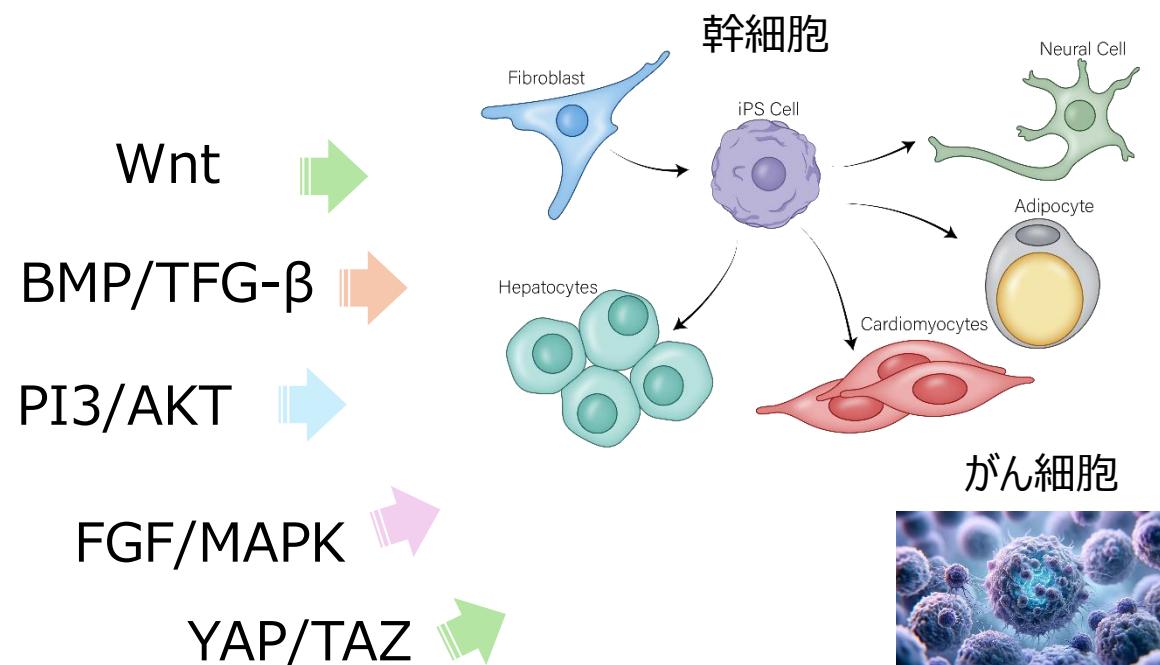


# Wnt シグナル伝達経路は幹細胞の機能を制御する

幹細胞は複数のシグナル伝達経路によりその機能が遺伝子発現を通じて制御されている

Wnt<sup>\*</sup> シグナル伝達経路は幹細胞の自己再生や分化、がん細胞の増殖をコントロールする

β-カテニンは Wnt シグナルの主要転写制御因子であるが特異的阻害剤開発は難航している



# 量子-HPC ハイブリッドシステムによる $\beta$ -カテニン分子メカニズムの解明

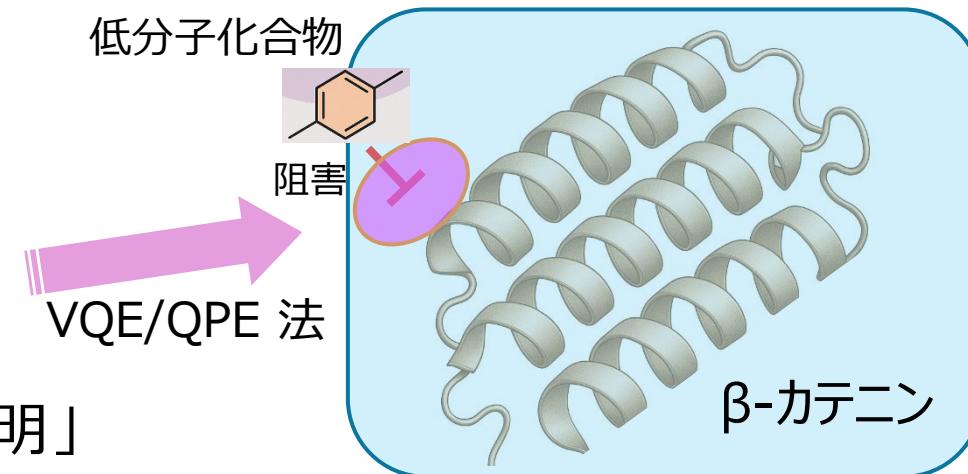
$\beta$ -カテニンと低分子阻害候補薬との相互作用を **量子コンピューティング/FMO法** で高精度解析を行なう

相互作用最重要部位を量子コンピュータで高精度計算、全体をFMO法 (HPC) で量子化学計算を実行

$\beta$ -カテニンと相互作用/機能阻害する化学構造を特定し解析することで病態解明や創薬基盤として応用



量子コンピュータ「黎明」



量子-HPC ハイブリッドシステム



スーパーコンピュータ「富岳」

VQE: Variational Quantum Eigensolver  
QPE: Quantum Phase Estimation

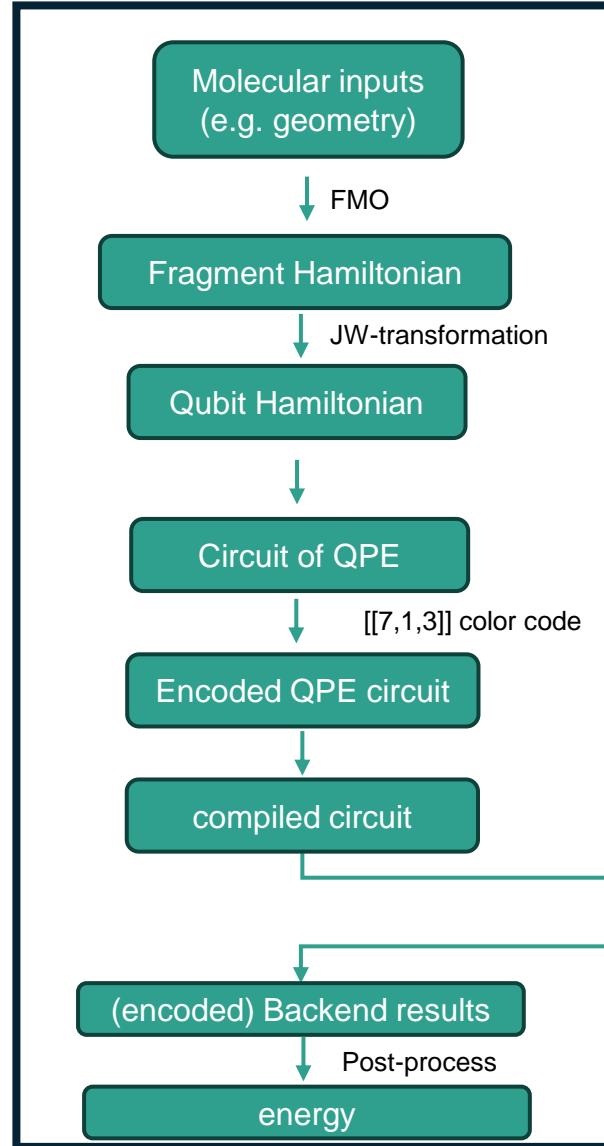
## “デモンストレーションのためのモデル系

低分子阻害候補薬st3\*と $\beta$ -カテニンの相互作用のうち化学反応を伴うものに注目し、モデル化

Unpublished results

# 量子-HPC ハイブリッドシステムを用いた計算のワークフロー

富岳



- Quantinuum社が開発したソフトウェアを使用

- Tierkreis**: ハイブリッドシステムのワークフローマネジャー
- InQuanto**: 量子計算化学パッケージ (QEC code, QPE algorithm etc.)

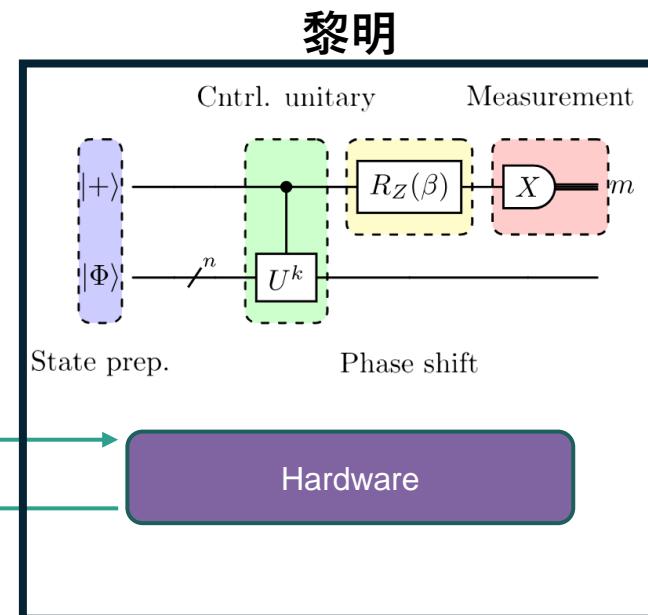
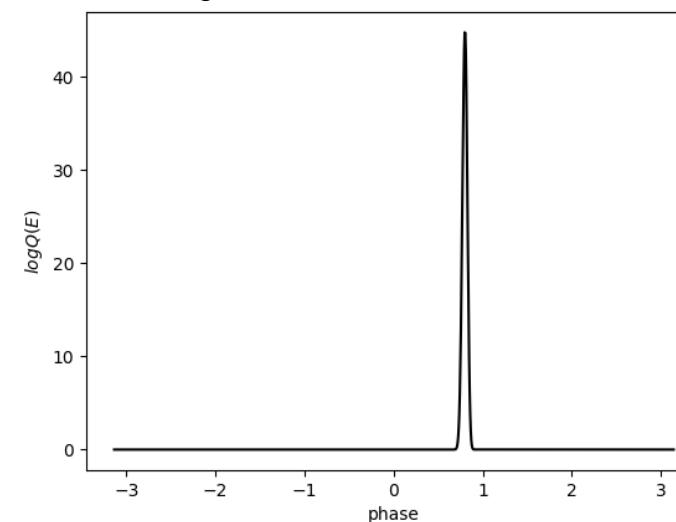


Fig. Result of QPE from Reimei



全shot数: 600  
HQCs: 737.56  
2量子ビットゲート: 62~502

Estimated g.s. energy: -1240.035330891748  
 $\sigma$ : 0.009254519016720699  
exact ROHF energy: -1240.0329392006208

# まとめとプロジェクトの進行状況

- ☑ 従来のFMO法では扱うことが難しいモデル系の選定

Molecular inputs  
(e.g. geometry)

↓ FMO

- ☑ 量子計算部分のワークフローの動作確認

Fragment Hamiltonian

Qubit Hamiltonian

- ▶ 富岳-黎明 ハイブリッドシステムを用いた実験

Circuit of QPE

⋮

- 分子全体の情報を入力として富岳上での大規模なFMO計算を含むハイブリッドシステム上の計算を目指す