ハッカソンプロンプト:量子コンピューティングによるタンパク質構造予測

# 背景と動機:

アミノ酸配列からタンパク質の三次元構造を予測することは、分子生物学における中心的な課題のままです。AlphaFold などの AI ベースの手法は目覚ましい成功を収めていますが、既知の構造相同体を欠く配列に苦労することがよくあります。物理ベースのフリーモデリングアプローチは、原理的にはより高い精度を提供しますが、従来のハードウェアでは計算が法外です。

量子コンピューティングは、根本的に異なるアプローチを提供します。量子アルゴリズムと、タンパク質構造を単純化された表現に離散化する粗粒度格子モデル (coarse-grained lattice models) を組み合わせることで、量子プロセッサはタンパク質の広大な構造状況を効率的にサンプリングできます。ただし、格子モデルの選択は、精度とリソースの需要に大きく影響します。四面体格子は効率的ですが、主要な二次構造をモデル化するには剛性が高すぎます。対照的に、面心立方 (FCC) 格子はより高い幾何学的忠実度を提供し、量子資源コストは増加しますが、αらせんやβシートなどのより現実的な折り畳みパターンを可能にします。

あなたの課題は、さらに進んで、現在のIBM量子ハードウェア(Eagle R3、Heron R2)の機能を活用することに重点を置き、選択した3D格子モデルを使用してタンパク質構造予測のための量子アルゴリズムを設計することです。四面体格子や FCC 格子を超えて、体心立方格子 (BCC)、カスタム ハイブリッド格子などの可能性を探り、生物学的リアリズムと量子効率のバランスをとります。

# はじめ：

選択した3D格子のエネルギー項と構造制約をコード化するハミルトニアンを最小化することにより、短いタンパク質(5〜10アミノ酸)の折り畳み構造を予測する量子アルゴリズムを作成します。Qiskit を使用して、次のことを行います。

* ターンベースまたは座標ベースの格子エンコーディングを使用して、タンパク質の折り畳みをコードします。
* 相互作用エネルギー(疎水性極性、宮沢ジャーニガンなど)と自己回避や非後戻りなどの制約を説明するハミルトニアンを構築します。
* 変分法(QAOA、CVaR-VQE、VQEC など)を使用してアルゴリズムを実装および最適化し、オプションでエラー軽減とハイブリッド ワークフローを組み込みます。

# ヒント：

* FCCは12方向と複数の3体結合角(60°、90°、120°、180°)を提供し、モデリングの精度を向上させますが、量子ビットとハミルトニアン複雑さを増大させます。
* 四面体格子は、必要な量子ビットは少なくなりますが、固定された 3 体の角度 (109.5° のみが許可される) ため、らせんをモデル化する場合にはパフォーマンスが低下します。
* オーバーヘッドのエンコードに対して、調整可能な柔軟性を得るために、体心立方体 (BCC) などの新しい格子を検討してください。
* 制約を適用するときは、スラック変数を避けるようにしてください。代わりに、多項式フィッティングまたはラグランジュ双対性(VQECを使用)を試して、よりスケーラブルなエンコーディングを行ってください。
* 可能であれば、二乗平均平方根偏差 (RMSD) または回転半径メトリックを使用して、既知のグラウンドトゥルース構造と結果を比較します。

# より深い質問:

* 選択した格子は、生物学的忠実度と量子回路の深さにどのように影響しますか?
* エンコーディングは、実際のハードウェアでネイティブのような構造を回復できますか?
* より長いペプチドやより複雑なスコアリング関数へのアプローチをどのように拡張しますか?

# 推奨されるリソース:

* ドーガ H、ラウベノールト B、クンボ F、ジョシ J、ディフィリッポ FP、チン J、ブランケンベルク D、シェハブ O。量子コンピュータを用いた蛋白質構造予測の展望J 化学理論計算。2024年5月14日;20(9):3359-3378.土井: 10.1021/acs.jctc.4c00067。Epub 2024 年 5 月 4 日。PMID:38703105;PMCID: PMC11099973。 <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jctc.4c00067>
* Robert A、Barkoutsos PK、Woerner S、et al. タンパク質折り畳みのためのリソース効率の高い量子アルゴリズム。npj 量子 Inf 7, 38 (2021)。 <https://doi.org/10.1038/s41534-021-00368-4>

● Li R, Doga H, Raubenolt R, et al. Quantum Algorithm for Protein Structure Prediction Using the Face-Centered Cubic Lattice. arXiv (2025)