

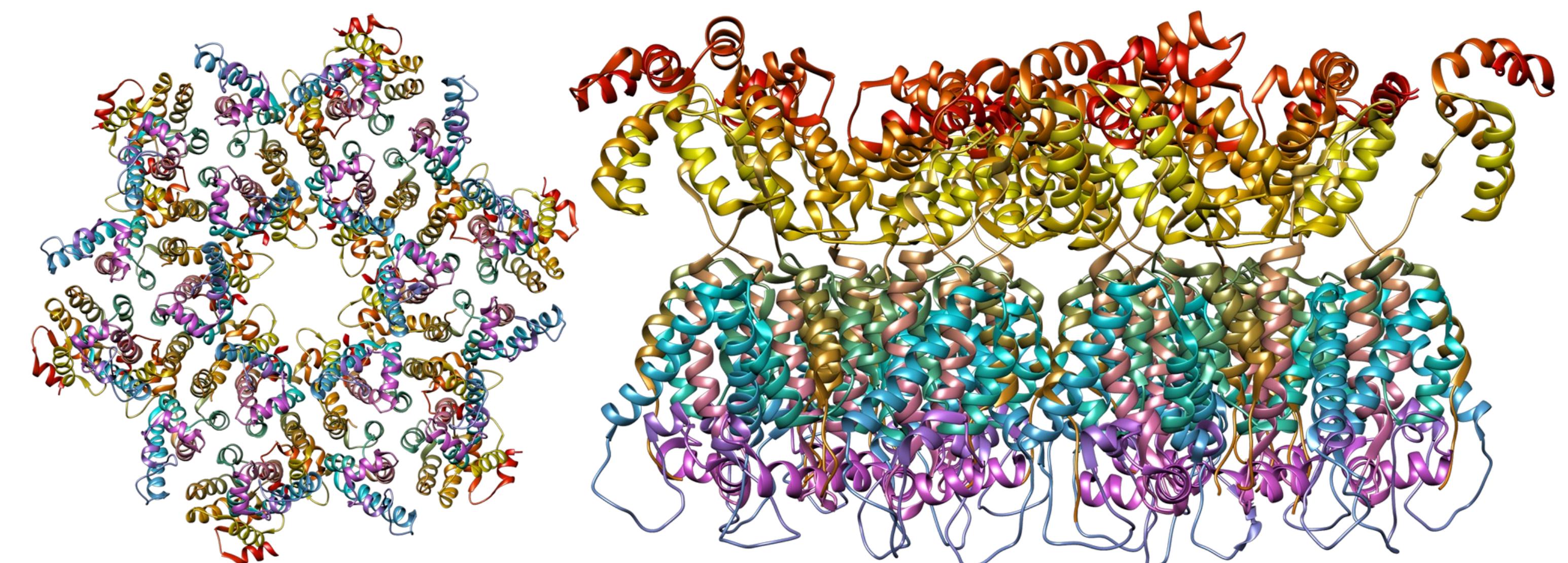
Kawasaki Quantum Summer Camp

# 分子のシミュレーション

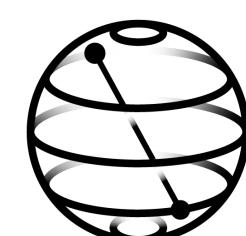
沼田 祢史

Kifumi Numata

IBM Quantum



川崎市  
KAWASAKI CITY



Qiskit

**実験をする前に結果を予測したいです。  
あなたならどうしますか？**



1981年5月 IBMとマサチューセッツ工科大学(MIT)が  
計算物理会議 (The Physics of Computation Conference)を共催

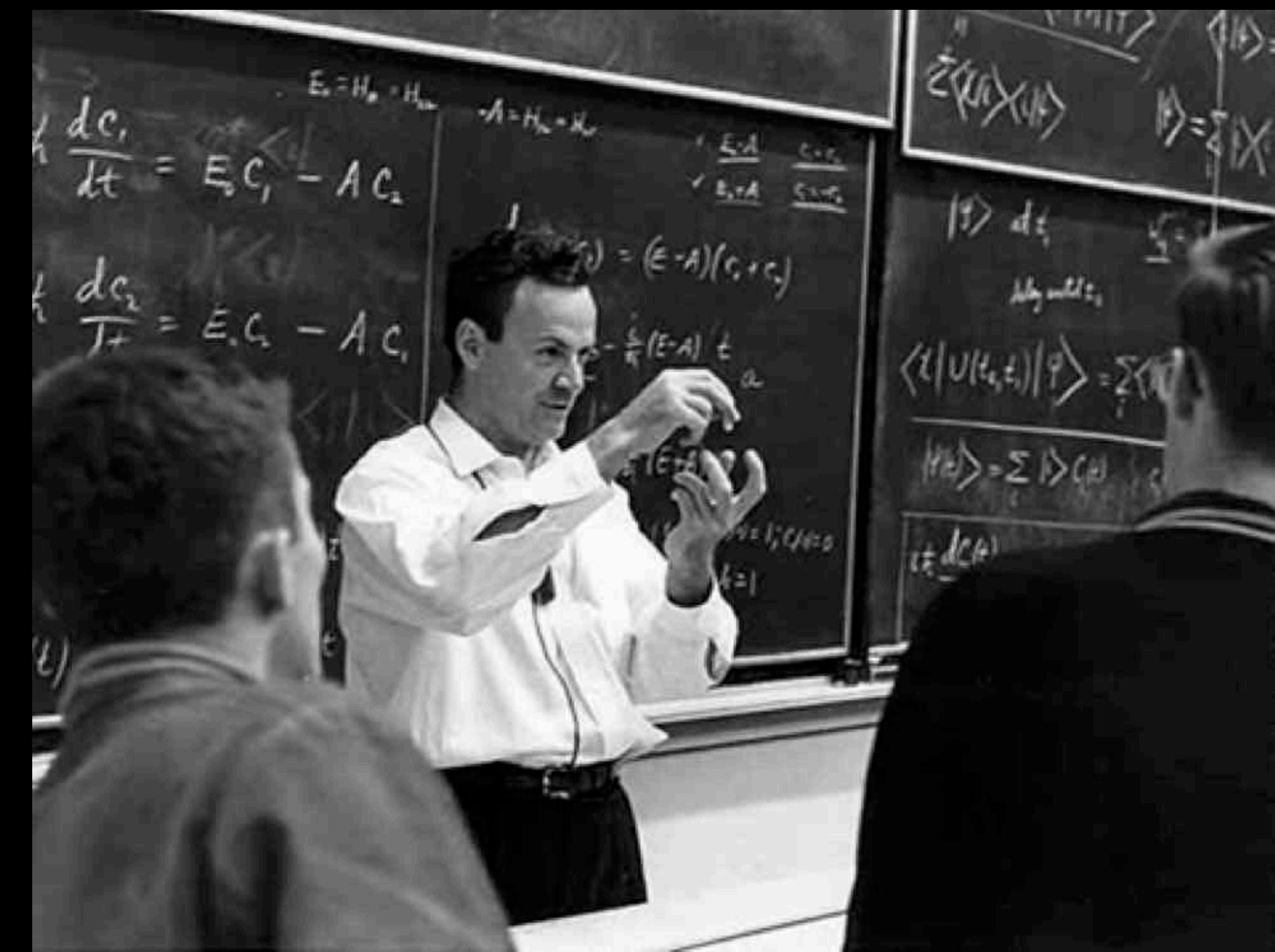


コンピューターによる物理現象のシミュレーション

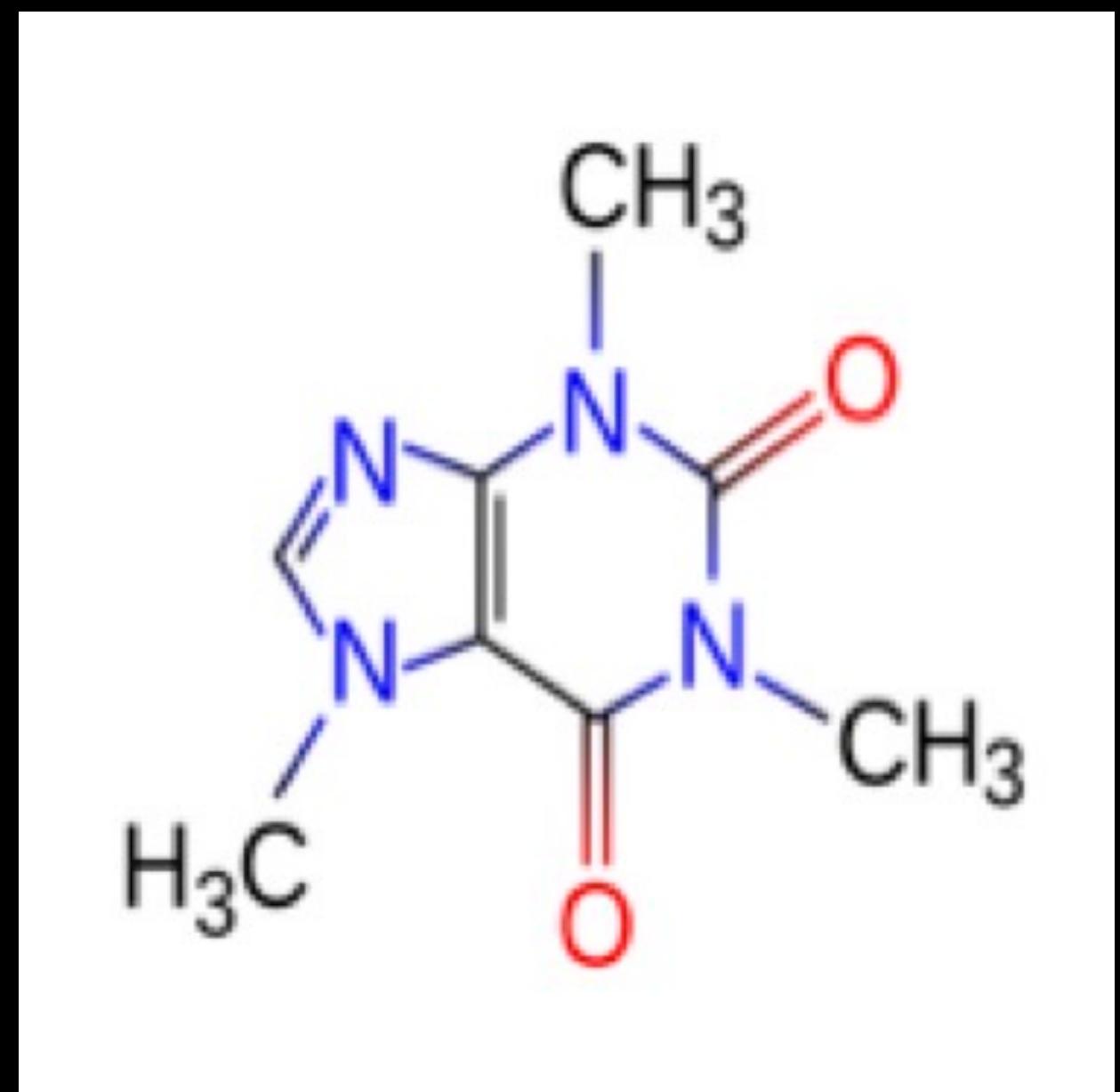
私は古典的な理論による分析は好み  
ない。なぜなら自然界は古典的な理  
論では説明できないからだ。だからもし  
自然界をシミュレートしたいのであれば、  
量子力学を用いるべきなのだ。

**Richard P. Feynman**

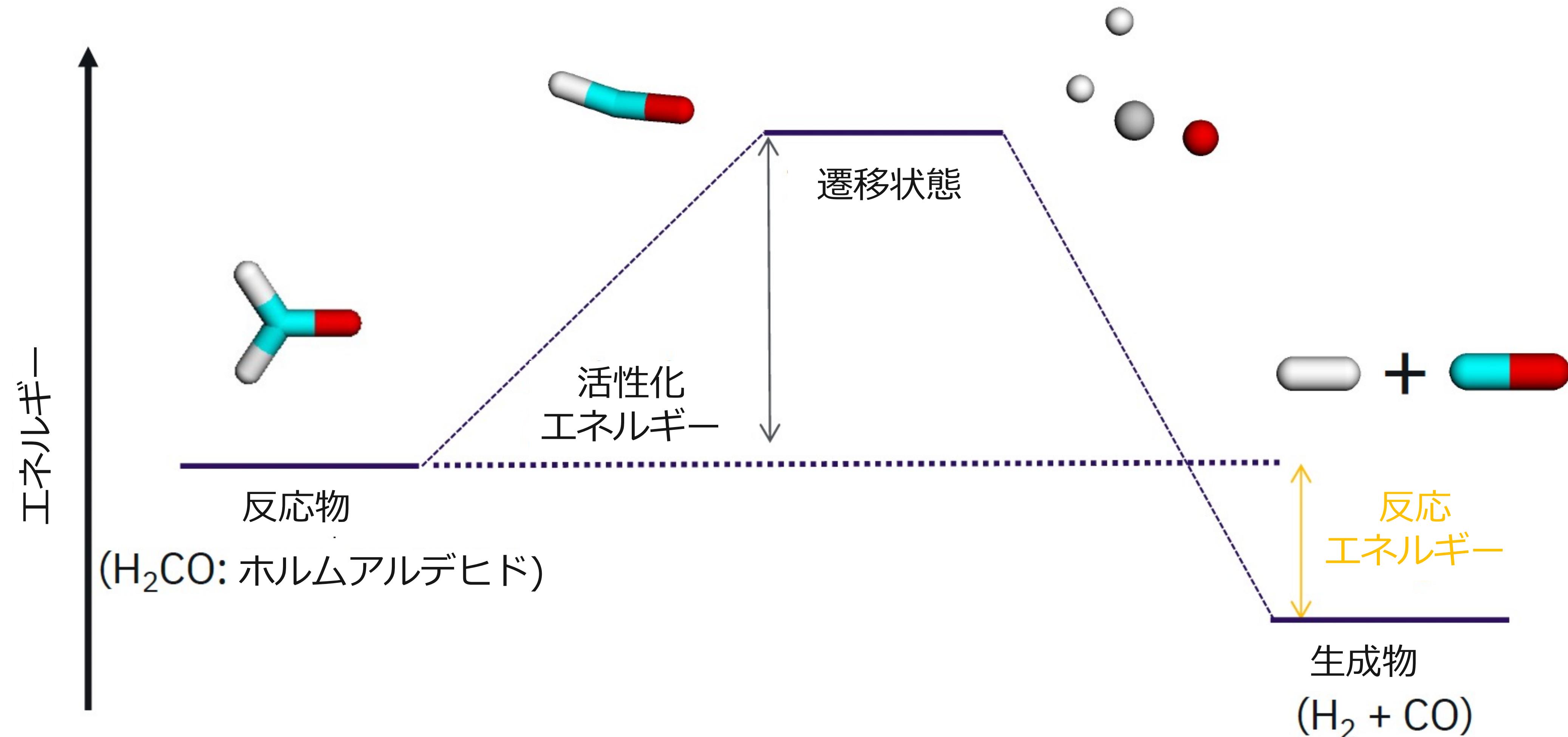
Department of Physics, California  
Institute of Technology, Pasadena,  
California 91107



現在の最もパワフルな  
スーパーコンピューターを使用しても  
カフェイン分子をモデル化することは  
できませんが、  
量子コンピューターであれば  
160 量子ビット (qubit) で  
表現できます。

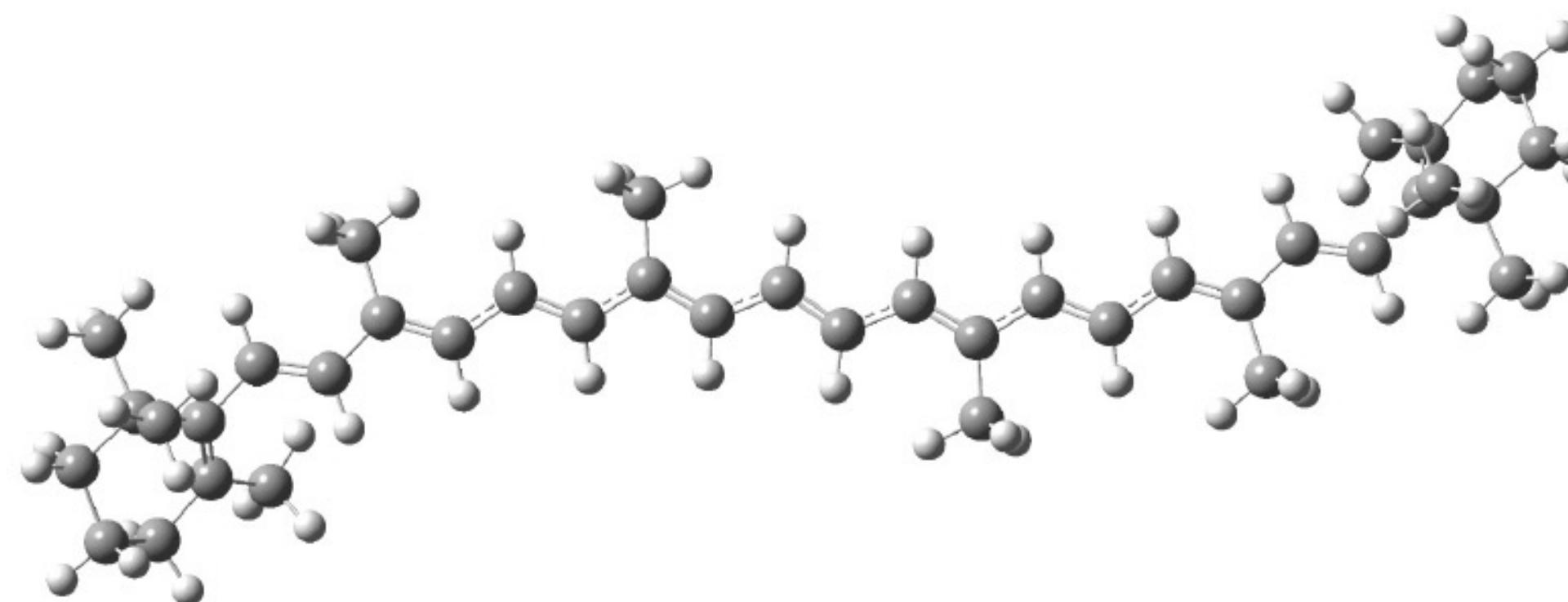


# 化学反応を解析する

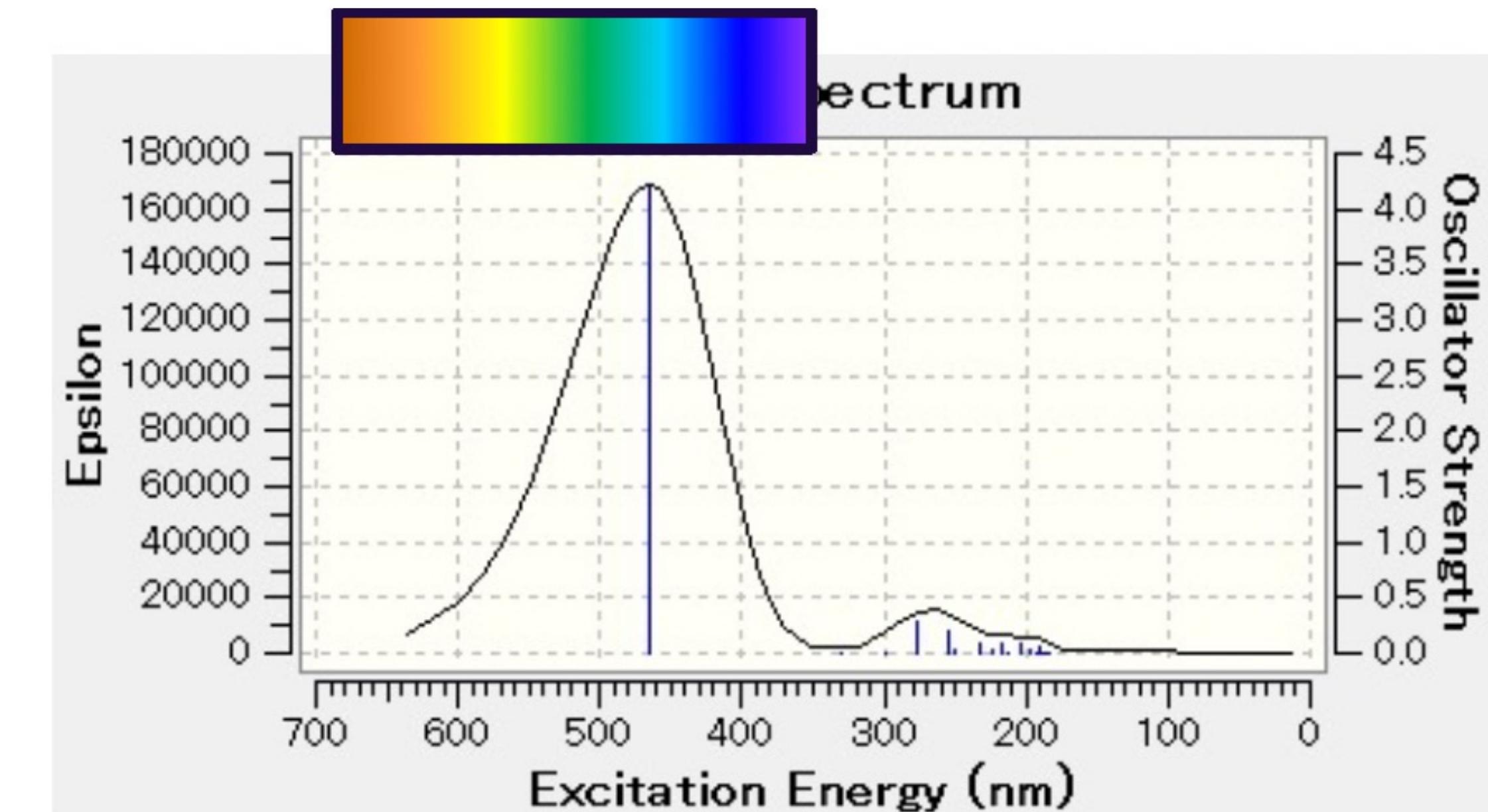


活性化工エネルギーと反応エネルギーを計算できる。  
反応の途中のプロセスが予測できる。

# 顔料や発光体の色を予測する



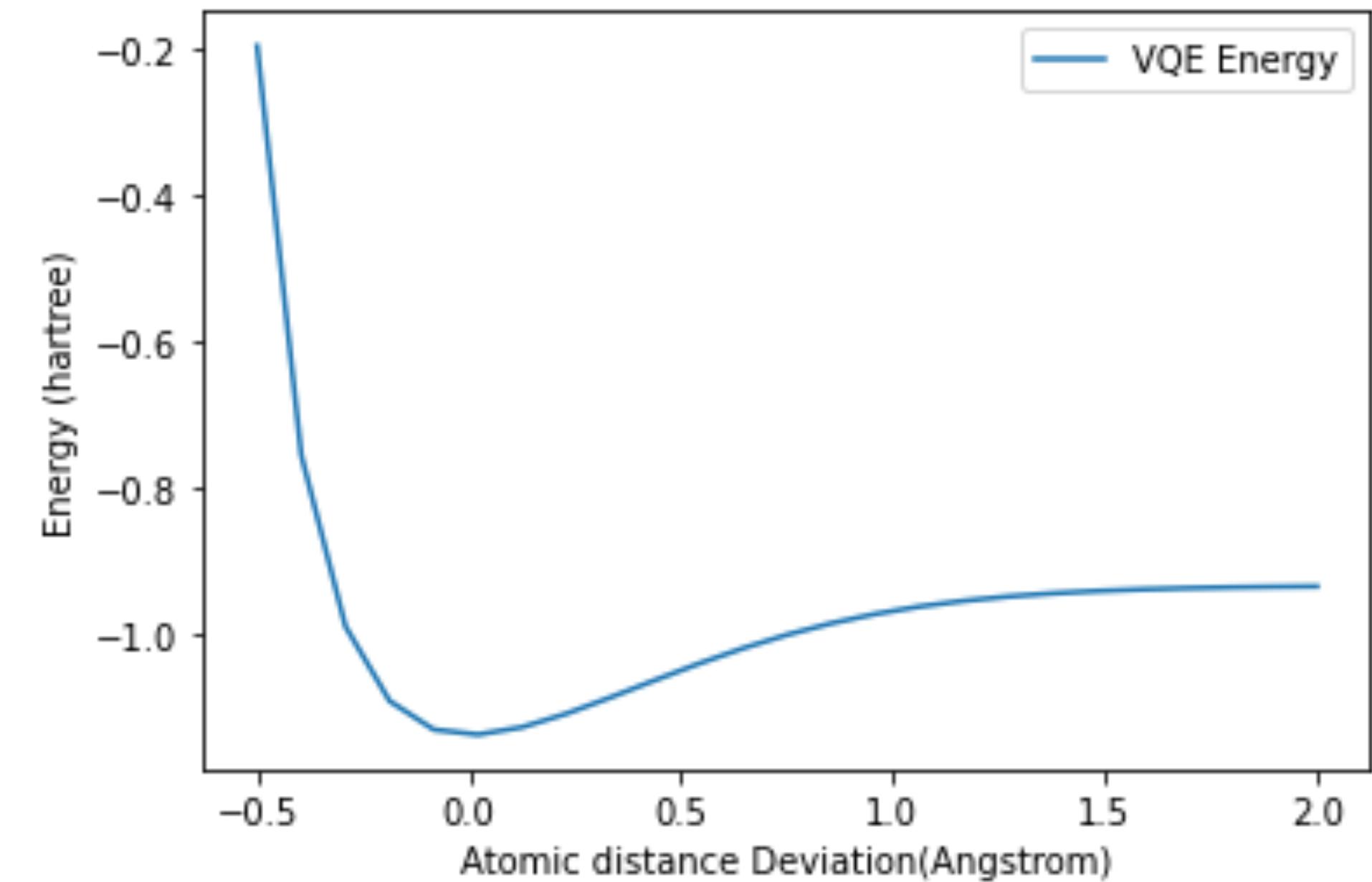
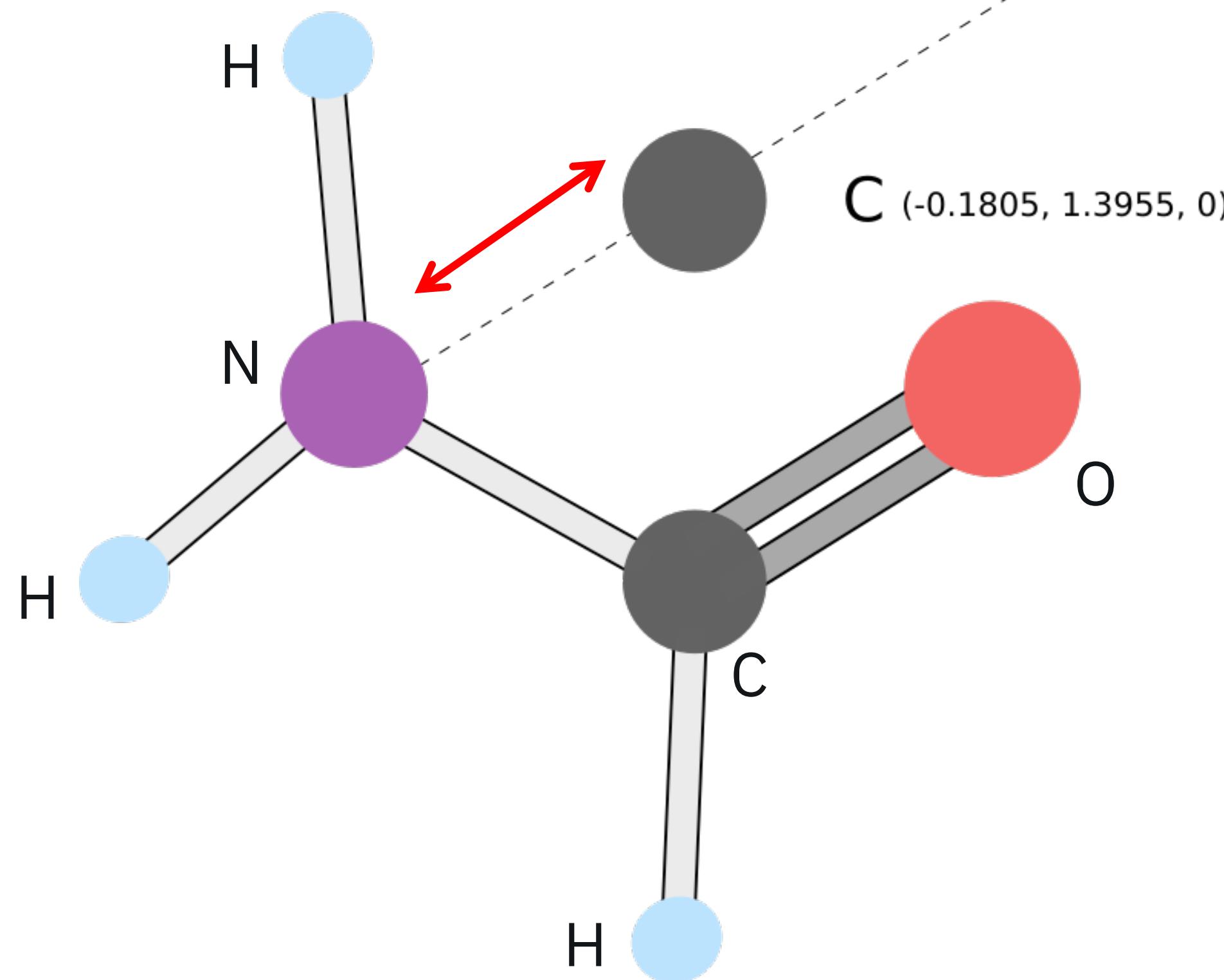
$\beta$ -カロテン分子



$\beta$ -カロテンは特定の波長の光を吸収し、それ以外の光を反射します。紫、青、緑の光は吸収され、黄、オレンジ、赤の光は反射されます。よって、オレンジ色に見えます。

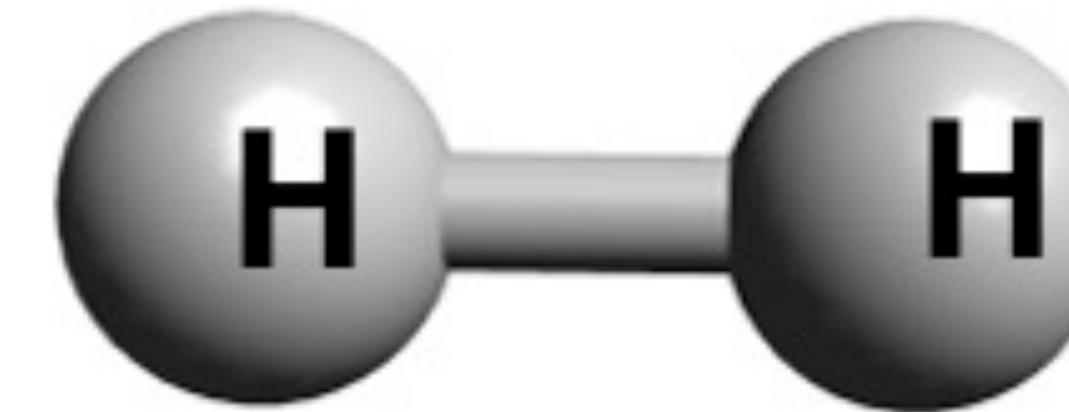
分子が吸収するエネルギーをシミュレーションすることで、新しい顔料やLEDの開発を行うことができます。

# 薬の効果を調べる



分子と分子の間の距離を変えてエネルギーをシミュレーションすることで、新しい薬の効果を調べられます。

# 水素分子のエネルギーを求める

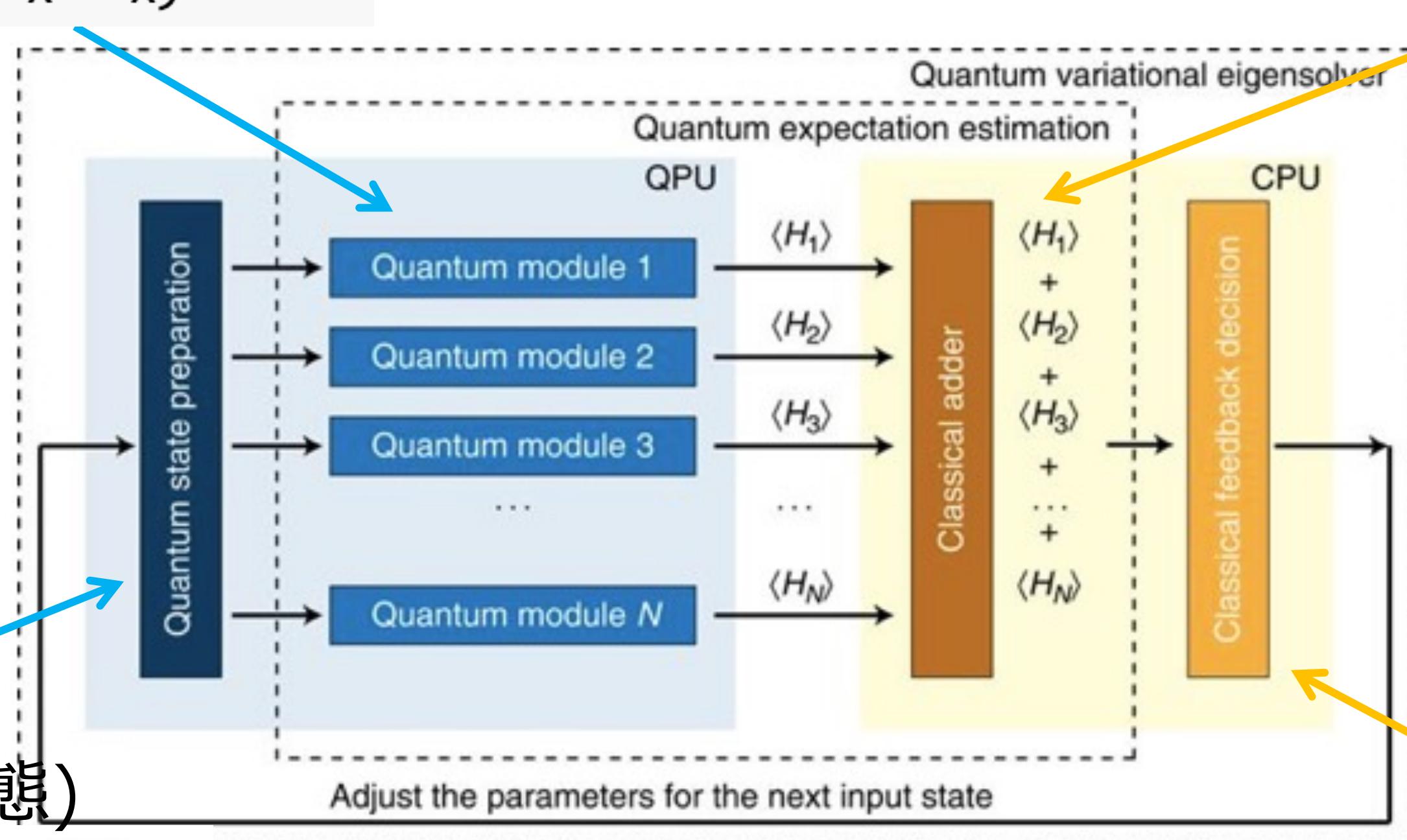


## (1) 水素のエネルギー式 (ハミルトニアン)

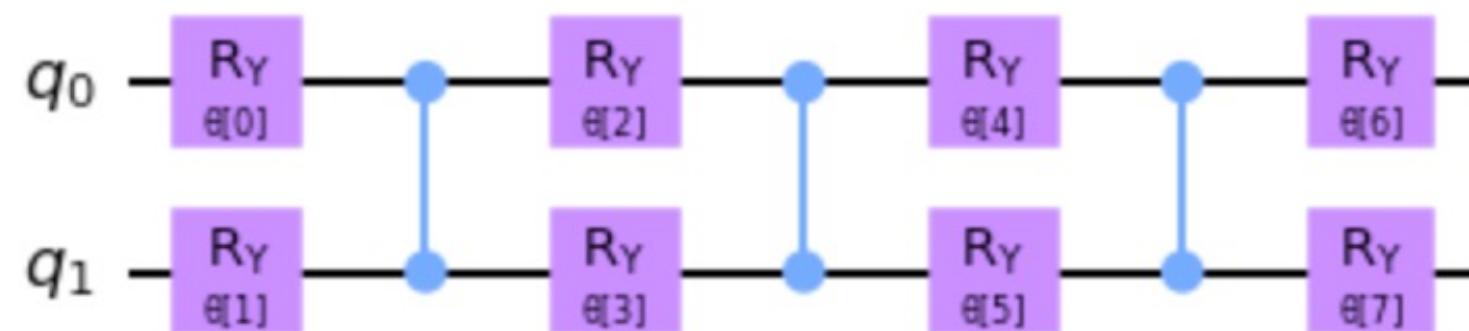
```
H2_op = (-1.052373245772859 * I ^ I) + \
          (0.39793742484318045 * I ^ Z) + \
          (-0.39793742484318045 * Z ^ I) + \
          (-0.01128010425623538 * Z ^ Z) + \
          (0.18093119978423156 * X ^ X)
```

よく使う量子ゲートであるX演算やZ演算で表現されている。

## (3) エネルギーの計算 (測定と合算)



## (2) パラメーター付き 量子回路 (トライアル状態)



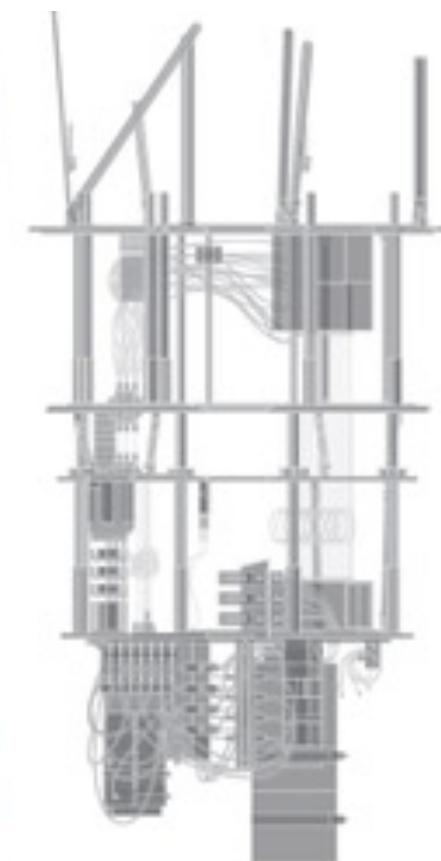
パラメーターを変化させ、最も低いエネルギーを求める

## (4) 古典コンピューターで 最適化ルーチンを使って パラメーター調整

# パラメーター付き量子計算

## 量子コンピューター

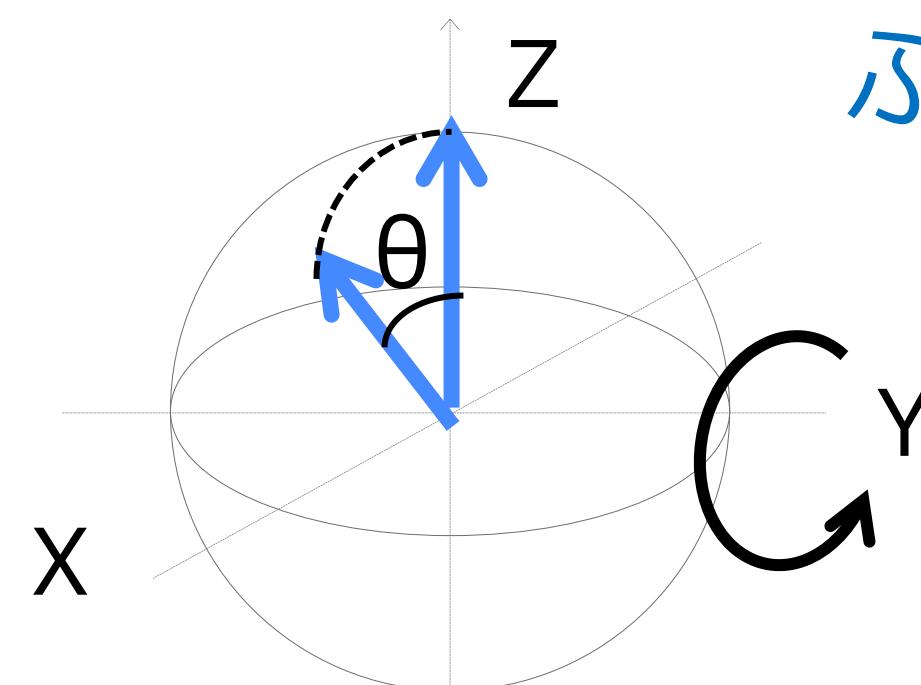
Prepare trial state  
 $|\Psi(\theta)\rangle$   
Measure expectation values  
 $\langle\Psi(\theta)|P_i|\Psi(\theta)\rangle$



パラメーター付き量子回路で  
コスト関数を表現

量子ビット  $q_0$  —  $R_Y \theta[0]$  —  $R_Y \theta[2]$  —  $R_Y \theta[4]$  —  $R_Y \theta[6]$   
量子ビット  $q_1$  —  $R_Y \theta[1]$  —  $R_Y \theta[3]$  —  $R_Y \theta[5]$  —  $R_Y \theta[7]$

Y軸回転の  
回転角θ  
回転角を調整することで  
ふさわしい量子回路に調整していく



パラメーター付き量子回路で表すもの：  
分子のエネルギー、最適化問題のコスト関数、など

# 変分量子固有値ソルバー (Variational Quantum Eigensolver, VQE)

量子コンピューターの得意な計算と  
古典コンピューターと組み合わせ、エラーを少なくするハイブリッド手法。

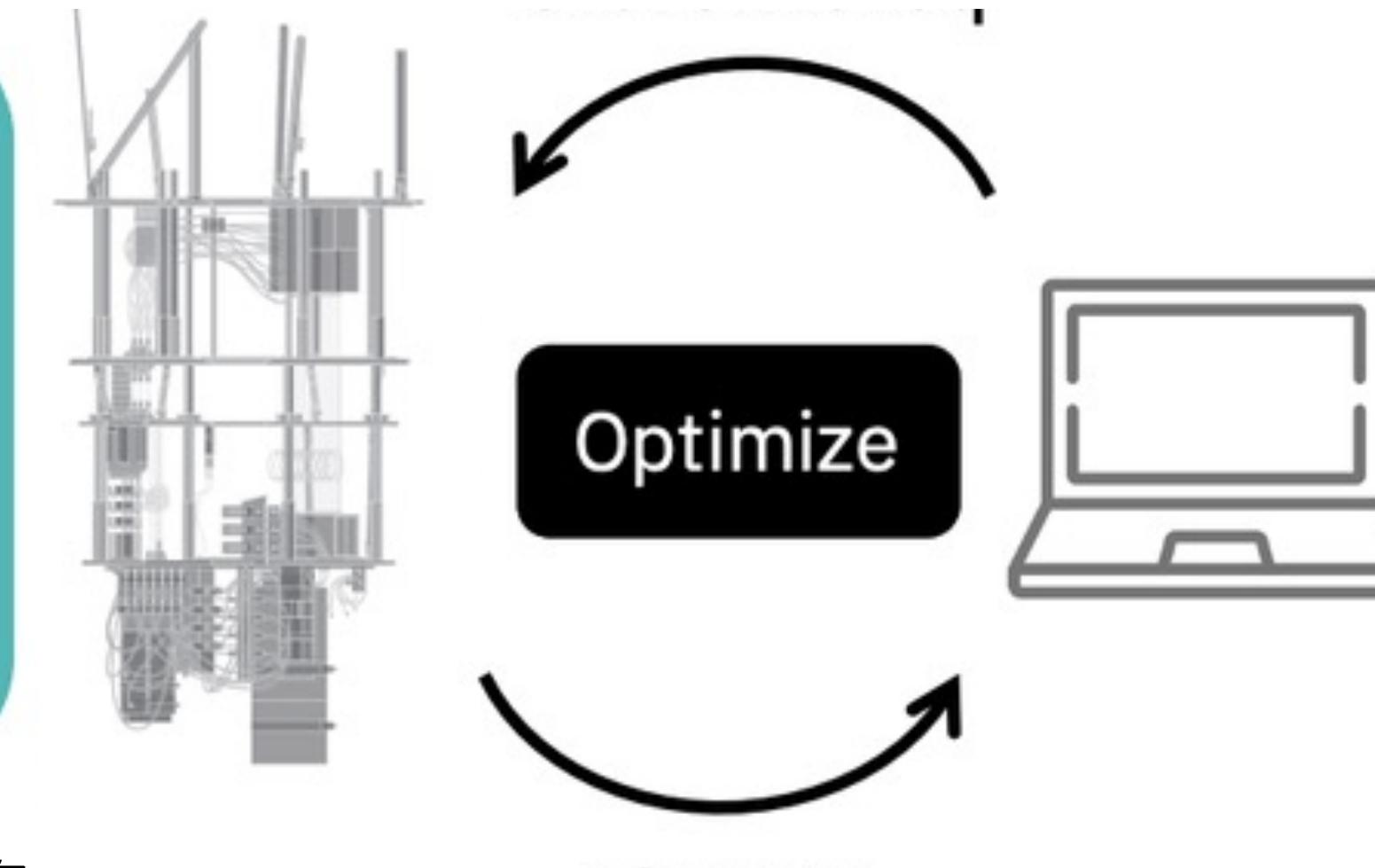
量子コンピューター

Prepare trial state

$$|\Psi(\theta)\rangle$$

Measure expectation  
values

$$\langle \Psi(\theta) | P_i | \Psi(\theta) \rangle$$



古典コンピューター

Calculate energy

$$E = \sum_i c_i \langle \Psi(\theta) | P_i | \Psi(\theta) \rangle \geq E_{\text{exact}}$$

Adjust parameters

$$\{\theta_i\}$$

パラメーター付き量子回路で  
コスト関数を表現

パラメーターの  
最適化計算

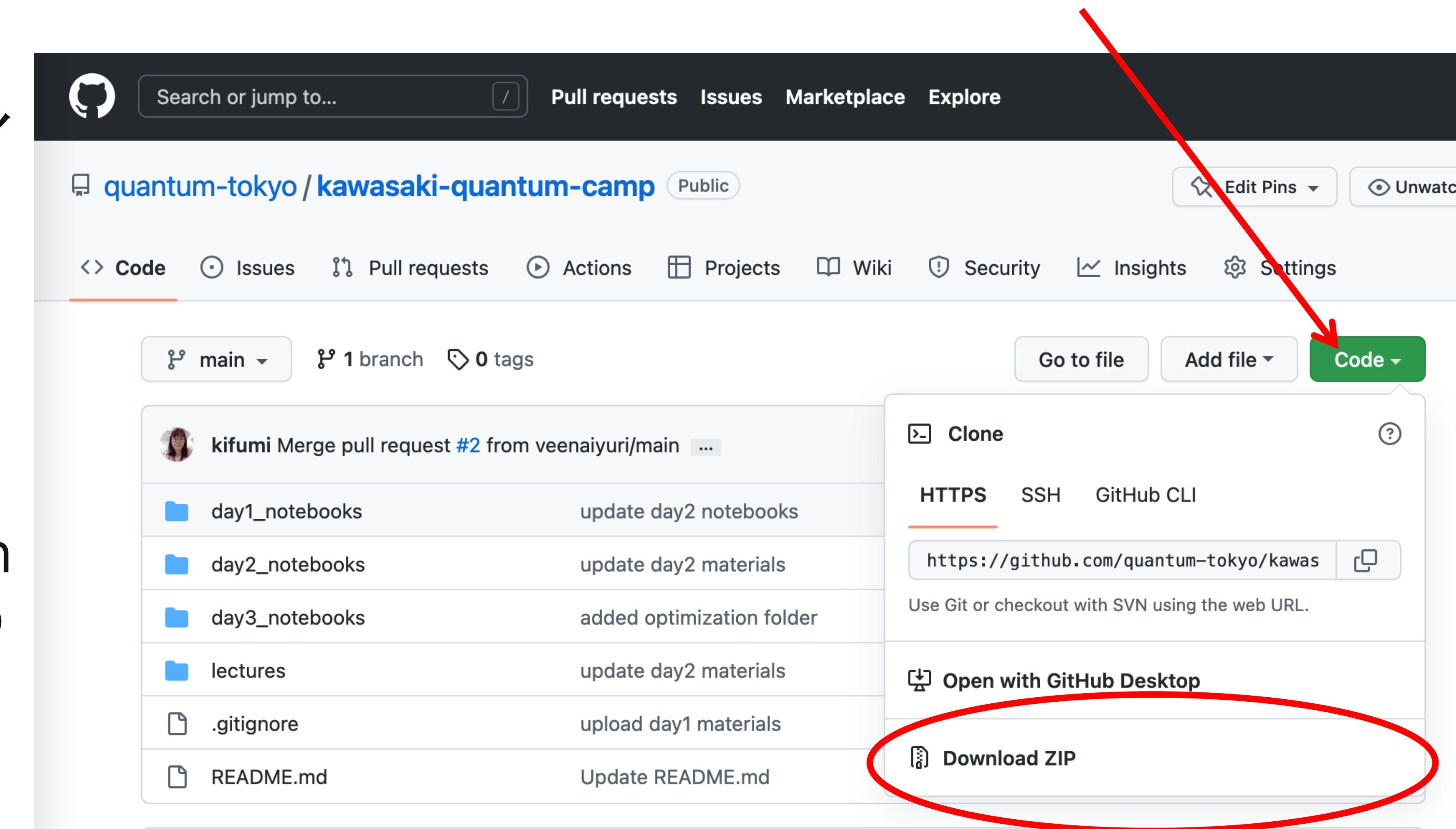
# 水素分子の基底エネルギーを求めるStep

- 1) 原子の種類、位置を指定して、必要な情報を取得。
- 2) 分子(のうちの電子)の運動のエネルギー式(ハミルトニアン)を作成。
- 3) エネルギー式を量子ゲートに変換。
- 4) トライアル状態 (パラメーター付き量子状態, Ansatz) をセット。
- 5) 量子計算の実行環境を設定。
- 6) VQEを実行し、最適なパラメーターを探し、エネルギーの近似解を求める。

# ハンズオン ファイルのダウンロード

<https://github.com/quantum-tokyo/kawasaki-quantum-camp>

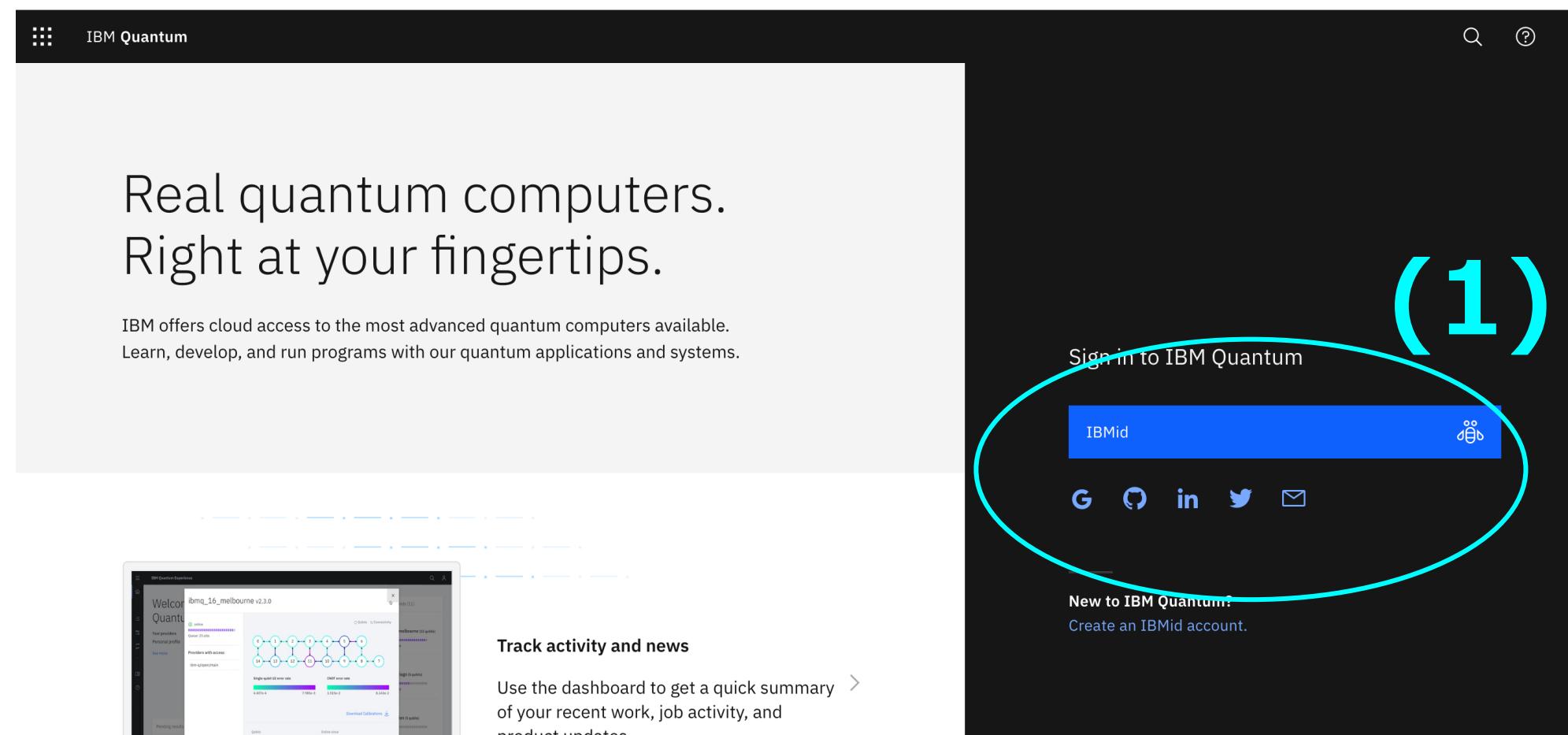
1. ハンズオンで使用するファイル(zipファイル)をダウンロードします。
2. ダウンロードしたzipファイルを解凍します。
3. 「day3\_notebooks/nature」フォルダーの下のファイルを全てアップロードします。



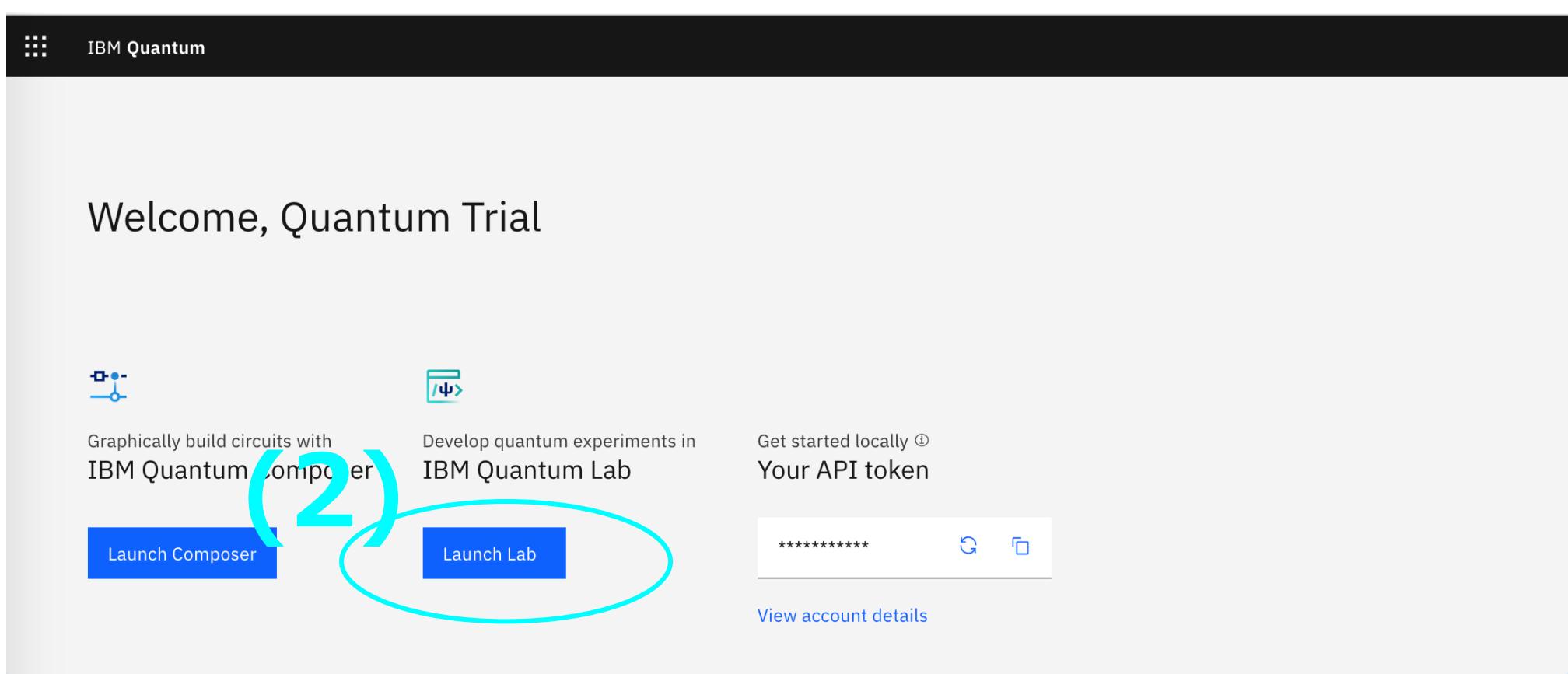
# IBM Quantum Labでの実行準備

(1) IBM Quantumにログインします。

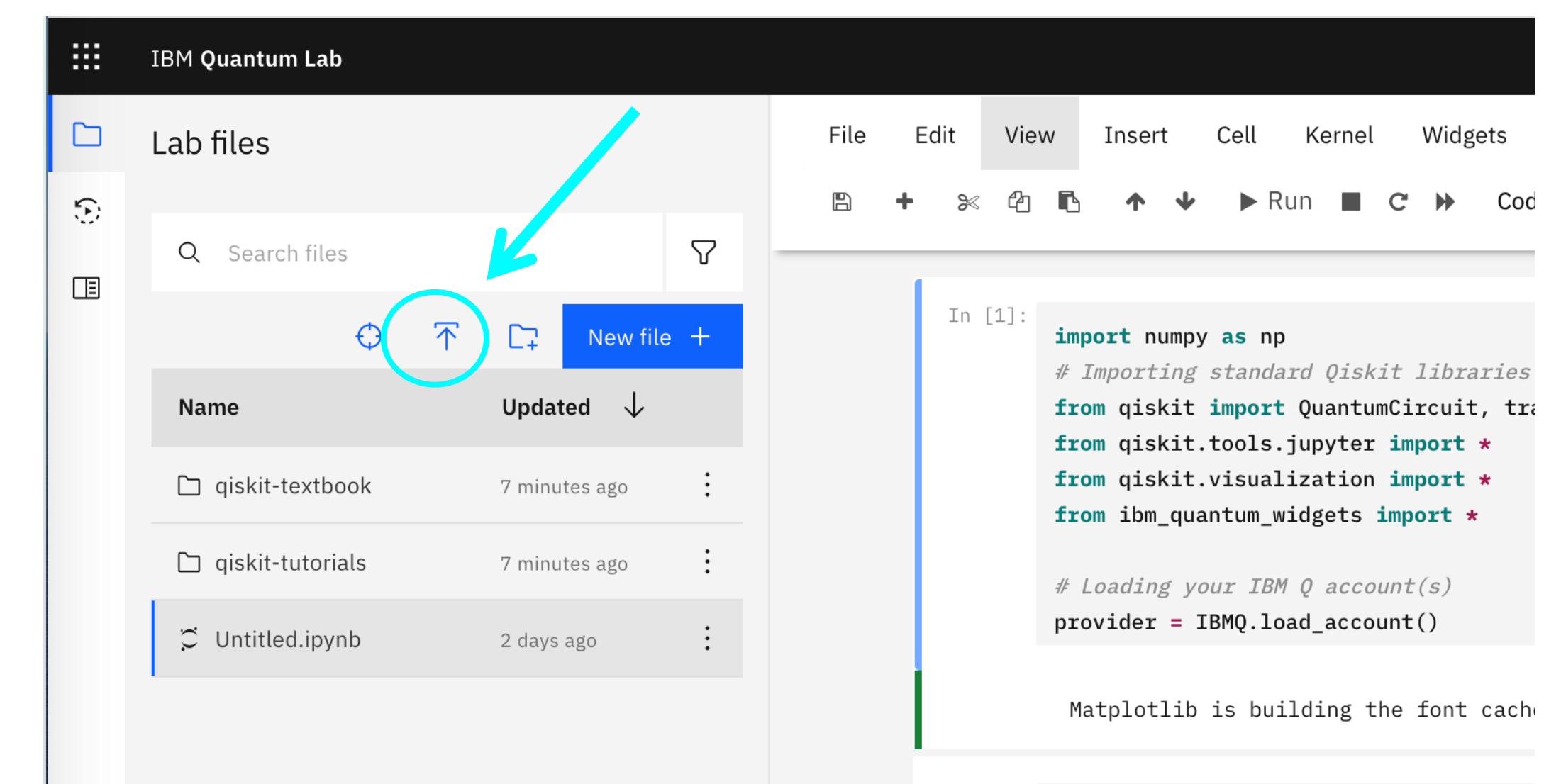
URL: <https://quantum-computing.ibm.com/>



(2) 青の右側「Launch Lab」をクリック。



(3) 左側 の「Upload file」から、ご自分のローカルに保存したハンズオンコンテンツ「day3\_notebooks/nature」フォルダーの下のファイルを全てアップロードします。



(4) ファイル名「20220803\_nature.ipynb」をダブルクリックして開きます。

# HIVの新しい治療薬を設計するための量子化学シミュレーション

(Quantum Challenge Africa Lab3から)

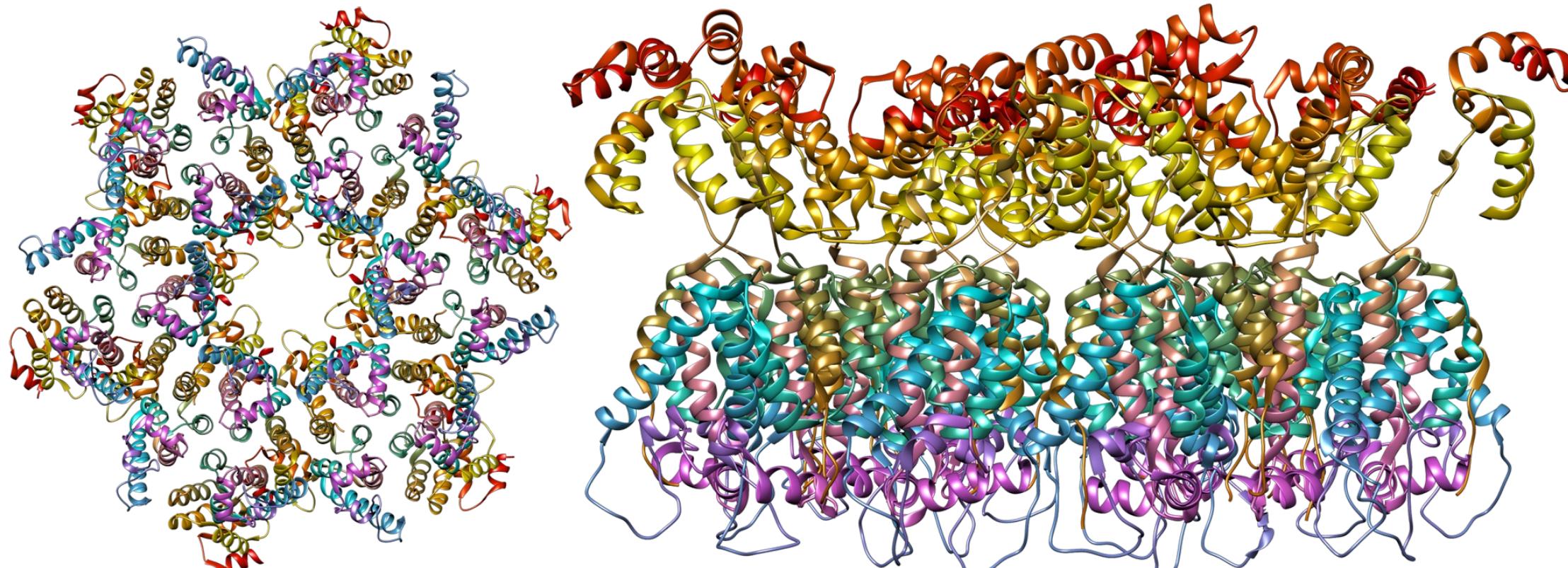
## 概要

HIV（ヒト免疫不全ウイルス、Human Immunodeficiency Virus）は、人の免疫細胞に感染して破壊し、最終的に後天性免疫不全症候群（AIDS）を発症させるウイルス。

増えていく過程で、ウイルスの組み立てに必要なタンパク質を、感染した細胞に作らせますが、大きなタンパク質のままではウイルスが組み立てられません。

HIVに特有の「**プロテアーゼ**」という酵素によって、そのタンパク質が適当な大きさに切断され、増殖されていきます。

**抗レトロウイルス薬**は、プロテアーゼに結合してブロックする薬剤です。



## シミュレーションの対象となる分子

- **プロテアーゼ**（ウイルスタンパクをハサミでカットしてウイルスを増やす悪者分子）
- **抗レトロウイルス剤**（プロテアーゼにくつづいてハサミの能力をブロックする薬）

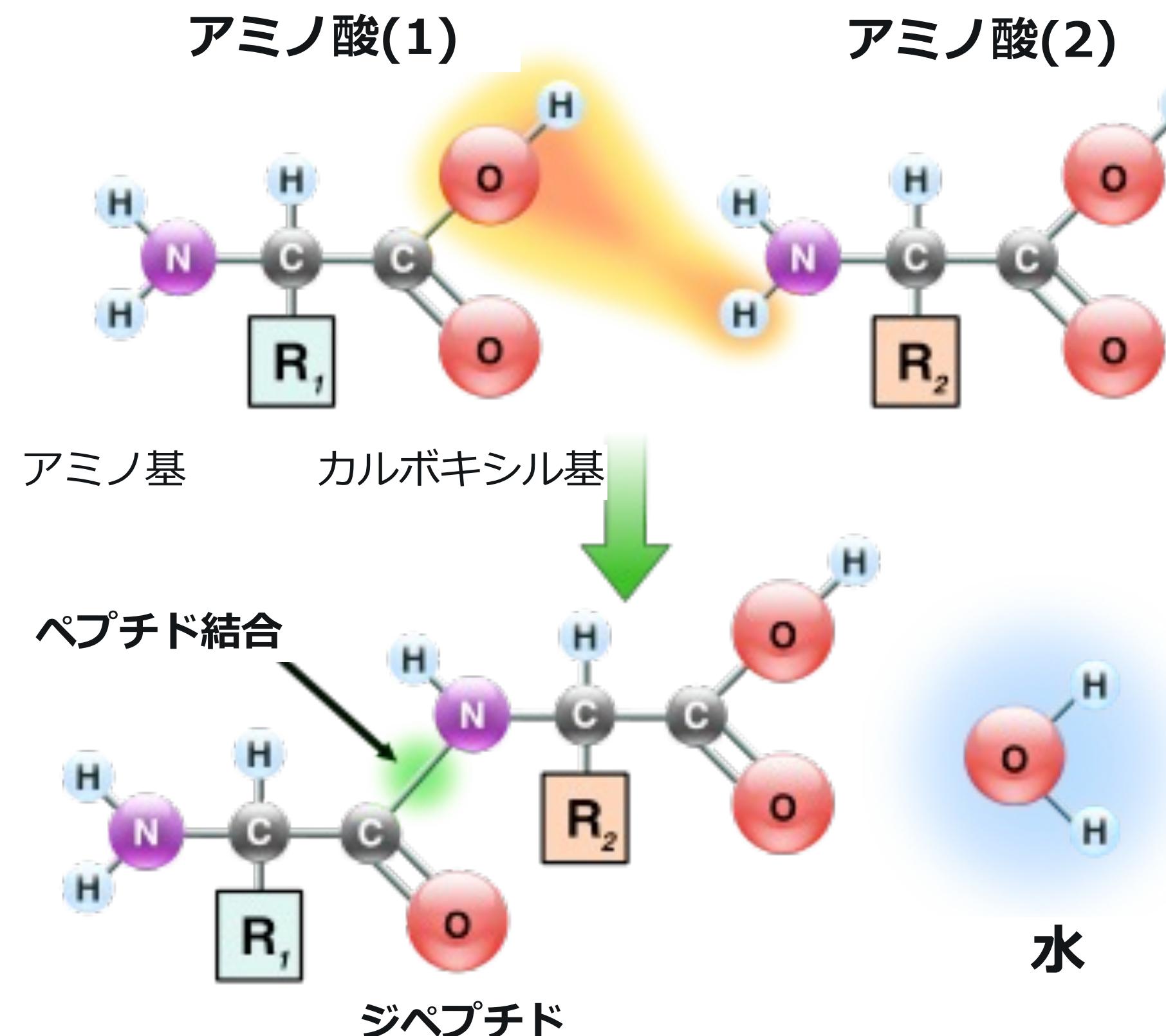
プロテアーゼが抗レトロウイルスによってブロックされると、ウイルスは自分自身のコピーを増やせなくなる。

**課題) VQEを使って、抗レトロウイルス剤がプロテアーゼと結合するかどうか調べる**  
(結合した状態 = 全体の基底エネルギーが低い状態)

# HIVチャレンジ：薬の効果を調べる

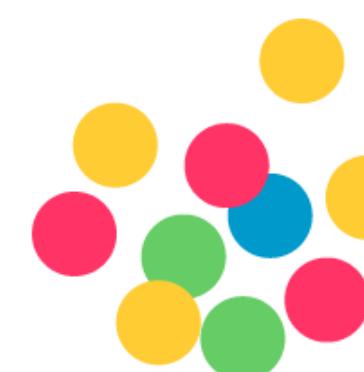
## 本物のプロテアーゼ（ハサミとなる悪者分子）

- 約100個のアミノ酸からなる2本のペプチド鎖で構成される
- 隣り合うアミノ酸同士はペプチド結合で結ばれている

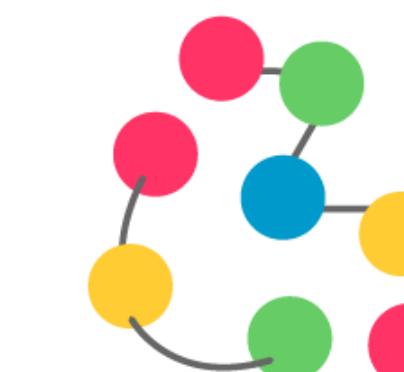


ご参考)

- タンパク質：アミノ酸が大量にペプチド結合されたもの
- ペプチド：アミノ酸が複数ペプチド結合されたもの
- ジペプチド：2つのアミノ酸が1つのペプチド結合した分子



アミノ酸



ペプチド



タンパク質

<https://health.kirin.co.jp/bl/feature/index.html>

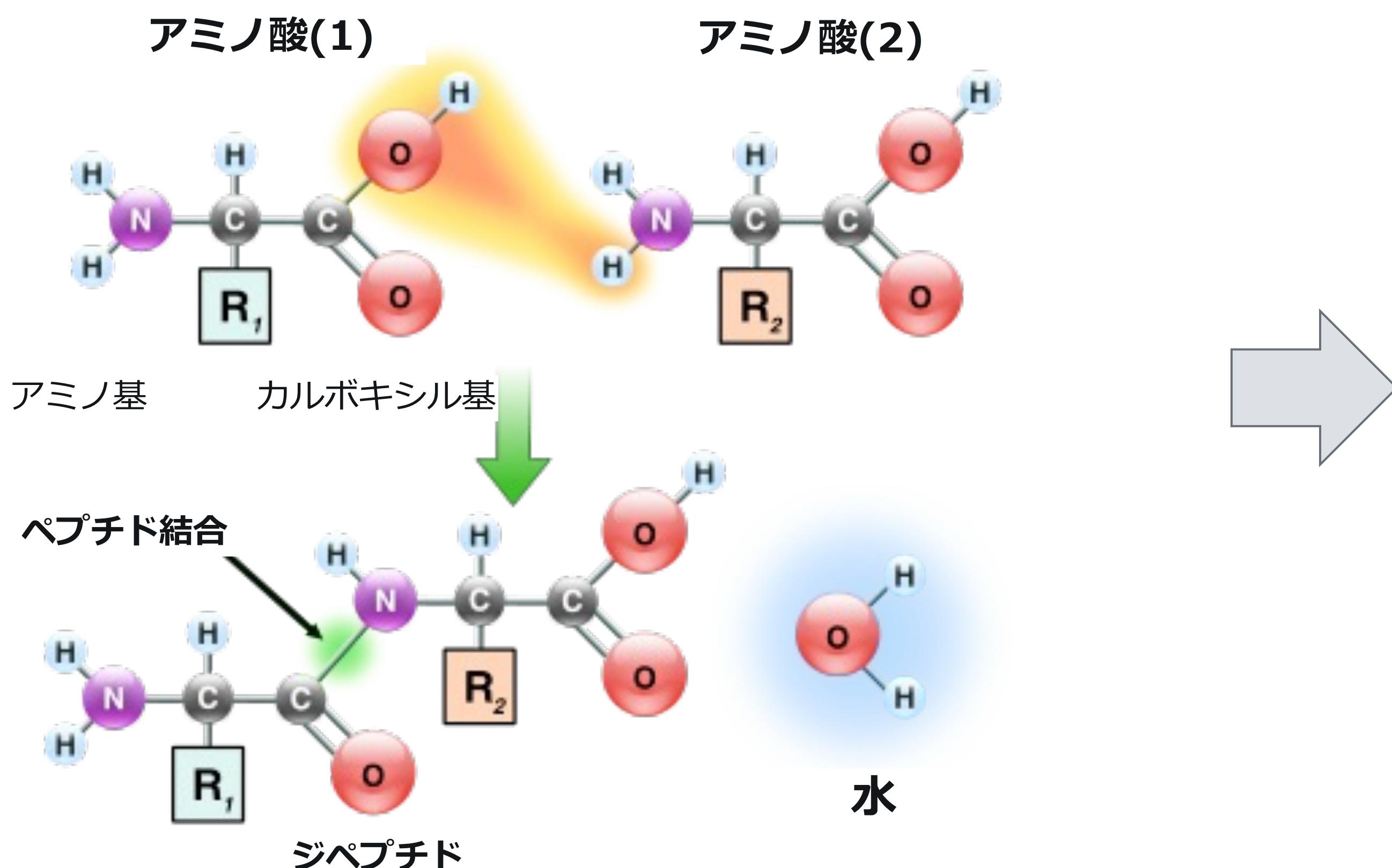
## ペプチド結合に注目：

ペプチド結合は、一般的なタンパク質の折り畳みや、HIVプロテアーゼの切断能力など、タンパク質の化学的性質を決定する最も重要な要素の1つ。

# HIVチャレンジ：薬の効果を調べる

## 本物のプロテアーゼ（ハサミとなる悪者分子）

- 約100個のアミノ酸からなる2本のペプチド鎖で構成される
- 隣り合うアミノ酸同士はペプチド結合で結ばれている

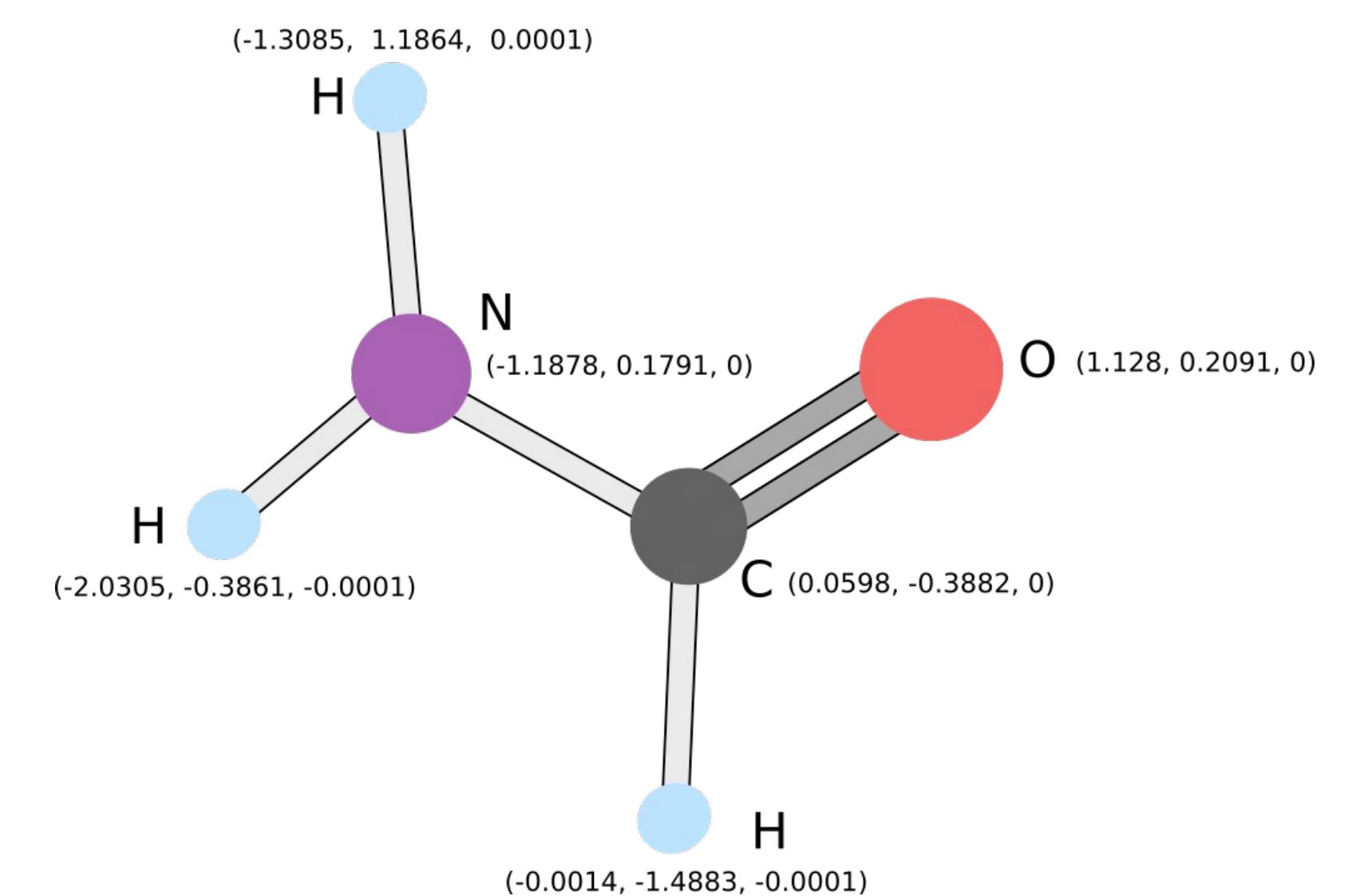


## ペプチド結合に注目：

ペプチド結合は、一般的なタンパク質の折り畳みや、HIVプロテアーゼの切断能力など、タンパク質の化学的性質を決定する最も重要な要素の1つ。

## プロテアーゼのトイモデル

- ペプチド結合のO=C-NにH原子を追加した HCONH<sub>2</sub> (ホルムアミド)。
- 実際にイオン性の溶媒でもあるので、イオン結合を「切る」ことができる物質。

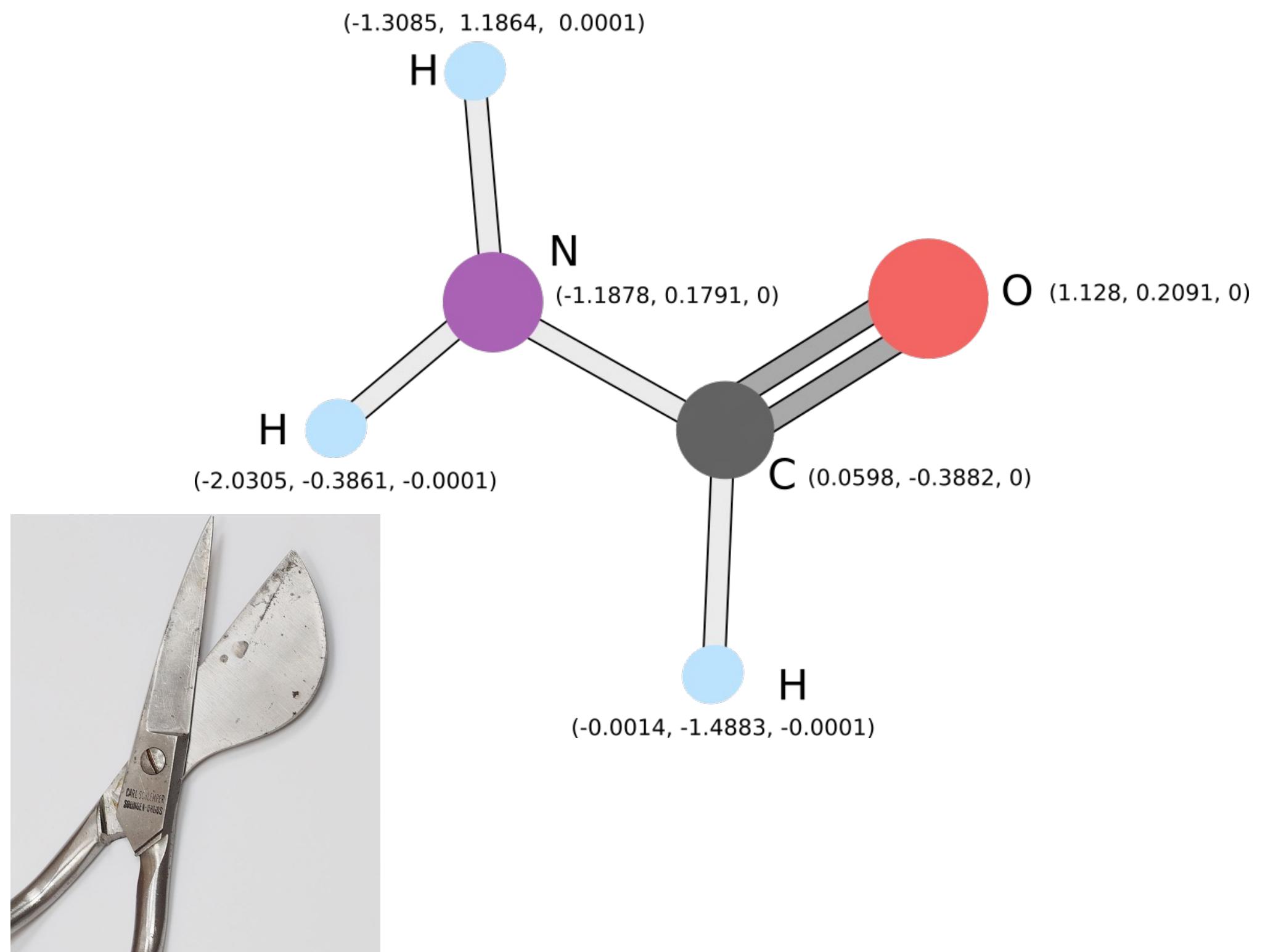


(座標はアメリカ国立医学図書館より)

# HIVチャレンジ：薬の効果を調べる

プロテアーゼ（ハサミとなる悪者分子）のトイモデル

- ・ ペプチド結合のO=C-NにH原子を追加したHCONH<sub>2</sub>（ホルムアミド）。
- ・ 実際にイオン性の溶媒でもあるので、イオン結合を「切る」ことができる物質。



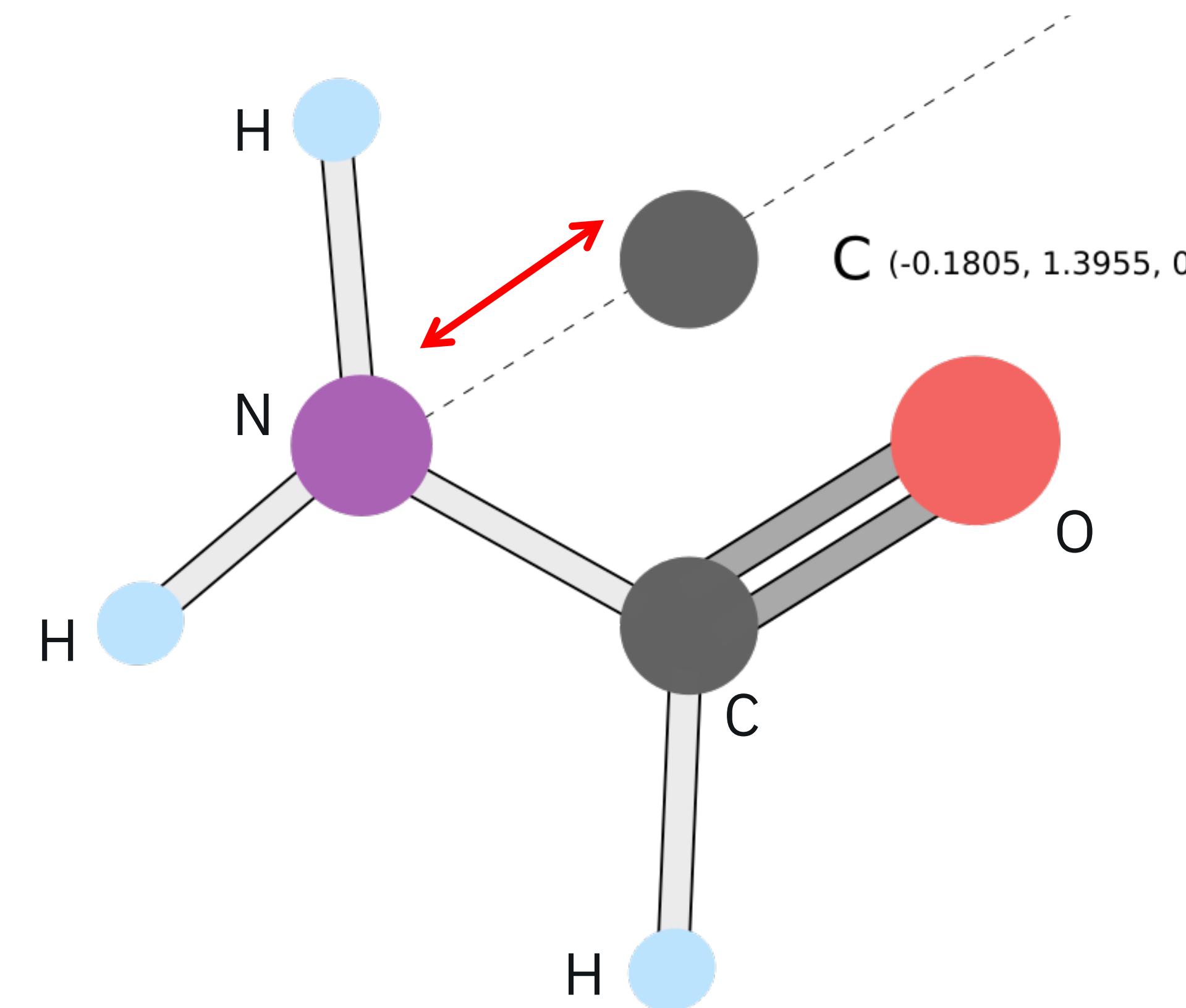
抗レトロウイルス（薬）のトイモデル

- ・ プロテアーゼと結合して、その切断機構を阻害する分子。
- ・ 1個の炭素原子(C)を抗レトロウイルス分子の代用とする。



# HIVチャレンジ：薬の効果を調べる

抗レトロウイルス剤（薬）が、プロテアーゼ（ハサミとなる悪者分子）の「刃」の間に窒素原子（N）に接近し、それが「刺さった」となれば成功とみなし、HIVの複製活動を妨害することに成功したことになります。



課題) VQEを使って、抗レトロウイルス剤がプロテアーゼと結合するかどうか調べる  
(結合した状態 = 全体の基底エネルギーが低い状態)