

第9回量子ソフトウェア社会人講座

FUJITSU

# 量子インスパイアードを軸にした社会実装可能な ユースケース紹介

2026年3月16日

富士通株式会社

Executive Director

岩井 大介



© 2026 Fujitsu Limited

# コンピューティング業界は何を追いかけてきたか

## ■ コンピュータに掛ける夢

あらゆる問題に一瞬で答えを出し決して間違わない何か  
その時々 of 過剰な期待に短期的に応えられたかは疑問  
時間をかけて夢を実現したことは間違いない

## ■ ただ、従来の延長線上の夢は終焉を迎えつつある

■ 延長線上ではないもの・・・

■ 人工知能（AI）、量子コンピュータ・・・

■ デジタルアニーラ（量子インスパイアード）

Q-STAR 最適化・組合せ問題  
に関する部会の取組み

量子インスパイアード技術  
社会実装可能なユースケース紹介

# 最適化・組合せ問題に関する部会

## 【概要】

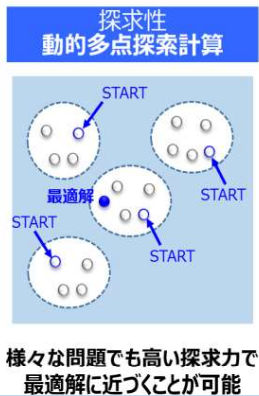
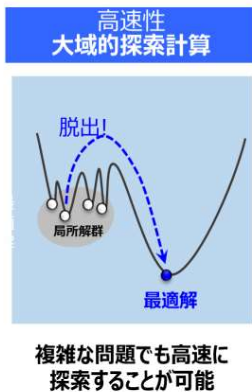
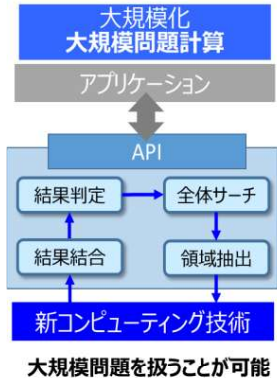
社会実装が進んでいるイジングマシン（量子インスパイアード）を用いて、**産業分野の様々な課題解決**を目指す部会。

イジングマシンは、汎用コンピュータでは計算が困難な組合せ最適化問題を瞬時に計算可能であり、また将来的に実現が期待されているゲート型量子コンピュータに先んじて、**いち早く多ビット化を実現しているため実問題への適用が可能**。実社会の複雑な問題をイジングモデルに数式化し、膨大な組合せの中から最適解を瞬時に算出し、**リアルタイム予測、効率化、最適化等の問題**を解くことで、**製造、物流、金融、材料開発等の様々な分野**で活用されています。

## 【事例】

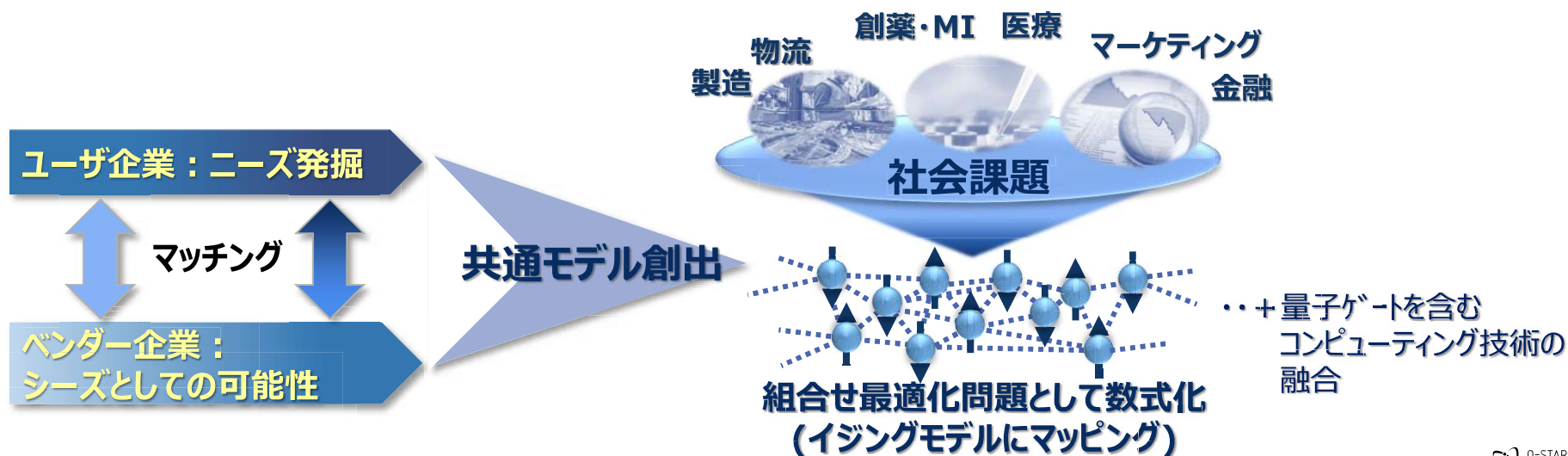
大規模問題計算、高速探索計算、多点探求計算等を行い、組合せ最適化問題の実問題への適用が可能。

・医療、創薬・材料、物流・交通、製造、金融、情報等の分野における課題を最適化問題に落とし込み、社会実装可能なレベルの**ユースケース創出**を行っています。



# 最適化・組合せ問題に関する部会：活動概要

- 量子インスパイアード、量子アニーリング技術を用いて産業分野の様々な課題解決を目指す部会
- 製造、物流、金融、材料開発等の様々な分野の課題抽出、**組合せ最適化問題として捉え、ユースケース仮説立案・検証**を行うことで、**量子技術の産業化を加速させ、量子産業の裾野を拡大する**
- ユーザ企業44社、ベンダ企業7社、合計51社、171名が参加（2025.12.11時点）



# ユースケース例

## 有機分子の結晶構造予測

材料・創薬：有機分子の結晶構造予測

**解決すべき課題**

- 計算コストに期間が大きい（大規模計算がまだできない）

**期待される効果**

- 開発コストと期間の削減
- 探索空間拡大による新規材料創出

**ユースケース概要**

- 個体有機分子の膨大な組合せから、多数の適切な密度の結晶構造を短時間で発生させる
- インクジェット・HPC・量子ゲート技術の組合せによる量子化学計算（計算科学）の高速化、インクジェット・AIの組合せを活用し積層材料の絞り込みを行う

**QRAMI**  
Business 「新規機能材料探索」

**実現イメージ** 実現目標時期：2030-40年

**メトリック**

メトリック	評価
新規性	4 (1: 既存の改良 - 5: 全く新しい)
達成困難度	4 (1: 極めて容易 - 5: 極めて困難)
社会貢献度	5 (1: 特定業種のみ - 5: 社会全体に貢献)
市場規模	5 (1: 100億円未満 - 2: 100億 - 1,000億円 - 3: 1,000億 - 1兆円 - 4: 1 - 10兆円 - 5: 10兆円以上)

## バーチャル患者モデル生成

材料・創薬：臨床予測のためのバーチャル患者モデルの生成

**解決すべき課題**

- 多様性に富んだバーチャル患者モデルを得ることが難しい（現在はランダムに探索し時間がかかっている）

**期待される効果**

- 幅広い患者層に対する薬効や安全性の予測精度が向上し、新薬開発の成功確率が高まることが期待される
- 臨床試験のデザインや被験者選択の最適化にも役立つ、開発コストの削減や開発期間の短縮にも繋がる可能性がある

**ユースケース概要**

- 仮想患者モデルを生成する際に、量子アニーリングを活用したブラクボックス最適化手法である、FMAアルリズムを適用する。QSPモデルのパラメータ空間から、多様性を最大化するような仮想患者モデルを探索することを目指す。得られた仮想患者集団を用いて、様々な患者層に対する薬効や安全性をシミュレーションし、臨床予測の精度向上を図る。

**QRAMI**  
Business 「仮想患者モデルシミュレーション」

**実現イメージ** 実現目標時期：2030-40年

**メトリック**

メトリック	評価
新規性	4 (1: 既存の改良 - 5: 全く新しい)
達成困難度	4 (1: 極めて容易 - 5: 極めて困難)
社会貢献度	5 (1: 特定業種のみ - 5: 社会全体に貢献)
市場規模	4 (1: 100億円未満 - 2: 100億 - 1,000億円 - 3: 1,000億 - 1兆円 - 4: 1 - 10兆円 - 5: 10兆円以上)

## 自然災害リスクレポート最適化

金融：自然災害リスクレポート最適化

**解決すべき課題**

- 短期的には自然災害激甚化に伴う顧客企業（保険契約者や融資先）の事業活動における不確実性の高まりや再保険マーケットの100円化
- 中長期的には気候変動による自然災害発生様式変化、それに伴う投資優先リスクの変化の影響把握（定量化）が課題

**期待される効果**

- 自然災害リスクの変化を考慮した適正なリスク分散

**ユースケース概要**

- 契約（保険）間のロスに相関あり
- リスク尺度は数百年に1度の大きな損害（VaR）
- 数百年に1度の大きな自然災害にも耐えつつ期待収益が最大となるポートフォリオを探索

**QRAMI**  
Business 「損害保険」

**実現イメージ** 実現目標時期：2025年

**メトリック**

メトリック	評価
新規性	3 (1: 既存の改良 - 5: 全く新しい)
達成困難度	4 (1: 極めて容易 - 5: 極めて困難)
社会貢献度	5 (1: 特定業種のみ - 5: 社会全体に貢献)
市場規模	3 (1: 100億円未満 - 2: 100億 - 1,000億円 - 3: 1,000億 - 1兆円 - 4: 1 - 10兆円 - 5: 10兆円以上)

## FMQAによる機械学習の特徴量選定

製造・物流：FMQAによる機械学習の特徴量選定

**解決すべき課題**

- 大量の車両番号から有効な特徴量の自動選択

**期待される効果**

- 機械学習においてFMQAで自動的に特徴量選択を行うことで、知識面による精度の差や工数を小さくすることができる。
- 古典的手法よりも高速かつ定期的に特徴量を選別するため、学習精度向上や新たな重要特徴量の発見が期待できる。

**ユースケース概要**

- 車両の設計・品質にかかわるデータ分析における、機械学習のための特徴量エンジニアリング

**QRAMI**  
Information 「センサーデータ、FMQA」

**実現イメージ**

**メトリック**

メトリック	評価
新規性	4 (1: 既存の改良 - 5: 全く新しい)
達成困難度	2 (1: 極めて容易 - 5: 極めて困難)
社会貢献度	3 (1: 特定業種のみ - 5: 社会全体に貢献)
市場規模	2 (1: 100億円未満 - 2: 100億 - 1,000億円 - 3: 1,000億 - 1兆円 - 4: 1 - 10兆円 - 5: 10兆円以上)

## トラック配送ルート最適化

製造・物流：トラック配送ルート最適化

**解決すべき課題**

- 大規模拠点を（多拠点）ルートの同時最適化

**期待される効果**

- トラック容量の有効利用によるトラック台数削減
- トラック台数削減による物流コスト削減
- トラック台数削減によるCO2排出量削減に寄与

**ユースケース概要**

- 2024年問題と呼ばれるトラックドライバー不足への対応。
- 複数のグループ会社やサプライヤーからの受取物流へと変えるために複数拠点同時のルート最適化を行う。
- かんばし方式などの制約を守りながらトラック台数削減を実現する。

**QRAMI**  
Business 「配送計画」

**実現イメージ** 実現目標時期：2025-28年

**メトリック**

メトリック	評価
新規性	2 (1: 既存の改良 - 5: 全く新しい)
達成困難度	3 (1: 極めて容易 - 5: 極めて困難)
社会貢献度	3 (1: 特定業種のみ - 5: 社会全体に貢献)
市場規模	2 (1: 100億円未満 - 2: 100億 - 1,000億円 - 3: 1,000億 - 1兆円 - 4: 1 - 10兆円 - 5: 10兆円以上)

## 報酬発生型ルート案内システム

交通：報酬発生型ルート案内システム

**解決すべき課題**

- リアルタイム計算

**期待される効果**

- 渋滞緩和（全体最適として）
- 渋滞によるエネルギー損失の低減
- 時間効率化による経済活動の活性化
- 渋滞緩和によるCO2排出量削減に寄与

**ユースケース概要**

- 渋滞状況や非行経路を的確に把握して迂回非行の経路や車種に応じた動的なルート案内を実現し、高速道路や一般道における渋滞解消や環境保全地域CO2排出量削減に寄与する。
- ルート案内に際しては工ポイント実行機能を導入し、人々の行動変容を促す。

**QRAMI**  
Business 「交通最適管理」

**実現イメージ** 実現目標時期：2030-40年

**メトリック**

メトリック	評価
新規性	4 (1: 既存の改良 - 5: 全く新しい)
達成困難度	4 (1: 極めて容易 - 5: 極めて困難)
社会貢献度	5 (1: 特定業種のみ - 5: 社会全体に貢献)
市場規模	3 (1: 100億円未満 - 2: 100億 - 1,000億円 - 3: 1,000億 - 1兆円 - 4: 1 - 10兆円 - 5: 10兆円以上)

# 交通：報酬発生型ルート案内システム

## 解決すべき課題

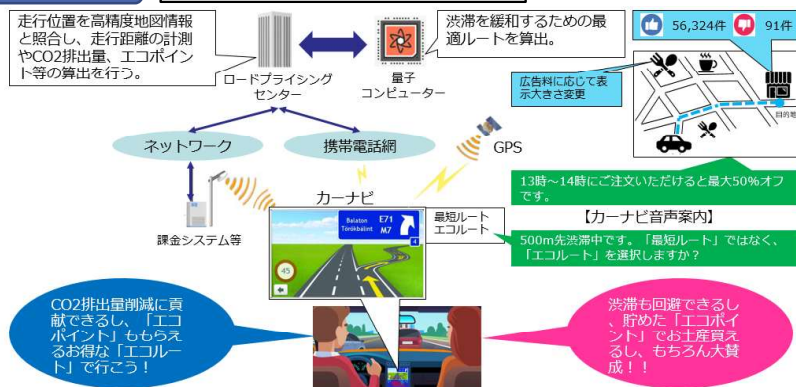
- リアルタイム計算

## ユースケース概要

- 渋滞状況や走行経路を的確に把握して迂回走行の状態や車種に応じた動的なルート案内を実現し、高速道路や一般道における渋滞解消や環境保全地域のCO2排出量削減に寄与する。
- ルート案内に際してはエコポイント発行機能を導入し、人々の行動変容を促す。

## 実現イメージ

実現目標時期：2030-40年

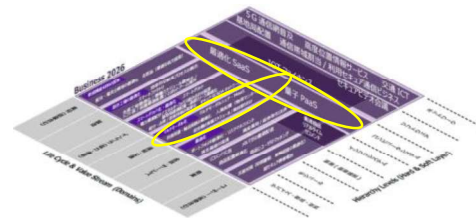


## 期待される効果

- 渋滞緩和（全体最適として）
- 渋滞によるエネルギー損失の低減
- 時間効率化による経済活動の活性化
- 渋滞緩和によるCO2排出量削減に寄与

## QRAMI

Business 「交通量適正管理」



メトリック	評価
新規性	4 (1: 既存の改良 - 5: 全く新しい)
達成困難度	4 (1: 極めて容易 - 5: 極めて困難)
社会貢献度	5 (1: 特定業種のみ - 5: 社会全体に効果)
市場規模	5 (1. 100億円未満 2. 100億~1,000億円 3. 1,000億~1兆円 4. 1~10兆円 5. 10兆円以上)

# 製造・物流：FMQAによる機械学習の特徴量選定

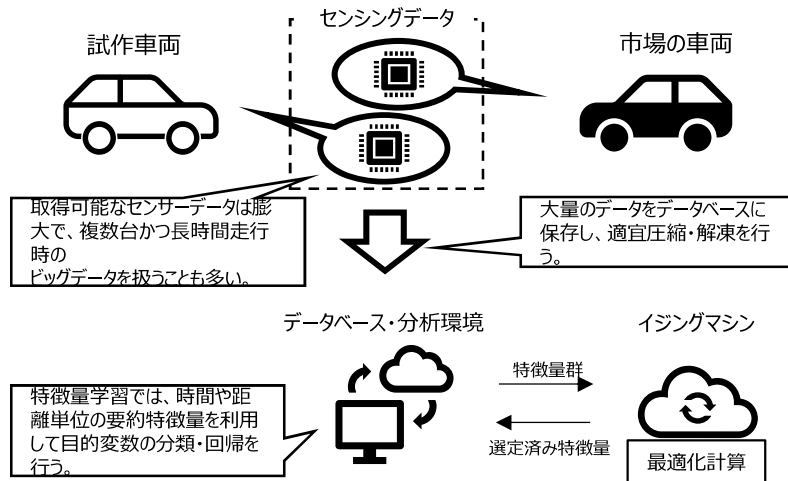
## 解決すべき課題

- 大量の車両信号から有効な特徴量の自動選択

## ユースケース概要

- 単向の設計・品質にかかわるデータ分析における、  
機械学習のための特徴量エンジニアリング

## 実現イメージ

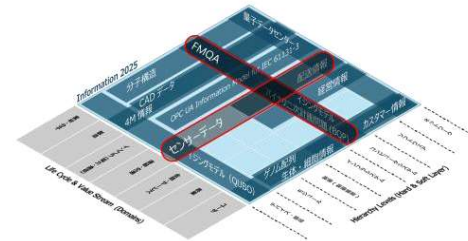


## 期待される効果

- 機械学習においてFMQAで自動的に特徴量選択を行うことで、知識量による精度の差や工数を小さくすることができる。
- 古典的手法よりも高速かつ網羅的に特徴量を選別するため、学習精度向上や新たな重要特徴量の発見が期待できる。

## QRAMI

### Information 「センサーデータ、FMQA」



メトリック	評価
新規性	4 (1:既存の改良 - 5:全く新しい)
達成困難度	2 (1:極めて容易 - 5:極めて困難)
社会貢献度	3 (1:特定業種のみ - 5:社会全体に効果)
市場規模	2 (1. 100億円未満 2. 100億~1000億円 3. 1000億~1兆円 4. 1~10兆円 5. 10兆円以上)

# 材料・創薬：臨床予測のためのバーチャル患者モデルの生成

## 解決すべき課題

- 多様性に富んだバーチャル患者モデルを得ることが難しい  
(現在はランダムに探索し時間がかかっている)

## ユースケース概要

- 仮想患者モデルを生成する際に、量子アニーリングを活用したブラックボックス最適化手法である、FMAアルゴリズムを適用する。QSPモデルのパラメータ空間から、多様性を最大化するような仮想患者モデルを探索することを目指す。得られた仮想患者集団を用いて、様々な患者層に対する薬効や安全性をシミュレーションし、臨床予測の精度向上を図る。

## 期待される効果

- 幅広い患者層に対する薬効や安全性の予測精度が向上し、新薬開発の成功確率が高まることが期待される
- 臨床試験のデザインや被験者選択の最適化にも役立ち、開発コストの削減や開発期間の短縮にも繋がる可能性がある

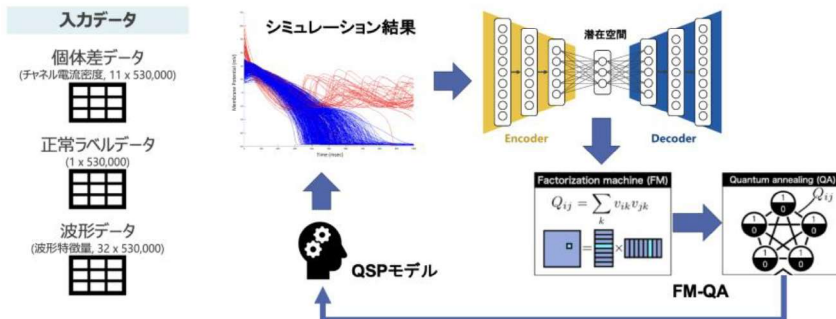
## QRAMI

### Business 「仮想患者モデルシミュレーション」



## 実現イメージ

実現目標時期：2030-40年



メトリック	評価
新規性	4 (1: 既存の改良 - 5: 全く新しい)
達成困難度	4 (1: 極めて容易 - 5: 極めて困難)
社会貢献度	5 (1: 特定業種のみ - 5: 社会全体に効果)
市場規模	4 (1. 100億円未満 2. 100億~1,000億円 3. 1,000億~1兆円 4. 1~10兆円 5. 10兆円以上)

# 金融：自然災害リスクポートフォリオ最適化

## 解決すべき課題

- 短期的には自然災害激甚化に伴う顧客企業（保険契約者や融資先）の事業活動における不確実性の高まりや再保険マーケットのハード化
- 中長期的には気候変動による自然災害発生様式変化、それに伴う投融資先リスクの変化の影響把握（定量化）が課題

## ユースケース概要

- 契約（銘柄）間のロスに相関あり
- リスク尺度は数百年に1度の大きな損害（VaR）
- 数百年に1度の大きな自然災害にも耐えつつ期待収益が最大となるポートフォリオを探索

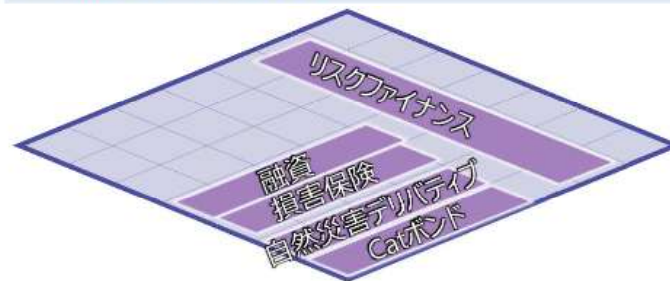
実現目標時期：2025年

## 期待される効果

- 自然災害リスクの変化を考慮した適正なリスク分散

## QRAMI

### Business 「損害保険」

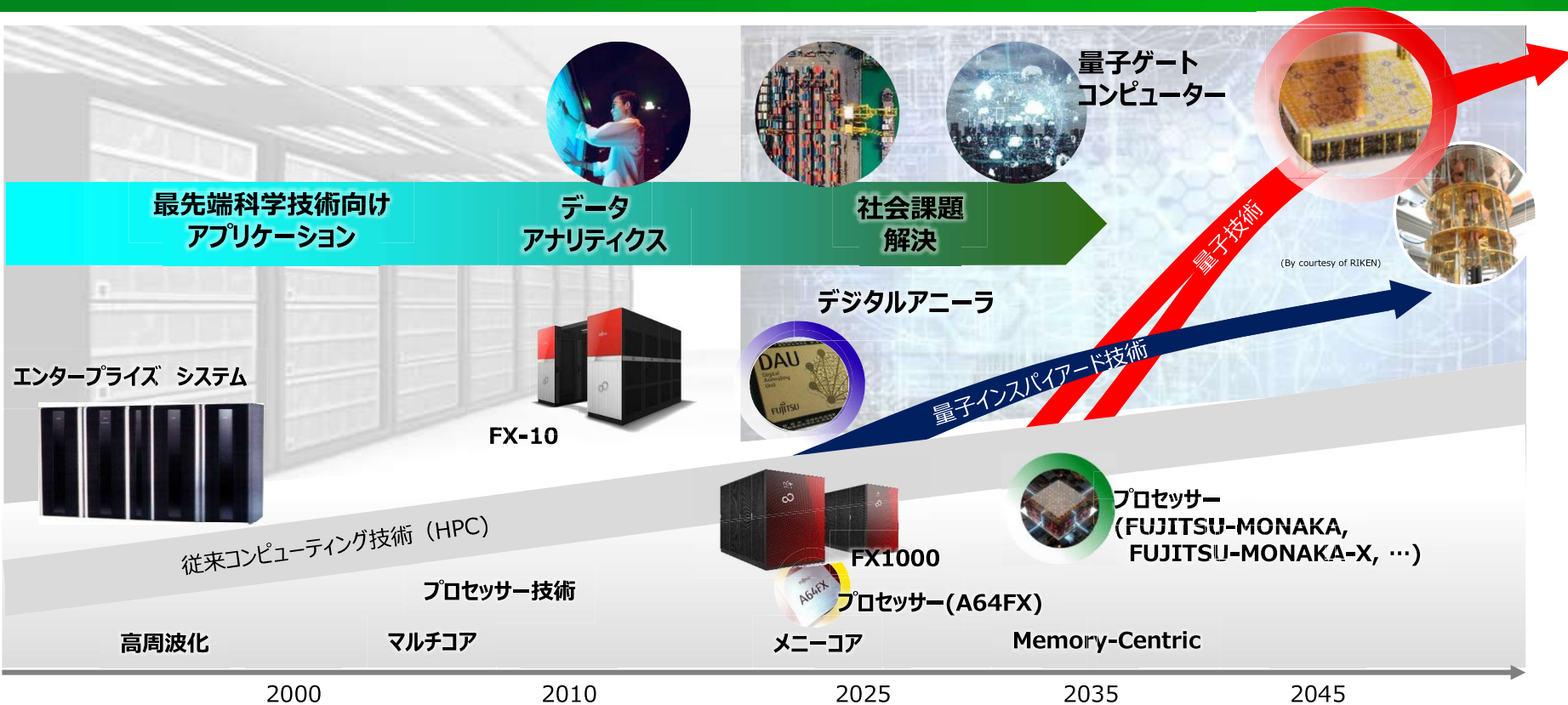


メトリック	評価
新規性	3 (1: 既存の改良 - 5: 全く新しい)
達成困難度	4 (1: 極めて容易 - 5: 極めて困難)
社会貢献度	5 (1: 特定業種のみ - 5: 社会全体に効果)
市場規模	3 (1. 100億円未満 2. 100億~1,000億円 3. 1,000億~1兆円 4. 1~10兆円 5. 10兆円以上)

Q-STAR 最適化・組合せ問題  
に関する部会の取組み

量子イノベーション技術  
社会実装可能なユースケース紹介

# コンピューティングの変遷



# デジタルアニーラ(量子インスパイアード)と量子コンピュータ FUJITSU

## ■ デジタルアニーラ

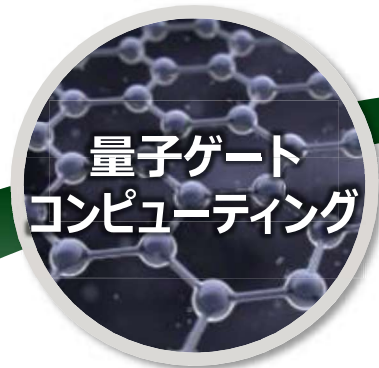
- 物理学の磁性体簡易モデルであるイジングモデルの最適化問題に特化したコンピューティング
- 組合せ最適化問題に能力を発揮

## ■ 量子コンピューティング

- 有望なコンピューティング候補



汎用コンピューティング



### 組合せ最適化問題適用分野



物流・製造分野



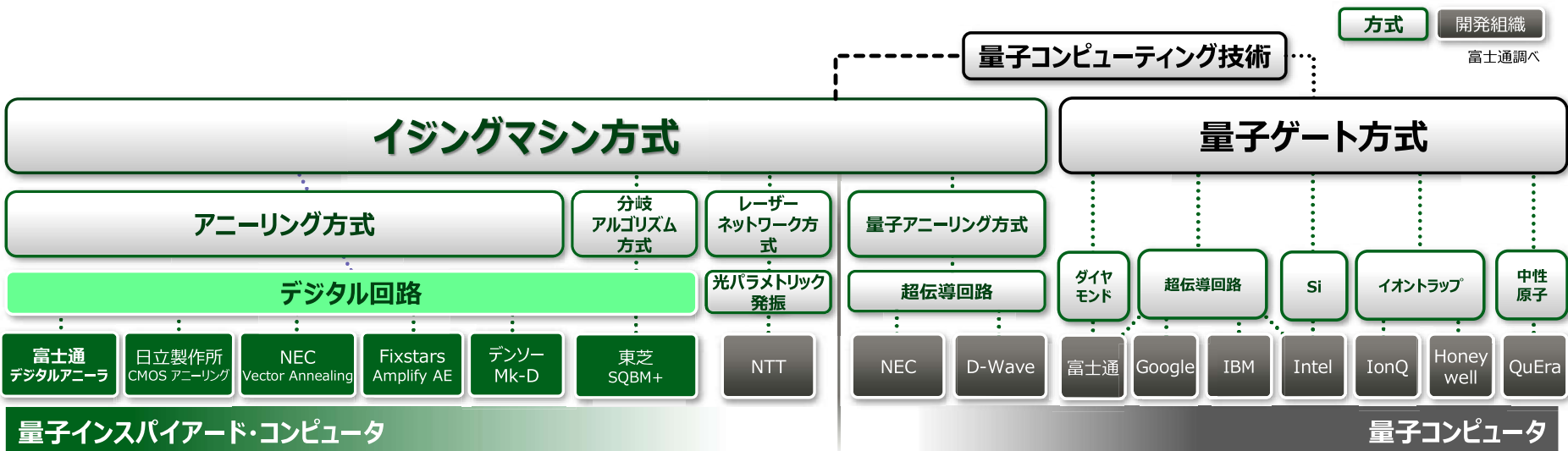
創薬・材料分野



金融分野

# 量子コンピューティング技術

- イジングマシン方式の多くは、量子インスパイアード、日本が先行
- 量子ゲート方式は、各社開発途上（規模、誤り耐性）

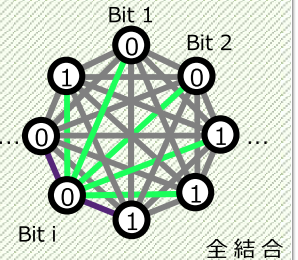


## 量子アニーリング

- 厳密解が保証される
- 量子状態維持のため超低温冷却の大型装置が必要（超低温動作、大規模化が困難）
- 量子ビットが物理結合であり、結合数が少ない（複雑な実問題を求解できない）

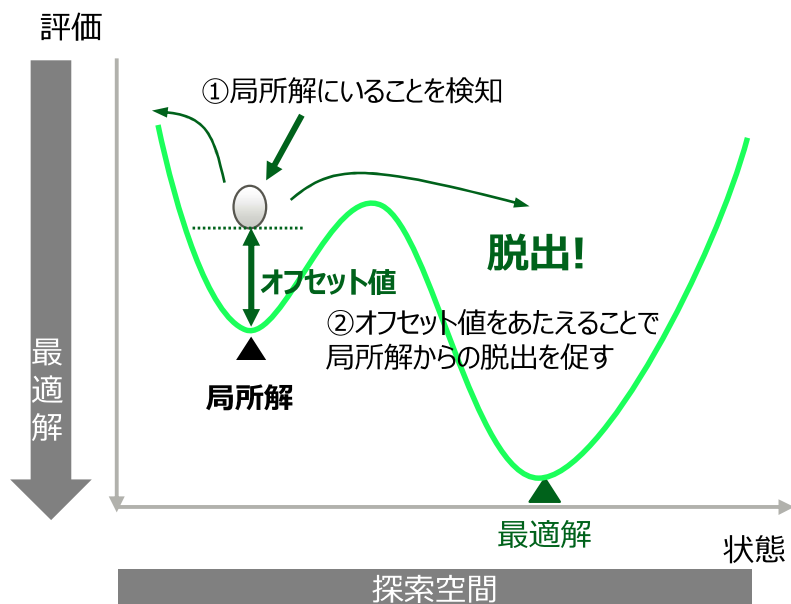
## 量子インスパイアード

- 厳密解は保証されない
- シリコン半導体のため小型化が容易（室温動作、大規模化が可能）
- 全結合アーキテクチャを採用し、
- 結合精度が高い（複雑な組合せ最適化問題を求解できる）



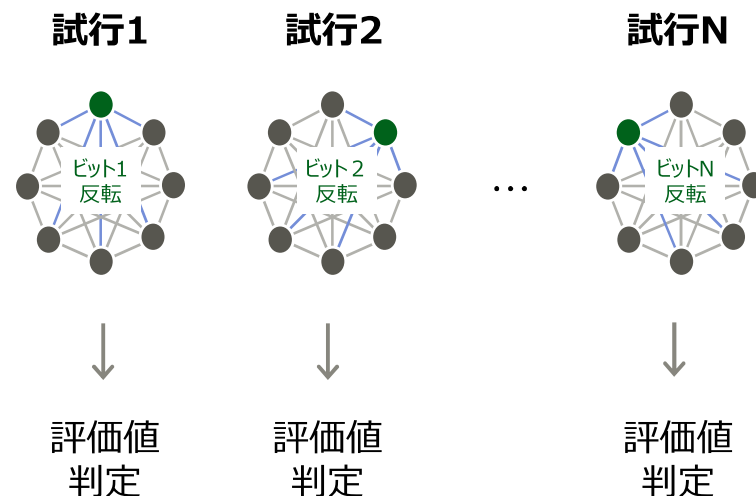
量子インスパイアードは既存のシリコン半導体技術をベースに実問題を解決

## 最適解に導く確率を高める



オフセット値を与えることで局所解からの脱出を促し、最適解を導く。

## 並列評価により高速に最適解を求める



並列的に反転させるビットを評価することで高速に最適解を導く。

# デジタルアニメーラで「組合せ最適化問題」を解く手順①

巡回セールスマン問題

各都市を必ず1回だけ通るという制約のもとで、距離が最小となる巡回ルート（最短経路）を見つける問題

## 1. 解きたい問題の最適解(最適値)を定義する

一番総距離が短い経路



最適解(最適値)<sup>\*</sup>:最短経路

※何を最適解(最適値)とするか 巡回セールスマン問題においては、最短経路(=最小値)であるが、問題によっては最大値が最適解になることもある。

NEXT

最短経路を導くには何の情報と何の情報を  
組合せれば求められるのか？

## 2. 変数/制約条件を定義する

最短経路を導くには、

訪問する  
順番

訪問する  
都市

…巡回セールスマン問題  
における変数<sup>\*</sup>

を組合せれば求められる。

※何を変数とするか 最適解を決めたい要素を変数とする。  
巡回セールスマン問題においては、訪問する都市とその順番が変数となる。

各都市を必ず1回だけ通るという制約のもとで

この問題における制約条件

NEXT

最適解/変数・制約条件を定義した問題を  
デジタルアニメーラで解けるようにするには？

# デジタルアニーラで「組合せ最適化問題」を解く手順②

巡回セールスマン問題

各都市を必ず1回だけ通るという制約のもとで、距離が最小となる巡回ルート（最短経路）を見つける問題

## 3. デジタルアニーラで解ける数式をつくる

### 数式をたてるために、イジングモデルをつくる

イジングモデル：変数の「なし」「あり」を「0」「1」で表現できるようにしたモデル

訪問都市 (i, j)

訪問順 (t)	A市	B市	C市	D市	E市
	0	1	2	3	4
0	X <sub>00</sub>	X <sub>01</sub>	X <sub>02</sub>	X <sub>03</sub>	X <sub>04</sub>
1	X <sub>10</sub>	X <sub>11</sub>	X <sub>12</sub>	X <sub>13</sub>	X <sub>14</sub>
2	X <sub>20</sub>	X <sub>21</sub>	X <sub>22</sub>	X <sub>23</sub>	X <sub>24</sub>
3	X <sub>30</sub>	X <sub>31</sub>	X <sub>32</sub>	X <sub>33</sub>	X <sub>34</sub>
4	X <sub>40</sub>	X <sub>41</sub>	X <sub>42</sub>	X <sub>43</sub>	X <sub>44</sub>

**制約条件** 複数の都市に同時に滞在できない  
各都市を必ず1回だけ通る  
→各行/各列1つのみ選択可能

- ・黒い丸が1ビットを表す
- ・デジタルアニーラ第二世代では8192ビットまで対応

	A市	B市	C市	D市	E市
	0	1	2	3	4
0	0	1	0	0	0
1	1	0	0	0	0
2	0	0	0	1	0
3	0	0	1	0	0
4	0	0	0	0	1

①は、1番目にB市を訪問  
2番目にA市を訪問  
を意味する。

- ・1ビットは「0」(なし)が「1」(あり)になることができる
- ・何番目にどの都市を訪問するか(=最適解)を①で表せる。  
→デジタルアニーラで解ける問題になっている。

## 4. デジタルアニーラで解く

デジタルアニーラに式を投入  
→最適解(最適値)を確認

目的関数

$$E = \sum_{t,i,j} d_{ij} x_{ti} x_{(t+1)j} +$$

$t, i, j$  : 訪問する都市  
 $t$  : 訪問順

制約項

$$\alpha \sum_t \left( \sum_i x_{ti} - 1 \right)^2 +$$

**制約条件** 複数の都市に同時に滞在できない

$$\beta \sum_i \left( \sum_t x_{ti} - 1 \right)^2$$

**制約条件** 各都市を必ず1回だけ通る

# デジタルアニーラの適用領域

## 社会課題の解決を目指して



# ラストワンマイル配送最適化

## 小売業における配送計画最適化

### ラストワンマイル配送の DX により、 配送ルートに適正化し配送効率を向上

- ✓ ラストワンマイル問題を解消するために  
全国80カ所の配送センターで運用を開始
- ✓ 配送ルートの適正化により、ドライバーの労働  
時間が短縮
- ✓ CO<sub>2</sub>排出量削減など環境負荷軽減に貢献

お客様による発表：2024年 1月23日

<https://www.nitorihd.co.jp/news/items/be646b745964fc695a60d16fb229f480.pdf>



配送計画  
最適化

# 小売業における配送計画最適化

高速計算が可能な「配送最適化エンジン」に、小売業特有の条件を追加  
配送計画を自動化し、輸送費および人件費の削減可能

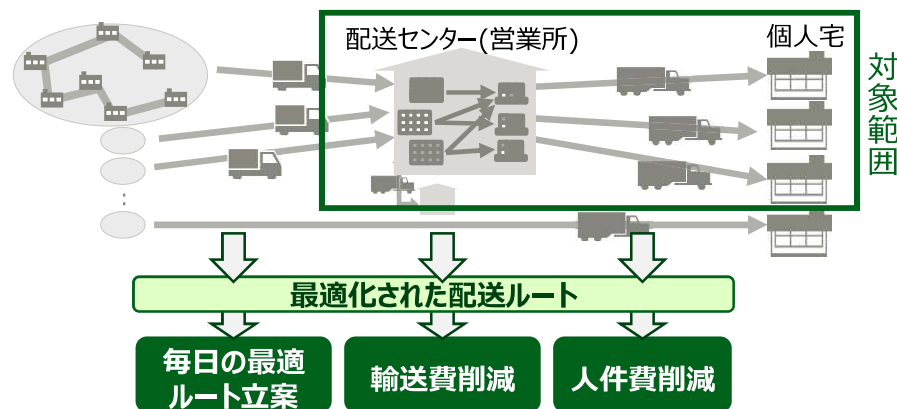
## 現状の課題

多量の配送を目標とする中、配送ルート作成業務を手作業で行っており、時間がかかる。また個人の知識と経験に頼っている。

- 配送件数増加への対応
- ルート作成業務の自動化
- オーダーと車両種別の割り当てを人手で対応
- 有料道路の考慮

## 課題への対応

- ✓ 膨大な配送ルートの組合せから高速計算により最適な配送ルートを立案
- ✓ 小売業固有の条件を取り組むことで、手作業による修正を軽減  
※ 有料道路情報、車両種別、作業者スキル、固有制約条件



# 車両混流生産順序最適化

1ラインで複数車種を生産する混流生産で  
車両の並びを平準化した生産順序を作成

- ✓ 従来手法では不十分であった平準化生産順序を実現
- ✓ 工場での作業効率低下は部品発注の非効率を回避するために、各工程における作業時間のばらつきは各制約条件を考慮し、車両並びを平準化
- ✓ 納期遵守、部品在庫低減、物流スペース低減

プレスリリース：2022年 10月21日

<https://pr.fujitsu.com/jp/news/2022/10/21.html>



自動車生産計画  
最適化

# 車両混流生産順序の最適化

## ■ 工程間での生産順序入れ替えを最小限に抑えた平準化を実現

### ■ 課題

- 混流生産では、工程間の制約条件が衝突するため「生産順序入替」が必要となり、納期が厳しくなる
- 入替工数・構内物流スペース増の課題

### ■ 狙い

- 最適化性能向上：納期遵守、部品在庫低減、物流スペース低減を図る
- 将来の変化変動への備え：最適化エンジン導入で工場のニーズ・特性に応じた生産順序立案する



# 搬出入最適化

## 自動車専用輸送船への車両の 積み付けプランを最適化

- 専門のプランナーが手作業で行っていた  
積み付けプラン作成業務を自動化
- 業務の効率化により、  
**年間4,000時間もの労働時間を削減**
- 急な計画変更への迅速な対応や、  
プランの品質バラツキの防止も実現



自動車積付  
最適化

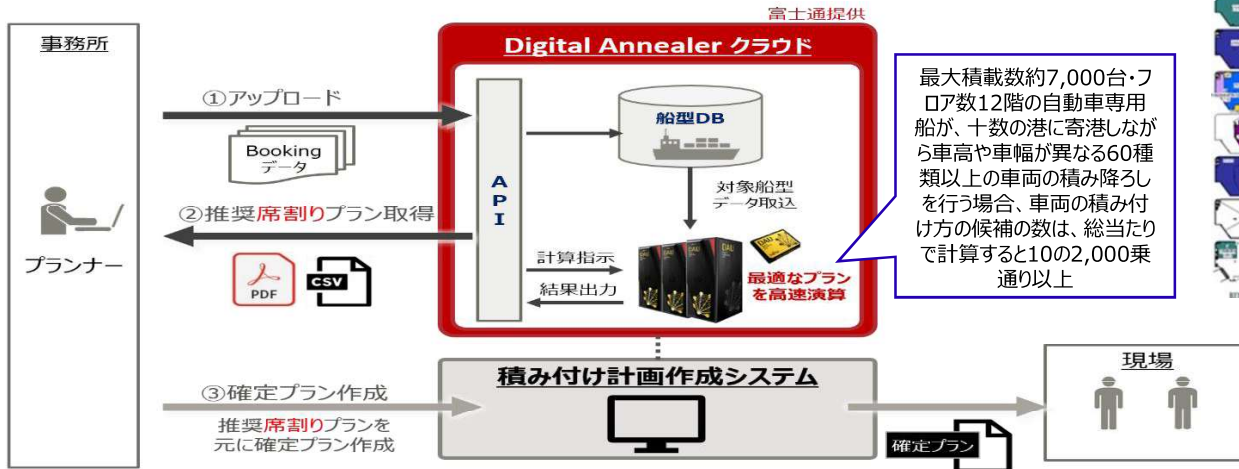
# 日本郵船様 実証事例

## ○自動車専用船の積み付け計画作成業務を効率化

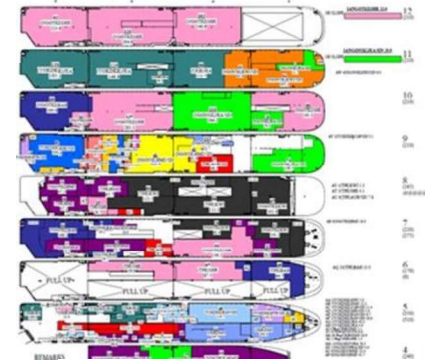
- 人手による積み付け計画作成作業を自動化，業務の効率化により労働時間を大幅に削減
- 急な輸送計画の変更に迅速に対応することが可能
- 経験値や技量による担当者ごとの積み付け計画の品質のバラつきを防止

入力データ

- ・積荷リスト  
(車種・数量)
- ・寄港プラン  
(積地・揚地)



出カプラン (席割りプランの例)



年間4,000時間以上の労働時間の削減を実現

# トポロジー最適化

## デバイス形状の広範囲 & 高速探索を支援

- ✓ 形状をビットマップ化してON/OFF組み合わせをデジタルアニーラで最適化
- ✓ 広域探索と低計算コストの両立を実現
- ✓ 磁気シールドの最適化に適用して、CAE解析回数を従来法の1/300に削減

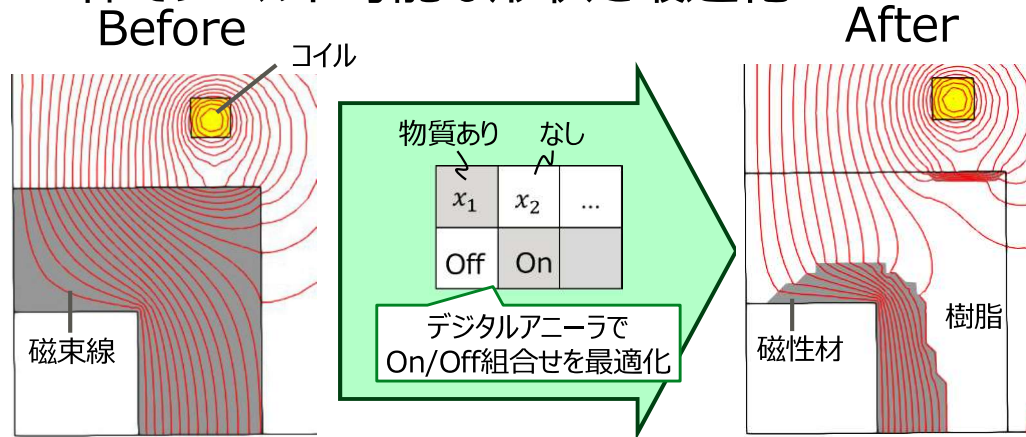


トポロジー  
最適化

# 部品設計最適化事例：磁気シールドのトポロジ最適化

## 人間の発想では到達しえないデバイスの最適形状を高速に探索

- コイルから発生する磁束線が対象領域に侵入しないように、出来るだけ少ない磁性体でシールド可能な形状を最適化



要求性能

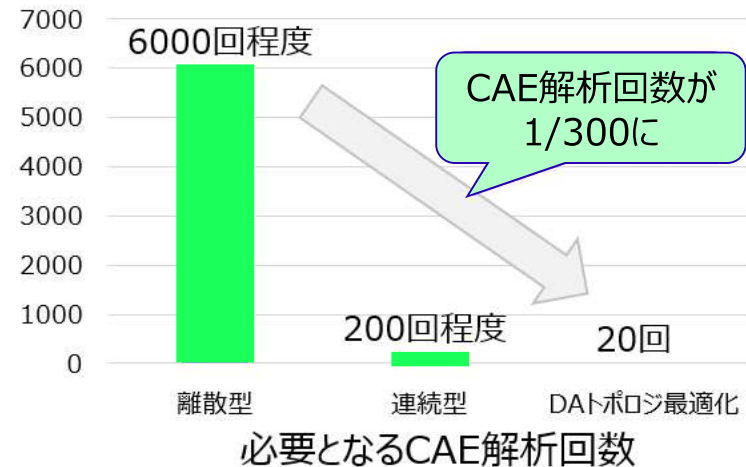
磁束線侵入量の最小化  
磁性材使用量の最小化



[https://www.ohtama.co.jp/products/shield\\_box.html](https://www.ohtama.co.jp/products/shield_box.html)

要求性能を満たしつつ  
低コスト・加工可能な形状を探索

## DAトポロジ最適化の効果



トポロジー最適化で課題であった  
形状の広範囲 & 高速探索が可能に

# バイパスキャパシタ配置最適化

## プリント回路基板のノイズ対策部品配置を最適化

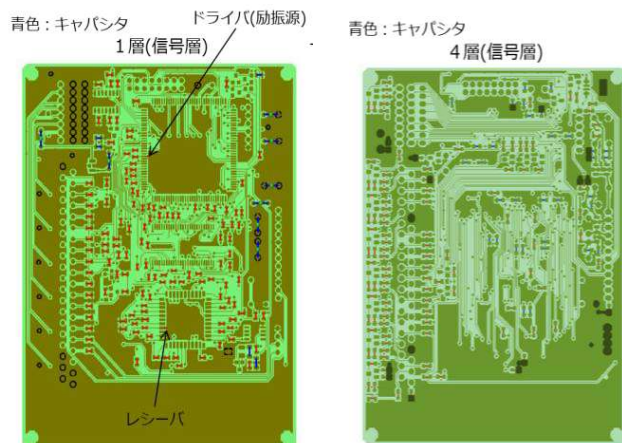
- ✓ 放射電界が最も小さくなるキャパシタ素子の組み合わせを求める
- ✓ キャパシタ素子を配置するか否かを0と1で表現しデジタルアニーラで構造最適化
- ✓ QUBO定式化式なしで実行可能(FM-DA手法)
- ✓ キャパシタ素子数を46個から9個に低減



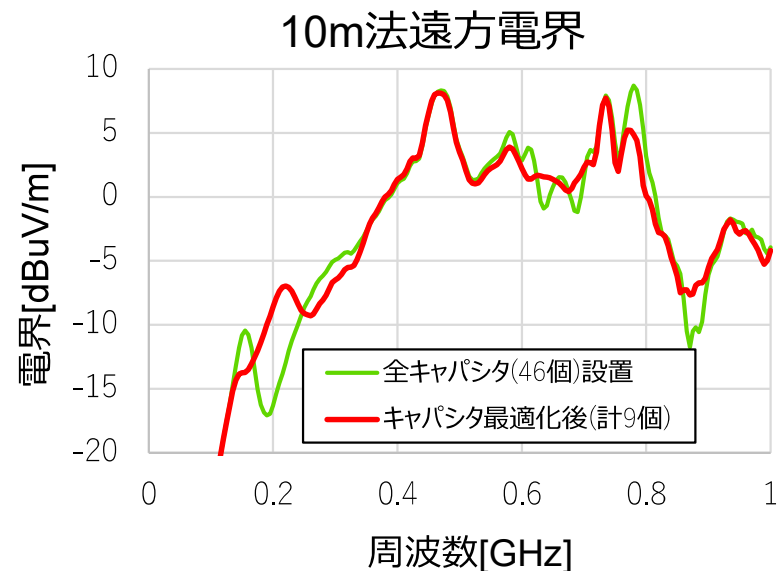
FM-DA  
最適化

# プリント基板のキャパシタ素子最適化

- 寸法 : 121 x 94 x 1 [mm]
- 層数 : 4層
- 解析規模 : 8580万格子 x 31万ステップ(50[ns])
- 出力結果 : 10m法放射電界(30MHz~1GHz)
- 最適化 : 電源層-GND層間に設定された**最大46個のキャパシタ**について、**放射電界の最大値が最小化する組み合わせを最適化**



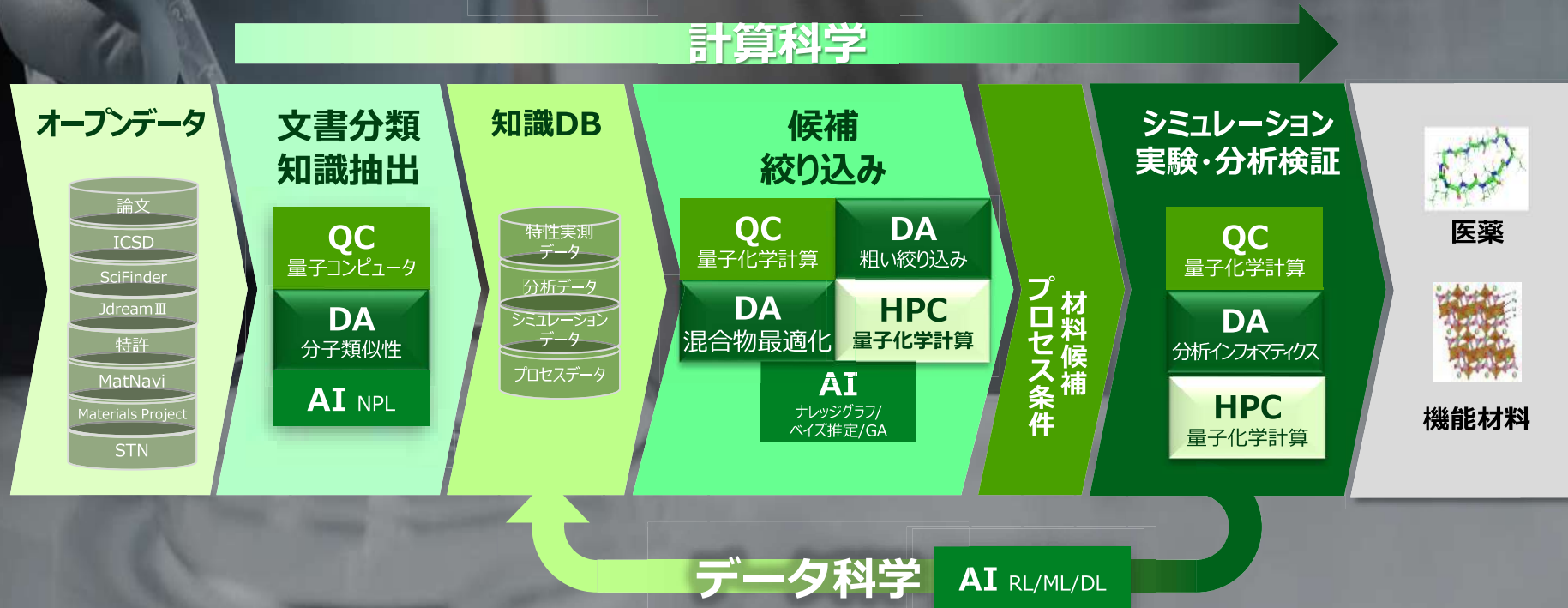
## DA×AI×HPCによる設計最適化



最大値を下げつつキャパシタ数を46→9に最適化

# Materials Informatics / Drug Discovery

量子インスパイアード（デジタルアニーラ）とのハイブリッドコンピューティングによる  
計算科学・データ科学の高速化

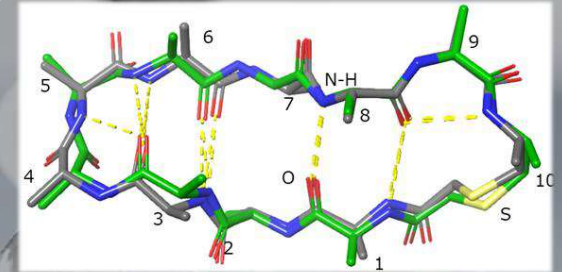


# 不可能であった中分子創薬の 計算を高精度で実現！

- ✓ **驚異的な精度(RMSD 0.73 Å)**で実験構造と計算構造を一致させることに成功。**一晩で高精度に計算**。中分子医薬候補探索の飛躍的効率化を実現。
- ✓ ペプチドリームから高評価。「高精度を維持し、探索時間の短縮化に挑戦しながら、革新的な新薬創出がこれまで以上に加速していくものと考えている」。
- ✓ **新型コロナウイルス感染症治療薬**に特化した合弁会社、**ペプチエイド株式会社**を**2020.11**に設立。新薬開発を加速。治療薬の開発候補化合物の**臨床研究**を**2022.3**に開始。

FUJITSU

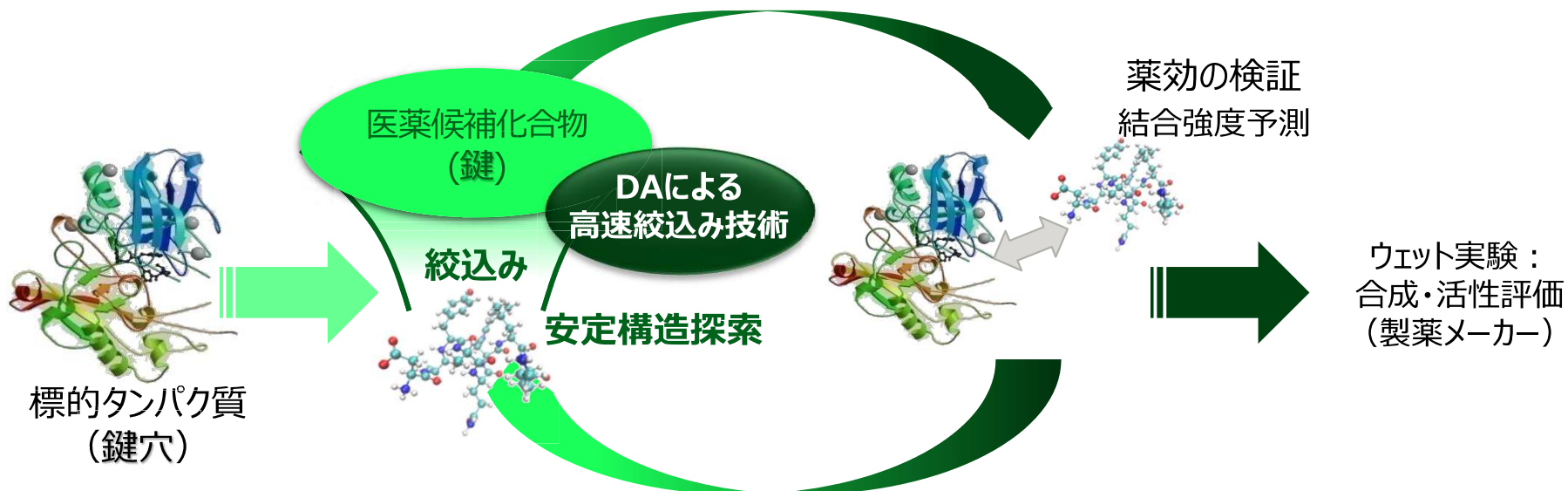
緑色：計算結果  
灰色：実験結果



環状ペプチドの実験構造と計算構造の比較  
**RMSD：0.73 Åの驚異的な精度で  
実験構造と計算構造が一致**  
RMSD(Root Mean Square Deviation)：平均二乗偏差

**新型コロナウイルス感染症治療薬を  
含む、新薬の開発を加速**

# IT創薬プロセスと課題



低分子医薬(アミノ酸2~4個)でのIT創薬活用は進みつつあるが……

- 低分子医薬(アミノ酸2~4個)から副作用のリスクが低い中分子医薬(アミノ酸5~50個)へシフト
- 中分子医薬候補の安定構造探索は、計算量の爆発的な増加により、困難

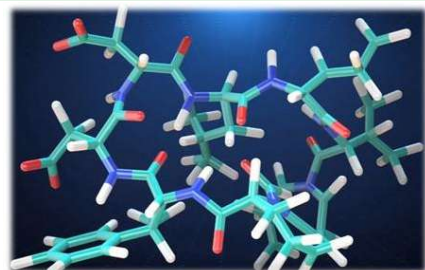
低分子：天然のアミノ酸3個の配列種類は：4200

中分子：天然のアミノ酸15個の配列種類は： $\sim 1.6 \times 10^{19} = 1,600$ 京

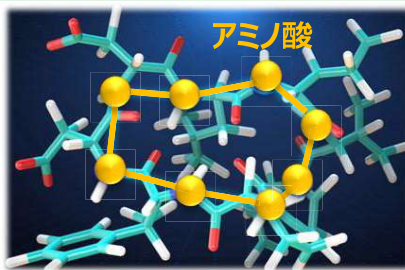


DAによる  
高速絞込み技術

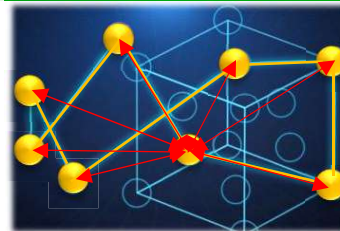
# デジタルアニーラによる安定構造探索



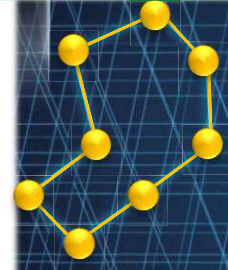
中分子環状ペプチド



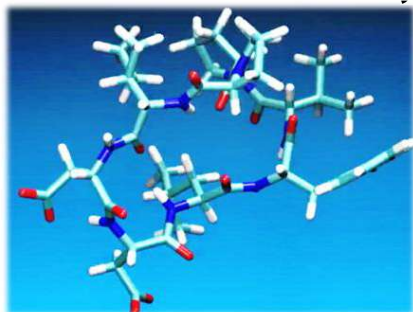
アミノ酸で括って粗視化  
アミノ酸間の相互作用をAIでモデル化



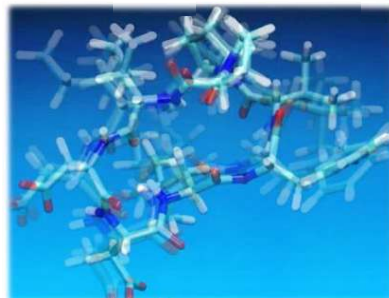
アミノ酸を格子点に配置し  
アミノ酸間の相互作用を考慮  
デジタルアニーラで構造探索



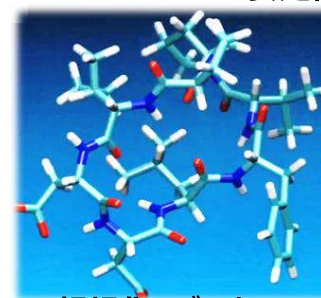
デジタルアニーラで求めた  
安定構造



求めた安定構造  
(実験構造と1Å以下で一致)



HPCによる  
精細構造探索



粗視化モデルを  
全原子モデルに戻す

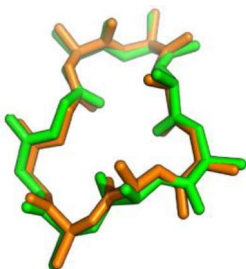
AI・デジタルアニーラ・HPCの連携計算により高速かつ高精度な中分子安定構造探索を実現  
粗視化の単位を工夫すれば、他の電池など他材料への展開も可能

# ①-1 安定構造探索の検証結果 (1)

## 最も頻繁に現れる構造群が、NMR実測構造を再現

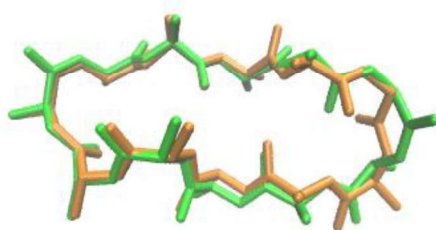
オレンジ：実測構造  
グリーン：最頻クラスターセンター

PDB : 6AWK  
(8残基)



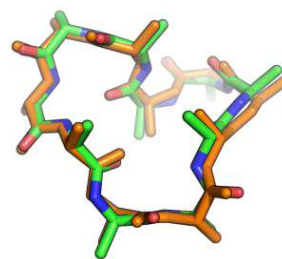
水中での実測構造と  
最頻クラスターセンターとの  
RMSD: 0.41 Å

CSD : 1138505  
(シクロスポリンA, 11残基)



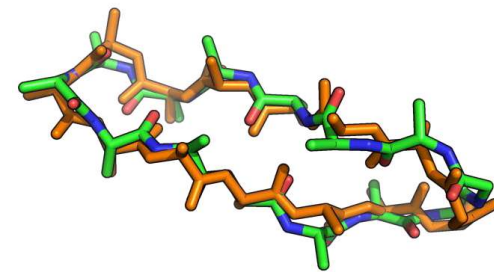
クロロホルム中での実測構造と  
最頻クラスターセンターとの  
RMSD: 0.87 Å

PDB : 6BEQ  
(10残基)



水中での実測構造と  
最頻クラスターセンターとの  
RMSD: 0.30 Å

PDB : 2KDQ  
(14残基)

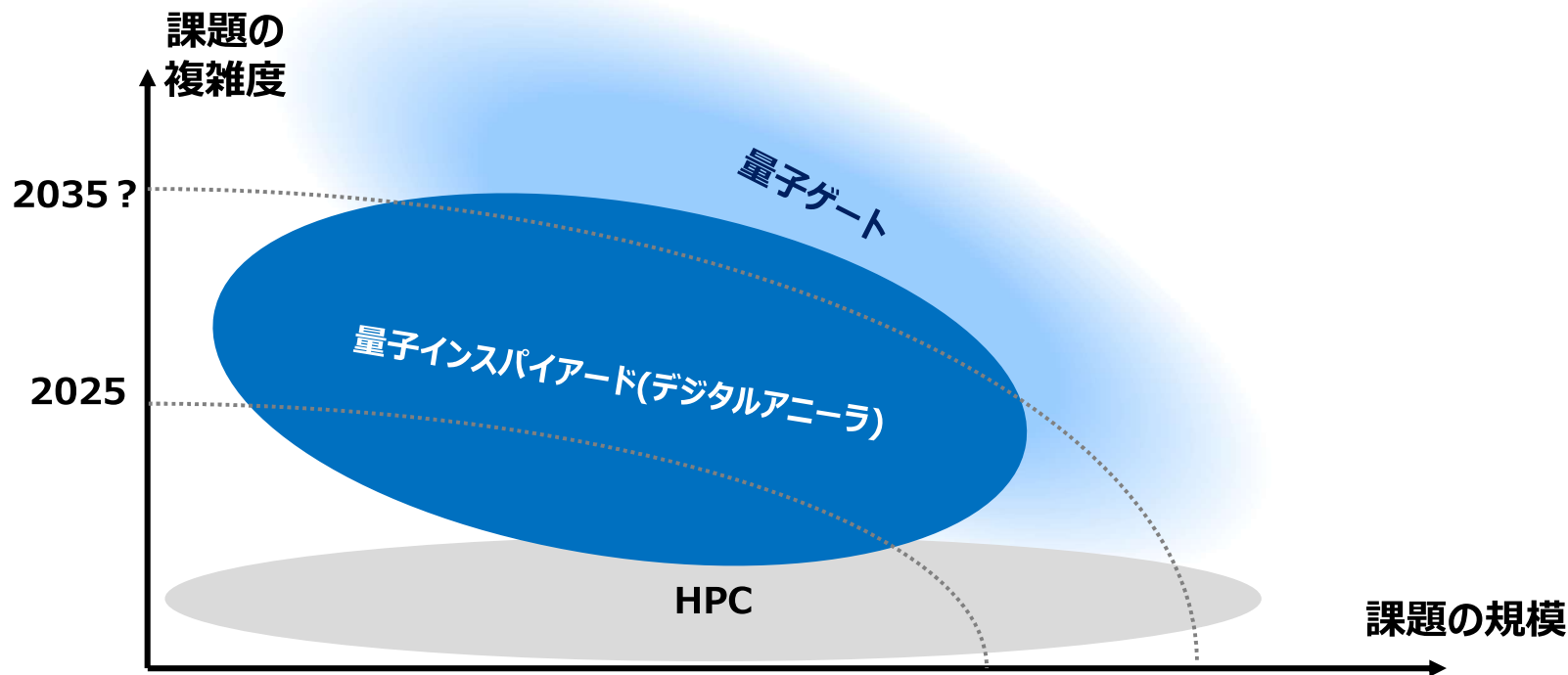


水中での実測構造と  
最頻クラスターセンターとの  
RMSD: 1.02 Å

極性・非極性溶媒中の双方とも、探索構造がNMR実測構造を再現

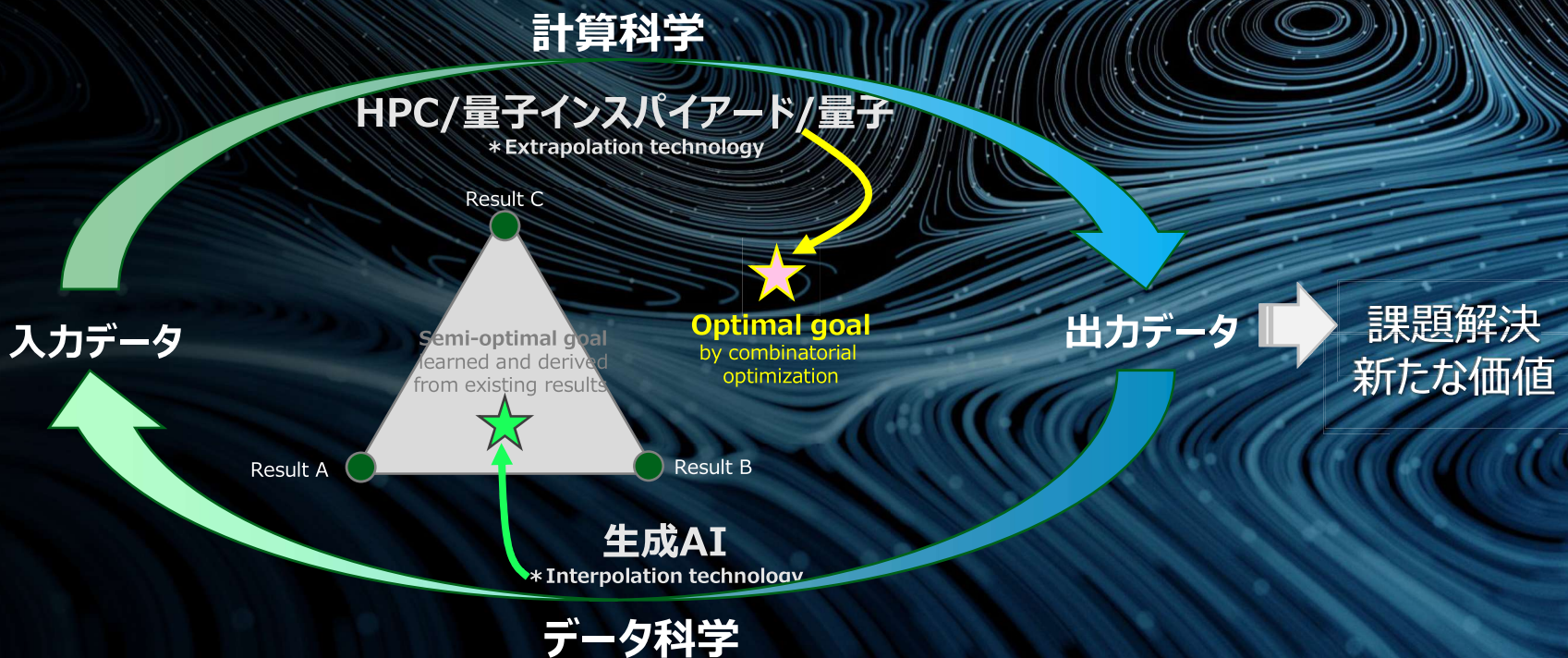
# これからのコンピューティング

## コンピューティング市場



# コンピューティング業界は何を追いかけていくか

- データ科学（生成AIも含むAI技術）により膨大なデータを活用した社会課題解決
- 計算科学（HPC/量子インスパイアード/量子のハイブリッドコンピューティング）に社会課題をドラスティックに解決
- データ科学・計算科学のループが新たな課題を解決し、新たな価値を創造・・・



**Thank you**



**FUJITSU**