

量子コンピューターと 計算数理工学



群馬大学大学院理工学府 環境創生部門

齋藤 隆泰



Assoc. Prof. Takahiro SAITOH

2006: Dr.(Eng.)

from Tokyo Institute of Technology, Japan

2024: IPA未踏ターゲット事業プロジェクト修了
(量子コンピュータを用いたソフトウェア開発分野)

My biography:

- Mar., 2006, Dr. of Engineering, Tokyo Institute of Technology (東工大)
- Apr., 2006: Japan Society of Postdoctoral Fellowship (学振)
- Nov., 2008: Assis. Prof., at Fukui University (福井大)
- Oct., 2009: Assis. Prof., at Dept. Tokyo Institute of Technology (東工大)
- Aug., 2010: Visiting researcher, Siegen University, Germany (ドイツ, Siegen大学)
- Apr., 2012: Assoc. Prof., at Gunma University (群馬大)

Academic society affiliation :

- JSCE: Japan Society of Civil Engineers (土木学会)
- JSME: Japan Society of Mechanical Engineers (機械学会)
- JSCES: Japan Society for Computational Engineers (計算工学会)
- JASCOME: Japan Society for Computational Methods in Engineering (計算数理)
- JSST: Japan Society for Simulation Technology (シミュレーション)
- JSNDI: Japan Society for Non-Destructive Inspection (非破壊検査)

応用力学に関する研究

- 2024～**非局所理論**の非破壊評価への展開(基盤研究(B), 代表)

弾性波動論, 非破壊評価に関する研究(数値計算が柱)

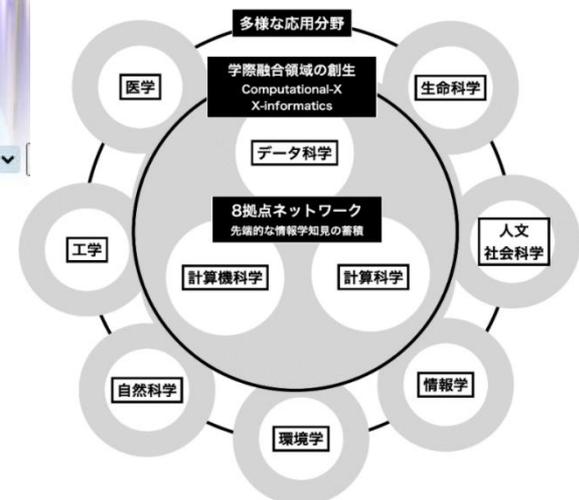
- 2024～**時間反転法**を用いた鋼床板中の疲労き裂検出のためのDX超音波非破壊検査の開発(財)高速道路調査会, 代表)
- 2021～**弾性波動論**とAIの融合による非接触レーザ超音波**非破壊検査**手法の開発(セコム科学技術振興財団, 代表)

計算力学・計算数値・シミュレーションに関する研究

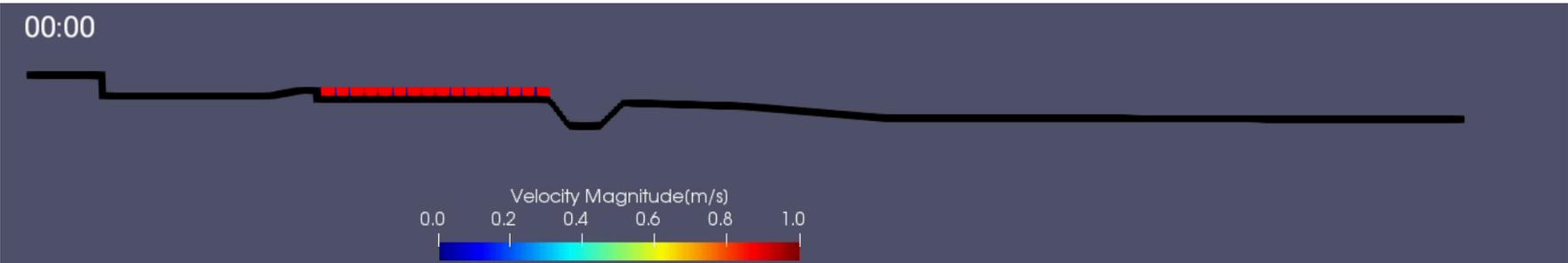


- 2021～NDE4.0実現のための高性能**波動解析**技術とデータサイエンスの融合(東工大, 京大, 代表)

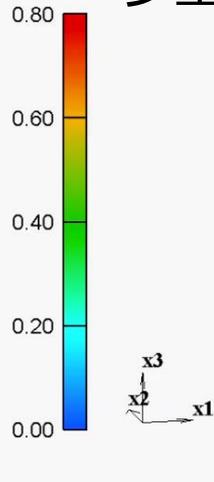
NDE4.0: 第4世代非破壊評価(AI, ビッグデータ, センシング, HPC)



護床エブロックの流出解析(粒子法)

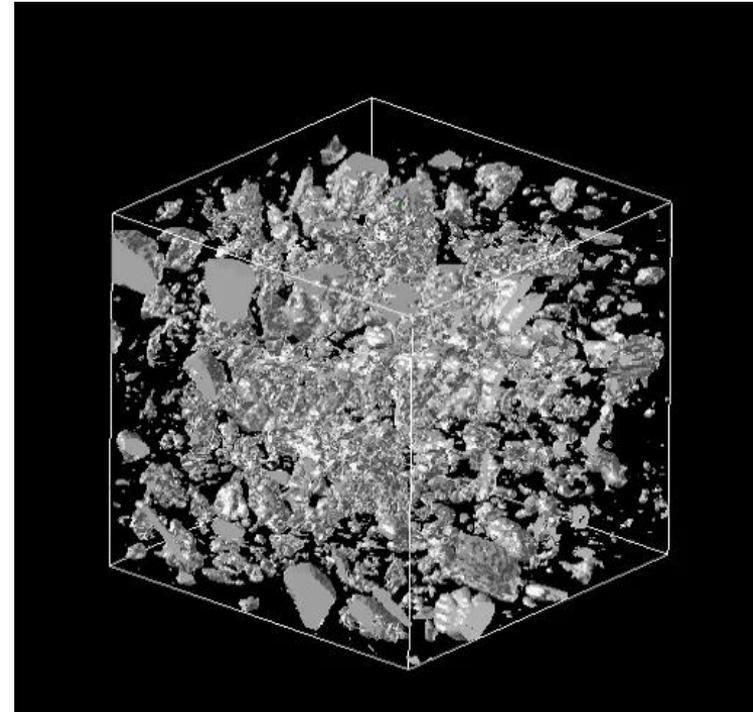


多重散乱解析



境界要素法

コンクリート中の弾性波動(超音波)解析 有限要素法

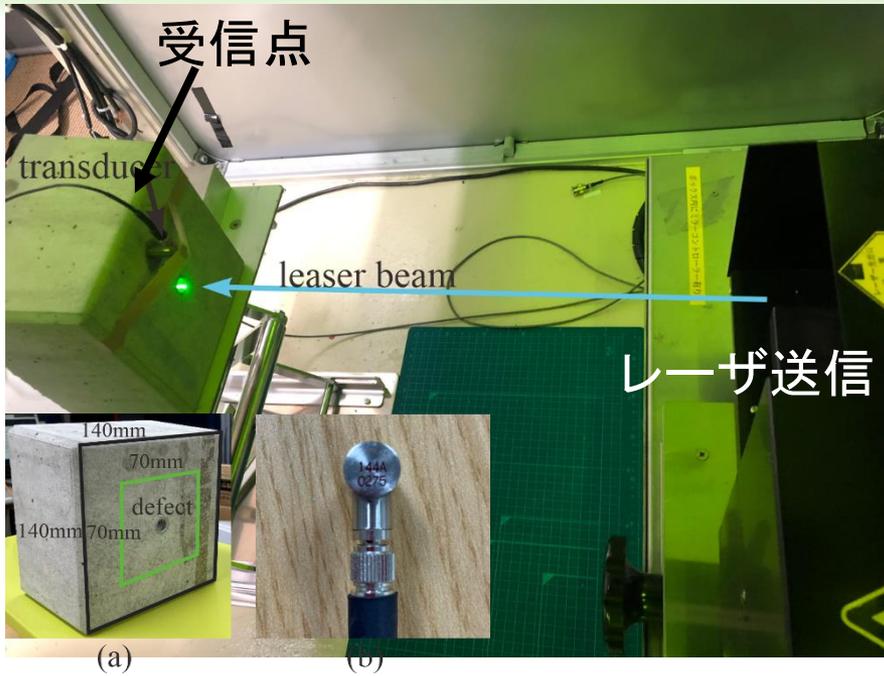


CFRP中の波動解析



動弾性有限積分法(差分法)

自己紹介(4)-波動解析(逆解析, AIや計測実験含)

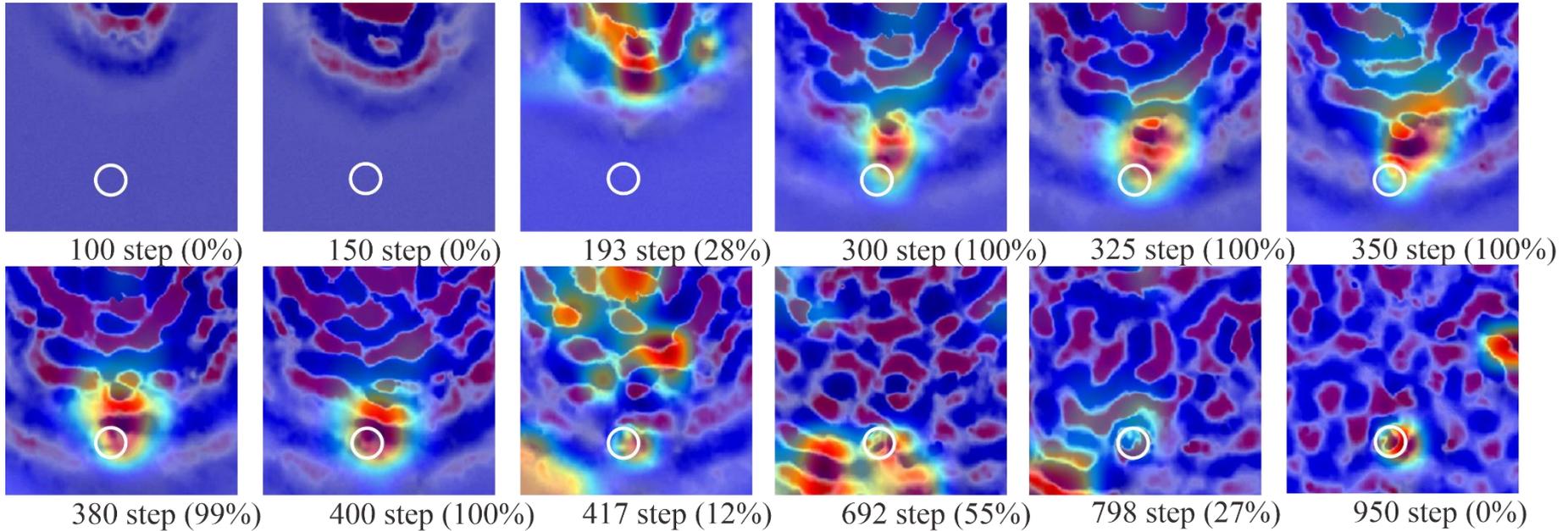


レーザー超音波とAIを用いた欠陥の検出(構造力学で習う**相反定理**の応用)

受信点と送信を**入れ替えて**可視化



可視化結果に対する深層学習
で欠陥有無の判定
(コンクリート内部の欠陥の検出)



医療ではDICOM(医療データ通信の国際規格)でデータ管理
非破壊検査ではそのような規格は現状難しい



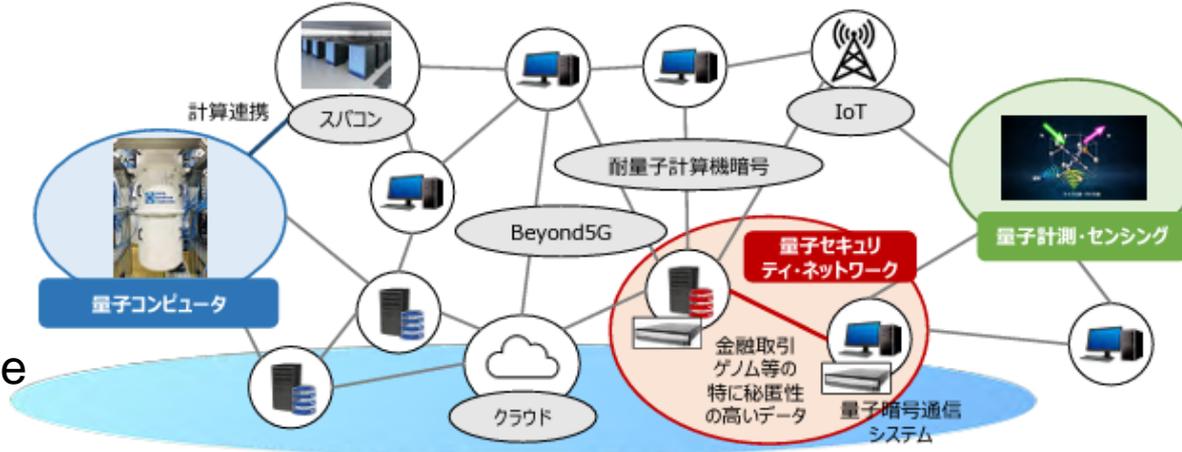
シミュレーション結果を学習データに使えるか？
そのままでは実画像と大きく乖離, 逆に精度低下を招く

	0 反復	100 反復	10000 反復	20000 反復	実画像の例
欠陥あり					
欠陥なし					

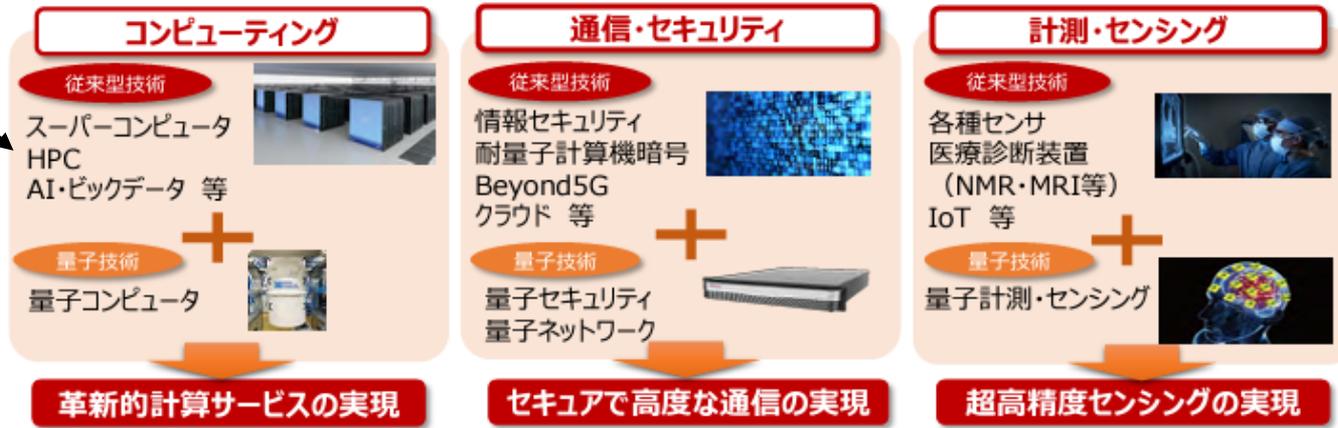
このように様々なシミュレーションを古典コンピュータを用いて実行

量子コンピューター活用への期待

未来社会ビジョン (量子・従来型 (古典) 技術のハイブリッド化イメージ)



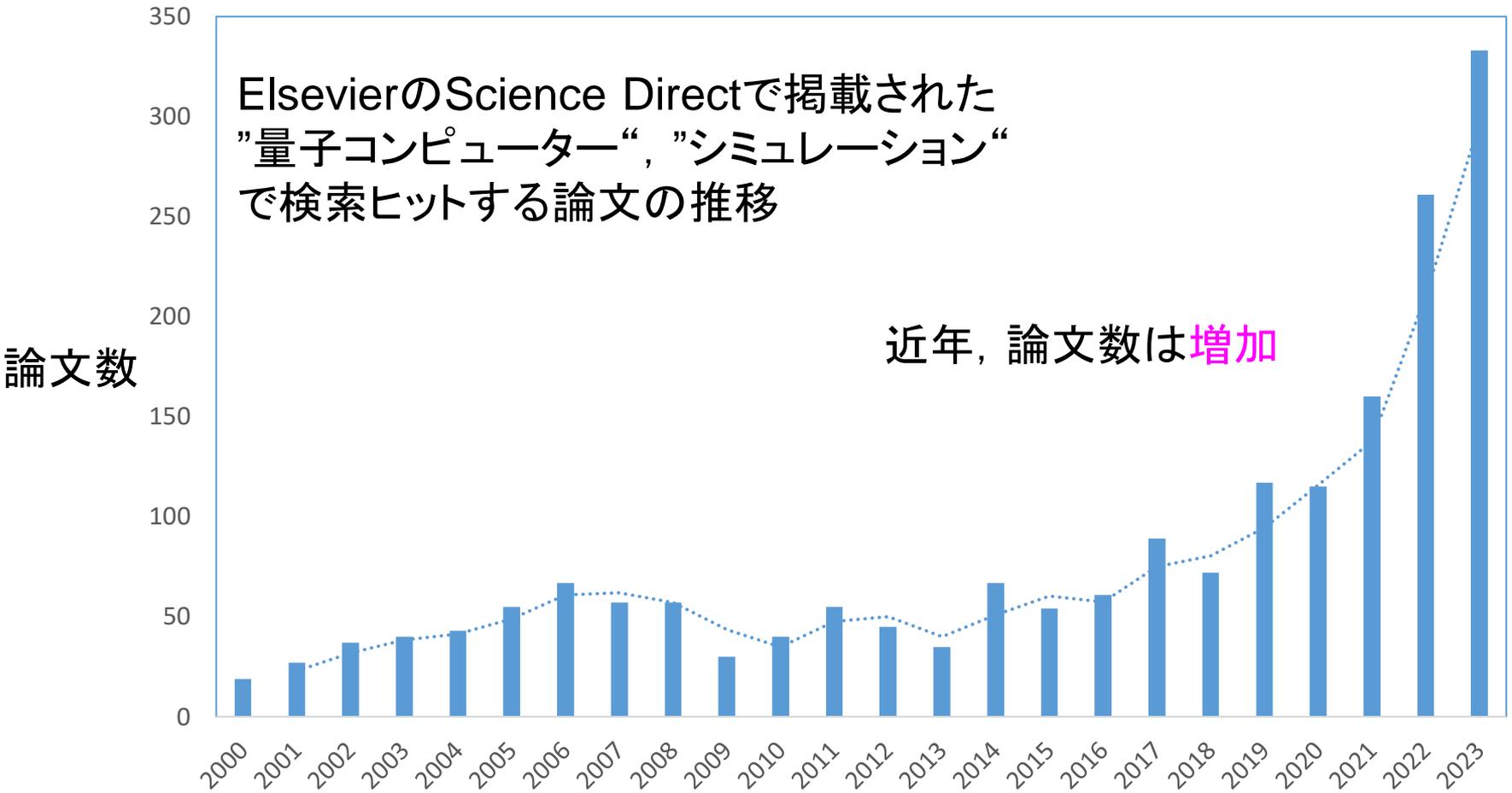
High-Performance Computing(HPC)



(内閣府科学技術・イノベーション推進HPより引用)

計算力学分野では量子コンピューター活用への期待が高まっている
(量子コンピューターを用いた新たな展開)

量子コンピューターとシミュレーション



この傾向は今後も続くと考えられる

Finite element analysis of a 2D cantilever on a noisy intermediate-scale quantum computer

André Mielke^{1,*} and Tim Ricken¹

¹ Institute of Mechanics, Structural Analysis and Dynamics, Faculty of Aerospace Engineering and Geodesy, University of Stuttgart, 70569 Stuttgart, Germany

Quantum computing is a promising new computing paradigm that may yield both significant speedup over classical algorithms as well as new ways to think about problems and finding novel solution algorithms. While large-scale error-corrected quantum computers are still under development, a selection of noisy intermediate-scale quantum processing units is readily made available by some companies via cloud access. Despite the lack of error correction, these units can be used to test established quantum algorithms on custom problem setups. Here, we solve the finite element problem of a two-dimensional cantilever, completely fixed on one side and loaded on the opposite side, on a 15-qubit QPU from IBM.

© 2021 The Authors. *Proceedings in Applied Mathematics & Mechanics* published by Wiley-VCH GmbH.

代表的な数値シミュレーション手法である有限要素法への応用研究も始まっている

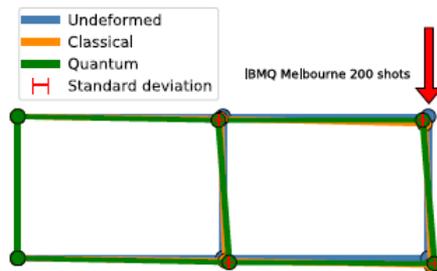


Fig. 3: Undeformed position (blue), analytical solution (orange) and quantum-computed solution (green) for the problem. The red bars show the standard deviation of each nodal position into each direction. The red arrow indicates the load.

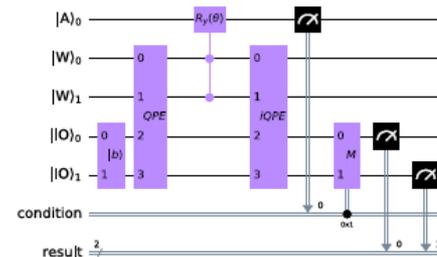


Fig. 2: Sketch of the HHL quantum circuit, produced with Qiskit [3]. An ancilla $|A\rangle$, a work $|W\rangle$, and an input-output register $|IO\rangle$ are necessary to transform the right-hand side $|b\rangle$ of the equation system into an approximation of the solution vector $|u\rangle$.

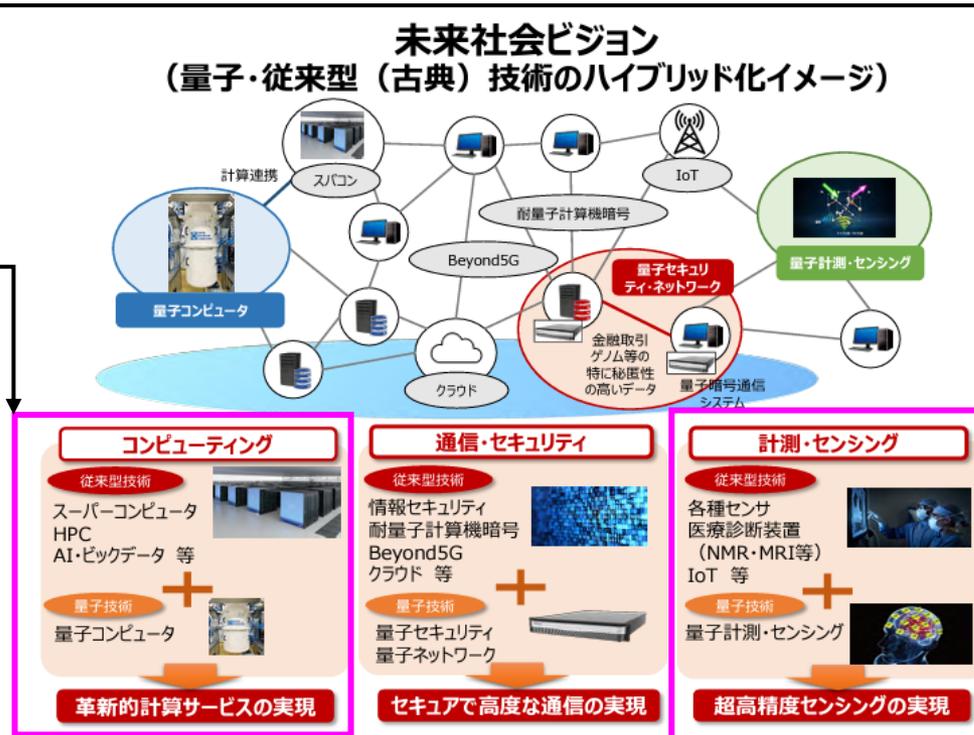
本日の発表の内容

• 本プロジェクトの目的

- 量子コンピューティングによる境界要素法(未踏TG)
(2次元ラプラス方程式の計算：順問題)

斎藤隆泰：量子シミュレーターを用いた次元有限要素法解析(2024)

- 量子アニーリングの逆問題への基礎的検討(4月から)
(2次元波動，光CT：逆問題)



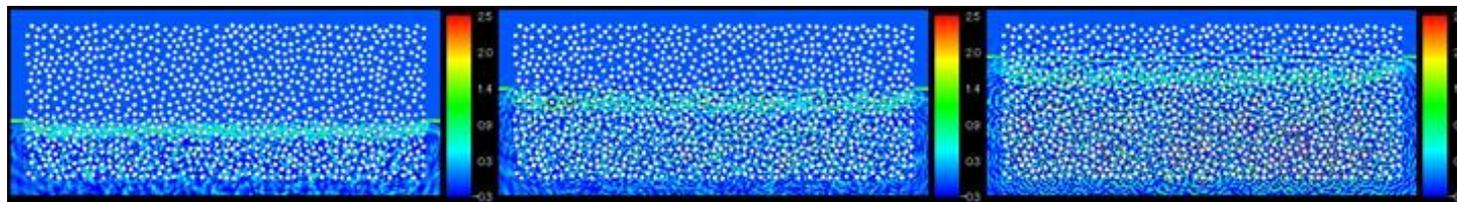
Chapter 1:

量子コンピューティングによる 境界要素法

量子コンピュータとは、量子ビット数 n に対して指数的なサイズ 2^n の複素ベクトルを、物理法則に従ってユニタリ変換するコンピュータのこと
(Quantum Native Dojo!)

Google:「2029年までに100万量子ビットの量子コンピューター」の開発を実施する
*30量子ビットで $2^{30} \simeq 10$ 億程度

未知数1億5千万程度(京大スパコンMPI)



通常の境界要素法(有限要素法でもほぼ同様)の解析手順

①形状データの入力(どの数値計算でも避けて通れない)



②代数方程式における係数行列 A , B の作成(数値積分を伴う)

③係数行列 B とベクトル c による行列ベクトル積 Bc の計算

④線形代数方程式の計算($Ax=b$)

⑤結果の出力(どの数値計算でも避けて通れない)

最初から下記の全ステップを行うのは大変そうなので予め古典コンピュータで計算した係数行列をエンコーディングし量子アルゴリズムを用いて代数方程式④の計算を行う**古典・量子ハイブリッド計算**をシミュレーターで実施する



- 定常熱伝導問題に対する境界要素法(解析例1, HHL使用)
- 定常波動問題に対する境界要素法(解析例2, LCU使用)

境界要素法の基礎-2次元ラプラス方程式を例(1)-

図のような2次元定常熱伝導問題
(2次元ポテンシャル問題)を考える

通常, 境界条件は u, q どちらかが与えられる

境界積分方程式

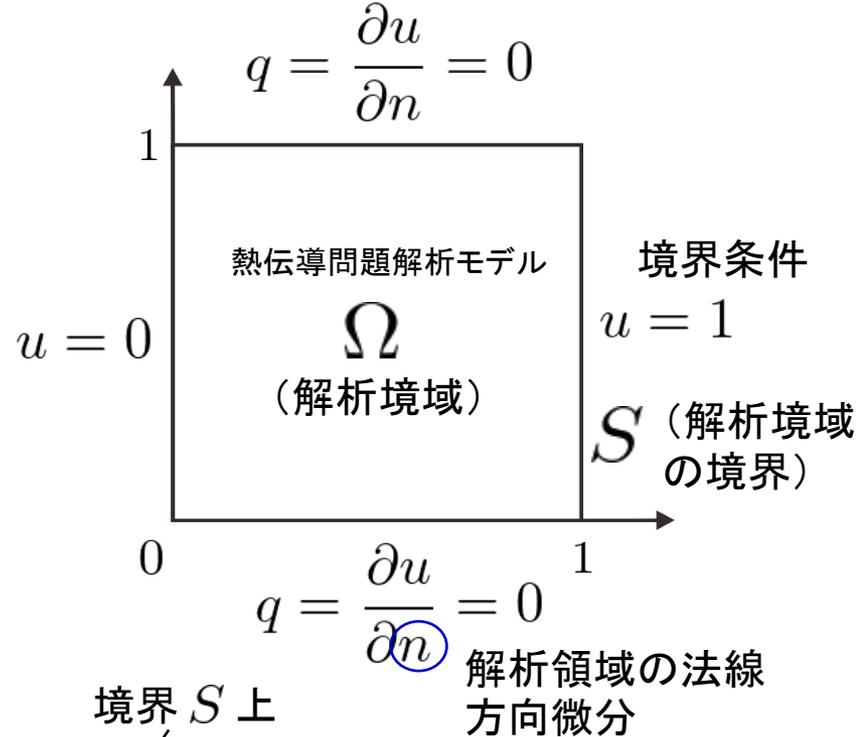
支配方程式

$$\nabla^2 u = 0$$

境界条件

$$u = 0 \quad (x = 0 \text{ or } x = 1)$$

$$q = 0 \quad (y = 0 \text{ or } y = 1)$$



境界積分方程式

$$C(\mathbf{x})u(\mathbf{x}) = \int_{S_y} G(\mathbf{x}, \mathbf{y})q(\mathbf{y})dS - \int_{S_y} H(\mathbf{x}, \mathbf{y})u(\mathbf{y})dS$$

$$C(\mathbf{x}) = 1 \text{ for } \mathbf{x} \in S$$

$$C(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \text{ for } \mathbf{x} \in \Omega$$

基本解

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{1}{2\pi} \log \frac{1}{r} \quad \text{二重層核}$$

$$H(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{\partial G(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial n}$$

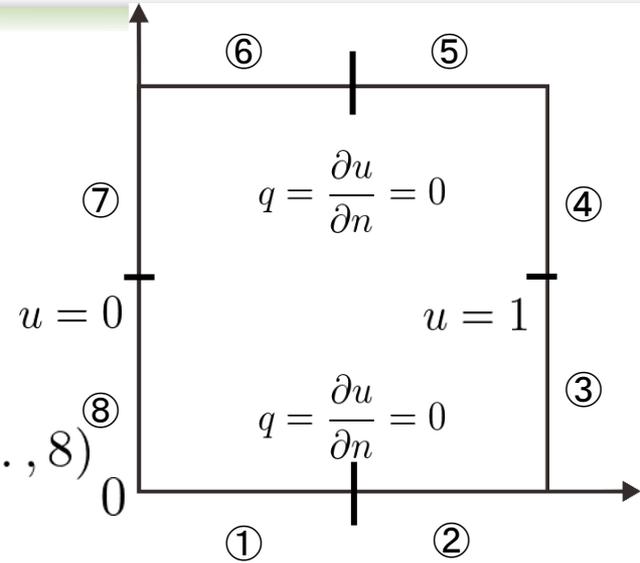
$$\frac{1}{2}u(\mathbf{x}) = \int_{S_y} G(\mathbf{x}, \mathbf{y})q(\mathbf{y})dS - \int_{S_y} H(\mathbf{x}, \mathbf{y})u(\mathbf{y})dS \quad \mathbf{x}, \mathbf{y} \text{ 共に境界 } S \text{ 上にある}$$

境界要素法の基礎-2次元ラプラス方程式を例(2)-

$$\frac{1}{2}u(\mathbf{x}) = \int_{S_y} G(\mathbf{x}, \mathbf{y})q(\mathbf{y})dS - \int_{S_y} H(\mathbf{x}, \mathbf{y})u(\mathbf{y})dS$$

\mathbf{x}, \mathbf{y} 共に境界 S 上にあることから

共に境界要素①-⑧の midpoint $\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i (i = 1, \dots, 8)$



8要素で離散化
(境界を要素に分割)

$$\int_{S_y} G(\mathbf{x}_i, \mathbf{y})q(\mathbf{y})dS = \int_{S_j} G(\mathbf{x}_i, \mathbf{y})q(\mathbf{y})dS_y, (i, j = 1, \dots, 8)$$

$$\begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} & \cdots & G_{17} & G_{18} \\ G_{21} & G_{22} & \cdots & G_{27} & G_{28} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ G_{81} & G_{82} & \cdots & G_{87} & G_{88} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ \vdots \\ q_7 \\ q_8 \end{pmatrix}$$

のように表現できる
(行列表示できる)

残りの項についても同様に考えて以下の式を得る

$$\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots & H_{17} & H_{18} \\ H_{21} & H_{22} & \cdots & H_{27} & H_{28} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ H_{81} & H_{82} & \cdots & H_{87} & H_{88} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_7 \\ u_8 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} & \cdots & G_{17} & G_{18} \\ G_{21} & G_{22} & \cdots & G_{27} & G_{28} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ G_{81} & G_{82} & \cdots & G_{87} & G_{88} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ \vdots \\ q_7 \\ q_8 \end{pmatrix}$$

境界条件に従って
並び替え

$\rightarrow Ax = b$

に帰着する

どのように代数方程式 $Ax = b$ を解くか？

W. Harrow, A. Hassidim, and S. Lloyd: Quantum algorithm for linear systems of equations, *Physical Review Letters*, **103**, 150502, (2009) $|b\rangle \rightarrow |A^{-1}b\rangle$

(量子アルゴリズムを用いた代数方程式の解法の1つ, HHLアルゴリズム)

- 係数行列 A はエルミート行列である必要がある
(ただしこの点はおそらく有限要素法でも境界要素法でも問題とならない?)

どのように量子状態を作るのか？ (右辺ベクトル等のエンコーディング)

古典状態の $b \longrightarrow |b\rangle = \frac{\sum_i b_i |i\rangle}{\sqrt{\sum_i |b_i|^2}}$ 適当に条件数を $[0, 2\pi]$ に規格化しておく

*ある量子状態 $|\psi\rangle$ は必ず固有ベクトルの重ね合わせで展開できる

どのように固有値の位相を求めるのか？

$$Uv = \lambda v (Uv = e^{i2\pi\theta} v) \longrightarrow U|x\rangle = e^{i2\pi\theta} |x\rangle$$

量子位相推定 (QPE) アルゴリズム (ユニタリ行列固有値の位相 θ を求める方法) を使って固有値を求める

量子コンピュータで、できること、できないことを明確に理解する必要がある

HHLアルゴリズムとその古典的解釈

解くべき代数方程式

$$Ax = b$$

エルミート行列

振幅エンコーディング

固有ベクトル a_i と固有値 λ_i が存在

$$Aa_i = \lambda_i a_i$$

量子位相推定アルゴリズム
を使って求める

$$A^{-1}a_i = \lambda_i^{-1}a_i$$

エルミート行列の固有ベクトル a_i は必ず直交するので a_i で b を展開すると
(基底にできる)

$$\rightarrow b = \sum_i \beta_i a_i \quad (\text{量子コンピュータ上では固有ベクトル } a_i \text{ は自動的に求まる})$$

だから、解ベクトル x は、

$$x = A^{-1}b = A^{-1} \sum_i \beta_i a_i = \sum_i \beta_i A^{-1}a_i = \sum_i \beta_i \lambda_i^{-1} a_i$$

と求まる

この演算は、有限要素法の場合は A がスパース行列なので、計算オーダーは $O(\text{poly log } N)$ となり、指数加速し、古典コンピュータより理論上高速である

解析結果: 2次元定常熱伝導問題(2次元ラプラス方程式)

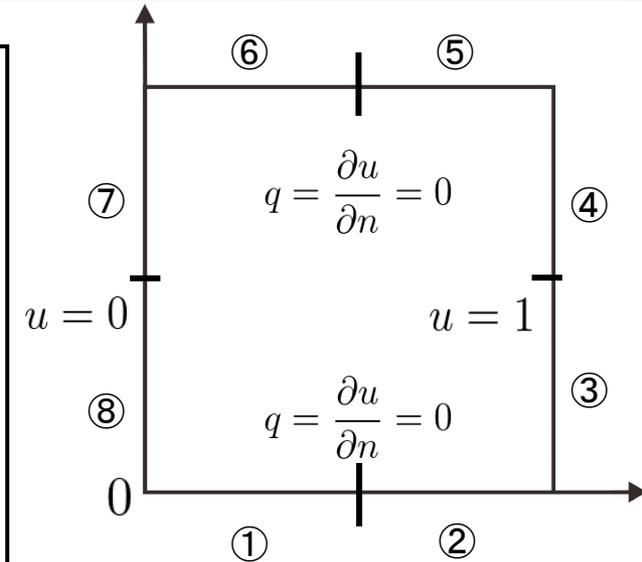
解析に当たっての問題点

- 係数行列 A は密行列である(比較的対角優位)
- 係数行列 A はエルミート行列でもない
- HHLアルゴリズムは, エルミートかつスパースな行列向き



$$\tilde{A} := \begin{bmatrix} 0 & A \\ A^\dagger & 0 \end{bmatrix} \text{ のような } \tilde{A} \text{ を, } \tilde{b} := \begin{pmatrix} b \\ 0 \end{pmatrix} \text{ を定義し}$$

$\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b}$ を計算して元の x を求める

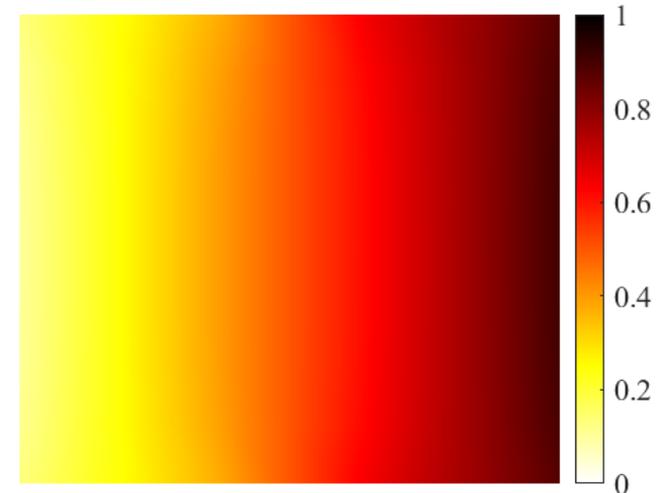
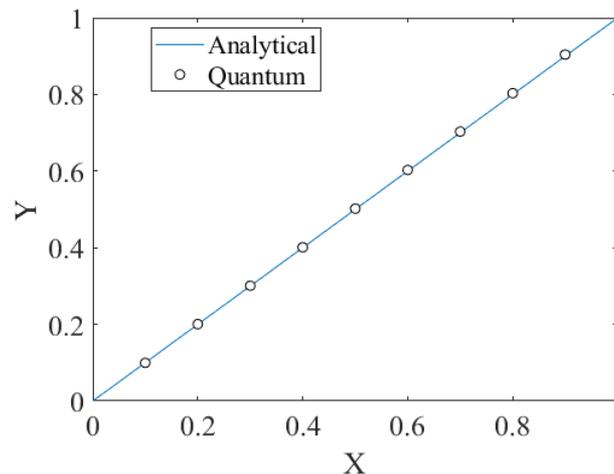


HHL解析結果

$y = \frac{1}{2}$ 上の温度場 u

領域内の温度場 u

classical	quantum	相对誤差%
0.241415	0.243607	0.908161
0.758588	0.762996	0.58113
1.05863	1.05343	0.491142
1.05863	1.053	0.491142
0.758588	0.762996	0.58113
0.241415	0.243607	0.908161
-1.05859	-1.04956	0.853568
-1.05859	-1.04956	0.853568



解析解と比較すると誤差1パーセント程度で推移している

境界要素法の基礎-2次元波動問題の場合(1)-

支配方程式(2次元Helmholtz方程式)

支配方程式 $\nabla^2 u = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$ in D

$u = \hat{u}$ on S_1 ,

境界条件

$q = \frac{\partial u}{\partial n} = \hat{q}$ on S_2 , $S_2 = S \setminus S_1$

境界条件(ノイマン問題)

$\hat{q} = 0$

入射波



入射波による散乱問題

波動問題に対する境界積分方程式

$$c(\mathbf{x})u(\mathbf{x}) = \boxed{u^{\text{in}}(\mathbf{x})} + \int_{S_y} G(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \cancel{q(\mathbf{y})} dS - \int_{S_y} H(\mathbf{x}, \mathbf{y}) u(\mathbf{y}) dS$$

入射波の項が追加

境界条件よりゼロ

$C(\mathbf{x}) = 1$ for $\mathbf{x} \in S$

$C(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}$ for $\mathbf{x} \in \Omega$

基本解

$G(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{i}{4} H_0^{(1)}(k_T r)$

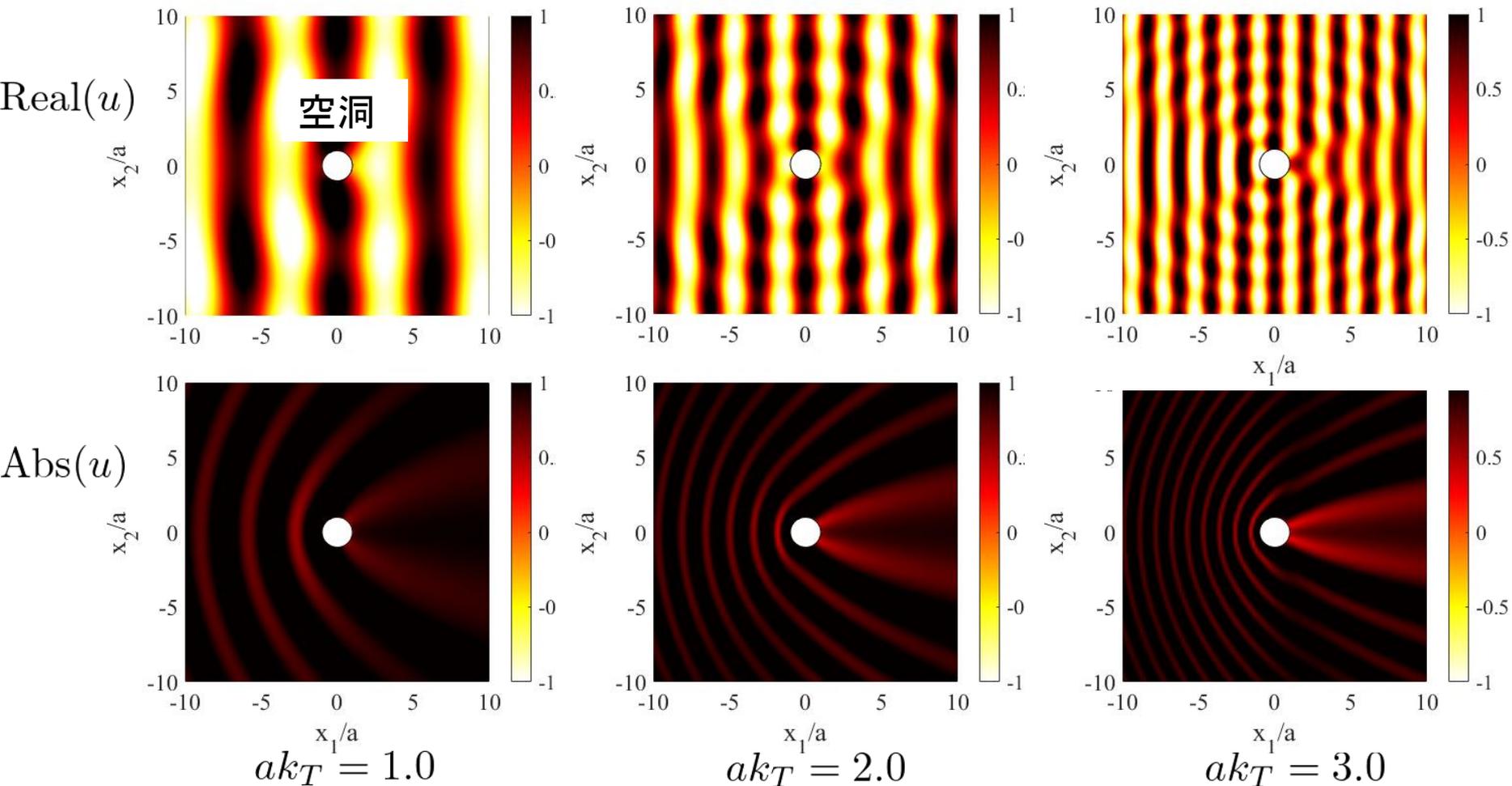
二重層核

$H(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{\partial G(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial n}$

- 波動問題の場合も境界要素法の定式化は基本解が代わるだけで同じ
➡ 同様の代数方程式に帰着できる
- 同様の変換で、ただしここではLCU(Linear Combination of Unitaries)を使う
 (藤井啓祐先生(大阪大学)にご協力頂きました)

解析結果: 2次元定常波動問題(2次元Helmholtz方程式)

- 異なる周波数帯における空洞周辺の全変位場(=入射場+散乱場)
- 波長が短くなる(波数が大きくなる)程, 後方散乱の影響が大きい



シミュレーターの利用ではあるが, LCUを用いて波動問題を解くことができた

Chapter 2:

量子アニーリングの逆問題への
基礎的応用(逆問題)

What is **NDT** (**N**on-**D**estructive **T**esting) ?

Non-destructive testing is the method to examine structures and materials **without damaging or destroying** the object being tested, and to **ensure their reliability and quality**

Fig.1: 建設後50年後の橋梁の数

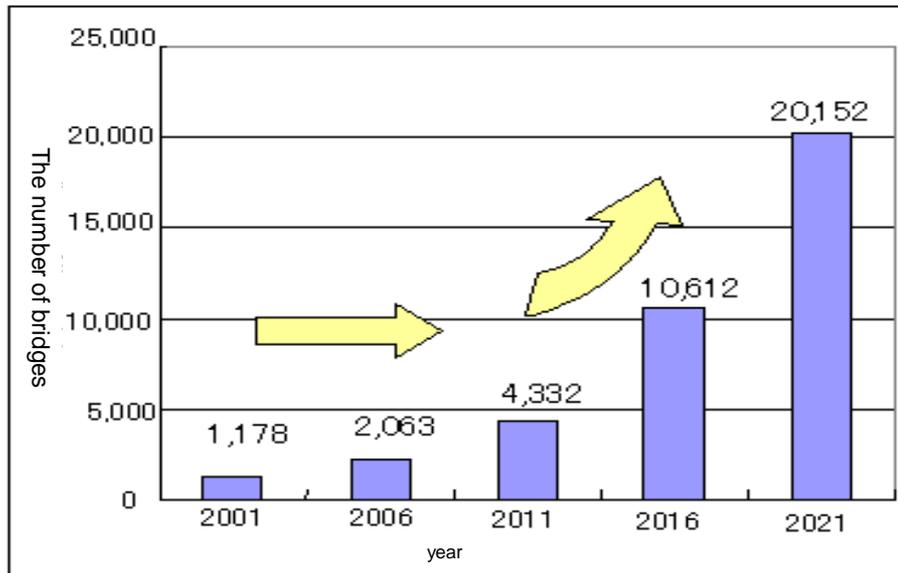
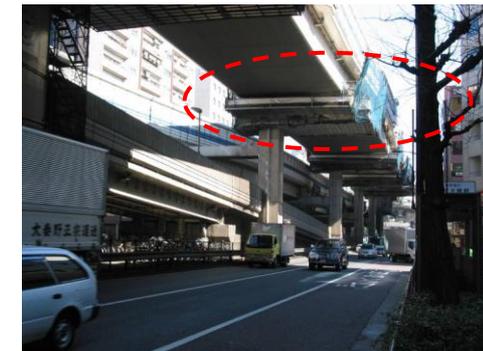


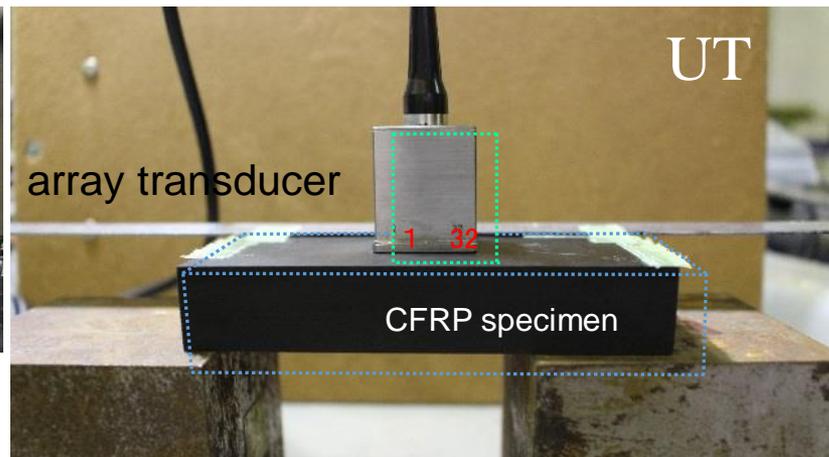
Fig.3: Sasago tunnel collapse (2012)

Fig.2: Fatigue damage of corner intersection for a steel bridge



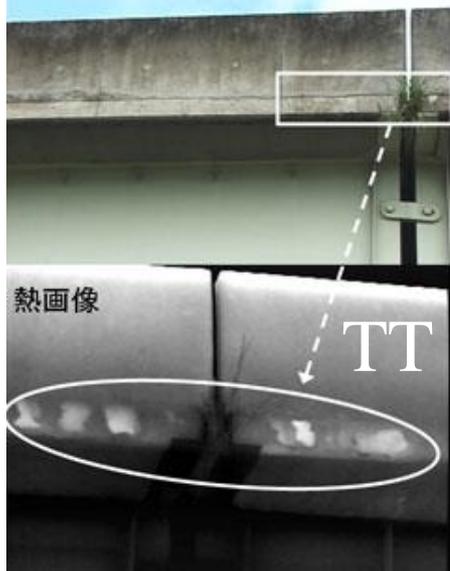
様々な非破壊検査手法が提案されてきた

- 目視点検(VT)
- サーモグラフィー試験 (TT)
- 放射線透過試験(RT)
- 超音波試験, レーザ超音波試験(UT)

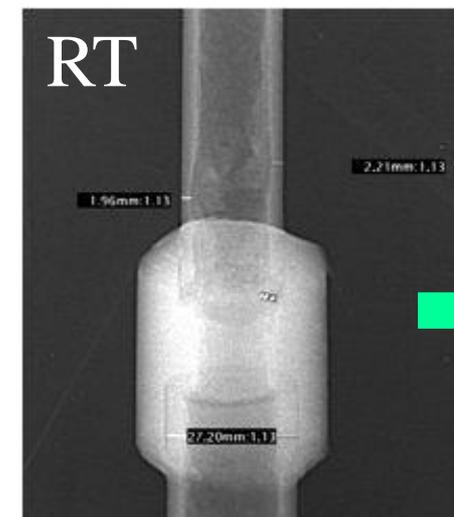


医療の診断と同じ概念
医者が患者を診断し
適切な評価を下すのと
同様のことを、構造・
材料に対しても実施する

可視画像

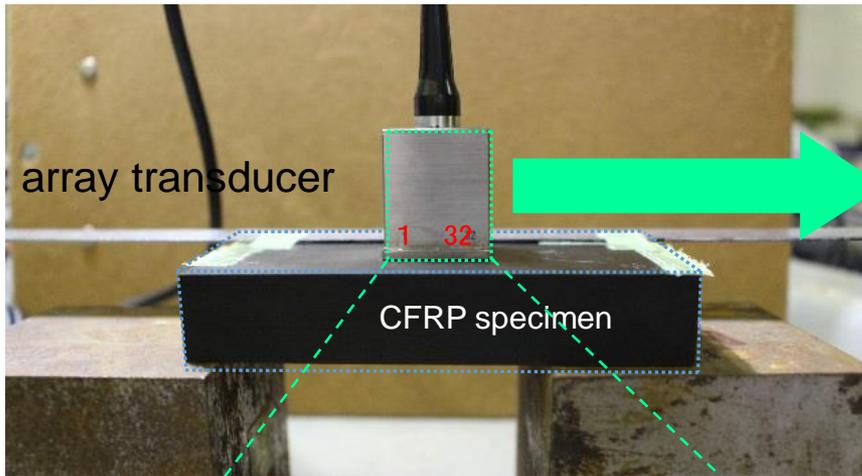


熱画像



非破壊評価と逆問題の例(1)

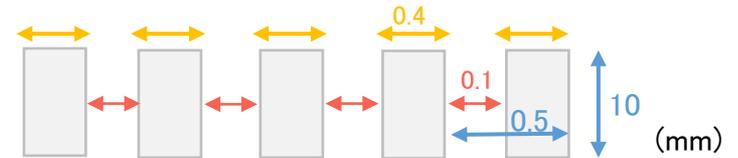
UT using array transducer



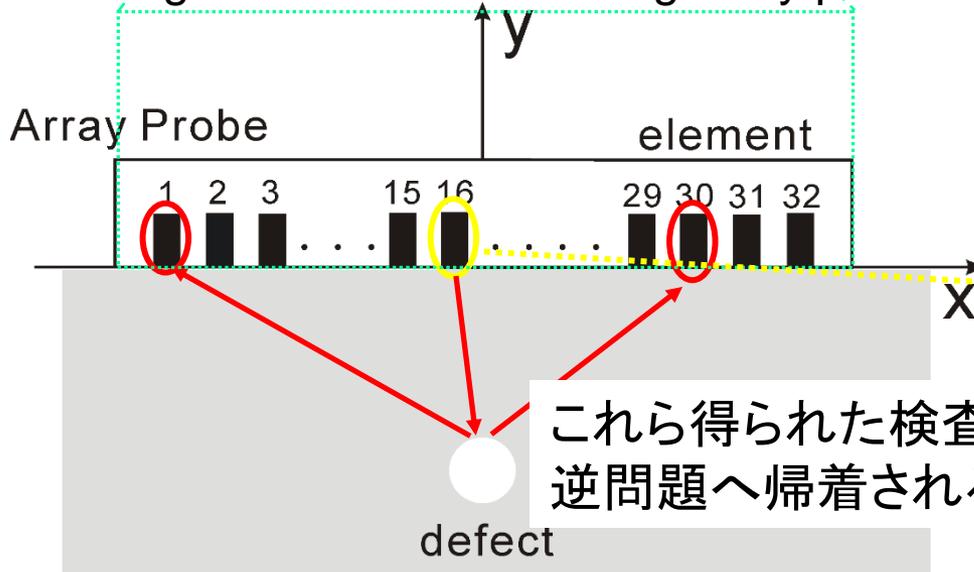
Characteristics of array transducer

N 2 K 0.5(0.4/0.1) × 10 -32
 ① ② ③ ④ ⑤

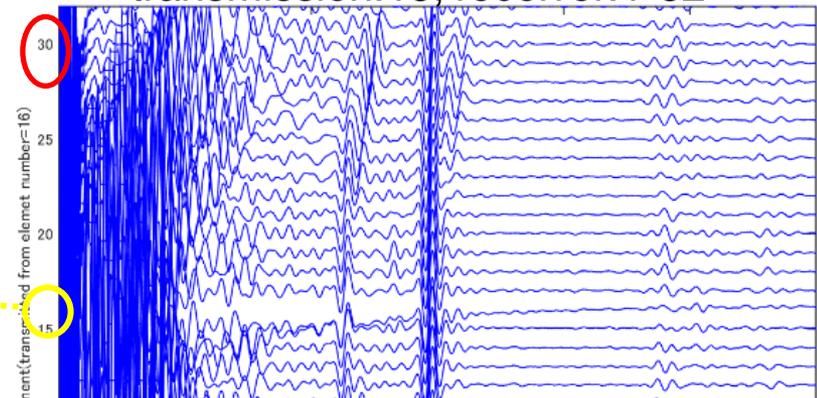
- ① narrow band
- ② 2MHz
- ③ composite
- ④ (0.4/0.1): element size and between each
- ⑤ 32 elements



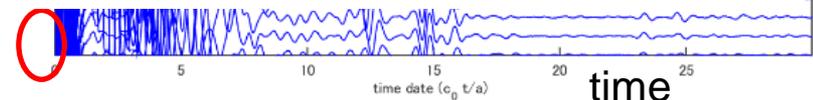
Incident wave transmission and receiving scattered waves using array probe



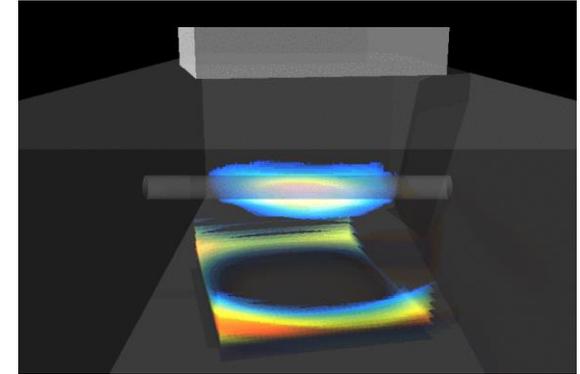
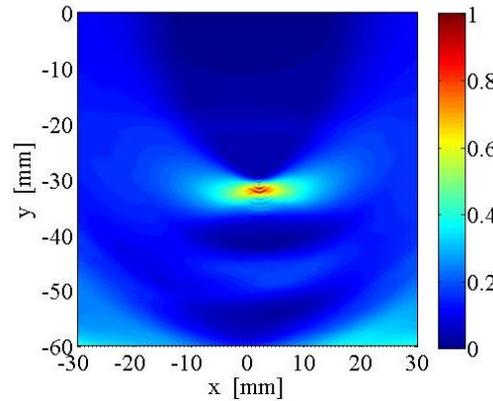
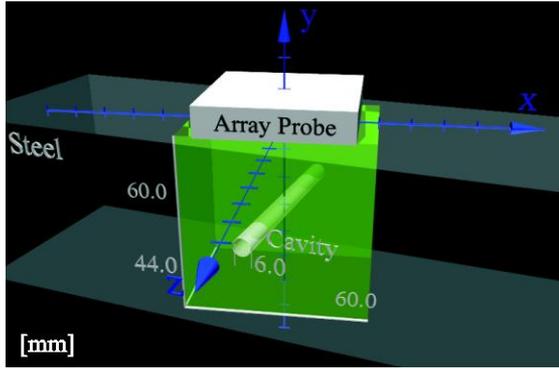
Ex) received wave form obtained by experiment
 transmission:15, receiver:1-32



これら得られた検査結果を元に、内部の状態を予測する
 逆問題へ帰着される



逆問題解析結果の例(開口合成法)



modeling of visualization area

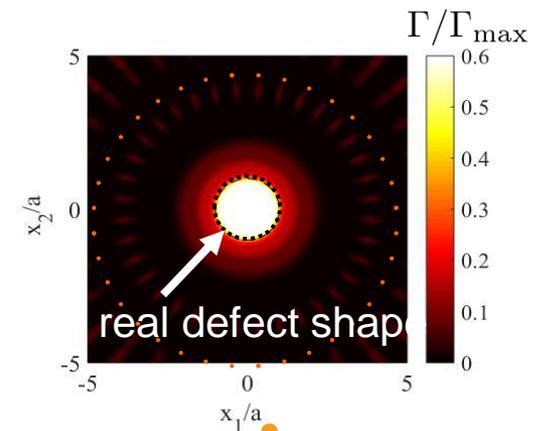
2D result for a cross section

3D result

- ・ 斎藤隆泰・廣瀬壯一：波動解析や逆問題および非破壊評価におけるAI・データサイエンス活用の動向, AI・データサイエンス論文集, vol.4(3), pp. 852-866, (2023)
 - ・ 斎藤隆泰: 最新の超音波イメージング-深層学習の応用を中心に-, 非破壊検査, vol.73(2), pp.73-77, (2024)
- 数多くの逆解析手法が提案されている

逆問題解析結果の例(逆散乱解析)

$$\Gamma(\mathbf{y}) = iC_{66} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \sqrt{\frac{|x| |f''(\varphi^s)|}{2\pi^3 k_0}} \left(\frac{1}{c_n} f(\varphi^s) + \frac{1}{c^{in}(\psi)} \right) \times \frac{u_i^{sc}(\mathbf{x}, \omega)}{d_j F(\omega) \hat{Q}_{ij} \text{sgn}(\cos(\varphi^s - \psi)) S^3(\varphi^s)} \times \exp \left[-ik_0 f(\varphi^s) |\mathbf{x}| + i(k_0 f(\varphi^s) + k) \hat{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{y} - i\frac{\pi}{4} \text{sgn}(f''(\varphi^s)) \right]$$



トモグラフィベース逆問題



transmitter

$t = 0$

$c(x_i, y_i)$

天谷ら: 0-1整数制約条件を用いた光CT逆問題, 日本機械学会論文集, (2006)

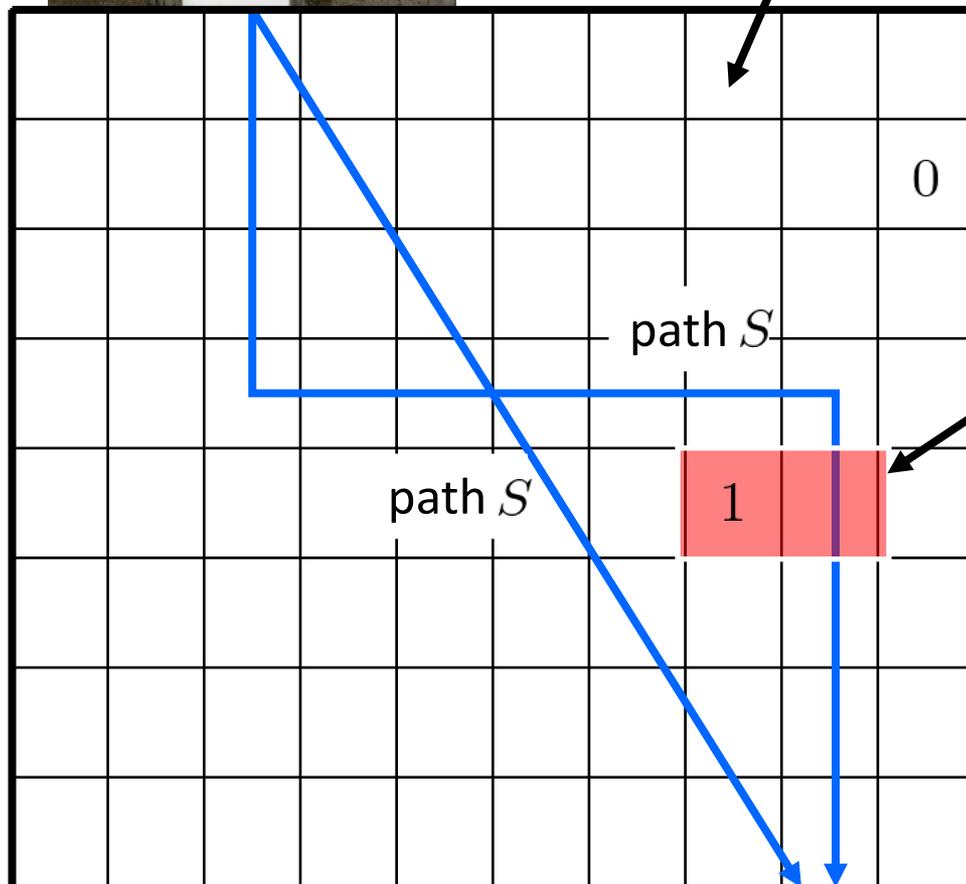


x 0-1 整数組合せ最適化問題に帰着し病患部を推定する逆問題を解いている



inclusion (defect)

量子アニーリング使えるか?



観測時間 t と波速 c の関係

$$t = \int_S \frac{1}{c(x, y)} dS = \int_S s(x, y) dS$$



スローネス(波速の逆数)

$$t_i = \sum_{j=1}^N s_j l_{ij} \quad s = \frac{1}{c}$$

(波動は送信点から受信点へ波線経路に従い最短経路を辿る)

receiver



トモグラフィ基礎検討結果(1)

欠陥部分(スリット)を逆解析

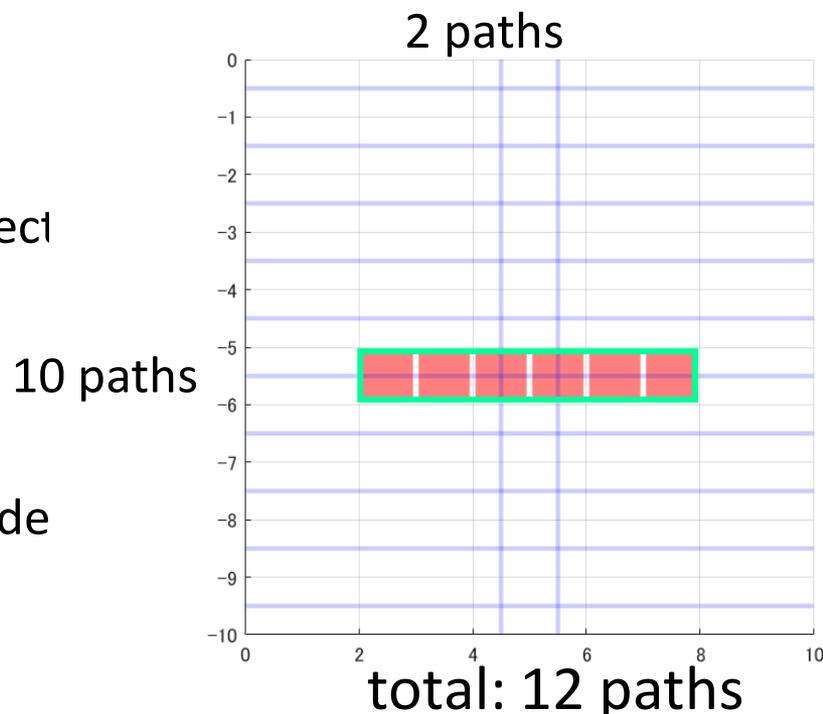
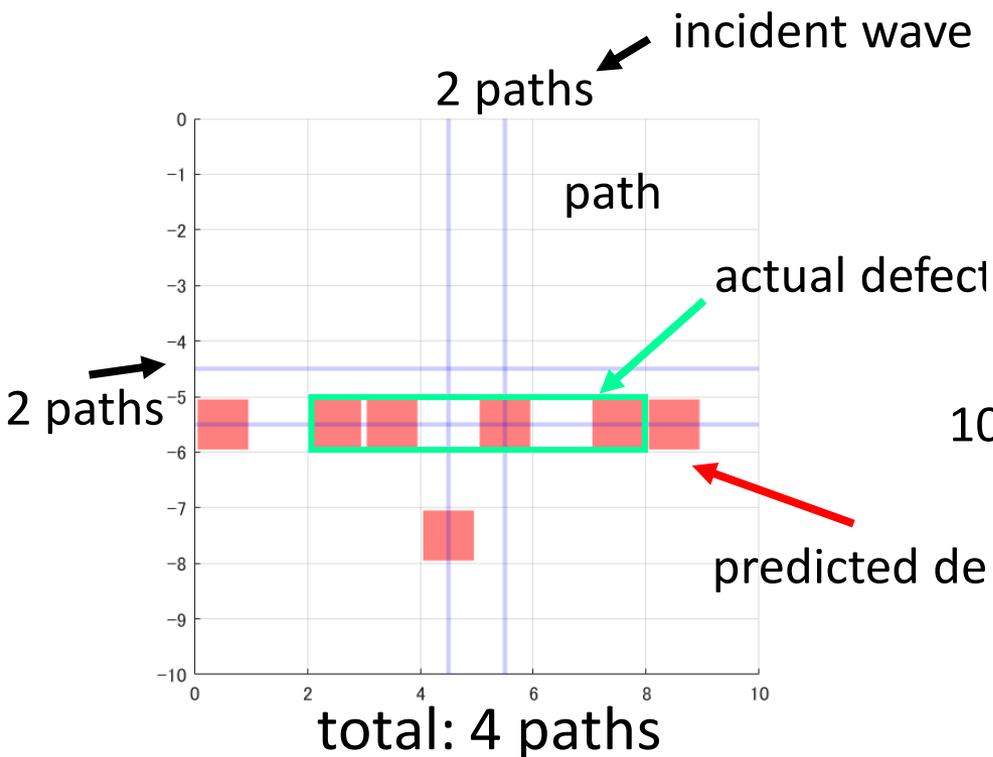
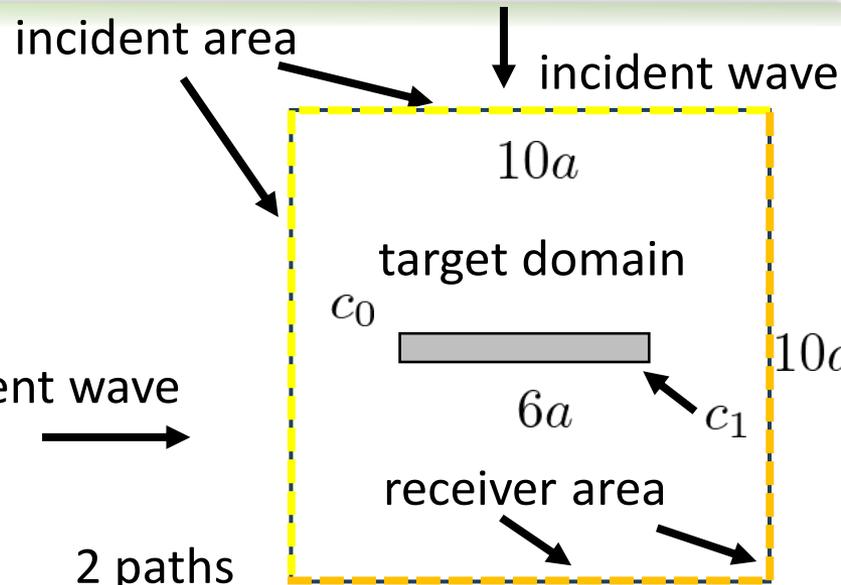
送受信領域限定(ただし形上)

波動の到達時間(光強度)を制約条件

無次元化波動速度 $c_0/c_1 = 2.0$

ショット数: 100000

Qubo アニールング (Torch Tytan, GPU: RTX 6000)



欠陥部分(矩形欠陥)を逆解析

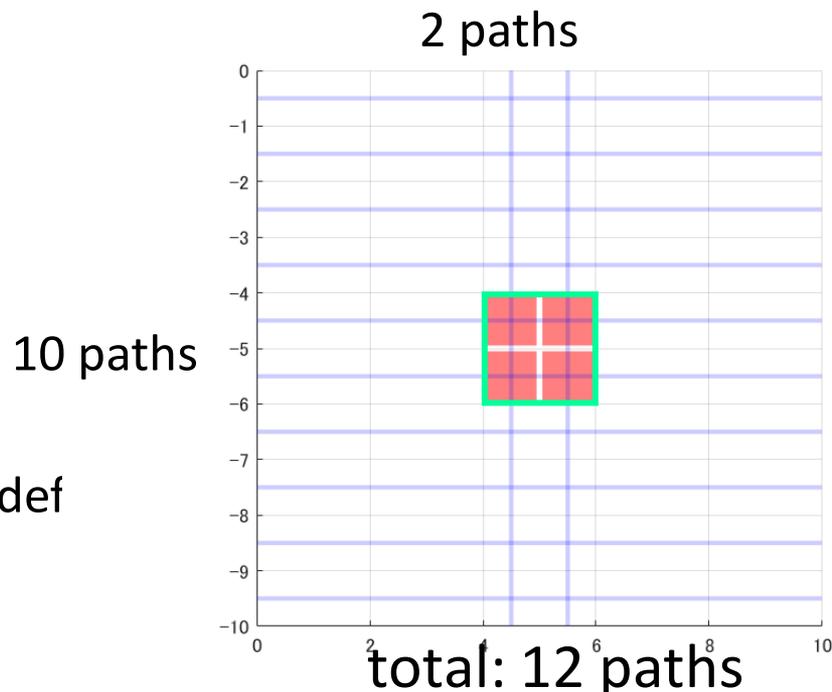
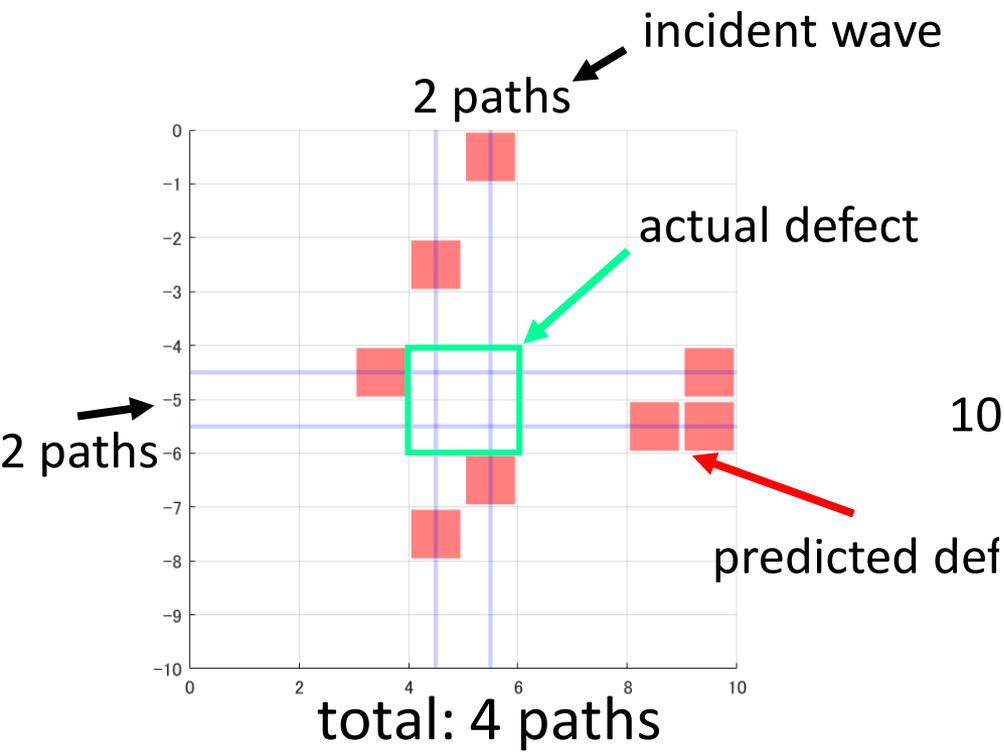
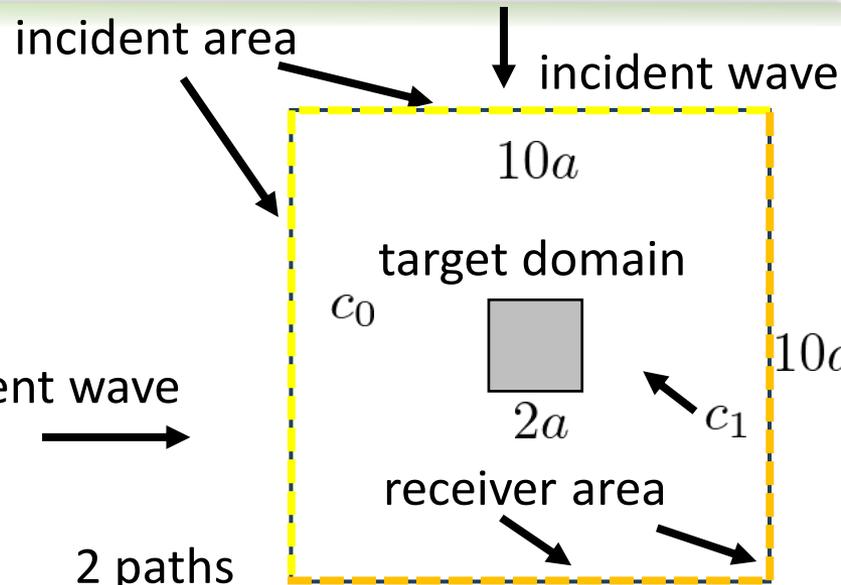
送受信領域限定(ただし形上)

波動の到達時間(光強度)を制約条件

無次元化波動速度 $c_0/c_1 = 2.0$

ショット数: 100000

Qubo アニールング (Torch Tytan, GPU: RTX 6000)



まとめ

- 古典-量子ハイブリッド計算による境界要素法解析等を行った
- シミュレーターの利用かつ簡単な問題設定ではあるが一連のハイブリッド化の流れで数値解を構成することができた
- 量子アニーリングを逆解析に適用する基礎的な検討を行った
- 基礎的な問題ではあるが欠陥位置等を推定することができた

今後の課題・予定

- どこを量子コンピューターで解くのか(現状は代数方程式)
- 古典コンピュータからのデータのエンコーディングをどうするか
- 実機を用いた場合ででてくる問題
- 制約条件や複数の欠陥, 欠陥種別の検討, 計測誤差を含む場合
- 3次元問題への応用
- 特性関数を導入した逆散乱解析, 反射トモグラフィへの応用等, 適用できそうな問題はまだまだありそう