

The Future of Simulation and Machine Learning
Transformed by FTQC
～ FTQC Demonstration Has Begun ～

FTQCで変わる未来のシミュレーション・機械学習
～始まったFTQCの検証～

Yu-ichiro Matsushita / 松下 雄一郎
President & CEO / 代表取締役 CEO
Quemix Inc. / 株式会社 Quemix /



YU-ICHIRO MATSUSHITA

/ 松下 雄一郎



Chief Executive Office(CEO) Quemix Inc.
/ 株式会社Quemix 代表取締役CEO

Specially Appointed Associate Professor, The University of Tokyo
/ 東京大学 理学部物理学科 特任准教授

Project chief, Quantum Materials Theory Group, National Institutes for Quantum Science and Technology (QST)
/ 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

Specially Appointed Associate Professor, Tokyo Institute of Technology
/ 東京工業大学 科学技術創成研究院 特任准教授

QUANTUM COMPUTER

- We will announce 4 latest news.
/ 4つの最新ニュースを発表します

QUANTUM SENSOR

- We are exhibiting actual quantum sensors at our booth.
/ ブースに量子センサの実物を展示しています

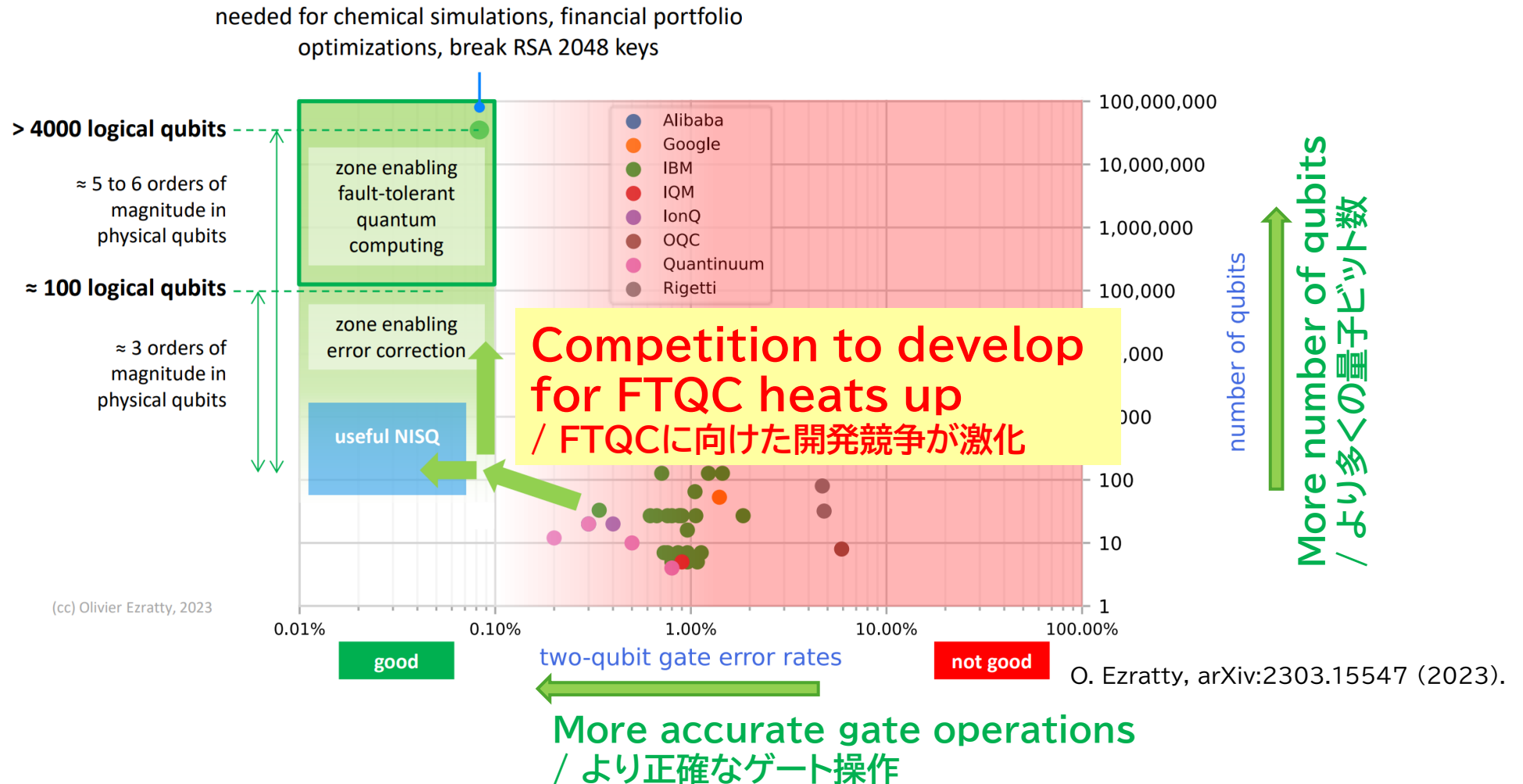


<https://www.flickr.com/photos/ibm-research-zurich/albums/72177720306298550/>

Challenging of current quantum computer / 現時点における量子計算機技術への挑戦

■ HW is advancing step by step for useful NISQ, Early-FTQC, and FTQC.

/ ハードウェアは有用なNISQ、Early-FTQC、FTQCに向けて着実に進展している



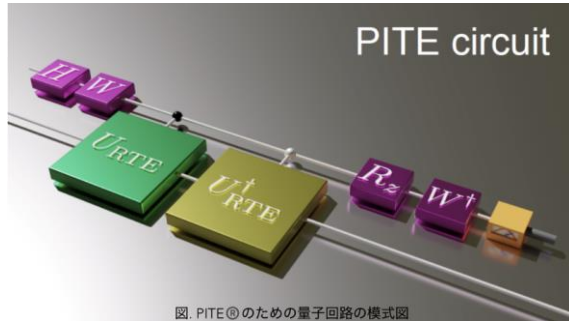
List of our developing technologies / 我々が開発を行ってきたFTQC用の技術一覧

- Since our establishment, we have been developing algorithms and software for the coming era of FTQC.

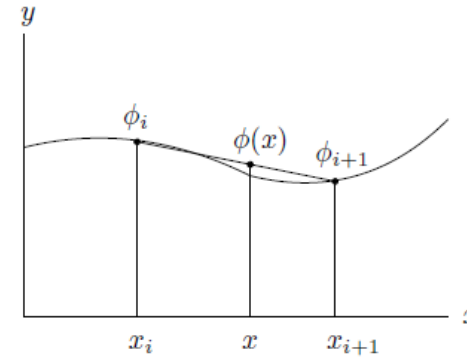
/ 我々はFTQC到来時代に向けたアルゴリズム・ソフト開発を設立以来行ってきた

PITE®

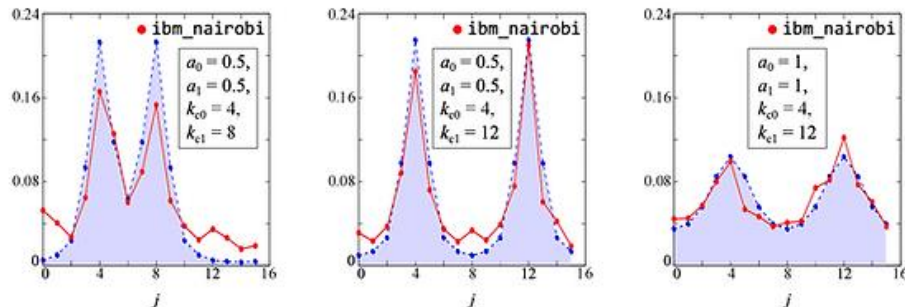
Probabilistic imaginary-time evolution
/ 確率的虚時間発展法



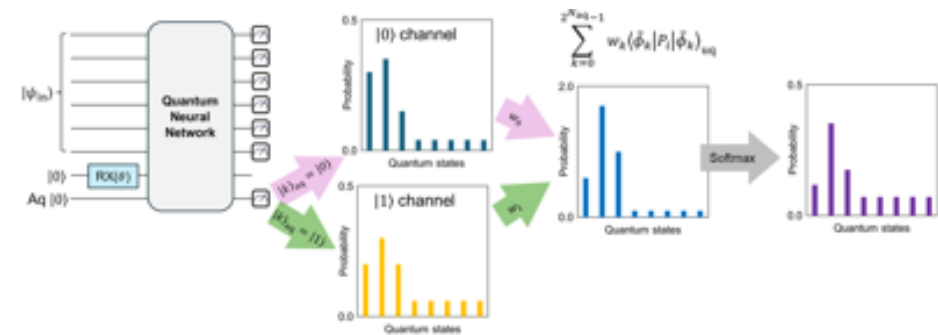
Potential interpolation technology
/ ポテンシャル補間技術



Qubit encoding
/ 量子ビットエンコーディング



Quantum channel attention
/ 量子チャネルアテンション



4 results on quantum computing technology / 量子コンピュータ関連事業から4つの成果

1. FTQC algorithm **execution** on an actual computer

/ FTQCアルゴリズムの**実機上での実行**

2. **New** quantum chemical calculation method

/ **新しい量子化学計算**の提案

3. **Fluid simulation** by a quantum computer

/ **流体**の量子計算

4. Quantum **Generative AI**

/ 量子**生成AI**

1. FTQC algorithm **execution** on an actual computer

/ FTQCアルゴリズムの**実機上での実行**

■ You may think FTQC algorithms cannot run on current QC...

/ 今の量子コンピュータではFTQCアルゴリズムは実行できないと思われるかもしれない

■ **No, our FTQC algorithms become viable with current QC.**

/ FTQCアルゴリズムは今の量子コンピュータ上でも実行可能になりつつある

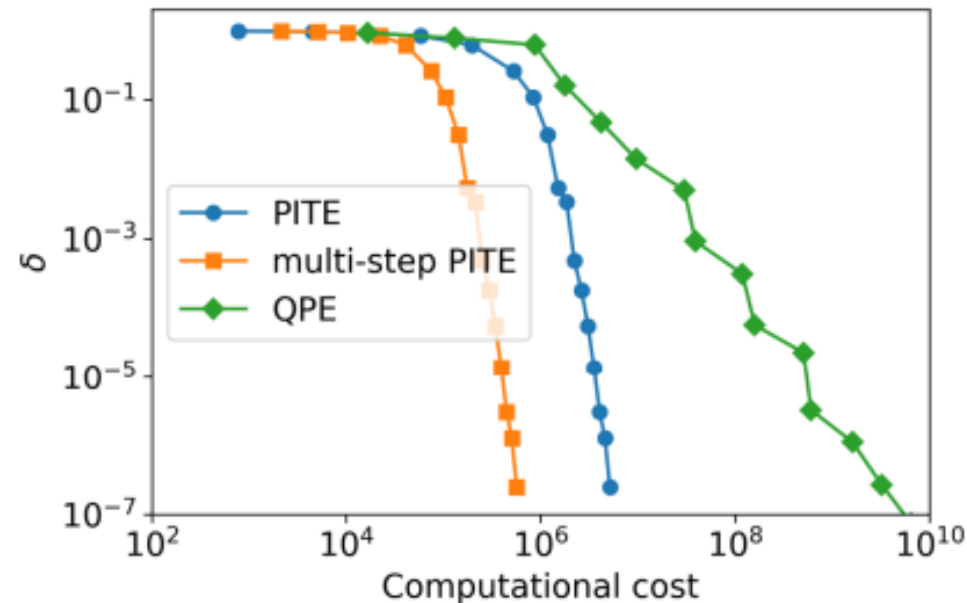
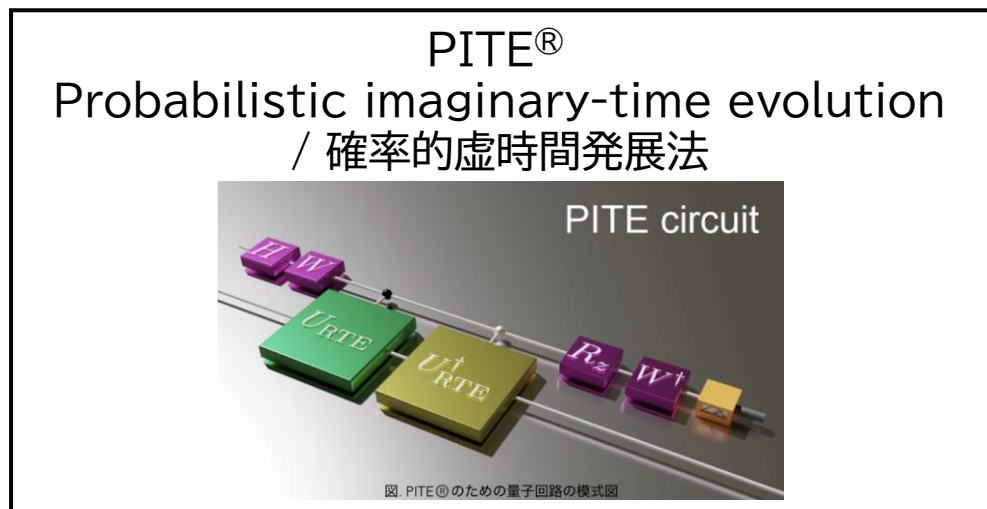
Probabilistic Imaginary-Time Evolution method: PITE[®] / 確率的虚時間発展法:PITE[®]

- PITE is Quemix's proprietary quantum algorithm for obtaining the lowest energy and lowest cost states.

/ PITEは、最低エネルギー状態や最低コスト状態を得る、Quemix独自の量子アルゴリズムである

- Confirmed that the quantum acceleration occurs from resource analysis

/ 計算量の解析から量子加速することを確認



Kosugi, Nishiya, Nishi, and Matsushita, Phys. Rev. Res. **4**, 033121 (2022).

Nishi, Kosugi, Nishiya, and Matsushita, Phys. Rev. Res. **6**, L022041 (2024).

イオントラップ型量子コンピュータ/ Trapped-ion quantum computer

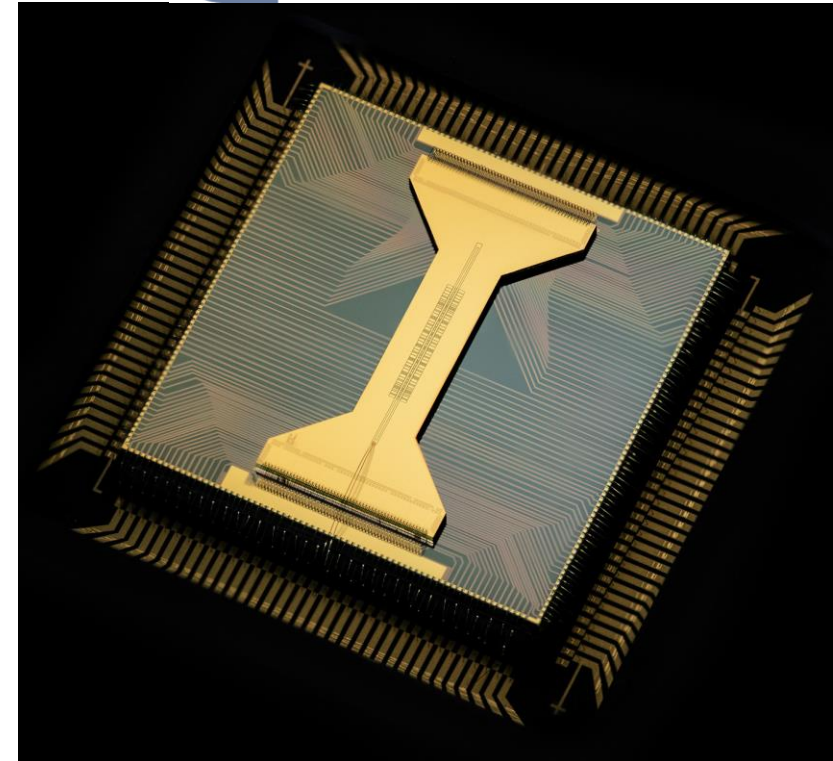
■ Feature of Quantinuum H1-1 quantum computer, suitable for Quantum Error Detection(QED) & FTQC algorithms

/ クオンティニウムH1-1量子計算機の特徴は、量子誤り検出(QED)とFTQCアルゴリズムにとって望ましい

- High fidelity two-qubit gates, 99.9% / 99.9%の高い二量子ゲート忠実度
- All-to-all connectivity / 全結合
- Mid-circuit measurement and reuse / 回路中間測定と再利用



No. qubits / 量子ビット数	20
Quantum volume / 量子体積	2^{20}
Single qubit gate fidelity / 単一量子ゲート忠実度	99.9979(3) %
Two qubit gate fidelity / 二量子ゲート忠実度	99.914(3) %

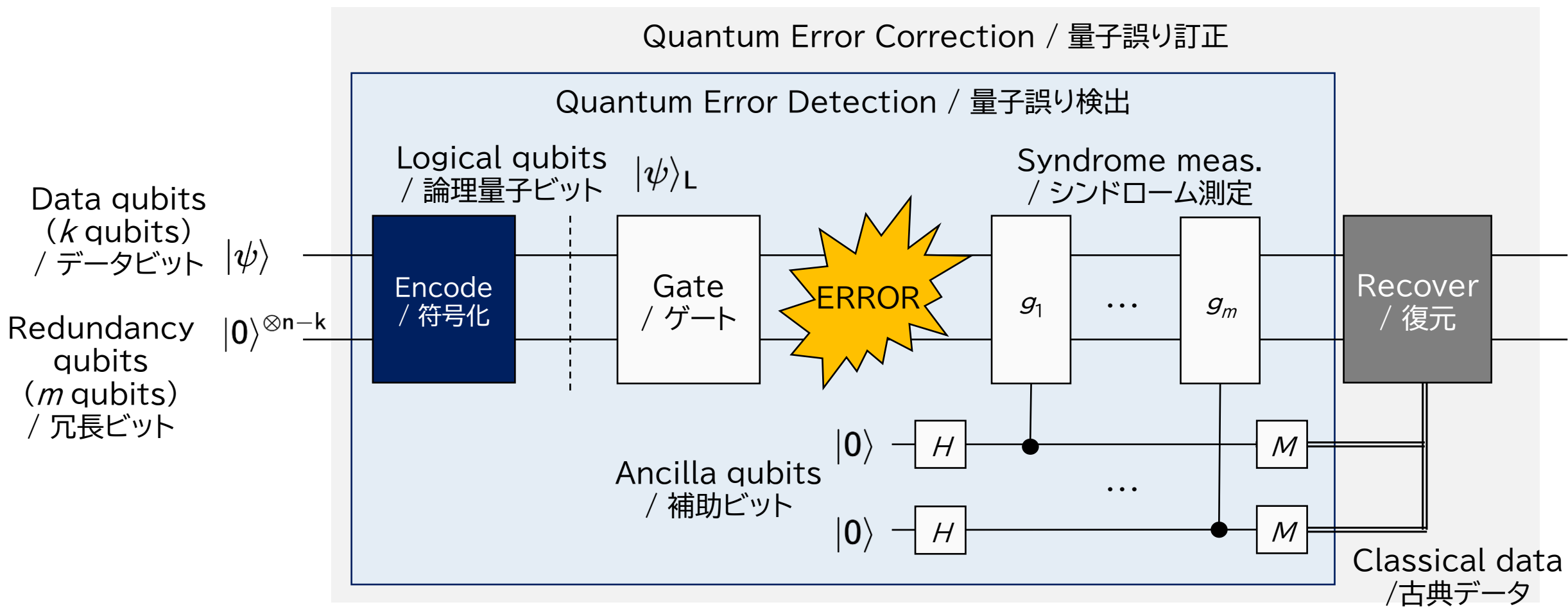


<https://www.quantinuum.com/hardware/h1>

Quantum Error Detection (QED) / 量子誤り検出 (QED)

- QED implemented in PITE as a technique to simulate FTQC with current QC. Only results for which no errors were detected during a series of gate operations should be accepted.

/ FTQCを擬似的に実現するためのテクニックとして、QEDをPITEに実装. エラーが検出されなかった結果のみを採択.



Application target from Asahi Kasei / 計算ターゲットとして旭化成社の商材に適用

- The target of this calculation is a system that cannot be well described using DFT.
/ 今回の計算ターゲットは、DFTではうまく記述することができない系
- Performs highly accurate ground state and excited state calculations using Asahi Kasei's products as calculation targets.
/ エラー検出機能を実装した、基底状態・励起状態計算のFTQCアルゴリズムを世界初で実行.

THU
25

July 25 @ 2:40 pm - 3:00 pm

TRACK: Case Studies
The Promise of Quantum Computing Technology to Accelerate the Research and Development of Innovative New Materials

ROOM: Tarragon

FEATURED SPEAKER(S):



西 紘史 / Hirofumi Nishi
研究開発部 部長 / Director, Research & Development
株式会社 Quemix / Quemix Inc.





青柳 岳司 / Takeshi Aoyagi
デジタル共創本部 インフォマティクス推進センター センター長、プリンシパルエキスパート / Senior General Manager of Informatics Initiative, Principal Expert
旭化成 株式会社 / Asahi Kasei Corporation



Google Calendar

iCal/Outlook

In 2014, VQE (NISQ algorithm) was executed on a real machine. Now, 10 years later, the FTQC algorithm is running on a real machine and ground state calculations have been performed for the first time.

/ 2014年にVQE(NISQアルゴリズム)が実機上で実行された。
それから10年を経た現在、FTQCアルゴリズムが実機上で動き、初めて基底状態計算が実行された。

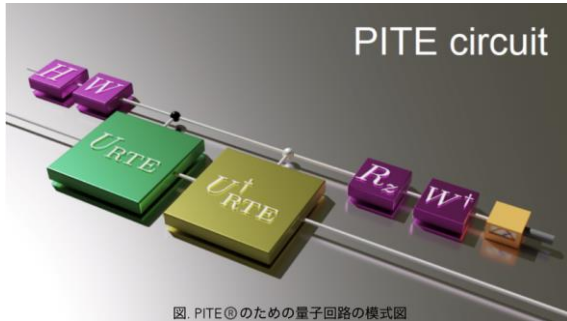
List of our developing technologies / 我々が開発を行ってきたFTQC用の技術一覧

- Since our establishment, we have been developing algorithms and software for the coming era of FTQC.

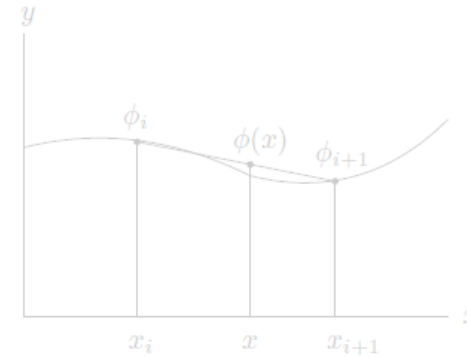
/ 我々はFTQC到来時代に向けたアルゴリズム・ソフト開発を設立以来行ってきた

PITE®

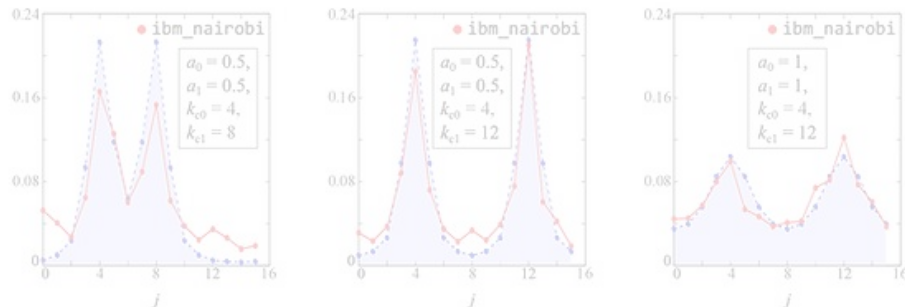
Probabilistic imaginary-time evolution
/ 確率的虚時間発展法



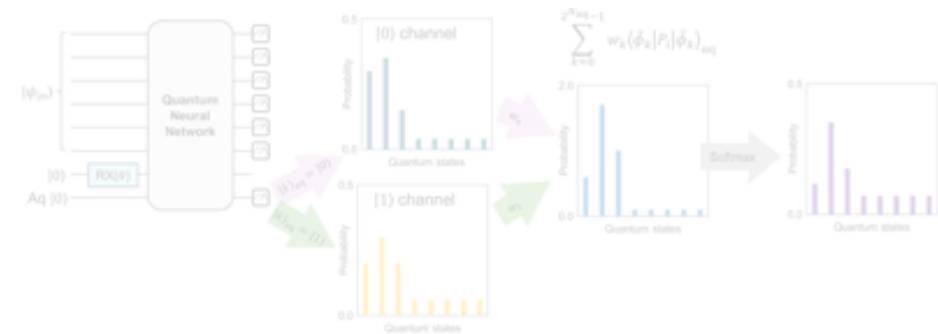
Potential interpolation technology
/ ポテンシャル補間技術



Qubit encoding
/ 量子ビットエンコーディング



Quantum channel attention
/ 量子チャネルアテンション



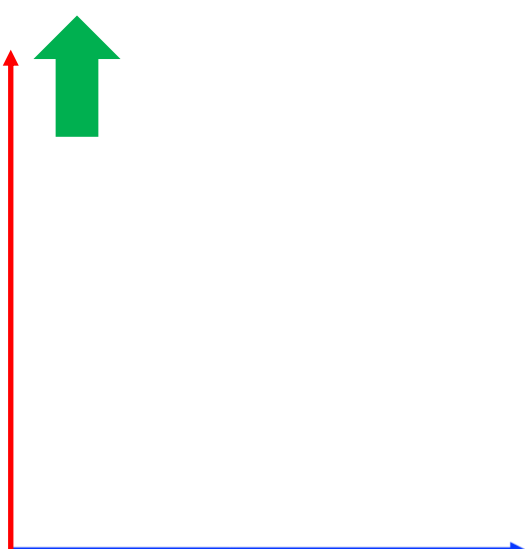
2. New quantum chemical calculation method

/ 新しい量子化学計算の提案

■ There are various axes in material calculation.

/ 材料計算には様々な軸がある

Size axis
/ 計算サイズ軸



Accuracy axis
/ 精度軸

Is there a way to handle larger system sizes instead of so-so computational accuracy?

/ 計算精度はソコソコで良い代わりに、もっと大きなシステムサイズを扱う量子化学計算手法はないか？

OFDFT using a quantum computer / 量子コンピュータを用いたOFDFT

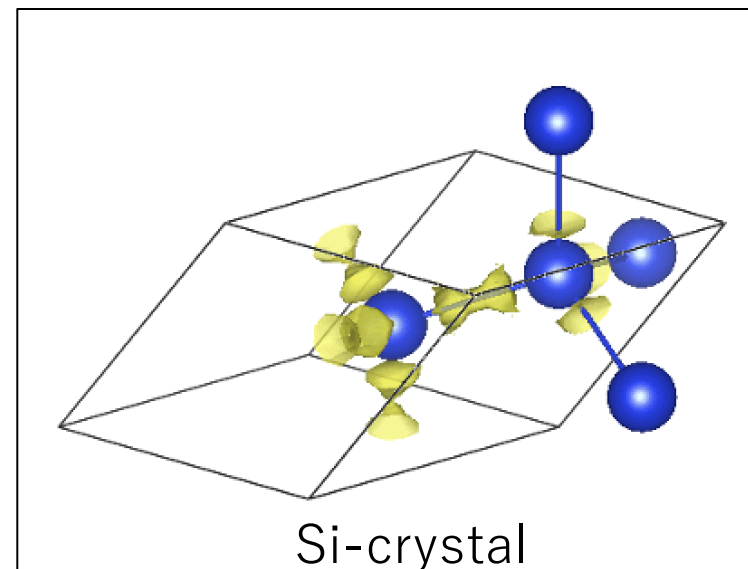
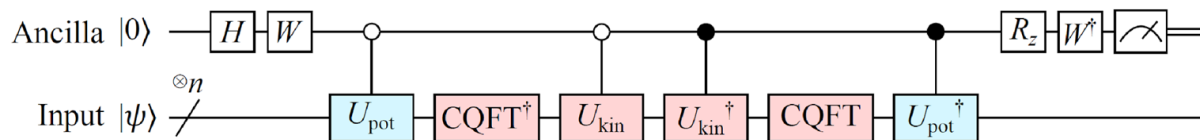
- Orbital-Free Density-Functional Theory (OFDFT) and quantum computers are compatible
/Orbital-Free Density-Functional Theory (OFDFT)と量子コンピュータの相性が良い
- Proposed a new quantum chemical calculation method for OFDFT with PITE.
/Orbital-Free DFT (OFDFT)を量子コンピュータ+PITEで実行する、新しい量子化学計算手法を提案

Equation of OFDFT
/ OFDFTの方程式

$$\hat{H}_{\text{OF}}[\rho_{\text{in}}]\sqrt{\rho_{\text{out}}} = \mu\sqrt{\rho_{\text{out}}}$$

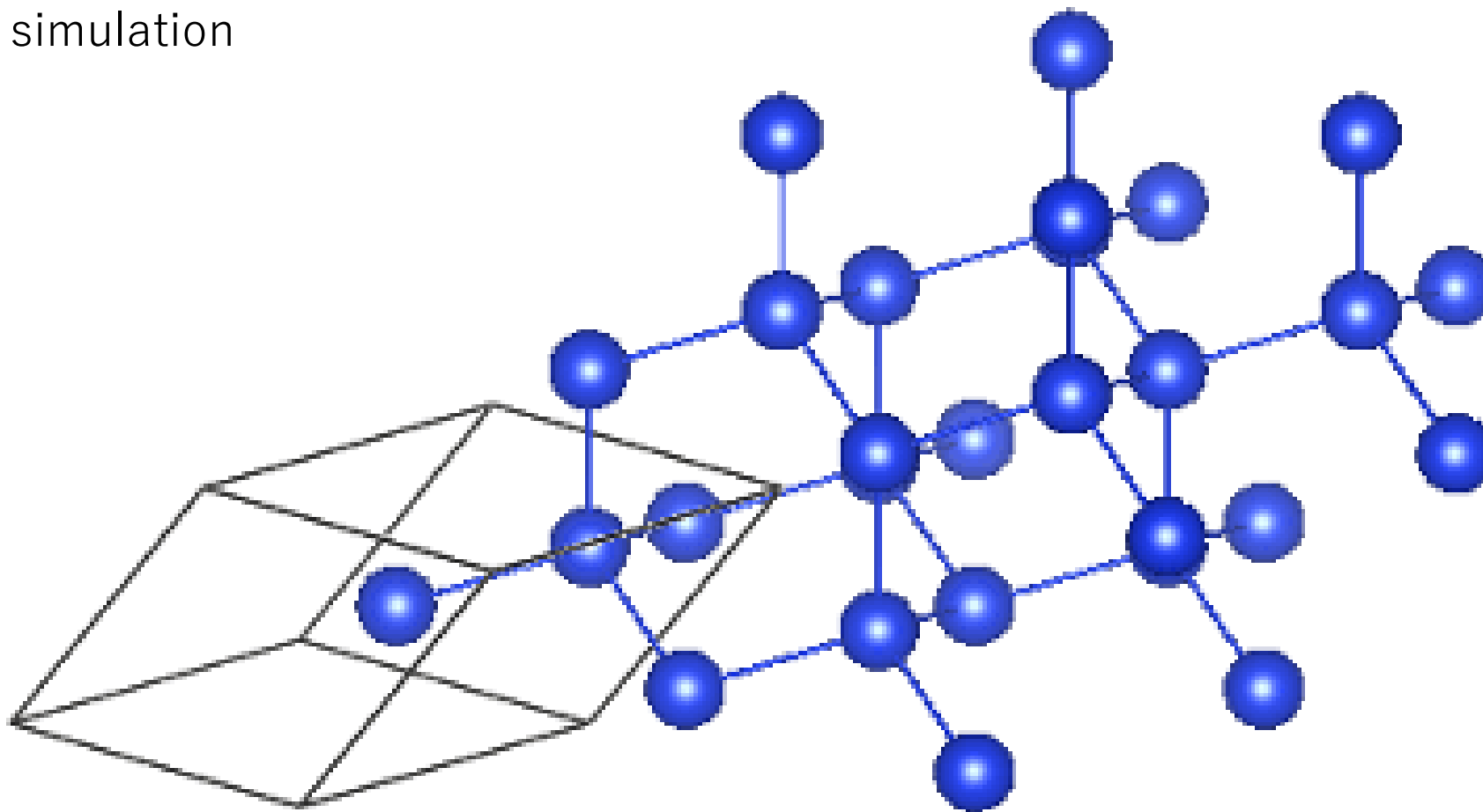
(32 × 32 × 32)-real space mesh
by only 15 qubit simulation

PITE for OFDFT eq.
/ PITE法のOFDFTへの適用

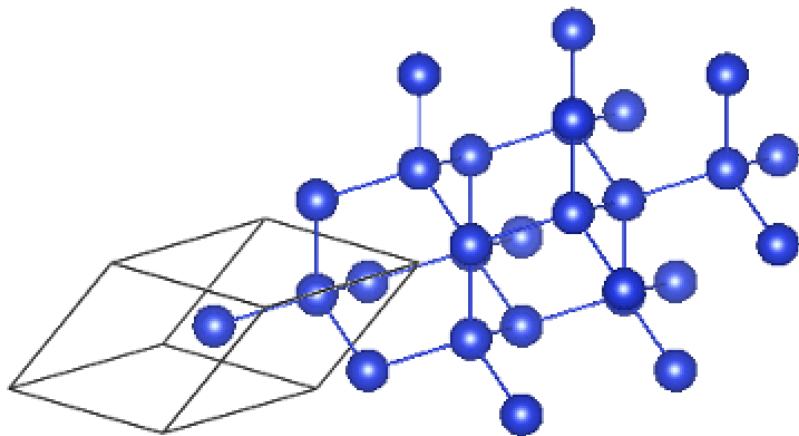


OFDFT using a quantum computer / 量子コンピュータを用いたOFDFT

($32 \times 32 \times 32$)-real space mesh
by only 15 qubit simulation

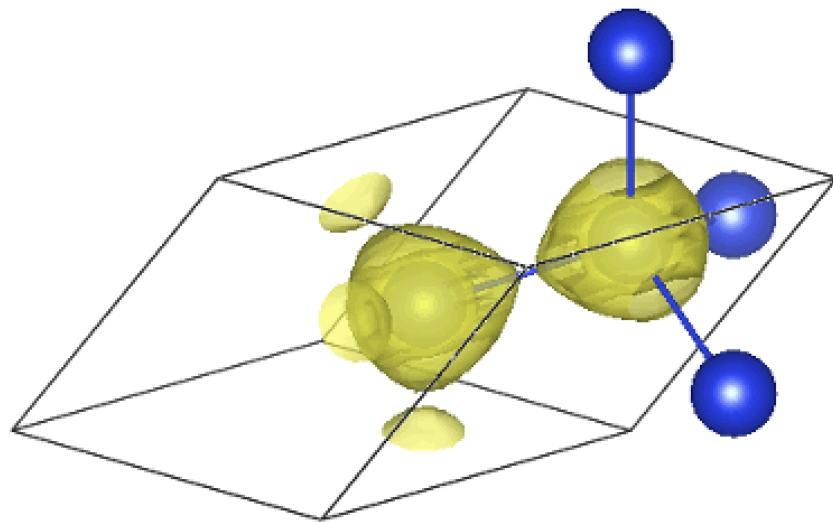


OFDFT using a quantum computer / 量子コンピュータを用いたOFDFT



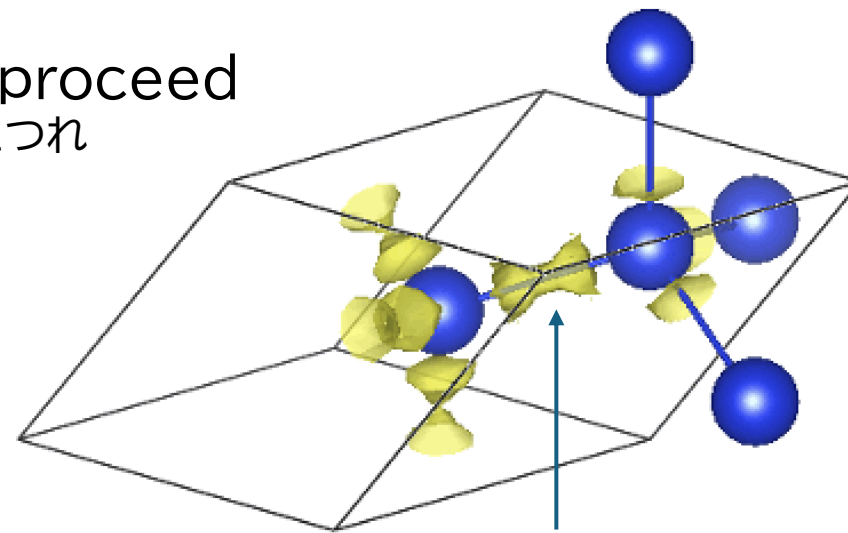
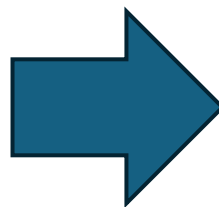
Target: Si-crystal with periodic boundary condition
/ Si結晶(周期境界条件)がターゲット

(32 × 32 × 32)-real space mesh
by only 15 qubit simulation



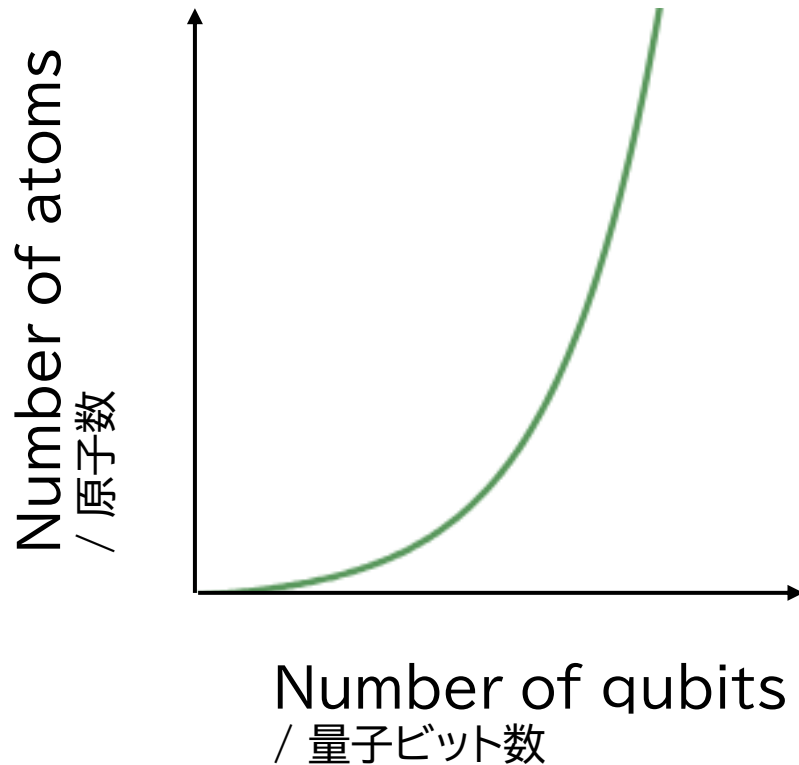
Initial state
/ 初期状態

As PITE steps proceed
/ PITE stepが進むにつれ



sp^3 chemical bond
/ sp^3 結合

Number of atoms vs Number of qubits / 原子数 vs 量子ビット数



In OFDFT, the number of atoms (computational size) grows exponentially with the number of qubits.

/ OFDFTにおいては、原子数(計算サイズ)は量子ビット数に関して指数関数的に増加

30 qubits simulate 65,000 atoms.

/ 30 qubitを用いると6万5千原子がOFDFTで扱えることになる.

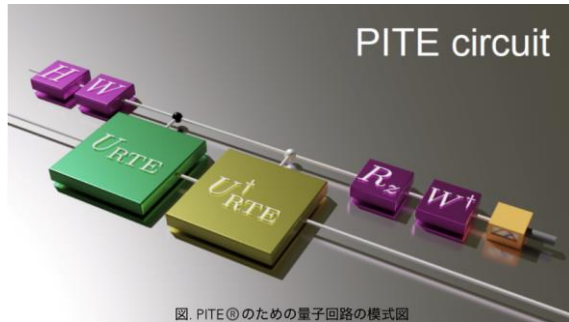
List of our developing technologies / 我々が開発を行ってきたFTQC用の技術一覧

- Since our establishment, we have been developing algorithms and software for the coming era of FTQC.

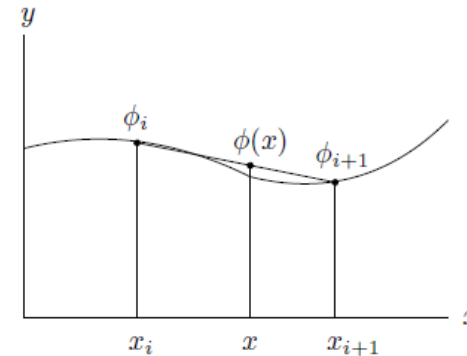
/ 我々はFTQC到来時代に向けたアルゴリズム・ソフト開発を設立以来行ってきた

PITE®

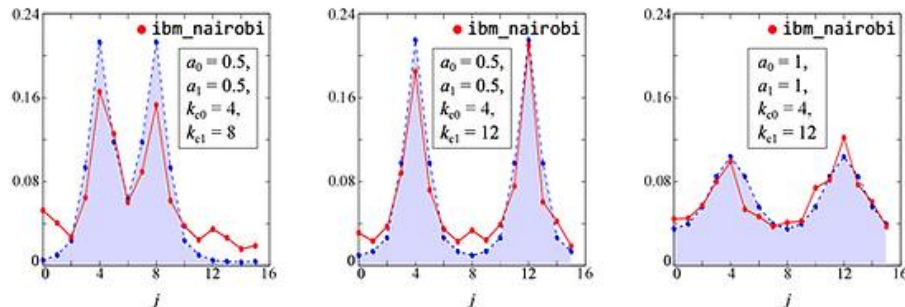
Probabilistic imaginary-time evolution
/ 確率的虚時間発展法



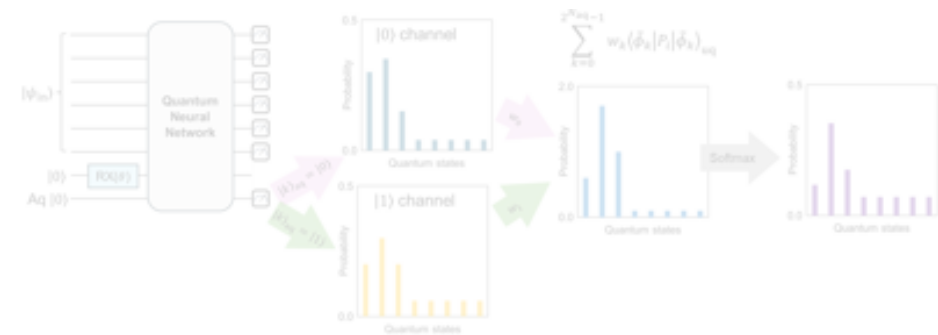
Potential interpolation technology
/ ポテンシャル補間技術



Qubit encoding
/ 量子ビットエンコーディング



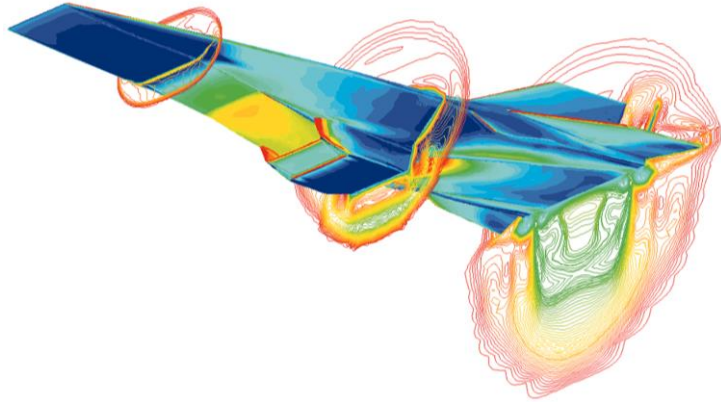
Quantum channel attention
/ 量子チャネルアテンション



3. Fluid simulation by a quantum computer

/ 流体の量子計算

- PITE can also be applied to other fields than quantum chemistry.
/ PITEは量子化学計算以外にも適用可能なアルゴリズムです.

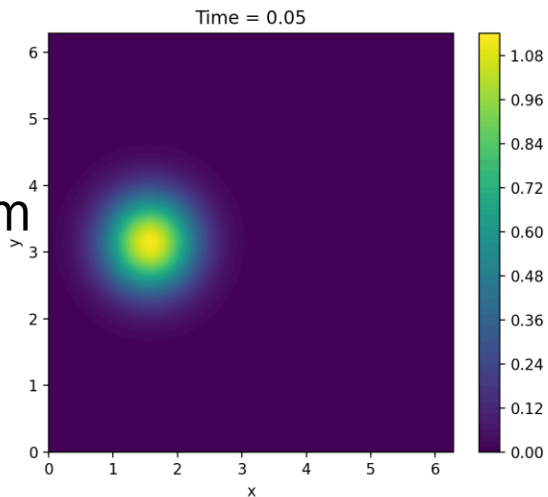


When PITE is applied to fluid calculations, it exponentially accelerates the computational speed of the arithmetic part of the quantum computer.

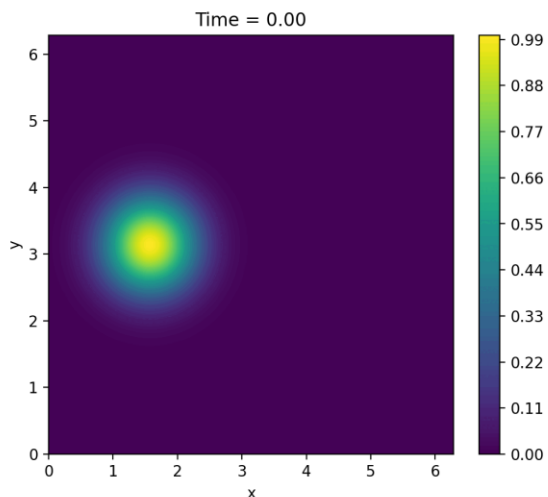
/ PITEが流体計算に適用された際は、量子コンピュータの演算部分の計算速度を指数関数加速します.

Advection / diffusion of concentration / 濃度の移流拡散

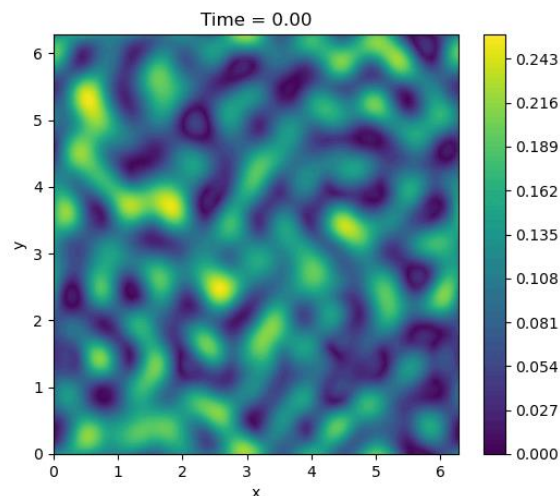
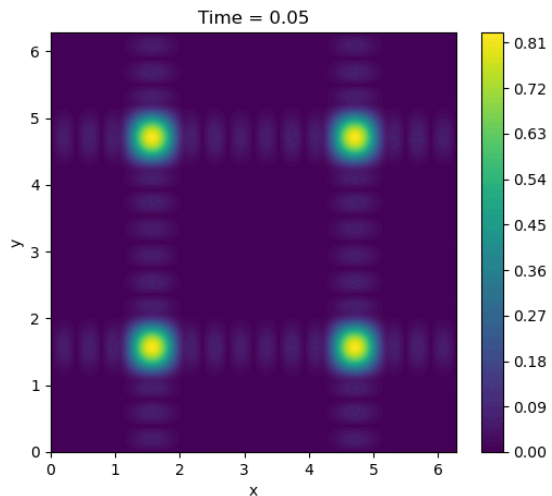
Quantum
/ 量子
 $n = 5$



Classic
/ 古典
 $N = 128$



Turing Pattern / チューリング・パターン

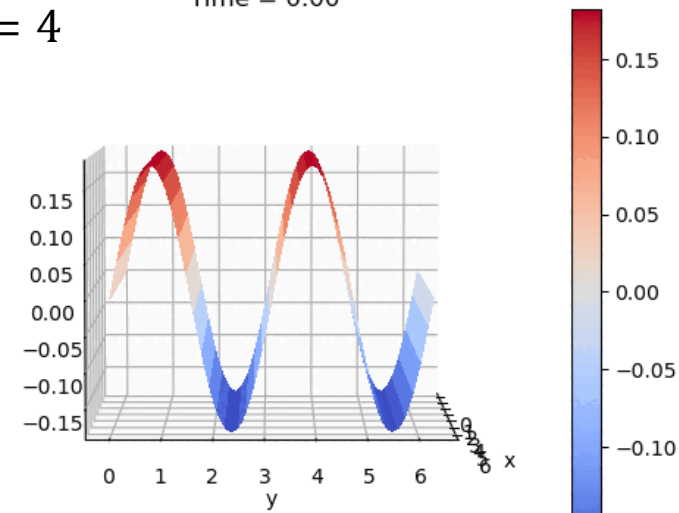


Requires readout every time step
/ 時間ステップごとに読み出しが必要

Shock wave / 衝撃波

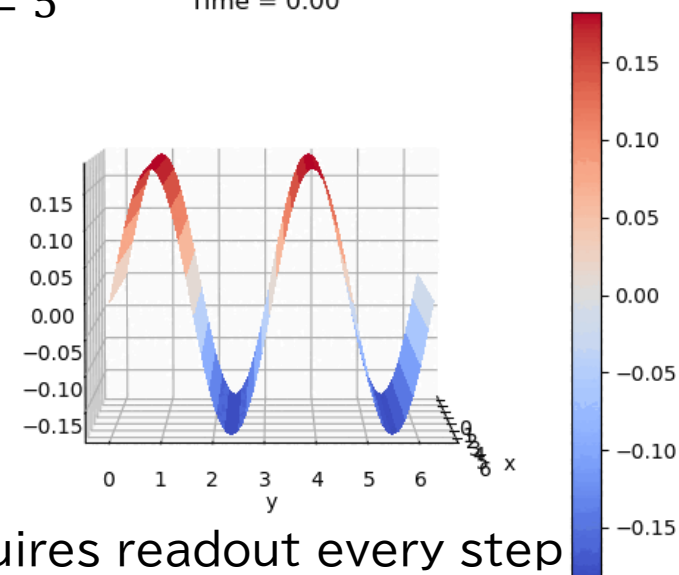
$n = 4$

Time = 0.00



$n = 5$

Time = 0.00



Requires readout every step
/ ステップごとに読み出しが必要

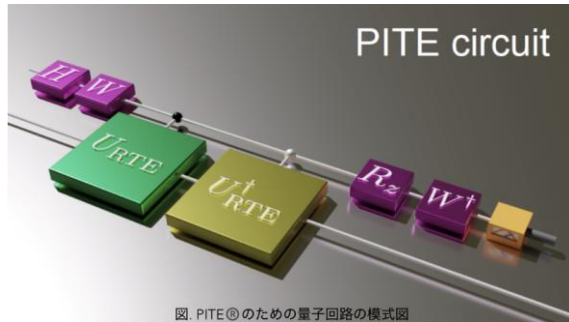
List of our developing technologies / 我々が開発を行ってきたFTQC用の技術一覧

- Since our establishment, we have been developing algorithms and software for the coming era of FTQC.

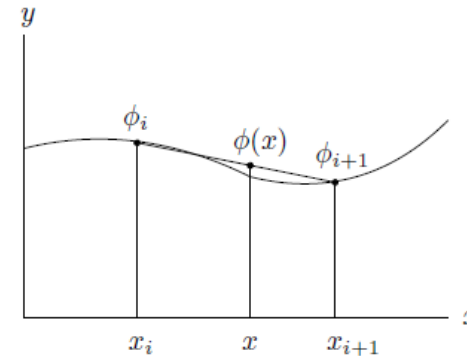
/ 我々はFTQC到来時代に向けたアルゴリズム・ソフト開発を設立以来行ってきた

PITE®

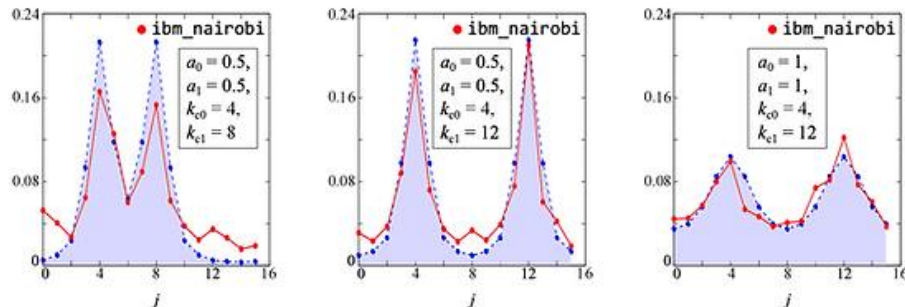
Probabilistic imaginary-time evolution
/ 確率的虚時間発展法



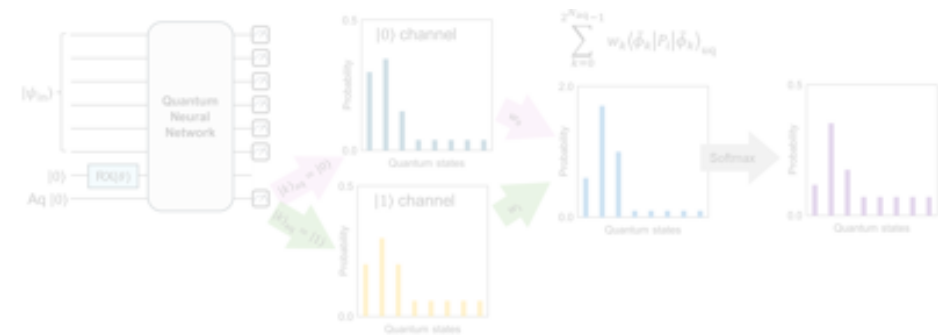
Potential interpolation technology
/ ポテンシャル補間技術



Qubit encoding
/ 量子ビットエンコーディング



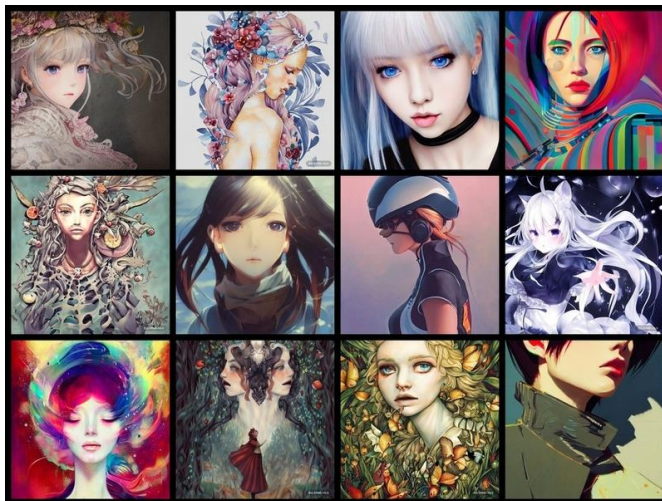
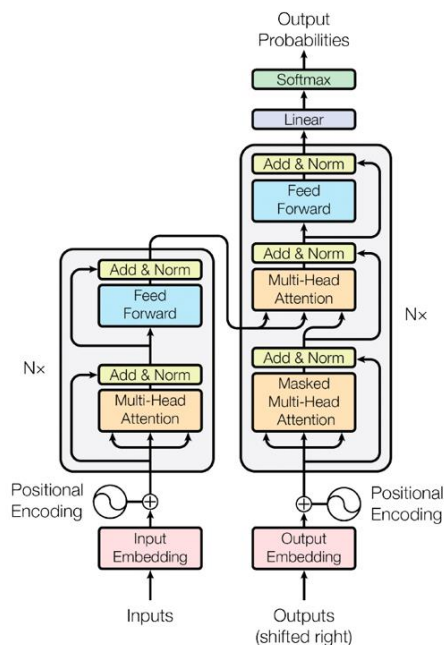
Quantum channel attention
/ 量子チャネルアテンション



4. Quantum Generative AI

/ 量子生成AI

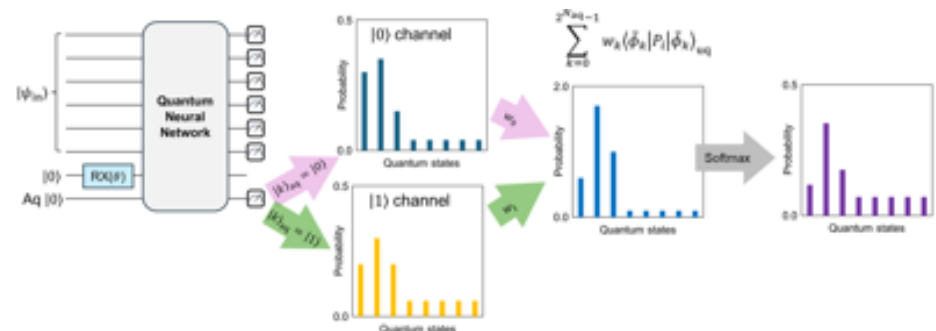
Transformer



<https://aws.amazon.com/jp/what-is/transformers-in-artificial-intelligence/>

Channel attention for QC / チャネルアテンションの量子コンピュータ版

Quantum channel attention / 量子チャネルアテンション

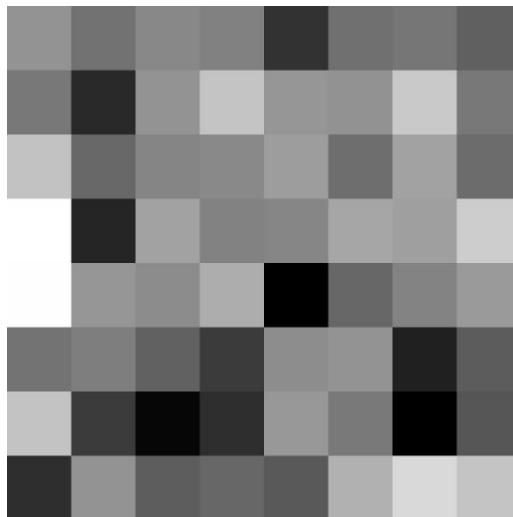


<https://gihyo.jp/design/serial/01/website-pickup/0174>

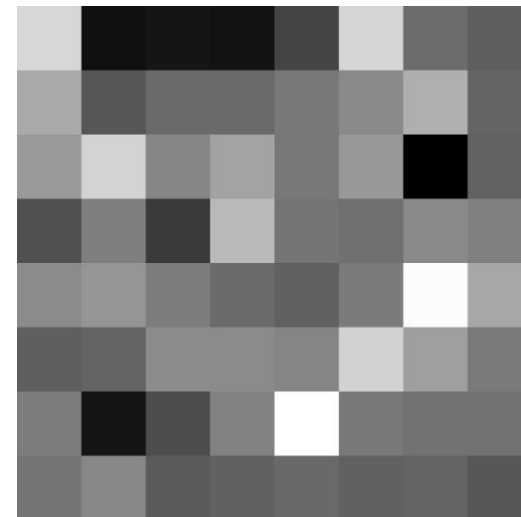
Quantum generative AI / 量子生成AI

QNN with channel
attention developed
by Quemix
/ Quemixが開発したチャンネルア
テンションを導入したQNN

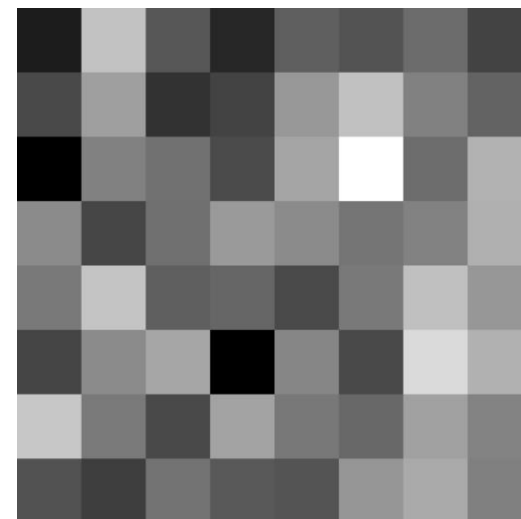
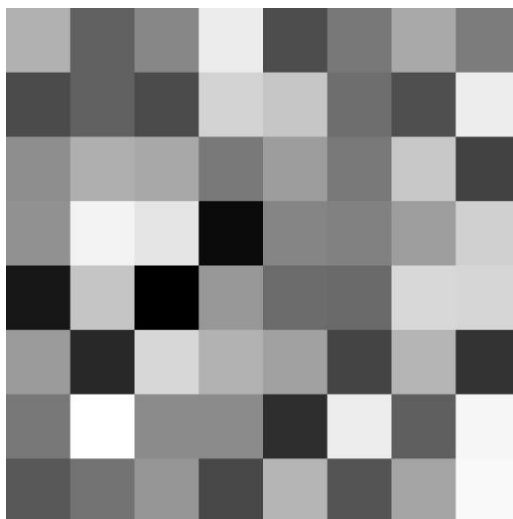
Generate 0 / 0を生成



Generate 1 / 1を生成

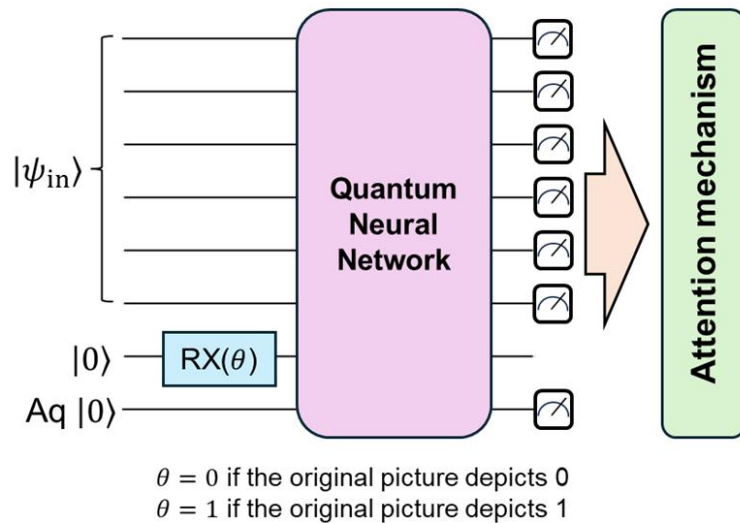


Traditional method
/ 従来の手法



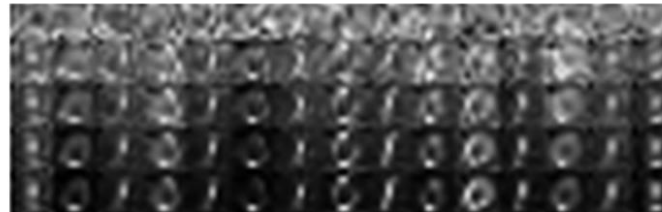
Quantum generative AI / 量子生成AI

With channel attention



Reconstruction with QNN with channel attention

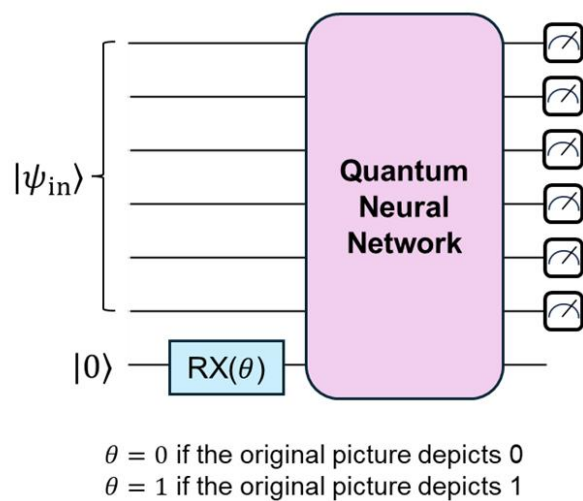
STEP 1
STEP 2
STEP 3
STEP 4
STEP 5



Reconstruction target:



Without channel attention



Reconstruction with QNN

STEP 1
STEP 2
STEP 3
STEP 4
STEP 5



Reconstruction target:



4 results on quantum computing technology / 量子コンピュータ関連事業から4つの成果

1. FTQC algorithm **execution** on an actual computer

/ FTQCアルゴリズムの**実機上での実行**

2. **New** quantum chemical calculation method

/ **新しい量子化学計算**の提案

3. **Fluid simulation** by a quantum computer

/ **流体**の量子計算

4. Quantum **Generative AI**

/ 量子**生成AI**

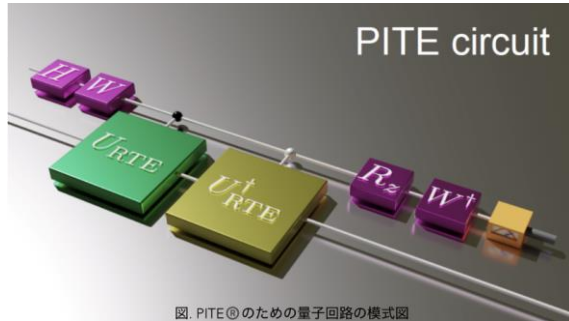
List of our developing technologies / 我々が開発を行ってきたFTQC用の技術一覧

- Since our establishment, we have been developing algorithms and software for the coming era of FTQC.

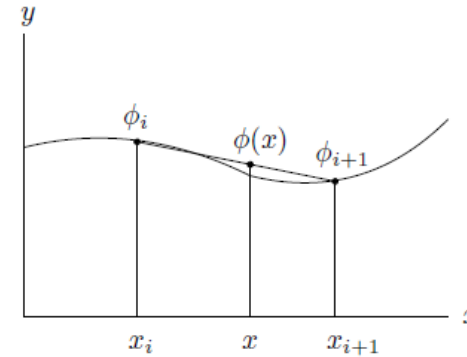
/ 我々はFTQC到来時代に向けたアルゴリズム・ソフト開発を設立以来行ってきた

PITE®

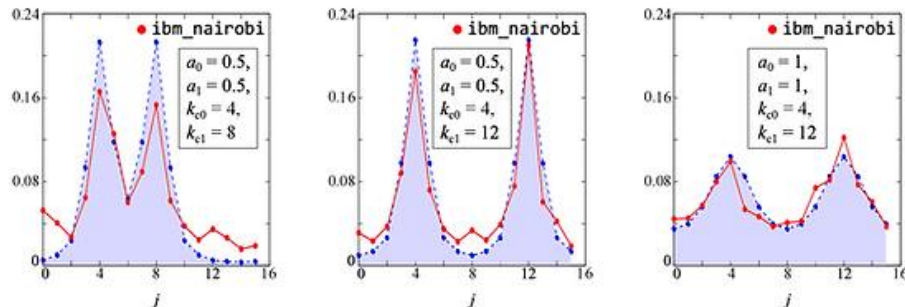
Probabilistic imaginary-time evolution
/ 確率的虚時間発展法



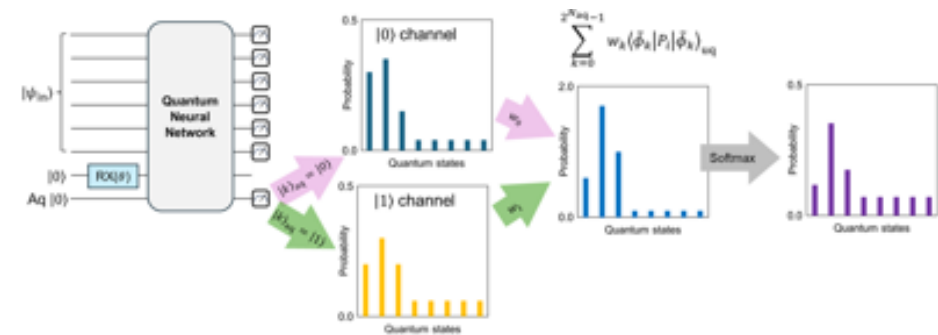
Potential interpolation technology
/ ポテンシャル補間技術



Qubit encoding
/ 量子ビットエンコーディング

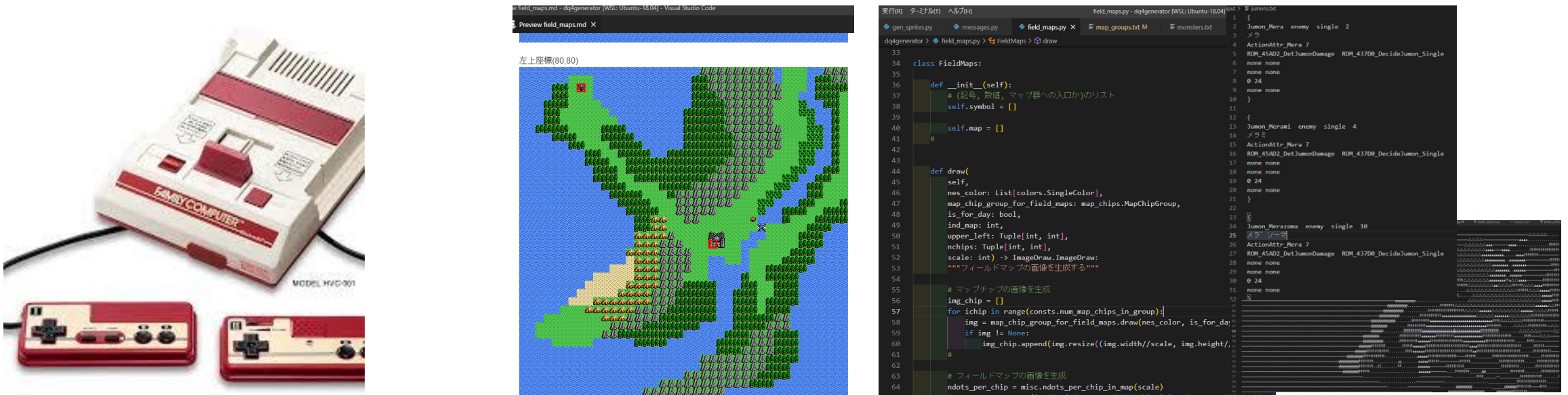


Quantum channel attention
/ 量子チャネルアテンション



Lastly / 最後に

- We have finally entered an era in which FTQC algorithms can run on real machines.
/ いよいよFTQCアルゴリズムが実機上で動く時代に突入した。
- Now that the number of qubits is limited, we are in an era where ideas for how to do interesting things are being tested.
/ 量子ビット数が限られている今、それでもいかに面白いことをするか、アイデアが試される時代



Modern rosetta stone / 現代のロゼッタストーン

- We are developing algorithms and software in preparation for the arrival of FTQC.
/ 我々は来るFTQC到来に備えて、アルゴリズム開発・ソフト開発に取り組んでおります。



量子のチカラで、ともに未来を創ろう。

Let's create the future together with the power of quantum



If you are interested in our technology and business, please visit our booth!

/ 我々の技術・ビジネスにご興味を持っていた方はブースまでお越しください！

We are exhibiting actual quantum sensors at our booth, so please visit us.

/ ブースに量子センサの実物を展示していますので、ぜひお越しください