ながれ44（2025）210－215

〔特集〕次世代ながれ解析

流体理工学分野における量子アニーリングの応用可能性について

九州大学　大学院工学研究院　久　谷　雄　一*

Potential of Quantum Annealing in Fluid Science and Engineering

*Yuichi Kuya, Department of Aeronautics and Astronautics, Kyushu University

*E-mail: kuya@aero.kyushu-u.ac.jp

1　はじめに

量子コンピューティングの分野と，我々が日頃取り扱っている流体理工学分野の専門性は大きく異なる．そこで本稿では両分野の間にあるギャップを少しでも埋められるよう，流体理工学分野における量子アニーリングの応用可能性についてお話ししたい．なお，筆者が量子コンピューティングに関する研究を始めてからまだ数年しか経っていないことから，まだまだ浅学で不十分なところがある点はお許しいただきたい．

一般に「量子コンピュータ」と言われる場合には，量子ゲート (論理ゲートの量子版) を組み合わせることで汎用計算を可能とするゲート型量子コンピュータのことを指す．一方で，本稿が取り扱う量子アニーリングは最適化問題を解くための解法 [1] であり，量子アニーリングマシン [2] はそのための装置である (本稿では量子アニーリングマシンという呼称を用いているが，他にも量子アニーラや量子アニーリングコンピュータと呼ばれることもあり，D-Wave のウェブサイトでは「annealing quantum computer」という呼び方が散見される)．量子アニーリングマシンは最適化問題を超伝導量子回路上で物理現象として再現しているアナログ計算機であり，その動作原理は磁性体の振る舞いを記述するために考案された Ising モデルと呼ばれる統計力学モデルに基づいている．その動作原理に従い，量子アニーリングでは以下のように定式化されたコスト関数を最小化する $\sigma_i \in \{-1, +1\}$ もしくは $q_i \in \{0, 1\}$ の組み合わせを最適解として得る．

$$\text{Ising}: \ E(\{\sigma_i\}) = \sum_{i=1}^{N} h_i \sigma_i + \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=i+1}^{N} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \tag{1}$$

$$\text{QUBO}: \ E(\{q_i\}) = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} Q_{ij} q_i q_j \tag{2}$$

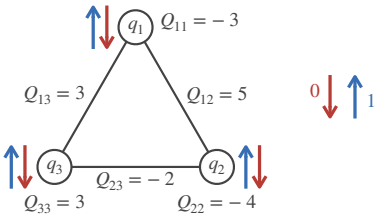

図 1: 組合せ最適化問題例.

ここで，h_i は σ_i に働く局所バイアス，J_{ij} は σ_i と σ_j の相互作用の強さである．一方，Q_{ij} は QUBO (quadratic unconstrained binary optimization) 行列と呼ばれ，この行列の対角成分は変数 q_i の単独の影響を，非対角成分は q_i と q_j の相互作用の強さを示している．また，一般に Ising モデルと QUBO モデルは以下の変換式を用いると等価になる．

$$q_i = \frac{\sigma_i + 1}{2} \tag{3}$$

解きたい最適化問題を式 (1) や (2) のように記述することが出来れば，量子アニーリングにより最適化を実施することが出来る．ここで例として図 1 のような簡単な組合せ最適化問題を考える．このとき QUBO モデルは

$$\begin{aligned} E(\{q_i\}) = &-3q_1q_1 - 4q_2q_2 + 3q_3q_3 \\ &+ 5q_1q_2 - 2q_2q_3 + 3q_1q_3 \end{aligned} \tag{4}$$

と記述され，この QUBO モデルを最小にする最適な q_i の組み合わせは $q_1 = 0, q_2 = 1, q_3 = 0$ となるはずである．このような二値数に対する組合せ最適化問題における組み合わせ総数は，要素の数 (=頂点の数) を N としたときに 2^N で与えられる．今回の例のように q_i の組み合わせが 2^3 通りの組み合わせしかない場合には，例えば表計算ソフトを使用して総当たりでコスト関数の値を調べられるが，N が大きくなるとその数は指数関数的に増加する．そのため，量子アニーリングなどの解

© 2025 日本流体力学会

法に期待が集まっている．

(補足) 一般に，式 (1) や (2) の形で記述された組合せ最適化問題を解く装置のことを総称してイジングマシンと呼ぶ．つまり，量子アニーリングマシンは量子力学の性質を使ったイジングマシンである．また，量子アニーリングに着想を得たコンピューティング技術により，組合せ最適化問題を高速に解くための専用の計算機 (シミュレーテッドアニーリングマシン) [3–5] なども開発されている．

2　量子アニーリングの流体理工学分野への応用

一般に量子アニーリングのアプリケーションとしては以下のようなものが挙げられる．

- 組合せ最適化
- ブラックボックス最適化
- 量子ボルツマンマシン

以下では，先行研究や応用例を混じえながらそれぞれのアプリケーションが流体理工学分野においてどのように応用可能か議論，ご紹介をしたい．

2.1　組合せ最適化: 流体計算への応用

上述のように量子アニーリングでは，式 (1) や (2) の形で定式化されたコスト関数を最小化する σ_i や q_i の組み合わせを最適解として得ることが出来る．まだ数は多くはないが，先行研究 [6–9] により流体計算問題を組合せ最適化問題として定式化することで，量子アニーリングによる流体計算を可能にするアルゴリズムがいくつか提案されている．繰り返しになるが量子アニーリングでは

$$\sigma_i^{\mathrm{opt}} = \underset{\sigma_i}{\mathrm{argmin}} \left(E(\{\sigma_i\}) \right) \tag{5}$$

$$q_i^{\mathrm{opt}} = \underset{q_i}{\mathrm{argmin}} \left(E(\{q_i\}) \right) \tag{6}$$

が解として得られる．ここで，支配方程式を離散化することによって得られた以下のような線型システムを考える．

$$\sum_{j=1}^{n} A_{ij} u_j = b_i \quad (i = 1, 2, \ldots, n) \tag{7}$$

ここで A_{ij} は係数行列，u_j は流体変数ベクトル，b_i は定数ベクトルである．このとき，コスト関数を以下のように定義すると

$$E(u_j) = \left(\sum_{j=1}^{n} A_{ij} u_j - b_i \right)^2 \tag{8}$$

式 (7) を満たす解は，このコスト関数を 0 にする，つまり最小化する u_j であるため，その解は以下のように与えられる．

$$u_j^{\mathrm{opt}} = \underset{u_j}{\mathrm{argmin}} \left(E(u_j) \right) \tag{9}$$

これは式 (5) や (6) と同様の形をしている．しかし，u_j は連続数であるため，二値数を扱う量子アニーリングではこのまま式 (8) を解くことは出来ない．そこで連続数 u に対して，例えば以下のような式 [10] を用いてバイナリー変換を行う．

$$u = \sum_{k=1}^{K} \frac{2^{k_0}}{2^k} q_k, \quad q_k \in \{0, 1\} \tag{10}$$

ここで，K と k_0 はそれぞれ二進数の全ビット数と整数部のビット数を表しており，k_0 と K によって表される値の範囲は 0 から $2^{k_0} - 2^{k_0}/2^K$ までである．そのため，このバイナリー変換の解像度は $2^{k_0}/2^K$ である．このバイナリー変換により，式 (8) は以下のように変換される．

$$E(\{q_j\}) = \left(\sum_{j=1}^{M} \tilde{A}_{ij} q_j - b_i \right)^2 \tag{11}$$

ここで，$M = n \times K$ であり，$\tilde{A}$ はもとの係数行列 A と式 (10) の係数 $\sum(2^{k_0}/2^k)$ が合わさったものである．式 (11) の右辺を展開し，最適化には影響しない定数項 b_i^2 を無視すると

$$\begin{aligned} E(\{q_j\}) &= \sum_{j=1}^{M} \sum_{k=1}^{M} \tilde{A}_{ij} \tilde{A}_{ik} q_j q_k - 2 b_i \sum_{j=1}^{M} \tilde{A}_{ij} q_j \\ &= \sum_{j=1}^{M} \sum_{k=1}^{M} \tilde{A}_{ij} \tilde{A}_{ik} q_j q_k - \sum_{j=1}^{M} (2 b_i \tilde{A}_{ij}) q_j \\ &= \sum_{j=1}^{M} \sum_{k=1}^{M} Q_{jk} q_j q_k \end{aligned} \tag{12}$$

$$Q_{jk} = \begin{cases} \tilde{A}_{ij} \tilde{A}_{ik} & \text{if } j \neq k \\ \tilde{A}_{ij}^2 - 2 b_i \tilde{A}_{ij} & \text{if } j = k \end{cases} \tag{13}$$

のように式変形され，QUBO モデルが得られる．ここで，式 (12) の 2 行目から 3 行目への式変形の際に，q_j は 0 もしくは 1 であるため対角項に対して $q_j = q_j q_j$ の関係を用いている．この式 (12) を量子アニーリングマシンを含むイジングマシンを用いて解くことで，$E(\{q_j\})$ を最小化する q_j の組み合わせ，つまり式 (7) の解が得られる．ただしこの解はバイナリー形式で表記されているため，最終的な解は式 (10) を用いて連続数に再変換されたものになる．

ここまでの話をまとめると，以下に示す 4 ステップにより，流体計算問題を組合せ最適化問題として定式化出来ることになる．

1. 支配方程式を離散化: 式 (7)

2. 離散化された支配方程式を二乗し，コスト関数として定義 (二乗しているのは，Ising モデルや QUBO モデルが二次多項式で記述されているため): 式 (8)

3. コスト関数内で連続数として表現されている流体変数を二値数に変換: 式 (10)

4. 二値数によって表現されたコスト関数を展開し，定数項を無視することで Ising や QUBO モデルを作成: 式 (11)-(13)

先行研究では，このステップ 1 の段階で様々な離散化方法を用いて式 (7) の定式化を行っている: 有限差分法 (Ray ら [6])，格子気体法 (Kuya ら [7])，スペクトル法 (Rodríguez ら [9]，Takagi ら [8])．このように，流体計算問題を組合せ最適化問題として定式化することで量子アニーリングにより流体計算を行うことが出来る．一方で，Takagi ら [8] が指摘している通り，現状のイジングマシンでは解く問題の規模が大きくなるほど，量子アニーリングで得られる解の正確性は低下してしまうという課題がある．一般的な数値流体計算においては，空間の格子点間隔が小さくなる (=格子点数が増加する) と離散化エラーは減少し，離散方程式は元の連続な方程式に収束する (数値流体計算における consistency)．一方，現状ではハードウェア側の制約により，扱う格子点数が増えると量子アニーリングによる求解の際に生じるエラーが増えてしまうため，数値流体計算の consistency が担保されない．このため，量子アニーリングを用いて実用的な流体計算を行うには，更なるハードウェアの開発とともに，このような課題を解決する新たな流体計算アルゴリズムの構築が望まれる．

2.2 ブラックボックス最適化

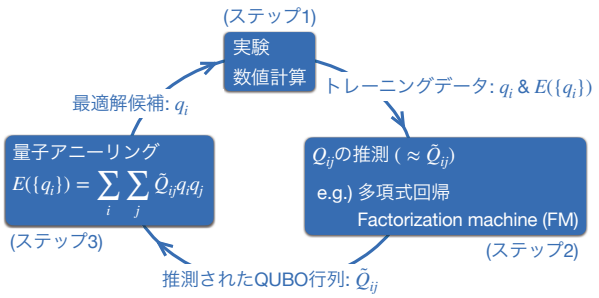

図 2: 量子アニーリングブラックボックス最適化の概略．

量子アニーリングにおける課題の一つに，個々の問題に対して明示的に式 (1) や (2) によって記述される Ising モデルや QUBO モデルを作成するのが容易でない点が挙げられる．その課題を解決する手法の一つとして量子アニーリングブラックボックス最適化 (以下，QA ブラックボックス最適化) と呼ばれる手法が挙げられる．筆者の私見ではあるが，この手法が最も流体理工学分野への応用がしやすく，かつ有用なツールになり得ると考える．以下では QUBO モデルを用いて説明を行うが，Ising モデルに対しても手順は同様である．

QA ブラックボックス最適化の概略図を図 2 に示す．QA ブラックボックス最適化とは，既存の q_i と $E(\{q_i\})$ のデータをトレーニングデータとして用いることで機械学習的に Q_{ij} の予測を行い，予測された QUBO 行列 $\tilde{Q}_{ij}$ によって構築された QUBO モデルを量子アニーリングによって解くことで最適解を得る手法のことである．言い換えると，q_i と $E(\{q_i\})$ をそれぞれ入力と出力として見立て，Q_{ij} をそれらの関係を繋げるブラックボックス関数，もしくはサロゲートモデルとして扱う手法である．QA ブラックボックス最適化では，ステップ 1 として実験や数値計算によりトレーニングデータのペア，q_i と $E(\{q_i\})$，を作る．次にステップ 2 において，これらのトレーニングデータを用いて QUBO 行列 Q_{ij} の予測を行う．このとき，例えば以下のような多項式回帰が用いられ，w_0，w_i，W_{ij} をトレーニングデータに合わせて機械学習的に学習する．

$$f(\{q_i\}) = w_0 + \sum_{i=1}^{N} w_i q_i + \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=i+1}^{N} W_{ij} q_i q_j \tag{14}$$

また QA ブラックボックス最適化において広く用いられる Factorization machine [11,12] では，以下のように相互作用係数 W_{ij} をベクトル $\boldsymbol{v}_i$ の内積として得ている．

$$W_{ij} = \boldsymbol{v}_i \cdot \boldsymbol{v}_j \tag{15}$$

$$= \sum_{k=1}^{K} v_{ik} v_{jk} \quad (K \ll N) \tag{16}$$

Factorization machine を用いると，パラメータの数が W_{ij} を直接学習した場合の $N \times N$ から $K \times N$ $(K \ll N)$ に削減されるなどのメリットがある (詳細については文献を参照)．ここで予測されたモデルパラメータ w_i と W_{ij} はそれぞれ，予測 QUBO 行列 $\tilde{Q}_{ij}$ の対角項および非対角項として利用される．最後に，ステップ 3 では機械学習で予測された $\tilde{Q}_{ij}$ を用いて QUBO モデルを構築し，量子アニーリングによりその予測 QUBO モデルを解くことで最適解を得る．しかし，初期トレーニングデータが QUBO 行列の予測に十分である保証はないため，一般にはステップ 3 で得られた最適解を最適解候補 $q_i^{\text{opt cand}}$ として考え，$q_i^{\text{opt cand}}$ を用いて再度ステップ 1 の実験や数値計算を行うことでトレーニングデータ $E(\{q_i^{\text{opt cand}}\})$ の追加を行う．このようにステップ 1 から 3 までのサイクルを繰り返し，ベイズ的に最適化を行うことで最終的に収束した解を最適解として得る．

ここで例として，先行研究で発表されたデータを用いて QA ブラックボックス最適化を行ってみる．山内ら [13] は高速鉄道車両がトンネルに突入した際に生じる

トンネル微気圧波 (圧力波) と，その微気圧波の低減を目的にトンネル側壁に設置された緩衝工の開閉パターンとの関係について解析を行っている．この微気圧波がトンネル出口から放出されると発破音が生じ騒音問題を引き起こすため，微気圧波の低減は高速鉄道車両開発における主要課題の一つとなっている．山内ら [13] の研究ではトンネル入口付近の側壁に 11 個の開口部を用意し，この開口部の開閉パターンを変化させることで微気圧波の低減効果を解析している．表 1 は山内ら [13] の CFD 解析結果 (合計 2700 万セルを用いた RANS 解析) を示しており，上から最も微気圧波の低減効果があった開閉パターンの順に記載されている．微気圧波の強さと入口圧力勾配（dp/dt）の最大値は相関がある [14] ため，解析では入口圧力勾配の最大値を評価することで，微気圧波の低減効果を評価している．開閉状態は，開口部が閉じている状態を 0，開いている状態を 1 として表現され，11 個の開口部の開閉パターンは 0 と 1 からなる 11 桁の数字列で表される (例えば，トンネル入口側から 2 つの開口部が連続的に空いている場合の開閉パターンは “11000000000” と表現される)．つまりこの問題は問題サイズが $2^{11} = 2048$ 通りの組合せ最適化問題となっている．当然ながら 2048 通りの CFD 解析を行うのは容易ではないため，山内ら [13] の研究では 42 ケースに絞って解析を行っている．解析ケースは「開口部を連続して 3 つ開けると最大圧力勾配が下がる傾向にある」という先行研究結果 [15] に従って決定されている．

表 1: 入口圧力勾配最大値と緩衝工側壁開閉パターンの関係 [13].

順位	緩衝工の開閉パターン											dp/dt_max [kPa/sec]
1	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	7.459
2	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	7.489
3	0	1	1	1	0	1	1	1	1	1	1	7.562
4	0	1	1	1	1	1	1	0	1	1	1	7.612
5	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	7.758
6	1	1	1	0	0	1	1	1	1	1	1	7.815
7	1	1	1	0	1	1	1	0	1	1	1	7.836
8	1	1	1	1	1	1	0	0	1	1	1	7.956
9	1	1	1	0	1	1	1	1	1	1	0	7.980
10	1	1	1	1	1	1	0	1	1	1	0	8.057
11	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	0	8.210
12	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	8.281
13	0	0	0	0	1	1	1	0	1	1	1	8.281
14	0	0	0	1	1	1	0	0	1	1	1	8.370
15	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	0	8.425
16	0	0	0	1	1	1	0	1	1	1	0	8.468
17	0	0	1	1	1	0	0	0	1	1	1	8.542
18	0	0	0	1	1	1	1	1	1	0	0	8.619
19	0	0	1	1	1	0	0	1	1	1	0	8.621
20	0	0	1	1	1	0	1	1	1	0	0	8.728
21	0	1	1	1	0	0	0	0	1	1	1	8.802
22	0	1	1	1	0	0	0	1	1	1	0	8.874
23	0	0	1	1	1	1	1	1	0	0	0	8.888
24	0	1	1	1	0	0	1	1	1	0	0	8.963
25	0	1	1	1	0	1	1	1	0	0	0	9.082
26	1	1	1	0	0	0	0	0	1	1	1	9.140
27	1	1	1	0	0	0	0	1	1	1	0	9.209
28	0	1	1	1	1	1	1	0	0	0	0	9.255
29	1	1	1	0	0	0	1	1	1	0	0	9.291
30	1	1	1	0	0	1	1	1	0	0	0	9.395
31	1	1	1	0	1	1	1	0	0	0	0	9.532
32	1	1	1	1	1	1	0	0	0	0	0	9.737
33	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	9.754
34	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	0	9.817
35	0	0	0	0	0	0	1	1	1	0	0	9.891
36	0	0	0	0	0	1	1	1	0	0	0	9.984
37	0	0	0	0	1	1	1	0	0	0	0	10.103
38	0	0	0	1	1	1	0	0	0	0	0	10.271
39	0	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0	10.510
40	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	10.847
41	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	11.277
42	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	12.036

入口圧力勾配の最大値を評価することで，微気圧波の低減効果を評価している．開閉状態は，開口部が閉じている状態を 0，開いている状態を 1 として表現され，11 個の開口部の開閉パターンは 0 と 1 からなる 11 桁の数字列で表される (例えば，トンネル入口側から 2 つの開口部が連続的に空いている場合の開閉パターンは “11000000000” と表現される)．つまりこの問題は問題サイズが $2^{11} = 2048$ 通りの組合せ最適化問題となっている．当然ながら 2048 通りの CFD 解析を行うのは容易ではないため，山内ら [13] の研究では 42 ケースに絞って解析を行っている．解析ケースは「開口部を連続して 3 つ開けると最大圧力勾配が下がる傾向にある」という先行研究結果 [15] に従って決定されている．

表 1 に示されたデータを元に QA ブラックボックス最適化を行うと，以下のような最適解が得られた．

$$[10100101101], \quad dp/dt = 6.67335 \qquad (17)$$

注意として，ここでは QA ブラックボックス最適化の応用例を示すことが目的であり，利用できるデータは表 1 に示されたものだけであるため，今回は上述のステップ 1 から 3 のサイクルは 1 回しか行っておらず，正確にはここで得られたものは「最適解候補」である．式 (17) が示す結果が最終的に収束した解であると仮定して話を進めると，まず量子アニーリングによってより低い入口圧力勾配（dp/dt）が得られていることがわかる (元データでは 7.459 が最も低い値)．また興味深いことに，先行研究では開口部を連続して 3 つ開けると最大圧力勾配が下がる傾向にあることが示されているが，量子アニーリングで得られた結果はその先行研究に反するものとなっている．さらに解析を進めるために，QA ブラックボックス最適化で予測された QUBO 行列 $\tilde{Q}_{ij}$ の非対角項の値 (相互作用係数) を図 3 に示す．図中には太線で囲まれたブロックが 3 つあるが，これらは $\tilde{Q}_{ij}$ の相互作用係数が特に他の値よりも低いものを示している (web 版原稿はカラーであるため，白黒画像でわかりにくい場合にはそちらを参照いただきたい)．QUBO 行列の値が小さい場合，特に値が負の場合には $q_i = q_j = 1$ のときに QUBO モデルの値が小さくなる．つまり，太線で囲まれた相互作用係数は，3 つ目，6 つ目，9 つ目の開口部を同時に開口すると入口圧力勾配最大値が下がる傾向にあることを示している．表 1 を見てみると，実際に最大圧力勾配が小さい上位 11 開閉パターンはすべてこの開け方になっていることがわかる．また，逆に図 3 内で点線で囲まれたブロックは $\tilde{Q}_{ij}$ の相互作用係数が特に他の値よりも高いものを示している．QUBO 行列の値が大きい場合には，$q_i = q_j = 1$ のときに QUBO

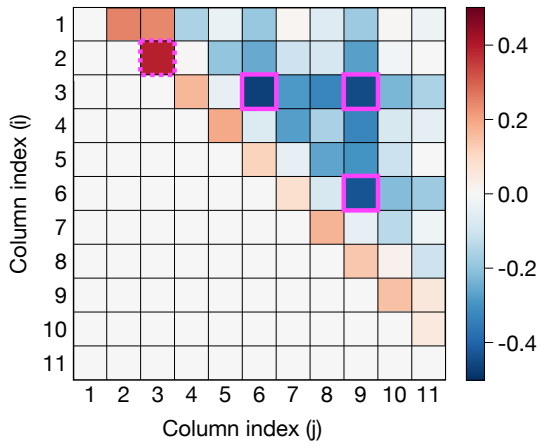

図 3: 予測された QUBO 行列 $\tilde{Q}_{ij}$ の相互作用係数.

モデルの値はより大きくなる．一方で，$q_i = 0$ もしくは $q_j = 0$ であれば $Q_{ij}q_iq_j = 0$ となる．そのため，QUBO 行列の値が大きい場合に QUBO モデルの値を最小化するには，q_i もしくは q_j が 0 となることが望ましい．今回の例の場合では，図 3 内で点線で囲まれた相互作用係数は 2 つ目と 3 つ目の開口部は同時に開けない方が良いことを示している ($q_2 = 0$ もしくは $q_3 = 0$ となることが望ましい)．確かに表 1 において最も最大圧力勾配が小さい開閉パターンでは，2 つ目の開口部は開けられ，3 つ目の開口部は閉じられている ($q_2 = 0$，$q_3 = 1$ となっている)．一方で，それ以下ではほとんどの場合で 2 つ目と 3 つ目の開口部は同時に開けられており，量子アニーリングによって得られた最適解候補 (式 (17)) を含めて，まだより良い開閉パターンが存在する可能性が示唆されている．

このように QA ブラックボックス最適化では未知のブラックボックス関数に対して機械学習的に Ising モデルや QUBO モデルの予測を行うが，解きたい最適化問題を支配する真の関数が Ising モデルや QUBO モデルの形で記述出来るという保証はない．しかし，定式化が簡単であることからも，今後 QA ブラックボックス最適化が様々な流体理工学分野の課題の解決や理解に活用される可能性は十分あると考える．

2.3 量子ボルツマンマシン

量子アニーリングのアプリケーションとして，最後に量子ボルツマンマシンと呼ばれる機械学習モデルについてご紹介する．筆者らも量子ボルツマンマシンを応用した研究に取り組んではいるが，どのようにしてこの量子ボルツマンマシンの特徴を有効に活用出来るかという点についてはまだ日々試行錯誤の状態であるため，ここでは簡単にご紹介するという形に留めたい．

以下のような N 個のデータを考える．

$$\mathbf{x} = \{x_1, x_2, \cdots, x_N\}, \quad x_i \in \{-1, +1\} \tag{18}$$

この場合，-1 と $+1$ の数字列の組み合わせ ($+1, +1, \cdots, -1$ など) が全部で 2^N パターンあることになる．このとき，この数字列のパターンが確率分布 $P(\mathbf{x})$ に従って出現 (生成) されるとすると，確率分布に従って出現しやすいパターンと出現しにくいパターンなどが存在することになる．この確率に従ってパターンを生成するのがボルツマンマシンである．$x_i \in \{-1, +1\}$ であることから，例えばボルツマンマシンを用いて白黒画像を生成することが出来，その白黒画像のパターンの出やすさは確率分布に従う．

ボルツマンマシンは，エネルギーが低い状態ほど高い確率で現れるという統計力学的な性質を利用して学習やデータ生成を行う生成モデル型のニューラルネットワークである．流体理工学分野においてニューラルネットワークと言われると，情報が入力側から出力側に流れる一方向のネットワークがイメージされるが，ボルツマンマシンは情報の流れが一方向ではなく双方向的であるため，無向グラフで表現される．ボルツマンマシンでは機械学習的に得られた確率分布から画像などの新しいデータを生成する．ある状態 $\mathbf{x}$ の出現確率が以下のボルツマン分布に従うとする．

$$P(\mathbf{x}) = \frac{1}{Z} e^{-E(\mathbf{x})}, \quad Z = \sum e^{-E(\mathbf{x})} \tag{19}$$

エネルギー関数 $E(\mathbf{x})$ は以下のように与えられる．

$$E(\mathbf{x}) = -\sum_{i=1}^{N} b_i x_i - \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=i+1}^{N} \omega_{ij} x_i x_j \tag{20}$$

このエネルギー関数は Ising モデル (式 (1)) と同様の形をしていることがわかる．また Z は正規化定数（分配関数）であり，2^N 個の項の和であるため，N が大きい場合には計算が困難となる．ボルツマンマシンの学習過程では，トレーニングデータの確率分布が再現されるようにモデルパラメータである b_i と ω_{ij} の学習が行われる．この際，正規化定数 Z の計算は N が大きい場合には困難となるため，量子アニーリングを用いて学習過程の高速化を狙ったものが量子ボルツマンマシンである．ボルツマンマシンの機械学習過程ではトレーニングデータに沿った確率分布を得るために，与えられたエネルギーに従って -1 と $+1$ のパターンをランダムに生成する必要がある．詳細については割愛するが，量子アニーリングでは式 (20) と同じ形をした Ising モデルの低エネルギー状態の探索が行われるため，この性質を利用して量子アニーリングによるサンプリングを行うことで，このデータ生成のプロセスを従来手法に比べて高速に行うことが出来る．量子ボルツマンマシンを用いた先行研究には，例えば欠損画像の修復 [16] などがあり，流体理工学分野においても何かしらの画像処理への応用が考えられるかもしれない．

3 おわりに

本稿では，筆者の現時点での理解に基づいて，量子アニーリングの流体理工学分野への応用に焦点を当てて解説をさせていただいた．まだまだ我々の分野においての研究数は多くはないが，情報分野に目を向けると，量子アニーリングを含めて，量子コンピューティングに関する研究・開発は非常に活発に行われている．つまり，視点を変え，立ち位置を変えるとたくさんの知見が山のように積み上がっていることに気付く．例えばその中には量子アニーリングを用いた有限差分法に関する研究 [17] などもある．ゲート型量子コンピュータの実用化まではもうしばらく時間が必要となるが，量子アニーリングマシンを含めたイジングマシンの産業利用はすでに始まっている．一方で，流体理工学分野における量子アニーリングに関する研究は，まだまだフィージビリティスタディの段階であると考える．本稿をきっかけに，読者の中から量子アニーリングの応用に関する新しい発想やアイディアが創出されれば幸いである．

謝辞

データの利用についてご快諾いただきました文献 [13] の著者らのご理解とご配慮に感謝いたします．また，この融合分野における研究を続けられているのも，これまで研究室で一緒に研究に携わってくれた学部生および大学院生の皆さんのおかげです．加藤優紀さん，田中龍さん，浅賀尭一さん，大盛優太さん，永山虹空さん，吉田侑紘さん，奥山太陽さん，長井翔太さんの研究への寄与に感謝します．加えて，本研究の一部は JSPS 科研費 (22K04530) および JAXA イノベーションチャレンジ 2024 の支援を受けたものです．

引用文献

1) T. Kadowaki, H. Nishimori, Quantum annealing in the transverse ising model, *Physical Review E*, 58 (1998) 5355–5363.
2) D-wave systems, https://www.dwavesys.com/solutions-and-products/systems (Accessed 4 Aug 2025).
3) Fujitsu Digital Annealer, https://www.fujitsu.com/jp/digitalannealer (Accessed 4 Aug 2025).
4) NEC Vector Annealing, https://jpn.nec.com/nec-vector-annealing-service/index.html (Accessed 4 Aug 2025).
5) TOSHIBA SQBM+, https://www.global.toshiba/jp/products-solutions/ai-iot/sbm.html (Accessed 4 Aug 2025).
6) N. Ray, T. Banerjee, B. Nadiga, S. Karra, On the viability of quantum annealers to solve fluid flows, *Frontiers in Mechanical Engineering* 8 (2022) 906696.
7) Y. Kuya, K. Komatsu, K. Yonaga, H. Kobayashi, Quantum annealing-based algorithm for lattice gas automata, *Computer & Fluids*, 274 (2024) 106238.
8) K. Takagi, N. Moriya, S. Aoki, K. Endo, M. Muramatsu, K. Fukagata, Implementation of spectral methods on ising machines: toward flow simulations on quantum annealers, *Fluid Dynamics Research* 56 (6) (2024) 061401.
9) J. D. D. Rodríguez, A. P. Pérez, E. I. Fernández, A. J. J. Valera, A quantum annealing approach to fluid dynamics problems solving navier-stokes equations, *2024 9th International Conference on Smart and Sustainable Technologies (SpliTech)*, (2024) 1–6.
10) D. O'Malley, V. V. Vesselinov, Toq. jl: A high-level programming language for D–Wave machines based on Julia, *2016 IEEE High Performance Extreme Computing Conference (HPEC)*, (2016) 1–7.
11) S. Rendle, Factorization machines, *2010 IEEE International conference on data mining*, (2010) 995–1000.
12) K. Kitai, J. Guo, S. Ju, S. Tanaka, K. Tsuda, J. Shiomi, R. Tamura, Designing metamaterials with quantum annealing and factorization machines, *Physical Review Research*, 2 (2020) 013319.
13) 山内優果, 上野陽亮, 田島厚志, 安田英将, 佐々木隆, 高速鉄道車両のトンネル微気圧波低減のための緩衝工開閉パターン調査, 日本流体力学会 第 36 回数値流体力学シンポジウム (2022) C02–1.
14) D. H. Kim, S. Y. Cheol, R. S. Iyer, H. D. Kim, A newly designed entrance hood to reduce the micro pressure wave emitted from the exit of high-speed railway tunnel, Tunnelling and Underground Space Technology 108 (2021) 103728.
15) 伊戸川絵美, 金子達哉, ダクト付トンネル緩衝工の適用範囲拡大の検討, 土木学会 第 68 回土木学会年次学術講演会 (2013) VII–036.
16) M. Benedetti, J. Realpe-Gómez, R. Biswas, A. Perdomo-Ortiz, Quantum-assisted learning of hardware-embedded probabilistic graphical models, *Physical Review X*, 7 (2017) 041052.
17) O. M. Raisuddin, S. De, Feqa: Finite element computations on quantum annealers, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 395 (2022) 115014.