

量子コンピューター ユースケース事例集



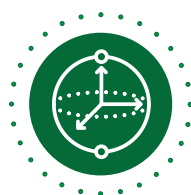
国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO)

はじめに

本ユースケース集について

- 国連総会は、量子物理学誕生100周年を記念して、2025年を「国際量子科学技術年」と定めている。量子力学の特性を活かした技術として、非常に期待され、技術進化が続いているのが量子コンピューターである。日本政府も2022年4月に「量子未来社会ビジョン」を策定するなど、量子産業の創出・発展に向けて取り組んでいる
- このような背景の下、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。）では、2023年度から「量子・古典ハイブリッド技術のサイバー・フィジカル開発事業」において、量子コンピューターのユースケース開発を推進している
- しかし、より一層国内でユースケース開発のノウハウを蓄積していくためには、量子コンピューターのユーザー企業をより増やしていく必要があるものの、国内における先進ユーザー企業の取組事例については、まだ十分に知られていない
- そこでNEDOは今般、国内の量子コンピューターの利活用研究開発の活性化を図り、量子コンピューター産業の発展に貢献するため、量子コンピューターの活用事例を収集・分析し、「量子コンピューター ユースケース事例集」として公開した

本ユースケース集の構成



■ 第1章 ユースケースの傾向と示唆

- 掲載されている全事例を踏まえ、領域ごとの量子コンピューターを活用したユースケースの傾向等について解説



■ 第2章 ユースケースの覧

- 6つの産業領域（製造組立、製造プロセス、創薬医療、金融、交通、エネルギー）と3つの技術領域（CAE*、AI、セキュリティ）の事例について紹介

* Computer Aided Engineering



■ 巻末付録 量子コンピューターベンダーの一覧

- 読者の方々が実際に、ユースケース開発/実装に取り組むに当たって、参考となる量子サービスを提供するベンダーを一覧化して整理

本ユースケース集の留意事項

- 本ユースケース集で掲載している事例や企業などは、あくまで一例の紹介であり、網羅的に国内外の事例や企業を取り上げているわけではない
- 複数の領域にまたがる事例も存在するが、各事例の主たる内容が属する領域に基づき整理している
- 公表資料を基に掲載しているが、情報の正確性や完全性に関して、保証または確約をするものではない

第1章 ユースケースの傾向と示唆

製造・組立 ユースケースの傾向

製造・組立の領域では、足元のサプライチェーン個別業務の最適化に取り組むが、将来的にはサプライチェーン全体の最適化における活用が期待される

主たる用途



主なユースケースは調達・生産・工程設計・販売業務の最適化

- 複雑な生産計画自動化、ヒトとロボットの協働シフト最適化、無人搬送車の稼働率向上など

人手の余地が残っている業務領域が特に有望

- 現時点では古典コンピューターに対する優位性を示すことは難しいため、従来のDX導入が進んでいない段取り替え、シフト計画等での活用ニーズが大きい

ビジネス効果と成熟度



足元はサプライチェーン個別業務のコスト削減を担う

- 熟練者の継承問題を抱える企業の場合、コストメリット以上の効果をもたらす
- 一部ユースケースは実用化まで進む**
- 量子インスパイアード技術を活用したソリューションが既に実運用されているケースが複数
- 現在は投資余力のある一部先進企業での導入にとどまる

普及に向けた課題感



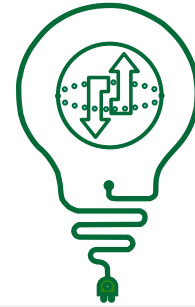
量子コンピューターの優位性の明確化

- 古典コンピューターの導入が進んでいる倉庫管理、物流管理業務などは従来手法に対して量子コンピューターの優位性を発揮することが難しい

現場の協調とデータ整備・標準化

- 経営者が推奨しても現場が納得しなければ実用化は実現しない
- 業務のノウハウは熟練者の頭の中にあり明文化されていないケースが多い
- サプライチェーン全体の最適化には部門・システム間のデータ標準化が必要

今後の展望



将来的にはサプライチェーン全体の最適化領域での活用を期待

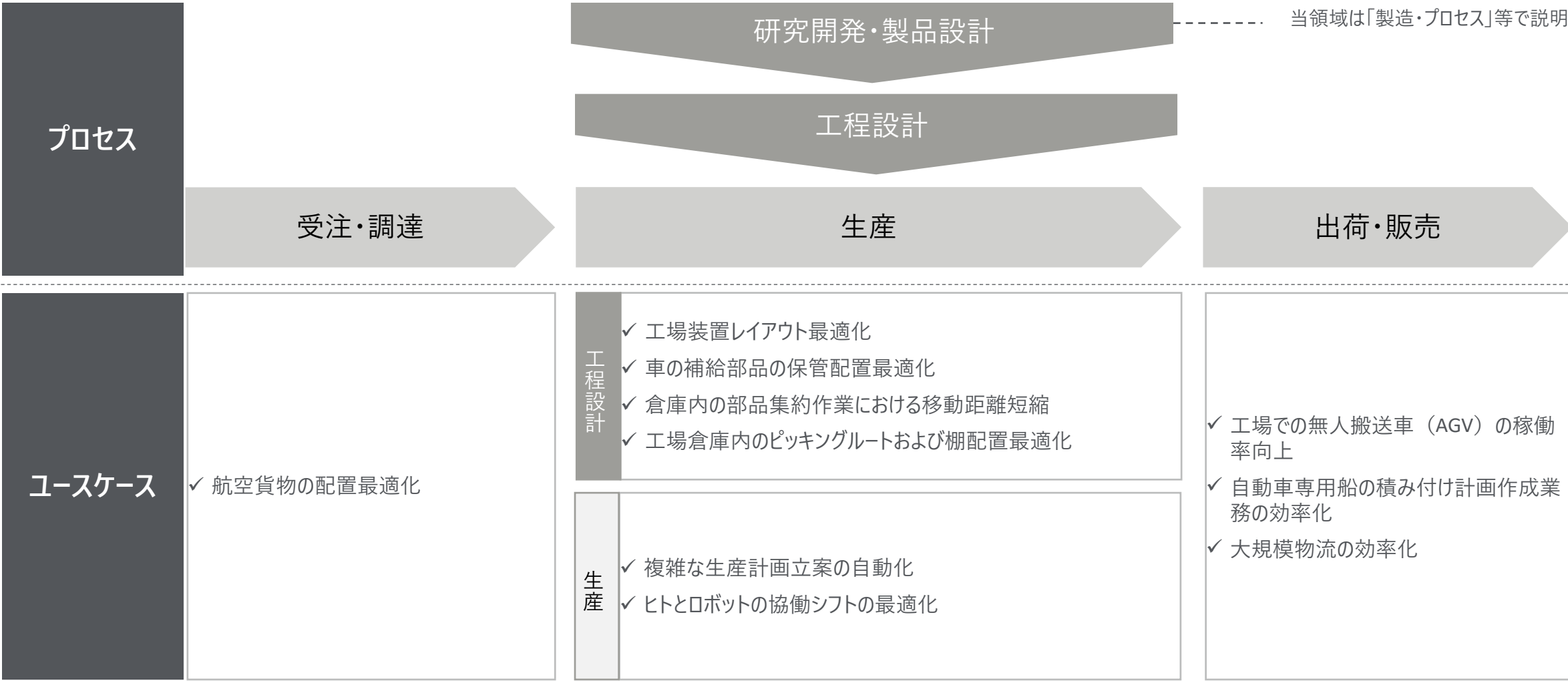
- サプライチェーン全体での最適化には、連携データの種類・量や最適化パラメータが増加し、量子活用のニーズが高まる

古典コンピューターとの組み合わせと組織設計等の環境整備

- 現場のニーズを起点とし、従来手法との棲み分け・組み合わせによる導入が重要
- サプライチェーン横断のKPI設計、組織設計に加え、DXの前提となるデータ整備が重要

製造・組立 ユースケースの整理

製造・組立の領域では、工程設計におけるレイアウトの最適化や、出荷・販売における輸送の最適化を中心にユースケースを確認できた



製造・プロセス、創薬医療 ユースケースの傾向

製造・プロセス、創薬医療の領域では、研究開発期間の短縮や新規の素材・創薬開発に資するユースケースがあり、先進企業では素材開発のための計算アルゴリズム開発を見据えて研究開発に取り組んでいる

主たる用途



主なユースケースは素材候補や創薬候補の効率的探索による研究開発期間の短縮、新規の素材・創薬開発の加速

- 材料の物性値予測や様々な化学反応の解析シミュレーション、大規模分子・固体向け高精度エネルギー計算、中分子医薬品候補化合物の探索など

ビジネス効果と成熟度



技術成熟度は低い、一部の先進企業は取り組み始めている

- 量子ゲート技術の活用が必須であるため実用化が遠いものの、量子コンピューターの本格普及後に参入した場合、必要なマシンリソースを確保できない可能性がある
- IT企業/OEMを含む異業種の参入も考えられるため、早めに対応しないと淘汰される可能性も
- したがって、素材開発のための計算アルゴリズムを早期に開発して、デファクトスタンダードとして普及させることも可能

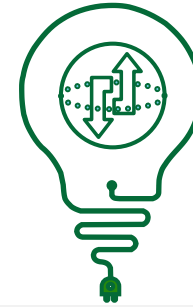
普及に向けた課題感



ゲート技術の開発やキラーアプリケーションの探索

- アルゴリズム/ハードウェア含めた量子ゲート技術の成熟度の低さに加え、従来手法に対する優位性およびビジネス効果が明確になった具体的なキラーアプリケーションは未だ見つかっていない状態

今後の展望



ユーザーの早期理解

- 当該領域の主なユーザーは研究開発部門であり、同部門は既に量子科学計算に取り組んでいることから、量子コンピューター導入メリットの理解・実践につながる

海外大学・研究機関との技術連携

- 今後は、世界の最先端の研究者と連携（カナダのトロント大学やNVIDIAなど）と協業することで、日本国内の技術力・人材強化にもつながる

製造・プロセス ユースケースの整理

製造・プロセスの領域では、研究開発における素材探索を中心にユースケースを確認できた

プロセス	研究開発		
	素材探索	検証実験	評価
ユースケース	✓ 自動車材料デザインへの適用に向けた分子シミュレーション ✓ 自動車の燃料電池開発における酸素還元反応のモデル化 ✓ 材料の物性値予測や様々な化学反応の解析シミュレーション ✓ 大規模分子・固体向け高精度エネルギー計算	✓ 既存の材料データ×機械学習を活用した材料の特性予測 ✓ 航空機向け複合材料の設計改善	—

創薬医療 ユースケースの整理

創薬医療の領域では、研究開発におけるリード探索・最適化を中心にユースケースを確認できた

プロセス	研究開発		
	創薬ターゲット選定	リード探索・最適化	臨床試験
ユースケース	✓ タンパク質のアロステリック制御予測による創薬ターゲットの拡大	✓ 中分子医薬品候補化合物の探索 ✓ 薬物代謝酵素の電子構造に関する分子シミュレーション ✓ アルツハイマー病の原因酵素BASE1に対するリード化合物の薬効分析	—

金融 ユースケースの傾向

金融の領域では、ポートフォリオ最適化やモンテカルロシミュレーションが現在のキラアアプリケーションであり、将来的な規制を見据えて3メガ等でも取組を進めているところ

主たる用途



主なユースケースはポートフォリオ最適化、モンテカルロシミュレーション、信用性スコアリング

- 流動資産ポートフォリオの最適化、デリバティブ価格算定のためのモンテカルロシミュレーション、中小企業の信用性スコアリングなど
- 特に、損害保険のポートフォリオ最適化とモンテカルロシミュレーションがキラアプリケーション

ビジネス効果と成熟度



規制対応に先行した先進企業の早期取組

- モンテカルロシミュレーションへの量子コンピューター導入は3メガを筆頭とする一部の国内先進企業では、将来的に規制・ガイドライン対応や競争優位性を保てず事業が継続できない可能性（ホラーストーリー）を見据えて早期から取り組んでいる

一部ユースケースは実用化まで進む

- 損害保険引き受け業務において、CMOSアニーリングの実務利用を開始しているユースケースがある

普及に向けた課題感



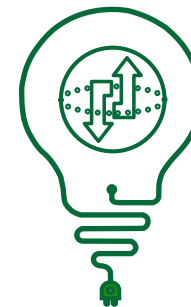
FTQCに関連した量子コンピューター技術の成熟度

- 現時点ではNISQを銀行業務に適用した事例はなく、銀行業では厳密性が求められるためFTQCの量子コンピューター活用が求められている

キラアプリケーション探索の継続

- 例えば、金融機関における裁定取引の最適化については、金融各社がそれぞれのやり方で既に取り組めているため、現時点での特段の課題/悩みがない

今後の展望



キラアプリケーションの横展開

- 金融業界には「競合他社が量子コンピューターに取り組んだ場合に、自社も取り組まないと金融サービスの質が劣り市場から淘汰される可能性がある」と考える企業が多く、有望なキラアプリケーションが1つ見つければ横展開が進みやすい

金融工学エンジニアと量子コンピューター技術の有識者の協働

- 数理最適化に取り組むエンジニアと量子サービサー/ベンダー等との協働によるキラアプリケーションの探索

金融 ユースケースの整理

金融の領域では、証券の金融商品の取引や保険の商品開発・営業を中心にユースケースを確認できた

銀行 貸出業務*1	プロセス	商品開発	提案・交渉	審査・貸出	モニタリング・回収
	ユースケース	✓ 流動資産ポートフォリオの最適化	—	✓ 中小企業の信用性スコアリング	—
証券 ブローカー業務*2	プロセス	商品開発・営業	注文・約定	清算・受渡	アフターサービス
	ユースケース	✓ デリバティブ価格算定のためのモンテカルロシミュレーション	✓ 株式投資の運用ポートフォリオの最適化 ✓ 金融商品の裁定取引の最適化 ✓ ポートフォリオ最適化に必要なリソース見積もり		—
保険	プロセス	商品開発・営業	契約・保全	保険金支払い	アフターサービス
	ユースケース	✓ 損害保険ポートフォリオ最適化 ✓ 車両センサデータに基づく運転リスクの予測	—	—	✓ コールセンターにおける最適な勤務シフト作成

*1:銀行業務には他にデリバティブや投信の販売業務も想定されるが貸出業務と比較して収益割合は小さい＆証券側で議論されるため劣後

11 *2:証券業務には他にディーラー・アンダーライティング・セリング業務等も想定されるが、ブローカー業務と大卒の業務フローや量子コンピューターの活用先は変わらないと想定されるため劣後

交通 ユースケースの傾向

交通の領域では、社会課題解決に資するような防災関連のユースケースが多く、将来的には人命救助に資する活用が期待される

主たる用途



主なユースケースは物流ルートの最適化や積み荷の最適化、人流ルートの最適化

- 交通流最適化（渋滞解消）、大都市での交通信号の最適化、災害時の被害抑制に向けた人流の最適化など
- 社会課題解決に資する領域が多い**
- 「防災」という社会的課題の解決に向けて、被災（水害）時のルート最適化といった社会的使命感のあるユースケースがある

ビジネス効果と成熟度



一部ユースケースは実用化まで進む

- イジング技術を活用して実用化まで進んでいるユースケースがある

普及に向けた課題感



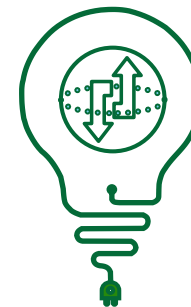
量子コンピューターの優位性の明確化

- 他領域と同様に、従来手法（古典コンピューター）に対する量子コンピューター技術の優位性を発揮することが難しい

現場の協調とデータ整備・標準化

- 製造組立領域と同様に、人手の余地が残っている領域であることから、実用化に向けた現場の協力やデータの整備・標準化が必要

今後の展望



将来的には人命救助に資する活用を期待

- 防災関連のユースケースは人命救助の観点から、他ユースケースよりも計算速度・精度の改善にメリットを感じやすいと想定

交通 ユースケースの整理

交通の領域では、ヒトを対象とした陸運を中心にユースケースを確認できた

		運搬の手段		
		陸運	海運	空運
運搬の対象	ヒト	✓ 交通流最適化_渋滞解消 ✓ 大都市での交通信号の最適化 ✓ マルチモーダル輸送システムの経路最適化 ✓ 災害時の被害抑制に向けた人流の最適化	—	✓ 空飛ぶクルマ（エアモビリティ）の交通制御
	モノ	✓ 大規模物流の効率化（*製造・組立領域に掲載）	✓ 海上輸送の航路最適化 ✓ 自動車専用船の積み付け計画作成業務の効率化（*製造・組立領域に掲載）	✓ 航空貨物の配置最適化（*製造・組立領域に掲載）

エネルギー ユースケースの傾向

エネルギーの領域では、発電・送配電計画、電力消費計画の最適化のユースケースが多く、計算量が多い電力市場取引での活用が期待される

主たる用途



主なユースケースは発電・送配電計画の最適化、電力消費計画の最適化

- 不安定な再エネ電源出力の予測、VPP（仮想発電所）の需給調整最適化、データセンターの消費電力削減に向けた設備運転計画の最適化など

ビジネス効果と成熟度



基礎研究段階で、一部の先進企業は実証を通じて技術・知見の蓄積が進む

- 製造・組立領域と同様に比較的実用化に近い最適化の領域が中心であるが、実用化まで進んでいるユースケースは存在しない
- 一部の先進企業はVPP運用の最適化実証を実施（量子コンピューター関連の技術・知見の蓄積が主目的）

普及に向けた課題感



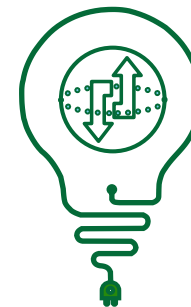
量子コンピューターの優位性の明確化

- 現状、古典コンピューターに対する優位性の確立を目指してゲート（FTQC）の技術開発を進めているが、その実用化は2035-40年頃の見込

ユーザーメリットの明確な検証

- 例えば、電力会社による発電計画の最適化やVPP（仮想発電所）運用の最適化などが有望視されているが、量子コンピューターの導入により更なる計算時間短縮を実現した際に、電力会社が享受する経済的メリットについて明確に検証できていない

今後の展望

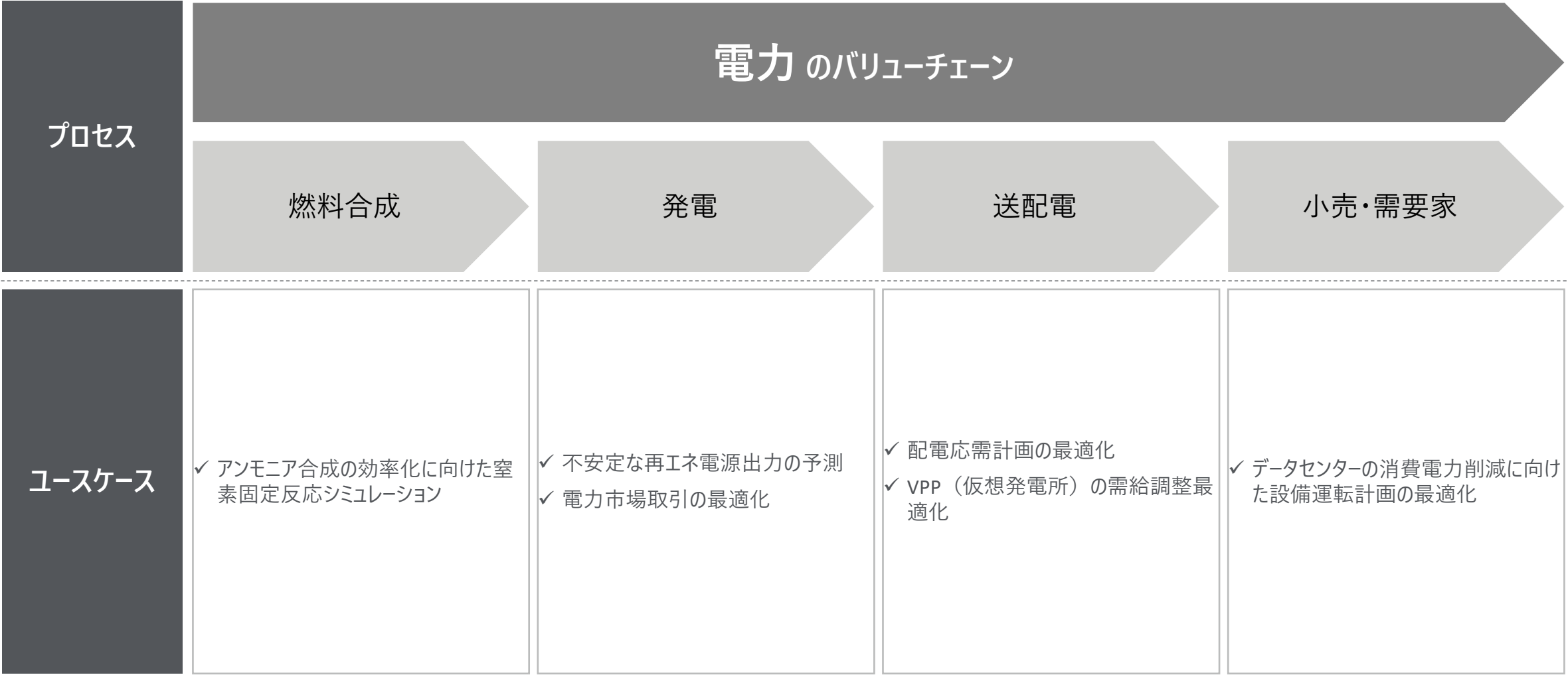


電力市場取引の最適化領域での活用を期待

- 電力市場取引の最適化では、卸電力市場・需給調整市場・容量市場の取引運用を最適化することによりトレーダーの収益を最大化することが求められる
- 上記の最適化計算は、政策動向や気象条件、設備状態、トレーダーのリスク嗜好や競合トレーダーの動きなど不確実性の高い領域でありその計算には膨大なパラメータが必要となる。また、再エネなどの変動電源や蓄電池の導入拡大に伴い、欧米を中心に電力市場の取引ルールは複雑化している

エネルギー ユースケースの整理

エネルギーの領域では、電力のバリューチェーンそれぞれに対してユースケースを確認できた



CAE ユースケースの傾向

CAEの領域では、CFD（数値流体力学）といった計算機シミュレーションの高度化などのユースケースがあり、既存の設計・開発現場/環境への量子コンピューター技術の組み込みによって、真価を発揮する

主たる用途



主なユースケースは計算機シミュレーション（CFD：数値流体力学など）の高度化、量子AIを活用した材料探索、構造最適化

- ジェットエンジン高性能化、固有振動数解析による共振の防止、車両設計最適化など

ビジネス効果と成熟度



組み合わせ最適化における早期成果の期待

- 計算機シミュレーションの高度化は量子コンピューター（ゲート）で計算する必要があるため実用化は遠いものの、組み合わせ最適化はアニーリングで計算可能であるため成果が早く期待できる
- さらに、計算機シミュレーション高速化・組み合わせ最適化・量子AI活用を1つにインテグレート（統合）できれば、古典コンピューターでは不可能な更なる高度な処理が期待される

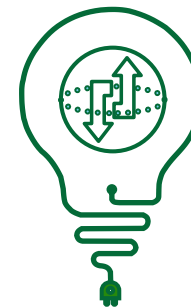
普及に向けた課題感



設計・開発現場におけるDX化の推進

- 実際の製品設計・製造の現場に導入されたユースケースは確認されない
- これは、他領域と同様の技術的な課題に加え、Quantum CAEの利用者として想定される設計・開発現場においてそもそもDX化が進んでいないことが挙げられる

今後の展望



既存の設計環境への量子コンピューター技術の組み込み

- 特定の数値計算単体に量子コンピューターを適用したとしても、ユーザーごとに設計プロセスに組み込む場合、負担が大きい
- CAEはあくまでも設計支援システムの1機能であるため、設計作業全体の自動化を行うEDAツールの中にQuantum CAEを組み込み、ユーザーが量子技術を意識することなく設計に活用出来るようになった場合、Quantum CAEが広く社会で活用されるようになる

* CAE：Computer Aided Engineering

CAE ユースケースの整理

CAEの領域では、構造解析や流体解析、電磁場解析の種類でユースケースを確認できた

各CAEの概要		CAEの種類			
		構造解析	流体解析	電磁場解析	伝熱解析・音響解析
ユースケース	計算機シミュレーション	✓ 量子位相推定を用いた固有振動数解析による共振の防止	✓ 航空機設計における空力特性の最適 ✓ ジェットエンジンの高性能化	—	—
	組み合わせ最適化	✓ ブラックボックス最適化を活用した車両設計最適化	—	✓ 4層プリント回路基板におけるデカップリングコンデンサの最適化	—

AI ユースケースの傾向

AIの領域では、量子センサ等を活用した複素数データ（波動関数）の入力や未知の状況に強い高精度な機械学習の実現、推論実行時の高速化、低コスト・低消費電力化といったユースケース探索が行われている

主たる用途



主たるユースケースは量子センサ等を活用した複素数データ（波動関数）の入力、未知の状況に強い高精度な機械学習の実現、推論実行時の高速化、低コスト・低消費電力化

- 量子データを活用した物理系の性質予測の高精度化、量子カーネル学習を用いた通信サービス故障診断システム、バイオメディカル情報解析におけるLLMの低コスト化など

ビジネス効果と成熟度



量子コンピューターの強みを活用した技術研究及び適用領域の設計フェーズにとどまる

- 量子AI技術の必要性は現段階では顕在化されていないが、量子コンピューターの強みを活用したアプリケーションに対する技術検証が進む

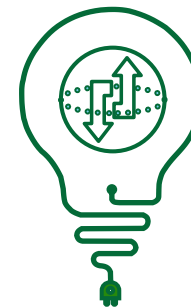
普及に向けた課題感



ユーザーメリットの確立

- 有望な“学習の高速化”も未実現であり、それ以外の強みを含め既存AI技術に代替するほどの優位性（例：自動運転における更なるレスポンスタイムの向上）が求められるユースケースもまだ見つかっていない
- 具体的なユースケースが明確になっていないため、技術成熟度や経済的インパクトも未知数

今後の展望



量子AIが生み出す3つの可能性

- ① 量子AI技術を起点とした全く新しいユースケース（新産業の創出）
- ② 量子AI技術の活用による限定的/極限的なユースケース（例：自動運転レーシングカー）
- ③ 既存技術の代替的なユースケース（例：データセンターの消費電力削減効果）

* 本調査では、「量子AI」とは量子コンピューティングを活用し、処理の一部または全て（学習データの準備含む）を、量子状態によるデータの表現や量子回路を用いて行うAI技術と定義

AI ユースケースの整理

AIの領域では、推論（推論処理～アウトプット）を中心にユースケースを確認できた

プロセス	学習～推論		
	インプット（データ収集）	モデル学習	推論（推論処理～アウトプット）
ユースケース	【量子センサ等を活用した複素数データ（波動関数）の入力】 ✓ 量子データを活用した物理系の性質予測の高精度化	【未知の状況に強く精度が高いAIの実現】 ✓ 量子カーネル学習を用いた通信サービス故障診断システム ✓ 量子強化学習を用いたロボットアーム制御の向上	【推論実行時の高速化、低コスト・低消費電力化】 ✓ 独自量子LLMを用いた大規模ガントチャートの高速生成 ✓ バイオメディカル情報解析におけるLLMの低コスト化 ✓ 量子ニューラルネットワークを活用した画像生成 ✓ NeRFモデルを用いた画像の3Dモデル変換のAIモデル圧縮
	【精度の高い乱数・確率分布を生成・入力】 ✓ 量子GANとQAOAを用いたVPP需給調整最適化（*エネルギー領域に掲載）	【高速かつ質の高い探索の実現】 ✓ 量子AI創薬プロセスの概念実証 ✓ 量子生成AIを用いた抗がん剤候補の作成	

セキュリティ ユースケースの傾向

セキュリティの領域では、RSA暗号や楕円曲線暗号の解読のおそれがあり、現段階ではその実現可能性は低いと想定されるものの、予防策を講じていくことが肝要である

主たる用途



RSA暗号、楕円曲線暗号の解読

- 既存の暗号のうち量子コンピューター（Shorアルゴリズム）で解読可能な暗号はRSA暗号や楕円曲線暗号であると想定される

ビジネス効果と成熟度



暗号解読はまだ先か

- 短期的には、大規模かつ長時間にわたって安定稼働する量子コンピューターの実現は困難であり、RSA暗号は当面安全である見込み

普及に向けた予防策

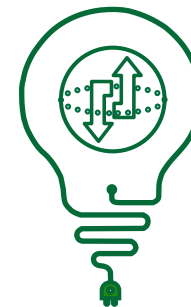


早期の暗号強化対策

- 犯罪者によるハーベスト攻撃*の可能性を踏まえると、量子コンピューターによる暗号解読が実現されるより、ずっと前から暗号強化の対策が必要になる

*犯罪者が暗号化されたデータをあらかじめ保存しておいて将来的な技術成熟後に同データを解読・悪用すること

今後の展望



耐量子計算機暗号、PQCへの移行

- 米国連邦政府およびNISTでは、2024年に量子コンピューターでも解読できない公開鍵暗号（耐量子計算機暗号、PQC）を標準化しており、既にGoogleやAppleは自社製品におけるPQCへの移行を推進している

第2章 ユースケースの一覧

ユースケース一覧

産業領域	ユースケース名	
製造・組立	航空貨物の配置最適化	P. 25
	複雑な生産計画立案の自動化	P. 27
	ヒトとロボットの協働シフトの最適化	P. 30
	工場装置レイアウト最適化	P. 32
	車の補給部品の保管配置最適化	P. 36
	倉庫内の部品集約作業における移動距離短縮	P. 38
	工場倉庫内のピッキングルートおよび棚配置最適化	P. 40
	工場での無人搬送車（AGV）の稼働率向上	P. 42
	自動車専用船の積み付け計画作成業務の効率化	P. 45
	大規模物流の効率化	P. 47
製造・プロセス	自動車材料デザインへの適用に向けた分子シミュレーション	P. 49
	自動車の燃料電池開発における酸素還元反応のモデル化	P. 52
	材料の物性値予測や様々な化学反応の解析シミュレーション	P. 53
	大規模分子・固体向け高精度エネルギー計算	P. 55
	既存の材料データ×機械学習を活用した材料の特性予測	P. 57
	航空機向け複合材料の設計改善	P. 59

産業領域	ユースケース名	
創薬・医療	タンパク質のアロステリック制御予測による創薬ターゲットの拡大	P. 61
	中分子医薬品候補化合物の探索	P. 63
	薬物代謝酵素の電子構造に関する分子シミュレーション	P. 65
	アルツハイマー病の原因酵素BASE1に対するリード化合物の薬効分析	P. 68
金融	流動資産ポートフォリオの最適化	P. 71
	中小企業の信用性スコアリング	P. 72
	デリバティブ価格算定のためのモンテカルロシミュレーション	P. 74
	株式投資の運用ポートフォリオの最適化	P. 75
	金融商品の裁定取引の最適化	P. 76
	ポートフォリオ最適化に必要なリソース見積もり	P. 78
	損害保険ポートフォリオ最適化	P. 79
	車両センサデータに基づく運転リスクの予測	P. 80
	コールセンターにおける最適な勤務シフト作成	P. 81

ユースケース一覧

産業領域	ユースケース名	
交通	交通流最適化（渋滞解消）	P. 84
	大都市での交通信号の最適化	P. 88
	マルチモーダル輸送システムの経路最適化	P. 90
	災害時の被害抑制に向けた人流の最適化	P. 92
	空飛ぶクルマ（エアモビリティ）の交通制御	P. 93
	海上輸送の航路最適化	P. 95
エネルギー	アンモニア合成の効率化に向けた窒素固定反応シミュレーション	P. 97
	不安定な再生電源出力の予測	P. 100
	配電応需計画の最適化	P. 102
	データセンターの消費電力削減に向けた設備運転計画の最適化	P. 104
	電力市場取引の最適化	P. 106
	VPP（仮想発電所）の需給調整最適化	P. 108

技術領域	ユースケース名	
CAE	量子位相推定を用いた固有振動数解析による共振の防止	P. 111
	航空機設計における空力特性の最適	P. 113
	ジェットエンジンの高性能化	P. 116
	4層プリント回路基板におけるデカップリングコンデンサの最適化	P. 118
	ブラックボックス最適化を活用した車両設計最適化	P. 120
AI	量子データを活用した物理系の性質予測の高精度化	P. 123
	量子カーネル学習を用いた通信サービス故障診断システム	P. 126
	量子強化学習を用いたロボットアーム制御の向上	P. 129
	独自量子LLMを用いた大規模ガントチャートの高速生成	P. 132
	バイオメディカル情報解析におけるLLMの低コスト化	P. 134
	量子ニューラルネットワークを活用した画像生成	P. 136
	NeRFモデルを用いた画像の3Dモデル変換のAIモデル圧縮	P. 139
	量子AI創薬プロセスの概念実証	P. 141
	量子生成AIを用いた抗がん剤候補の作成	P. 143
セキュリティ	RSA暗号の解読可能性評価	P. 146

製造・組立

航空貨物の配置最適化	P. 25
複雑な生産計画立案の自動化	P. 27
ヒトとロボットの協働シフトの最適化	P. 30
工場装置レイアウト最適化	P. 32
車の補給部品の保管配置最適化	P. 36
倉庫内の部品集約作業における移動距離短縮	P. 38
工場倉庫内のピッキングルートおよび棚配置最適化	P. 40
工場での無人搬送車（AGV）の稼働率向上	P. 42
自動車専用船の積み付け計画作成業務の効率化	P. 45
大規模物流の効率化	P. 47



取組の背景

- 世界の航空貨物市場は、2042年までに現在より50%成長するとAirbusは予測しており、顕在化しているサプライチェーンの危機はさらに深刻化すると想定
- 航空会社は効率的輸送、収益最大化、消費燃料の低減に向けて、**航空機のペイロード（有償荷重）能力を最大限に活用し、運用コスト（燃料燃焼）の削減に向けてパフォーマンスに影響を与えるパラメータの最適化を訴求している**
- ただし、最適化は遵守する必要のある航空機の運用範囲によって制限される
 - ✓ **最も重要な制限は、特定のミッションにおける航空機の最大積載量、搭載された航空機の重心位置、およびその機体のせん断限界、である**
- 航空貨物の安全な積み込み、輸送などを管轄するロードマスターには、燃料燃焼、全体的な運用コストの削減、及び負荷（ロードシート）を正確に計画し、すべての運用および安全要件を満たす責務がある
 - ✓ これまでは、最適化業務は手動、あるいは「ドラッグ&ドロップ」アプリケーションが使用されてきたが、パラメータの組合せの複雑さが増大し限定的な使用にとどまっている

解決したい課題・モチベーション

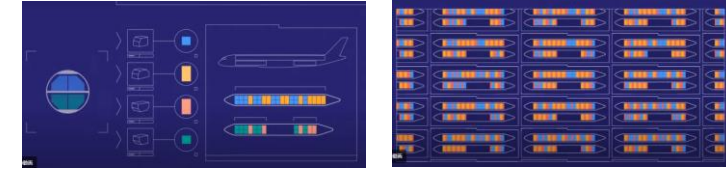
- **指数関数的な組合せ数を持つ積荷配置の最適化問題はNP困難問題（指数関数的に複雑になる問題）に分類され、古典コンピューターでは現実的な時間内で解くことが困難**
- 上記を踏まえ、2022年Airbusは12ヶ月の量子貨物配置最適化/量子機械学習プロジェクトにおいてIonQとパートナーシップを締結し、コスト低減とCO₂排出量低減に向けた航空機搭載用の量子アプリケーションのプロトタイプの開発を実施した

期待されるビジネス効果

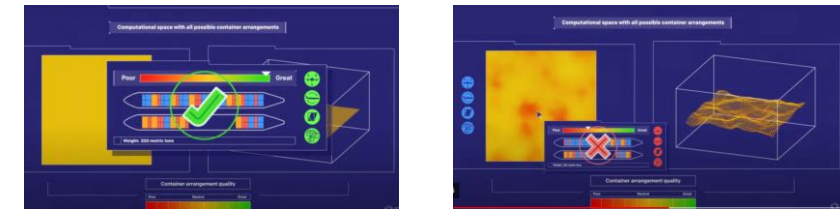
- 実証では3種類の仮想コンテナを含む運行上の制約条件を満たす積載可能な最大重量を持つ最適な配置を抽出した
 - ✓ **IonQForte（28量子ビット）を活用し、変分最適化アルゴリズムを25万回反復する計算を正常に実行**
- 本実証は、2023年時点でゲート型量子システムで実行された最大の最適化アルゴリズム

量子コンピューターとしての問題設定

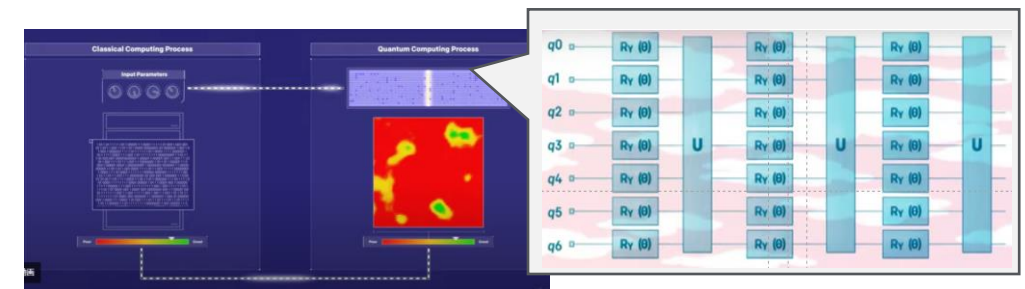
- 複数の種類のコンテナを保持する様々なスロットが存在する**航空機**の貨物の**最適配置**は制約付き組合せ最適化問題となる
 - ✓ 制約として、**貨物積載量、最大貨物質量での重心、航空機のせん断限界、及び仮想コンテナ**を検討
- 量子コンピューターを活用した最適化問題では、コンテナと格納するスロットの全ての組み合わせは、量子ビットの重ね合わせ状態で同時処理が可能
- 量子コンピューター計算により、航空機の運用上の制約に違反することなく最大重量貨物の積載が可能なコンテナの配置を示す量子状態を探索
 - ✓ 変分最適化アルゴリズムにより、制約を満たすコンテナとスロットの組み合わせと、満たさないものを識別
- 上記計算処理は、入出力データの処理を担う古典コンと、最適な配置の振幅を増幅するプロセスを担う**量子コンピューター（ゲート方式のIonQ Forte）**を組み合わせで実行
 - ✓ 古典コンピューターは量子回路に影響する入力パラメータを選択し、量子コンピューターで制約を満たす配置の振幅が増幅され、結果が再度古典コンピューターに送られ、評価される
 - ✓ 上記の一連のプロセスが反復され、最終的に運用可能な配置が最大振幅の状態として抽出される



航空機のスロットへのコンテナ配置（左）と組合せ例（右）



量子コンピューターが抽出した制約を満たすコンテナ配置（左）と満たさない配置（右）



ハードウェア構成（左）とアルゴリズム（右）
古典コンピューターでの入力処理と量子コンピューターの大規模計算の反復

取組の背景

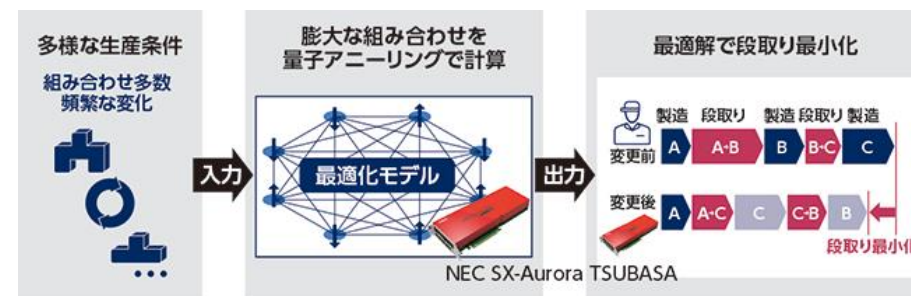
- 多品種少量生産、製品ライフサイクルの短縮化、生産量の変動、さらには半導体部品の需給ひっ迫といった要因により**複数の品種を日々変わる要望量に応じて迅速に生産する需要が顕在化**
- 一方で生産性向上には、**生産品種が変わるごとに数百種類ある部品や設備設定を変更する「段取り」の効率化が不可欠だが、段取り自体に付加価値がないため、複雑な段取りの立案プロセスを短時間で実行できるかが競争力向上には必要**
 - ✓ 「段取り」で決められる、「『いつ』『どの順番で』その日に必要な品種を生産するのか」の組み合わせにより、生産工程の時間は大きく変動するため
- これまでは、**生産工程を熟知する熟練作業者が、変動に応じて段取りを最小化するための生産計画を立案してきた**

解決したい課題・モチベーション

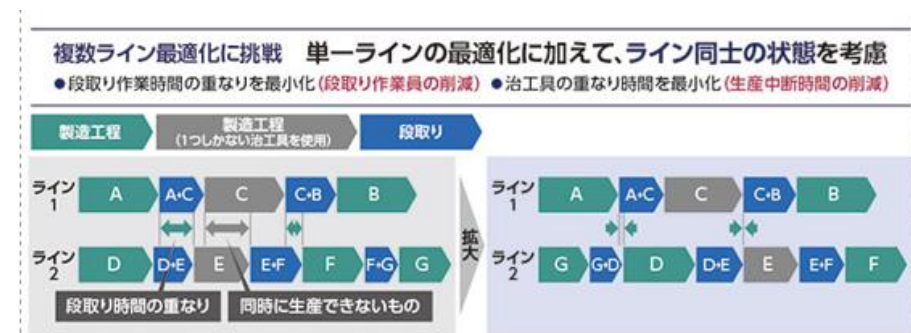
- 多品種少量生産などによる**生産計画のさらなる複雑化により、現状熟練作業でも効率的な計画立案が難しい状況**
 - ✓ プリント基板を製造する表面実装(SMT)工程では、1ラインで異なる複数の品種を生産する混流生産を行っているが、部品や設定などを変更する「段取り」はラインを停止して行うため、段取りが増えると生産性の低下を招いてしまう
- **生産計画立案業務が熟練作業者に集中していたが、労働人口減少により段取り調整に精通した熟練工の不足が顕在化し、また、AIを含む既存の仕組みでは自動化は難しく、スキルの継承も課題**
- 上記を踏まえ、NECプラットフォームズは突発的に発生する設定変更に瞬時に生産計画の修正を実現するため、高速計算が可能な量子コンピューター技術を活用し計画立案の自動化を企図した

量子コンピューターとしての問題設定

- 量子コンピューター技術により、段取りを最短化する生産計画立案の自動化、及び複数ラインでの混流生産^{*1}における高効率な生産計画立案を実証
 - ✓ 複数ライン x 混流生産は、ライン間の作業員や治工具などのリソースまで考慮することから膨大なパラメータの組合せを処理するのは古典コンピューターでは困難ゆえ、同時高速処理可能な量子コンピューターの強みを活用
- 目的関数として、段取り作業員の削減、生産中断時間の削減が想定される
 - ✓ 配送距離、時間、コストを最小にする配送計画の立案、役職やスキル等を満たす勤務シフトの計画立案など大規模な組合せ最適化問題の超高速処理を実現
- 量子コンピューティング技術により膨大な組合せ問題の超高速処理を実現する「NEC Vector Annealingサービス」を活用
 - ✓ 量子アニーリング方式の技術をNEC製SX-Aurora TSUBASA ベクトル型スパコンに適用する疑似量子アニーリングプラットフォームを活用



疑似量子アニーリング技術の高速処理を活用した製造ラインの生産計画の最適化



熟練工でも困難な複数の生産ラインによる混流生産の最適化

参考：NECプラットフォームズ「量子コンピューティング技術の活用で複雑な生産計画立案の自動化に成功」(https://jpn.nec.com/quantum_annealing/case/necplatforms/index.html)、NEC「多様化するビジネスの課題を組合せ最適化問題として解決に導くNEC Vector Annealing サービス」(<https://jpn.nec.com/nec-vector-annealing-service/index.html>)

^{*1}: 混流生産は、異なる複数の品種を同一ラインで生産する方式

期待されるビジネス効果

- 「段取り」を最短化した生産計画立案の自動化と複数ラインの超高速同時最適化を実現
 - ✓ 従来は熟練作業（人手）でも1～2時間かかった生産計画立案を、同等精度の計画を10分程度で立案可能
 - ✓ また、更に複雑な複数ラインの同時最適化により、ライン同士の段取り時間をずらすことで、熟練作業の計画にはなかった作業の負担軽減など付加価値のある計画策定が実現
- 生産計画自動化により段取り工数50%削減、設備稼働率15%向上、生産計画立案工数90%削減の見込み
 - ✓ 最適化のスコープを広げるほど全体コスト削減につながる価値提供の実現
- 古典コンピューターのAIでは、新製品が出るたびに機械学習用のデータを収集する必要があるが、左記データが揃わなかったため、導入・比較できなかった

取組の背景

- 生産工場においては、一部生産工程にロボットを導入しロボットや作業員が、ある決められた作業を繰り返すよう作業割り当てされることで作業効率化が実現している
- 一方、総菜製造を行う食品工場では、取り扱う対象物が不定形の場合が多く、また多品種小ロットであることからロボットの導入が困難で大部分の作業を人手に依存してきた
 - ✓ 不定形の惣菜を見栄え良く盛り付ける必要があるが、粘着力のあるポテトサラダや水分の多い酢の物を、同じ機械がつかんで指定量を盛り付けることが困難なため機械化が進んでこなかった
- ところが労働力不足が顕在化する中、自動化による人手不足解消と生産効率化のため、総菜工場でも生産工程の一部にロボット導入の必要性が高まっている
- その際問題になるのが、人とロボット混成の最適なシフト作成にある
 - ✓ これまで総菜工場の勤務シフトは工場の責任者等が経験に基づき手作業で作成

解決したい課題・モチベーション

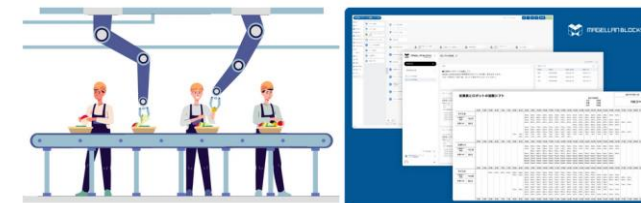
- 人とロボットが協働する工場において、従業員ごとに異なる勤務時間や休日、従業員間の作業スピードの違い、及びロボットの作業能力等様々な条件を加えた膨大な組み合わせから最適な勤務シフトを人が作成するのは困難で、古典コンピュータでも膨大な計算リソースが必要
- そこで、マックスバリュ東海とグルーヴノーツは共同で人・ロボット混成の勤務シフト作成に量子コンピュータ技術を活用し、従業員を増やすことなく従業員の負荷を軽減し生産性向上の実現を企図

期待されるビジネス効果

- 量子クラウドプラットフォームを活用した「Magellan Blocks」により、人・ロボットに関するパラメータの膨大な組合せから、最適な人・ロボット混成勤務シフトを約10分で作成
 - ✓ 量子コンピュータの処理時間自体は10万分の1秒程度であり、データの取り込み、シフト表への変換など前後工程を含めた時間が10分程度
 - ✓ 実運用には至っていないが、これまでの人手による勤務シフトとそん色ない結果

参考：産経新聞社「量子コンピュータが考える「勤務シフト」 最先端技術が10分で変える働き方」

（<https://www.sankei.com/article/20230602-SRG2QXNDJRJONPFKBPBJKB3FJ4/>）、株式会社グルーヴノーツ「マックスバリュ東海とグルメデリカで、量子コンピュータを用いたシフト作成サービスの活用を開始 | ニッセーデリカは、AIによる注文量予測を実施」（<https://www.magellanic-clouds.com/blocks/2022/03/29/robot-friendly-2/>）、株式会社インプレス「マックスバリュ東海、惣菜製造の勤務シフトを量子コンピュータで作成、製造ラインのロボットも対象」（<https://it.impress.co.jp/articles/-/24608>）



Magellan Blocksのシフト最適化ソリューションを活用した人・ロボット混成勤務シフト作成

期待されるビジネス効果

- マックスバリュ東海の総菜工場では多様な総菜への作業対応が必要
 - ✓ 取り扱う総菜の形・柔らかさ・盛り付け量など、多岐にわたるポテトサラダの場合小・中・大・増量など複数のケースへの対応が必要
- 実証では、ポテトサラダのロボットラインを含む約50人の勤務シフト作成の自動化を目標に設定し、業界に共通する要件の抽出と標準化した要件を基にした最適化モデルを作成
 - ✓ 入力データとして、従業員の契約時間や休日、日別の必要人数、従業員の生産力の指標としての総菜の1時間当たりの製造量（盛り付け可能量）
- 人・ロボット混成の勤務シフト作成に対して、グルーヴノーツが開発した量子クラウドプラットフォーム「Magellan Blocks」を適用
 - ✓ Magellan Blocksは、量子技術を活用し生産計画や工場物流、勤務シフトなどサプライチェーン管理に特化した最適化ソリューション
 - ✓ 稼働環境として、D-waveの量子アニーリングマシンやSQBM+（東芝）のシミュレーテッド分岐マシンによる最適化計算に特化したソルバーを活用

日々の更新情報を取り込み、ボタンを押すだけで簡単にシフト作成が完了



Magellan Blocksのシフト最適化ソリューションを活用した
人・ロボット混成勤務シフト作成

取組の背景

- 国内労働人口の減少に伴う製造業での人手不足が常態化している
 - ✓ 人手不足は国内大企業・中小企業の94%以上で顕在化し、ビジネスへの影響がでている企業も32%に上る*1
- 人手不足の迅速な解消が困難な状況では、生産性の向上により限られた人員で生産を維持する必要性が高まっている
 - ✓ グローバル化による国際競争の激化の中、製品の競争力強化に向けた製造コスト低減にも生産性向上が急務となる
- 工場における生産性向上には、生産装置や組立に必要な部品を収納する棚の配置の最適化による作業員の移動距離（動線）を最短化する必要がある
 - ✓ 棚や装置の配置が作業工程を踏まえた配置でないため、作業員等の動線が煩雑なことが非効率な生産性の要因

解決したい課題・モチベーション

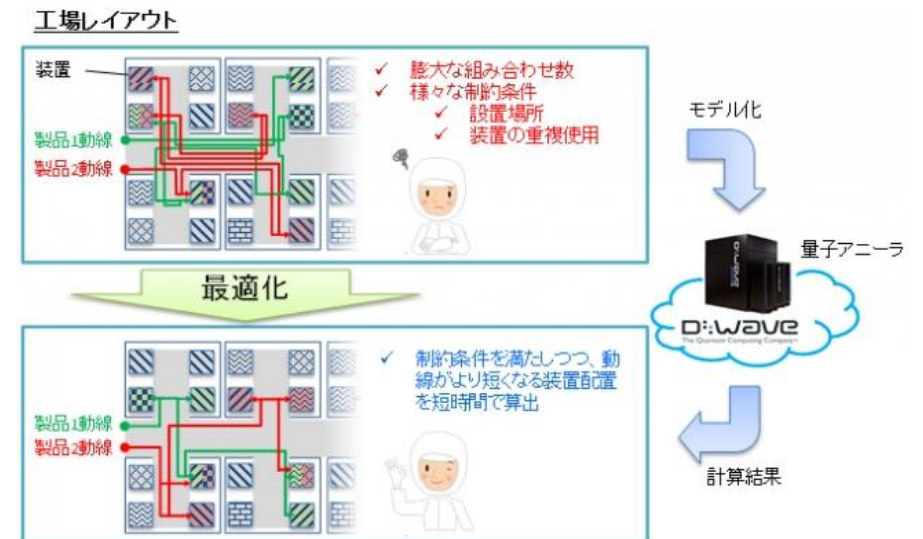
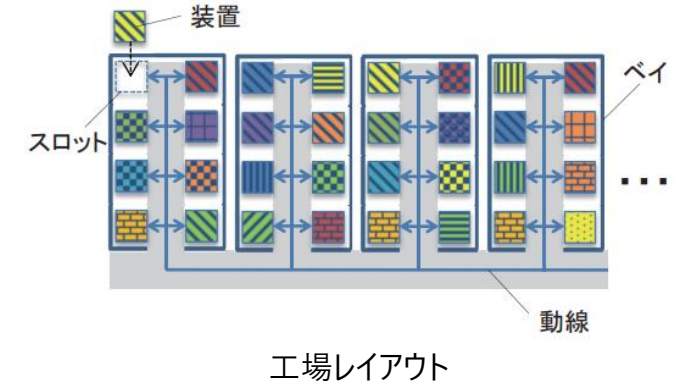
- 多種類の装置を組み合わせる生産を行う精密機器等の工場では、装置台数や種類が増加するにつれ組み合わせパターンは天文学的な数になり、装置の設置場所などの制約条件を加えるとスパコンを活用しても最適な配置の算出が不可能になる
 - ✓ OKIのLED統括工場は、製造工程の異なる複数製品を、～数百台の多種類の装置を共有し装置間を作業員が移動して製造中
 - ✓ 動線短縮のための最適な装置配置には、1,076通りの組み合わせを評価する必要があり、古典コンピューターでは1,051年程必要
- そこで、OKIはD-waveの量子アニーラを活用し、自社工場における半導体製造装置の最適な配置の算出による動線短縮（生産性向上）の可能性を検証した

参考：沖電気工業株式会社「量子コンピューターを用いた工場内装置レイアウト最適化」（https://www.oki.com/jp/otr/2020/n235/pdf/otr235_r13.pdf）、株式会社 PR TIMES「OKIとOKIデータ、製造現場の最適化実問題に量子コンピューターを適用」（<https://prtimes.jp/main/html/rd/p/000000307.000017036.html>）

*1: 経済産業省:製造業における人手不足の現状、および外国人材の活用について、2018年7月12日

量子コンピューターとしての問題設定（1/2）

- OKIのLED統括工場では、製造工程の異なる複数の製品を一部重複した装置を使用し製造している
 - ✓ 製造工程は製品を作る際の工程順と使用する装置を記したもの
 - ✓ 作業員は製造工程に従い部品を加工し次工程の装置に移動し別の加工を施す、作業を全製造行程にわたり実行する
 - ✓ 工場内は加工装置がある小間（ベイ）が複数集まり形成され、ベイ間及びベイ内の装置間には通路で連結され作業員が自由に行き来する
- 装置配置を最適化し動線を最短化する問題。複数製品を製造する工場なので各製品の動線の平均値を評価指標と定義
 - ✓ より多く製造する製品の動線を短縮する方が全体の動線の短縮化に貢献するため、各製品の製造数比（ロット数比）で重みづけし算出
- 動線最適化問題に量子アニーラを適用するため、QUBO (Quadratic unconstrained binary optimization)モデルで定式化する



量子アニーラによる動線最適化（短縮化）の概要図

量子コンピューターとしての問題設定（2/2）

量子コンピューターとしての問題設定（詳細）

問題設定	複数の製品を製造する装置配置を最適化し製品を完成するまでの動線を最短化
量子コンピューター ハードウェア	D-waveのクラウドプラットフォームを活用（製品タイプは不明）
実装	以下の最適化計算を複数回解が収束するまで実行（所要時間は30分ほど）
目的関数	作業員の動線の距離
制約	1つのスロットには必ず1つの装置を配置する（右図（3）式の第2項） 1つの装置は必ずどこか1つのスロットに配置される（右図（3）式の第3項）
変数	- 変数の数は不明 - 量子ビット間に制限があるD-Waveマシンで解決可能な論理変数を越えているため、問題を分割し繰り返し計算を実行

$$x_{s,d} = \begin{cases} 1: \text{スロット} s \text{ に装置} d \text{ を配置する} \\ 0: \text{それ以外} \end{cases}$$

QUBO変数

$$E(\mathbf{x}) = \sum_{u,t,s',s''} x_{s',d_u[t]} \cdot x_{s'',d_u[t+1]} \cdot L(s',s'') + \sum_s \left(\sum_d x_{s,d} - 1 \right)^2 \cdot p \quad (3)$$

$$+ \sum_d \left(\sum_s x_{s,d} - 1 \right)^2 \cdot p$$

動線距離を最短化するためのQUBOモデルの目的関数

- S', S'' は其々 t 番目、 $t + 1$ 番目の工程で使用する装置が配置されているスロット
- $L(S', S'')$ はスロット S', S'' 間の距離
- $d_u[t]$ は製品 u の t 番目の工程で使用する装置
- p はペナルティ係数

期待されるビジネス効果

- 最適化前の装置配置（現状の配置）と最適化計算結果を比較し動線の短縮化の良否を評価。なお、**2製品、ロット数比3パターン**の疑似的な環境下を模擬して計算
- 装置を最適化することで**2製品ともに動線距離が短縮される**
 - ✓ ロット数の多い製品の動線をより重点的に削減するようなレイアウトを算出している
- いずれのロット数比のパターンでも**20%以上の動線短縮が実現されている**

(a) ロット数比（製品1）：（製品2）＝1：4

	最適化前	最適化後	増減率
製品 1	1,510	1,284	-15%
製品 2	2,876	2,036	-29%
平均	2,603	1,886	-28%

(b) ロット数比（製品1）：（製品2）＝1：1

	最適化前	最適化後	増減率
製品 1	1,510	961	-36%
製品 2	2,876	2,307	-20%
平均	2,193	1,634	-21%

(c) ロット数比（製品1）：（製品2）＝4：1

	最適化前	最適化後	増減率
製品 1	1,510	832	-45%
製品 2	2,876	2,484	-14%
平均	1,783	1,162	-24%

複数製品を製造する際の動線距離の最適化計算結果
 （距離は規格化されているため、単位は任意）

取組の背景

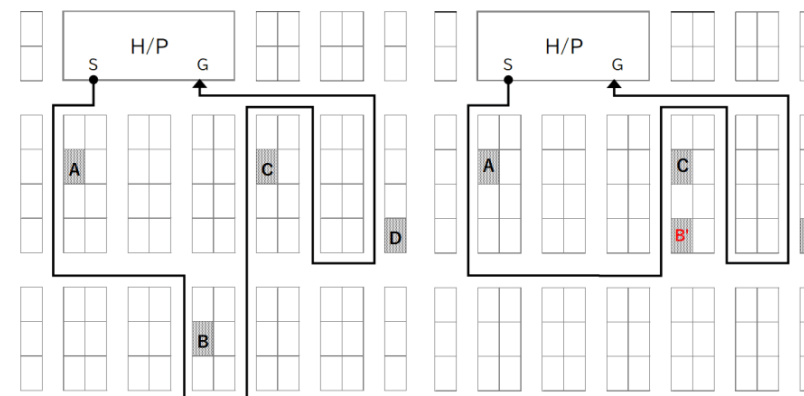
- トヨタ社内には様々な領域（設計、製造、物流、人事など）の多種多様な問題とそれらに関するデータが存在している
- 多種多様な問題に対して量子コンピューターの活用を検討することで、得意、不得意な問題の特徴を見極めている
- トヨタは検討結果から得られた知見を広く共有することで、量子技術の発展や社会課題の解決に貢献していきたいと考えている

解決したい課題・モチベーション

- 組み合わせ最適化はトヨタ社内の様々な領域で課題となっているが、組み合わせ数が膨大（数十億通り）で最適化が困難な問題である部品センターにおける車の補給部品（パーツ）の保管配置最適化を検証課題とした
- 作業者が注文が入った際に保管棚まで歩いていき、パーツを取って、戻ってくるような「ピッキング作業」において、本検証では、パーツの保管配置を変更することによって移動距離を削減することを目的とした

量子コンピューターとしての問題設定

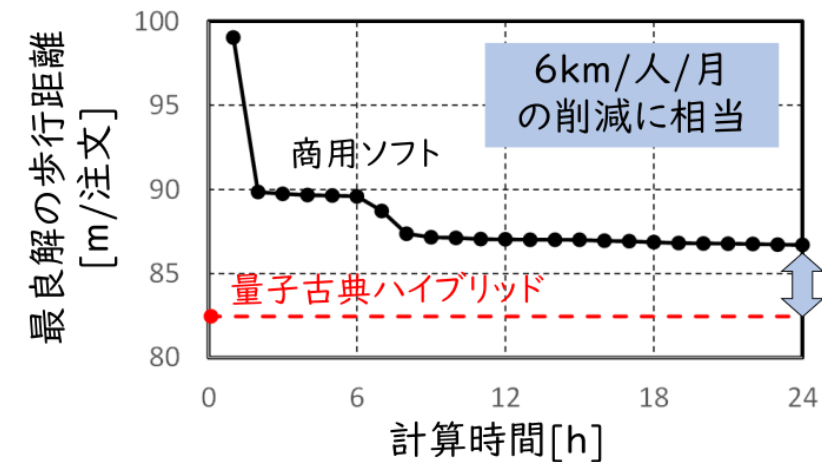
- 作業者の移動距離を量子アニーラで扱える二次制約なし二値最適化の形式で表現し、これを目的変数とした数万変数規模の最小化問題を解いた
- 数万変数は実問題と比べるとかなり小規模だが、できるだけ実問題の特徴を反映できるような2つの工夫を行った
 - ① 部品センターの実際の棚レイアウトから一部を抜粋する
 - ② 1度に注文されるパーツの種類数や各パーツの注文頻度の分布が実際の注文データと一致し、全パーツの種類数を任意に選択した疑似注文データを作成する
- マシンは、D-Wave Systems社の量子古典ハイブリッドソルバーサービスを利用した



保管配置の変更による作業者の移動距離削減

期待されるビジネス効果

- 古典コンピューターによる商用最適化ソフトウェアを用いた計算と量子古典ハイブリッド計算で比較を行った
 - ✓ 結果は、古典のみ：24時間、量子古典ハイブリッド：6分と大幅に時間短縮できた
 - ✓ さらに、量子古典ハイブリッドの方が歩行距離を3mほど短くできる最適解を計算できた
- 3mの差は、例えば1人の作業者が1日100回ピッキング作業を行い1カ月に20日勤務したとすると、1カ月あたり6km/人の移動距離を削減できる効果が見込める



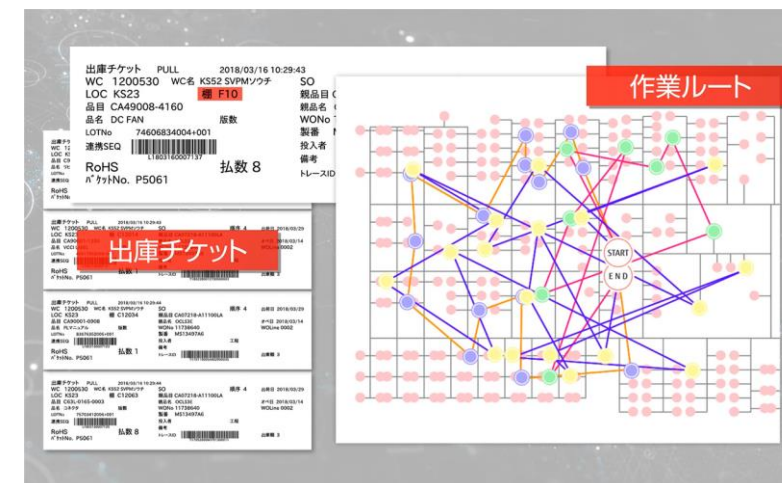
計算時間と平均移動距離

取組の背景

- 富士通ITプロダクツは、富士通のコンピューターシステムの基幹工場として、メインフレーム、UNIXサーバ、基幹IA、スパコンなどの中大型サーバ、ストレージシステムなどを製造している
- 生産スタイルは多品種少量で、2002年の設立以来、「QCD（Quality：品質、Cost：費用、Delivery：引渡）の追求による顧客満足度の向上」を標榜として、生産体制の合理化を推進してきた
- 生産性を上げるための施策として、倉庫を含む工場内の動線の最適化に着目し、デジタルアニーラの活用可能性について検討をしてきた

解決したい課題・モチベーション

- 倉庫作業において、効率よく部品のピッキングを行うためには作業者の経験に頼る部分が非常に大きく、経験の浅い作業者は、どの棚にどの部品があるのか見当もつかないため、倉庫内を無駄に探し回ることになり、ピッキングにかなりの時間がかかっていた
- 特に最近では、少量多品種によって出庫する部品の種類も多く、また、毎回異なる部品を集める事となり、ベテラン作業者の経験に頼らざるを得なかった
- 今回は、富士通ITプロダクツの倉庫において、デジタルアニーラを活用した移動ルートの最適化を企図した



出庫チケット（部品リスト）と作業ルート

量子コンピューターとしての問題設定

- 富士通ITプロダクツの倉庫（広さが1000平米、保管されている部品数3000点）において、ピッキングの最適動線を算出
- ピッキングの最適動線としてシンプルな一筆書きとなり、動線がタブレット上に可視化した
- マシンは、富士通の量子インスパイアード技術を活用したデジタルアニールを利用した



富士通ITプロダクツの倉庫



タブレットに表示された
最適なピッキングルート

期待されるビジネス効果

- 実証の結果、部品を集める移動距離は人手と比較して月あたり20%減少できた
- さらに、棚の位置を再考することで月あたり45%までの減少を見込んでいる
- 作業員に対して、口だけで動線が短くなったと言うのではなく、タブレット上に可視化して“こんなに短くなったんだ”と効果を具体的に知ってもらうことで、さらに作業効率を上げようと作業員の意識が変わることを想定している

取組の背景

- 工場倉庫管理の最適化は、複雑かつ重要な課題の1つである
 - ✓ 最適化は、生産性向上とコスト削減に有効である
 - ✓ 一方で、最適化が適切に行われないことで、作業者の負担増や安全性の問題、生産効率の低下が起こり得る
- TOPPANグループは、長年培われた経験に基づき、自社開発のシミュレーションツールを使ってピッキングルートの最適化を図ってきた
- しかし、作業者の経験を頼りにした現場では、最適な作業を行うことは難しく、時間もかかっていた

解決したい課題・モチベーション

- 自社開発のツールを使ってピッキングルートの最適化を図ってきたが、経験者の経験に頼りした現場では最適な作業が困難であったため、ピッキングの最適化に対して、量子技術の適用可能性を検討した
- 作業者のノウハウに依存せずに効率的な作業を可能にすることを目指し、2022年から東芝デジタルソリューションズと工場倉庫管理の最適化に量子インスパイアード技術を適用する取り組みを開始した
- 今回の共同研究では、ピッキングルートの最適化を追求する中で、棚配置の最適化にも取り組んだ

期待されるビジネス効果

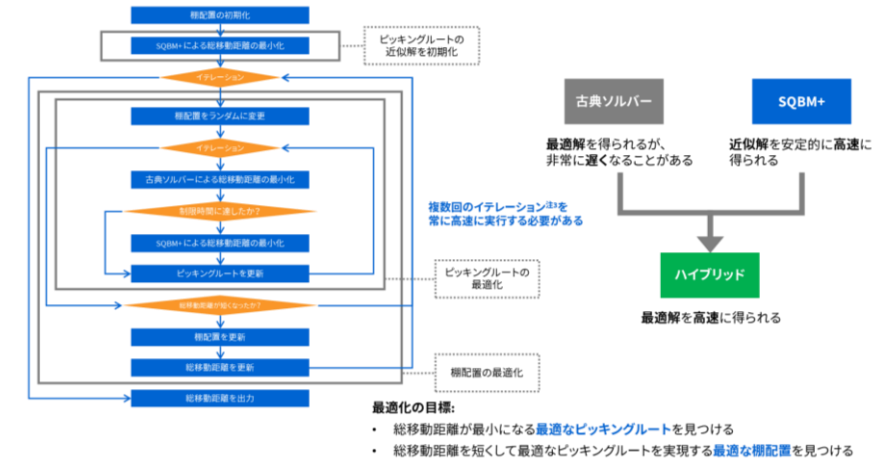
- ピッキングルートの最適化に加えて、棚配置も最適化したことにより、現在使われているツールによるシミュレーション（古典）と比較して、ピッキング作業時間を平均15%短縮できる結果が出た
- 最適化の対象を工場倉庫管理の最適化以外にも広げ、量子技術を活用したBPOや製造プロセスの業務改善を目指す

TOPPANデジタル：工場倉庫内のピッキングルートおよび棚配置最適化 【2024/04】 2 / 2

産業領域 製造・組立
バリューチェーン 工程設計
技術分類 イジング（シミュレーション）

量子コンピューターとしての問題設定

- TOPPANグループの工場の実データから、アイテム、人員、エリア、レイアウト要素を考慮してモデリングした約9,000変数の最適化問題を解いた
 - 目的関数は、ピッキングルートの最適化と棚配置の最適化である
 - マシンは、東芝デジタルソリューションズの量子インスパイアード最適化ソリューションSQBM+を利用した
 - 最適なピッキングルートと最適な棚配置を同時に見つけるために、SQBM+と古典ソルバーのそれぞれの特徴を活かし、SQBM+で求めた近似解を利用して、古典ソルバーの探索範囲を絞り、探索時間を短縮するというハイブリッド手法
- ✓ SQBM+の特徴：安定的に高速かつ高精度な近似解を生成できる
 - ✓ 古典ソルバーの特徴：探索する範囲が広がるほど、探索時間が長くなり、計算が遅くなるが、最短ルートを探索できる



ハイブリッド解法により、ピッキングルートと棚配置の最適化を実現

目的関数1:ピッキングルートの最適化

$$F_s(\text{ItemToTask}) = \underset{X,Y}{\text{minimize}} \sum_{w=0}^{\text{NumWorkers}-1} \text{Time}_{s,w}^{\text{Goal}}$$

目的関数2:棚配置の最適化

$$G = \underset{\text{ItemToTask}}{\text{minimize}} \sum_{s=0}^{\text{NumScenarios}} F_s(\text{ItemToTask})$$

モデリング

参考：TOPPANホールディングス株式会社「TOPPANデジタルと東芝デジタルソリューションズ、量子インスパイアード最適化ソリューションSQBM+™を活用した、工場倉庫内のピッキングルートおよび棚配置の最適化を実証」
(https://www.holdings.toppan.com/ja/news/2024/04/newsrelease240424_1.html)

取組の背景

- 製造業にとって、工場内の生産性向上は至上命題であり、アウトプット（量・質）やコストが企業の業績に直結する
- 今後はスマートファクトリーの進展により、工場内の設備とIoTが相互接続され、機器/生産ライン内や工場全体、ひいては工場外含めたサプライチェーン全体の稼働状況をリアルタイムで可視化し、プロセス全般を管理/制御していくことが重要である
 - ✓ 工場では製造ラインごとに数分から数十分にわたる「チョコ停」という生産停止が日常的によく発生し、その生産停止が発生してから、作業員が手動で時間をかけて、生産の切替判断/作業を実施している
 - ✓ 切替判断には、部品や材料の組み立て順序、納期に対する前後タスクやマイルストーンなど、さまざまなパラメータを組み合わせて考慮する必要があるが、古典コンピュータでは問題規模が多すぎて、これらを瞬時に最適化することが困難
- 計算処理に時間がかかることで、在庫/製品の流れが滞り生産ラインの効率が低下し、経済的な損失が非常に大きくなると予想される。具体的には、需要予測が困難である場合や急な生産計画の変更を要する場合、アドホックに生産プロセスの最適化処理を実施しなければ、中間在庫が増加しやすくなり、それがコストの増加を招くおそれもある

解決したい課題・モチベーション

- 工場内の生産効率向上に向けて、無人搬送車（以下、AGV）の活用が注目されている。AGVは、工場や倉庫内で部品/物品を自動的に運搬するための自動化された車両であり、人手不足等の課題を解決する重要な手段である
 - ✓ AGVは、各工程間のプロセスの効率化に資するものであり、工場内全体の生産性向上に大きく寄与する
- 一方で、AGVは通常、事前に設定された経路やルールに基づく単純走行であるため、複数のAGVが同じ経路を走行しようとして渋滞が発生し、その結果、AGVの稼働率が低下することがある
- 無人搬送車（AGV）を管理・制御し、渋滞を防ぐためには、同時に走行する複数のAGVの動きを調整する必要がある。したがって、AGVをリアルタイムで統合制御し、最適な経路を選択する組合せ最適化の有効性を検証することが重要である
- そこで、デンソー社×東北大学では、量子コンピュータを活用したAGVの稼働率向上に向けた実証を実施した

量子コンピューターとしての問題設定

- 本実証では、（工場内全体の生産プロセス最適化ではなく）無人搬送車（AGV）の管理・制御に焦点当て、組合せ最適化の手段として、D-Wave社の“量子アニーリングマシン”を活用し、AGVシミュレータを使用

量子コンピューターとしての問題設定（詳細）

問題設定	工場での無人搬送車（AGV、Automated Guided Vehicle）の稼働率向上
量子コンピューターハードウェア	D-wave2000Q（2000量子ビット）
実装	以下の最適化を毎時刻実施し、AGVの計画をアップデート
目的関数	AGVの停止時間をできるだけ減らす（＝稼働率を向上）
制約	AGV同士がぶつからないこと
変数	各AGV（10台から1万台で実施）の速度（停止、1歩進む、2歩進むの3通りから選択）→組み合わせ数は3のN乗 N:AGV台数

i 番目の AGV の位置 x_i とタスク s_i によって決まる経路候補の集合

経路 μ の距離

変数。 i 番目の AGV が経路 μ を選択したら 1、選択しなければ 0

$$E(q) = - \sum_{i=1} \sum_{\mu \in M(x_i, s_i)} d_{\mu} q_{\mu, i} + \lambda_1 \sum_{i=1} \left(\sum_{\mu \in M(x_i, s_i)} q_{\mu, i} - 1 \right)^2 + \lambda_2 \sum_e \sum_{t=1} \left(\sum_{i=1} \sum_{\mu \in M(x_i, s_i)} F_{\mu, t, e} q_{\mu, i} - 1 \right)$$

目的「各AGVがルートの更新ごとに目的地に最も近づく経路を選ぶ」

制約条件①「各AGVが経路候補の中から1つ選ぶ」

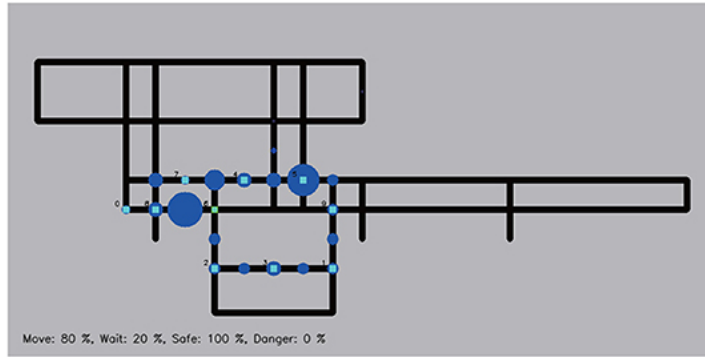
制約条件②「AGV同士の衝突回避（異なるAGVが同時刻に同じエッジを通ることを回避）」

経路 μ を通る AGV が時刻 t にエッジ e を通れば 1、通らなければ 0

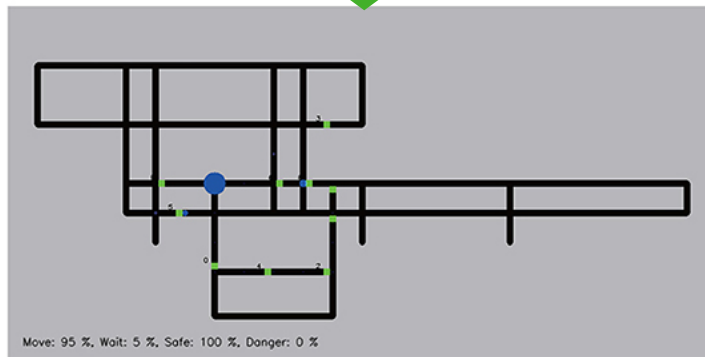
期待されるビジネス効果

- AGVシミュレータを活用した効果測定を実証。青丸の大きさはAGVがその地点で止まった回数を表す。つまり青丸が少なく、小さいほど稼働率が高い
- AGVの稼働率を80%から95%へ向上。ただし、最適化なし状態(80%)と量子最適化(95%)の比較であることに留意

既存のルールに従って動いた場合

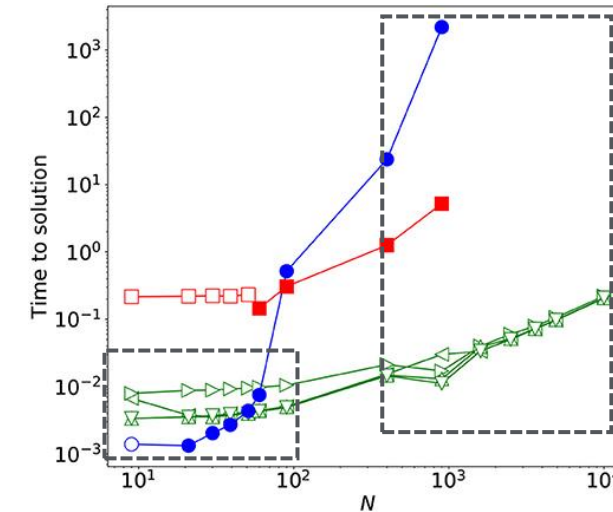


最適化した場合



古典コンピュータとの比較結果

（99%の確率で最適解を導出するための計算時間で比較）



N : AGV台数

N = 60以上ではD-Wave単独では動作しないため、ハイブリッド計算となり、そのためのオーバーヘッドで劇的に速度が低下

○ : D-Wave

□ : Digital Annealer

△ : Gurobi（3通りのオプションで実施）

塗りつぶし有りは99%の確率で最適解を導出するための時間、塗りつぶし無しは完全解が出るまでにかかった時間

参考：日経BP「デンソーが工場のAGVの経路最適化 稼働率が80%から95%へ」（<https://xtech.nikkei.com/atcl/nxt/column/18/01755/00011/>）、ビジネス+IT「デンソーが世界最大級の量子コンピュータ国際会議で喝采を浴びた理由」（<https://www.sbbt.jp/article/cont1/35565>）、東北大学「東北大学とデンソー、量子アニーリングマシンを活用した工場内の無人搬送車の効率的配送技術を発表」（https://www.tohoku.ac.jp/japanese/newimg/pressimg/tohokuuniv-press20191125_01web_Com.pdf）

取組の背景

- 日本郵船では、1隻の自動車専用船に数千台もの自動車を積載して日本と世界各地を結び、グローバルな自動車輸送事業を展開している
- 自動車専用船の船内では、自動車を1台ずつ決められた間隔で、予め作成された積み付け計画に沿って積載していくが、積み付け方の候補数は膨大である
 - ✓ 例えば、最大積載数約7,000台・フロア数12階の自動車専用船が、十数の港に寄港しながら車高や車幅が異なる60種類以上の車両の積み降ろしを行う場合、車両の積み付け方の候補の数は、総当たりで10の2,000乗通り以上にもなる
- 膨大なパターンの中から、船の最大積載量に近い積載率で車両を積み込むことや、積み降ろし作業時に安全に作業できる船内スペースを確保することなどの制約条件を満たした積み付け計画を作成することは非常に複雑な作業である

解決したい課題・モチベーション

- 従来は、専門のプランナーが経験を重ねながら、積み付けのパターンや配列法を習得して積み付け計画を作成していた
- 積み付け計画を効率的に作成するために、さまざまなことが長年の課題となっていた
 - ✓ プランナーごとの経験値や技量により積み付け計画の品質に個人差が生じること
 - ✓ 1隻あたりの計画作成時間が最大約6時間にも及ぶこと
 - ✓ 急な状況の変化による積み付け計画の変更に多くの業務負荷が生じること



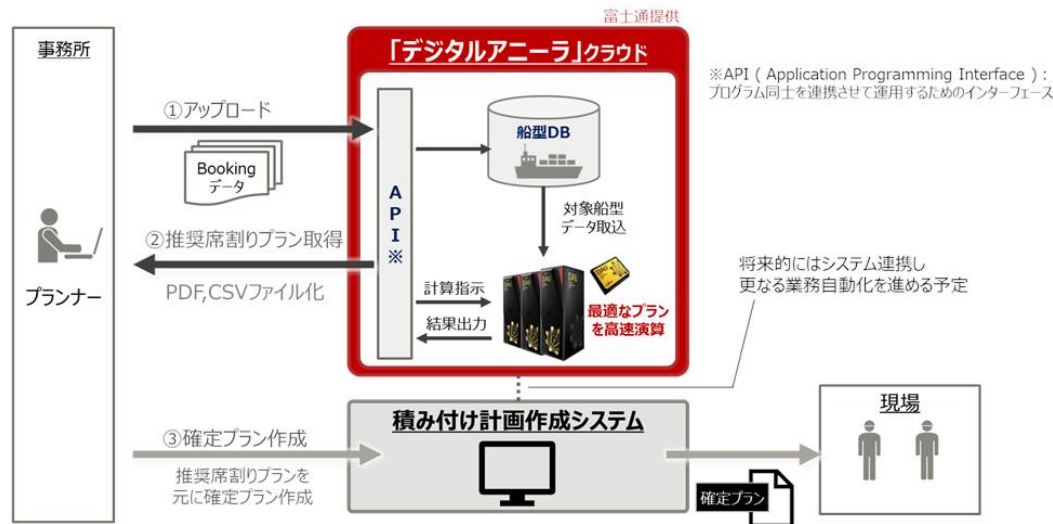
自動車専用船

量子コンピューターとしての問題設定

- 日本郵船の社内システムから積み込む車両のサイズや積み降ろす港の情報を取り込み、「デジタルアニーラ」を用いて最適な積載位置を高速計算した
- それによって、積み付け計画作成業務の中で最も重要な席割り作業（様々な条件を考慮し車両の最適積載位置を計画する作業）を約30分で自動的に完了させるシステムをクラウド上に構築した
- マシンは、富士通の量子インスパイアード技術を活用したデジタルアニーラを利用した

期待されるビジネス効果

- これまでベテランのプランナーが1隻あたり最大約6時間を要していた積み付け計画作成業務（人手）を約2.5時間に短縮
- これにより、プランナーが積み付け計画作成に要する時間を年間4,000時間以上削減できた
- 時間削減による副次的な効果として、以下を見込んでいる
 - ✓ 意思決定の迅速化がもたらすビジネスチャンスの拡大
 - ✓ 急な計画変更へのより効率的な対応の実現
 - ✓ プランナーの経験の違いによる積み付け計画の品質のバラつきを抑える



システム概要図

取組の背景

- 近年、物流は社会を支えるインフラとして重要度を増している反面、様々な課題を抱えている
 - ✓ ドライバー不足・交通渋滞・CO2排出量の増加など
- 一方、生産拠点である工場への必要な部品の物流管理はサプライチェーンの根幹であり、ますますの効率化とコスト削減が求められている
- トヨタシステムズは、トヨタ自動車株式会社およびそのグループを技術力と生産性でサポートするITソリューション企業として2019年1月に設立され、量子コンピューティングの活用についても2018年より富士通と研究を推進してきた

解決したい課題・モチベーション

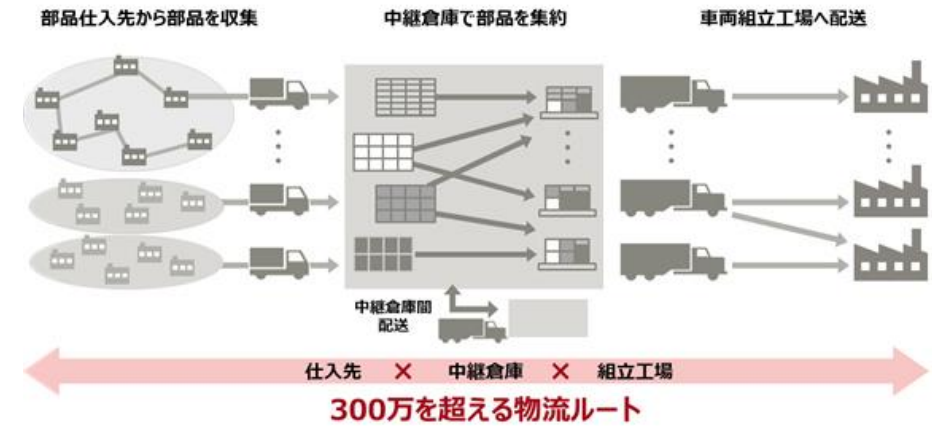
- 物流業界においては、従来（古典的）手法（従来の最適化エンジン）では問題規模が大きくなると計算時間が膨大となり、手作業による調整を要していた
- 自動車製造に関して、300万以上のルート候補がある大規模物流ネットワークに対し、効果算出を行うために、富士通の「デジタルアニーラ」の適用を企図した

期待されるビジネス効果

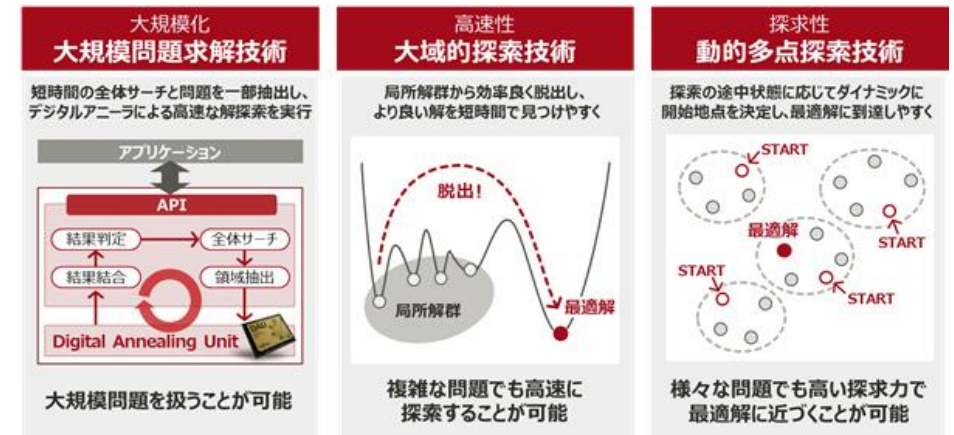
- シミュレーション（試算）の結果、300万以上のルート候補から、全体の物流コストが削減できる新たなルートを30分以内で計算できた（これまで見つけられなかった有効な物流ルートを発見）
- また、従来手法（古典）と比較して約2～5%のコスト削減効果を見込む

量子コンピューターとしての問題設定

- 物流ルートは、300万以上のルートのうち、最も物流コストが小さくなるルートを算出
 - ✓ 数百を超える仕入れ先から部品を仕入れ、数か所の中継倉庫を通り、数十の工場へ配送することを想定
 - ✓ 物流コストは、トラック数、総走行距離、荷物仕分けの作業量から算出した
- 今回、実際の物流業務に適用するため、以下の2つの技術を組み込んだシステムを開発し、今回の実証に適用した
 - ✓ 大域的探索技術：局所解群から効率的に脱出しながら広範囲に探索する技術
 - ✓ 動的多点探索技術：探索の途中状態に応じてダイナミックに開始地点を決定する技術
- マシンは、富士通の量子インスパイアード技術を活用したデジタルアニーラを利用した



大規模物流ネットワークのイメージ



デジタルアニーラの求解技術

製造・プロセス

自動車材料デザインへの適用に向けた分子シミュレーション	P. 49
自動車の燃料電池開発における酸素還元反応のモデル化	P. 52
材料の物性値予測や様々な化学反応の解析シミュレーション	P. 53
大規模分子・固体向け高精度エネルギー計算	P. 55
既存の材料データ×機械学習を活用した材料の特性予測	P. 57
航空機向け複合材料の設計改善	P. 59



取組の背景

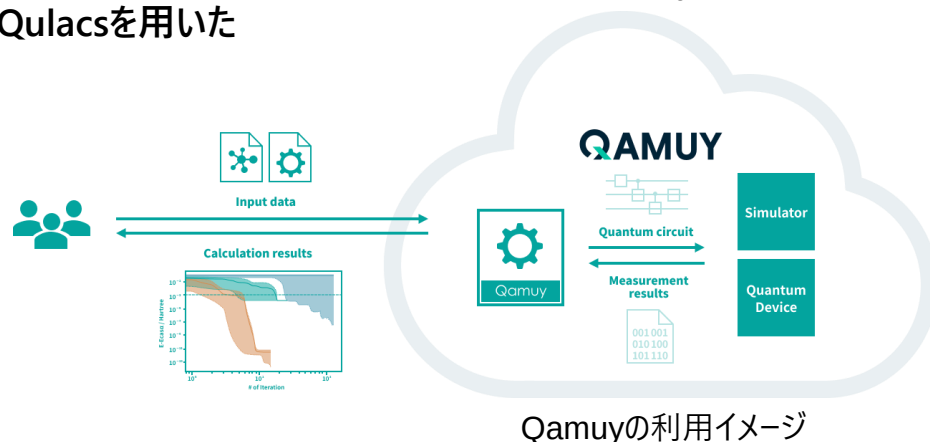
- 自動車に関わる研究開発のあらゆる場面において、大規模な計算機シミュレーションの重要性は増大しており、HPC（ハイ・パフォーマンス・コンピューティング）のニーズは高まっている
- ムーアの法則による古典コンピューターパワーの右肩上がりの工場は、いずれ終焉を迎えることは予想されているため、最近では、量子コンピューターの活用期待が高まっている
 - ✓ 例えば、カーボンニュートラルを目指すうえで、機能性材料に関わる研究開発は欠かすことができない要素となっているが、**電池反応等のあらゆる材料に関わる研究課題**は、量子コンピューターとの相性が良いことが知られている

解決したい課題・モチベーション

- DFT法（密度汎関数法）に代表される電子状態の計算は、自動車材料の研究開発で多様されており、リチウムイオン電池の電極材料デザイン等、**量子化学計算が材料スクリーニングにおける羅針盤として活用**されている
- 量子コンピューターでは、既存のDFT法と比較して、**電子相関（電子同士の多体相互作用）を厳密に取り扱うことができる**ため、予測精度を向上することが期待できる
- 本検証では、TOYOTAとQunaSysが共同で、**水素分子間に働く相互作用に関して、燃料電池や水素エンジン用の水素ストレージにおける液体水素の熱力学的な実挙動について、既存のDFT法と量子コンピューターによる比較を行った**

量子コンピューターとしての問題設定

- 電子相関の影響が顕著に表れる可能性のある対象として、水素分子同士の間働くファンデルワールス相互作用を取り上げ、異なる水素分子同士に働く微小なエネルギー変化の算出を行った
- 電子状態の計算手法としては、主に量子コンピューターを活用したVQE*法と古典コンピューターのMI（マテリアルインフォマティクス）で標準的に用いられるDFT法を用いた
- VQE法による電子状態計算には、QynaSysの量子化学計算クラウドサービスQamuyを用いた
 - ✓ 量子コンピューター（ゲート）のシミュレータとして、Pythonベースで実装できるQulacsを用いた

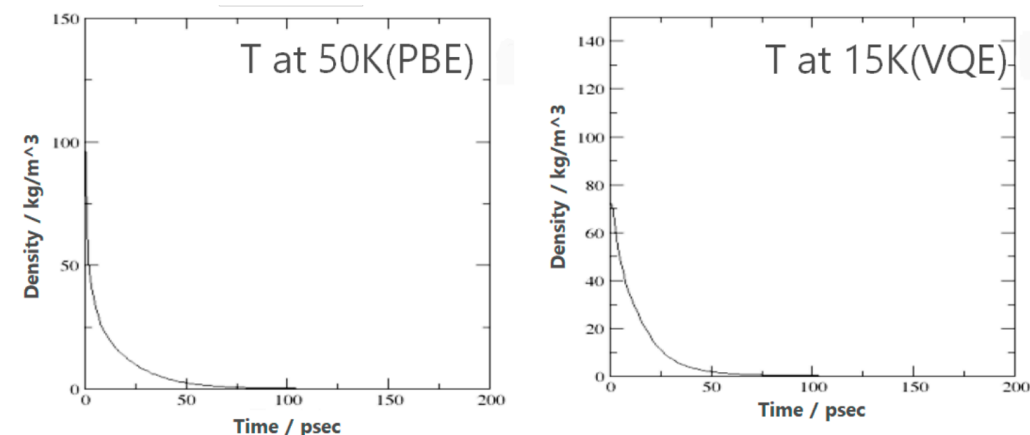


参考：J-STAGE「量子コンピューティングの自動車材料デザインへの適用可能性」

（https://www.jstage.jst.go.jp/article/jsaeronbun/54/1/54_20234032/_pdf/-char/ja）、Qamuy「Qamuyの利用フローイメージ」（<https://qunasy.com/services/qamuy/>）、「世界最高速シミュレータQulacsの使い方」（https://dojo.qulacs.org/ja/latest/notebooks/3.1_Qulacs_tutorial.html）

期待されるビジネス効果

- 温度を徐々に上昇させながら、液体水素（3810原子）の蒸発過程の分子動力学シミュレーションを古典のDFT法（PBE*）と量子のVQE法で実施し、液体水素がその密度を大幅に低下させる温度を計測した
- 量子のVQE法の方が実測に近い結果を得られた
 - ✓ 液体水素の沸点の実測値は20K（ケルビン）程度であるが、古典のDFT法では50Kにおいて蒸発現象が観測されたのに対して、量子のVQE法では15K程度で蒸発が観測された。液体水素の沸点の実測値は20K程度である



古典のDFT（PBE）と量子のVQEによる水素蒸気化挙動の比較

参考：J-STAGE「量子コンピューティングの自動車材料デザインへの適用可能性」

（https://www.jstage.jst.go.jp/article/jsaeronbun/54/1/54_20234032/_pdf/-char/ja）

取組の背景

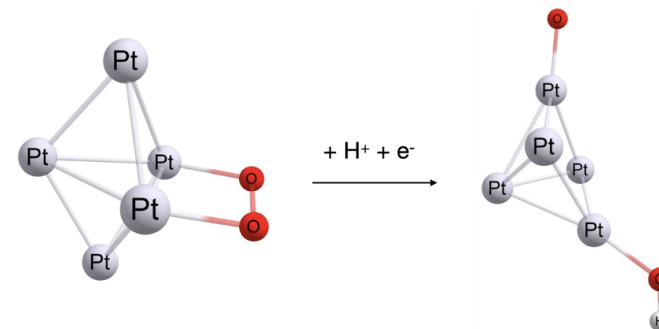
- 自動車に用いられる新しい燃料電池技術の開発において、酸素還元反応（ORR）の速度の鈍さが重要な課題としてある
- ORRのような触媒化学反応および電気触媒化学反応の原子モデリングに関する研究の多くでは、密度汎関数理論（DFT）を用いて計算を行うが、計算精度に限界がある
- 金属錯体（金属と非金属の原子が結合した構造を持つ化合物）や遷移状態などの強い（静的な）電子相関が関与する系に対しては、DFT計算が失敗することが知られている

解決したい課題・モチベーション

- 量子コンピューターを活用することで、DFTなどの近似的手法を用いて精度を落とすことなく、複雑な系を第一原理で正確に計算できることが期待されている
- BMWでは、白金クラスター上の酸素還元反応を対象して、ORRのメカニズムを実証した

量子コンピューターとしての問題設定

- 白金クラスター上の酸素還元反応を対象とし、白金クラスターと酸素の相互作用に関して、量子コンピューターを活用して基底状態エネルギーを計算する
- 本ユースケースでは、Quantinuum社の量子計算科学ソフトウェアプラットフォームであるInQuantoを用いて、AWSの量子コンピューティングサービスであるAmazon Braketの量子シミュレーションを活用している
- ✓ 量子化学計算を行うため、ゲート方式（シミュレーション）を活用していると想定



白金クラスター上の酸素還元反応のモデル

期待されるビジネス効果

- 白金クラスター上で起こる反応ステップの最小モデルを構築し、その基底状態エネルギーの探索的計算を実行できた
- 本ユースケースは、将来的に車両の燃料電池設計に適用される可能性があるため、BMWにとって興味深い結果となった

取組の背景

- 量子コンピューターは様々な産業に大きな変革をもたらす革新的な技術であると期待されている
 - ✓ 特に、**化学の分野では、革新的な新規材料の創出などが期待されている**
- これまでの材料開発は、研究者が過去のデータや経験を基に、所望の物性値を持つと期待できる分子構造を設計し、実際に合成、物性値の測定などを繰り返し行うことで、有望な化合物を探索するため、**多くの時間が必要**である
- 近年、マテリアルズインフォマティクス（MI）などの新しい手法を活用することで、**研究開発の加速が図られるようになってきた**
 - ✓ 機能発現のメカニズムなどを解明する計算化学
 - ✓ AIなどによる膨大な材料データを効率的なスクリーニング

解決したい課題・モチベーション

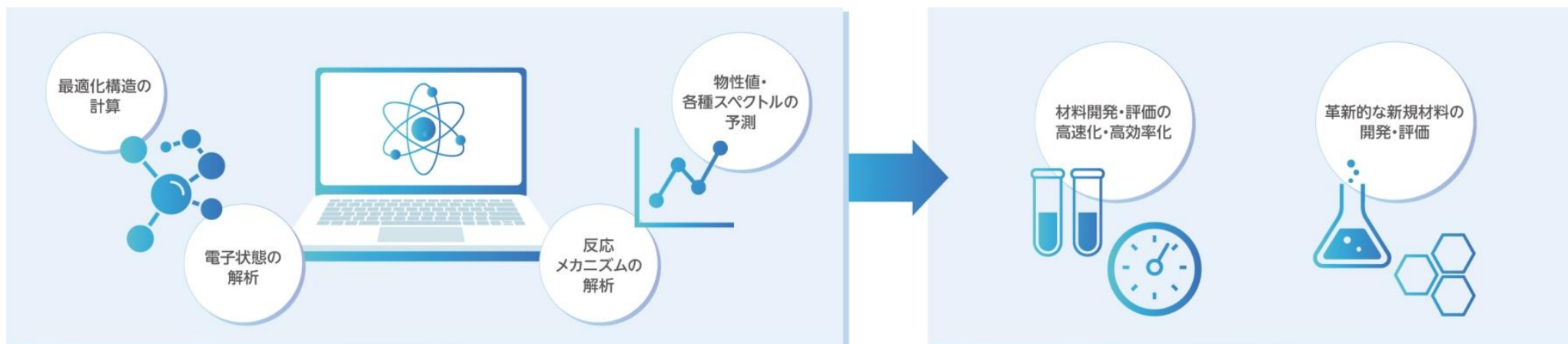
- 計算化学に量子コンピューターを利用することで、古典コンピューターでは計算できないような複雑な分子に関しても、**高速・高精度に計算できる可能性があると期待が高まってきている**
- 量子コンピューターで計算した分子の構造や特性値は、MIにとっても重要な学習データとなり、スクリーニングの際の探索領域が格段に広がることが期待される
- 凸版印刷と大阪大学量子情報・量子生命研究センター（QIQB）は、**量子化学計算アルゴリズムの開発と実証を行う共同研究を開始した**

期待されるビジネス効果

- 本共同研究を通じ、**材料の開発・評価プロセスの変革とスピードアップ、革新的な新規材料や機能性材料の創出などを目指す**

量子コンピューターとしての問題設定

- 新規材料の物性値計算や化学反応の解析シミュレーションを量子コンピューターで実行するための量子化学計算アルゴリズムを開発する
 - ✓ 凸版印刷の事業領域で開発・製造する半導体・ディスプレイ関連部材や建装材・パッケージなどの材料の物性値予測
 - ✓ 様々な化学反応の解析シミュレーションなどの演算
- これらにより、古典コンピューターでは計算できなかった分子の計算が可能かを検証する
- 量子化学計算を行うため、ゲート方式を用いる



量子コンピューター活用イメージ

取組の背景

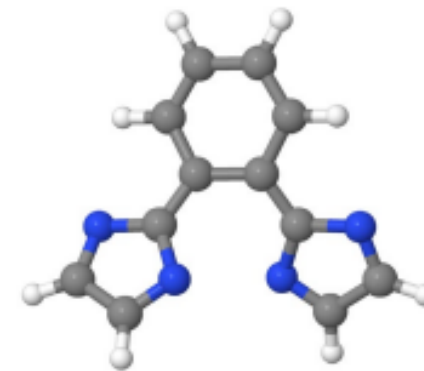
- 分子や固体の物性は、物質に含まれる電子の状態を計算することで知ることができる
- しかし、電子状態の計算は**電子の数に応じて指数的にコストが増加**するため、現状は**近似を利用して計算**を行っている
- 最もエネルギーの低い状態である電子の基底状態の計算では、**電子相関を近似した DFT（密度汎関数）**が広く用いられるが、**クーロン反発が強い複雑な電子構造を持つ物質の場合、十分な精度が得ることが困難**である

解決したい課題・モチベーション

- 量子コンピューターを活用することによって、**複雑な電子構造を持つ物質における、電子の基底状態計算の精度向上が期待**されている
- 現在の量子コンピューターは量子ビット数とゲート数に制限がある中、**量子コンピューター単体の性能を超える大規模・高精度な計算が求められていたため、三菱ケミカルと慶応大とIBMは共同でその計算手法の開発を行った**

期待されるビジネス効果

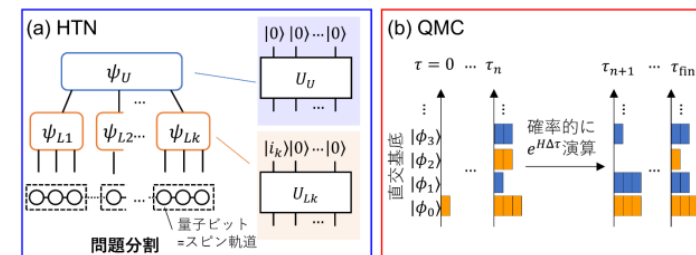
- 開発した2つの計算手法である「HTN + QMC」と「疑似アダマールテスト」を組み合わせ、**フォトクロミックモデル分子であるモノアリルジイミダゾール^{*1}を計算した結果、高精度で基底状態を算出することができた**
- ✓ 具体的には、 0.042 ± 2.0 milli-Hartree^{*2}という精度で、**一般的な化学現象を理解するための精度（1.6 milli- Hartree）よりも高精度で計算できた**



今回計算したモノアリルジイミダゾールの構造
グレーは炭素、白は水素、青は窒素を表している

量子コンピューターとしての問題設定

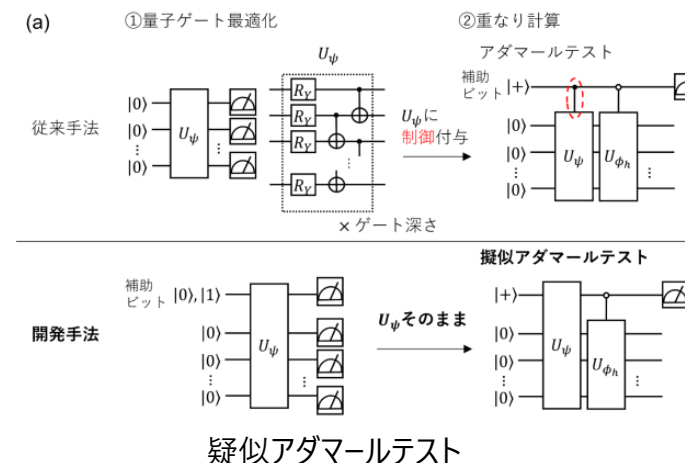
- 大規模な分子・固体のエネルギーを高精度で求めるために、2つの計算手法を開発した
 - ✓ 量子コンピューターのサイズより大きな量子状態を小さなテンソル（ブロック）に分割し、テンソルは量子コンピューター・テンソル間接続は古典コンピューターを用いる「ハイブリッドテンソルネットワーク（HTN）」と、高精度なエネルギー計算手法である「量子モンテカルロ（QMC）」を組み合わせた「HTN+QMC」を開発
 - ✓ 量子状態同士の重なりを量子回路上で効率的に計算する「疑似アダマルテスト」を開発
- この計算手法を用いて、フォトクロミックモデル分子*のエネルギー計算を行った
*：光の強度変化に応じて色が変わる材料の性質
- 実際に活用したマシンは、IBM のゲート方式の商用量子コンピューター「IBM Quantum System One」である



(c) HTN+QMC

$$E_{proj} = \frac{\langle \psi_{HTN} | H | \psi_{QMC} \rangle}{\langle \psi_{HTN} | \psi_{QMC} \rangle}$$

HTN + QMCの手法



取組の背景

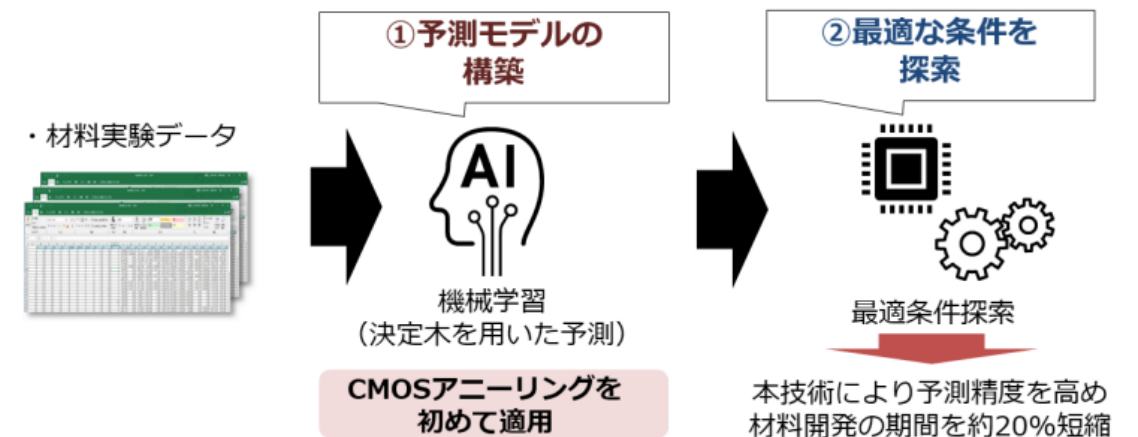
- これまでの材料開発は、研究者の経験や勘に依存し、実用化まで長い時間と費用を要していた
- 一方で、市場では製品ライフサイクルの短命化、資源の制約などを起点として材料開発への要求が多様化・高度化しており、その要求に応えるべくMI（マテリアルインフォマティクス）への取り組みが本格化している
- 日立では、データを活用して材料開発プロセスを効率化するデータ管理・アナリティクス基盤の実現に向けて、技術開発を重ねるとともに、MIを適用した材料開発ソリューションを提供し、素材産業をはじめとするお客様のニーズに応えてきた

解決したい課題・モチベーション

- 従来の材料開発においては、研究者の経験や勘に基づいて、材料の作成に関わる様々な条件を選び、材料の特性を予測する予測モデルを構築していたが、条件を網羅的に検討していないため、精度向上に限界があった
- 本実証では、積水化学工業と日立が共同で、材料開発の加速につながる新たな機械学習モデルを開発し、材料開発期間の短縮可能性について検証した

量子コンピューターとしての問題設定

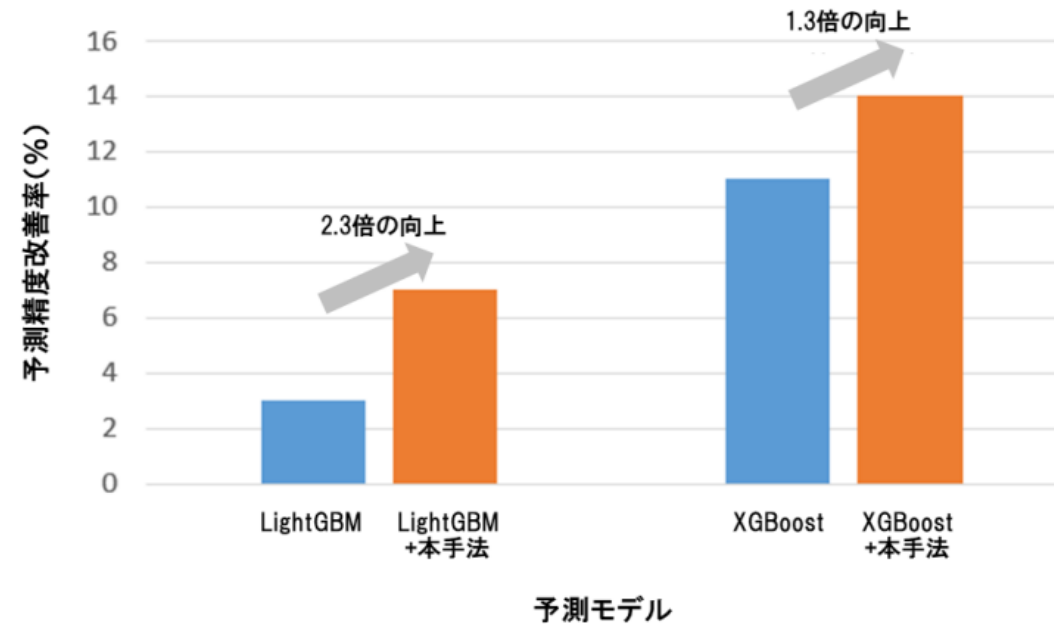
- 量子技術を活用し、材料の作成に関わる条件を網羅的に考慮することで、予測精度を高める新たな手法を開発した
- 開発した予測精度モデルを、既存の有機材料の分子構造からその特性を予測する問題に適用し、従来手法と精度について比較した
- マシンは、日立の疑似量子コンピューター技術であるCMOSアニーリングを活用した



開発した機械学習モデルの概念図

期待されるビジネス効果

- 機械学習による予測精度に関して、従来の機械学習アルゴリズム（LightGBM, XGBoost）単独と従来の機械学習アルゴリズムに本手法を適用した場合で比較した結果、**従来単独での予測を上回る精度を達成**することができた
- 本技術を用いて材料開発を行った場合、従来のMIを用いた方式に比べ、**材料開発に要する期間を約20%削減**できる見通しを得た



従来技術に開発した手法を適用した際の予測精度の改善結果

取組の背景

- ボーイング社の工場では、衛星、防衛システム、宇宙船、商用ジェット機など、世界の重要な航空宇宙インフラの多くを生産している
- プロジェクトの多くでは、羽のように軽く、耐久性があり、層状の構造を持つプライ複合材料を活用して、翼、胴体、その他の航空宇宙部品の組み立てを行っている
- プライ複合材料の設計は非常に複雑な問題であり、この問題に対して従来のスパコンの能力を超えているため、ボーイングのエンジニアは非常に複雑な問題を小さな問題に分割して解決しているが、コストがかかっている

解決したい課題・モチベーション

- ボーイングのプライ設計問題は、最大100,000変数を扱う必要があり、従来のスパコンの処理能力をはるかに超えている
- ボーイングとIBMがパートナーシップを組み、プライ複合材料に関する複雑な問題を量子技術を活用して解決することを企図した

量子コンピューターとしての問題設定

- ボーイングのプライ設計問題を本質的に絞り込み、材料の層を最適に積み重ねる方法を見つける「簡略化されたプライ設計問題」を解いた
 - ✓ 簡略化されたプライ設計問題には、**40変数**が含まれる
- 量子最適化を解くために、各量子ビットに1つの変数をエンコードするのではなく、**各量子ビットに3つの変数をエンコード**した

期待されるビジネス効果

- 今回の量子最適化手法を用いたことで、従来の量子最適化アルゴリズムを比較して、**劇的な処理効率向上（約2倍）を実現**できた
- 今回の成果により、製品設計の核心となる非常に大きな最適化問題を解析し、量子コンピューターがその最適化問題の一部を解決できることを示すことができた

創薬・医療

タンパク質のアロステリック制御予測による創薬ターゲットの拡大 P. 61

中分子医薬品候補化合物の探索 P. 63

薬物代謝酵素の電子構造に関する分子シミュレーション P. 65

アルツハイマー病の原因酵素BASE1に対するリード化合物の薬効分析 P. 68



取組の背景

- 創薬プロセスにおいて、**創薬ターゲット^{*1}の枯渇が課題**になっている
- これに対して、アロステリック制御^{*2}に着目した創薬手法（アロステリック創薬）では、従来、創薬困難とされていたタンパク質を創薬ターゲット候補として見出すことが可能であり、**ターゲットの枯渇という創薬課題の解決に期待**が寄せられている
- タンパク質におけるアロステリック制御部位^{*3}を発見するためには、多大な労力と時間を要する **in vitro実験^{*4}が必要**であることから、これを計算によって代替する技術が求められている

解決したい課題・モチベーション

- タンパク質のアロステリック制御の予測を実験ではなく、計算によって代替するために、**量子技術の活用が期待**されている
- 本検証では、Revorfと東芝デジタルソリューションズが共同で、**アロステリック制御の予測を組合せ最適化問題として解く新たな技術を開発し、従来手法の計算で特定できていなかったアロステリック制御部位を計算で予測**することを企図した

*1：疾患の責任分子と想定されるもので、治療薬をデザインする際に標的とするタンパク質のこと

*2：タンパク質に機能的多様性をもたらす立体構造や活性を特異的に調節する機構

*3：タンパク質の活性中心以外の部位で、制御分子（アロステリック因子）が結合する領域

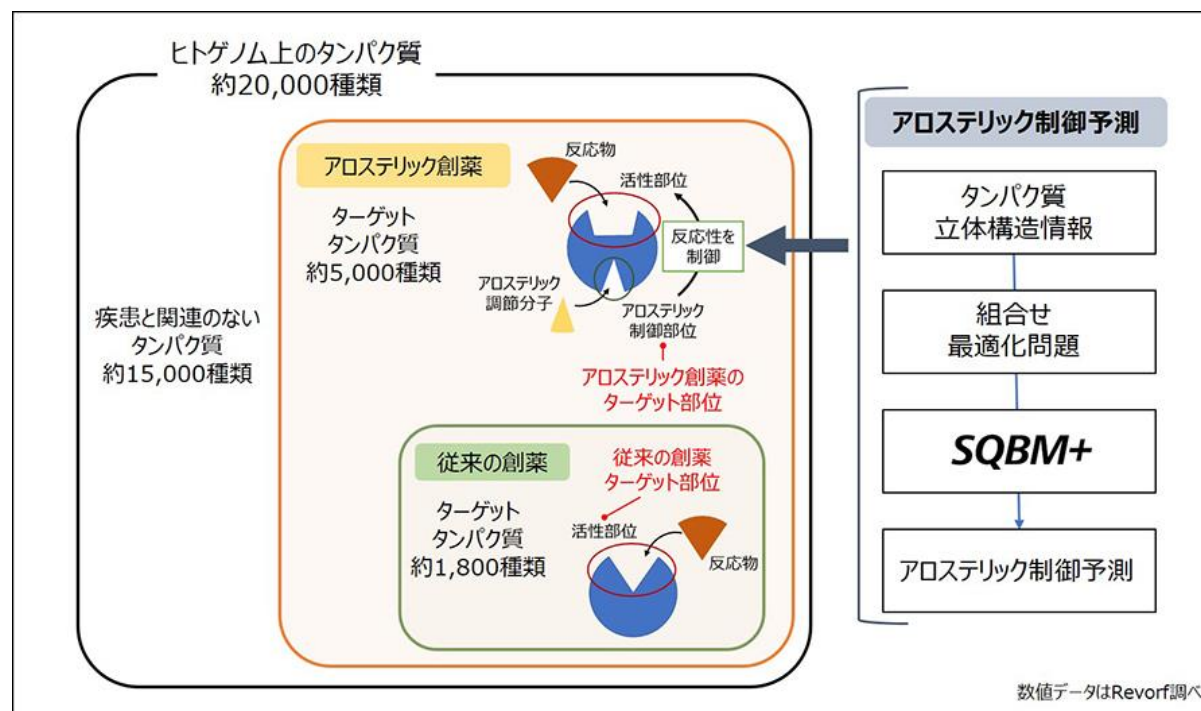
*4：試験管や培養器内で生体内を模倣した環境を人工的に作り実験のこと

期待されるビジネス効果

- 量子技術を活用した今回の手法を用いることで、**従来手法の計算で特定できていなかったアロステリック制御部位を計算で予測することに成功した**
 - ✓ がん遺伝子の1つであるKRASを含む複数のタンパク質に対して、量子技術で計算し予測したアロステリック制御部位と、既知のアロステリック制御部位を比較し、従来の計算手法では特定できていなかった部位を、量子技術による計算でより正確に予測できた
- 本検証により、**計算のみでアロステリック制御部位を発見でき、創薬候補化合物の探索を加速できる可能性が高まった**

量子コンピューターとしての問題設定

- 本検証では、タンパク質の立体構造情報をもとに、タンパク質のアロステリック制御機構を組合せ最適化問題として定式化し、計算によってアロステリック制御を予測する
- マシンは、東芝の量子インスパイアード最適化ソリューションであるSQBM+を活用した



取組の背景

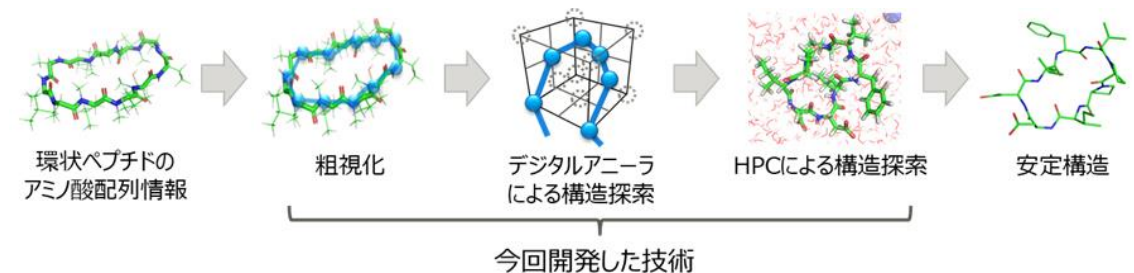
- ペプチドリームでは、中分子医薬品の候補化合物の開発を数多く進めている
 - ✓ 中分子医薬品は、分子量が低分子医薬品と抗体医薬品（高分子医薬品）の中間に位置し、コストを比較的抑制した上で、かつ副作用が出にくいという両者の長所を併せ持つことから注目を集めている
- 医薬品の候補化合物の開発において、数兆種類の化合物ライブラリから候補化合物を絞り込む過程では、従来のコンピューターでは安定構造を探索することが難しく、開発にはかなり多くの時間を要してしまう

解決したい課題・モチベーション

- 中分子の候補化合物は、古典コンピューターでは安定構造を探索することが難しく、ウェット実験を繰り返し行う必要があることから、一般的に数か月から年の単位で時間を要してしまうことが課題である
- この課題を解決するために、富士通とペプチドリームは共同研究を開始し、量子技術を活用することで、創薬の候補化合物となる中分子サイズの環状ペプチドの安定構造探索を高速かつ高精度化する新たな基盤技術の開発を企図した

量子コンピューターとしての問題設定

- 中分子サイズの環状ペプチド安定構造を探索するために、量子技術と古典コンピューター技術を活用した探索技術を開発した
 - ✓ 複雑な分子構造を量子技術で高速かつ効率的に計算するために、分子を粗く捉えた（粗視化）構造を用いて中分子の安定構造を探索する技術を開発
 - ✓ 量子技術で求めた候補化合物の粗視化モデルを全原子モデル（全ての原子座標を用いた分子構造を表したモデル）に自動変換する技術を開発
- 量子コンピューター技術として、富士通のデジタルアニーラを活用した

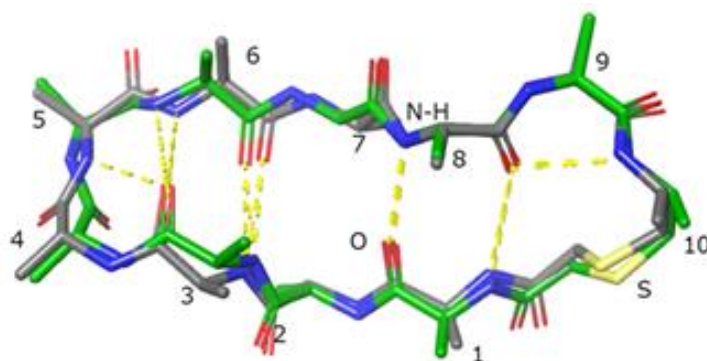


開発した中分子サイズの環状ペプチド安定構造探索の流れ

期待されるビジネス効果

- 従来の古典コンピューターを使った計算で求めることが難しいとされた中分子サイズの環状ペプチドの安定構造の高速な探索について、今回の開発技術を用いることで12時間以内に高精度で実施することに成功した
- 今回の開発技術で計算した構造と実際の実験で導いた構造を比較すると、**実際の実験とほぼ同等の候補化合物を高精度に探索でき、候補化合物の探索に必要な実験工程を最小化できる可能性が高まった**
 - ✓ 主鎖*のずれが0.73オングストローム（1オングストローム＝0.1ナノメートル）であり、実験と同等の精度
- 研究期間・実験期間を短縮することで、残りの時間を活用して未知の創薬開発にもつなげることも可能となる

*：高分子化合物の構造の骨格をなす分子鎖のこと



実験構造と計算構造の比較
（主鎖部分のみ表示、灰色が実験で求めた構造、緑色が計算で求めた構造）

取組の背景

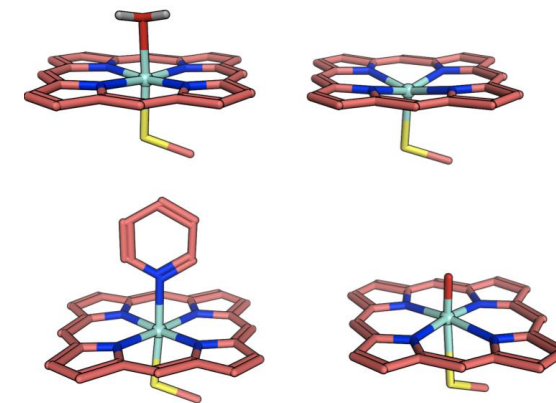
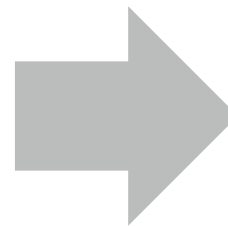
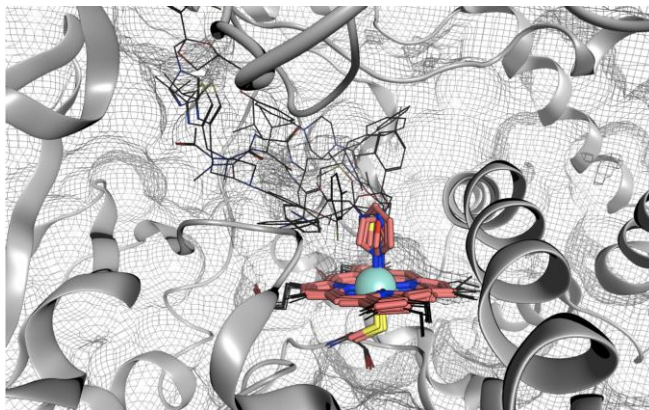
- 重大なアンメットメディカルニーズを抱える病気に対する画期的な新薬の開発は膨大な予算と～10年のタイムスパンが必要なプロセスであり、その中のR&Dフェーズでは疾病機序に関連する分子（ターゲット）やターゲットに効果を示す化合物（リード）などの分子状態（分子中の電子状態）の理解には分子シミュレーションが必要になる
- 複雑な分子構造を持つ物質の高精度なシミュレーションによるエネルギー的に安定した構造/分子状態の特定は、ターゲット分子や化合物の正確な理解と新薬開発プロセスの加速を促す

解決したい課題・モチベーション

- 一方で、スパコン等古典コンピューターを活用する場合、シミュレーションの精度を上げると（分子の電子数＝軌道数を増やす）計算時間が膨大となるため、現実的な時間で計算できるように精度を落としている
 - ✓ 古典的計算では、正確な結果を得るために軌道数を増やすと計算量が指数関数的に増加し多くの計算資源が必要
- そのために、分子シミュレーションのポテンシャルに対して、必要な計算機リソースの増大により現状は創薬の段階ではターゲット分子など分子状態の理解に対する分子シミュレーションの活用は限定的
- Boehringer IngelheimはGoogleと協業し、体内に入った薬物の分解に関与する薬物代謝酵素、CYP（シトクロムP450）の電子構造の把握に向けた分子シミュレーションに必要なマシンリソースの推定を実施した
 - ✓ CYP（シトクロムP450）は生物学的に重要な酵素で、特に薬物代謝や解毒作用において重要な役割を果たす薬物代謝酵素であり、CYPの触媒サイクルに関与する化学中間体は非常に複雑な電子構造を持つ

量子コンピューターとしての問題設定

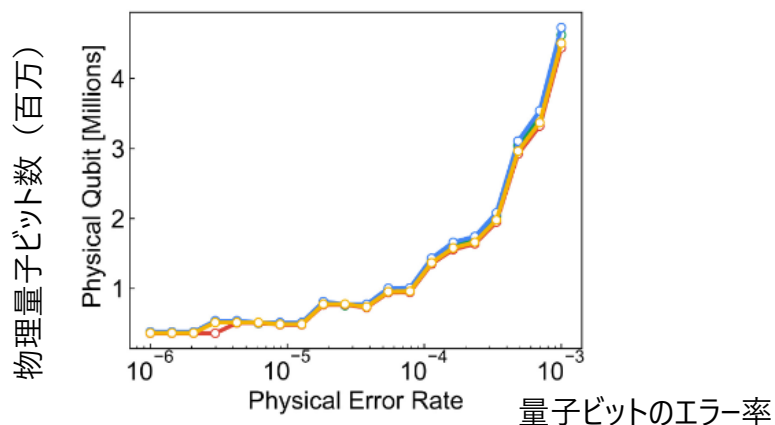
- 本実証では、創薬・医療の研究開発のリード探索フェーズでの利用が想定される***CYP（シトクロムP450）の電子構造の把握**に向けて、**CPUベースの古典コンピューターと量子コンピューターでの分子シミュレーションに必要なリソースを推定した**
*：CYPは、体内に入った薬物の分解に関与する薬物代謝酵素であるため、病気の原因であるターゲット分子ではなく、ターゲットに効果を示すリードであると想定
- 古典コンピューターは密度行列繰り込み群によるシミュレーション、量子コンピューターでは**FTQCと量子位相推定（QPE）アルゴリズムを用いた場合のシミュレーションを想定した**



計算対象のシトクロムP450酵素
本来は複雑な電子構造を持つタンパク質（左図） 量子コンピューターでの計算に向けてシンプルなモデル系（右図）を使用

期待されるビジネス効果

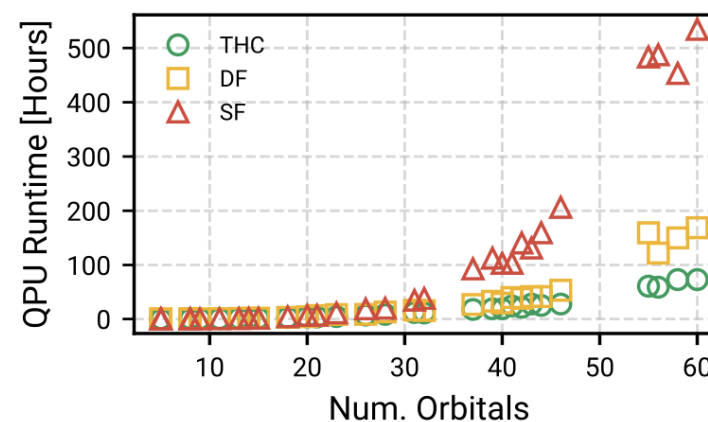
- 古典コンピューターでの分子シミュレーションで、最大モデル（58軌道）且つ高精度化（ $M=3000$ ）の場合計算時間が数年必要
 - ✓ 右表における M は量子化学計算における近似パラメータで大きいほど高精度だが計算負荷が高くなる
- 量子コンピューターでは、酵素（シトクロムP450）の最大モデルをTHC方式では100時間未満の量子コンピューター時間でシミュレートできると予測
 - ✓ THCは量子コンピューターでのリソース推定に影響するテンソル因数分解方式で、最も計算コストを低減する方式
 - ✓ 現実的なエラー率（0.1%）を想定したFTQCでは、約500万物理量子ビットが必要になる



計算に必要な物理量子ビット要件

	G ($M=1500$)	X ($M=1500$)	X ($M=3000$)
CPU time (hrs)	1800	4570	36564
Memory (Gb)	48	87	348
Disk (Gb)	235	572	2288

古典コンピューターでの計算に必要な推定リソース
(G：43軌道、X：58軌道)



※量子ビットのエラー率は0.1%を想定

※マーカーは特定の値設定での結果

量子コンピューターでの計算に必要な推定リソース

- SF： 単一因数分解方式は、テンソルを一つの因数に分解する手法で基本的な手法
- DF： 二重因数分解方式は、テンソルを二つの因数に分解する手法で、単一因数分解よりも効率的にテンソルを分解し、計算コストを削減
- THC： テンソルハイパー収縮方式は、テンソルを多次元的に収縮する高度な分解手法で、最も計算コストを削減できる

取組の背景

- 複雑で強相関の化学系のシミュレーションは、標準的な手法が不正確または高コストであるため、量子計算の進展から最も恩恵を受ける分野の一つと広く信じられている
 - ✓ 実際、過去半世紀にわたり、材料シミュレーションのための量子アルゴリズムの研究が爆発的に進展しており、様々な分野で研究が行われている
- 新薬候補の合成には、相当な医薬品化学の取り組みが必要である。CADD（コンピューター支援創薬設計）において、最も有望な化合物を優先するために、様々なアプローチを用いて候補分子をスクリーニングすることで、合成の必要性を制限することができる
 - ✓ CADDにおいて、量子技術を活用することが期待されている

解決したい課題・モチベーション

- DFT（密度汎関数）およびCC（カプリングクラスター）の手法を用いてタンパク質をシミュレーションできる低スケーリングの量子力学的方法の開発が進行しているが、**大規模シミュレーションのための正確な計算手法**が求められている
- タンパク質-リガンド結合エネルギーの計算を量子エミュレータで行った既存研究があるが、RocheとQuantinum（旧Cambridge Quantum Computing）によるチームは、**量子コンピューターの実機を活用したタンパク質-リガンド結合エネルギーの計算**に取り組んだ

量子コンピューターとしての問題設定

- アルツハイマー病の病因と関連しているBACE1酵素を対象として、タンパク質-リガンド結合エネルギーについて、量子技術を活用して計算を行った
- エネルギー計算を行うために、強く関連した電子構造問題を解くための数値的手法密度行列埋め込み理論（DMET）埋め込み手法と、分子の電子基底状態を見つけるための変分量子固有値ソルバー（VQE）アプローチを組み合わせた
- マシンは、以下の2つを用いた
 - ✓ IBMの超伝導型の量子コンピューター
 - ✓ Quantinum（旧 Honeywell Quantum Solutions）のイオントラップ型の量子コンピューター（NISQ）

期待されるビジネス効果

- 従来手法は量子エミュレータを用いていたが、本検証では**実際の量子コンピューター**を活用して、タンパク質-リガンド結合エネルギーを初めて計算することができた
 - ✓ **NISQの量子コンピューター**を利用してタンパク質-リガンド結合エネルギーを計算できることを示した

金融

流動資産ポートフォリオの最適化	P. 71
中小企業の信用性スコアリング	P. 72
デリバティブ価格算定のためのモンテカルロシミュレーション	P. 74
株式投資の運用ポートフォリオの最適化	P. 75
金融商品の裁定取引の最適化	P. 76
ポートフォリオ最適化に必要なリソース見積もり	P. 78
損害保険ポートフォリオ最適化	P. 79
車両センサデータに基づく運転リスクの予測	P. 80
コールセンターにおける最適な勤務シフト作成	P. 81



取組の背景

- 金融機関では、リスクレベルを許容範囲に保ちながら、可能な限り最大のリターンをもたらすように、現金・債券および政府債券を含む流動性が高く信用度の高い資産を組み込むことが理想的である
- しかし、数千もの選択肢から最適な資産ポートフォリオの作成および維持を行う課題に常に直面している
- 流動資産は金融機関にとって最重要である一方、資産の組合せ最適化を行う計算は非常に複雑であり、コストや時間が膨大にかかるため、今までは頻繁に行うことはできなかった

解決したい課題・モチベーション

- 膨大な選択肢から最適な資産ポートフォリオの作成および維持するために、量子技術の活用が期待されている
- NatWestは、富士通の量子技術を活用し、金融ポートフォリオの組み合わせ最適化問題を高速に解くための実証実験を企画した

量子コンピューターとしての問題設定

- NatWest銀行の**高品質流動資産***（HQLA）について、ポートフォリオの**最適構成**を計算した
 - ✓ HQLAは、現金や債券などの資産であり、英国のすべての銀行が財政難に陥った場合のバッファとして保有する必要がある
- マシンは、富士通のデジタルアニーラを活用した

期待されるビジネス効果

- 従来の古典コンピューターと比較して、約300倍のスピードで組み合わせ最適化問題を計算することができた
- 量子技術の活用により、正確に、かつ人的ミスリスクも低減させることが可能となる
- また、NatWestは、同行のポートフォリオの包括的なリスク評価を高速に完了できるとともに、これまでと比較し、はるかに幅広い結果やポートフォリオの入れ替えができることで、貸出金利と預金金利の差である**金利スプレッド**を最適化しリスク低減に役立てることが期待される

*：市場ストレス時でも容易に売却できる安全な資産のこと。金融機関が流動性リスクに対処するための最後の防衛ラインとして機能するもの

参考：富士通株式会社「富士通、Royal Bank of ScotlandグループNatWestにおいて「デジタルアニーラ」の実証実験を実施」（<https://pr.fujitsu.com/jp/news/2018/10/23-1.html>）

取組の背景

- クレジットスコアリングにより、企業が合理的な金利で資本を借りれるようにすることで、経済の拡大を促進する
- 大企業は多くのアナリストが信用格付けを行うが、中小企業（SME）は格付け機関によって分析されることが少なく、クレジットスコアリングは会社や市場データに基づいてのみ行われていた
- 最近では、機械学習アプローチを活用することにより、企業情報、会計情報、社会経済情報を組み合わせた中小企業の属性をより幅広くカバーするための自動クレジットスコアリングが可能になってきた

解決したい課題・モチベーション

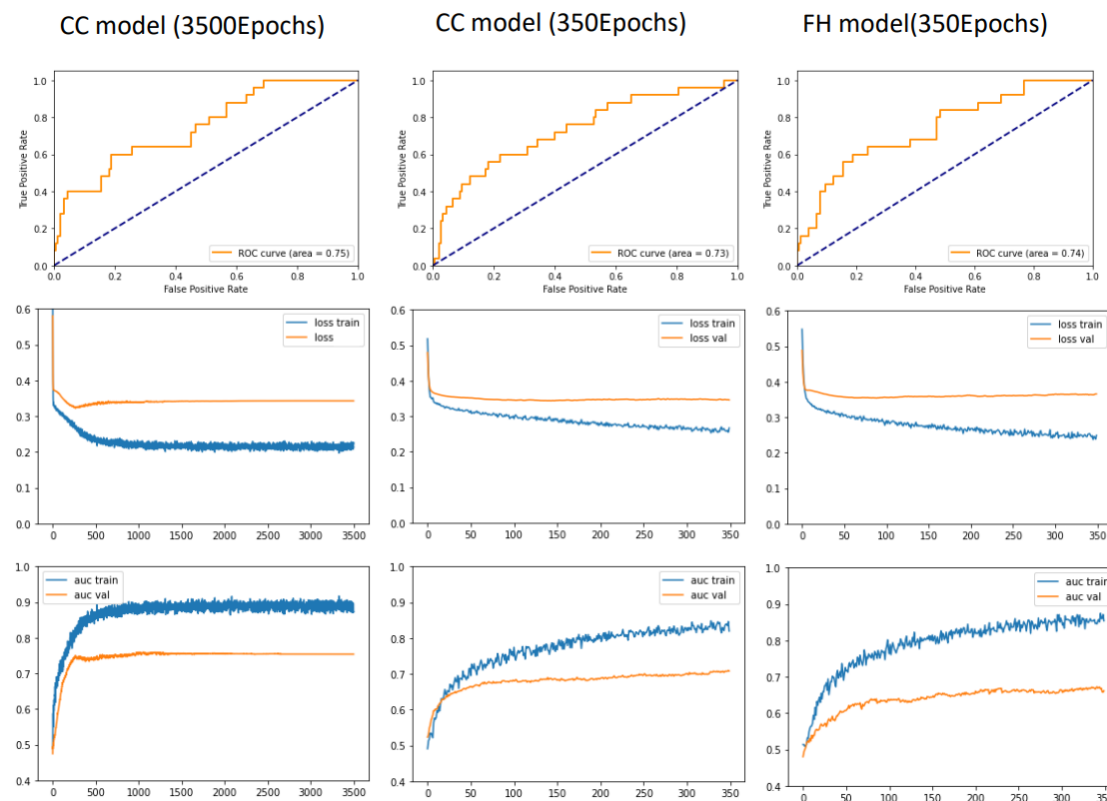
- クレジットスコアリングで用いる機械学習アルゴリズムを改善することは、信用リスクの透明性を提供するためには重要である
- シンガポール経営大学等のメンバーによる研究者らは、SMEのクレジットスコアリングを強化するために量子技術を活用した機械学習アルゴリズムに関する研究に取り組んだ

量子コンピューターとしての問題設定

- SMEのクレジットスコアリングを行うために、シンガポール企業の実際のテストデータセットで量子技術を活用した量子と古典のハイブリッドモデルの作成を行った
- テストデータとしては、1940年から2016年の期間に法人化された企業（2,246社）を対象に、債務不履行した企業246社、健全な企業2,000社のデータを活用した
- 古典モデルと量子技術を活用したモデルを比較するために、訓練データ全体の繰り返し学習回数（エポック数）に応じた精度比較を行った
- マシンは、ゲート方式（シミュレータ）を活用している

期待されるビジネス効果

- 量子と古典ハイブリッドモデル（FHモデル）は、従来のCCモデルのエポック数3,500の場合と比較して、大幅に少ない1/10のエポック数で、同程度の予測精度を得ることができた
- 同じエポック数（350）で従来手法と比較した場合は、従来手法よりも高精度となることが分かった



取組の背景

- 金融業界では、多数の高性能コンピューター（古典コンピューター）を稼働し、様々な計算を行っている
 - ✓ 例えば、ある金融商品について、翌日の商品価格を決定するため、夜間数時間以上コンピューターで計算をして、価格を算出
- デリバティブの1つである「オプション取引」は、株式や債券といった金融商品を、将来いくらで売買するかという「権利」について、あらかじめ価格を決めて取引するが、この価格を高性能コンピューターで日々大量に計算している

解決したい課題・モチベーション

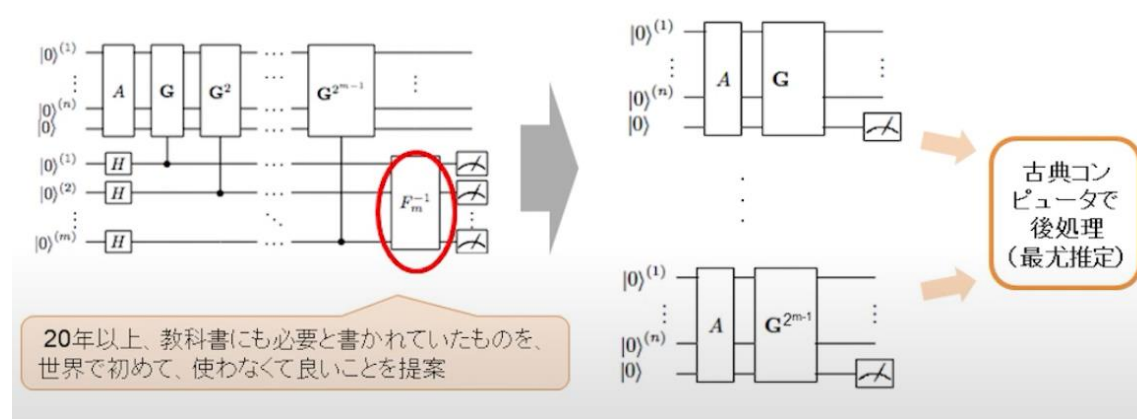
- オプション取引の価格を算出するために、夜間数時間以上コンピューターで計算をしているが、この計算を高速化することが課題である
- 価格算出を行うために「モンテカルロ計算」が用いられているが、これは量子コンピューターを用いることで優位性があると言われている計算のひとつであるため、世界各国の金融機関が研究を進めている
- モンテカルロ計算の高速化について、慶應・みずほ・IBM・MUFGで連携して、共同研究を実施した。

期待されるビジネス効果

- 量子フーリエ変換を不要にしたことで、量子ビット数を増えないようにし、量子ゲート数を90%近く削減することに成功した

量子コンピューターとしての問題設定

- デリバティブの1つである「オプション取引」の価格を高速に算出することが課題である
- モンテカルロ計算を行うために、振幅推定アルゴリズムを用いる
 - ✓ 振幅推定アルゴリズムを計算するために、量子フーリエ変換という操作が必要であったが、統計的な手法により古典コンピューターで後処理を行うことで、量子フーリエ変換を不要にし、量子コンピューターの回路を短くする



振幅推定アルゴリズムのイメージ

取組の背景

- 投資、資産運用で重要なのはリターンとリスクのバランスである。投資先を選ぶときには、大きなリターンを求める一方で、万が一の急激な価格変動にも備えておくことが大切であり、その対策のひとつとして、**金融資産ポートフォリオによる分散投資**がある
- 最適な金融商品を組み合わせるポートフォリオを選定するには、**刻々と変わる企業の財務状況や市場動向を迅速に分析・判断して、金融商品の構成比率を検討する必要がある**
- 金融資産ポートフォリオは、扱う銘柄数に応じて、**組み合わせ数が膨大になる**

解決したい課題・モチベーション

- 金融資産のポートフォリオ最適化を行うために、例えば100銘柄から50銘柄を選ぶ場合でも、組み合わせ数は 10^{29} 通り必要であり、従来の古典コンピュータでは計算が困難である
- メルコインベストメンツは、量子技術を活用した金融資産のポートフォリオ最適化問題を解くことで、計算時間の短縮を企図した

量子コンピューターとしての問題設定

- 銘柄データ（数百銘柄）と制約条件をもとに、**金融資産のポートフォリオ最適化問題について、計算時間の評価を行う**
- マシンは、富士通のデジタルアニーラを活用

期待されるビジネス効果

- 数百銘柄に関する**最適な金融資産のポートフォリオを10分程度で計算できた**
 - ✓ 本結果は、金融分野での実務における初めてのデジタルアニーラの適用ケースとなった

メルコインベストメンツ様 導入事例

FUJITSU

■ 金融ポートフォリオの最適化

2020年2月 プレスリリース

- 例えば100銘柄から50銘柄を選ぶ場合でも組み合わせは 10^{29} 乗通りとなり従来のコンピュータでは膨大な計算量と時間が必要
しかしデジタルアニーラでは**10分**で計算



金融分野の実業務で活用中

取組の背景

- 日立は、事業環境の急激な変化に対するお客さまのビジネス・レジリエンス向上に向けたサービス創生に取り組んでいる
 - ✓ 金融取引などでは、刻々と変化する環境に応じ、さまざまな選択肢を考慮して実行する組合せ最適化問題を解く必要がある
- 日立はこれまで、組合せ最適化問題を処理する技術としてCMOSアニーリングを開発し、損害保険の再保険ポートフォリオ最適化やコールセンターにおける勤務シフト最適化など、お客さまのビジネス課題に適用してきた
- 今回は、組合せ最適化処理に適したCMOSアニーリングの特長を活かし、**金融商品の裁定取引^{*1}を支援するポートフォリオ最適化**に取り組む

解決したい課題・モチベーション

- 金融商品は、大きな利益をもたらすことがある半面、値下がりしてしまうといったリスクもあることから、全ての資金を一つの金融商品に投資するのではなく、複数の金融商品を組み合わせでリスクを抑える分散投資が行われるため、**利益とリスクのバランスを取った最適なポートフォリオを構成することが重要**である
- 従来の統計手法では、複数の株式を組み合わせで、平均回帰性^{*2}を有する金融商品ポートフォリオを構築してきたが、**ポートフォリオを構成する株式毎の取引手数料やポジションなどの売買ルールによる制約、流動性リスクなどの指標を柔軟に考慮することができなかったため、これらの制約や指標を考慮することが重要**である

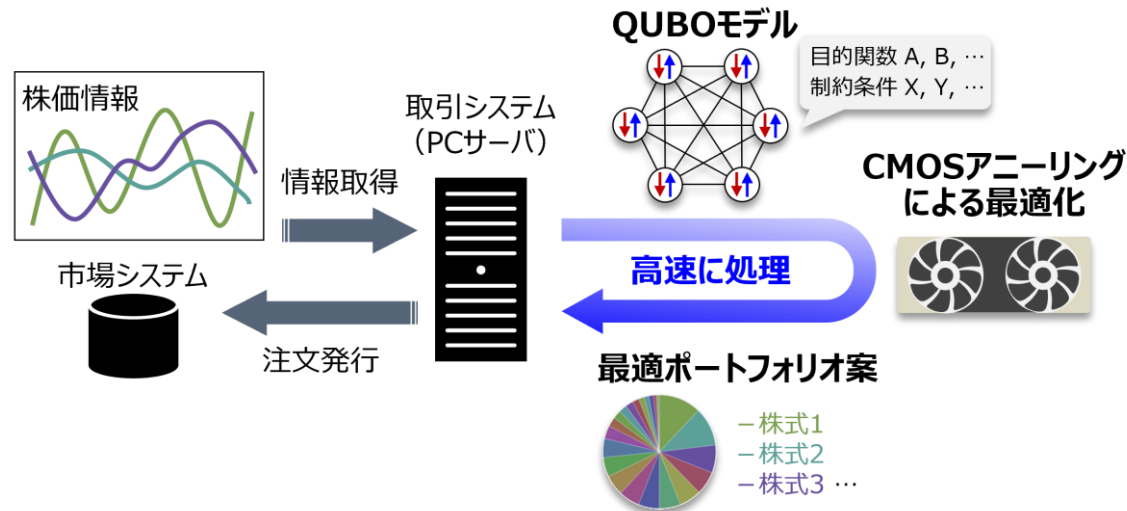
*1：売買する金融商品の価格差を利用して利益を得る取引

*2：時間の経過とともに平均値に近づくことを示す性質

参考：日立グループ「組合せ最適化処理に適したCMOSアニーリングを高速の金融商品取引に適用するための技術を開発」（https://www.hitachi.co.jp/rd/news/topics/2021/2110_cmos.html）、三井情報株式会社「量子コンピューターは金融をどう変えるのか ～初歩の初歩～」（<https://www.mki.co.jp/knowledge/column128.html>）

量子コンピューターとしての問題設定

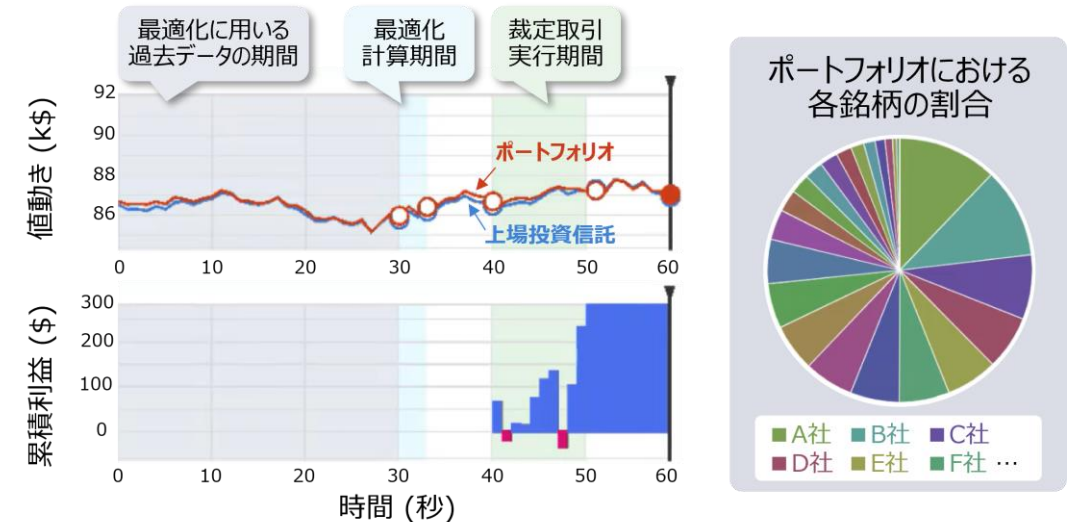
- 裁定取引で考慮すべき事項を目的関数や制約条件としてQUBO形式で書き下すことにより、平均回帰性を有する金融商品の最適なポートフォリオ案を求める問題を定式化する
 - ✓ 制約：ポートフォリオを構成する株式毎の取引手数料やポジションなどの売買ルール
 - ✓ 指標：流動性リスクなど
- マシンは、日立のCMOSアニーリングを活用する



CMOSアニーリングを用いた高速金融商品取引システム

期待されるビジネス効果

- 実際の金融取引では多くの指標や制約条件を考慮する必要があり、実用性を向上するとQUBO形式に含まれる項が増えるが、CMOSアニーリングでは変数の数が不変であれば計算時間は変わらないため、実用性と高速性を両立した裁定取引が可能
- 裁定取引で考慮する指標や制約条件の有効性を検証するために、過去の取引データを用いた評価を実施した
- 過去データを切り替えながら約100個の株式を用いた評価を実施したところ、CMOSアニーリングが最適ポートフォリオの構築を数秒以内に実行し、それを用いた裁定取引により運用益が見込めることを確認できた



CMOSアニーリングと連携した取引シミュレーション結果の画面

取組の背景

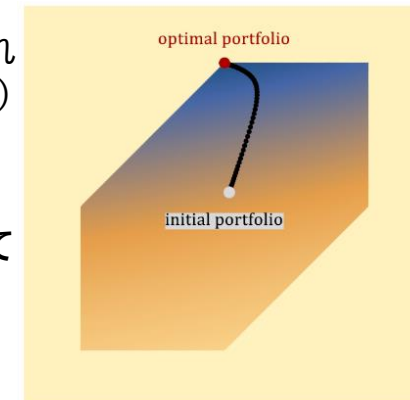
- クオントファイナンスの分野で一般的に研究されるユースケースの1つとして、ポートフォリオ最適化がある
- ポートフォリオ最適化を解くための量子アルゴリズムが提案されており、古典的なアルゴリズムと比較して、理論的に高速化を実現できることが期待されている

解決したい課題・モチベーション

- 量子技術を活用してポートフォリオ最適化を解くことが期待されている中、量子コンピューターの活用によって理論的に高速化を実現できるかについて評価することは難しいが、そのために必要な量子ビット数等を見積もることが重要である
- 評価が難しいにも関わらず、ゴールドマンサックスとAWSは共同で、ポートフォリオ最適化を解くために必要な量子コンピューターのリソースの見積もりに取り組んだ

量子コンピューターとしての問題設定

- ポートフォリオの期待収益を最大化しつつ、リスクが期待値から逸脱する可能性を最小化するポートフォリオ構築を行う
- ポートフォリオ最適化を解くために広く使用されている古典的な手法である、内点法*（IPM）を量子技術を使った量子内点法（QIPM）に置き換えて解くことで、高速化を行う
- 銘柄数に応じたQIPMの量子リソースについて見積もりを行う



内点法がポートフォリオ最適化を解くときのイメージ図

期待されるビジネス効果

- 銘柄数を100として、量子コンピューターのリソースを見積もった結果、論理量子ビットは800万必要であることを示した
- 今回の見積もりからは、量子アルゴリズムの実行時間は依然として数百万年であることが分かった
- QIPM の場合、基礎となるアルゴリズムの大幅な改善がない限り、有用ではないことを示し、実用性に向けてはまだまだ大きな課題があることが明らかになった

*：最適化問題のアルゴリズムの1つであり、実行可能な領域を経由して、最適化に収束するのが特徴

参考：AWS「A detailed, end-to-end assessment of a quantum algorithm for portfolio optimization, released by Goldman Sachs and AWS」 (<https://aws.amazon.com/jp/blogs/quantum-computing/a-detailed-end-to-end-assessment-of-a-quantum-algorithm-for-portfolio-optimization-released-by-goldman-sachs-and-aws/>)

取組の背景

- 近年、損害保険業界においては、国内外での地震や台風など大規模な自然災害の多発により、保険金支払いが増加し、自然災害を起因とした想定を上回る損失への対応が重要となっている
- 損保ジャパン日本興亜社・SOMPOリスクマネジメント社は、独自に開発した自然災害工学モデル及びポートフォリオ最適化技術を用いて、再保険^{*1}など損害保険会社が保有するリスクを再保険会社などの外部に分散する仕組みを効率的に活用し、自然災害リスクを適正に分散させ、安定した保険運営に取り組んできた。

解決したい課題・モチベーション

- 近年頻発する大規模自然災害に加え、海外事業拡大などの環境変化に伴い、考慮すべき保険契約数や保険スキーム数などが拡大し、より大規模で複雑な損害保険ポートフォリオ最適化のニーズが高まっている
- 従来型の古典コンピュータで、大規模で複雑な保険条件を考慮した損害保険ポートフォリオ最適化問題を解くためには、月単位あるいは年単位の膨大な計算時間がかかるため、CMOSアニーリングの活用により許容計算時間内で最適化問題を解くことができるかについて検証する

量子コンピューターとしての問題設定

- 大規模で複雑な保険条件を考慮した損害保険ポートフォリオ最適化問題を解くために、以下の条件をモデル化し、膨大な組み合わせからリスクイクと安定収益を両立する条件を求める手法を開発した
 - ✓ 損保ジャパンで保有すべきリスク
 - ✓ 再保険など外部移転すべきリスク
 - ✓ 外部移転時の条件（再保険条件）
 - ✓ 実務上考慮が必要なその他条件など
- マシンは、日立のCMOSアニーリングを活用する

期待されるビジネス効果

- 今回、大規模で複雑な保険条件を考慮した、損害保険ポートフォリオ最適化問題を許容計算時間内（例えば1日以内）で解くことが可能かについて検証した
- CMOSアニーリングの活用可能性について検証を重ねたことで、実務利用の目途が立ったため、2022年4月から損害保険引き受け業務において、CMOSアニーリングの実務利用を開始した

^{*1}：保険会社が加入者と契約した保険の責任の一部または全部を他の保険会社に移転し、リスクを分散する損害保険

参考：損害保険ジャパン「半導体ベースの新型コンピューターを活用した損害保険ポートフォリオ最適化に関する実証実験を開始」（https://www.sompo-japan.co.jp/-/media/SJNK/files/news/2019/20200108_1.pdf）、損害保険ジャパン「損保ジャパン、保険引受業務における擬似量子コンピューターの実務利用を開始」（https://www.sompo-japan.co.jp/-/media/SJNK/files/news/2021/20220329_3.pdf）

あいおいニッセイ同和（USA）・AWS：車両センサデータに基づく運転リスクの予測 【2021/05】

産業領域 金融

バリューチェーン 保険

技術分類 ゲート（シミュレーション）

取組の背景

- あいおいニッセイ同和（USA）では、運輸業界向けにデータサイエンスに基づく商品・サービス開発を進めている
- 車両には、データを収集する多数のセンサが装備されているため、このセンサデータを活用して、車両の運転リスク評価を行いたいと考えている
- リスク評価するために、入力データにバイナリラベル（0または1、SafeまたはFail等）を割り当ててデータを分類するためのバイナリ分類器を用いた方法を検討している

解決したい課題・モチベーション

- データを分類するために用いられる機械学習の手法としてディープラーニング（DL）があり、量子技術を活用した量子ニューラルネットワーク（QNN）が古典のニューラルネットワークよりも実用的な計算上の優位性があるかについては、未解決の問題である
- あいおいニッセイ同和（USA）とAWSは、量子機械学習を活用して、車両のテレマティクスデータ（車両から得られるデータ）を活用して運転リスクを予測するための検証を行った

量子コンピューターとしての問題設定

- 自動運転レベルがL1およびL2*の車両のテレマティクスデータを活用して、機械学習を行い、運転リスクを予測するための検証を行う
- 機械学習の回路としては、量子技術を活用したQNNを用いる
- マシンは、AWSの量子コンピューターサービスであるAmazon Braket（ゲート方式）を活用する

期待されるビジネス効果

- 量子機械学習を使用して、QNNをAmazon Braket量子コンピューティングサービスと組み合わせることで、車両のテレマティクスデータを分析する方法を示すことができた

*：L1は運転支援（自動ブレーキ、前の車について走る（ACC）、車両からはみ出さない（LKAS））であり、L2は特定条件下での自動運転機能（L1の組み合わせ）である

参考：AWS「Using Quantum Machine Learning with Amazon Braket to Create a Binary Classifier」(<https://aws.amazon.com/jp/blogs/quantum-computing/aioi-using-quantum-machine-learning-with-amazon-braket-to-create-a-binary-classifier/>)、マグニカ「自動運転のレベル分けとは？レベル0～5までを一挙解説」(<https://www.macnica.co.jp/business/maas/columns/135343/>)

取組の背景

- 年々労働人口が減少している日本において、金融などのさまざまな業種のコールセンターでは、オペレータの人数が限られている中でも問い合わせ客に質の高いサービスを提供し続けることが、運営上の喫緊の課題となっている。
- 運営上の課題を解決するために、問い合わせ量の予測に対し、適切にオペレータを人員配置する必要があるが、単にオペレータの人数をそろえるだけでは不十分なケースが多く、**実際はオペレータ1人1人のスキル、希望するシフト、有給休暇なども考慮したうえで人員配置を検討することが求められる。**

解決したい課題・モチベーション

- シフト作成の担当者は、オペレータのスキル・希望シフト・休暇予定等、さまざまな条件を考慮しながら膨大な時間と労力をかけて毎月勤務シフトを作成しているが、**人手での作成には限界があるため、オペレータの希望や状況を柔軟に反映できないという問題や、本来必要な人数に対して過不足が発生するという問題が発生してしまう**
- CMOSアニーリングを用いた最適な勤務シフト作成を行うために、三井住友フィナンシャルグループのコールセンター数カ所で活用し、実務上の評価観点を検討・実証を企図した

期待されるビジネス効果

- 人手で作成する従来の勤務シフトと比較して、**余剰配置の発生を約80%削減するなど、要員配置の適正化に対する高い有効性が確認**
- 要員配置の適正化によって、**過剰配置によるコスト増加や人員不足による対応の遅延、サービス品質の低下などを防ぐことが期待できる**

量子コンピューターとしての問題設定

- コールセンターなどの大規模な勤務シフトにおいて、画一的なローテーションによるシフト組みではなく、オペレータに関する細かな制約を複合的に考慮した最適な要員配置を実現する

- ✓ 時間ごとの必要人数やタスク（職務）
- ✓ 休暇希望
- ✓ 勤務頻度
- ✓ 通勤時間

- マシンは、日立のCMOSアニーリングを活用する

最適化イメージ

/ 日別のシフト最適化イメージ（オペレータの状況を考慮した場合）

設定 画面イメージ

日付	オペレータ						必要人数
	A	B	C	D	E	F	早番 遅番
1日	1						4 2
2日							3 2
3日							3 2
4日							2 1
5日							3 2
6日							2 2
7日							3 2
8日							2 2
9日							3 1
10日							4 2
...	...	...	...	...	...	...	...
31日							4 2

割り当て可能シフト	凡例
早番	○ × ○ ○ ○ ○ ○
遅番	× ○ ○ ○ ○ ○ ○
希望	- - - - -
	有給

CMOS 計算

最適化 画面イメージ

日付	オペレータ						過不足人数
	A	B	C	D	E	F	早番 遅番
1日							0 0
2日							0 0
3日							0 0
4日							0 0
5日							0 0
6日							0 0
7日							0 0
8日							0 0
9日							0 0
10日							0 0
...	...	...	...	...	...	...	...
31日							0 0

凡例
早番
遅番
休日
有給

- 1 月単位のシフトで、有給休暇の希望日を設定
- 2 日ごと、シフトの種類ごとに、必要人数を設定
- 3 人員ごとに割り当て可能なシフトを調整

割り当て可能なシフトのみが割り当てられる
「遅番の翌日に早番」を禁止する設定が可能

/ 時間別のシフト最適化イメージ

(凡例) 赤：過剰人員数、青：不足人員数

セルの色が薄いほど、割り当てた人員数が適正であることを示します。

ソリューション未適用時

日付	9:00	9:30	10:00	10:30	11:00	11:30	12:00	12:30	13:00
1	4	2	1	-3	-4	-7	-4	-7	-8
2	9	10	9	4	8	3	1	0	0
3	3	3	2	-1	-7	-7	0	-1	-3
4	3	3	2	-2	-7	-9	1	1	-5
5	10	11	10	4	1	-2	5	4	-1
6	2	1	-1	-2	-4	-5	-3	-4	
7	2	2	0	1	-4	-7	0	1	-5
8	9	10	9	3	2	0	-3	-4	3
9	11	13	12	5	8	4	3	2	1
10	2	3	3	0	-4	-4	-1	-2	-2

ソリューション適用時（CMOS計算後）

日付	9:00	9:30	10:00	10:30	11:00	11:30	12:00	12:30	13:00
1	2	0	2	-1	-1	-2	0	-2	-2
2	2	2	2	1	1	0	0	0	1
3	0	0	1	-2	0	0	0	-1	-1
4	2	0	1	-1	0	0	0	0	0
5	0	0	2	-1	0	0	0	0	0
6	0	0	0	-1	-2	-2	-2	-2	-1
7	0	0	0	0	-1	-2	-2	-1	0
8	1	2	0	0	1	0	0	-1	0
9	2	2	2	1	2	1	2	1	1
10	0	0	2	0	0	0	1	0	0

時間ごとの人員配置を最適化

参考：日立製作所「数十人、数百人規模の最適な勤務シフトを作成するソリューションを提供開始」（<https://www.hitachi.co.jp/New/cnews/month/2020/10/1019a.html>）、「勤務シフト最適化ソリューション」（<https://www.hitachi.co.jp/products/it/finance/solutions/application/common/CMOS-PersonnelShift/index.html>）

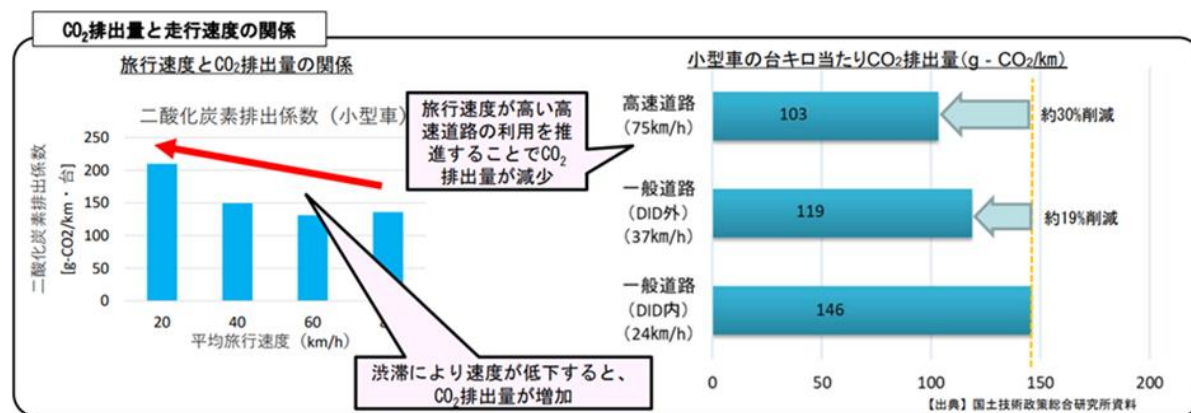
交通

交通流最適化（渋滞解消）	P. 84
大都市での交通信号の最適化	P. 88
マルチモーダル輸送システムの経路最適化	P. 90
災害時の被害抑制に向けた人流の最適化	P. 92
空飛ぶクルマ（エアモビリティ）の交通制御	P. 93
海上輸送の航路最適化	P. 95



取組の背景

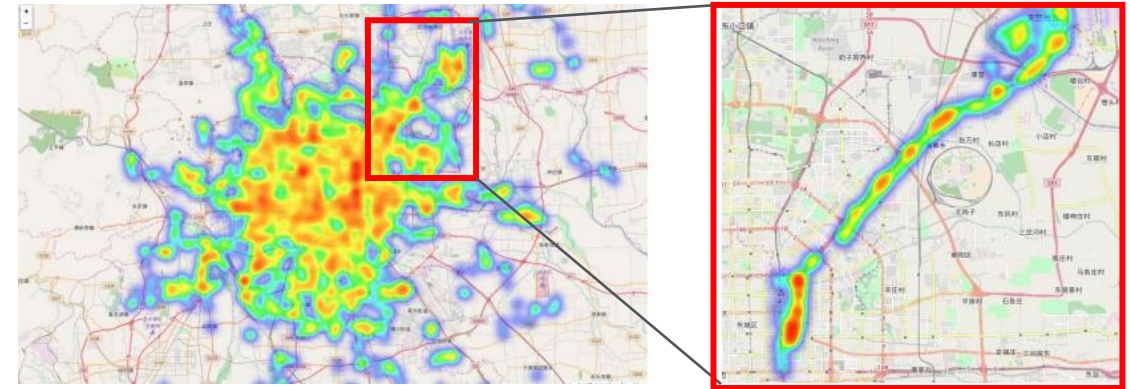
- 走行車両密度の高い都市部における交通渋滞は、利用者の移動時間の長時間化による経済損失だけでなく、NOX（窒素酸化物）などの大気汚染物質や二酸化炭素の排出による地球温暖化の要因の1つとなっている
 - ✓ 渋滞による速度低下と走行時間の長時間化によりCO₂排出量が増加する
- “交通渋滞が顕在化する前に回避する”手段・技術を開発することで、低速度走行による排気ガス排出量の削減やアイドリングなど無駄な燃料消費の削減が可能となる
 - ✓ 環境問題の解決だけでなく、車両利用者の走行時間短縮による利便性向上も達成することが重要



参考：国土交通省「道路分野におけるカーボンニュートラルへの貢献」（<https://www.mlit.go.jp/policy/shingikai/content/001470072.pdf>）、D-WAVE「フォルクスワーゲンが交通最適化研究に実量子コンピューターをどのように使用しているか」（https://dwavejapan.com/app/uploads/2019/12/Final_Dwave_VW_Case_Study_2019_11_13.pdf）

解決したい課題・モチベーション

- 都市部の渋滞解消に必要な交通流最適化を解くためには、数百万台の車両と数十億通りのルートと目的地などを考慮したルート最適化問題を解く必要がある
 - ✓ 特に、2 地点間を結ぶ複数台の車両を扱う場合、全車両は 2 地点間を結ぶ同一（最短）ルートを取る傾向があるため、渋滞が発生する
- よって、渋滞解消には同時走行する複数車両の走行ルートを制御する必要があり、そのためにはリアルタイムに収集した位置データから混雑していないルートを含む最適な経路を選択する組合せ最適化の有効性を検証することが重要となる
 - ✓ 一方で、膨大なパラメータを組み合わせた計算は古典コンピュータでは困難となる
- そこで、Volkswagen社は、量子コンピュータを活用した稼働率向上に向けた実証を実施した



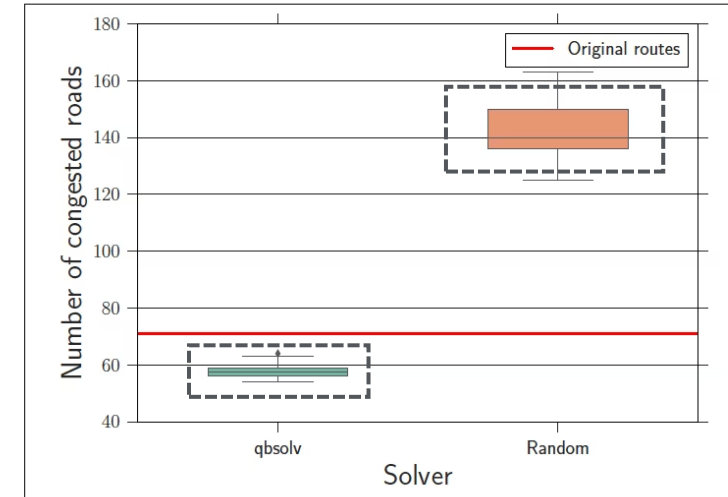
交通渋滞の激しい大都市（例: 北京）
（赤は高い車両密度）

2地点間（北京市内と北京国際空港間）ルートの渋滞

量子コンピューターとしての問題設定

- 本実証では、世界で最も混雑する中国北京市における（都市全体の渋滞緩和ではなく）市内と北京国際空港を結ぶタクシーの交通流最適化に焦点を当て、**走行車両からの移動データを収集し渋滞解消に向けた最適化ルート**を導出
- マシンは、**D-Wave社の“量子アニーリングマシン”**を活用した

問題設定	混雑する北京市中心部と北京空港を結ぶタクシーによる交通渋滞の解消（＝経路の分散による交通流最適化）
量子コンピューターハードウェア	D-wave2000Q（2000量子ビット）
実装	以下の最適化計算を50回実行しタクシーの経路をアップデート
目的関数	最適化対象の418台のタクシーの経路の重複を可能な限り低減（経路が長くなることは許容する）
制約	各タクシーが必ず一つの経路を選択
変数	タクシー418台×3通りの経路候補＝1,254変数 （量子ビット間に制限があるD-Waveマシンで解決可能な論理変数を越えているため、古典/量子コンピューターのハイブリッドツールで計算）→組み合わせ数は3の418乗通り

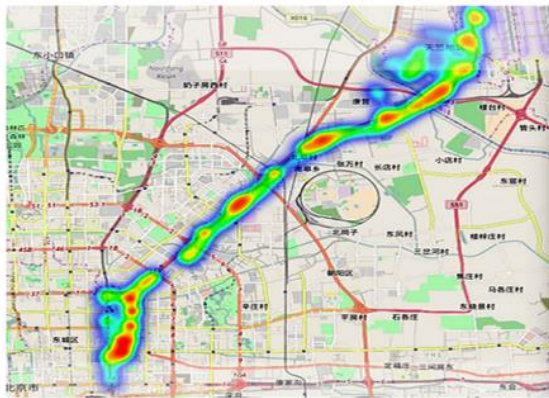


Solver：
qbsolvは量子コンピューターによるアルゴリズム、Randomはタクシーへのランダムなルートの割り当てに該当
Number of congested roads：渋滞している道路数

期待されるビジネス効果

- 量子アニーリングマシン（D-wave2000Q）と経路最適化に特化した古典/量子ハイブリッドアルゴリズムによるタクシーの渋滞緩和の効果をオープンマップを活用し測定
- 北京のタクシー418台のGPSデータ（1～5秒ごとに更新）を活用し、リアルタイムで最適化ルート进行計算することで各車両のルートを分散化し、渋滞を緩和できることを実証

最適化前：空港への道路の混雑の様子

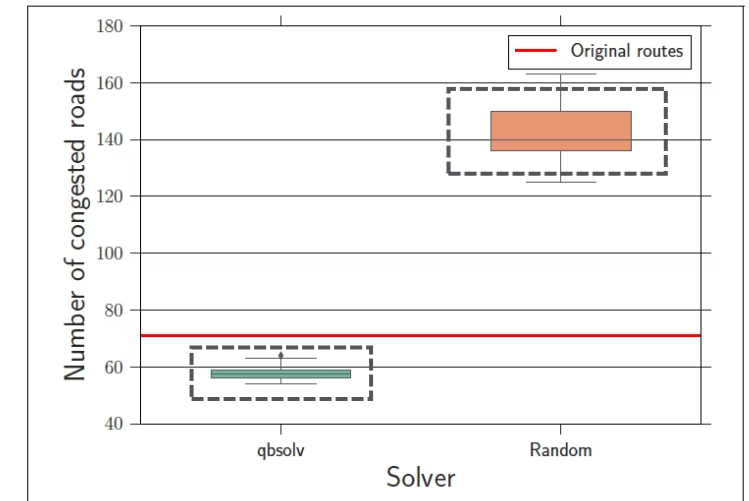


全てのタクシーが同じルートを採用する場合、タクシーが密集する渋滞道路（地図上の赤いエリア）が多く存在する

最適化後：最適化された交通の流れの様子



量子コンピュータアルゴリズムによりタクシーに代替ルートを割り当てた結果、渋滞エリアが解消された



Solver：

qbsolvは量子コンピュータによるアルゴリズム、Randomはタクシーへのランダムなルートの割り当てに該当

Number of congested roads：渋滞している道路数

取組の背景

- 大都市の渋滞を緩和するために、**交通状態に応じて適応的に信号機を制御することは重要な課題**とされている
- 大都市での信号機の制御は複雑な問題であり、交通渋滞の可能性を最小限に抑えるように交通流全体を最適化することは、**従来の計算方法ではほとんど不可能な問題**である
- これまでにさまざまな回避策が提案されてきたが、その多くは交通網を細かく分割し、交差点の近傍の情報のみを使って各信号を制御する**局所的な制御方法**であった

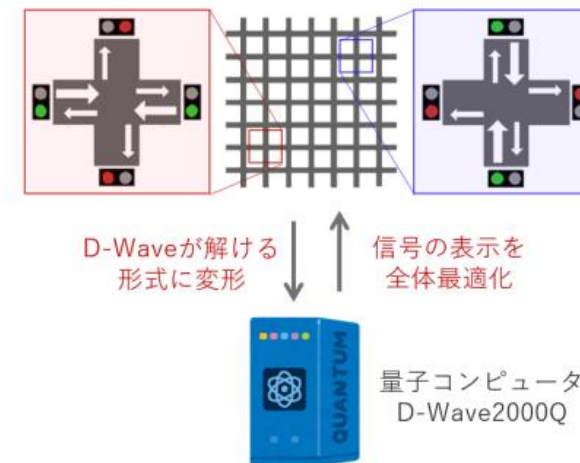
解決したい課題・モチベーション

- 従来の信号機の制御は、各交差点の周辺の局所情報のみを考慮したもので、**都市全体の交通状況を同時に最適化する手法ではなかった**
- 豊田中央研究所と東大は共同で、**都市全体の交通状況を考慮し、大都市の信号機群を協調制御する手法の開発を企図した**

量子コンピューターとしての問題設定

- 都市全体の交通状況を考慮した**信号機群の最適化問題**を、量子技術を用いて求解する手法を開発した
- ✓ **交通流の偏りを最小化するように各交差点の信号機の状態を決める最適化問題を解いた**
- 道路網は縦横に直交する格子状であるとし、道路網上の交通は一定の確率で右左折する車両群によりモデル化した
- 50×50 の道路からなる都市の信号機を一斉に制御する数値実験を行い、交通流の偏りの大きさを表す評価関数の値を従来手法と比較した
- マシンは、D-waveの量子アニーリングであるD-Wave2000Qを活用した

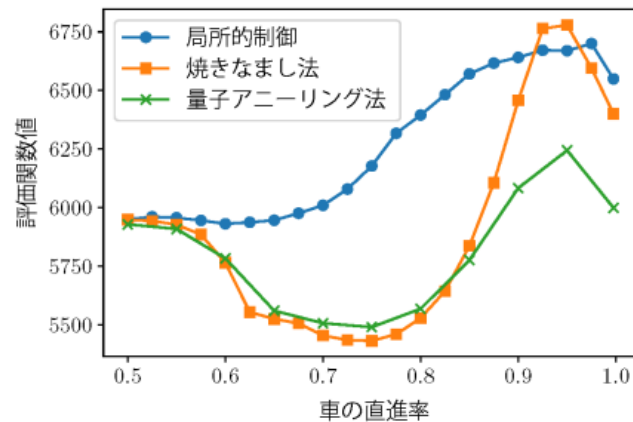
車が円滑に流れるように信号の表示を決める問題



交通流制御手法の概念図

期待されるビジネス効果

- 従来手法と量子技術を活用した手法を比較した結果、**交通状態である車両の流れやすさを約10%向上**することができた
- 従来の最適化手法である焼きなまし法を用いても求解できるが、**量子アニーリングマシンを用いると焼きなまし法を用いた場合に比べ高速かつ高性能**であることもわかった
- 今回の結果は、**実際の都市の信号機群を都市全体の交通状態に応じて高速かつ効率的に制御するため基盤技術として期待される**



交通流の偏りの大きさを表す評価関数の値の比較
（評価関数の値が小さい＝スムーズな交通流）

取組の背景

- タクシーやライドシェアサービスは、世界の多くの都市を移動するのに欠かせない移動手段となっている
 - ✓ 観光客は、タクシーのヘビーユーザーであり、目的地に向かう途中の観光の機会として利用する乗客も多い
- しかし、配車に関して、適切な場所と時間に十分な車両を確保し、ドライバーと待機中の乗客の両方が無駄にする時間を最小限に抑えることは難しいとされている

解決したい課題・モチベーション

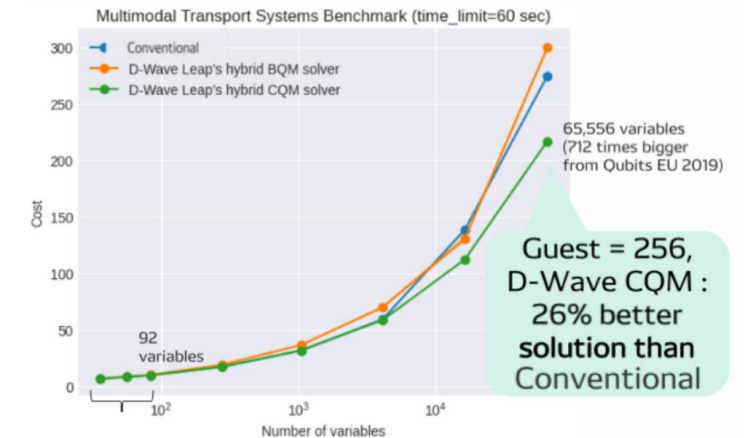
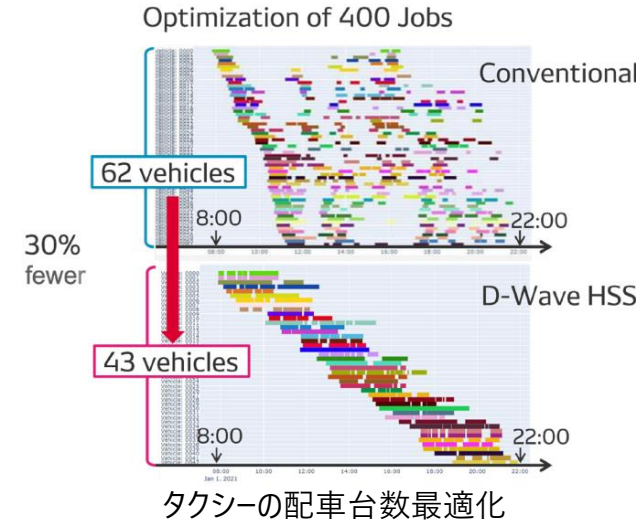
- デンソーは、世界をリードする自動車部品メーカーであり、「コネクテッドドライビング」を実現する技術は重要である
- デンソーでは、都市交通の効率性と持続可能性を向上させるために、量子技術を活用した2つの実証を企図した
 - ✓ タクシーの配車台数の最適化
 - ✓ マルチモーダル輸送システムの経路最適化

量子コンピューターとしての問題設定

- 京都での観光タクシーを対象にして、タクシーの配車台数最適化を検討した
 - ✓ 400件のタクシー乗車に対する必要なタクシー数について、従来手法と量子技術の比較を行った
- 以下に示すクルマ、シャトルバス、タクシーを組み合わせたマルチモーダル輸送システムのシナリオにおいて、車両数、乗客数、1台あたりの乗降場所が異なるといった様々な条件で定式化し、経路最適化を検討した
 - ✓ 複数のクルマがさまざまな場所で複数のゲストを迎え、シャトルバスが待機する分岐点まで乗客を中継する
 - ✓ シャトルバスは、集まった乗客を別のジャンクションに連れて行く
 - ✓ ジャンクションからタクシーに拾われて、さまざまな目的地に連れて行く
- マシンは、D-wave社のハイブリッドソルバーサービスを活用

期待されるビジネス効果

- タクシーの配車台数最適化を検討し、従来手法と量子技術と比較した結果、400回の乗車に対応するために必要なタクシー数を約30%削減することができた
 - ✓ 従来は62台必要であったが、量子技術活用により43台に削減できた
 - ✓ タクシー配車台数の最適化によって、CO2の排出量を大幅に削減する可能性がある
- マルチモーダル輸送システムの経路最適化について256人の乗客でのシナリオを想定した場合、従来技術と量子技術（D-wave CQM）を比較した結果、従来よりも26%効率的にルーティングできた
 - ✓ シナリオの複雑さに伴い、計算時間が増加したが、最適解の効率を10%犠牲にすることで、D-wave CQMソルバーが複雑性の高いルーティング計算を100倍以上高速に処理することができた



マルチモーダル輸送システムの経路最適化

取組の背景

- 近年、自然災害の増加や被害の甚大化に伴い、**避難の遅れを防ぐための対策**が求められている。
 - ✓ 九州各地では豪雨による河川氾濫と洪水災害が頻繁に発生
- 九州電力は、自治体や金融機関等と「安全安心なまちづくり」や「活力と魅力のあふれるまちづくり」等に関する包括連携協定を締結し、**九州地域が抱える課題の解決や持続可能なまちづくりを推進**している
 - ✓ 取組の一環として、**災害時の地域住民の避難支援**を推進

解決したい課題・モチベーション

- 災害時の避難において、個々人が避難場所を目指し最短で行動しようとする、特定の道路に集中し危険な状態になるおそれがあるため、**迅速な避難指示と避難経路の誘導が必要**である
- 避難経路には膨大な選択肢があるため、その中から最適な経路を導き出すにあたり、**古典コンピュータでは計算に多大な時間がかかる点が課題**である
- 量子技術は、最適化問題を効率的に解くことが期待されているため、本検討では、**住友商事が培ってきた量子技術の知見を活かし、地域住民の最適な避難経路計算に量子技術を適用**することを検討する

量子コンピューターとしての問題設定

- 住民の避難中に環境が刻々と変化する中で、事前に割り当てられた避難所が最適であるとは限らないため、逃げ遅れなく全員が避難完了できるように、**ダイナミック（動的）に地域住民全員の避難経路と避難先を決定するための計算**を行う
- **避難中の渋滞や事故、避難中の橋の崩壊等を考慮した、避難所までの最適なルート**を地域住民に伝えることができるようにする

取組の背景

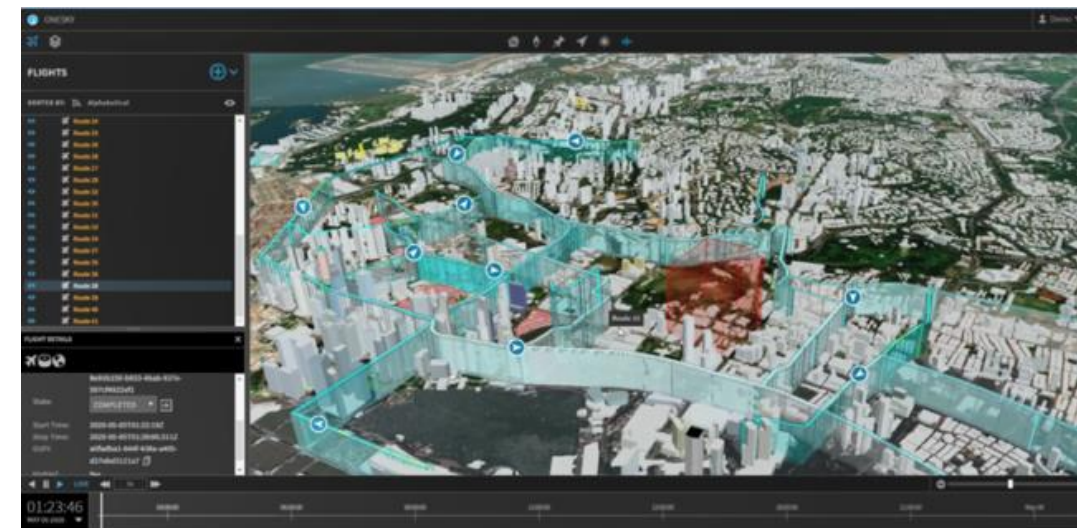
- エアモビリティは、都市部における移動時間の短縮、離島や山間部における移動の利便性向上、緊急搬送や物資輸送の迅速化などの効果が期待されている**次世代の移動手段**である
- エアモビリティ社会が実現した際には、数多くの無人航空機（Unmanned Aerial Vehicle：UAV）が飛び交うことが想定されており、**UAVも含めたリアルタイム三次元交通制御を行うシステムが必要**となってくる

解決したい課題・モチベーション

- エアモビリティ時代の空の交通の安心安全のためには、**刻一刻と変わる気象や電波状況、他のエアモビリティの状況を鑑みて最適な運航を決定する必要がある**
- しかし、指数関数的に増大する組合せの中からリアルタイムに答えを求めるのは**従来コンピューターでは困難**となる可能性がある
- そのため、OneSky、東北大、住友商事（QX Project）は、**多数のエアモビリティをリアルタイムに制御する量子技術実証を開始した**

量子コンピューターとしての問題設定

- エアモビリティをリアルタイムに制御可能な台数について、**従来手法と量子技術の比較**を行った
- マシンは、**量子アニーリング**を活用した



期待されるビジネス効果

- 制御可能なエアモビリティの台数について、従来手法よりも70%程度向上できた
 - ✓ 従来は40台程度であったが、量子技術活用により70台程度まで増加した
- ある特定の最適化問題については、古典コンピューターと比較して、10倍程度の高速化を実現できた



従来手法



量子技術活用

取組の背景

- 2021年には、500隻以上のLNG船が重要な燃料供給を海上輸送するために使用されている
 - ✓ 重要インフラに電力を供給するために、LNGが展開される目的地の港まで年間数千回の航海を行っている
- 海上輸送における最適航路を見つけることは、複雑な最適化問題になる可能性あり、LNGを効率的に輸送するためには、各船舶の位置を各配送場所のLNG要件とともに、年間を通じて各日で考慮する必要がある
- 現在、この種の問題を古典コンピュータで計算するのは困難である
 - ✓ 数十隻の船舶が関与する単純な問題であっても、さまざまな決定の可能な組み合わせの数は $2^{1,000,000}$ に達する可能性がある

解決したい課題・モチベーション

- 海上輸送における最適航路を見つけるために、膨大な組み合わせ数の問題を解く必要があり、古典コンピュータでは困難であるため、量子技術の活用が期待されている
- ExxonMobilとIBMは、量子技術を活用したの海上在庫ルーティングのモデル化や、車両と在庫ルーティングのさまざまな戦略の強みとトレードオフを分析し、運用に向けた実用的な基盤構築を企図した

量子コンピューターとしての問題設定

- LGNを効率的に輸送するための航路最適化問題について取り組んでいる

エネルギー

アンモニア合成の効率化に向けた窒素固定反応シミュレーション P. 97

不安定な再エネ電源出力の予測 P. 100

配電応需計画の最適化 P. 102

データセンターの消費電力削減に向けた設備運転計画の最適化 P. 104

電力市場取引の最適化 P. 106

VPP（仮想発電所）の需給調整最適化 P. 108



取組の背景

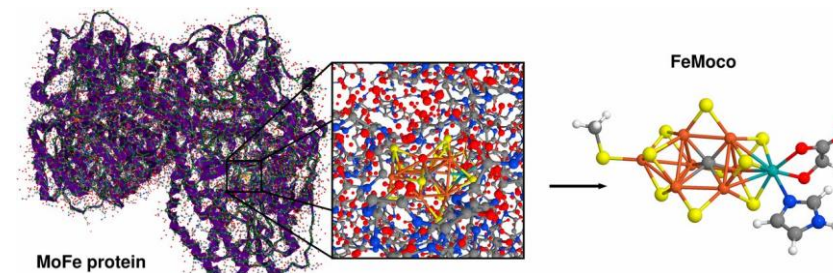
- グローバルな取組である気候変動対策において、化石燃料の代替候補のクリーン燃料としてアンモニアが注目されている
 - ✓ 燃焼時にCO₂を排出しないことで脱炭素化に貢献
- 一方で、アンモニアの製造法は大量のエネルギー消費とCO₂の排出をしている
 - ✓ 現在主流の製造法である「ハーバーボッシュ法」は、高温高压条件の合成法（400～600℃の高い温度と100～300気圧の高圧力）
 - ✓ 地球全体で消費されるエネルギーの1～2%を要し、製造時に排出されるCO₂の量も、人類の排出量の1～3%を占有
- 「ハーバーボッシュ法」を代替するための、環境にやさしい低消費エネルギー・低CO₂排出アンモニア製造の代替法のニーズがある

解決したい課題・モチベーション

- 「ハーバーボッシュ法」では空気中の窒素を固定するプロセスにエネルギーの大部分が消費されているが、自然界、特に生物系ではマメ科の植物の根に存在する窒素固定酵素（ニトロゲナーゼ）に常温・常圧でアンモニアの合成を促す働きがある
 - ✓ その仕組みはFeMocoと呼ばれる補因子*が関与
*酵素の触媒活性に必要なタンパク質以外の化学物質
- 生物系と同様の反応を工業的に実現することでクリーンなアンモニア製造が実現できるが、FeMocoが関与する化学反応が複雑で量子性が強いいため、古典コンピューター（スパコン）ではシミュレーションが困難
 - ✓ ニトロゲナーゼ酵素中のFeMoco補因子は遷移金属触媒としてアンモニア合成に関与するが、電子間相互作用が強く、古典コンピューターで多用される近似法のHartree-FockやDFTでは正確な化学反応が捉えられない
- 現在、量子コンピューターで量子化学計算に対して量子加速を持つアルゴリズムを活用した分子シミュレーションが研究されている

量子コンピューターとしての問題設定

- 電子相関を考慮し、より多くの軌道数を含む計算が可能な密度行列繰り込み群とCASSCF（多配置自己無撞着場）法を組合せ、量子位相推定を用いた量子コンピューター計算を実行した
- 量子コンピューターとして、2つの条件で計算
 - ✓ 短中期で実現可能なFTQCで計算可能なエラー率、 10^{-3} 、ゲート速度 100 ns
 - ✓ 将来実現可能なFTQCで計算可能なエラー率、 10^{-6} 、ゲート速度 10 ns



ニトロゲナーゼ酵素（左図）の活性中心にある鉄・モリブデン補因子（FeMoco）（右図）により、窒素ガスのアンモニアへの変換反応を起こす

期待されるビジネス効果

- FeMocoが関与する化学反応が複雑で量子性が強いことにより、古典コンピュータでは計算が困難であるが、量子コンピュータによる2つの条件でのシミュレーションに必要な計算リソースと時間を算出した
 - ✓ 許容誤差を厳密解から0.1 mHartree^{*1}以内に収めるには、Serial（シングルスレッド）ではStructure1、2とも論理量子ビット数が111で3年以上が必要
 - ✓ 一方、PAR（マルチスレッド）では両者とも論理量子ビット数2000程度で1.5か月～3か月で実行
- 窒素ゲナーゼ中の生物学的窒素固定という未解決の問題を例に、量子コンピュータを用いて複雑な化学系における反応機構を解明できることを示した

Table 1. Simulation time estimates

Structure	T gates	Cl. gates	Δt (10 ns)	Δt (100 ns)	Qubits
Quantitatively accurate simulation (0.1 mHa)					
Structure 1					
Serial	1.1×10^{15}	1.7×10^{15}	130 d	3.6 y	111
Nesting	3.5×10^{15}	5.7×10^{15}	15 d	4.9 mo	135
PAR	3.1×10^{16}	3.1×10^{16}	110 h	1.5 mo	1,982
Structure 2					
Serial	2.0×10^{15}	3.1×10^{15}	240 d	6.6 y	117
Nesting	6.5×10^{15}	1.0×10^{16}	27 d	8.9 mo	142
PAR	6.0×10^{16}	6.0×10^{16}	210 h	2.9 mo	2,024
Qualitatively accurate simulation (1 mHa)					
Structure 1					
Serial	1.0×10^{14}	1.6×10^{14}	12 d	3.9 mo	111
Nesting	3.3×10^{14}	5.6×10^{14}	1.4 d	14 d	135
PAR	3.0×10^{15}	3.0×10^{15}	11 h	4.6 d	1,982
Structure 2					
Serial	1.9×10^{14}	3.0×10^{14}	22 d	7.2 mo	117
Nesting	6.0×10^{14}	9.9×10^{14}	2.5 d	25 d	142
PAR	5.5×10^{15}	5.5×10^{15}	20 h	8.3 d	2,024

Listed are the number of Clifford and T-gate operations, the estimate of the run time (Δt), and the number of logical qubits required to obtain energies within 0.1 mHa or 1 mHa for two different structures of FeMoco on a quantum computer. Structure 1 is for spin state $S = 0$ and charge +3 elementary charges with 54 electrons in 54 spatial orbitals. Structure 2 is for spin state $S = 1/2$ and charge 0 with 65 electrons in 57 spatial orbitals (see [SI Appendix](#) for further details). These run times and gate counts are likely to be pessimistic.

取組の背景

- 太陽光、風力など自然環境からエネルギーを抽出する再生可能エネルギーは気候変動対策に向けた脱炭素化に対して大きなポテンシャルを提供しているが、**再エネ電源の出力は不安定である**
 - ✓ エネルギー消費量の変化に応じてオン/オフできる他のエネルギー源とは異なり、システムの安定化のために**再生可能エネルギー源の管理は需要に合わせて完全に最適化される必要がある**
- よって、**不安定な再エネ電源からの出力を予測するモデルの確立が求められている**
 - ✓ 信頼性に欠ける予測モデルの場合、エネルギー供給者は化石燃料やその他の非サステナブルな代替燃料などの供給源を利用する必要が生じ、それは環境負荷の大幅な増加要因となる

解決したい課題・モチベーション

- **不安定で複雑な挙動を示す再エネ電源出力の予測モデルは、トレーニングが難しく、大量のエネルギーとデータを必要とする場合がある**
 - ✓ 予測シミュレーションは無秩序でモデル化が困難な気象・気候条件に依存しているため、HPCなど高性能コンピューティングリソースが必要になる
- そこで、PASQALは仏送発電事業者のEDFと共同で、量子コンピューター技術を活用し出力予測シミュレーションにおけるCO2排出量を低減し、かつ高精度で出力予測を実現するモデルを開発した
- さらに、PASQAL主催による量子コンピューターを活用したサステナブルなソリューションのハッカソンで2023年に優勝したことで、実証に向けて取り組む予定

量子コンピューターとしての問題設定

- **再エネ電源のような複雑な物理システムをモデル化し、古典コンピューターと量子コンピューターのモデルの精度を比較した**
 - ✓ 量子コンピューターとしては、14量子ビットのエミュレータ（ゲートと想定）を用いた
- **また、エネルギー消費のベンチマークとして、古典コンピューターと量子コンピューターを用いた場合のCO2の排出量の比較を行った**
 - ✓ 量子コンピューターとしては、PASQALの現在の商用デバイスであるFresnel（ゲート）を用いた

参考: pasqal「Three Winning Quantum Projects Announced for the Blaise Pascal [re]Generative Quantum Challenge」 (<https://www.pasqal.com/news/winners-of-the-blaise-pascal-regenerative-quantum-challenge/>)、RTE「Le transport d'électricité, comment ça fonctionne ?」 (<https://www.rte-france.com/wiki-energie/transport-electricite-comment-ca-fonctionne>)、Pasqal「The Blaise Pascal [re]Generative Quantum Challenge」 (<https://www.pasqal.com/news/the-blaise-pascal-regenerative-quantum-challenge-the-journey-winning-projects-and-lessons-drawn/>)、Microsoft「PASQAL プロバイダー」 (<https://learn.microsoft.com/ja-jp/azure/quantum/provider-pasqal#fresnel1>)

期待されるビジネス効果

- 古典コンピューターを活用したニューラルネットワークに基づく古典的リザーバーを上回る高い予測精度を少ないデータサイズで実現
- 古典コンピューターと量子コンピューターを用いた場合のCO2の排出量の比較した結果、データサイズが大きい場合、量子コンピューターの方がCO2排出量が少ない
- ✓ データサイズが拡大するにつれ古典コンピューターは消費エネルギーが増大するが、量子コンピューターのCO2排出量は一定である
- ✓ データセットについて産業用途に対応する10⁵～10⁶のあたりで、古典コンピューターよりも量子コンピューターのCO2排出量が少なくなる

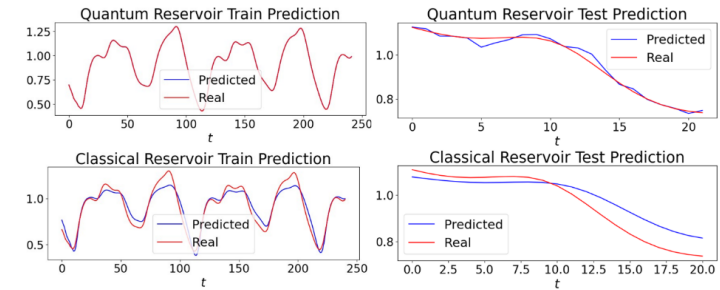


Figure 7.

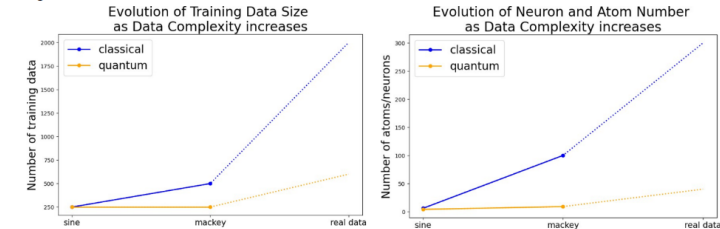
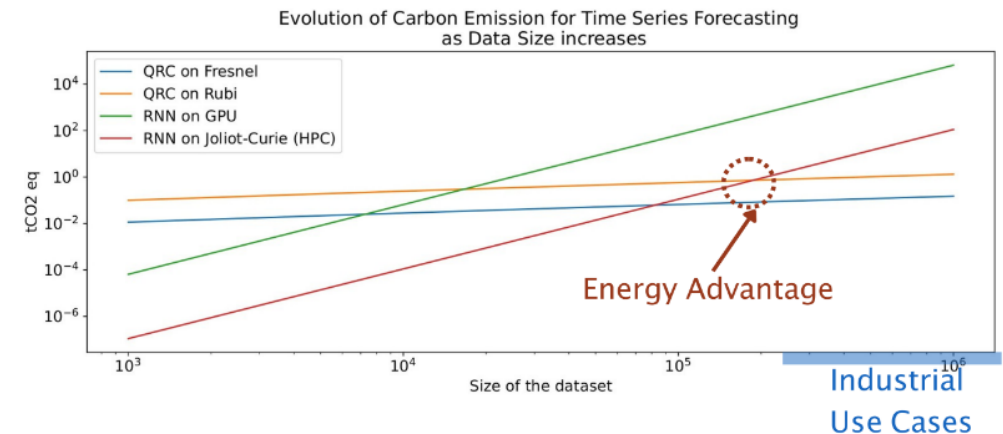


Figure 8.



取組の背景

- 中部電力パワーグリッドの配電部門では、顧客宅へ電気を届けるための電柱や電線などの建設、保守運用を行っている
- 日々の保守運用業務においては、各営業所の作業担当者が担当エリアの顧客から電気の供給・停止・増設などの申し込みや、故障による停電情報が入ると現地に出向して必要に応じた工事・点検・復旧作業を行っている
- 作業計画（応需計画）においては、営業所の運営管理者が日々の作業と要員数を勘案してスケジュールを作成している

解決したい課題・モチベーション

- 訪問順序やジョブの分担の組合せは必ずしも自明ではないが、人手で行っているスケジュールリングの最適化を自動で実現できれば有用性が高い
- 作業中に発生する突発的案件（停電対応や感電などにつながる緊急を要する事象）が発生した場合、各現場での作業状況や各作業担当者の位置情報から臨機応変にリスケジュールリングを行う必要がある
- 顧客宅などの巡回順序や作業担当者の作業スキル、作業可能な時間帯、移動時間などの制約を考慮に入れると、考えられる作業計画の組合せ数は膨大な数になるため、本実証では膨大な数の組合せ最適化問題に対して、富士通のデジタルアニーラの有効性検証を行う

量子コンピューターとしての問題設定

- 中部電力パワーグリッドの営業所1箇所における1日分の作業実績の一部（電子データで抽出できた作業40個）をテストデータとして用い、以下の目的関数および制約条件の下で作業計画を自動作成した
 - ✓ 目的関数として、業務時間の短縮のみを対象とした
 - ✓ 制約条件は、以下のとおり
 - ・ 各作業は1度だけ実行される
 - ・ 各作業担当者は作業の開始から完了まで他の作業を実行できない
 - ・ 各作業担当者は移動中に他の作業を実行できない
 - ・ 実行可能時間が設定されている作業がある
 - ・ 最初の作業を出社と定義し、各作業者は所定時刻に業務を開始する
 - ・ 最後の作業を帰社と定義し、各作業者はどこかの時刻で帰社し、その後作業を実行できない
- また、以下の実際の業務における付随的な条件を考慮した
 - ✓ SEは全員12時に事務所に戻り、13時まで休憩時間とする
 - ✓ 時間帯によって、車での移動時間が変わる
 - ✓ 突発的な作業が発生する場合がある。発生時はその時点から応需計画をリスケジュールリングする
- マシンは、富士通のデジタルアニーラを活用した

期待されるビジネス効果

- 今回の応需計画の最適化検証では、テストデータを用いて、デジタルアニーラと古典の商用ソルバ（Gurobi）と比較を実施し、求解時間・業務完了時間に関してデジタルアニーラの有効性を示すことができた
- 求解時間について、パターン①・②・③・④（右図を参照）のいずれのパターンにおいてもデジタルアニーラが優位となった
 - ✓ パターン①において、デジタルアニーラでは17:40に業務を完了できるという解が得られたのに対し、Gurobiでは時間をかけても有効な最適解が得られなかった
 - ✓ パターン③の突発的な作業発生時においても、デジタルアニーラはパターン②よりも1.5倍程度の時間増で求解できており、Gurobiよりも高速に対応できた
- 業務完了時間について、デジタルアニーラによる有効性を確認できた
 - ✓ 作業担当者5人以上の場合、17:00で全てのジョブが完了という結果が得られた
 - ✓ 人間系実績との直接比較はできないが、デジタルアニーラによる効率的なスケジューリングの実現性を確認できた
（テストデータに反映できなかった紙帳票のジョブがあり、人間系による業務完了時間を同一条件で計測なかった）

パターン	検証結果		
	業務完了時刻	デジタルアニーラ 求解時間（秒）	Gurobi Optimizer 求解時間（秒）
① 作業担当者数：4人	17:40	857	— (17:40の解得られず)
② 作業担当者数：5人	17:00	35	120
③ 作業担当者数：5人＋突発的な作業	17:00	35＋16※	120＋19※
④ 作業担当者数：6人	17:00	5	12

※＋の後の数値は、突発的な作業発生時の再計算に要した時間。

取組の背景

- NRIでは、地球環境問題をはじめとするさまざまな社会課題の解決に向けて、量子コンピューティング技術がどのように活用できるのかを明らかにするための技術検証や研究開発を進めている
- 世の中の脱炭素化の動きや電力価格の高騰に伴って、電力消費量の削減が注目を集めている
- NRIの事業における電力消費量の約 8 割を占めるデータセンターにおいて、電力効率が高い設備運転計画が求められている

解決したい課題・モチベーション

- NRIが運用する東京第一データセンターの空調等で使用する熱源設備に関して、電力効率が高い設備運転計画を作成するために、2022年4月から9月にかけて量子コンピューターを活用した最適な運転計画作成に関する実証実験を実施した
- 本実証実験は量子コンピューターの応用研究を進めている東北大学の大関研究室と共同で進めた

量子コンピューターとしての問題設定

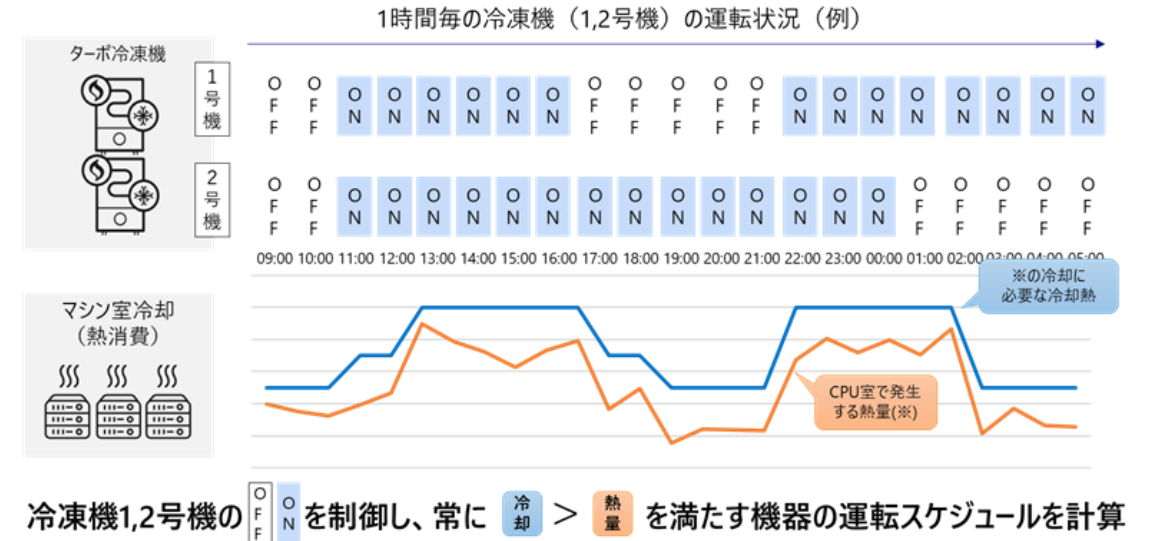
- ビジネス上の課題を数式化する数理計画的なアプローチによって、データセンターの熱源設備において電力消費量に影響を与えるデータを分析し、数理モデルを構築した
- 構築した数理モデルを用いて、電力消費量が最小となる熱源設備の運転計画を算出した
 - ✓ 前提条件として、データセンターで稼働する機器は年々増加しているという背景から、今後データセンターで必要となる冷却熱量が現在よりも30%増加することを考慮した
- マシンは、量子アニーリング方式の量子コンピューターであるD-wave Advantageを利用した
 - ✓ なお、量子コンピューターで演算を行うために、Fixstars Amplify社が提供するFixstars Amplify SDKを活用した

NRI：データセンターの消費電力削減に向けた設備運転計画の最適化 【2022/12】 2 / 2

産業領域 エネルギー
バリューチェーン 小売・需要家
技術分類 イジング（量子アニーリング）

期待されるビジネス効果

- 運転計画に従って熱源設備を運用した場合、外気温が20度前後となる春秋の季節に限ると、**電力消費量が最大で約10%削減できることを試算**した
- 本実証実験で最適化に用いた数理モデルは、NRIのデータセンターに特化したものではなく、**一般的な建築物の熱源設備に対しても汎用的に適用可能**である



算出した熱源設備内における冷凍機の運転計画イメージ

取組の背景

- 多くの国で電力市場が自由化され、独占的な電力会社による運営から、**多くの発電会社やエネルギー取引業者が競争する市場へと移行している**
- また、不安定な再生可能エネルギーの導入や分散型エネルギーの導入拡大により電力市場のボラティリティが高まっており、**電力市場の参加者（発電事業者）による入札戦略・意思決定の最適化ニーズが高まっている**

解決したい課題・モチベーション

- 従来のマルチエージェント強化学習（MARL）手法は、発電会社（GENCO）の意思決定をモデル化できる
- 一方で、**政策や長期的な事業計画、資産の状態、トレーダーのリスク嗜好や（非）合理性による不確実性**のため、GENCOは最適な意思決定には至っていない。また、GENCOは市場の情報を一部観察できないため、**市場取引結果を精度よく予測できない**。さらに、各GENCOの報酬は**競争する他のGENCOの意思決定に影響を受ける**
- そのため量子コンピューターを活用して**電力市場取引を最適化**することが求められる。従来のMARLを量子MARLに修正することで、電力市場の均衡とダイナミクスをより精度高くシミュレーションするニーズが高まっている

量子コンピューターとしての問題設定

- 発電会社（GENCO）による**電力市場の入札戦略を最適化しその収益を最大化する**
- 具体的なマシンは明記されていないが、**ゲート式の量子コンピューター**を活用している
- 電力市場の入札をシミュレーションするための**量子マルチエージェントディープQネットワークアルゴリズム（Q-MADQN）**を提案
 - ✓ この方法では、変分量子回路をマルチエージェント強化学習（MARL）フレームワークに統合することで、電力市場における不確実性を効果的に評価およびシミュレート

期待されるビジネス効果

- 6つのGENCO（発電会社）のデータを活用（発電コスト等）を活用しつつQ-MADQNと従来のMADQNモデルそれぞれで電力市場取引の入札戦略スタディを実施し、その結果を比較した
- 結果として、Q-MADQNは、従来のMADQNでは検出できなかった**潜在的なアクション**を探索可能となり、また、**Q-MADQNを活用することでGENCOの総利益が大幅に増加することを確認した**

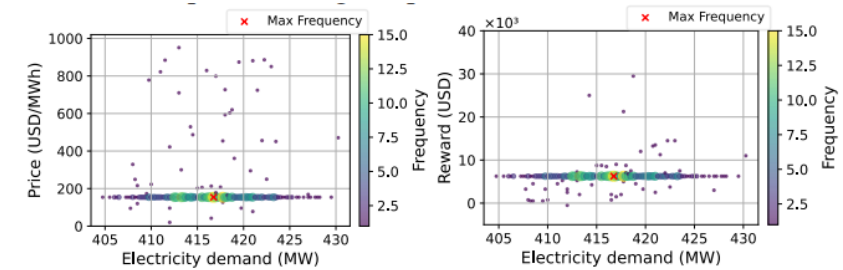


Fig. 2. State-action and reward distributions of GENCO 5 using MADQN.

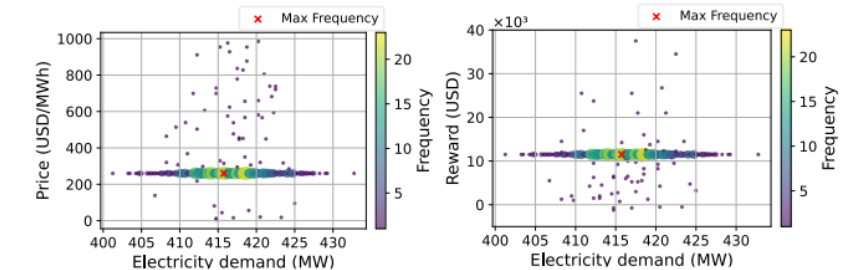


Fig. 3. State-action and reward distributions of GENCO 5 using Q-MADQN.

取組の背景

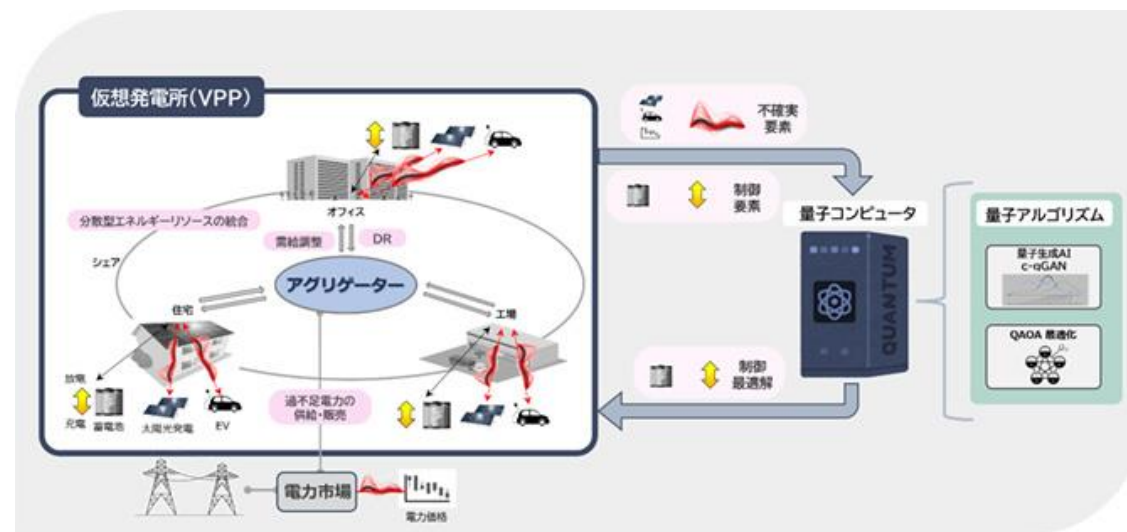
- 世界的に再エネ導入が進む中、天候に左右されやすい再エネによる電力供給の不安定さが課題となっている
- 解決策として注目されているVPP（仮想発電所）は、オフィス等の小型発電所と蓄電池を一つの発電所のように扱い、電力市場と連携して管理/調整することで電気を無駄なく使う。この時各施設からのDR（デマンドレスポンス）を受けて発電と消費のバランスをリアルタイムに最適化する「需給調整」が効率的・安定的な電力供給の実現において重要な役割を担う

解決したい課題・モチベーション

- 現在、VPPの需給調整におけるシナリオの作成で利用されている確率計画法は、分布の範囲の中で何度も起こりうるシナリオをサンプリングして計画のリスクとリターンを評価しているが、計算量が膨大になるため実用化が難しく、実際の需給運用では効果的ではなかった
- また、不確実性が高い電力システムの問題を量子コンピューターで計算により解決する手法については十分に研究が実施されてこなかった

期待されるビジネス効果

- 本取組では、①1世帯におけるVPPの需給調整を最適化②数世帯へ適用③100世帯以上へ対応の3段階で開発を進める
- 2035年前後に誤り訂正（FTQC）機能を持った量子コンピューターが実用化されるという予測のもと、**2024年から社会問題への実装を見据えた研究を実施している**

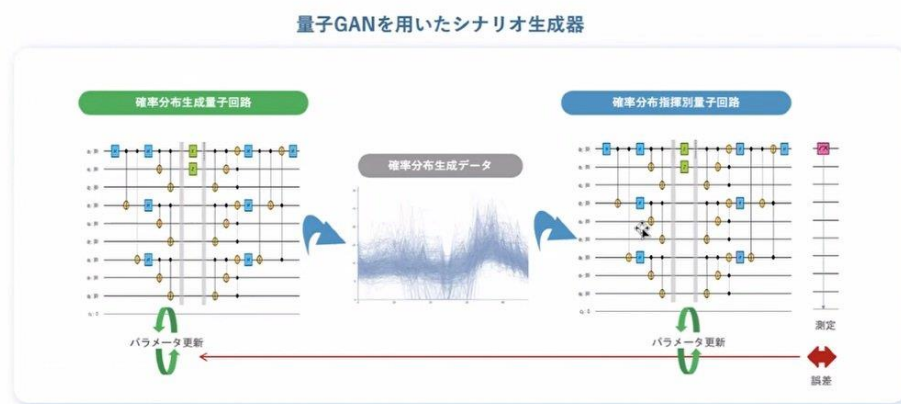


VPP需給調整最適化手法の実現イメージ

量子コンピューターとしての問題設定

- VPPにおける需給の不確実性解消と最適化を目的に、ゲート方式の量子技術を活用した量子古典確率最適化手法の研究開発を行う
- 具体的には3つの研究を行う①VPPの不確実性を量子GAN*1にマッピングする②量子近似最適化アルゴリズム（QAOA*2）を用いてVPPの問題を解く③量子GANとQAOAの融合
- HWはゲート方式の量子技術を活用している

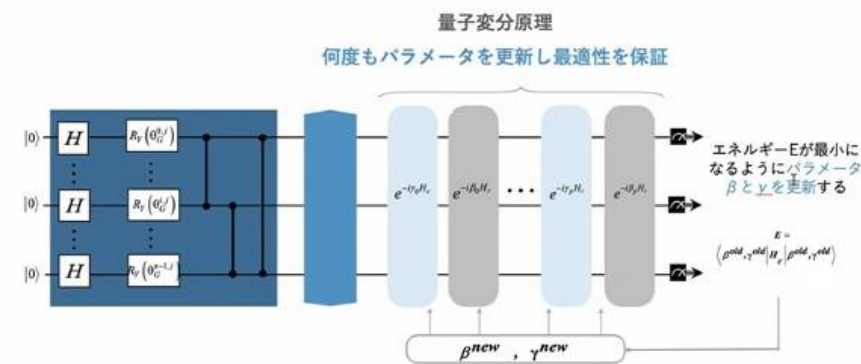
量子技術を使ったアプローチ：量子GAN



量子GAN

*1 GANはDiscriminatorとGeneratorを交互に競合させながら学習を進めることで、本物に近いデータの生成を可能にするネットワーク。古典GANは勾配消失問題により、離散的な値を生成するのが苦手という欠点がある

量子技術を使ったアプローチ：QAOAの特徴



QAOA

*2 QAOAは量子近似最適化アルゴリズムと呼ばれ、量子ゲート方式による組合せ最適化問題の解を求めるためのアルゴリズム

CAE

量子位相推定を用いた固有振動数解析による共振の防止 P. 111

航空機設計における空力特性の最適 P. 113

ジェットエンジンの高性能化 P. 116

4層プリント回路基板におけるデカップリングコンデンサの最適化 P. 118

ブラックボックス最適化を活用した車両設計最適化 P. 120



取組の背景

- QunaSysはCAE分野での量子コンピューターの応用の検討をしており、量子コンピューターのパラダイムであるNISQ時代とFTQC時代の2つの段階において、主に技術的な観点から、量子コンピューターの応用可能性、そのインパクト、古典計算との比較を議論している。CAEの勉強会を開催し、JX石油開発株式会社、村田製作所らが参加し、量子コンピューターの特性を踏まえた活用の方向について示唆を集めている
- 量子位相推定アルゴリズム*は量子化学をはじめ多くの応用において指数的な量子加速のもとになっている
- 構造体の固有振動数解析は、共振による破壊や騒音を防ぐために産業上重要
 - ✓ 固有振動数解析とは、入力される荷重の周波数と構造側の固有振動数が一致することで共振が発生し、不快な振動や騒音、破損などを防ぐ為の解析

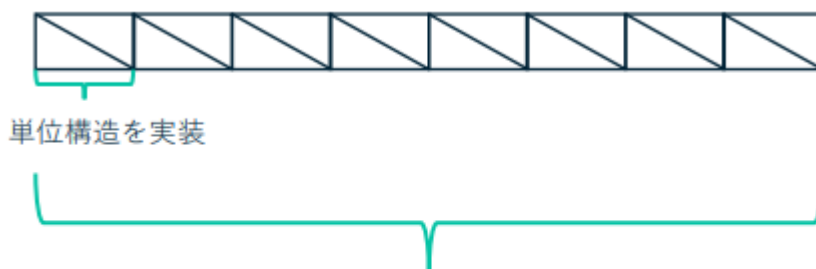
解決したい課題・モチベーション

- 量子位相推定では固有値問題が解けるため、量子化学に応用されているか、他に量子コンピューターが指数的に速く解ける固有値問題がみつければ有望ユースケースが広がる
- 本取組では新たな取組先として固有振動数解析への応用を検討している

量子位相推定アルゴリズム*：ユニタリ演算の固有ベクトルが与えられたときに、それに付随する固有値を推定する方法

量子コンピューターとしての問題設定

- 本取組は量子位相推定アルゴリズムの新たな応用として、固有振動数解析を提案するのが目的
- 1次元につながれた、ばねでつながったN個の質点についてLV1（ばね定数が一定）、LV2（2種類のばね定数）について計算を実施
 - ✓ 入力を古典コンピューターで粗い計算を行って準備した上で、1次元系について、ゲートレベルでの量子位相推定の実装を行った
 - ✓ 繰り返しがある系についての効率的な実装の提案も行った
- 利用したHWは明記されていないが、QunaSysはゲート方式の量子コンピューターに取り組んでいるため、ゲート方式の量子コンピューターが対象と推定



本取組が適用できる繰り返しがある系

期待されるビジネス効果

- 1次元でつながれた、ばねでつながったN個の質点についてLV1（ばね定数が一定）、LV2（2種類のばね定数）について計算を実施した
- 1次元系について、ゲートレベルでの量子位相推定の実装を行い、**計算全体を通しての指数加速が示された**
 - ✓ 固有振動数解析には、Qubitization*を活用し、量子回路全体で、質点数 N に対してゲート数は $O(\log N)$ （古典コンピューターでは $O(N)$ ）を達成した

Qubitization*：過去の手法と比較して少ないリソースでハミルトニアンを量子位相推定可能なかたちに変換する手法

2^n	code distance	# of physical qubits	runtime
2^{32}	25	$\sim 5.2 \times 10^5$	~ 23 min.
2^{64}	25	$\sim 8.5 \times 10^5$	~ 45 min.
2^{128}	27	$\sim 17.5 \times 10^5$	~ 90 min.

LV2におけるn数と推定計算時間



強風による共振により崩壊したタコマ橋（1940年）

取組の背景

- 航空機の機体全体の形状・デザインはエネルギー効率性を左右するため機体設計において重要な要素である
- 現状、効率性の高い機体形状を決定するためにCFD^{*1}が活用され、機体周囲の空気の流れを解析し、機体に及ぼす力などを解明する空力特性評価が実施されている
- ✓ 航空機は大量の二酸化炭素を排出するため地球温暖化の要因と考えられている。従って、航空機業界では機体デザインや航空機運用を最適化することが求められている

^{*1}：CFDとは、偏微分方程式の数値解法等を駆使して流体の運動に関する方程式（オイラー方程式、ナビエ-ストークス方程式、またはその派生式）をコンピュータで解くことによって流れを観察する数値解析・シミュレーション手法

解決したい課題・モチベーション

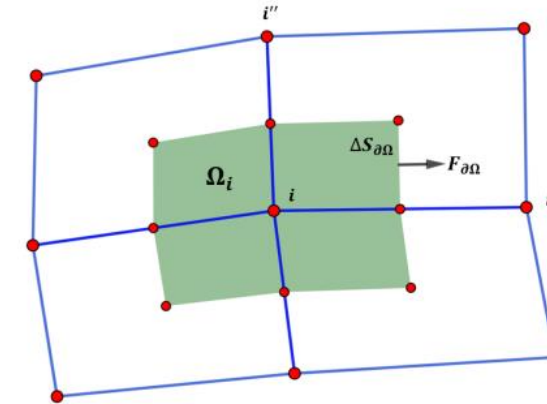
- 機体回りの空気の流れをモデル化し空力特性評価を実施するためにスパコンが活用されているが、処理時間がかかり精度向上が困難
- 大規模・高速計算が可能な量子コンピューターの航空機設計への活用を目指し、Airbusは2019年、Quantum Computing Challenge^{*2}を実施しNISQを活用した機体設計の効率化のタスクに関する競技を実施した
- 上記Challengeにおいて、中国の量子コンピューターHWベンダー、Origin Quantum（本源量子計算科技）は量子コンピューターを活用した空力特性評価のファイナリストに選定
- Origin Quantumは量子コンピューターで空力評価モデルを実行し高速計算の可能性を検証した

^{*2}：Quantum Computing Challengeは空力特性評価以外に、航空機貨物の配置最適化、主翼構造の最適化など5つのタスクを設定しファイナリストを選定しAirbusとの共同研究を実施

量子コンピューターとしての問題設定

- 機体の空力特性評価などの数学的に厳密に解くことが困難な工学的問題を近似的に解くために有限体積法が使用される
 - ✓ 有限体積法は解析領域を有限個のコントロールボリュームに分割し、連続した偏微分方程式を非連続な線形代数方程式に置換する
 - ✓ ただし、コントロールボリュームを細かくすると必要な計算機リソースも増大し古典コンピューター（スパコン）での計算が困難になる
- 量子ランダムアクセスメモリー（QRAM^{*1}）を活用し古典コンピューターの入出力データを迅速に処理可能な量子CFDソルバーを開発
 - ✓ 有限体積法と量子コンピューターに基づくこの方法は、航空機設計におけるCFDの時間積分プロセスを最適化し、計算時間の指数加速が可能
- AirbusのコンペティションはNISQ量子コンピューターをによる開発技法の探求が目的であるため、ゲート型量子コンピューターを活用していると考えられる

^{*1}：QRAMとは、古典コンピューターにおけるRAMに相当しメモリアドレスを与えられたとき、対応する量子ビット列より量子状態を出力する装置



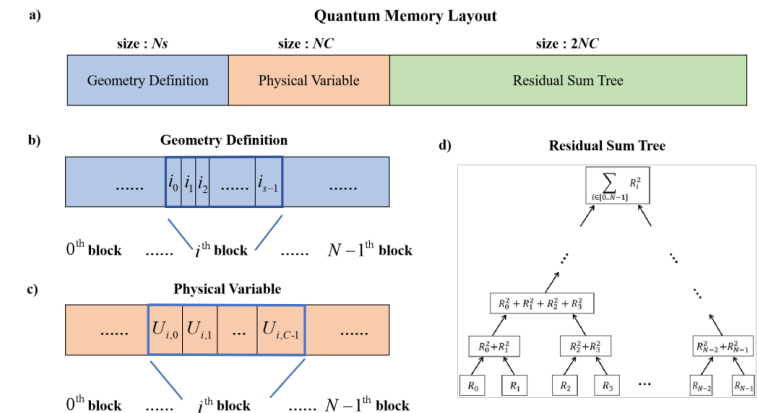
解析領域をグリッド化したコントロールボリューム
(Fは離散化方程式で使用する境界面における流束値、Sは面積、Ωは体積)

期待されるビジネス効果

- 積分計算における各反復ステップが古典コンピューターの $O(N)$ から $O(\log N)$ に短縮され、QCFD（量子コンピューターを用いたCFD）による全計算時間は古典コンピューターに比して、指数関数的に加速される
- QCFDによる量子加速は問題規模（ N ）が十分大きな場合に限定される
 - ✓ QCFDアルゴリズムの高速パフォーマンスが保証される条件は N と計算精度（ ϵ ）に依存し、量子加速が満たされる条件は $N \gg 1/\epsilon^2$ のため
- 古典コンピューターでは困難な、機体形状に関する空力特性評価の大規模な数値流体力学モデルを生成し、量子コンピューターでエネルギー効率の高い機体設計のシミュレーションの実現可能性が高まった
 - ✓ ただし、上記アルゴリズムの残論点である計算精度と計算の収束を明確化する必要がある



Airbusの機体デザイン



QRAMの構造（3ブロックで構成）

Geometry Definition: 問題の入力情報を保持

Physical Variable: 離散化方程式の物理変数を保持

Residual Sum Tree: Residual vectorのツリー構造

取組の背景

- 持続可能な航空機の実現に向けて、最先端の高効率なジェットエンジンを構築する必要があるが、ジェットエンジンは非常に複雑であることから、設計には費用がかかり計算コストもかかる
- Rolls-Royceはジェットエンジン設計において、古典コンピューターと量子コンピューターを両方組み合わせたシミュレーションでジェットエンジンをモデリングする計画を立てている
- 現在世界中の量子コンピューター研究でNVIDIA GPUが活用されており、現在、世界の量子コンピューティングソフトウェアの多くが、NVIDIA 量子プラットフォームを活用した GPU アクセラレーションに対応している

解決したい課題・モチベーション

- 量子コンピューター時代が到来の際に、量子アドバンテージの恩恵を享受できる体制を確保する
- 現在の量子コンピューターだけでなく、未来の（古典コンピューターを超える計算速度を持つ）量子コンピューター向けに最適化されたハードウェアに依存しないアルゴリズムの実装を進める

期待されるビジネス効果

- 39の量子ビットで、1,000万層^{*1}の測定可能な世界最大規模なCFD向けの量子コンピューター回路の設計とシミュレーションを実施した
- GPUを用いて、高性能な量子コンピューターが実現した未来に備えを進めている

^{*1}：現在の量子コンピューターは数層（2023/05当時）にしか対応できないが、1,000万層の回路をシミュレーション上で実行している



ジェットエンジンの例

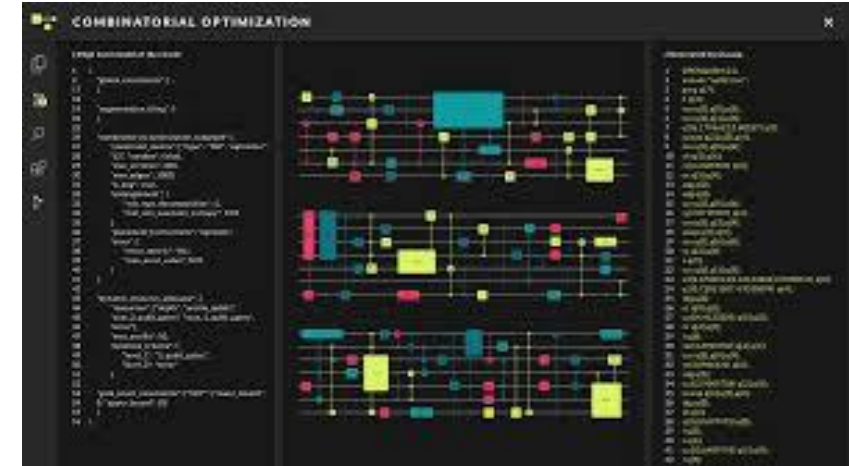
参考：NVIDIA「NVIDIA、Rolls-Royce と Classiq が、ジェット エンジンの計算流体力学向けの量子コンピューティングのブレイクスルーを発表」（<https://www.nvidia.com/ja-jp/about-nvidia/press-releases/2023/nvidia-rolls-royce-and-classiq-announce-quantum-computing-breakthrough-for-computational-fluid-dynamics-in-jet-engines/>）、PRTIMES「ロールス・ロイスとClassiqが、流体解析のための量子アルゴリズム設計で協業」（<https://prtimes.jp/main/html/rd/p/0000000007.000101286.html>）

量子コンピューターとしての問題設定

- 流体解析（CFD^{*1}）について、新たな解析アルゴリズムの実装を行う
- 線形方程式を解くHHLアルゴリズム^{*2}について、非線形部分は古典コンピューター、線形部分は量子コンピューターにより解く
- Classiq社の独自プラットフォームを活用し、HHLアルゴリズムに最適な最先端の量子回路を開発する
- 上記にて合成された回路について、NVIDIA A100 Tensor コア GPU を使って回路のシミュレーションを行う

*1：CFDとは、偏微分方程式の数値解法等を駆使して流体の運動に関する方程式（オイラー方程式、ナビエ-ストークス方程式、またはその派生式）をコンピューターで解くことによって流れを観察する数値解析・シミュレーション手法

*2：Harrow-Hassidim-Lloyd (HHL) アルゴリズムは連立方程式を高速で解くアルゴリズム。連立一次方程式は電磁気・熱流体解析や機械学習などあらゆる科学技術計算で用いられる



Classiqの量子ソフトウェア開発支援プラットフォーム

取組の背景

- 富士通は独自技術を用いた第四世代のデジタルアニーラをリリースしている。デジタルアニーラは量子現象に着想を得たコンピューティング技術で、一般的なコンピューターでは解くことが難しい組合せ最適化問題を短時間で解くことが可能
 - ✓ 大規模アニーリングコアはマルチGPUに実装
- EMI（Electromagnetic Interference）とは「電磁障害」や「電波障害」のことで、電子機器や通信機器が発する電磁波が、他の機器やシステムに影響を与える現象を指し、電子機器や通信機器はEMI規格に適合しなければ市販することができない
- 本取組では、EMIを評価し放射電界がもっとも小さくなるコンデンサの組み合わせを特定

解決したい課題・モチベーション

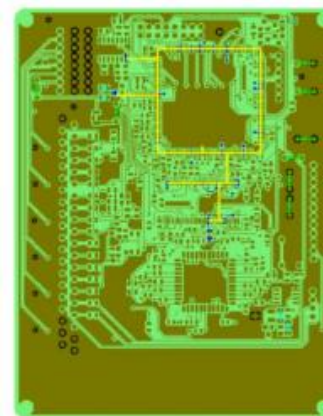
- ノイズ低減用デカップリングコンデンサの数と容量値の最適化には大規模な計算が必要。例として、コンデンサが38個、コンデンサの容量はなし又は7段階としたとき、合計 2.07×10^{34} 通りの組み合わせが発生する
- ノイズ電解を抑えつつ、コンデンサ数を削減することで設計の最適化を実現

量子コンピューターとしての問題設定

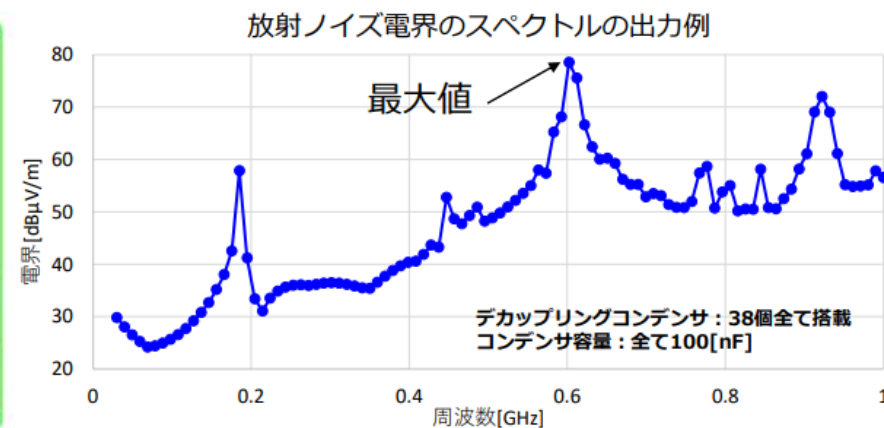
- デジタルアニーラと機械学習を組み合わせたFM-DAによる近似モデル上の高速探索とGA（遺伝的アルゴリズム*1）により大域的な探索により電磁界解析を実施し設計を最適化。121 x 94 x 1[mm]の基板について、5040万格子で65万ステップを行い解析結果として10m法放射電界（30MHz～1GHz）の出力を得た
- デジタルアニーラに必要なQUBO定式化*2を機械学習で自動生成
- HWはスーパーコンピューターの富岳と富士通の独自技術である大規模アニーリングコアを活用

*1：遺伝的アルゴリズムとは、進化論の考え方に基づい近似解を探索するためのアルゴリズム

*2：QUBO定式化とは、量子アニーリングで実行可能なバイナリ変数の2次多項式として定式化することを指す



解析モデル

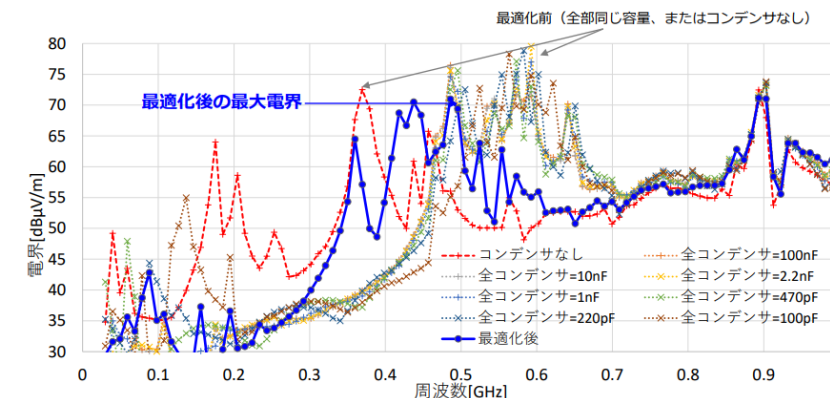


解析結果

（10m法放射電界（30MHz～1GHz））

期待されるビジネス効果

- 4層プリント回路基板にて、最適化前にコンデンサを38個で最大電界値72.52～79.55[dBμV/m]だったところを、コンデンサ20個71.18[dBμV/m]へノイズ電界を抑えつつコンデンサ数を約半分へ削減



FMDA + GAによる最適化結果

C9000	C9001	C9002	C9004	C9005	C9006	C9009	C9011	C9014	C9016	C9017	C9019	C9021	C9022	C9023	C9024	C9027	C9028	C9029
なし	10nF	1nF	100nF	なし	1nF	なし	1nF	100pF	なし	1nF	100pF	1nF	なし	なし	なし	470pF	なし	なし
C9030	C9035	C9036	C9043	C9044	C9047	C9048	C9057	C9058	C9069	C9070	C9071	C9072	C9073	C9074	C9075	C9076	C9077	C9078
なし	なし	100pF	10nF	100pF	1nF	なし	なし	なし	2.2nF	なし	2.2nF	なし	2.2nF	なし	なし	220pF	220pF	470pF

コンデンサの有無・容量値の最適化結果

取組の背景

- マツダは2006年より「一括企画（コモンアーキテクチャー）」という戦略に基づき、**車種や車格を越えた最適構造の共通化**に取り組んでいる
- **車種を越えた最適構造の設計（鋼板の板厚の最適化）に量子アニーリング・イジングマシンを用いたブラックボックス最適化を活用した**
 - ✓ 鋼板の板厚の最適化については、2014年～2015年にかけて、マツダはJAXAや東京理科大学と共同で、スーパーコンピュータを使って進化計算をベースにした手法で解くというアプローチを試したが従来の技術では、妥当なパレート解を得るのに、数万回の試行と数か月の時間が必要で、実用化に向けてはさらなる工夫が必要であることが明らかになった

解決したい課題・モチベーション

- マツダは車体構造同時設計最適化問題についてベイズ最適化で取り組んだものの、特に問題のサイズが大きくなっていくと制約を満たす解を見つけるのが極端に難しくなるという課題が残っていた
- 上記課題についてFMQA^{*1}によるブラックボックス最適化^{*2}によって解決することを目指し取り組みを実施した

*1：機械学習と量子アニーリングを組み合わせたブラックボックス最適化手法

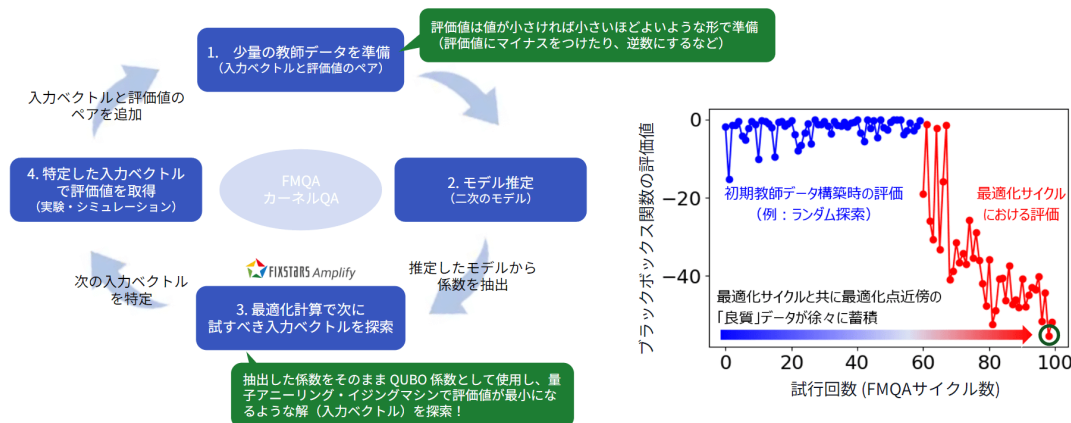
*2：ある入力に対して、その出力結果だけしか取得することが出来ず、それ以外の情報が与えられないような状況で、「結果を最適化（最小化・最大化）」を行う

量子コンピューターとしての問題設定

- 3車種の車体構造同時設計最適化問題として、1車種あたり74カ所（3車種合計で222カ所）の部品に対して、**どの厚さの鋼板を割り当てるのが最適なのかを求める問題**で、各車種に求められる乗り心地や衝突性能等の品質特性上の制約条件を満たした上で、**車両の軽量化と複数車種間の共通部品数の最大化を実現する多目的最適化問題**に取り組みを行った

量子アニーリング・イジングマシンを用いたブラックボックス最適化

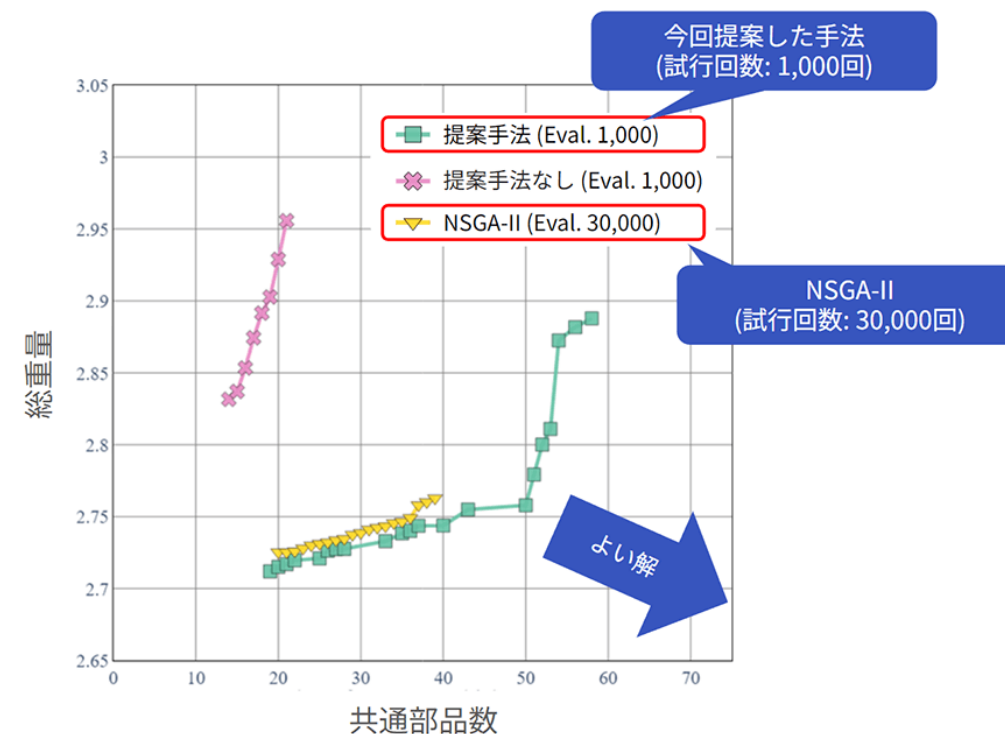
少ない試行回数（実験・シミュレーション）で評価値が最もよくなる入力ベクトルを効率的に探します



FMQAによる最適化

期待されるビジネス効果

- 量子アニーリング・イジングマシンを活用したブラックボックスで最適化を行ったところ、進化計算の1つであり多目的最適化の代表的な手法の一つであるNSGA-IIで30,000回の試行により得られる解よりも優れた解を1,000回の試行で求めることに成功した
- 現在は研究段階であり、どれだけよい解をいかに早く見つけられるかということに主眼を置いてたが、**実際の設計の現場で日常的に使うには最良ではなくてもほとほどの解を、少ない試行回数で安定的に取得できる必要がある**、大きな課題となっている
- 加えて、設計者であれば誰でも使いやすいようなシステム化やパラメータレス化にも取り組んでいく必要がある



提案手法の優位性
(部品数が多い複雑な条件で軽量化)

AI

量子データを活用した物理系の性質予測の高精度化	P. 123
量子カーネル学習を用いた通信サービス故障診断システム	P. 126
量子強化学習を用いたロボットアーム制御の向上	P. 129
独自量子LLMを用いた大規模ガントチャートの高速生成	P. 132
バイオメディカル情報解析におけるLLMの低コスト化	P. 134
量子ニューラルネットワークを活用した画像生成	P. 136
NeRFモデルを用いた画像の3Dモデル変換のAIモデル圧縮	P. 139
量子AI創薬プロセスの概念実証	P. 141
量子生成AIを用いた抗がん剤候補の作成	P. 143



取組の背景

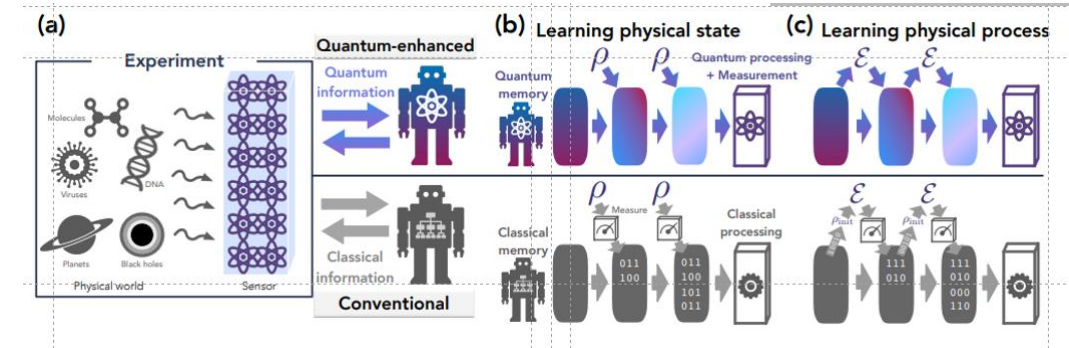
- 機械学習/深層学習の利活用が進み、産業・商業用途だけでなく新素材開発などR&D領域での活用も進展している
- **大規模・高速計算に優位性を持つ量子コンピューターを機械学習に適用するための研究が進展している**
 - ✓ 1つの方向性は、機械学習でのテキスト・画像データといった「古典データ」の学習や生成AIでのLLM学習などを量子コンピューターが代替することでの高速化
 - ✓ もう一方は、本取組のように物理系の量子状態（分子中の電子状態など量子力学で記述される波動関数）や量子コンピューターのためのプログラムといった、量子性を帯びる「量子データ」とその重ね合わせ状態を量子コンピューターで直接解析・学習することでの効率化

解決したい課題・モチベーション

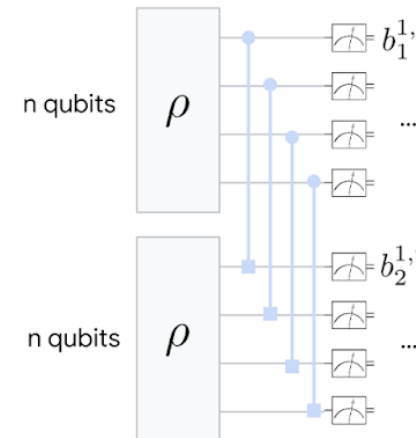
- 物理系の量子力学的プロセスをシミュレーションするなど、量子状態を直接処理することに量子コンピューターの強みがあり、量子データに対する量子機械学習を推進するモチベーションになる
- そのためには、実験データ等を量子コンピューターにインプットする量子センサーと量子コンピューターでの処理を組み合わせた量子機械学習が必要になる
- 上記を踏まえ、Googleはノイズの影響のあるNISQマシンを活用し、物理実験から得られた量子データを、量子性（重ね合わせ状態）を壊す「測定」をすることなく量子コンピューターに格納し量子機械学習アルゴリズムで学習する場合と、量子コンピューターで「測定」し古典データに変換した後で学習する場合の予測性能を比較する研究を実施した

量子コンピューターとしての問題設定

- 重ね合わせ状態の物理系の波動関数を測定せず、量子状態を保持した「量子データ」を直接量子機械学習へ入力し学習を行った
 - ✓ 古典コンピューターを用いた機械学習では測定により量子状態が壊れた古典データを用いて物理系を学習
- 量子センサにより物理系の実験データを抽出し、量子機械学習で活用
- HWはGoogleが開発した量子プロセッサ「Sycamore」を活用した



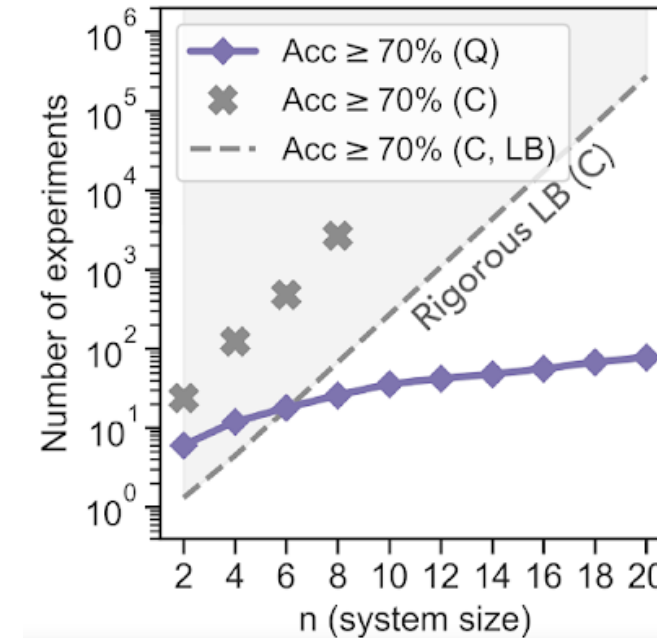
量子機械学習アルゴリズムと古典機械学習アルゴリズムの比較



量子機械学習アルゴリズムの基本的な概略図
(量子状態の2つのコピーを保存し、ベル測定により各ペアが絡み合い、それらの相関が測定される)

期待されるビジネス効果

- 機械学習により予測可能な物理系の情報（波動関数）について、70%の予測精度を達成するために必要な実験（学習）回数の量子と古典機械学習の差はシステム規模とともに指数関数的に拡大する
- 量子センサー、量子メモリーを量子コンピューターと組み合わせることで量子機械学習による効率化が加速される
- 古典機械学習ではマシンパワー、リソースの観点から困難だった高い精度での物理系の性質予測が量子機械学習を活用することで進展する可能性がある
 - ✓ ただし、現状長時間コヒーレンスを保持可能な量子メモリーは開発途上であり、量子コンピューターへの接続など更なる研究・ブレークスルーが必要



量子状態の観測可能値を予測するための
量子機械学習と古典機械学習の実験的比較

- Q: 量子コンピューターのデータを“測定”せずに直接量子メモリーに格納しQMLアルゴリズムで学習
- C: “測定”した量子コンピューターデータ（古典データ）を古典メモリーに格納し機械学習を実行
- C, LB: 古典学習に必要な実験回数の理論上の下限値

取組の背景

- 近年、企業のDX（デジタルトランスフォーメーション）の進展やリモートワークの浸透が進んでいることに加え、Beyond 5G/6Gにおいては超高速・大容量の伝送技術とエッジコンピューティング技術の組み合わせによって、データ駆動型社会が実現すると考えられており、それらを支える**通信ネットワークの品質が重要な指標の一つとなっている**
- ネットワーク需要の拡大などにより、通信事業者の機器の構成が大規模・複雑化し、その運用はMLOps*と呼ばれるAI（人工知能）を用いた**高度なコンピューティング技術による自動化の検討が進んでいるが、古典コンピュータではエネルギー消費量や計算複雑性に対する効率・脆弱性に課題があり量子コンピュータによる高度化・高速化が期待されている**

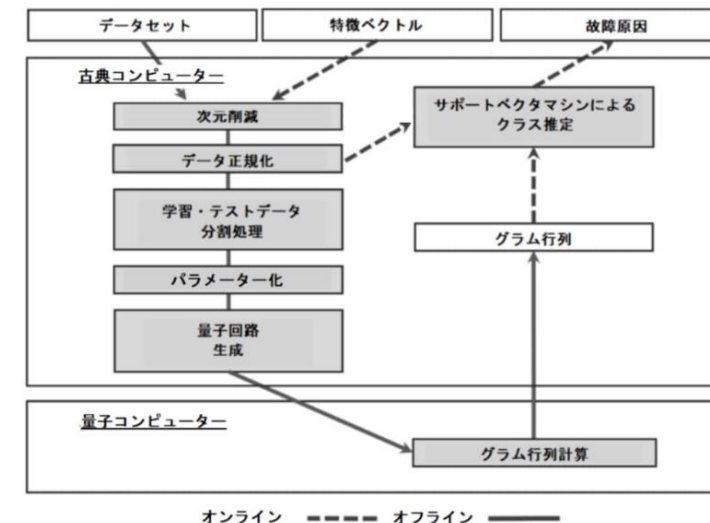
MLOps*：機械学習（ML）と運用（Ops）を合わせた造語で、機械学習を用いた開発運用工程におけるパイプラインをさす

解決したい課題・モチベーション

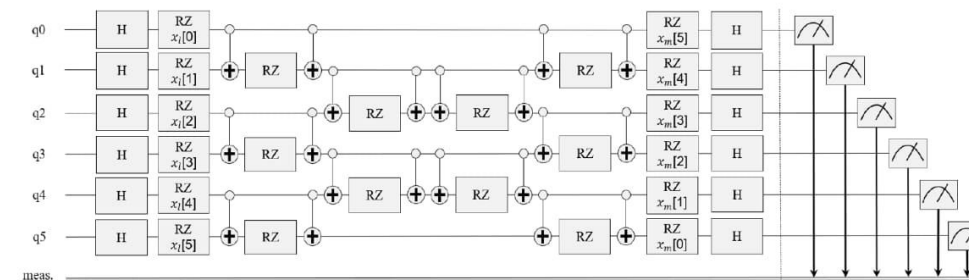
- 商用ネットワークで稼働するシステムのログから抽出したデータセットを用い、**量子機械学習による通信サービス故障診断システムの実証実験を実施した**

量子コンピューターとしての問題設定

- オフライン処理でデータセットを用いた学習を行い、オンライン処理で未知の特徴ベクトルに対する故障原因を推定する運用動作を行った中で、量子コンピューターは学習用データの故障パターン数について総当たりで内積計算しながらグラム行列を生成するのに活用した
- 量子カーネル学習によるカーネル生成において、独自の量子もつれ制御回路を考案（特許出願中）し、より汎用的なデータに対応して量子コンピューターの性能を引き出した
- HWはIBM社の超伝導型ゲート式量子コンピューター（IBM Quantum System One：IBM-Kawasaki 127量子ビット）とQ-CTRL社のエラー抑制システムを活用している



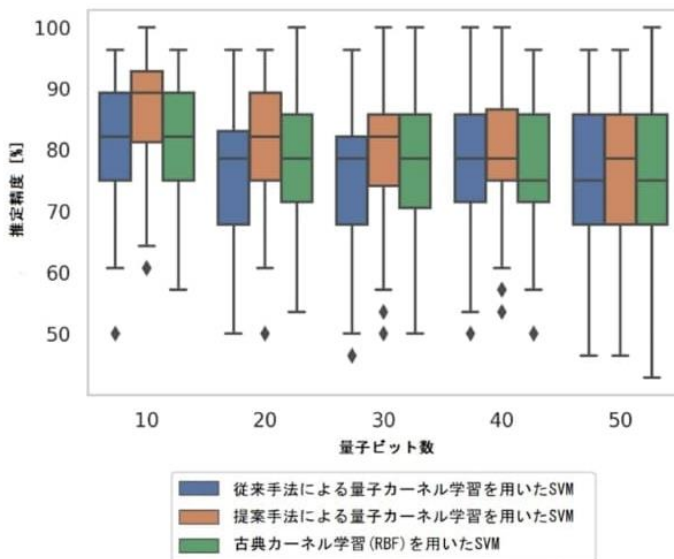
本取組における量子コンピューターの活用範囲



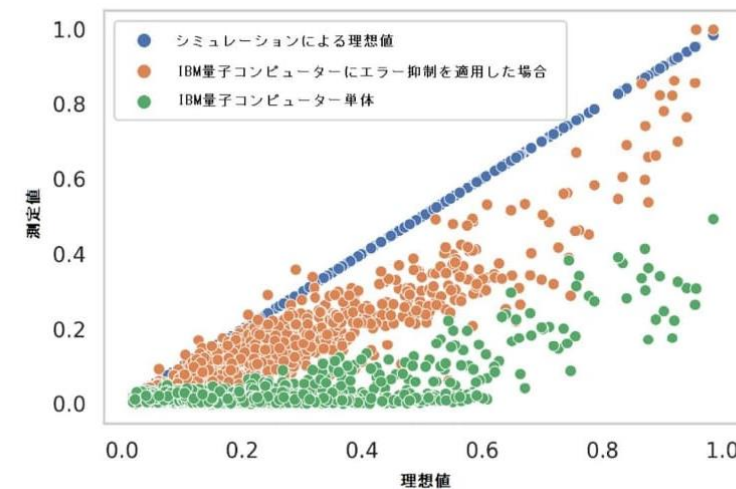
提案量子カーネル学習回路

期待されるビジネス効果

- 提案手法は従来の量子カーネル学習を用いたSVMおよび古典カーネル学習を用いたSVMと比較して優れた性能を示した。全ての量子ビット数における評価結果の平均値で比較すると、従来の量子カーネル学習は77%、提案する量子カーネル学習は81%、古典カーネル学習は78%であり、提案手法がもっともすぐれた結果となった
- 量子カーネル学習アルゴリズムの改良に加えてエラー抑制により、量子コンピューターの実用的な性能を実証した



テンソルネットワークシミュレーションによる
故障原因推定性能評価の比較



30量子ビット時のグラム行列におけるエラー抑制の効果

取組の背景

- ロボットアームの動作を制御する興味深い手法の一つとして強化学習が登場したが、探索戦略と学習速度の遅さの2点が原因で多様な制御機能の学習を世界で応用できる水準には達していない
- ロボットの自律的な動作実現に向けて、低コストのセンサーによるソフトウェアベースのより多くの制御ソリューションが追及されてきた
- ロボットの制御に学習ベースの技術を活用することで、ロボットがより構造化レベルの低い環境に進出し、未知のオブジェクトを処理し、複数のタスクに適した状態を実現することでヒトによるピッカーに代わり、様々なサイズと形状の物品を選択できるようになることが期待されている

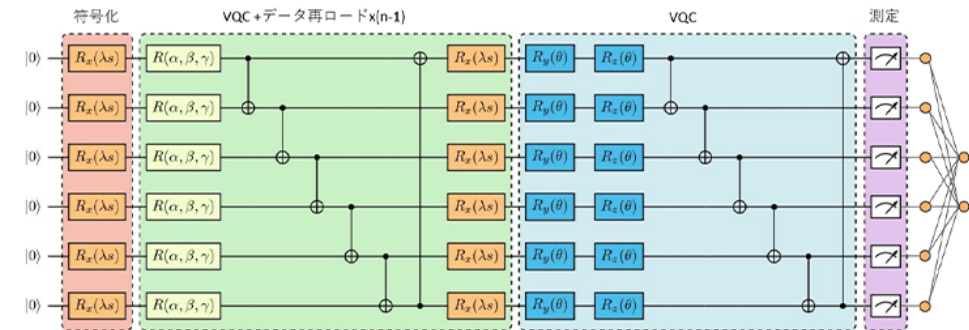
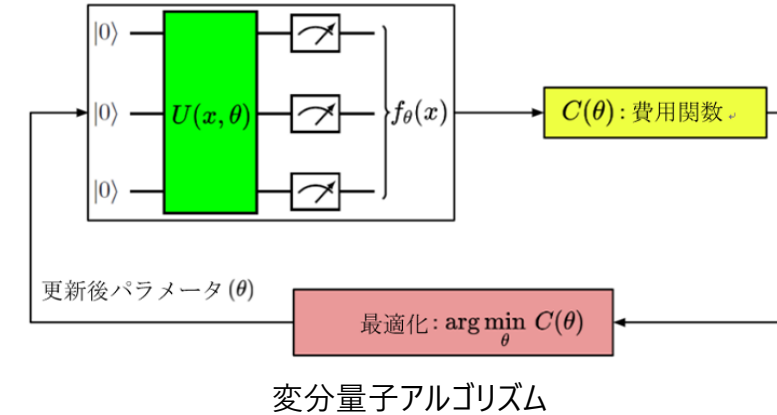
解決したい課題・モチベーション

- 深層学習（DL）と強化学習*（RL）を組み合わせた**深層強化学習（DRL）**が有望な手法として注目されているが、深層強化学習は計算集約的であるため実世界での実用化に向けて量子コンピューターの計算リソースと汎化能力が期待されている
- ✓ 汎化能力とはソース環境から得られた以前の知識を活用して、ターゲット環境で優れたパフォーマンスを達成する能力、および柔軟で長期的な自律性への適用性を指し、ヒトと同様に行動する人工知能を生み出すために必要なステップであると考えられている

強化学習*：コンピューター エージェントが動的環境と、繰り返し試行錯誤のやりとりを重ねることによってタスクを実行できるようにする手法

量子コンピューターとしての問題設定

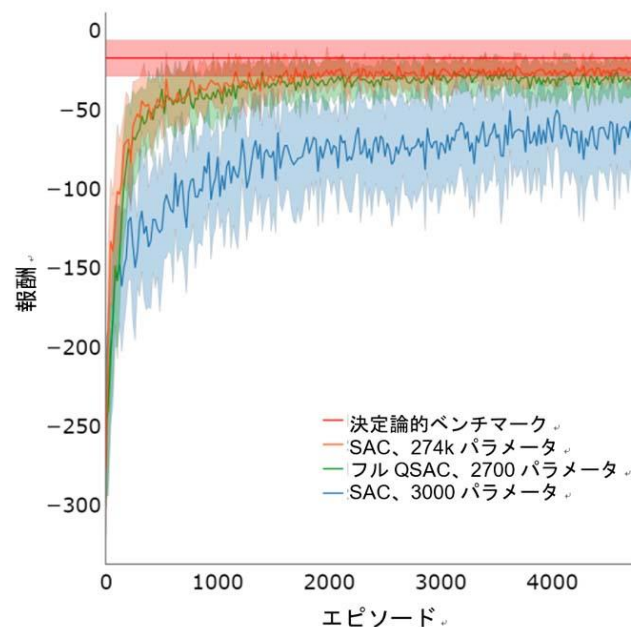
- ロボットアーム制御の向上における量子コンピューターの活用方法は、変分量子アルゴリズムである。
 - ✓ 変分量子アルゴリズムとは、量子回路の出力を適宜モニタしながら、古典コンピューターによってその構成を逐次調整し、目的のタスクを実行できる量子回路を作り出すアルゴリズムを指す
- 本取組では連続制御のための最先端の強化学習手法の1つであるソフトアクター・クリティック（SAC）に変分量子アルゴリズムを適用した
- 量子回路のデジタルシミュレーションを用いて検証を実施した



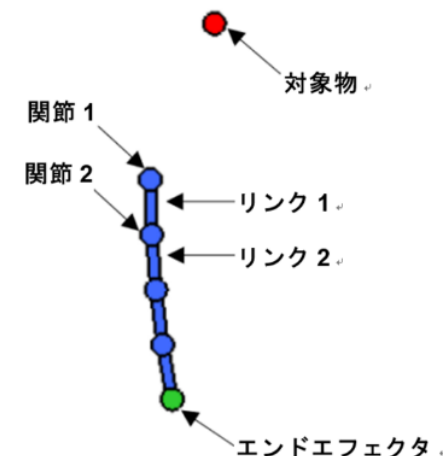
SACの量子・古典ハイブリッド型
アクターコンポーネントアーキテクチャ

期待されるビジネス効果

- 数値シミュレーションを通じて、ベンチマークのロボット制御タスクにおいてアクター・クリティック量子方策は、同様のアーキテクチャの古典モデルよりも、優れたパフォーマンスを持つことを示し、学習可能なパラメータ数に、明らかな量子優位性が見られた
- ただし、上記はあくまでも試験環境内での検証となっている



ロボットアーム環境で試験した、古典および量子・古典SACアーキテクチャの学習曲線



試験対象とした
仮想二次元四関節ロボットアーム

取組の背景

- 近年LLM（大規模言語モデル）が急速に発展を遂げ広範な用途で活用されているが、ロジックの入り組んだ最適化問題に対しては高精度な回答が難しく応用範囲が限られている
- 従来のLLMによるスケジュール最適化は下記2点の理由により大規模なプロジェクトに対して効果的ではなかった
 - ① 複数の人間・タスクを扱うと計算量が多く発生
 - ② スケジュールの複雑性が高まると精度が著しく低下

解決したい課題・モチベーション

- 量子技術の活用によって、以下の課題を解決することを目指している
 - ✓ 学習情報を数理モデルやLLMプロンプトに落とし込み、それ自体を量子LLMで生成することで計算量を抑制
 - ✓ LLMと量子技術の融合により、学習データの効率的な利用を実現
 - ✓ 組合せ爆発等計算量の問題を有効に解決し、音声、画像、テキストなどマルチモーダル活用を実現
 - ✓ 大規模計算時の速度を解決しAIとの対話型コミュニケーションを可能にする
 - ✓ 量子技術により、ロジックの入り組んだ最適化問題への応答の精度を上げ、応用範囲を広げる

量子コンピューターとしての問題設定

- 受発注AI、ノーコードワークフローAIとプロマネAIに関しては量子LLM（量子アニーリングや量子インスパイアド技術）が得意とする領域である
- 本取組ではLLMと疑似量子技術を組み合わせた量子プロマネAI「CalqPM」で大規模高速高精度なガントチャート生成を実現した
- 疑似量子技術は数理最適化の数理モデルをベースに量子コンピューターの特性をシミュレートする形で活用
- 本取組は古典コンピューター上で疑似量子技術を活用する形で動作させているが、D-waveなど量子コンピューターに置き換えても数理モデルを大幅な変更することなく動作させることが可能

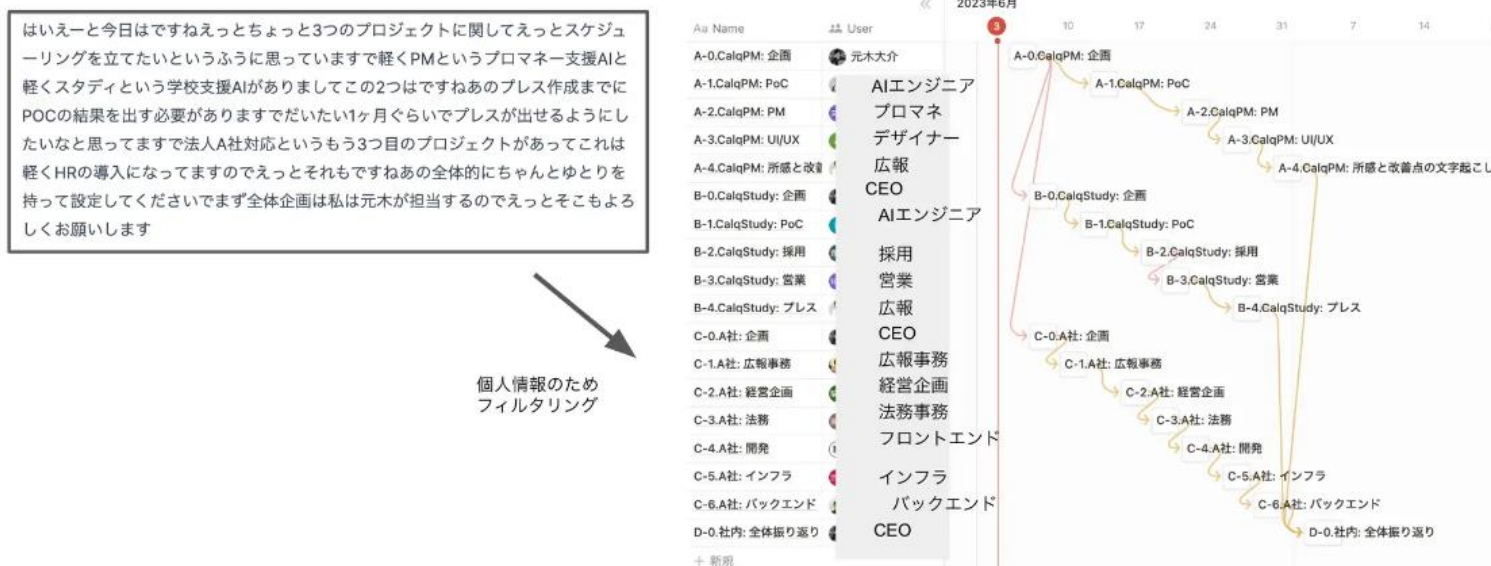
プロジェクト内容

- 期間
 - 4ヶ月
- プロジェクトの目的
 - 保険業界のデジタル化を推進する
- プロジェクトの成果物
 - 4ヶ月後までに保険支援AIの企画、研究開発（PoC）、プレスリリースをする必要があります。
- 詳細
 - やることは企画コンサル、実証実験、通常開発、プレスリリースなど多岐にわたります。
 - プレスはPoC前に行います。実証実験開始前に行うことで、プロジェクトの認知度を高めることができます。

量子プロマネAIへの入力イメージ（別途従業員情報も入力）

期待されるビジネス効果

- 担当者17人に対して4か月で50タスクのガントチャートを**タスク依存関係、職種マッチング、リソース状況も考慮し4分でガントチャートの出力を実現**
- 本量子プロマネAIはアジャイル型のプロジェクトや自律分散組織（DAO）、ティール組織に代表されるような**大規模ネットワーク型のプロジェクト**における**プロジェクト推進の安定性と迅速性向上への貢献を期待**されている



音声入力に対する量子プロマネAIの出力イメージ

取組の背景

- 近年ゲノムデータなどの生物学的データや患者の医療記録などの臨床情報を、機械学習や統計学などの計算科学的手法で解析するバイオメディカル情報解析*が注目されている
 - ✓ バイオメディカル情報解析は生物学や医学、生命科学の分野で、情報技術を活用して生物学的なデータを解析・処理することを指す
- また、開発・普及が進んでいるLLM（大規模言語モデル）はバイオメディカル情報解析において活用が始まっているが、大量の計算リソースと高いコストによる経済的負担から事実上中小企業や自治体・研究機関がLLMを開発・運用することは困難だった

解決したい課題・モチベーション

- 量子AIによってLLMの運用コストを大幅に削減する
 - ✓ 古典コンピュータ上で学習されていたLLMを量子コンピュータ上で学習・推論する
- LLMのパラメータ数を大幅に削減することで、モデルの運用に係るコストを大幅に削減する
- バイオメディカル言語モデルを安価に開発・運用することでより多くの研究機関や企業が臨床応用に貢献できるようにする

期待されるビジネス効果

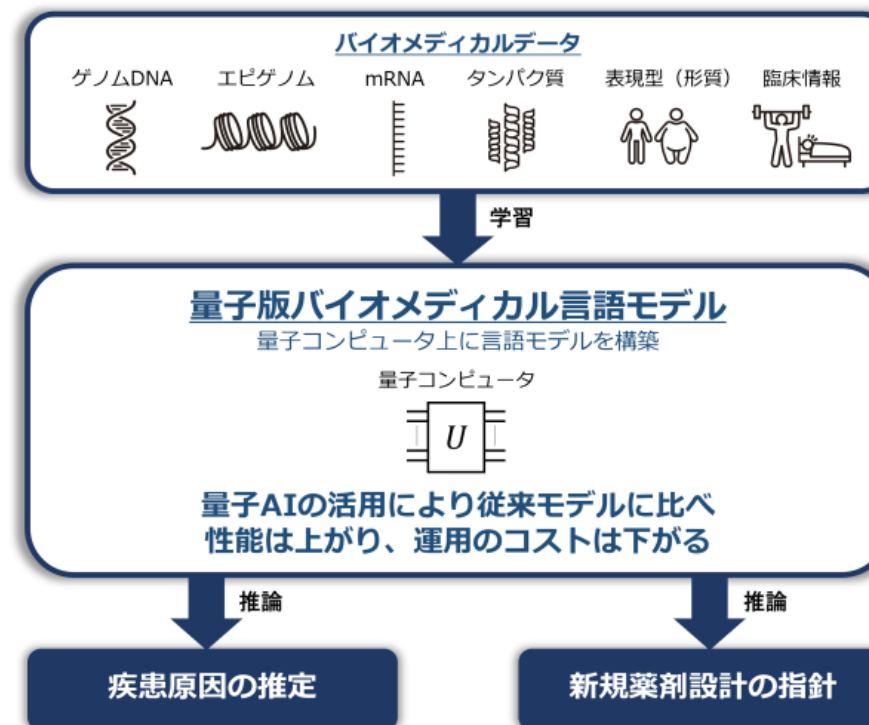
- 訓練済みモデルをAPI等を通じて展開する場合推論コストは学習コストを上回り、ChatGPTは1日あたり70万ドル（およそ1億円）以上の運用コストがかかると推定されており、GPT-4を使用して顧客サービスをサポートすると、中小企業では月に2万1000ドル（約300万円）以上のコストがかかると推定される
- 量子AI分野の最新の研究成果では、LLMを量子コンピュータ上で実装しこれを訓練・推論する場合古典コンピュータ上で必要となるメモリ容量よりも少ないメモリ容量で訓練・推論できるという量子優位性が証明されている
- バイオメディカル言語モデルを安価に開発・運用することでより多くの研究機関や企業がLLMを臨床応用に貢献できるようにすることを目指す

参考：DS100「BlueMemeと九州大学、量子AIを用いた大規模言語モデル構築のための共同研究を開始」

（<https://ds100.jp/news/2023/06/21/bluememe%E3%81%A8%E4%B9%9D%E5%B7%9E%E5%A4%A7%E5%AD%A6%E3%80%81%E9%87%8F%E5%AD%90%E3%82%92%E7%94%A8%E3%81%84%E3%81%9F%E5%A4%A7%E8%A6%8F%E6%A8%A1%E8%A8%80%E8%AA%9E%E3%83%A2%E3%83%87%E3%83%AB%E6%A7%8B/>）、bluememe「量子コンピューティングを用いたバイオメディカル情報解析分野への取り組み」（<https://www.bluememe.jp/research-and-development/>）

量子コンピューターとしての問題設定

- 高精度・高分解能の最先端のオミクスデータを量子AI技術を用いたオミクス言語モデルの学習基盤として使用する
 - ✓ オミクス言語モデルとは、生物学的なデータ解析に特化するために、膨大なオミクスデータ（網羅的な生体分子についての情報）を学習させて開発する人工知能モデルを指す
- 量子AIによってLLMのパラメータ数を減らし、学習・推論におけるコンピューティングコストを削減する
- GPUスパコンにおけるシミュレーションや量子コンピューター実機などの計算基盤で性能検証を実施する



量子AI技術を用いたオミクス言語モデル

取組の背景

- AI自身が学習し最善/新規の回答を提供する生成AIの活用ニーズが拡大し、高次元データ生成を行う画像生成も実現
- 生成AIによる画像生成など大規模演算の必要性から、コンピューティングリソースやエネルギー需要が増大しCO2排出量の増加が懸念されている
 - ✓ AIモデルが排出するCO2の内、大部分を占めるのはAIモデルの訓練ではなくユーザーによるAIの利用時に発生する^{*1}
 - ✓ その中でも画像生成AIに必要なエネルギーはテキスト生成よりも遥かに多く、Stable Diffusionなどの拡散モデルを活用し1000枚の画像を生成すると平均的なガソリン車でおよそ6.6キロメートル走行するのに匹敵する量の二酸化炭素を排出

解決したい課題・モチベーション

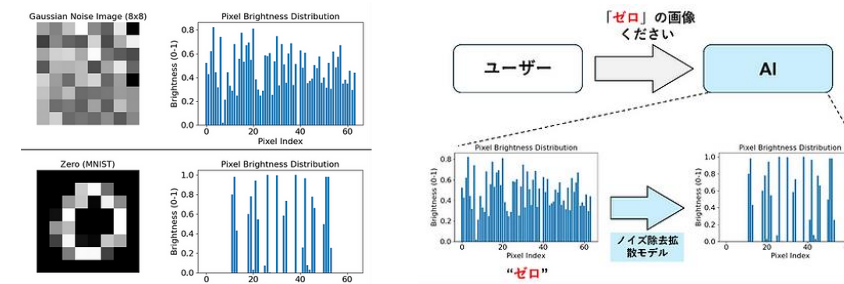
- 画像・ビデオ生成においては古典ニューラルネットワークモデルを用いた拡散モデルが広く活用されている
 - ✓ 拡散モデルは、ランダムノイズを含む元画像データ（ピクセル値）からノイズを除去し求める画像に変換している
- ただし、画像データの2次関数的スケーリング（例: 8ピクセル画像では64要素が必要）により、4K画像など高解像度画像では大規模データの同時処理が必要になり古典コンピューターでは困難であり、ビデオ生成では更に事態は深刻になる
- よって、量子アルゴリズムベンダーのQuemixは、古典ニューラルネットワークを量子ニューラルネットワークに置き換え量子コンピューターの同時並列計算の強みを活かした大規模画像・ビデオ生成の可能性を企図している

^{*1}：MIT Technology Review「AI画像生成のエネルギー消費量、スマホのフル充電に匹敵」（<https://www.technologyreview.jp/s/323271/making-an-image-with-generative-ai-uses-as-much-energy-as-charging-your-phone/>）

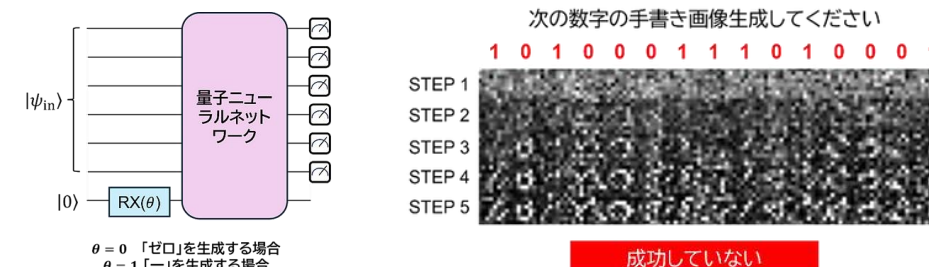
参考：Quemix「チャネルアテンションを導入した量子ニューラルネットワークによる拡散モデル」（<https://www.quemix.com/notes011>）

量子コンピューターとしての問題設定

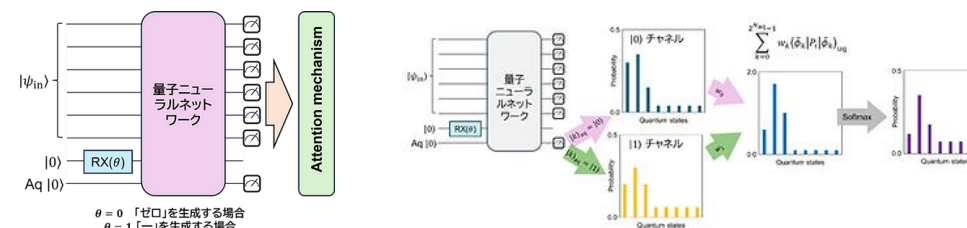
- 古典ニューラルネットワーク（古典NN）を用いた拡散モデル
 - ✓ 画像は2次元行列として表現され、行列要素はピクセルに対応
 - ✓ AIに手書きの「ゼロ」を要求すると、行列表現されたランダムノイズ画像のピクセル値から手書きの「ゼロ」の値へ変換し画像を生成
- 量子ニューラルネットワーク（量子NN）を用いた拡散モデル
 - ✓ 4K画像生成に必要な800万要素は古典NNでは同時処理が困難だが、量子コンピューターを活用すると23ビットで高速処理が可能
 - ✓ 一方で、画像生成にはノイズ除去が必要
- ノイズ除去性能を付与した量子ニューラルネットワークを用いた拡散モデル
 - ✓ ノイズ除去が非ユニタリー演算であり、量子コンピューターで許容されるユニタリー演算では処理できない
 - ✓ よって、大規模演算は量子コンピューターで実行しノイズ除去のための非ユニタリー演算を古典コンピューターで実行するチャンネルアテンション機能を導入



古典NNでの拡散モデルによる手書き「0」の生成ノイズ除去された出力が生成可能



量子NNの拡散モデルで手書き「0」が「1」を生成する
 量子回路と出力（ノイズにより画像生成は失敗）



量子NNの拡散モデルにノイズ除去機能（チャンネルアテンション）の導入

期待されるビジネス効果

- QCNNのパフォーマンスが向上し、フィードフォワードニューラルネットワークを追加の後処理として使用する従来のアプローチよりも優れたパフォーマンスを発揮した
- 古典コンピュータによる画像生成では、4K解像度以上の高解像度画像では困難になる。4K解像度以上ではノイズ除去拡散プロセス中に、約800万要素の長さのベクトルを同時に処理する必要がある。この課題は、現代のビデオ制作に必要な1秒あたり60～120枚の画像を扱うビデオではさらに深刻化する。
 - ✓ 量子コンピュータを使用すれば、4K画像を生成するために必要な800万個の要素を、わずか23量子ビットで処理できる可能性がある

取組の背景

- NeRF(Neural Radiance Field^{*1})は、対象の画像から自由視点画像を生成することができる3D再構成技術を指す。NeRFモデルは、画像によって訓練されたニューラルネットワークを用いて、3次元座標と視点方向を色と密度にマップする連続関数として自由視点画像を表現可能である
- 博報堂DYホールディングスのR&D部門であるMTC(マーケティング・テクノロジー・センター)はblueqat社と協力し、将来的な量子コンピューター時代の到来を見据え、広告・マーケティング領域における量子コンピューターの活用可能性を模索している

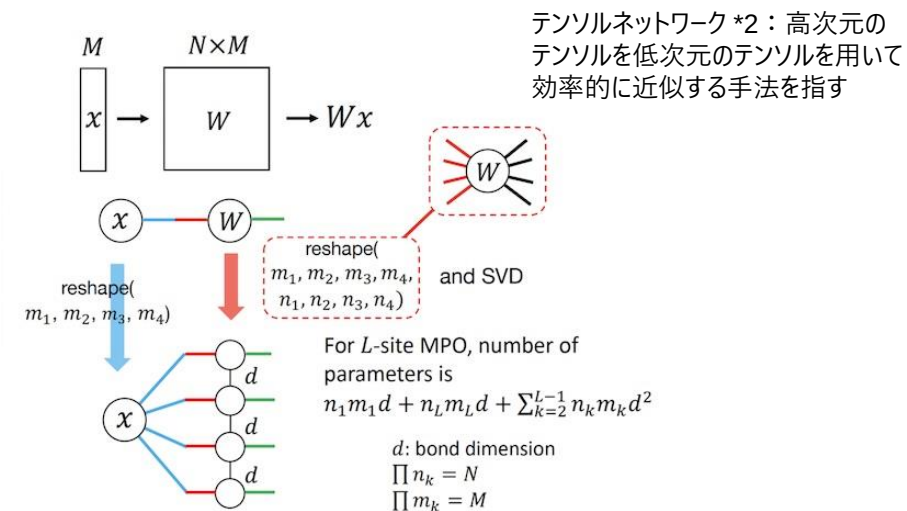
解決したい課題・モチベーション

- 機械学習の分野において、高性能GPUへの依存とそれに伴うエネルギー消費は、持続可能性の観点から重要な課題となっている。さらに、厳格な応答時間やセキュリティ基準が必要なアプリケーションでは、クラウド上のリソースなしでタスクをローカルで実行できる能力が重要となる。このような課題に対処するために、さまざまなモデル圧縮技術が導入されている

NeRF^{*1}：3次元座標と視線方向 を色と密度にマップする、3D表現手法

量子コンピューターとしての問題設定

- テンソルネットワーク^{*2}の持つ高次元空間から効果的に特徴を抽出する能力が機械学習の領域で注目されている
 - ✓ ニューラルネットワーク内の大量の重みパラメータにテンソル分解技術を適用することで、特徴を効率的に抽出し、パラメータの数を削減することが可能
- LLM（大規模言語モデル）にTensor-Train(MPO)分解(下記)を適用した際にモデルサイズを削減することに成功した先例があることから、MPO分解を用いてNeRF（Neural Radiance Field）の圧縮を目指す

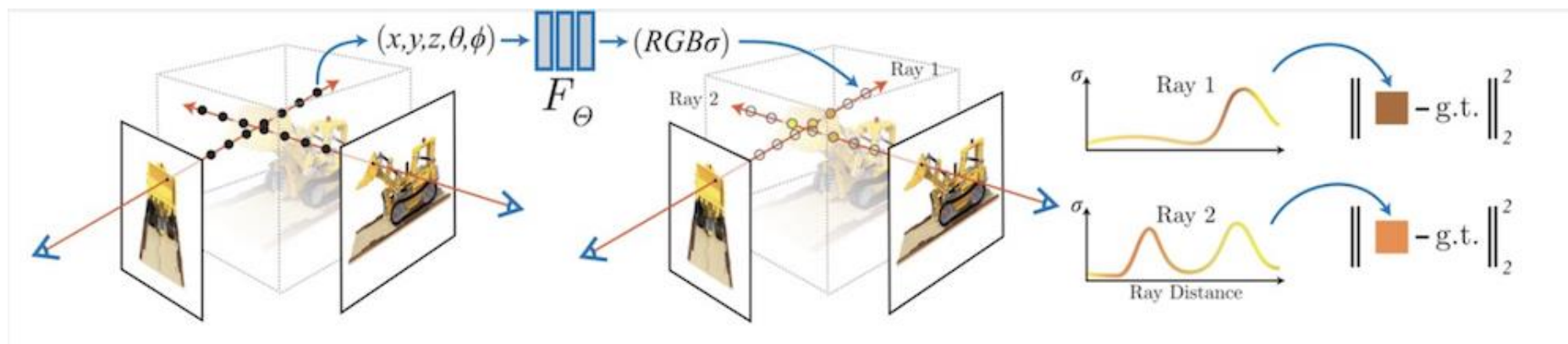


MLP層をTensor-Train(MPO)層に置き換えている様子

参考：博報堂「博報堂 D Y ホールディングス、量子ゲート型コンピューターに応用可能な テンソルネットワークを用いたNeRFモデルの圧縮を実証、3D画像生成の効率化を可能に」（<https://www.hakuhodody-holdings.co.jp/news/corporate/2024/05/4809.html>）、blueqat「博報堂 D Y ホールディングス/blueqat、テンソルネットワーク技術を用いてNeRFモデルの圧縮を実証。SQAI-NCTS 国際ワークショップにて発表」（https://blueqat.com/blueqat_official_news_ja/0233c282-1f78-447a-ac5f-bc4727e33857）

期待されるビジネス効果

- テンソルネットワークをNeRFモデルに適用することで、レンダリング品質を維持しながらモデルサイズを効率的に削減できることを実証
- 本取組は画像レンダリングの効率化に対するテンソルネットワークの応用可能性をしている。また、テンソルネットワークは量子回路と相性が良いことが知られており、将来的に量子ゲート型コンピューターが完成した際には、直接的に本技術を応用することが可能と想定させる



NeRFによる画像生成とレンダリング手法の概略図

参考：博報堂「博報堂 D Y ホールディングス、量子ゲート型コンピューターに応用可能な テンソルネットワークを用いたNeRFモデルの圧縮を実証、3D画像生成の効率化を可能に」 (<https://www.hakuhodody-holdings.co.jp/news/corporate/2024/05/4809.html>)、blueqat「博報堂 D Y ホールディングス/blueqat、テンソルネットワーク技術を用いてNeRFモデルの圧縮を実証。SQAI-NCTS 国際ワークショップにて発表」 (https://blueqat.com/blueqat_official_news_ja/0233c282-1f78-447a-ac5f-bc4727e33857)

取組の背景

- 生成AIは学習可能なデータがWeb上に大量に存在するため急速に普及した。一方、創薬ではヒトのデータが必要であるため、AIに学習させるための膨大なデータ自体を生成する必要がある点が発展における壁となっている
 - ✓ シミュレーションを実行し、得られたデータをAIに学習させることで創薬AIを構築
- JT（日本たばこ産業株式会社）では現在化合物創出プロセスに力点を置いているが、AI技術は、トランスレーショナルリサーチなどを含む全ての創薬プロセスにおいて革新的な変化をもたらすポテンシャルがあると考えている
- AI創薬を発展させていく中で、JTは量子コンピューターの処理速度および得られるデータの質の両面でその革新性に注目している
 - ✓ 量子シミュレーション技術の世界的トップリーダーであるQsimulateと低分子創薬技術の開発において戦略的パートナーシップを締結
- JTはD-Waveと共同で、AIと量子コンピューターを活用した革新的な創薬技術の開発を目指す本取組を発表した

解決したい課題・モチベーション

- 製薬会社は新薬開発における難しさ、不確実性、期間の課題に対応しながら競争力を維持する必要がある
- First in Class（画期的）な低分子化合物を発見するプロセスを加速すると共に、創薬の様々なプロセスにおける質の向上を創り出す

量子コンピューターとしての問題設定

- JTでは独自の先端的AI創薬技術の開発を進めており現在実装段階。特に基本原理による物理シミュレーションとAIとを有機的かつ密接に連動・同期させた技術開発を重要視している
- 本取組ではD-Waveのアニーリング型量子コンピューターをJT独自のAI技術に活かし、創薬のためのAIの開発と応用をスピード・質・適用範囲において拡張することを目指している

期待されるビジネス効果

- 量子AIを活用することで、低分子化合物の探索空間の質および地平を拡大するための新しい先端技術確立を目指す
- 概念実証プロジェクトの後、JTの医薬事業部は「量子AI創薬」技術の創出を進め、量子コンピューターを現実の分子設計に運用するステージに移行することを計画している

参考：D-WAVE「日本たばこ産業と D-Wave、AIと量子コンピューターを活用した革新的な創薬技術の開発を目指した共同プロジェクトを発表」
(<https://dwavejapan.com/%E6%97%A5%E6%9C%AC%E3%81%9F%E3%81%B0%E3%81%93%E7%94%A3%E6%A5%AD%E3%81%A8-d-wave%E3%80%81ai%E3%81%A8%E9%87%8F%E5%AD%90%E3%82%B3%E3%83%B3%E3%83%94%E3%83%A5%E3%83%BC%E3%82%BF%E3%82%92%E6%B4%BB%E7%94%A8/>)

取組の背景

- Zapata AIはハーバード大学をスピンアウトする形で量子アルゴリズム開発のソフトウェア会社として始まり、その後主に生成AIへ事業領域を移した
 - ✓ 量子プロセッサプロバイダのIonQと協業し、量子生成AI技術に関して戦略的提携を締結
 - ✓ ただし、その後Zapata AIは倒産している（2024年10月12日）
- Zapata AIは業界特化生成AIに取り組んでおり、時間とコストのかかる医薬品の研究開発に量子生成AIの適用を試みた

期待されるビジネス効果

- VQCを用いた量子GANは、従来のベンチマークより優れた特性を持つ物理化学的特性と性能を持った分子の生成に成功した
- 加えて、パラメータ数も少ないことから、表現力における量子優位性を観察できた
- この研究は量子コンピューターによる創薬支援の実用的な可能性を示した

解決したい課題・モチベーション

- 医薬品の研究開発には時間とコストがかかる
- 量子生成AIが現実の問題を効果的に解決することを実証する

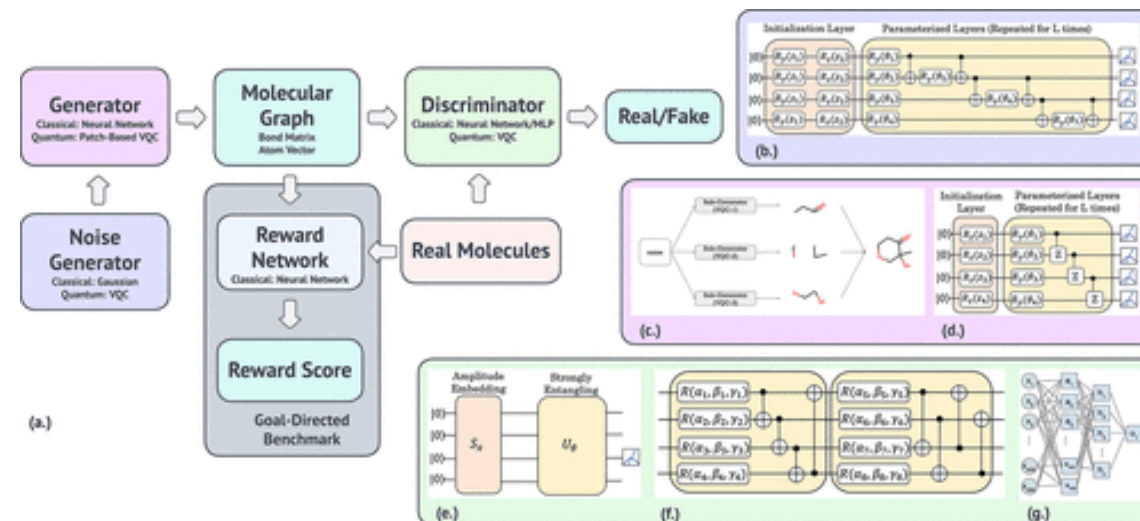
参考：QKAI「Zapata AI (ZPTA) がNASDAQ上場。量子分野からピボットし生成AI会社としてAndretti Acquisition Corporationとの経営統合を完了。2024年4月1日から取引開始」
（<https://www.qcrjp.com/post/zapata-ai-zpta-nasdaq-go-public>、QKAI「Zapata AI 倒産についての日本市場での解釈とその影響」（https://www.qcrjp.com/post/zapata-ai-form8k?utm_source=twitter&utm_medium=blog.post-promoter&utm_campaign=efa0e2ed-a78a-4f84-aa0a-ac0e2b9dae5c）、ACS「Exploring the Advantages of Quantum Generative Adversarial Networks in Generative Chemistry」（<https://pubs.acs.org/doi/full/10.1021/acs.jcim.3c00562>）

量子コンピューターとしての問題設定

- 低分子化合物の発見に向けて、量子-古典ハイブリットGAN*1を活用した
- GANの各要素を変分量子回路（VQC*2）に置き換えて、創薬における量子の利点を実証した
- 本取組では16量子ビットのIBM量子コンピューターを活用した

*1：GANはDiscriminatorとGeneratorを交互に競合させながら学習を進めることで、本物に近いデータの生成を可能にするネットワーク

*2：VQCは量子古典ハイブリッド計算方式を実装する量子回路を指す



本取組の全体像

セキュリティ

RSA暗号の解読可能性評価

P. 146



取組の背景

- 現在普及している公開鍵暗号（RSA暗号等）の安全性は素因数分解問題の困難性に立脚し、2,048ビットの合成数が広く利用されている
 - ✓ 現在古典コンピュータで解読可能な合成数は829ビットのため^{*1}
 - ✓ 素因数分解の合成数 $N = p \times q$ （ p 、 q は異なる素数）
- 古典コンピュータによる素因数分解を効率的に解く研究も進められているが、現在最も漸近的に高速なアルゴリズムである数体ふるい法では、合成数 N の桁長に対して準指数時間が必要となり解読が困難
 - ✓ 2,048ビットの合成数の素因数分解に数体ふるい法を適用しスパコンを利用しても、最も高速なスパコン（Linpack性能1018FLOPS）でも数十年以上必要と推算される^{*2}
- ところが、量子コンピュータと高速計算可能なShorアルゴリズムの出現によりRSA暗号の現実的な時間内での解読可能性が示され、理論的に解読された状態にある
 - ✓ Shorアルゴリズムの計算量は合成数 N の桁長の多項式時間となり、古典コンピュータの計算時間から指数加速されている

解決したい課題・モチベーション

- 量子コンピュータの出現により暗号の安全性が危殆化されるが、実際にどれくらいの量子コンピュータの計算リソースがRSA暗号の解読に必要なかを検証した実験事例が少なく見積もりは困難な状況
- よって、富士通は量子シミュレータを活用し、2,048ビットのRSA暗号の安全性を評価するための素因数分解を実証した

*1：「[Cado-nfs-discuss] Factorization of RSA-250」（<https://web.archive.org/web/20200228234716/https://lists.gforge.inria.fr/pipermail/cado-nfs-discuss/2020-February/001166.html>）

*2：電子情報通信学会「量子計算機時代のセキュリティ耐量子計算機暗号の動向」（https://app.journal.ieice.org/trial/106_11/k106_11_966/index.html）

参考：富士通株式会社「量子シミュレータを活用したRSA暗号の安全性評価に成功」（<https://pr.fujitsu.com/jp/news/2023/01/23.html>）

量子コンピューターとしての問題設定

- 現在一般的に用いられている2048ビットのRSA暗号を解読するために必要とされる量子コンピューターのリソース評価を行った
- 計算機実験は、入力された合成数を素因数分解する量子回路を生成する汎用的なプログラムをShorのアルゴリズムを活用して量子シミュレータに実装した上で、10ビットから25ビットのいくつかの合成数を素因数分解する量子回路を実際に生成した
- その際必要だった計算リソースから、2,048ビット合成数の素因数分解に必要な量子回路の計算リソース推定を実行
- 自社開発の39量子ビットの量子シミュレータを活用し素因数分解を実行
 - ✓ 量子シミュレータはスパコン「富岳」のCPU「A64FX」の高速性と富士通が持つ大規模並列計算技術を活用

期待されるビジネス効果

- N=15からN=511までの96個の素因数分解に成功し、汎用的なプログラムが正しい量子回路を生成できることを確認した
- 10ビットから25ビットのいくつかの合成数を素因数分解する量子回路で必要な計算リソースから、2,048ビットの合成数を素因数分解するには下記のスペックを持つ量子回路を使用しても104日間の計算量が必要であることを示した
 - ✓ 量子ビット数: およそ1万量子ビット
 - ✓ ゲート数: およそ2兆2,300億
 - ✓ 量子計算のステップ数: およそ1兆8,000億回
- ただし、大規模かつ長時間（104日間量子ビットを誤りなく保持すること）にわたり安定稼働するFTQCを短期的に開発することは困難なことから、2,048ビットのRSA暗号はShorアルゴリズムに対して安全である、と評価

巻末付録 量子コンピューターベンダーの一覧

量子技術を保有する主なプレイヤー 1 / 2

* 本ページに掲載している社名は、可読性及び一貫性を確保するために英語表記で統一。各社の正式な名称や表記については、各企業の公式ウェブサイト等をご参照いただきたい

No.	プレイヤー名	国
1	1QBit	カナダ
2	A*QUANTUM	日本
3	ALIBABA DAMO HANGZHOU TECHNOLOGY	中国
4	ALIBABA HOLDING	中国
5	Alice & Bob	フランス
6	Alpine Quantum Technology	オーストリア
7	AMAZON TECHNOLOGIES	アメリカ
8	Anyon Systems	カナダ
9	aQuantum Software Engineerig	スペイン
10	Atom Computing	アメリカ
11	BEIJING BAIDU NETCOM SCIENCE & TECHNOLOGY	中国
12	Beit	ポーランド
13	Bleximo	アメリカ
14	blueqat	日本
15	BosonQ Psi	アメリカ
16	C12 Quantum Electronics	フランス
17	CLASSIQ TECHNOLOGIES	イスラエル
18	COLDQUANTA	アメリカ
19	D-WAVE SYSTEMS	カナダ
20	eleQtron	ドイツ
21	Entropica Labs	シンガポール
22	Fixstars	日本
23	FUJITSU	日本
24	GOOGLE	アメリカ
25	Groovenauts	日本

No.	プレイヤー名	国
26	Haiqu	アメリカ
27	Hefei Origin Quantum Computing Technology	中国
28	HITACHI	日本
29	Horizon Quantum Computing	シンガポール
30	HUAWEI	中国
31	IBM	アメリカ
32	Inflection	アメリカ
33	INTEL	アメリカ
34	IonQ	アメリカ
35	IQM Quantum Computers	フィンランド
36	Jij	日本
37	MICROSOFT TECHNOLOGY LICENSING	アメリカ
38	Multiverse computing	スペイン
39	Nanofiber Quantum Technologies	日本
41	NEC	日本
42	Nord Quantique	カナダ
43	NTT	日本
44	NTT RESEARCH	日本
45	OptQC	日本
46	ORCA Computing	イギリス
47	ORIGIN QUANTUM COMPUTING TECHNOLOGY HEFEI	中国
48	Oxford Ionics	イギリス
49	Oxford Quantum Circuits	イギリス
50	PASQAL	フランス
51	Photonic	カナダ

量子技術を保有する主なプレイヤー 2 / 2

* 本ページに掲載している社名は、可読性及び一貫性を確保するために英語表記で統一。各社の正式な名称や表記については、各企業の公式ウェブサイト等をご参照いただきたい

No.	プレイヤー名	国
52	PSIQUANTUM	アメリカ
53	Qblox	オランダ
54	qBraid	アメリカ
55	QC design	ドイツ
56	QC Ware	アメリカ
57	Q-CTRL	オーストラリア
58	QILIMANJARO QUANTUM TECHNOLOGY	スペイン
59	Qrithm	アメリカ
60	Quandela	フランス
61	Quanmatic	日本
62	Quantinuum	アメリカ
63	Quantum Benchmark	カナダ
64	Quantum Brilliance	オーストラリア
65	Quantum Circuits	アメリカ
66	Quantum Computing	アメリカ
67	QUANTUM MACHINES	イスラエル
68	QUANTUM MOTION TECHNOLOGIES	イギリス
69	Quantum Source	イスラエル
70	QuantWare	オランダ
71	Qubitcore	日本
72	Quel	日本
73	Quemix	日本
74	QuEra Computing	アメリカ
75	Quix	オランダ
76	QunaSys	日本

No.	プレイヤー名	国
77	Quobly	フランス
78	Rigetti	アメリカ
79	Riverlane	イギリス
80	SandboxAQ	アメリカ
81	SeeQC	アメリカ
82	Sigma-I	日本
83	Silicon Quantum Computing	オーストラリア
84	SpinQ Technology	中国
85	Strangeworks	アメリカ
86	Tabor Quantum Solutions	イスラエル
87	TENCENT TECHNOLOGY SHENZEN	中国
88	Terra Quantum	スイス
89	TOSHIBA	日本
90	Universal Quantum	イギリス
91	XANADU QUANTUM TECHNOLOGIES	カナダ
92	XeedQ	ドイツ
93	Zurich Instruments	スイス

2025年2月17日（初版）

国立研究開発法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）

AI・ロボット部（TEL：044－520-5241）

本ユースケース集は、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術開発機構（NEDO）の委託業務「量子・古典ハイブリッド技術のサイバー・フィジカル開発事業／量子技術に関するユースケース事例調査」の成果として、得られたものです。