

# デロイト トーマツ、ソフトウェア会社 Classiq、三菱ケミカルが 材料開発用途での量子コンピュータ早期実用化に向けて 最大 97%のアルゴリズム圧縮を実現

量子コンピュータを活用した高性能な有機 EL 材料探索の計算における、量子アルゴリズム実装の効率化を実証。創薬、AI、金融、製造、物流など様々な領域への量子コンピュータ早期実用化を加速

三菱ケミカルグループ<sup>※1</sup>（以下「三菱ケミカル」）は、デロイト トーマツ グループ（東京都千代田区、グループ CEO：木村研一、以下「デロイト トーマツ」）およびイスラエルの量子ソフトウェアスタートアップの Classiq Technologies（CEO：Nir Minerbi、以下「Classiq」）と連携して、高性能な有機 EL 材料探索の計算における量子回路\*を圧縮する実証実験（以下「本実証」）に成功したことを発表します。

\*量子コンピュータ上で利用するアルゴリズムの実装形態。情報の基本単位である量子ビットと、それらの量子ビットに対して操作を行う量子ゲートの組み合わせから成る。

## 【実証の成果～量子回路圧縮成功が示唆する量子コンピュータの早期実用化】

本実証を通じて、2つの量子アルゴリズムの実装形態である2種類の量子回路のうち、一方で最大97%、もう一方で最大54%の圧縮を実現しました。量子コンピュータでアルゴリズムを実行するには、量子回路という形式で実装する必要があり、回路が長いほど、計算中のエラー発生リスクが高まります。本実証では、効率的な量子回路設計技術を活用することで、新材料探索時の計算精度向上の可能性が示されました。この結果は、化学分野はもとより、本実証で用いた回路圧縮の手法が様々な量子回路に適用できることから、創薬、AI、金融、製造、物流など幅広い分野での量子コンピュータの早期実用化を加速させるものと言えます。近年、量子コンピュータの誤り訂正技術が進展し量子コンピュータの信頼性が向上することで、より複雑で長い量子アルゴリズムの実行が可能になると想定されています。そのため、量子回路の圧縮は量子コンピュータの実用化に向けてますます重要な課題となっています。

## 【実証の概要～量子コンピュータ活用による新材料開発時の計算精度向上に向けて】

本実証は、量子分野の技術およびグローバルプレーヤーに関する知見を持つデロイト トーマツが、従来から量子コンピュータの化学分野への活用を見越し研究を行っていた三菱ケミカルが保有する材料探索向けの実データと、量子コンピュータソフトウェアの先端テクノロジーを保有する Classiq の量子回路設計技術を掛け合わせることで、実材料のデータを用いた有望な材料探索の場面での量子回路圧縮が可能かを検証しました。

三菱ケミカルは以前より、有機 EL 材料開発への量子コンピュータ適用を題材に、量子近似最適化アルゴリズム（Quantum Approximate Optimization Algorithm、以下「QAOA<sup>\*2</sup>」）を用いて新材料における最適解の探索研究を行ってききましたが（Intell. Comput. 2023;2:Article 0037）、長い量子回路の操作が必要なため、量子ビットの状態に影響を与えるノイズの影響が蓄積し、実機の計算精度が担保できないことが課題となっていました。そこで、量子回路の圧縮が実現すれば、量子コンピュータの化学分野での実用可能性が高まると考え 3社共同による本実証の実施に至りました。

また、近年量子コンピュータのエラーを訂正する誤り訂正技術の進展が著しい中、誤り耐性ハードウェアにおいて真価を發揮する量子位相推定アルゴリズム（Quantum Phase Estimation、以下「QPE<sup>\*3</sup>」）においても実証を行うことで、更なる将来を見越した取り組みを行いました。

\*<sup>2</sup> QAOA：量子コンピューティングの分野で注目されているアルゴリズムの一つ。特に組合せ最適化問題を解くために設計されており、従来のコンピュータのアルゴリズムでは解くのが難しい問題に対して量子コンピュータの優位性を示すことを期待されている。

\*<sup>3</sup> QPE：量子の状態（位相）を推定するためのアルゴリズム。多くの量子アルゴリズムの基盤として機能する。

● **実施体制：**

- プロジェクト全体企画・実施：デロイト トーマツ
- 実証支援：Classiq
- データ提供・実証実験の助言：三菱ケミカル

● **手法：**

三菱ケミカルが有機 EL 材料探索の計算に利用した QAOA に加えて、誤り耐性ハードウェアにおいて真価を発揮する QPE それぞれのアルゴリズムについて、Classiq が開発した Qmod（Quantum Modeling Language）<sup>\*4</sup> で記述したモデルを元に Classiq Platform<sup>\*5</sup>にてより効率的な量子回路を生成しました。なお、この量子回路は実機の量子コンピュータでの実行を想定して最適化したもので、実際に実機上で計算を行いました。

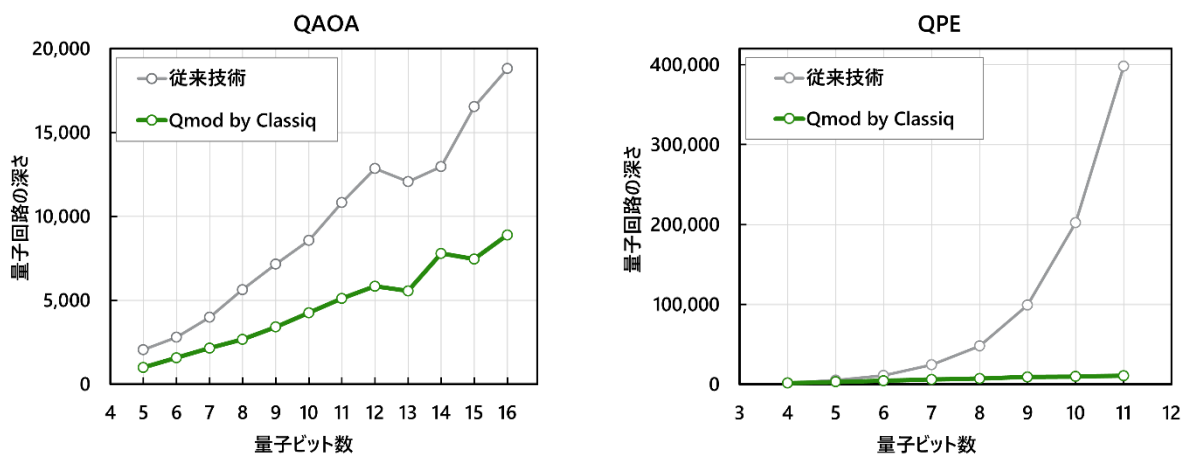
\*<sup>4</sup> Qmod（Quantum Modeling Language）：Classiq が開発した、量子コーディングのための高水準モデリング言語。ユーザーが量子コンピュータで実現したい機能を記述できる。

\*<sup>5</sup> Classiq Platform：ユーザーの量子アルゴリズムの設計を手助けするクラウド型の量子回路生成プラットフォーム。Qmod で記述されたモデルから量子コンピュータで計算するための量子回路を自動的に生成できる。幅広いハードウェアおよびシミュレーション環境向けに最適化された量子回路を生成可能であり、ユーザーの量子回路設計過程だけでなく生成された量子回路に基づく計算実行時間も短縮される。

● **結果：**

本実証において、QAOA は三菱ケミカルが従来の技術で生成していた量子回路に比べ、計算精度を維持したまま最大 54%の量子アルゴリズム圧縮を実現、QPE においては同じく計算精度を維持したまま最大 97%の圧縮を実現し、実機の計算精度向上の可能性を示しました。これにより、実機上でより高い確率で有望な材料を発見できる可能性が示されました。

図：量子回路圧縮の結果（左：QAOA、右：QPE）



**【背景～新規材料開発における量子コンピュータ活用への期待の高まり】**

化学分野では、主に研究者の知見・経験や実験に大きく依存している従来型の研究開発アプローチに代わり、シミュレーション技術やデータセットを用いた AI 予測の情報技術（マテリアルズ・インフォマティクス）のアプローチがしばしば用いられるようになりました。これらのアプローチは効率的かつ高度な研究開発を可能にし、例えば新規材料開発においては開発に必要な期間とコストの大幅削減が可能となります。一方で、高精度なシミュレーションや、幅広い材料のデータスペースでの探索計算に膨大な計算コストを要することが実用面での課題となっています。そこで、従来のコンピュータと比較して複雑な計算や最適化問題の処理に強みを持つ量子コンピュータの活用が期待されています。

以 上

※1 三菱ケミカルグループは、三菱ケミカルグループ株式会社とそのグループ会社の総称です。

お問合せ先

三菱ケミカルグループ株式会社  
広報本部 メディアリレーション部  
TEL : 03-6748-7140