

# 量子アニーリングによる材料微視組織解析のための Phase-fieldシミュレーション

Phase-field simulation for microstructural analysis of  
materials by quantum annealing

村松 眞由

慶應義塾大学 理工学部 機械工学科

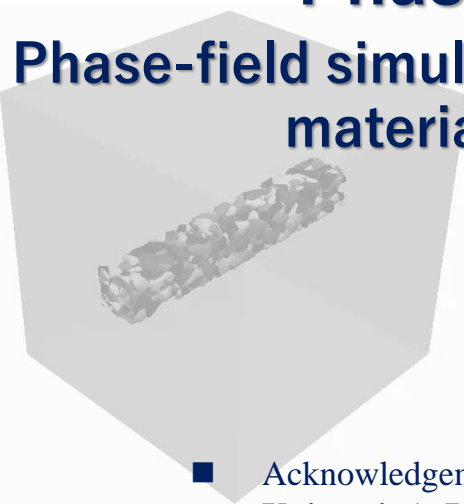
May 10, 2024@産業技術総合研究所  
臨海副都心センター別館11階 会議室



Keio  
University

1858

CALAMVS  
GLADIO  
FORTIOR

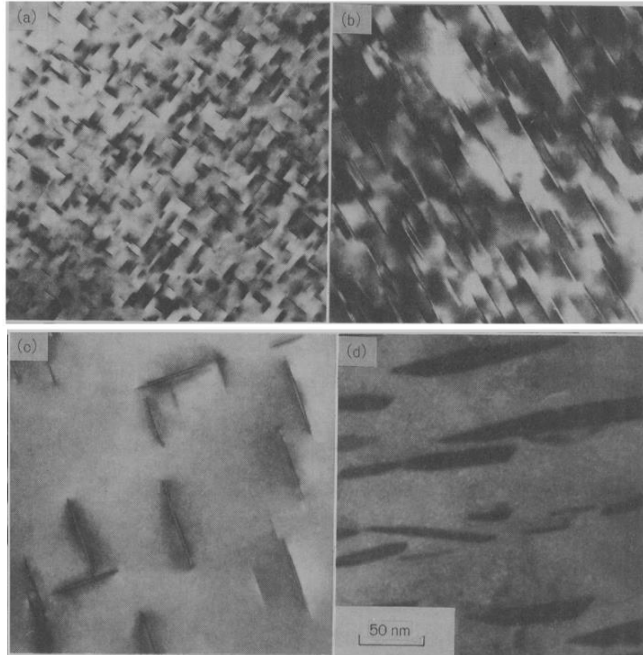


COI-NEXT

- Acknowledgement: Dr. Katsuhiko Endo (AIST), Prof. Yuya Seki (Keio University), Prof. Shu Tanaka (Keio University), Dr. Yoshiki Matsuda (Fixstars), Dr. Fabian Key (TU Wien), Prof. Marek Behr, (RWTH Aachen University), Yudai Suzuki (Keio University), Rio Honda (D1), Shiori Aoki (M2)
- Partially supported by: JST FOREST Program (Grant Number JPMJFR212K, Japan) and JST COI-NEXT (SQAI-Center of Innovation for Sustainable Quantum AI)

*Fusion Oriented REsearch for disruptive Science and Technology*

# 構造材料の力学特性と材料組織(トポロジー)



Al-4%Cu 合金の時効硬化現象 [1]



航空機のエンジンとタービン [2]

- 構造材料への熱処理で材料組織が決まる。
- 材料組織を制御することで力学特性を制御できる。
- 熱処理による材料トポロジー設計・プロセス設計が重要である。
- 処理過程では相変態や析出が生じ、相分離が進行する。

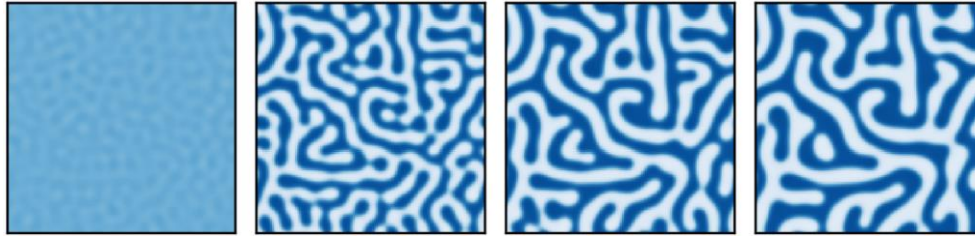
[1] <https://www.flickr.com/photos/bestboyzde/8492930011/>

[2] <https://www.mhi.com/jp/news/story/181213.html>

# スピノーダル分解



## Phase-field解析



Phase-field解析でのスピノーダル分解の時間発展

初期状態として乱数による濃度ゆらぎを与え、ゆらぎが発展して相分離構造となる。

$$\frac{\partial x_B}{\partial t} = \nabla \cdot \left\{ M \nabla \left( \frac{\delta G}{\delta x_B} \right) \right\}$$

保存量に対する発展方程式  
(Cahn-Hilliard方程式)

$$G = G_{\text{grad}} + G_{\text{chem}} = \int_V (g_{\text{grad}} + g_{\text{chem}}) dV \quad \text{自由エネルギー汎関数}$$

$$g_{\text{grad}} = \frac{a}{2} |\nabla x_B|^2 \quad \text{こう配エネルギー密度}$$

$$g_{\text{chem}} = \frac{1}{\nu} [RT \{x_B \ln x_B + (1 - x_B) \ln(1 - x_B)\} + \Omega_{AB} x_B (1 - x_B)] \quad \text{[Blowey and Elliott 1991]}$$

化学的エネルギー密度

- Phase-field解析によって平衡状態における材料トポロジーを得る。
- 方程式が有する非線形性によって材料の構造が平衡状態に達するまでに膨大な時間が必要。

## Fe-Cr合金

格子点数	128 × 128
計算領域サイズ	150 × 150 nm <sup>2</sup>
Cr 初期濃度	0.5
温度	673 K
初期濃度ゆらぎ強度	0.01

計算条件. 原子A, Bはそれぞれ  
Fe, Cr

$x_B$  : Phase-field 変数 (原子Bの濃度)

$M$  : 易動度,

$\nu$  : モル体積,

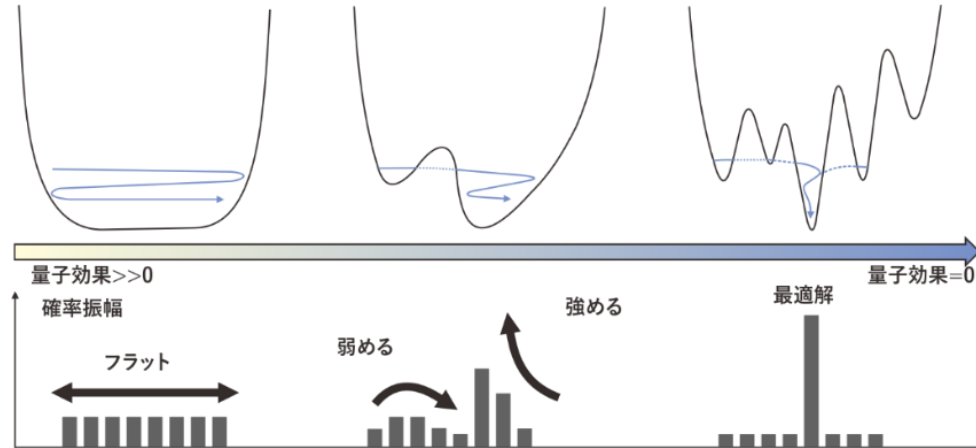
$\Omega_{AB}$  : 原子A, Bの相互作用パラメータ,

$a$  : こう配係数,

# 量子アニーリング



D-Wave社 2000量子ビットの  
量子コンピュータ



量子アニーリング操作

- 量子アニーリングではアニーリング解析を量子効果を使って実施する。 [Kadowaki, Nishimori (1998)]
- 量子効果を徐々に小さくしていくことで目的関数が最小になるポイントを探す。
- 2011年に量子アニーリングマシンが商品化された。
- 古典コンピュータより計算が加速されるいくつかの事例が示された。 [2015年Google・NASA発表], [A.D. King, (2021)]
- 量子アニーリングに関するハードウェア開発, ソフトウェア開発, アプリケーション開発が密接に関係し合いながら研究が進められている。
- 工学問題に応用するための手法開発を検討する。

# 量子アニーリングの適用



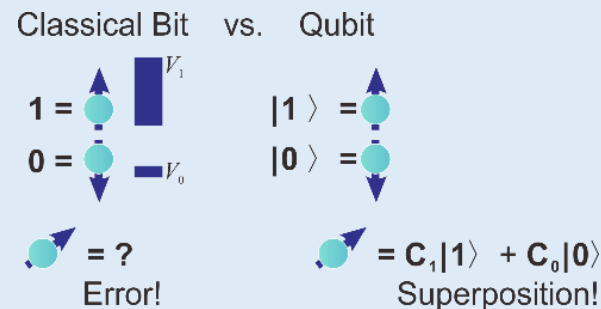
## アニーリングモデル

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} q_i q_j - \sum_{i=1}^N h_i q_i \quad (q_i = 0,1)$$

$H$  : ハミルトニアン

$J_{ij}, h_i$  : 問題設定によって決まるパラメータ

$q_i, q_j$  : イジングモデルの二値変数



- アニーリングマシンを用いるためにはイジングモデルを設定する必要がある。
- 目的関数となるハミルトニアンを設計する必要がある。

状態変数

イジング  
モデル

エネルギー

ハミルト  
ニアン

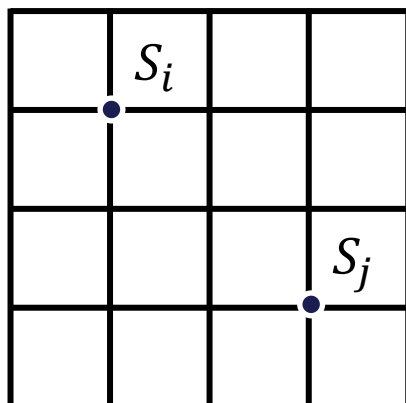
- 状態変数をイジングモデルの二値変数を使って表現する。
- エネルギーをハミルトニアンとして定式化する。
- Phase-field解析をアニーリングモデル化

# Phase-fieldモデルのイジング化, ハミルトニアン化



## Phase-field 変数の表現

$$S_i = \{a_{i1}, a_{i2}, a_{i3}, a_{i4}\}$$



## Quadratic Unconstrained Binary Optimization, QUBO (二次形式の制約なし二値変数最適化)

スピノーダル分解のハミルトニアン各項

$$\text{総和保存項} = \alpha_C \left( \left[ \sum_{S_i \in ALL} \sum_k a_{ik} \right] - c \right)^2$$

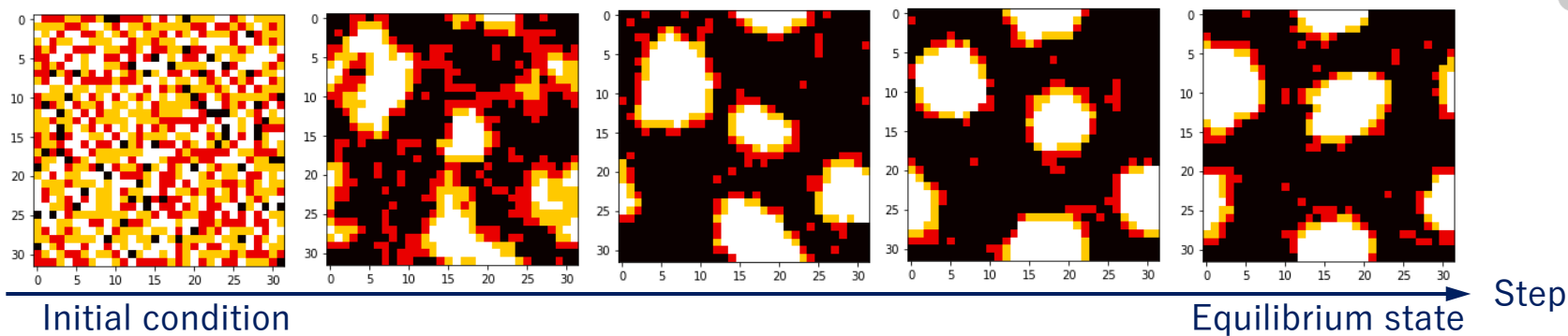
$$\text{隣接エネルギー項} = \alpha_A \sum_{(S_i, S_j) \in Adj} \left( \left[ \sum_k a_{ik} \right] - \left[ \sum_k a_{jk} \right] \right)^2$$

$$\text{内部エネルギー項} = -\alpha_I \sum_{S_i \in ALL} \left( \left[ \sum_k a_{ik} \right] - 2.0 \right)^2$$

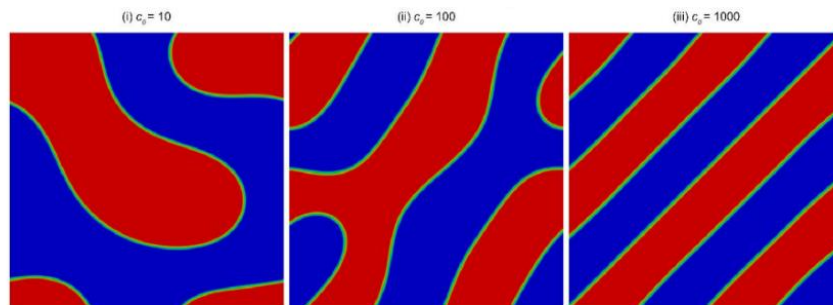
$$\text{長距離相互作用項} = \alpha_{OK} \sum_{(S_i, S_j) \in ALL^2} \left( G_{ij} \left[ \sum_k a_{ik} \right] \left[ \sum_k a_{jk} \right] \right)$$

- $i$ 番目のグリッド $S_i$ は4つのイジング変数で構成.
- グリッド $S_i$ の値は $\sum_k a_{ik}$ とする $a_{ik} \in \{0,1\}$ なので,  $S_i$ の値は0~4.
- $G_{ij}=1/r$  ( $r$ は $S_i, S_j$ 間の距離).

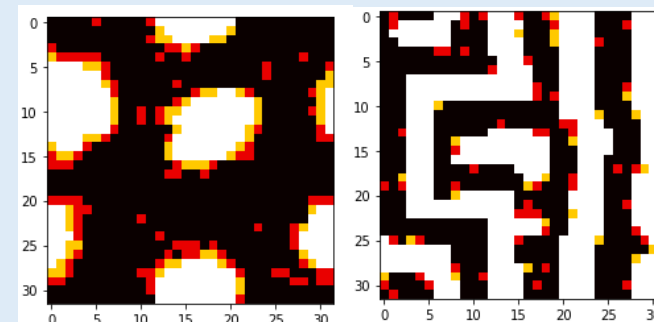
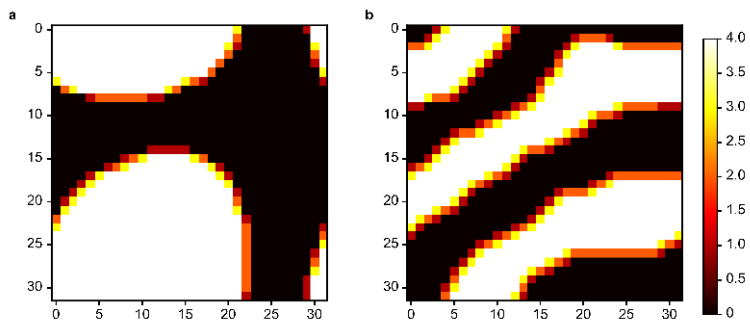
# 2次元Phase-fieldモデルのアニーリング解析



## 従来解析



## アニーリング解析



Cylinderライク  
パターン

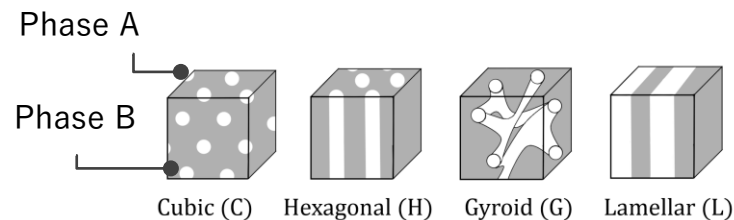
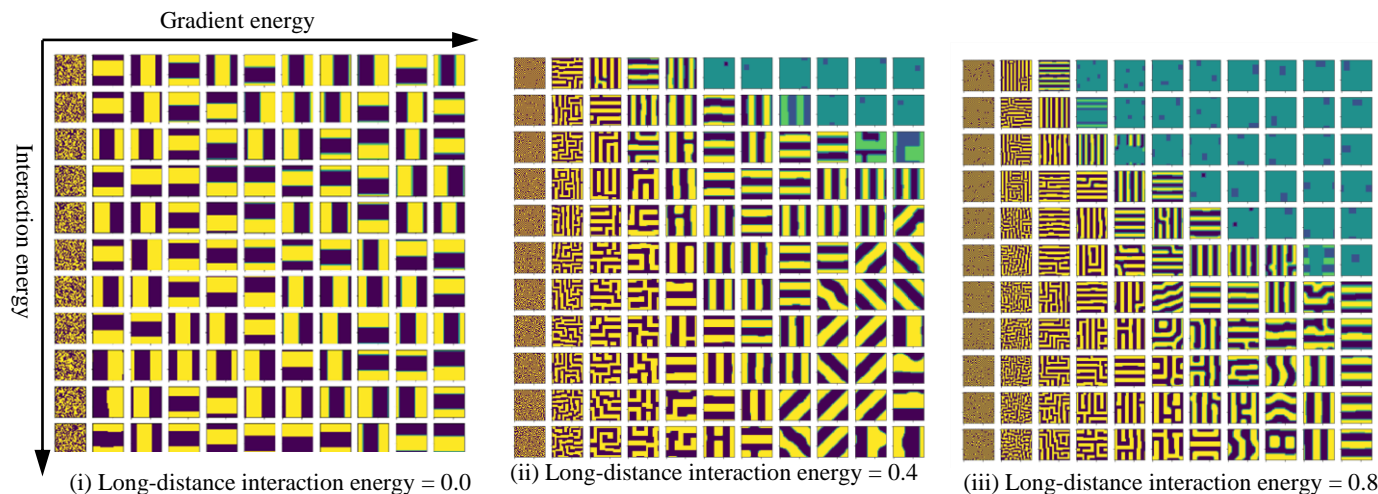
Lamellerライク  
パターン

- 解析が進むにつれて相が分離していく様子が観察される。
- 従来解析に類似したパターンが得られる。
- パラメータを変更することでトポロジーの特徴が変化する。

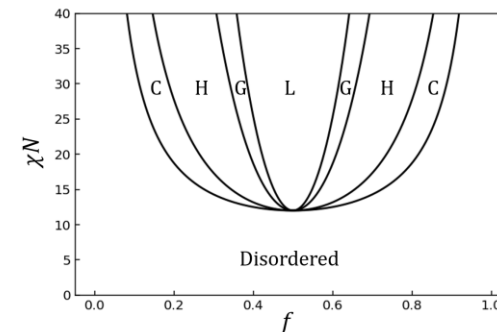
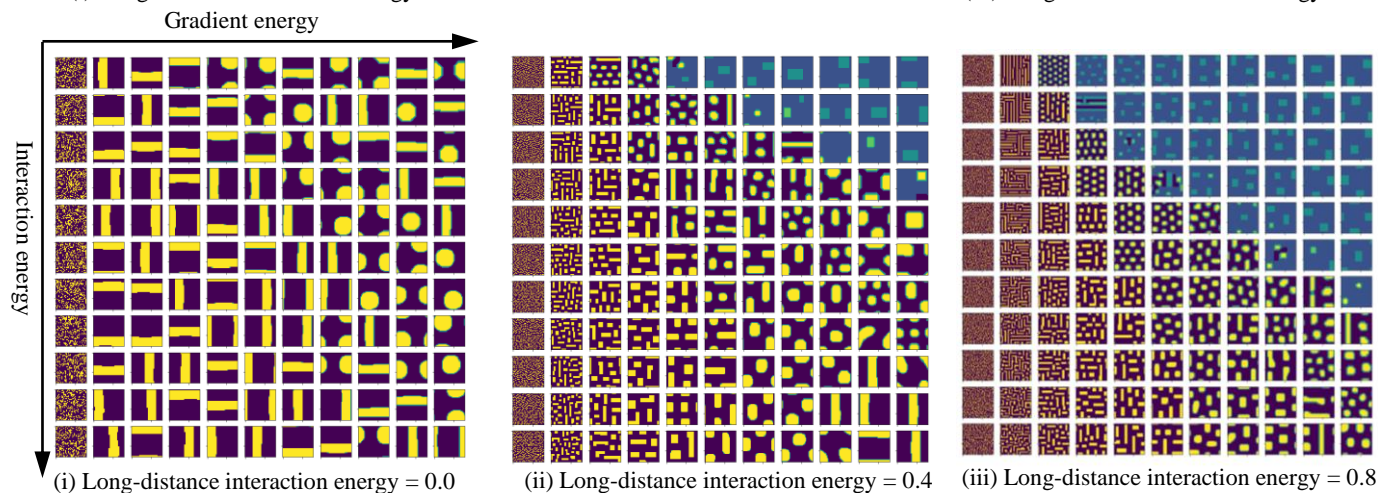
# 2次元Phase-field解析



(a) Initial average concentration 0.5



(b) Initial average concentration 0.3



Phase diagram of diblock-copolymer

$\chi$  : Flory-Huggins  $\chi$  parameter  
 $N$  : Product of the polymerization  
 $f$  : Volume fraction

[Matsen, M.W. and Schick, M., *Physical Review Letters*, 72, 2660, 1994.]

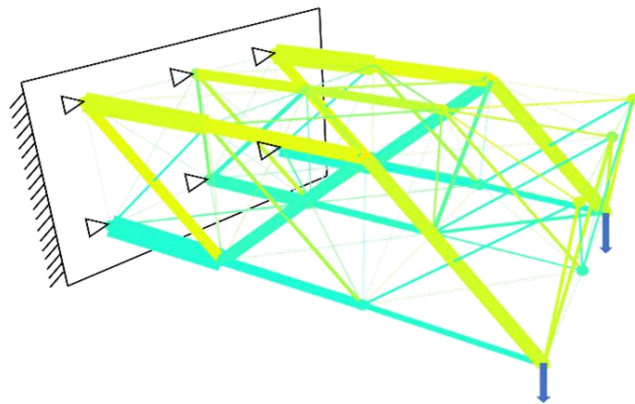
- アニールングにより得られるスピノーダル分解組織.
- 1 sほどで平衡状態が取得できる.
- (a) 初期平均濃度0.5, (b) 初期平均濃度0.3



# まとめ

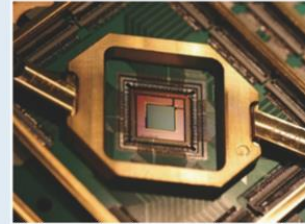


- 本研究では、量子アニーリングを用いたフェーズフィールド法に基づく材料トポロジーの高速解析手法および固体の構造解析を開発した。
- 古典手法との比較のため定量評価を試みた。
- 逆解析に基づく数値材料設計システムの開発を目指し、望ましい構造材料を提案する。
- 同スキームは流体力学にも適用できる。
- 量子アニーリングによる構造解析への拡張も実施している。



[Honda, R., Endo, K., Suzuki, Y., Matsuda, Y., Tanaka, S., and Muramatsu, M., "Development of optimization method for truss structure by quantum annealing", (Under Rev.)]

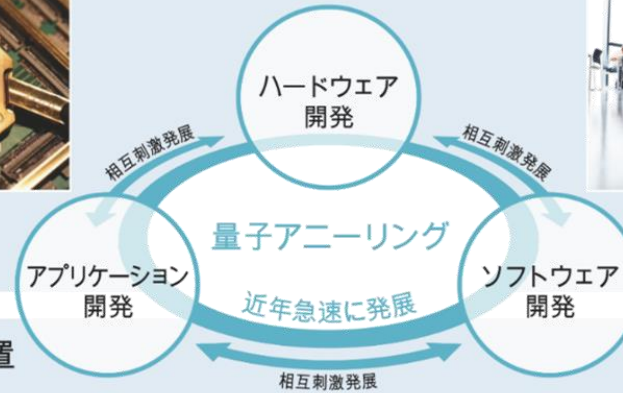
## 量子アニーリングを取り巻く現状



D-Wave Systems  
量子コンピュータ



量子コンピュータ IBM Q  
慶応義塾大学ハブ



## 本提案の立ち位置

量子アニーリング  
を使った  
アプリケーション開発  
の必要性

本提案

量子アニーリング  
の応用範囲拡大と  
材料開発  
の高速化を推進

将来

要求に応じた力学特性  
を有する材料設計  
産業界にインパクト



応用範囲: 金属、高分子、セラミックス

- 非線形性が強い問題への拡張
- 複雑な連成物理問題への適用
- 非定常問題の解法

ご清聴ありがとうございました！