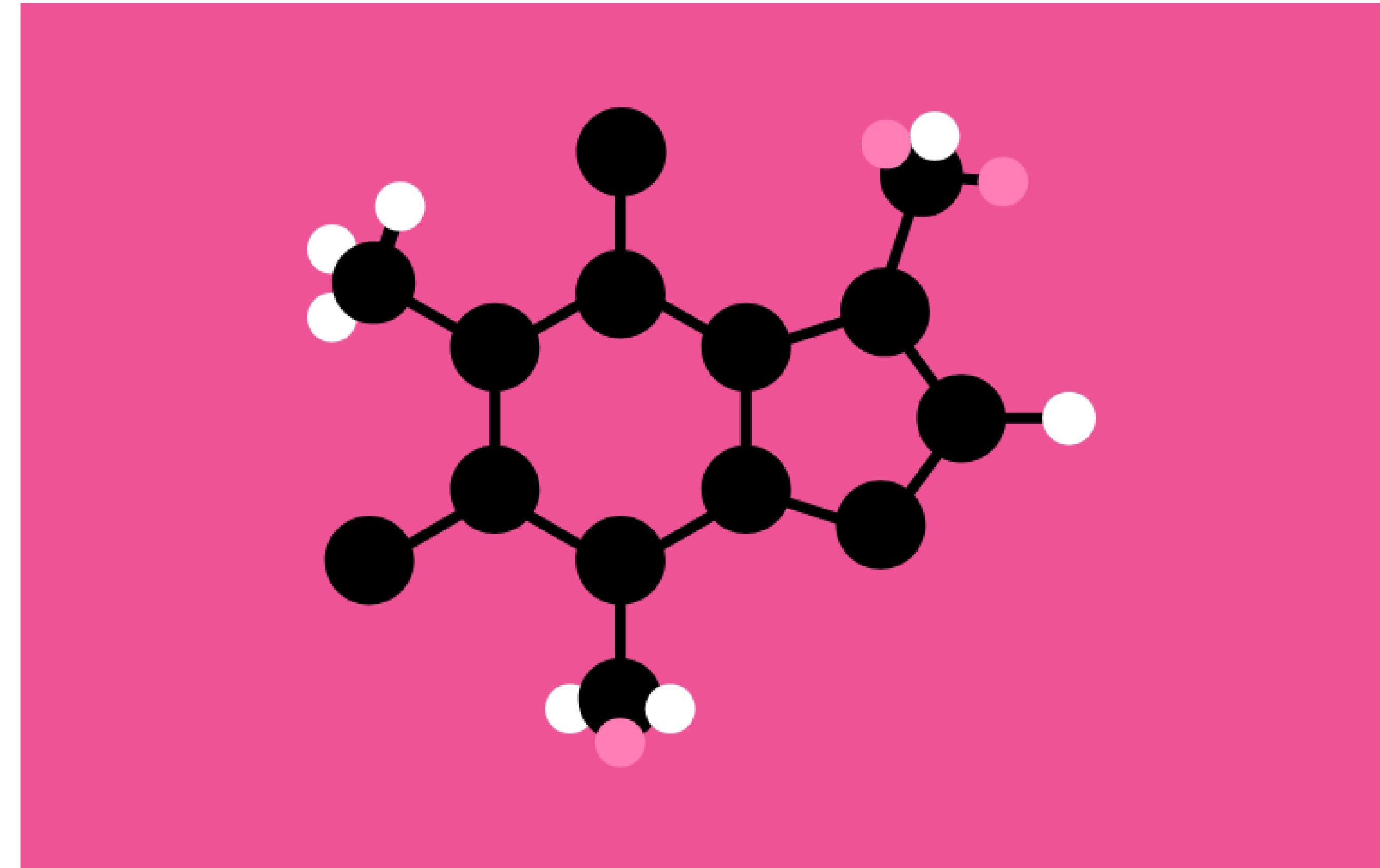


分子の シミュレーション

Sep 30, 2025

沼田祈史
Kifumi Numata
IBM Quantum



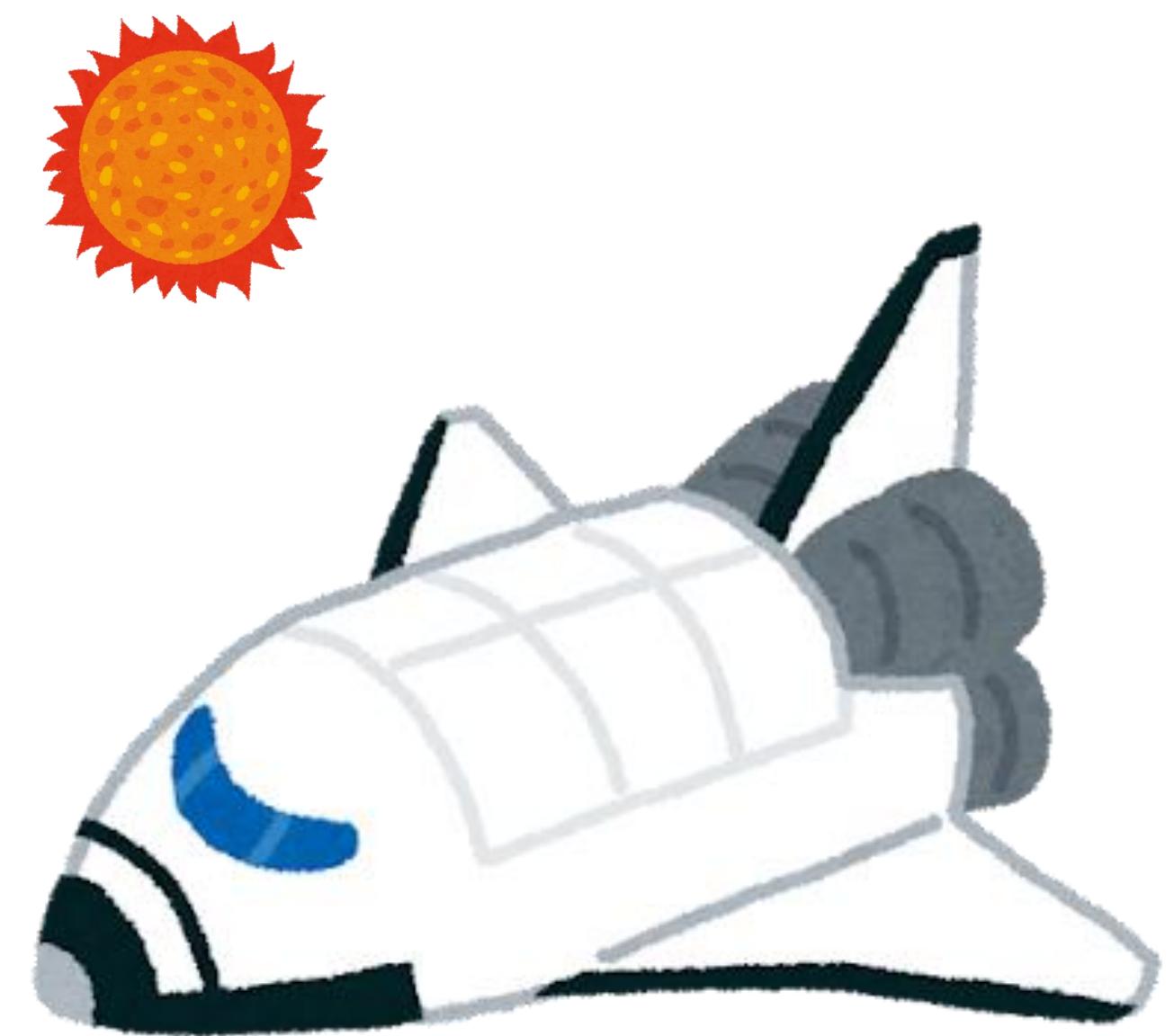
IBM Quantum

シミュレーションで予測できるのは？

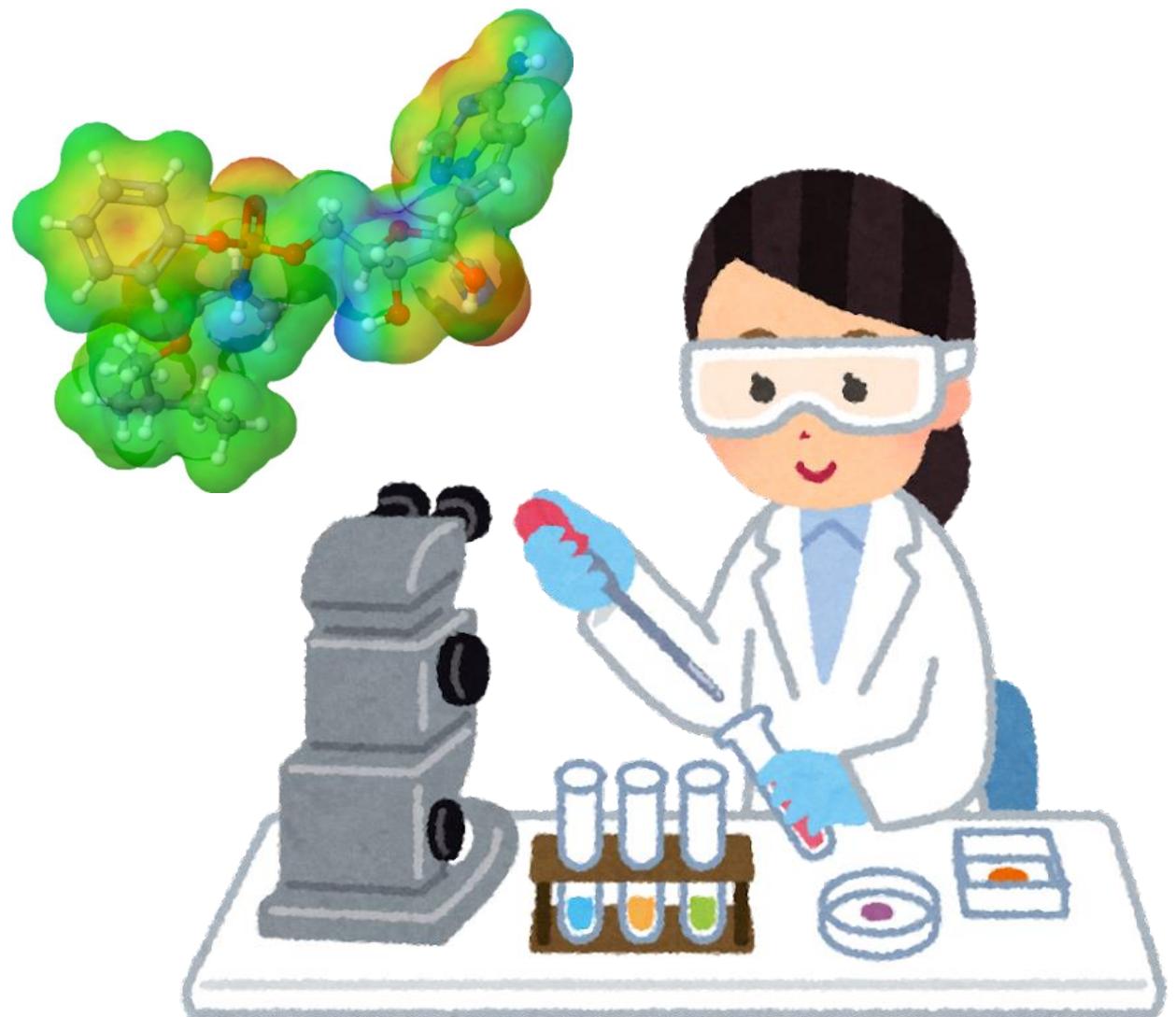
(1)
バスケットボールの軌跡



(2)
スペースシャトルの耐久性



(3)
新薬のための化学実験



シミュレーションで予測できるのは？

シミュレーションとは・・

法則を表す方程式（モデル）を解き、再現や予測すること。

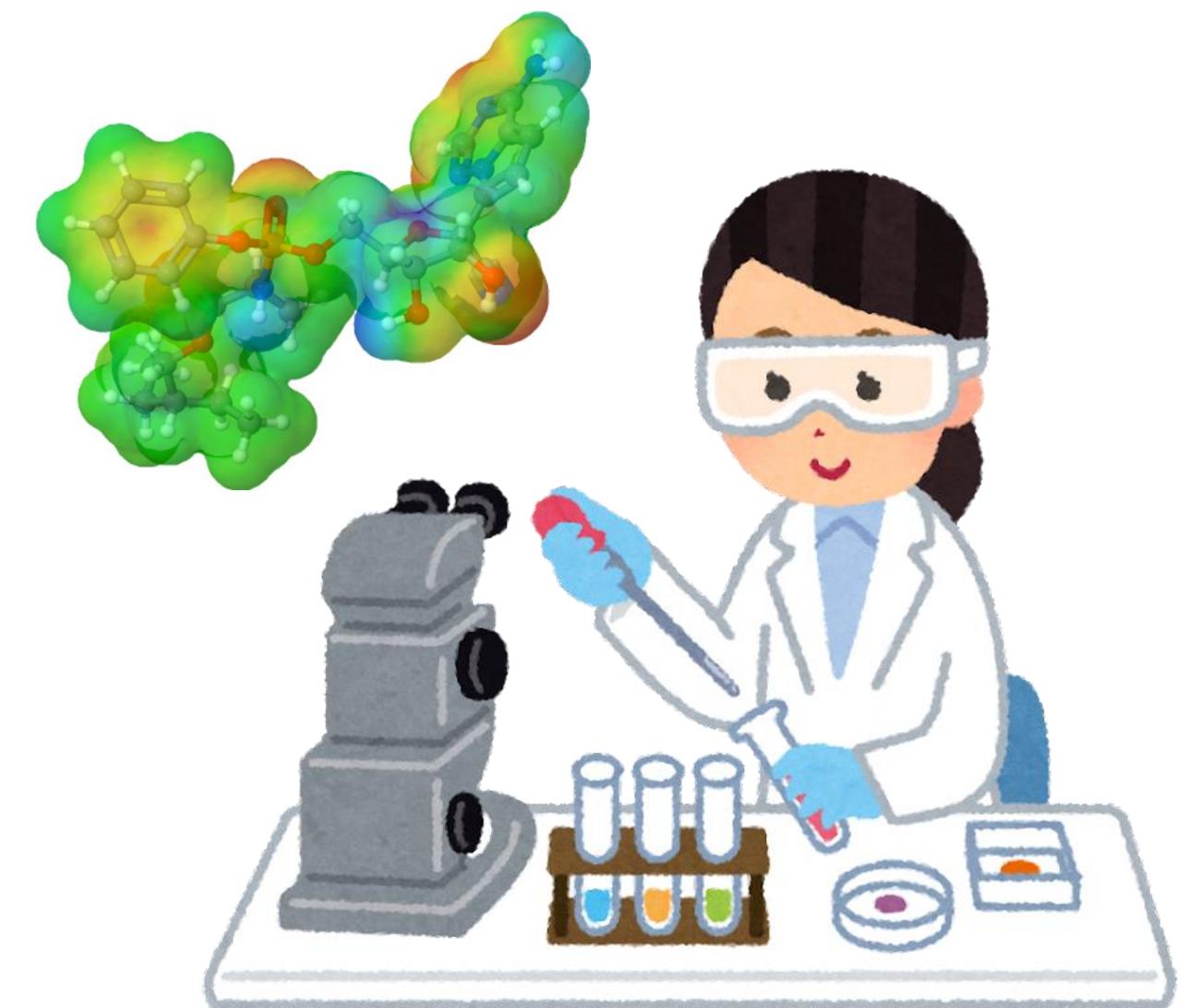
(1)
バスケットボールの軌跡



(2)
スペースシャトルの耐久性



(3)
新薬のための化学実験



シミュレーションで予測できるのは？

シミュレーションとは・・

法則を表す方程式（モデル）を解き、再現や予測すること。

(1)
バスケットボールの軌跡



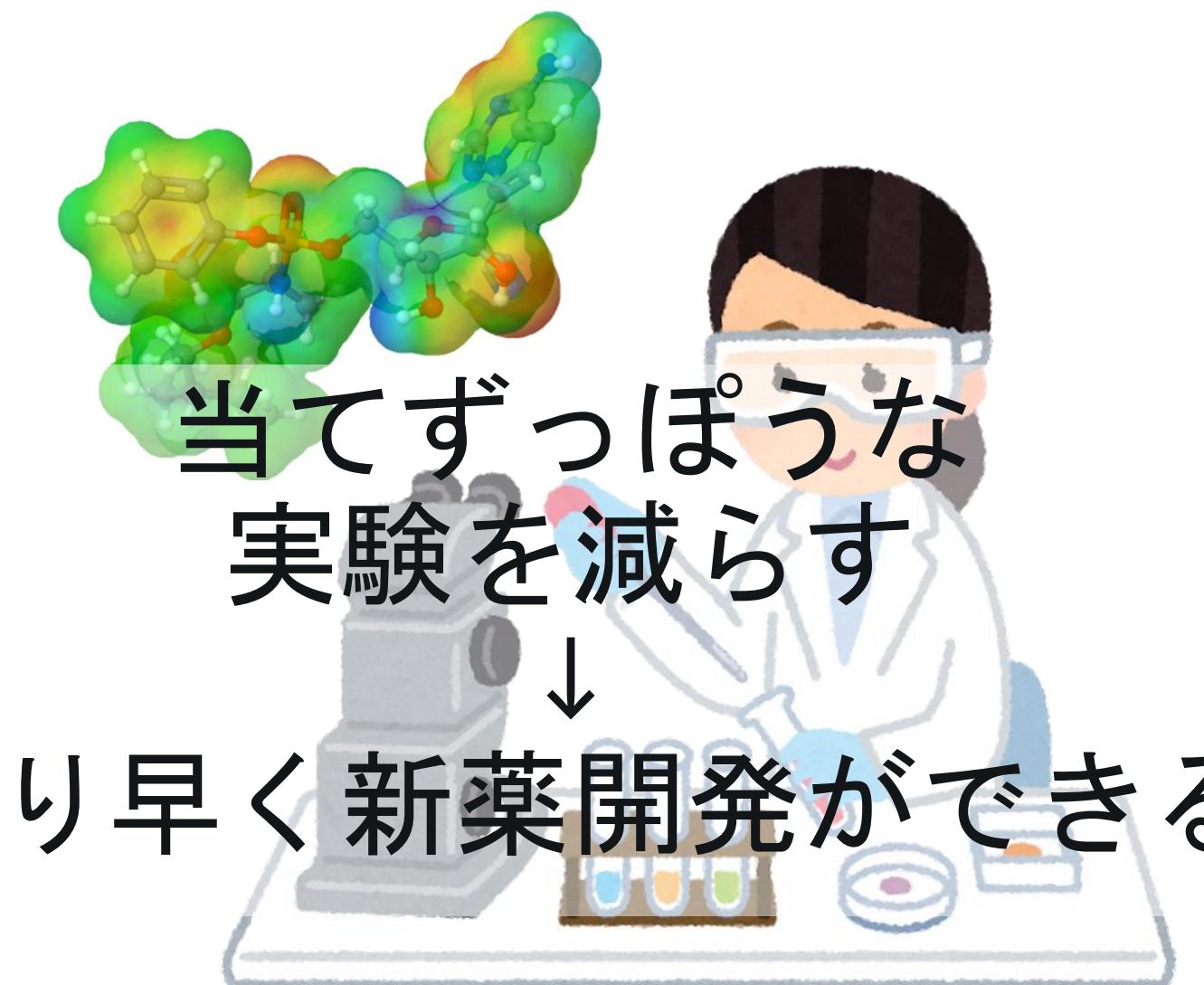
運動方程式
 $F = ma$
も運動を表すモデル

(2)
スペースシャトルの耐久性



コンピューターで何度も実験
↓
より高い安全性を実現

(3)
新薬のための化学実験



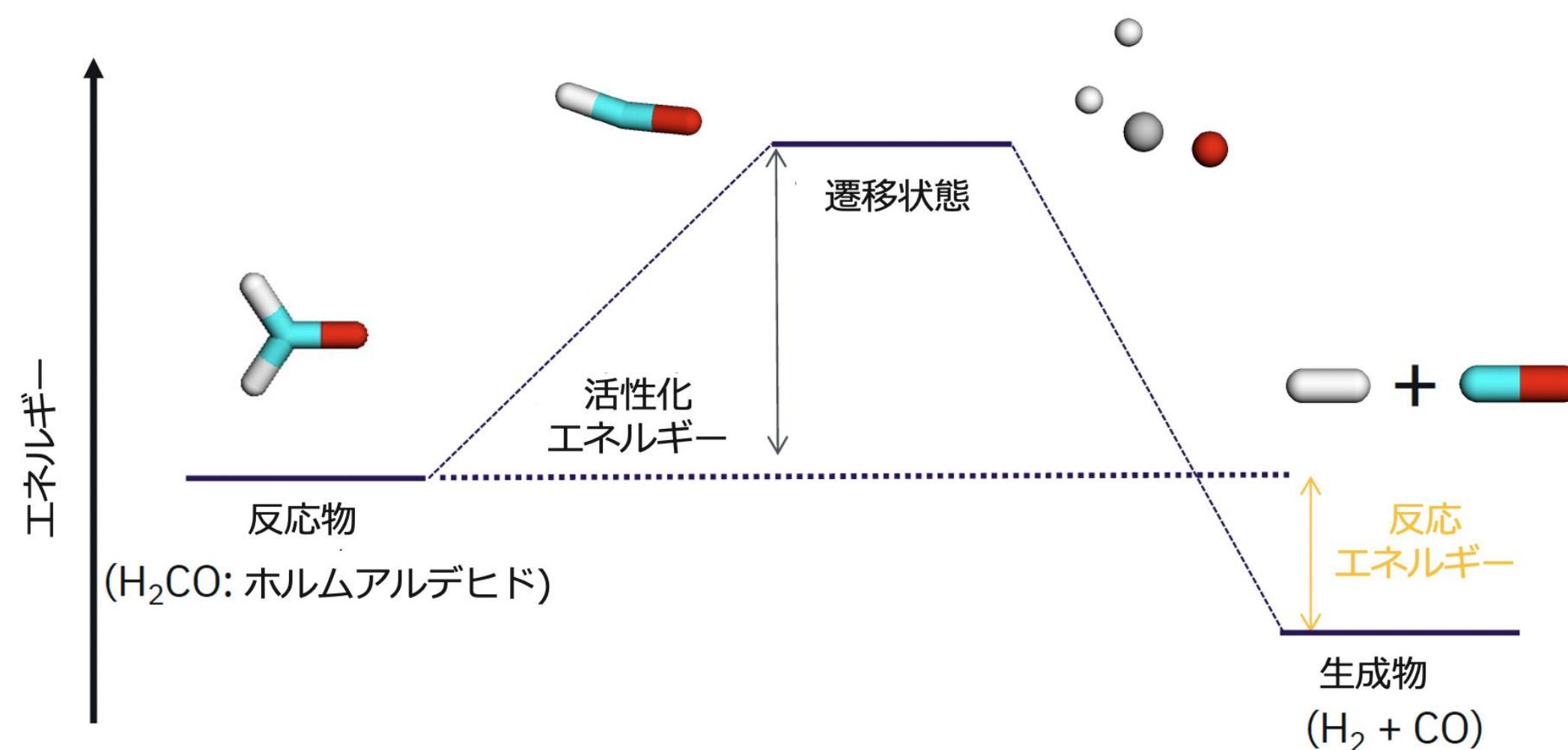
当てずっぽうな
実験を減らす
↓
より早く新薬開発ができる

分子シミュレーションで何ができるのか？

→ 物質の反応を予測したり、性質を調査できる

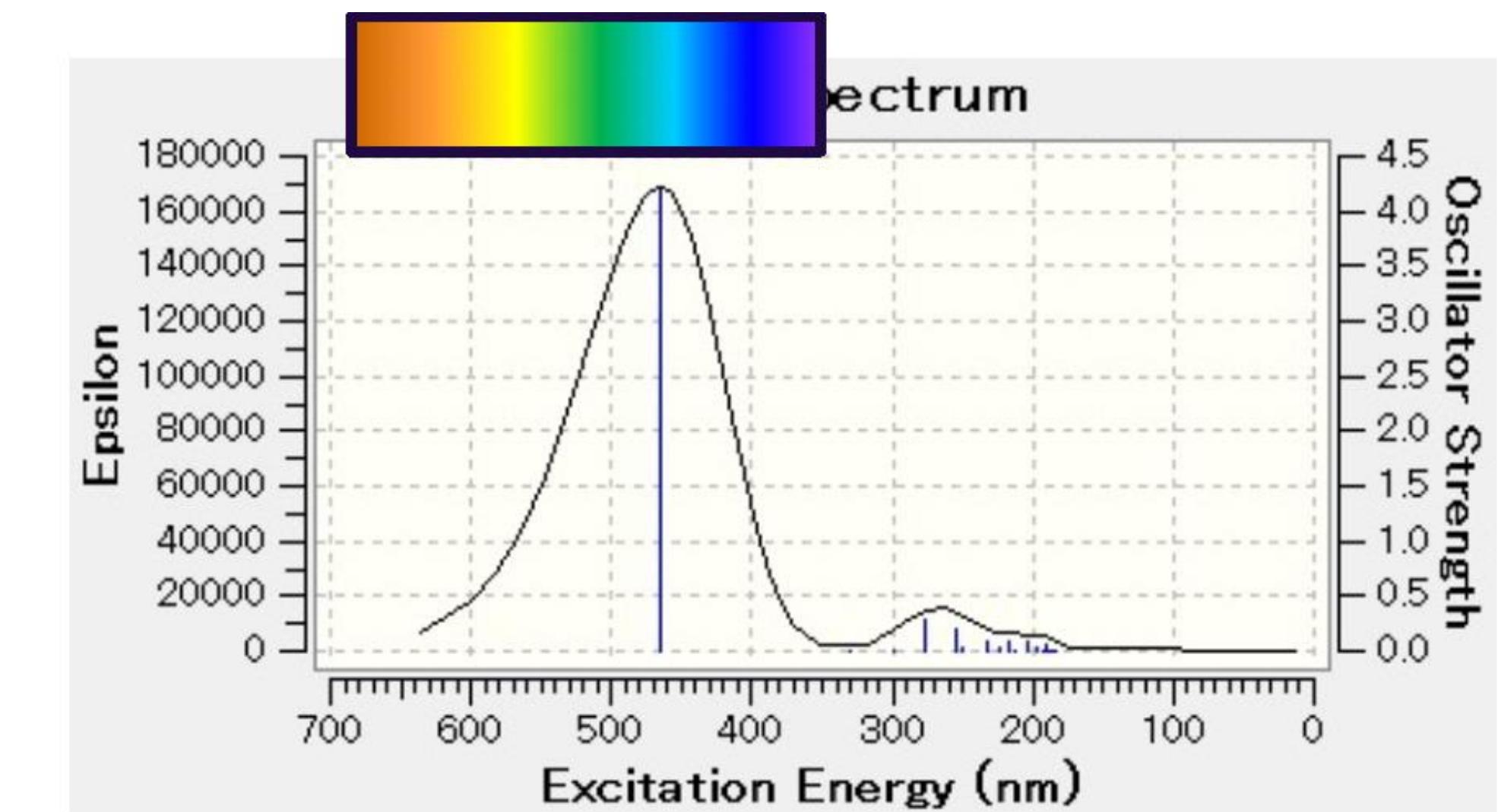
例えば、分子や原子のエネルギーがわかると・・・

化学反応が予測できる



活性化工エネルギーと反応エネルギーを計算
→ 観察できない反応の過程を予測できる

物質の色が予測できる



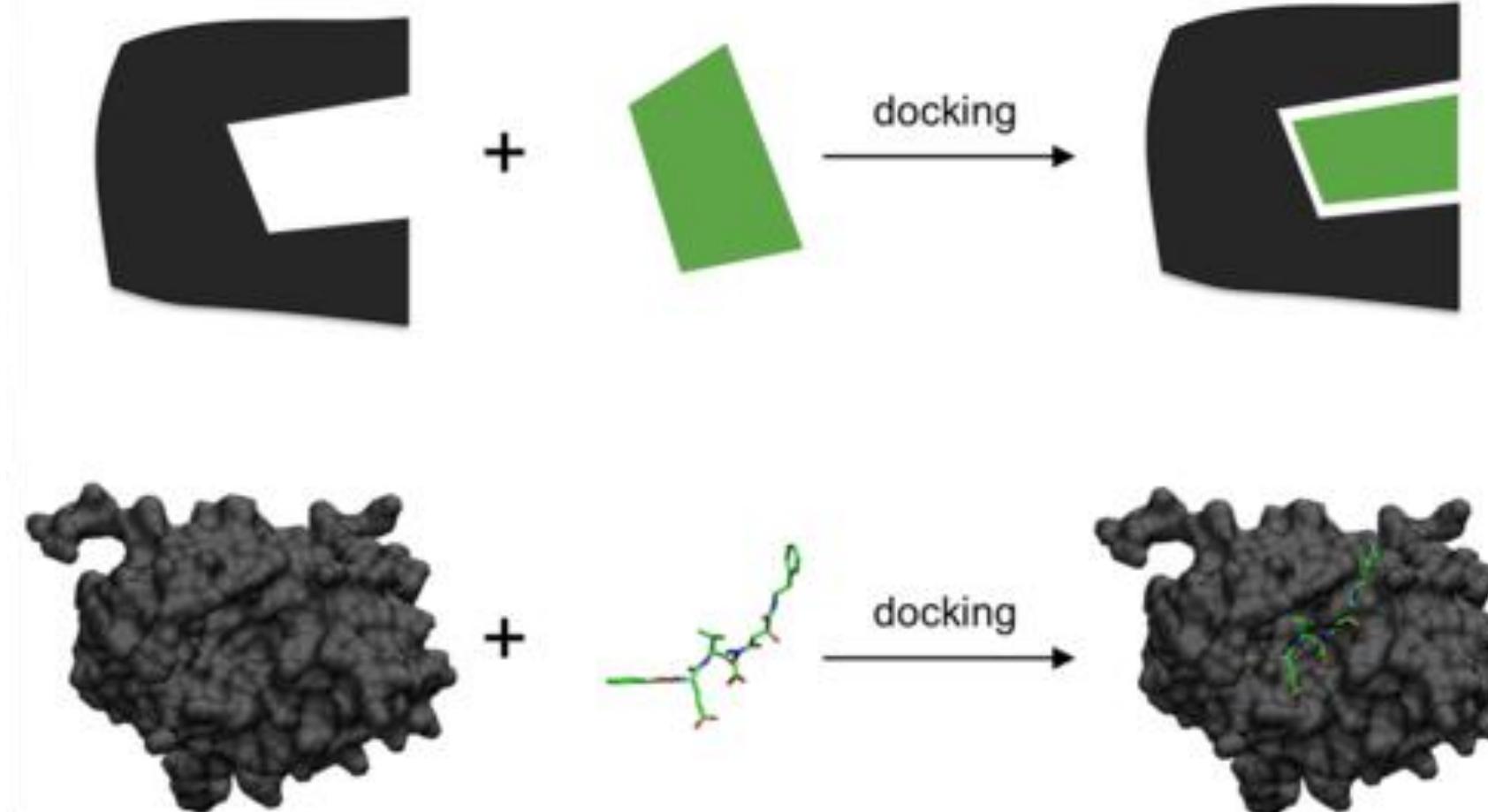
エネルギーごとに吸収する色が違う
→ 反射する色 (=目に見える色) が予測できる

分子シミュレーションで何ができるのか？

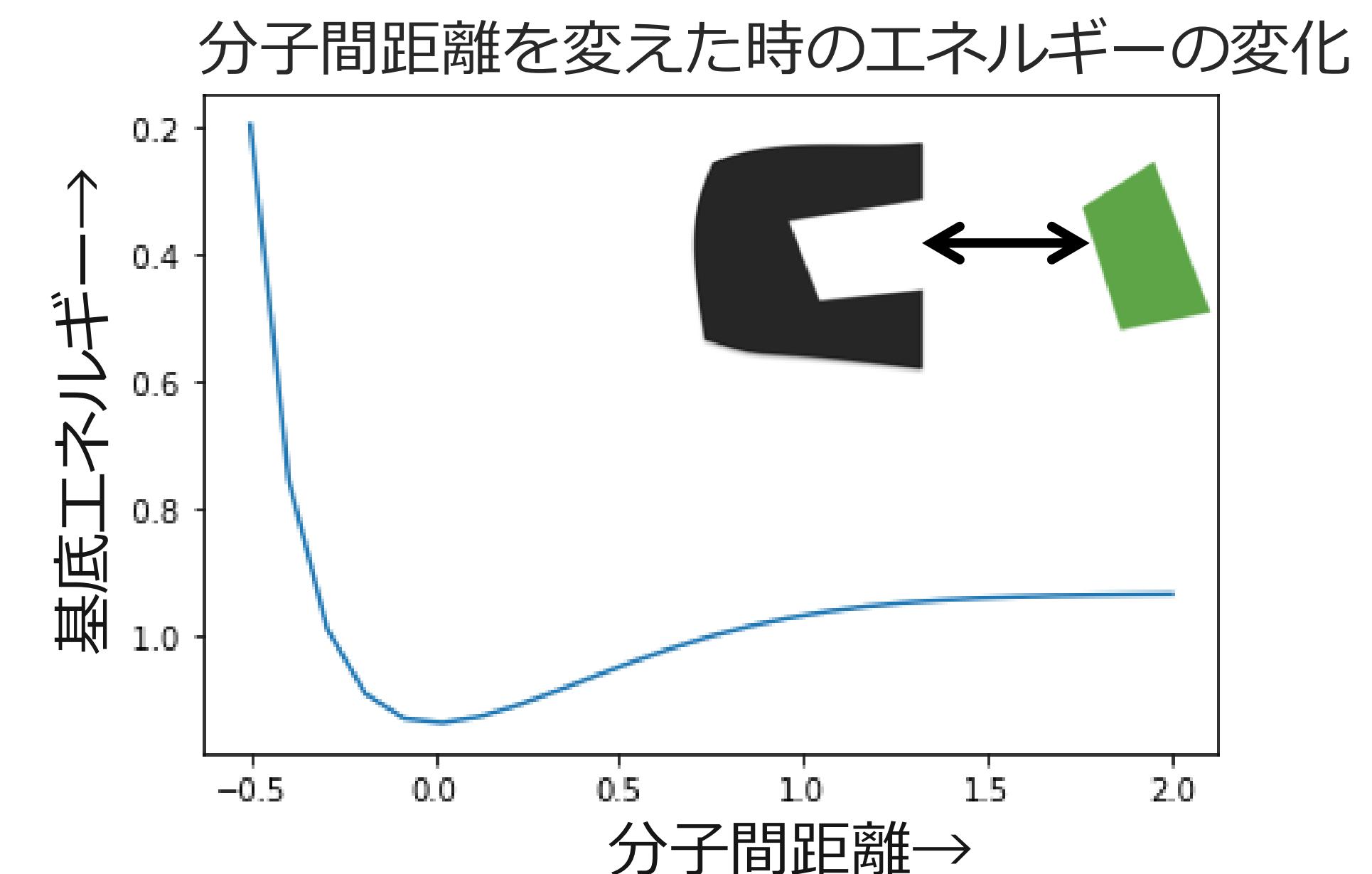
→ 物質の反応を予測したり、性質を調査できる

例えば、分子や原子のエネルギーがわかると・・・

薬の反応が予測できる



<https://ja.wikipedia.org/wiki/%E3%82%AA%E3%82%8B%E3%82%8C%E3%82%8B%E3%82%8C%E3%82%8B>



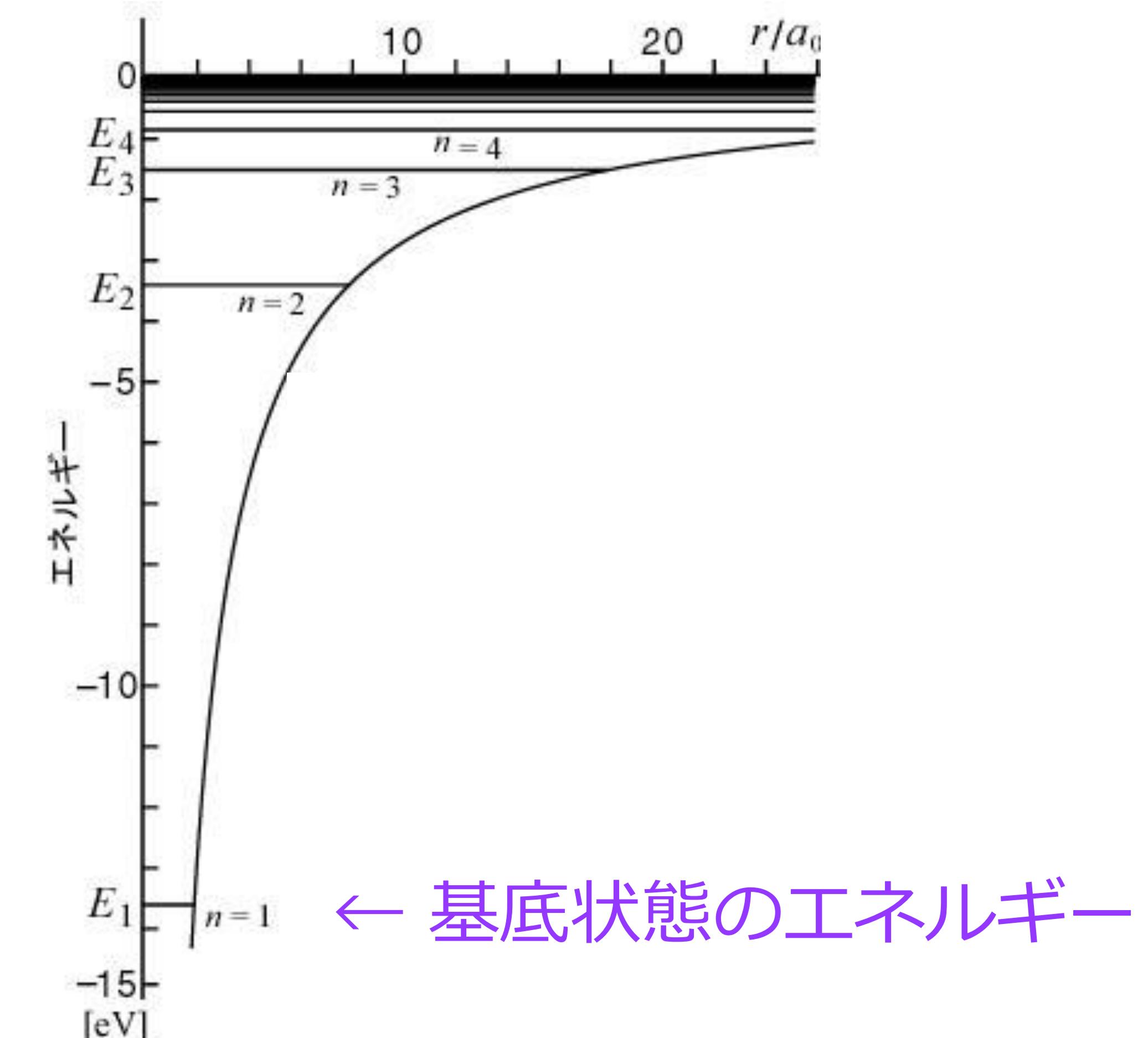
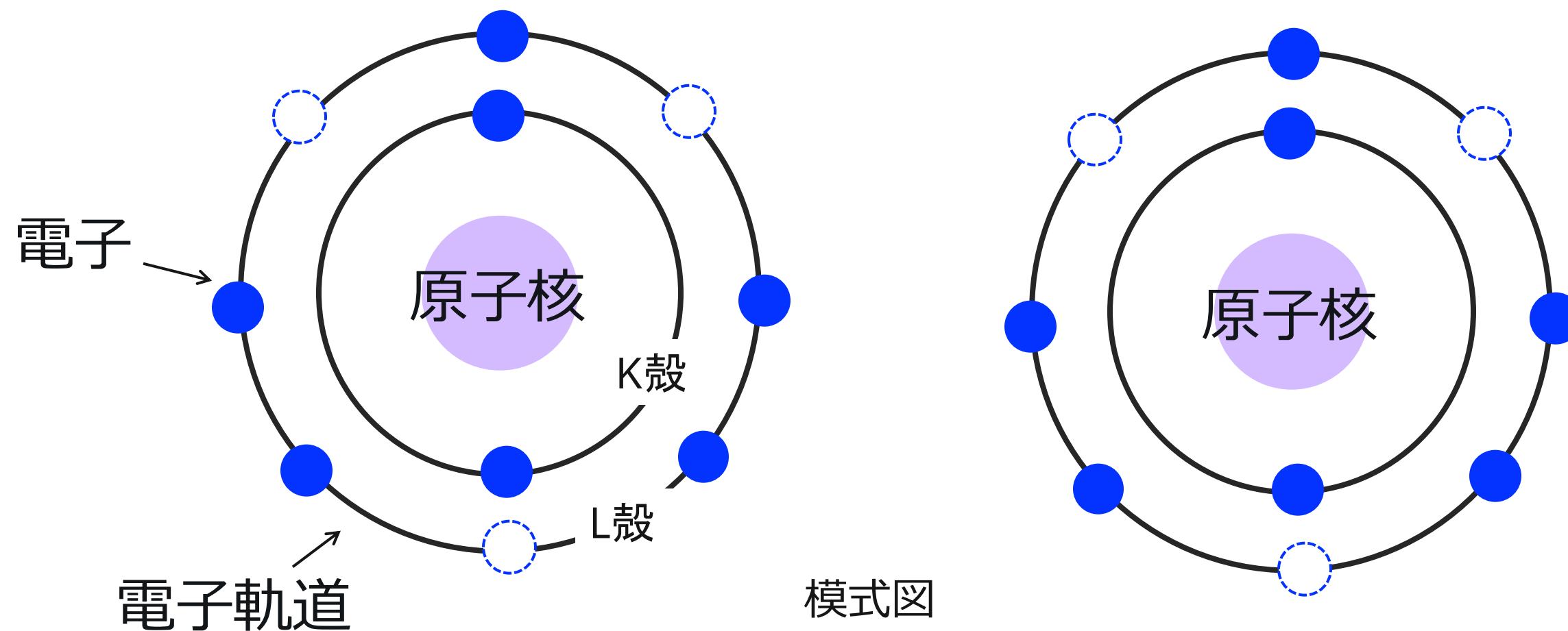
タンパク質と薬のドッキングシミュレーションで効果の予測ができる

今日取り組むのは、窒素分子の基底エネルギーを求める

窒素は、原子番号7（電子は7個）

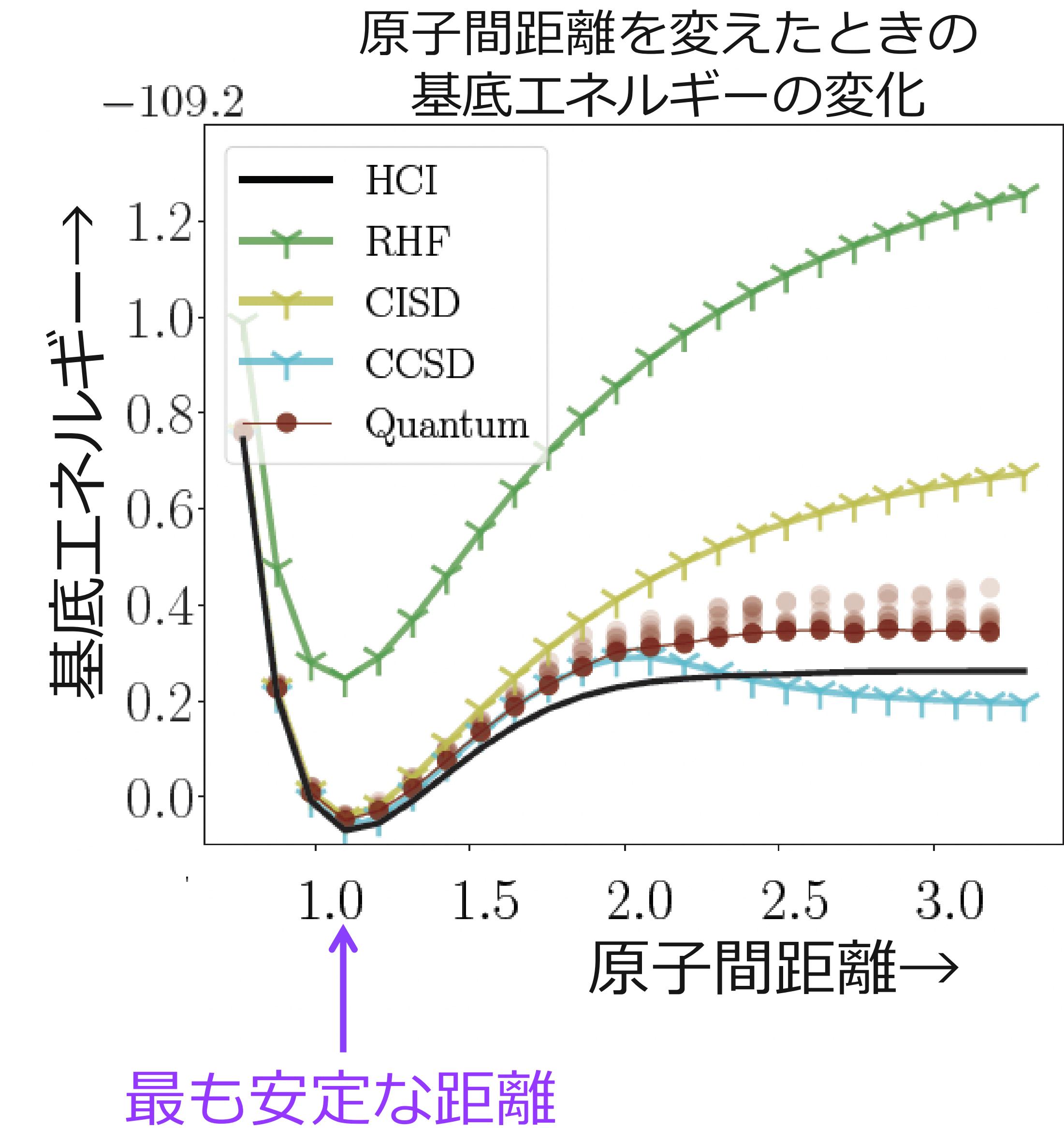
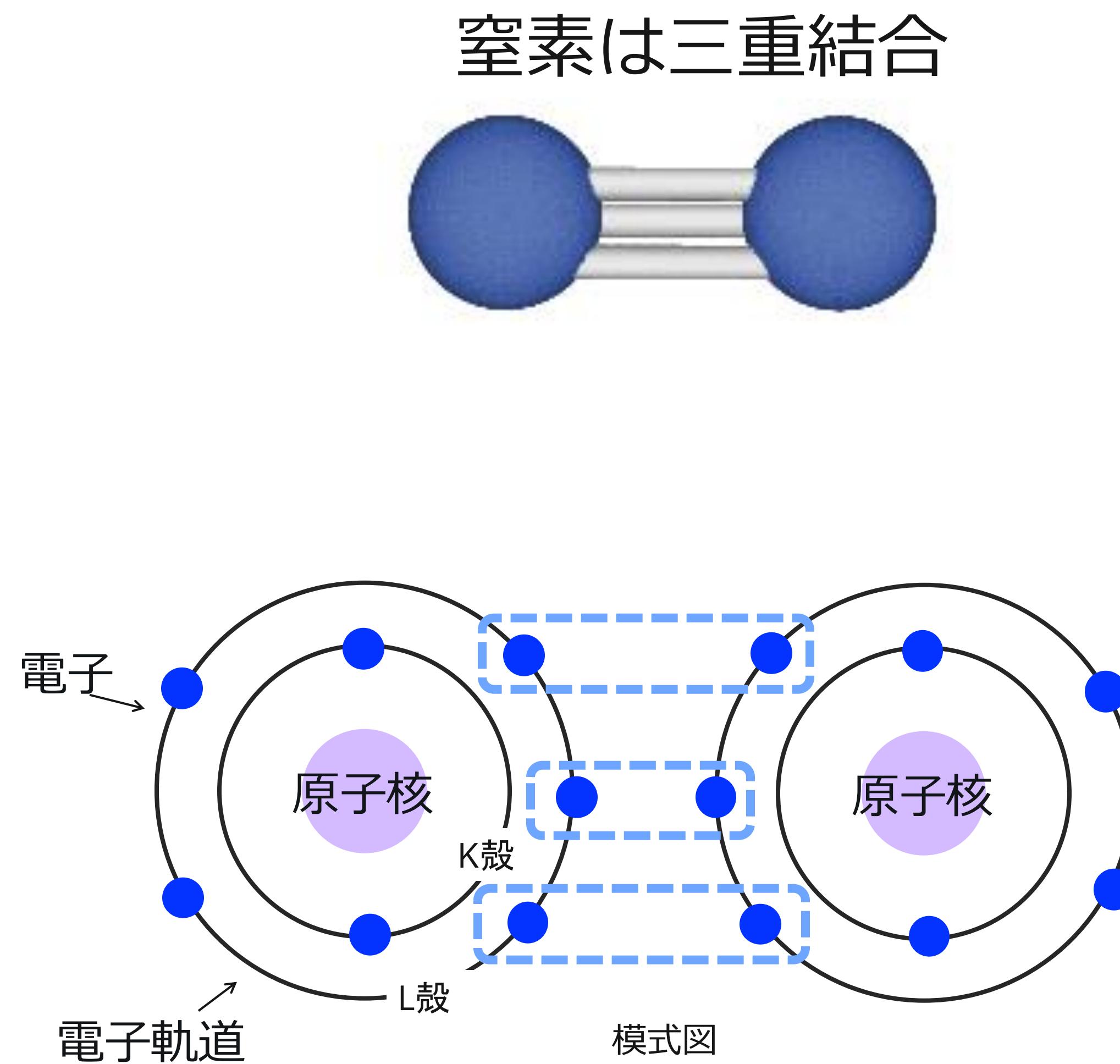
周期・族	1	2	3	12	13	14	15	16	17	18
1	1 H 水素 Hydrogen 1.00798									2 He ヘリウム Helium 4.0026
2	3 Li リチウム Lithium 6.968	4 Be ベリリウム Beryllium 9.01218			5 B 硼(ホウ)素 Boron 10.814	6 C 炭素 Carbon 12.0106	7 N 窒素 Nitrogen 14.0069	8 O 酸素 Oxygen 15.9994	9 F 弗(フッ)素 Fluorine 18.9984	10 Ne ネオン Neon 20.1797
3	11 Na ナトリウム Sodium 22.9898	12 Mg マグネシウム Magnesium 24.306			13 Al アルミニウム Aluminum 26.9815	14 Si 珪(ケイ)素 Silicon 28.085	15 P 磷(リン) Phosphorus 30.9738	16 S 硫黄 Sulfur 32.068	17 Cl 塩素 Chlorine 35.452	18 Ar アルゴン Argon 39.948

出典：<https://ja.wikipedia.org/wiki/周期表>



原子・分子のエネルギーが最も低く、安定する時の値

窒素のシミュレーションは難しい



基底エネルギーを求めるには？

シュレディンガー方程式（原子や分子を表す式）を解く！

$$\text{ハミルトニアン} \quad H |\psi\rangle = E |\psi\rangle$$

行列・ベクトル = 値・ベクトル

- ・ **ハミルトニアン** H ：物理の世界でエネルギーに相当する演算子。分子によって変わる。
- ・ **波動関数** $|\psi\rangle$ ：粒子の位置情報が保存されている関数。（固有ベクトル）
- ・ **エネルギー固有値** E ：波動関数に固有のエネルギー。

「シュレディンガー方程式を解く」 = 「ハミルトニアンの固有値問題を解く」

自然界では、エネルギーが最小の状態で系が安定します。

よって、ハミルトニアンのエネルギー固有値 E の最小値を求めることで、自然をシミュレーションすることができます。

物理の世界以外でもハミルトニアンを使います

物理の世界：エネルギーに相当する演算子 H

物理の世界以外：最適化問題のコスト関数

最小化したいものを **ハミルトニアン（コスト関数）** で表し、その期待値を最小化問題として扱います。

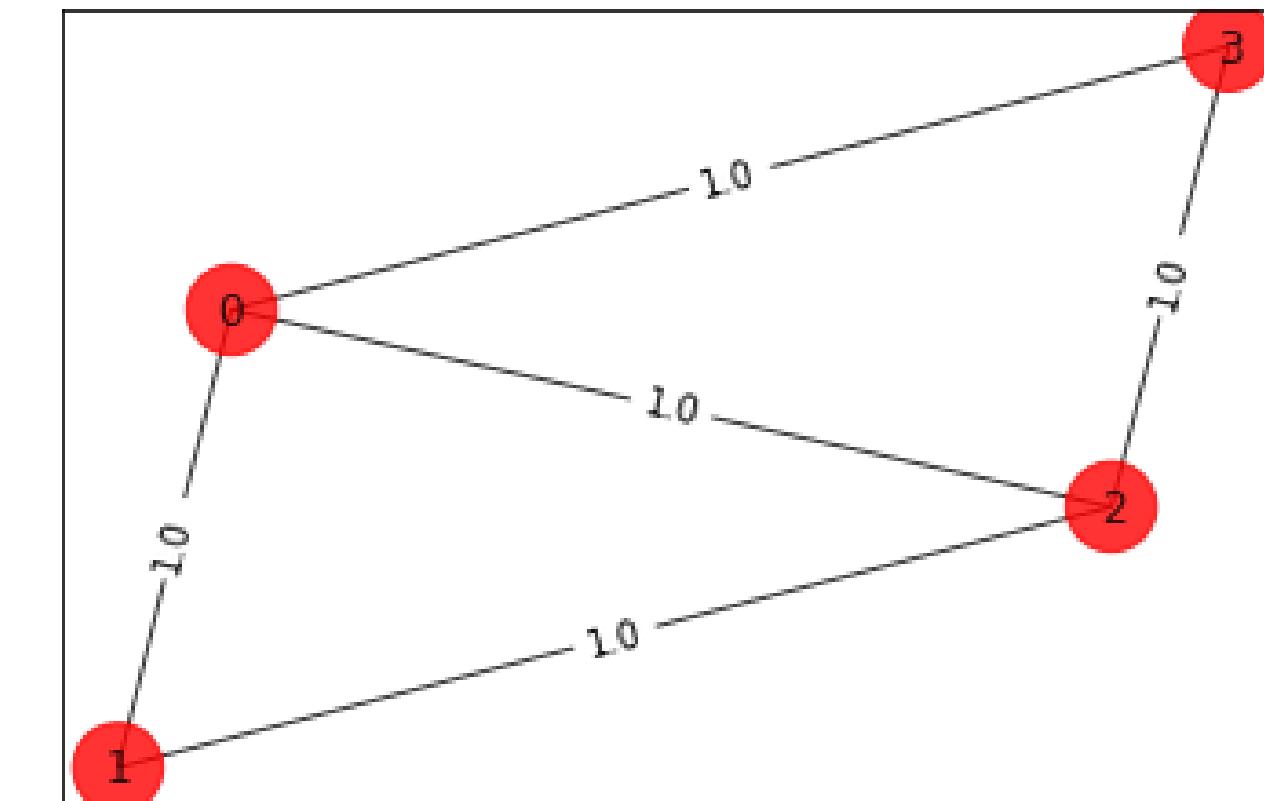
例) Maxカット問題のハミルトニアン

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} C_{i,j} (1 - z_i z_j) \quad (\text{ここで, } z_i = \{1, -1\}, C_{i,j} \text{ は重み})$$

$$\rightarrow \frac{1}{2} (Z_0 Z_1 + Z_1 Z_2 + Z_2 Z_3 + Z_3 Z_1 + Z_0 Z_2) - \frac{5}{2} I_0 I_1 I_2 I_3$$

: 最小値とそのときの Z_i の値を求める

頂点を2つのグループに分けるときに
カットする辺の数を最も多くする問題



最適化問題の例)

- 最小化: コスト、距離、重量、処理時間、材料、エネルギー消費量
- 最大化: 利益、価値、生産高、リターン、利回り、有用性、効率、収容能力

つまり、解きたい問題の問題設定部分がハミルトニアン。

行列の固有値・固有ベクトルとは

$A \vec{x} = \lambda \vec{x}$ が成立するとき \vec{x} を A の固有ベクトル、 λ を A の固有値という。
ただし、 A は正方行列、 \vec{x} は $\vec{0}$ でないベクトル、 λ はスカラー(数)。

固有値、固有ベクトルの求め方：

固有値方程式 $\det(A - \lambda I) = 0$ を解いて、 λ を求め、その各々の解に対して、 $(A - \lambda I)\vec{x} = 0$ を満たす \vec{x} を求める。

例) $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ -1 & 4 \end{pmatrix}$ の固有値と固有ベクトルは？

行列の固有値・固有ベクトルとは

$A \vec{x} = \lambda \vec{x}$ が成立するとき \vec{x} を A の固有ベクトル、 λ を A の固有値という。
ただし、 A は正方行列、 \vec{x} は $\vec{0}$ でないベクトル、 λ はスカラー(数)。

固有値、固有ベクトルの求め方：

固有値方程式 $\det(A - \lambda I) = 0$ を解いて、 λ を求め、その各々の解に対して、 $(A - \lambda I)\vec{x} = 0$ を満たす \vec{x} を求める。

例) $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ -1 & 4 \end{pmatrix}$ の固有値と固有ベクトルは？

$$A - \lambda I = \begin{pmatrix} 1 - \lambda & 2 \\ -1 & 4 - \lambda \end{pmatrix} \text{ より 固有値方程式は、}$$

$$(1 - \lambda)(4 - \lambda) + 2 = 0$$

$$\lambda^2 - 5\lambda + 6 = (\lambda - 2)(\lambda - 3) = 0$$

より、固有値 $\lambda = 2, 3$

$$\left| \begin{array}{l} \lambda = 2 \text{ に対して} \\ (A - 2I)\vec{x} = \begin{pmatrix} -1 & 2 \\ -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = 0 \quad \text{より} \\ -x_1 + 2x_2 = 0 \\ \text{よって、固有ベクトルは } \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ (の定数倍)} \\ \text{つまり } \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ -1 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \lambda = 3 \text{ に対して} \\ (A - 3I)\vec{x} = \begin{pmatrix} -2 & 2 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = 0 \quad \text{より} \\ -x_1 + x_2 = 0 \\ \text{よって固有ベクトルは } \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ (の定数倍)} \\ \text{つまり } \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ -1 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = 3 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \end{array} \right.$$

行列の対角化とは

正方行列 A の固有ベクトルを $\vec{b}_1, \dots, \vec{b}_n$ とするとき、この固有ベクトルの組み合わせによって構成される

$P = (\vec{b}_1 \cdots \vec{b}_n)$ を使うと $P^{-1}AP = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_n \end{pmatrix}$ となるとき、これを行列の対角化と呼ぶ。

逆行列 P^{-1} とは：

行列 P の逆行列 P^{-1} は、 $PP^{-1} = P^{-1}P = I$ を満たす。

$P = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ の逆行列は、 $P^{-1} = \frac{1}{ad-bc} \begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}$

例) $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ -1 & 4 \end{pmatrix}$ を対角化するには？

行列の対角化とは

正方行列 A の固有ベクトルを $\vec{b}_1, \dots, \vec{b}_n$ とするとき、この固有ベクトルの組み合わせによって構成される

$P = (\vec{b}_1 \cdots \vec{b}_n)$ を使うと $P^{-1}AP = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_n \end{pmatrix}$ となるとき、これを行列の対角化と呼ぶ。

逆行列 P^{-1} とは：

行列 P の逆行列 P^{-1} は、 $PP^{-1} = P^{-1}P = I$ を満たす。

$P = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ の逆行列は、 $P^{-1} = \frac{1}{ad-bc} \begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}$

例) $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ -1 & 4 \end{pmatrix}$ を対角化するには？

A の固有方程式 $\begin{vmatrix} 1-\lambda & 2 \\ -1 & 4-\lambda \end{vmatrix} = 0$ より、 A の固有値 $\lambda = 2, 3$ (前ページ参照)。

固有値 2 に対応する固有ベクトルの一つは $\begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}$ 、

固有値 3 に対応する固有ベクトルの一つは $\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$

より $P = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$ とおくと、逆行列は $P^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}$ となり、

$P^{-1}AP = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}$ となる。

ハミルトニアンのエネルギー期待値を求めたい

物理の世界でエネルギーに相当する演算子：ハミルトニアン

電子のハミルトニアン $\mathcal{H}_{\text{el}} = - \sum_i \frac{\nabla_{r_i}^2}{m_e} - \sum_I \sum_i \frac{Z_I e^2}{|R_I - r_i|} + \sum_i \sum_{j>i} \frac{e^2}{|r_i - r_j|}.$

電子の運動
エネルギー

電子と原子核の間の
クーロンエネルギー

電子と電子の間の
クーロンエネルギー

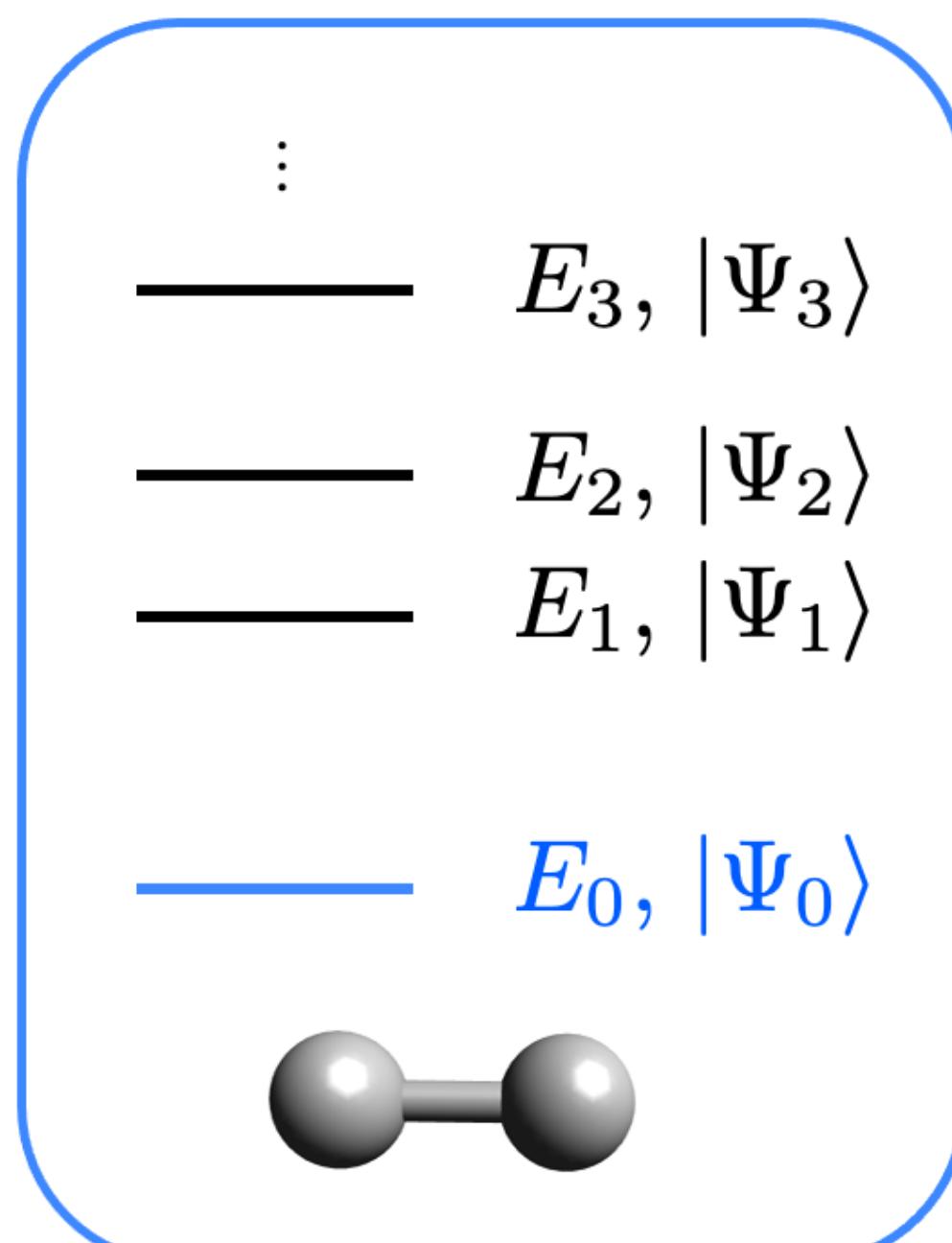
ハミルトニアン H のエネルギー期待値（基底状態エネルギー）を求めるることは、
ハミルトニアン行列の固有値を求めるることと同じ。

$$H|\Psi_n\rangle = E_n|\Psi_n\rangle$$

正しい固有ベクトル $|\Psi_n\rangle$ が見つかれば、
ハミルトニアン行列 H は $|\Psi_n\rangle$ によって対角化され、固有値 E_n が求められる。

$$\begin{pmatrix} \langle \Psi_0 | H | \Psi_0 \rangle & \langle \Psi_0 | H | \Psi_1 \rangle & \langle \Psi_0 | H | \Psi_2 \rangle \\ \langle \Psi_1 | H | \Psi_0 \rangle & \langle \Psi_1 | H | \Psi_1 \rangle & \langle \Psi_1 | H | \Psi_2 \rangle \\ \langle \Psi_2 | H | \Psi_0 \rangle & \langle \Psi_2 | H | \Psi_1 \rangle & \langle \Psi_2 | H | \Psi_2 \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_0 & 0 & 0 \\ 0 & E_1 & 0 \\ 0 & 0 & E_2 \end{pmatrix}$$

この最小エネルギー E_0 が基底状態エネルギー。



ハミルトニアンの固有値を求めるには？

シュレディンガーエルガム方程式：

行列・ベクトル = 値・ベクトル

分子のハミルトニアン H は一般にはとても大きいです！

例： $2^{32} \times 2^{32}$

どうやって解く？

ハミルトニアンの固有値を求めるには？

シュレディンガーエルメント : $H |\psi\rangle = E|\psi\rangle$

一般にはとても大きい行列

手計算



古典コンピューター



計算メモリーが足りない

ハミルトニアンの固有値を求めるには？

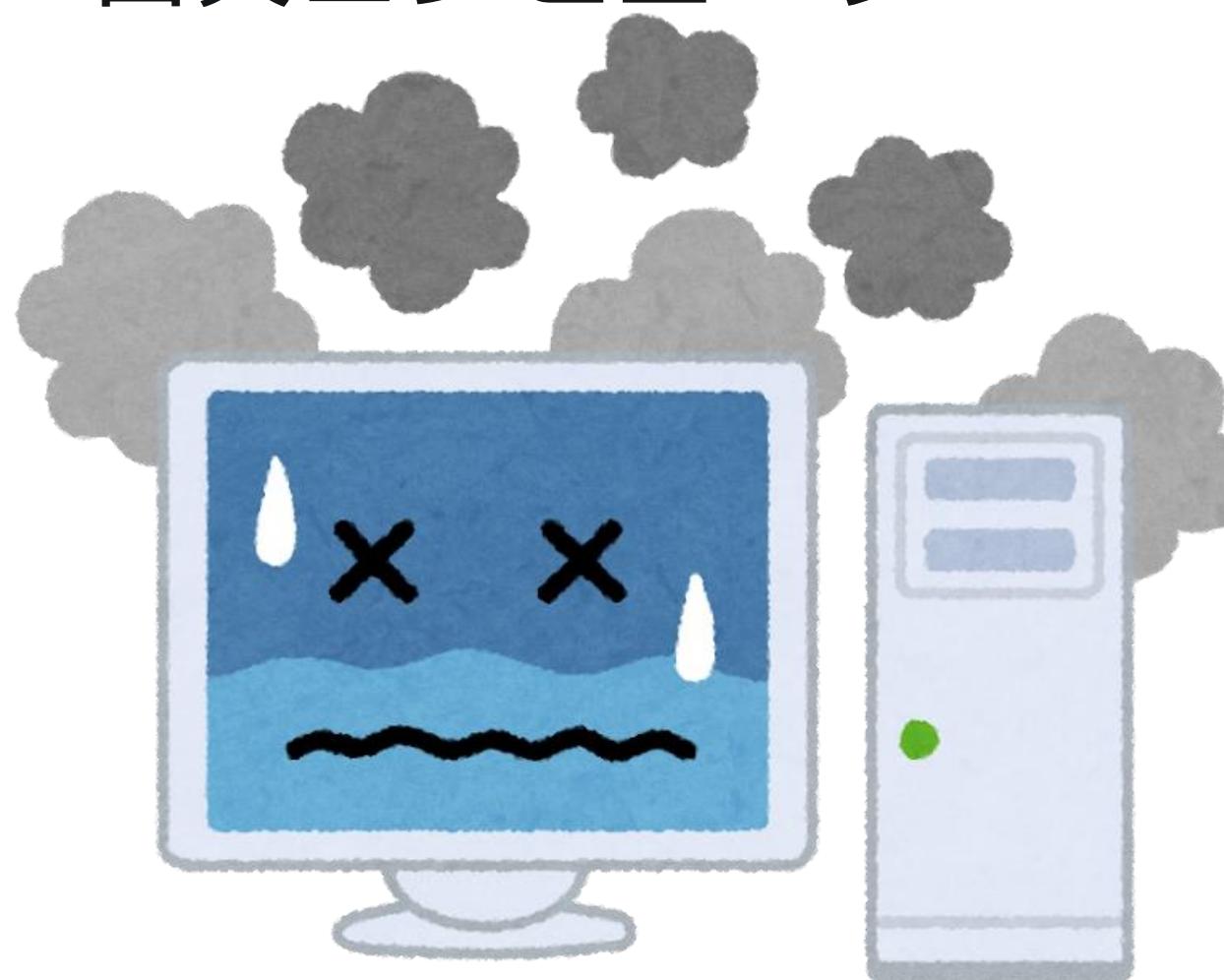
シュレディンガーエルゴリズム： $H |\psi\rangle = E|\psi\rangle$

一般にはとても大きい行列

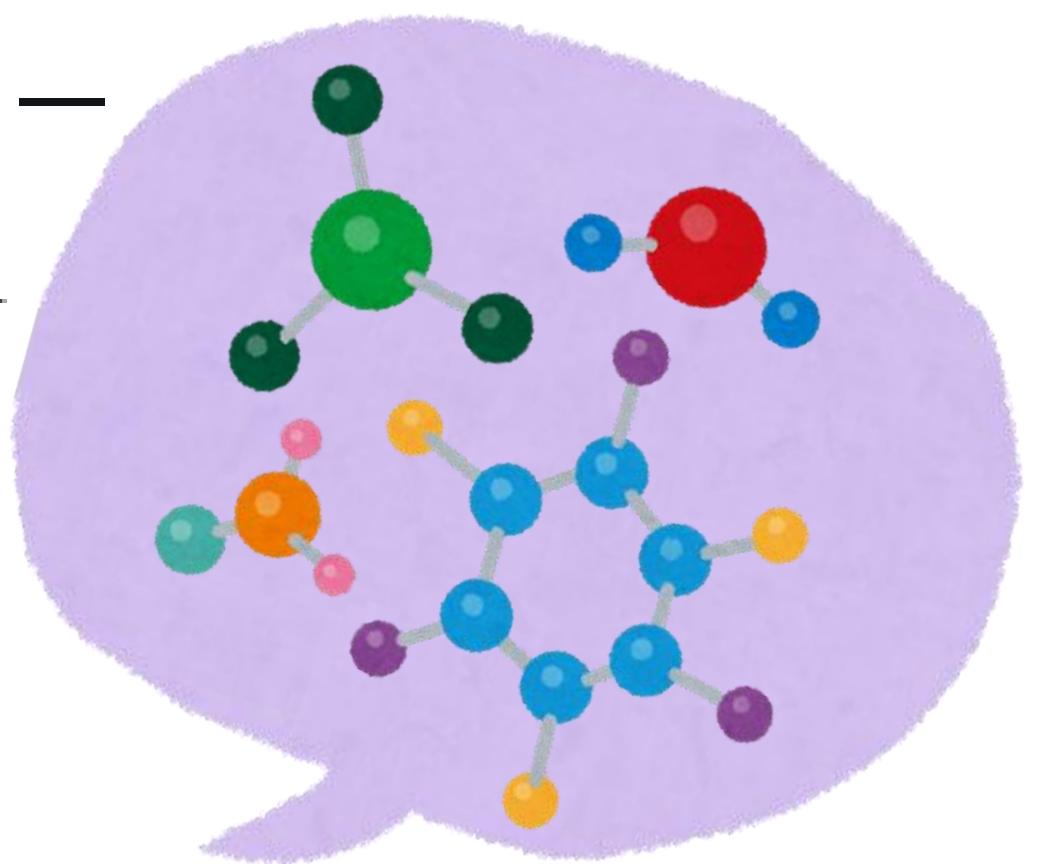
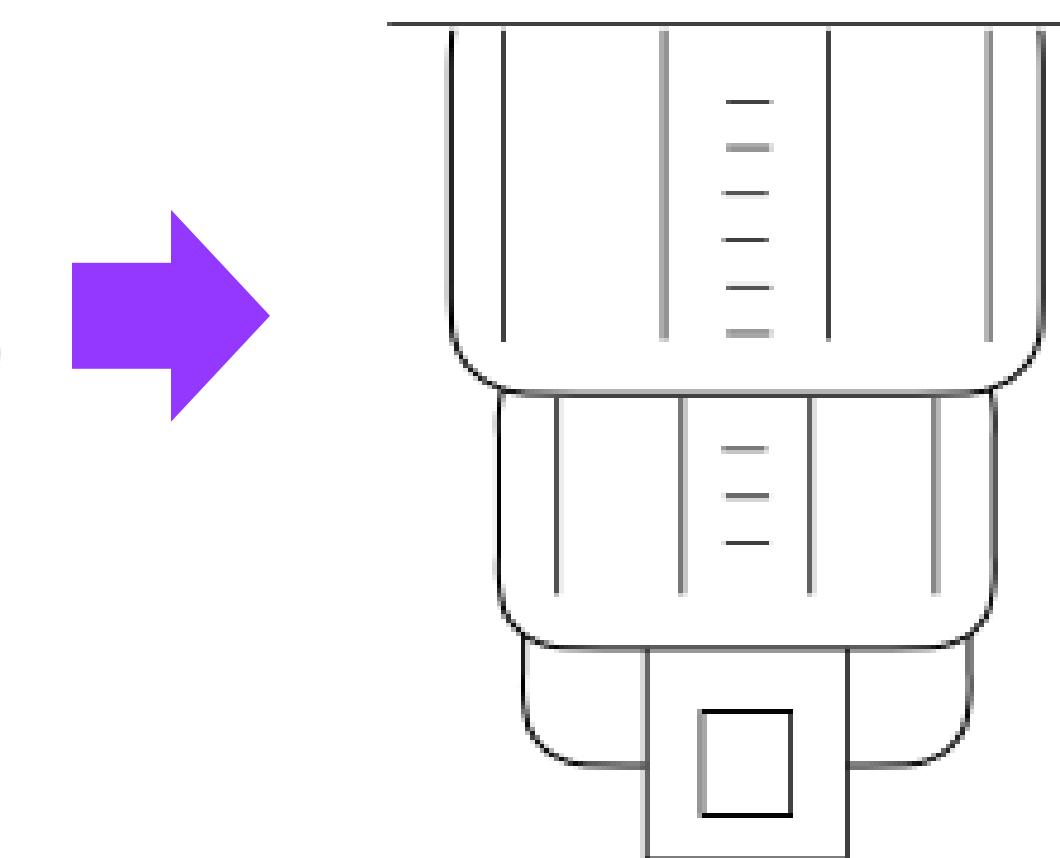
手計算



古典コンピューター



量子コンピューター



分子は
量子力学の世界

計算メモリーが足りない

量子力学の仕組み
(重ね合わせや量子もつれ) を
使って計算する！

「位相推定アルゴリズム」など

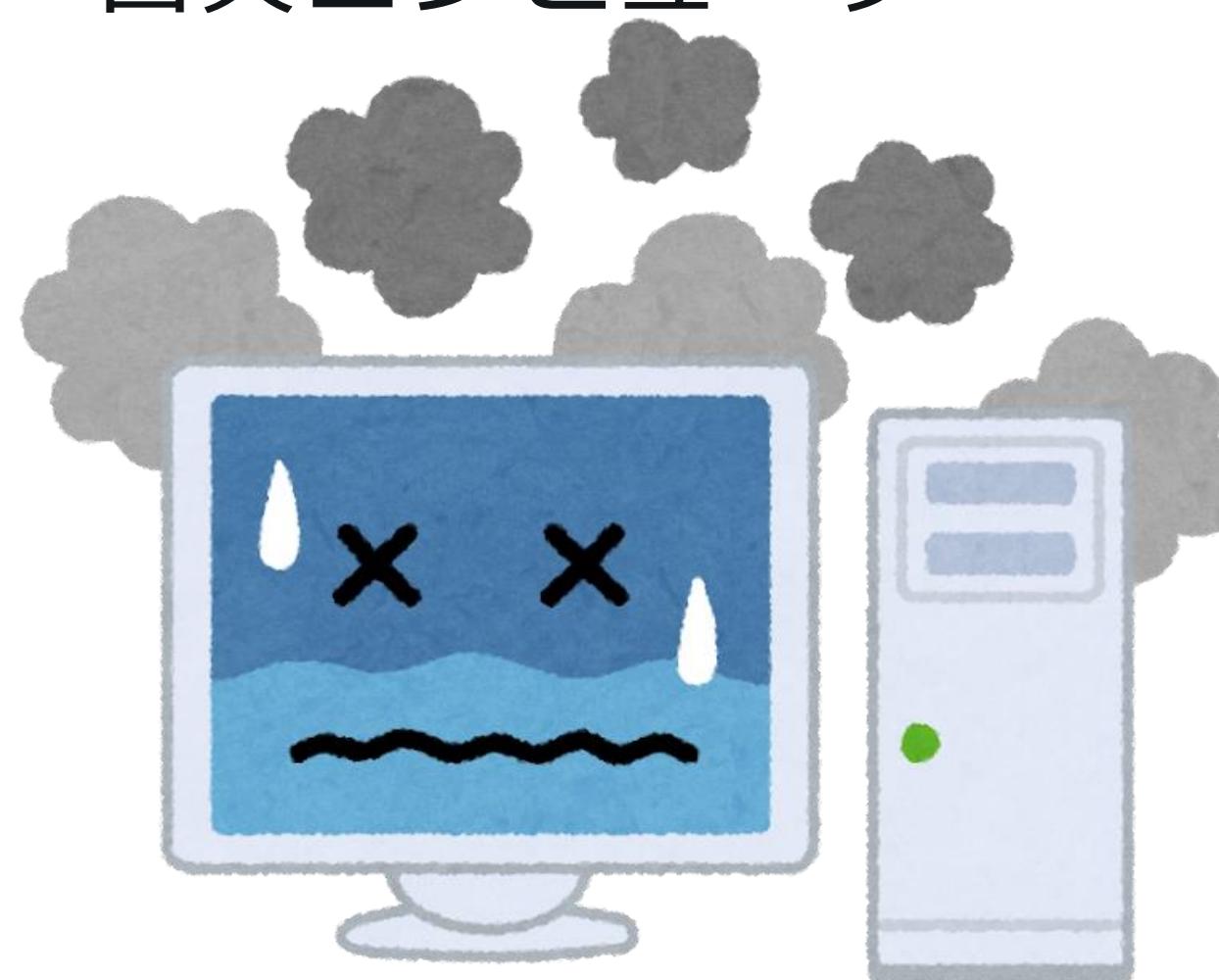
ハミルトニアンの固有値を求めるには？

シュレディンガーエルゴリズム : $H |\psi\rangle = E|\psi\rangle$

手計算



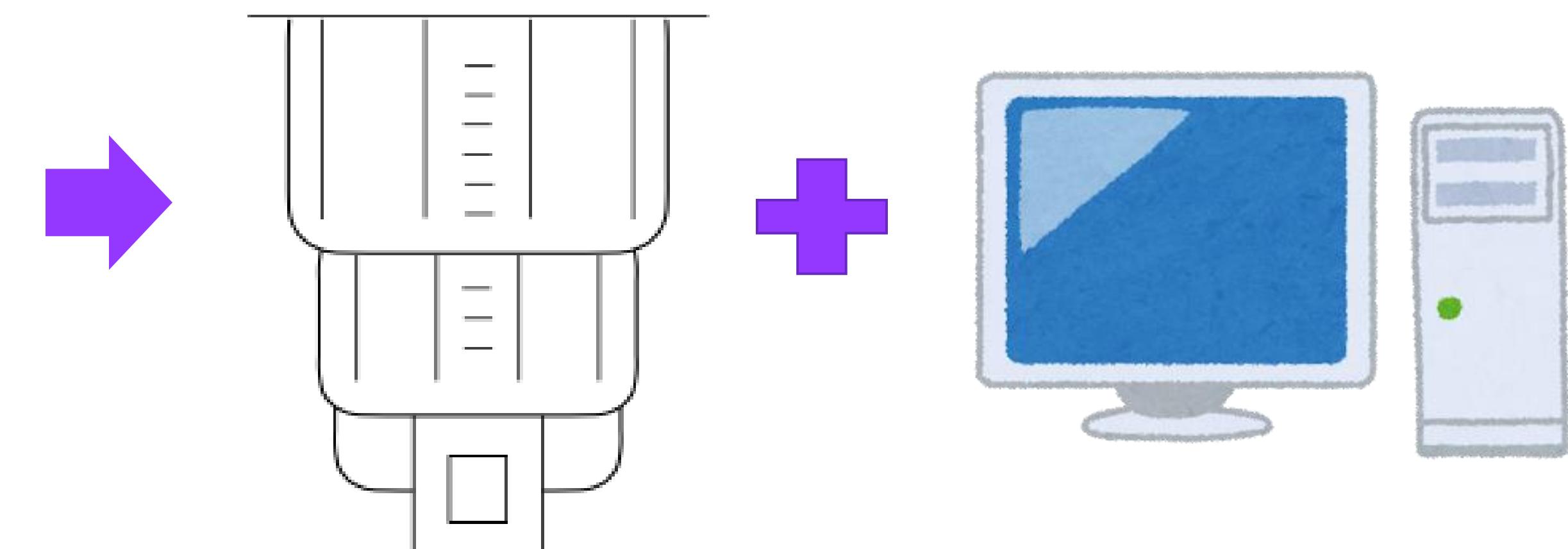
古典コンピューター



計算メモリーが足りない

ノイズありの

量子コンピューター + 古典コンピューター



量子の得意な計算 + 古典の得意な計算

「量子古典ハイブリッドアルゴリズム」

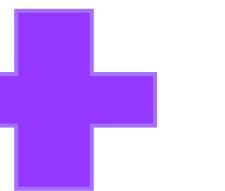
さらに

スーパーコンピューターと量子コンピューターを統合して使う

今年6月に稼働開始！



同じサイト
に設置



スーパーコンピューター富岳

今日学ぶ量子化学のアルゴリズムは
スパコン+量子コンピューターの日本発の事例！



IBM Quantum System Two
133量子ビット Heron プロセッサー

場所：理研神戸

東大の IBM Quantum System One と 東大のスパコンMiyabi も統合予定！

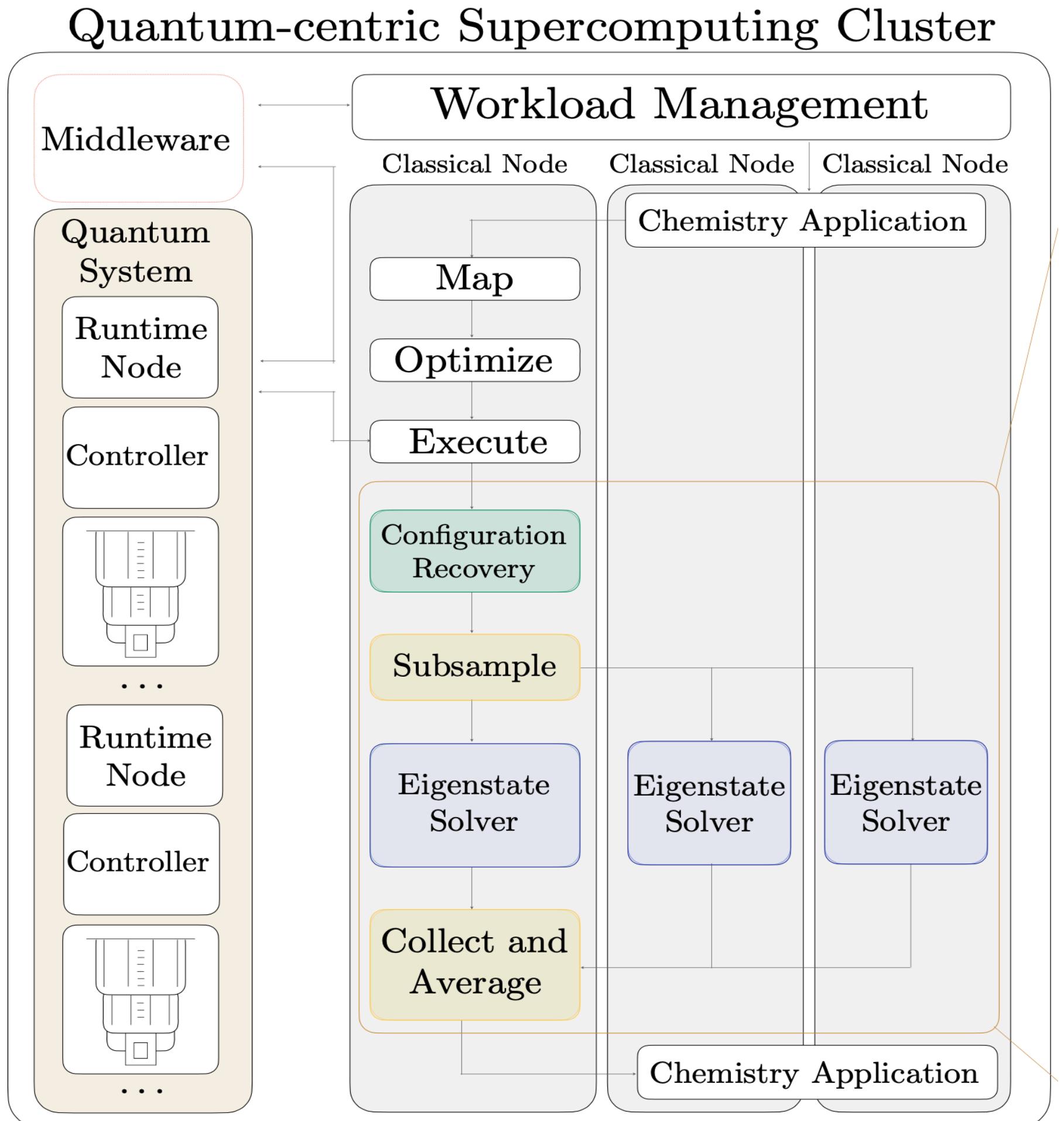


新川崎にあるIBM Quantum System One



東京大学のスパコンMiyabi

今日学ぶサンプルベースの量子対角化(SQD)は スパコン+量子コンピューターの日本発の事例！



量子コンピューター 古典コンピューター

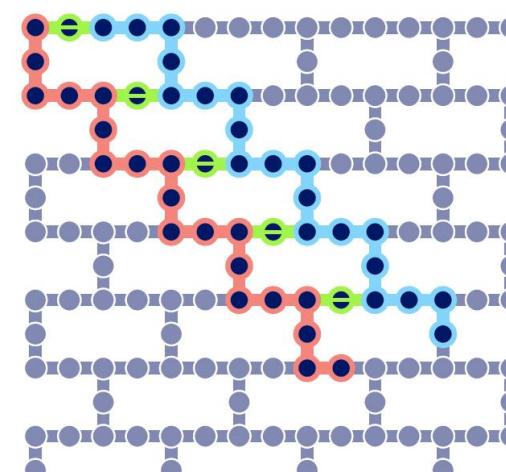
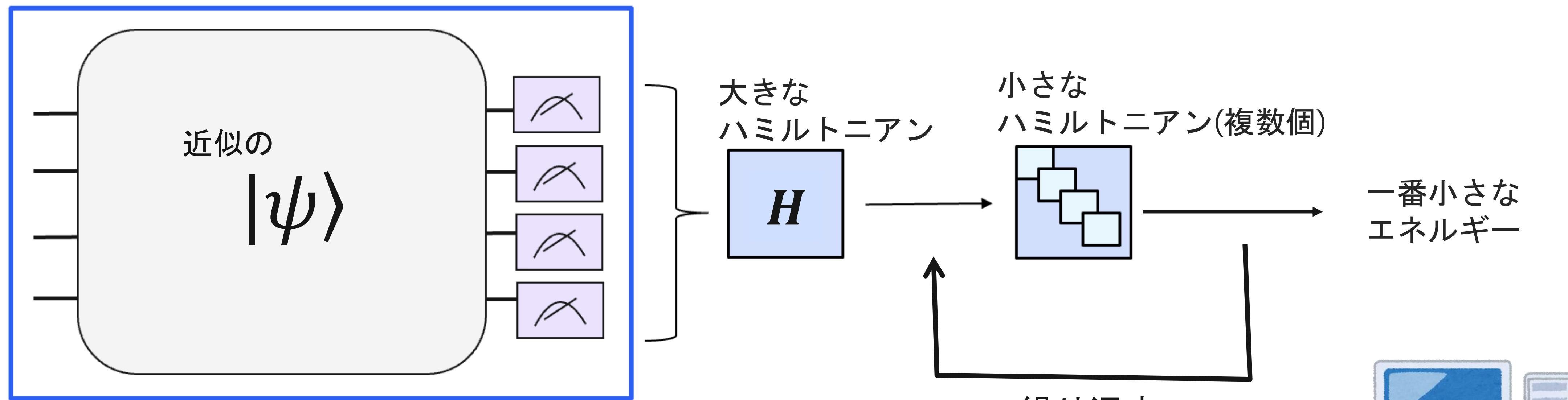
“Chemistry Beyond Exact Solutions on a Quantum-Centric Supercomputer” arXiv:2405:05068



この機能はアドオンとしてQiskitに取り込まれました。₂₃

量子+古典のハイブリッドアルゴリズムで 分子の基底エネルギーを求める「サンプルベースの量子対角化」

目的：窒素分子のシュレディンガーアルゴリズムで解く

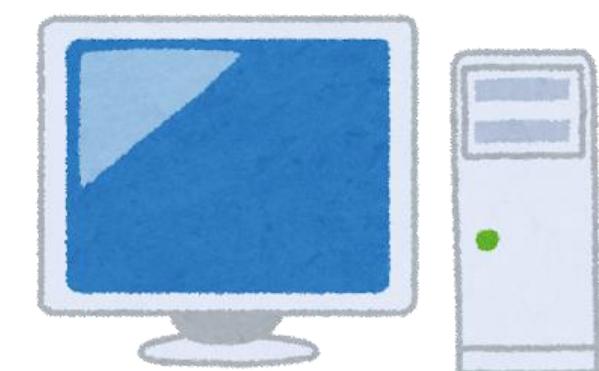


量子コンピューター

量子状態（アンサツ） $|\psi\rangle$ を近似的に作って、測定結果を得る。

古典コンピューター：

1. 測定結果を化学のルールに従って修正。
2. 結果から部分的にサンプルしていくつか選択。
3. サンプルをもとにハミルトニアン H のサイズを小さくする。
4. 小さなハミルトニアンでエネルギーを求める(繰り返す)。



QSCI (Quantum Selected Configuration Interaction) 法

Qunasys さんが開発した元の手法



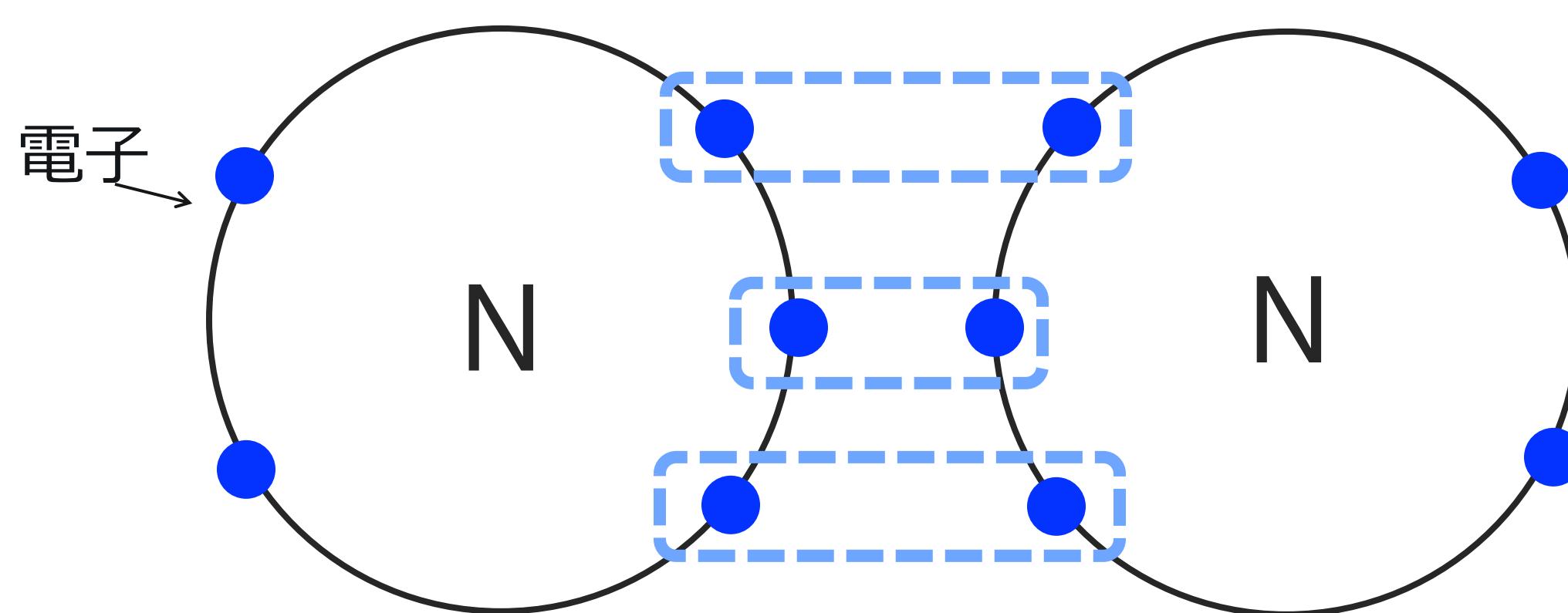
引用 : <https://doi.org/10.11436/mssj.25.202>

“Quantum-Selected Configuration Interaction: classical diagonalization of Hamiltonians in subspaces selected by quantum computers”
<https://arxiv.org/abs/2302.11320>

SQDは、QSCIにエラー緩和を追加し、大規模計算に使えるようにした手法

- ・多量子ビットでノイズの多い量子コンピューターでも使える工夫
- ・後処理をスパコンで並列計算できるように工夫

窒素分子の状態を量子回路にモデル化する



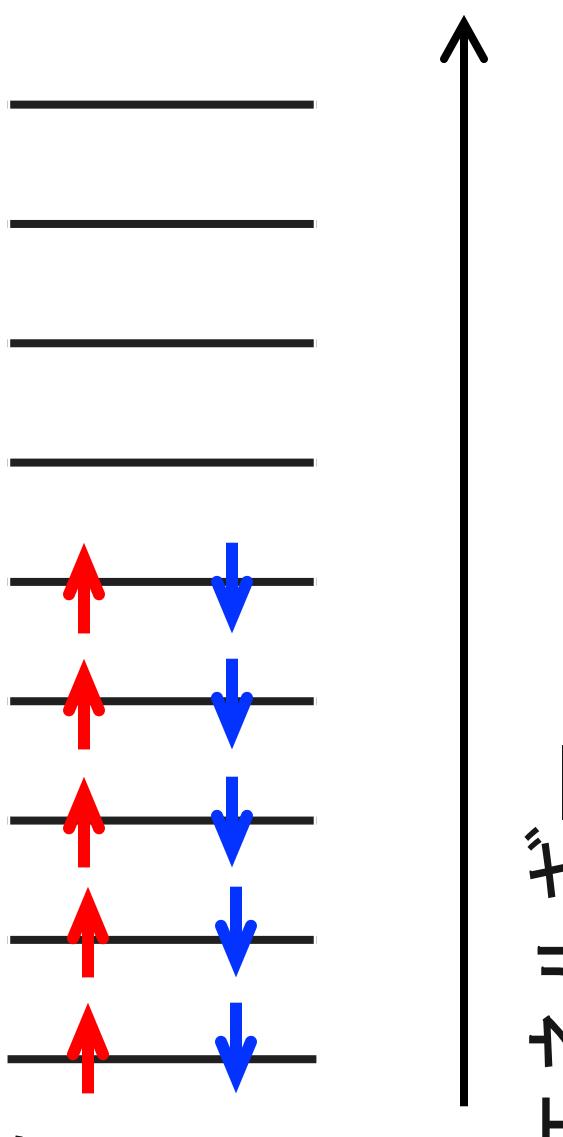
模式図

窒素分子の最外殻にある電子のみ考える。
→ 10個の電子(10量子ビット)

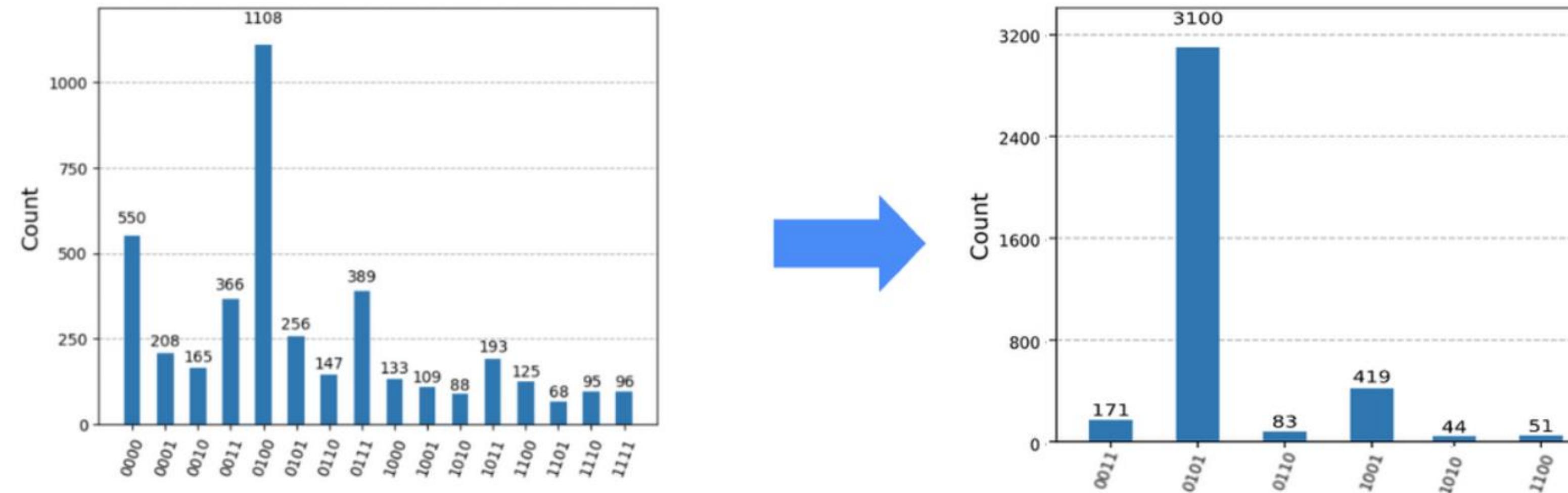
計算する空間を考える → 今回は32量子ビットを使う。

窒素分子のハミルトニアンをもとに量子回路を作成。
(Qiskitが作ってくれるが、今回は事前に計算されたものを使う)

32量子ビット
の空間

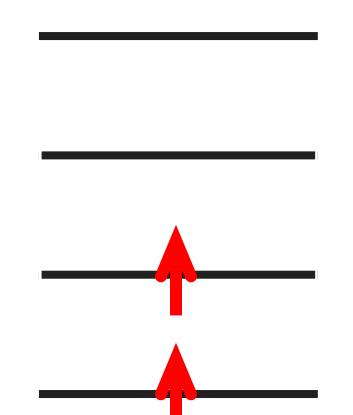


化学のルールに基づいた修正

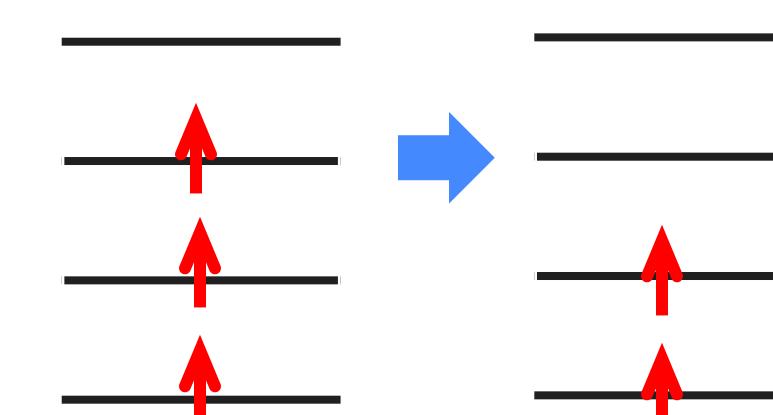


エラーのあるビット列を電子の数を保存するようにビット反転して修正。

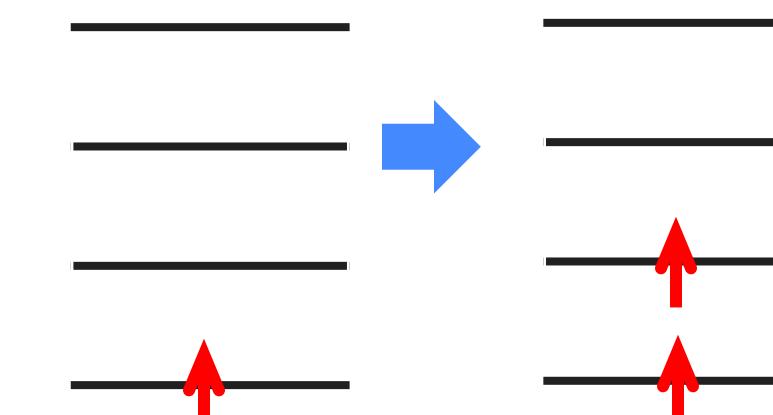
電子が2個の例



$|0011\rangle$



$|0111\rangle \rightarrow |0011\rangle$



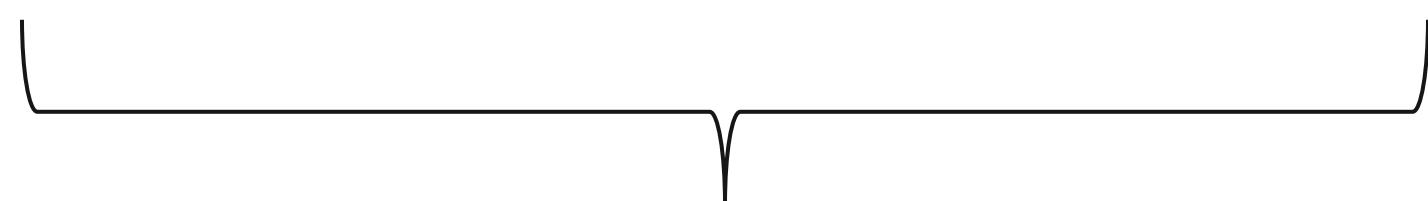
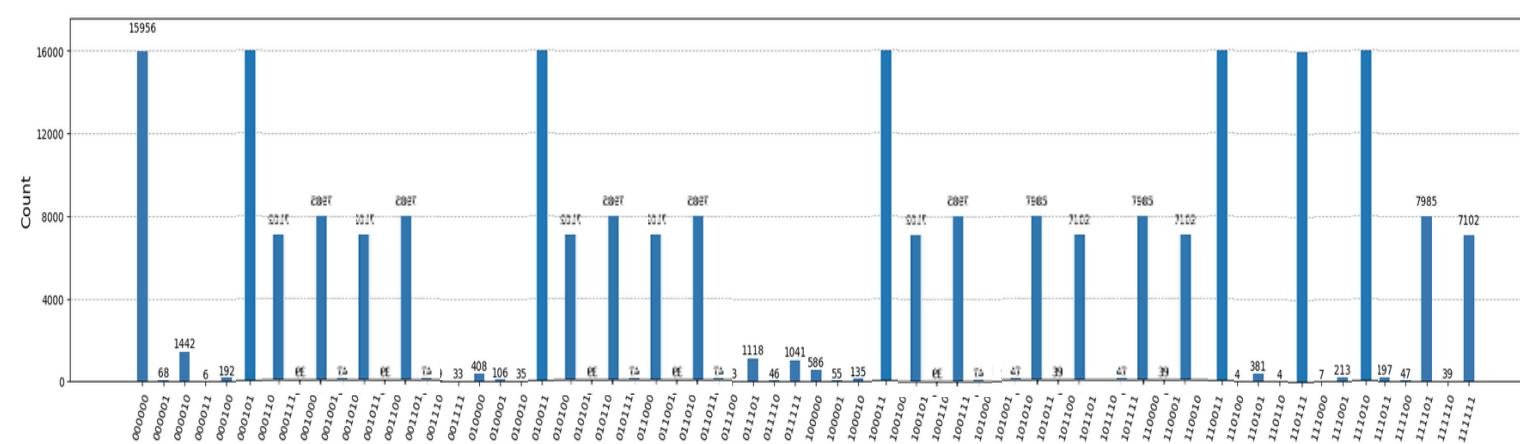
$|0001\rangle \rightarrow |0011\rangle$

この状態が出たら電子1つを追加するようにビット反転

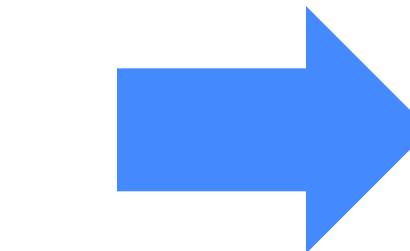
この状態が出たら電子1つを削除するようにビット反転

データをサンプリングする

10万ショットのビット列の中から、
50個 を5バッチ分、選択する。

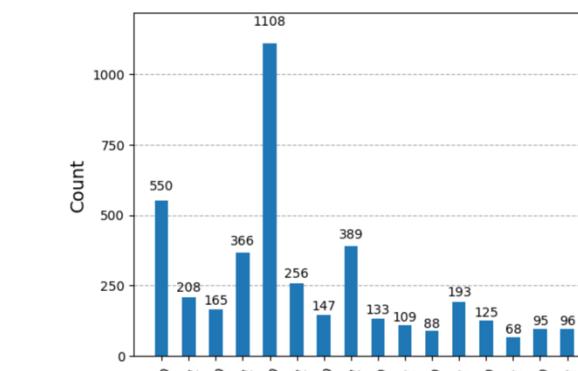


修正された合計10万ショットの
ビット列

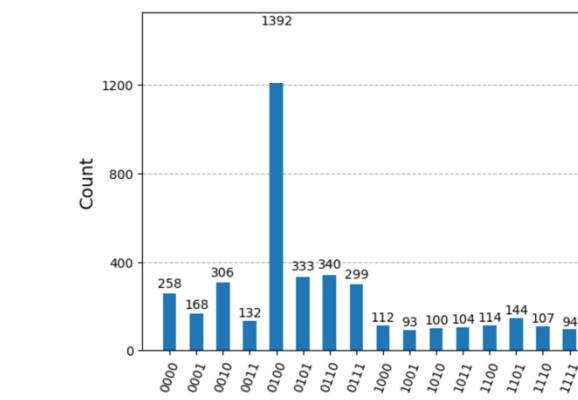


ランダムに
選択

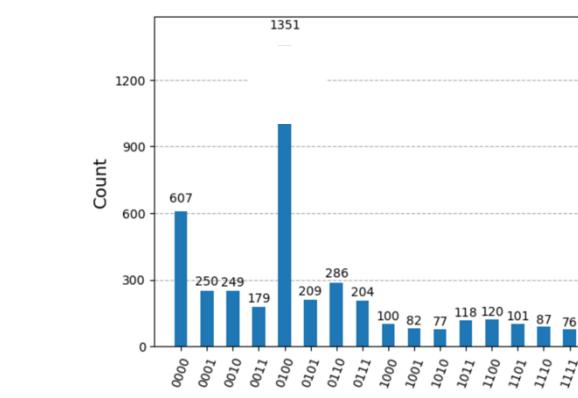
バッチにしているのは大きな問題の場合に、
スパコンなどで並列計算できるようにするために。



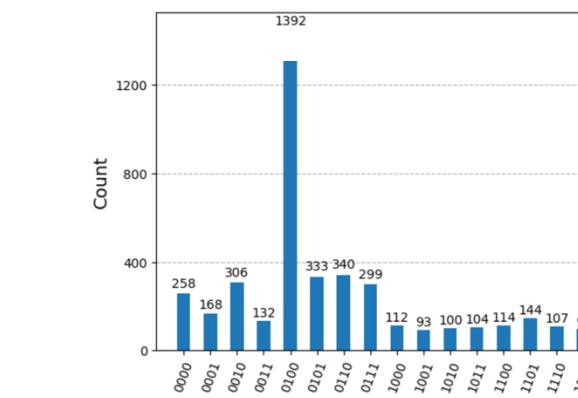
バッチ1: 50ショット分のビット列



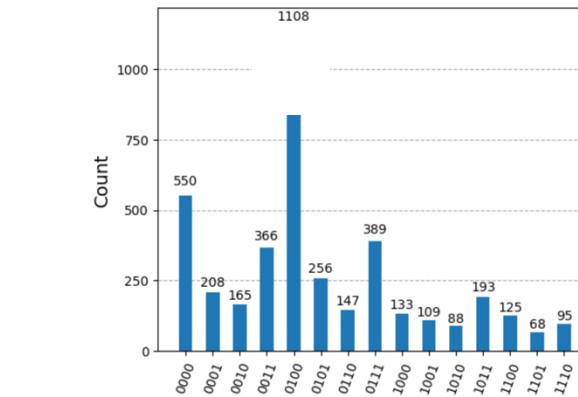
バッチ2: 50ショット分のビット列



バッチ3: 50ショット分のビット列



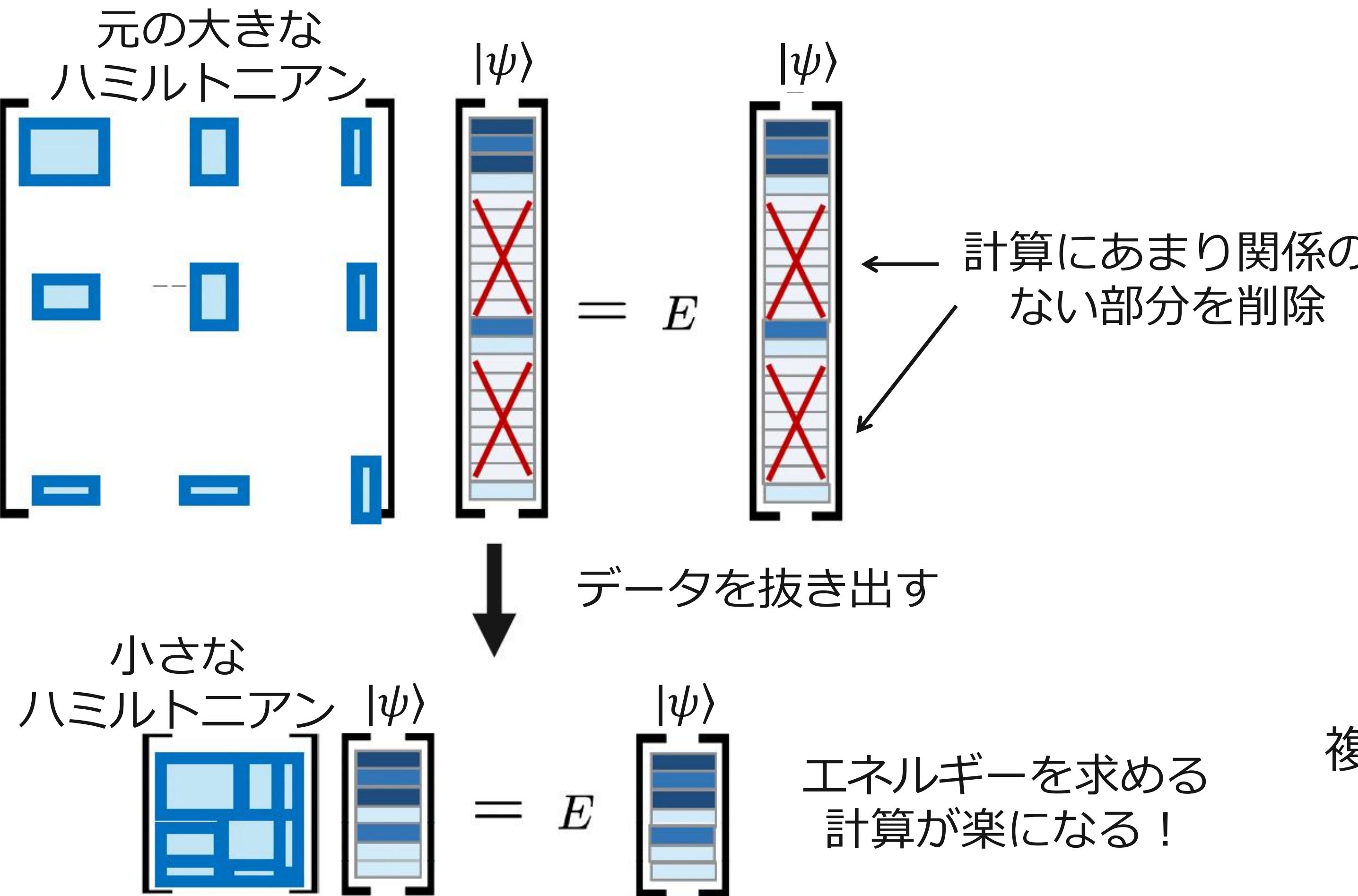
バッチ4: 50ショット分のビット列



バッチ5: 50ショット分のビット列

ハミルトニアンのサイズを小さくして、基底エネルギーを求める

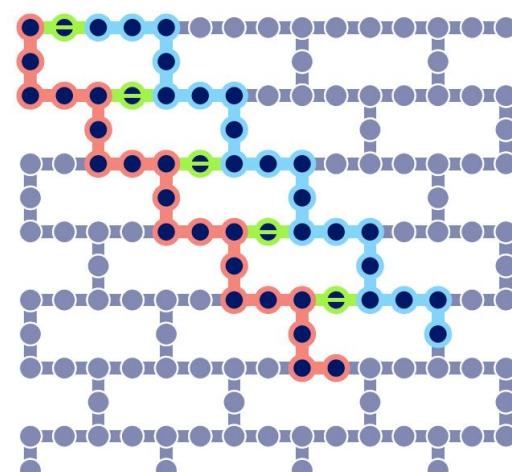
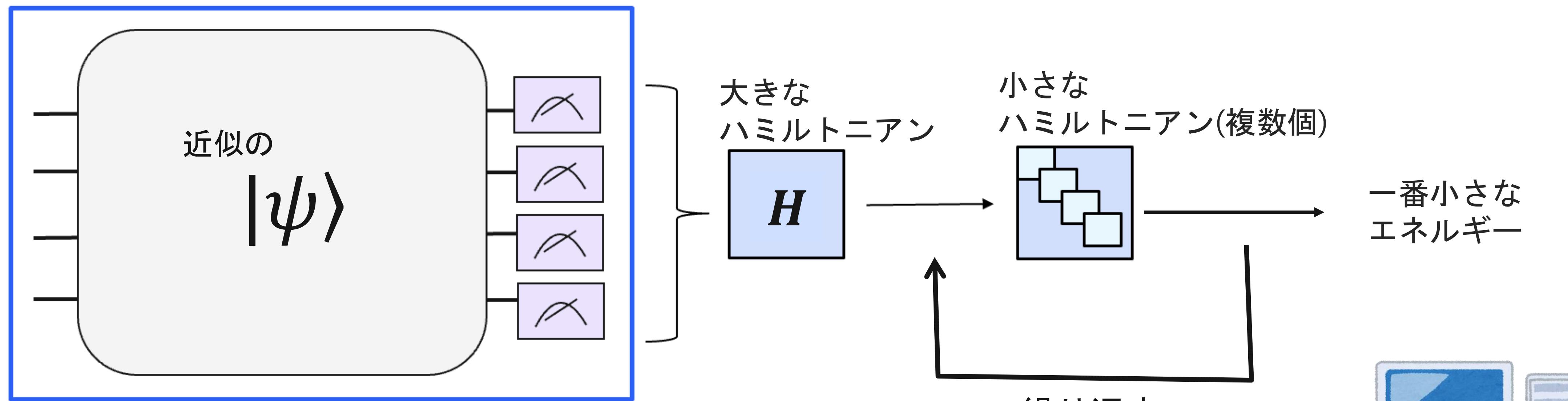
シュレディンガー方程式： $H |\psi\rangle = E |\psi\rangle$



複数回、サンプリングを行い、
最も小さいエネルギーが
基底エネルギー（近似解）

量子+古典のハイブリッドアルゴリズムで 分子の基底エネルギーを求める「サンプルベースの量子対角化」

目的：窒素分子のシュレディンガーアルゴリズムで解く



量子コンピューター

量子状態（アンサツ） $|\psi\rangle$ を近似的に作って、測定結果を得る。

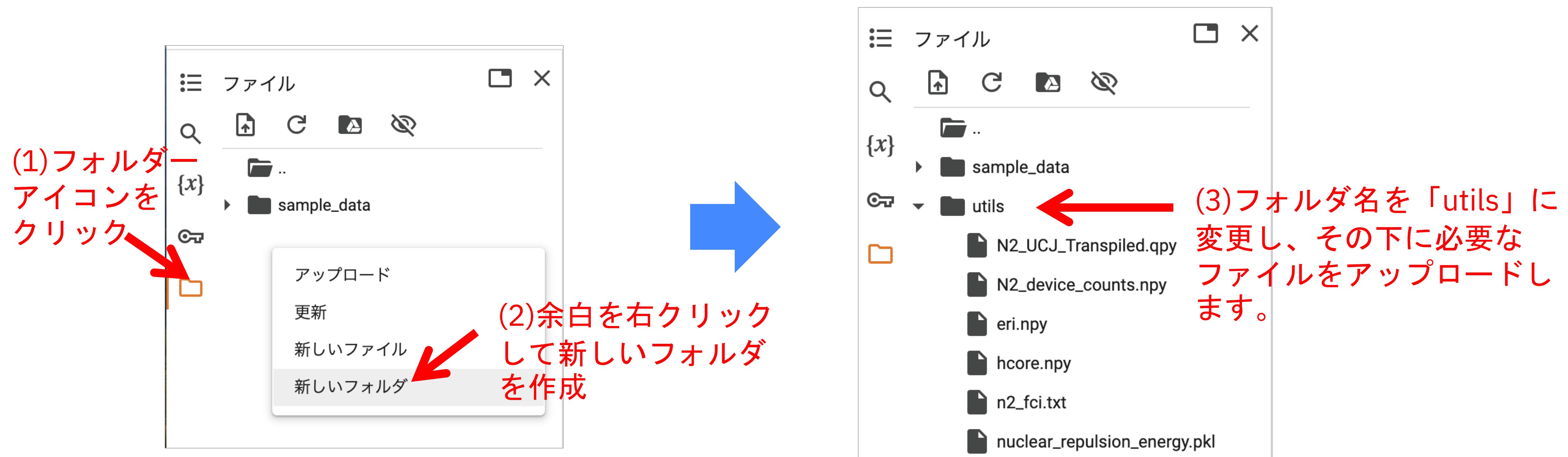
古典コンピューター：

1. 測定結果を化学のルールに従って修正。
2. 結果から部分的にサンプルしていくつか選択。
3. サンプルをもとにハミルトニアン H のサイズを小さくする。
4. 小さなハミルトニアンでエネルギーを求める(繰り返す)。

演習

20250930_8_chemi.ipynbとutilsフォルダーを使います。

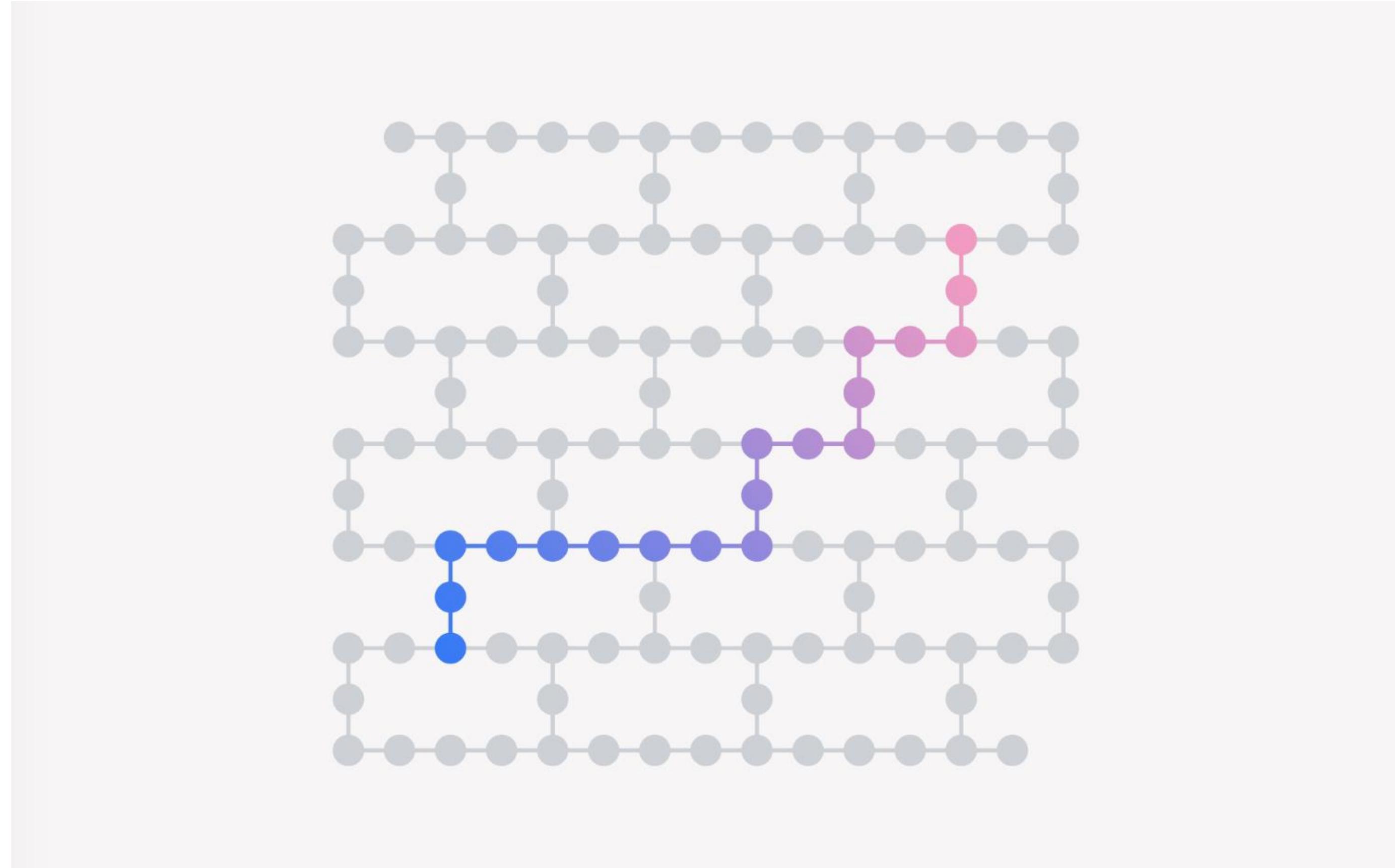
以下の手順で utilsフォルダーの中のファイルもアップロードしてください。



大きなGHZ状態を 作る

Sep 30, 2025

沼田祈史
Kifumi Numata
IBM Quantum



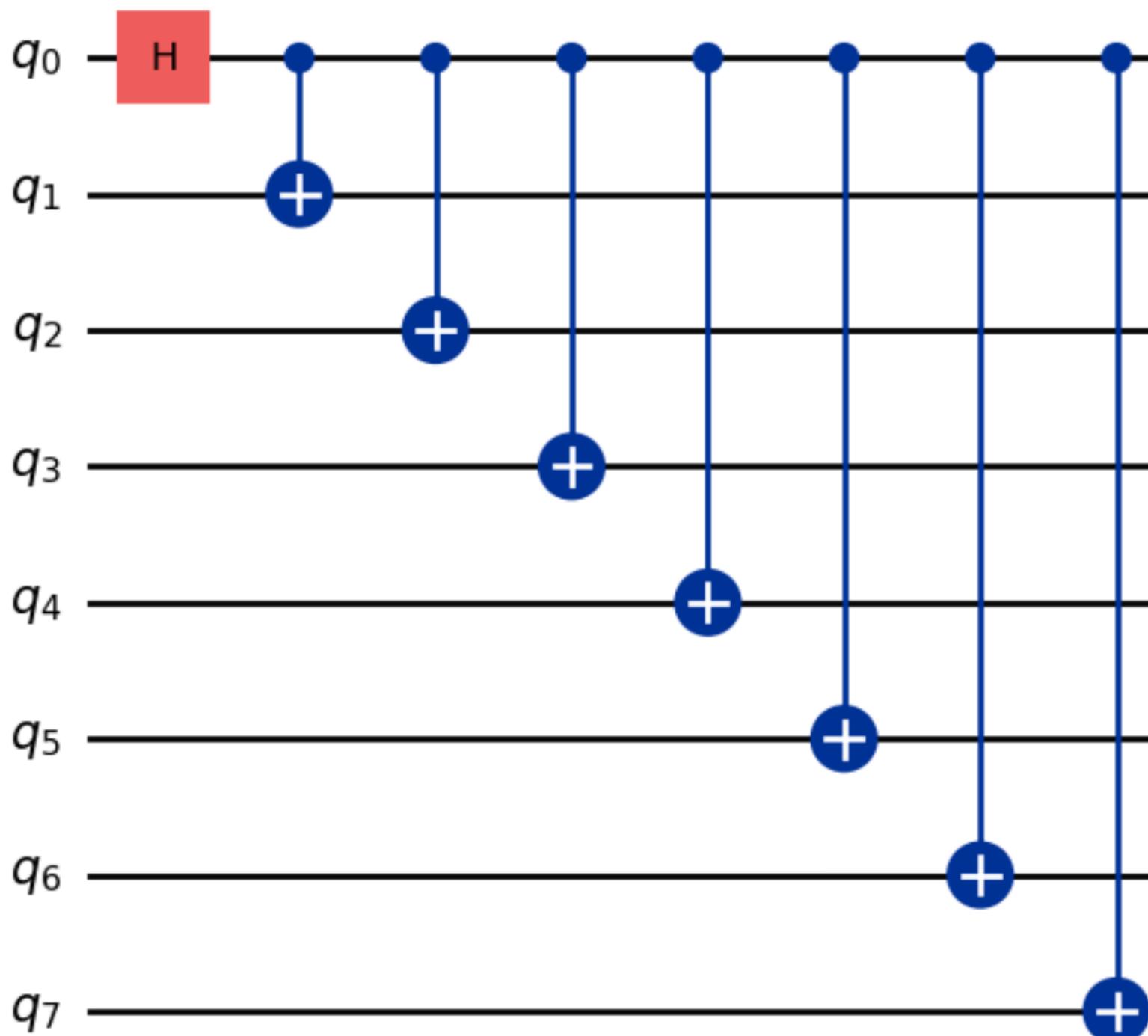
IBM Quantum

GHZ 状態

- GHZ (Greenberger-Horne-Zeilinger) 状態 :

$$|GHZ\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle^{\otimes n} + |1\rangle^{\otimes n}) \text{ for } n \text{ qubits}$$

- ベル状態の回路を拡張することで作ることができます。



GHZ状態の重要性

- ・複数の量子ビットのもつれ状態を作り出すことは、量子コンピューターの優位性を示す基本的な機能を作り出します。
- ・量子コンピューターの性能のベンチマークになります。
- ・アルゴリズムや手法のベンチマークとして使われる場合もあります。
 - ・例えば、エラー緩和手法など

GHZ状態を作る研究は活発に行われています

超伝導量子コン(IBM Heron)で75量子ビットGHZ
(Q-ctrl, 2024)

Achieving computational gains with quantum error correction primitives: Generation of long-range entanglement enhanced by error detection

Haoran Liao,^{*} Gavin S. Hartnett, Ashish Kakkar, Adrian Tan, Michael Hush, Pranav S. Mundada, Michael J. Biercuk, and Yuval Baum
Q-CTRL, Los Angeles, CA USA and Sydney, NSW Australia

The resource overhead required to achieve net computational benefits from quantum error correction (QEC) limits its utility while current systems remain constrained in size, despite exceptional progress in experimental demonstrations. In this paper, we demonstrate that the strategic application of QEC primitives without logical encoding can yield significant advantages on superconducting processors—relative to any alternative error-reduction strategy—while only requiring modest overhead. We first present a novel protocol for implementing long-range CNOT gates that relies on a unitarily-prepared Greenberger-Horne-Zeilinger (GHZ) state as well as a unitary disentangling step; the protocol natively introduces an error-detection process using the disentangled qubits as flags. We demonstrate that

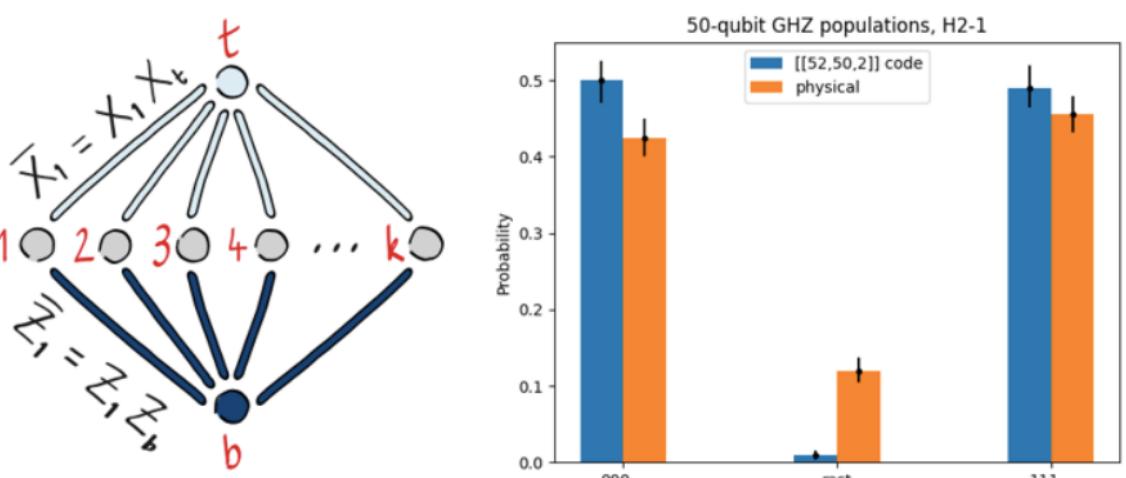
イオントラップ量子コンで50量子ビットGHZ (Quantinuum, 2024)

50 Logical Entangled Qubits, GHZ State > 98% Fidelity

Highly efficient quantum error detection code [[k+2,k,2]]

Logical GHZ state $98.0(9)\% \leq F \leq 99.0(6)\%$ (64% discard rate)

Physical GHZ state $79(2)\% \leq F \leq 88(2)\%$



Fidelity estimate measurement significantly increases circuit depth

SPAM penalty reduces fidelity to 75(1)% - still 50 entangled qubits!

中性原子量子コンピュータで24量子ビットGHZ
(Microsoft/Atom Computing, 2024)

Logical computation demonstrated with a neutral atom quantum processor

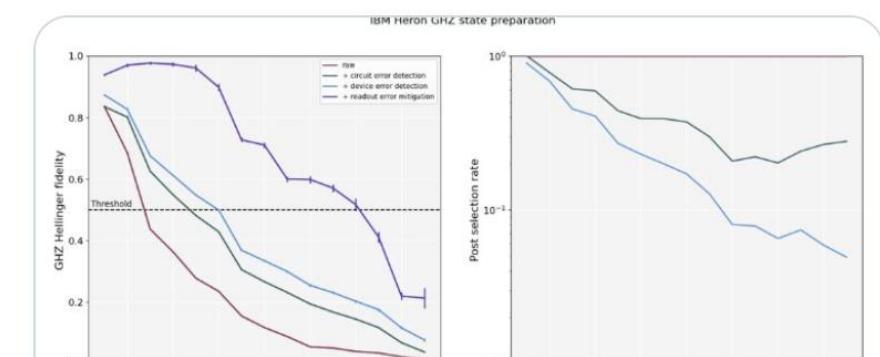
Ben W. Reichardt,^{1,3} Adam Paetznick,¹ David Aasen,¹ Ivan Basov,¹ Juan M. Bello-Rivas,¹ Parsa Bonderson,¹ Rui Chao,¹ Wim van Dam,¹ Matthew B. Hastings,¹ Andres Paz,¹ Marcus P. da Silva,¹ Aarthi Sundaram,¹ Krysta M. Svore,¹ Alexander Vaschillo,¹ Zhenghan Wang,¹ Matt Zanner,¹ William B. Cairncross,² Cheng-An Chen,² Daniel Crow,² Hyosub Kim,² Jonathan M. Kindem,² Jonathan King,² Michael McDonald,² Matthew A. Norcia,² Albert Ryoo,² Mark Stone,² Laura Wadleigh,² Katrina Barnes,² Peter Battaglino,² Thomas C. Bohdanowicz,² Graham Booth,² Andrew Brown,² Mark O. Brown,² Kayleigh Cassella,² Robin Coxe,² Jeffrey M. Epstein,² Max Feldkamp,² Christopher Griger,² Eli Halperin,² Andre Heinz,² Frederic Hummel,² Matthew Jaffe,² Antonia M. W. Jones,² Eliot Kapit,^{2,4} Krish Kotru,² Joseph Lauigan,² Ming Li,² Jan Marjanovic,² Eli Megidish,² Matthew Meredith,² Ryan Morshead,² Juan A. Muniz,² Sandeep Narayanaswami,² Ciro Nishiguchi,² Timothy Paule,²

超伝導量子コン(IBM Heron)で
120量子ビットGHZ (IBM, 2025)

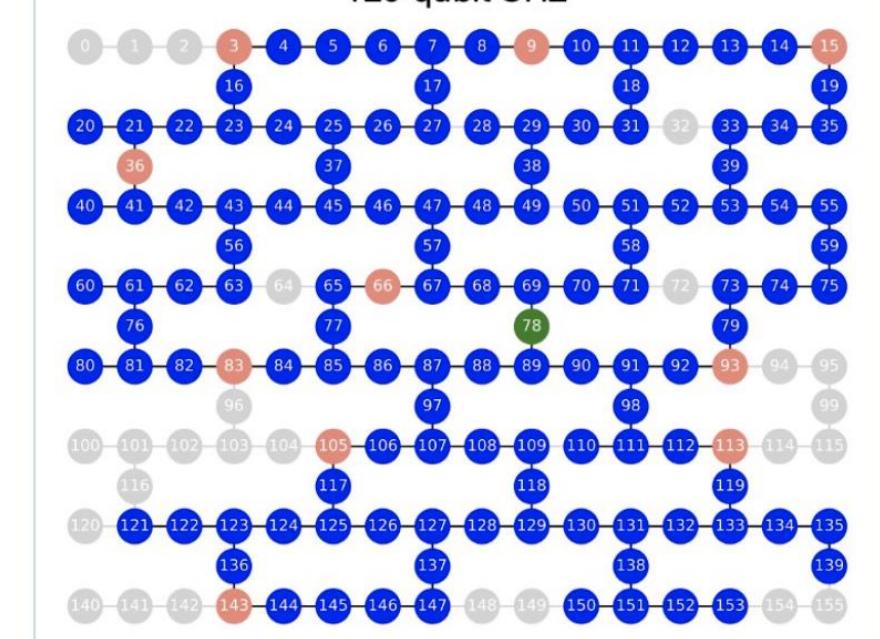


Jay Gambetta @jaygambetta · 3月4日

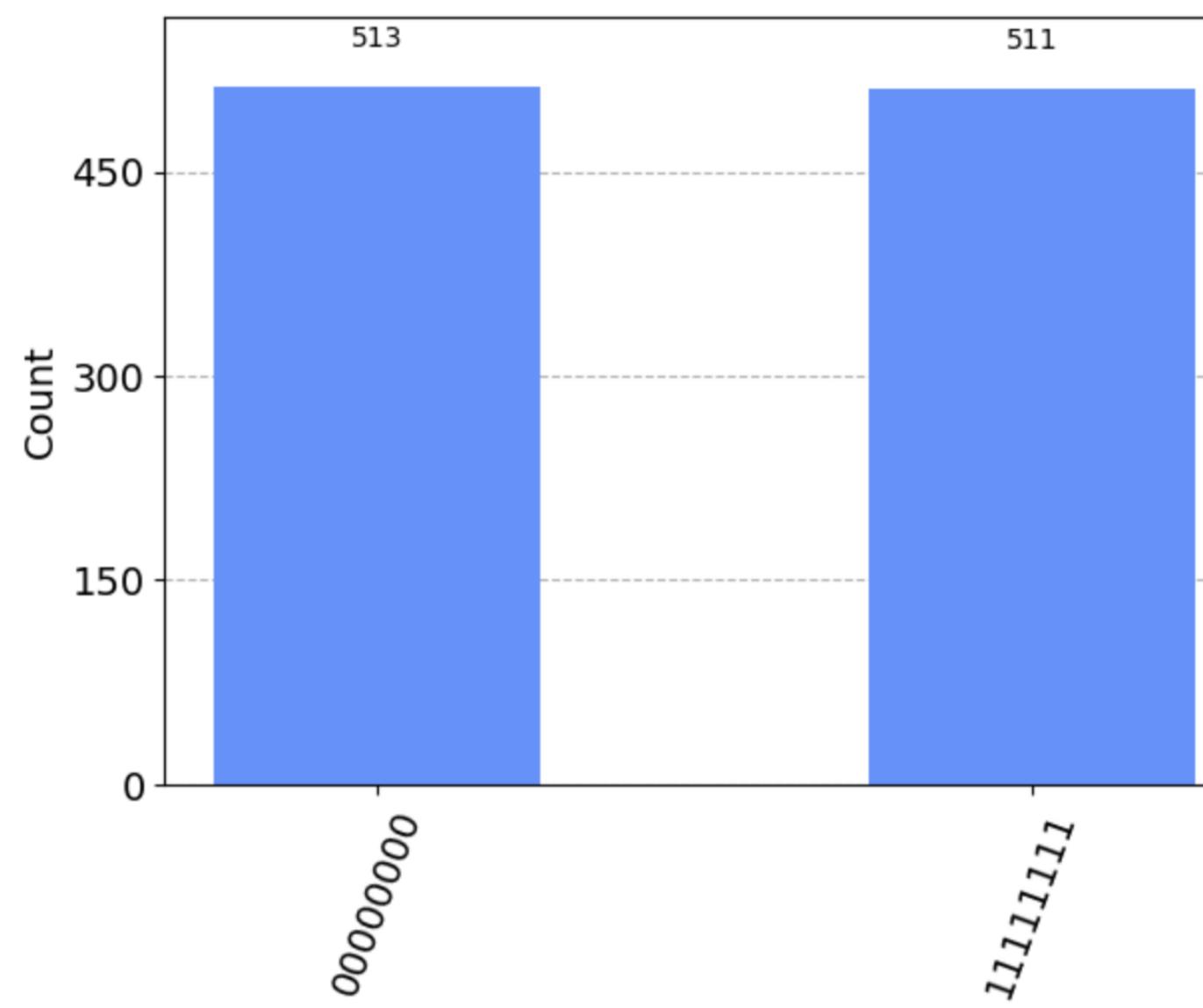
Preparing large GHZ states have long been a test of hardware capabilities. Using the IBM's Heron QPU the team recently showed that 120 logical qubits can be entangled in a GHZ state - a new world record. Work done by @AliJavadiAbhari and Simon Martiel.



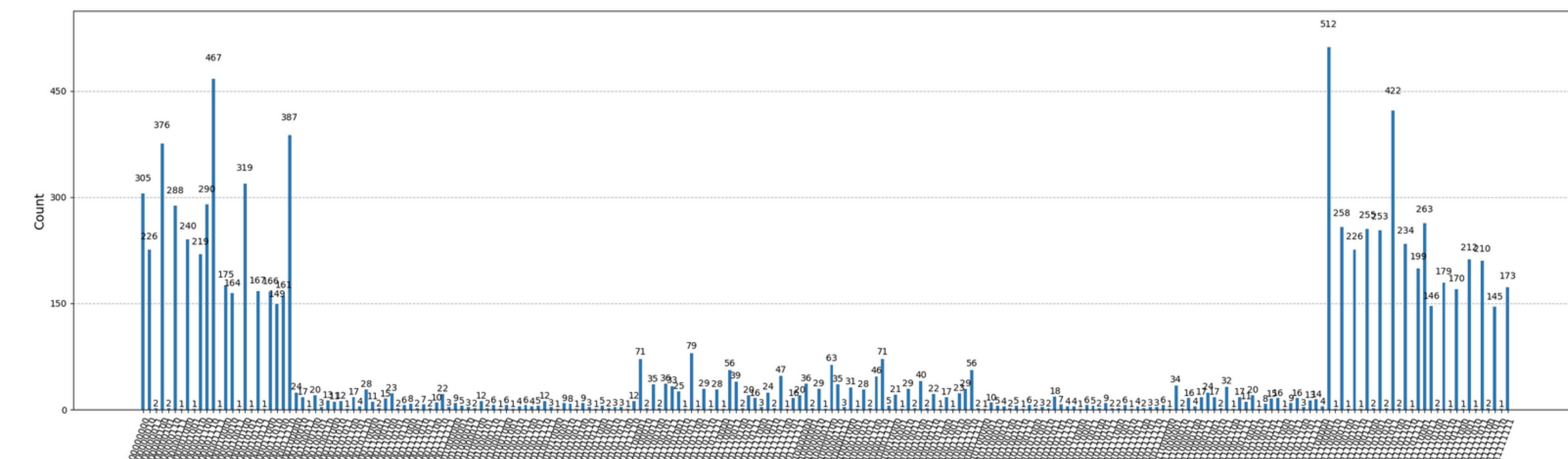
120-qubit GHZ



大きな量子ビット数のGHz状態を作るのは難しい



理想的なGHz状態



IBM Quantum の実機で実行したGHZ 回路の結果 (何も工夫をしなかった場合：1年前のEagle device)

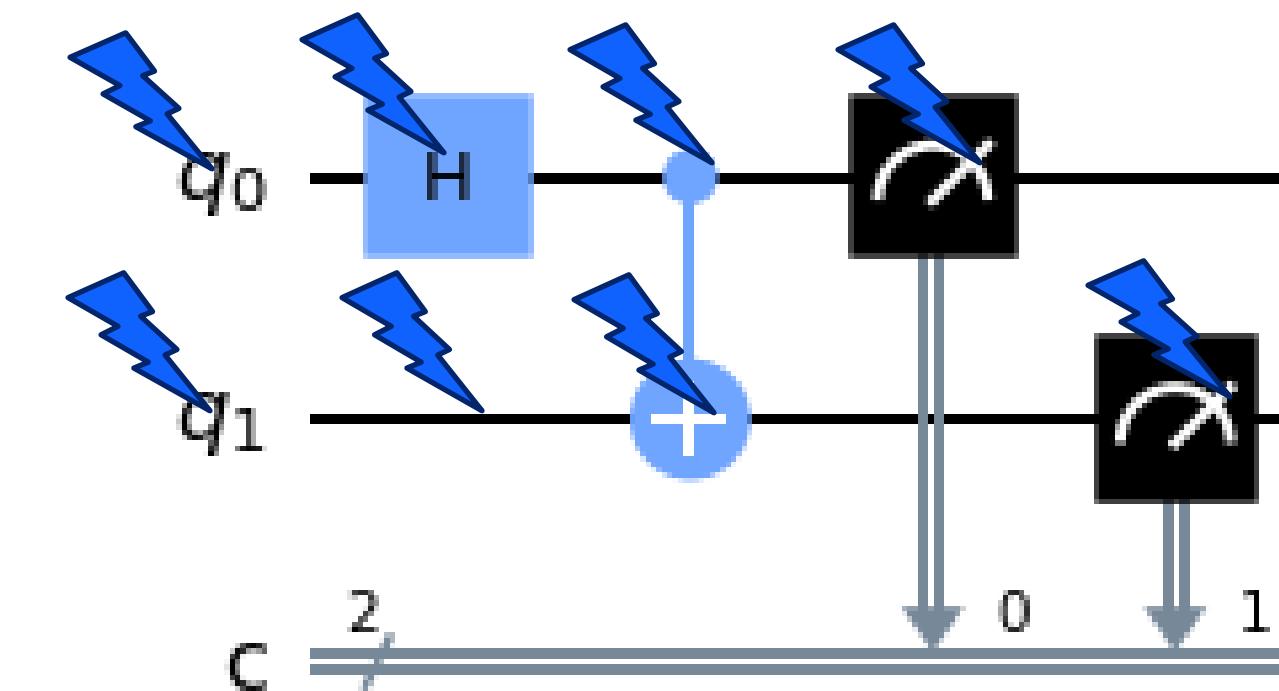
超伝導型量子コンピューターのデバイスの特性

1. デバイスのノイズの影響
2. デバイスの量子ビットの接続性による制限

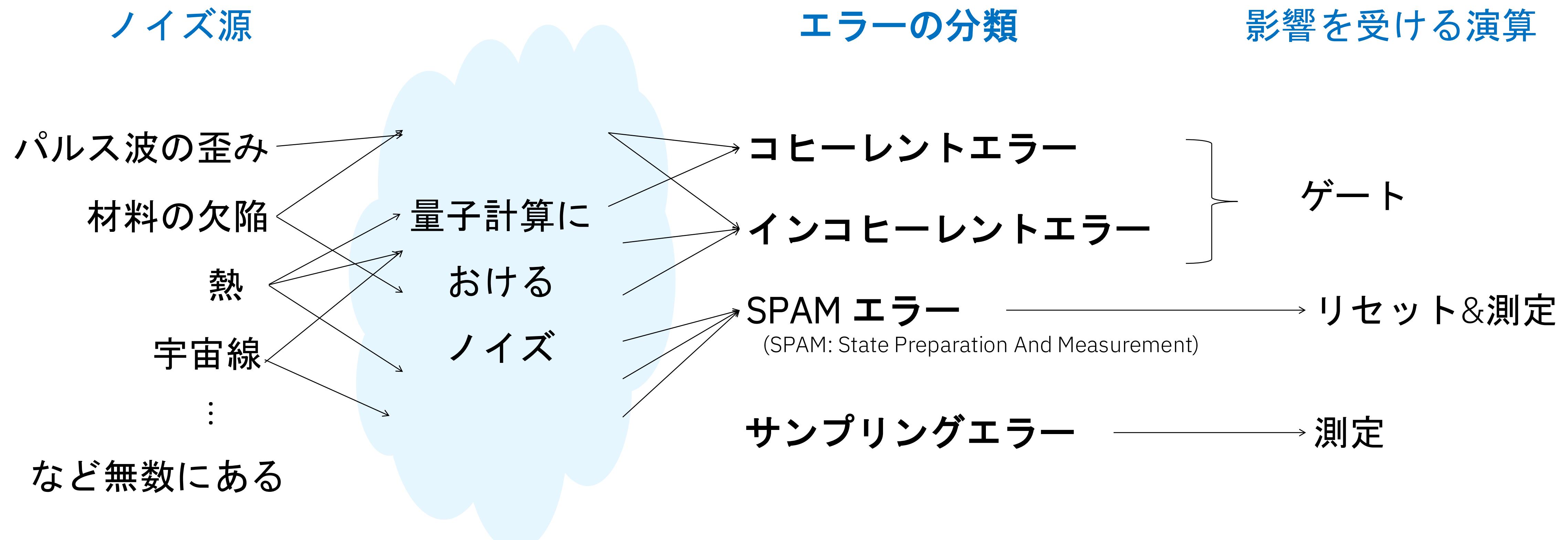
1. 超伝導量子デバイスのエラー

ノイズは計算中のあらゆるステップで現れます

- ・初期化時
- ・ゲート操作時(アイドル時にも)
- ・測定時



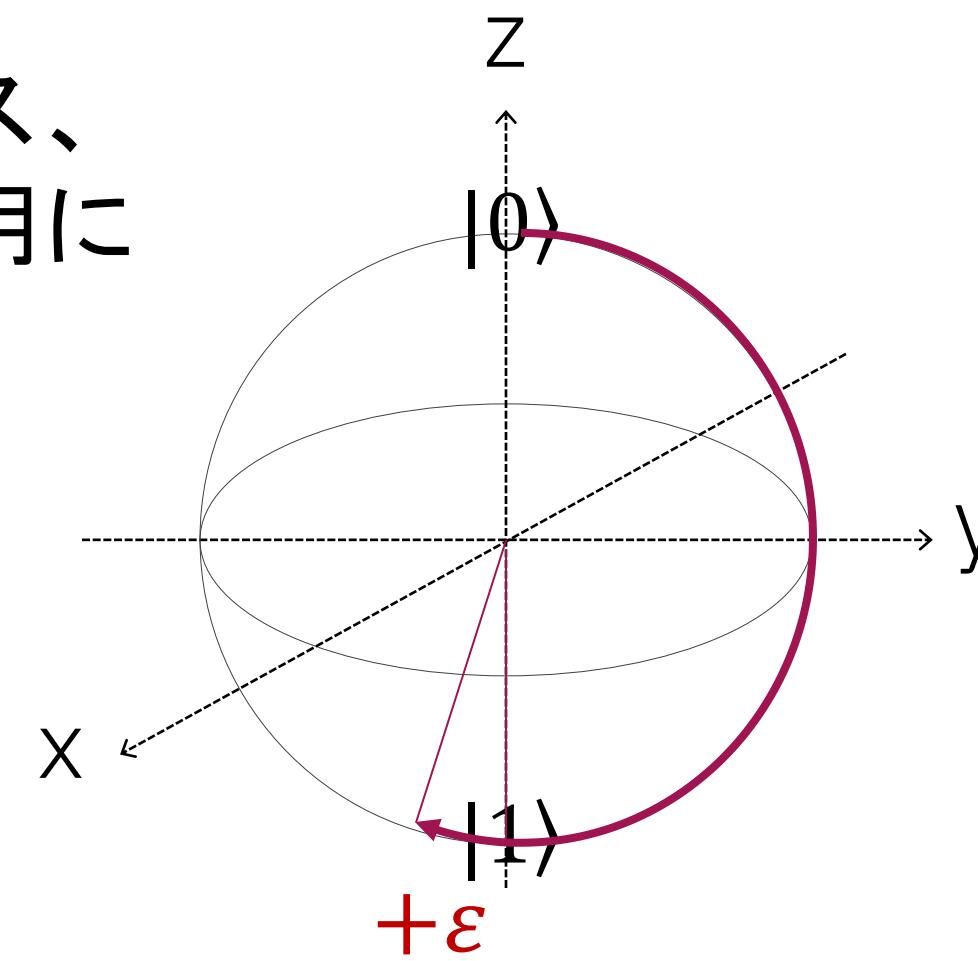
量子計算におけるノイズ



様々なエラー

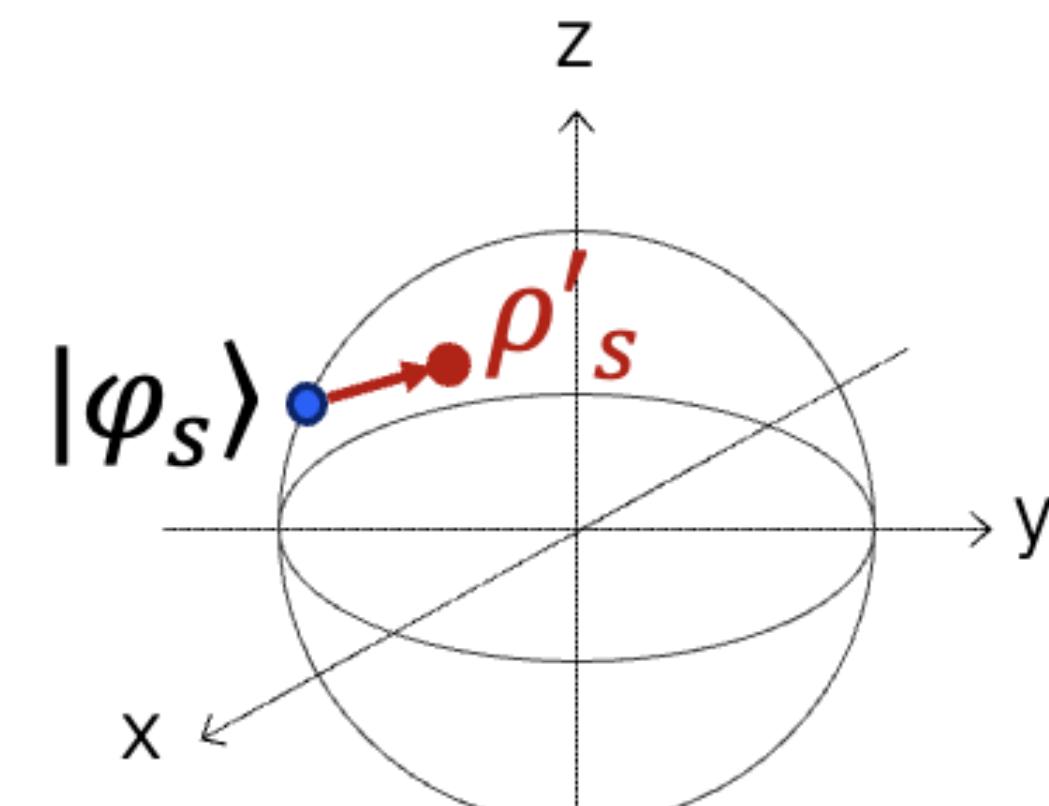
1. コヒーレントエラー

キャリブレーションミス、
量子ビット間の相互作用に
による



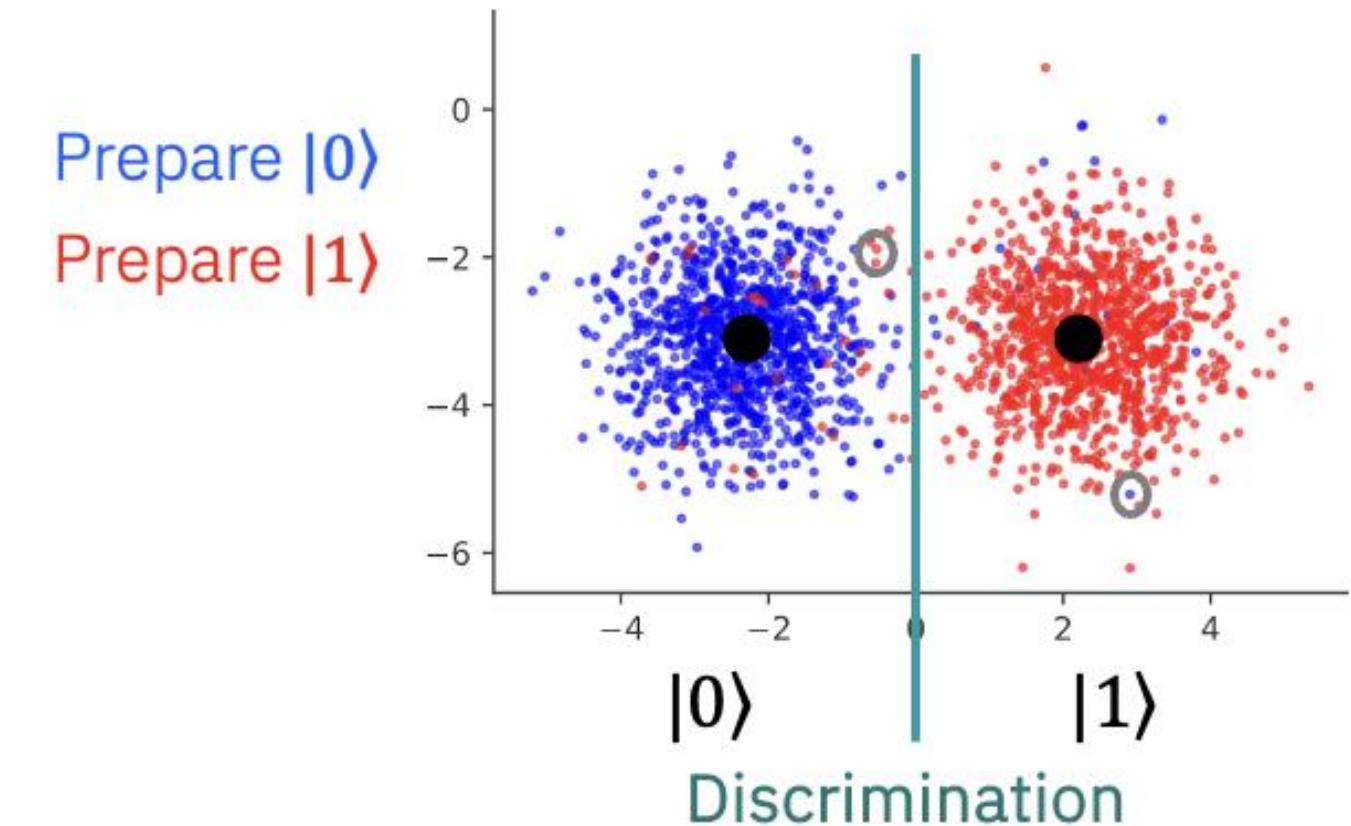
2. インコヒーレントエラー

環境とエンタングルするため



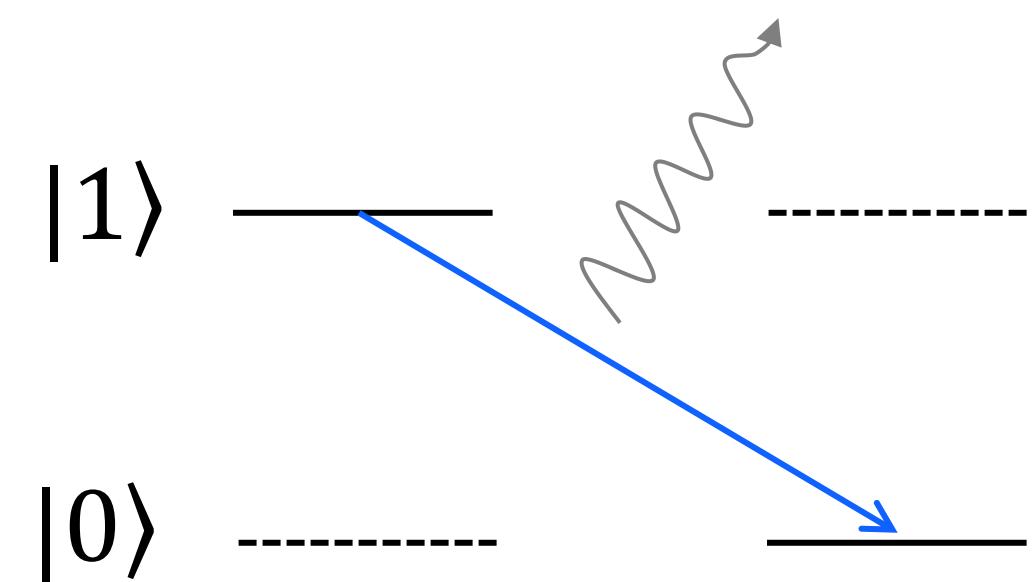
3. 測定エラー

分類のミス

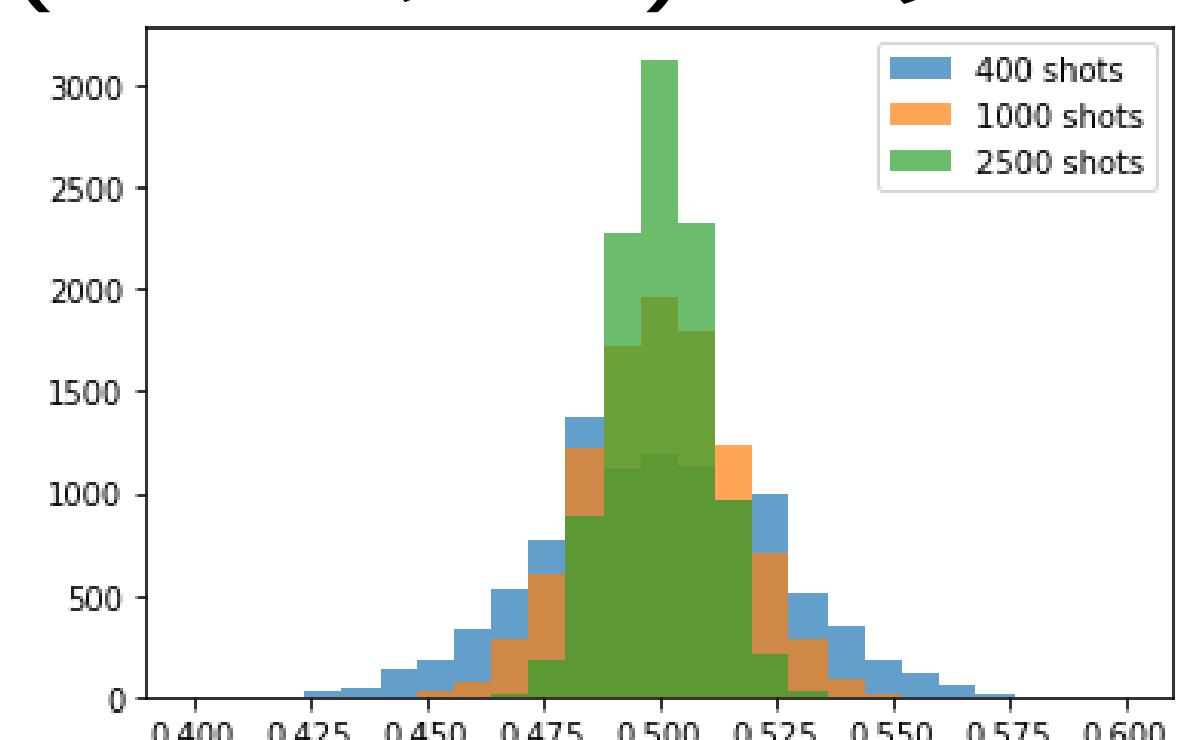


4. 初期化・リセットエラー

前回の測定状態が
残ってしまう



5. サンプリング(ショット)エラー



エラーの大きさは

測定エラー > 2量子ビットゲートエラー > 1量子ビットゲートエラー

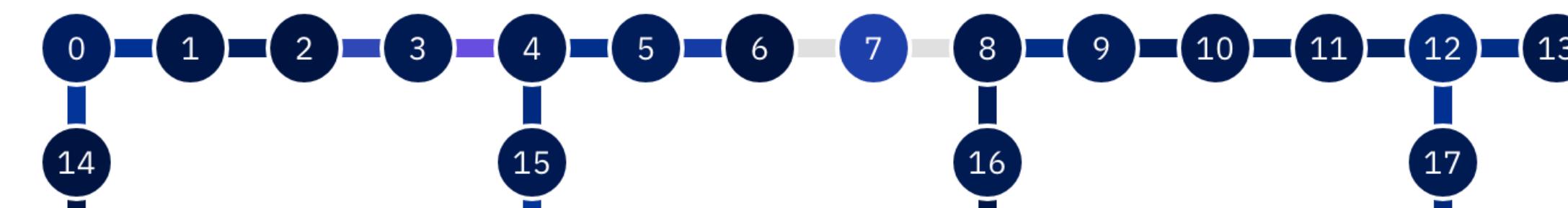
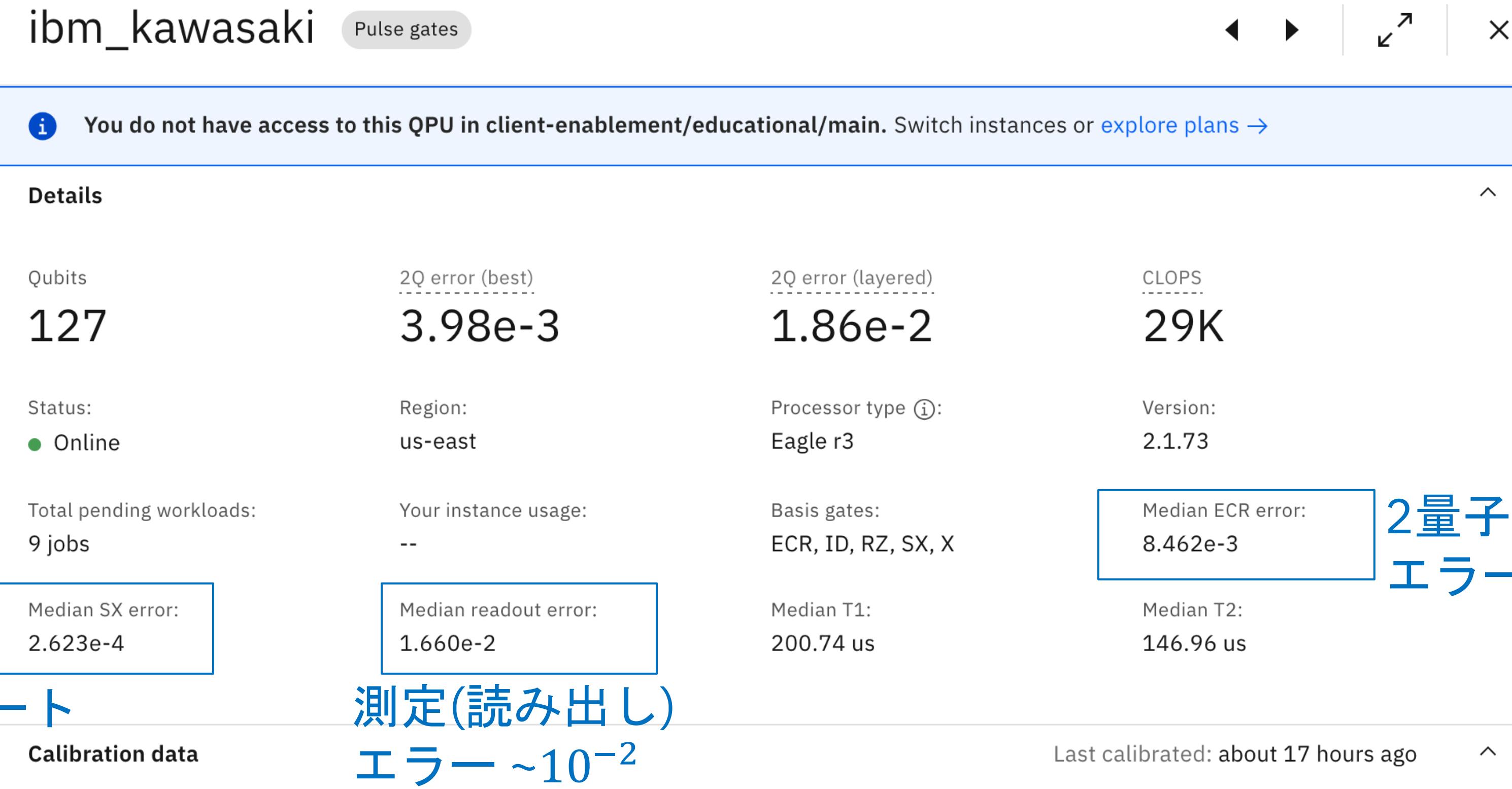
[IBM Quantum Platform](#)

→ Compute resources

→ ibm_kawasaki

で確認できます

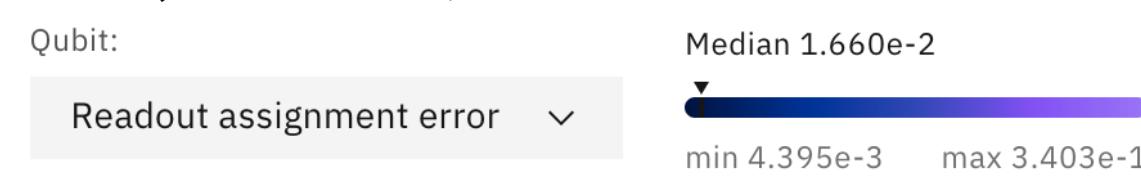
1量子ビットゲート
エラー $\sim 10^{-4}$



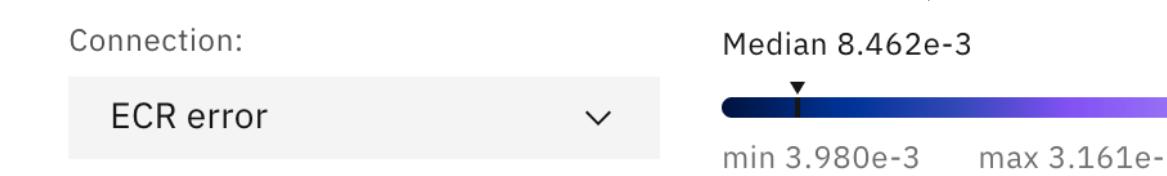
2量子ビットゲート
エラー $\sim 10^{-3}$

量子ビットや量子ゲートによってエラーが異なる

測定エラー



2量子ビットエラー



Calibration data

Last calibrated: about 17 hours ago

Map view Graph view Table view Expand graph view

Sort qubits:

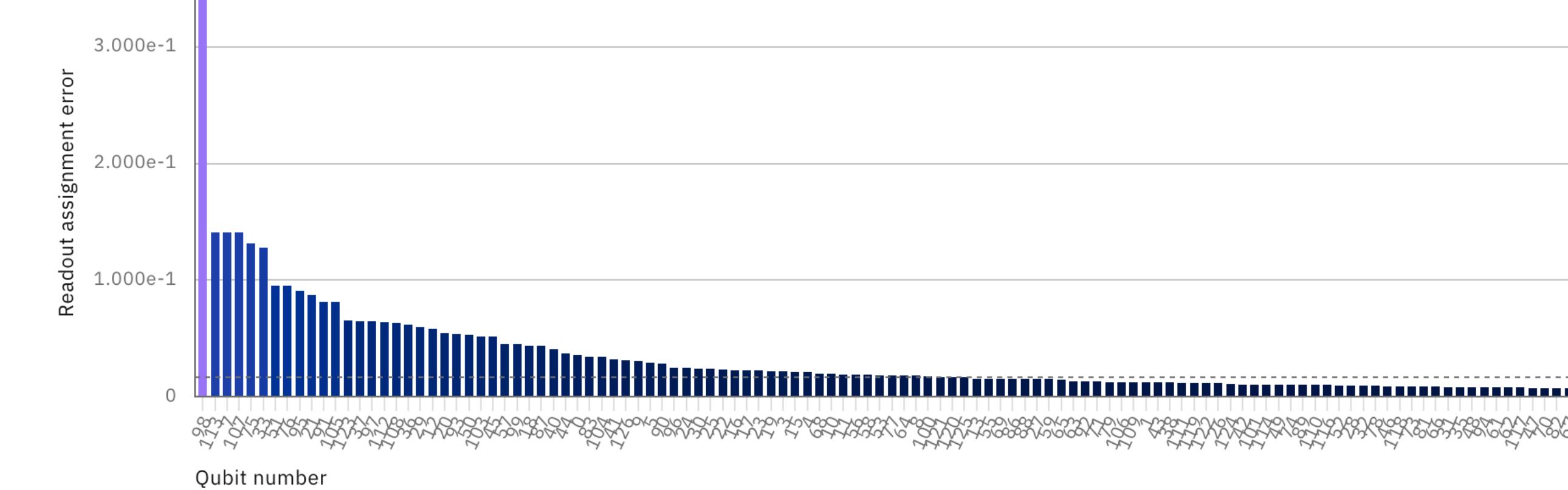
High to low

Graph output:

Readout assignment error

Median 1.660e-2

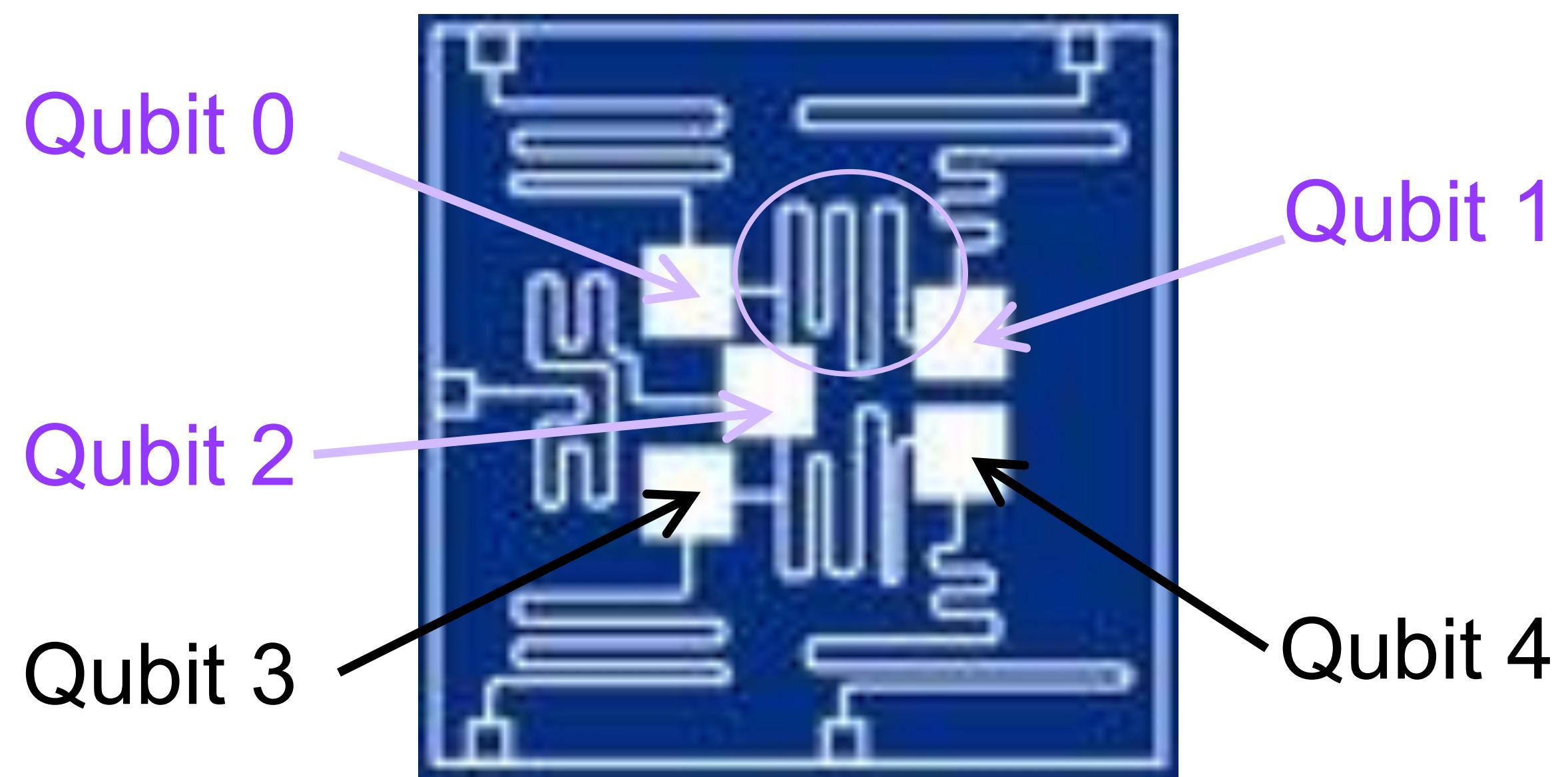
min 4.395e-3 max 3.403e-1



毎日、値が異なるので、
実行前に良い量子ビットや量子ゲート
を選んで計算に使う

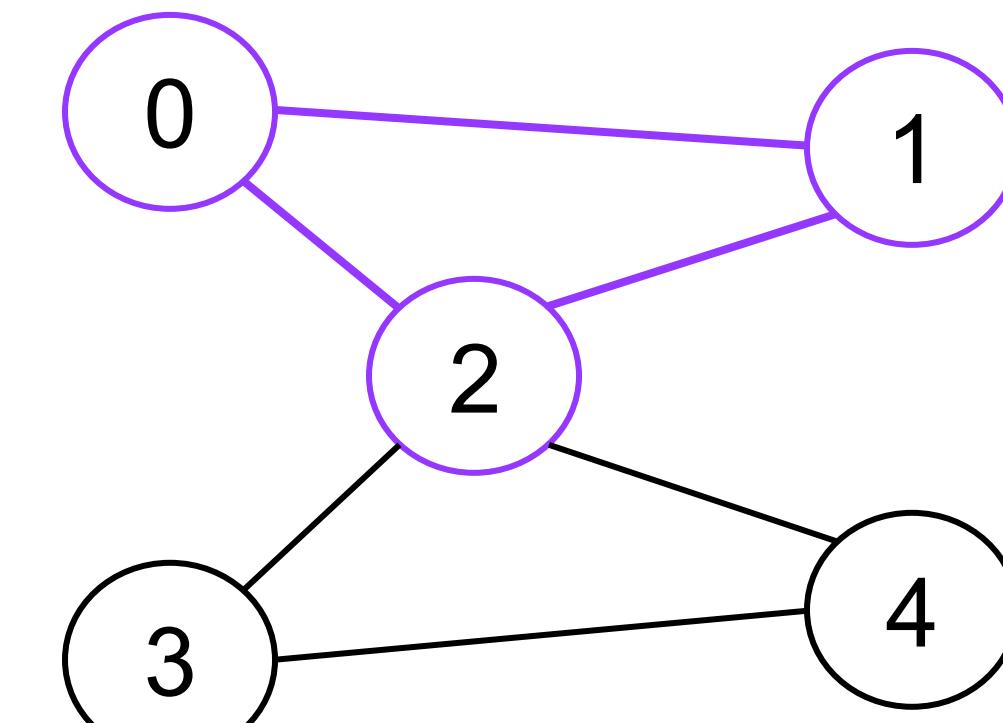
2. 量子ビットの結合制限 (最近傍制約)

2量子ビットゲートは「結合」された量子ビットにのみ実装可能



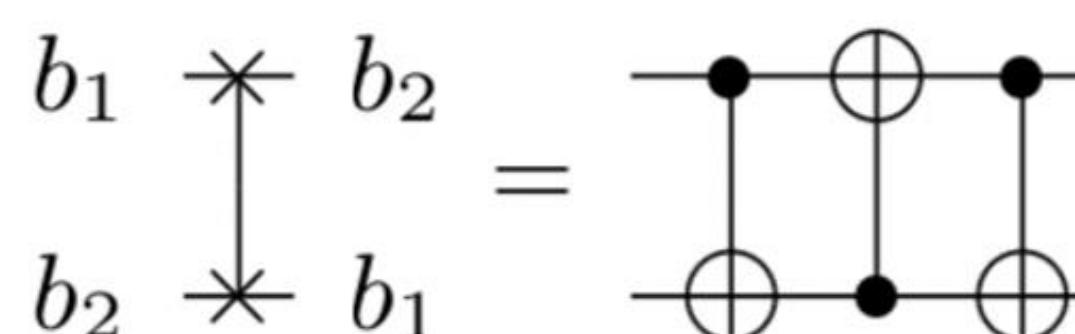
古いですが、IBM Q 5 Tenerife [ibmqx4]

結合グラフ



ノード ⇔ 量子ビット
エッジ ⇔ 接続

量子ビットが接続されていない所にはCNOTを適用できない。
→ SWAPゲートが必要



SWAPゲートはエラーの原因になる
→SWAPゲートの数は少ないほど良い

超伝導量子コンピューターで 大きな量子ビットのGHZ状態を作るために考慮すべきこと

1. 量子ビットのマッピングとルーティング
2. 回路の深さ
3. エラー緩和・エラー抑制手法

超伝導量子コンピューターで 大きな量子ビットのGHZ状態を作るために考慮すべきこと

1. 量子ビットのマッピングとルーティング

- ・ 回路の結合グラフは、デバイスの結合マップに完全に一致すべき。
- ・ 読み出しエラーの少ない量子ビットやエラーの少ないエンタングルゲートをピックアップすべき。
- ・ QiskitのTranspileに頼るか、自分でやる！

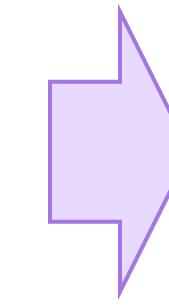
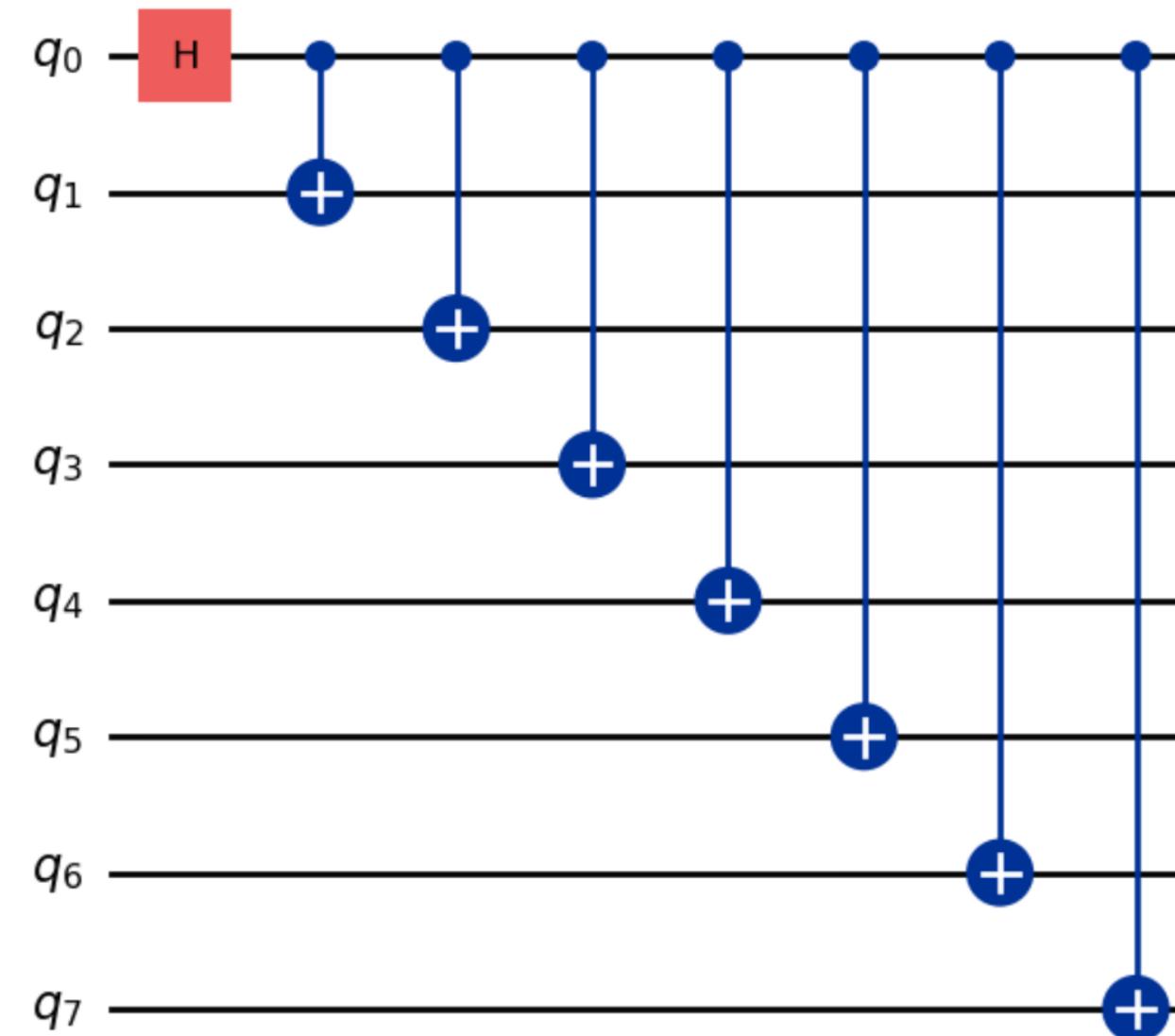
2. 回路の深さ

- ・ エンタングルゲートのツリー構造を追求すべき。

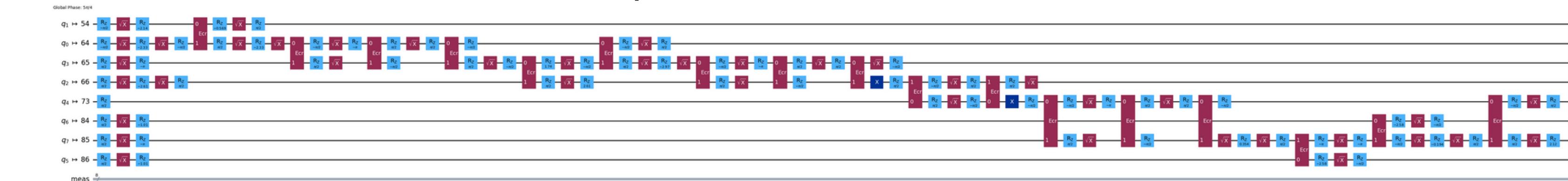
3. エラー緩和・エラー抑制手法

回路深さの探究

n 量子ビットのGHZ状態は、論理的には回路の深さが $\mathcal{O}(n)$ で作ることができますが、実際のIBM Quantumデバイスで実行できるようにトランスパイル(コンパイル)すると、大変長い回路になります。



実機でトランスパイル後
(optimization_level = 3)



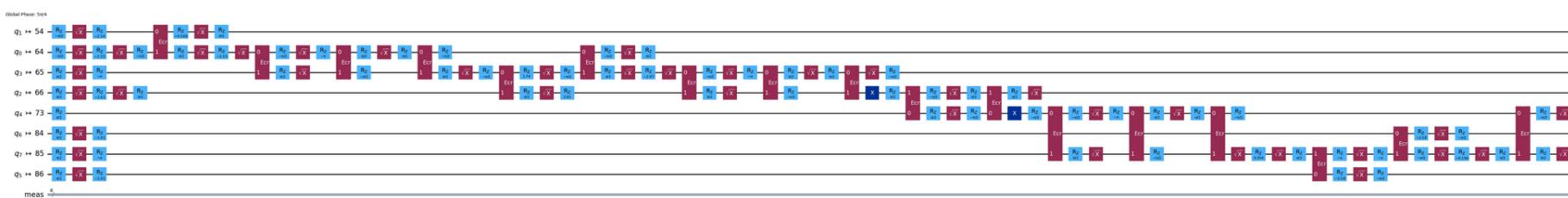
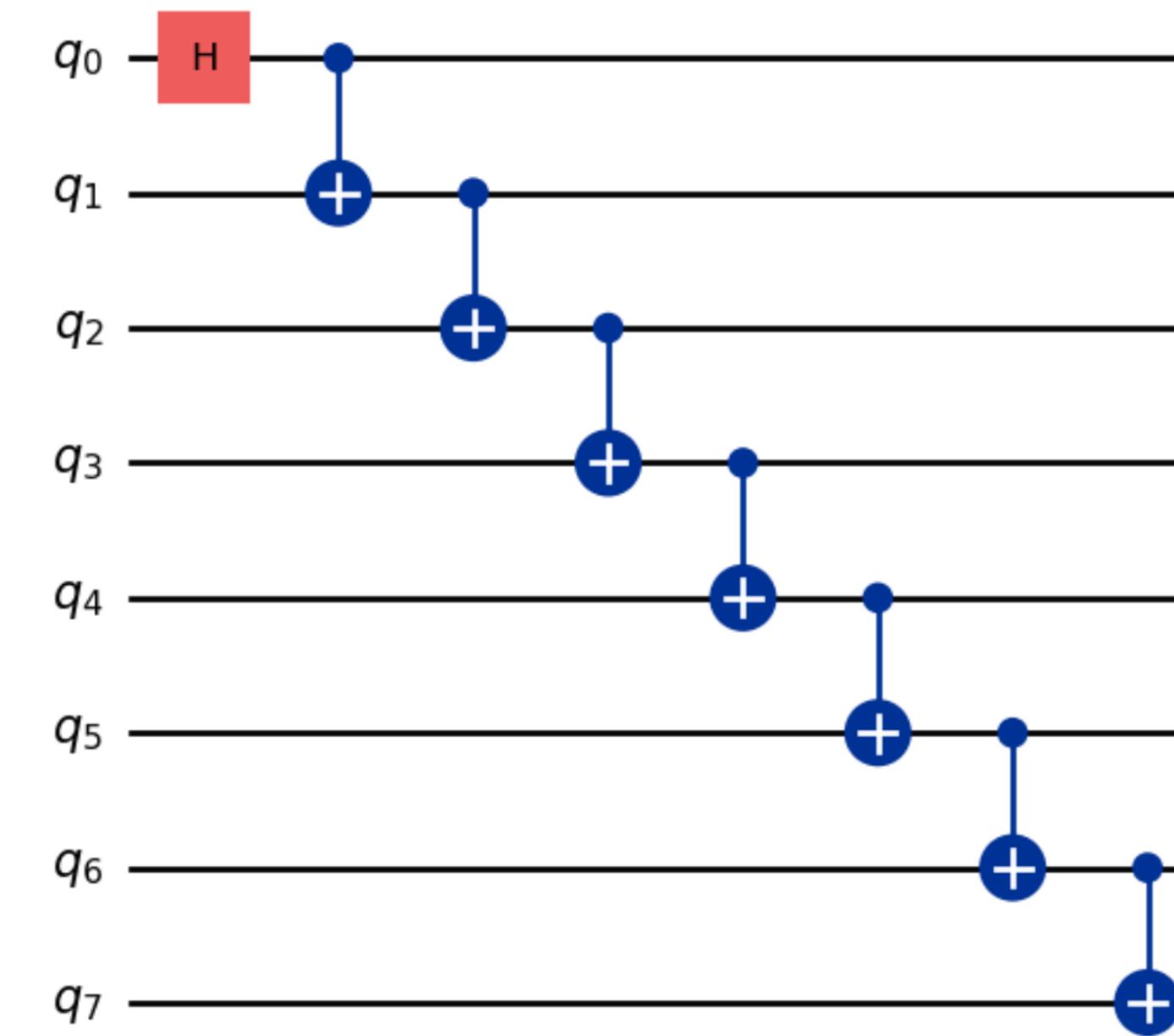
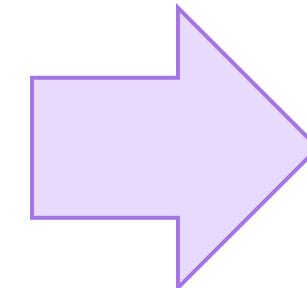
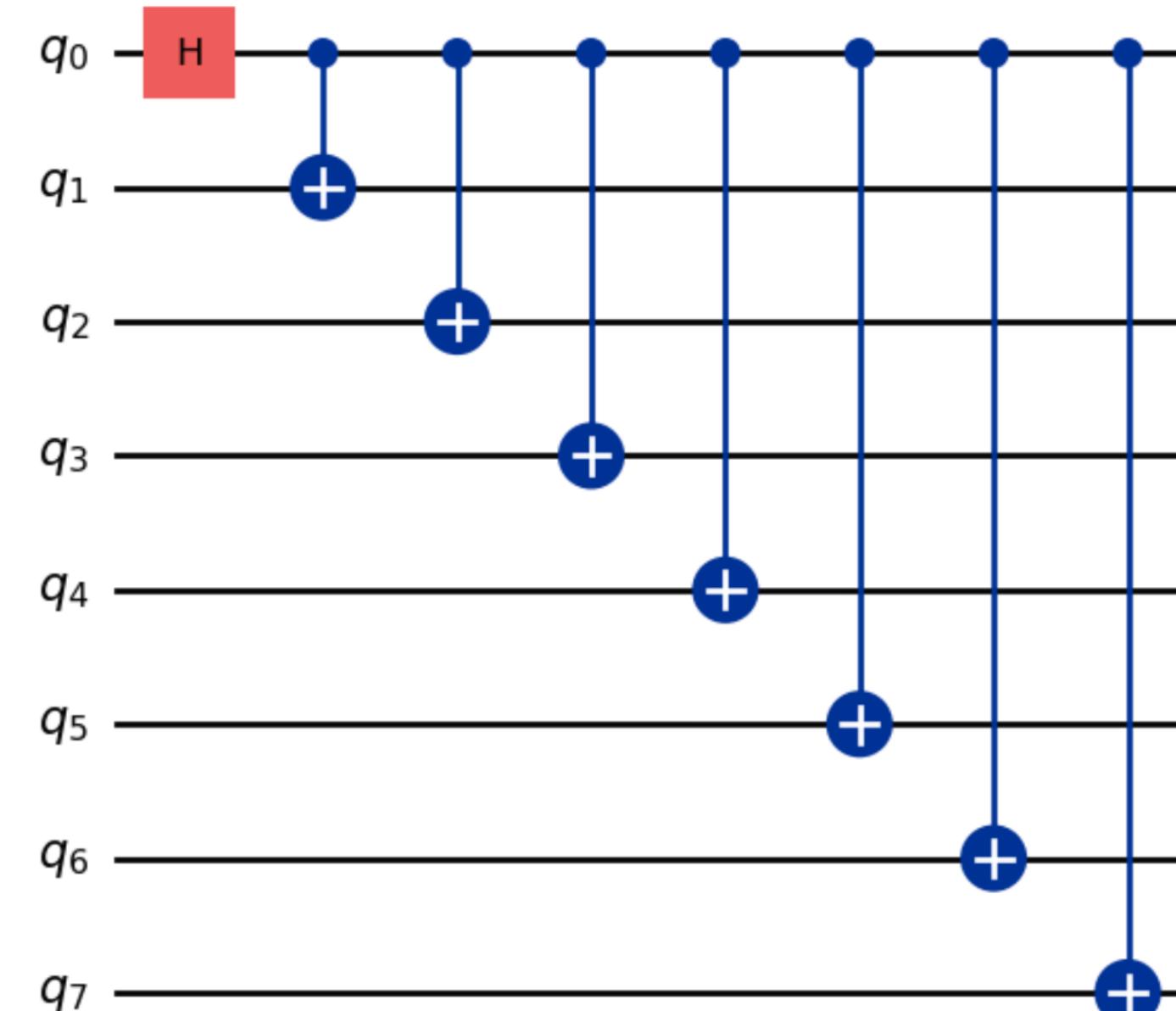
Depth: 8

Depth: 67 !!

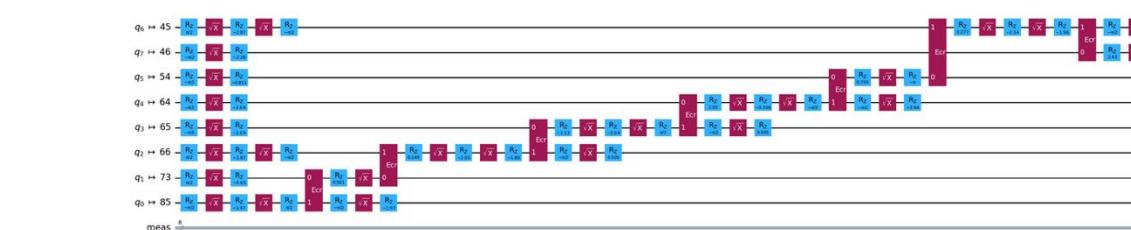
回路深さの探究

ヘビーヘックスのトポロジーでは、接続性を線形で表現した回路を書くのが望ましい。

Transpiled時にSWAPゲートを追加することなく互換性のある回路となる。



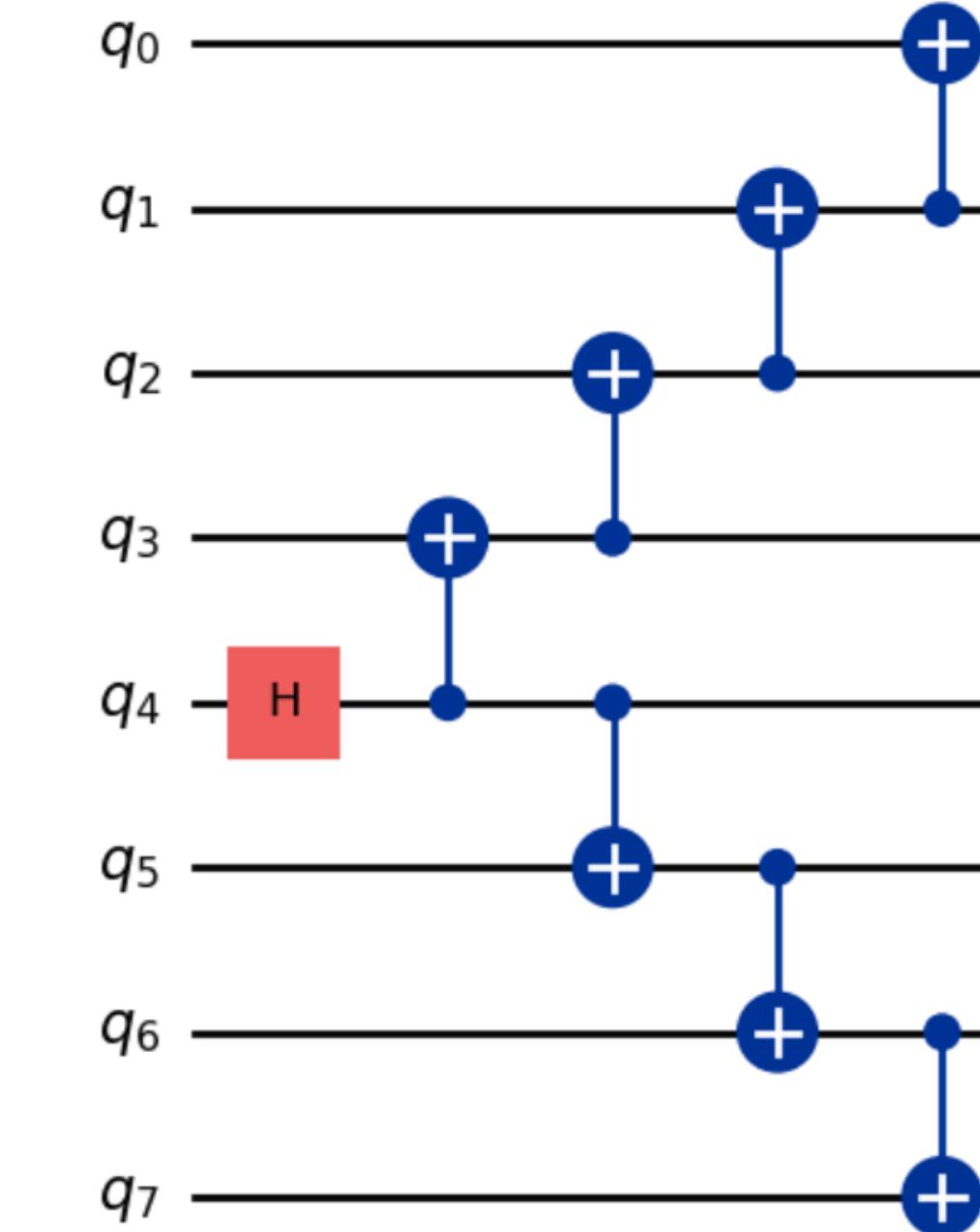
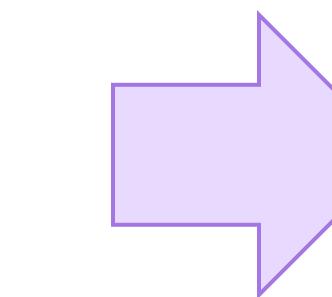
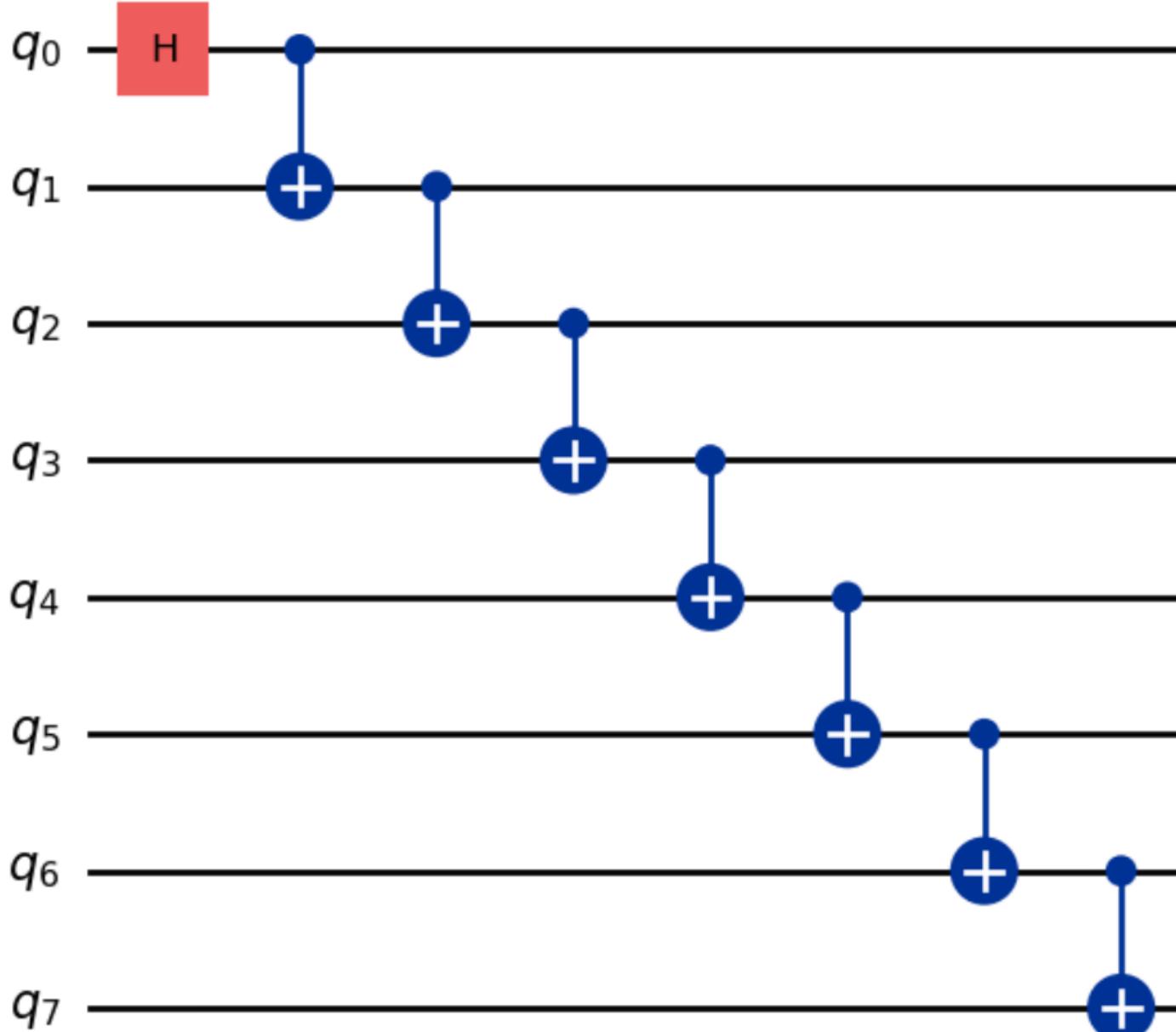
Depth: 67 (two-qubit depth 14)



Depth: 37 (two-qubit depth 7)

回路深さの探究

はじめの量子ビットを適切に選択することで、回路の深さを減らすことができる。



Quantum circuit diagram showing a sequence of operations on qubits q_6 through q_0 . The circuit includes initial state preparation, controlled operations involving Ecr gates, and final measurement. Each qubit path consists of a sequence of rotation gates (R_y , R_x , R_z) and phase gates (\sqrt{X} , \sqrt{Y} , \sqrt{Z}). The circuit starts with $q_6 \mapsto 45$, followed by a sequence of controlled operations involving Ecr gates, and ends with $q_0 \mapsto 85$ and a measurement.

Depth: 41 (two-qubit depth 7)

Quantum circuit diagram showing operations on qubits q_0 through q_5 . The circuit includes various rotation gates (R_z) and controlled operations involving Ecr gates.

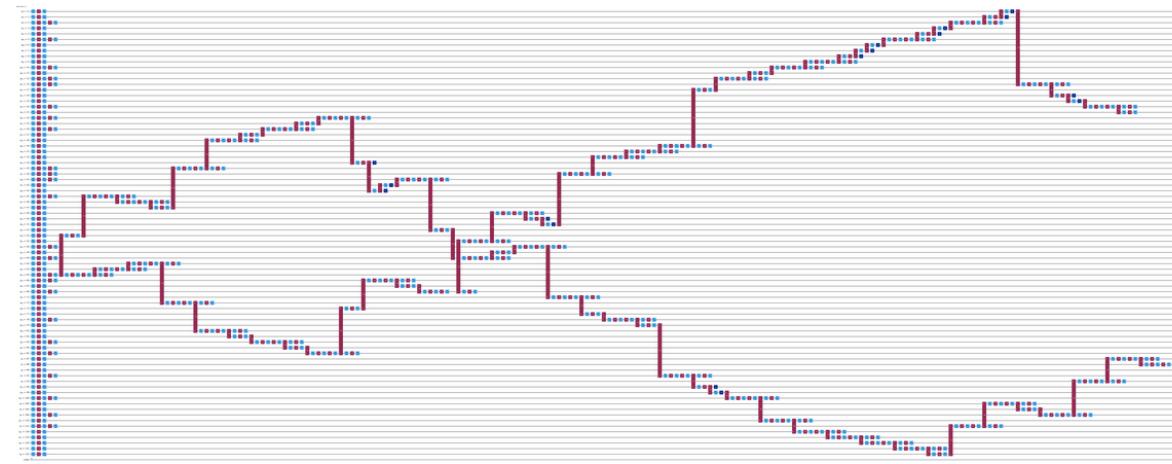
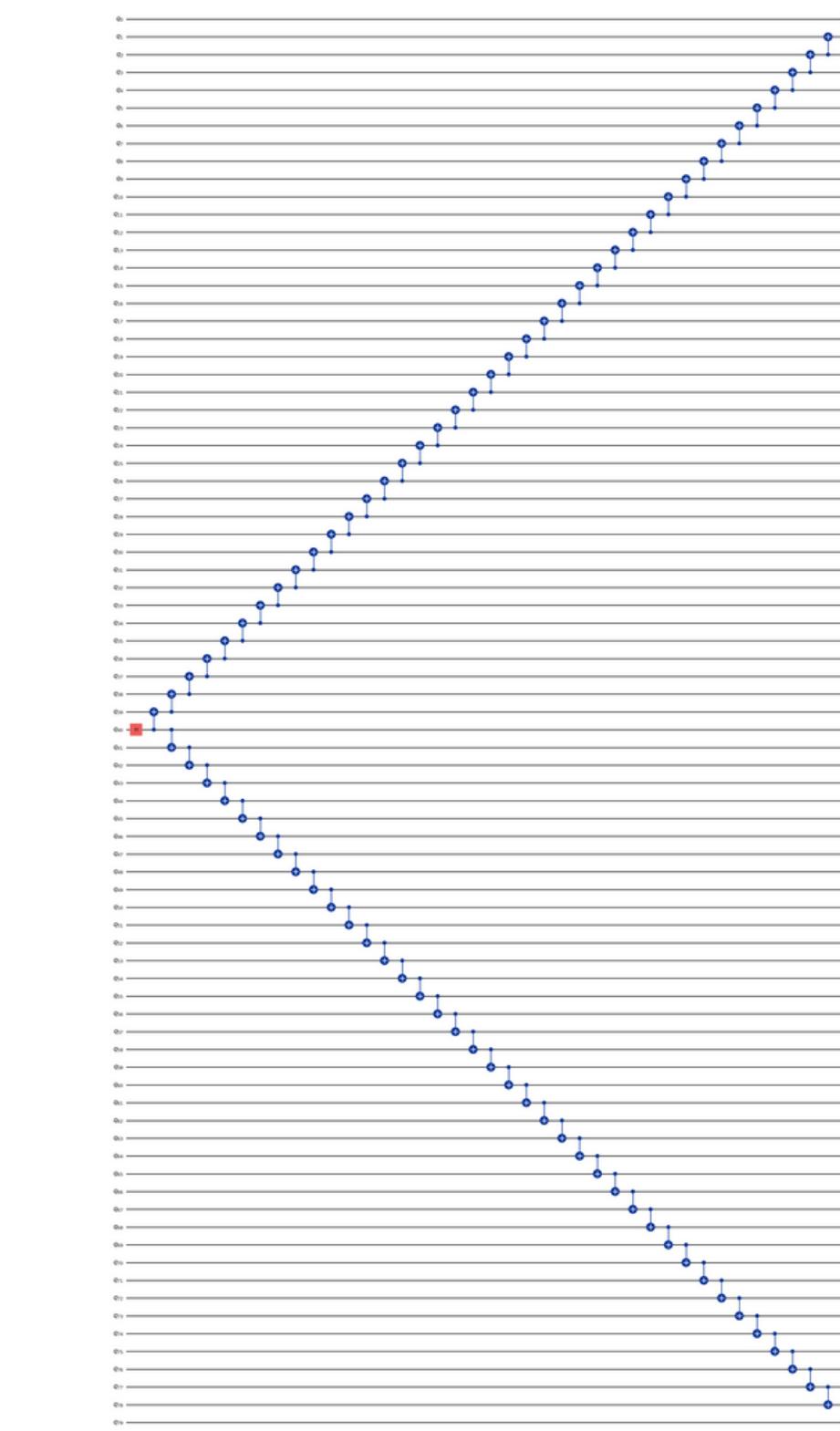
- $q_0 \mapsto 63$: R_z_{-m2} , \sqrt{X} , $R_z_{-2.21}$
- $q_1 \mapsto 64$: R_z_{-m2} , \sqrt{X} , $R_z_{-2.63}$
- $q_2 \mapsto 65$: R_z_{-m2} , \sqrt{X} , $R_z_{-2.63}$
- $q_3 \mapsto 66$: R_z_{-n2} , \sqrt{X} , $R_z_{-1.81}$, R_z_{-n2} , 1 , Ecr , $R_z_{-6.93}$, \sqrt{X} , $R_z_{-1.63}$, \sqrt{X} , $R_z_{-2.93}$, 1 , R_z_{-n2} , \sqrt{X} , $R_z_{-0.035}$
- $q_4 \mapsto 73$: R_z_{-n2} , \sqrt{X} , $R_z_{-0.685}$, 0 , $R_z_{-2.26}$, 0
- $q_7 \mapsto 83$: R_z_{-n} , \sqrt{X} , R_z_{-n}
- $q_6 \mapsto 84$: R_z_{-n2} , \sqrt{X} , $R_z_{-0.811}$
- $q_5 \mapsto 85$: R_z_{-n2} , \sqrt{X} , $R_z_{-2.87}$, \sqrt{X} , R_z_{-n2} , 1 , $R_z_{-3.06}$, \sqrt{X} , $R_z_{-1.29}$, \sqrt{X} , $R_z_{-1.86}$, 1 , Ecr , $R_z_{-2.39}$, \sqrt{X} , R_z_{-n2} , \sqrt{X} , $R_z_{-2.84}$
- $q_0 \mapsto 0$: Ecr , R_z_{-n2} , \sqrt{X}
- $q_1 \mapsto 1$: Ecr , R_z_{-n2} , \sqrt{X}

Depth: 26 (two-qubit depth 4)

回路深さの探究

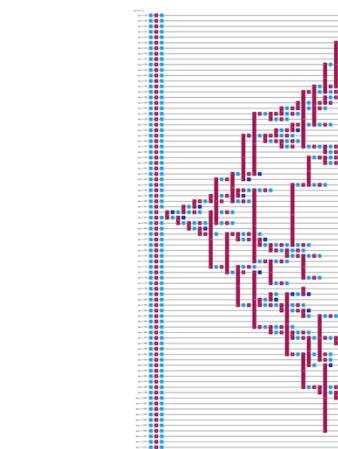
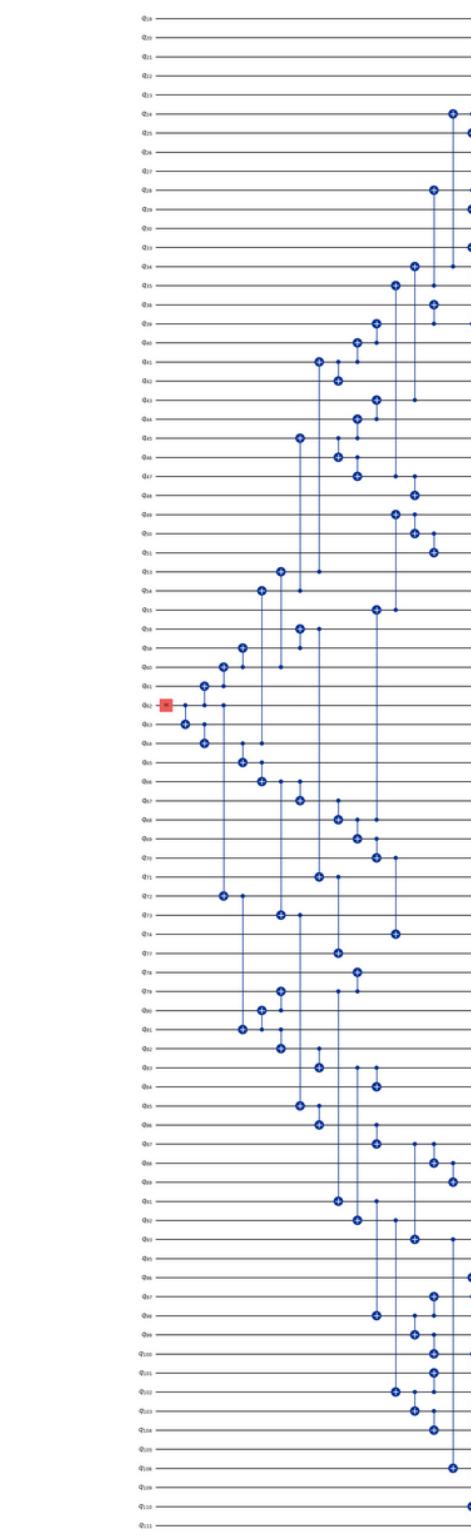
80量子ビットのGHZ回路

線形の回路

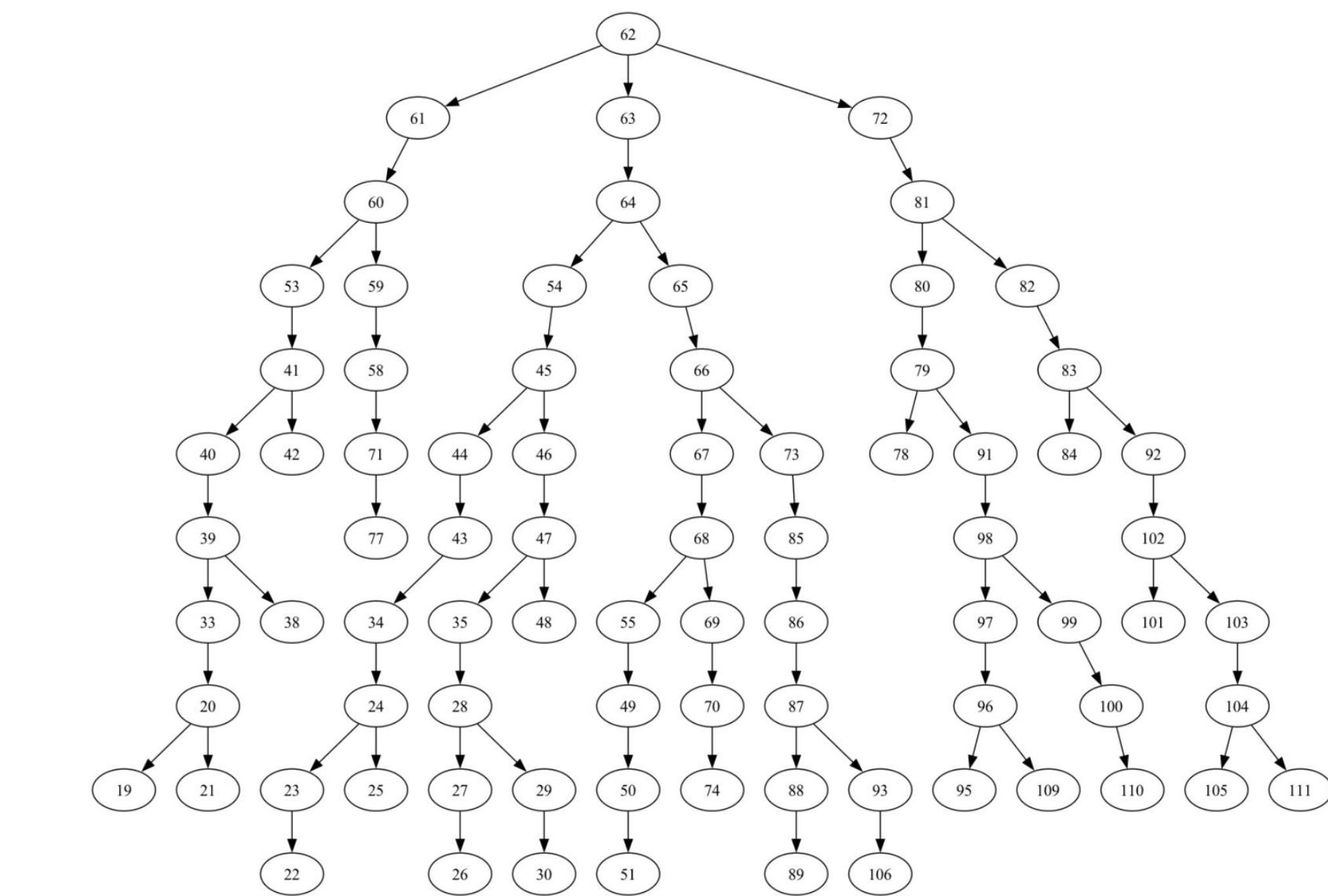


Depth: 208 (two-qubit depth 40)

ツリー型回路



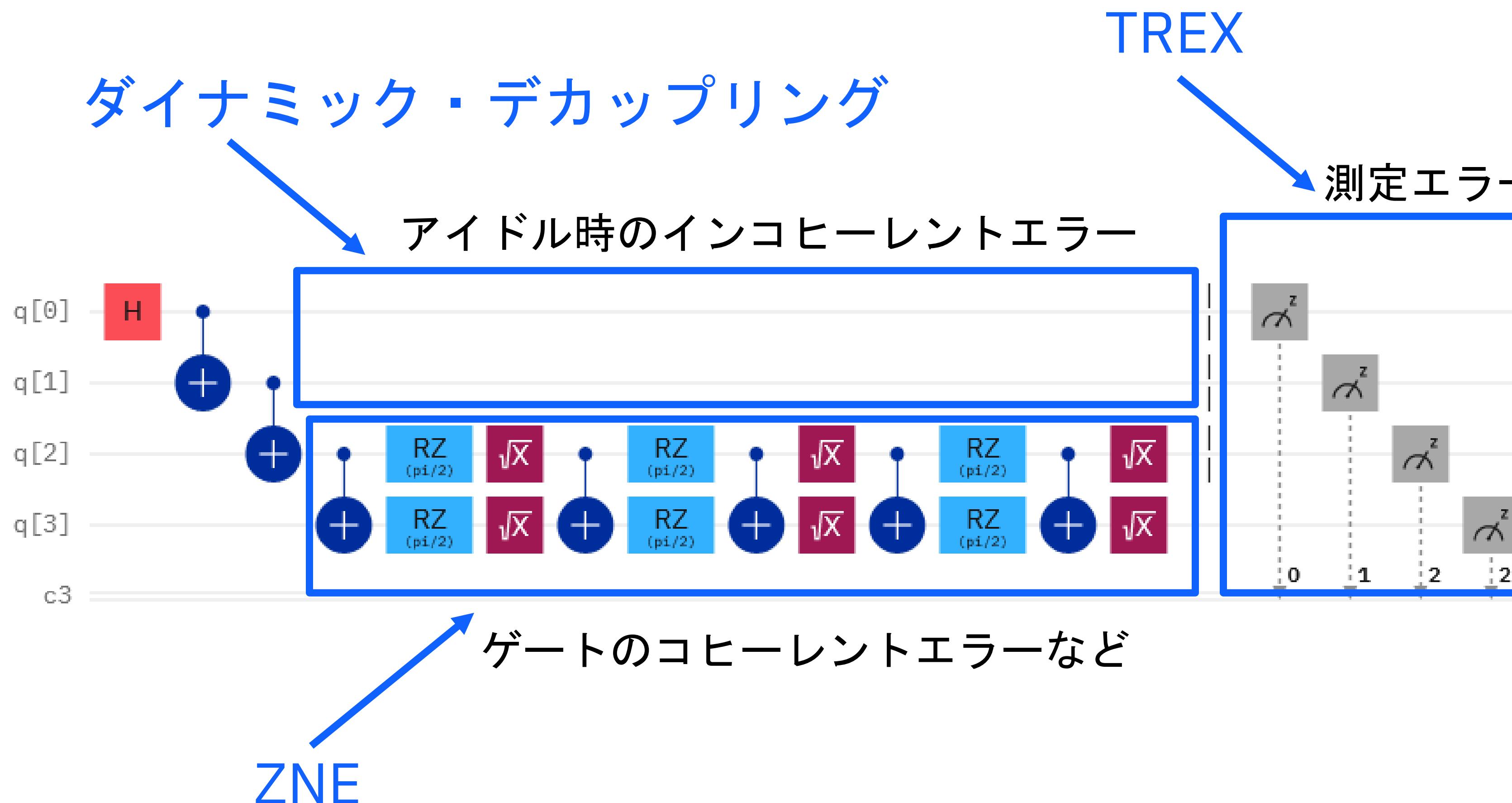
Depth: 46 (two-qubit depth 14)



幅優先探索を使う

エラー抑制と緩和のテクニック

- エラーの種類によって、抑制と緩和のテクニックは異なる。
- 異なるタイプの技術を組み合わせることもできる。



- ZNE (Zero Noise Extrapolation, ゼロノイズ外挿)
- TREX (Twirled Readout Error eXtinction, 回転読み出しえラー検出)

演習

できるだけ大きなGHZ状態を作ります。

1. 量子ビットのマッピングとルーティング

- 読み出しエラーの少ない量子ビットやエラーの少ないエンタングルゲートをピックアップ。
- トランスパイラーに頼るか、自分でやる！

2. 回路の深さ

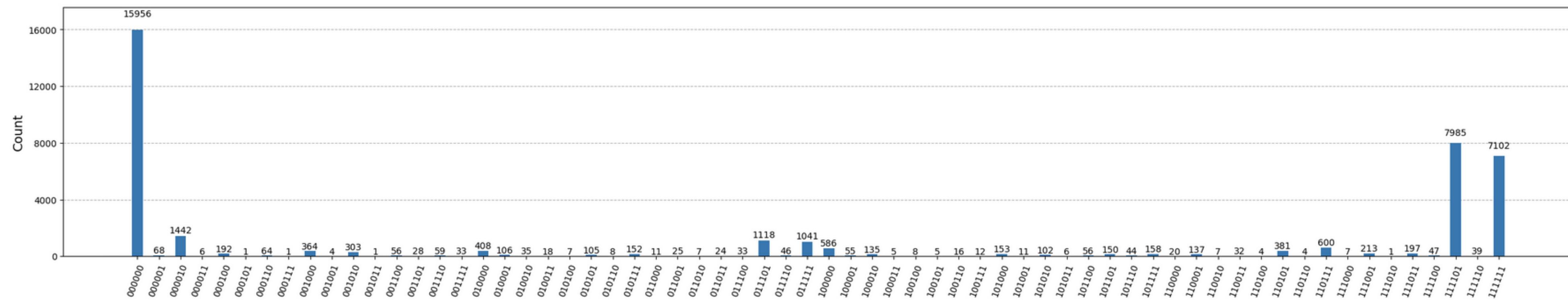
- エンタングルゲートのツリー構造を追求する。

3. エラー緩和・エラー抑制手法

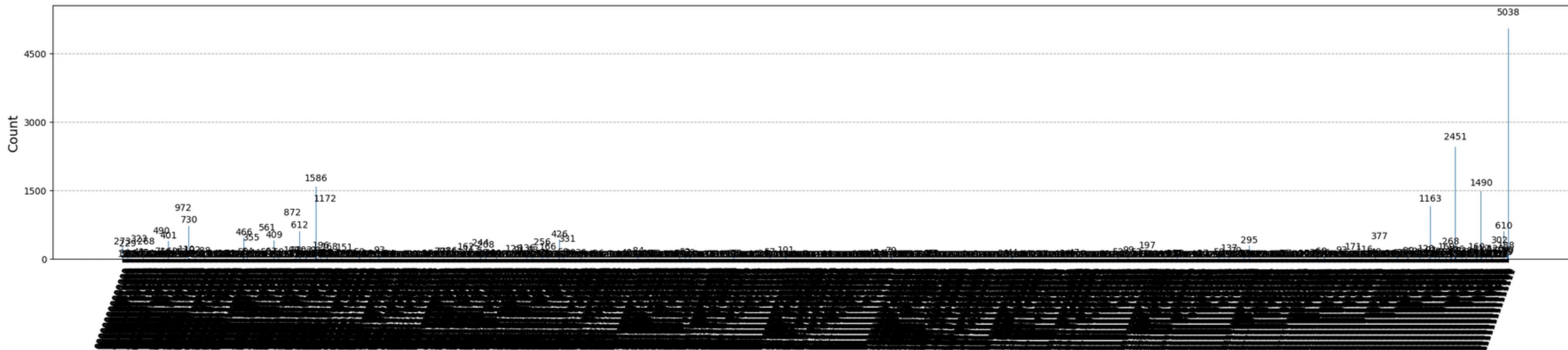
参考：GHZ状態の評価

GHZ状態を作れたと判断するには？

$N = 6, ibm_brisbane$



$N = 12, ibm_brisbane$



結果をどのように評価するか？

- ・準備したいものと実機で生成したものとの近さを定量化したい。
- ・様々な方法が提案されている。
- ・今回のハンズオンでは、[1]の忠実度に基づくものを採用。

[1] Otfried Gühne, Chao-Yang Lu, Wei-Bo Gao, and Jian-Wei Pan, “Toolbox for entanglement detection and fidelity estimation”, Phys. Rev. A 76, 030305 (2007)

GHZ状態の評価方法

- 純粋なGHZ状態に対する密度行列 ρ の忠実度は以下の通り：

$$F(\rho, |GHZ_N\rangle) = \frac{1}{2}\text{Tr}(\rho|0\rangle\langle 0|^{\otimes N}) + \frac{1}{2}\text{Tr}(\rho|1\rangle\langle 1|^{\otimes N}) + \frac{1}{2}\text{Tr}(\rho(|0\rangle\langle 1|^{\otimes N} + |1\rangle\langle 0|^{\otimes N})). \quad (5)$$

純粋なGHZ状態の密度行列

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\cdots 0\rangle + |1\cdots 1\rangle) \frac{1}{\sqrt{2}}(\langle 0\cdots 0| + \langle 1\cdots 1|) = \begin{bmatrix} 0.5 & 0\cdots 0 & 0.5 \\ 0 & & 0 \\ \vdots & & \vdots \\ 0 & 0\cdots 0 & 0 \\ 0.5 & 0\cdots 0 & 0.5 \end{bmatrix}$$

- GHZ 忠実度 > 0.5 であれば、真の多粒子エンタングルメントを証明するのに十分。
 - 最初の 2 つの項は、すべてゼロの状態とすべて 1 の状態の割合であり、計算基底内のすべての量子ビットを測定することによって推定される。
 - 3 番目の項は、以下を使用して推定され、演算子 M_k を測定することで計算できる。

$$|0\rangle\langle 1|^{\otimes N} + |1\rangle\langle 0|^{\otimes N} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (-1)^k M_k, \quad (6)$$

where the operators

$$M_k = \left(\cos(k\pi/N)X + \sin(k\pi/N)Y \right)^{\otimes N}, \quad (7)$$

Please refer:

- O. Guhne, C.-Y. Lu, W.-B. Gao, and J.-W. Pan, Tool-box for entanglement detection and fidelity estimation, Phys. Rev. A 76, 030305 (2007)
- O. Guhne and M. Seevinck, Separability criteria for genuine multiparticle entanglement, New Journal of Physics 12, 053002 (2010).

GHZ実験における忠実度の計算

私たちが準備したいのは：

$$|GHZ\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle^{\otimes N} + |1\rangle^{\otimes N})$$

回路が実デバイス上で生成した状態を ρ とする。計算したいのは新のGHZ状態と作った状態 ρ との忠実度(Fidelity)：

$$F(|GHZ\rangle\langle GHZ|, \rho) = Tr(\rho|GHZ\rangle\langle GHZ|) \leftarrow \text{次のページで導出}$$

$$= \frac{1}{2} \{ Tr(\rho|0\rangle\langle 0|^{\otimes N}) + Tr(\rho|1\rangle\langle 1|^{\otimes N}) + \underline{Tr(\rho|0\rangle\langle 1|^{\otimes N} + \rho|1\rangle\langle 0|^{\otimes N})} \}$$

- ρ を $Z^{\otimes N}$ で繰り返し準備・測定することで、トレースの最初の2つを得ることができる。
- $(HRz\left(-\frac{k\pi}{N}\right))^{\otimes N}$ をかけて、 $Z^{\otimes N}$ を測定することで、 $Tr(\rho|0\rangle\langle 1|^{\otimes N} + \rho|1\rangle\langle 0|^{\otimes N})$ の値を得ることができる($k = 1, \dots, N$)。 \leftarrow 次の次のページ以降で説明

まず、 $F(|\psi\rangle\langle\psi|, \sigma) = Tr(\sigma|\psi\rangle\langle\psi|)$ を導く

$\sqrt{|\psi\rangle\langle\psi|} = |\psi\rangle\langle\psi|$ を使って、 $((|\psi\rangle\langle\psi|)^2 = |\psi\rangle\langle\psi|$ より。)

$\sqrt{|\psi\rangle\langle\psi|}\sigma\sqrt{|\psi\rangle\langle\psi|} = |\psi\rangle\langle\psi|\sigma|\psi\rangle\langle\psi| = \langle\psi|\sigma|\psi\rangle|\psi\rangle\langle\psi|$. ($\langle\psi|\sigma|\psi\rangle$ はスカラーなので。)

よって、 $\sqrt{\sqrt{|\psi\rangle\langle\psi|}\sigma\sqrt{|\psi\rangle\langle\psi|}} = \sqrt{\langle\psi|\sigma|\psi\rangle}|\psi\rangle\langle\psi|$.

これにより、 $Tr(\sqrt{\langle\psi|\sigma|\psi\rangle}|\psi\rangle\langle\psi|) = \sqrt{\langle\psi|\sigma|\psi\rangle}$. ($Tr(|\psi\rangle\langle\psi|) = 1$ と $\langle\psi|\sigma|\psi\rangle$ はスカラーより。)

よって、

$$F(|\psi\rangle\langle\psi|, \sigma) = \left(Tr\left(\sqrt{\sqrt{|\psi\rangle\langle\psi|}\sigma\sqrt{|\psi\rangle\langle\psi|}}\right) \right)^2 = \left(Tr(\sqrt{\langle\psi|\sigma|\psi\rangle}|\psi\rangle\langle\psi|) \right)^2 = \langle\psi|\sigma|\psi\rangle = Tr(\sigma|\psi\rangle\langle\psi|).$$

よって、 $F(|GHZ\rangle\langle GHZ|, \rho) = Tr(\rho|GHZ\rangle\langle GHZ|)$

式変形

- $M_k = (\cos\left(\frac{k\pi}{N}\right)X + \sin\left(\frac{k\pi}{N}\right)Y)^{\otimes N}$ とすると、以下の式が成り立つ。 \leftarrow (1)

$$|0\rangle\langle 1|^{\otimes N} + |1\rangle\langle 0|^{\otimes N} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (-1)^k M_k \quad \leftarrow \text{次のページで導出}$$

- よって、 $\underline{Tr(\rho|0\rangle\langle 1|^{\otimes N} + \rho|1\rangle\langle 0|^{\otimes N})} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (-1)^k Tr(\rho M_k).$

- $M_k = (RZ\left(\frac{k\pi}{N}\right)HZH RZ\left(-\frac{k\pi}{N}\right))^{\otimes N}$ であるので、 \leftarrow (2)

$$Tr(\rho M_k) = Tr ((HRZ\left(-\frac{k\pi}{N}\right))^{\otimes N} \rho (RZ\left(\frac{k\pi}{N}\right)H)^{\otimes N} Z^{\otimes N})$$

- $(HRZ\left(-\frac{k\pi}{N}\right))^{\otimes N}$ をかけて、 $Z^{\otimes N}$ を測定することで、 $Tr(\rho M_k)$ の値を得ることができる($k = 1, \dots, N$)。

(1)から(2)への変形について

$$\begin{aligned} \cos\left(\frac{k\pi}{N}\right)X + \sin\left(\frac{k\pi}{N}\right)Y &= \cos\left(\frac{k\pi}{N}\right)\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \sin\left(\frac{k\pi}{N}\right)\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \exp(-i\frac{k\pi}{N}) \\ \exp(i\frac{k\pi}{N}) & 0 \end{pmatrix} \\ RZ\left(\frac{k\pi}{N}\right)HZH RZ\left(-\frac{k\pi}{N}\right) &= \begin{pmatrix} \exp(-i\frac{k\pi}{2N}) & 0 \\ 0 & \exp(i\frac{k\pi}{2N}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \exp(i\frac{k\pi}{2N}) & 0 \\ 0 & \exp(-i\frac{k\pi}{2N}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \exp(-i\frac{k\pi}{N}) \\ \exp(i\frac{k\pi}{N}) & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$|0\rangle\langle 1|^{\otimes N} + |1\rangle\langle 0|^{\otimes N} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (-1)^k M_k$ の検証

はじめに、 $(-1)^k M_k = (-1)^k (\exp\left(-i\frac{k\pi}{N}\right) |0\rangle\langle 1| + \exp\left(i\frac{k\pi}{N}\right) |1\rangle\langle 0|)^{\otimes N}$

$M_k = (\cos\left(\frac{k\pi}{N}\right) X + \sin\left(\frac{k\pi}{N}\right) Y)^{\otimes N}$ である。

なぜなら、 $|0\rangle\langle 1| = \frac{1}{2}(X + iY) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$, $|1\rangle\langle 0| = \frac{1}{2}(X - iY) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ より、

$$\begin{aligned} \exp\left(-i\frac{k\pi}{N}\right) |0\rangle\langle 1| + \exp\left(i\frac{k\pi}{N}\right) |1\rangle\langle 0| &= \begin{pmatrix} 0 & \exp\left(-i\frac{k\pi}{N}\right) \\ \exp\left(i\frac{k\pi}{N}\right) & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & \cos\left(\frac{k\pi}{N}\right) - i \sin\left(\frac{k\pi}{N}\right) \\ \cos\left(\frac{k\pi}{N}\right) + i \sin\left(\frac{k\pi}{N}\right) & 0 \end{pmatrix} \\ &= \cos\left(\frac{k\pi}{N}\right) X + \sin\left(\frac{k\pi}{N}\right) Y \end{aligned}$$

$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ と
 $Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ を思い出す。

$|0\rangle\langle 1|^{\otimes N} + |1\rangle\langle 0|^{\otimes N} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (-1)^k M_k$ の検証

$$(-1)^k M_k = (-1)^k (\exp\left(-i\frac{k\pi}{N}\right) |0\rangle\langle 1| + \exp\left(i\frac{k\pi}{N}\right) |1\rangle\langle 0|)^{\otimes N}$$

の右辺を展開すると 2^N の項が得られ、それぞれが N テンソル積となる。

- 項の一つは $|0\rangle\langle 1|^{\otimes N}$ で、その係数は $(-1)^k (\exp\left(-i\frac{k\pi}{N}\right))^{\otimes N} = 1$ である。 $k = 1$ から N まで和を取ると、この項の係数は N になる。
 $(\exp\left(-i\frac{k\pi}{N}\right))^{\otimes N} = \exp\left(-i\frac{k\pi}{N} \cdot N\right) = \exp(-ik\pi) = (-1)^k$ より、
 $(-1)^k (\exp\left(-i\frac{k\pi}{N}\right))^{\otimes N} = 1$

- 同様に、項の一つは $|1\rangle\langle 0|^{\otimes N}$ で、その係数は $(-1)^k (\exp\left(i\frac{k\pi}{N}\right))^{\otimes N} = 1$ である。 $k = 1$ から N まで和を取ると、この項の係数は N になる。
 $\exp(ik\pi) = (-1)^k$ を使う

- 他の各項の係数は、

$$(-1)^k (\exp\left(-i\frac{k\pi}{N}\right))^m (\exp\left(i\frac{k\pi}{N}\right))^{N-m} = \exp(i2k\pi(1 - m/N)) \quad \exp(ik\pi) = (-1)^k \text{を使う}$$

ここで、 $1 \leq m < N$ はテンソル積の $|0\rangle\langle 1|$ の数。 $k = 1$ から N まで和を取ると、この項の係数はゼロ。

$\omega = \exp(-i2\pi m/N)$ とおくと

$$\sum_{k=1}^N \exp\left(i2k\pi\left(1 - \frac{m}{N}\right)\right) = \sum_{k=1}^N \exp\left(-i2k\pi\frac{m}{N}\right) = \sum_{k=1}^N \omega^k = \frac{\omega(1 - \omega^N)}{1 - \omega} = 0$$

以上より、GHZ実験における忠実度の計算は

私たちが準備したいのは：

$$|GHZ\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle^{\otimes N} + |1\rangle^{\otimes N})$$

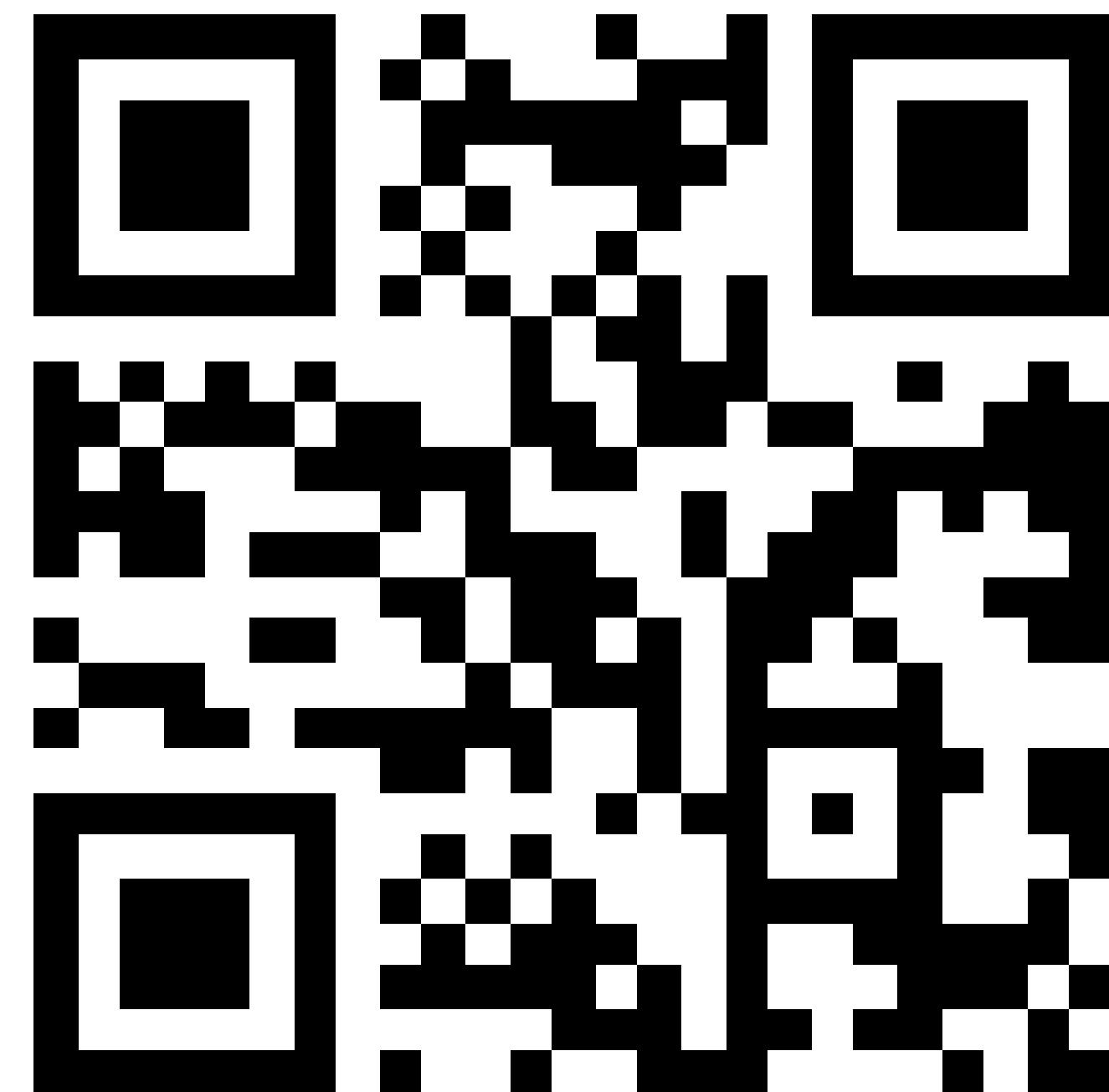
回路が実デバイス上で生成した状態を ρ とする。計算したいのは新のGHZ状態と作った状態 ρ との忠実度(Fidelity)：

$$\begin{aligned} F(|GHZ\rangle\langle GHZ|, \rho) &= Tr(\rho|GHZ\rangle\langle GHZ|) \\ &= \frac{1}{2}\left\{Tr\left(\rho|0\rangle\langle 0|^{\otimes N}\right) + Tr\left(\rho|1\rangle\langle 1|^{\otimes N}\right) + \underline{Tr\left(\rho|0\rangle\langle 1|^{\otimes N} + \rho|1\rangle\langle 0|^{\otimes N}\right)}\right\} \end{aligned}$$

- ρ を $Z^{\otimes N}$ で繰り返し準備・測定することで、トレースの最初の2つを得ることができる。
- $(HRz\left(-\frac{k\pi}{N}\right))^{\otimes N}$ をかけて、 $Z^{\otimes N}$ を測定することで、 $Tr(\rho|0\rangle\langle 1|^{\otimes N} + \rho|1\rangle\langle 0|^{\otimes N})$ の値を得ることができる($k = 1, \dots, N$)。

アンケートにご協力ください

ibm.biz/qkmbsvy



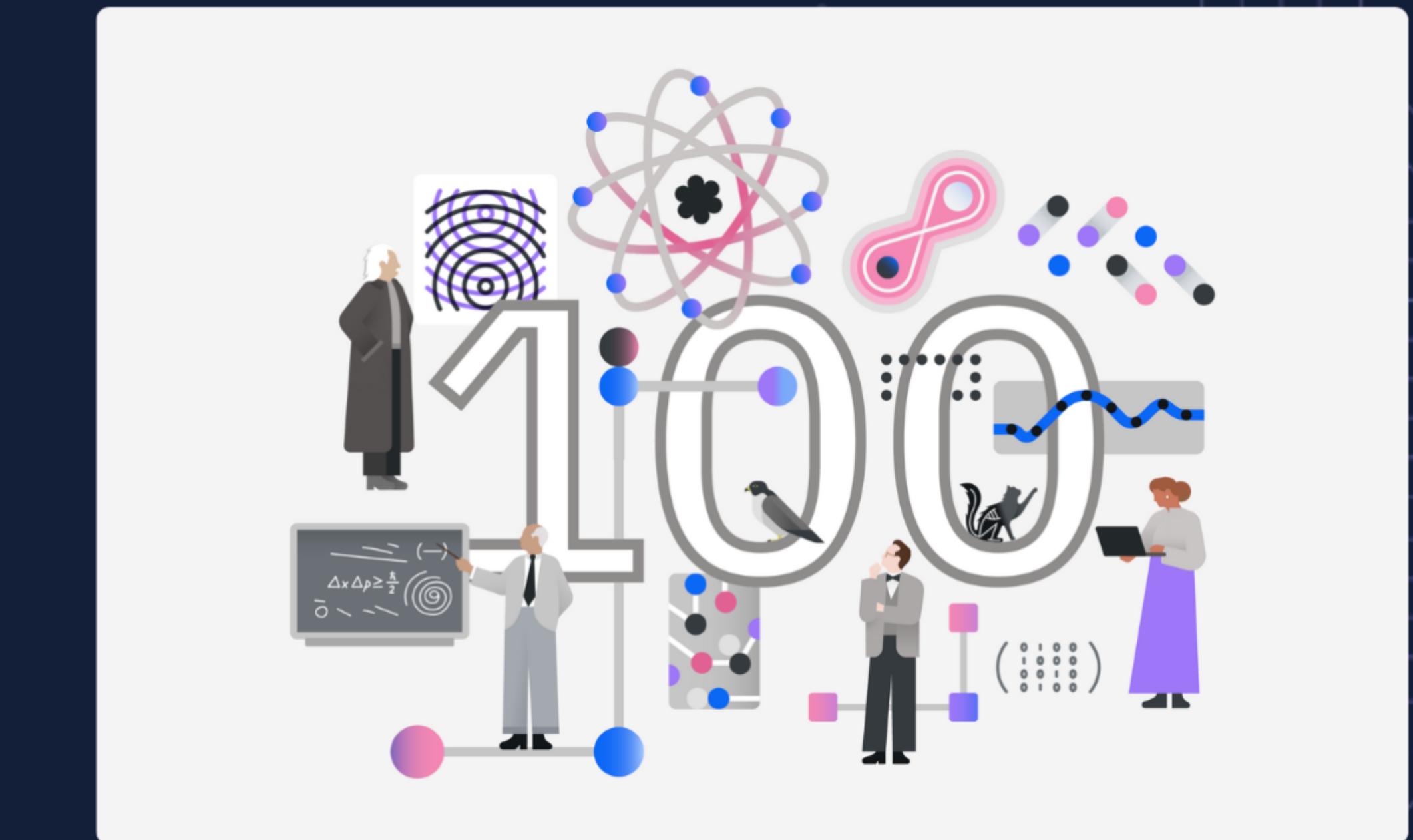
東大で11月に量子コンピューターを使ったハッカソンを開催します！

UTokyo Qiskit Fall Fest 2025

量子コンピューティングのハッカソンへようこそ！

今すぐ申し込む

URL: ibm.biz/utqff25



《 Date 》

2025.11.01 sat & 11.08 sat

*両日参加必須

《 Place 》

東京大学本郷キャンパス
理学部1号館 中央棟 341共通講義室

