計算工学講演会論文集 Vol. 29(2024 年 6 月) 計算工学会

量子コンピューティングによる境界要素法の検討

A Study on Boundary Element Method Using Quantum Computing

斎藤 隆泰 [1)]
Takahiro SAITOH

[1)]群馬大学 大学院理工学府 准教授（〒 376-8515 群馬県桐生市天神町 1-5-1, E-mail:t-saitoh@gunma-u.ac.jp）

In recent years, the global race to develop quantum computers has intensified. However, the development of computational mechanics methods using quantum computers has hardly progressed. In this study, the boundary element method (BEM) using quantum computing is investigated for 2-D Laplace equation. The resulting matrix obtained from the boundary integral equation is solved by using the HHL algorithm.

Key Words : *Quantum computing, boundary element method, 2-D Laplace equation*

1. はじめに

近年，量子コンピューターの開発競争が世界的に激化している．量子コンピューターは，様々な分野での活用が期待 [1] されているが，計算力学分野への活用もその一つである．しかしながら，量子コンピューターを用いた計算力学手法の開発については，殆ど進んでいないのが現状である．計算力学分野における代表的な数値解析手法として広く利用されている有限要素法や境界要素法といった数値解析手法に量子コンピューターを活用できれば，これまで解くことのできなかった問題を解析できる可能性がある．そこで，本研究では量子コンピューティング（ゲート式）を用いた境界要素法について検討する．以下では，基本的な境界要素法を例に，量子コンピューティングを適用する方法について考察した結果の一部を簡単に紹介する．また，実際に，量子シミュレーターを用いて計算した結果の一例を示し，今後の展望等について述べる．

2. 問題設定と基礎式

以下では，量子コンピューティングにおける境界要素法の最初の研究であることを考え，境界要素法で最も簡単な 2 次元ラプラス方程式に支配される場を考える．位置 $\boldsymbol{x}$ におけるポテンシャル u は次の方程式を満足する．

$$\nabla^2 u(\boldsymbol{x}) = 0 \tag{1}$$

また，ラプラス方程式 (1) に対する境界積分方程式は，次のように与えられる．

$$C(\boldsymbol{x})u(\boldsymbol{x}) = \int_S G(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})q(\boldsymbol{y})dS_y - \int_S H(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})u(\boldsymbol{y})dS_y \tag{2}$$

ここで，$C(\boldsymbol{x})$ は位置 $\boldsymbol{x}$ に依存する自由項，$q = \partial u/\partial n$ である．また $\partial/\partial n$ は境界 S における外向き法線方向微分を表す．一方，$G(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$ および $H(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$ は，2 次元ラプラス方程式における基本解および対応する二重層核であり，それぞれ次式で与えられる．

$$G(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = \frac{1}{2\pi}\log\frac{1}{r},\ H(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = \frac{\partial G(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})}{\partial n} \tag{3}$$

ここで, r は $r = |\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|$ である．詳細は省略するが，境界積分方程式 (2) を，式 (3) と共に用いて空間に関する離散化を行うことで，境界 S 上や領域内のポテンシャル u を計算することができる．最終的に，空間に関する離散化を行い，境界条件に従って，式を整理すると，境界積分方程式 (2) は，次のような代数方程式に帰着される．

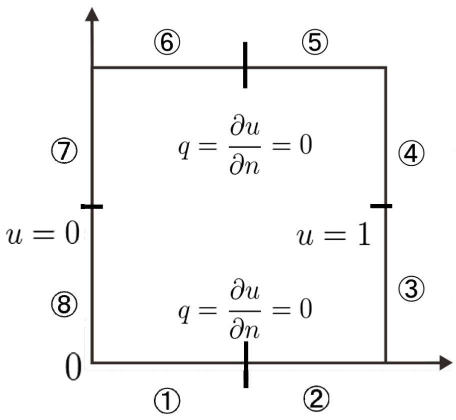
$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{4}$$

ここで，A は一般には非対称で密な係数行列，$\boldsymbol{b}$ は境界既知量から計算されるベクトルである．式 (4) を解くことで，境界未知量から成るベクトル $\boldsymbol{x}$ を求めることができる．

3. 量子コンピューティングと HHL アルゴリズム

一般的に，現状では，式 (4) に含まれる係数行列 A の成分計算を量子コンピューターで効率的に解くことは難しい．一方，係数行列 A が大規模なサイズの場合，式 (4) を古典コンピューターで直接解くことは，場合によっては困難である．そこで，ここでは代数方程式 (4) を量子コンピューティングで解くことを考える．

さて，量子コンピューターは，古典コンピューターと全く異なる原理で動作する．そのため，一般的に古典コンピューターにおける境界要素法で用いられるクラウト法といった直接法や GMRES 等の反復解法を使うことはできない．そのため，最終方程式 (4) を解くには，量子コンピューター専用の解法を用いる必要がある．式 (4) のような代数方程式を量子コンピューティングで解く方法は，発展途上であるが，例えば Harrow, Hassidim, Lloyd により，彼らの頭文字から名付けられた HHL アルゴリズムと呼ばれる方法が提案されている．HHL アルゴリズムは，量子位相推定アルゴリズム等を使って代数方程式を解くための量子コンピューティング専用のアルゴリズムである．ただし，HHL アルゴリズムでは係数行列 A がエルミート行列である必要があるため，境界積分方程式 (2) から得られた非対称な係数行列 A を持つ代数方程式 (4) に直接適用することはできない．そこで，本研究では，境界要素法で得られる



図–1 解析モデルと境界条件.

係数行列 A および右辺のベクトル $\boldsymbol{b}$ を次のように拡張する.

$$\tilde{A} := \begin{bmatrix} 0 & A \\ A^\dagger & 0 \end{bmatrix}, \quad \tilde{\boldsymbol{b}} := \begin{bmatrix} \boldsymbol{b} \\ \boldsymbol{0} \end{bmatrix} \tag{5}$$

ただし，$(\,)^\dagger$ は，エルミート共役を表す．この拡張により，代数方程式 (4) は，

$$\tilde{A}\tilde{\boldsymbol{x}} = \tilde{\boldsymbol{b}} \tag{6}$$

で書き直すことができる．さて，式 (6) における代数方程式の係数行列 $\tilde{A}$ は，エルミート行列となっていることがわかる．そのため，式 (2), (3) より計算された係数行列 A の成分を量子コンピューターに適切にエンコーディングし，$\tilde{A}$ を作ることができれば，HHL アルゴリズムを使って，新しい代数方程式 (6) を解くことができる．式 (6) の解 $\tilde{\boldsymbol{x}}$ は，元の代数方程式 (4) の解 $\tilde{\boldsymbol{x}}$ を含むので，結果的に式 (4) を解けたことになる．なお，HHL アルゴリズムの詳細は文献 [2] を参照されたい．

4. 数値解析例

数値解析例を示す．解析モデルは，図 1 に示すように，左下を原点とした長さ 1 の矩形領域であり，上下の境界で $q = \partial u/\partial n = 0$ の条件が規定され，左側境界では $u = 0$，右側境界では $u = 1$ の境界条件が規定された問題である．すなわち，定常熱伝導問題として考えると，上下面は断熱条件が課せられた問題となる．この解析では，与えられた境界条件や要素形状に応じて，式 (4) における係数行列 A や，対応する右辺ベクトル $\boldsymbol{b}$ を古典コンピューターで計算しておき，それらを量子コンピューターにエンコーディングできたとして，定常熱伝導問題を解析した．すなわち，古典・量子ハイブリッド計算を模擬したものである．

解析結果の一例を表 1 に示す．表 1 は，図 1 の問題に対して実際に式 (4) や式 (6) に相当する代数方程式を構成し，古典コンピューター (classical)，量子コンピューター (quantum) による HHL アルゴリズムを用いて得られた結果を示している．また，参考のため，両者による相対誤差も示してあり，上列から順番に要素①から要素⑧に対する結果を示してある．なお，各要素においてポテンシャル u またはそのフラックス q のいずれかが境界条件として与えられるため，境界要素法で求まる

classical	quantum	相対誤差
0.241415 (u)	0.243607	0.908161
0.758588(u)	0.762996	0.58113
1.05863(q)	1.05343	0.491142
1.05863(q)	1.053	0.491142
0.758588(u)	0.762996	0.58113
0.241415(u)	0.243607	0.908161
-1.05859(q)	-1.04956	0.853568
-1.05859(q)	-1.04956	0.853568

表–1 量子コンピューティングと古典コンピューティングによる精度比較.

方の対応する物理量を classical 列に代表して括弧書きで示してある．与えられた問題は，図 1 の $y = 0.5$ の上下で対称なため，得られた数値解は $y = 0.5$ の上下で対称となっていることがわかる．また，古典コンピューターとの相対誤差は, 最大で 1 パーセント程度となっていることがわかる．

以上より，正しく係数行列 A を量子コンピューター上でエンコーディングできれば，HHL アルゴリズムで数値解を求められることが示された．

5. おわりに

本研究では, 量子コンピューティングを用いた境界要素法について基礎的な検討を行った．解析の対象として，最も基礎的な 2 次元ラプラス方程式を扱った．代数方程式の解法には HHL アルゴリズムを用いた．量子シミュレーターの利用，かつ簡単な問題ではあるが，数値解を導出することができた．ただし量子シミュレーターを利用したため，どの程度高速化を達成できるかといった議論については触れていない．今後は，量子コンピューティングに適した境界要素法アルゴリズムについて検討すると共に，逆問題への展開を検討する予定である．また，量子コンピューターに適した数値解析手法の開発についても検討していきたい．なお，有限要素法を対象とした研究もわずかではあるが Mielke ら [3] により行われていることを付け加えておく．

謝辞

本研究は，独) 情報処理推進機構における令和 5 年度未踏ターゲット事業の支援の下で行われました．また，大阪大学の藤井啓祐教授，御手洗光祐准教授より多くの助言を頂いた．この場を借りて感謝申し上げます．

参考文献

[1] 藤井啓祐：驚異の量子コンピュータ:宇宙最強マシンへの挑戦，岩波科学ライブラリー，2019.

[2] Harrow, H., Hassidim, A. and and Lloyd, S.: Quantum algorithm for linear systems of equations, *Physical Review Letters*,103, 150502, 2009.

[3] Mielke, A. and Ricken, T.: Finite element analysis of a 2D cantilever on a noisy intermediate-scale quantum computer, Proceedings in Applied Mathematics & Mechanics, 2021. DOI:10.1002/pamm.202100246

