

計算固体力学における 量子アニーリングの適用性に関する 基礎的検討

第1回 Quantum CAE研究会

産業技術総合研究所 臨海副都心センター，東京
2024年5月9~10日

TOHOKU
UNIVERSITY

東北大学 工学研究科
寺田 賢二郎

Career summary

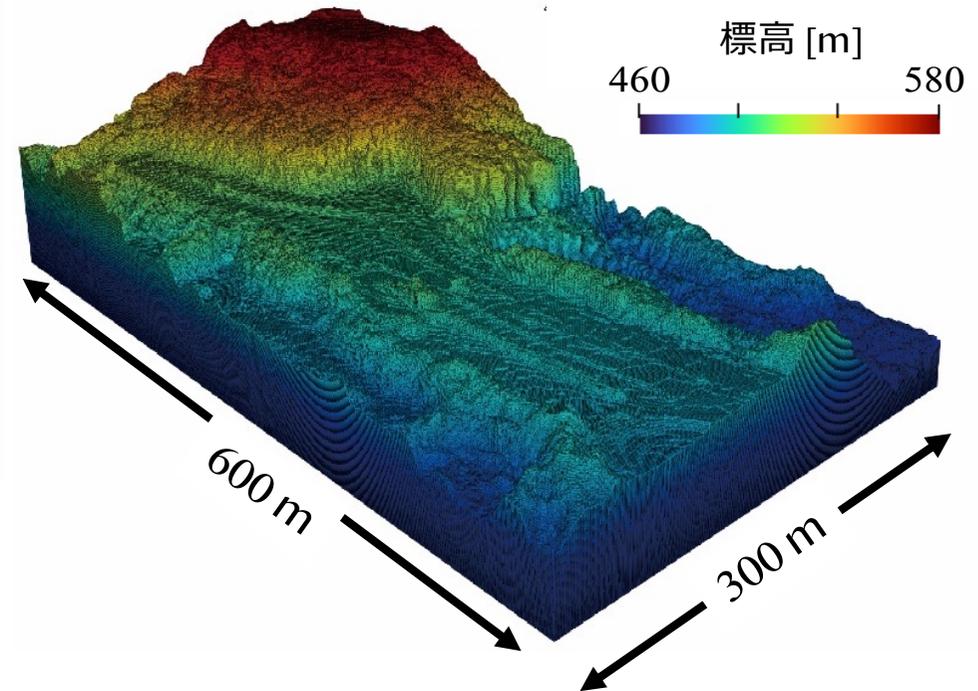
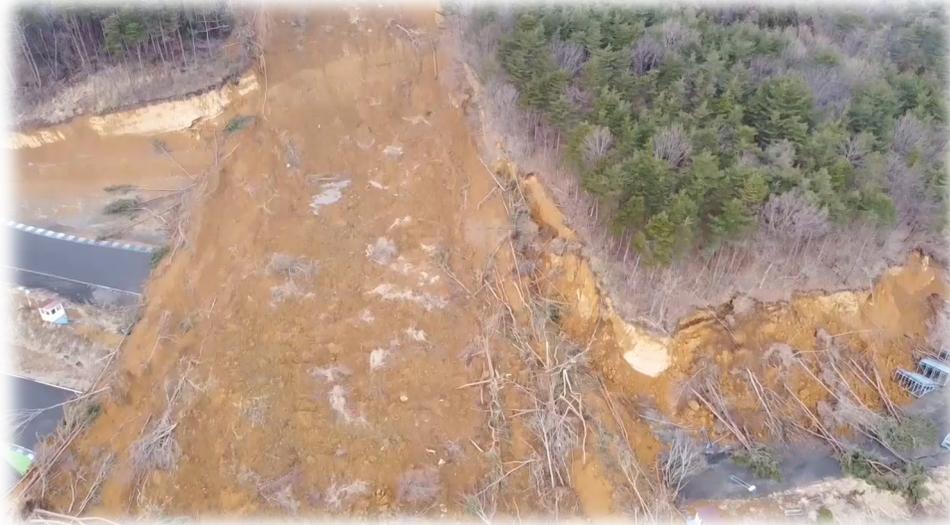


- 1990 Department of Civil Engineering, Nagoya University
- 1990-1991 Engineer, Shimizu Corporation
- 1996 Ph.D. (in Applied Mechanics, The University of Michigan, USA)
- 1996- 1997 Research Associate
 - Department of Naval Architecture and Ocean Engineering, The University of Tokyo
- 1997-2012 Associate Professor
 - Department of Civil Engineering, Tohoku University
- 2012-2023 Professor
 - International Research Institute of Disaster Science (IRIDeS), Tohoku University
- 2024-Present
 - Department of Civil Engineering, Tohoku University
- Selected research topics (Computational Science and Engineering & CAE)
 - Development of **multiscale numerical analysis methods for materials and structures** based on mathematical homogenization theory
 - Engineering application of nonlinear multiscale analysis methods
 - Commodification/commercialization of the nonlinear multiscale methods for practical applications
 - Structural and topology optimization
 - Modeling and analysis methods to **characterize the mechanical behavior of heterogeneous media**, Image-based modeling and structural analyses
 - **Failure analyses** using FEM and its deviations
 - Finite cover method/Phase-field crack model/**Material point method**
 - Development of solution methods for **disaster simulations**
 - landslides, fluid-structure interaction associated with tsunami, progressive failure, many others
 - Visualization and simulation for risk assessment of multiple components in urban and regional areas

土砂災害の再現解析



2021年2月13日の福島県沖地震によるエビスサーキット斜面崩壊の再現解析



仙頭ら¹⁾によると,

- 崩壊箇所は幅 39 m, 長さ 138 m
- 土砂は斜面の末端から 200 m ほど移動
- 表層は火山灰粘性土が約 4 m (高い流動性)
- 崩壊部底面は高い含水比の粘土

- 固体から流体へ遷移するような挙動
➡ μ -I rheology に基づく遷移モデル²⁾
- 動的負荷分散の適用による大規模解析

- 0.5mの分解能：1億自由度以上
(計算点数×変数の数)
- 1分程度の現象継続時間
- 陽解法MPMの直接適用は非現実的

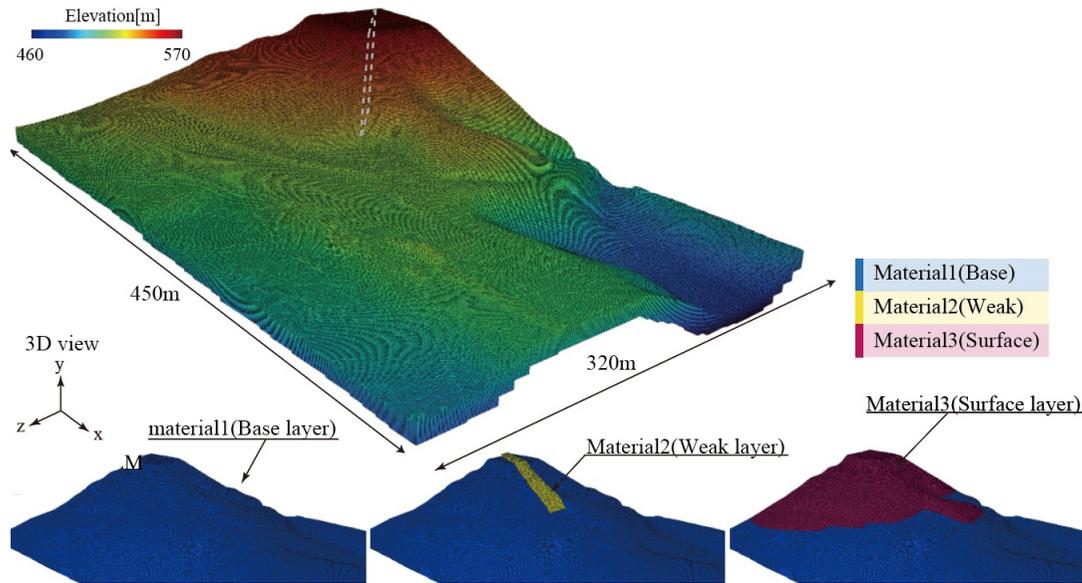
1) 仙頭紀明, 原勝重, 海野寿康, 畠良一, 加村晃良, 森口周二: 地盤工学会誌, 2021.

2) 木村凌一: 東北大学大学院工学研究科土木工学専攻修士論文, 2023.

解析モデル

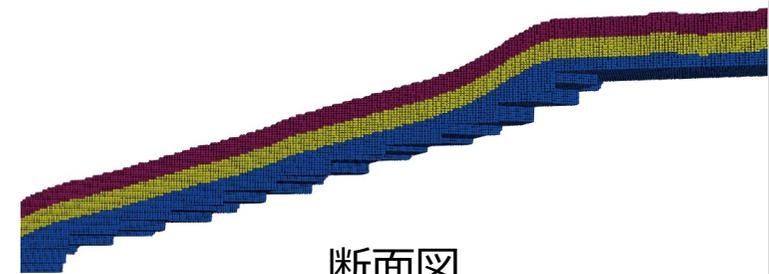


2021年2月13日の福島県沖地震によるエビスサーキット斜面崩壊の再現解析



- 格子サイズ : 1辺 1.0 m
- 粒子数 : 8 (2×2×2)
- 時間刻み幅 : 1.0×10^{-3} s
- 解析ステップ : 100,000
- 粒子数 : 1400万
- 格子数 : 1800万
- 並列数 : 5760 cores

Parameters		Surface layer	weak layer	Base layer
ヤング係数 (Pa)	E	4.00×10^6	4.00×10^6	1.0×10^9
ポアソン比	ν	0.40	0.40	0.30
内部摩擦角 (residual state)(°)	ϕ_r	3.0	6.5	53.4
内部摩擦角 (peak state)(°)	ϕ_p	30.9	10.0	57.3
軟化則における定数	η_s	10.0	10.0	100.0
静水圧補正係数 (kPa)	c	30.1	23.0	300.0
inertial numberにおける定数	μ_2	0.75	0.961	0.75
inertial numberにおける定数	I_0	0.01	0.01	0.01
粒径 (mm)	d	0.0045	0.030	0.20
粒子密度 (kg/m^3)	ρ_s	2,529	2,534	3,000
遷移モデルにおける定数	ω	0.6	0.5	0
遷移モデルにおける定数 ($\text{Pa} \cdot \text{s}$)	η_0	1.0	1.0	1.0
遷移モデルにおける定数	α_0	1.0	1.0	1.0



仙頭ら¹⁾の調査をもとに3層に分類

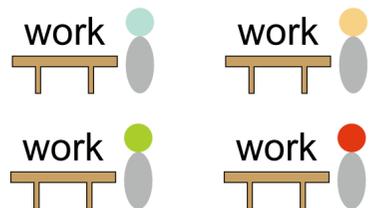
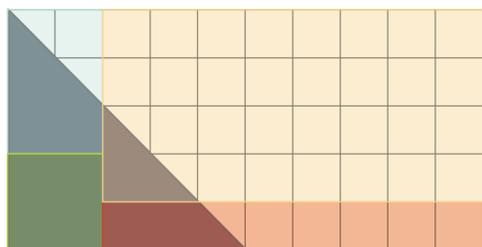
1) 仙頭紀明, 原勝重, 海野寿康, 畠良一, 加村晃良, 森口周二: 地盤工学会誌, 2021.

計算効率の向上

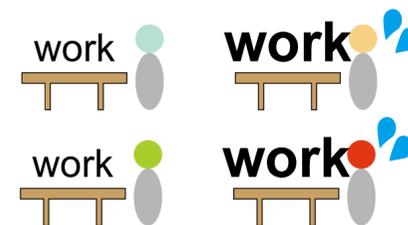
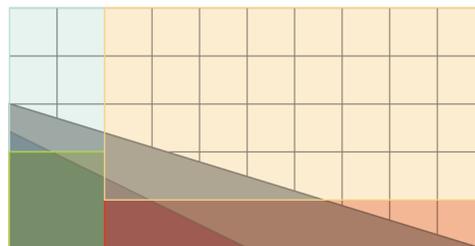
動的負荷分散

領域分割を粒子数に応じて計算中に変更する(Sampling method¹⁾)

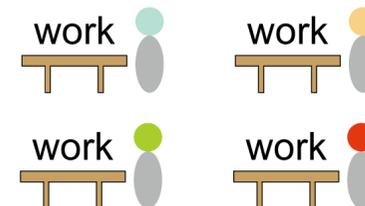
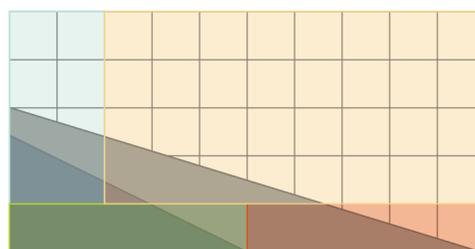
斜面 (崩壊前)
色分けごとに領域分割



動的負荷分散なし



動的負荷分散あり

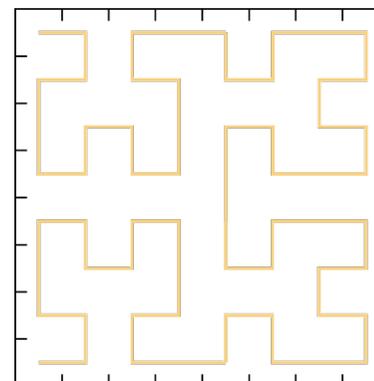


空間充填曲線による粒子ソート²⁾

各領域での粒子 ID を粒子の座標をもとに振り直す

キャッシュヒット率の向上

(Moron または, Peano-Hilbert curve を使用)



1) Ishiyama, T., Fukushima, T., and Makino, J.: Publications of the Astronomical Society of Japan, 2009.

2) Miki, Y. Umehara, M.: New Astronomy, 2017.

エビスサーキット解析結果

1) 防災科学技術研究所: 2021年2月13日福島県沖地震加速度(二本松), 2024,
<https://www.kyoshin.bosai.go.jp/kyoshin/quake/>

斜面全体の**表層崩壊**

切土位置での**すべり線**

累積塑性ひずみ



エビスサーキット西コースの土砂崩れ^[1]

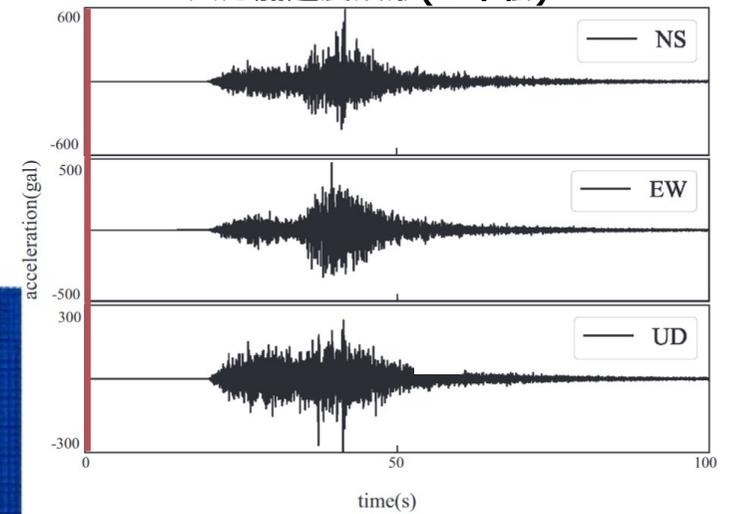
[1]: 地盤工学会東北支部, エビスサーキットの
実地調査の際に撮影された資料, 2021



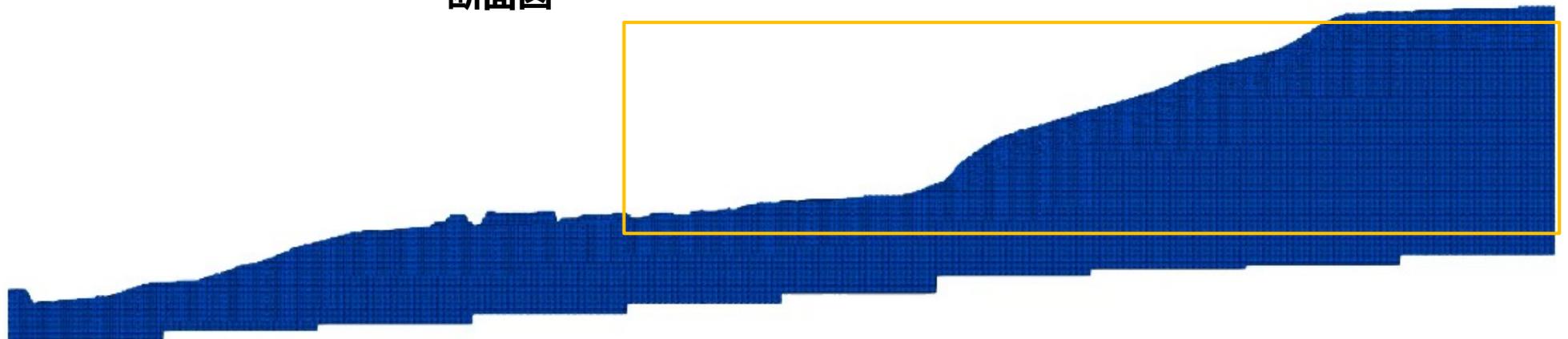
エビスサーキット解析結果



入力加速度波形(二本松)^[9]



断面図



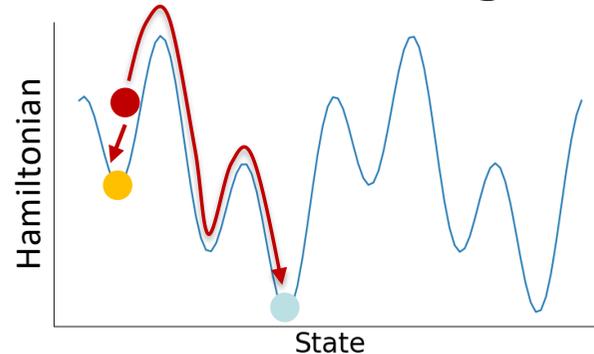
とはいえ、QAから

Quantum annealing (QA)^[1]:

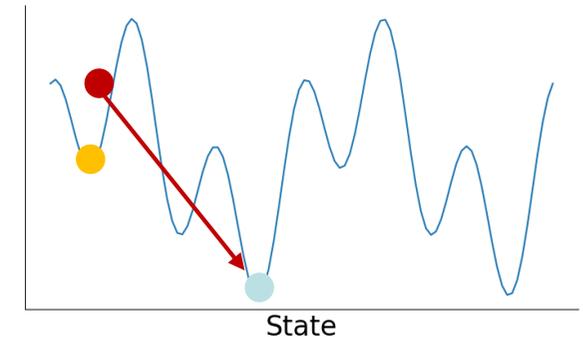
Combinatorial optimization with Quadratic Unconstrained Binary Optimization (QUBO) model attracted much attention.

Target: Optimization problem in solid mechanics

Simulated annealing (SA)



Quantum annealing (QA)



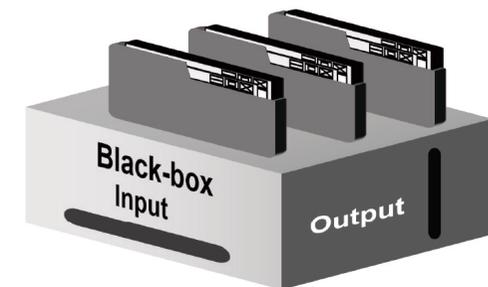
Tunneling effect^[2]

Factorization Machine with Quantum annealing (FMQA)^[3]

Black-box optimization:

Functions that are unknown or difficult to solve directly, search for the parameter sets corresponding to the minimum/maximum.

FMQA has been applied in automated material search^[3], but few examples in *structural and geotechnical engineering*



Black-box function

[1] Kadowaki T, Nishimori H. Quantum annealing in the transverse Ising model. *Physical Review E*. 1998;58(5):5355.

[2] Gunther, L. Quantum tunnelling of magnetisation. *Phys*. 1990;World 3, 28.

[3] Kitai K, Guo J, Ju S, et al. Designing metamaterials with quantum annealing and factorization machines. *Physical Review Research*.2020;2(1):013319.

Contents



1. イントロダクション
 - **QCを勉強し始めて1年未満**
 - **的外れな取り組みにはご容赦下さい**
 - 自己紹介~やりたいこと (やれたらいいなと思っている/いたこと)
 - 長時間現象の大規模非線形解析 (ex. 実物大規模災害シミュレーション)
2. 構造最適化 (QUBO)
 - 設計変数の乗算型更新
 - トラスの形状最適化と弾性体のトポロジー最適化
3. 有限要素離散化方程式の求解(QUBO&FMQA)
 1. 全ポテンシャルエネルギー最小化 (QUBO)
 - エンコーディング手法への依存性
 2. 残差ベクトルの最小化 (FMQA)
4. 非線形材料構成方則のパラメータ同定(FMQA)
5. メタ (代理) モデル (FMQA)
 1. メタモデル生成に際するハイパーパラメータ同定
 2. メタモデルによるリスク指標の最適化
 - リスク指標を最大化するパラメータの決定



我妻 航也 (M1)



Sukulthanasorn
Naruethap
(Assoc. Prof.)



肖珺森 (D2)

まとめ



1. トラス構造の剛性最適化 & 線形弾性体トポロジー最適化 (QUBO)
 - 設計変数の乗算型更新法の提案
 - Quantum annealing-based structural optimization with a multiplicative design update, Naruethep Sukulthanasorn, J. Xiao, K. Wagatsuma, S. Moriguchi, K. Terada (*Under review*)
2. 有限要素離散化方程式の求解(QUBO&FMQA)
 1. 全ポテンシャルエネルギー最小化 (QUBO)
 - エンコーディングによる実数表現と力学問題の性質
 2. 残差ベクトルの最小化 (FMQA)
 - 非線形有限要素法への適用は困難か？
3. 非線形材料構成方則のパラメータ同定(FMQA)
 - 引き続き要検討か？
4. メタ (代理) モデル (FMQA)
 - HPO & MBSOへの適用性
 - Application of FMQA to hyper-parameter optimization and metamodel-based simulation optimization in Granular Flow Simulations, J. Xiao, K. Endo, M. Muramatsu, R. Nomura, S. Moriguchi, K. Terada (*Under 2nd review*)
 - より複雑な (多峰性を有する) 問題への適用性の調査