

# 量子が変える未来社会： 準備とチャンス

2023年10月4日  
株式会社Quemix  
代表取締役  
松下 雄一郎



経歴

- 2013 博士（工学/東京大学）  
・ 材料シミュレーションを活用した**デバイス提案**
- 2013～2015 （独）マックス=プランク研究所 研究員  
・ 材料シミュレーションを活用した**新材料探索**
- 2015～2018 東京大学 助教  
・ 材料シミュレーションの教育  
・ **ポスト京事業メンバー**  
・ **材料シミュレーション（量子化学計算）の開発**  
・ **量子センサーの解析とデバイス開発**
- 2018～2019 東京工業大学 特任講師  
・ **量子コンピュータの材料計算に関するアルゴリズム開発**
- 2019～現在 東京工業大学 物質情報卓越教育院 特任准教授  
・ **ポスト富岳事業メンバー**  
・ **ポスト富岳世代の計算物質科学に関する文部科学省への提言書WGリーダー**
- 2020～現在 株式会社Quemix 代表取締役CEO**
- 2022～現在 量子科学技術研究開発機構(QST) 量子機能創製研究センター  
量子材料理論プロジェクトチーフ

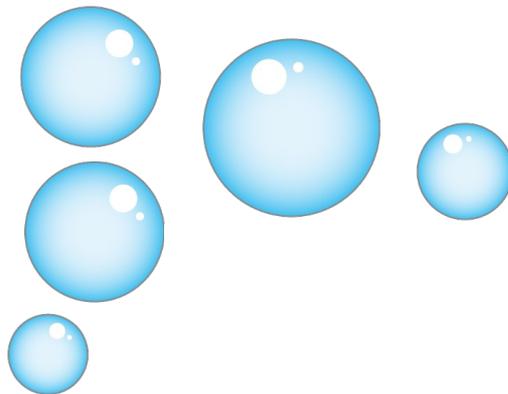


会社紹介の前に...

【よくある質問】

量子コンピュータは  
古典コンピュータとどう違うのか？

問題：1兆個のボールがあります。その中から最も大きいボールを探し出してください。



正攻法？（古典コンピュータの考え方）：

物差しを用意

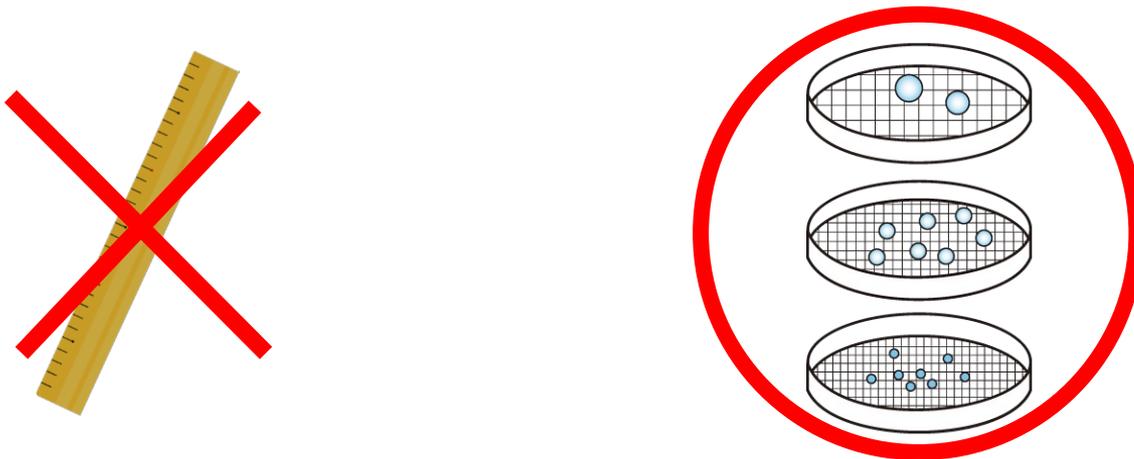
→全部のボールの大きさを全て計測・記録

→その中から最も大きいものを探し出す。

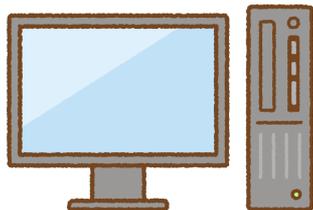
**欠点：時間がかかる。**

仮に1個ボールの計測に1秒だとすると、1兆秒 = **3万年** かかる！





量子コンピュータの考え方：1個1個のボールの大きさなんて気にしない。  
全部のボールをいくつかの目の細かさの違うふるいに入れてゆするのみ。



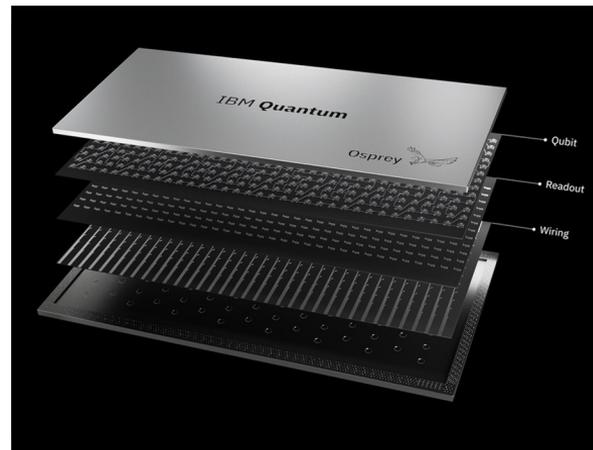
古典コンピュータ	量子コンピュータ
正攻法	要領よく
1個ずつ、全パターンを網羅的に計算する	<b>全パターンを一挙に*</b> ふるい（アルゴリズム）にかけて、 正解のみを浮かび上がらせる *「量子重ね合わせ状態」というものを使う
パターン数が天文学的な数値になると計算時間がかかる	うまくふるい（アルゴリズム）にかけてやると 圧倒的な計算スピード

## ● 2030年にはエラー耐性量子コンピュータ（FTQC）が実現している可能性



図 2.5: 量子ビット数の推移

## 433量子ビットを持つ新型量子プロセッサ 「IBM Osprey」 (2022年11月)



科学技術振興機構(JST)『みんなの量子コンピューター ～情報・数理・電子工学と拓く新しい量子アプリ～』  
(2018)より抜粋

# 株式会社Quemix 会社紹介

## ミッション： 企業・大学・研究所等で使う材料計算の 量子コンピュータソフトウェアの開発

材料計算が専門の研究者が中心となり、現状の材料計算ソフトの課題を解決するべく設立した会社です。  
量子コンピュータの登場により、かつて日本のお家芸であった材料開発分野を奪回するチャンス。  
誤り耐性量子コンピュータの計算速度を引き出す世界初のソフトウェアを開発し、提供していきます。

会社名	株式会社Quemix（キューミックス）
所在地	東京都中央区日本橋2-11-2 太陽生命日本橋ビル16階
設立	2019年6月（令和元年）
代表者	代表取締役CEO 松下 雄一郎
人員	社員15名（研究職11名 うちPh.D. 9名）／ 技術顧問3名
事業概要	エラー耐性量子アルゴリズムの開発とソフトウェア開発 量子センサのシステム開発 高度材料計算プラットフォームの提供 材料計算の受託解析業務

当社は株式会社テラスカイグループです。

 **株式会社テラスカイ**



東京証券取引所プライム市場  
証券コード3915

<https://www.terrasky.co.jp/>



## 川内 進

【博士（工学/京都大学）】  
量子化学計算  
（有機・高分子材料）



## 小杉 太一

【博士（理学/東京大学）】  
量子アルゴリズム開発



## 西 紘史

【修士（東京大学）】  
量子アルゴリズム開発



## 西谷 侑将

【修士（東京大学）】  
量子アルゴリズム開発  
第一原理計算



## Gekko Budiutama

【博士（工学/東京工業大学）】  
マテリアルズインフォマティクス  
機械学習



## 岩田 潤一

【博士（理学/筑波大学）】  
計算物質科学  
第一原理計算



## Tran Ba Hung

【博士（大阪大学）】  
マルチスケール磁気特性モデル



## 濱 祐介

【博士（理学/東京大学）】  
量子誤り低減  
非平衡量子統計力学



## ヤニック・グジニエ

【博士（数学/伊トレ大学）】  
量子アニーリング  
確率論



## 黄 欣馳 (HUANG Xinchi)

【博士（数理科学/東京大学）】  
微分方程式  
逆問題  
量子アルゴリズム開発

## 量子機械学習

## 誤り低減から 量子センシングへ

## 基盤アルゴリズム 「PITE®」

## 疑似量子アニーラ

## 材料計算

## 材料計算（磁性材）

2020年	2021年	2022年	2023年
			△Predicting toxicity by quantum machine learning
			△Quantum Circuits for Collective Amplitude Damping in Two-Qubit Systems
			△Quantum Error Mitigation via Quantum-Noise-Effect Circuit Groups
			△Spin property improvement of boron vacancy defect in hexagonal boron nitride by thermal treatment
			△Quantum-Error-Mitigation Circuit Groups for Noisy Quantum Metrology
			△Implementation of quantum imaginary-time evolution method on NISQ devices by introducing nonlocal approximation
			△First-quantized eigensolver for ground and excited states of electrons under a uniform magnetic field
			△Acceleration of probabilistic imaginary-time evolution method combined with quantum amplitude amplification
			△Exhaustive search for optimal molecular geometries using imaginary-time evolution on a quantum computer
			△Imaginary-time evolution using forward and backward real-time evolution with a single ancilla: First-quantized eigensolver algorithm for quantum chemistry
			△Analyzing computational cost of probabilistic imaginary-time evolution method
			△Optimal scheduling in probabilistic imaginary-time evolution on a quantum computer
			△First-quantized eigensolver for ground and excited states of electrons under a uniform magnetic field
			△Quadratic acceleration of multi-step probabilistic algorithms for state preparation
			△Systematic study on the dependence of the warm-start quantum approximate optimization algorithm on approximate solutions
			△Annealing for prediction of grand canonical crystal structures: Efficient implementation of n-body atomic interactions
			△Atomic and electronic structures of nitrogen vacancies in silicon nitride: Emergence of floating gap states
			△Atomic scale localization of Kohn–Sham wavefunction at SiO <sub>2</sub> /4H–SiC interface under electric field, deviating from envelope function by effective mass approximation
			△Effect of nitrogen introduced at the SiC/SiO <sub>2</sub> interface and SiC side on the electronic states by first-principles calculation
			△Dzyaloshinskii–Moriya interactions in Nd <sub>2</sub> Fe <sub>14</sub> B as the origin of spin reorientation and the rotating magnetocaloric effect
			△Skyrmions in van der Waals centrosymmetric materials with Dzyaloshinskii–Moriya interactions
			△Insight into anisotropic magnetocaloric effect of CrI <sub>3</sub>
			△Effect of magnetocrystalline anisotropy on magnetocaloric properties of an AlFe <sub>2</sub> B <sub>2</sub> compound, Tran, PRB
			△Temperature and Size Dependence of Energy Barrier for Magnetic Flips in L10 FePt Nanoparticles: First-Principles Study

Quemixはなぜ材料計算に力を入れるのか？

なぜ量子コンピュータに力を入れるのか？



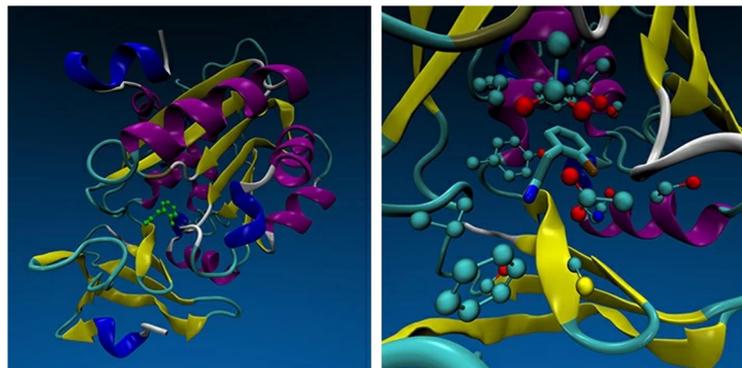
人工光合成の実現を加速することにより、  
カーボンニュートラル社会の実現

<https://www.rd.ntt/se/media/article/0005.html>

創薬開発スピードを加速することにより、  
誰もが健康な生活を送れる



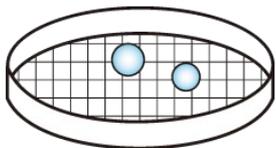
仕入れ・販売の最適化を行うことにより、  
フードロスの低減・労働人口減少への対応



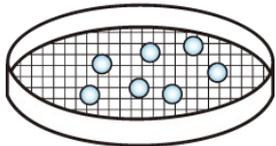
<https://www.titech.ac.jp/news/2017/038920>

## PITE® (Probabilistic Imaginary-Time Evolution)

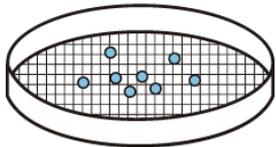
- Quemixがオリジナルで開発し、特許取得、商標登録。
- 量子優位性の示された、有望な材料計算（量子化学計算）アルゴリズム



虚時間発展演算子  
という名前のふるい



$$\exp(-\hat{H}\tau) |\Psi\rangle$$



どんな問題でも、  
このふるいを用いると  
解が高速に求まる

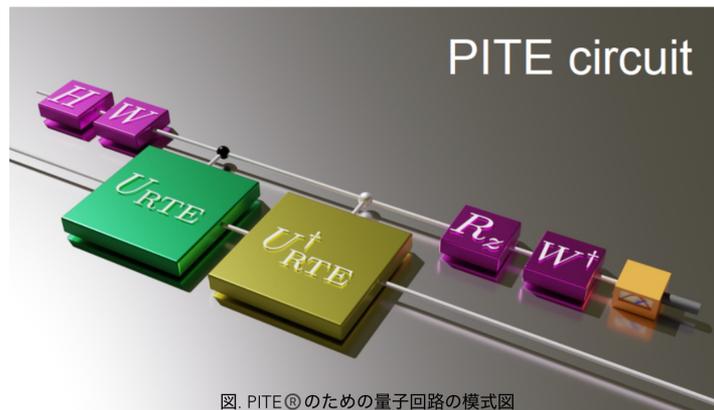
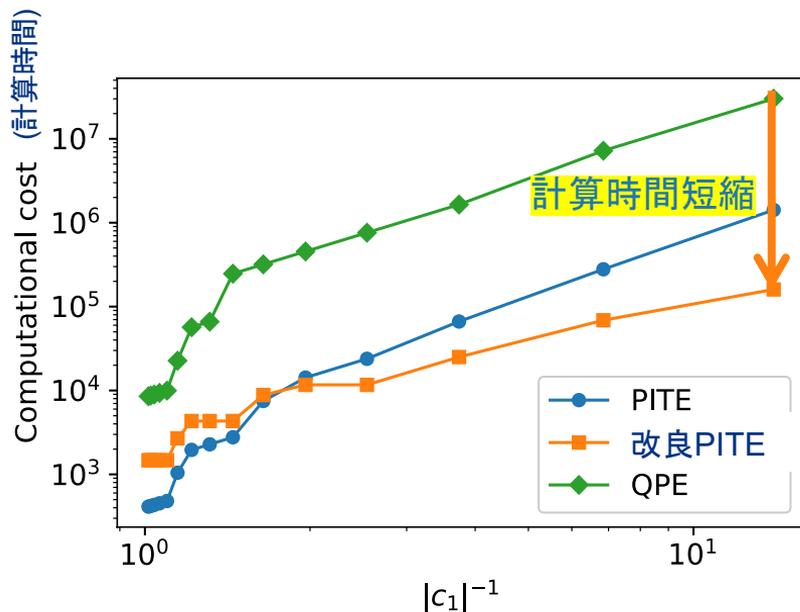
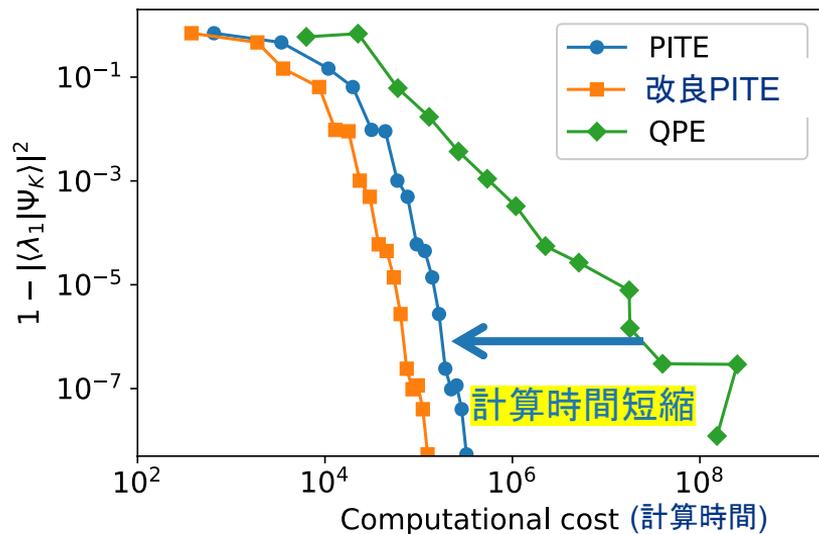


図. PITE®のための量子回路の模式図

## PITE<sup>®</sup> (Probabilistic Imaginary-Time Evolution) の特長

- 計算スピード
- 材料計算以外にも応用可能

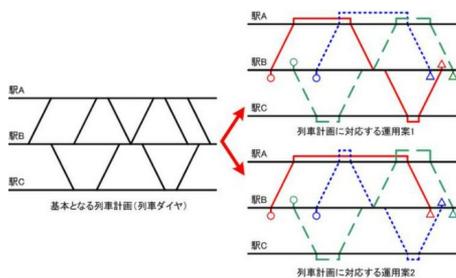


# PITE<sup>®</sup> は、材料計算のために開発された手法であるが、様々な問題に横展開可能



## 実施例 1

配送問題最適化。  
どこをどの順番で回ると最適か？最短経路で回れるか？



## 実施例 2

公共交通機関のダイヤ最適化。  
労働条件を満たしながら、どの経路をどの車両が辿ると最適か？

## 実施例 3

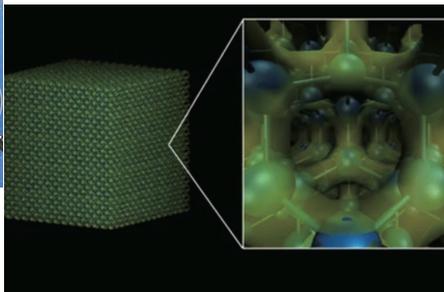
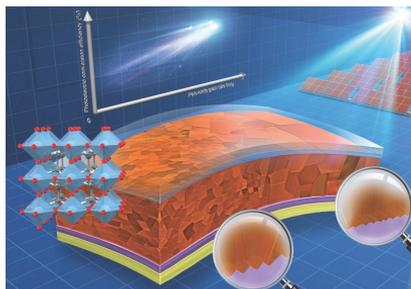
クーポン金額最適化。  
誰にどの金額のクーポン券（発行クーポン総額は既定値）を配ると最もリターンが大きいか？



## Quloud : 誰もが使える、スーパーコンピュータ規模の計算環境を提供

- イノベーションの70%は新物質開発から
- Quemixが開発したクラウド上の材料計算プラットフォーム
- 低コストに、高速に、新物質開発をサポート

➡ **量子コンピュータを活用し、計算速度を数百倍・数千倍に向上**



古典コンピュータ (ワークステーション、PCクラスター、スパコン、クラウド) → 量子コンピュータ

～2010年代

2020年代

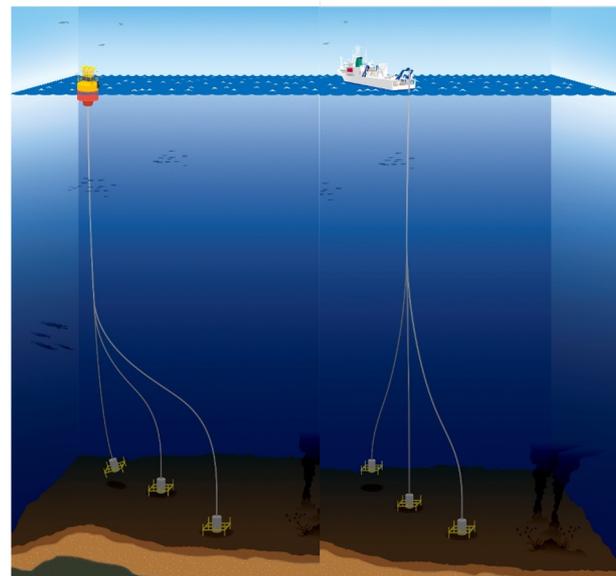
2030年代

量子技術で、もう一つの有望なデバイス  
-量子センサ-

量子センサ：  
量子ビットを活用して環境のセンシングを行う  
次世代の超高感度センサ装置



- 令和3年度 防衛装備庁  
安全保障技術研究推進制度  
「海底・地下での長距離量子センシングに関する研究」が採択
- 国研QST様・電力中央研究所様と共同  
で、国プロ推進



## 量子センサ活用例

### 海洋観測システム

### 海底地震や火山活動の調査

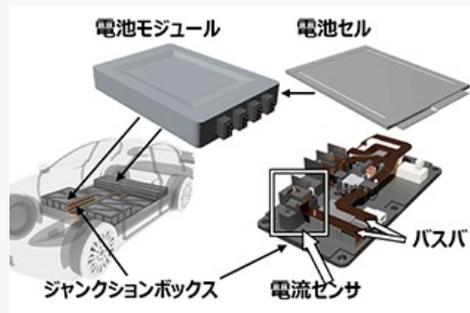
### 不審航行体の監視

### 脳磁計測 (ブレインテック)

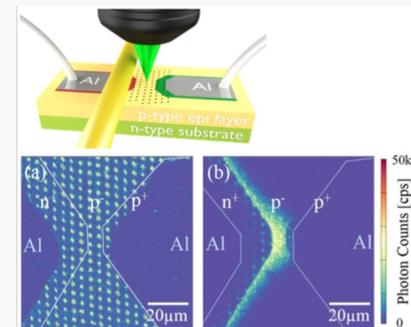
- 国家プロジェクトで研究
- 地上波でも登場



### 電気自動車 搭載電池容量の モニタリング



### 半導体デバイス中の 異常検知



Journal of Materials Research **33**, 3355 (2018).

量子デバイスがドンドン身近になっていきます。チャンスだらけです！

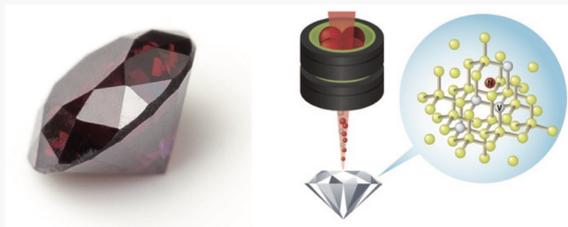
### 量子コンピュータ

- ・ 新素材開発の加速
- ・ 無駄のない社会の実現



### 量子センサ

- ・ 安全安心な社会の実現
- ・ 省エネデバイスの実現



# FUTURE OF QUANTUM COMPUTING

量子コンピュータのパワーで

新しい世界を

