計算工学講演会論文集 Vol. 30 (2025 年 6 月)　日本計算工学会

構造解析における有限要素法の線形ソルバーとしての量子特異値変換の適用性の検討

Investigation of the applicability of quantum singular value transformation as a linear solver for the finite element method in structural analysis.

我妻航也 [1)]，野村怜佳 [2)]，森口周二 [2)]，寺田賢二郎 [1)]
Koya Wagatsuma, Reika Nomura, Shuji Moriguchi and Kenjiro Terada

[1)] 東北大学大学院工学研究科土木工学専攻（〒 980-8579 宮城県仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-06, E-mail: wagatsuma.koya.t7@dc.tohoku.ac.jp)
[2)] 東北大学災害科学国際研究所（〒 980-8572 宮城県仙台市青葉区荒巻字青葉 468-1)

In structural analysis, solving large-scale linear equations is computationally expensive. Quantum computers have the potential to solve this problem, and it is expected that Quantum Singular Value Transformation (QSVT) can efficiently calculate inverse matrices. On the other hand, QSVT has not been applied to practical applications with a large condition number. In this study, we examined whether QSVT can be applied to computational mechanics as a linear solver for the finite element method from a practical point of view. As a result, although some improvement in accuracy was observed when the eigenstate filtering function was used, it was confirmed that there are still various issues, including accuracy and computational complexity.

Key Words : *Structural analysis, Linear solver, Quantum Singular Value Transformation*

1. 序論

有限要素法（FEM ）をはじめとした構造解析手法において，対象構造の大規模化や計算上の細分化によって大規模行列の計算が必要となる．これは計算コスト上問題になり，特に線形方程式 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ の求解はアルゴリズム全体での大きなボトルネックとなる．一方で，スーパーコンピュータなどの古典コンピュータは，半導体の集積度の限界からこれ以上の革新的な性能の向上が期待できない．

これらの問題を解決する可能性があるのが，量子力学の特性を利用した量子コンピュータである．量子コンピュータは古典コンピュータに比べて指数的に多いメモリ数と一部のアルゴリズムの高速化を特徴としており，素因数分解や線形ソルバーをはじめとして様々なアルゴリズムが提案されている [1][2]．また，近年提案された量子特異値変換（QSVT）[3][4] は，上記のアルゴリズムを全て記述できる包括的なアルゴリズムであり，量子アルゴリズムの大統一理論と呼ばれ注目を集めている．QSVT による逆行列計算は，線形方程式に対する量子緩和（quantum relaxation for linear systems）の中でも条件数に対する計算量の依存性が小さく，最新の量子線形ソルバーであると言える．一方で，QSVT の逆行列計算が条件数の大きい実用的な問題に適用された例はほとんどない．

そこで本研究では，QSVT による逆行列計算を有限要素法の線形ソルバーとして適用する．これにより，構造解析を量子加速する可能性について原理的な側面と実際の適用を踏まえて議論を行うとともに，QSVT による逆行列計算の，条件数が大きい実用的な問題への適用性についても検討を行う．

2. 量子特異値変換（QSVT）による逆行列計算

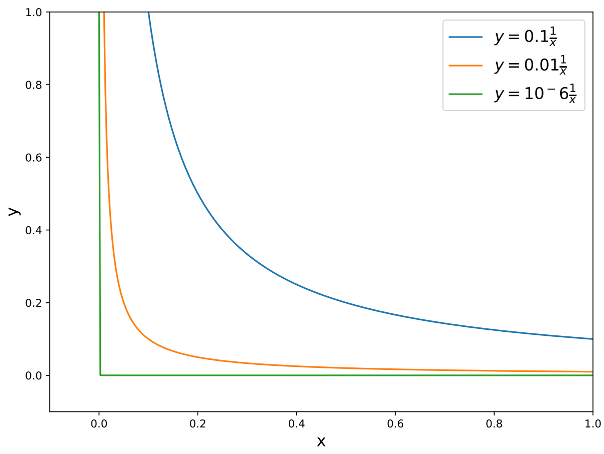
本項では，QSVT の概要と QSVT による逆行列計算について説明する．なお，本研究では正定値対称行列を取り扱うため，以降は量子特異値変換と量子固有値変換を区別しない．

(1) QSVT の概要

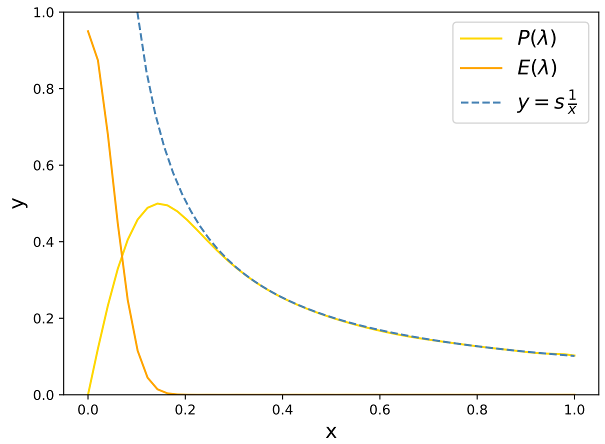
量子特異値変換（QSVT）は任意の行列 $\boldsymbol{A}$ の特異値 σ に多項式関数 $P(x)$ を効率的に作用させる量子アルゴリズムである．QSVT は主に 1. 量子信号処理（Quantum Signal Processing, QSP），2. 量子ビット化（Qubitization），3. ブロック埋め込み（Block encoding）の基本的な 3 つの理論から構成される．詳細な説明は省略するが，1 量子ビットに多項式関数を作用させる QSP の理論を，量子ビット化の理論を用いて 2 量子ビット以上にも適用できるよう拡張し，また扱いたい行列 $\boldsymbol{A}$ を量子回路にエンコードするためブロック埋め込みを行うことで，任意の行列 $\boldsymbol{A}$ の特異値 σ に多項式関数を作用せることが可能となる．ここで，$N \times N$ の正定値対称行列 $\boldsymbol{A}$ は以下のような固有モードの重ね合わせで表現できる．

$$\boldsymbol{A} = \lambda_1 |\lambda_1\rangle\langle\lambda_1| + \lambda_2 |\lambda_2\rangle\langle\lambda_2| + \cdots + \lambda_N |\lambda_N\rangle\langle\lambda_N| \tag{1}$$

ここに，λ_i は行列の i 番目の固有値であり，ブラケット記法で表された $|\lambda_i\rangle\langle\lambda_i|$ はそれぞれの固有ベクトルのテンソル積によって得られる行列である．$\lambda_i \to P(\lambda_i)$ という操作はすなわち $\boldsymbol{A} \to P(\boldsymbol{A})$ を意味し，QSVT は量子回路上で $\boldsymbol{A} \to P(\boldsymbol{A})$ を効率的に行うアルゴリズムであると言える．ここで，様々な目的に対応した多項式を用いることとで，今まで提案されてきた量子アルゴ



図–1 Shape of $y = \frac{1}{x}$ associated with scaling



図–2 Shape of Eigenstate filtering funcition($E(A)$) and optimized polynomial($P(A)$)

リズムは QSVT によって記述することができる．このことから，QSVT は量子アルゴリズムの大統一理論として呼ばれている．

(2) QSVT による逆行列計算

逆行列計算では，$y = \frac{1}{x}$ を多項式近似した関数である $P(x)$ を，行列 $\boldsymbol{A}$ の固有値に作用させることで $\boldsymbol{A}^{-1}$ と変換する．すなわち，以下のような式変換を行った後，$|\boldsymbol{b}\rangle$ に作用させることで効率的に線形方程式の解 $|x\rangle = A^{-1}|\boldsymbol{b}\rangle$ を得ることができる．

$$\boldsymbol{A}^{-1} = \lambda_1^{-1}|\lambda_1\rangle\langle\lambda_1| + \lambda_2^{-1}|\lambda_2\rangle\langle\lambda_2| + \cdots + \lambda_N^{-1}|\lambda_N\rangle\langle\lambda_N| \tag{2}$$

なお，Martyn ら [4] による QSVT の逆行列計算では，精度良く $y = \frac{1}{x}$ を多項式近似する次数 d は $d = O(\kappa\log(\kappa/\epsilon))$ であるとされている．ここに，κ は行列 $\boldsymbol{A}$ の条件数，ϵ は多項式近似の許容誤差である．

3. 実用上の課題

QSVT による逆行列計算を行う上で発生する課題を挙げ，実用的な観点から議論する．詳細な説明は省略するが，まず多項式関数 $P(\boldsymbol{A})$ は $|P(\boldsymbol{A})| \leq 1 \quad \forall x \in [-1, 1]$ である必要がある．ここで x 軸には，行列 $\boldsymbol{A}$ の固有値 λ が $[\lambda_{\min}, \lambda_{\max}] \rightarrow [\frac{1}{\kappa}, 1]$ のようにスケーリングされて，範囲内に分布していると考える．$y = \frac{1}{x}$ はこの要請を満たすように $y = s\frac{1}{x}$ のようにしてスケーリングされる．図 1 に $s = 0.1, 0.01, 10^{-6}$ の場合の $y = s\frac{1}{x}$ の概形を示す．条件数が大きくなるほど，$[\frac{1}{\kappa}, 1]$ の範囲が 0 付近まで広がるため，s の値を小さくしていく必要がある．$s = 10^{-6}$ ほどになると，ほぼ直角の関数になり，多項式近似に多くの次数を必要とすることが想像できる．

以上のことは，多項式の理論的な次数からも評価することができる． 仮に $\kappa = 10^6$ となった場合は，少なくとも 10^6 個以上の次数の多項式で近似する必要がある．さらに，実用的にはこの多項式を量子回路上で再現するために，回路上の位相因子 ϕ をパラメータとした古典手法による最適化する必要がある．このような数のパラメータを古典最適化手法によって最適化するのは困難であり，多くの計算コストを要する．合わせて， QSVT における最大回路深さは多項式近似の次数に等しく $d = O(\kappa\log(\kappa/\epsilon))$ であるとされており，条件数の大きい問題について，量子コンピュータの実機で QSVT による逆行列計算をすることは回路の深さの観点からも現状では困難であると言える．なお，QSVT の逆行列計算の回路深さの問題については，文献 [5] でも指摘されている．

一方で我々が対象とする行列の条件数は，対象構造の材料の複合性や形状の複雑性に起因し，簡単に $\kappa = 10^6$ 以上となる．以上を踏まえれば，単純に QSVT による逆行列計算を有限要素法などの線形ソルバーの代替として利用することは効率的であるとは言えない．

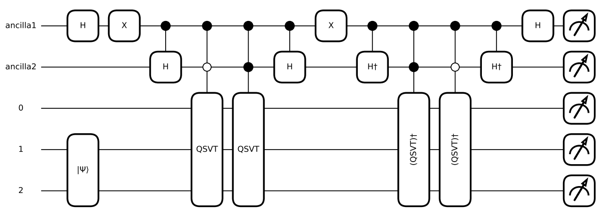
4. 固有状態フィルタリング関数の挿入

前項までの検討から，QSVT の理論通りに精度よく条件数の大きい行列の線形方程式を解くことは実用的でないことが分かった．そこで，より少ない次数，すなわち位相因子で低精度の多項式近似を行い，Newton-Raphson 法の収束性から 有限要素方程式 $F_{\mathrm{int}} = F_{\mathrm{ext}}$ の解を得ることを試みる．

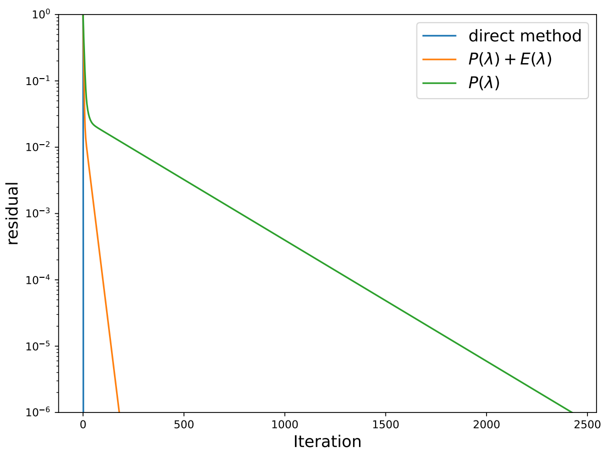
図 2 の $y = s\frac{1}{x}$ には，$s = 0.1014$ としたときの関数の概形を示している．一方で，$y = s\frac{1}{x}$ を $[\frac{1}{4}, 1]$ の範囲で再現する多項式 $P(\lambda)$ は，λ が小さい値について，$y = s\frac{1}{x}$ が表現できていない．逆行列 $\boldsymbol{A}^{-1}$ の

$$\boldsymbol{A}^{-1} = \frac{1}{\lambda_1}|\lambda_1\rangle\langle\lambda_1| + \frac{1}{\lambda_2}|\lambda_2\rangle\langle\lambda_2| + \cdots + \frac{1}{\lambda_N}|\lambda_N\rangle\langle\lambda_N| \tag{3}$$

という展開式を考えれば，λ が小さいほどその固有モードの $\boldsymbol{A}^{-1}$ への寄与度は大きく，$P(\lambda)$ は寄与度が大きい範囲ほど近似の精度が低くなってしまっている．そこで本研究では，一般に表現できない固有値の小さい範囲を固有状態フィルタリング関数（Eigenstate filtering function）[6]$E(\lambda)$ によって補完することで，小さい固有値についての $\frac{1}{\lambda}$ の値を大きくし，精度が改善することを期待する．それぞれの関数を作用させるユニタリ演算子 U_P と U_E は，図 3 に示すようにアダマールゲート H とコントロールビットによって $U_P + U_E$ とすることが可能である．



図–3 Quantum circuit of QSVT



図–4 Convergence of NR method

5. 検証結果

正方形の一軸引張を有限要素解析することで得られる式 $K\delta u = R$ を対象に検証を行った．非線形弾性体を仮定した 2×2 要素の二次元問題であり，行列 K の条件数は 85 程度であった．なお，量子アルゴリズムの検証には，Python で使用できる Penny lane[7] のライブラリを用いて，古典コンピュータによるシミュレーションを行った．図 4 に，古典手法である直接法（青），$P(\lambda)$ のみを用いた QSVT（青），$P(\lambda)+E(\lambda)$ を用いた QSVT（青）のそれぞれの収束性を示す．直接法では 2 回で残差が 10^{-6} 以下に収束しているのに対して，$P(\lambda)$ のみ QSVT では 2500 回以上の収束計算を行っており，精度が非常に低いことがわかる．一方で，$P(\lambda)+E(\lambda)$ では 200 回以内で収束しており，10 倍以上の収束性の改善はみられるが，依然として反復回数は非常に多く，これも実用的でないと言える．

6. 実用に向けての課題

本章では，以上の議論と加えて構造解析に量子アルゴリズムを適用する上で想定される実用的な観点での課題を述べる．

(1) 計算量について

Martyn による QSVT の逆行列計算では，$|x\rangle = A^{-1}|\boldsymbol{b}\rangle$ を求める計算量は $d = O(\kappa \log(\kappa/\epsilon))$ であった．これは，行列サイズ N に依存せず条件数 κ のみに依存するということであるが，本検証のようにサイズは小さいが条件数が大きくなるような問題において，条件数依存の計算量は適しておらず，実際に直接法の方が著しく少ない計算量であった．

また，実用する上では古典コンピュータと量子コンピュータでのデータのインプット，アウトプットによって $O(N)$ ほどの計算が必要となり，これを考慮すれば量子加速が相殺されてしまう．

(2) 行列ノルムについて

QSVT をはじめとした量子アルゴリズムでは，量子ゲートの作用がユニタリ行列で表されるという性質から，任意のエルミート行列を量子アルゴリズムに埋め込むためには，行列ノルムを 1 以下にするために，スペクトルノルムなどで正規化する必要がある．これは，対象の行列の最大固有値を計算前に把握している必要があると言うことであり，これにも大規模な計算が必要となる．

7. まとめ

本研究では，構造解析の量子加速の可能性の検討の一環として，QSVT の有限要素法の線形ソルバーとしての適用性を検討した．条件数の大きい問題での適用は極めて困難であることが理論的，実用的な観点から確かめられた．また現実的に可能なレベルでの多項式近似で収束計算を行うと多くの反復回数を要した．構造解析へ QSVT の逆行列計算を適用することは様々な課題が残されていると言える．

参考文献

[1] Shor, P.: Algorithms for quantum computation: discrete logarithms and factoring, *Proceedings 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science*, pp. 124–134, 1994.

[2] Harrow, A. W., Hassidim, A. and Lloyd, S.: Quantum algorithm for linear systems of equations, *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 103, p. 150502, Oct 2009.

[3] Gilyén, A., Su, Y., Low, G. H. and Wiebe, N.: Quantum singular value transformation and beyond: exponential improvements for quantum matrix arithmetics, *Proceedings of the 51st Annual ACM SIGACT Symposium on Theory of Computing*, STOC 2019, p. 193–204, New York, NY, USA, 2019, Association for Computing Machinery.

[4] Martyn, J. M., Rossi, Z. M., Tan, A. K. and Chuang, I. L.: Grand unification of quantum algorithms, *PRX Quantum*, Vol. 2, p. 040203, Dec 2021.

[5] 豊泉喜一郎, 山本直樹, 和田凱渡, 星野一生ほか: 量子特異値変換による量子共役勾配法, 研究報告量子ソフトウェア (QS), Vol. 2023, No. 8, pp. 1–10, 2023.

[6] Lin, L. and Tong, Y.: Optimal polynomial based quantum eigenstate filtering with application to solving quantum linear systems, *Quantum*, Vol. 4, p. 361, November 2020.

[7] PennyLane: qml.qsvt, 2025.