

格子ボルツマン法による 輻射輸送計算の量子アルゴリズム

2024/05/09 (木) 16:45-17:15

五十嵐朱夏 (国立情報学研究所、産総研)

門脇正史 (産総研、DENSO)

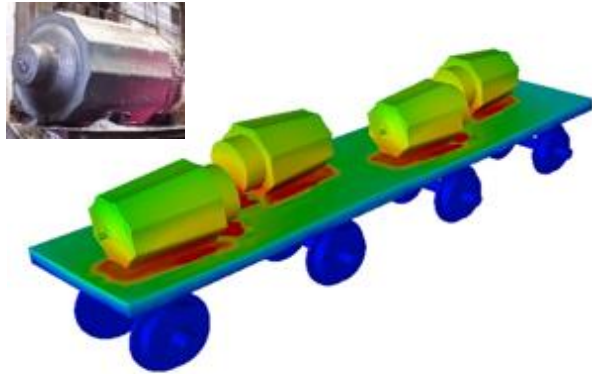
川畑史郎 (産総研、法政大)

A.Igarashi, T.Kadowaki, S.Kawabata, 2024, Physical Review Applied 21 (3), 034010

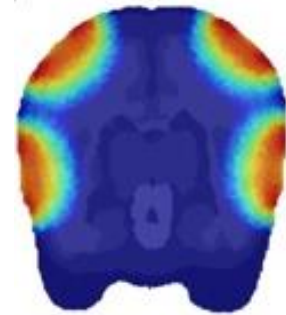
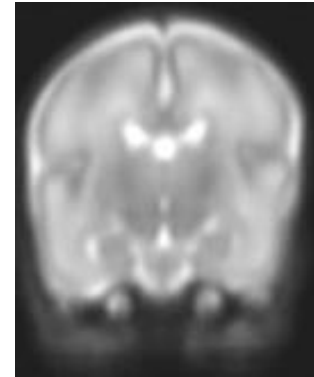
輻射輸送

物質中を通過する光子(電磁波)によるエネルギー輸送

輻射輸送計算は工学から医療まで様々な分野で用いられる
(輻射伝熱解析、拡散光トモグラフィ、輻射流体解析など)



鉄インゴットの放射冷却シミュレーション
(THERCAST®)



MRI画像(左)とトモグラフィモデル(右)
(Brigadoi et al. 2014)

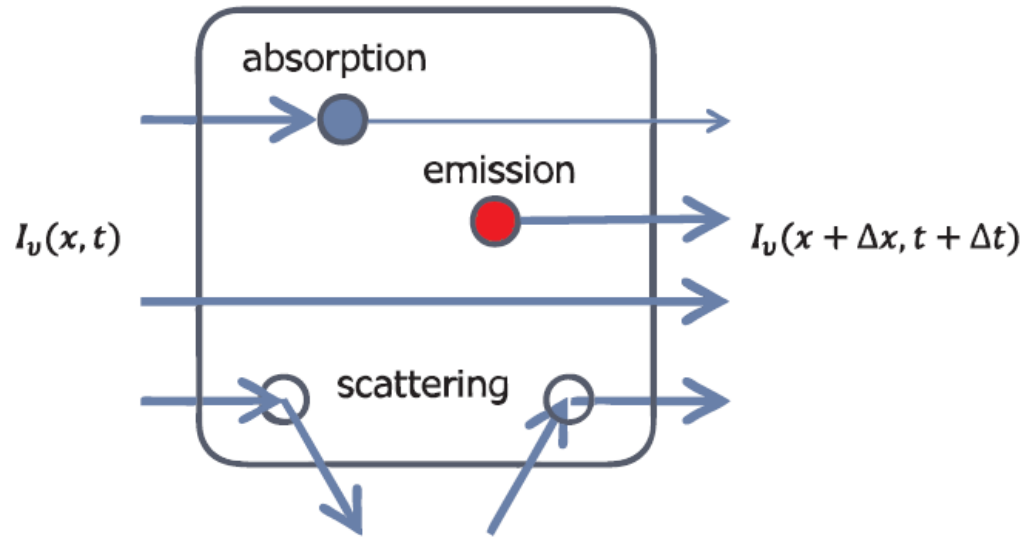
輻射輸送の計算は各格子点で行うと格子点数 M 程度
3次元では $M \sim 10^{6-9}$ 程度の格子点数になる



計算量の問題が生じる

輻射輸送

物質中を通過すると輻射強度 I_ν が増減する



1. 吸収による減少（再放射による増加含む）
2. 散乱による増加と減少
3. 放射による増加

輻射輸送方程式（輻射輸送のボルツマン方程式）

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial I_\nu(\vec{x}, \vec{\Omega}, t)}{c \partial t} + \vec{\Omega} \cdot \nabla I_\nu(\vec{x}, \vec{\Omega}, t) \\
 &= \underbrace{\kappa_{a,\nu}(\vec{x}, t) \{ I_{b,\nu}(\vec{x}, \vec{\Omega}, t) - I_\nu(\vec{x}, \vec{\Omega}, t) \}}_{\text{吸収}} + \underbrace{\sigma_{s,\nu}(\vec{x}, t) \left\{ \int_{4\pi} I_\nu(\vec{x}, \vec{\Omega}', t) \Phi(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' - I_\nu(\vec{x}, \vec{\Omega}, t) \right\}}_{\text{散乱}} + \underbrace{S_{e,\nu}(\vec{x}, \vec{\Omega}, t)}_{\text{放射}}
 \end{aligned}$$

輻射輸送

量子コンピュータで輻射輸送計算を指数関数的に加速したい

- ・ 格子ボルツマン法を用いた流体計算では、格子点数 M に対して計算量が $\log_2 M$ 程度になる量子アルゴリズムが開発されている (Budinski 2021)
- ・ 輻射輸送の支配方程式はボルツマン方程式



格子ボルツマン法を用いた輻射輸送の量子アルゴリズムを考える

格子ボルツマン法

流体計算で発展した計算法
(ボルツマン方程式の数値解法)

(外力のない) 1次元流体のボルツマン方程式

$$\frac{\partial f(x, t)}{\partial t} + u_x \frac{\partial f(x, t)}{\partial x} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{col}$$

衝突項

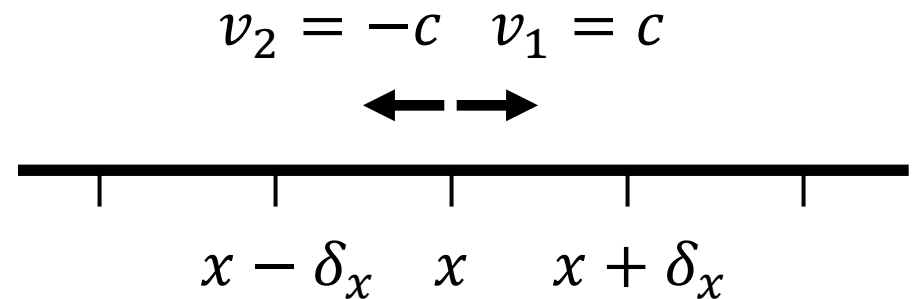
↓ 時間・空間・速度を離散化

流体の格子ボルツマン方程式

$$f_\alpha(x + v_\alpha \delta_t, t + \delta_t) - f_\alpha(x, t) = \delta_t \left(\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} \right)_{col}$$

$$\rho(x, t) = \sum_\alpha f_\alpha(x, t) \quad u_x(x, t) = \frac{1}{\rho} \sum_\alpha v_\alpha f_\alpha(x, t)$$

例：速度を2方向に離散化した場合



格子ボルツマン法

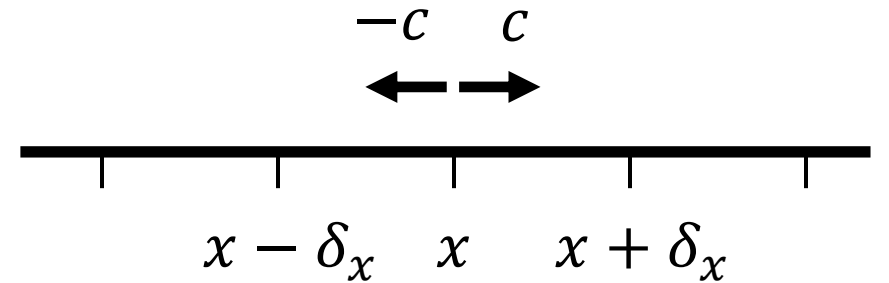
格子ボルツマン法を輻射輸送に適用

輻射輸送方程式

$$\frac{\partial I_\nu(\vec{x}, \vec{\Omega}, t)}{c \partial t} + \vec{\Omega} \cdot \nabla I_\nu(\vec{x}, \vec{\Omega}, t) = \kappa_{a,\nu}(\vec{x}, t) \{I_{b,\nu}(\vec{x}, \vec{\Omega}, t) - I_\nu(\vec{x}, \vec{\Omega}, t)\} + \sigma_{s,\nu}(\vec{x}, t) \left\{ \int_{4\pi} I_\nu(\vec{x}, \vec{\Omega}, t) \Phi(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}') \partial \vec{\Omega}' - I_\nu(\vec{x}, \vec{\Omega}, t) \right\} + S_{e,\nu}(\vec{x}, \vec{\Omega}, t)$$



1次元
一定の吸収・散乱・放射（一様な媒質）
振動数を一定とする
格子ボルツマン法を適用



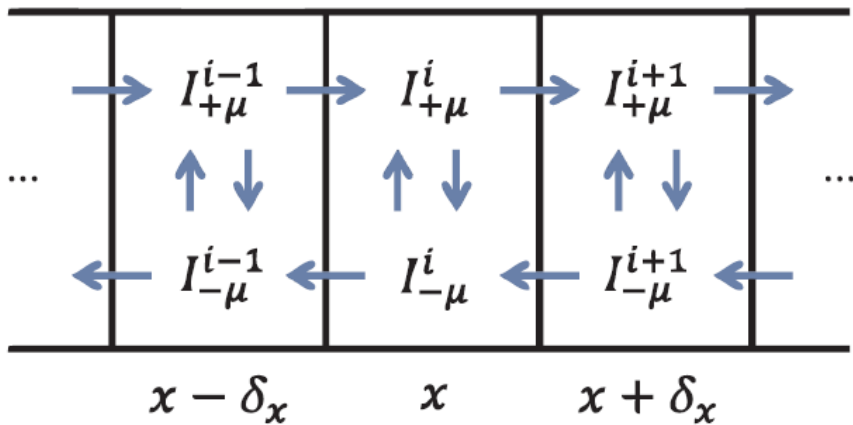
1次元輻射輸送の格子ボルツマン方程式

$$I_\pm(x \pm c\delta_t, t + \delta_t) - I_\pm(x, t) = -\kappa\delta_t I_\pm(x, t) + \frac{\sigma}{2} \delta_t \{I_+(x, t) + I_-(x, t)\} + \frac{1}{2} \delta_t S_\pm(x) \quad \pm: \text{伝搬方向}$$

$$(\kappa \equiv \kappa_a + \sigma_s, \sigma \equiv \sigma_s, /4\pi S \equiv \kappa_a I_b + S_e)$$

格子ボルツマン法

輻射輸送の格子ボルツマン方程式



$$I_{\pm}(x \pm c\delta_t, t + \delta_t) - I_{\pm}(x, t) = -\kappa\delta_t I_{\pm}(x, t) + \frac{\sigma}{2}\delta_t\{I_+(x, t) + I_-(x, t)\} + \frac{1}{2}\delta_t S_{\pm}(x)$$

⇓ 分割する (行列計算・加算・格子移動に分かれる)

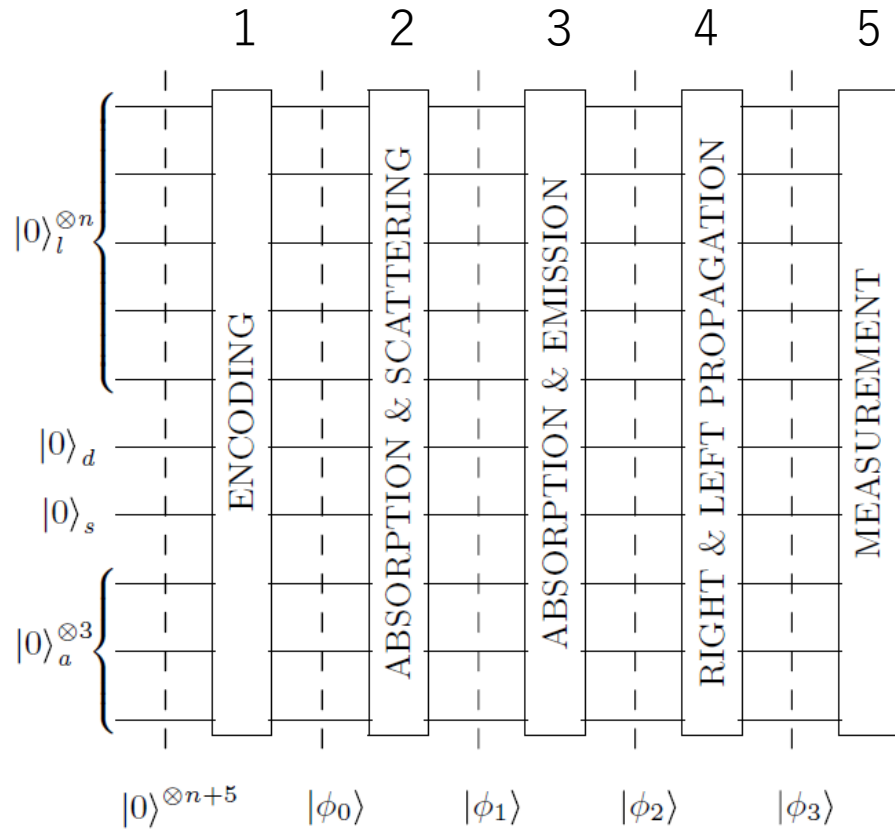
$$\begin{cases} I_+^{AS} = \left(1 - \kappa\delta_t + \frac{\sigma}{2}\delta_t\right) I_+(x, t) + \frac{\sigma}{2}\delta_t I_-(x, t) \\ I_-^{AS} = \frac{\sigma}{2}\delta_t I_+(x, t) + \left(1 - \kappa\delta_t + \frac{\sigma}{2}\delta_t\right) I_-(x, t) \end{cases}$$

$$I_{\pm}^{ASE}(x, t) = I_{\pm}^{AS}(x, t) + \frac{1}{2}\delta_t S_{\pm}(x)$$

$$I_{\pm}(x \pm c\delta_t, t + \delta_t) = I_{\pm}^{ASE}(x, t)$$

量子アルゴリズム

5つのステップに分ける



1. エンコード

2. 吸収と散乱

$$\begin{cases} I_+^{AS} = \left(1 - \kappa\delta_t + \frac{\sigma}{2}\delta_t\right) I_+(x, t) + \frac{\sigma}{2}\delta_t I_-(x, t) \\ I_-^{AS} = \frac{\sigma}{2}\delta_t I_+(x, t) + \left(1 - \kappa\delta_t + \frac{\sigma}{2}\delta_t\right) I_-(x, t) \end{cases}$$

3. 吸収と放射

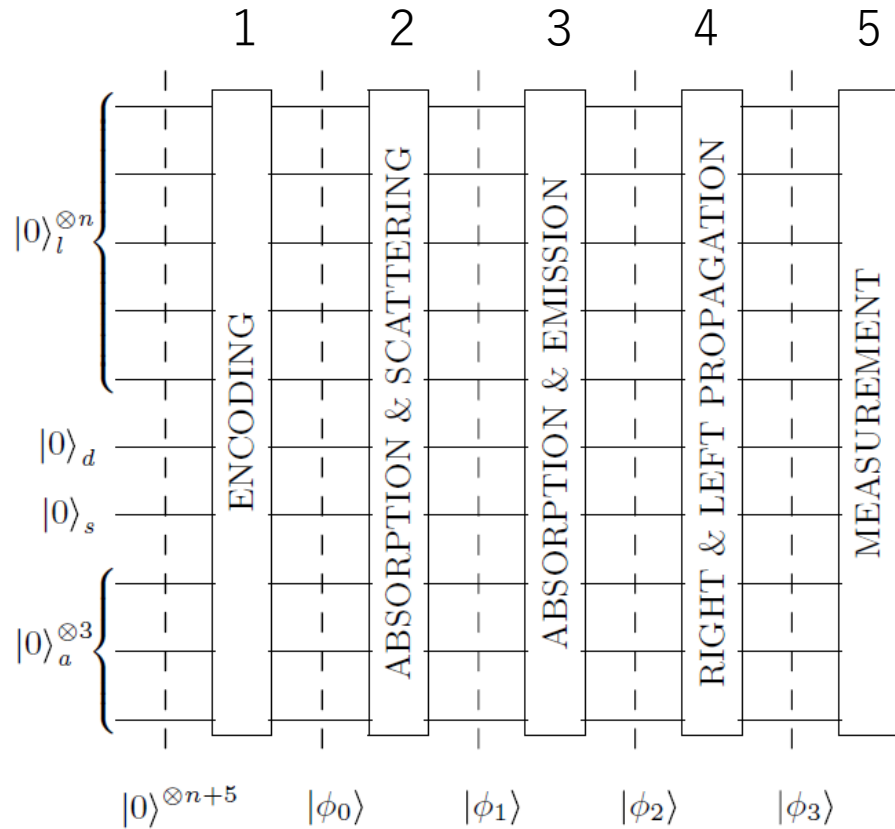
$$I_{\pm}^{ASE}(x, t) = I_{\pm}^{AS}(x, t) + \frac{1}{2}\delta_t S_{\pm}(x)$$

4. 伝搬

$$I_{\pm}(x \pm c\delta_t, t + \delta_t) = I_{\pm}^{ASE}(x, t)$$

5. 測定

量子アルゴリズム (1. エンコード)



状態ベクトルを以下のように置く (M : 格子点数)

$$\vec{\phi} \equiv \left(I_+^0, \dots, I_+^{M-1}, I_-^0, \dots, I_-^{M-1}, \right. \\ \left. \frac{1}{2} \delta_t S_+^0, \dots, \frac{1}{2} \delta_t S_+^{M-1}, \frac{1}{2} \delta_t S_-^0, \dots, \frac{1}{2} \delta_t S_-^{M-1} \right)$$

量子状態にエンコードする

$$|\phi_0\rangle = |000\rangle_a \frac{1}{\|\phi\|} \sum_{i=0}^{M-1} \left(I_+^i |0\rangle_s |0\rangle_d |i\rangle_l + I_-^i |0\rangle_s |1\rangle_d |i\rangle_l \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \delta_t S_+^i |1\rangle_s |0\rangle_d |i\rangle_l + \frac{1}{2} \delta_t S_-^i |1\rangle_s |1\rangle_d |i\rangle_l \right)$$

a : 補助ビット

s : 輻射強度 $I_{\pm\mu}$ と $S_{\pm\mu}$ を分けるビット

d : 伝搬方向を示すビット

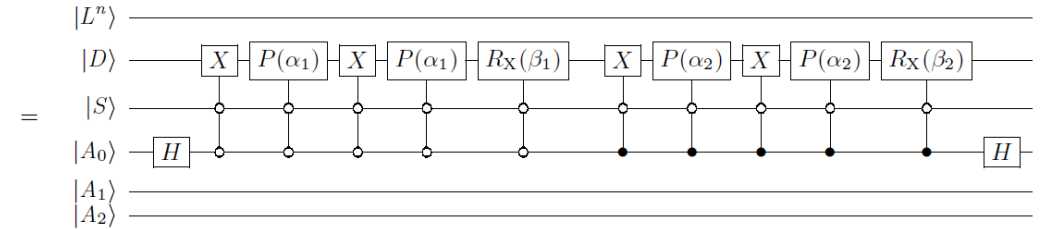
l : 格子点 (2進数表示)

量子アルゴリズム (2. 吸収と散乱)

量子回路 (右図) で吸収・散乱を計算する

$$|\phi_0\rangle = |000\rangle_a \frac{1}{\|\phi\|} \sum_{i=0}^{M-1} \left(I_+^i |0\rangle_s |0\rangle_d |i\rangle_l + I_-^i |0\rangle_s |1\rangle_d |i\rangle_l \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \delta_t S_+^i |1\rangle_s |0\rangle_d |i\rangle_l + \frac{1}{2} \delta_t S_-^i |1\rangle_s |1\rangle_d |i\rangle_l \right)$$

ABSORPTION & SCATTERING



補助ビットを1つ用いて行列計算を行う

$$\begin{cases} I_+^{AS} = \left(1 - \kappa \delta_t + \frac{\sigma}{2} \delta_t\right) I_+(x, t) + \frac{\sigma}{2} \delta_t I_-(x, t) \\ I_-^{AS} = \frac{\sigma}{2} \delta_t I_+(x, t) + \left(1 - \kappa \delta_t + \frac{\sigma}{2} \delta_t\right) I_-(x, t) \end{cases}$$

$$|\phi_1\rangle = |000\rangle_a \frac{1}{\|\phi\|} \sum_{i=0}^{M-1} \left(I_+^{AS,i} |0\rangle_s |0\rangle_d |i\rangle_l + I_-^{AS,i} |0\rangle_s |1\rangle_d |i\rangle_l \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \delta_t S_+^i |1\rangle_s |0\rangle_d |i\rangle_l + \frac{1}{2} \delta_t S_-^i |1\rangle_s |1\rangle_d |i\rangle_l \right) + |000^\perp\rangle_{asdl}$$

量子アルゴリズム (3. 吸収と放射)

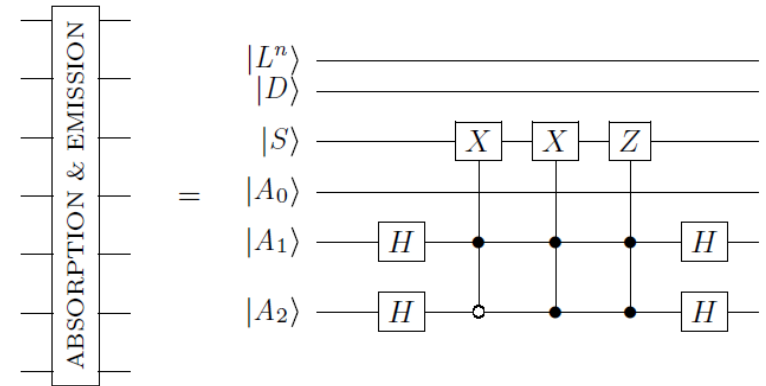
量子回路 (右図) で吸収・放射を計算する

$$|\phi_1\rangle = |000\rangle_a \frac{1}{\|\phi\|} \sum_{i=0}^{M-1} \left(I_+^{AS,i} |0\rangle_s |0\rangle_d |i\rangle_l + I_-^{AS,i} |0\rangle_s |1\rangle_d |i\rangle_l \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \delta_t S_+^i |1\rangle_s |0\rangle_d |i\rangle_l + \frac{1}{2} \delta_t S_-^i |1\rangle_s |1\rangle_d |i\rangle_l \right) + |000^\perp\rangle_{asdl}$$



補助ビットを2つ用いて加算する $I_\pm^{ASE}(x, t) = I_\pm^{AS}(x, t) + \frac{1}{2} \delta_t S_\pm(x)$

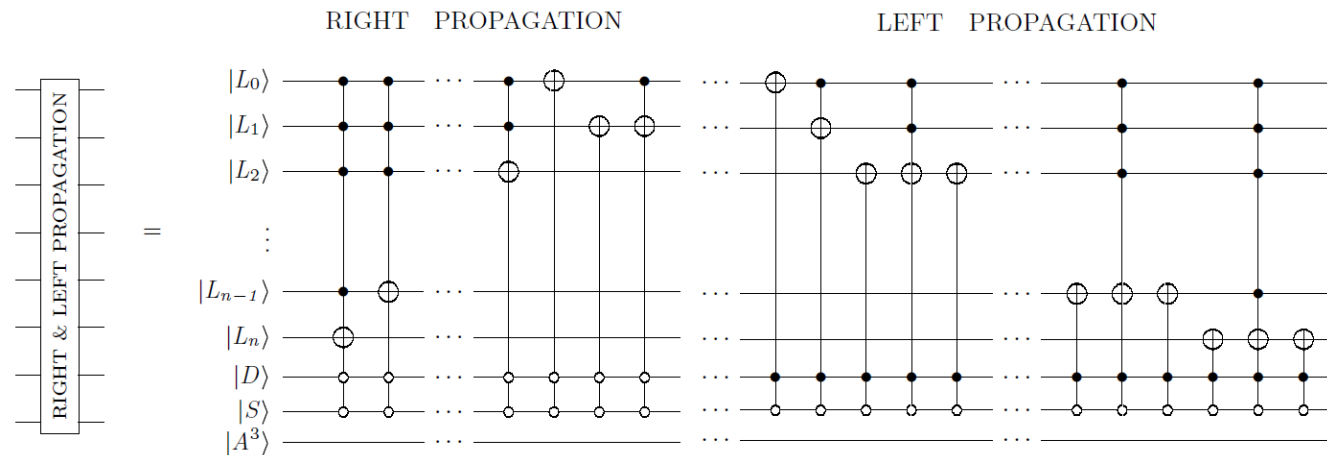
$$|\phi_2\rangle = |000\rangle_a \frac{1}{\|\phi\|} \sum_{i=0}^{M-1} \left(I_+^{ASE,i} |0\rangle_s |0\rangle_d |i\rangle_l + I_-^{ASE,i} |0\rangle_s |1\rangle_d |i\rangle_l \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \delta_t S_+^i |1\rangle_s |0\rangle_d |i\rangle_l + \frac{1}{2} \delta_t S_-^i |1\rangle_s |1\rangle_d |i\rangle_l \right) + |000^\perp\rangle'_{asdl}$$



量子アルゴリズム (4. 伝搬)

以下の回路(Budinski 2021)で格子点を左右に移動する

$$I_{\pm}(x \pm c\delta_t, t + \delta_t) = I_{\pm}^{ASE}(x, t)$$



最後に 5. 測定

確率分布から輻射強度分布を推定する

古典アルゴリズムでは各格子点(M 個)で計算する
量子アルゴリズムでは格子点ビット($\log_2 M$ 個)で計算



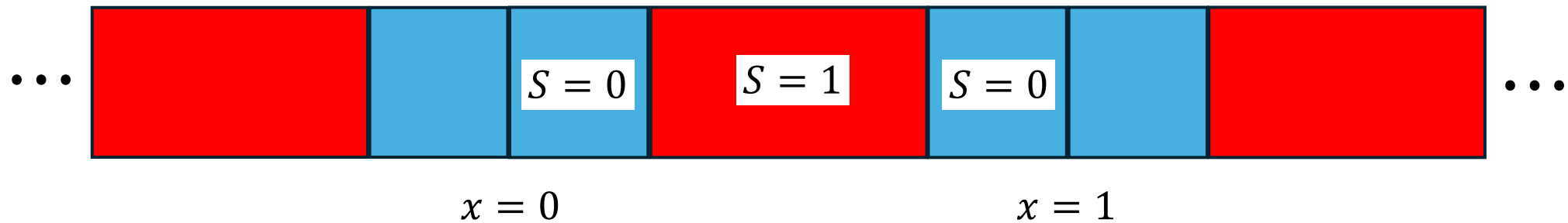
指数関数的に加速できる

テスト計算

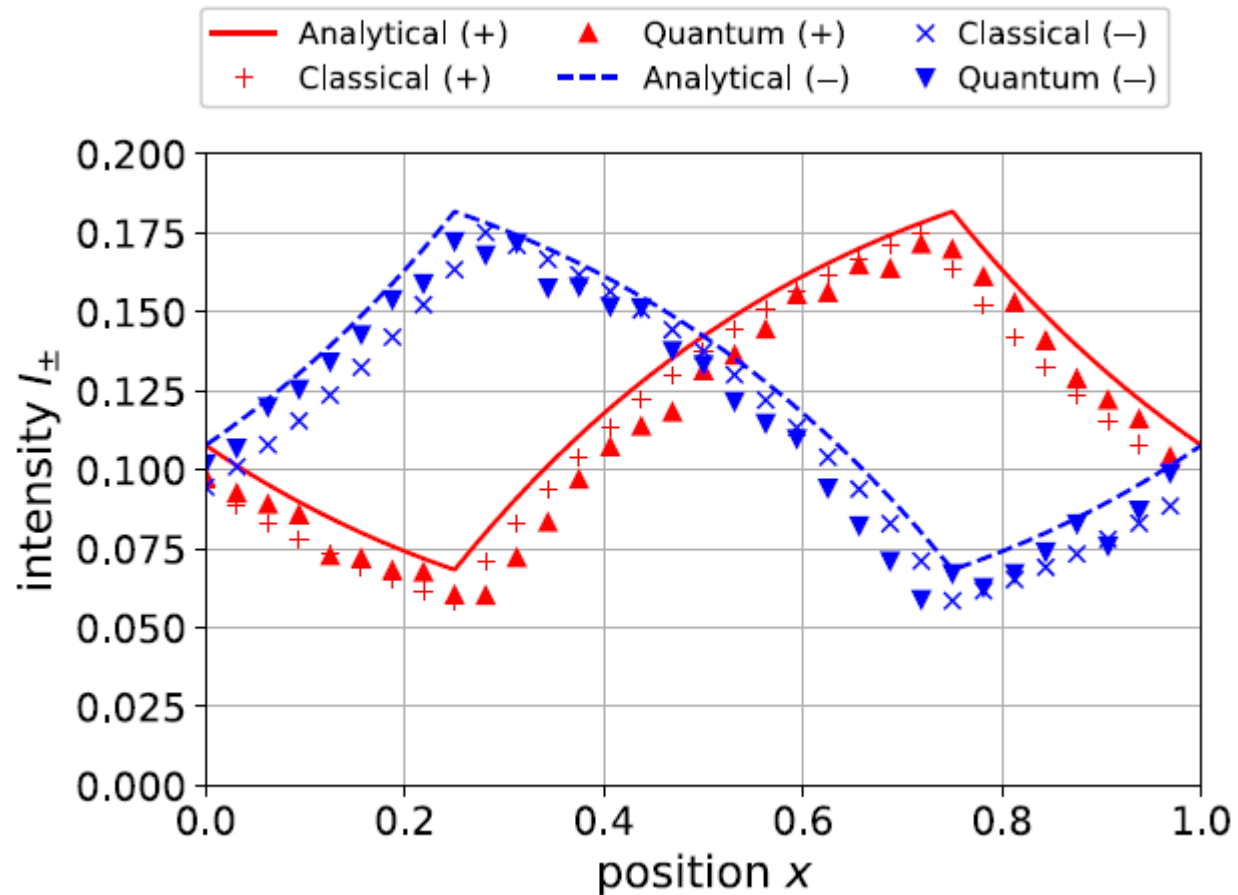
簡単な問題を設定する

- ・ 格子数は32
- ・ 吸収・散乱係数が一定($\kappa = 2.5, \sigma = 0.5$)
- ・ S のある領域とない領域が繰り返す (周期境界条件)

$$S(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < 1/4 \\ 1 & 1/4 < x < 3/4 \\ 0 & 3/4 < x < 1 \end{cases}$$



テスト計算



- Qiskitで量子アルゴリズムを試算する。
- 量子アルゴリズム (▲▼) と古典アルゴリズム (+×) の結果は解析解 (実線・破線) とよく一致する。
- この計算でのゲート数は2000程度。大部分は伝搬の回路で1600程。

まとめ

- ・ 輻射輸送の量子アルゴリズムを構成した。
- ・ アルゴリズムは5ステップに分かれる（エンコード・吸収と散乱・吸収と放射・伝搬・測定）。
- ・ 流体計算と同様に、輻射輸送計算でも（エンコードと測定を除いて）指数関数的な加速が可能。



確率分布推定のために測定回数が必要

発展先

- ・ 非一様媒質の輻射輸送
- ・ 熱伝導とのカップリング、流体とのカップリングなど