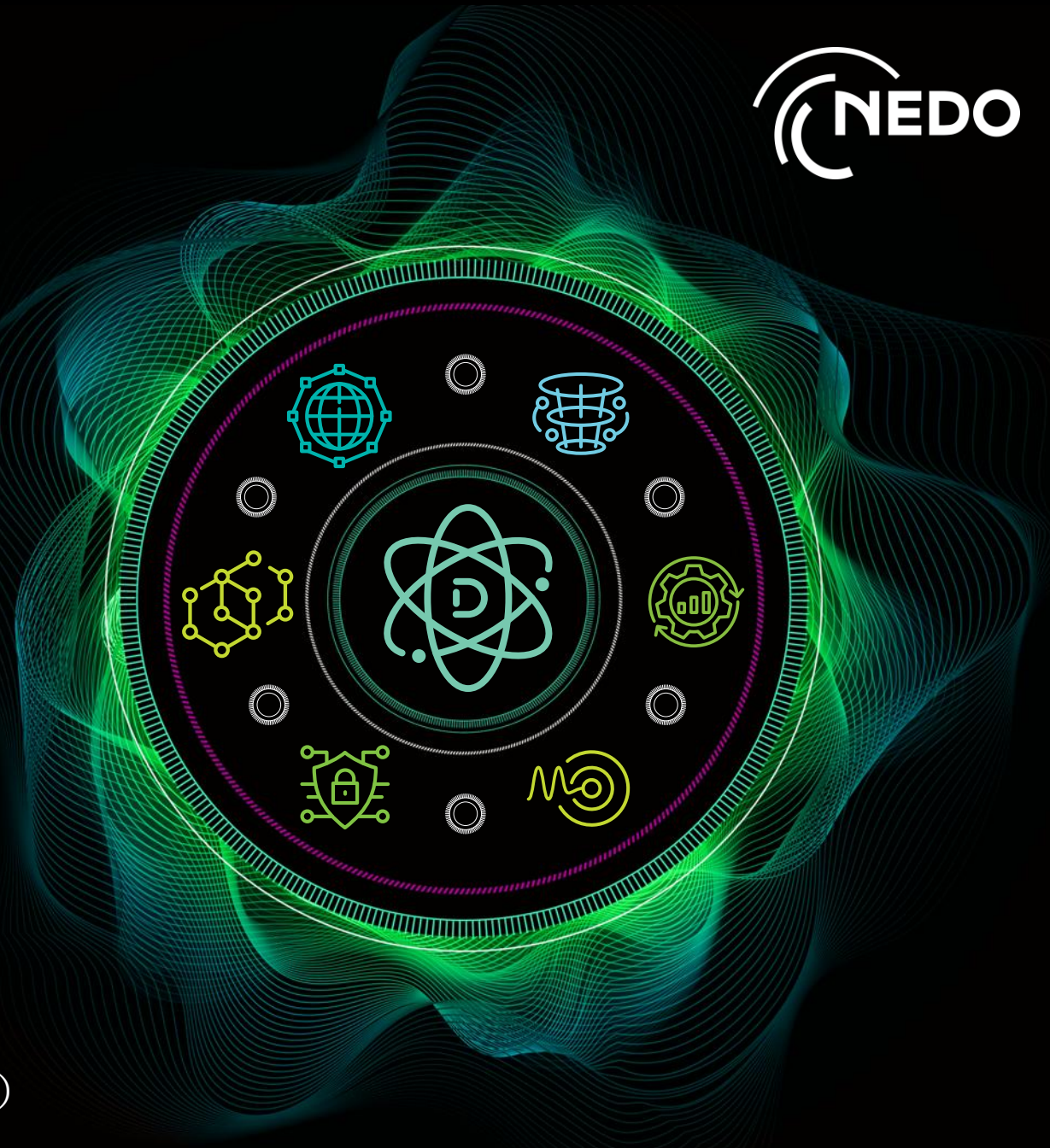
量子コンピューティング ユースケース集

既存の材料データ×機械学習を活用した材料の特性予測



積水化学工業·日立

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）

積水化学工業・日立：既存の材料データ×機械学習を活用した材料の特性予測【2022/12】 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	イジング*

取組の背景

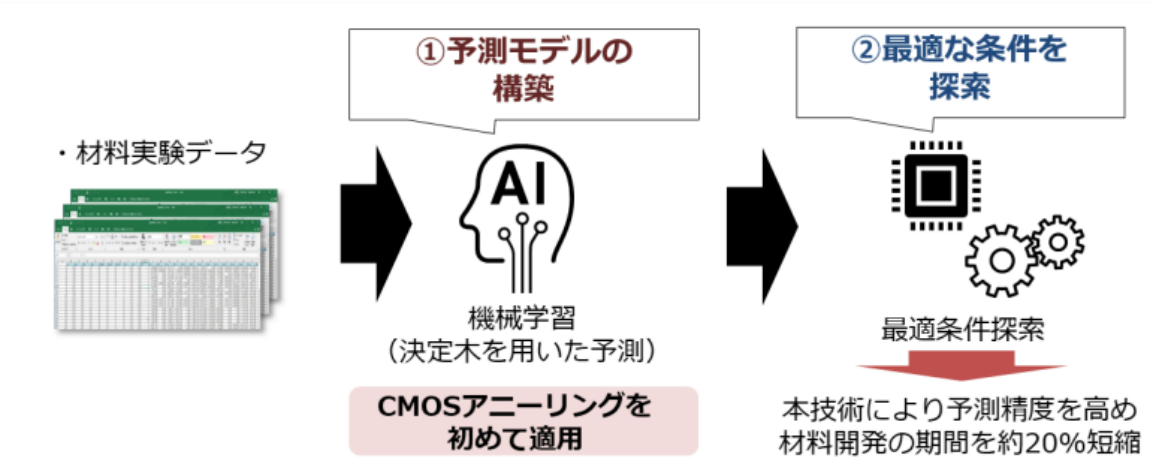
- これまでの材料開発は、**研究者の経験や勘に依存し、実用化まで長い時間と費用**を要していた
- 一方で、市場では製品ライフサイクルの短命化、資源の制約などを起点として材料開発への要求が多様化・高度化しており、その要求に応えるべく**MI（マテリアルインフォマティクス）への取り組みが本格化**している
- 日立では、データを活用して材料開発プロセスを効率化するデータ管理・アナリティクス基盤の実現に向けて、技術開発を重ねるとともに、**MIを適用した材料開発ソリューションを提供し、素材産業をはじめとするお客様のニーズに応えてきた**

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

参考：日立製作所「疑似量子の活用で従来のMIによる材料開発期間をさらに20％短縮できることを実証」（https://www.hitachi.co.jp/New/cnews/month/2022/12/1216.pdf）
*イジング = 主に量子アニーラやイジングモデル専用シミュレータを想定し、問題をイジングモデルで表現してから計算を行う方式。特に、膨大な選択肢の中から最適な組合せを探す問題と親和性が高い。

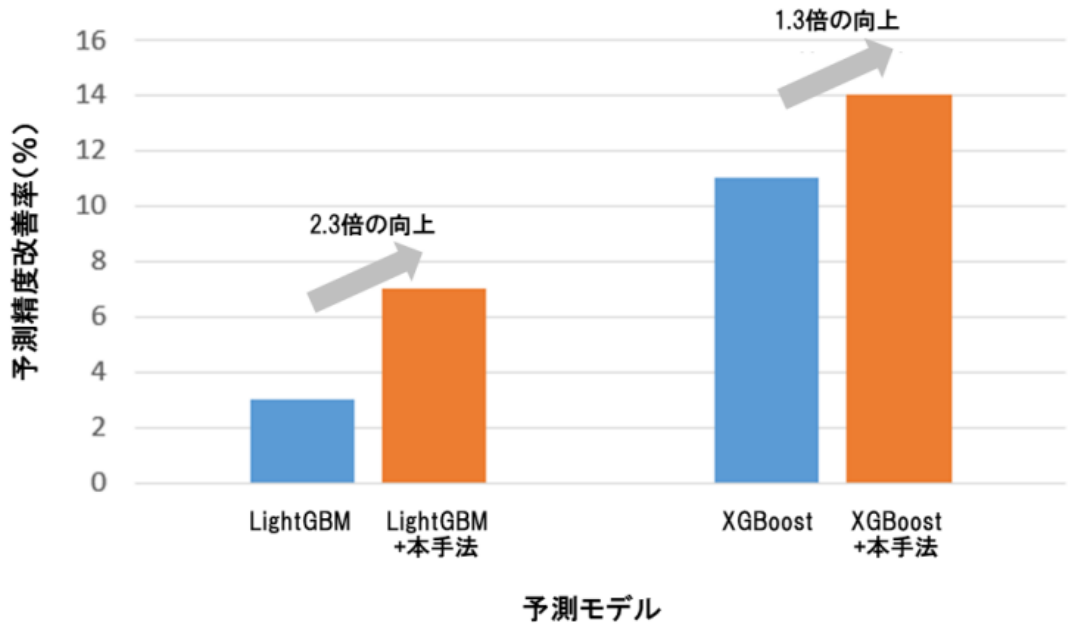
積水化学工業・日立：既存の材料データ×機械学習を活用した材料の特性予測【2022/12】 2／2

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	イジング*

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

参考：日立製作所「疑似量子の活用で従来のMIによる材料開発期間をさらに20％短縮できることを実証」（https://www.hitachi.co.jp/New/cnews/month/2022/12/1216.pdf）
*イジング = 主に量子アニーラやイジングモデル専用シミュレータを想定し、問題をイジングモデルで表現してから計算を行う方式。特に、膨大な選択肢の中から最適な組合せを探す問題と親和性が高い。

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。