

2023 年度
創発的研究支援事業 年次報告書

研究担当者	村松真由
研究機関名	慶應義塾大学
所属部署名	理工学部
役職名	准教授
研究課題名	量子アニーリングによる材料トポロジー設計システムの構築
研究実施期間	2023 年 4 月 1 日～2024 年 3 月 31 日

研究成果の概要

材料がどのような微細構造をとるのか解析することは重要である。2 成分材料系の 2 相構造を解析する方法の一つに Phase-field 解析がある。これは Phase-field 変数という秩序変数を導入し、その時間発展方程式を解くことで境界の移動を表現することができる。Phase-field 解析は、境界を追従することなく滑らかに表現できるため広く用いられている。しかしながら平衡状態を得るまでに長い計算時間がかかるという欠点がある。

一方、量子アニーリングは統計的で量子的な揺らぎを利用する方法で、最適化問題をエネルギー関数で表されるイジングモデルや Quadratic unconstrained binary optimization (QUBO) と呼ばれる形式に変換し、エネルギーが最小になる組合せの近似解を導出する。量子アニーリングによって離散最適化問題を解くとシミュレーテッドアニーリングと比較して最大 億倍高速に計算ができたという研究結果もある。

本年は本研究を構造解析に拡張した。トラス構造の変形解析プログラムを改造し、連続体要素の変形解析実施可能なプログラムを作成した。連続体要素は 2 次元 3 節点三角形要素および 2 次元 4 節点四辺形要素とした。構造解析における剛性行列を QUBO (Quadratic Unconstrained Binary Optimization, 2 次制約無し 2 値最適化問題) の形式にした場合と、構造解析の弾性エネルギーを QUBO にした場合とで得られる性能の違いを検討した。弾性エネルギーの QUBO 形式を利用した解析の場合は剛性行列の QUBO 形式を使用した場合より精度の良い解が得られることがわかった。また、ビット数が変化した場合の計算の収束状態も調べた。2 次元 3 節点三角形要素および 2 次元 4 節点四辺形要素ともに、実数表現に用いる bit 数を増やした際に収束傾向を示す bit 数を明らかにした。さらに、連続体要素を用いた構造のトポロジー最適化も可能なコードを作成した。片持ちはりの曲げ解析を実施した結果、得られるトポロジーは上側が引張り、下側が圧縮を示し、荷重負荷先端が細くなる構造になった。古典解析が示すものと同様の結果であった。数値解析デバイスには D-wave 量子ハイブリッドソルバーを利用した。古典解析の結果と比較すると、量子ハイブリッドソルバーを利用したトポロジー最適化の結果は荷重負荷先端の変位量が小さくなり、より剛性が高いトポロジーが得られていることが示唆された。