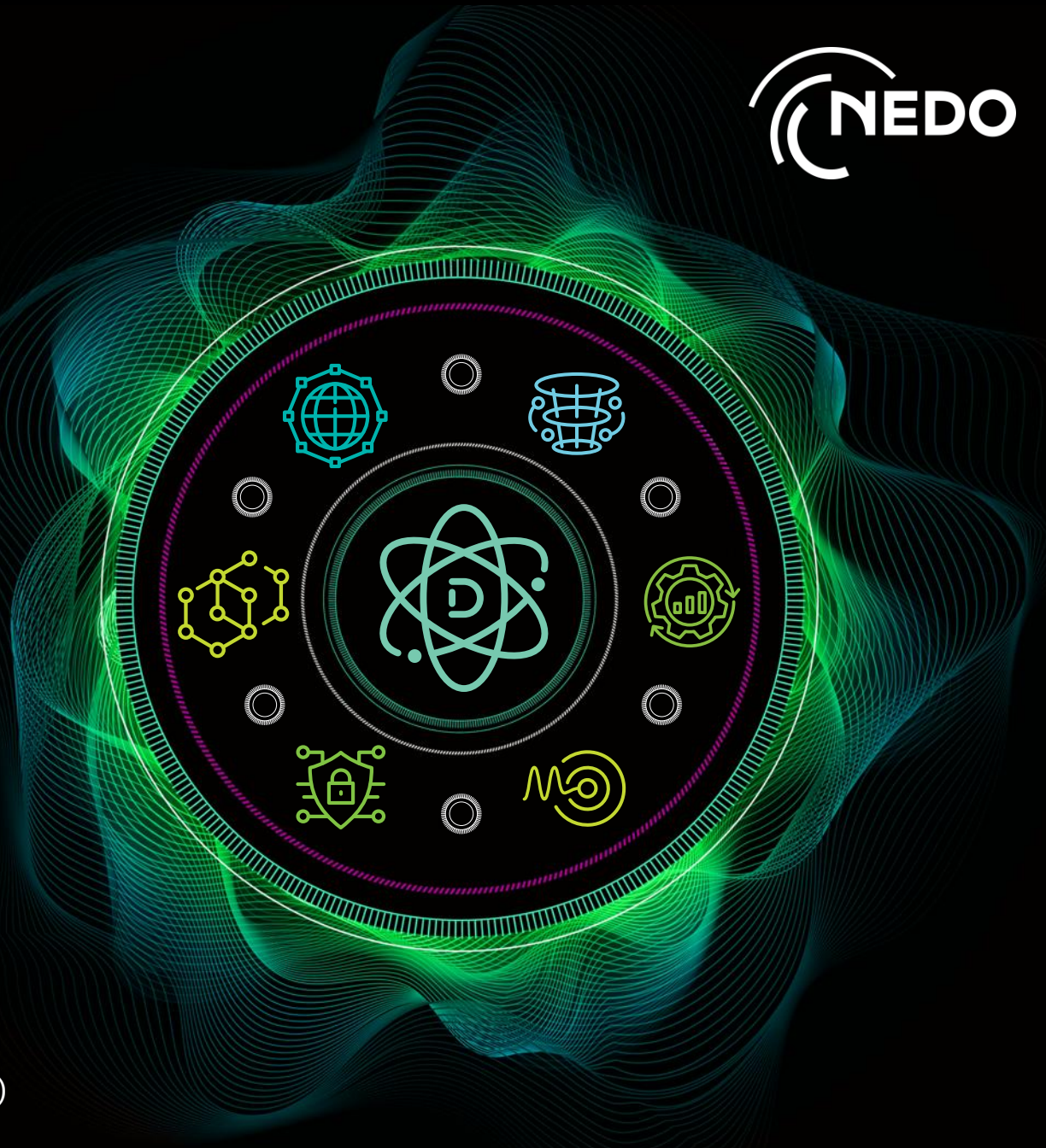
量子コンピューティング ユースケース集

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

TOYOTA



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）

TOYOTA：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【2023/01】 1／2

検証

産業領域	製造・プロセス
プロセス	研究開発
手法	シミュレーション
技術分類	ゲート*

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

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）
*ゲート（gate-based） = 量子ビットに対して順に演算を適用することで計算を行う方式。通常のコンピュータにおける論理回路に近い考え方で、幅広い問題に対応可能。

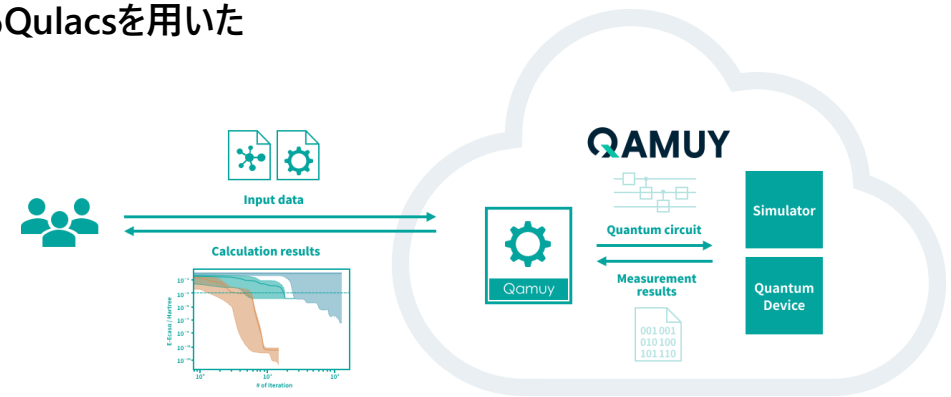
TOYOTA：自動車材料デザインへの適用に向けた分子シミュレーション【2023/01】 2／2

検証

産業領域	製造・プロセス
プロセス	研究開発
手法	シミュレーション
技術分類	ゲート*

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、**水素分子同士の間に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**

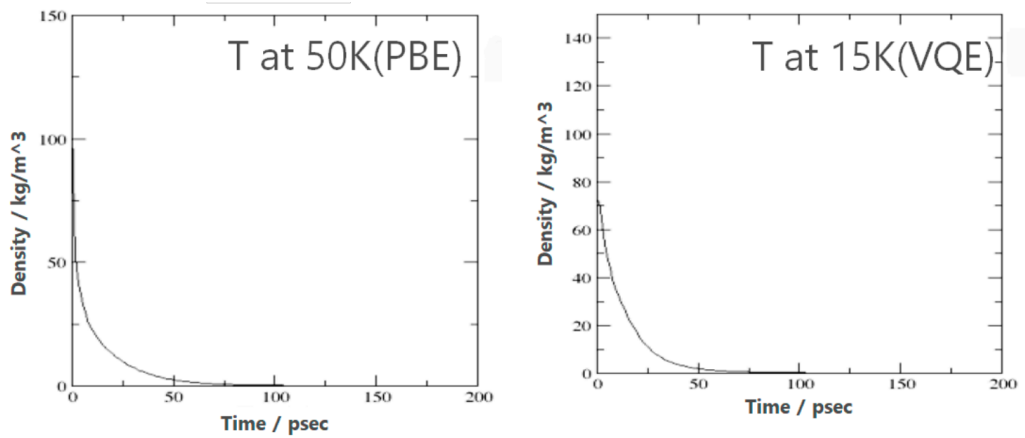


Qamuyの利用イメージ

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://qunasys.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）
*ゲート（gate-based）= 量子ビットに対して順に演算を適用することで計算を行う方式。通常のコンピュータにおける論理回路に近い考え方で、幅広い問題に対応可能。

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）

WEBサイトにて、その他の事例も公開しています。ぜひご覧ください。
https://www.quantum-computing-use-cases.nedo.go.jp

他の事例を見る

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（e-mail：quantum_ai@ml.nedo.go.jp）

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」および「ポスト５Ｇ情報通信システム基盤強化研究開発事業（量子産業化）／量子コンピュータの産業化促進に向けた包括的調査」の成果として、得られたものです。