

第1回Quantum CAE研究会

ボルツマン方程式求解の量子アルゴリズム： 宇宙大規模構造形成シミュレーションを例に

(based on KM et al., Phys. Rev. Research 6, 013200 (2024))

2024/05/09

宮本幸一

大阪大学 量子情報・量子生命研究センター (QIQB)

共同研究者：山崎壮一郎(東大)、内田経夫(東大)、藤澤幸太郎(東京工科大)、
吉田直紀(東大)

自己紹介: 宮本幸一

- 2013/03: 東京大学大学院理学系研究科物理学専攻修了(研究テーマ: 宇宙論)
- 2013/04 – 2017/12: 三菱UFJモルガン・スタンレー証券株式会社
 - 金融派生商品(デリバティブ)の価格評価のための数理モデル開発
- 2018/01 – 2020/12: みずほ第一フィナンシャルテクノロジー株式会社(金融コンサル)
 - 信用リスク評価のための機械学習モデル開発
 - 量子コンピューティングの金融への応用について研究をスタート(2019年～)
- 2021/01 – 現在: 大阪大学QIQB 特任准教授
 - 量子アルゴリズムの産業ならびに科学の諸分野への応用
 - ✓ ファイナンス、バイオインフォマティクス、宇宙論、...

1. 量子コンピュータで微分方程式を解く

量子コンピュータが速いのは巨大な行列計算が効率的にできるから

■ n 量子ビット系の状態: $2^n (= N)$ 次元の状態ベクトルによって記述

- 量子ビット: 0 or 1をとる
- n 量子ビット系のビット列: $0\dots 0 = 0, 0\dots 1 = 1, \dots, 1\dots 1 = N - 1$ の N 通り
- 一般の状態(重ね合わせ状態): ノルム1の複素 N 次元ベクトル
 $|\phi\rangle = \sum_{i=0}^{N-1} a_i |i\rangle = (a_0, \dots, a_{N-1})$ ($|a_i|^2$: 測定して i を得る確率)

■ 量子回路=状態ベクトルに対するユニタリ変換 ($N \times N$ ユニタリ行列)

$$\begin{pmatrix} a_0 \\ \vdots \\ a_{N-1} \end{pmatrix} \xrightarrow{\quad} \boxed{U} \xrightarrow{\quad} \begin{pmatrix} a'_0 \\ \vdots \\ a'_{N-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{0,0} & \cdots & u_{0,N-1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{N-1,0} & \cdots & u_{N-1,N-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ \vdots \\ a_{N-1} \end{pmatrix}$$

- 指数関数的に大きなサイズの線形代数計算が、量子回路を1回実行するだけでできる
- ただし、任意のユニタリが効率的に回路実装できるわけではない
(一般の $N \times N$ ユニタリを実装するには $O(N)$ 個の量子ゲートが必要)
- いくつかのタイプの行列は効率的に実装可能 → 所望の問題をそれにどう落とし込む？

微分方程式を解くのも行列計算

- 常微分方程式 $\frac{d}{dt}\vec{x}(t) = A\vec{x}(t)$ ($\vec{x} \in \mathbb{C}^N, A \in \mathbb{C}^{N \times N}$) を初期値 $\vec{x}(0)$ のもと解く
 - ⇒ 形式解 $\vec{x}(t) = e^{At}\vec{x}(0)$
 - 行列のexponential e^{At} が得られれば、解 $\vec{x}(t)$ も得られる
- 特に、 $\frac{d}{dt}|\vec{x}(t)\rangle = -iH|\vec{x}(t)\rangle$ (H : エルミート) の形の場合、この微分方程式を Schrödinger equation、 H を Hamiltonian、 $|\vec{x}(t)\rangle = e^{-iHt}|\vec{x}(0)\rangle$ を求めることを Hamiltonian simulation と言う
- しかし、 A のサイズ N が指数関数的に大きいと、 e^{At} を古典コンピュータで求めるのは無理
- 量子コンピュータなら(一定の条件のもと)できる!

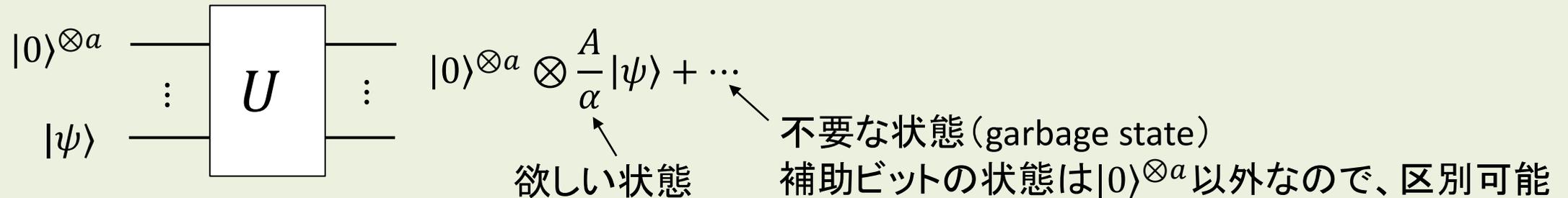
Block encoding

■ 非ユニタリ行列 A を、ユニタリ行列の”左上ブロック”として実装するテクニック

➤ $\frac{1}{\alpha} \begin{pmatrix} A & * \\ * & * \end{pmatrix}$ がユニタリなら、量子回路として実装可能

✓ α : A/α の各行・各列のノルムを1以下にするためのファクター

➤ A が非ユニタリなら、補助量子ビットを何個か加えて実現



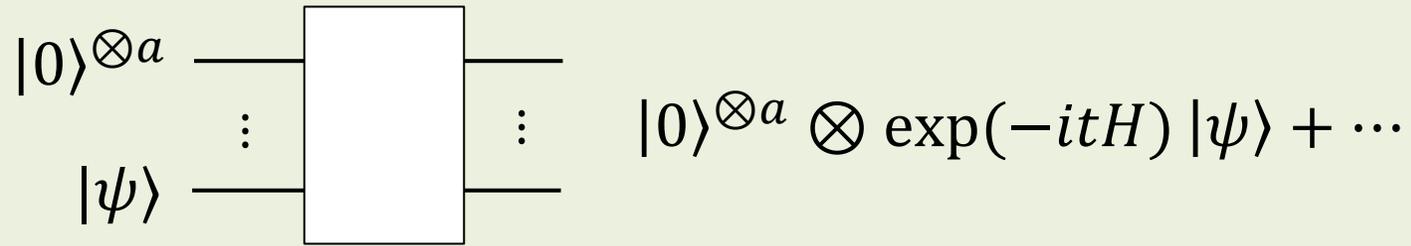
■ 疎行列 A の block-encoding は効率的に実装可能†

➤ 成分を計算する回路 $O_{\text{ent}}^A: |i\rangle|j\rangle|0\rangle \rightarrow |i\rangle|j\rangle|A_{ij}\rangle$ があれば、 O_{ent}^A を $O(1)$ 回使って作れる

† Gilyen et al., STOC 2019, pp. 193-204

Block encoding-based Hamiltonian simulation

- エルミート行列 H の block-encoding U_H が与えられれば、 U_H を使って Hamiltonian simulation の演算子 $\exp(-itH)$ の block-encoding が作れる



- quantum singular value transformation (QSVT)[†] に基づく
- U_H の呼出回数は H のサイズに依らない
 U_H が成分計算回路 O_{ent}^H から作られていれば、 O_{ent}^H の呼出回数もサイズに依らない
 - ✓ H が s -sparse[‡] なら、 O_{ent}^H の呼出回数は $\tilde{O}(s \|H\|_{\max} t)$ [¶]

[†] Gilyen et al., STOC 2019, pp. 193-204 [‡] 各行・各列の0でない成分の個数が高々 s 個

[¶] $\|H\|_{\max}$: H の成分の絶対値の最大値。 $\tilde{O}(\cdot)$: ランダウの記号 $O(\cdot)$ から対数的ファクターを除いたもの。

量子振幅推定 (Quantum amplitude estimation; QAE)

- Hamiltonian simulationの他に、今回の提案手法でコアとなる量子アルゴリズム
- 重ね合わせ状態 $|\Psi\rangle$ の中のターゲット基底状態 $|\psi\rangle$ の振幅を推定†
 - $|\Psi\rangle$ を生成する量子回路 $A|0\rangle = a|\psi\rangle + \sqrt{1 - |a|^2}|\psi'\rangle|0\rangle$ が与えられたとき、 $|a|^2$ の精度 ϵ の近似値を出力するアルゴリズムが存在し、
その中で A が $O(1/\epsilon)$ 回呼ばれる
- 微分方程式の解を振幅に埋め込んだ状態 $|\vec{x}(t)\rangle = \frac{1}{\|\vec{x}(t)\|} \sum_{i=0}^{N-1} x_i(t)|i\rangle$ から
“興味のある量”を数値として読み出すのに利用(後述)

† Brassard et al., Contemporary Mathematics, 305, 53 (2002)

2. ニュートリノを含めた宇宙大規模構造形成の Vlasovシミュレーション

ニュートリノ

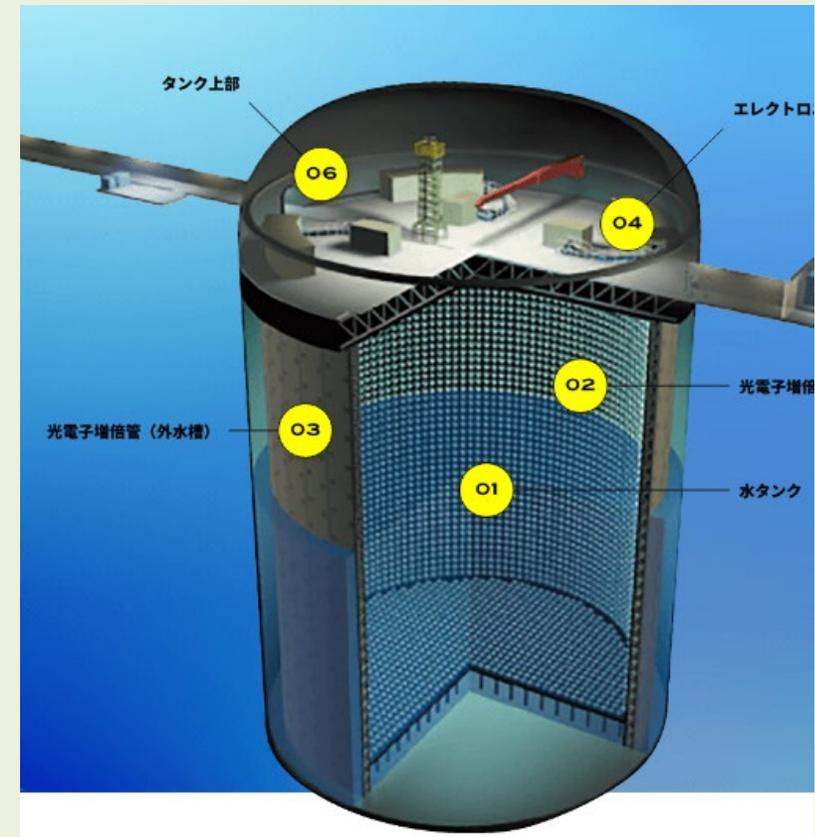
- 素粒子の一種で、他の素粒子と“弱い相互作用”しかせず、検出が難しい
- スーパーカミオカンデ等の実験施設で検出され、性質が調べられている

素粒子標準模型：
現在確立されている素粒子のモデル

物質の三代 (フェルミ粒子)			相互作用 / 力の伝搬 (ボース粒子)	
I	II	III		
質量 電荷 スピン =2.2 MeV/c ² 2/3 1/2 u アップ	=1.28 GeV/c ² 2/3 1/2 c チャーム	=173.1 GeV/c ² 2/3 1/2 t トップ	0 0 1 g グルーオン	=124.97 GeV/c ² 0 0 0 H ヒッグス粒子
=4.7 MeV/c ² -1/3 1/2 d ダウン	=96 MeV/c ² -1/3 1/2 s ストレンジ	=4.18 GeV/c ² -1/3 1/2 b ボトム	0 0 1 γ 光子	スカラ粒子
=0.511 MeV/c ² -1 1/2 e 電子	=105.66 MeV/c ² -1 1/2 μ ミュー粒子	=1.7768 GeV/c ² -1 1/2 τ タウ粒子	=91.19 GeV/c ² 0 1 Z Zボソン	
<1.0 eV/c ² 0 1/2 ν _e 電子ニュートリノ	<0.17 MeV/c ² 0 1/2 ν _μ ミューニュートリノ	<18.2 MeV/c ² 0 1/2 ν _τ タウニュートリノ	=80.433 GeV/c ² ±1 1 W Wボソン	

出所: <https://ja.wikipedia.org/wiki/%E6%A8%99%E6%BA%96%E6%A8%A1%E5%9E%8B>

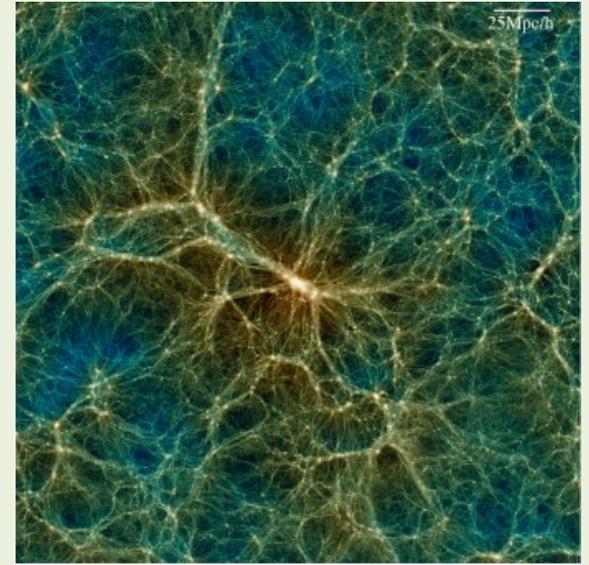
スーパーカミオカンデ



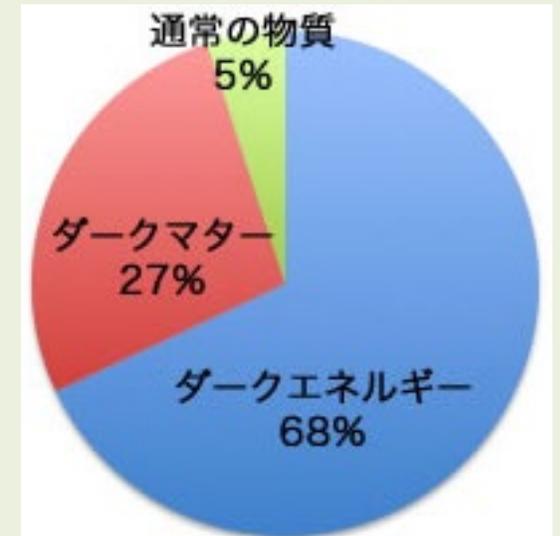
出所: スーパーカミオカンデ公式HP
<https://www-sk.icrr.u-tokyo.ac.jp/sk/about/detector/>

宇宙の大規模構造 (Large-scale structure of the Universe; LSS)

- LSS: 宇宙の観測実験で探索できる最大スケールの物質分布の構造
 - 初期密度揺らぎを種として重力不安定性により形成
- 宇宙の”物質”のうち、多くは正体不明の暗黒物質(ダークマター)
 - 多くのモデルで、暗黒物質は、大きな質量を持ち(例: $m_{\text{CDM}} \sim \text{TeV}^+$)、速度は非相対論的($v_{\text{CDM}} \ll \text{光速 } c$)
→ “cold dark matter (CDM)” と呼ばれる



出所: Ishiyama et al, MNRAS 506, 4210 (2021)



出所: <https://www-sk.icrr.u-tokyo.ac.jp/xmass/darkmatter/index.html>

† eV : 質量の単位 ($1\text{eV} \approx 1.8 \times 10^{-33}\text{g}$)。電子は0.51MeV。

質量を持つニュートリノ

- ニュートリノは標準模型では質量ゼロだが、近年の実験により質量を持つと判明
 - 標準模型を超える素粒子物理が存在する証拠
 - $m_{\nu, \text{tot}} = \sum_{i=1}^3 m_{\nu_i} \gtrsim 0.05\text{eV}^\dagger$
- ニュートリノは暗黒物質の一部としてLSS形成に影響を及ぼす
 - CDMよりずっと軽く ($m_\nu \ll m_{\text{CDM}}$)、速度は大きい ($v_{\text{CDM}} \ll v_\nu$): “hot dark matter”
 - CDMとは異なる形でLSS形成に影響
 - ✓ CDMより重力ポテンシャルにトラップされにくい
- 逆に、ニュートリノを含めたLSS形成シミュレーションとLSS観測結果の突合により、ニュートリノ質量に制限を加えることができる
 - LSS形成シミュレーションは宇宙論・素粒子論双方にとって重要なタスク
 - しかし容易ではない...(次頁以降で説明)

† <https://pdg.lbl.gov/2023/reviews/rpp2023-rev-neutrino-mixing.pdf>

ニュートリノを含めたLSSシミュレーション: Vlasov simulation

■ CDMのシミュレーション: N体シミュレーションが一般的

- CDMを多数(N個)の質点と見做し、互いの重力の下で運動方程式を解く
- CDMの速度分散は小さいため、これでOK
- Vlasov simulationに比べれば大変でない

■ massive neutrinoのシミュレーション: Vlasov simulationが望ましい

- Vlasov 方程式(無衝突ボルツマン方程式)を解く

$$\frac{\partial}{\partial t} f(t, \vec{x}, \vec{v}) + \vec{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} f(t, \vec{x}, \vec{v}) + \vec{F}(t, \vec{x}) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{v}} f(t, \vec{x}, \vec{v}) = 0$$

- ✓ 位相空間(位置 \vec{x} + 速度 \vec{v} の6次元空間)中の粒子の分布関数 f を記述
- ✓ \vec{F} : 粒子にかかる力(今の場合、CDM+ニュートリノが作る重力)
- ニュートリノの速度分散は大きいため、 \vec{v} に関する分布も精緻に求めながら時間発展を追うのが望ましい

Vlasov simulationは容易でない

- Vlasov simulation = (6+1)次元の偏微分方程式を解く("1":時間)
→ 計算時間・メモリ両面で容易でない

- 例:有限差分法

- 空間にグリッド点を配置、 f の微分を差分で近似

$$\frac{\partial f}{\partial x}(x_i, v_j) \simeq \frac{f(x_{i+1}, v_j) - f(x_{i-1}, v_j)}{2\Delta_x}, \quad \frac{\partial f}{\partial v}(x_i, v_j) \simeq \frac{f(x_i, v_{j+1}) - f(x_i, v_{j-1})}{2\Delta_v}$$

- 偏微分方程式を常微分方程式に変換し、これを解く

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} + \vec{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{v}} = 0 \rightarrow \frac{d}{dt} \vec{f} = A \vec{f}$$

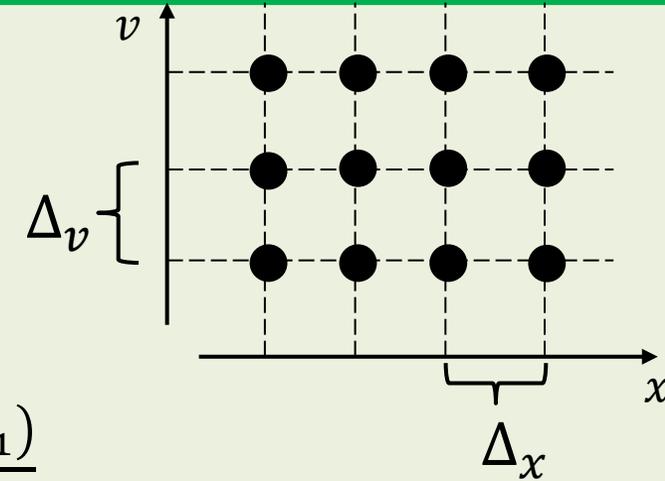
($\vec{f} = (f(t, \vec{x}_1, \vec{v}_1), \dots, f(t, \vec{x}_{n_{\text{gr}}^3}, \vec{v}_{n_{\text{gr}}^3}))$): グリッド上の f を並べたもの、行列 A :後述)

- 位相空間各次元につき n_{gr} 個のグリッド点を取るとすると、グリッド点の総数は n_{gr}^6 個

→ \vec{f} は n_{gr}^6 次元、 $O(n_{\text{gr}}^6)$ のメモリコスト

- 時間方向のグリッド数を n_t とすると、計算量は $O(n_{\text{gr}}^6 n_t)$

- 量子高速化を検討したい!



3. ニュートリノを含んだ宇宙大規模構造形成の Vlasovシミュレーションの量子アルゴリズム

線形化したVlasov方程式の有限差分近似

- 有限差分近似でVlasov方程式を常微分方程式に

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} + \vec{F}_{\text{CDM}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{v}} = 0 \rightarrow \frac{d}{dt} \vec{f} = A \vec{f}$$

$$A = A_x + A_y + A_z + A_{v_x} + A_{v_y} + A_z: n_{gr}^6 \times n_{gr}^6 \text{ 行列}$$

$$A_x = - \begin{pmatrix} 0 & 1/2\Delta_x & & & -1/2\Delta_x & \\ -1/2\Delta_x & 0 & 1/2\Delta_x & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & -1/2\Delta_x & 0 & 1/2\Delta_x & \\ 1/2\Delta_x & & & -1/2\Delta_x & 0 & \end{pmatrix} \otimes \text{diag}(v_{x,1}, \dots, v_{x,n_{gr}})$$

$$A_{v_x} = -\text{diag}(F_{\text{CDM},x}(t, x_1), \dots, F_{\text{CDM},x}(t, x_{n_{gr}})) \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1/2\Delta_v & & & & \\ -1/2\Delta_v & 0 & 1/2\Delta_v & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & -1/2\Delta_v & 0 & 1/2\Delta_v & \\ & & & -1/2\Delta_v & 0 & \\ & & & & -1/2\Delta_v & 0 \end{pmatrix}$$

※ \vec{x} 方向には周期的境界条件、 \vec{v} 方向にはディリクレ境界条件($f = 0$)を課した

※ 簡単のため1次元の場合の A_x, A_{v_x} を書いたが、実際には3次元なので異なる

Hamiltonian simulationを適用し、解を埋め込んだ状態を生成

- A は反エルミート ($A = -A^\dagger$)なので、 $\frac{d}{dt}\vec{f} = A\vec{f}$ は Schrödinger equation

$$\rightarrow \frac{d}{dt} |\vec{f}(t)\rangle = -iH |\vec{f}(t)\rangle, \quad H = -iA$$

$$|\vec{f}(t)\rangle = \frac{1}{C} \sum_{i,j} f(t, \vec{x}_i, \vec{v}_j) |i\rangle|j\rangle \quad (C: \text{規格化定数})$$

- Hamiltonian simulationを適用し、初期条件 $|\vec{f}(0)\rangle$ から時間発展させた $|\vec{f}(T)\rangle$ が得られる

➤ H のblock-encodingが必要だが、これは構成可能

✓ H は疎 (nonzero成分は各行・各列高々12個)

✓ H の各成分はあらわに与えられており、回路 $O_{\text{ent}}^H: |i\rangle|j\rangle|0\rangle \rightarrow |i\rangle|j\rangle|H_{ij}\rangle$ を構成可能

– グリッド点でのCDM重力 $\vec{F}_{\text{CDM}}(t, \vec{x}_k)$ は事前計算するとして、

これを格納したQRAM[†] ($O_{F_{\text{CDM},x}}: |k\rangle|0\rangle \rightarrow |k\rangle|F_{\text{CDM},x}(t, \vec{x}_k)\rangle$ 等) を使う

➤ 計算量 ($O_{F_{\text{CDM},x}}$ 等の呼出回数): $\tilde{O}(n_{\text{gr}} + n_t)$ ← 古典 ($O(n_{\text{gr}}^6 n_t)$) と比べ大幅な高速化

[†] quantum random access memory (QRAM):

インデックス i を指定し、それに紐づいた数値 c_i を量子レジスタ上に読み込むデバイス ($|i\rangle|0\rangle \rightarrow |i\rangle|c_i\rangle$)

理論的な実装提案はあるが、未だ存在せず (Giovannetti et al., PRL 100, 160501 (2008))

ニュートリノ密度揺らぎのパワースペクトル

- 上述の量子アルゴリズムで、Vlasov方程式の解を埋め込んだ量子状態が作れた
→ しかし、我々は量子状態が欲しいわけではない！
物理的に興味のある量を数字として知りたい！

- ここではニュートリノ密度揺らぎのパワースペクトルを得るのを目標にする

$$P(k) = |\tilde{\delta}(\vec{k})|^2 \dagger$$

$$\tilde{\delta}(\vec{k}) = \frac{1}{V} \int \delta(\vec{x}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} d\vec{x} \ddagger, \delta(\vec{x}) = \frac{\rho(\vec{x}) - \bar{\rho}}{\bar{\rho}}, \rho(\vec{x}) = \int f(T, \vec{x}, \vec{v}) d\vec{v}, \bar{\rho} = \frac{1}{V} \int \rho(\vec{x}) d\vec{x}$$

- ニュートリノ密度 $\rho(\vec{x})$ の揺らぎ $\delta(\vec{x})$ の波数 \vec{k} のフーリエ成分の大きさに相当
- 宇宙の観測実験の結果と突合可能
- 空間を離散化した今の状況では、グリッド点上の f の値から以下のように求まる[¶]

$$\tilde{\delta}(\vec{k}) \simeq \frac{1}{n_{\text{gr}}^3} \sum_i \delta_i e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}_i}, \delta_i = \frac{\rho_i - \bar{\rho}}{\bar{\rho}}, \rho_i = \sum_j f(T, \vec{x}_i, \vec{v}_j) \Delta_v^3, \bar{\rho} = \frac{1}{n_{\text{gr}}^3} \sum_i \rho_i$$

† 正確には、初期揺らぎのランダム性に関するアンサンブル平均をとる ‡ V : シミュレーション領域の体積

¶ Jing, ApJ 620, 559 (2005)

量子状態からニュートリノ密度揺らぎパワースペクトルを読み出す

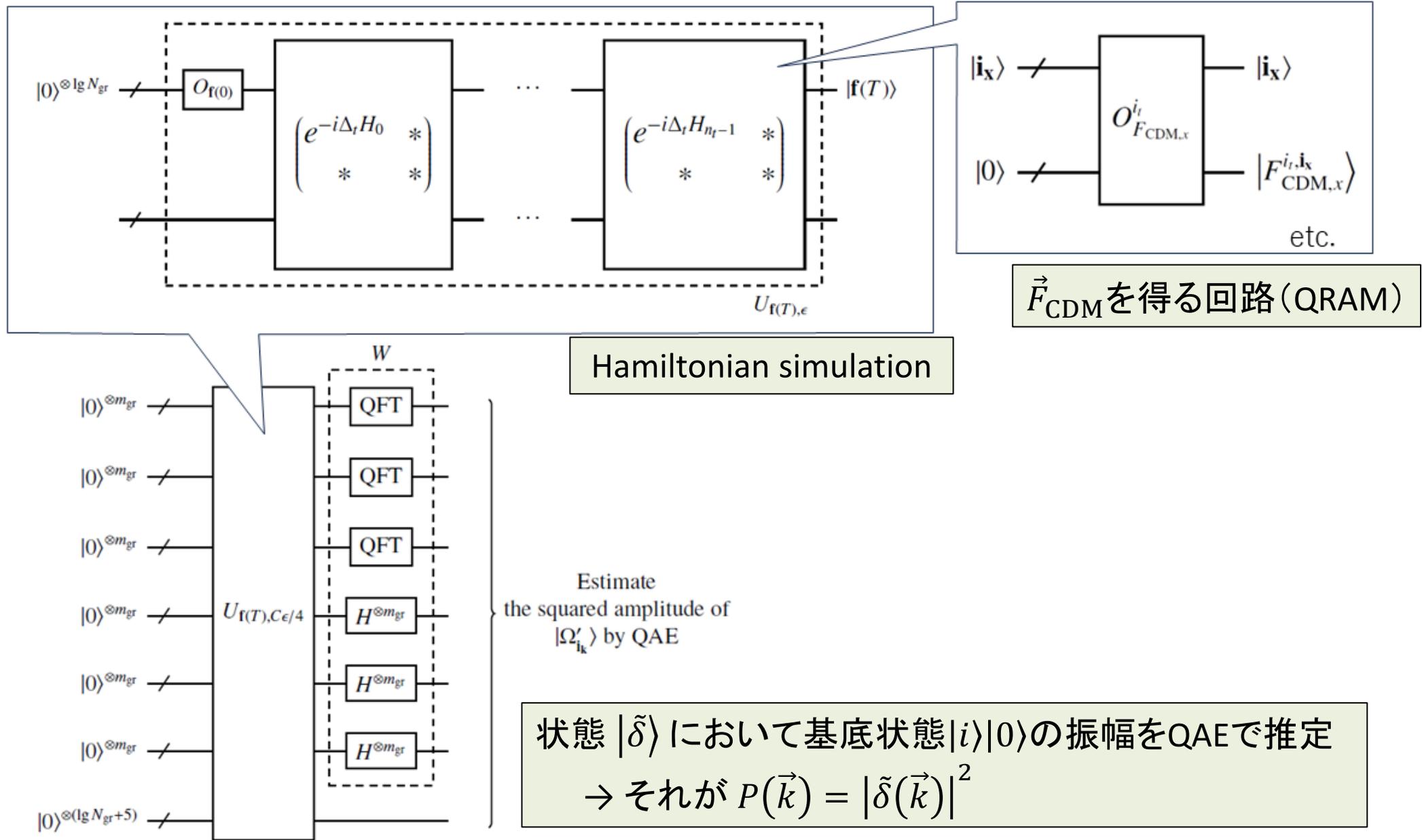
- $|\vec{f}(T)\rangle = \frac{1}{C} \sum_{i,j} f(T, \vec{x}_i, \vec{v}_j) |i\rangle|j\rangle$ に量子フーリエ変換[†] を作用させ、密度揺らぎのフーリエ成分が埋め込まれた量子状態 $|\tilde{\delta}\rangle := \frac{1}{C'} \sum_i \tilde{\delta}(k_i) |i\rangle|0\rangle$ を生成 ($k_i = \frac{2\pi i}{L}$, C' : 規格化定数)
- $|\tilde{\delta}\rangle$ に対して量子振幅推定 (QAE) を行い、計算基底状態 $|i\rangle|0\rangle$ の振幅を読み出すことで、 $P(\vec{k}) = |\tilde{\delta}(\vec{k})|^2$ を推定[‡]
 - 計算量: $\tilde{O}\left(\frac{n_{\text{gr}} + n_t}{\epsilon}\right)$ (ϵ : $P(\vec{k})$ の推定精度)

[†] 量子フーリエ変換(QFT): 離散フーリエ変換に類似した変換を行う量子回路 $\text{QFT}|j\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_{\text{gr}}}} \sum_{k=0}^{n_{\text{gr}}-1} \exp\left(2\pi i \frac{jl}{n_{\text{gr}}}\right) |l\rangle$

正確には、位置座標 \vec{x} を表すレジスタにQFTを掛け、速度座標 \vec{v} を表すレジスタの各量子ビットにHadamardを掛ける

[‡] 厳密には、 C' の値を知る必要があるが、実際に求まる。詳細はPhys. Rev. Research 6, 013200 参照。

ニュートリノ密度揺らぎパワースペクトル推定の量子回路の全体図



数値実験：設定

- PDEの解き方として、通常の古典アルゴリズムと異なるのは、結局、 $|\vec{f}(t)\rangle = \exp(At) |\vec{f}(0)\rangle$ という行列のexponentialをダイレクトに計算しているという点
→ 解の様子を簡単な例で見よう

■ テストケース

➤ 1次元空間 (位相空間は1+1次元)

➤ 重力場: $F_{\text{CDM},x}(x) = A \sin(Kx)$

➤ 初期条件: $f(0, x, v) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_v^2}} \exp\left(-\frac{v^2}{2\sigma_v^2}\right)$

✓ 位置については一様、速度についてはMaxwell分布

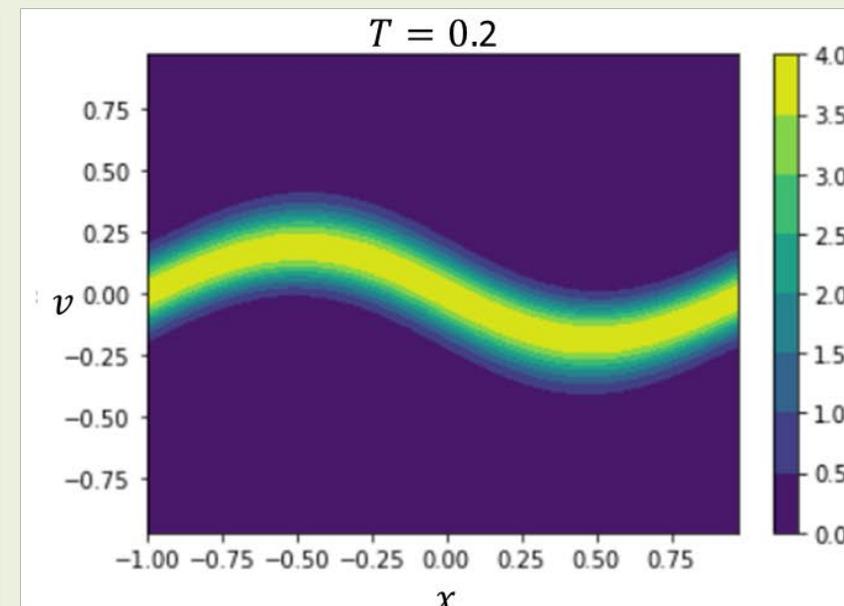
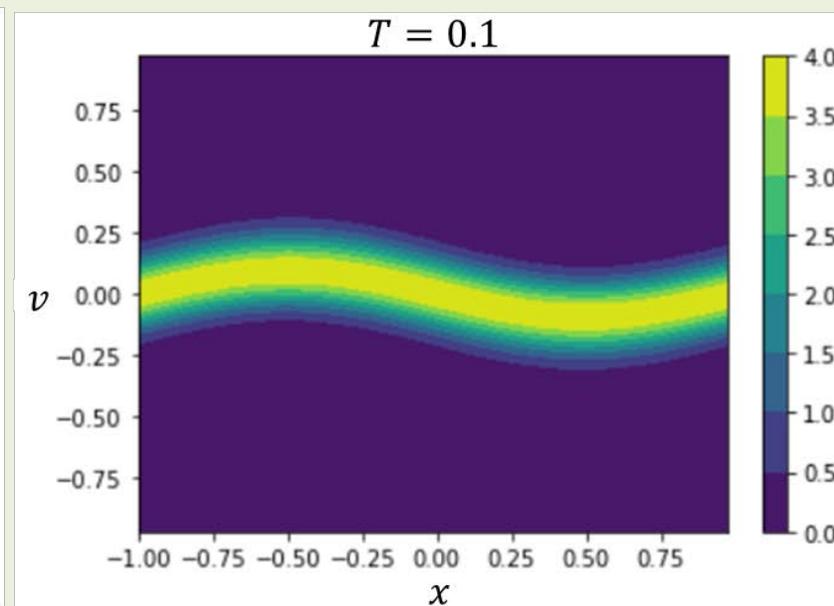
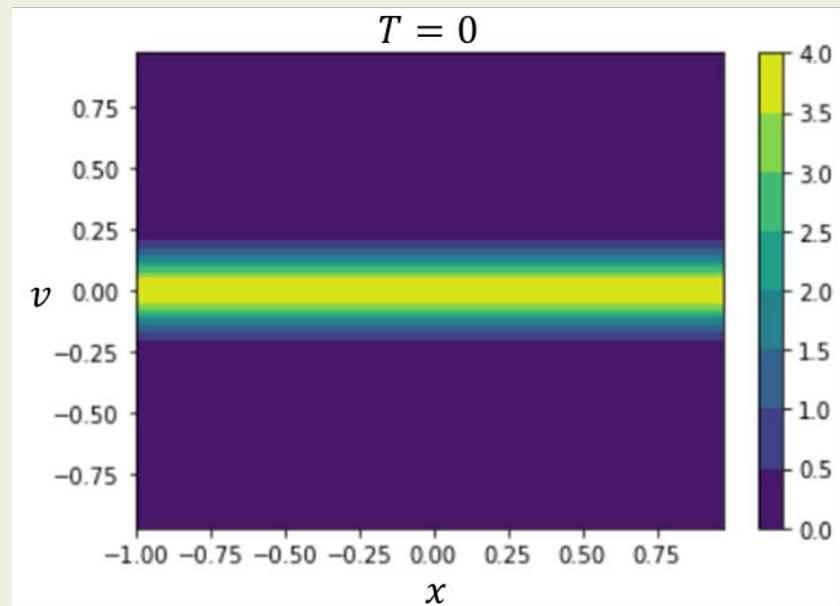
➤ シミュレーション領域: $-L \leq x \leq L, -V \leq v \leq V$

➤ 境界条件: 位置については周期的、速度についてはDirichlet

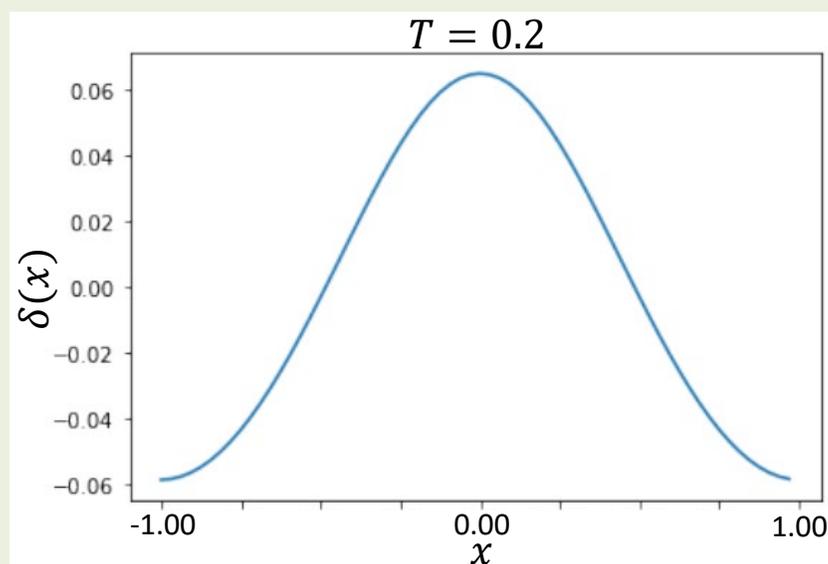
➤ $A = -1, L = 1, V = 1, K = \pi, \sigma_v = 0.1, n_{\text{gr}} = 64$

数値実験: 分布の様子

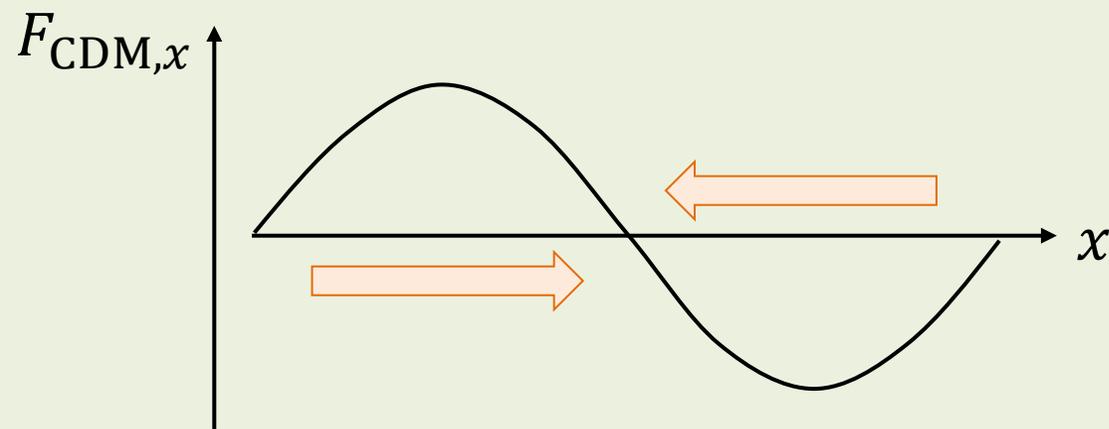
■ $f(T, x, v)$



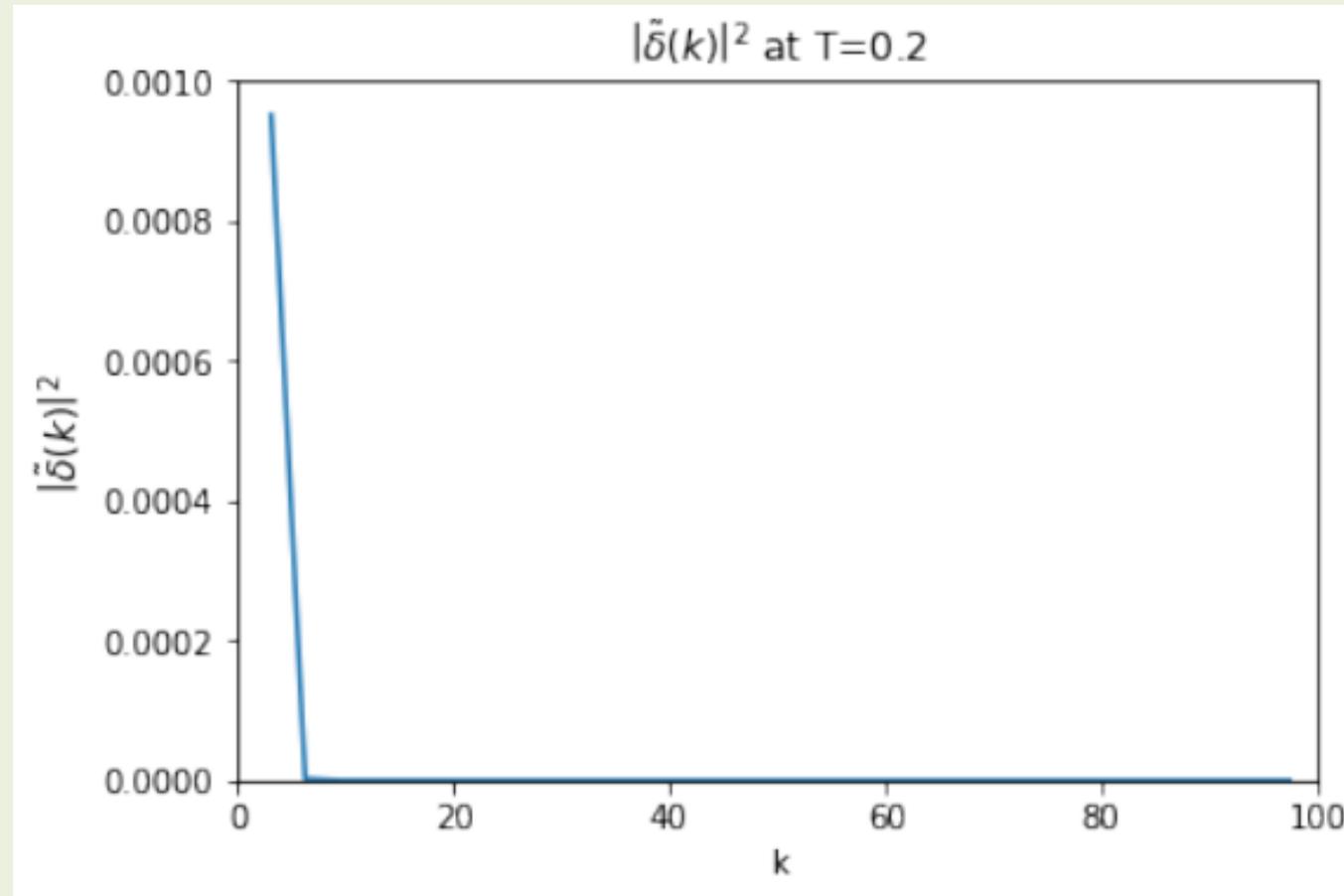
■ $\delta(T, x)$



徐々に重力に従って分布が集中していく



数値実験：パワースペクトルの様子



- 重力場は単一のサインカーブ $F_{\text{CDM},x}(x) = A \sin(Kx)$
→ 対応する波数のフーリエ成分のみ成長

4. 他の問題への応用の可能性

他の問題への応用の可能性

- 「宇宙とかニュートリノとか知らんし、私の研究分野とは何も関係ない...」と思われたかも
→ そんなことはない！（かも）
- 今回の手法は、
 - ・ 所与の外力の下でボルツマン方程式を解く
 - ・ 解からパワースペクトル(=特定のフーリエ成分の大きさ)を推定という問題一般に利用できる
 - ボルツマン方程式は様々な分野で登場(例: 流体力学)。
空間依存する外力の下で解く、という状況もあるのでは？
 - パワースペクトルの読み出しは、他の偏微分方程式を量子アルゴリズムで解く場合にも使える
- 他の応用先のアイデアがあれば是非ご教示ください

5. まとめ

まとめ

- 量子コンピューティングの宇宙論に対する応用の1つとして、ニュートリノを含んだLSS形成のVlasovシミュレーションを考えた
 - Vlasov方程式は(6+1)次元の偏微分方程式であり、これを古典コンピュータで解くのは容易でない
- 量子アルゴリズムの概要
 - ニュートリノ自己重力を無視する近似の下、Vlasov方程式を線形化
 - 有限差分近似によって偏微分方程式を常微分方程式に
 - ある種のSchrödinger方程式と見做せる
 - Hamiltonian sim.の量子アルゴリズムを適用し、解を埋め込んだ状態 $|\vec{f}(T)\rangle$ を生成
- さらに、QAEを利用して、 $|\vec{f}(T)\rangle$ からニュートリノ密度揺らぎのパワースペクトルを数字として読み出せる
 - 計算量 $\tilde{O}\left(\frac{n_{\text{gr}}+n_t}{\epsilon}\right)$ ← 古典の場合 $O(n_{\text{gr}}^6 n_t)$ と比べて大幅な高速化