ハミルトニアンシミュレーションを用いた線形弾性体の動的構造解析

*我妻航也[1)], 遠藤克浩[2)], 寺田賢二郎[1)]
1.東北大学
2.産業技術総合研究所

所属研究室の取り組み

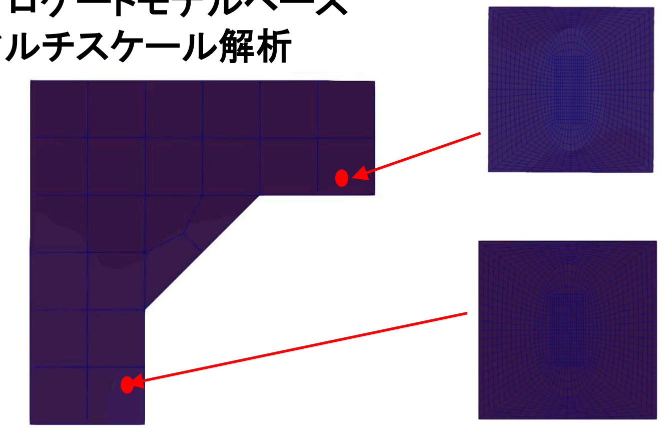
◆東北大学大学院工学研究科　土木工学専攻　先進計算力学研究室（寺田研究室）

研究課題

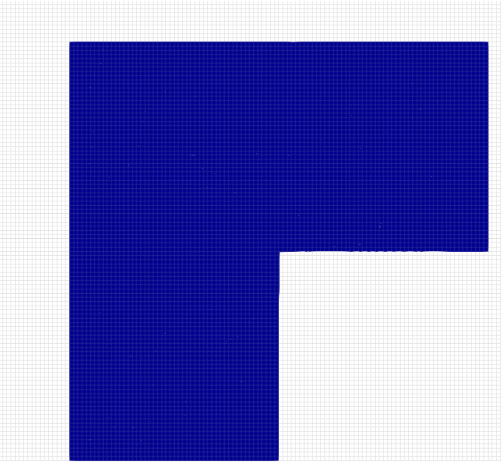
主に固体を対象とした数値シミュレーション技術の開発と現象の予測・評価

研究例　**～マルチスケール解析・破壊シミュレーション～**

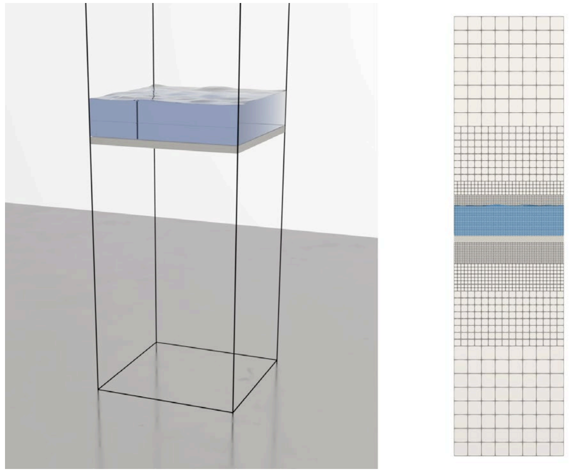
サロゲートモデルベース
マルチスケール解析



代理モデルによる複合材料のマルチスケール解析[1]



Material point method (MPM) による
離散き裂シミュレーション[2]



流体・構造破壊連成シミュレーション[3]

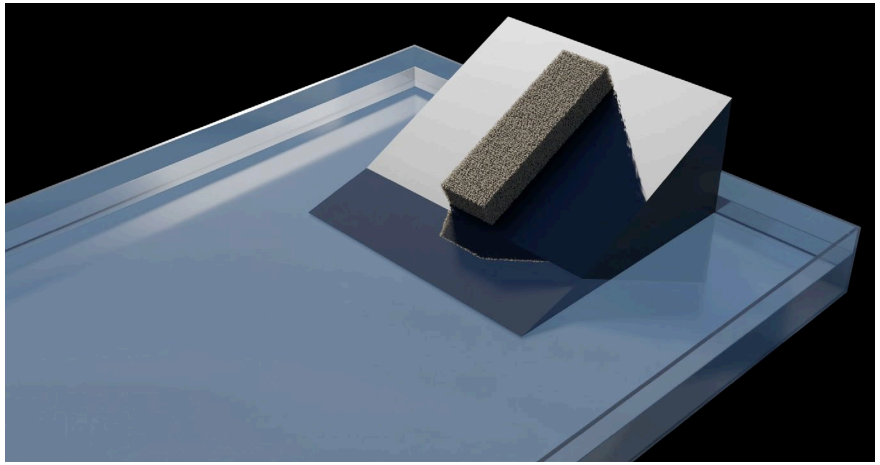
[1] Nakamura, A., Yamanaka, Y., Nomura, R., Moriguchi, S., and Kenjiro, T.: *Comput. Meth. Appl, Mech. Eng.*(2025)
[2] Sugai, R., Han, J., Moriguchi, S., and Kenjiro Terada: *Comput. Meth. Appl, Mech. Eng.*(2024)
[3] 平山大悟，下畑和希，野村怜佳，森口周二，青木尊之，寺田賢二郎：計算工学講演会論文集（2025）

所属研究室の取り組み

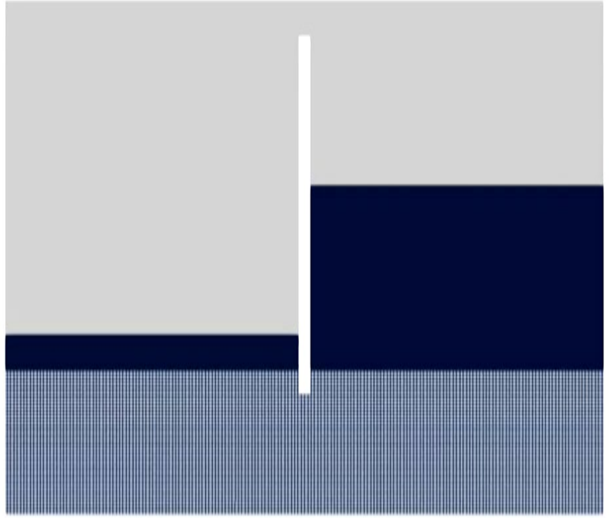
研究例　～マルチフィジックス・災害シミュレーション～
※土は連続体の固体として扱う

土砂流動シミュレーション[4]

300m×600m×標高（500m程度）　1m格子
→数千万自由度の計算×解析ステップ



土砂の水中流入シミュレーション[5]



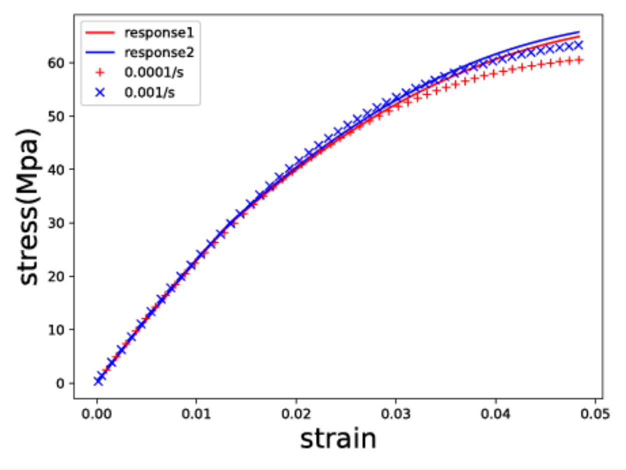
パイピングシミュレーション[6]

[4]木村凌一：東北大学大学院工学研究科土木工学専攻修士論文(2024)
[5] Pan, S., Nomura, R., Ling, G., Takase, S., Moriguchi, S., and Kenjiro Terada: *Int. J. Numer. Meth. Fluids.*(2023)
[6] Suzuki, Y., Sugai, R., Hidano, S., Nomura, R., Moriguchi, S., Kodaka, K., and Kenjiro, T.: *Under Review*

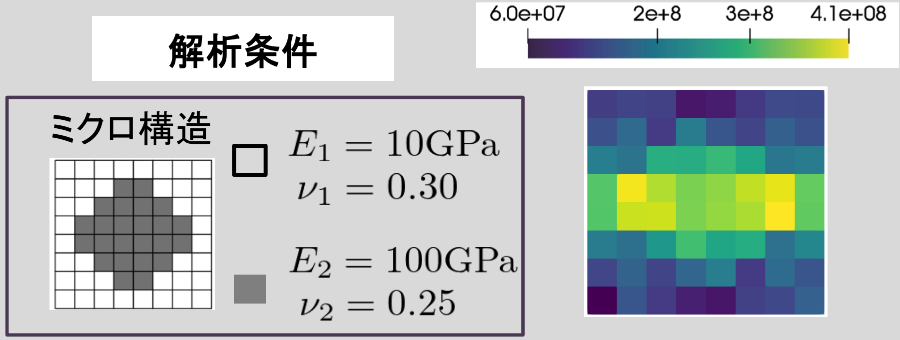
所属研究室の取り組み

研究例　～量子コンピューティング～

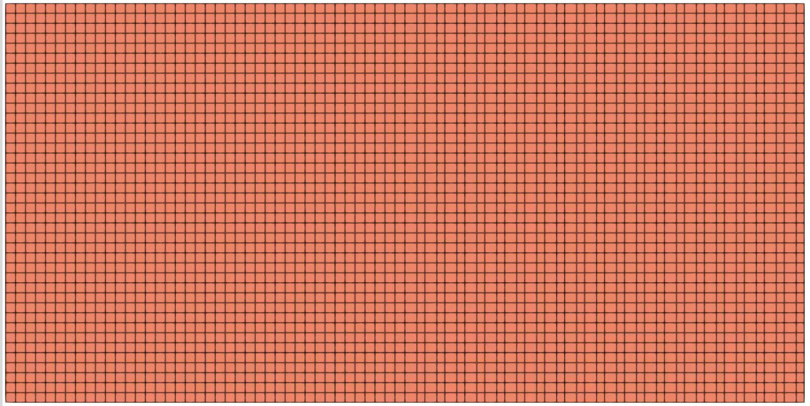
- ✓ 量子アニーリング（2023）量子ゲート（2024～現在）
- ✓ 絶賛勉強中（量子コンピューティング，量子力学については素人）



FMQAによる材料パラメータ同定[7]



QFT均質化を用いたミクロ構造解析[8]



QAによる連続体のトポロジー最適化[9]

色々と試したものの，，，

根本的にやりたいことは　$\boldsymbol{M}\ddot{\boldsymbol{d}} + \boldsymbol{C}\dot{\boldsymbol{d}} + \boldsymbol{F}_{\text{int}}(\boldsymbol{d}) = \boldsymbol{F}_{\text{ext}}$ または $\boldsymbol{F}_{int}(\boldsymbol{d}) = \boldsymbol{F}_{ext}$　を解くこと！！！

▶ 固体の運動をシミュレーションする量子アルゴリズムはあるか？　⇒ほぼない

[7] 我妻航也：東北大学工学部建築・社会環境工学科卒業論文(2024)
[8] 飯塚聡：東北大学工学部建築・社会環境工学科卒業論文(2025)
[9] Sukulthanasorn, N., Xiao, J., Wagatsuma, K., Nomura, R., Moriguchi, S., and Kenjiro Terada: *Comput. Meth. Appl, Mech. Eng.*(2025)

背景・目的

計算固体力学

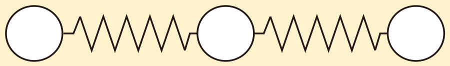
- 代表体積要素(RVE)問題[10]
FFT均質化⇒QFT均質化

- トポロジー最適化[11]
感度分析を量子アルゴリズムで代替

▶ 固体の運動（動的・静的問題）を
量子コンピュータで解く手法はない

量子コンピュータ

- バネマス系の振動シミュレーション[12]



⇒**時間発展問題を解く強力な量子アルゴリズム**の利用

質量行列$\boldsymbol{M}$が対角行列
行列の平方根の計算（後述）を無視

▶ 固体の連続体に適用できない

量子特異値変換（QSVT）を用いたハミルトニアンシミュレーション(HS)による
線形弾性体の単振動問題の時刻歴応答解析

【最終目的】

動的構造解析のための量子アルゴリズムの開発

[10] Burigede Liu and Michael Ortiz and Fehmi Cirak: *Comput. Meth. Appl, Mech. Eng.*(2024)
[11] Naruethep Sukulthanasorn and Kenjiro Terada: *Comput. Meth. Appl, Mech. Eng.*(2026)
[12] Babbush, Ryan and Berry, Dominic W. and Kothari, Robin and Somma, Rolando D. and Wiebe, Nathan : *Phys. Rev. X*(2023)

手法

TOHOKU UNIVERSITY

✓ ハミルトニアンシミュレーション(HS)とは

定義

（時間依存しない）シュレディンガー方程式に基づく物理系の時間発展を量子コンピュータでシミュレーションする手法

運動方程式

$$\boldsymbol{M}\ddot{\boldsymbol{d}} + \boldsymbol{K}\boldsymbol{d} = 0$$

変形

シュレディンガー方程式

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left|\psi(t)\right\rangle = -\mathrm{i}H(t)\left|\psi(t)\right\rangle$$

✓ 時間依存しない場合 $H(t) = H$

$$\left|\psi(t)\right\rangle = e^{-\mathrm{i}Ht}\left|\psi(0)\right\rangle$$

状態ベクトル

ユニタリ行列

⇒量子計算可能

ハミルトニアンHと状態$|\psi\rangle$に対して時刻tでの$e^{-\mathrm{i}Ht}|\psi\rangle$を計算する手法

実装方法

- ◆ トロッター分解
- ◆ QSVT

解析解を計算しているので
時間積分のような概念はない

手法

✓ 量子特異値変換(QSVT)[13]とは

行列Aと多項式$P(x)$に対して$A \to P(A)$を計算する量子計算フレームワーク

◆ 多項式または**多項式近似可能**な関数を計算可能（制約あり）

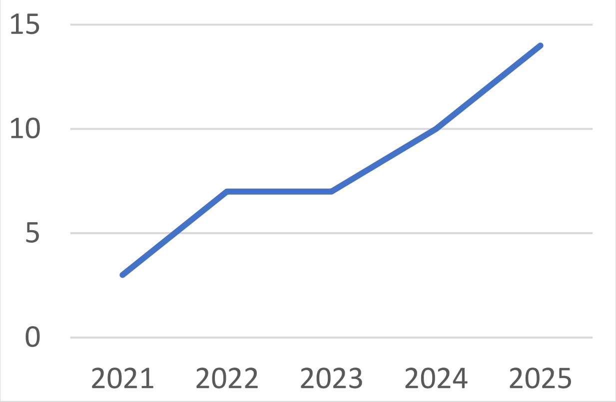
◆ 多項式次数や近似誤差の評価⇔アルゴリズムの計算量や誤差の評価

様々な文脈で開発された量子アルゴリズム

- 線形ソルバー（HHL）
- 素因数分解（Shorのアルゴリズム）
- ハミルトニアンシミュレーション

QSVTで記述可能

⇒量子アルゴリズムの大統一理論[14]



QSVTに関する論文数

✓ アルゴリズム設計の単純化（解きたい問題⇒多項式計算という落とし込み）

✓ 計算量や誤差評価の単純化

✓ 高い汎用性

⇒注目を集める手法

[13] Gilyén, András and Su, Yuan and Low, Guang Hao and Wiebe, Nathan : *STOC* (2019)
[14] Martyn, J. M., Rossi, Z, M., Tan, A. K. and Chuang, I. L. : *PRX Quantum* (2021)

式変形と計算プロセス

TOHOKU UNIVERSITY

単振動の式⇒シュレディンガー方程式への変形

※Aのブロックエンコーディングの存在を仮定

✓ 運動方程式の変換(量子的な要請)

$$\boldsymbol{M}\ddot{\boldsymbol{d}} + \boldsymbol{K}\boldsymbol{d} = 0$$

FEM離散化　Mは集中質量行列　Kは剛性行列

$$\boldsymbol{y} = \sqrt{\boldsymbol{M}}\boldsymbol{d} \qquad \boldsymbol{A} = \sqrt{\boldsymbol{M}^{-1}}\boldsymbol{K}\sqrt{\boldsymbol{M}^{-1}}$$

$$\ddot{\boldsymbol{y}} + \boldsymbol{A}\boldsymbol{y} = 0$$

Aは正定値対称行列

✓ 状態ベクトル$\boldsymbol{\psi}$とハミルトニアン$\boldsymbol{H}$の定義

①QSVT : Hの構築
$P(x) \approx \sqrt{x}$

$$\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{t},\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} \dot{\boldsymbol{y}} \\ \sqrt{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{y} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{H} = \mathrm{i}\begin{pmatrix} \boldsymbol{0} & -\sqrt{\boldsymbol{A}} \\ \sqrt{\boldsymbol{A}} & \boldsymbol{0} \end{pmatrix}$$

②QSVT : Hの時間発展の計算
$P(x) \approx e^{-\mathrm{i}xt}$
(③振幅増幅:割愛)

$$|\boldsymbol{\psi}(t)\rangle = e^{-\mathrm{i}\boldsymbol{H}t}\,|\boldsymbol{\psi}(0)\rangle$$

✓ シュレディンガー方程式との比較

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\psi}}{\mathrm{d}t} = \begin{pmatrix} \ddot{\boldsymbol{y}} \\ \sqrt{\boldsymbol{A}}\dot{\boldsymbol{y}} \end{pmatrix}, \quad -\mathrm{i}\boldsymbol{H}\boldsymbol{\psi} = \begin{pmatrix} -\boldsymbol{A}\boldsymbol{y} \\ \sqrt{\boldsymbol{A}}\dot{\boldsymbol{y}} \end{pmatrix}$$

成立！！！

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,|\boldsymbol{\psi}(t)\rangle = -\mathrm{i}\boldsymbol{H}\,|\boldsymbol{\psi}(t)\rangle$$

検証例題①

- ✓ Luangsirapornchaiら[15]による検証の再現
- ✓ Qiskit2.0[16] statevectorシミュレーション

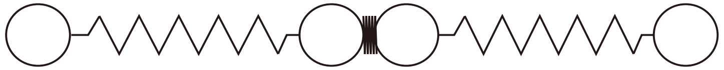
ケースA

$$k_{1,2} = k_{2,3} = k_{3,4} = 1$$

$$m_1 = m_2 = m_3 = m_4 = 1$$

$$\boldsymbol{d}(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0.3 \\ 0.7 \\ 1.0 \end{pmatrix}, \quad \dot{\boldsymbol{d}}(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

ケースB

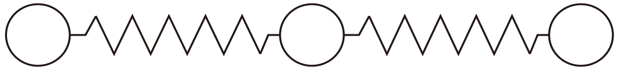


$$k_{1,2} = k_{2,3} = k_{3,4} = 1$$

$$m_1 = m_4 = 99999, \quad m_2 = m_3 = 1$$

$$\boldsymbol{d}(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \dot{\boldsymbol{d}}(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

ケースC



$$k_{1,2} = k_{2,3} = k_{3,4} = 1$$

$$m_1 = 1, m_2 = 100, m_3 = 2$$

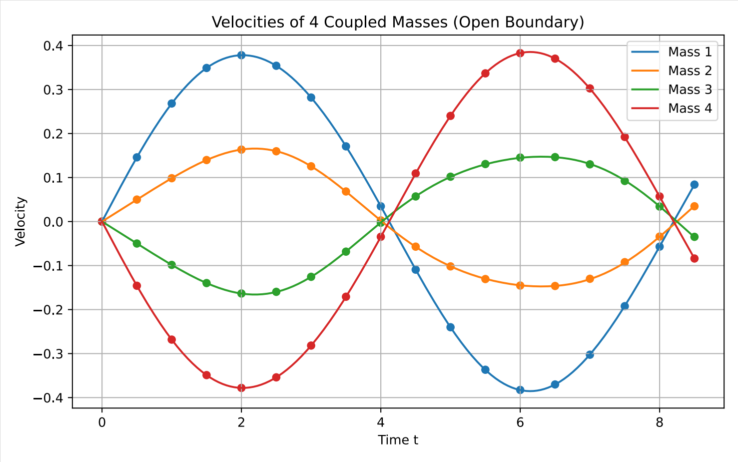
$$\boldsymbol{d}(0) = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \dot{\boldsymbol{d}}(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

[15] Luangsirapornchai, N., Sanglaor, P., Sornsaeng, A., Bressan, S., Chotibut, T., Suksen, K., & Chongstitvatana, P., IEEE Access,(2025)
[16]Javadi-Abhari, Ali and Treinish, Matthew and Krsulich, Kevin and Wood, Christopher J and Lishman, Jake and Gacon, Julien and Martiel, Simon and Nation, Paul D and Bishop, Lev S and Cross, Andrew W and others: *arXiv preprint arXiv:*2405.08810(2024)

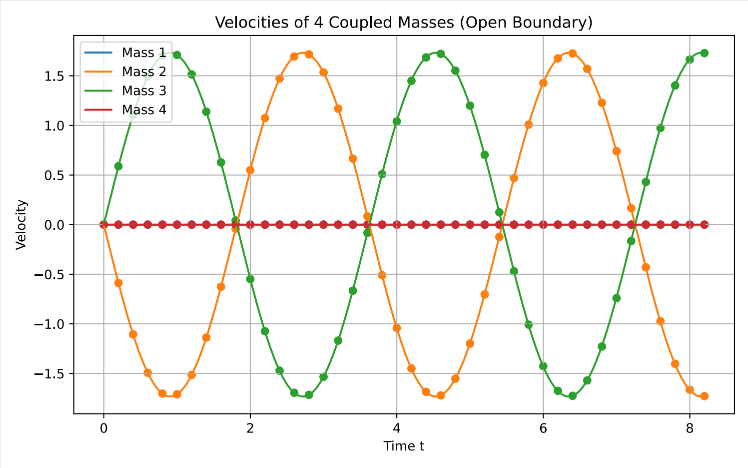
検証例題①

速度

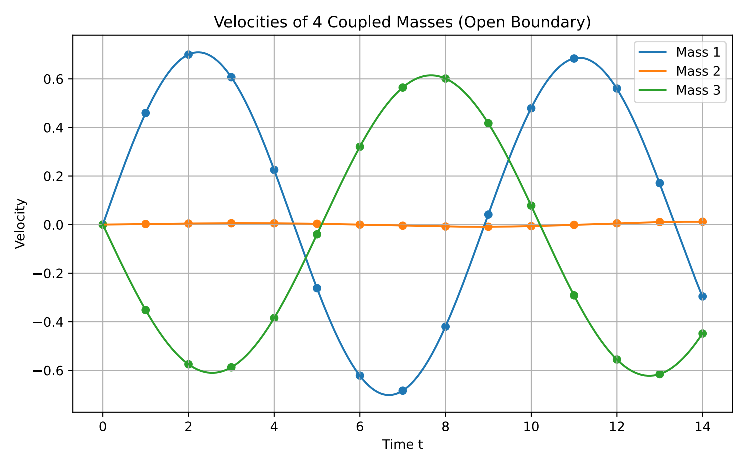
ケースA



ケースB



ケースC



時刻

	量子シミュレーション結果	古典解（ルンゲクッタ）
質点1	●	▬
質点2	●	▬
質点3	●	▬
質点4	●	▬

▶ 既往研究と同じ結果
手法の妥当性を確認

検証例題②③

✓問題設定

・モデル
平面応力における等方線形弾性体（2次元）

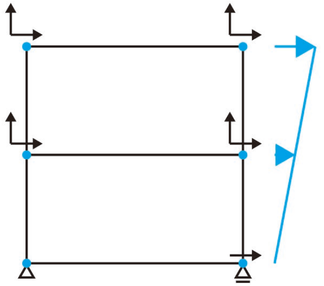
・サイズ
正方形構造：横1m×高さ1m　厚さ0.05m
長方形構造：横1m×高さ6m　厚さ0.05m

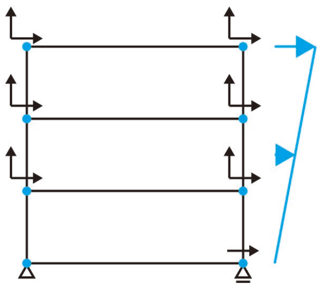
・初期条件
$v_0 = 0.1y$(m/s)で分布

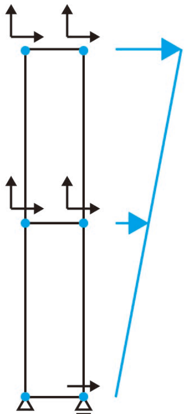
・材料パラメータ
ヤング率200kPa，ポアソン比0.3，密度1kg/m³

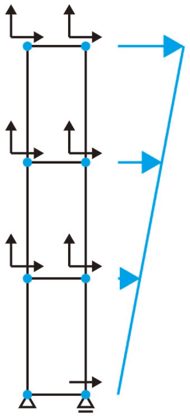
・計算機
Qiskit2.0statevectorシミュレーション
（古典コンピュータ）

初速度：$v_0 = 0.1y$ m/s


2 要素
（6 節点 9 自由度）


3 要素
（8 節点 13 自由度）


2 要素
（6 節点 9 自由度）

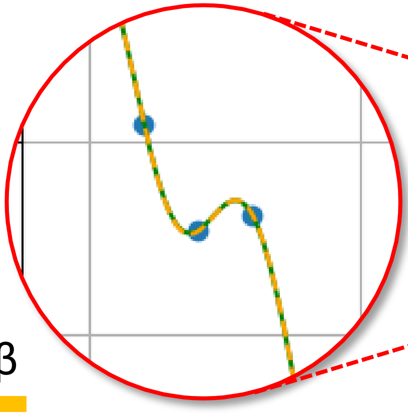

3 要素
（8 節点 13 自由度）

検証例題②（正方形構造）

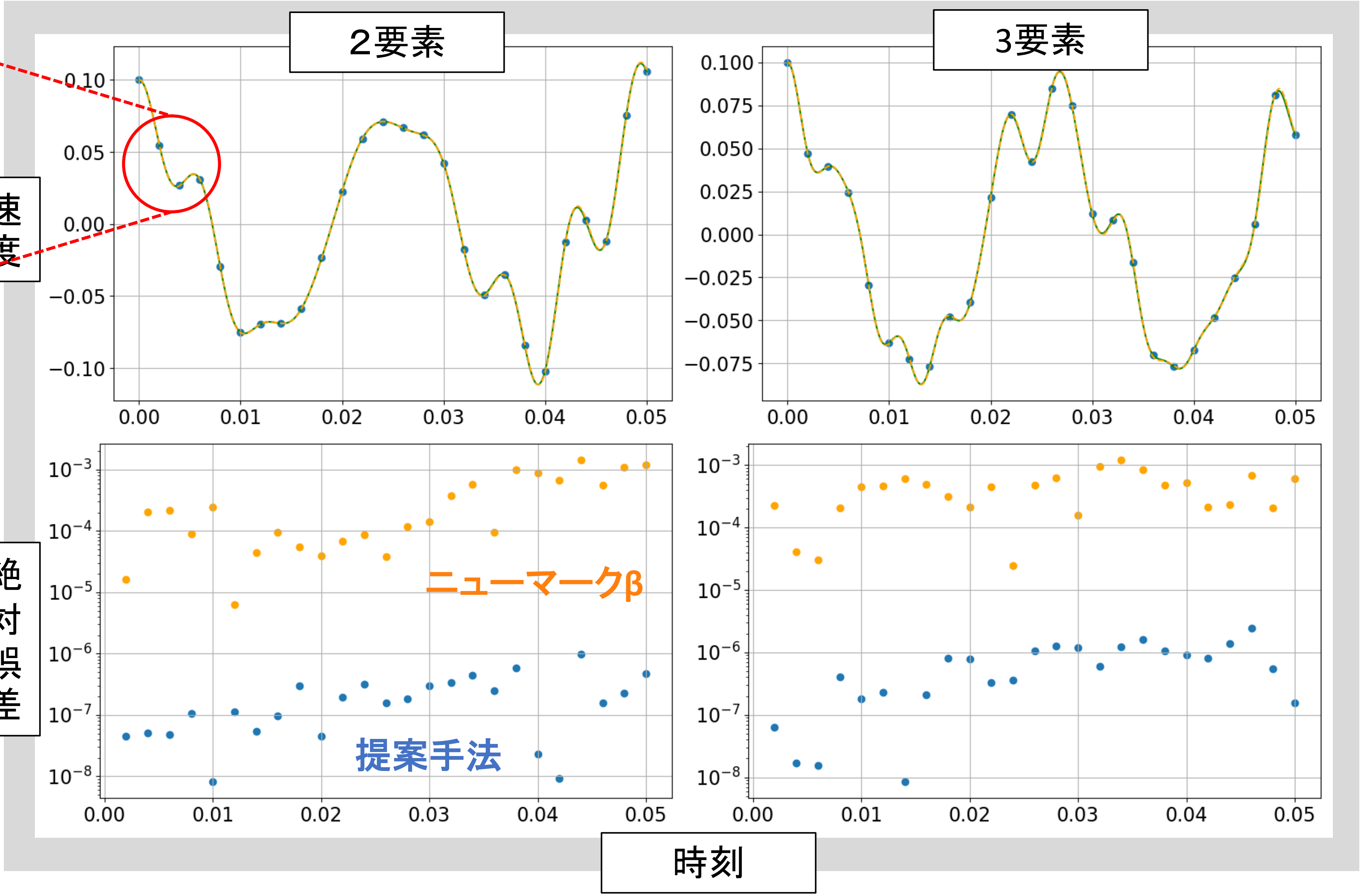
速度

厳密解

ニューマークβ



● 提案手法



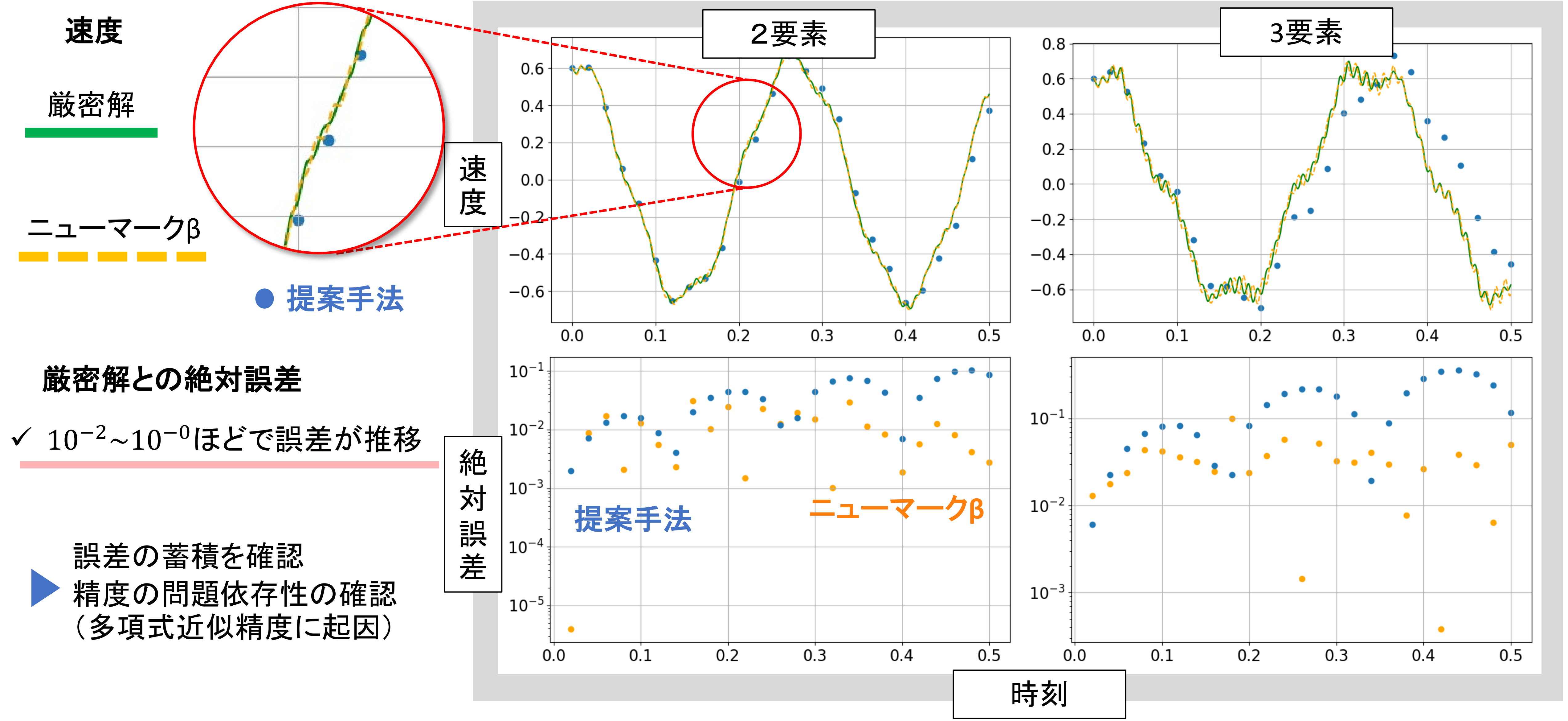
厳密解との絶対誤差

✓ 10^{-8}～10^{-5}ほどで誤差が推移

▶ 手法の妥当性を確認
線形弾性体の単振動
問題は**量子計算可能**

検証例題③（長方形構造）

TOHOKU UNIVERSITY



✓ 10^{-2}~10^{-0}ほどで誤差が推移

▶ 誤差の蓄積を確認
精度の問題依存性の確認
（多項式近似精度に起因）

クエリ計算量

TOHOKU UNIVERSITY

✓ ニューマークβ

— ステップ数

$$\frac{t}{\Delta t} = O\left(\frac{t}{\sqrt{\varepsilon_{\mathrm{NM}}}}\right)$$

— 線形ソルバー（CG法を仮定）

$$O(\sqrt{\kappa}\log(1/\varepsilon_{\mathrm{CG}}))$$

$$Q_{\mathrm{NM}} = O\left(\frac{t}{\sqrt{\varepsilon_{\mathrm{NM}}}} \cdot \sqrt{\kappa}\log(1/\varepsilon_{\mathrm{CG}})\right)$$

✓ 提案手法

— $\sqrt{x}$の計算量[17]

$$Q_{\mathrm{root}} = O\left(\frac{1}{\varepsilon_{\mathrm{root}}^2}\log(1/\varepsilon_{\mathrm{root}})\right)$$

— e^{-ixt}の計算量[14]

$$Q_{\mathrm{tri}} = O(\sqrt{\alpha}t + \log(1/\varepsilon_{\mathrm{tri}}))$$

— 振幅増幅の計算量[18]

$$Q_{\mathrm{OAA}} = 3$$

$$Q_{\mathrm{total}} = (Q_{\mathrm{root}} \cdot Q_{\mathrm{tri}} \cdot Q_{\mathrm{OAA}}) = O\left(\frac{1}{\varepsilon_{\mathrm{root}}^2}\log(1/\varepsilon_{\mathrm{root}})(\sqrt{\alpha}t + \log(1/\varepsilon_{\mathrm{tri}}))\right)$$

各クエリでのコスト（ブロックエンコーディングの実装コスト）がPolylog(N)になれば量子優位性（？）

[17] Metger, T., and Yuen, H.: *2023 IEEE 64th Annual Symposium on Foundations of Computer Science* (FOCS) (2023)
[18] Toyoizumi, K., Yamamoto, N., and Hoshino, K. : *Physical Review A*(2024)

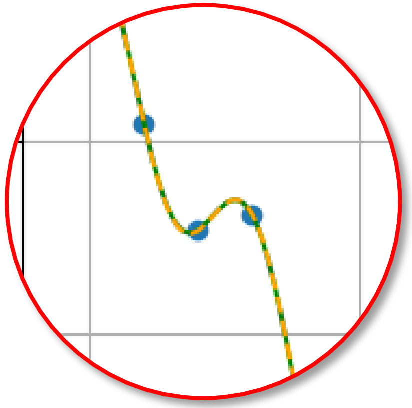
誤差に関する考察

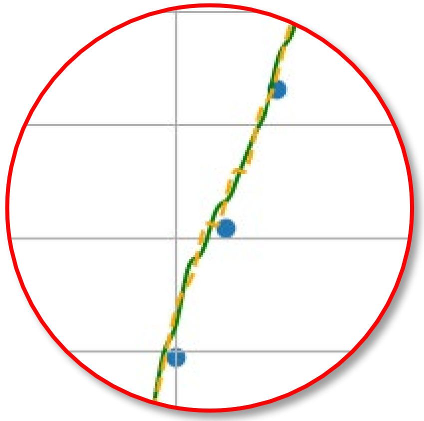
正方形構造と長方形構造で精度に差が出たのはなぜか？

▶ 平方根の多項式近似の誤差に条件数が効いているから

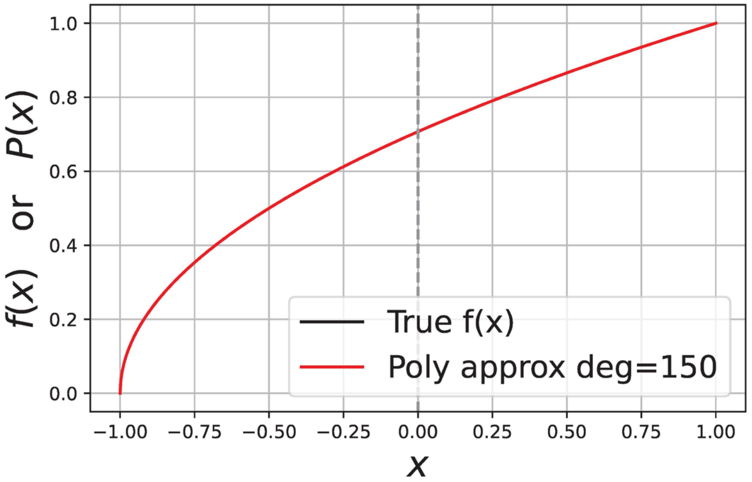
O記法では $Q_{\mathrm{root}} = O\left(\frac{1}{\varepsilon_{\mathrm{root}}^2}\log(1/\varepsilon_{\mathrm{root}})\right)$

と陽に条件数は出てこないが. . .

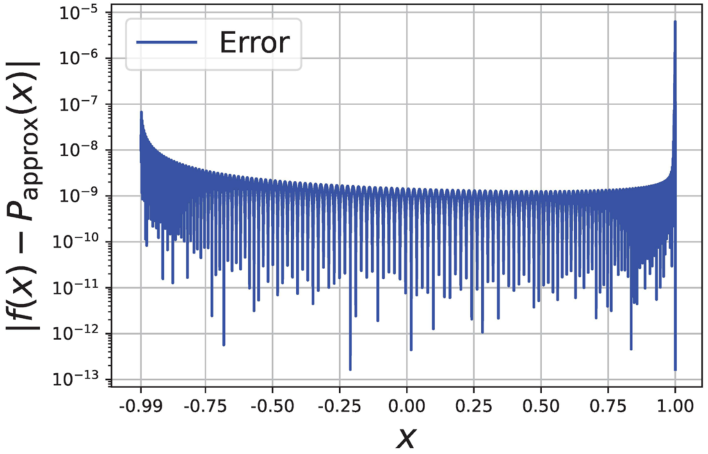




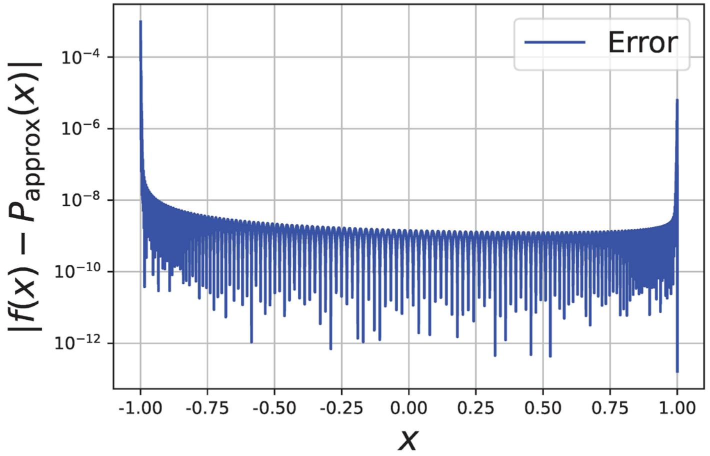
正方形（絶対誤差10^{-8}~10^{-5} ）　長方形（絶対誤差10^{-2}~10^{-0} ）



$f(x) = \sqrt{2x-1}$と近似多項式$P(x)$



プロット範囲$(-0.99,1)$



プロット範囲$(-0.999,1)$

近似範囲が左に行く（条件数が大きくなる）ほど誤差が増大！！

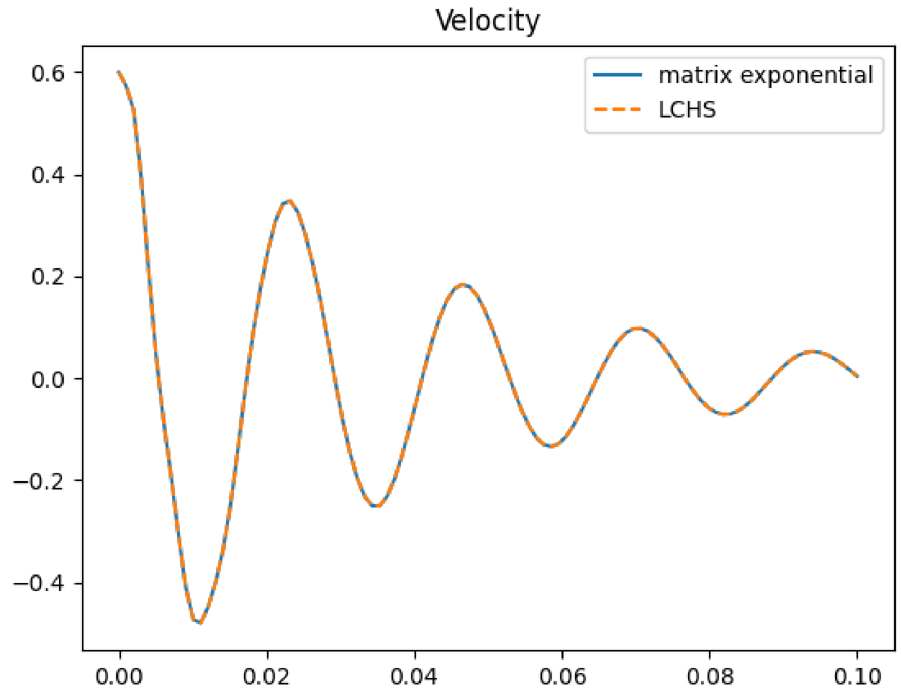
まとめ

目的

- 固体の動的解析のための量子アルゴリズムの開発
- 量子特異値変換(QSVT)を用いたハミルトニアンシミュレーション(HS)よる単振動問題の求解

結論

- 提案手法により単振動の解析を行うことが可能
- 計算固体力学の量子加速の議論のための第一歩
- 実用に向けて様々な問題



課題と展望

- 効率的なブロックエンコーディング手法の開発
- 非保存　非線形問題への拡張
- アルゴリズム自体のアプリケーションの検討

所感ーこれまでの研究を通じてー

TOHOKU UNIVERSITY

✓ 固体力学を対象として

• NR法，構成則計算はじめ，CAE技術の発展は（当然）古典コンピュータと密接
⇒据え置くパーツ，量子で作り替えるパーツ

• 読み出しができない，時刻歴もわからない　統計量は得意
⇒CAEに必要な情報は得られるか？現場で必要としていることは？（大学研究の弱い部分）

• 定数倍に苦しんでいる現実と指数的スケールを重んじる理論のギャップ
⇒真の優位性はでるか（超マルチスケール解析　超大規模災害解析のような新規課題？）

• 使ってみた論文の蔓延　新規参入の困難
⇒何がしたいか（すぐに結果がほしい，FTQCを見据えてじっくりやりたい，できるかできないか知りたい）

✓ 上記は量子技術に詳しくなくても考えられること　CAE側の長年の経験や感覚，要求をしっかり提示する
✓ “量子でできること”にすり寄りすぎない　できないことを明らかにするのも一つの目的