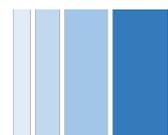


大健康与新医疗

BIG DATA Health
and New Medical

2024年
第24
期

上海科学技术情报研究所
上海市前沿技术发展研究中心
技术与创新支持中心(TISC)



医学领域量子计算应用进展

编者按

量子计算是利用量子力学的原理来处理信息的技术。与传统计算机依赖于二进制的 0 和 1 不同，量子计算机使用量子比特 (qubit)。这些量子比特可以同时处于多个状态，这种特性被称为量子叠加。此外，量子比特之间还可以存在量子纠缠，即一种信息传递机制，使得量子计算机能够在某些情况下以指数级的速度解决问题。在当今科技飞速发展的时代，量子计算作为一项前沿技术，正逐渐展现出其巨大的潜力，有望为各个领域带来革命性的变革，而医学领域便是其中之一。随着量子技术的不断进步，它与医学的结合正引领我们迈向一个更加健康、精准的未来。本期简报将分别从科技前沿、国内行业动态、国外行业动态三方面介绍医学领域量子计算应用进展。

目 录

科技前沿.....	4
腾讯携手医图生科发布药物设计量子计算框架.....	4
英矽智能利用量子计算尝试打破 KRAS 药物研发瓶颈.....	5
国外行业动态.....	6
英国政府投入 1 亿英镑建立新量子研究中心.....	6
克利夫兰诊所启动了量子-人工智能生物医学前沿奖学金计划.	7
美国国立卫生研究院量子生物医学 Qu-BIT 计划启动.....	7
新加坡与 QUANTINUM 签署谅解备忘录，获得其先进量子计 算机的访问权.....	8
国内行业动态.....	9
天基量子医学实验室筹备启动仪式在深圳举行.....	9
玻色量子与华大生命科学研究院达成战略合作.....	10

量子 AI + “量生万物”生物医药智能平台在无锡发布.....11

中国首个量子计算与数据医学研究院成立.....13

科技前沿

腾讯携手医图生科发布药物设计量子计算框架

近日，医图生科（苏州）生命科学技术有限公司联合腾讯量子实验室，中国药科大学，宁波工程学院正式发表题目为《A hybrid quantum computing pipeline for real world drug discovery》（一个面向真实世界药物发现的混合架构量子计算框架）论文。该研究团队创新的构建了经典+量子混合编程框架，并将其应用在了完成临床前动物实验以及经过临床验证的两个真实世界药物设计环节中，观察到了量子计算机在药物设计应用方面的巨大潜力和商业价值。研究团队认为随着量子计算机硬件能力的提升，未来量子计算会给该行业带来巨大的变革机会。

该研究旨在探索量子计算在药物分子动力学模拟、化学反应区域电子结构描述、药物筛选及优化等方面的潜力，并验证其在实际药物设计中的可行性。研究团队认为随着量子计算机硬件能力的提升，未来量子计算会给该行业带来巨大的变革机会。此次量子计算应用于药物设计的研究成果，将为未来药物研

发带来更加高效和精确的解决方案，推动医药行业的持续创新与发展。

研究发现，在计算精确性方面，量子混合计算所产生的误差在实际的药物设计场景中是可以接受的。量子混合计算机在薛定谔方程求解方面已经能够达到经典计算机的任务目标。更为重要的是，其计算误差落在特定生物系统允许的误差范围内。

医图生科方面认为，在当前阶段的药物设计领域，量子计算已成为可作为生产工具的重要创新性手段。随着未来硬件性能的进一步提升，量子计算机在该领域将带来更多创新的革命性成果。医图生科将进一步加强与腾讯量子实验室的合作，完成量子计算的商业化运转。此次量子计算应用于药物设计的研究成果，不仅为医图生科在新药研发领域树立了新的里程碑，也为整个医药行业带来了新的希望。随着量子计算的逐步成熟和应用，将为未来药物研发带来更加高效和精确的解决方案，推动医药行业的持续创新与发展。

资料来源：<https://www.nature.com/articles/s41598-024-67897-8>

英矽智能利用量子计算尝试打破 KRAS 药物研发瓶颈

KRAS 突变是癌症中常见的突变之一，出现在大约四分之一的人类肿瘤中。



KRAS 突变会导致细胞不受控制的增殖进而引发癌症。尽管 KRAS 突变非常普遍且影响巨大，但目前只有两种专门针对突变 KRAS 的药物获得了美国食品药品监督管理局（FDA）的批准。而且，临床数据显示，与传统化疗相比，这些药物仅能延长患者几个月的生命。改良 KRAS 靶向疗法，使它为癌症患者带来更多的获益，成为当前尚未被满足的迫切需求。

在近期发表于 Nature Biotechnology 的研究中，来自英矽智能（Insilico Medicine）与加拿大多伦多大学、以及其他科研机构如圣裘德儿童研究医院等，展开了一次“量子计算+经典计算+生成式 AI”的跨界合作，尝试从头设计出对付“不可成药”KRAS 的新型抑制剂分子。该研究首次展示了量子计算结合 AI 在药物早期发现过程中的潜在优势，为高难度靶点的治疗方案带来了新的希望。

研究团队提出了一种量子-经典混合的生成框架：结合量子变分生成模型（QCBM）和长短期记忆网络（LSTM）来协同设计新分子。具体而言，他们用一个包含 110 万种分子的定制数据集对量子-经典混合模型进行“训练”。

在实际应用中，研究团队先用混合模型一次性产生了 100 万种候选分子。接着，他们借助英矽智能自主研发的 Chemistry42 生成式人工智能引擎，对这些

分子进行系统的评估和筛选，包括类药性、对接评分、合成可及性等多个维度，从中挑选出 15 种最具潜力的候选分子进入实验室测试。与传统药物发现相比，这种方法不需要依赖大规模的物理化合物库来进行昂贵、冗长的高通量筛选。相反，大部分筛选工作都能在云端完成，大大降低成本与时间。

而在最终实验室阶段，针对那 15 种优选分子进行了“湿实验”测试，结果发现 2 个分子格外突出。其中，名为 ISM061-018-2 的分子既有较强的靶向 KRAS 活性，又未表现出明显的细胞毒性。同时，它对野生型 KRAS 和多种常见突变型 KRAS（以及野生型 HRAS、NRAS）都具有抑制活性，展现出成为“泛 RAS 抑制剂”的潜力。另外一个分子 ISM061-022 则在针对某些突变型 KRAS（如 G12R、Q61H）上表现出更高效的抑制作用，也同样有望发展成为广谱抗癌药物的候选。

值得注意的是，目前的研究还无法证明这类量子-经典混合方法比纯经典方法“更优”，但至少说明量子计算在药物早期发现中具备可行性和潜在加速作用。随着量子计算硬件的不断升级，其在生成式模型中的应用前景也会相应扩大。

该研究成果再次印证了量子计算在药物设计阶段拥有的潜在价值。随着量

子计算技术与 AI 生成式模型的进一步结合，未来或许能更快、更精准地筛选到

针对那些“疑难靶点”的活性分子，为更多患者带去希望。

资料来源：<https://www.jfdaily.com/staticsg/res/html/web/newsDetail.html?id=849813&sid=300>

国外行业动态

英国政府投入 1 亿英镑建立新量子研究中心

7 月 26 日，英国科学、创新和技术部（DSIT）宣布将投资 1.06 亿英镑（约合 10 亿元人民币）用于建立 5 个新的量子研究中心，以促进量子技术在医疗保健、网络安全和交通领域的应用。5 个新中心的建设将由英国各地的顶尖高校领导，同时将与行业伙伴密切合作，以确保研究成果的应用与转化。

1、量子生物医学传感研究中心。伦敦大学学院和剑桥大学牵头，开发用于超敏感疾病诊断的量子传感器，以促进癌症和阿尔茨海默病等疾病的早期诊断和治疗，包括快速血液测试和生物医学扫描仪等。

2、传感、成像与定时量子技术中心。伯明翰大学牵头，研究将量子传感技术实际应用于痴呆症的大脑扫描仪、癌症诊断以及高级安全和基础设施监测。

3、量子集成网络与量子技术中心。赫瑞瓦特大学牵头，研究面向未来网络

安全的量子互联网技术，使未来的网络安全和强大的分布式量子计算成为可能。

4、集成与互联量子计算中心。牛津大学牵头，开发量子计算机相关技术，增强量子计算机软硬件性能，促进其在工业领域的广泛应用。

5、量子定时、定位与导航中心。格拉斯哥大学牵头，为关键基础设施、自动驾驶汽车以及改进的室内和水下导航创建基于量子的定位和导航系统。

资料来源：http://casisd.cas.cn/zkcg/ydkb/kjqykb/2024/kjqykb2409/202410/t20241029_7409827.html

克利夫兰诊所启动了量子-人工智能生物医学前沿奖学金计划

2024年8月5日，克利夫兰诊所宣布启动了克利夫兰诊所——丹麦：量子-人工智能生物医学前沿奖学金计划。该计划奖学金由与诺和诺德基金会（NovoNordisk Foundation）合作提供，将重点研究分析大量数据的技术，以提高诊断准确性、加快个性化医疗和改善临床试验。

该计划由总部位于丹麦的 NNF 和克利夫兰诊所共同制定，致力于将量子技术和人工智能整合到生物医学研究和患者护理中，推动这些技术在医学和医疗保健中的应用。



诺和诺德基金会高级副总裁兼自然与技术主管 Lene Oddershede 表示：“NNF 和克利夫兰诊所之间的合作旨在使量子技术和人工智能等先进关键技术 在生物医学研究和实际临床应用中的使用成为可能，确保这些创新技术有助于理解疾病并改善患者的治疗效果。

克利夫兰诊所首席研究信息官 Lara Jehi 博士说：“通过结合我们的优势，我们旨在加速量子技术和人工智能向临床环境的转化，开创一个集两家机构最佳优势于一体的医疗创新新时代。”

资料来源：<http://www.qtc.com.cn/flash/17229064276589.html>

美国国立卫生研究院量子生物医学 Qu-BIT 计划启动

2024 年 9 月 18 日，美国国立卫生研究院（NIH）的国家促进转化科学中心（NCATS）宣布推出 NIH 量子生物医学创新和技术（Qu-BIT）计划。9 月 20 日，NIH 发布通知，资助“生物医学应用中的量子传感（SBIR/STTR）”。

Qu-BIT 的目标是进一步将创新的新型量子传感技术和量子计算方法应用于各种生物医学和转化用例。由此产生的发展预计将极大地改进现有技术，并将

生物医学研究推向新时代。

NCATS 一直领导着 NIH 的量子科学技术工作组，探索将量子技术应用于生物医学领域的传感和计算领域的方法。NCATS 已经确定了几个关键的差距和机会，以加快原型量子技术的开发和采用，并将其应用于实际应用。

生物医学应用中的量子传感项目的发出单位为美国国家眼科研究所 (NEI)、美国国家心肺血液研究所 (NHLBI)、国家生物医学成像和生物工程研究所 (NIBIB)、美国国家转化科学促进中心 (NCATS)、美国国家癌症研究所 (NCI)。

资料来源：https://news.qq.com/rain/a/20240923A07S6400?suid=&media_id=

新加坡与 QUANTINUM 签署谅解备忘录，获得其先进量子计算机的

访问权

2024 年 7 月 29 日，新加坡国家量子办公室 (NQO)、科技研究局 (A*STAR)、新加坡国立大学 (NUS)、国家超级计算中心 (NSCC) 和 Quantinuum 签署了一份谅解备忘录 (MoU)，获得 Quantinuum 先进量子计算



机的访问权，探索和合作开发量子计算用例，重点关注计算生物学。

根据谅解备忘录，双方同意利用 Quantinuum 的 H 系列和 Helios 量子计算机，促进各种量子计算应用的联合研发活动。Helios 是 Quantinuum 的下一代量子处理器，可以指数级地提高量子计算机的计算能力。双方还将合作开发包括经典计算和量子计算基础设施在内的混合计算解决方案，从而制定长期战略路线图。该谅解备忘录还有助于通过研讨会、讲习班和定制计划开展培训和外联合作，培养量子人才，为新加坡日益壮大的量子社区做出贡献。

新加坡在计算生物学和高质量健康数据集收集方面拥有深厚的背景。通过这份谅解备忘录，来自 A*STAR 生物信息学研究所 (BII)、新加坡国立大学量子技术中心 (CQT) 和 Duke-NUS 医学院计算生物学中心的科学家，将能够利用 Quantinuum 的机器来提高复杂生物系统的建模能力，推动药物发现和个性化医疗的发展。此外，Quantinuum 还计划在新加坡设立专门的研发机构，让 Quantinuum 和新加坡的研究人员能够更好地交流知识和专业技能，以进一步开发量子应用和算法。

作为最大的量子计算公司，Quantinuum 已成功构建了最高性能的量子计算



机，并提供集成的端到端量子计算平台。Quantinuum 利用俘获离子技术（构建最高保真度和可扩展量子计算机的最有前景的方法之一）来开发包括制药、材料科学和金融在内的广泛的应用案例。

该谅解备忘录以新加坡的国家量子战略为指导，该战略旨在加强新加坡作为量子技术开发和部署领先中心的地位，具体做法包括：在具有重大影响的量子研究领域促进卓越的科学研究；加强新加坡在量子技术方面的工程能力，以加速转化为现实世界的解决方案；吸引、培养和留住量子人才；巩固公司伙伴关系，以建立一个充满活力和弹性的量子产业。

资料来源：<https://www.prnasia.com/story/455545-1.shtml>

国内行业动态

天基权量子医学实验室筹备启动仪式在深圳举行

2024年1月10日，深圳天基权集团举办“数字化智能化发展及量子科技应用医学（产学研）研讨会暨天基权量子医学数字化智能化实验室筹备启动仪式。”

天基权集团董事长总裁释延豹在致辞中表示，天基权量子医学数字化智能



化实验室筹备，是加快推动天基权量子医学数字化智能化升级的一个重要举措。

作为较早开发量子科技应用在医学上的天基权集团，一直专注于量子医学领域的研究，连续四年为全国人大、政协两会委员和代表服务。天基权量子医学产品，已取得欧盟 CE 认证、韩国的 GMP 认证、东南亚 CB 认证。先后多次代表商务部在国际高科技展会上为国争光，获得过南非科技博览会金奖、泰国发明者日“中国好技术金奖”等国际奖项，天基权集团以高度的社会责任意识和深厚的民族情怀主动担当，用实际行动为全人类的心脑血管健康保驾护航。

天基权量子医学实验室是天基权集团联同大学科研机构共同筹办，以“发展量子医学，造福人类健康”为发展目标，力求探索量子医学应用的基础理论，对量子医学应用进行技术支持，为量子新时代走一条中国特色的道路，让量子医学更好地服务于国家，服务于社会，服务于人民。

资料来源：http://szjj.china.com.cn/2024-01/12/content_42668395.html

玻色量子与华大生命科学研究院达成战略合作

2024年3月5日，北京玻色量子科技有限公司（以下简称“玻色量子”）与深圳华大生命科学研究院（以下简称“华大研究院”）达成战略合作。玻色量子与华大研究院基于量子计算在生命科学领域的应用这一未来产业上展开探索合作，并计划进行专项人才培养。

生命科学已经成为当前发展最快的领域之一。由于基因测序等技术的发展，生命科学数据量呈现爆发式增长，这些生命科学数据可视为当今时代的“石油”，其潜在价值将对医药健康等领域的创新有着非凡意义。

根据 IDC 发布的《中国生命科学算力与算法解决方案市场分析》报告提出，生命科学领域的计算需求有其独特性。一方面，生命科学领域有着数据量大、增长速度快、数据质量低、数据多模态的特征，相应的数据治理和计算对算力提出了较高的要求；另一方面，生命科学行业分散，不同的细分领域、不同的场景有着不同的算力需求，且调用的数据规模不同对算力的需求也有区别。

华大研究院作为国际一流的产学研一体化新型生命科学研究院，以基因组



学为核心和基础，聚焦生命科学基础研究领域前沿方向和关键问题，努力实现基础研究重大技术突破和领先技术开发，成为生物产业发展核心驱动力。华大研究院通过建设全贯穿高通量低成本的核心算法和组学平台，支撑医疗健康、农业育种等研究，规划与实施大科学项目，树立科学标志性成果，协助推动形成产业标准。

而玻色量子是实用化光量子计算领域的行业领导者，基于自研 100 计算量子比特的国内首台相干光量子计算机真机——“天工量子大脑”，以及国内首个光量子算力云平台——恒山光量子算力平台，已具备多行业场景的真机测试与场景验证的卓越算力优势。

通过此次战略合作，双方将聚焦科技创新，基于量子计算在生命科学中的应用场景，联合打造“量子计算+生命科学”行业真实场景解决方案；基于行业发展以及科技创新的深入认知，再着力推动科技成果转化和应用，并实现“量子计算+生命科学”多学科融合的复合型创新人才储备。

资料来源：<https://baijiahao.baidu.com/s?id=1792758834868601137&wfr=spider&for=pc>

量子 AI + “量生万物”生物医药智能平台在无锡发布

量子、人工智能携手加持生物医药研发。2024 年 12 月 27 日，由图灵量子、上海交通大学无锡光子芯片研究院、阿斯利康、乐达医药、途深智合、Chip 期刊等单位共同主办的首届量子 AI + 生物医药创新融合峰会在无锡光子芯谷举办。

会议以「智联生物，量启未来」为核心主题，聚焦量子计算、人工智能与生物医药行业的深度融合，100 余位领域内知名专家学者、生物医药公司 CEO 和技术领军人物莅临会议现场，以产学研用多维度视角，助力未来产业快速落地发展。会议中，图灵量子正式发布“量生万物”生物医药智能平台。该平台从生物医药各环节痛点问题出发，深度融合量子计算、人工智能技术优势，形成包含合成生物学，抗原抗体设计，小分子药物设计三大板块的综合性一站式应用平台，为生物医药发展带来无限想象空间。

在合成生物学平台中，图灵量子团队依托于基因元件的庞大数据库与高度精细化的代谢网络模型，精心构建了智能化的菌株设计流程，流程深度融合了前沿生物信息技术与先进工程技术。平台结合基因元件库中海量的生物资源，



并借助精确的代谢网络模型模拟预测微生物行为，为菌株的定制化设计与优化奠定了坚实基础。该设计流程为微生物菌株的定制与优化带来了前所未有的精准性、快速性和可靠性，为生物制造、医药健康、环境治理等多个领域的发展注入了强劲动力。

量子人工智能小分子药物设计平台则可以广泛应用于药物设计、靶点筛选、先导化合物优化、亲和力计算等生物医药场景。该平台融合了量子计算的速度、人工智能的神经网络，以及传统药物化学与生物学的深厚底蕴，对药物研发模式进行了全新创建。同时，借助量子比特，该平台助力于发现药物分子结构的微观世界，深度挖掘小分子数据库和靶点数据库，精准预测药物与靶点的相互作用，缩短了药物研发的周期，降低了成本。专家表示，在面对复杂多变的疾病挑战时，量子人工智能计算药物设计平台可以展现出高度的灵活性与可扩展性。从特定靶点的精准药物筛选，到复杂疾病的多靶点协同计算，实现个性化的解决方案，推动精准医疗向「一人一药」的终极梦想迈进。

在抗原抗体设计平台中，图灵量子团队通过量子算法与人工智能技术的持

续融合，打破了传统研发模式的局限，实现了从理论设想到实验验证的快速跨越，其汇聚了免疫学、分子生物学、结构生物学以及计算生物学，通过跨学科的深度交融，构建了一个集设计、模拟、优化于一体的综合体系。

资料来源：<https://baijiahao.baidu.com/s?id=1819587992904069978&wfr=spider&for=pc>

中国首个量子计算与数据医学研究院成立

12月8日，合肥量子计算与数据医学研究院（以下简称“研究院”）在安徽省合肥市揭牌成立，这是中国首个量子计算与数据医学研究院。

研究院由蚌埠医科大学与本源量子计算科技（合肥）股份有限公司（以下简称“本源量子”）联合设立。目前，双方已在国内率先将量子算力应用于医学领域，发布量子计算提升乳腺钼靶检测效率的研究成果，探索量子算力加速小分子药物研发进程，并开设中国首个量子计算与数据医学实验班。

蚌埠医科大学副校长、研究院院长刘浩介绍，研究院将致力于量子计算赋能中国医疗数据安全和应用，充分利用量子计算、医学研究、人才培养等领域的优势，开展量子医疗算法真机验证研究，推进量子计算与医学研究的深入合

作，布局量子算力赋能数字医疗发展路径，全力推进量子医学科研和成果转化。

中国科学院量子信息重点实验室副主任、本源量子首席科学家、研究院名誉院长郭国平教授表示，研究院将促进国产量子算力与医疗数据深度融合，探索培养量子数据医学复合型人才的新路径。

本源量子是中国第一家量子计算公司，已交付多台超导量子计算机，其“本源悟空”超导量子计算机自上线以来，已为全球 137 个国家和地区用户完成 29.8 万个量子计算任务。

资料来源：<https://baijiahao.baidu.com/s?id=1817848949705573677&wfr=spider&for=pc>



地址：上海市永福路 265 号

邮编：200031

编辑：华晶晶

责编：陈晖

编审：林鹤

电话：021-64455555

邮件：istis@libnet.sh.cn

网址：www.istis.sh.cn