

第6回量子ソフトウェアワークショップ

FTQCアルゴリズム研究開発とその応用： 量子化学計算・CAE計算

東京大学大学院理学系研究科 特任准教授
株式会社Quemix 代表取締役CEO

松下雄一郎



松下 雄一郎

Yu-ichiro MATSUSHITA

東京大学 大学院理学系研究科 特任准教授

Specially Appointed Associate Professor, The University of Tokyo

株式会社Quemix 代表取締役CEO 社長執行役員

Quemix Inc. President & CEO

量子科学技術研究開発機構 (QST)
量子材料理論プロジェクト プロジェクトチーフ

Project Chief , Quantum Materials Theory Project,
National Institutes for Quantum Science and Technology (QST)



量子コンピュータのソフトウェア研究開発ベンチャー企業

A Software R&D Venture Focused on Quantum Computing

2019年設立 社員 20名（研究開発者: 14名）

Established in 2019 | 20 members, including 14 researchers

設立当時からFTQC（誤り耐性量子コンピュータ）アルゴリズム
開発に着手

We've been developing FTQC(Fault-tolerant quantum computer) algorithms since our establishment

2019年設立以来、FTQC向けアルゴリズム開発にフォーカス

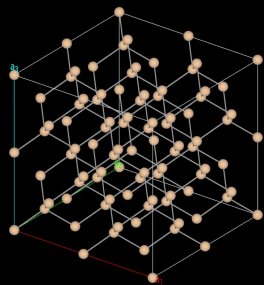
We've been focusing on developing algorithms for FTQC since our establishment in 2019

業界標準となりうる実用的な量子アルゴリズムを研究開発

We conduct R&D on practical quantum algorithms that could become industry standards

量子化学計算

Quantum Chemistry
Calculation



CAE計算

Computer Aided
Engineering



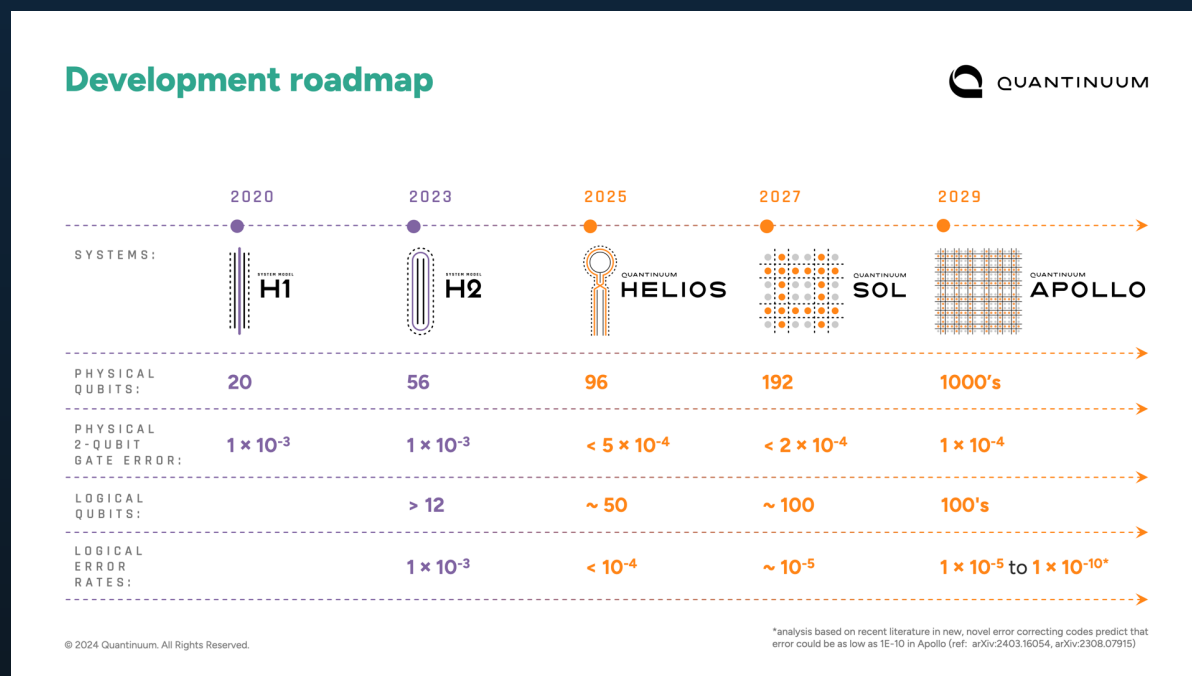
機械学習

Machine Learning



FTQC（誤り耐性量子コンピュータ）の実現加速

Accelerated Roadmap to FTQC(Fault-Tolerant QC)



2029年までに100論理ビット以上&エラー率 10^{-5} 以下のハードが実現: eFTQCの始まり
Hardware with over 100 logical qubits and an error rate below 10^{-5} will be realized by 2029: Beginning of eFTQC

Quemixのチャレンジ：量子超越への挑戦

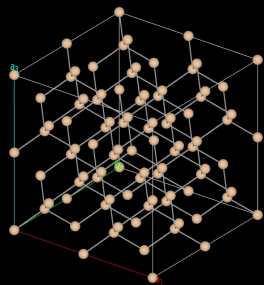
Quemix's Challenge: Striving for Quantum Supremacy

3つ全ての領域に対して5年以内に量子超越の実現を目指す

We aim to achieve quantum supremacy in all the following fields within the next five years

量子化学計算

Quantum Chemistry
Calculation



CAE計算

Computer Aided
Engineering



機械学習

Machine Learning

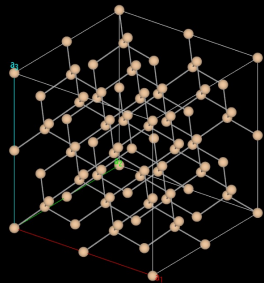


FTQCで加速する量子化学計算：Quemixの技術

Accelerating Quantum Chemistry Calculations by FTQC: Quemix's Technologies

量子化学計算

Quantum Chemistry
Calculation



CAE計算

Computer Aided
Engineering



機械学習

Machine Learning



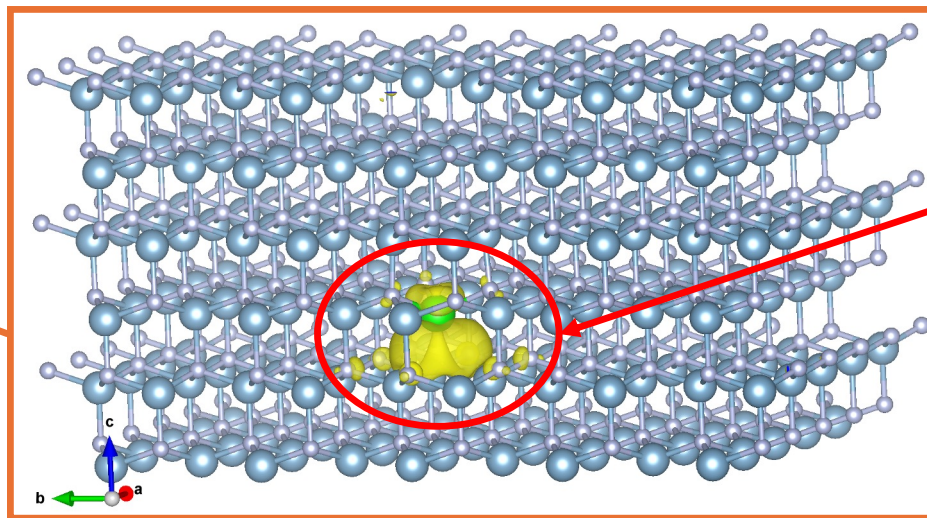
実用的な量子化学計算を求めて

Towards Practical Quantum Chemistry Calc. Scheme

課題：当面の量子コンピュータ(eFTQC)にとって、現実的な問題丸ごととは大きすぎる

Problem: The practical problem as a whole is too large for eFTQC machines

古典コンピュータで計算
Calc. by classical computers



量子コンピュータで計算
Calc. by quantum computers

Realistic solution: HPC-FTQC Hybrid Computing

実用的な量子化学計算スキーム Practical Quantum Chemistry Calc. Scheme

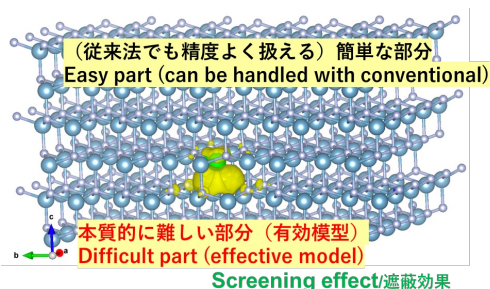
HPC-FTQC Hybrid Computing

密度汎関数計算
DFT Calc.

部分抽出
Extraction

基底状態計算
Ground State Calc.

物理量計算
Property Calc.



Quemix technology

有効ハミルトニアン構築 (抽出) のノウハウ蓄積

Accumulation of expertise in constructing effective Hamiltonians

有効ハミルトニアン

Effective Hamiltonian

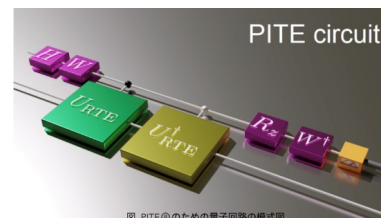
$$\mathcal{H} = \sum_{\sigma} \sum_{ij} t_{ij} a_{i\sigma}^{\dagger} a_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\sigma\rho} \sum_{ij} \left\{ U_{ij} a_{i\sigma}^{\dagger} a_{j\rho}^{\dagger} a_{j\rho} a_{i\sigma} + J_{ij} \left(a_{i\sigma}^{\dagger} a_{j\rho}^{\dagger} a_{i\rho} a_{j\sigma} + a_{i\sigma}^{\dagger} a_{i\rho}^{\dagger} a_{j\rho} a_{j\sigma} \right) \right\}$$

Quemix technology

確率的虚時間発展法 (PITE®)

による量子加速

Quantum speedup by Probabilistic
Imaginary-Time Evolution (PITE®)
method



■ 励起エネルギー

Excitation Energy

■ 吸収スペクトル

Absorption Spectra

... etc.

Quemix technology

QPEを用いた応答関数計算

手法による量子加速

Response Func. Calc. Using QPE and
its mathematical verification of
speedup

全ての要素技術が揃った

All the necessary technological components were in place

PITE[®]: 基底状態計算のための量子アルゴリズム

Quantum algorithm for ground state calculations

Quemix technology

虚時間発展法 $M = e^{-H\tau}$ は高エネルギー状態を指数的に減衰させるため基底状態計算に有望と期待

ハミルトニアンが与えられた時に、

虚時間発展法

$$e^{-H\tau} \sum_k c_k |\phi_k\rangle = \sum_k c_k e^{-E_k\tau} |\phi_k\rangle$$

虚時間発展演算子
非ユニタリ

初期量子状態

- ✓ 虚時間軸方向に時間発展を追うと、高エネルギー状態成分が減衰する
- ✓ 変分波動関数（アンザッツ）を設定する必要がない
- ✗ 虚時間発展演算子は非ユニタリであり、量子ゲート操作としてこのままでは実装できない。
量子コンピュータの基本演算はユニタリ演算

(Difficult point to realize)

Kosugi and HN, Phys. Rev. Res. **4**, 033121 (2022). Nishi et al., Phys. Rev. Res. **6**, L022041 (2024).

PITE[®]: 基底状態計算のための量子アルゴリズム

Quantum algorithm for ground state calculations

虚時間発展法 $M = e^{-H\tau}$ は高エネルギー状態を指数的に減衰させるため基底状態計算に有望と期待

埋め込み

$$U_{\text{PITE}} \equiv \begin{pmatrix} \mathcal{M} & \sqrt{1 - \mathcal{M}^2} \\ \sqrt{1 - \mathcal{M}^2} & -\mathcal{M} \end{pmatrix}$$

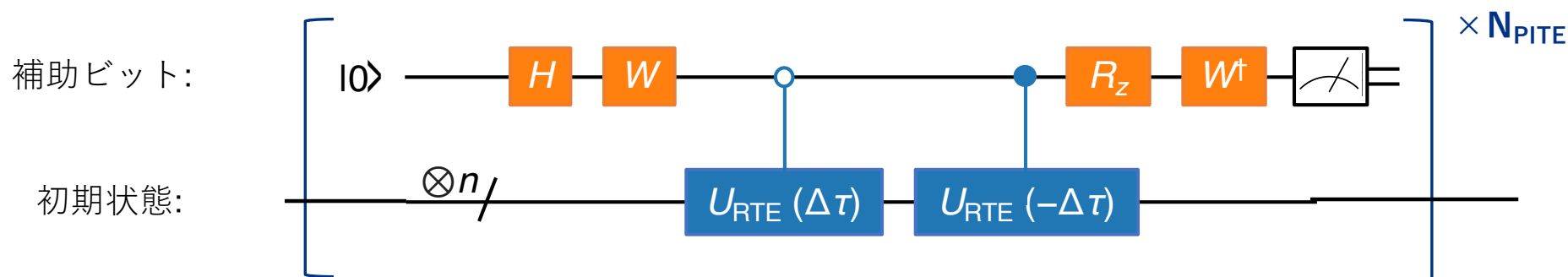
PITEの作用:

$$|\psi\rangle \otimes |0\rangle \longrightarrow \underbrace{\mathcal{M}|\psi\rangle \otimes |0\rangle}_{\text{成功状態}} + \underbrace{\sqrt{1 - \mathcal{M}^2}|\psi\rangle \otimes |1\rangle}_{\text{失敗状態}}$$

補助ビット

$|0\rangle$ 状態である補助ビットを事後選択することにより、虚時間発展演算子が作用した状態を確率的に得る

微小虚時間 $\Delta\tau$ の1次に関する近似回路



- 振幅増幅を併用することで、2乗加速を達成することが示されている

Kosugi and HN, Phys. Rev. Res. **4**, 033121 (2022). Nishi et al., Phys. Rev. Res. **6**, L022041 (2024).

応答関数計算のための量子アルゴリズム

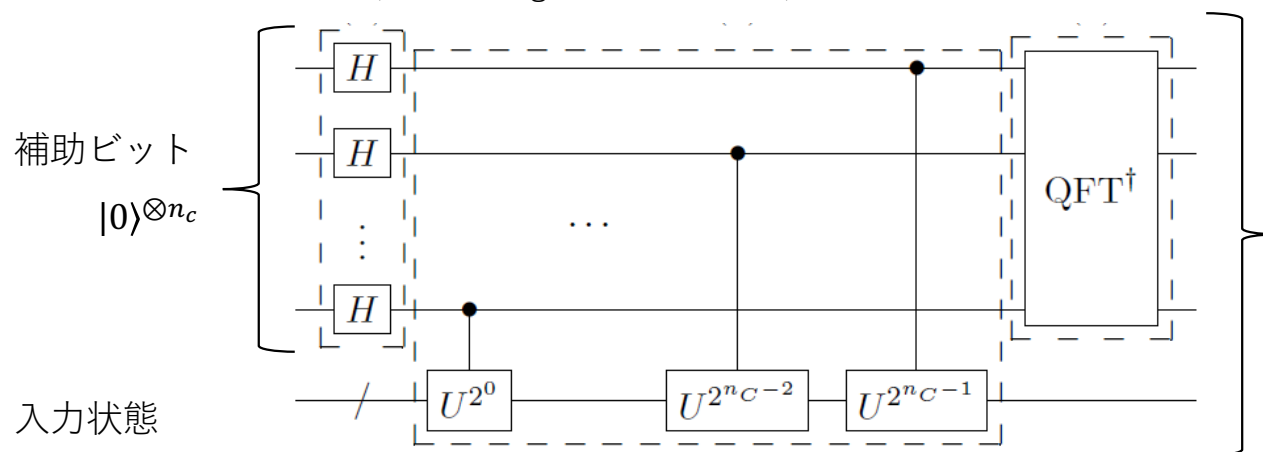
Quantum algorithm for response functions

□ QPEを用いた正孔部分グリーン関数（HOMOのスペクトル関数）の計算手法

$$G_{mm'}^{(h)}(z) = \langle \Psi_{\text{gs}}^N | a_{m'}^\dagger \frac{1}{z - E_{\text{gs}}^N + \mathcal{H}} a_m | \Psi_{\text{gs}}^N \rangle = \sum_{\lambda \in N-1} \frac{\langle \Psi_{\text{gs}}^N | a_{m'}^\dagger | \Psi_\lambda^{N-1} \rangle \langle \Psi_\lambda^{N-1} | a_m | \Psi_{\text{gs}}^N \rangle}{z + E_\lambda^{N-1} - E_{\text{gs}}^N}$$

基底状態に正孔が生じた状態 (レーマン表示)

(Jordan-Wigner変換を用いる)

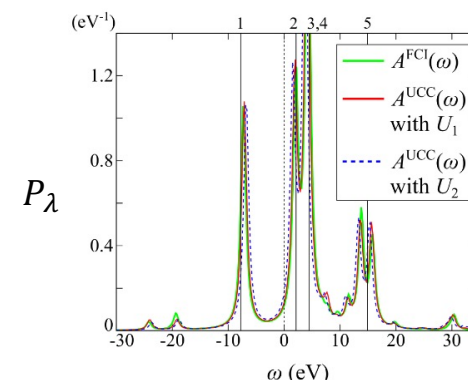


入力状態

$$a_m | \Psi_{\text{gs}}^N \rangle = \sum_{\lambda} c_{\lambda} | \Psi_{\lambda}^{N-1} \rangle$$

Kosugi, YM, PRResearch 2, 033043(2020). PRA 101, 012330(2020).

Quemix technology



測定した固有値Eをx軸、確率をy軸にプロットしてスペクトルを得る

出力状態

$$\sum_{\lambda} c_{\lambda} | \Psi_{\lambda}^{N-1} \rangle \otimes | \underline{E_{\lambda}^{N-1}} \rangle$$

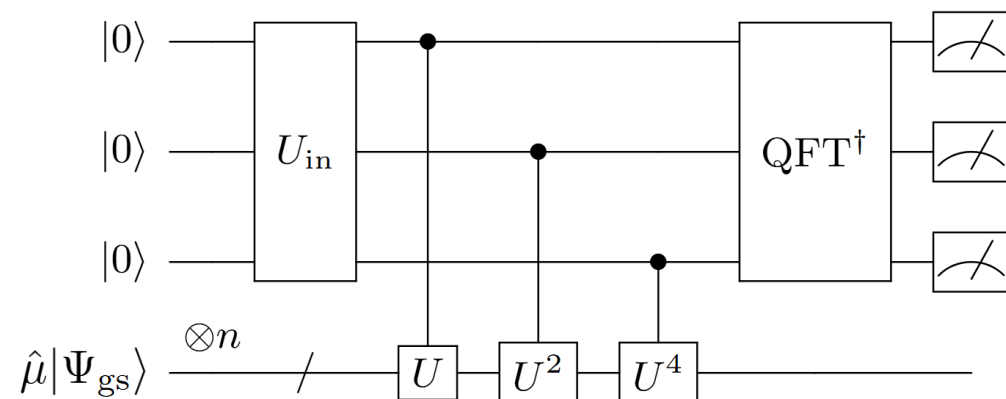
補助ビットを測定することにより、
確率 $P_{\lambda} = |c_{\lambda}|^2 = |\langle \Psi_{\lambda}^{N-1} | a_m | \Psi_{\text{gs}}^N \rangle|^2$
で二進数表現の固有値 E_{λ}^{N-1} を得る

応答関数計算のための量子アルゴリズム

Quantum algorithm for response functions

量子位相推定 (QPE) を使用したXAFS計算のための量子回路

The quantum circuit for XAFS calculation using quantum phase estimation (QPE)



基底状態に双極子演算子が作用した状態

Dipole-applied ground state

QPEのアウトプットのサンプリング結果がXAFSスペクトルになる

The sampling results of QPE output become XAFS spectra

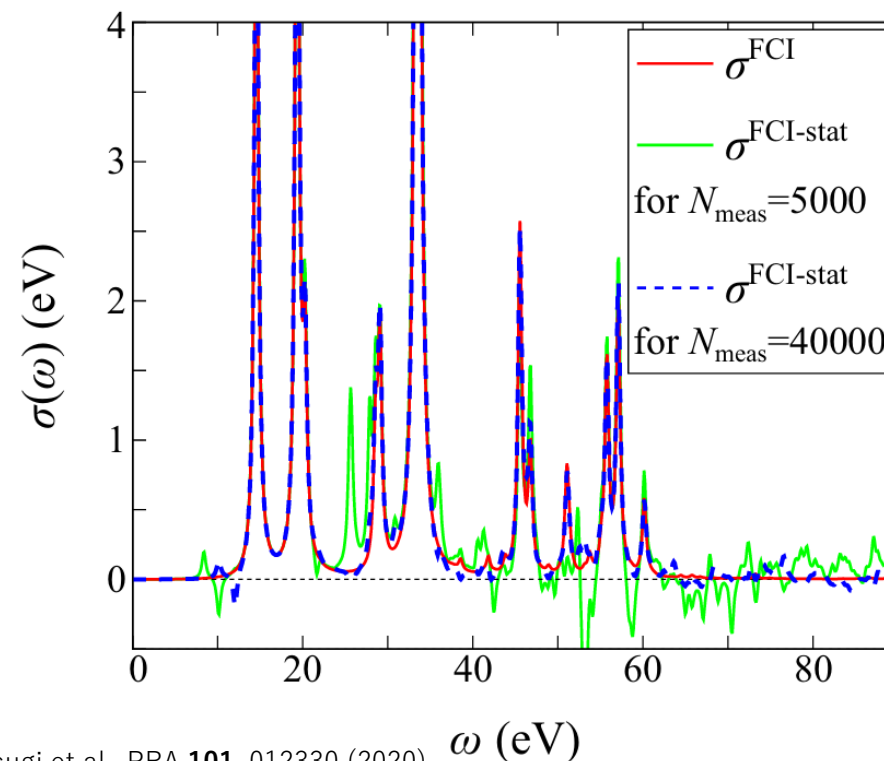
Xanadu&Volkswagen論文のresource estimationによると、

現在最良の量子アルゴリズム

N₂分子の光学吸収スペクトル

Quemix technology

The photoabsorption spectrum for N₂ molecule



Kosugi et al., PRA **101**, 012330 (2020),

Kosugi et al., PRR **2**, 033043 (2020).

実用的な量子化学計算スキーム Practical Quantum Chemistry Calc. Scheme

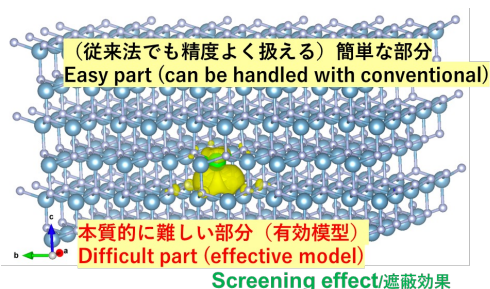
HPC-FTQC Hybrid Computing

密度汎関数計算
DFT Calc.

部分抽出
Extraction

基底状態計算
Ground State Calc.

物理量計算
Property Calc.



有効ハミルトニアン
Effective Hamiltonian

$$\mathcal{H} = \sum_{\sigma} \sum_{ij} t_{ij} a_{i\sigma}^{\dagger} a_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\sigma\rho} \sum_{ij} \left\{ U_{ij} a_{i\sigma}^{\dagger} a_{j\rho}^{\dagger} a_{j\rho} a_{i\sigma} + J_{ij} \left(a_{i\sigma}^{\dagger} a_{j\rho}^{\dagger} a_{i\rho} a_{j\sigma} + a_{i\sigma}^{\dagger} a_{i\rho}^{\dagger} a_{j\rho} a_{j\sigma} \right) \right\}$$

Quemix technology

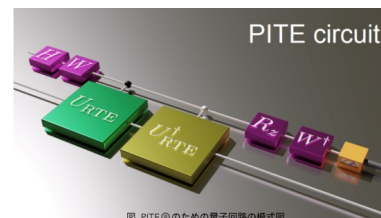
有効ハミルトニアン構築 (抽出) のノウハウ蓄積

Accumulation of expertise in constructing effective Hamiltonians

Quemix technology

確率的虚時間発展法 (PITE®)
による量子加速

Quantum speedup by Probabilistic
Imaginary-Time Evolution (PITE®)
method



■ 励起エネルギー
Excitation Energy

■ 吸収スペクトル
Absorption Spectra
... etc.

Quemix technology

QPEを用いた応答関数計算
手法による量子加速

Response Func. Calc. Using QPE and
its mathematical verification of
speedup

全ての要素技術が揃った

All the necessary technological components were in place

実機を用いた一気通貫の量子化学計算の実行

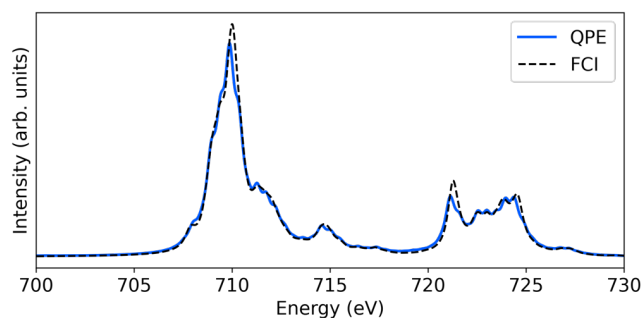
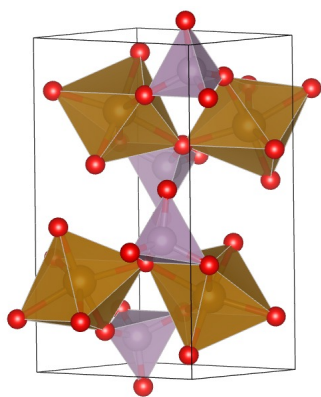
Executing end-to-end quantum chemistry calculations using a real machine

Collaboration with

HONDA

ターゲット：電池材料のXAFSスペクトル

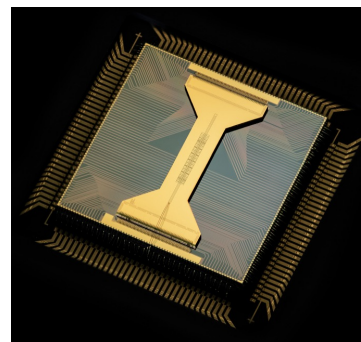
Target: XAFS spectrum from a battery material



XAFSスペクトル：電子の相関効果を精緻に考慮する必要性

XAFS Spectrum: Need to carefully consider electron-correlation effect

Hardware: H1-1 series (Quintinuum)



QUANTINUUM

Azure Quantum

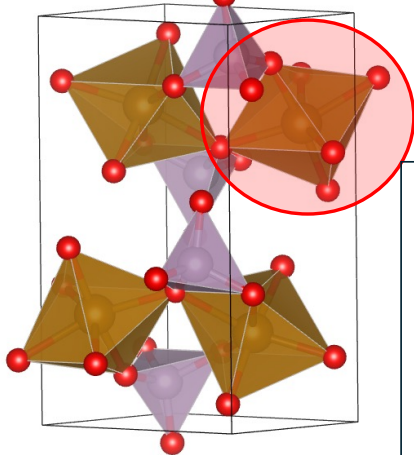
**中間回路測定・高いフィデリティ・全結合型
量子コンピュータ**

Hardware with mid-circuit measurement, high fidelity,
and all-to-all connectivity

XAFSのシミュレーション結果

Simulation result for XAFS

FePO₄



クラスター FeO₆⁹⁻

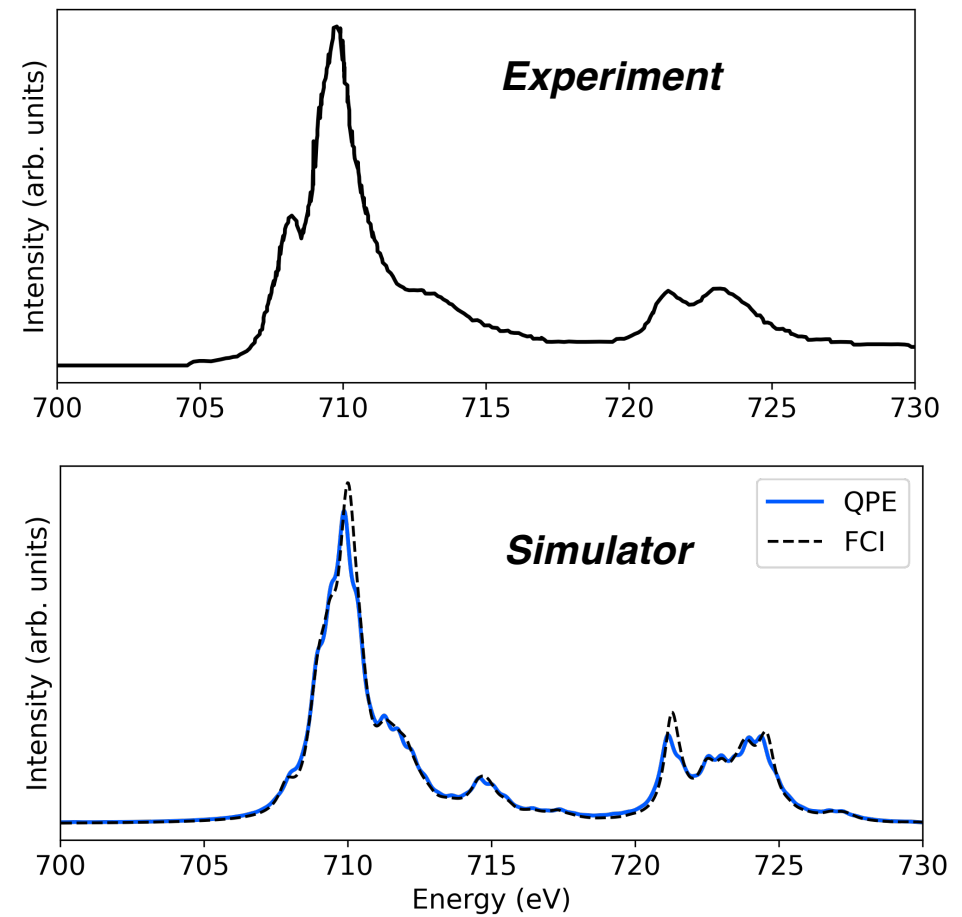
Fe 3d $\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow$



Fe 2p $\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$

サテライトピークを含む実験のXAFSスペクトルを再現

Reproduce experimental XAFS spectrum including satellite peaks



実機を用いた一気通貫の量子化学計算の実行

Executing end-to-end quantum chemistry calculations using a real machine

Collaboration with

HONDA

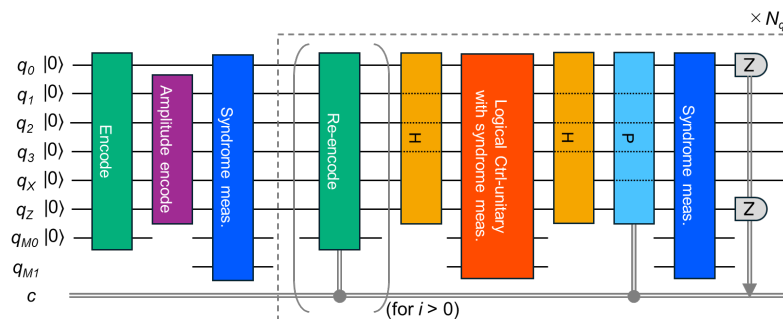
今現在の量子ハードの性能を擬似的にeFTQC化するため、量子エラー検出（QED）を用いた

We can effectively transform the current quantum computer hardware into a simulated eFTQC by using quantum error detection (QED).

QED符号ありFTQCアルゴリズムを実行し、実験と直接比較可能な物理量計算を世界初で実行

Executing FTQC algorithms on logical qubits and performing the first-ever physical quantity calculations directly comparable with experiments

arXiv: 2505.08612 (2025).



QED符号あり量子位相推定を用いたXAFS計算
Quantum phase estimation with QED code for XAFS spectrum

量子回路実装のための技術開発により始めて実現

Development of technology for quantum circuit implementation

必要な物理量子ビット数：56 → 8

Required # of physical qubits: 56 → 8

必要なゲート操作数：12分の1へ

Required # of gate operations: reduced to 1/12

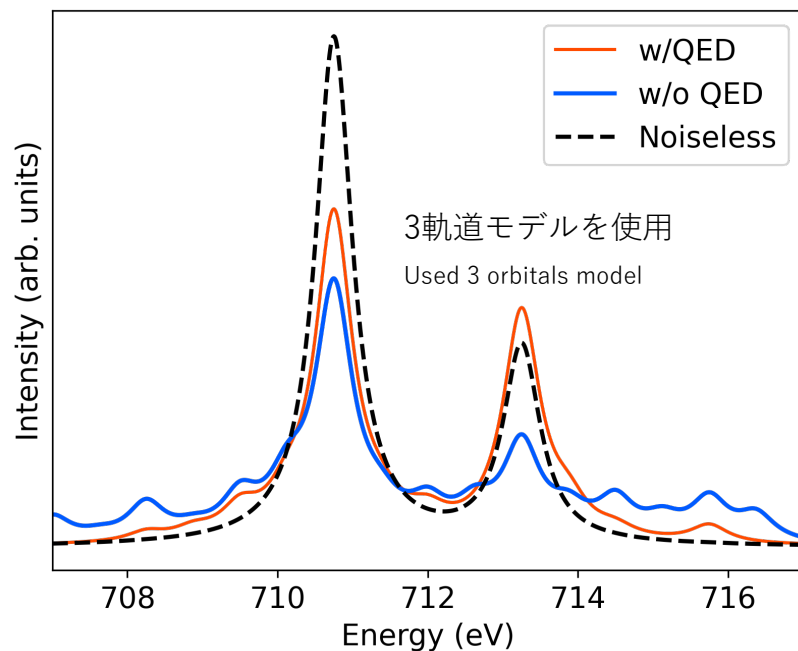
結果：XAFSスペクトル

Results: XAFS spectra

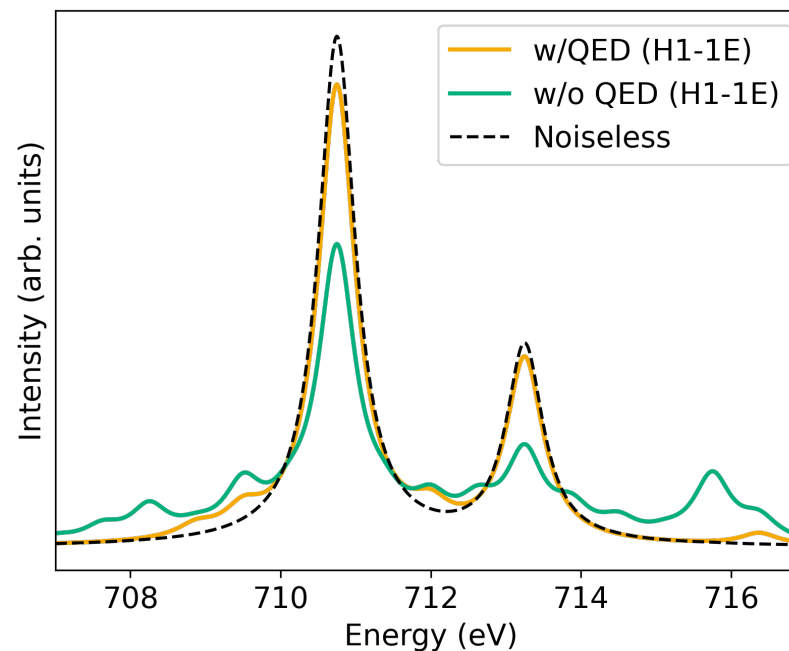
QPEにより、現在のイオントラップ量子コンピュータがXAFSスペクトルを理想的なFTQCの結果と比較して 1.8×10^{-2} の誤差で取得 (エミュレータでは 6.1×10^{-3})

Using QPE, present trapped-ion quantum computer provides XAS spectra with 1.8×10^{-2} error compared to ideal FTQC results (6.1×10^{-3} by emulator).

実機/QPU (H1-1)



Emulator (H1-1E)



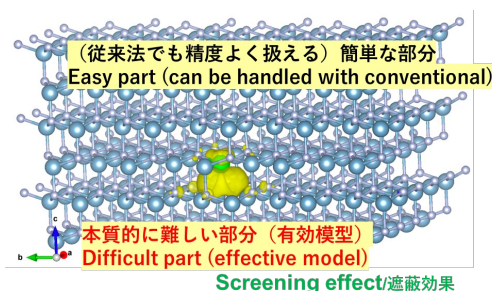
実用的な量子化学計算スキーム Practical Quantum Chemistry Calc. Scheme

密度汎関数計算
DFT Calc.

部分抽出
Extraction

基底状態計算
Ground State Calc.

物理量計算
Property Calc.



Quemix technology

有効ハミルトニアン構築 (抽出) のノウハウ蓄積

Accumulation of expertise in constructing effective Hamiltonians

有効ハミルトニアン
Effective Hamiltonian

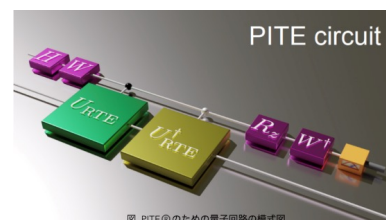
$$\mathcal{H} = \sum_{\sigma} \sum_{ij} t_{ij} a_{i\sigma}^{\dagger} a_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\sigma\rho} \sum_{ij} \left\{ U_{ij} a_{i\sigma}^{\dagger} a_{j\rho}^{\dagger} a_{j\rho} a_{i\sigma} + J_{ij} \left(a_{i\sigma}^{\dagger} a_{j\rho}^{\dagger} a_{i\rho} a_{j\sigma} + a_{i\sigma}^{\dagger} a_{i\rho}^{\dagger} a_{j\rho} a_{j\sigma} \right) \right\}$$

Quemix technology

確率的虚時間発展法 (PITE®)

による量子加速

Quantum speedup by Probabilistic
Imaginary-Time Evolution (PITE®)
method



■ 励起エネルギー

Excitation Energy

■ 吸収スペクトル

Absorption Spectra

... etc.

Quemix technology

QPEを用いた応答関数計算

手法による量子加速

Response Func. Calc. Using QPE and
its mathematical verification of
speedup

5年以内の量子超越

Aiming for quantum supremacy in 5years

ユースケース&共同研究募集中

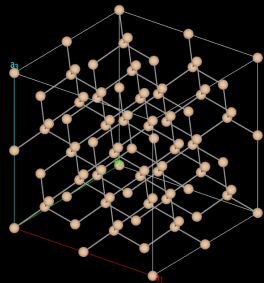
Seeking use cases and collaborative research

FTQCで加速するCAE計算：Quemixの技術

Accelerating CAE Calculations by FTQC: Quemix's Technologies

量子化学計算

Quantum Chemistry
Calculation



CAE計算

Computer Aided
Engineering



機械学習

Machine Learning



実用的なCAE計算スキーム

Practical CAE Calc. Scheme

HPC-FTQC Hybrid Computing

Input

Quantum computing

Readout

Quemix technology

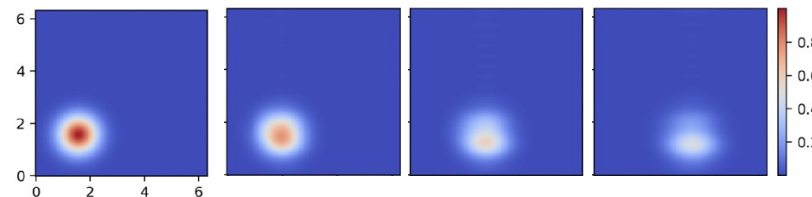
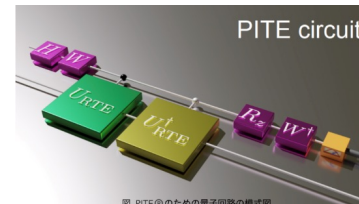
インプットしやすい形に
古典Cで変換して量子Cへ入力

Convert the data into an easily
encodable form using a classical
computer and input it into quantum
computer

Quemix technology

確率的虚時間発展法
(PITE[®])による
指数関数加速

Exponential speedup by
PITE[®] method



arXiv: 2409.18559 (2025).

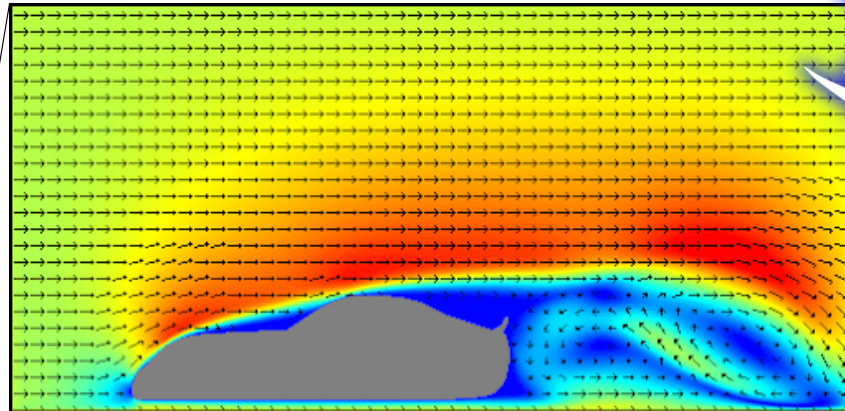
Missing Piece...

量子コンピュータ利活用の
最大の課題

The biggest challenge in utilizing
quantum computers

量子状態読出し：量子CAE計算を阻む壁

Readout : Barrier to Quantum CAE Calc.



@Flowsquare

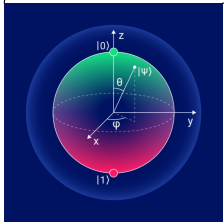


1 pixel

Readout

量子コンピュータの良いところが台無し

This undermines the advantages of QC



量子ビットにはフルスクリーンの莫大な情報（量子情報）が残っているが、読み出そうとすると、たった1画素の情報を残し他は全て消えしまう（波束の収縮）

Quantum bits contain a vast amount of information (quantum information) in full, but when attempting to read it, only a single pixel's information remains, with all the rest disappearing (wavefunction collapse).

量子状態読出しの技術革新無しには量子CAE計算はあり得ない

Without effective readout, quantum CAE calculations are impossible

量子状態読み出しの新技術開発 Practical Quantum Chemistry Scheme

HPC-FTQC Hybrid Computing

Input

Quemix technology

エンコードしやすい形に
古典Cで変換して量子Cへ入力

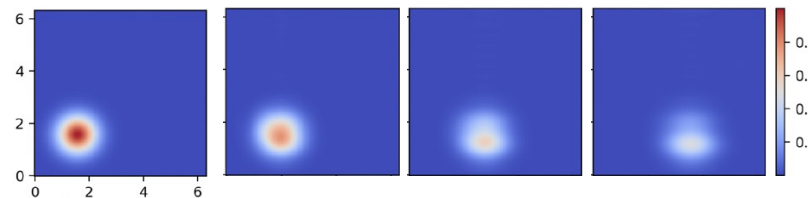
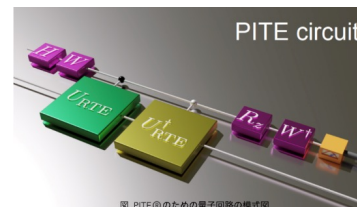
Convert the data into an easily
encodable form using a classical
computer and input it into quantum
computer

Quantum computing

Quemix technology

確率的虚時間発展法
(PITE[®])による
指数関数加速

Exponential speedup by
PITE[®] method



Readout

Collaboration with

HONDA

Quemix technology

[新技術]

読出しを行わず、
特徴量のみを抽出して
古典コンピュータで再構成

[NEW TECH.]

Extracting only features without direct
readout, and then reconstructing on a
CC

arXiv: 2505.08613 (2025).

全ての要素技術が揃った

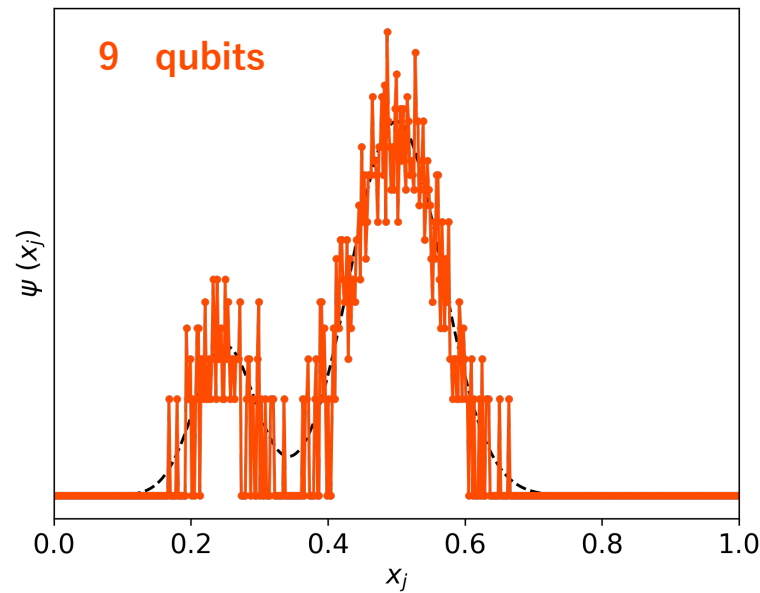
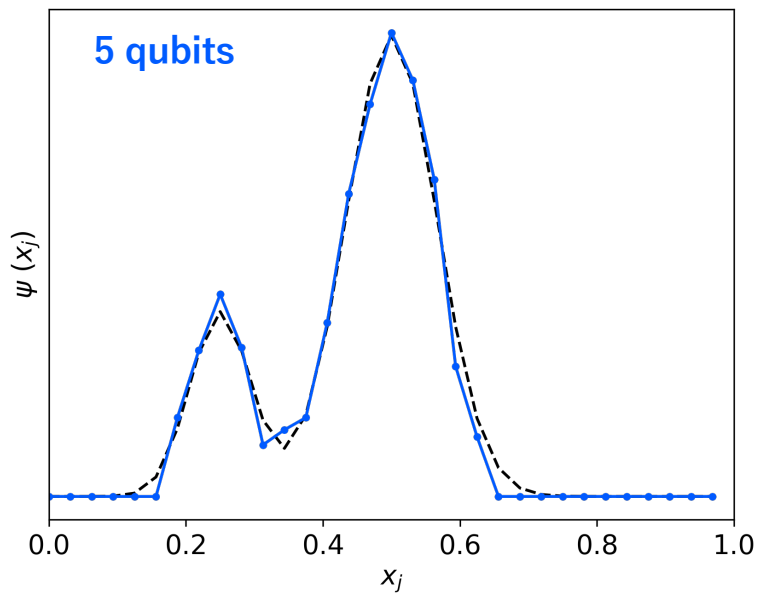
All the necessary technological components were in place

量子計算における読み出しの課題

Challenges in readout

量子ビット数が増加するほど、量子状態の読み出しに必要な測定回数が増加

As a first step toward FTQC era, we implemented QED on QPE



測定回数 1,000回

1,000 measurements

黒: 測定回数無限

Black: Exact

量子ビット数が増えるほど係数の大きさが減少するので、高い精度が必要

The magnitude of coefficients decreases as the number of qubits increases. High precision is required.

量子状態の特徴量抽出と再構築

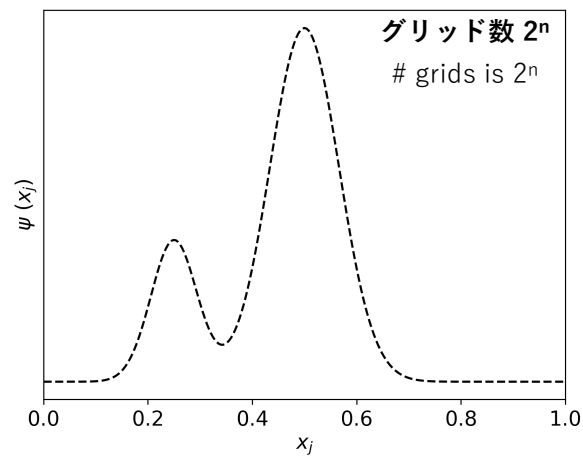
Feature extraction & reconstruction of quantum states

量子状態は指数関数的な自由度を持つが、少数のパラメータで特徴づけられることが多い

In amplitude encoding, the cost of quantum computation increases as the number of qubits increases.

指数的な自由度

Exponential degree of freedom



特徴量抽出
Feature extraction

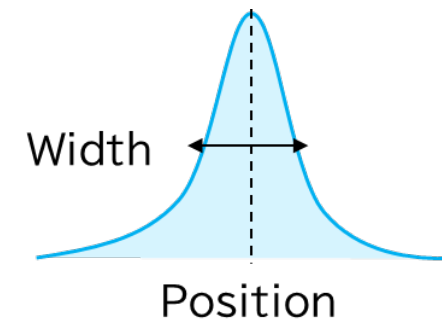


再構築
Reconstruction



少数パラメータで特徴づけられる

Characterized by a few parameters



効率的な振幅エンコード方法

Methodology for an efficient amplitude encoding

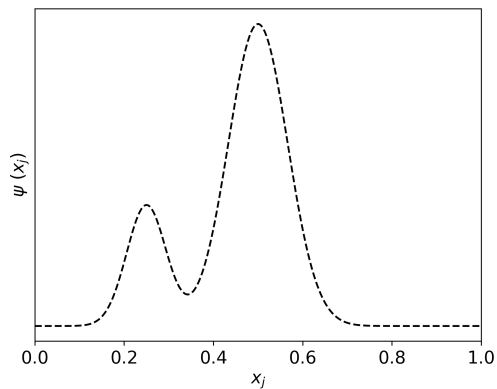
Kosugi et al, Phys. Rev. A **110** 062407(2024)

Kosugi et al., arXiv 2501.07211(2025)

量子状態の読み出し Quantum state readout

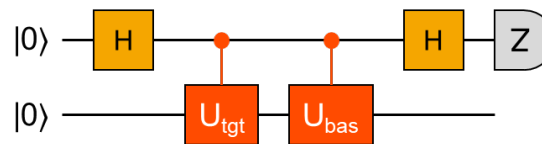
量子古典ハイブリッド計算により、
目的の量子状態の特徴量を抽出

Extract feature of target state by Q/C
hybrid calculation



特徴量抽出
Feature extraction

量子重なり計算
Quantum overlap calc.

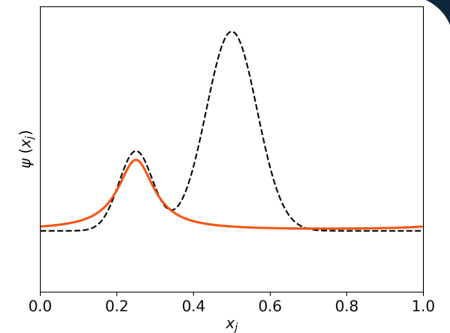


(古典) フィデリティ最大化
(Class.) Maximizing fidelity

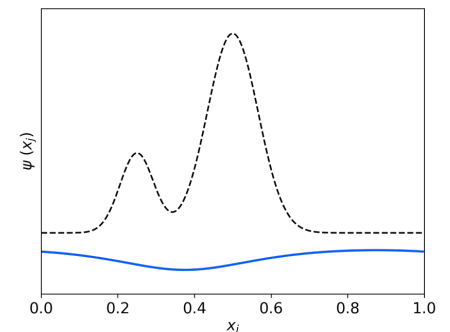
$$Gd = \kappa SG$$

$$|\psi_{\text{tgt}}\rangle \approx \sum_{\ell} d_{\ell} |\psi_{\ell}\rangle$$

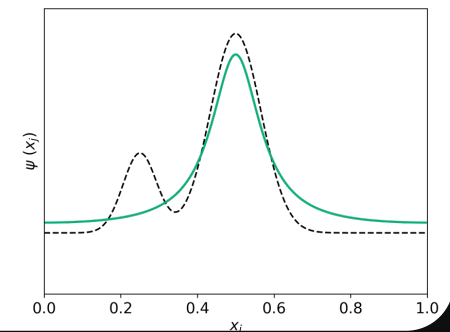
$\times d_1$
→



$\times d_2$
→



$\times d_3$
→



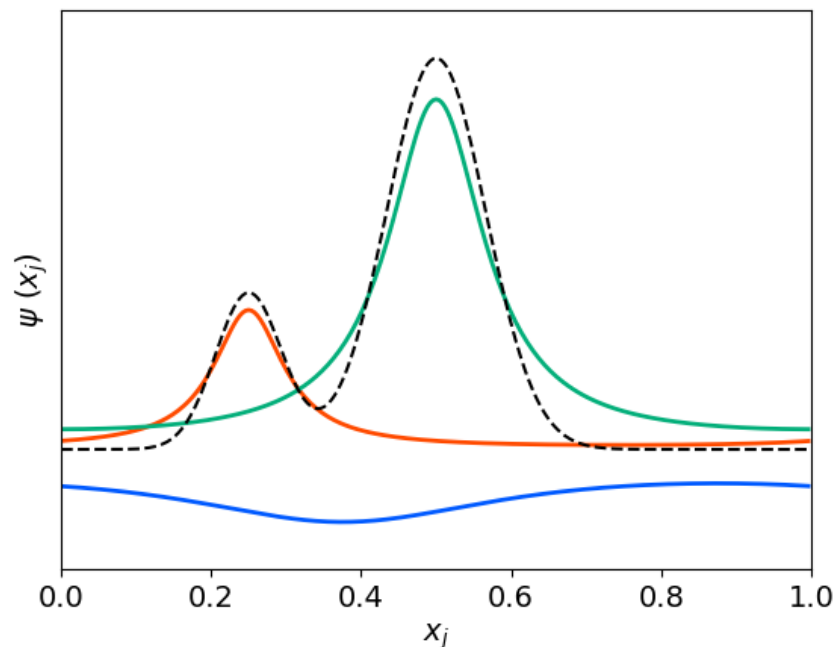
数値計算例

Numerical example

多量子ビットに少ない測定回数で量子状態を読み出すことに成功

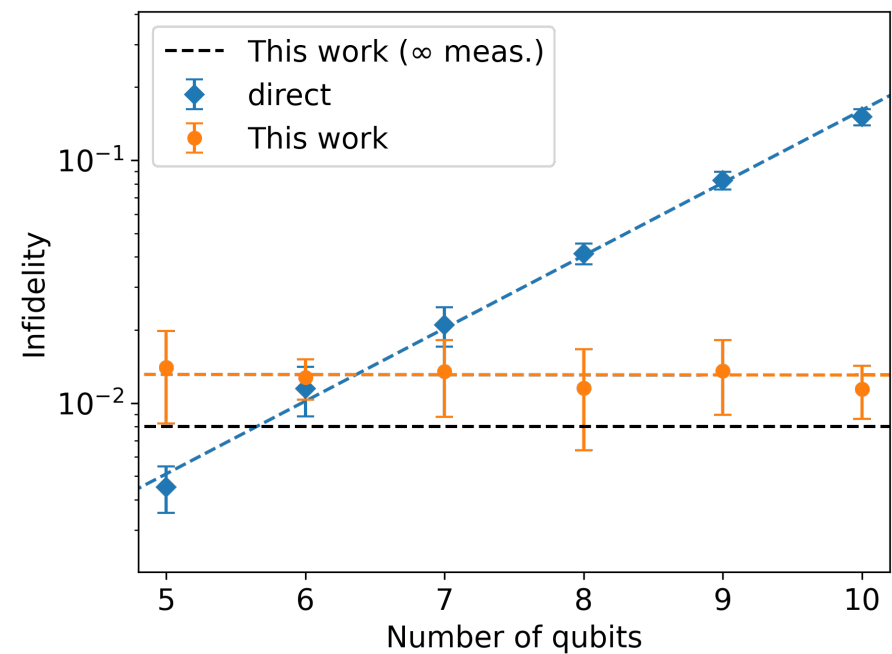
Successfully readout quantum state using fewer measurements for a large number of qubits

測定回数 1,000回
1,000 measurements



ピーク位置・幅が与えられた場合

Cases of given peak centers and width



量子状態読み出しの新技术開発 Practical Quantum Chemistry Scheme

HPC-FTQC Hybrid Computing

Input

小杉さんによるポスター発表で
紹介させていただきます
(量子化学計算でのエンコード)

Quemix technology

エンコードしやすい形に
古典Cで変換して量子Cへ入力

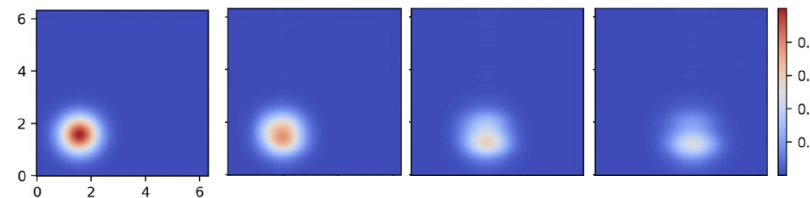
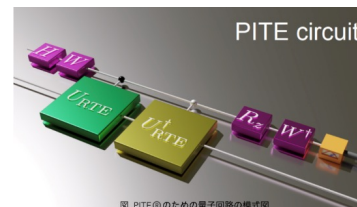
Convert the data into an easily
encodable form using a classical
computer and input it into quantum
computer

Quantum computing

Quemix technology

確率的虚時間発展法
(PITE[®])による
指数関数加速

Exponential speedup by
PITE[®] method



arXiv: 2409.18559 (2025).

Readout

Collaboration with

HONDA

Quemix technology

[新技术]

読み出しを行わず、
特徴量のみを抽出して
古典コンピュータで再構成

[NEW TECH.]

Extracting only features without direct
readout, and then reconstructing on a
CC

arXiv: 2505.08613 (2025).

全ての要素技術が揃った

All the necessary technological components were in place

PITE[®] アルゴリズム
Practical Quantum Chemistry Scheme

eFTQC時代の量子アルゴリズム

Quantum Algorithm for eFTQC Era

Method	System Size Dependence	Accuracy	# of Qubits	Application Era
PITE [®]	◎ 指数関数加速 Exponential speedup	△	○ 少ない Fewer	eFTQC
QLSAs	○ 多項式加速 Polynomial speedup	○	× 多い Many	FTQC

5年以内の量子超越

Aiming for quantum supremacy in 5years

ユースケース&共同研究募集中

Seeking use cases and collaborative research

PITE[®]アルゴリズムの流体計算への適用

Applications of PITE algorithm to fluid dynamics simulations

線型な流体方程式の場合に量子優位性が確認され、PITE[®]は他の量子アルゴリズムと比べても最速

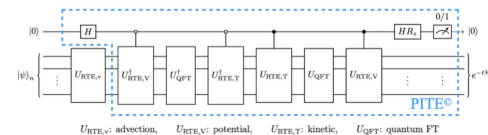
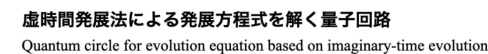
流体の方程式（ナビエ-ストークス方程式）

$$\frac{\partial u(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\hat{H}u(\mathbf{r}, t)$$

$$u(\mathbf{r}, t) = \underline{-\exp(-\hat{H}t)u(\mathbf{r}, t = 0)}$$

虚時間発展演算子 (非ユニタリ)

→ PITE®で実装可能

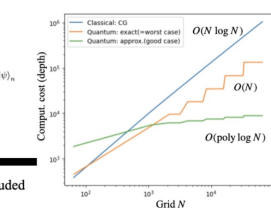


指数的加速の可能性 Possible exponential speed-up

※ 状態用意及び読み出しを除く statevec. preparation and readout NOT included

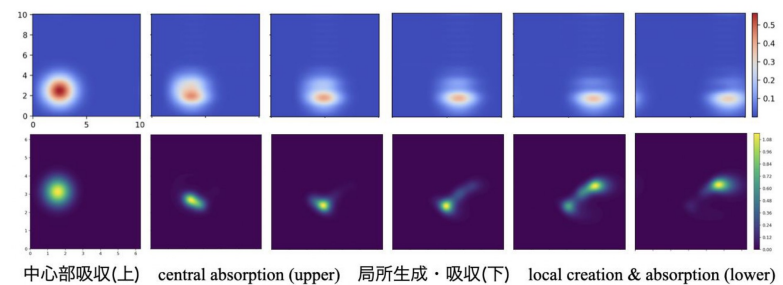
計算量の見積もり (量子 vs. 古典)

Evaluation of cost (quantum vs. classical)



計算例 2次元移流拡散方程式

Advection-diffusion equation in two dimension via Qiskit



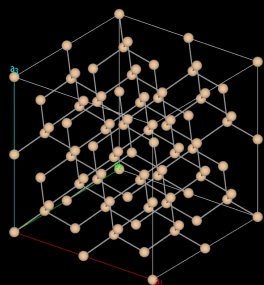
Huang and YM, arXiv: 2409.18559(2024).

FTQCで加速する機械学習：Quemixの技術

Accelerating Machine Learning by FTQC: Quemix's Technologies

ゲッコさんによるポスター発表で
紹介させていただきます

量子化学計算
Quantum Chemistry
Calculation



CAE計算
Computer Aided
Engineering



機械学習
Machine Learning



3つ全ての領域に対して5年以内に量子超越の実現を目指す

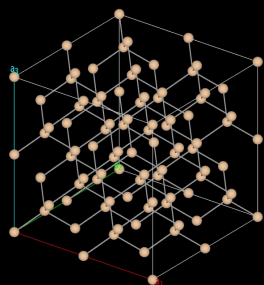
We aim to achieve quantum supremacy in all the following fields within the next five years

ユースケース&共同研究募集中

Seeking use cases and collaborative research

量子化学計算

Quantum Chemistry
Calculation



CAE計算

Computer Aided
Engineering



機械学習

Machine Learning



Empower the Future with Quantum Power



The Quantum Technology Company