

23 量子计算探索之药物发现

Quantum Computing Exploration for Drug Discovery on Amazon Web Services

行业：金融、生命科学、制造业
技术：量子计算



1. 总体介绍

- 方案背景** 生物制药研发是一个高风险且耗时的流程。研究人员利用计算机辅助药物设计 (CADD) 来提高药物发现的生产效率，以便更快更准确地找到候选药物，进而缩短整个制药周期。量子计算 (Quantum Computing) 代表了新颖的计算模式，有希望被应用到 CADD 中的一些具体环节来提高效率。虽然该技术仍处于早期阶段，但目前我们已经进入量子计算的高速发展时期，这值得我们用真实的量子计算机开展研究和实验，对比不同的技术，从而探索让量子计算对业务产生真正价值的可能性。
- 适用客户** 该方案主要适合医药卫生与生命科学 (HCLS) 行业的客户，他们想要了解如何将量子计算技术应用于药物发现问题，希望通过一些方案来加快进程，节省研发时间和成本。另外，该方案对量子计算领域的科技公司、开展相关课题研究的高校与科研院所都有参考价值。
- 适用场景** 当客户寻求解决方案来探索量子计算技术与药物发现应用场景的结合点时，可以推荐该方案。
- 客户痛点** 大量客户首先还不清楚量子计算可以应用到药物发现的研究问题。即使知道有相关的报告，客户也不清楚如何快速将理论落地，进行相关研究和实验。

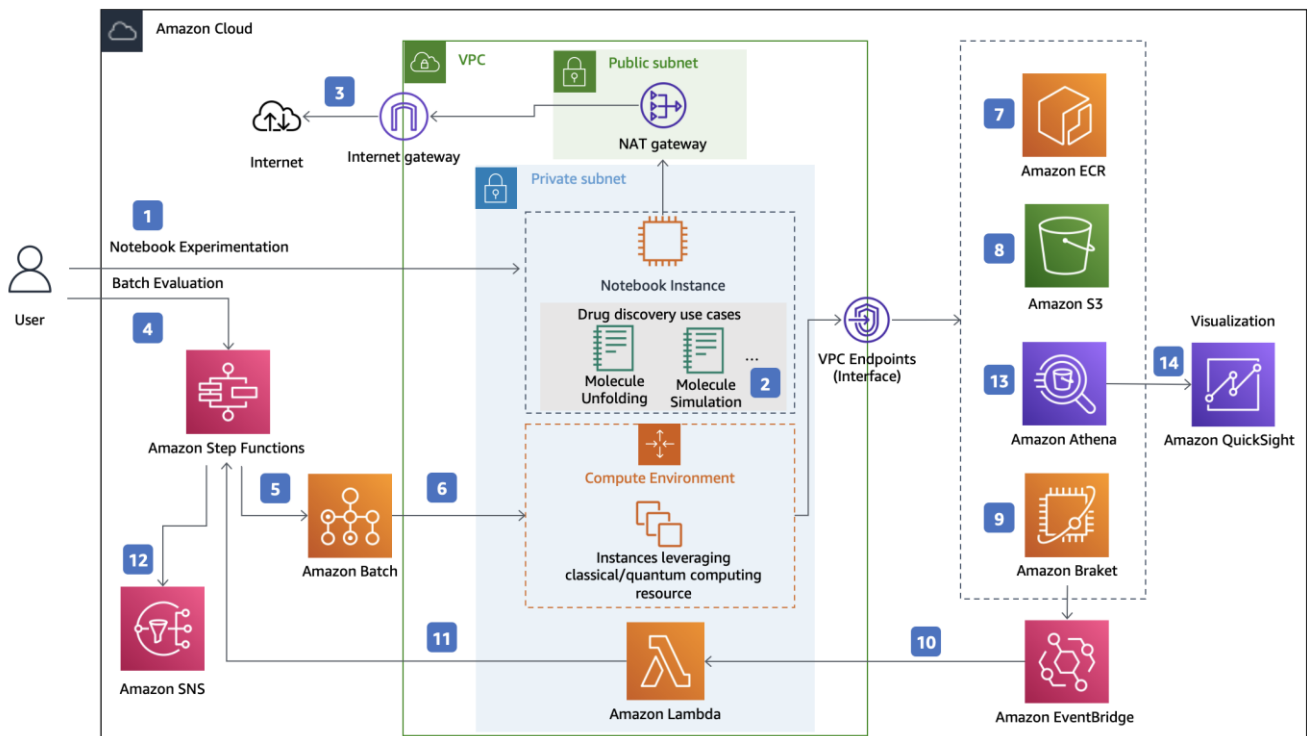
2. 客户价值

该方案能够有效地帮助客户了解如何将量子计算应用到药物研发领域中，并借助该方案的批量验证功能和算法库加速研究的迭代。

3. 解决方案概要

- 方案概要** 该方案旨在帮助客户研究药物发现问题，例如分子对接，蛋白质折叠等。通过 Amazon Braket 调用量子计算资源进行实验，同时调用经典计算资源进行对比，从而让客户提升研究效率，获取研究的新思路。该方案不仅提供完全托管的 Jupyter 笔记本，用于设计和调试药物研发算法，还提供基于 Amazon Step Functions 和 Amazon Batch 的工作流，用于批量验证算法，并最终利用 Amazon QuickSight 展示结果。
- 方案特点** 该方案的主要特点包括：1) 实现一键部署包含量子计算和经典计算工作流的混合架构；2) 包含了研究针对特定药物研发问题的开源算法模块；3) 能够批量验证算法性能并通过数据和表格进行分析；4) 支持自定义其它药物研发问题的算法并进行复用。
- 部署前提** 客户需要拥有亚马逊云科技的全球区域账号。
- 客户资源/能力评估** 客户需要具有亚马逊云科技架构实践经验的 IT 架构师、开发人员、DevOps 人员、数据科学家和算法工程师，以及药物研发领域的专业技术人员。
- 成本因素** 该方案的应用成本主要来自 5 个方面：笔记本、计算、存储、分析、任务调度。实际成本取决于执行的任务和复杂性。以样本分子 (117_idel.mol2) 的展开应用为例，截至 2022 年 5 月，该解决方案的应用成本约为每天 37 美元。更多详情，请参考实施指南。

4. 架构图



主要服务: Amazon Athena、Amazon Batch、Amazon ECR、Amazon EventBridge、Amazon Lambda、Amazon S3、Amazon SageMaker、Amazon SNS、Amazon Step Functions、Amazon Braket、Amazon QuickSight

5. 资源和帮助

官网 (中国) » <https://www.amazonaws.cn/solutions/quantum-computing-exploration-for-drug-discovery-on-aws/>

官网 (全球) » <https://aws.amazon.com/solutions/implementations/quantum-computing-exploration-for-drug-discovery/>

实施指南 » <https://awslabs.github.io/quantum-computing-exploration-for-drug-discovery-on-aws/zh/>

实施指南（下载）» <https://aws-gcr-solutions.s3.amazonaws.com/quantum-computing-exploration-for-drug-discovery-on-aws/latest/docs.zh.pdf>

GitHub » <https://github.com/awslabs/quantum-computing-exploration-for-drug-discovery-on-aws>

PartnerCast: 采用量子计算新模式, 探索药物发现热前沿 »

<https://explore.skillbuilder.aws/learn/course/internal/view/elearning/13379/aws-partnercast-cai-yong-liang-zi-ji-suan-xin-mo-shi-tan-suo-yao-wu-fa-xian-re-qian-yan-technical>

生物制药解决方案专题页面 » <https://www.amazonaws.cn/en/health/biopharma/biopharma-solution/>

Amazon Braket » <https://aws.amazon.com/braket/>

Campaign ID » GCR-Solution-Biz-HCLS-ISA-Quantum computing (QC) in Biotech

产 品 经 理 苏璠 (fansu@amazon.com)

项目负责人 张奥宇 (aoyuzhan@amazon.com)

推广负责人 张濮 (puzhang@amazon.com)

SO8027 