

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

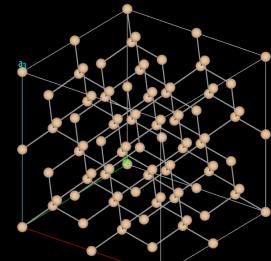
We've been focusing on developing **algorithms** for FTQC since our establishment in 2019

## 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



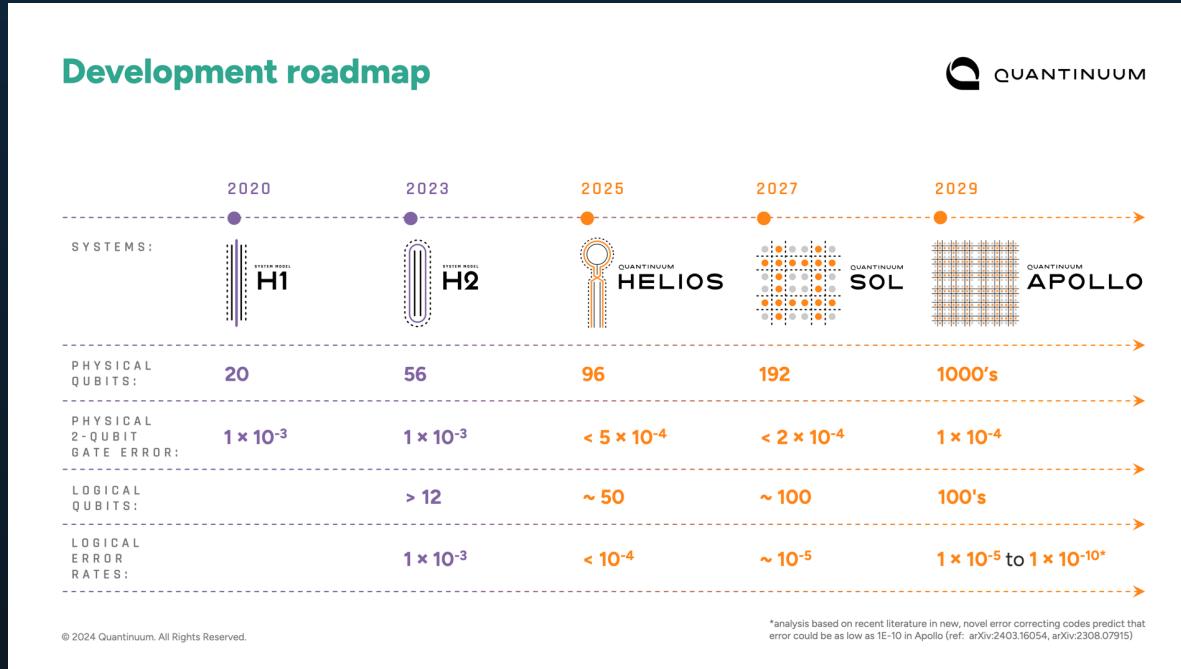
### 機械学習

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

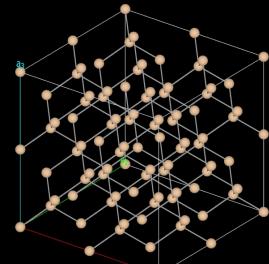
Quemix's Challenge: Striving for Quantum Supremacy

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

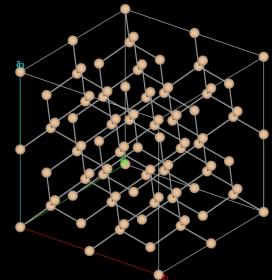


# FTQCで加速する量子化学計算：Quemixの技術

Accelerating Quantum Chemistry Calculations by FTQC: Quemix's Technologies

## 量子化学計算

Quantum Chemistry  
Calculation



## CAE計算

Computer Aided  
Engineering



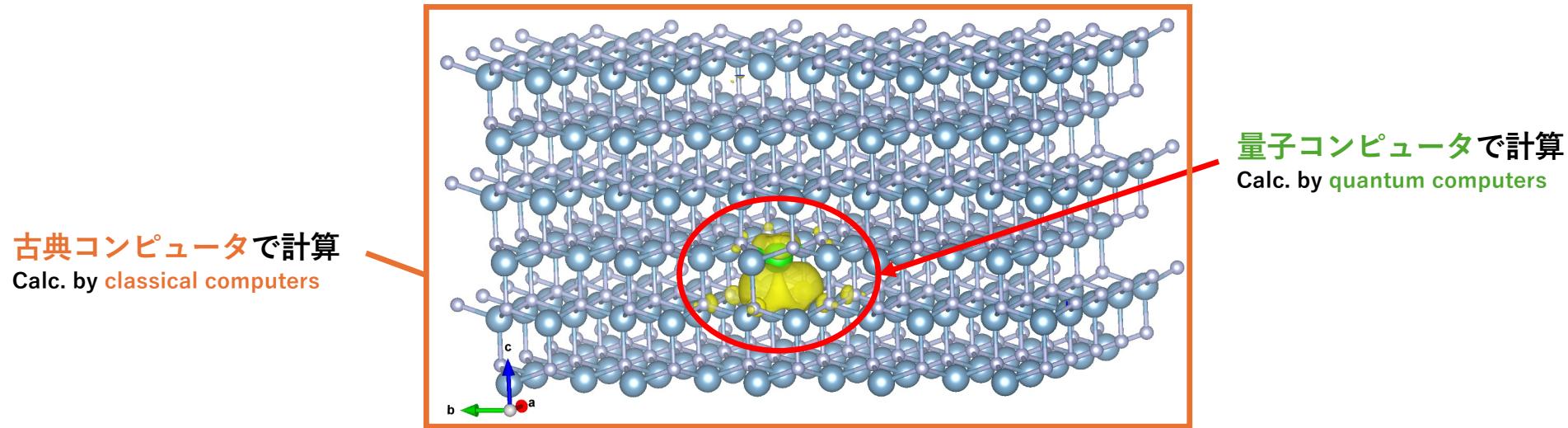
## 機械学習

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は大きすぎる  
Problem: The practical problem as a whole is too large for eFTQC machines



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.



有効ハミルトニアン  
Effective Hamiltonian

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

#### 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



#### 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

- 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<sup>®</sup>: 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 初期量子状態  
非ユニタリ

- ✓ 虚時間軸方向に時間発展を追うと、こう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

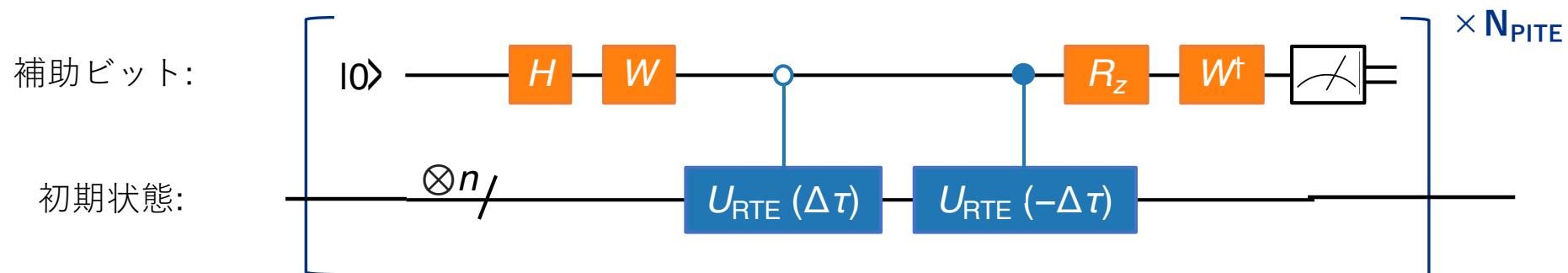
$$U_{\text{PITE}} \equiv \begin{pmatrix} M & \sqrt{1-M^2} \\ \sqrt{1-M^2} & -M \end{pmatrix}$$

PITEの作用:

$$|\psi\rangle \otimes |0\rangle \xrightarrow{\text{PITE}} \underbrace{M|\psi\rangle \otimes |0\rangle}_{\text{補助ビット}} + \underbrace{\sqrt{1-M^2}|\psi\rangle \otimes |1\rangle}_{\text{成功状態}} \quad \text{失敗状態}$$

$|0\rangle$ 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).

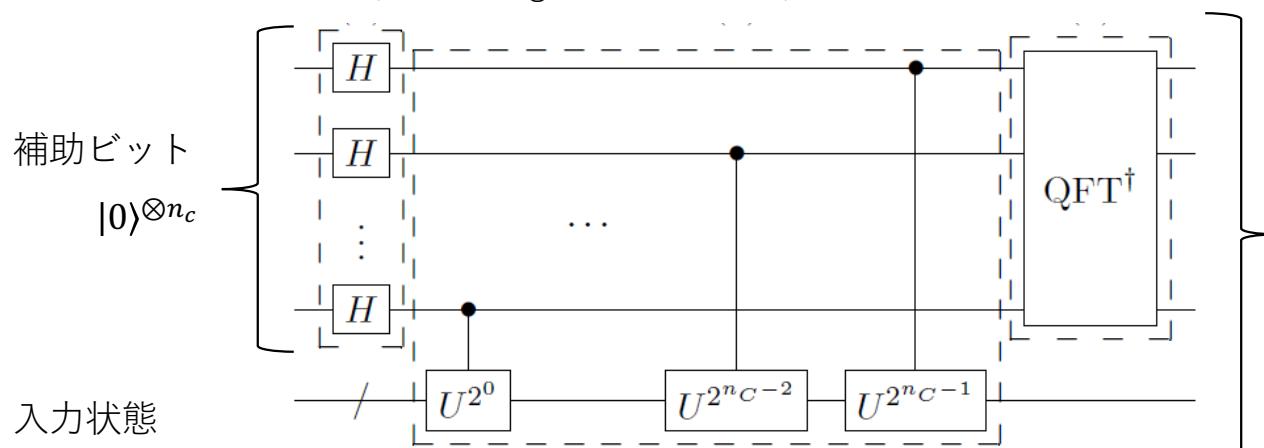
# 応答関数計算のための量子アルゴリズム

## 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

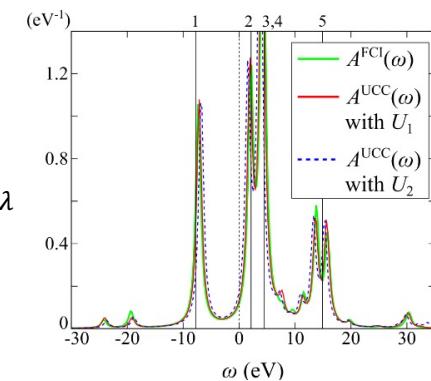
$$G_{mm'}^{(h)}(z) = \langle \Psi_{\text{gs}}^N | a_{m'}^\dagger \frac{1}{z - E_{\text{gs}}^N + \mathcal{H}} a_m | \Psi_{\text{gs}}^N \rangle = \sum_{\lambda \in N-1} \frac{\langle \Psi_{\text{gs}}^N | a_{m'}^\dagger | \Psi_\lambda^{N-1} \rangle \langle \Psi_\lambda^{N-1} | a_m | \Psi_{\text{gs}}^N \rangle}{z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

基底状態に正孔が生じた状態  
(Jordan-Wigner変換を用いる)



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

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

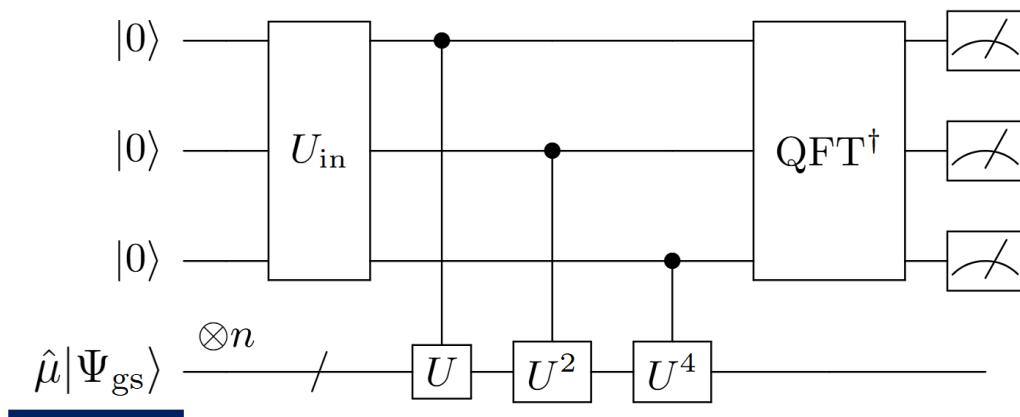
補助ビットを測定することにより、  
確率  $P_{\lambda} = |c_{\lambda}|^2 = |\langle \Psi_{\lambda}^{N-1} | a_m | \Psi_{\text{gs}}^N \rangle|^2$   
で二進数表現の固有値  $E_{\lambda}^{N-1}$  を得る

# 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

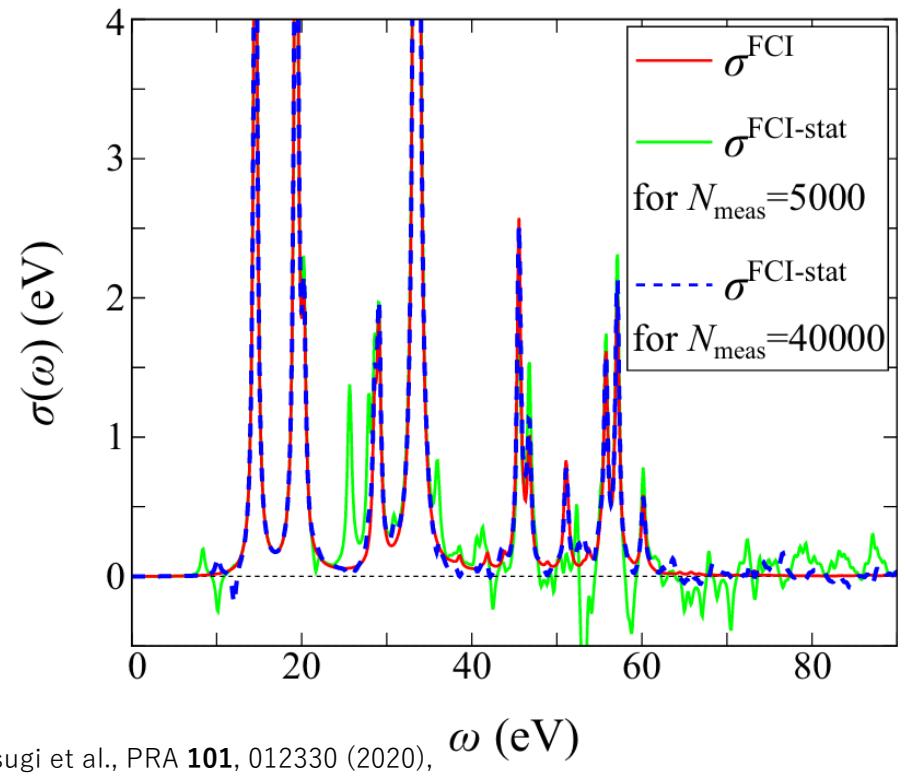
QPEのアウトプットのサンプリング結果がXAFSスペクトルになる

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

### N<sub>2</sub>分子の光学吸収スペクトル

The photoabsorption spectrum for N<sub>2</sub> molecule



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

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

Quemix technology

# 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

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

#### 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



#### 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

- 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

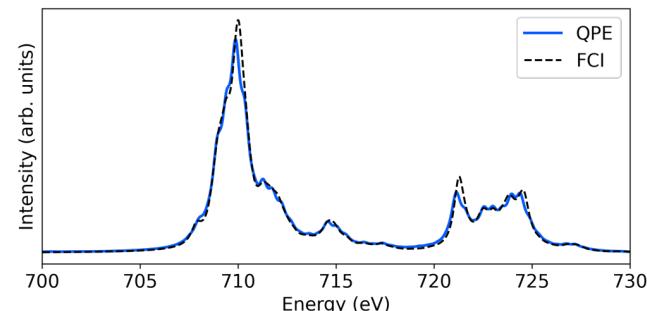
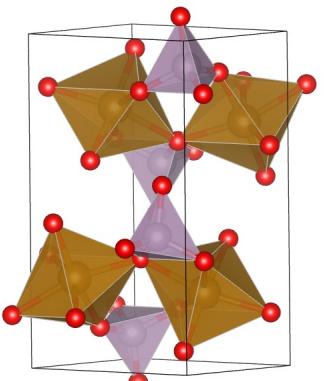
## Executing end-to-end quantum chemistry calculations using a real machine

Collaboration with

**HONDA**

ターゲット：電池材料のXAFSスペクトル

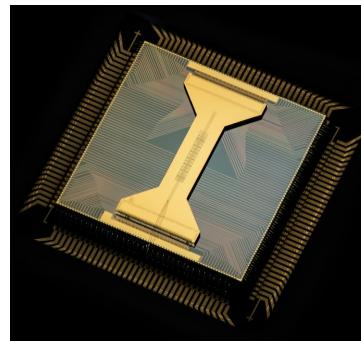
Target: XAFS spectrum from a battery material



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 (Quantinuum)



  
QUANTINUUM

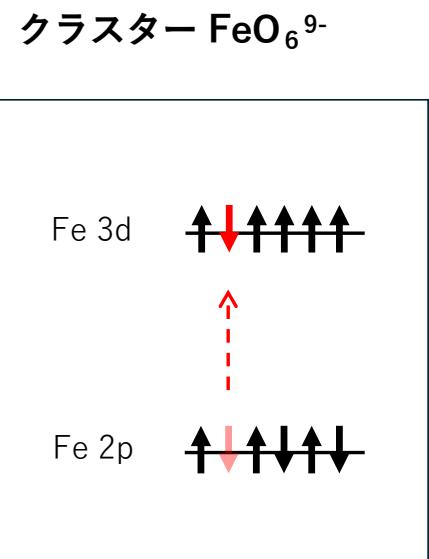
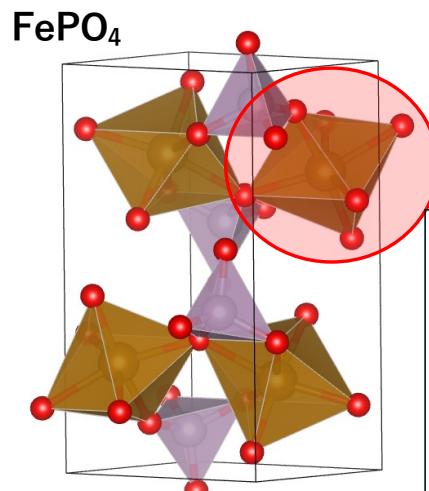
Azure Quantum

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

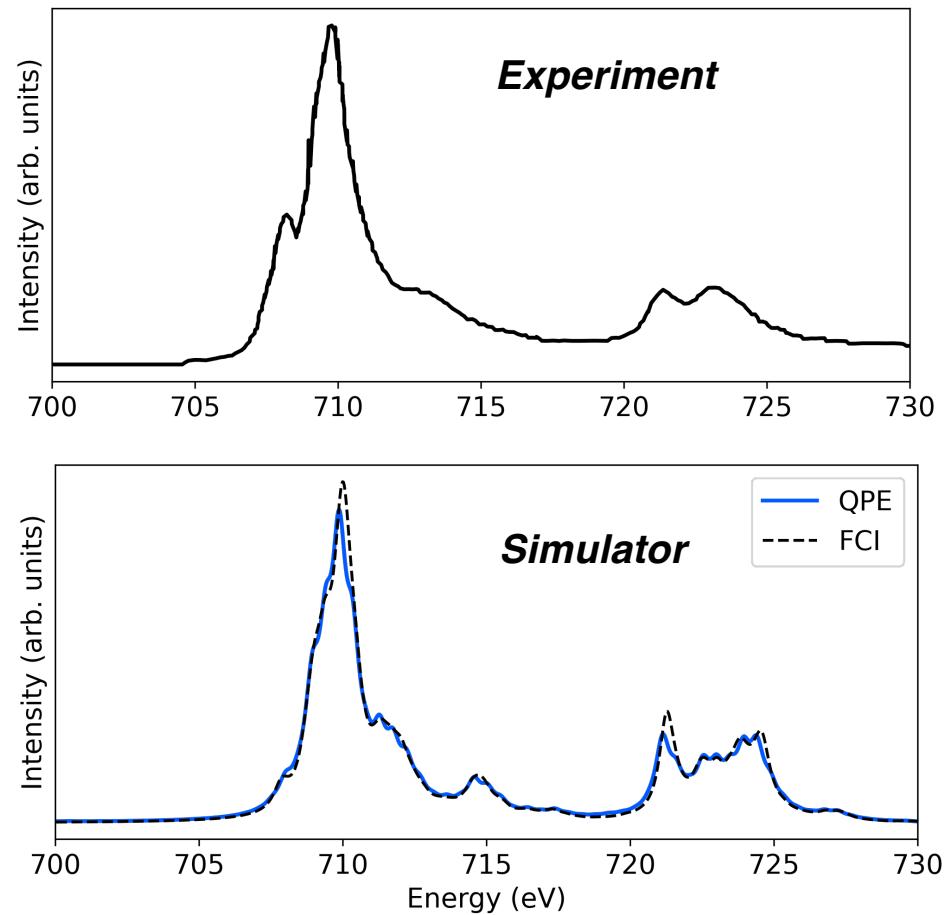
# XAFSのシミュレーション結果

## Simulation result for XAFS



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**

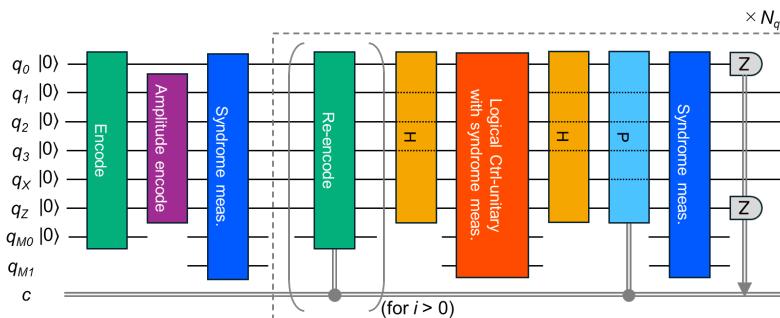
今現在の量子ハードの性能を擬似的にeFTQC化するため、量子エラー検出（QED）を用いた

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 :  $56 \rightarrow 8$   
Required # of physical qubits:  $56 \rightarrow 8$

必要なゲート操作数 : 12分の1へ  
Required # of gate operations: reduced to 1/12

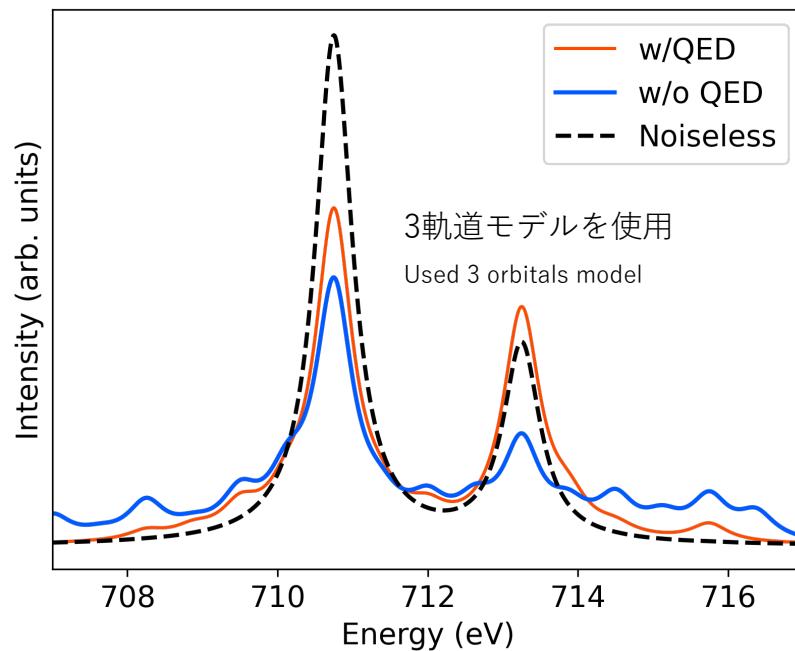
# 結果： XAFSスペクトル

## Results: XAFS spectra

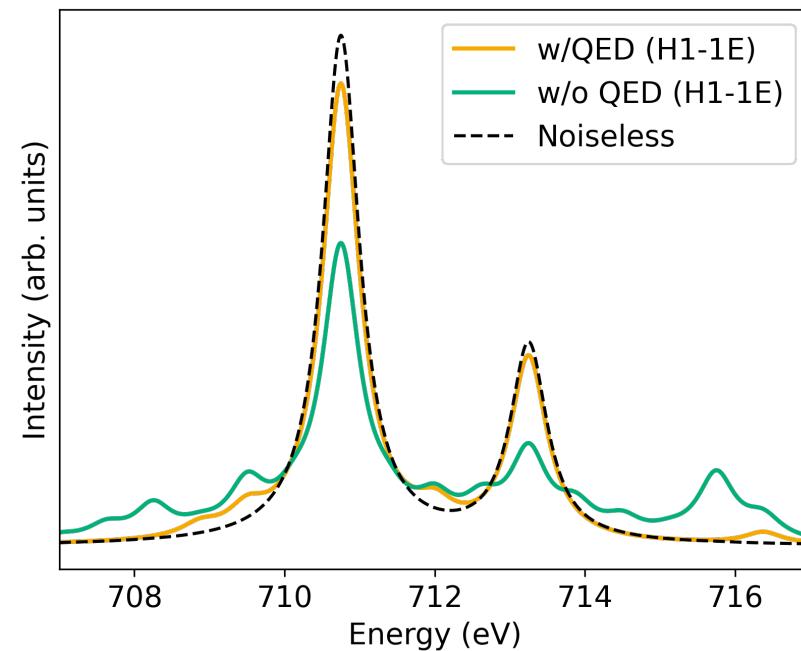
QPEにより、現在のイオントラップ量子コンピュータがXAFSスペクトルを理想的なFTQCの結果と比較して  $1.8 \times 10^{-2}$  の誤差で取得（エミュレータでは  $6.1 \times 10^{-3}$ ）

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

実機/QPU (H1-1)



Emulator (H1-1E)



# 実用的な量子化学計算スキーム

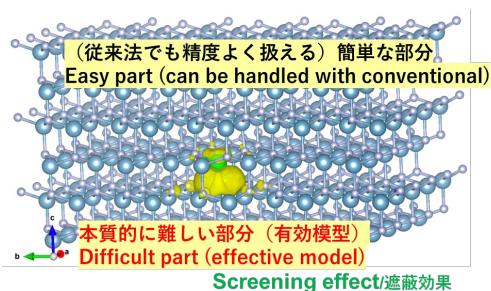
## Practical Quantum Chemistry Calc. Scheme

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

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

### 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

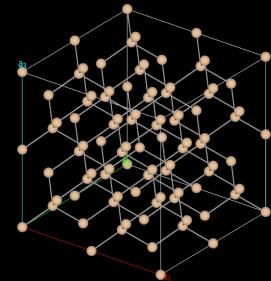
ユースケース&共同研究募集中  
Seeking use cases and collaborative research

# 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

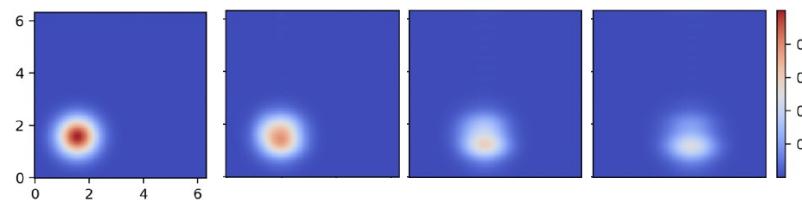
インプットしやすい形に  
古典Cで変換して量子Cへ入力

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<sup>®</sup>)による  
指数関数加速

Exponential speedup by  
PITE<sup>®</sup> method



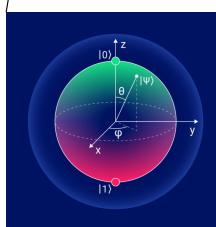
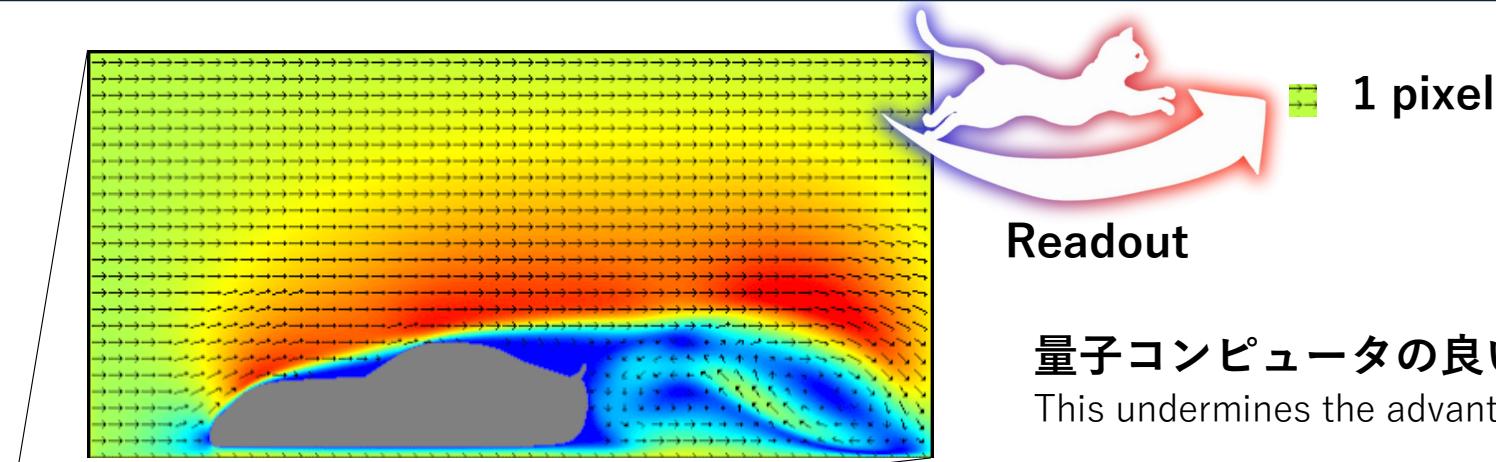
Missing Piece…

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.



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

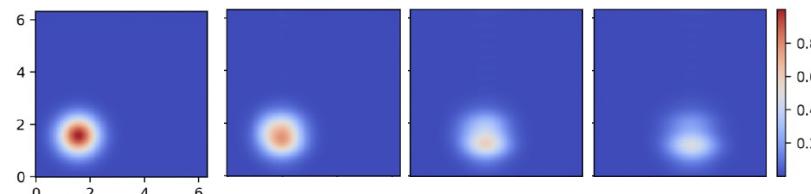
Convert the data into an easily  
encodable form using a classical  
computer and input it into quantum  
computer

Quantum computing

Quemix technology

確率的虚時間発展法  
(PITE<sup>®</sup>)による  
指数関数加速

Exponential speedup by  
PITE<sup>®</sup> method



Readout

Collaboration with

**HONDA**

Quemix technology

[新技術]  
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

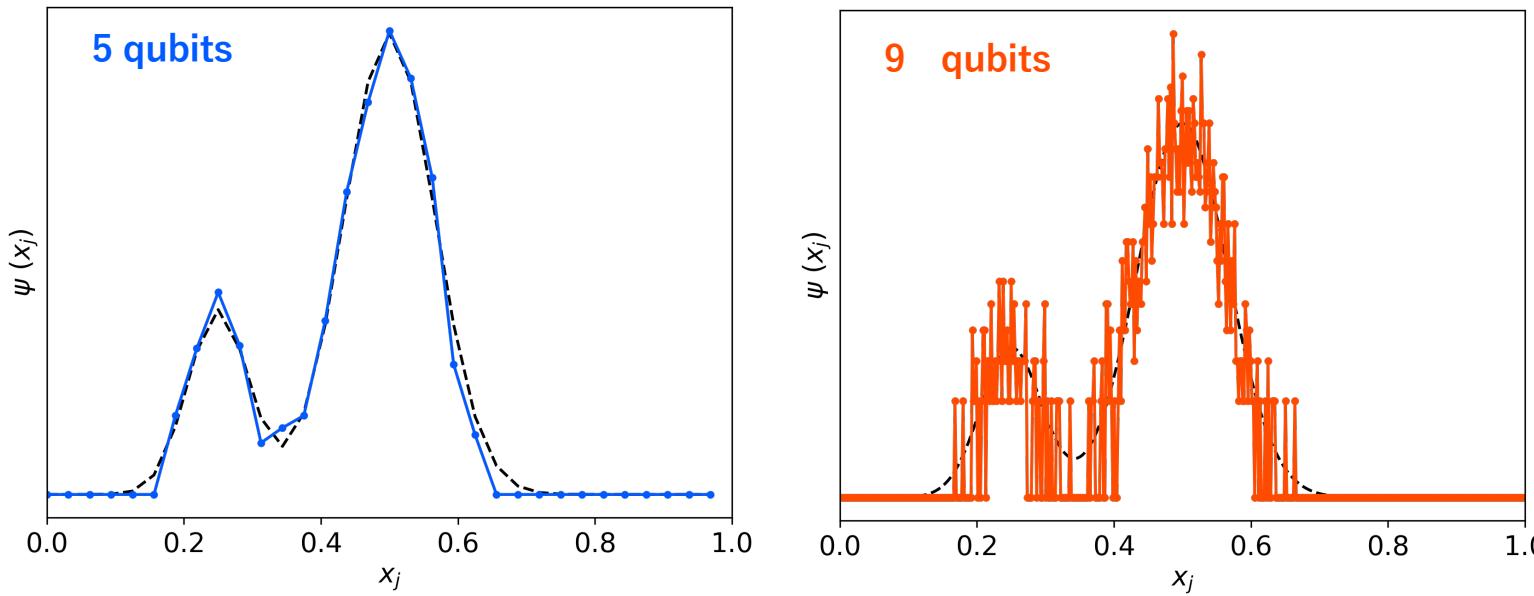
All the necessary technological components were in place

# 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

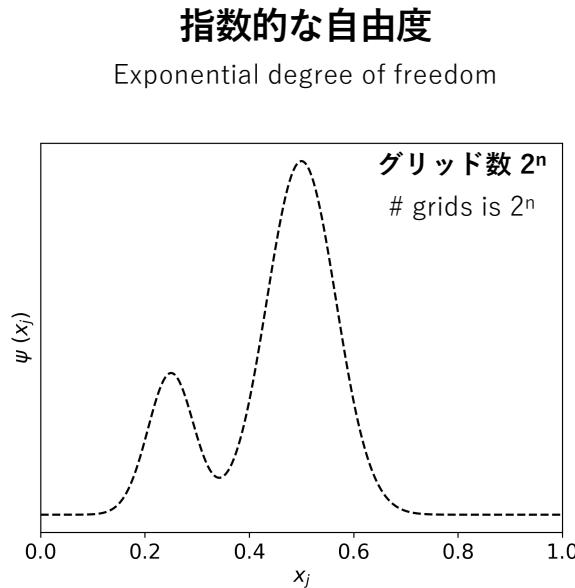
The magnitude of coefficients decreases as the number of qubits increases. High precision is required.

# 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

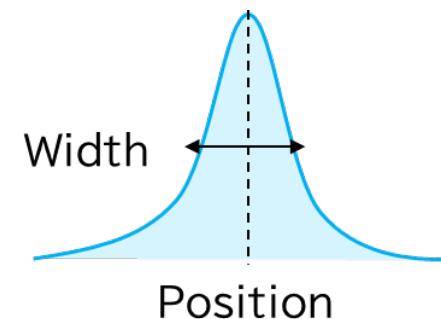
In amplitude encoding, the cost of quantum computation increases as the number of qubits increases.



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

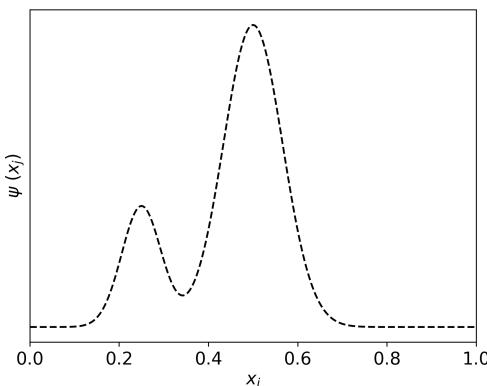
Kosugi et al, Phys. Rev. A **110** 062407(2024)  
Kosugi et al., arXiv 2501.07211(2025)

# 量子状態の読み出し

## Quantum state readout

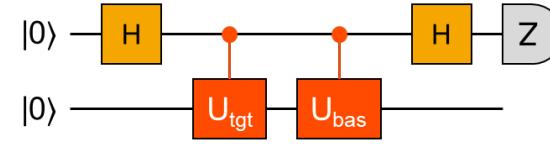
量子古典ハイブリッド計算により、  
目的の量子状態の特徴量を抽出

Extract feature of target state by Q/C  
hybrid calculation



特徴量抽出  
Feature extraction

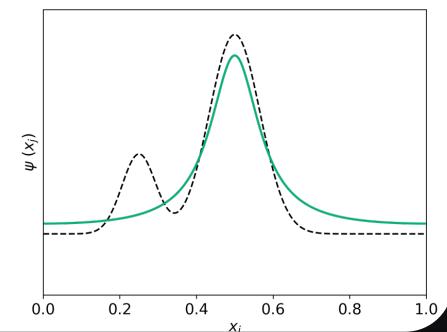
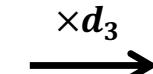
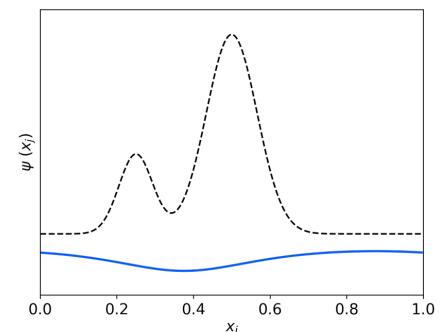
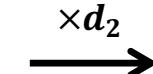
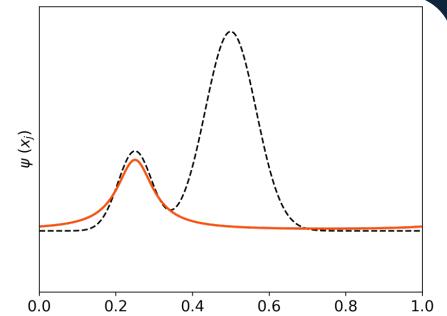
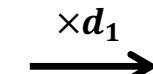
量子重なり計算  
Quantum overlap calc.



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

$$Gd = \kappa SG$$

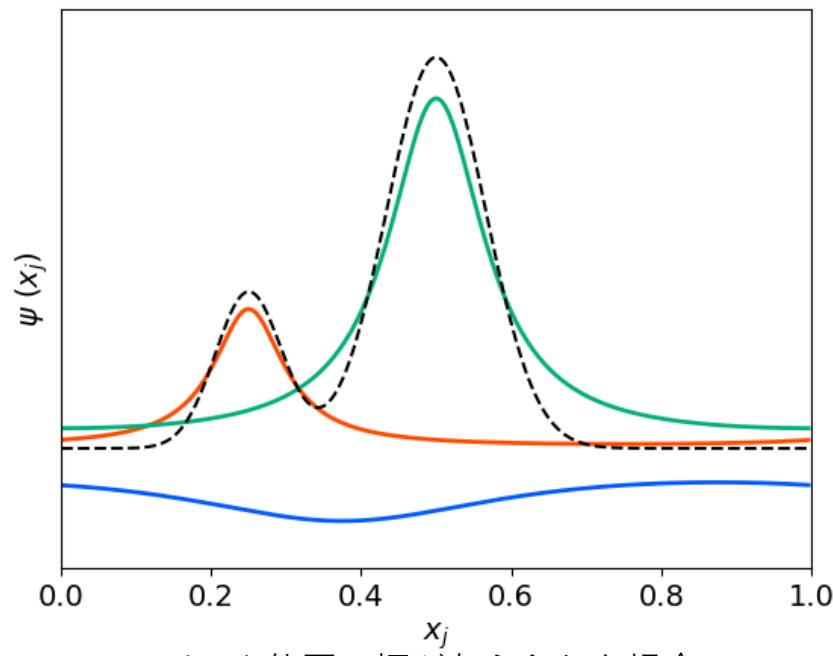
$$|\psi_{tgt}\rangle \approx \sum_{\ell} d_{\ell} |\psi_{\ell}\rangle$$



## 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

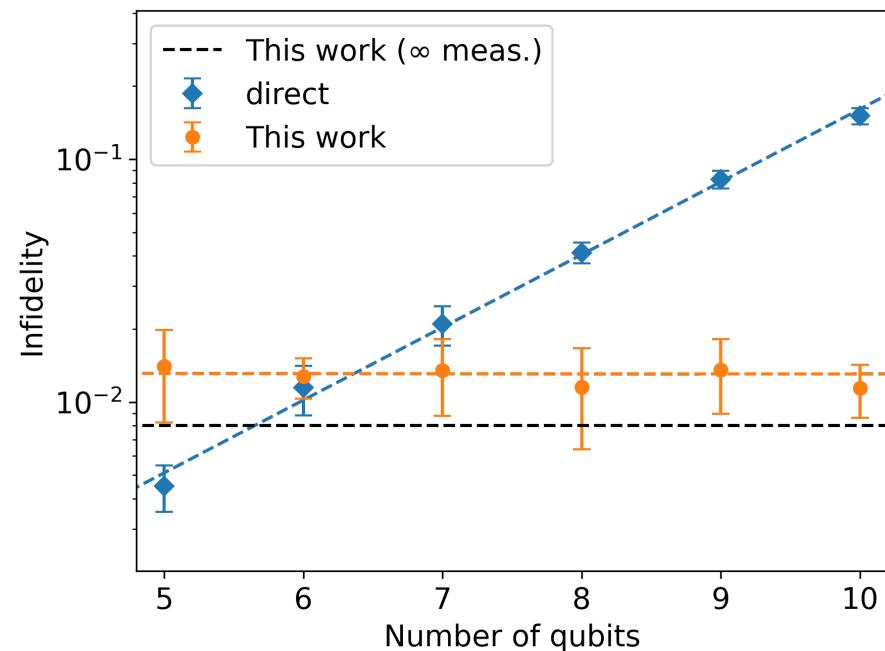


ピーク位置・幅が与えられた場合

Cases of given peak centers and width

測定回数 1,000回

1,000 measurements



# 量子状態読み出しの新技術開発

## 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

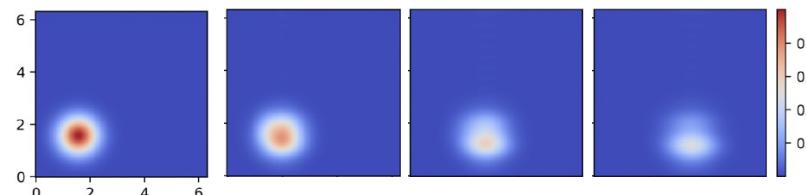
エンコードしやすい形に  
古典Cで変換して量子Cへ入力  
Convert the data into an easily  
encodable form using a classical  
computer and input it into quantum  
computer

Quantum computing

#### Quemix technology

確率的虚時間発展法  
(PITE<sup>®</sup>)による  
指数関数加速

Exponential speedup by  
PITE<sup>®</sup> method



arXiv: 2409.18559 (2025).

Readout

Collaboration with

**HONDA**

#### Quemix technology

[新技術]  
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

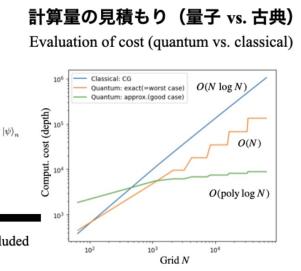
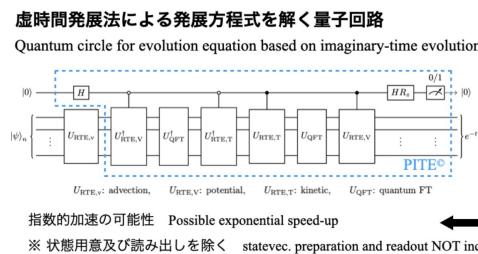
流体の方程式（ナビエ-ストークス方程式）

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

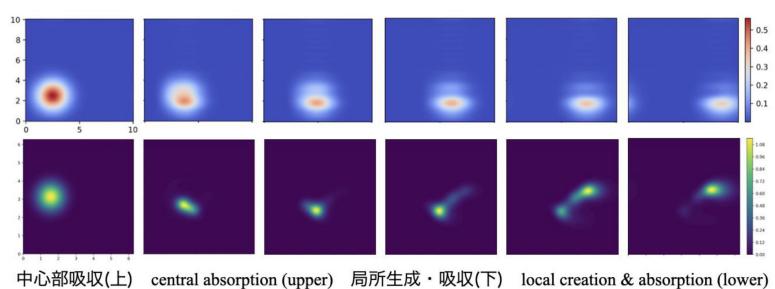
$$u(\mathbf{r}, t) = \underline{-\exp(-\hat{H}t)u(\mathbf{r}, t=0)}$$

虚時間発展演算子（非ユニタリ）

→ PITE®で実装可能



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).

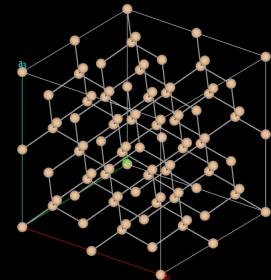
# FTQCで加速する機械学習：Quemixの技術

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



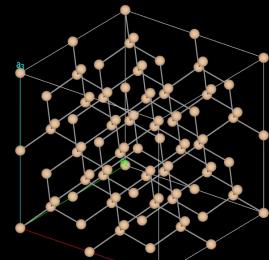
**3つ全ての領域に対して5年以内に量子超越の実現を目指す**

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