



Expert Insights

# 石油・化学産業における量子コンピューティングのユースケースの探求

化学物質設計方法および石油精製方法の変革



IBM Institute for  
Business Value



## 専門家



### Bob Parney博士

IBM Q インダストリー・コンサルタント、  
石油・化学業界、  
IBM Services  
<https://www.linkedin.com/in/bobparney/>  
Bob.Parney@ibm.com

Bob Parney博士は、IBM Qコンサルティング組織における石油・化学部門のリーダーであり、お客様の量子コンピューティングに関する戦略、アプローチ、具体的なユースケースの策定を支援している。30年以上にわたり、石油やガスにとどまらずさまざまな業界に携わり、技術チームを率いて石油とガスの貯留層の開発計画を指導し、多くのお客様に対して新技術を活用した戦略策定に関するコンサルティングを行ってきた経験を有する。



### Jeannette Garcia博士

量子アルゴリズム/アプリケーション/  
理論、シニア・マネージャー、  
IBMマスター・インベーター、IBM  
Research  
<https://www.linkedin.com/in/jeannette-garcia-114bb3113/jmgarcia@us.ibm.com>

Jeannette (Jamie) Garcia博士は、IBM Researchで量子のアプリケーション、アルゴリズム、および理論を担当する部門のシニア・マネージャーであり、IBM Research—Almadenのスタッフ・メンバーでもある。彼女のチームの研究課題の1つに、化学および材料の分野における実用的なアプリケーションのための量子アルゴリズムの開発と特性分析がある。



### David Womack

ディレクター、ワールドワイド石油・化学産業戦略およびエミネンス、  
IBM Industry Academyメンバー、  
IBM Industry Platform  
<https://www.linkedin.com/in/david-womack-4b81454/dmwomack@us.ibm.com>

David M. Womackは、IBMの石油・化学産業部門で戦略および事業開発を担当するグローバル・ディレクターを務めている。新たな市場やソリューションの機会を見だし、業界固有のソリューション・ポートフォリオの開発を管理し、事業拡大のための市場参入計画を実施して、それらの戦略に関係する重要なビジネス・パートナーとの提携を主導する役割を担っている。

古典コンピューターによる化学シミュレーションでは、分子間相互作用の複雑性が増すにつれて、計算精度が低下する。

## 要点

### 発見までの時間短縮

石油・化学企業が量子コンピューターを活用すると、新しい化学手法や化学物質の発見や開発に要する時間が短縮される可能性がある。

### 利幅の拡大

量子コンピューティングを活用することで、石油・化学企業は、原料輸送、精製、製品市場投入における最適なプロセスを見極めることで、その利幅を拡大できる可能性がある。

### クオラムアドバンテージの実現

量子コンピューティングを活用することではじめて創出可能な価値(クオラムアドバンテージ)は、その業界固有のアプリケーションを最初に開発した企業が独占的に享受する可能性がある。

## 量子コンピューティングの展望

携帯電話をどこかに置き忘れたことはないだろうか? 車の中か、会社か、スーパーで落としたか、とあれこれ思い悩んだに違いない。あるいは、簡単なアプリケーションを使って携帯電話の正確な場所を調べたこともあるかもしれない。この時、本当に知りたい情報は「正確な場所」であって、「あるかもしれない場所」ではない。我々の住む世界では、位置は明確に定義でき、この問題もクラウド上のアプリで簡単に解決できる。

しかし、位置の概念さえもあいまいな量子の世界で、状態間を遷移する1つの電子の影響を追跡しなければならないと考えるとどうだろうか? 電子が辿った可能性のあるあらゆる状態を、量子的に捉える必要があり、頭を抱えることになるだろう。このような状況において化学システムのモデリングに量子コンピューターを使用することの威力が発揮され始めるのである。

巨大分子における量子力学的系のエネルギー計算を行う際、電子の動きなどを含めたありとあらゆるパラメーターを用いて計算をしようとする、その計算は、従来のコンピューターでは手に負えないものとなる。そのため、産業上重要な多くの分子モデリングを用いた計算では不正確さが増したり、正確な解が出るまでに膨大な時間がかかったりする。

化学工業は、米国において国内総生産の7%(5.7兆米ドル)を占め、約1億2千万人も雇を生み出している。<sup>1</sup> 新たな化学製品を開発するためには費用も時間も掛けて研究を行う必要がある。現在でも、従来の化学シミュレーションは実験の役に立っているが、分子間相互作用の複雑性が増すにつれて、計算精度が低下する課題がある。

この種の問題解決能力という点で、量子コンピューティングが古典コンピューターよりも優れているのはなぜか?

## 量子の威力

分子の反応を理解するためには、分子の電子構造を明らかにすることが不可欠である。水素(H<sub>2</sub>)よりも分子量の大きい分子の場合、電子間相互作用や核効果などを正確に捉えて分子を数学的に記述しようとする、大きい分子ほど複雑になる。実際、電子間相互作用の完全な計算を従来のアルゴリズムで実行すると、計算量は分子量の増加に対して指数関数的に増えてしまう。しかし、量子アルゴリズムを用いる場合、その性質から、計算量は多項式的な増え方になると予測されている。このことから、現時点では正確な実行が不可能と考えられている分子の計算が、将来的には可能になると期待される。



## 十分な性能の量子コンピューターが開発されれば、量子化学シミュレーションが従来のソリューションを凌駕する。

例えば、単純な炭化水素、ナフタレン(C<sub>10</sub>H<sub>8</sub>)は、116量子ビット以下でモデル化できるが、古典コンピューターでは同じ処理に10<sup>34</sup>ビットが必要になる。<sup>2</sup>ちなみに、10<sup>34</sup>ビットとは、2025年までに保存されると予測される全データ量(約175ゼタバイト)の71億倍である。<sup>3</sup>

量子コンピューティングは、化学物質の設計方法や、炭化水素の精製方法、石油貯留層の発見や採掘の方法を変革する可能性がある。量子コンピューティングは今後数年のうちに、新しい化学製品開発における市場投入サイクルを短縮させ、厳格化する環境規制をふまえた投資戦略を再立案し、利益に直結するような輸送、精製、化学プラントのプロセスなどの複雑なシステムの最適化を可能にする可能性がある。

いずれは、量子コンピューターによる貯留層シミュレーションや地震探査処理も可能になるかもしれない。つまり、量子コンピューティングが、石油・化学業界の状況を根本から変革することが予想される。

## 量子コンピューティングの導入を急がなければならない理由

現在は量子コンピューティングの威力が見え始めたばかりの状況であるが、石油・化学企業が今すぐ行動を起こすことがいかに重要であるかを説明する。

十分な性能の量子コンピューターが開発されれば、量子化学シミュレーションが従来のソリューションを凌駕する可能性が高いことは既の実証されている。量子コンピューターを使用することで、企業は油田の発見や新しい化学物質の開発にかかる時間を大幅に短縮できる可能性がある。このことが、あなたの企業の収益とリスク・プロファイルに与える影響について考えてみてほしい。もし競合他社が先に行動を起こして成功したとしたら、それはあなたの企業にとって何を意味するだろうか。

## 量子コンピューティングのユースケースの検討

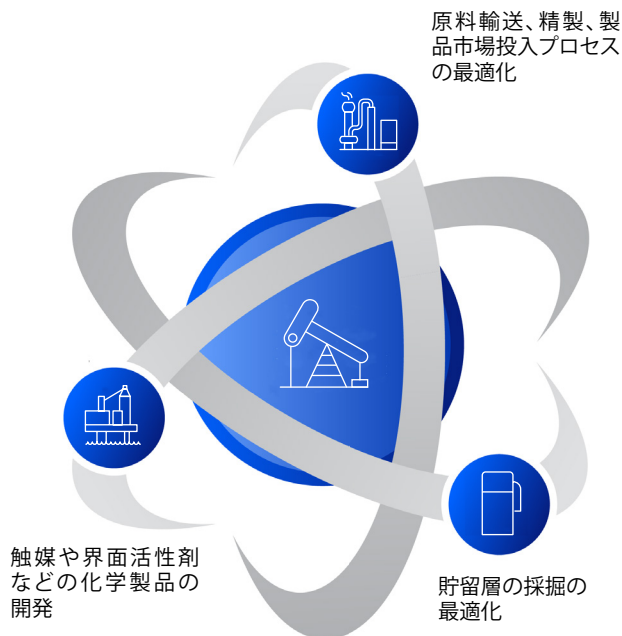
前述したように、石油・化学企業によって既に検討されている量子コンピューティングの有力な3つのユースケースは以下のとおりである(図1を参照)。

- 触媒や界面活性剤などの化学製品の開発
- 原料輸送、精製、製品市場投入プロセスの最適化
- 貯留層の採掘量の拡大

—

### 図1

石油・化学産業での量子コンピューティングのユースケース



出典: IBM Institute for Business Value.

## ユースケース1: 触媒や界面活性剤などの化学製品の開発

このユースケースのシナリオでは、石油・化学企業が量子コンピューターを使用するようになることで、新しい化学的手法や化学物質の発見や開発に要する時間が短縮される。量子コンピューターと古典コンピューターの併用アルゴリズムによる量子化学シミュレーションは既に行われている。

2017年には、IBMが一般公開している量子コンピューターでモデル化された水素化リチウム(LiH)と水素化ベリリウム(BeH<sub>2</sub>)に関する描写が雑誌「Nature」の特集記事で取り上げられた。<sup>4</sup> 近い将来、石油・化学産業の課題の解明に対してこれらと同じハイブリッド法を応用できるようになるかもしれない。CO<sub>2</sub>排出削減のための新しい触媒や、回収量を向上させるための新しい界面活性剤の発見などへの応用が考えられる。こうした可能性から、「化学」の領域は量子コンピューティングの「キラー・アプリ」だと考える人が出てきている。<sup>5</sup>

## ユースケース2: 原料輸送、精製、製品市場投入の最適化

驚かれるかもしれないが、分子モデリングに採用されているものと同様の(ハミルトニアンを使用した)手法が、輸送、サプライ・チェーンのロジスティクス、投資ポートフォリオの最適化といったさまざまな最適化問題の解決にも転用できる。<sup>6</sup>

このユースケースのシナリオでは、量子コンピューティングの導入により、石油・化学企業が、原料輸送、精製、製品市場投入プロセスの最適な組み合わせを見極めることで、その利幅を拡大する。精製への影響は、オクタン価に起因する推定年間事業損失額として把握することができる。2018年のこの額は、110億米ドルに上った。これは、精油業の総利益の38パーセントに当たる。<sup>7</sup>

## 洞察: ビットと量子ビット

古典コンピューティングでは、ビットが情報の基本単位であり、コーディングの中で表せる状態は、「0」または「1」の2つのみである。

これに対し、量子ビット(キュービットともいう)は、「0」と「1」を重ね合わせた状態(数学的には2つの状態の線形結合として表わされる)をとるため、古典ビットよりも多くの情報を表すことができる。

また、量子ビットは互いにもつれることが可能である。量子ビットのもつれとは、一方の量子ビットに対する演算がもう一方の量子ビットの状態と結合することをいう。この2つの量子ビットの性質と、振幅増幅などの技術とを組み合わせることで、量子コンピューターの際立った計算能力が実現されている。

## 量子コンピューティングが、地下流体力学の理解と貯留層シミュレーションに革新をもたらす。

### 慶応ハブ・パートナー: 量子コンピューティングの探索

量子コンピューティングを使用した化学アプリケーションを探索するために、日本の化学企業JSRおよび三菱化学は量子コンピューティング・エコシステム(日本の慶応大学にあるIBM Qのハブ)に参加している。この両企業は、Fortune500社、学術機関、国立研究所が参加する同ハブの協調的パートナーシップを活用し、20量子ビットや50量子ビットの量子コンピューターを利用して、両企業の事業に固有の量子コンピューティング・ソリューションを開発する方法を調査しようとしている。

### ExxonMobil: エネルギー・セクターでの量子コンピューティング・アプリケーションの開発

ExxonMobilは、現在の従来型のコンピューターでは計算することが難しい、次世代のエネルギー技術や製造技術の開発に、量子コンピューティングを利用することを探求している。アプリケーションの中には、国の送電網の最適化、より予測的な環境モデリングの実行、より効率的な炭素捕捉を実現する新素材を発見するための非常に正確な量子化学計算などが含まれる。<sup>10</sup>

### ユースケース3: 貯留層の採掘量の拡大

1856年、パリ市の水のろ過システムの設計に取り組んでいたフランス人エンジニアHenri D’Arcyは、砂を詰めた管に水を通すという単純な実験を行った。その観察結果から導き出されたダルシーの法則が、それ以来、貯留層のシミュレーションと採掘作業の分野全体の基礎になっている。<sup>8</sup>

しかし、最近のナノ孔隙を用いた非在来型貯留層の開発では、このダルシーの法則が通用しない。その1つの結果として、世界のオイル・ヒエラルキーの順位が変わり、米国が世界トップのエネルギー産出国となった。量子コンピューティングは、貯留層の分子レベルの物理特性の探索を可能にすることで、地下の理解や貯留層シミュレーションの新世代を切り拓く可能性がある。

非在来型の貯留層では、液体の石油が、ガスなどの高浸透率の物質であるかのように振る舞い、短鎖の炭化水素が優先的に回収され、長鎖の炭化水素は後に残される。この物理特性は、従来の地下流体力学についての理解とは一致しない。

このユースケースのシナリオでは、量子コンピューティングが、地下流体力学の理解と貯留層シミュレーションに革新をもたらす。石油、水、ガスの分子と岩石表面の相互作用を、量子コンピューターによって分子レベルでモデリングすることは、ダルシー流動と非ダルシー流動の違いを生んでいる物理特性の解明に役立つ。これが解明されれば、相応の利益が生まれることになるであろう。

例えば、油井の数をほんの10%でも減らすことができれば、非在来型石油を生産している北米の上位32社のネット・キャッシュ・フローは、10億米ドルの純損失(2018年1月から9月まで)から、80億米ドルの正のキャッシュフローに転換するだろう(油井1つにつき600万米ドルという推定に基づく)。<sup>9</sup>

## 推奨アプローチ

### 石油・化学産業における量子コンピューティングのユースケースの探求

石油・化学業界は、量子コンピューティングから非常に大きな恩恵を受けると考えられる。しかし、量子優位性を示す業界固有のアプリケーションは、それを最初に開発した企業が独占する可能性がある。量子コンピューティングを新たな技術として受け入れるには、異なる考え方、強く求められている新しいスキル・セット、ハイブリッドITアーキテクチャー、新しい企業戦略が必要である。これらの能力や利益を、有力競合他社が手にしたらどうなるか想像しなければならない。これこそが、様々な標準も戦略もユースケースもエコシステムもまだ開発中である今のうちに、量子コンピューティングを始めなければならない理由である。具体的には以下の様な取り組みが推奨される。

#### 1. アプリケーションの探求

まず、社内の量子コンピューティングに最も詳しい人物に実際の量子コンピューターを試用させ、自社事業に活用可能な量子コンピューティングのアプリケーションを探索させる。現在は既にクラウド環境で実行できるようになっている。<sup>11</sup> その量子コンピューティング責任者を事業部長や販売戦略企画責任者によって構成される量子コンピューティング・ステアリングコミッティーに所属させ、最も重要な問題に取り組めるように支援する。

#### 2. ユースケースの優先順位付け

次に、業界固有の量子コンピューティングのユースケースについて理解し、事業優位性を見極めて各ユースケースに優先順位を付ける。事業優位性の評価においては組織の事業戦略や顧客への提供価値、将来の成長計画を踏まえる。その上で、量子アプリケーション開発の進行状況を常にモニターし、すぐにでも実用化可能なユースケースを特定する。

#### 3. エコシステムの活用

最後に、量子コンピューティングの世界クラスのリーダーや、共通テーマに取り組む研究所、学術機関、量子技術プロバイダー、量子アプリケーションの開発者やプログラマー、サポート技術を持つスタートアップ企業などが参加するエコシステムとパートナーを組むことも肝要である。<sup>12</sup> 自社の事業ニーズに固有の量子アルゴリズムを開発・実行するための量子コンピューティングの技術スタックを即座に活用できるようにするには、類似の挑戦に取り組む組織を巻き込むことが重要である。量子テクノロジーにおける突破口を探す上ではエコシステム・パートナー側での変化が必要になる場合がある。

## 注釈および出典

- 1 “Chemical Industry Contributes \$5.7 Trillion To Global GDP And Supports 120 Million Jobs, New Report Shows.”The European Chemical Industry Council.March 11, 2019. <https://cefic.org/media-corner/newsroom/chemical-industry-contributes-5-7-trillion-to-global-gdp-and-supports-120-million-jobs-new-report-shows/>
- 2 Based on IBM calculations.
- 3 Coughlin, Tom. “175 Zettabytes By 2025.”Forbes. November 27, 2018. <https://www.forbes.com/sites/tomcoughlin/2018/11/27/175-zettabytes-by-2025/#5d4c9cb65459>
- 4 Kandala, Abhinav, Antonio Mezzacapo, Kristan Temme, Maika Takita, Markus Brink, Jerry M. Chow, Jay M. Gambetta. “Hardware-efficient variational quantum eigensolver for small molecules and quantum magnets.”Nature. September 13, 2017. <https://www.nature.com/articles/nature23879>
- 5 Bourzac, Katherine. “Chemistry is quantum computing’s killer app.”Chemical & Engineering News.October 30, 2017. <https://cen.acs.org/content/cen/articles/95/i43/Chemistry-quantum-computings-killer-app.html>
- 6 Stamatopoulos, Nikitas, Daniel J. Egger, Yue Sun, Christa Zoufal, Raban Iten, Ning Shen, and Stefan Woerner. “Option Pricing using Quantum Computers.”Arxiv.July 5, 2019. <https://arxiv.org/pdf/1905.02666.pdf>
- 7 Cahill, Jay. “Minimizing Valuable Octane Giveaway.”Emerson.2016. <https://www.emersonautomationexperts.com/2016/industry/refining/minimizing-valuable-octane-giveaway/>; “Oil Refineries Market Report 2018-2028.”MarketWatch.August 23, 2018. <https://www.marketwatch.com/press-release/oil-refineries-market-report-2018-2028-2018-08-23>
- 8 “Darcy’s law.”Encyclopaedia Britannica.May 28, 2009. <https://www.britannica.com/science/Darcys-Law>
- 9 Mikulka, Justin. “Fracking in 2018: Another Year of Pretending to Make Money.”Resilience.January 17, 2019. <https://www.resilience.org/stories/2019-01-17/fracking-in-2018-another-year-of-pretending-to-make-money/>; Merva, John. “Oil Economics - How Much Does An Oil And Gas Well Cost?”Seeking Alpha.January 3, 2017. <https://seekingalpha.com/article/4034075-oil-economics-much-oil-gas-well-cost>
- 10 “ExxonMobil and IBM to Advance Energy Sector Application of Quantum Computing.”ExxonMobil.January 8, 2019. <https://news.exxonmobil.com/press-release/exxonmobil-and-ibm-advance-energy-sector-application-quantum-computing>
- 11 “IBM Q Experience is quantum on the cloud.”IBM. <https://www.ibm.com/quantum-computing/technology/experience/>
- 12 “IBM Q Network: an engine for discovery.”IBM. <https://www.ibm.com/quantum-computing/network/overview/>

## 日本語翻訳監修

橋本光弘

日本アイ・ピー・エム株式会社 戦略コンサルティング & デザイン統括 シニア・マネージング・コンサルタント

IBM Quantum Senior Ambassador / IBM Quantum CoC Japan Co-Lead

日本学術振興会特別研究員 (DC1)、国内大手電機メーカー研究員 (中央研究所、米国研究所他) としてストレージ・デバイスの研究開発に従事。その後、米系戦略コンサルティング・ファームおよびIBMにて、電機・機械・エネルギー・金融業界のコンサルティング・プロジェクトに参画。専門領域は全社戦略 (中期経営計画、ポートフォリオ戦略、シナリオ・プランニング)、新規事業戦略、M&A (ビジネス・デューデリジェンス、PMI)、オペレーション改革、組織再編。近年は、特に量子コンピューティング等のテクノロジーを活用した新規事業戦略策定やオペレーション改革をテーマにしたプロジェクトを多数手掛けている。博士 (工学)。

連絡先: [hashimit@jp.ibm.com](mailto:hashimit@jp.ibm.com)

西林泰如

日本アイ・ピー・エム株式会社 戦略コンサルティング & デザイン統括 アソシエイト・パートナー

IBM Quantum Senior Ambassador / IBM Quantum CoC Japan Lead

総合電機メーカーR&D、米国系戦略コンサルティングファーム・グローバル戦略部門を経て、IBMへ参画。専門はビジネスとテクノロジー両輪に関する、経営企画・経営戦略、事業開発・事業戦略、提携・投資/M&A、海外進出 (米国シリコンバレー、シンガポールでの5年超の駐在経験)、情報通信・インターネット技術 (日米120 件超の特許筆頭発明)。IBMでは、Global Enterprise Strategy Group、および、Global Quantum CoC (Center of Competency) に所属。量子コンピューティングを中心に、IBMがリードする破壊的テクノロジーによる革新をテーマに、経営戦略・事業戦略、デジタル戦略、オペレーション戦略、組織チェンジ・マネジメント、テクノロジー・データ戦略業務に従事している。工学修士 (MEng)、および、経営管理修士 (MBA)。

連絡先: [yasuyuki.nishibayashi@ibm.com](mailto:yasuyuki.nishibayashi@ibm.com)

土居遼太郎

日本アイ・ピー・エム株式会社 戦略コンサルティング & デザイン統括 コンサルタント

IBM Quantum Ambassador

専門は、事業戦略策定、新規事業立案、先端技術活用。これまでに、製造 (自動車、総合電機)、ヘルスケア (製薬、医療機器)、金融、保険業界における、デジタル化に係る事業戦略策定、新規事業立案、業界横断のビジネスアレンジメント、実証実験推進支援等のプロジェクトに参画。近年は、量子コンピューティングを活用した業界ごとのユースケース検討、ロードマップ策定 等をテーマにしたプロジェクトを手掛けている。工学修士 (MEng)。

連絡先: [Ryotaro.Doii@ibm.com](mailto:Ryotaro.Doii@ibm.com)

櫻井亮

日本アイ・ピー・エム株式会社 戦略コンサルティング & デザイン統括 コンサルタント

IBM Quantum Ambassador

専門は、事業戦略策定、新規事業構想、テクノロジー・アナリティクスを活用した新規事業の実行支援。これまでに、製造 (自動車、総合電機、機械、素材)、ヘルスケア (製薬)、金融業界における、デジタル化に係る事業戦略策定、新規事業構想、業界横断のビジネスアレンジメント、テクノロジー・アナリティクスを活用した新規事業の各種実行支援等のプロジェクトに参画。

特に、事業戦略と最先端テクノロジーの融合を興味領域として、高い専門性を

発揮している。そのため、直近は、量子コンピューティングの業界ごとの適用可能性評価、量子コンピューティングを活用したユースケース検討、ロードマップの策定 等をテーマにしたプロジェクトを中心に参画している。工学士 (B.Eng)。

連絡先: [Ryo.Sakurai1@ibm.com](mailto:Ryo.Sakurai1@ibm.com)

## Expert Insightsについて

Expert Insightsは、ニュース価値の高いビジネスや関連テクノロジーのトピックについて、ソートリーダーの見解を伝えるレポートです。世界中の該当分野の優れた専門家との対話をもとに作成されます。詳細については、IBM Institute for Business Value ([iibv@us.ibm.com](mailto:iibv@us.ibm.com))までお問い合わせください。

© Copyright IBM Corporation 2019

IBM Corporation  
New Orchard Road  
Armonk, NY 10504  
Produced in the United States of America  
November 2019

IBM、IBMロゴ、ibm.comおよびWatsonは、世界の多くの国で登録されたInternational Business Machines Corporationの商標です。他の製品名およびサービス名等は、それぞれIBMまたは各社の商標である場合があります。現時点でのIBMの商標リストについては[ibm.com/legal/copytrade.shtml](http://ibm.com/legal/copytrade.shtml) (US)をご覧ください。

本書の情報は最初の発行日の時点で最新ですが、予告なしに変更される場合があります。すべての製品が、IBMが営業を行っているすべての国において利用可能なわけではありません。

本書に掲載されている情報は特定物として現存するままの状態を提供され、第三者の権利の不侵害の保証、商品性の保証、特定目的適合性の保証および法律上の瑕疵担保責任を含むすべての明示もしくは黙示の保証責任なしで提供されています。IBM 製品は、IBM 所定の契約書の条項に基づき保証されます。

本レポートは一般的なガイダンスを目的としています。入念な調査または専門家による判断の代用となることを意図していません。IBM は本資料に依拠する組織や個人によるいかなる損害についても責任を負いません。

本レポートの中で使用されているデータは、第三者の情報源が得られている場合があり、IBMはかかるデータに対する独自の検査、検証、または監査は行っていません。かかるデータを使用して得られた結果は「そのままの状態」で提供されており、明示的にも黙示的にもIBMが明言あるいは保証するものではありません。

本書は英語版「Exploring quantum use cases for chemicals and petroleum」の日本語訳として提供されるものです。

