دوشنبه 29 اردیبهشت 1399 - 07:05

رایانش کوانتومی ساخت "واکسن کرونا" را چند روزه خواهد کرد!

کارشناسان حوزه محاسبات یا رایانش کوانتومی می‌گویند این فناوری روزی موجب خواهد شد ساخت واکسن برای بیماری‌هایی نظیر کووید-۱۹ بیش از چند روز طول نکشد.

کارشناسان حوزه محاسبات یا رایانش کوانتومی می گویند این فناوری روزی موجب خواهد شد ساخت واکسن برای بیماری هایی نظیر کووید-۱۹ بیش از چند روز طول نکشد.

به گزارش ایسنا و به نقل از ونچر بیت، کروناویروس ثابت کرد که ما باید در شناسایی و کنترل بیماری ها قبل از همه گیر شدن بسیار سریع تر عمل کنیم، زیرا در دنیای امروز، ویروسها بسیار سریع تر و گسترده تر از گذشته شایع می شوند.

اگر کووید-۱۹ به ما چیزی آموخته باشد، این است که توانایی ما در شناسایی و درمان همه گیری ها از زمان شیوع آنفلوانزای اسپانیایی در سال ۱۹۱۸ تاکنون بسیار بهبود یافته است، اما هنوز راه زیادی برای پیشرفت وجود دارد. طی چند دهه گذشته ما اقدامات بزرگی را برای بهبود قابلیت تشخیص سریع انجام داده ایم. تنها ۱۲ روز طول کشید تا پروتئین بیرونی ویروس کووید-۱۹ را با استفاده از تکنیک های جدید نقشه برداری مولکولی شناسایی کنیم. در حالی که در دهه ۱۹۸۰، یک تحلیل ساختاری مشابه برای ویروس ایدز، چهار سال به طول انجامید.

اما ابداع یک روش درمانی یا واکسن هنوز مدت زمان زیادی طول می کشد و هزینه های بالایی را شامل می شود که سبب کاهش انگیزه داروسازهای بزرگ می شود.

پروفسور "نور شاکر" متخصص اکتساف دارو اظهار داشت: هرگاه یک بیماری شناسایی می شود، سفر جدیدی در دنیای شیمی شروع به جستجوی دارویی می کند که می تواند در مقابله با بیماری ها مفید واقع شود. این سفر تقریبا ۱۵ سال به طول می انجامد و ۲.۶ میلیارد دلار هزینه دارد و با روشی برای فیلتر کردن میلیون ها مولکول برای شناسایی صدها مورد با پتانسیل بالا برای تبدیل شدن به دارو شروع می شود. حدود ۹۹ درصد از کاندیداهای منتخب شکست می خورند و تنها یک درصد سربلند بیرون می آیند.

پروفسور شاکر یکی از اصلی ترین مشکلات روند فعلی کشف داروها را توسعه تجربی داروسازی می داند. وی می گوید مولکول ها ساخته می شوند و سپس مورد آزمایش قرار می گیرند، بدون آنکه بتوان عملکرد آنها را از قبل به طور دقیق پیش بینی کرد. این فرآیند آزمایش به خودی خود طولانی، خسته کننده و دست و پا گیر است و ممکن است عوارض بعدی را پیش بینی نکند که باعث افزایش نسبت هزینه به سود می شود. در حالی که ابزارهایی از قبیل هوش مصنوعی برای بهینه سازی این فرآیندها در حال توسعه و پیاده سازی هستند، اما محدودیت در کارآیی آنها در کارهای کلیدی این فرآیند وجود دارد.

در حالت ایده آل، یک روش عالی برای کاهش زمان و هزینه انتقال و کشف و آزمایش درمان یا واکسن، فرآیند آزمایش در آزمایشگاه است که امروزه از آن استفاده می کنیم و با آن به شبیه سازی های رایانه ای می پردازیم. پایگاه های داده مولکولها در حال حاضر در دسترس ما هستند و اگر قدرت محاسبه نامحدود داشتیم می توانستیم این پایگاه های داده را اسکن کنیم و محاسبه کنیم که کدام مولکول می تواند به عنوان درمان یا واکسن کروناویروس عمل کند. ما به راحتی می توانستیم عوامل خود را در شبیه سازی وارد کنیم و فضای شیمیایی را برای حل مشکل خود به نمایش بگذاریم.

در اصل، این کار زمانی امکان پذیر است که بتوان ساختارهای شیمیایی را به دقت سنجید و قوانین فیزیک حاکم بر شیمی به خوبی شناخته شده باشند، اما برای تحقق این امر به حل معادلات بسیار پیچیده نیاز داریم که اکنون بسیار طول می کشند.

به عبارت دیگر، ما قدرت محاسبه سریع و کافی را برای حل این معادلات نداریم و اگر به رایانه های کلاسیک متوسل شویم، هرگز موفق نخواهیم شد.

مشکل اساسی این است که بفهمیم الکترون ها در داخل یک مولکول کجا قرار می گیرند و انرژی کل چنین پیکربندی را محاسبه کنیم. با این داده ها می توان خواص یک مولکول را محاسبه کرد و رفتار آن را پیش بینی کرد. محاسبات دقیق

این خصوصیات، امکان نمایش پایگاه داده های مولکولی را برای ترکیباتی که عملکردهای خاصی از خود نشان می دهند، فراهم می کند. مانند مولکول دارویی که قادر به اتصال به کروناویروس و حمله به آن است.

اساساً اگر بتوانیم از رایانه ای برای محاسبه دقیق خواص یک مولکول و پیش بینی رفتار آن در یک شرایط خاص استفاده کنیم، می توانیم به روند شناسایی یک درمان و بهبود کارایی آن سرعت ببخشیم.
چرا رایانه های کوانتومی در شبیه سازی مولکول ها بسیار بهتر از رایانه های کلاسیک هستند؟

الکترونها به شکلی کاملاً همبسته بر روی مولکول پخش می شوند و ویژگی های هر الکترون به ویژگی های همسایگان آن بستگی دارد. این همبستگی های کوانتومی (درهم تنیدگی کوانتومی) قلب تئوری کوانتومی هستند.

به عنوان مثال با الکترون های ویروس کووید-۱۹ به طور کلی باید به عنوان بخشی از یک موجود واحد که دارای درجه آزادی زیادی است، رفتار شود و اثر کلی این گروه نمی تواند به جمع الکترون های متمایز و جداگانه اش تقسیم شود. الکترون ها به دلیل همبستگی های قوی، فردیت خود را از دست داده اند و باید به عنوان یک هویت کلی با آنها رفتار شود. بنابراین برای حل معادلات، باید تمام الکترون ها را به طور همزمان در نظر گرفت.

اگرچه کامپیوترهای کلاسیک در اصل می توانند چنین مولکول هایی را شبیه سازی کنند، اما هر پیکربندی چند الکترونی باید بطور جداگانه در حافظه ذخیره شود.

بیایید بگوییم که یک مولکول با تنها ۱۰ الکترون داریم(فعلا بقیه اتم را فراموش کنید) و هر الکترون می تواند در دو موقعیت مختلف درون مولکول باشد. بنابراین در اصل شما باید ۱۰۲۴ حالت مختلف را در نظر بگیرید و به ۱۰۲۴ بیت کلاسیک احتیاج دارید. از طرف دیگر، کامپیوترهای کوانتومی دارای بیت های کوانتومی(کیوبیت) هستند که می توان آنها را مانند الکترونها در مولکولها با یکدیگر مرتبط کرد. بنابراین در اصل، برای نمایش الکترون های در هم تنیده در رایانه کوانتومی تنها به ۱۰ کیوبیت نیاز خواهد بود.

این اختلاف مقیاس بین محاسبات کلاسیک و کوانتومی موجب می شود محاسبات بسیار سریع تر انجام شود. به عنوان مثال، شبیه سازی پنی سیلین که یک مولکول با ۴۱ اتم و تعداد الکترون های بسیار بیشتری است، به ۱۰ به توان ۸۶ بیت کلاسیک نیاز دارد که بیشتر از تعداد اتم های موجود در تمام جهان است. در حالی که با یک ریانه کوانتومی فقط به ۲۸۶ کیوبیت نیاز است. البته این میزان هنوز بسیار بیشتر از کیوبیت هایی است که ما تاکنون به آن رسیده ایم، اما مطمئناً یک عدد منطقی و دست یافتنی تر است.

پروتئین بیرونی کروناویروس جدید، برای مقایسه، حاوی هزاران اتم است و بنابراین محاسبه کلاسیک حالات آن غیرممکن است و حتی از دست قوی ترین ابررایانه های کلاسیک نیز کاری برنمی آید.

ممکن است چند دهه طول بکشد تا یک رایانه کوانتومی که قادر به شبیه سازی چنین مولکول هایی باشد، ساخته شود. اما هنگامی که چنین رایانه ای در دسترس قرار گیرد، به معنای یک انقلاب کامل در داروسازی و صنایع شیمیایی خواهد بود.

توسعه مداوم رایانه های کوانتومی در صورت موفقیت، امکان ساخت داروهای جدید را فراهم می آورد و با وجود آنها می توانیم کل فرآیند را به یک شبیه سازی رایانه ای منتقل کنیم و به ما این امکان را می دهد که با سرعت شگفت انگیزی به نتیجه برسیم. شبیه سازی های کوانتومی در کسری از زمان می توانند ۹۹.۹ درصد از داروهای بی فایده را غربال کنند و با ظهور یک اپیدمی جدید، دانشمندان می توانند ظرف چند روز واکسن یا داروی بالقوه آن را شناسایی کرده و توسعه دهند.

دستیابی به همه این رویاها نیاز به سرمایه گذاری مستمر در توسعه محاسبات کوانتومی به عنوان یک فناوری دارد.