

# 量子コンピュータで加速する流体シミュレーション

## Fluid Dynamics Simulations Accelerated by Quantum Computers

松下雄一郎 黄欣馳 川田佳史 小杉太一 西紘史

Matsushita Yu-ichiro, Xinchu Huang, Yoshifumi Kawada, Taichi Kosugi, and Hirofumi Nishi

株式会社Quemix 代表取締役CEO (〒103-0027 東京都中央区日本橋2-11-2 太陽生命日本橋ビル16階, E-mail: ymatsushita@quemix.com)

Partial differential equations are recognized as mathematical models that describe various physical phenomena. Obtaining their numerical solutions accurately and efficiently is crucial for understanding and predicting these phenomena. In computational engineering, in particular, there is a strong demand for large-scale numerical computations to solve complex systems of equations with high precision. However, on classical computers, performing operations on extremely large matrices associated with large-scale numerical computations requires enormous memory and computation time. In this talk, we introduce prospects for accelerating large-scale numerical computations, such as fluid dynamics simulations, using quantum computing.

**Key Words :** Gate-based quantum computing, Computational Fluid Dynamics, Advection-diffusion equation, Probabilistic imaginary-time evolution

### 1. はじめに

偏微分方程式は様々な物理現象を記述する数値モデルとして認識されています。その数値解を正しく且つ素早く得ることは事象解明及び予測に役立ち、極めて重要な問題です。特に、計算工学においては、高精度で複雑な連立システムを解くため、大規模数値計算を行う必要があります。一方で、古典コンピュータでは、大規模数値計算に伴う極めて大きな行列の演算を行うには膨大なメモリと計算時間が必要です。本講演では、量子コンピュータの導入から、量子コンピュータを用いた流体シミュレーションなどの大規模数値計算を加速する展望を紹介いたします。

### 2. 量子コンピュータによる「指数的加速」

量子コンピュータには、量子ビットという概念があり、 $\log_2 N$ 個の量子ビットで $N$ 次元の広い状態空間を表現できます。この指数的に少ない量子ビットに対する基本ゲート演算が(ゲート式)量子コンピュータの操作単位となるため、最良で古典の行列演算を指数的に加速することが可能です。ただし、自由度の観点からみると、 $N$ 個のランダムな要素を持つ行列を表現するには、原則的に量子コンピュータであっても $N$ 以上の基本ゲート演算が必須です。

流体シミュレーションなどの具体的な問題において、行列は数値モデルによる特別な構造を持つため、効率良く計算できることがあります。以下、流体計算のパートと見なされる移流拡散方程式に対して、古典計算より行列サイズにおいて指数的加速の結果を示します。

### 3. 計算例および主たる手法

#### (1) 移流拡散反応方程式

移流拡散反応方程式は温度、物質濃度などの物理量の時間変化を記述する数値モデルで流体計算の一部と見なすことができます。数式上、以下のように、空間に関して2階微分(拡散項)、1階微分(移流項)と0階微分(反応項)を有し、それぞれ物理量の空間における広がり、移動、増減を表しております。

$$\partial_t u - \alpha \nabla^2 u + \vec{v} \cdot \nabla u + Vu = 0 \quad (1)$$

#### (2) 確率的虚時間発展(PITE)

時間発展方程式は、行列の虚時間発展(指数関数の行列冪演算)を用いて解くことが知られています。量子コンピュータでは、補助ビットを導入して虚時間発展演算のような非ユニタリ演算を実現することができます。本講演では、確率的虚時間発展法(PITE)の量子回路を用いることにより、指数的な加速を達成できることを紹介します。

### 4. 結果

#### (1) 行列サイズに対する指数的加速

共役勾配法などの典型的な古典アルゴリズムでは、計算時間は行列サイズ $N$ に比例します。一方で、前述のPITEを用いる量子アルゴリズムの計算時間は量子回路の深さに比例して $\log_2 N$ の多項式となります。量子加速のイメージは図-1に示されています。現在の量子コンピュータのゲート実行時間が長いいため、量子計算の前因子が

古典計算と比べて大変大きく、十分大きな行列に対して量子優位性が言えます。

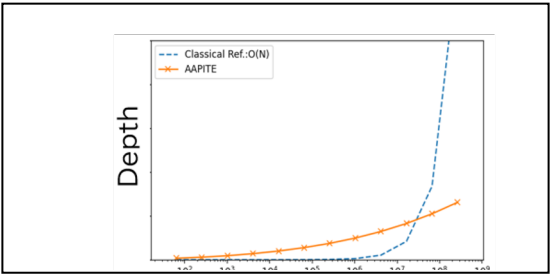


図-1 量子計算による加速のイメージ

(2) 数値計算例

以下は、移流拡散反応方程式に対して、Qiskitというゲート式量子シミュレーターを用いて量子エラーなしの数値シミュレーションを行う結果です。

空間2次元で、拡散と移流係数をそれぞれ $a = 0.5$ と $\vec{v} = (20,0)$ に設定しております。また、領域は辺長 $2\pi$ の正方形とし、領域中心に吸収する反応項を設けます。図-2は時刻ごとに数値解をプロットするもので、ただし、初期値は左下の点にピークを持つガウス関数を取っています。

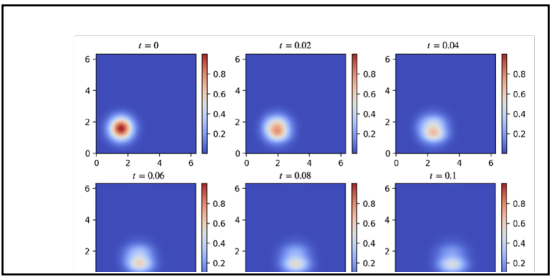


図-2 二次元吸収項ありのシミュレーション

図-2においては、横軸と縦軸は空間のXとY座標を表し、数値解をカラーマップでプロットしております。予想通りに、X方向における移流現象と領域中心部を通過する際の吸収現象が見られています。誤差プロットなどの詳細は、論文[1]に記載してあります。

5. 考察

(1) 古典アルゴリズムと量子アルゴリズムとの比較  
偏微分方程式を解く際に、汎用的な手法は、方程式を離散化して、その離散化した線型方程式を解くものです。代表的な手法として、古典線型方程式ソルバーの共役勾配法(CG法)[2]と量子線型方程式ソルバーのQLSA[3, 4]が挙げられます。実用上、数値計算の精度も重要な指標ではありますが、ここでは行列サイズに注目して手法ごとに計算時間のオーダーを表-1にまとめております。

表-1 古典と量子との計算時間の比較

	線型方程式	移流拡散方程式
CG法[2]	$O(\sqrt{\kappa}N)$	$O(N^{(d+1)/d})$
QLSA[3,4]	$O(\kappa \text{polylog}N)$	$O(N^{2/d} \text{polylog}N)$
PITE法[1]	/	$O(\text{polylog}N)$

ここで、 $d$ は空間次元数で、 $\kappa$ は行列条件数です。流体計算を含む偏微分方程式を解く問題において、一般的に量子計算法(QLSA)は大きな次元数に対して多項式的加速を達成できます。ただし、適切な前処理ができる仮定の下で、最良でPITE法と同様に、指数的加速を達成することもあります。

(2) 連立微分方程式への展開

$M$ 個の微分方程式からなる連立方程式に対して、量子計算においては、新たに $\log_2 M$ 個の量子ビットを追加することで、原理上で計算が可能です。従って、量子計算は連立方程式の個数に対しても最良で指数的に加速できます。

また、効率良く量子状態を取得できれば、時間軸を十分に細かく刻んで、バーガース方程式を含む非線型微分方程式を取り扱うことが可能です[1]。

6. 結論

本講演では、流体計算の一種でもある移流拡散反応方程式を計算例として、大きな行列演算の部分における量子コンピュータでの加速を示しました。汎用的な手法である量子線型方程式ソルバー(QLSA)を使用すれば、古典のCG法より、多項式的な加速を成し遂げます。また、効率良い前処理が行える、或いはPITE法のような効率的な手法を使える良い問題設定において、量子コンピュータは最良で指数的な加速を達成できます。

一方で、流体計算や構造計算などのCAE解析からきた複雑な非線型方程式に対して、量子アルゴリズムのサブルーチンである行列のブロックエンコーディングの効率良い構成法と、量子アルゴリズムの共通な課題である量子状態の効率良い取得法と、この二点に関して更なる検討が必要です。

7. 謝辞

本研究は、日本学術振興会科学研究費助成事業(JSPS KAKENHI) 14K04553、20H00340、22H01517の助成を受けて実施されました。本研究の一部は、JST 課題番号JPMJPF2221「Sustainable Quantum AI (SQAI)イノベーション拠点」の支援を受けて実施されました。なお、本研究の一部については、東京大学物性研究所スーパーコンピュータを利用いたしました。

参考文献

- [1] Huang, X. et al.: A quantum algorithm for advection-diffusion equation by a probabilistic imaginary-time evolution operator, preprint, arXiv:2409.18559
- [2] Shewchuk, J.R.: An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain, Technical Report, Carnegie Mellon University, Schenley Park Pittsburgh, PA, United States, 1994.
- [3] Childs, A.M. et al.: Quantum algorithm for systems of linear equations with exponentially improved dependence on precision, *SIAM J. Comput.* 46(6), pp.1920-1950, 2017.
- [4] Costa, P.C.S et al.: Optimal scaling quantum linear-systems solver via discrete adiabatic theorem, *PRX Quantum* 3, 040303, 2022.