量子コンピューティング ユースケース集

量子・古典連携による大規模分子計算技術の開発

IBM×理研×クリーブランドクリニック



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）

IBM×理研×クリーブランドクリニック：量子・古典連携による大規模分子計算技術の開発 【2026/5】 1／3

検証

産業領域	創薬・医療
プロセス	リード探索・最適化
手法	シミュレーション
技術分類	ゲート*

取組の背景

- 創薬には莫大なコストと時間がかかっている課題がある。そんな中で、**タンパク質と薬剤候補の組み合わせを計算で評価し、結合の強さを予測できると、実験にかかる時間やコストの削減**につながる可能性がある。
- ただし、そのためには、**実験値に近い精度と、数千原子規模の大きな分子系を扱える計算規模を両立する必要**がある
- 従来の計算手法には、**比較的大きな系を扱いやすい一方で精度に限界があるものと、高精度だが計算負荷が大きすぎるものがあり、この両立が課題**となっていた。そこで、分子を小さなフラグメントに分け、量子コンピューターと古典スーパーコンピューターを組み合わせて計算するアプローチが検討された

解決したい課題・モチベーション

- 本研究の狙いは、**量子コンピューターとスーパーコンピューターを組み合わせて、大きな生体分子を現実的な時間で計算できるようにすること**である
- そのためには、**分子を小さく分けた後も十分な精度を保ちながら計算量を抑える必要があり、さらに量子計算機と古典計算機をまたぐ複雑な処理を効率よく実行する仕組みも求められた**
- 本研究では、**EWFフラグメント構築の低スケーリング化、TrimSQDによる精度改善、Selected-Basis DiagonalizationのGPU加速、および自動化ワークフローの構築によって対応した**

参考：クリーブランド・クリニック、理化学研究所、IBMによる2026 ACMゴードン・ベル賞最終候補選出に関するニュースリリース（https://jp.newsroom.ibm.com/2026-09-09-cleveland-clinic,-riken-and-ibm-team-advance-to-finals-for-2026-acm-gordon-bell-prize）

*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。

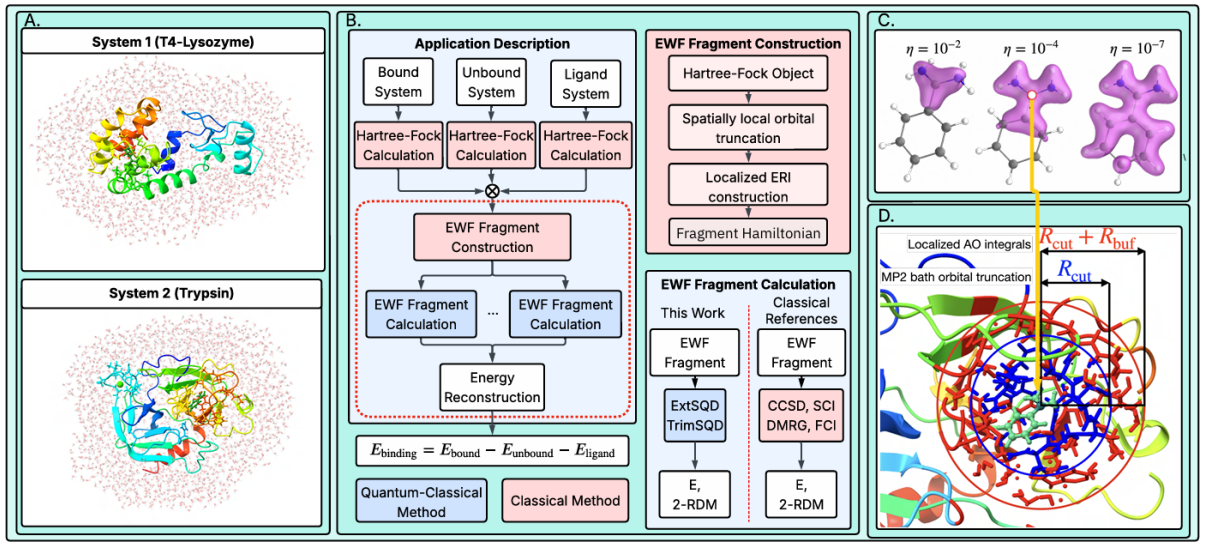
IBM×理研×クリーブランドクリニック：量子・古典連携による大規模分子計算技術の開発 【2026/5】 2／3

検証

産業領域：創薬・医療
プロセス：リード探索・最適化
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

- 本研究では、**量子コンピューターが分子全体を単独で解かず、まず分子を複数の小さな部分に分け、そのうち量子的な扱いが特に重要な部分について、量子コンピューターで計算に必要な情報をサンプリングする**
- **そこで得た結果を、スーパーコンピューター側の計算と組み合わせて全体のエネルギーや結合の強さを評価する**役割分担になっている
- つまり、**量子コンピューターはCPUやGPUの置き換えではなく、全体ワークフローの中で一部を担う補完的な計算資源として使われている**
  - ✓ 具体的には、分子を EWF によりフラグメントへ分解し、各フラグメントに対して量子回路を構築して、QPU 上で繰り返し測定を行い、電子配置をサンプリングする
  - ✓ 得られたサンプルに対し、古典側で誤差緩和、部分空間対角化、部分空間拡張を行い、フラグメントのエネルギーと2-RDMを算出する最終的に、それらを再構成して全体系のエネルギーや結合エネルギーを求める
- 実験では、**2台の156量子ビットQPUを使い、最大94量子ビットを活用し、21,006回路を239時間超実行し、3.0×10^9件の測定結果を収集**した



図：大規模タンパク質-リガンド系に対する量子・古典連携計算の全体フロー
Aは対象とした2つのタンパク質-リガンド複合体、Bは結合エネルギー評価まで含む全体の計算フロー、Cは環境軌道の切り詰め閾値に応じたフラグメント表現、Dは局所化軌道と局所ERIを用いた低スケーリングなフラグメント構築を示している。赤点線枠は、自動化したワークフローの対象範囲を示している

参考：クリーブランド・クリニック、理化学研究所、IBMによる2026 ACMゴードン・ベル賞最終候補選出に関するニュースリリース（https://jp.newsroom.ibm.com/2026-09-09-cleveland-clinic,-riken-and-ibm-team-advance-to-finals-for-2026-acm-gordon-bell-prize）
*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。

IBM×理研×クリーブランドクリニック：量子・古典連携による大規模分子計算技術の開発 【2026/5】 3／3

検証

産業領域 創薬・医療
プロセス リード探索・最適化
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

- 本研究は、**創薬で重要となるタンパク質-薬剤候補の結合評価を、より高い精度かつ大規模に進めるための計算基盤を示したもの**である
  - ✓ **11,608原子および12,635原子のタンパク質-リガンド複合体に対してHQC計算を実施し、先行事例の303原子Trp-cageと比べて40倍超の系サイズ拡大**を達成した
  - ✓ 加えて、**最大フラグメントにおけるHQCと参照古典計算のエネルギー差は、Trp-cageの21mHaからtrypsinの0.10mHaに改善され、最大210倍の精度向上**と整理されている
  - ✓ さらに、自動化ワークフローにより、QPU・CPU・GPUをまたぐ計算実行、監視、再実行、障害回復を含むend-to-end基盤を構築し、T4-Lysozyme系のmixed basis計算では 62.4時間のend-to-end実行時間が報告されている
- これにより、**薬候補と標的タンパク質の相互作用を計算で事前に見極めるための手段が強化され、創薬研究の効率化**につながる可能性がある
- また、量子計算機とスーパーコンピューターをまたぐ処理を自動化したことで、単発の実証にとどまらず、より継続的な研究運用へ広げていく基盤も示された

Method	Benchmark system	Atoms	Active space	Embedding (largest HQC)	Features	HQC error‡ (largest HQC)
SQD	[4Fe-4S]	28	$(54e, 36o)$	N/A	1. ansatz-based circuit 2. closed-loop parametrization 3. configuration carryover 4. Selected basis diagonalization	250 mHa*
ExtSQDrift	$C_{13}Cl_{12}$	15	$(46e, 50o)$	N/A	1. random time-evolution circuits 2. ExtSQD	75 mHa
EWF-ExtSQD	Trp-cage	303	$(1,158e, 919o)$	EWF $(34e, 33o)$	1. ansatz-based circuit 2. classical parametrization 3. configuration carryover 4. ExtSQD	21 mHa†
EWF-TrimSQD STO-3G basis	trypsin benzamidine	12,635	(43,858e, 31,795o)	EWF + Sec. IV $(66e, 45o)$	Sec. IV	0.10 mHa†
EWF-TrimSQD STO-3G basis	T4-Lysozyme *n*-butyl-benzene	11,608	$(39,880e, 28,844o)$	EWF + Sec. IV $(36e, 35o)$	Sec. IV	0.16 mHa†
EWF-TrimSQD mixed basis§	T4-Lysozyme *n*-butyl-benzene	11,608	$(39,880e, 29,455o)$	EWF + Sec. IV $(34e, 42o)$	Sec. IV	2.23 mHa†

表：先行HQC手法との比較にみる本研究の適用規模と最大フラグメント誤差
本表は、先行HQC手法と比べて、本研究がより大規模なタンパク質-リガンド系へ適用されていることと、最大フラグメントにおける誤差が小さいことを示している。303原子から12,635原子への拡張と、21mHaから0.10mHaへの改善を、40倍超の系サイズ拡大と最大210倍の精度向上として整理している

参考：クリーブランド・クリニック、理化学研究所、IBMによる2026 ACMゴードン・ベル賞最終候補選出に関するニュースリリース（https://jp.newsroom.ibm.com/2026-09-09-cleveland-clinic,-riken-and-ibm-team-advance-to-finals-for-2026-acm-gordon-bell-prize）
*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。