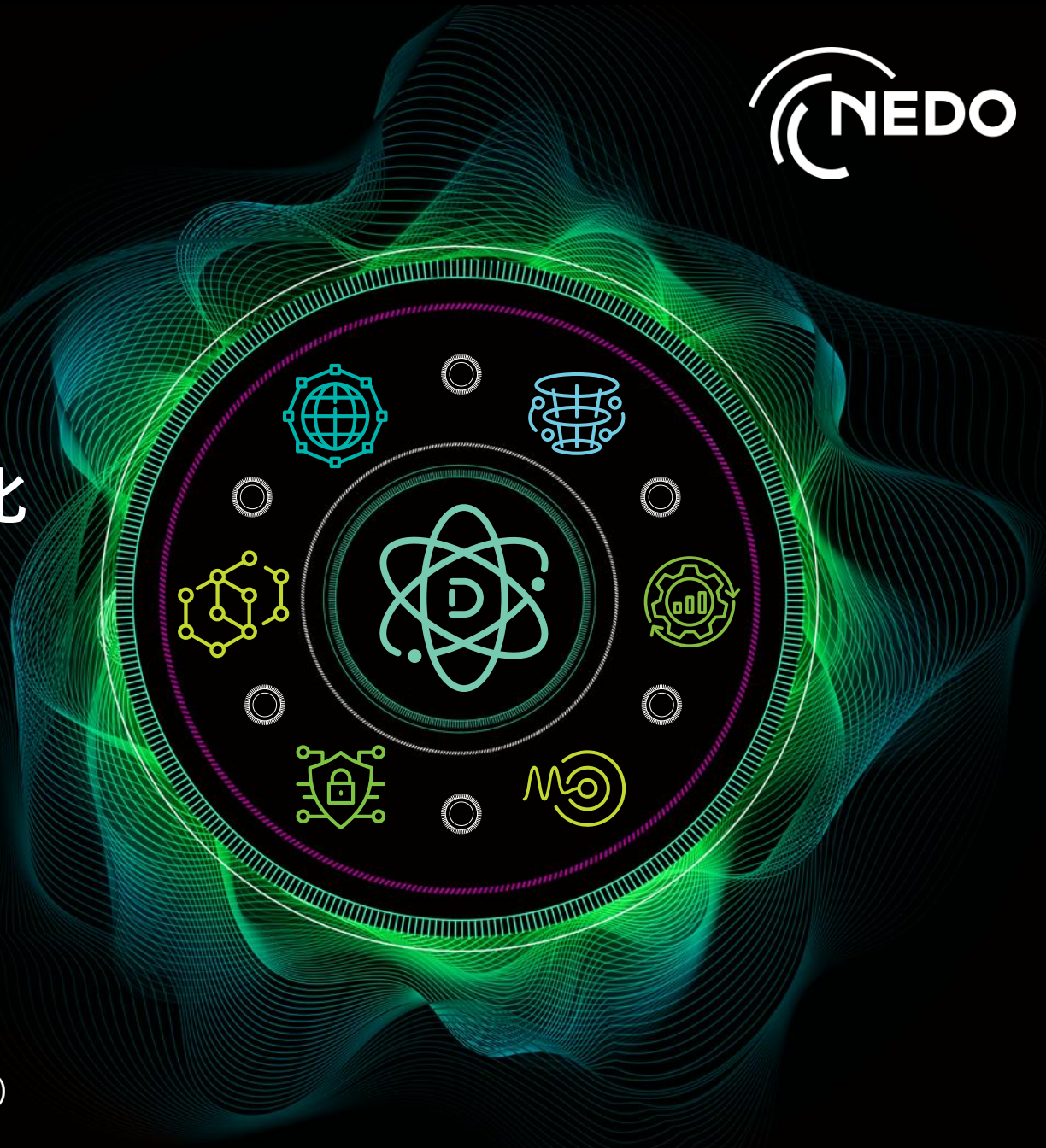
量子コンピューティング ユースケース集

材料シミュレーションの高精度化・高速化に向けたDMFT計算技術の開発



Quemix、三井金属

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）

Quemix×三井金属：材料シミュレーションの高精度化・高速化に向けたDMFT計算技術の開発　【2026/6】　1／3

検証

産業領域	製造・プロセス
プロセス	素材探索
手法	シミュレーション
技術分類	ゲート*

取組の背景

- 材料開発では、高性能な新素材を探索するために多くの試行錯誤を要し、**実験と計算の両面で時間とコストがかかることが課題**となっている
- 有望な材料候補を効率的に絞り込むには、コンピュータシミュレーションの活用が重要である一方、**解析精度の向上と計算時間の短縮を両立することは容易ではなかった**
  - ✓ **精度を高めるほど計算負荷が増えやすく、計算時間を抑えると必要な精度を確保しにくいという課題**がある
- こうした中で三井金属とQuemixは、**量子コンピュータを用いた材料計算の新技術の共同研究**を進めた

解決したい課題・モチベーション

- 本件では、**高精度な計算が可能である一方、計算時間の長さが課題となっていたDMFT法に着目した**
- 特に、DMFT計算の重要な構成要素である量子位相推定（QPE）は、**エネルギー分解能を高めるほどゲート操作数や計算コストが増加するため、高速性と高精度の両立を妨げる要因**となっていた
- DMFT法を量子コンピュータ上で効率的に実行するため、**新たな計算フローを構築するとともに、計算プロセスで重要な役割を担う量子位相推定（QPE）の性能改善**を目標とした
  - ✓ 単に既存計算を量子コンピュータへ置き換えるのではなく、実用的な材料シミュレーションへの応用を見据えた計算効率の向上を目指した

参考：三井金属とQuemix、量子コンピュータ上での材料計算の新技術を開発
～材料シミュレーションの実用化を加速～（https://www.mitsui-kinzoku.com/LinkClick.aspx?fileticket=QhyijuGgx%2fY%3d&tabid=100&mid=826）
*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。

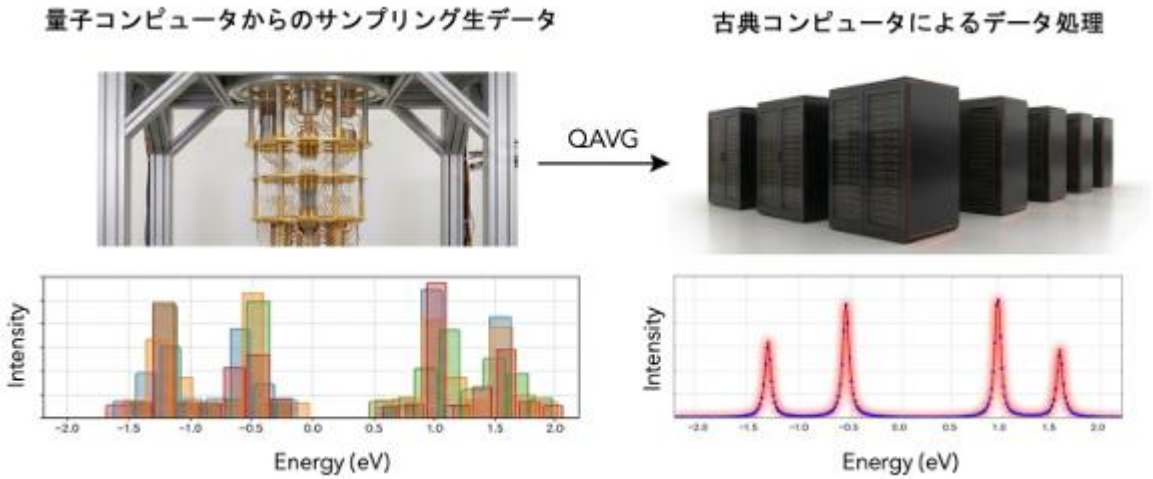
Quemix×三井金属：材料シミュレーションの高精度化・高速化に向けたDMFT計算技術の開発　【2026/6】　2／3

検証

産業領域	製造・プロセス
プロセス	素材探索
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

- DMFT法の量子計算への適用を見据え、量子コンピュータ上で効率的に実行するための新たな計算フローを構築した
- そのうえで、**計算プロセスの重要要素である量子位相推定（QPE）を改良する新技術「QAVG（QPE Averaged over Variable Grids）」を開発した。**
  - ✓ QAVGは、エネルギー分解能を高めるほどゲート操作数や計算コストが増大する従来QPEの課題を抑えつつ、高精度化・高速化を図る技術である
- さらに、**Quantinuum社の量子コンピュータ実機上で触媒材料を想定したシミュレーションを行い、DMFT計算フローの重要な構成要素であるQAVGの有効性を確認した**
- これにより、**DMFT計算フローの重要要素を実機環境で検証**し、量子コンピュータを用いた材料計算の実行可能性を示した



図：QAVGの概念図
左下図：量子コンピュータ上でQPEを実行した結果得られた4種類のデータ（4種類の色で区別）
右下図：量子コンピュータから得られた4種類のデータを基に、QAVGを実行し得られた連続スペクトル（青い点が実際のQAVGの結果であり、赤い線が厳密解）

参考：三井金属とQuemix、量子コンピュータ上での材料計算の新技術を開発
～材料シミュレーションの実用化を加速～（https://www.mitsui-kinzoku.com/LinkClick.aspx?fileticket=QhyijuGgx%2fY%3d&tabid=100&mid=826）
*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。

Quemix×三井金属：材料シミュレーションの高精度化・高速化に向けたDMFT計算技術の開発　【2026/6】　3／3

検証

産業領域	製造・プロセス
プロセス	素材探索
手法	シミュレーション
技術分類	ゲート*

期待されるビジネス効果

- **QAVGにより、計算コストの増加を抑えながら、量子コンピュータ上でのDMFT計算の高精度化・高速化できる可能性**が示された
- 実機検証では、**通常であればハードウェアの進化により約2年後に達成されると見込まれる計算精度を現行マシンで実現**しており、量子コンピュータを用いたDMFT計算の早期実用化に期待される
- また、**QPEは材料計算分野で広く用いられる技術であることから、QAVGはDMFT計算にとどまらず、他の材料計算手法への波及も期待**される
- その結果として、**触媒材料を含む材料開発テーマにおいて高精度シミュレーションの活用**が進み、**有望材料の探索効率向上や開発期間短縮につながる可能性**がある

参考：三井金属とQuemix、量子コンピュータ上での材料計算の新技術を開発
～材料シミュレーションの実用化を加速～（https://www.mitsui-kinzoku.com/LinkClick.aspx?fileticket=QhyijuGgx%2fY%3d&tabid=100&mid=826）
*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。

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。