

第2回Quantum CAE研究会

# トラス構造解析への 量子コンピューティングの適用

慶應義塾大学 理工学研究科 村松研究室

本田理央

2025/05/09

ヒト・モノ・環境との  
相互作用！

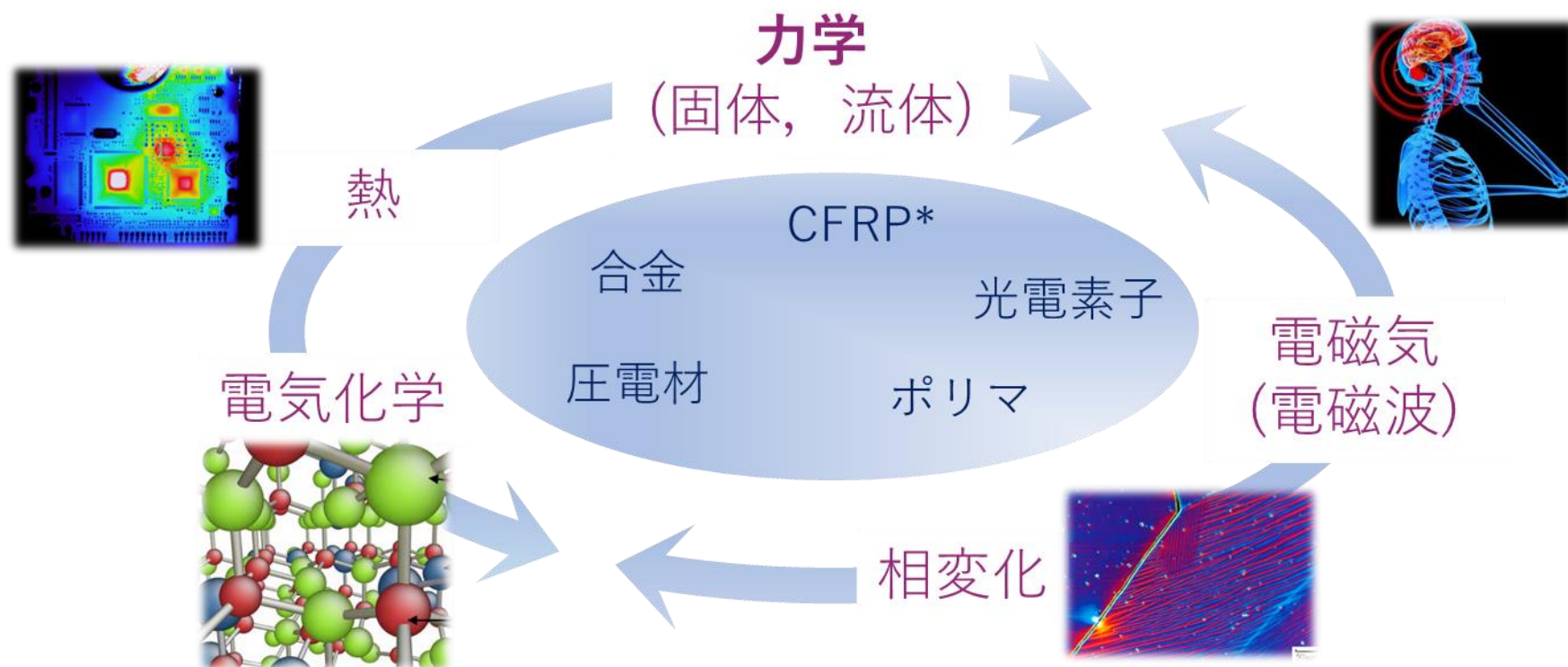
## 複数の物理現象の中での 材料に関する シミュレーション

生成AIのみでは再現  
できない！

# 村松研究室について

これからの新素材，新技術構造物の特性予測：

多様化する新素材，新技術構造物で生じる現象

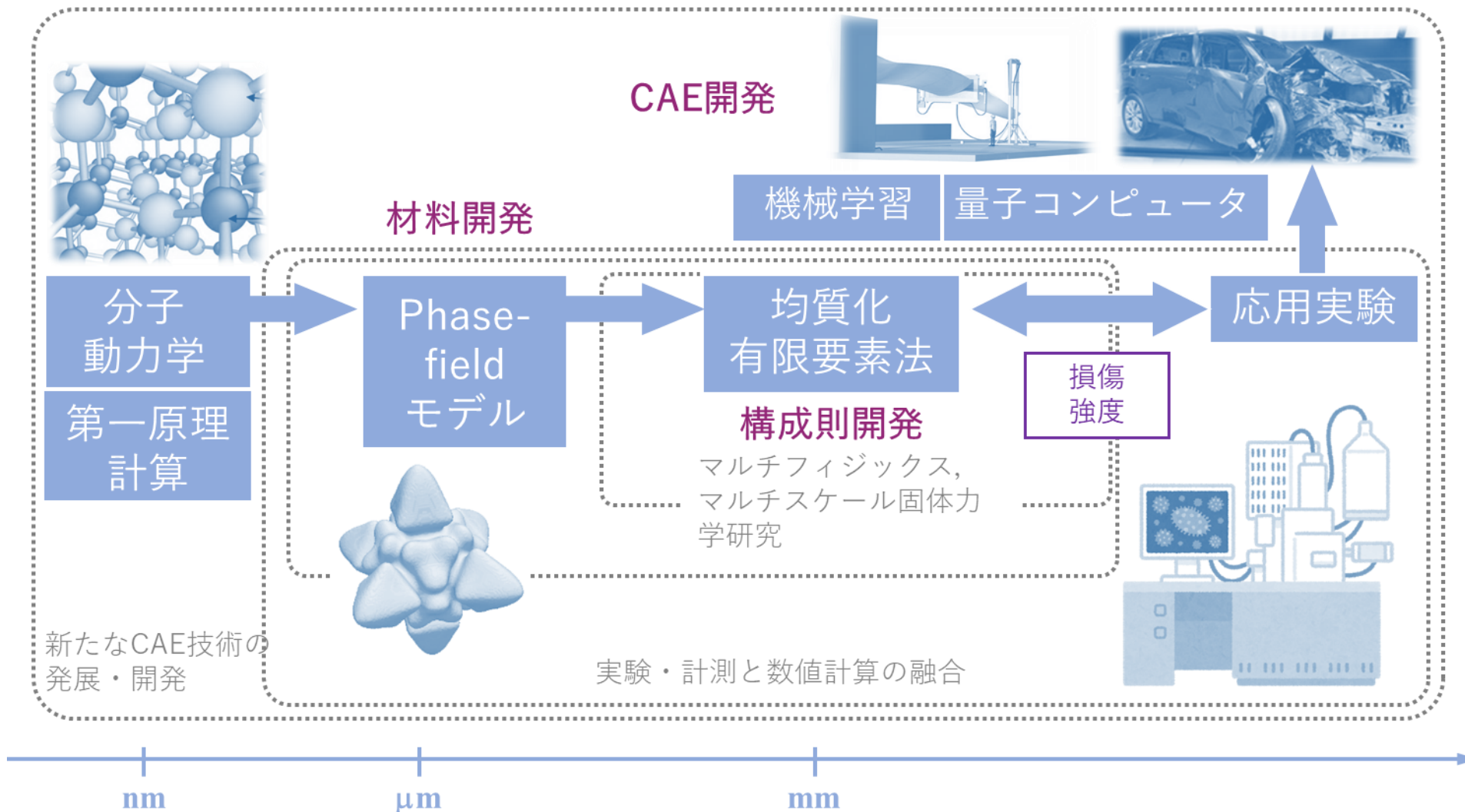


連成系の物理：マルチフィジックス  
新素材の性能予測

\*：炭素繊維強化樹脂

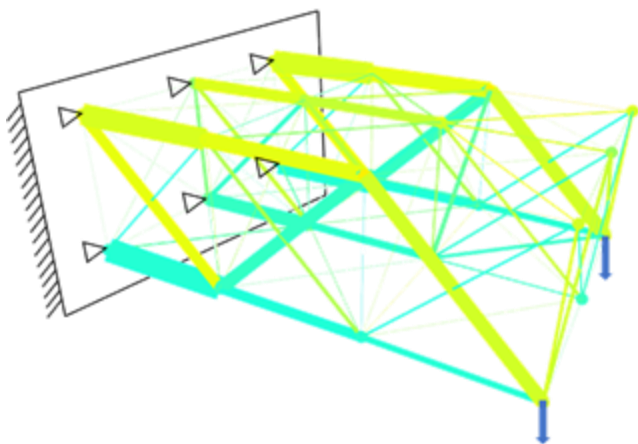


# 村松研究室について

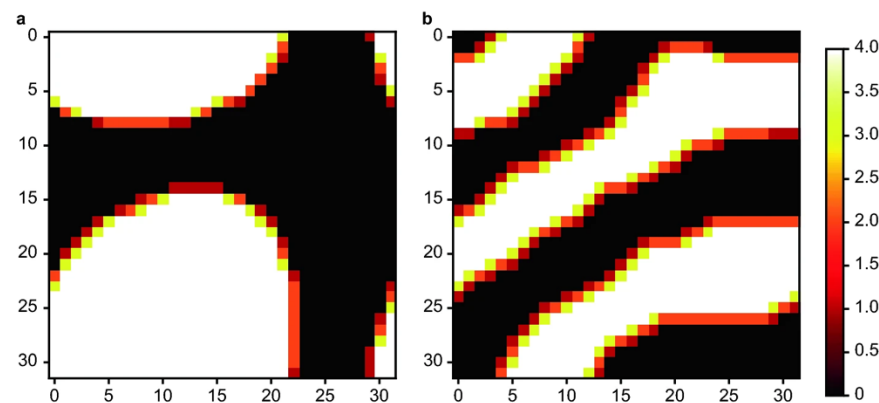


(A)力学理論の構築, (B)数値計算法の開発, (C)理論と計算法の検証のバランスをとりながら進展させる.

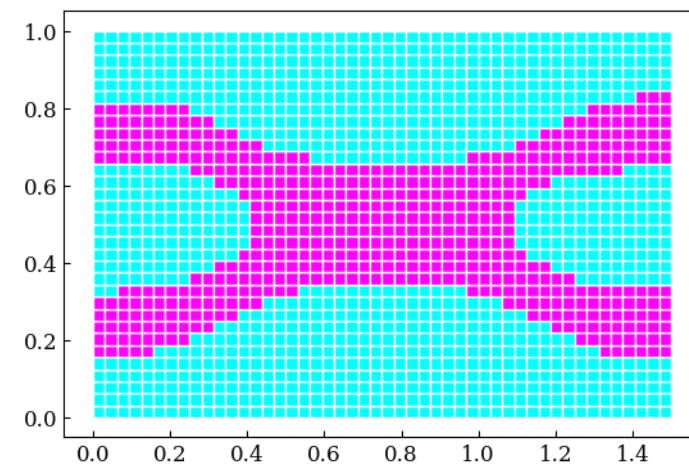
## 量子アニーリングを用いた力学解析



トラス構造のトポロジー最適化[1]



Phase-fieldシミュレーション[2]



流路最適化[3]

現在はゲート式量子コンピュータの適用の研究も行っている

[1] Honda, R., Endo, K., Kaji, T., Suzuki, Y., Matsuda, Y., Tanaka, S., & Muramatsu, M. (2024). *Scientific Reports*, 14(1), 13872.

[2] Endo, K., Matsuda, Y., Tanaka, S., & Muramatsu, M. (2022). *Scientific Reports*, 12(1), 10794

[3] Suzuki, Y., Aoki, S., Key, F., Endo, K., Matsuda, Y., Tanaka, S., M Behr., & Muramatsu, M. arXiv preprint arXiv:2411.08405 (2024).

# トポロジー最適化問題とその課題

## トポロジー最適化問題

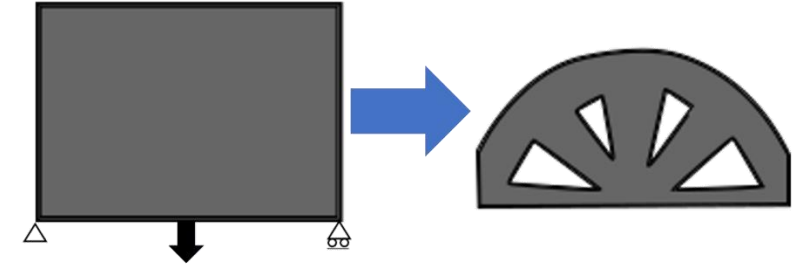
トポロジー最適化問題は、高い性能を低コストで実現できる部材の組み合わせを見つける問題である。

トポロジー最適化問題の使用例として橋の設計が挙げられる。

## 現状手法の課題

トポロジー最適化問題のような組合せ最適化問題は系が大きくなると全体最適解を得るのに膨大な計算コストが必要

将来的に新規計算手法が必要



トポロジー最適化のイメージ  
[4]



トポロジー最適化を用いて  
設計された橋[5]

[4] 中住昭吾. 連続体の構造最適化に基づく機械系の最適設計技術. 日本 AEM 学会誌, 2014, 22.1: 27-32.

[5] <https://idarts.co.jp/3dp/topology-optimised-bridge/>

## 量子コンピュータ

- 重ね合わせの原理や量子もつれなどの効果を利用するコンピュータ.
- 従来のコンピュータよりも高速化が期待.

### ゲート式量子コンピュータ

- ◆ 量子ゲートを量子ビットへ適用させる

#### Hadamard gate

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$$

#### CNOT gate

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

...

- ◆ アルゴリズムに応じて様々な計算が可能
- ◆ ハードウェアの実装が難しい

### 量子アニーリング

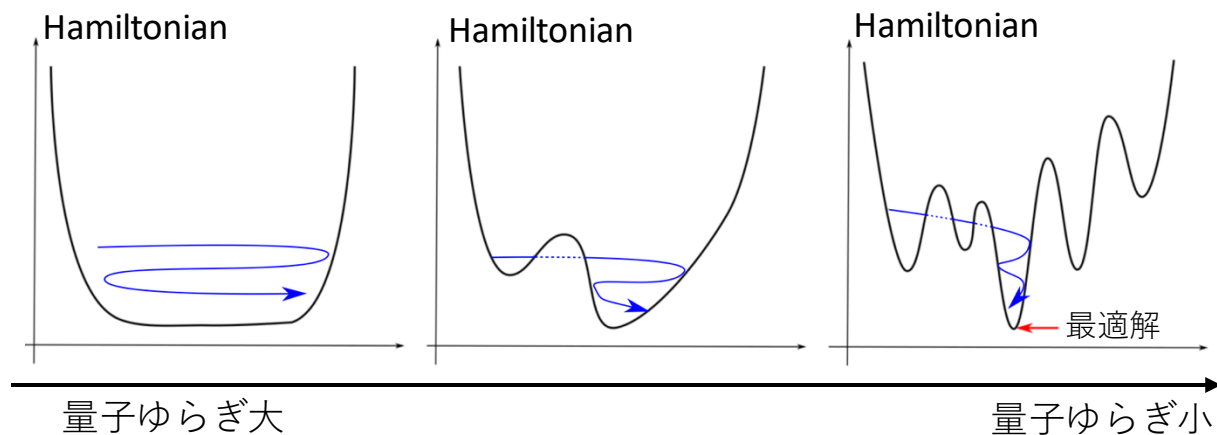
- ◆ 最適化問題を得意とする

#### Quadratic Unconstrained Binary Optimization (QUBO)

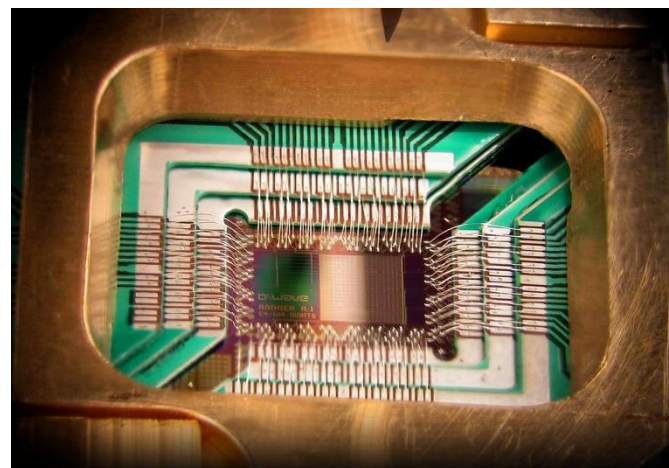
$$H = - \sum_{\alpha, \beta} Q_{\alpha\beta} q_{\alpha} q_{\beta} \quad (q_{\alpha} = 0, 1)$$

- ◆ 約5000量子ビットを扱えるアニーリング  
マシンをD-waveが開発

# 量子アニーリング



量子アニーリングのイメージ[6]



量子アニーリングマシンの内部構造の例[7]

## 量子アニーリング

近年、量子コンピュータが注目されており  
中でも量子アニーリングは  
**組合せ最適化問題を解くのに特化している。**

量子ゆらぎの大きさを徐々に変動させる  
ことによって最適解を求める。

## 先行研究

量子アニーリングを用いた先行研究の  
例としては交通量の整理[8]や  
看護師スケジューリング問題[9]等が挙げられる。  
**固体力学分野へ応用するための手法開発を検討  
する。**

[6] <https://amplify.fixstars.com/ja/techresources/annealing-method/>

[7] <https://dwavejapan.com>

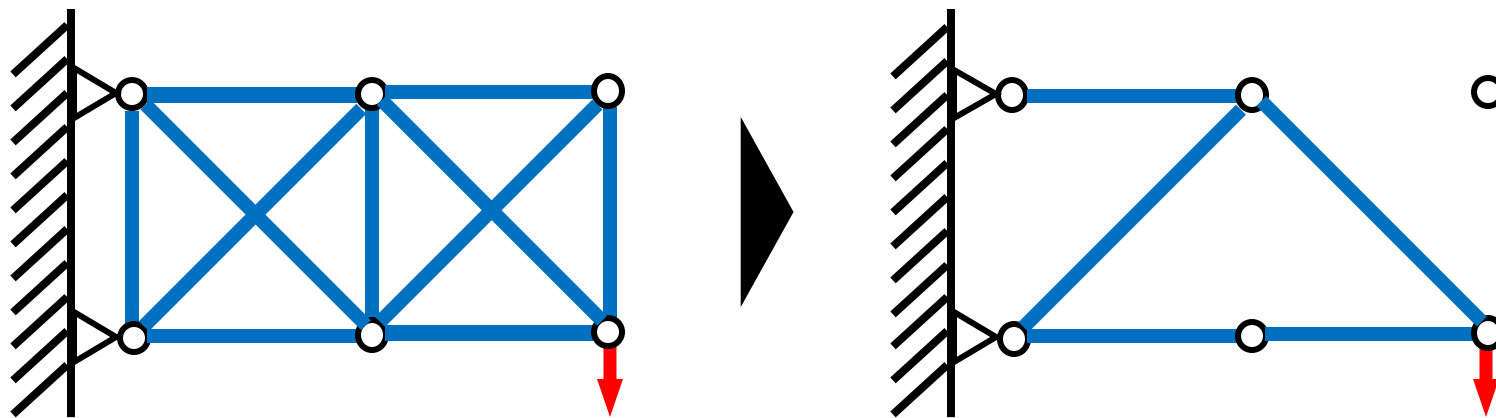
[8] Neukart, F., Compostella, G., Seidel, C., Von Dollen, D., Yarkoni, S., and Parney, B. **4**. *Frontiers*, 2017.

[9] Ikeda, K., Nakamura, Y., and Humble, T. S. **9**. *Nature Publishing Group*, 2019.



# 研究目的

- ◆量子アニーリングを用いた固体構造のトポロジー最適化手法を開発する。
- ◆本研究では例題としてトラス構造のトポロジー最適化を量子アニーリングを用いて実施する。



トラス構造のトポロジー最適化のイメージ

# 量子アニーリングの使用

アニーリングマシンを用いるために組合せ最適化問題を、

イジング模型や二次形式二値変数最適化

(QUBO: Quadratic Unconstrained Binary Optimization)

に変換する。最適化問題のエネルギー関数はハミルトニアン $H$ で表され、 $H$ を最小とする変数の組合せを量子アニーリングによって求める。

イジング模型

$$H = - \sum_{\alpha < \beta} J_{\alpha\beta} \sigma_{\alpha} \sigma_{\beta} - \sum_{\alpha=1}^N h_{\alpha} \sigma_{\alpha} \quad (\sigma_{\alpha} = \pm 1)$$

$J_{\alpha\beta}, h_{\alpha}$ : 問題設定で定まるパラメータ  
 $\sigma_{\alpha}$ : イジング変数

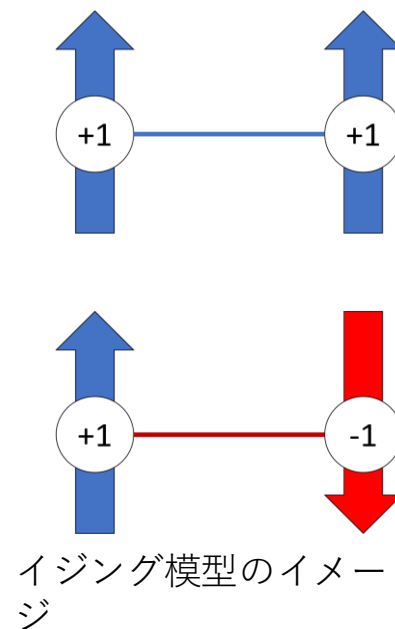
$$\sigma_{\alpha} = 1 - 2q_{\alpha}$$

等価

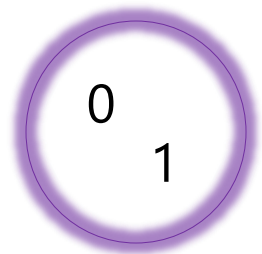
QUBO

$$H = - \sum_{\alpha, \beta} Q_{\alpha\beta} q_{\alpha} q_{\beta} \quad (q_{\alpha} = 0, 1)$$

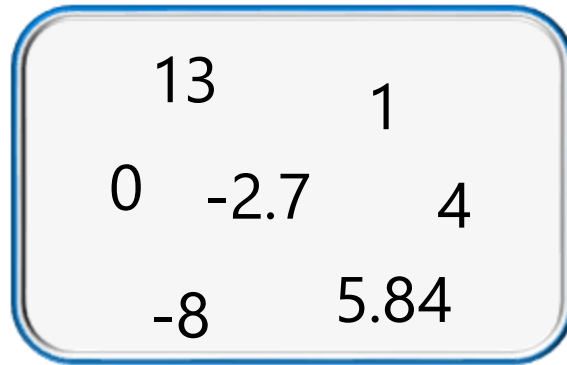
$Q_{\alpha\beta}$ : 問題設定で定まるパラメータ  
 $q_{\alpha}$ : 二値変数



# 実数の乱数和表現



qubit



実数変数

- 実数変数をqubit(二値変数)で表現する
- ある範囲の実数を複数の乱数の和で表す[10]

$$r = a \left\{ \left( 2 \sum_{\alpha \in N} \epsilon_{\alpha} q_{\alpha} / \sum_{\alpha \in N} \epsilon_{\alpha} \right) - 1 \right\}$$

$\epsilon_{\alpha}$  : 0~1の乱数,  $q_{\alpha}$  : 二値変数,  $N$  : 乱数と二値変数の  
個数

$a$  : 範囲のパラメータ,  $-a \leq r \leq a$

乱数

0.17295

0.37782

0.13406

0.67586

0.18184

×

×

×

×

×

qubit

0

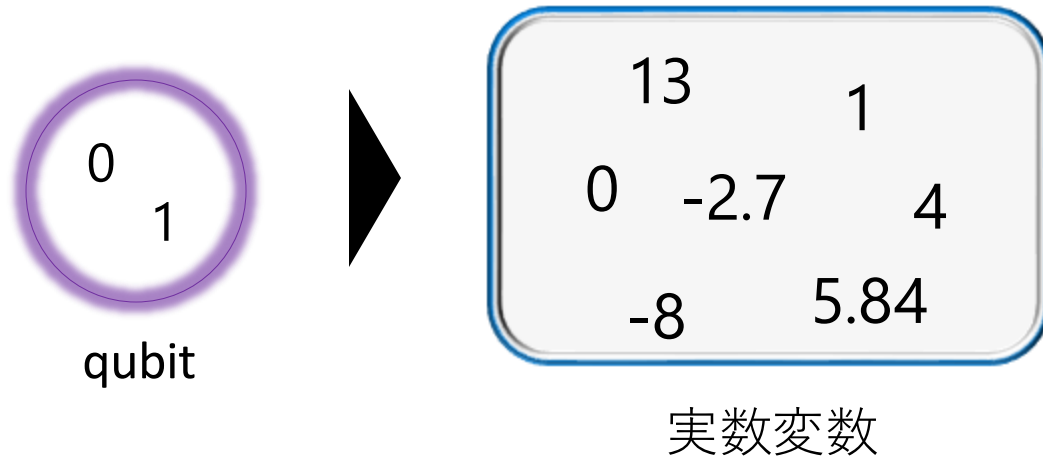
0

0

0

0

# 実数の乱数和表現

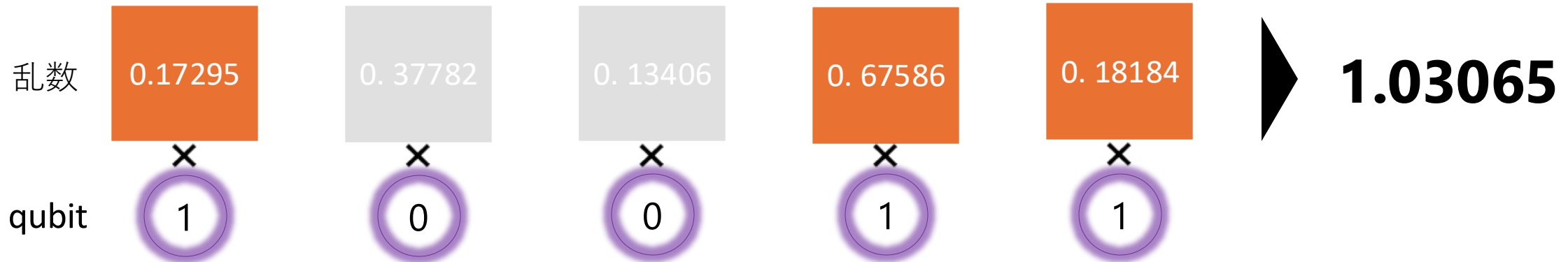


- 実数変数をqubit(二値変数)で表現する
- ある範囲の実数を複数の乱数の和で表す[10]

$$r = a \left\{ \left( 2 \sum_{\alpha \in N} \epsilon_{\alpha} q_{\alpha} / \sum_{\alpha \in N} \epsilon_{\alpha} \right) - 1 \right\}$$

$\epsilon_{\alpha}$  : 0~1の乱数,  $q_{\alpha}$  : 二値変数,  $N$  : 乱数と二値変数の  
個数

$a$  : 範囲のパラメータ,  $-a \leq r \leq a$





# トラスのハミルトニアン定式化

トラスの節点 $i$ と $j$ の間の弾性エネルギーを近似すると以下のようなになる。

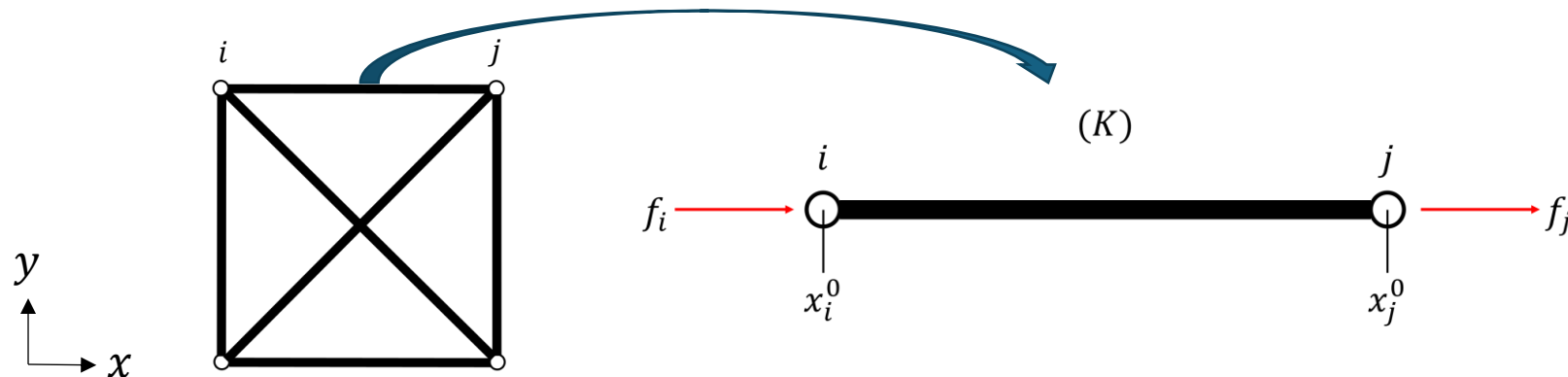
$$E^{(K)} = k^{(K)} \left( |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j| - l_{ij}^{(K)} \right)^2$$

$$\cong k^{(K)} \left( (x_i^{0x} - x_j^{0x})(u_i^x - u_j^x)/l_{ij}^{(K)} + (x_i^{0y} - x_j^{0y})(u_i^y - u_j^y)/l_{ij}^{(K)} \right)^2$$

$E^{(K)}$ :弾性エネルギー,  $k^{(K)}$ バネ定数,  $\mathbf{x}_i$ : 変位,  $l_{ij}^{(K)}$ :自然長,  $x_i^0$ : 自然位置,  $u_i^x$ : 変位  
節点 $i$ の変形前と変形後の位置エネルギーの差 $\Delta U_i$ は以下のようなになる。

$$\Delta U_i = W u_i^y$$

$\Delta U_i$ : 位置エネルギーの差,  $W$ : 節点 $i$ の $y$ 方向荷重,  $u_i^y$ :  $y$ 方向変位



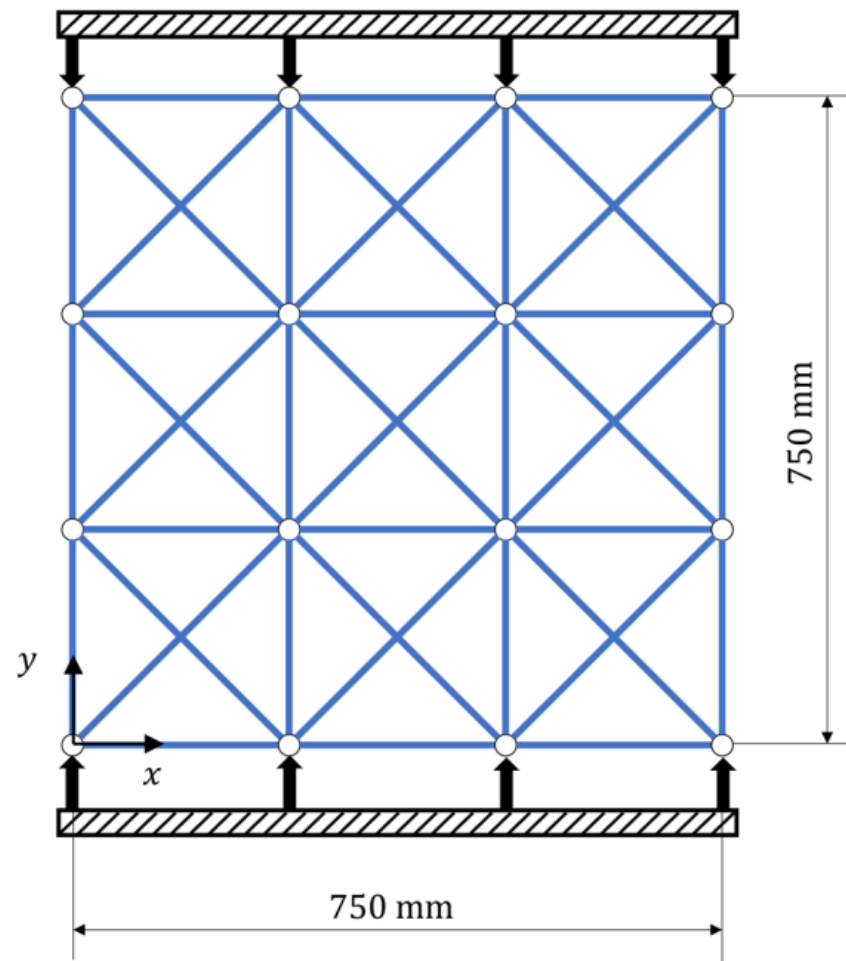
# 変形解析結果

弾性エネルギーと位置エネルギーの総和が最小となる  
とき，トラス構造は釣り合いが取れている状態  
である。

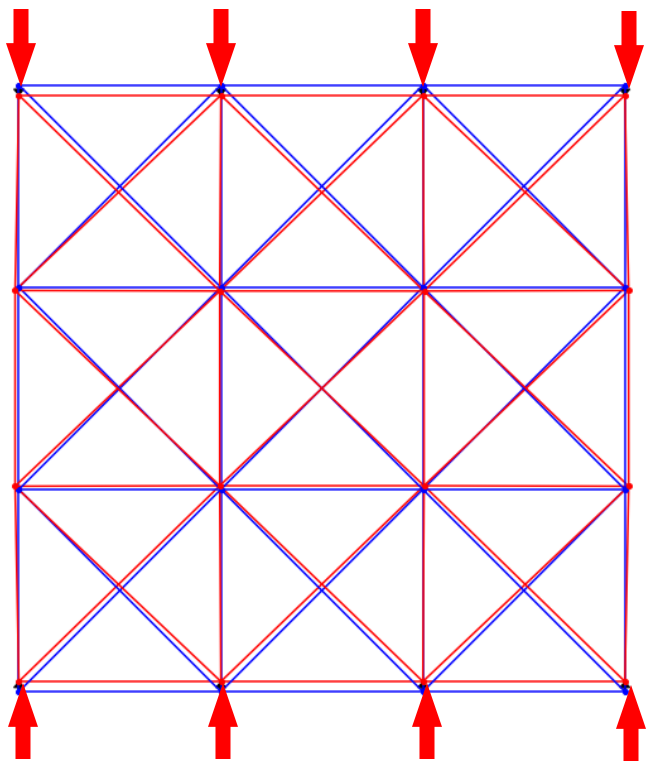
$$H = k^{(K)} \left\{ (x_i^{0x} - x_j^{0x}) (u_i^x - u_j^x) / l_{ij}^{(K)} + (x_i^{0y} - x_j^{0y}) (u_i^y - u_j^y) / l_{ij}^{(K)} \right\}^2 \rightarrow \text{弾性エネルギー}$$

$$+ W u_i^y \rightarrow \text{位置エネルギー}$$

$$u_i^{x,y} = a \left\{ \left( 2 \sum_{\alpha \in N} \epsilon_{\alpha} q_{\alpha} / \sum_{\alpha \in N} \epsilon_{\alpha} \right) - 1 \right\}$$

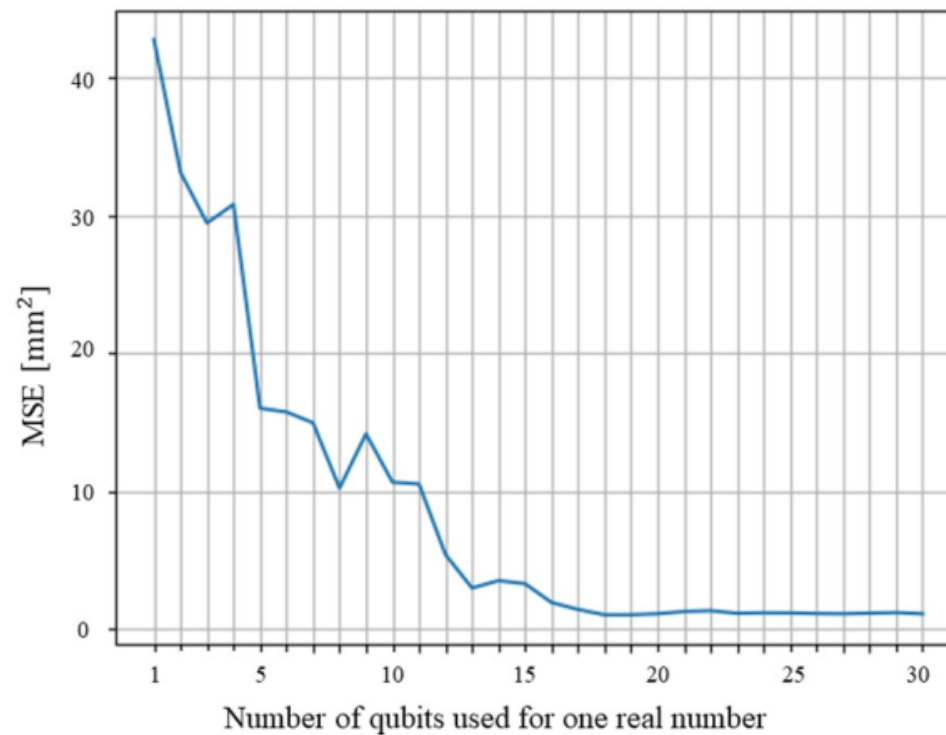


# 変形解析結果



圧縮の解析結果

青線:変形前  
赤線:変形後



実数表現に用いるqubit数を増やすと  
誤差が小さくなる様子が見られる

# 構造最適化のための定式化

バネ定数  $k_{ij}$  を部材の断面積を用いて表すと以下の式のようになる。

$$k_{ij} = \hat{E} A_{ij} / l_{ij}$$

$\hat{E}$ : Young率,  $A_{ij}$ : 断面積,  $l_{ij}$ : 自然長

上式を用いると弾性エネルギーは以下の式のようになる。

$$E_{ij} \cong \hat{E} A_{ij} / l_{ij} \left( (u_i^{0x} - u_j^{0x})(\Delta u_i^x - \Delta u_j^x) / l_{ij} + (u_i^{0y} - u_j^{0y})(\Delta u_i^y - \Delta u_j^y) / l_{ij} \right)^2$$

断面積の増減  $\Delta A_{ij}$  を以下のように二値変数で表現する。

$$\Delta A_{ij} = 2N \left( \sum_{\alpha \in \mathbb{N}} 2^{\alpha-1} q^{\alpha} \right) / \sum_{\alpha \in \mathbb{N}} 2^{\alpha-1} - N$$

$$-N \leq \Delta A_{ij} \leq N$$

断面積を変数にとった最適化計算が可能となる。



# 最適化手順

つり合い条件のもと、剛性最大化を考える。

$$H = - \sum_{e=1}^{N_{\text{elem}}} \left( \hat{E} A_{ij} / l_{ij} \left( (u_i^{0x} - u_j^{0x})(\Delta u_i^x - \Delta u_j^x) / l_{ij} + (u_i^{0y} - u_j^{0y})(\Delta u_i^y - \Delta u_j^y) / l_{ij} \right)^2 \right) \\ + \lambda \left\{ \sum_{e=1}^{N_{\text{elem}}} \left( k^{(K)} \left( (x_i^{0x} - x_j^{0x})(u_i^x - u_j^x) / l_{ij}^{(K)} + (x_i^{0y} - x_j^{0y})(u_i^y - u_j^y) / l_{ij}^{(K)} \right)^2 \right) \right\}$$

剛性最大化

つり合い計算

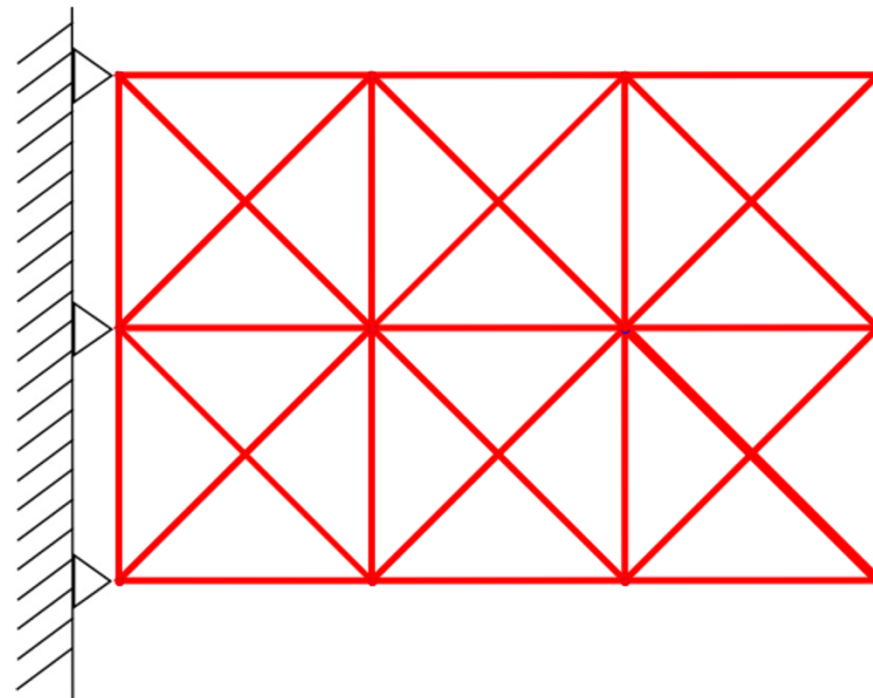
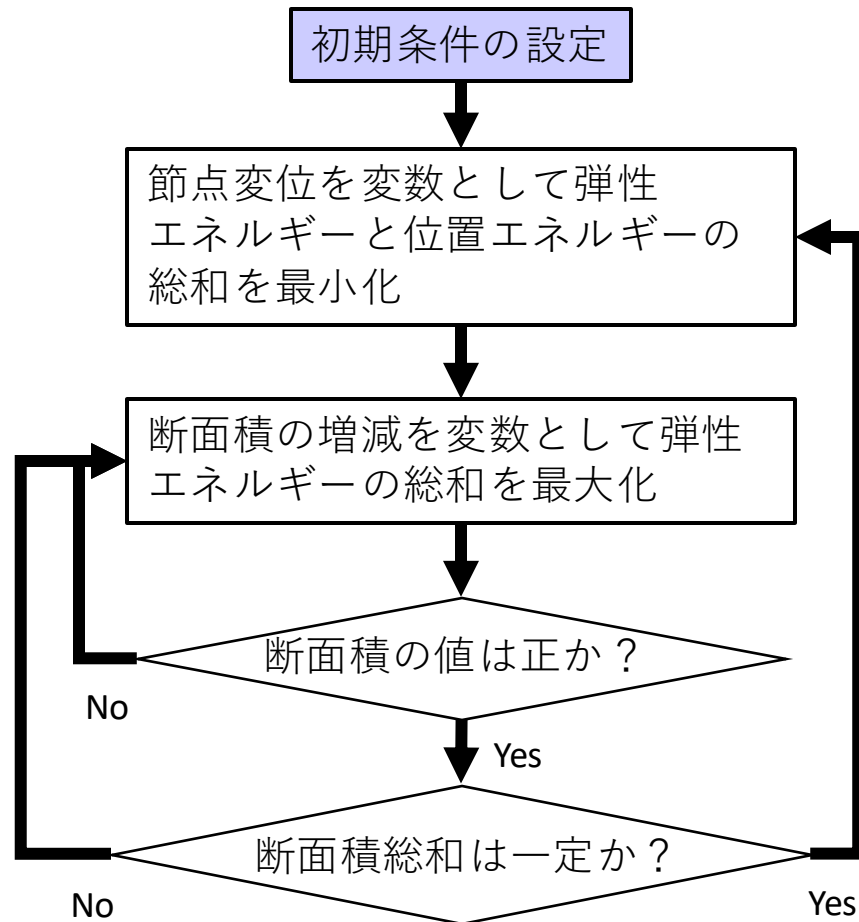
2つの式が打ち消し合ってしまう



つり合いと剛性最大化の同時計算は困難

# 最適化手順

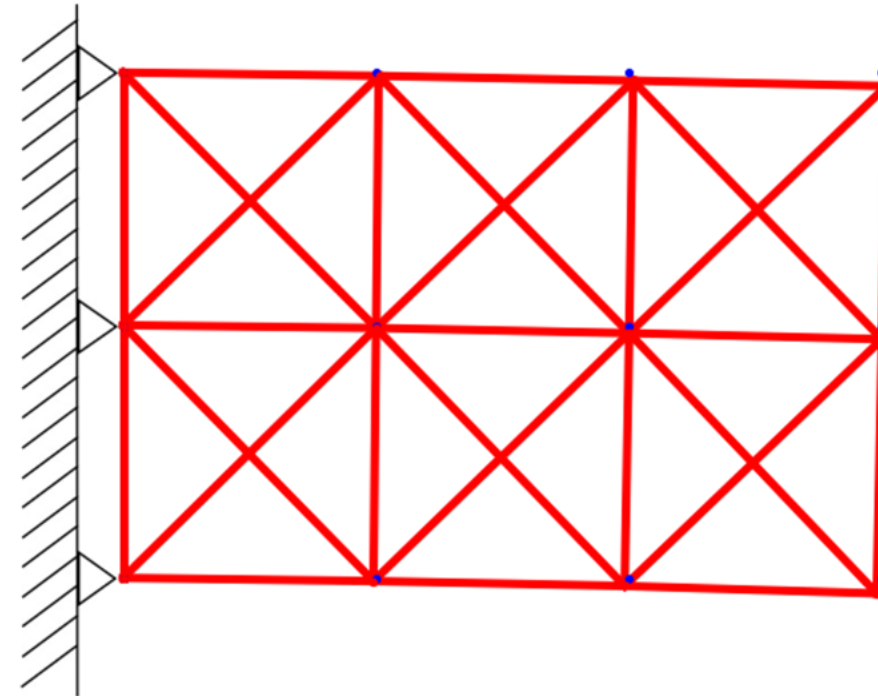
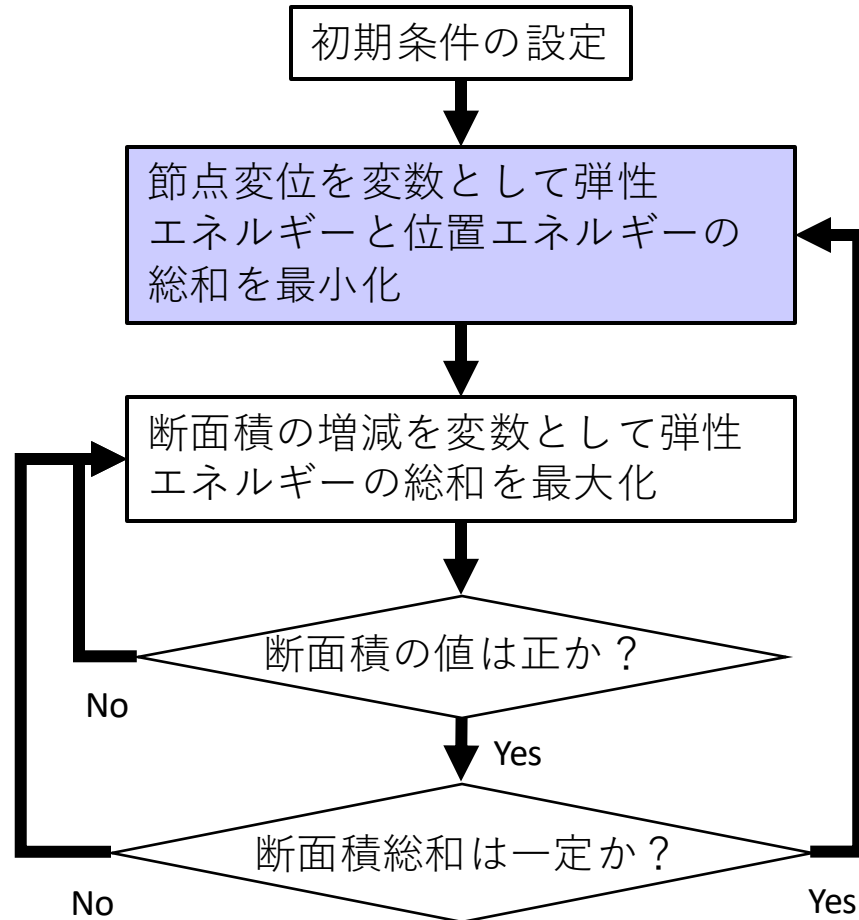
変位の計算と断面積の計算を分けて行い、両者を繰り返し行う。



初期状態

# 最適化手順

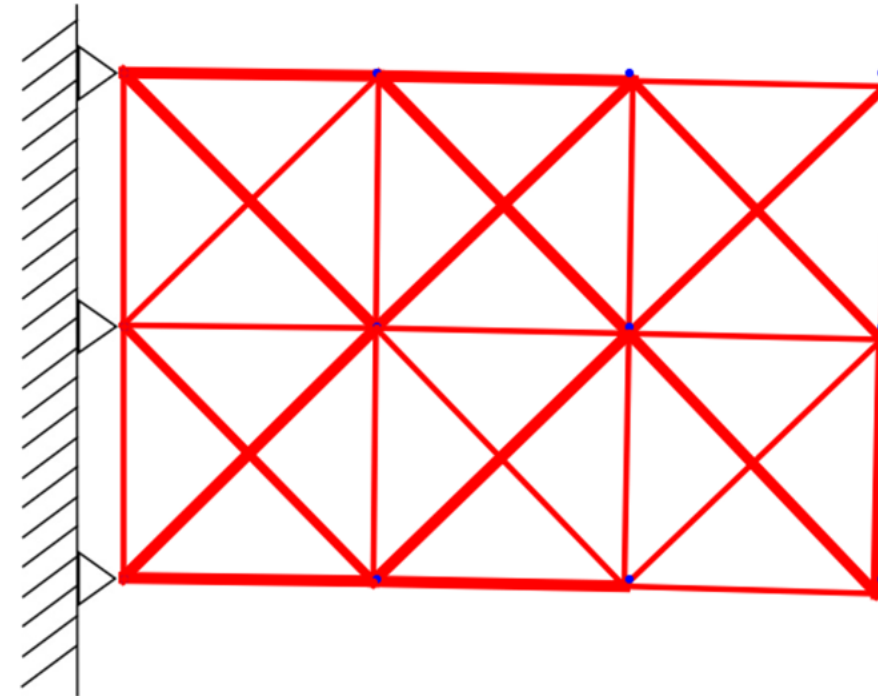
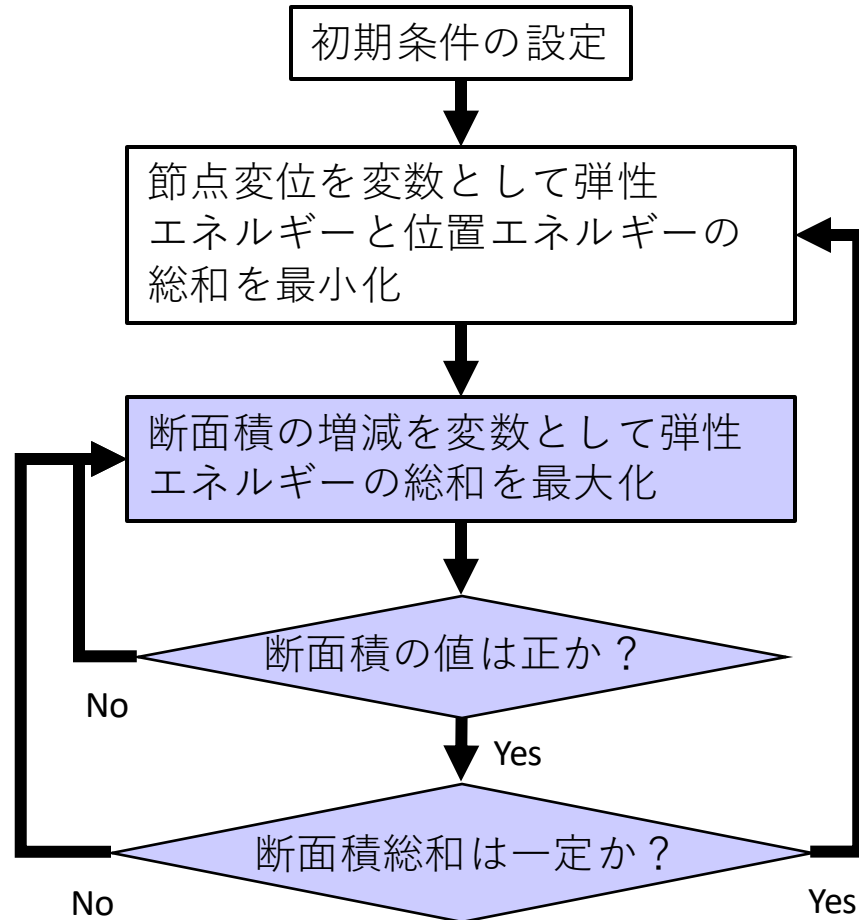
変位の計算と断面積の計算を分けて行い、両者を繰り返す行う。



変位変化

# 最適化手順

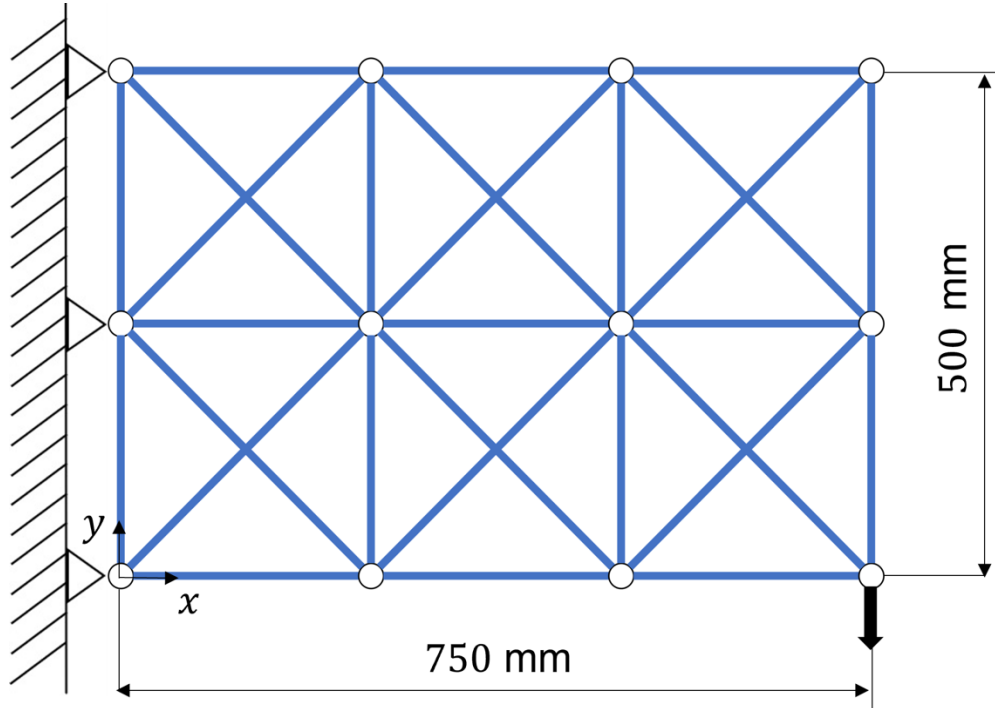
変位の計算と断面積の計算を分けて行い、両者を繰り返す行う。



断面積変化



# 解析条件



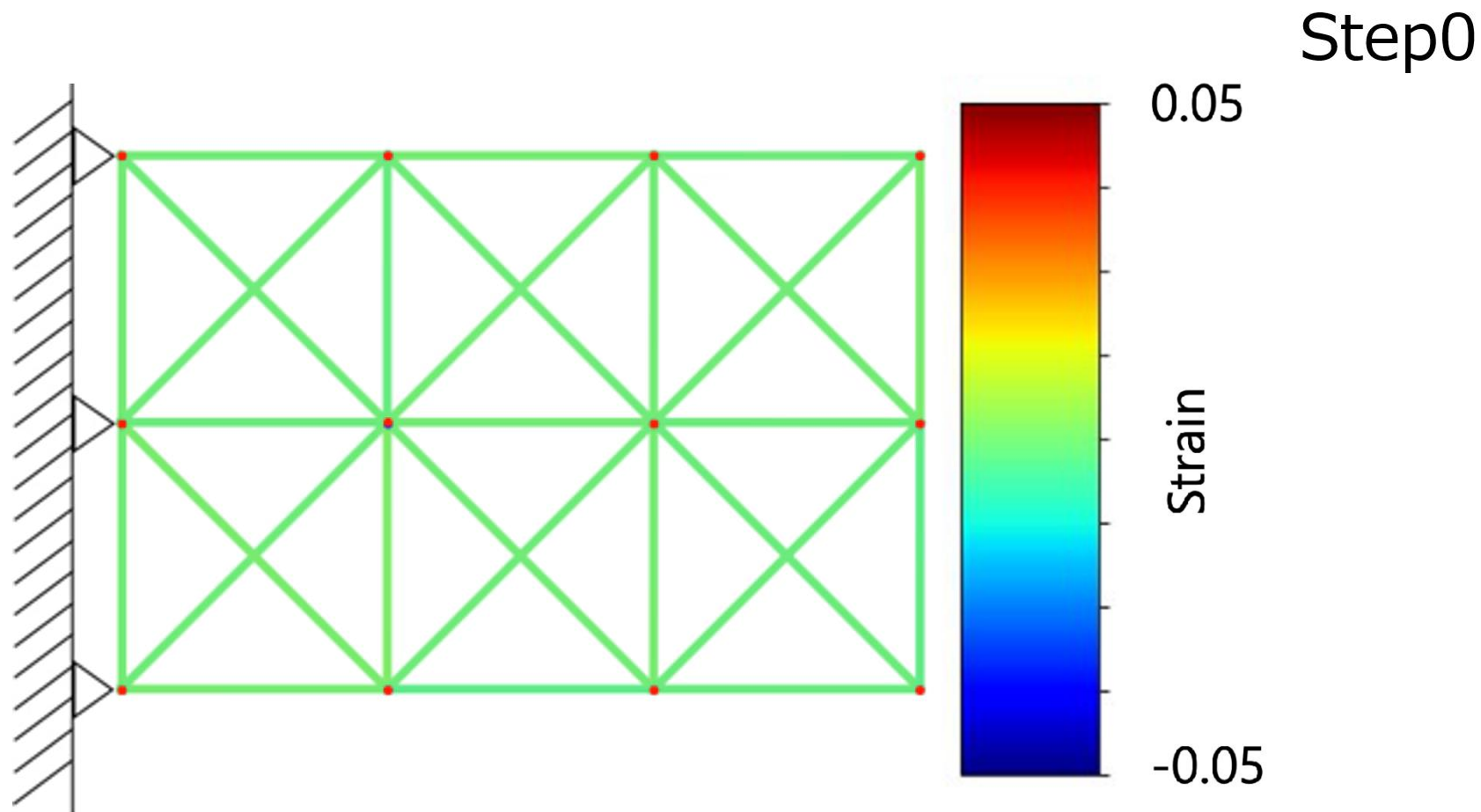
解析モデル

図のトラスの左端を固定,  
右下に荷重を加える.

解析条件

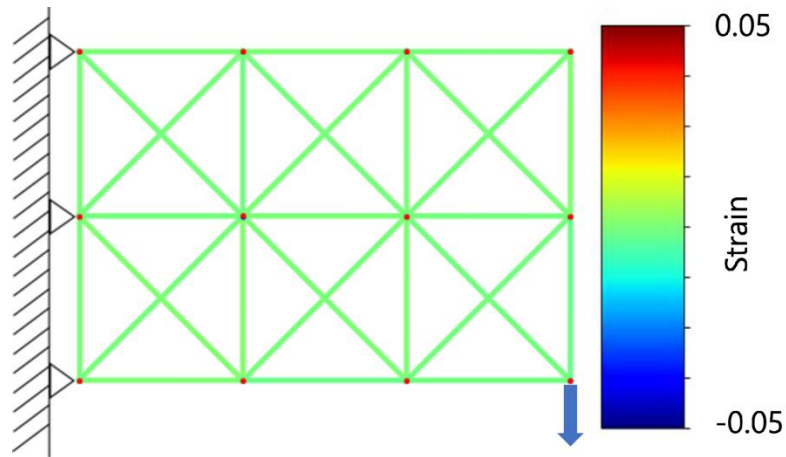
|          |                           |
|----------|---------------------------|
| 使用マシン    | D-Wave Leap Hybrid Solver |
| 部材本数     | 29本                       |
| トラス一辺の長さ | 250 mm                    |
| 初期断面積    | 50 mm <sup>2</sup>        |
| Young率   | 5 MPa                     |
| 荷重       | 150 N                     |

# 2次元トラス解析結果

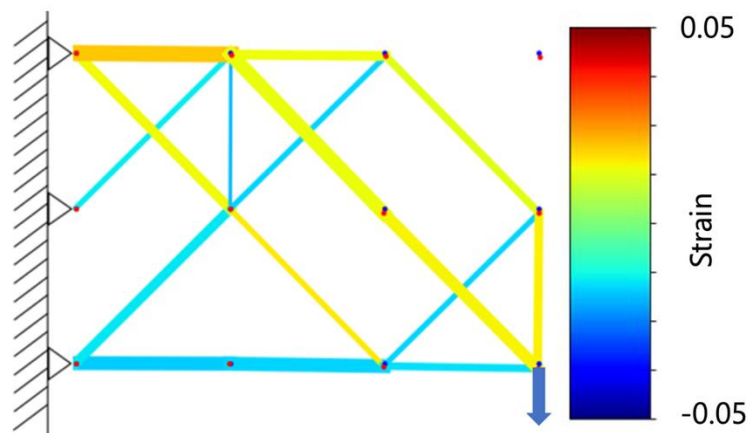


# 最適化結果

30ステップ後の解析結果を図に示す。



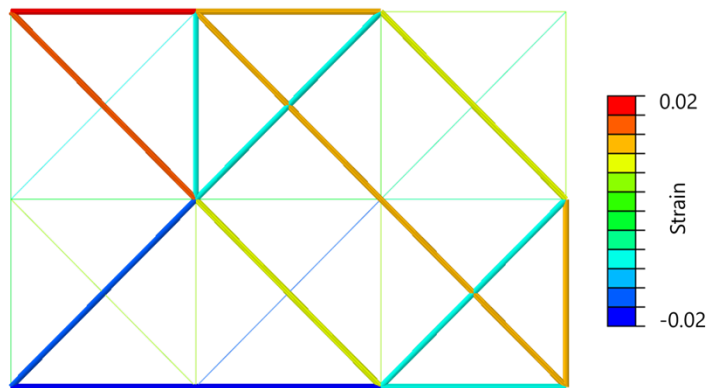
初期のトラス構造



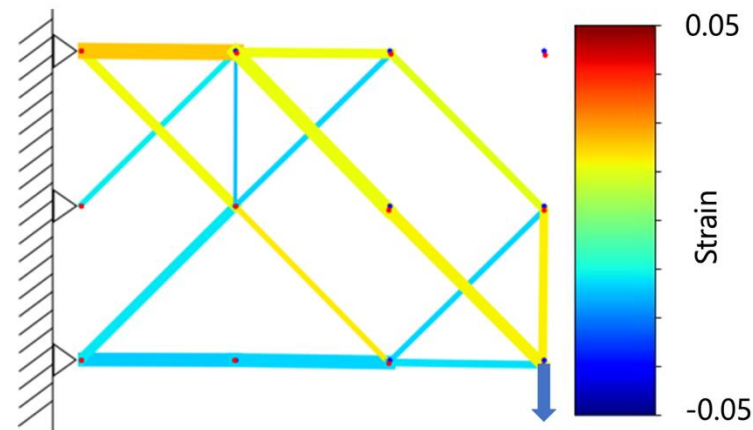
30ステップ後の解析結果

- ◆ はりの曲げと同様，トラス構造の上側が引張り，下側が圧縮となっている。
- ◆ 各ステップごとでの断面積は，ひずみが多い部材では増加し，ひずみが小さい部材では減少していくように変化していく様子が見られる。
- ◆ 荷重をかけた先が細くなる構造が見られる。

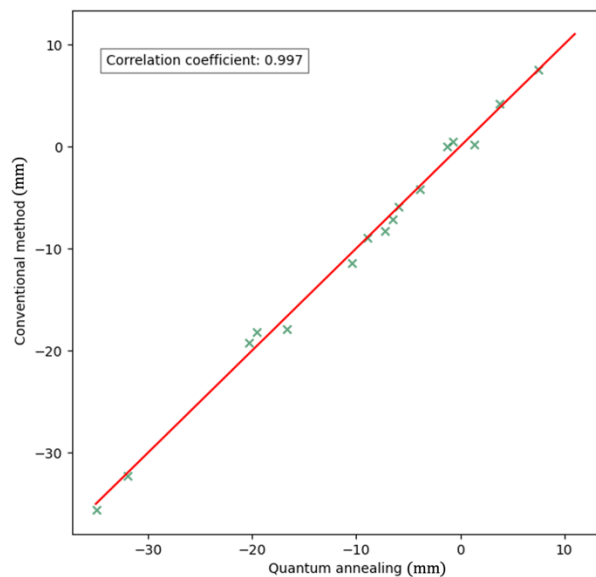
# 古典最適化との比較



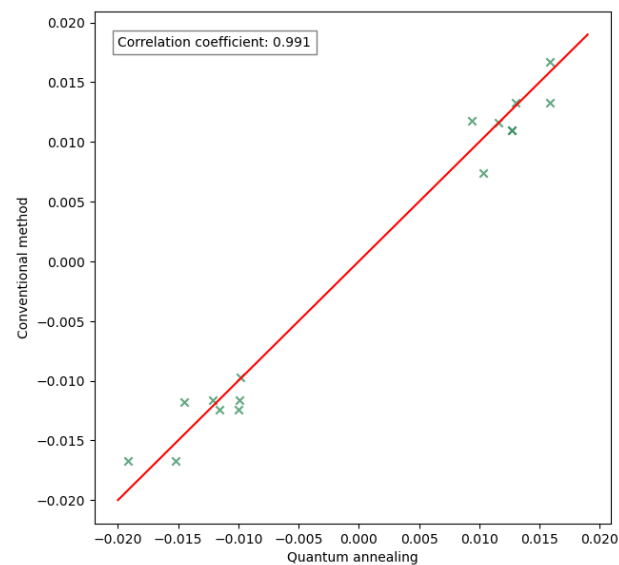
古典解析(OC法)による結果



アニーリングによる結果



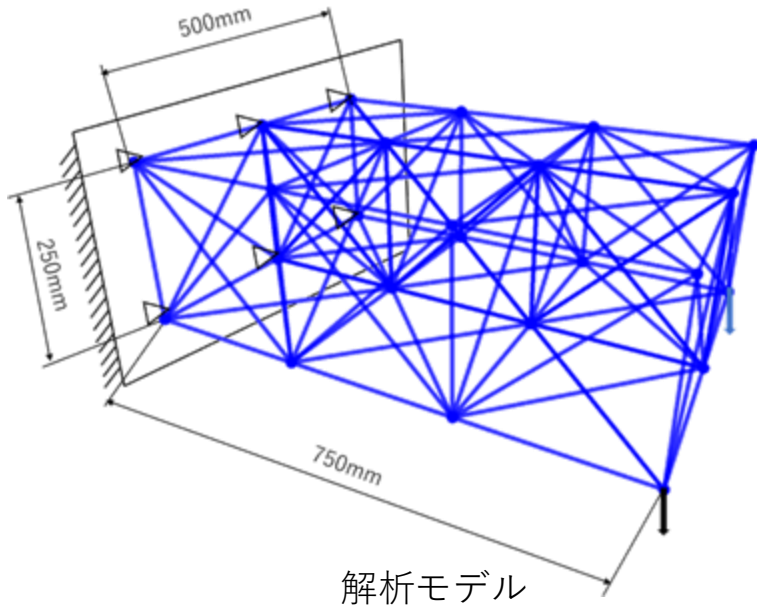
節点変位の比較



要素ひずみの比較

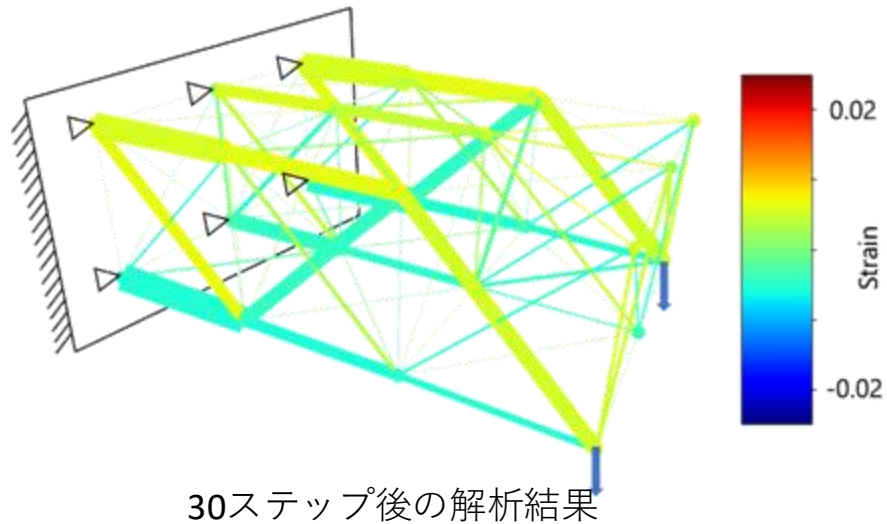


# 3次元トラスへの適用



解析条件

|          |                           |
|----------|---------------------------|
| 使用マシン    | D-Wave Leap Hybrid Solver |
| 部材本数     | 60本                       |
| トラス一辺の長さ | 250 mm                    |
| 初期断面積    | 50 mm <sup>2</sup>        |
| Young率   | 5 MPa                     |
| 荷重       | 150 N                     |



本研究では量子アニーリングを用いてトラス構造の変形解析およびトポロジー最適化解析を行う方法を提案した.

提案手法の検証の結果, 以下のことを示した.

- 節点変位を二値変数で表し, トラスの弾性エネルギーと位置エネルギーを目的関数とすることによって量子アニーリングでのトラスの変形解析が可能である.
- 断面積の増減値を二値変数で表すことで, 量子アニーリングを用いたトラス構造の最適化が可能である.