

仕様書

技術戦略研究センター

1. 件名

量子 AI 技術を活用したマテリアル産業競争力強化に係る動向調査

2. 目的

国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構（以下「NEDO」という。）は、経済産業省との協力のもと、材料技術分野の激しい国際競争を我が国が勝ち抜くための技術開発を推進している。また、材料技術分野の研究開発と実用化の好循環を実現し、世界の中で日本が存在感を発揮するためには、国内外の政策や技術開発の進展等最新の情報を適切に把握した上で、技術戦略に結び付ける必要がある。

近年マテリアル産業界においては、製品のニーズ多様化と国際競争の激しさが増し、さらなる製造プロセスの高度化と開発期間の短縮化が求められており、2021年4月に策定された「マテリアル革新力強化戦略」では、データ駆動型マテリアル開発技術の徹底した先行による競争優位の確保の必要性に言及されるなど、デジタル技術の活用による競争力強化に向けた取り組みが模索されている。例えば、MI（マテリアルズ・インフォマティクス）やPI（プロセス・インフォマティクス）などの手法の確立と社会実装の加速、サイバー空間上の仮想世界において物理的な現象や化学反応の予測にも応用することが可能なデジタルツインの導入や、第一原理計算等の高度なシミュレーション技術の活用を進めるとともに、とりわけAI向けスーパーコンピュータや量子コンピュータといった次世代計算基盤を積極的に活用していくことの重要性が増している。

そこで本調査では、マテリアル産業競争力の強化に資する次世代計算基盤の動向に焦点を当て、従来型のAI技術と量子計算技術の融合によって創出される新たな価値を明らかにし、NEDOとして今後取り組むべき方向性について検討する。

3. 内容

上記の目的を達成するため、下記項目について実施する。なお、実施にあたっては、NEDOとの緊密な連携のもとで行うものとする。

（1）公開情報による国内外の動向調査

マテリアル分野を対象とした量子計算技術の利用に期待される効果、主要技術の最新動向、従来型AIと量子計算技術が融合したシステムのあり方、我が国の競争優位性と将来展望など、以下の①～⑤について国内外の公開文書などをもとに調査する。あわせて（2）の有識者ヒアリング先選定の基礎となる情報を調査する。

《調査対象》

- ① マテリアル分野における量子コンピュータ（ゲート型及びアニーリング型）利用の現状と課題、我が国の競争優位性と将来展望

- ② 従来型（古典）技術システム（材料・プロセス・計測などを対象とした機械学習等の AI やシミュレーション）と量子計算技術の融合により解決が期待できる現状では困難な問題
- ③ 「量子 inspired 技術・準量子技術」を活用したマテリアルユースケース（組合せ最適化問題等をイジング型コンピュータにより高速・大規模で処理する具体的な取組と従来技術に対する優位性）
- ④ 量子計算技術の利用に関する課題（量子コンピュータの計算機能力や利用コスト、アルゴリズム、アプリケーション、ユーザー教育など）
- ⑤ 上記①から④以外で、マテリアル産業競争力強化に資する量子 AI 技術の有益な知見。

（2）有識者ヒアリング等

産業界（企業経験者を含む）や学術、国研の有識者へのヒアリング（目安として国内 15 件、海外 5 件程度）を通じて、（1）①～⑤および NEDO として取り組むべき方向性について調査する。なお、（1）で調査した有識者情報をもとにヒアリング候補リストを作成し、NEDO と協議のうえヒアリング先を決定する。また、ヒアリングで得られた内容を分類・整理・体系化する。

《有識者の例¹》

- ・マテリアル企業関係者（高度計算技術に関心のあるマテリアル研究開発者）
- ・学術、国研等においてデータ駆動型研究開発を行っている研究者等
- ・IT 企業、ベンチャー等、高度計算技術に対し知見を有する関係者。
- ・海外の当該分野の動向に詳しい関係者

なお、ヒアリングにあたっては上記（1）における調査対象を十分踏まえた調査を実施すること。

4. 調査期間

NEDO が指定する日から 2023 年 3 月 10 日(金)まで

5. 予算額

2,000 万円以下（税込）

6. 報告書

提出期限：2023 年 3 月 10 日(金)

提出部数：NEDO プロジェクトマネジメントシステムによる提出

提出方法：「成果報告書・中間年報の電子ファイル提出の手引き」に従って提出のこと。

<https://www.nedo.go.jp/itaku-gyomu/manual.html>

※報告書の仕様については、別途指示することがある。

¹ ヒアリング先を構成する有識者については、NEDO の例に限定されることなく、提案者の独自見解も盛り込んで重み付けした提案を期待する。

7. 報告会等の開催

委託期間中又は委託期間後に、NEDO に対する中間報告会や成果報告会等における報告を依頼する
場合がある。

8. その他

実施事項の内容や進め方、及び本仕様書に定めなき事項等については、NEDO と実施事業者が協議
の上で決定するものとする。

以上