

量子コンピューターを用いた境界要素法の開発 — 計算力学への応用を目指して —

1. 背景

令和4年に内閣府が掲げた量子未来社会ビジョン¹⁾では、量子コンピューターを活用すべき分野の1つとしてHPC(High Performance Computing)との連携を挙げている。そのため、量子コンピューターを用いて工学の様々な問題を解決するための数値解析手法を開発することは重要である。

現在の通常の計算機(古典コンピューター)を利用し、HPC(High Performance Computing)を実施する代表的な学問分野は「計算力学(Computational Mechanics)」と呼ばれている。計算力学とは、解析対象となる場が満足する支配方程式や運動方程式等を、時間や空間等に関して離散化し、初期条件や境界条件と共に、様々な物理量を追跡し、工学の諸問題を解き明かすための学問である。現代では、構造設計、気象予測、津波シミュレーション等、様々な場面で計算力学は利用されており、既に社会で必須となっている。

このような計算力学分野においても、近年、量子コンピューターに対する注目が集まっている。図1は国際学術論文のデータベースサイトであるElsevier社のScience Directに掲載された「量子コンピューター」、「シミュレーション」のワード検索でヒットした論文数の推移を示している。図1より、近年急激に掲載論文が増加しており、注目の高さが伺える。もし、計算力学分野においても量子コンピューターを活用することができれば、これまで解くことができなかった工学の諸問題を解くことができる可能性がある。そのため、量子コンピューターの実用化に先立ち、量子コンピューターを用いて解析可能な計算力学手法について検討しておくことは重要であろう。

2. 目的

以上の背景の下、本プロジェクトでは、量子コンピューターを用いた境界要素法の開発を実施する。境界要素法は、有限要素法と並び、計算力学分野の有力な数値解析手法の1つとして知られている。ただし、本プロジェクトは量子コンピューターを用いた境界要素法の最初の検討となるため、対象とする問題を、ラプラス方程式(定常熱伝導問題)、Helmholtz方程式(スカラー波動問題)に限定する。開発対象はゲート式量子コンピューターである。



図1 : Science Directに掲載された「量子コンピューター」、「シミュレーション」のワード検索でヒットする論文数の推移。

3. ソフトウェア開発内容

本プロジェクトでは、量子アルゴリズムに対する基本的知識の修得後、具体的に2次元ラプラス方程式、Helmholtz方程式を解析した。ただし、量子コンピューターの実機利用については、簡単な動作確認、基礎的なアルゴリズムの動作確認に留め、ここではQulacs, Qiskitといった量子シミュレーターを利用した。

一般に、境界要素法を用いた物理シミュレーションの解析ステップは、①形状データの入力②代数方程式における係数行列の作成③境界条件に従った係数行列のアレンジと代数方程式の右辺作成④代数方程式の計算⑤結果の出力に分けられる。ただし、これら全てを量子コンピューター上で実現することは、現状では難しい。そこで本プロジェクトでは、上記のステップ④を量子コンピューターで解くことを行った。すなわち、古典コンピューター上で計算した境界要素法の係数行列を、量子コンピューターに適切にエンコーディングできる前提で古典・量子ハイブリッド計算を行った。

本プロジェクトで開発したソフトウェアによる解析例を示す。解析モデルは、図2に示すように、左下を原点とした長さ1の矩形領域であり、上下の境界で断熱条件が規定され、左右の境界で温度場が規定された問題である。

解析結果の一例を表1に示す。表1は、図2の問題に対して、古典コンピューター(classical), HHLアルゴリズムを用いた古典・量子ハイブリッド計算で得られた結果(quantum)を示している。また、両者の相対誤差も示してあり、上列から順番に要素①から要素⑧に対する結果を示してある。なお、各要素において、温度場、または、そのフラックスのいずれかが境界条件として与えられるため、境界要素法で求まる方の対応する物理量を classical 列に代表して示してある。与えられた問題は、図2の青点線の上下で対称なため、得られた数値解は青点線の上下で対称となっていること

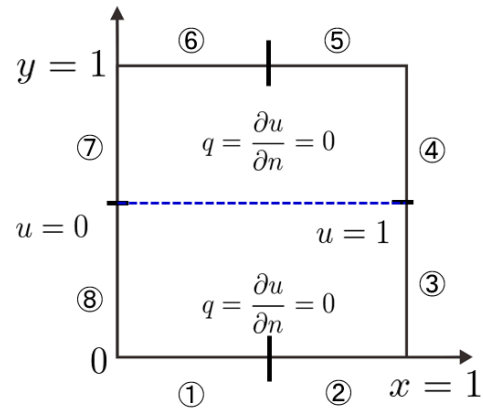


図2：2次元ラプラス方程式に対する境界要素法解析モデル。

表1：図2の境界要素①-⑧における古典コンピューター、古典・量子ハイブリッド計算結果の比較。

classical	quantum	相対誤差%
0.241415 (u)	0.243607	0.908161
0.758588(u)	0.762996	0.58113
1.05863(q)	1.05343	0.491142
1.05863(q)	1.053	0.491142
0.758588(u)	0.762996	0.58113
0.241415(u)	0.243607	0.908161
-1.05859(q)	-1.04956	0.853568
-1.05859(q)	-1.04956	0.853568

がわかる。また、古典コンピューターとの相対誤差は、最大で1パーセント程度となっていることがわかる。

最後に、HHL アルゴリズムで最終的に得られた解ベクトルを使って、古典コンピューターにより境界積分方程式を解くことで得られた解析領域全体の定常温度場をプロットした結果を図3に示す。この問題は解析解が存在し、左-右境界に向かって温度場は線形に変化するはずである。図3より、得られた結果は線形に変化していることがわかる。

なお、表1、図3の結果は、図2に示すように、空間に対して8要素で分割したものである。そのため、将来的に量子コンピューターで解くべきサイズの問題では決してないが、境界要素法における係数行列や右辺ベクトルを正しく量子コンピューターにエンコーディングできれば、適切な数値解を得られることが確かめられた。

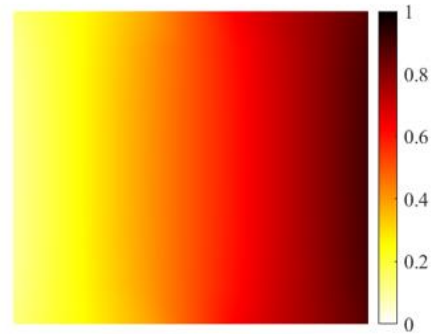


図3：図2の解析モデル内部の定常温度場。

4. 新規性・優位性

量子コンピューターを有限要素法に活かすことを試みた研究は、近年いくつか報告例がある。例えば Mielke ら (A. Mielke and T. Ricken: Finite element analysis of a 2D cantilever on a noisy intermediate-scale quantum computer, Proceedings in Applied Mathematics & Mechanics, (2021))は、片持ちばりの静的曲げ問題を解いている。解析モデルは、基本的な問題であるものの、本プロジェクト同様、ゲート式量子コンピューターを対象とした貴重な報告である。しかしながら、境界要素法を対象とした報告例は、プロジェクト代表者の知る限り例はない。そのため、本プロジェクトの新規性は十分である。

元来、有限要素法と境界要素法は、両者それぞれに特徴的な長所を持つ。特に、境界要素法は、無限遠を含む問題や、波動問題に有効な手法として知られている。そのため、本プロジェクトを足掛かりに、今後、量子コンピューターを用いた境界要素法が発展すれば、有限要素法では解析が難しい、工学の様々な問題への適用が進むと考えられる。事実、現在の古典コンピューターを用いた場合でも、弾性波動解析やその非破壊評価への応用等、境界要素法の長所を活かした数多くの報告がなされており、そのような解析対象に、本プロジェクトは優位性を持つと考えられる。

また、境界要素法は、周波数領域、時間領域を問わず、大規模問題を解くことが苦手な解法として知られている。そのため、1990年から2000年代初頭は、高速多重極法や、H-matrix法といった境界要素法の高速化に関する研究が盛んに行われている。ただし、これらの工夫を施したとしても、境界要素法における代数方程式の計算オーダーは最大でも $O(N)$ 程度である。しかも、これら高速解法のアルゴリズムは、一般

的には難解である。また、波動問題においては、周波数に応じて、計算オーダーも低下する場合もある。これらの方法を、例えば反復法を用いて計算したとしても、反復法における適切な前処理を施さなければ、実計算時間は大幅に増加する。本プロジェクトでは、代数方程式の解法に、量子アルゴリズムを用いた代数方程式の解法として知られる HHL アルゴリズムや、LCU アルゴリズムを用いている。例えば、HHL アルゴリズムは、計算で要求する精度を ϵ とすると、およそ $\text{poly}(\log N, 1/\epsilon)$ 程度の計算オーダーで解ベクトルを求めることができる量子アルゴリズムである。そのため、計算オーダーは、古典コンピューターにおける計算オーダーを理論上、上回るため、この点も本プロジェクト内容の優位点と考えられる。

5. 期待されるユーザー価値と社会へのインパクト

本プロジェクト成果のユーザーは、工学における物理シミュレーションに興味がある研究者、技術者等を想定している。特に、差分法や有限要素法、境界要素法等を扱った経験があるか、物理現象を支配する支配偏微分方程式を数値的に解くことに興味がある研究者、技術者には特に有益と思われる。今後、図 1 で示したように、量子コンピューターを用いた計算力学に関する研究が国内外で増加すると思われる。本プロジェクトはその進展に資する内容となっている。計算力学分野における量子コンピューターの活用は始まったばかりであり、量子コンピューターの実機自体の利用、実機が利用できた場合の量子誤り訂正と解析精度の問題等、依然として解決すべき問題も多く残されている。しかしながら、量子コンピューターの活用は、これまでに解くことができないスケールの問題を効率的に解くことができる可能性を秘めている。現状の計算力学分野では、スーパーコンピューターを利用して、大規模な問題を解くことが行われているが、それでも解けないスケールの問題は数多い。そのため、本プロジェクトを足掛かりに、将来、社会を一変させるような超大規模シミュレーションを実用的な計算時間の範囲内で解くことができるようになる可能性がある。

計算力学分野における量子コンピューターの活用を進めるには、広く利用されることが重要になる。上記に記載した本プロジェクト成果の想定するユーザーをはじめ、多くの方に計算力学分野における量子コンピューターの活用に興味を持って頂き、本報告書を参考にして頂くことが重要と考える。その暁には、3次元の超大規模弾性波動解析への道も拓け、超音波、地震、フルスケール構造解析等、量子コンピューターを活用した前人未到のシミュレーションに繋がる。本プロジェクトはその第一歩であり、社会へ与えるインパクトも十分であると考える。

6. 氏名（所属）

齋藤 隆泰（群馬大学大学院理工学府 環境創生部門）

（参考）関連 URL

<https://civil.ees.st.gunma-u.ac.jp/~applmech/index.html>（プロジェクト代表者 HP）