

# NEDO量子懸賞金事業 追加予定懸賞課題

2025年6月

国立研究開発法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構

AI・ロボット部

# カーボンニュートラルに貢献する車体構造の最適化技術

|         |                                                                                                                                                                                                                                                                                      |
|---------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 課題背景    | 地球温暖化をはじめとする環境問題に対応するため、自動車業界においてもカーボンニュートラルの達成が重要な課題となっています。特に車体構造における軽量化は、開発・生産・実走行時のCO2排出を効果的に削減する手段として強く求められています。しかし、市場のグローバル化と顧客ニーズの多様化により、軽量化と顧客ニーズの両立が難しい状況です。                                                                                                                |
| 課題内容    | 多目的最適化技術を活用して車体構造の軽量化問題を制約条件を満たした上で解決する方法を検討します。本課題は、大規模変数を持ち、多くの制約条件がある多目的最適化問題として定式化されます。従来のコンピュータと最適化手法の組み合わせでは、膨大な試行回数が必要とされ、計算コスト増大や開発期間中のCO2削減が難しいという課題があります。そこで、量子コンピュータを用いて効率的に最適解を見つける手法等を開発することを目指します。なお、制約条件の例として衝突性能や製造制約などが挙げられます。                                      |
| 量子技術例   | <ol style="list-style-type: none"><li>量子最適化<br/>組合せ最適化問題を効率的に解くことができます。特に、多目的最適化問題における大規模変数や制約条件の処理に有効であり、従来のコンピュータでは困難な計算を短時間で行うことが期待されます。</li><li>量子機械学習<br/>量子コンピュータにおける量子ビットの表現力を活用してデータ解析やパターン認識を迅速に行うことが可能です。自動車の構造設計において、過去のデータを基にして軽量化に関する最適化を進めることが可能になることが期待される。</li></ol> |
| 期待される成果 | 量子コンピュータを活用することで、従来の手法では困難だった大規模変数多制約の多目的最適化問題を効率的に解決できることを示します。これにより、車体構造の軽量化と顧客ニーズの両立を実現し、カーボンニュートラルに向けたより持続可能な自動車開発のための新たな道を切り開くことが期待されます。最終的には、開発コストの削減やCO2排出量の削減に大きく貢献することを目指します。                                                                                               |
| キーワード   | 量子最適化、量子機械学習、車体設計、多目的最適化問題                                                                                                                                                                                                                                                           |

本課題は2024年12月の課題募集後に応募された追加課題であり、懸賞金交付等審査委員会にて審査中の課題です。正式採用是非は2025年8月頃に決定予定ですが、採用見込みがあるため、記載しております。

# 量子技術を用いた金融商品の価格・リスクのリアルタイム計算

|         |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |
|---------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 課題背景    | 金融機関では、日々膨大な量の計算が必要とされ、特にオプションやリスク指標、価格調整項などに関する計算が重要な役割を担っています。これらの計算は、確率的微分方程式に基づき、解析的な解を持たないため、確率論的手法が広く使われています。しかし、確率論的手法は非常に多くのサンプル数を必要とし、リアルタイムな価格やリスク量の参照・更新が困難な状況にあります。金融市場が開いている間にも変動するインプットパラメータに対し、現在の手法では精度を担保した上でのリアルタイムな対応が困難です。                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |
| 課題内容    | 量子コンピュータを活用した確率論的手法等を利用し、以下の実現を目指します<br>・日中の市場変動（株価やボラティリティの変化など）に即応できるリアルタイムなオプション価格・リスク量を可能とするアルゴリズムの実現<br>・金利や経済状況の将来的なシナリオを踏まえた、将来時点のオプション価格分布の予測機能の実現<br>また上記を達成した上で、以下についても実施を目指します<br>・シミュレーションや実機を用いた、金融機関で実際に使われているようなモデルに対する優位性の検証<br>・複数の技術を統合した新しい計算アーキテクチャの提案（例えば、将来のシナリオの生成は機械学習で行い、価格算出の部分は量子で高速可を図るなど）                                                                                                                                                                                                                                                              |
| 量子技術例   | <ol style="list-style-type: none"><li>量子最適化<br/>量子最適化アルゴリズムをリスク計算やポートフォリオ最適化などの金融問題に適用することで、既存のアルゴリズムよりも効率的に解を導き出すことが可能になる場合があります。</li><li>量子コンピュータによるシミュレーション<br/>従来の確率論的手法に比べて少ないデータポイントで結果を得ることが可能になります。理論的には、この方法により計算速度が大幅に向上し、処理時間が短縮されるとされています。この特性により、従来手法よりも少ない計算量での解析や評価が現実的に行えるようになる可能性があります。</li><li>量子機械学習<br/>適応型モデルやニューラルネットワークをより高速に学習・評価することが可能になることが期待されています。これにより、オプション価格関数の迅速な評価と更新が可能になることが期待されます。</li><li>量子ランダムウォーク<br/>確率的プロセスをシミュレーションする際に、古典的なランダムウォークよりも効率的な計算を提供する可能性があります。これにより、金融デリバティブの価格設定やリスク分析の際に利用されるシミュレーション計算を加速することが可能になることが期待されます。</li></ol> |
| 期待される成果 | 金融機関がリアルタイムにオプション価格やリスク量を効率的に参照・更新することが可能となり、特に市場が開いている時間帯のパフォーマンス向上が期待されます。量子技術や機械学習の応用によって、従来の計算時間を削減しつつ、より正確な価格付けとリスク管理を実現することで、金融機関の業務効率の向上に寄与することが見込まれます。                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |
| キーワード   | 量子最適化、量子機械学習、金融リスク、オプション価格分布の予測                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |

本課題は2024年12月の課題募集後に応募された追加課題であり、懸賞金交付等審査委員会にて審査中の課題です。正式採用是非は2025年8月頃に決定予定ですが、採用見込みがあるため、記載しております。

# 原子の空間配置最適化シミュレーションによる 有機分子の結晶構造予測システムの開発

|         |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |
|---------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 課題背景    | 製薬企業では、薬剤分子を結晶状態にして溶解速度を制御し、不純物を除去することが重要です。しかし、有機分子は立体構造や空間配置が異なる複数の結晶多形を持つことが多く、それらによって溶解性が変わるため、錠剤製造には安定な結晶形の選択が求められます。準安定結晶が得られた後に、最安定結晶が出現するLate-Appearing Polymorph現象により、薬の効果が減少したり、安定供給が困難になる場合があります。患者に不利益を与えることがあります。また、機能性材料の研究開発においては、分子構造のわずかな改変が結晶構造や機能に大きく影響するため、結晶構造予測に要する計算量の削減が求められています。                                                                                                                                                     |
| 課題内容    | 量子アニーリング等の量子コンピューティングによる最適化を活用して、有機分子の結晶構造を予測するシステムを開発します。量子コンピューティングによる最適化により、分子の空間配置を決定する変数の最適な組み合わせを探索し、従来の古典計算機よりも大幅に計算量を削減します。これにより、薬剤の未知の最安定結晶の出現を事前に予測し、製造トラブルを未然に防ぐことを可能にします。また、理論的に設計された分子の結晶構造と機能の予測を行い、機能性材料の研究開発の効率を向上させます。                                                                                                                                                                                                                       |
| 量子技術例   | <ol style="list-style-type: none"><li>量子最適化<br/>組合せ最適化問題を効率的に解くことができるため、分子の空間配置の最適化問題に適用できる可能性があります。これにより、結晶構造予測の計算量を大幅に削減し、高精度な予測が可能になることが期待されます。</li><li>量子コンピュータを用いたシミュレーション<br/>量子コンピュータを用いたシミュレーションにより、分子の結晶多形のエネルギー差を詳細に分析し、最安定構造を予測する精度を向上させることが期待されます。結晶構造が実際にどのように形成されるかを詳細に理解し、新たな結晶構造の発見や予測に役立てることが期待されます。</li><li>量子機械学習<br/>量子機械学習アルゴリズムを用いることで、データ駆動型のモデルを構築し、膨大な分子データから結晶多形を予測するパターンやトレンドを効率的に学習できます。これにより、未知の結晶構造の探索を加速することが期待されます。</li></ol> |
| 期待される成果 | このシステムの開発により、製薬業界での薬剤の安定供給を支え、患者の安全性を確保することが期待されます。さらに、機能性材料の研究開発においても、分子設計の成功確度が高まり、競争優位性の向上に寄与します。量子コンピューティングによる最適化の特性を活用した計算量削減により、結晶構造予測の効率化と予測可能な分子の範囲拡大が可能となり、分子設計に革新をもたらします。                                                                                                                                                                                                                                                                           |
| キーワード   | 量子最適化、量子コンピュータを用いたシミュレーション、結晶構造予測、薬剤開発、創薬                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |

本課題は2024年12月の課題募集後に応募された追加課題であり、懸賞金交付等審査委員会にて審査中の課題です。正式採用是非は2025年8月頃に決定予定ですが、採用見込みがあるため、記載しております。