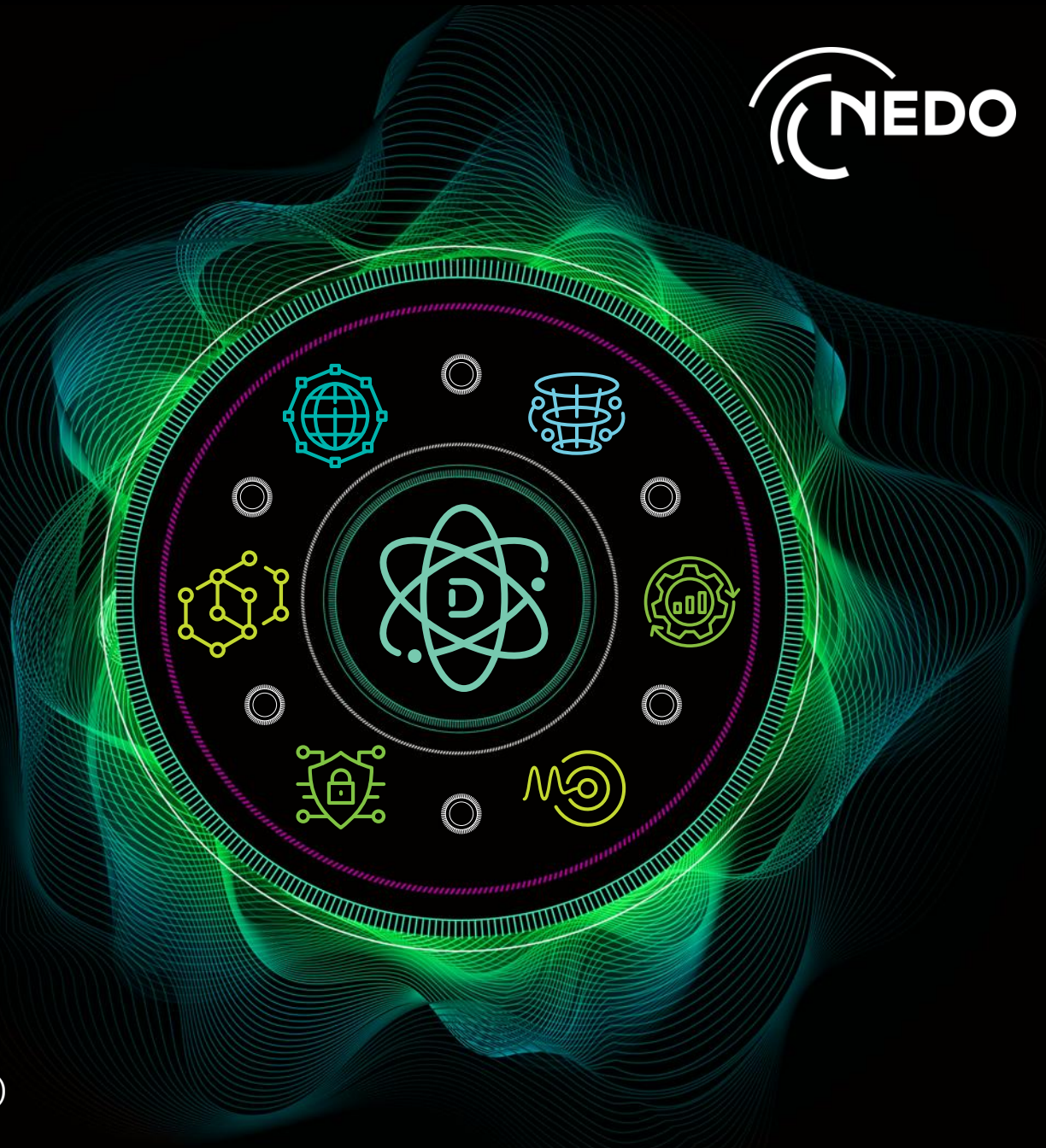
量子コンピューティング ユースケース集

量子コンピューターとHPCの連携による高精度材料スクリーニング



ソフトバンク株式会社

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）

ソフトバンク株式会社：量子コンピューターとHPCの連携による高精度材料スクリーニング　【2026/7】　1／2

検証

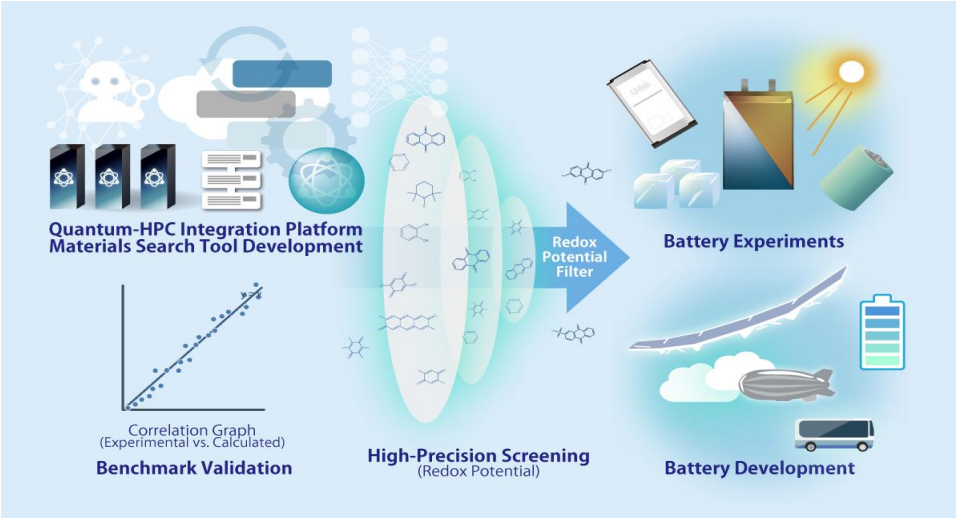
産業領域　製造・プロセス
プロセス　素材探索
手法　シミュレーション
技術分類　ゲート*

取組の背景

- 電気自動車、ドローン、ロボット、HAPS（成層圏から通信ネットワークを提供する無人航空機）などの**次世代デバイスには、軽量で長時間使用できる次世代電池が必要**である。その実現には、**重量エネルギー密度の高い材料が求められるが、候補は膨大であり、人手に依存した評価には限界がある**
- 計算によって候補を絞り込む必要があるものの、**従来手法は条件によって精度が変動し、高精度計算はスーパーコンピューターを用いても困難**である。この限界を打開する手段として量子コンピューターの活用が期待されており、ソフトバンクと大阪大学QIQBは**量子HPC連携手法を共同開発**した。ソフトバンクはJHPC-quantum（量子HPC連携プラットフォーム開発プロジェクト）のテストユーザープログラムでIBM Heron、「富岳」、ソフトバンクAIデータセンターを活用するワークフローを構築し、計算を実行した

解決したい課題・モチベーション

- 本ユースケースでは、重量エネルギー密度に関わる酸化還元電位を高精度に予測し、有望な有機分子を実験前に順位付けする手法の確立を目指す。**従来の量子コンピューターを用いた量子化学研究は、少数の分子を対象とした計算手法同士の比較が中心であり、社会実装に向けた、実験値との比較に基づく材料スクリーニングへの有効性は十分に評価されていなかった**
- そこで11種類の有機分子を対象として、計算値を実験値と体系的に比較した。**単一の実験値への過度な適合や実験値自体の不確かさを考慮し、相関と誤差の両面から、候補順位付けの汎用性を評価**した



量子HPC連携プラットフォームによる材料スクリーニングが材料開発を加速する枠組みを示す概念図



本ユースケースで構築した量子HPC連携ワークフローの概念図

参考：「Toward Practical Materials Screening Beyond 50 Qubits Enabled by QSCI-AFQMC in a Quantum-HPC Workflow
（https://indico2.riken.jp/event/5118/contributions/28546/attachments/14756/22654/Toshihiro_Aoki.pdf）
理論化学会会誌「フロンティア」2026年4月号「量子HPC連携による化学・材料シミュレーションの最前線とその先」（https://www.jstc.org/frontier30/）
*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。

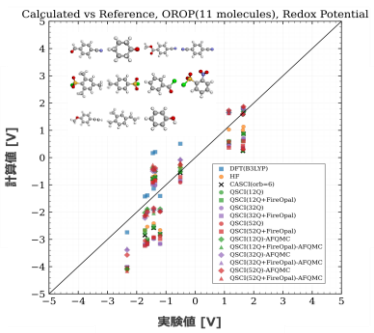
ソフトバンク株式会社：量子コンピューターとHPCの連携による高精度材料スクリーニング　【2026/7】　2 ／ 2

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

- **実験値と比較できる精度で11種類の有機分子を計算するには、全軌道を対象とした場合、276～528量子ビット相当が必要だが、現行QPUでは実行できない。**
- そこで、**50量子ビット超の量子化学計算を先導し、量子HPC連携研究を牽引しているSQD手法で示された量子コンピューターとHPCの役割分担を参考に、その基盤となるQSCI手法（重要な電子配置をQPUで選び出す手法）を採用し量子HPC連携に対応できるよう拡張した**
- QPUを用いて12～52量子ビットの重要な電子配置を抽出し、「富岳」で計算する。さらに、現行QPUでは扱えない軌道の電子相関をソフトバンクAIデータセンターを用いて高精度に補正し、実験値と比較可能な酸化還元電位を求める。本ユースケースの最大条件では、考慮すべき電子配置数が最大約10^{14}に達する。全電子配置を扱う厳密解計算や、対応する量子状態の厳密なエミュレーションはスーパーコンピューターでも困難であるため、実機QPUを使う意義がある



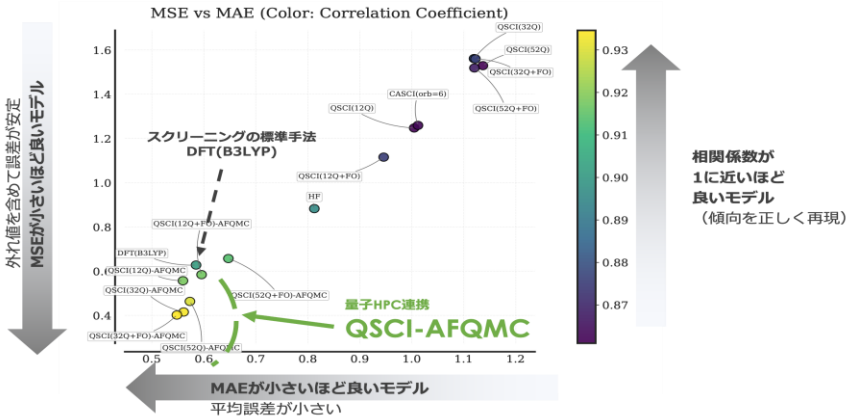
12Q: (5-7e, 6o), 32Q: (15-17e, 16o), 52Q: (25-27e, 26o)

計算手法		相関係数	MAE	MSE
スクリーニングの標準手法 DFT(B3LYP)		**0.9021**	**0.5849**	**0.6276**
量子HPC連携 QSCI	32Q	0.8815	1.1196	1.5611
	52Q	**0.8679**	**1.1204**	**1.5187**
量子HPC連携 QSCI-AFQMC	32Q	0.9346	0.5480	0.4016
	52Q	**0.9301**	**0.5731**	**0.4632**

11種類の有機分子に対する各手法の酸化還元電位予測値の比較。
左の図は、実験値と計算値の相関関係を示し、右の表は一部の手法に対する評価値を示す

期待されるビジネス効果

- **本量子HPC連携手法は、実験値との相関が標準手法より高く、52量子ビットの場合でも精度を維持した。**HPCとの連携により、現行QPUの制約下においても、実用的な計算を早期に実現することを目指している
- **高精度な事前スクリーニングにより、性能が見込めない候補に対する実験や候補選定の手戻りを削減できる。**これにより、研究期間の短縮と実験コストの削減に加え、有望な新規材料や新規化合物の早期実用化につながることが期待される。
- また、**酸化還元電位予測は、電池だけでなく、有機半導体の劣化リスク評価や、レドックス活性を持つ医薬候補の毒性リスク評価にも応用できる可能性があり、新材料・新薬の開発加速への貢献が期待**される



酸化還元電位予測におけるMAE-MSE平面上での各手法の位置づけ
左下に位置し、色が明るいほど実験値に対する予測精度が高い

*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。