

Quantum CAEに関する取り組み紹介： 偏微分方程式の求解と設計最適化のための 量子アルゴリズム

株式会社豊田中央研究所
量子コンピューティング研究領域
佐藤 勇気



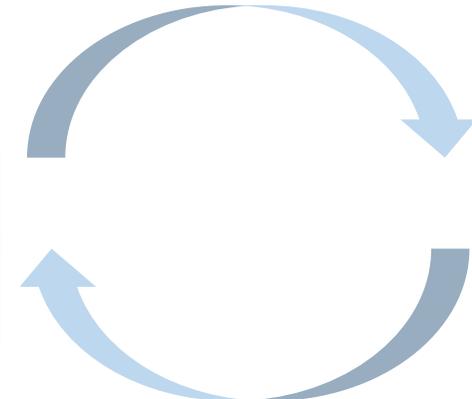
コンピューティング技術の発展につれ シミュレーションを活用したモノづくりが主流に

Computer-aided Engineering; CAE

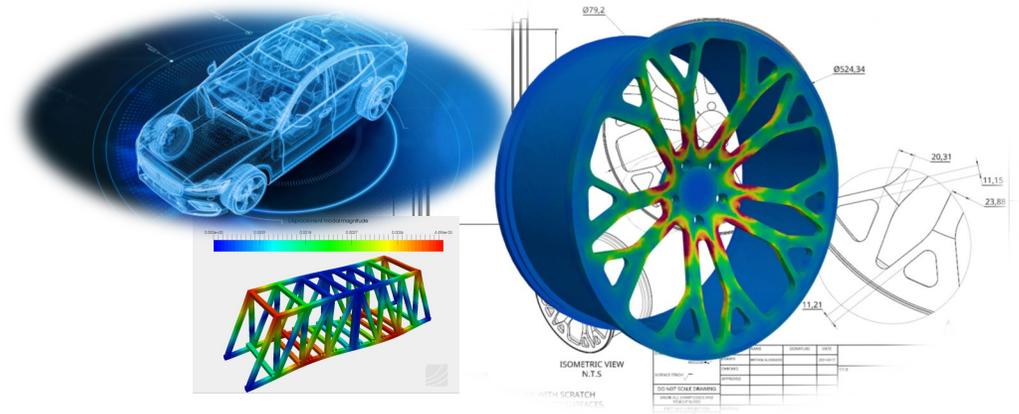


設計最適化

シミュレーションモデル



シミュレーション結果



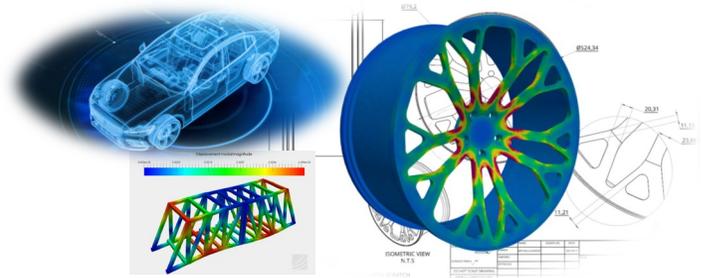
物理現象のシミュレーション
(変形、熱伝導、流体など)

CAEの大規模化・高速化⇔シミュレーションの大規模化・高速化

シミュレーション対象

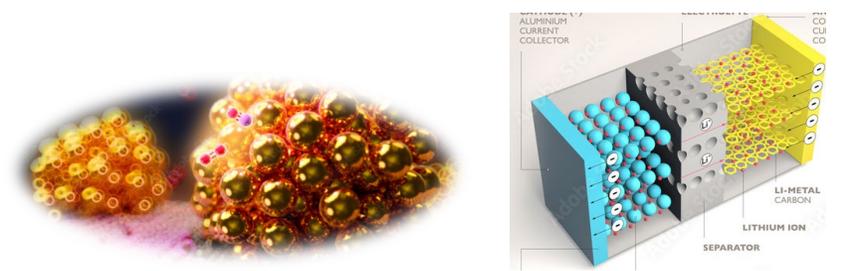
古典系

(材料力学、熱力学、流体力学、電磁気、etc..)



量子系

(電子、原子核、光子、etc..)



コンピューティングシステム

古典コンピュータ

- 計算力学
- CAE

- 量子化学計算
- 量子統計物理

量子コンピュータ

- **Quantum-CAE**

- 量子計算化学
- 量子計算統計物理

古典系のシミュレーション
≡ 偏微分方程式 (PDE) の求解

- 量子アルゴリズム：
- 変分量子固有値ソルバー
 - 量子位相推定
 - ハミルトニアンシミュレーション

定常問題

平衡状態を表す偏微分方程式 (PDE)

e.g. ポアソン方程式 $-k\nabla^2 T = Q$

| アルゴリズム | 特徴 |
|---|---|
| HHL algorithm (Harrow et al., Phys Rev Lett 103 150502, 2009) | <ul style="list-style-type: none"> • (特定条件下で)指数加速が得られる • 実装はブラックボックスになっている |
| VQLS (Variational Quantum Linear Solver) (Bravo-Prieto et al., Quantum, 1188, 2023) | <ul style="list-style-type: none"> • Near-termデバイスに実装できる • 適切な量子回路設計が必要になる • 理論保証はない |

時間発展問題

時間発展を表す偏微分方程式 (PDE)

e.g. 波動方程式 $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \nabla^2 u$

| アルゴリズム | 特徴 |
|--|---|
| Hamiltonian simulation (Babbush et al., Phys Rev X 13 041041, 2023) | <ul style="list-style-type: none"> • (特定条件下で)指数加速が得られる • 実装はブラックボックスになっている • 様々なアルゴリズムの内部で使われる |
| VQS (Variational Quantum Simulation) (Leong et al., International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow, 33 (11), 2023) | <ul style="list-style-type: none"> • Near-termデバイスに実装できる • 適切な量子回路設計が必要になる • 理論保証はない |

変分量子アルゴリズム (Variational Quantum Algorithm; VQA)

$|\psi(\theta)\rangle$: パラメータ θ により決まる量子状態
 パラメータ付き量子ゲートを作用させてつくる

Ex. Ryゲート

$$R_y(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -\sin \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

パラメータ θ に応じた
量子回路入力



$\langle \psi(\theta) | O | \psi(\theta) \rangle$ の最小化

$\langle \psi(\theta) | O | \psi(\theta) \rangle$ の値 (と勾配)



→ O の固有値と
固有ベクトルがわかる

従来コンピュータ

パラメータ θ の更新

量子コンピュータ

$\langle \psi(\theta) | O | \psi(\theta) \rangle$ の評価
 ある演算子 (エルミート行列) O の期待値

シュレディンガー方程式

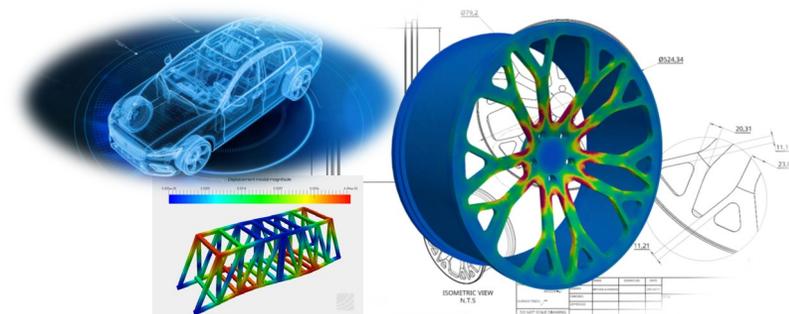
$$\frac{\partial \psi(t)}{\partial t} = -iH\psi(t) \quad \rightarrow \quad \psi(t) = e^{-iH(t-t_0)}\psi(t_0)$$

ハミルトニアンシミュレーション

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iH(t-t_0)}|\psi(t_0)\rangle \quad |\psi(t_0)\rangle: \text{量子ビットの量子状態}$$

時間発展演算子 $e^{-iH(t-t_0)}$ を量子回路として実装し、
量子ビットの状態 $|\psi(t)\rangle$ の時間発展を解きたい系の波動関数 $\psi(t)$ と対応させる

Quantum computer-aided Engineering; Quantum CAE



物理現象のシミュレーション
(変形、熱伝導、流体など)

ポアソン方程式のための
量子・古典アルゴリズム
(Phys. Rev. A, 2021)

ハミルトニアンシミュレーションによる
古典系の時間発展シミュレーション
(arXiv:2402.18398, 2024)

一般化固有値問題のための
量子・古典アルゴリズムの提案と
有限要素法への適用
(Phys. Rev. A, 2023)



設計最適化

NISQ

量子重ね合わせを利用した
設計最適化アルゴリズムの提案
(QCE, 2023)

FTQC

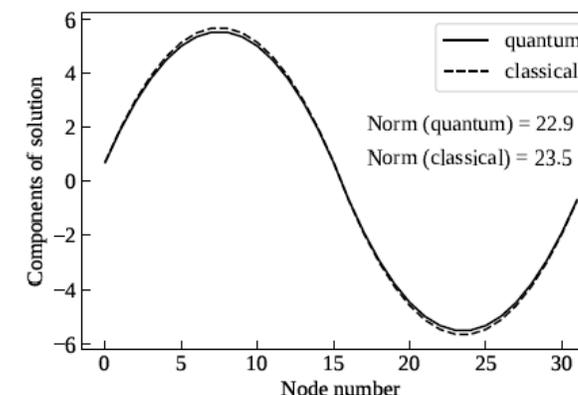
PHYSICAL REVIEW A **104**, 052409 (2021)**Variational quantum algorithm based on the minimum potential energy for solving the Poisson equation**Yuki Sato^{1,*}, Ruho Kondo,² Satoshi Koide,¹ Hideki Takamatsu,³ and Nobuyuki Imoto⁴¹Toyota Central R&D Labs., Inc., Koraku Mori Building 10F, 1-4-14 Koraku, Bunkyo-ku, Tokyo 112-0004, Japan²Toyota Central R&D Labs., Inc., 41-1 Yokomichi, Nagakute, Aichi 480-1192, Japan³Toyota Motor Corporation, 1 Toyota-Cho, Toyota, Aichi 471-8571, Japan⁴Institute for Photon Science and Technology, School of Science, The University of Tokyo, 7-3-1 Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo 113-0033, Japan

(Received 18 June 2021; revised 27 September 2021; accepted 22 October 2021; published 10 November 2021)

Computer-aided engineering techniques are indispensable in modern engineering developments. In particular, partial differential equations are commonly used to simulate the dynamics of physical phenomena, but very large systems are often intractable within a reasonable computation time, even when using supercomputers. To overcome the inherent limit of classical computing, we present a variational quantum algorithm for solving the Poisson equation that can be implemented in noisy intermediate-scale quantum devices. The proposed method defines the total potential energy of the Poisson equation as an expectation of certain observables, which are decomposed into a linear combination of Pauli operators and simple observables. The expectation value of these observables is then minimized with respect to a parameterized quantum state. Because the number of decomposed terms is independent of the size of the problem, this method requires relatively few quantum measurements. Numerical experiments demonstrate the faster computing speed of this method compared with classical computing methods and a previous variational quantum approach. We believe that our approach brings quantum computer-aided techniques closer to future applications in engineering developments.

DOI: [10.1103/PhysRevA.104.052409](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.104.052409)**変分量子アルゴリズムを用いたポアソン方程式の求解 (Toyota w/ UTokyo)**

- グラフ構造を用いた**定常状態**のPDEの離散化
- **エネルギー最小化問題**としての定式化



ポアソン方程式を離散化した連立方程式 $Au = f$ を解く変分量子アルゴリズム

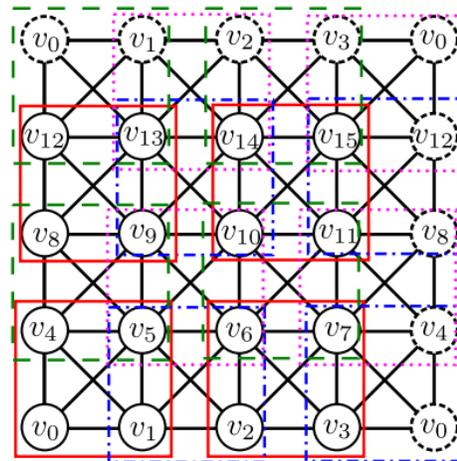
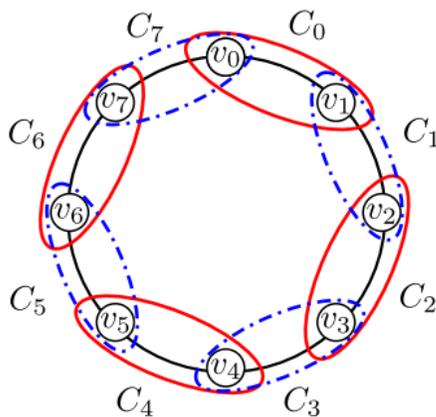
$Au = f$ の解は $\operatorname{argmin}_u J = \frac{1}{2} u^\dagger Au - u^\dagger f$ を満たす：**エネルギー最小化**問題として定式化

量子コンピュータで評価できる形式に変換

$$\min_{\theta} - \frac{1}{2} \frac{(\langle f, \psi(\theta) | (X \otimes I) | f, \psi(\theta) \rangle)^2}{\langle \psi(\theta) | A | \psi(\theta) \rangle}$$

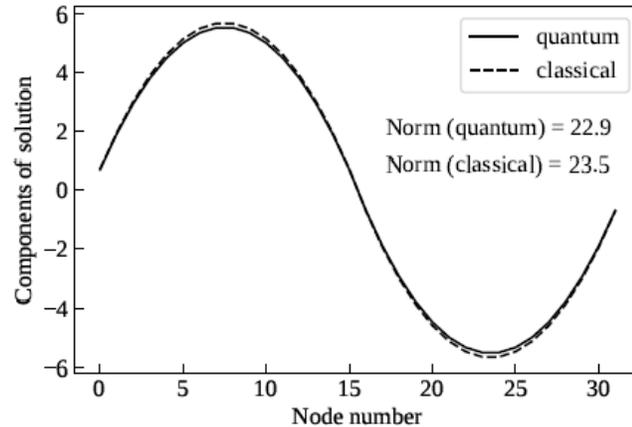
$$u = \frac{\langle b, \psi(\theta_{\text{opt}}) | (X \otimes I) | b, \psi(\theta_{\text{opt}}) \rangle}{\langle \psi(\theta_{\text{opt}}) | A | \psi(\theta_{\text{opt}}) \rangle} |\psi(\theta_{\text{opt}})\rangle$$

がポアソン方程式の解



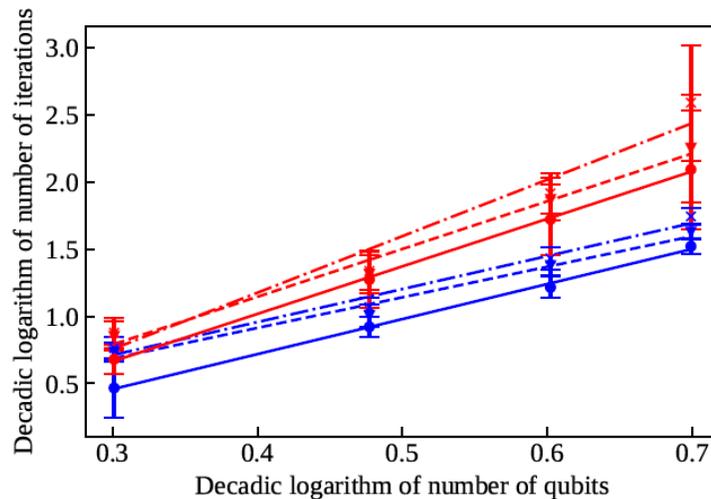
$X \otimes I$ はパウリ測定可能、
 A の期待値は問題を**グラフ構造に対応させる**ことで
期待値計算できる形式に**分解可能**

Statevector simulatorを用いて実行



(a) Periodic boundary conditions

古典コンピュータによる求解法（逆行列計算）とよく一致する解が得られた



先行研究

提案手法

連立方程式の残差最小化による先行研究と比べて少ない反復回数で解が得られた

本研究の成果

- PDEの求解をエネルギー最小化問題として、VQAの枠組みで定式化した。
- PDEを離散化した際に現れる剛性行列をグラフ構造と対応させて少数項数で分解する方法を提示した。
- 数値実験において、先行研究と比べてパラメータ最適化の収束性が良いことを確認した。

問題点・課題

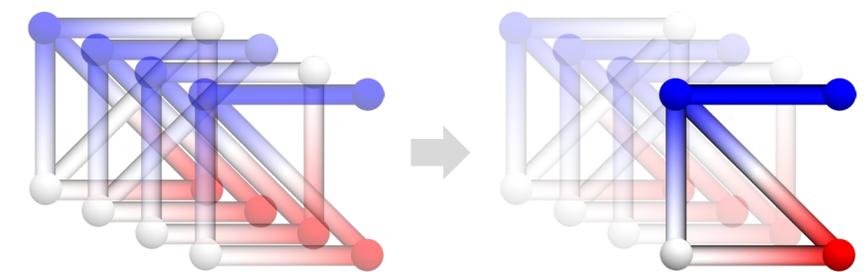
- VQAの課題として広く知られている勾配消失問題（いわゆるBarren Plateau）が生じる。
→Warm startなど適切な初期値の扱いが必要
- 得られる解が量子状態の振幅に埋め込まれるため、すべての成分を取り出すには状態トモグラフィ（指数時間）が必要になる。
→すべての成分を必要としない有用なアプリケーションが必要

逆問題（最適設計問題）を 変分量子アルゴリズムの枠組みで定式化 (Toyota)

- トポロジー最適化問題を
 - 複数構造に対する**並列シミュレーション**
 - 最適構造の**確率の増幅**
 の2ステップで実施する方法を提案



トポロジー最適化
モノの最適な形を数理的に設計



2023 IEEE International Conference on Quantum Computing and Engineering (QCE)

Quantum topology optimization of ground structures for near-term devices

Yuki Sato
Toyota Central R& D Labs., Inc.
41-1, Yokomichi, Nagakute, Aichi 480-1192, Japan
yuki-sato@mosk.tytlabs.co.jp

Ruho Kondo
Toyota Central R& D Labs., Inc.
41-1, Yokomichi, Nagakute, Aichi 480-1192, Japan

Satoshi Koide
Toyota Central R& D Labs., Inc.
41-1, Yokomichi, Nagakute, Aichi 480-1192, Japan

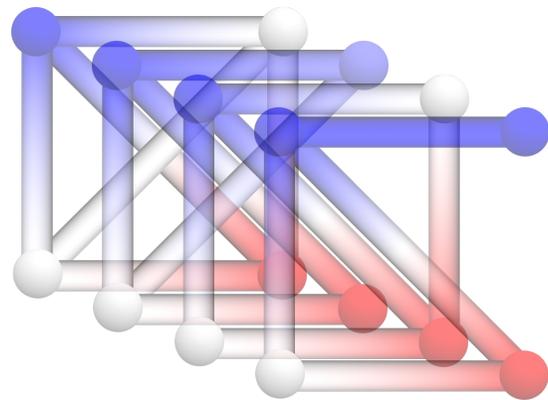
Seiji Kajita
Toyota Central R& D Labs., Inc.
41-1, Yokomichi, Nagakute, Aichi 480-1192, Japan

Abstract—Product development processes frequently use numerical simulations and mathematical programming techniques. Structural optimization, especially topology optimization, is one of the most promising techniques for generating insightful design choices. Topology optimization for discrete structures, such as truss structures, can be formulated as a combinatorial optimization problem, where the combination of the existence or absence of the material is optimized. In this study, we examine the usage of quantum computers as a potential solution to discrete topology optimization problems. The proposed method consists of two variational quantum algorithms (VQAs); the first solves the state equilibrium equation for all possible structures, and the second amplifies the probability of the optimal structure in quantum superposition. Several experiments, including a real device experiment, show that the proposed method successfully obtained the optimal structure. These findings suggest that quantum computers could be a potential tool for solving topology optimization problems.

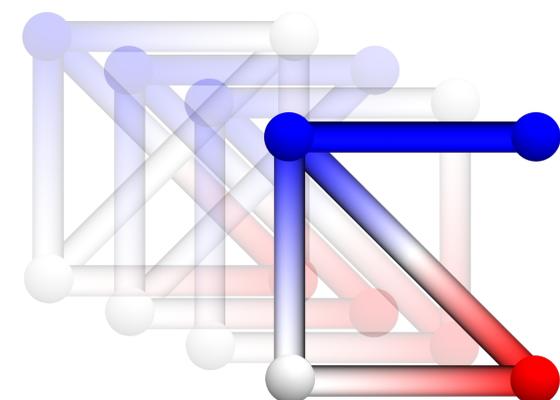
they can handle the existence and absence of the material exactly by binary variables and have the potential for avoiding local optima owing to the stochastic exploration of the design space [8], such approaches have only been applied to relatively small-scale problems due to the curse of dimensionality. For discrete structures, on the other hand, truss topology optimization methods, so-called ground structure methods, were widely studied, in which many edges connect several pre-placed nodes and then the existence or absence of each edge is optimized. For relatively small-scale problems, the mixed integer programming [9], [10] was widely used to solve truss topology optimization problems. However, it is well-known that determining minimum weight truss structures with discrete member sizes is an NP-hard problem [2], which will take an exponentially long time to solve exactly. Thus, the heuristic approaches have also been developed [11], [12] to handle the problems within a reasonable time, whereas

Index Terms—Variational quantum algorithm, Design optimization, Computer-aided engineering

Simulation for all possible designs



Measurement of optimum design



すべての構造についての順方向解析を実行して解を量子状態ベクトルに埋め込む

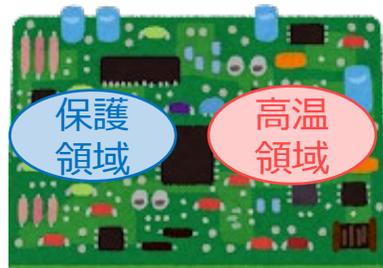
$$|\Psi\rangle := \sum_{x_1, \dots, x_m \in \{0,1\}} \sum_{k=1}^N T_k(x_1, \dots, x_m) \underbrace{|x_1, \dots, x_m\rangle}_{\text{構造配置}} \otimes \underbrace{|k\rangle}_{\text{節点番号}}$$

最適構造の確率を増幅してから量子状態を観測して結果を取り出す

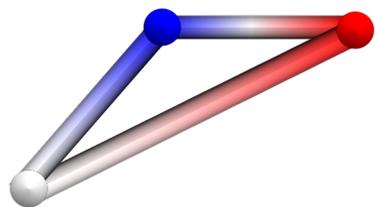
振幅に埋め込まれた解は最適化の目的関数を評価するために使用される
→解を古典情報として取り出す必要なし

背景

保護領域に熱を伝えないよう基板上の熱流を制御したい

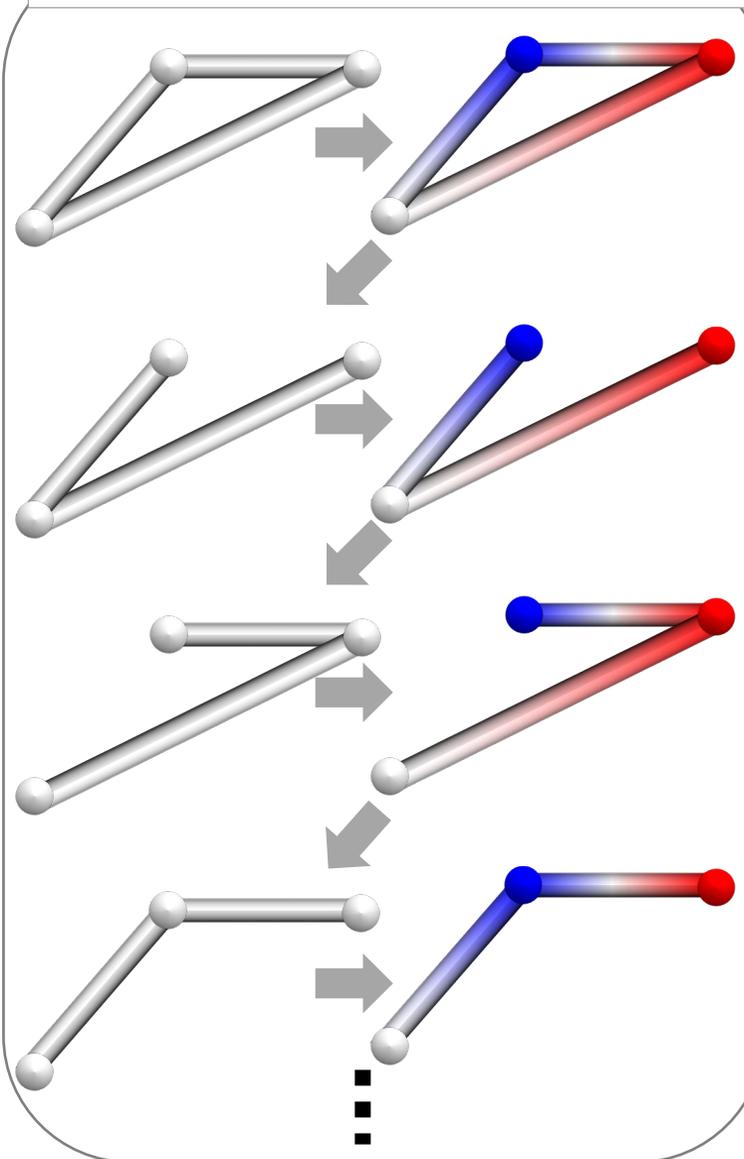


問題設定



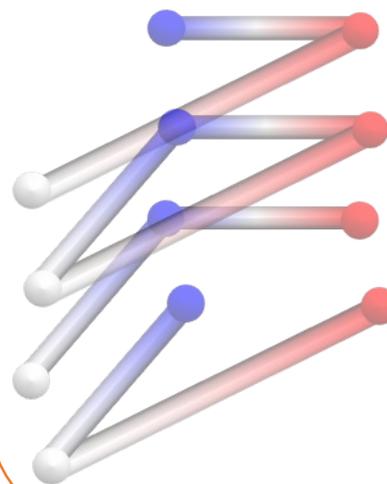
グラフ構造のエッジ配置最適化問題として定式化

古典コンピュータのアプローチ: 逐一計算

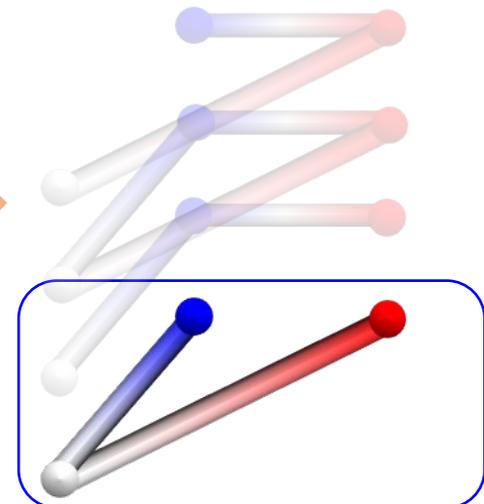


量子コンピュータのアプローチ: 一気に計算

全構造の温度分布



最適構造の観測



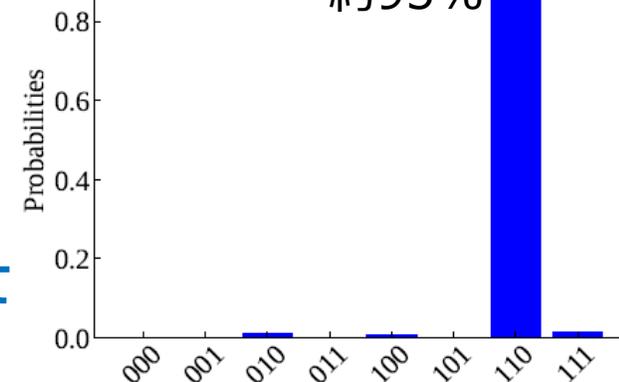
ibm_kawasakiの結果

約95%



<https://www.ibm.com/jp-ja/quantum>

量子コンピュータを用いて最適構造を計算できた



本研究の成果

- 順方向解析と逆問題を繋ぐ量子アルゴリズムのコンセプトを提示した。
 - 順方向解析と最適設計問題をそれぞれVQAの枠組みで定式化した。
- 数値実験および実機実験において、妥当性を確認した。

問題点・課題

- VQAの課題として広く知られている勾配消失問題（いわゆるBarren Plateau）が生じる。
→Warm startなど適切な初期値の扱いが必要
- すべての構造の情報を効率的に（少ないパラメータで）表現できる量子回路の設計が必要になる。
→問題の特徴を考慮した量子回路設計が必要

ハミルトニアンシミュレーションによる時間発展系のPDEの求解 (Toyota w/ IBM Q hub@Keio)

Hamiltonian simulation for time-evolving partial differential equation by scalable quantum circuits

Yuki Sato,^{1,2,*} Ruho Kondo,^{1,2} Ikko Hamamura,³ Tamiya Onodera,^{3,2} and Naoki Yamamoto^{4,2}

¹Toyota Central R&D Labs., Inc., 1-4-14, Koraku, Bunkyo-ku, Tokyo, 112-0004, Japan

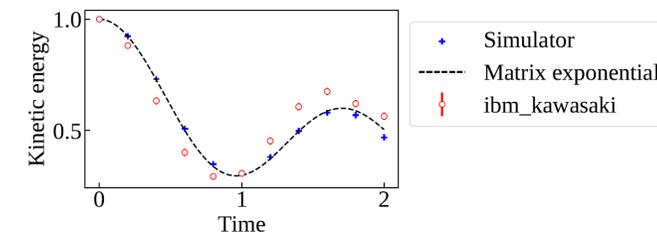
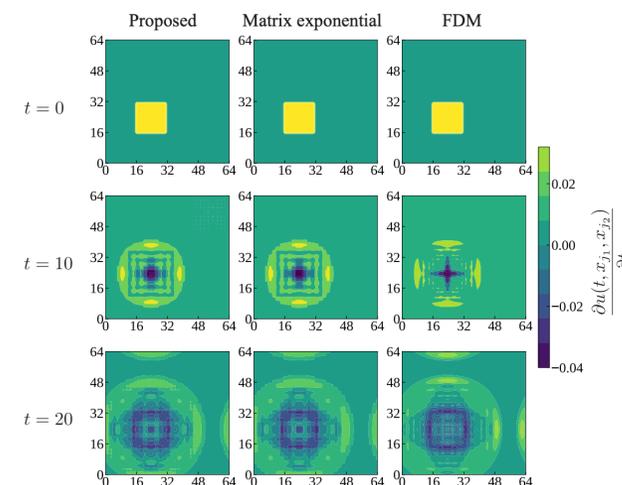
²Quantum Computing Center, Keio University, 3-14-1 Hiyoshi, Kohoku-ku, Yokohama, Kanagawa, 223-8522, Japan

³IBM Quantum, IBM Research – Tokyo 19-21 Nihonbashi Hakozaki-cho, Chuo-ku, Tokyo, 103-8510, Japan

⁴Department of Applied Physics and Physico-Informatics, Keio University, Hiyoshi 3-14-1, Kohoku-ku, Yokohama, Kanagawa, 223-8522, Japan

Solving partial differential equations for extremely large-scale systems within a feasible computation time serves in accelerating engineering developments. Quantum computing algorithm, particularly the Hamiltonian simulation, is a potential and promising approach to achieve this purpose. Actually there are several proposals of Hamiltonian simulation with potential quantum speedup, but their detailed implementation and accordingly the detailed computational complexity are all somewhat unclear. This paper presents a method that enables us to explicitly implement the quantum circuit for Hamiltonian simulation; the key technique is the explicit gate construction of differential operators contained in the target partial differential equation. Moreover, we show that the space and time complexity of the constructed circuit is exponentially smaller than that of all classical algorithms. We also provide numerical experiments and an experiment on a real device for the wave equation to demonstrate the validity of our proposed method.

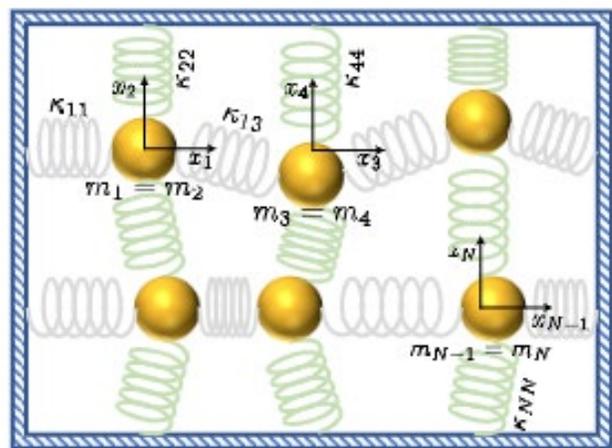
- **古典保存系**のPDEをシュレディンガー方程式に帰着
- 差分演算子を量子ビットの演算に変換
- 具体的な量子回路を導出し、**指数加速**が見込めることを提示



Exponential Quantum Speedup in Simulating Coupled Classical Oscillators by Babbush et al., published in Physical Review X, 2023.

ニュートンの運動方程式

$$m_j \ddot{x}_j(t) = \sum_{k \neq j} \kappa_{jk} (x_k(t) - x_j(t)) - \kappa_{jj} x_j(t)$$



(Babbush et al., Physical Review X, 2023)

量子状態

$$|\psi(t)\rangle := \frac{1}{\sqrt{2E}} \begin{pmatrix} \sqrt{\mathbf{M}} \dot{\mathbf{x}}(t) \\ i\vec{\mu}(t) \end{pmatrix}$$

E: 系の全力学的エネルギーは保存量

→ 量子状態ベクトルのノルムの保存と対応させる

シュレディンガー方程式

$$i\dot{|\psi(t)\rangle} = \mathbf{H}|\psi(t)\rangle$$

オラクルベースのハミルトニアン

$$\mathbf{H} := - \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{B} \\ \mathbf{B}^\dagger & \mathbf{0} \end{pmatrix}$$

$$\sqrt{\mathbf{M}}\mathbf{B}|j, k\rangle = \begin{cases} \sqrt{\kappa_{jj}}|j\rangle & \text{if } j = k \\ \sqrt{\kappa_{jk}}(|j\rangle - |k\rangle) & \text{if } j < k \end{cases}$$

古典系のシミュレーションにおいて指数加速を理論的に保証している

オラクルを量子回路として実装する方法は自明ではない

波動方程式

$$\frac{\partial^2 u(t, \boldsymbol{x})}{\partial t^2} = c^2 \nabla^2 u(t, \boldsymbol{x})$$

c : 波の速さ
 u : 状態量



$$\psi(t, x_1) = \begin{pmatrix} \frac{\partial u(t, x_1)}{\partial t} \\ i c \frac{\partial u(t, x_1)}{\partial x_1} \end{pmatrix}, \quad \mathcal{H} = c \begin{pmatrix} 0 & \frac{\partial}{\partial x_1} \\ -\frac{\partial}{\partial x_1} & 0 \end{pmatrix}$$

シュレディンガー方程式

$$\frac{\partial \psi(t, \boldsymbol{x})}{\partial t} = -i \mathcal{H} \psi(t, \boldsymbol{x})$$

時間発展演算子 $e^{-iH\tau}$ を量子回路に実装したい

連続空間のハミルトニアン

$$\mathcal{H} = c \begin{pmatrix} 0 & \frac{\partial}{\partial x_1} \\ -\frac{\partial}{\partial x_1} & 0 \end{pmatrix}$$



前進差分の量子ビット演算子

$$D_D^+ := \frac{1}{l} (S^- - I^{\otimes n})$$

シフト演算子 $S^- = \sum_{j=1}^{2^n-1} |j-1\rangle \langle j|$

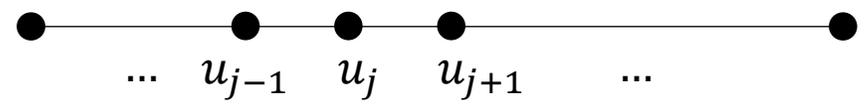
$$\begin{aligned} S^- &:= \sum_{j=1}^n I^{\otimes(n-j)} \otimes \sigma_{01} \otimes \sigma_{10}^{\otimes(j-1)} \\ &= \sum_{j=1}^n s_j^- \end{aligned}$$

昇降演算子

$$\sigma_{01} := \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_{10} := \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

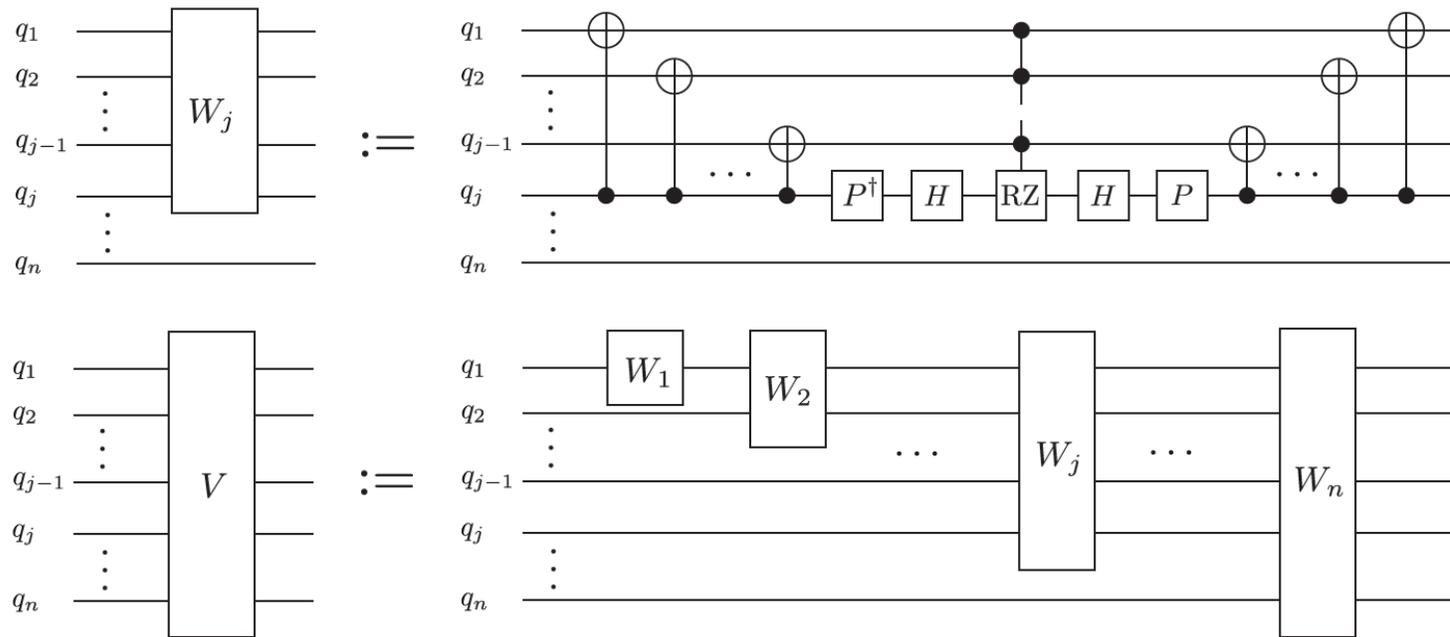
離散空間のハミルトニアン

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= c (\sigma_{01} \otimes D_D^+ - \sigma_{10} \otimes D_D^-) \\ &= \frac{c}{l} \left(\sum_{j=1}^n (\sigma_{01} \otimes s_j^- + \sigma_{10} \otimes s_j^+) - (\sigma_{01} + \sigma_{10}) \otimes I^{\otimes n} \right) \end{aligned}$$



$N (= 2^n)$ グリッド

$\mathcal{H} = \gamma \sum_{j=1}^n (e^{i\lambda} s_j^- + e^{-i\lambda} s_j^+)$ に関して時間発展演算子 $e^{-iH\tau}$ の実装を考えよう



トロッター分解の近似誤差

$$\|\exp(-i\mathcal{H}\tau) - V(\gamma\tau, \lambda)\| \leq \frac{\gamma^2\tau^2(n-1)}{2}$$

トロッターステップのゲート数 (CNOT gates)

$$9n^2 - 33n + 34$$

Time Complexity

$$O(dn^3\gamma^2T^2 \sum_{\alpha=1}^d \eta_{\alpha}^2/\varepsilon)$$

ε : additive error
 d : spatial dimension
 η_{α} : coeff. of Hamiltonian for x_{α} -axis

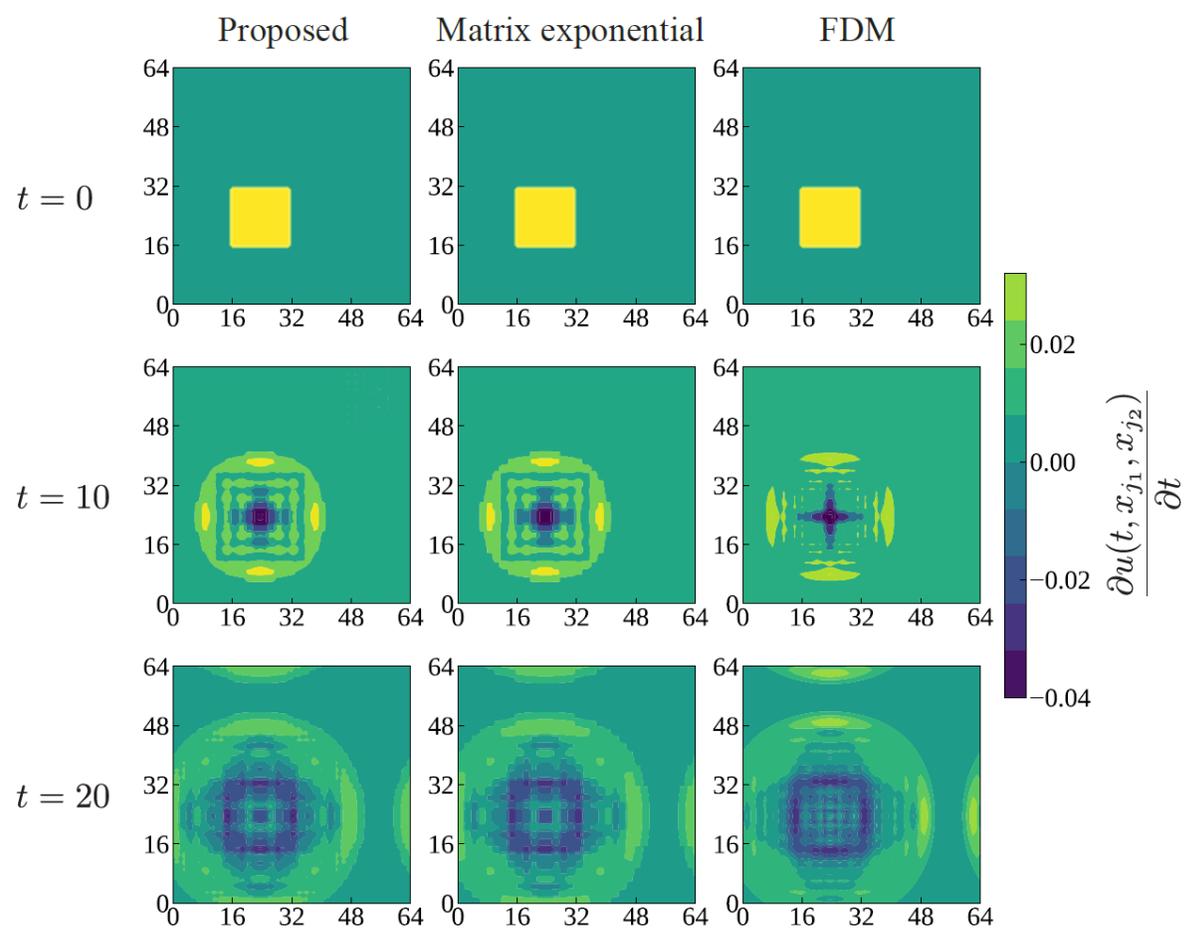
ハミルトニアンシミュレーションの量子ゲート数 $O\left(\frac{dn^3T^2}{\varepsilon}\right)$
 古典的な差分法における四則演算数 $O(2^{dn}T^2/\varepsilon)$

→ グリッド数 $N(= 2^n)$ と空間次元 d に関して指数的な加速

解は量子状態の振幅に埋め込まれるため、すべての成分を取り出すには状態トモグラフィ（指数時間）が必要になることに注意

Statevector simulatorによる2次元波動方程式のシミュレーション (13qubits)

運動量の時間発展をプロット



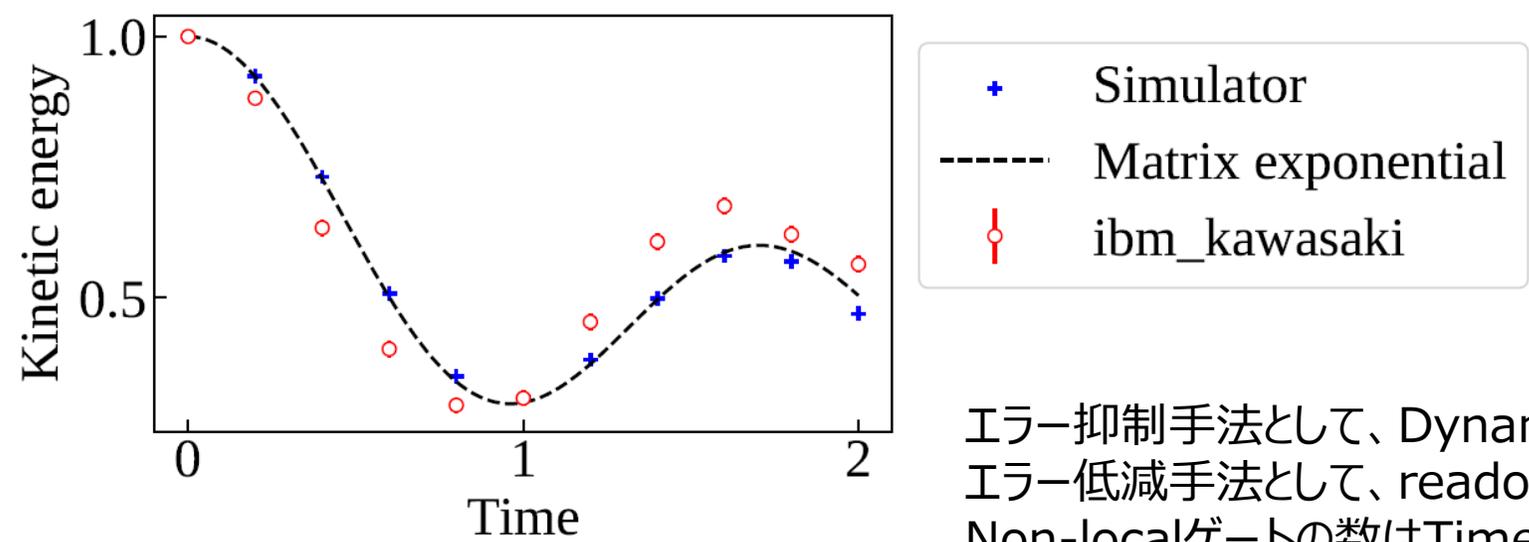
| | |
|--------------------|---------------------|
| Proposed | シュレディンガー方程式の量子回路実装 |
| Matrix exponential | シュレディンガー方程式の古典的求解 |
| FDM | 有限差分法による波動方程式の古典的求解 |

波動方程式を解いた結果 (FDM、右列) とシュレディンガー方程式を解いた結果 (左列と中列) に差異がある
→ 離散化の違いに起因

提案手法 (量子回路実装) による時間発展はシュレディンガー方程式による厳密な時間発展と良く一致している
→ 量子回路実装による誤差は十分小さい

ibm_kawasaki 実機を用いた1次元波動方程式のシミュレーション (3 qubits)

系の運動エネルギーの時間発展をプロット



エラー抑制手法として、Dynamical decouplingを
 エラー低減手法として、readout error mitigation (TRES)を使用
 Non-localゲートの数はTime=2のときで最大の120個

実機により評価した系の運動エネルギーはシミュレータの結果を良く捉えている

本研究の成果

- 古典保存系のシミュレーションをハミルトニアンシミュレーションとして実行するための具体的な量子回路とそのリソースの見積もりを提示した。
- 数値実験において、提案手法による結果が従来の有限差分法とよく一致していることを確認し、本手法の妥当性を示した。さらに、実機実験も行った。

課題と今後の展望

- 現状はシュレディンガー方程式と対応づけるために扱える現象が保存系に限られている。今後は非保存系への拡張に取り組む。
- シュレディンガー方程式のハミルトニアンが自己共役性を満たすために扱える境界条件が限られている。上記の非保存系への拡張と合わせて扱える境界条件を拡張する。

これまでの取り組みのまとめ

新しいモノづくりを見据えた量子アルゴリズムの探索

- 偏微分方程式の求解法の構築
- 設計最適化手法

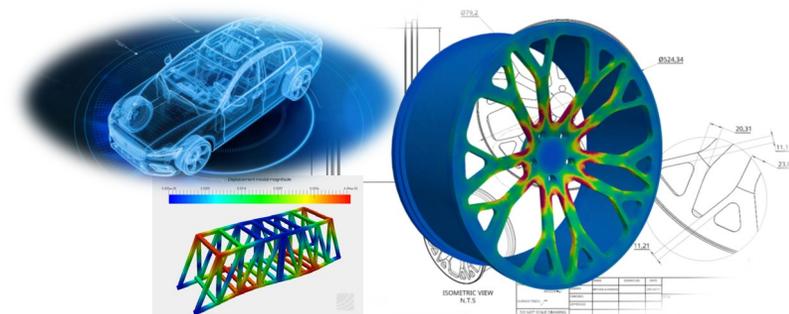
Quantum CAEのための
基盤技術は揃いつつある

今後の課題

- アルゴリズム面
 - 量子回路の効率化（できるだけ浅くしたい）
 - 非線形系への適用
- ハードウェア面
 - ~100万自由度規模（~20qubits程度）を安定的に実行できる精度

目覚ましいスピードで研究が進展しており、参入のハードルが上昇
→オープンイノベーションで補完しながら研究を推進

Quantum computer-aided Engineering; Quantum CAE



物理現象のシミュレーション
(変形、熱伝導、流体など)

ポアソン方程式のための
量子・古典アルゴリズム
(Phys. Rev. A, 2021)

Components of solution vs Node number. The graph shows a smooth curve oscillating between -6 and 6. The legend indicates 'quantum' (solid line) and 'classical' (dashed line). Norm (quantum) = 22.9, Norm (classical) = 23.5.

ハミルトニアンシミュレーションによる
古典系の時間発展シミュレーション
(arXiv:2402.18398, 2024)

A 3x3 grid of heatmaps showing the time evolution of a system. The columns are labeled 'Proposed', 'Matrix exponential', and 'FDM'. The rows are labeled with time steps $t=0$, $t=10$, and $t=20$. A color scale on the right indicates the magnitude of the function.

一般化固有値問題のための
量子・古典アルゴリズムの提案と
有限要素法への適用
(Phys. Rev. A, 2023)

A diagram showing a rectangular domain divided into a grid of finite elements. The x and y coordinates are labeled on the axes, ranging from 0.0 to 1.0.

一般のPDEへの拡張



設計最適化

NISQ

量子重ね合わせを利用した
設計最適化アルゴリズムの提案
(QCE, 2023)

A diagram showing a truss structure with nodes and edges. A red arrow points from a single configuration to a superposition of multiple configurations, illustrating the use of quantum superposition for design optimization.

より効率的な探索

FTQC

シミュレーションを活用したモノづくりを量子コンピュータで加速する