

GPUイジングマシンを用いた分子設計技術

深層学習を用いて、ある物性を最適化する分子を設計する研究は盛んに行われている。その一つとして、Variational Autoencoderの潜在空間においてブラックボックス最適化を行う方法が広く使われているが、最適化の対象となる関数が非常に複雑なため、通常の最急降下法などでは、局所解に陥る危険がある。本研究では、潜在空間が二値変数となるbinary variational autoencoderを採用し、潜在空間でGPUイジングマシン(Fixstars Amplify)を適用することで、効率よく分子の設計ができることを示した。

Mao et al., Digital Discovery, 2023

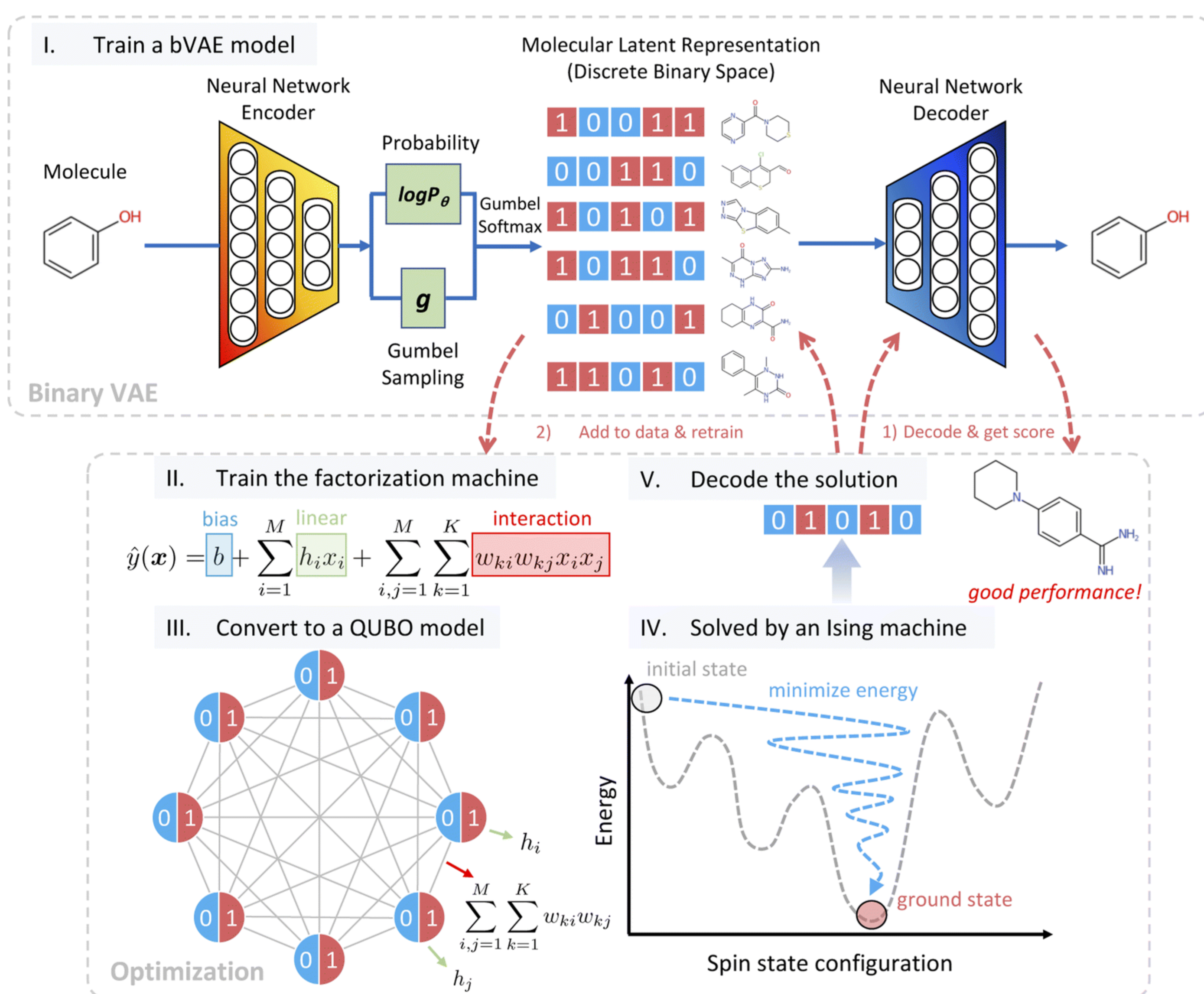


図: GPUイジングマシンを用いた分子設計

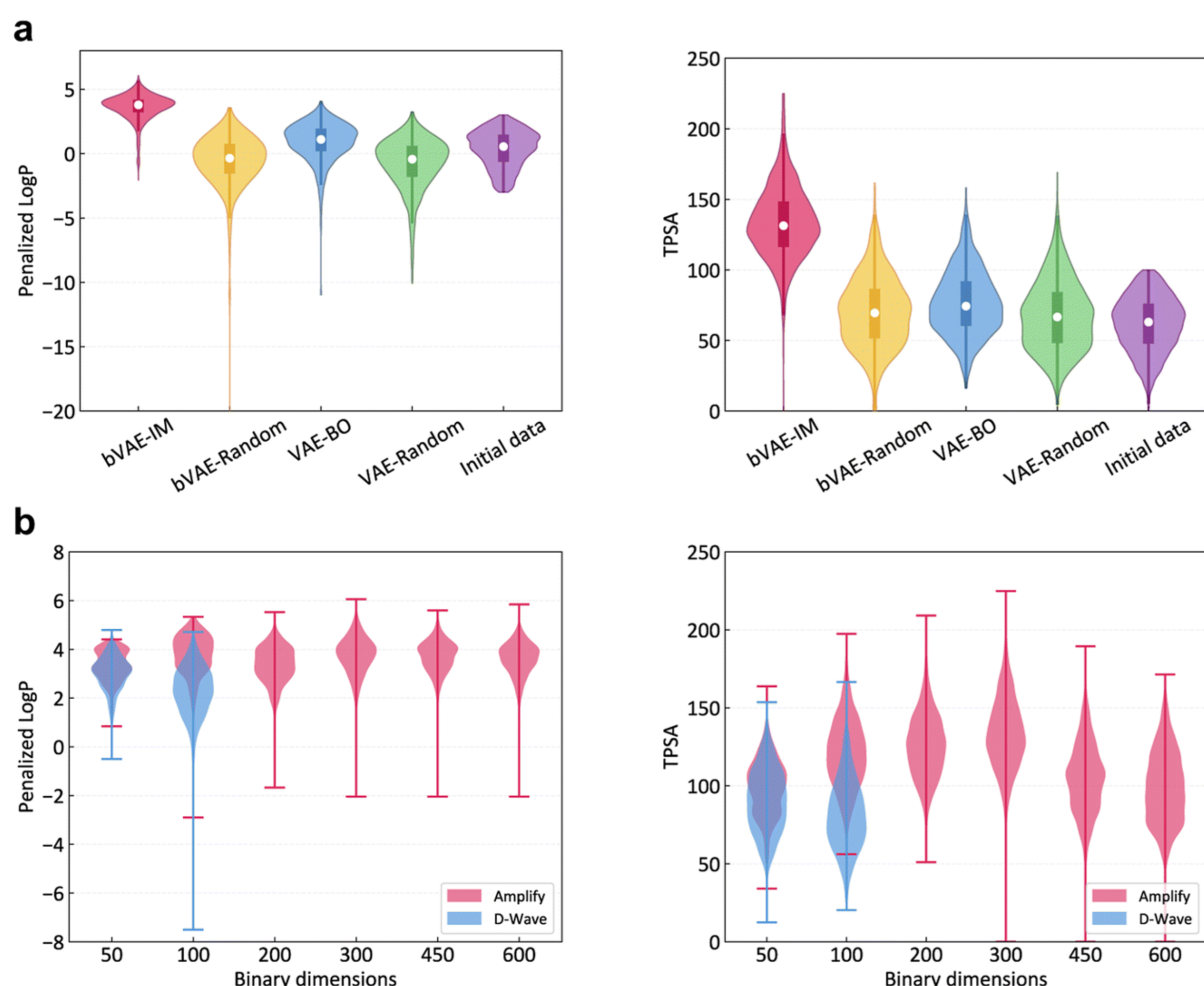


図: 提案手法(bVAE-IM)と他手法の比較

量子アニーラを用いたVHH抗体の開発

VHH抗体(variable domain of Heavy chain of Heavy chain antibody)とは、ラクダ科生物の結成中から見出された特殊な抗体の可変領域を利用したシングルドメイン抗体である。本研究では、D-wave量子アニーラと、深層学習を組み合わせることで、標的タンパク質galectin-3に結合するVHH抗体の開発に成功し、実験的に検証を行った。

Tucs et al., Scientific Reports, 2023.

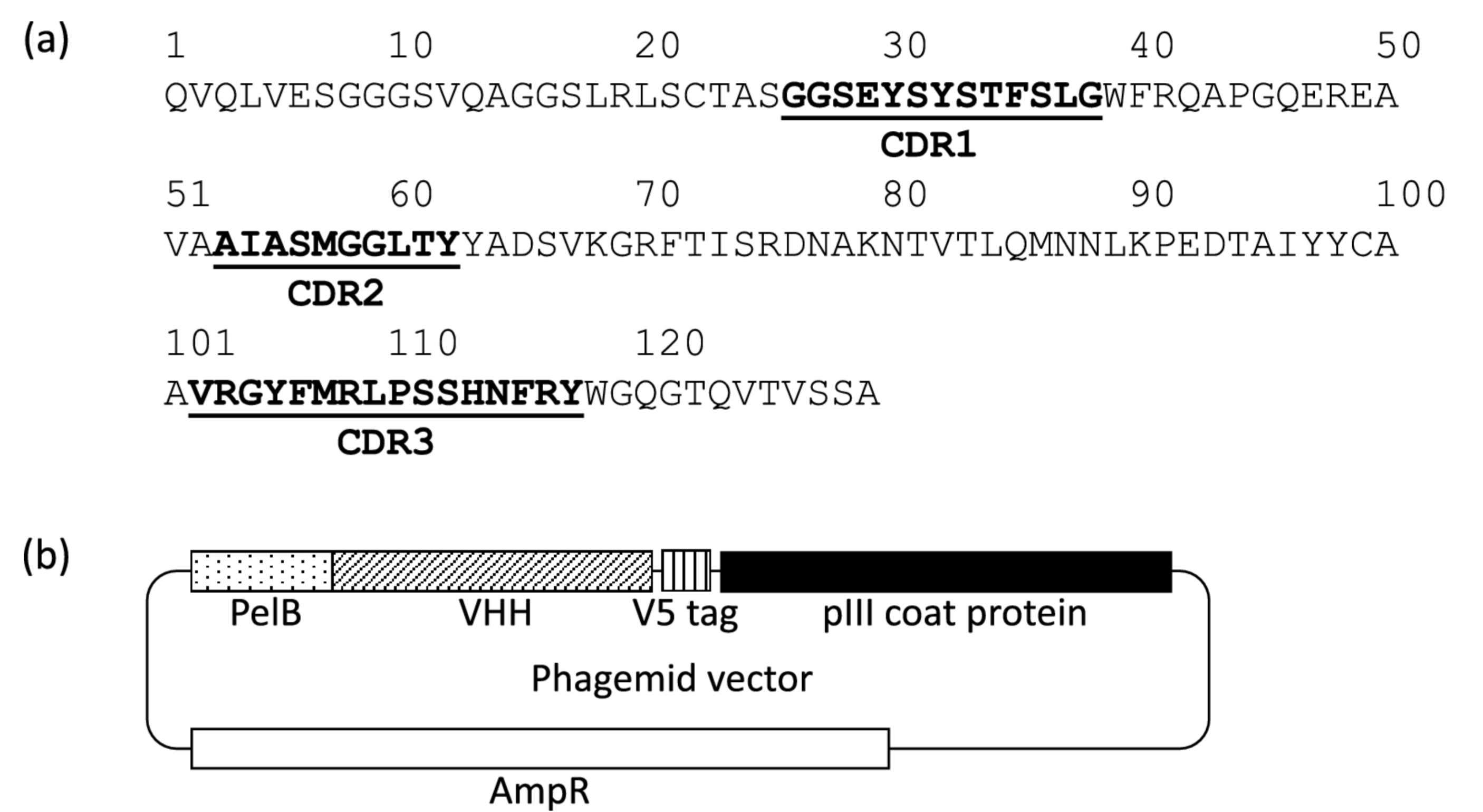


図: VHH抗体の配列

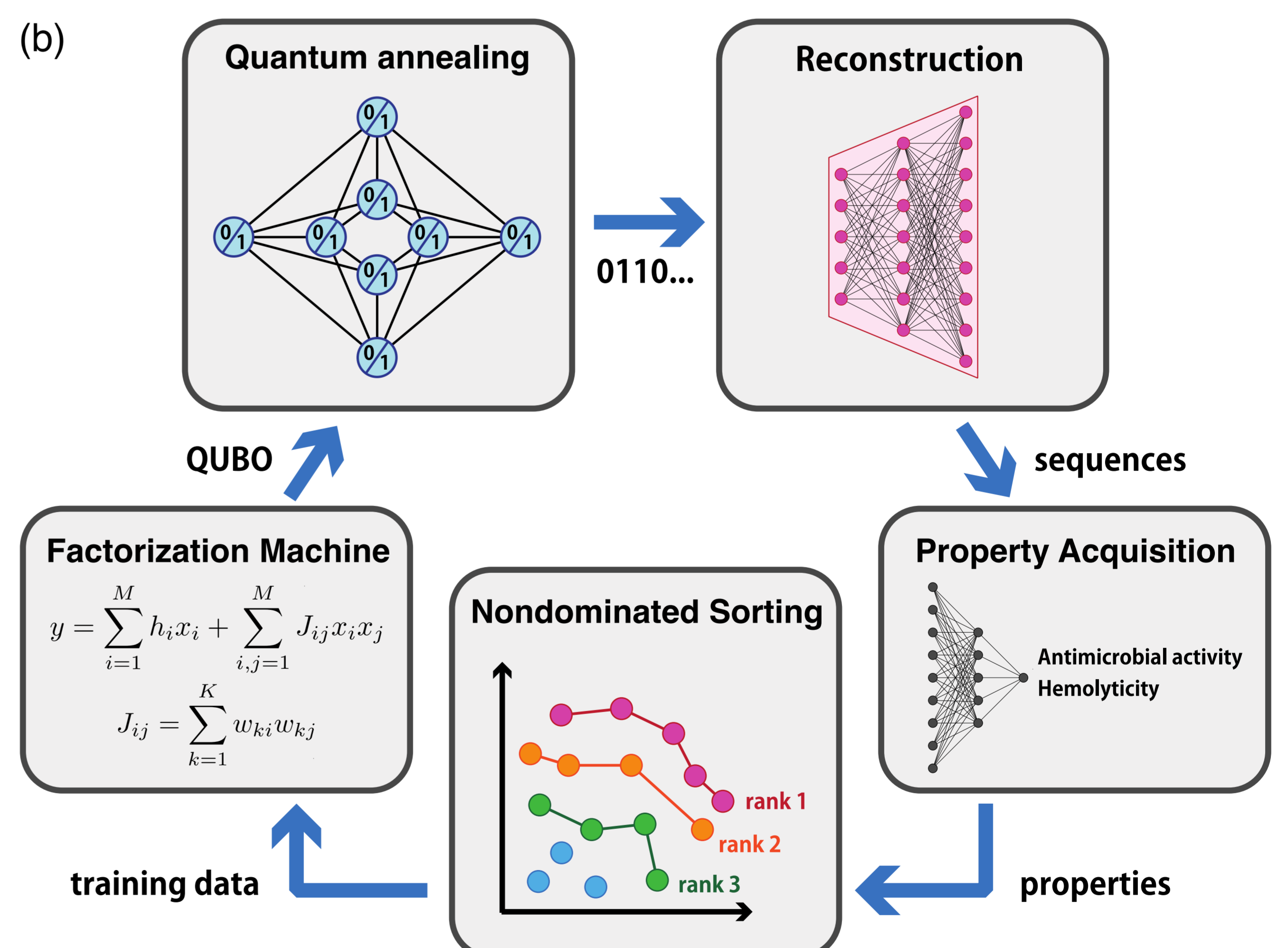


図: 量子アニーラを用いた自動配列設計

Name	CDR1	CDR2	CDR3	Distance
WT	GGSEYSYTFSLG	AIASMGLTY	VRGYFMRLPSSHNFY	-
VHH1832	SNQNNSYNSYDY	YFYNNSSYSY	DSFNYYDDNNFDDYRR	23
VHH1834	ANGDYNASYSN	YNYCDYSYSY	DDYFNYYYNNDDDRF	23
VHH1835	DNQNLNSYNDNS	FSYNSYYSY	DDYYSYNNFNDRA	22
VHH1836	NNNDNSNYSYD	SFYGDFNFY	NNQPNDHDYDHYDHS	16
VHH1837	NQANFNHSRYS	NNGSYYDDSF	VNPPNDHDYDHYDHS	18

図: 設計されたVHH配列