



量子位相推定アルゴリズムを用いた 量子コンピュータによる固有振動数解析

菅野恵太 (QunaSys CTO)

Y. Lee and K. Kanno, “Modal analysis on quantum computers via qubitization”, arXiv:2307.07478 に基づく

会社紹介

QUNASYS

We are Quantum Native.

創業

2018年 東京
代表：楊 天任

注力分野

量子計算ソフトウェアとアルゴリズムの研究開発・
量子コンピューティング
教育・
材料開発支援

アドバイザー

藤井啓祐 教授
+
教員3名 (大阪大学)

従業員数

55名
(博士号取得者24名)
+ インターン生



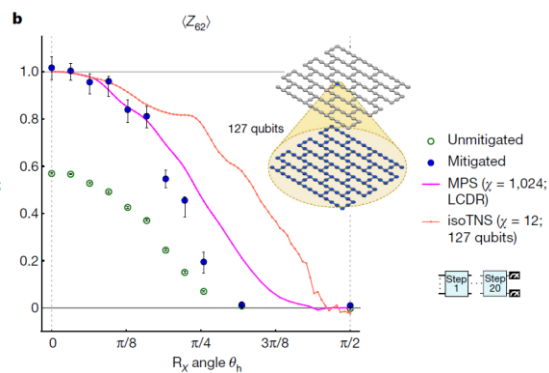
ミッション

Maximize the Power of Quantum Computing

量子コンピューティング技術をさまざまな産業で活用できる未来のために、
量子コンピュータのパワーを最大限に引き出す研究開発を進めています。

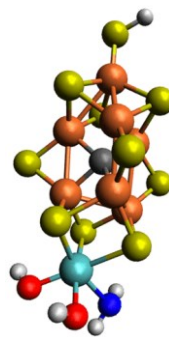
量子コンピューターの応用先

量子シミュレーション



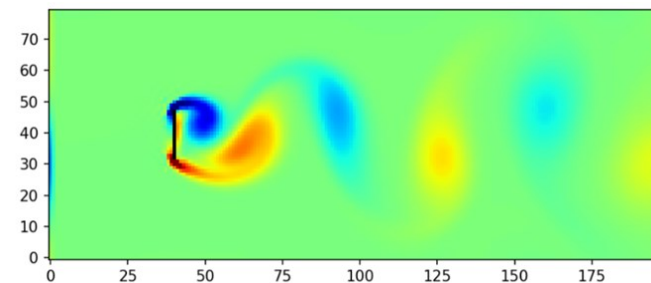
[IBM+..., Nature 618 (2023)]

量子化学計算

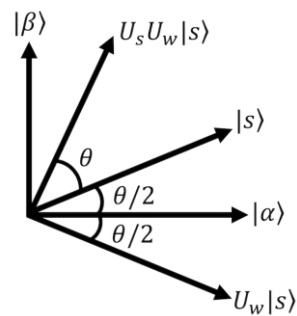


窒素固定のカギとなる FeMoco
<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jpca.8b00941>

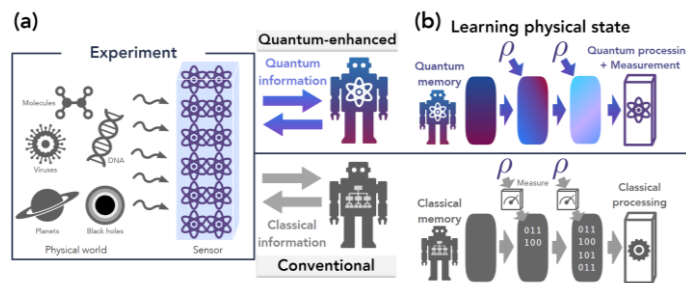
微分方程式 (流体シミュレーション...)



組み合わせ最適化

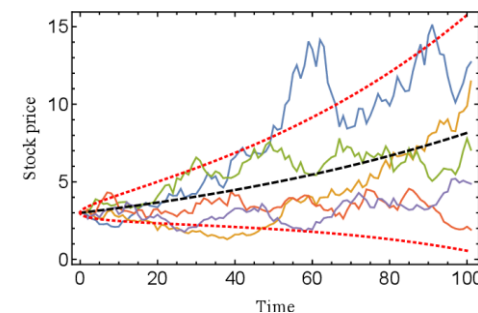


量子機械学習



[Science 376 (2022)]

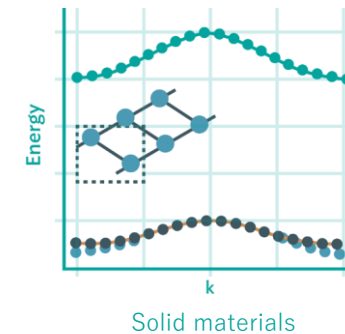
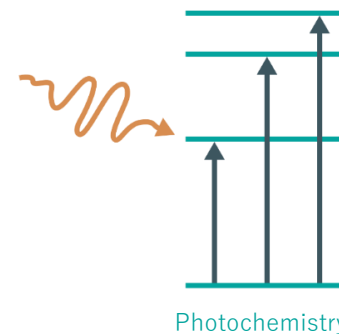
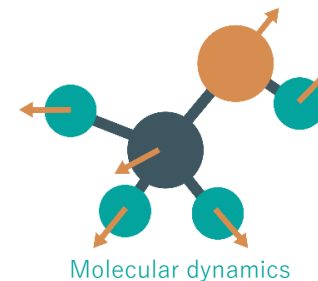
金融工学



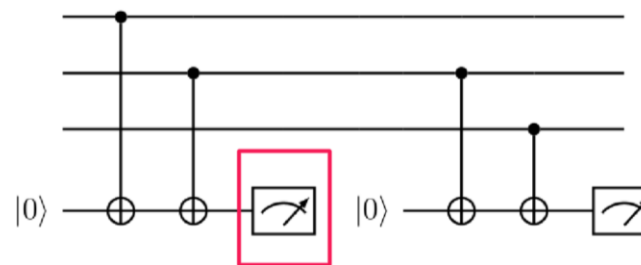
[PRA 98 (2018)]

量子アルゴリズムの研究開発

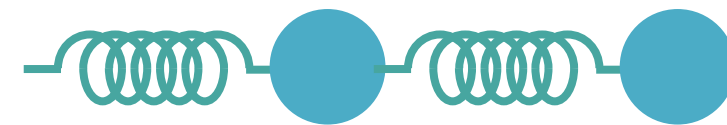
- 材料開発への応用に向けた共同研究開発の実施
 - ENEOS・JSR・トヨタ自動車・豊田中央研究所・パナソニック・富士通・ブリヂストン・三菱ケミカルなど
- CAEへの応用に向けた共同研究も複数実施中
- アカデミアと連携した研究開発
 - 大阪大学など
- NISQの産業応用から、FTQCを見据えた研究まで
- 創業から6年で46本の論文を発表（2024年5月現在）



論文一覧
qunasys.com/publications



Partial error correction



Natural frequency analysis

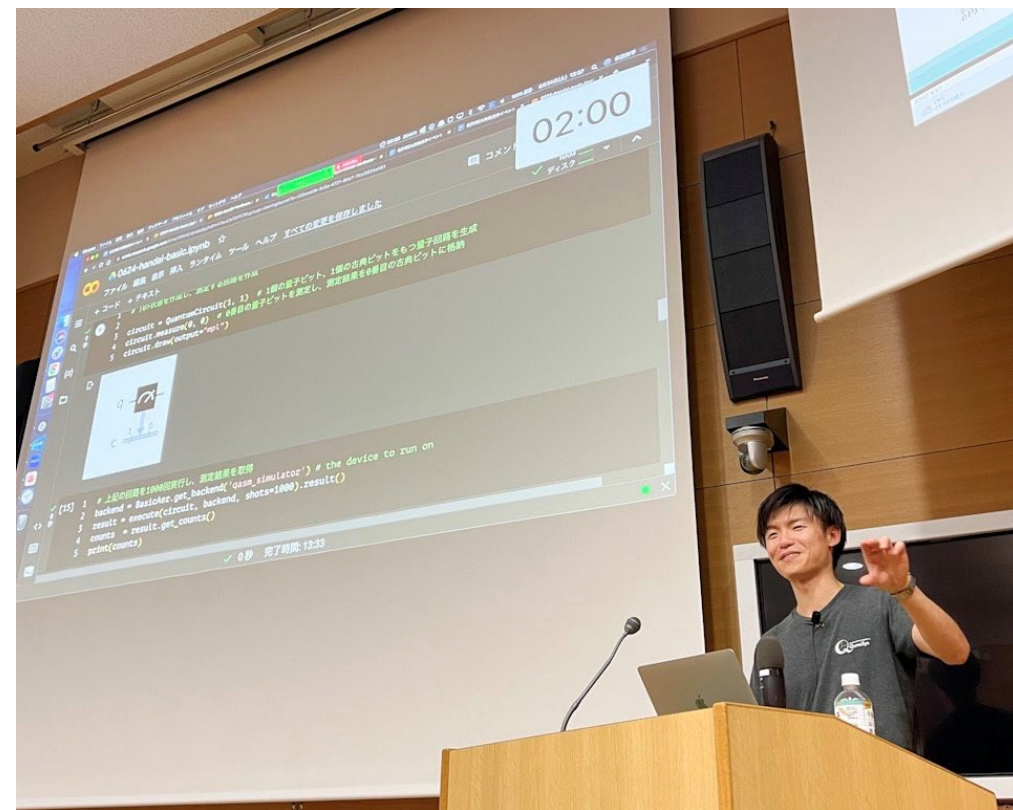
量子コンピュータ活用のコミュニティづくり

QPARC

- 量子コンピュータ実応用の可能性を模索するコミュニティ
- 材料開発が中心だが、CAE応用を考える勉強会も発足
- 国内50社以上が参画、海外にも展開
- 提供プログラム
 - 最新動向の把握（レクチャー・論文研究会）
 - 実践スキルの習得（レクチャー・ワークショップ）
 - 実応用の探索（ワークショップ）



QPARC
qparc.qunasys.com

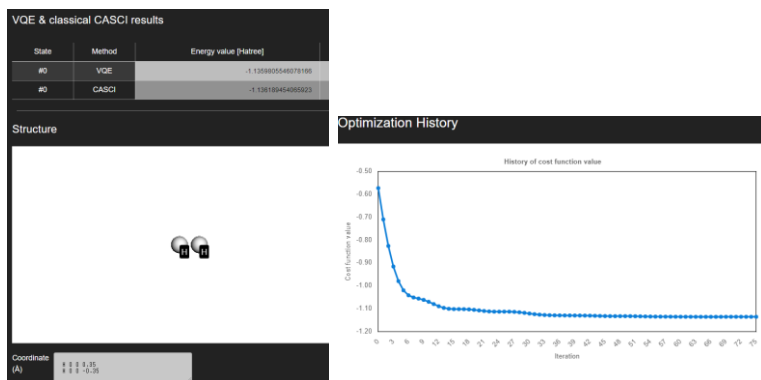


量子ソフトウェアプロダクト開発

QURI

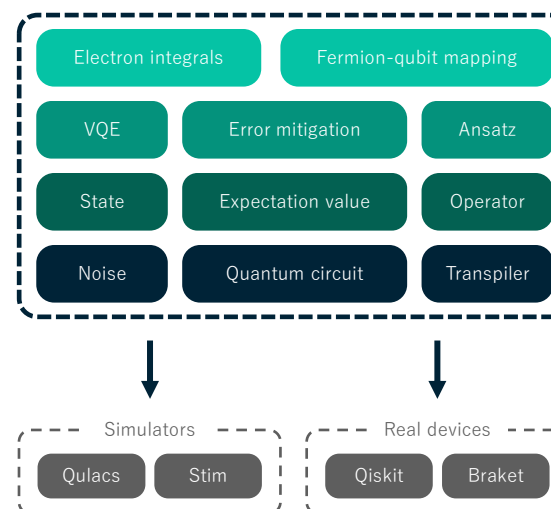
- 量子アルゴリズムによる量子化学計算を、直感的なインターフェースで実行できるwebサービス
- 量子アルゴリズムの専門知識不要
- 量子コンピュータ教育: 大学等の講義で活用中
- 量子コンピュータ応用の現状把握

QURI
qunasys.com/services/quri



QURI Parts

- 量子アルゴリズムをポータブルで高性能なPythonコードとして書けるオープンソースライブラリ
- 1つのコードを、シミュレーター・量子コンピュータ実機両方で実行できる



QURI Parts (リリース記事)
qunasys.com/news/posts/quri-parts



産業での実験・計算化学活用サポート

MIQAN

- 材料開発の現場で、実験データと計算データを統合的に管理することで、開発の効率化を支援するプラットフォームサービス
- データの記録・管理・共有を効率化することで、材料開発の課題に集中し、データをもとに次の実験計画の策定が可能
- 実験主体の材料開発に計算化学を取り入れ、データ駆動の材料開発を促進



MIQAN
qunasys.com/services/miqan

材料開発LLM勉強会

- 材料開発向けのLLM研究を行うコンソーシアム
- 討議と演習を通じた最新の動向のキャッチアップ
- 個社で取り組む課題、コンソーシアムで取り組む課題の整理
- 材料研究フレンドリーなLLMの開発と精度検証（コンソーシアム内で活用）

QunaSys、材料開発フレンドリーなLLMを目指して業界各社で協働して取り組むコンソーシアム「材料開発LLM勉強会」の参加企業募集

QunaSys 2024年3月26日 10時00分



材料開発LLM勉強会
llm.qunasys.com/

量子位相推定アルゴリズムを用いた 量子コンピュータによる固有振動数解析

菅野恵太 (QunaSys CTO)

Y. Lee and K. Kanno, “Modal analysis on quantum computers via qubitization”, arXiv:2307.07478 に基づく

Introduction

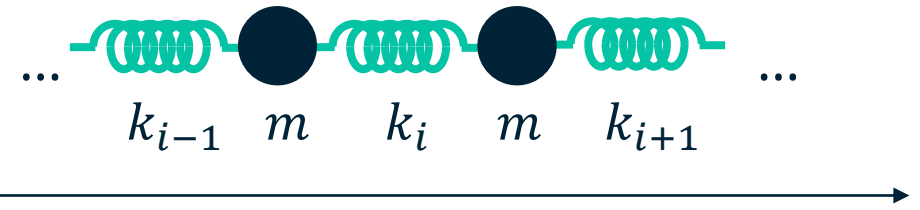
- **量子位相推定アルゴリズム**は量子化学をはじめ多くの応用において指数的な量子加速のもとになっている
- 量子位相推定では、**固有値問題**が解ける：量子化学計算以外に、量子コンピュータが指数的に速く解ける固有値問題は存在しないか？
- 構造体の**固有振動数解析**は、共振による破壊や騒音を防ぐために産業上重要
- 本講演では、量子位相推定の新たな応用として**固有振動数解析**を提案する



強風による共振により崩壊したタコマ橋（1940年）
<https://www.britannica.com/topic/Tacoma-Narrows-Bridge>

問題設定

周期境界条件でつながった N 個の質点



- 1次元に配置された、ばねでつながった質点を考える
- i 番目の質点の運動方程式

$$m\ddot{x}_i = k_i(x_{i+1} - x_i) - k_{i-1}(x_i - x_{i-1})$$

- \vec{x} に関する運動方程式

$$\ddot{\vec{x}} = A\vec{x}, \quad A = \frac{1}{m} \begin{pmatrix} -k_N - k_1 & k_1 & \cdots & 0 & k_N \\ k_1 & -k_1 - k_2 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & -k_{N-2} - k_{N-1} & k_{N-1} \\ k_N & 0 & \cdots & k_{N-1} & -k_{N-1} - k_N \end{pmatrix}$$

- A の固有値が**系の固有振動数**に対応する
- 今回は以下を考える
 - ばね定数がすべて等しい場合： $k_i = k$
 - 2種類のばねが交互に配置された場合： $k_{2j-1} = k_1$ and $k_{2j} = k_2$

準備：疎行列の実装

- 量子位相推定で固有値計算を行う行列は**ユニタリ行列**である必要がある。
- たとえば、エルミート行列 A に対しては $U = e^{iA}$ とユニタリ行列を作り、固有値を求めることができる。
- より効率的な方法として、**ブロックエンコーディング**がある。

block encoding

$$U = \begin{pmatrix} A & \cdot \\ \cdot & \cdot \end{pmatrix} \text{ equiv. } A = \text{anc.} \langle \phi | U | \phi \rangle_{\text{anc.}} \quad (\text{not unique})$$

- ブロックエンコーディングは、行列 A がたとえば以下のような場合に可能：
 - ユニタリの線型和**: 量子化学計算で用いられる
 - オラクル O_F, O_H で表現される**疎行列**: 本講演で利用

two oracles

$$O_F |x\rangle |i\rangle = |x\rangle |y_i\rangle \quad (0 \leq i \leq d-1)$$

$$O_H |x\rangle |y\rangle |*\rangle = |x\rangle |y\rangle |* \oplus A_{xy}\rangle$$

[arXiv:0910.4157]

実装

Lv.1: ばね定数が一定の場合

- 非自明な行列成分が1種類なため、 O_F のみあれば良い

$$O_F |x, 0\rangle = |x, x - 1\rangle$$

$$O_F |x, 1\rangle = |x, x + 1\rangle$$

$$A = \frac{k}{m} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & & & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & & 0 \\ 0 & & & & -2 & 1 \\ 1 & 0 & \cdots & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix}$$

two oracles

$$O_F |x\rangle |i\rangle = |x\rangle |y_i\rangle \quad (0 \leq i \leq d-1)$$

$$O_H |x\rangle |y\rangle |*\rangle = |x\rangle |y\rangle |* \oplus A_{xy}\rangle$$

実装

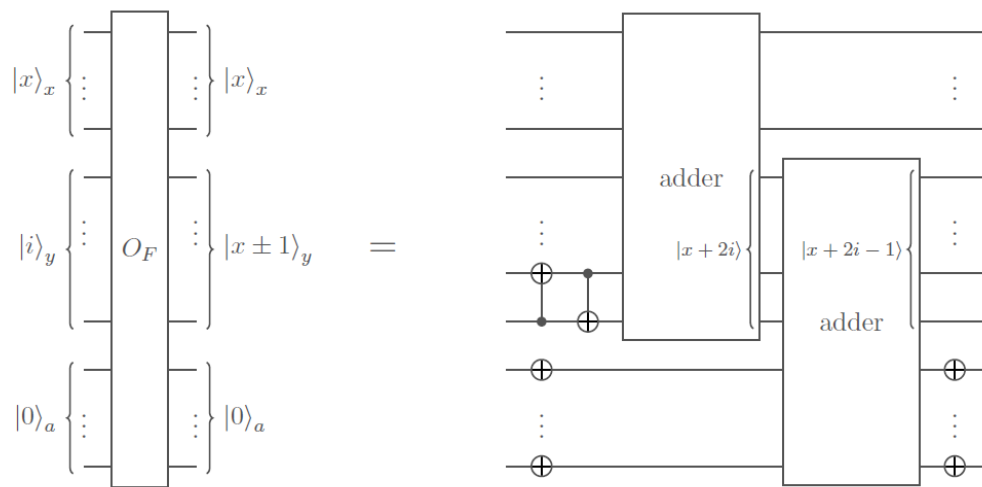
Lv.1: ばね定数が一定の場合

- 非自明な行列成分が1種類なため、 O_F のみあれば良い

$$O_F |x, 0\rangle = |x, x - 1\rangle$$

$$O_F |x, 1\rangle = |x, x + 1\rangle$$

$$A = \frac{k}{m} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & & & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & & 0 \\ 0 & & & & -2 & 1 \\ 1 & 0 & \dots & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix}$$



実装

Lv.2: 2種類のばね定数

- Lv.1 と同じ O_F に加え、 O_H の実装が必要

$$A = \frac{1}{m} \begin{pmatrix} -(k_1 + k_2) & k_2 & 0 & \cdots & 0 & k_1 \\ k_2 & -(k_1 + k_2) & k_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & k_1 & -(k_1 + k_2) & k_2 & & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & & \vdots \end{pmatrix}$$

two oracles

$$O_F |x\rangle |i\rangle = |x\rangle |y_i\rangle \quad (0 \leq i \leq d-1)$$

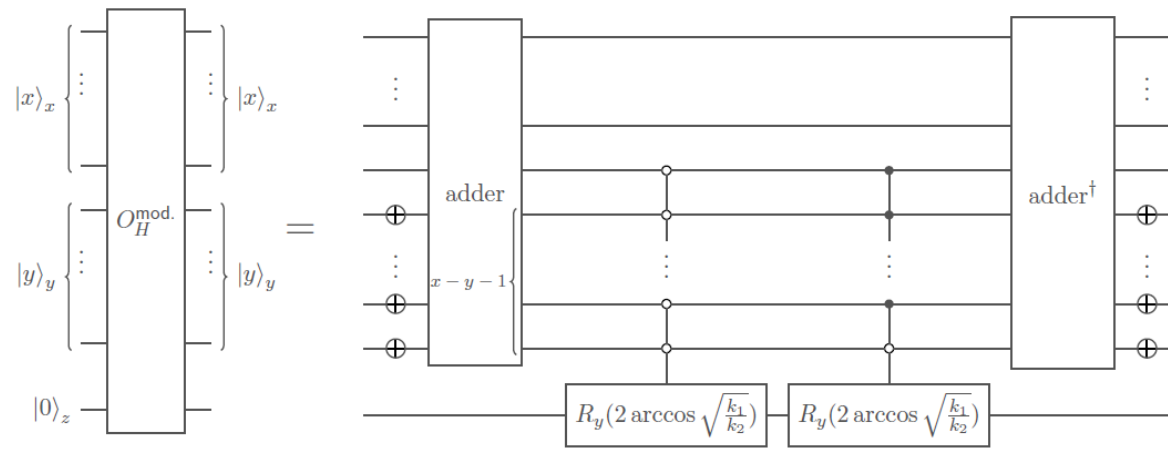
$$O_H |x\rangle |y\rangle |*\rangle = |x\rangle |y\rangle |* \oplus A_{xy}\rangle$$

実装

Lv.2: 2種類のばね定数

- Lv.1 と同じ O_F に加え、 O_H の実装が必要

$$A = \frac{1}{m} \begin{pmatrix} -(k_1 + k_2) & k_2 & 0 & \cdots & 0 & k_1 \\ k_2 & -(k_1 + k_2) & k_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & k_1 & -(k_1 + k_2) & k_2 & & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & & \\ & & & & \ddots & \end{pmatrix}$$



リソース推定

- $N = 2^n$ 個の質点を扱う場合のリソースを推定
 - 実装には qubitization を採用 [arXiv:1610.06546]
 - 量子回路全体で、質点数 N に対してゲート数は $O(\log N)$: **指数加速!**
 - 古典コンピュータでは、疎行列の対角化は $O(N)$
 - 論文中では、古典コンピュータでの粗い計算を活用した効率的な初期状態準備法についても提案

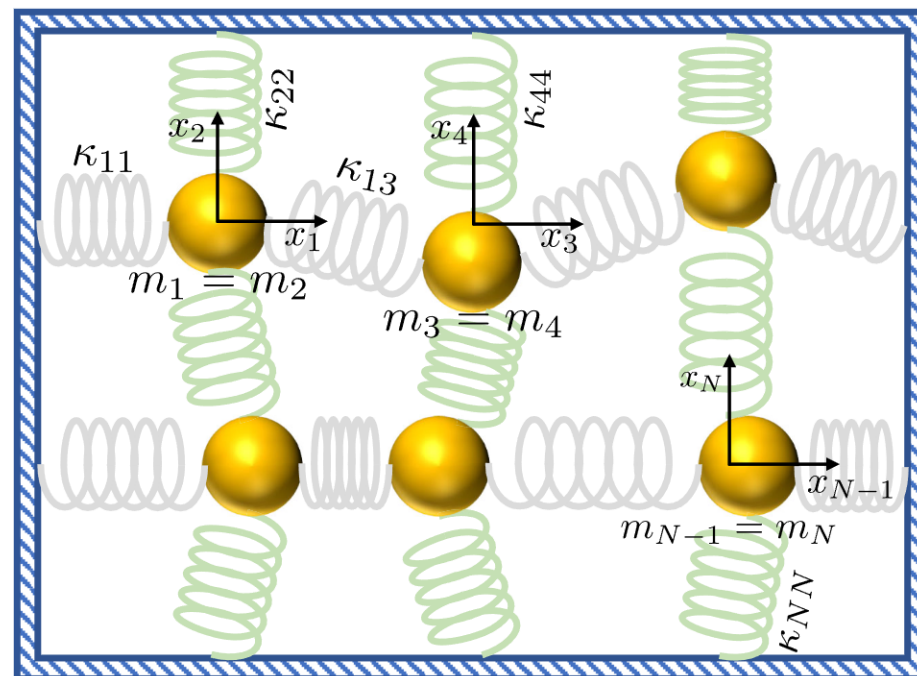
	$\#(\text{logical qubits})/U^*$	$\#(\text{Toffoli gates})/\text{controlled-}U^*$
Lv. 1	$4n + 2$	$11n + 2$
Lv. 2	$4n + 6$	$42n + 30$

- Lv. 2 の計算について、表面符号を前提に物理量子ビットにコンパイルした際のリソースを推定

2^n	code distance	$\#$ of physical qubits	runtime
2^{32}	25	$\sim 5.2 \times 10^5$	~ 23 min.
2^{64}	25	$\sim 8.5 \times 10^5$	~ 45 min.
2^{128}	27	$\sim 17.5 \times 10^5$	~ 90 min.

関連研究：連成振動系のシミュレーションはBQP完全

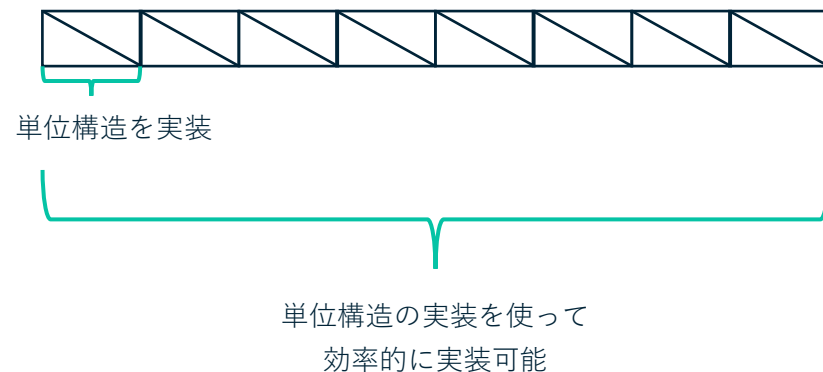
- $N = 2^n$ 個の質点を含むとある連成振動系のシミュレーションが、量子コンピュータでは n について**効率的に実行可能**で、さらに**BQP完全**であることが示された。 [Google+..., PRX 13 (2023)]
- 言い換えれば、**指数個の連成振動系は量子コンピュータと同等の計算能力を持つ**ということ
- (とあるクラスの) 固有振動数計算もBQP完全であると示すことができれば、とても面白い
 - cf. 量子化学計算に近い “guided local Hamiltonian problem” はBQP完全 [Cade et al., ICALP 2023]



[Google+..., PRX 13 (2023)]

結論と展望：固有振動数解析

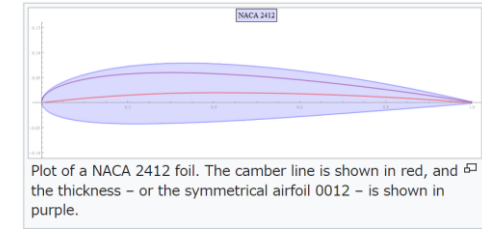
- 量子位相推定アルゴリズムの新たな応用として、**固有振動数解析**を提案した。
- 1次元系について、ゲートレベルでの量子位相推定の実装を行い、計算全体を通しての**指数加速**が示された。
 - 入力：古典コンピュータで**粗い計算を行って準備する**手法を提案
 - 計算：**行列成分を生成するルールそのものを量子回路として実装**することで、行列サイズに比例しない実装が可能
 - 出力：量子位相推定を使うことで、**固有値が二進数としてそのまま測定できる**
- より複雑な系に適用する**など、今後の研究の発展が期待できる。
 - 本研究では、繰り返しがある系についての効率的な実装の提案も行った。



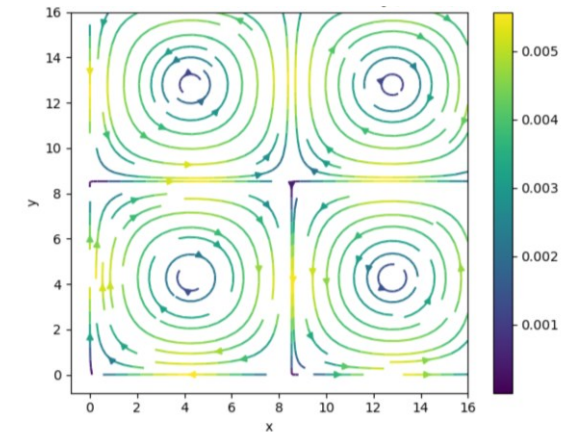
結論と展望：量子コンピュータによるCAE計算に向けて

- 一般に、量子コンピュータによる効率的な行列計算のためには、効率的な計算と、効率的な入出力が重要。
 - 入力：一般に、今回開発した、古典コンピュータで**粗い計算を行って準備する**手法が適用可能と期待できる。
 - 計算：行列成分を生成するルールそのものを量子回路として実装できれば、行列サイズに比例しない実装が可能
 - 出力：量子位相推定を使えば、**固有値が二進数としてそのまま測定できる**。HHL/QSVT系のアルゴリズムでは、解に対応する**量子状態 $|x\rangle$ の読み出しに工夫が必要**。
- 弊社では、流体シミュレーションに登場する行列の効率的な実装をはじめ、量子コンピュータによるCAE計算実現に向けて鋭意研究開発中

$$y_c = \begin{cases} \frac{m}{p^2} (2px - x^2), & 0 \leq x \leq p, \\ \frac{m}{(1-p)^2} ((1-2p) + 2px - x^2), & p \leq x \leq 1, \end{cases}$$



物体の形状が方程式で記述できる例
(https://en.wikipedia.org/wiki/NACA_airfoil)



量子コンピュータによる実装が可能な、線形化された流体シミュレーション

[QunaSys, in progress]

QUNASYS

We are Quantum Native.