

大規模CAEのための量子HPC連携の開拓

株式会社豊田中央研究所
量子コンピューティング研究領域
リーディングリサーチャー 佐藤 勇気

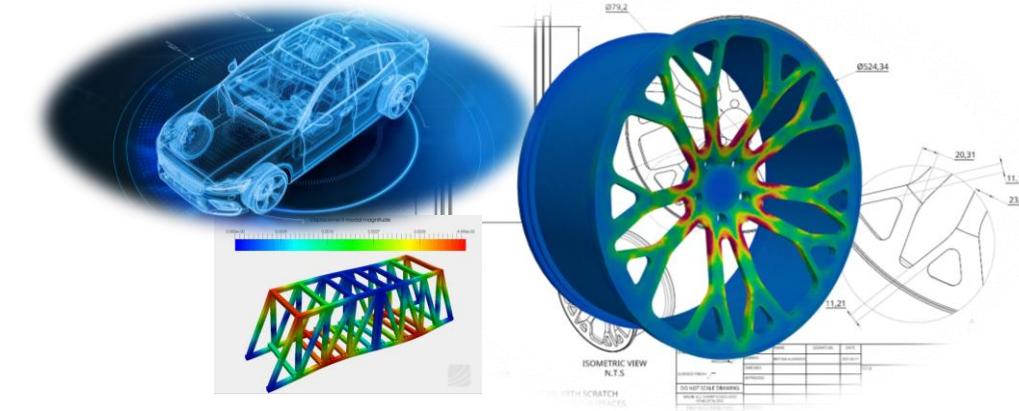
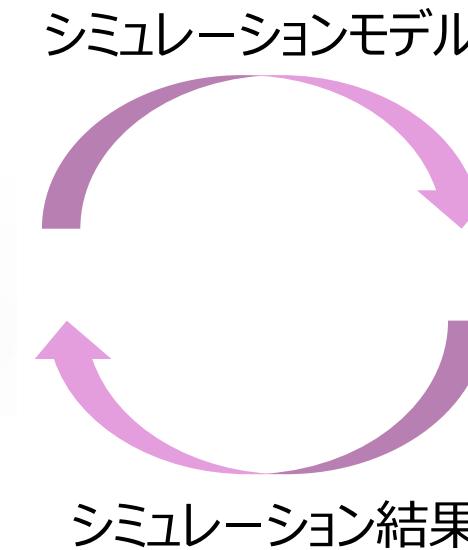
研究背景

コンピューティング技術の発展につれ
シミュレーションを活用したモノづくりが主流に

Computer-aided Engineering; CAE



設計最適化



物理現象のシミュレーション
(変形、熱伝導、流体など)

CAEの大規模化・高速化 ≒ シミュレーション(偏微分方程式; PDE)の大規模化・高速化

定常問題

平衡状態を表す偏微分方程式 (PDE)

e.g. ポアソン方程式 $-k\nabla^2 T = Q$

アルゴリズム	特徴
HHL algorithm (Harrow et al., Phys Rev Lett 103 150502, 2009)	<ul style="list-style-type: none"> (特定条件下で)指数加速が得られる 実装はブラックボックスになっている
VQLS (Variational Quantum Linear Solver) (Bravo-Prieto et al., Quantum, 1188, 2023)	<ul style="list-style-type: none"> Near-termデバイスに実装できる 適切な量子回路設計が必要になる 理論保証はない

時間発展問題

時間発展を表す偏微分方程式 (PDE)

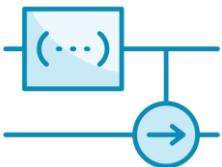
e.g. 波動方程式 $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \nabla^2 u$

アルゴリズム	特徴
Hamiltonian simulation (Babbush et al., Phys Rev X 13 041041, 2023)	<ul style="list-style-type: none"> (特定条件下で)指数加速が得られる 実装はブラックボックスになっている 様々なアルゴリズムの内部で使われる
VQS (Variational Quantum Simulation) (Leong et al., International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow, 33 (11), 2023)	<ul style="list-style-type: none"> Near-termデバイスに実装できる 適切な量子回路設計が必要になる 理論保証はない



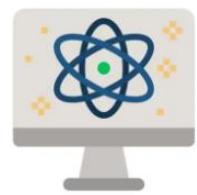
問題設定の入力

- 問題設定の効率的なエンコードが必須
 - 状態準備
 - ハミルトニアンの構築

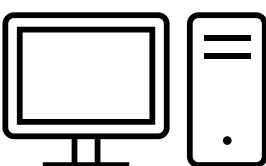


量子回路

- PDEの時間発展シミュレーションの量子回路
これまでの主な取り組み (w/ KQCC, Toyota)



量子コンピュータ



ポスト処理

- アプリケーションによっては必須
 - 固有値計算
 - 期待値計算

これまでの取り組み

PHYSICAL REVIEW RESEARCH 6, 033246 (2024)

Hamiltonian simulation for hyperbolic partial differential equations by scalable quantum circuits

Yuki Sato^{1,2,*}, Ruho Kondo^{1,2}, Ikko Hamamura^{3,†}, Tamiya Onodera^{1,2,3}, and Naoki Yamamoto^{1,2,4}

¹Toyota Central R&D Labs., Inc., 1-4-14, Koraku, Bunkyo-ku, Tokyo 112-0004, Japan

²Quantum Computing Center, Keio University, 3-14-1 Hiyoshi, Kohoku-ku, Yokohama, Kanagawa 223-8522, Japan

³IBM Quantum, IBM Research-Tokyo 19-21 Nihonbashi Hakozaki-cho, Chuo-ku, Tokyo 103-8510, Japan

⁴Department of Applied Physics and Physico-Informatics, Keio University,

Hiyoshi 3-14-1, Kohoku-ku, Yokohama, Kanagawa 223-8522, Japan

保存系のPDEシミュレーションの量子回路を明示的に構成 w/ Keio, IBM

Hyperbolic PDE

$$\frac{\partial^2 u(t, x)}{\partial t^2} = c^2 \nabla^2 u(t, x)$$

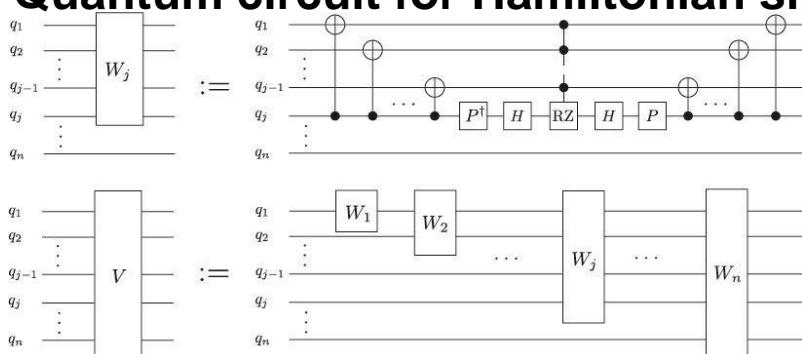
$$\psi(t, x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial u(t, x)}{\partial t} \\ i c \nabla^\top u(t, x) \end{pmatrix}$$

Schrödinger equation

$$\frac{\partial \psi(t, x)}{\partial t} = -i \mathcal{H} \psi(t, x)$$

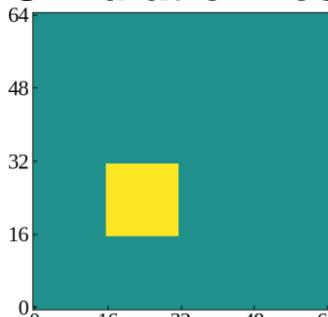
$$\exp(-i \mathcal{H} \tau)$$

Quantum circuit for Hamiltonian simulation

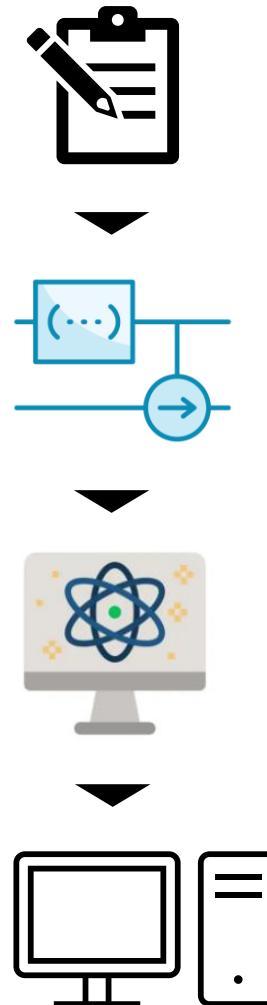


$$\frac{\partial u(t, x)}{\partial t}$$

Simulation result



- PDEをシュレディンガー方程式に変換
- エンタングル基底を用いた効率的な量子回路を導出
- 初期状態の効率的な準備を仮定
- 測定量の議論が不足



問題設定の入力

- 問題設定の効率的なエンコードが必須
 - 状態準備
 - ハミルトニアンの構築

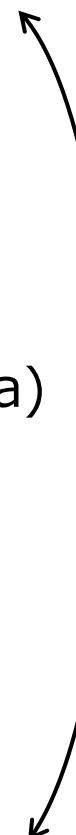
量子回路

- PDEの時間発展シミュレーションの量子回路
これまでの主な取り組み (w/ KQCC, Toyota)

量子コンピュータ

- アプリケーションによっては必須。
 - 固有値計算
 - 期待値計算

HPCのターゲット





問題設定の入力

[1] Manuel S Rudolph et al 2024 Quantum Sci. Technol. 9 015012
[2] Ballarin, M., García-Ripoll, J. J., Hayes, D., & Lubasch, M. (2025). arXiv preprint arXiv:2511.15674.

MPS (Matrix product state)を経由した量子回路実装

