

## 1D02 量子アニーリングによる乱流計算に向けた RANS の変分法 ベースの定式化

○ 高木謙一郎 (東大院), 今村太郎, 山下礼 (東大工学系)

Variational calculus-based RANS formulation for turbulent flow computation using quantum annealing  
Kenichiro Takagi, Taro Imamura, and Rei Yamashita (Univ. of Tokyo)

Keywords: CFD, Numerical Analysis, Turbulent Flow

### Abstract

This study explores the application of quantum annealing to turbulence simulations by employing a variational calculus-based approach. Quantum annealing is a quantum computational method specialized for solving optimization problems and is considered capable of efficiently addressing certain NP-hard problems. However, its application to fluid dynamics—problems that are not inherently formulated as optimization tasks—remains limited. The proposed method aims to achieve more accurate turbulence simulations by defining an objective function, without numerical processing, that is consistent with the solution of the original governing equations of fluid flow. Instead of converting these equations into an optimization problem, the method directly incorporates the physical consistency of the original formulation. As a first step, we formulate the Reynolds-Averaged Navier–Stokes equations (RANS) for channel flow into a Quadratic Unconstrained Binary Optimization (QUBO) form using the variational calculus concept. We then validate this approach through simulated annealing.

### 1. はじめに

Navier–Stokes 方程式や Euler 方程式で記述される流体の運動は本質的に非線形であり、精密なシミュレーションには多大な計算資源と時間を要する。高 Reynolds 数の流れにおいては、乱流の不規則性やマルチスケール性のために、特にその傾向が顕著である。そのため、Direct Numerical Simulation (DNS) の適用は摩擦 Reynolds 数 8000 以下の流れに限定され、産業的な利用を困難なものとしている<sup>[1]</sup>。一方で、Large Eddy Simulation (LES) や Reynolds-Averaged Navier–Stokes equations (RANS) などの乱流モデリングはチューニングの仕方によって計算できる流れ場に得手不得手があることが知られている。また LES は航空機全周のシミュレーションなど大規模な計算に用いるには依然として高コストであること、より計算量の少ない RANS では翼の失速近傍などにおいて解のばらつきが非常に大きくなるなど、モデル化の度合いと計算精度にはトレードオフの関係がある<sup>[2, 3]</sup>。

これらトレードオフの関係を超越、高速で信頼性のある流体計算を行うため、近年は従来のコンピュータに代わり量子コンピュータを用いる研究がなされている。従来のコンピュータの持つ古典ビットが 0 または 1 の情報しか持てないのに対し、量子コンピュータが用いる量子ビットは複数の状態を重ね合わせることができる。また、量子もつれと呼ばれる、古典的には説明できない量子ビット間の相互作用により、重なり合

わさった状態がそれぞれ影響を及ぼし合い、時間発展することができる。そのため、量子コンピュータは古典コンピュータよりも高速な並列計算を行うことが可能であるとされている<sup>[4]</sup>。

量子コンピュータの計算方式の一つに、量子ゲート型<sup>[5]</sup>がある。これは量子ゲートと呼ばれる変換を量子ビットに施すことで計算を行う形式であり、論理ゲートを用いる古典計算との類似性が高く、汎用性の高い計算方式であるとされている<sup>[6]</sup>。量子ゲートで流体計算を行うためのアルゴリズムもこれまで多く提案されており、De Laval ノズル<sup>[7]</sup>、Burgers 方程式<sup>[8]</sup>、乱流構造<sup>[9, 10]</sup>など、多くの流れについて適用できることが示唆されている。しかし、量子ゲート型はノイズに弱くエラーが生じやすいことが欠点として挙げられており<sup>[11]</sup>、実用に耐える大規模な量子ゲート型コンピュータの実現には時間を要すると考えられる。

他方、近年では量子アニーリング型<sup>[12]</sup>と呼ばれる計算方式が注目されている。量子アニーリング型は組合せ最適化問題に特化した量子計算方式であり、計算に関わる量子ビット全てが結合しながら作動するため、量子ゲート型に比べノイズの影響を受けにくいことが特長である<sup>[11]</sup>。そのため、カナダの D-Wave 社から既に 5000 量子ビットを超える規模の量子アニーラーが発売されており<sup>[13]</sup>、実用化が進められている。一方、組合せ最適化問題以外への適用例は少なく、筆者の知る限りではこれまで 3 例のみ報告されている。Ray らは、Navier–Stokes 方程式を有限差分法によ

て離散化することで得られる一次方程式を線形最小二乗法を用いて解き、チャンネル流れを計算した<sup>[14]</sup>。Kuyaらは、気体格子オートマトンを量子アニーリングの形式で記述することで、より量子アニーリングに適した計算方法となり得ることを示した<sup>[15]</sup>。Takagiらは、有限差分法の代わりにChebyshevスペクトル法を用いることで変数の数を減らし、一次元移流拡散方程式をより高い精度で計算できる可能性を示した<sup>[16]</sup>。

これらの手法は、既存の計算手法を量子アニーリングの形式に変換することで得られるため、理論体系が確立しているという利点がある。一方、それらの変換は一般に最適化問題でない問題を最適化問題に置き換えるための、流体の物理とは無関係な数値的処理で行われる。従ってこれまで提案されてきた手法では、流体力学とは無関係なチューニングパラメータの追加や、変換された後の最適化問題の解と元の問題の解との相違などによって、望まれた出力が得られないことが多い。

そこで本研究では、実現可能性の高い量子アニーリングを用いた計算手法として、本質的に最適化問題である流体計算スキームを提案する。本発表では一例として、チャンネル流れについてのRANSを題材とし、変分法の考え方を元に、目的関数を定義することを試みる。また、先行研究で提案された線形最小二乗法を用いる計算手法<sup>[14, 16]</sup>と本研究の提案手法をそれぞれ古典コンピュータによってシミュレーションし、提案手法の有意性を示す。

## 2. 計算手法

### 2.1 量子アニーリング

量子アニーリングは、以下に示すIsingモデルまたは二次制約なし二値最適化問題 (Quadratic Unconstrained Binary Optimization, QUBO) を解く量子計算手法である。

#### Ising モデル

$$\begin{aligned} \text{minimize } H = & -\sum_{i,j} J_{ij}\sigma_i\sigma_j - \sum_i h_i\sigma_i, \\ & \sigma_i \in \{-1, +1\} \end{aligned} \quad (1)$$

#### Quadratic Unconstrained Binary Optimization (QUBO)

$$\text{minimize } F = -\sum_{i,j} Q_{ij}q_iq_j, \quad q_i \in \{0, 1\} \quad (2)$$

式(1)で表されるIsingモデルは磁性体についての統計力学上のモデルであり、 $J_{ij}$ は原子 $i, j$ 間の相互作用、 $h_i$ は原子 $i$ に加わる局所磁場、 $\sigma_i$ は原子 $i$ の持つスピンである。 $H$ はハミルトニアンと呼ばれ系のエネルギーを表しており、Isingモデルは $H$ を最小化するようにスピン構成 $\{\sigma_i\}$ が決定される最小化問題と捉えられる。一方、QUBOはIsingモデルに簡単な変数変

換を行うことで得られる、Isingモデルと等価な最小化問題である。式(2)中の $Q_{ij}$ は目的関数 $F$ の係数行列であり、 $F$ を最小化するように二値変数 $\{q_i\}$ の値が決定される。変数の値域が $q_i \in \{0, 1\}$ と古典ビットのものとは共通することから、量子アニーリングを用いた最小化問題ではQUBOがよく用いられる。

IsingモデルおよびQUBOはNP困難な問題と位置づけられ、古典計算では最適解の探索に膨大な計算量を要する。量子アニーリングは量子的な作用により、古典コンピュータに比べより高速な探索が可能であると期待されている。ただし、本発表では計算手法の検証のため、古典コンピュータによるQUBOソルバーである、シミュレーテッドアニーリングによって数値実験を行う。シミュレーテッドアニーリングによって最適解の一つ求めるのに要する時間時間は数秒から数十秒程度と決して短くはないが、現在の技術レベルにおいては実際に量子アニーリングを行うよりも精度が良く、解法ごとの性質を理解するのに適している<sup>[16]</sup>。

### 2.2 RANSの変分法ベースの定式化

本発表では例として、流れ方向( $x$ 方向)および幅方向( $z$ 方向)に一樣で、統計的に定常な非圧縮性チャンネル流れを考える。この時、系の支配方程式と境界条件は

$$\begin{aligned} -p_x + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \rho(\nu + \nu_t) \frac{\partial u}{\partial y} \right] &= 0, \\ u(y = -d) = u(y = +d) &= 0 \end{aligned} \quad (3)$$

と表される。ここで、 $y$ は壁面垂直方向の座標、 $u$ は $x$ 方向の流速の時間および $x, z$ 方向の平均、 $p_x$ は $x$ 方向の圧力勾配、 $\nu$ は動粘性係数、 $\nu_t$ は渦粘性、 $d$ はチャンネル半幅である。

式(3)を直接解くのではなく、数値的処理を伴わない定性的な議論によって式(3)と等価な最小化問題を立式することを試みる。Isingモデルが磁性体のエネルギーを最小化すると同様に、流体に関しても流れのエネルギー収支を元に最小化関数を定義するのが自然であると考えられる。

はじめに、簡単のため渦粘性を考慮しない層流状態、

$$-p_x + \frac{\partial}{\partial y} \left( \rho\nu \frac{\partial u}{\partial y} \right) = 0 \quad (4)$$

を扱う。この時、系に外部から加わるエネルギー $D$ は圧力勾配 $-p_x$ が流体に対して行う仕事、系から外部に出るエネルギー $E$ は粘性 $\nu$ が流体に行う仕事であり、それぞれ

$$\begin{aligned} D &= -p_x u \\ E &= \frac{1}{2} \rho\nu \left( \frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 \end{aligned}$$

と表される。これらを用いて $u$ の輸送方程式(4)に対

応するラグランジアン密度  $L_u$  を定義すると、

$$\begin{aligned} L_u &= -D + E \\ &= p_x u + \frac{1}{2} \rho \nu \left( \frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 \end{aligned} \quad (5)$$

となる。ラグランジアン密度  $L_u$  を計算領域で積分することで、 $u$  の輸送方程式 (4) に対応する最小化関数  $F_u$  を

$$F_u = \int_{\text{channel}} L_u dy$$

と定義できる。

ここで、 $F_u$  の第一変分  $\delta_1 J$  が 0 となる必要十分条件を与える Euler 方程式、

$$\frac{\partial L_u}{\partial u} - \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\partial L_u}{\partial u'} \right) = 0, \quad u' \equiv \frac{\partial u}{\partial y}$$

に式 (5) を代入すると、式 (4) が得られる。従って、 $F_u$  は式 (4) の解で極値を取る。また、この時の第二変分  $\delta_2 J$  を考える。 $\epsilon$  を微小量、 $v$  を計算領域  $[-d, +d]$  の端点で 0 となる任意の関数とすると、

$$\begin{aligned} \delta_2 J &= \frac{\epsilon^2}{2} \int \left[ \frac{\partial^2 L_u}{\partial u^2} v^2 + 2 \frac{\partial^2 L_u}{\partial u \partial u'} v v' + \frac{\partial^2 L_u}{\partial u'^2} (v')^2 \right] dy \\ &= \frac{\epsilon^2}{2} \int \rho \nu (v')^2 dy \end{aligned}$$

となり、明らかに  $\delta_2 J > 0$  であるから、 $F_u$  は式 (4) の解で最小値を取る。このことから、量子アニーリングによって  $F_u$  の最小化問題を解くことで、式 (4) の解を得られる。

式 (5) の  $\nu$  を  $\nu + \nu_t$  に置き換えることで、渦粘性  $\nu_t$  を考慮する場合も同様に

$$L_u = p_x u + \frac{1}{2} \rho (\nu + \nu_t) \left( \frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 \quad (6)$$

とし、式 (3) を解くことができる。ただし、式 (2) より、アニーリングで扱うことのできる目的関数は高々 2 次の多項式であり、 $\nu_t$  を  $u$  と同時に計算するためには代替ビットを配置する必要があるなど、問題が複雑になり計算精度に大きな影響を与える。そのため、本発表においては輸送方程式のみをアニーリングで解き、得られた  $u$  などから代数方程式を解くことによって  $\nu_t$  を更新し再度アニーリングを行うといった反復計算によって、1 次または 2 次以外の項を扱う。

RANS には、渦粘性の与え方によって様々なモデルが存在する。本発表では、航空産業でよく用いられる 0 方程式モデルである Baldwin-Lomax モデル<sup>[17]</sup> と、基本的な 1 方程式モデルである  $k$  方程式モデル<sup>[18]</sup> を用いる。

#### Baldwin-Lomax モデル (0 方程式モデル)

Baldwin-Lomax モデルでは、乱流境界層を内層と外層に分け、それぞれに対して渦粘性を別のモデルに

よって与える<sup>[17]</sup>。どちらのモデルにおいても渦粘性が  $u$  の代数方程式によって与えられるため、アニーリングによって得られた  $u$  から渦粘性  $\nu_t$  を計算し、目的関数に反映させて再び  $F_u$  の最小化を行い、より正確な  $u$  を得る。モデルの詳細は付録 A に示す。

#### $k$ 方程式モデル (1 方程式モデル)

$k$  方程式モデルでは、 $u$  に関する方程式 (3) と共に乱流エネルギー  $k$  の輸送方程式、

$$\begin{aligned} \nu_t \left( \frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 - \frac{C_D}{l_m} k^{\frac{3}{2}} + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \left( \nu + \frac{\nu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial y} \right] &= 0, \\ k(y = -d) = k(y = +d) &= 0 \end{aligned} \quad (7)$$

を解く必要がある。式 (7) も、式 (3) から式 (6) への変換とのアナロジーから、 $k$  の輸送方程式に対応するラグランジアン密度  $L_k$  は

$$\begin{aligned} L_k &= -\nu_t \left( \frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 \tilde{k} + \frac{C_D}{2l_m} k^{\frac{1}{2}} \tilde{k}^2 \\ &\quad + \frac{1}{2} \left( \nu + \frac{\nu_t}{\sigma_k} \right) \left( \frac{\partial \tilde{k}}{\partial y} \right)^2 \end{aligned} \quad (8)$$

と表される。ただし、 $L_k$  を  $k$  に関する 1 次または 2 次の項のみで定義するため、式 (8) の最小化を行う際の変数は  $\tilde{k}$  のみとし、式 (8) 右辺第 2 項の  $k^{1/2}$  を含む他の変数は反復計算によって逐次更新する。式 (8) も式 (6) 同様、 $\tilde{k}$  に関する Euler 方程式、

$$\frac{\partial L_k}{\partial \tilde{k}} - \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\partial L_k}{\partial \tilde{k}'} \right) = 0, \quad \tilde{k}' \equiv \frac{\partial \tilde{k}}{\partial y}$$

に代入し、 $\tilde{k}$  を  $k$  と置き換えることで元の輸送方程式 (7) を得る。 $k$  の輸送方程式に対応する最小化関数  $F_k$  は、 $F_u$  同様にラグランジアン密度の積分によって

$$F_k = \int_{\text{channel}} L_k dy$$

と定義される。渦粘性  $\nu_t$  は、計算された  $k$  を元に、

$$\nu_t = C l_m \sqrt{k}$$

と計算する。ただし、 $l_m$  は乱れの長さスケールを表す混合長であり、Karman 定数  $\kappa$  およびモデル定数  $A^+$  を用いて、Van Driest damping 関数

$$l_m = \min \left\{ \kappa y \left[ 1 - \exp \left( \frac{-y^+}{A^+} \right) \right], \frac{1}{2} \kappa d \right\}$$

で与えられる。

$k$  方程式モデルでは、アニーリングで最小化する関

数を  $F_u$  と  $F_k$  の和,

$$F = F_u + W_k F_k$$

$$= \int_{\text{channel}} (L_u + W_k L_k) dy \quad (9)$$

とする。ただし、 $W_k$  は  $u$  と  $k$  のオーダー差が最小化に与える影響を解消するための重み定数であり、

$$W_k = \frac{\max \{u\}}{\max \{\tilde{k}\}}$$

とする。 $W_k$  についても  $\nu_t$  同様に反復計算によって値を更新する。

### 2.3 空間離散化

本発表では等間隔格子を用いて計算する。流速  $u$  および乱流エネルギーの勾配  $\partial k / \partial y$  の値は、壁面にあたる端点を除き  $N$  点の格子点での値を用いる。また、乱流エネルギー  $k$  および流速の勾配  $\partial u / \partial y$  の値は、格子点から格子幅の半分だけずらしたセル中心での値を用いる。図 1 に、 $N = 5$  の場合の計算点の配置例を示す。図 1 中の白丸は  $u$  や  $\partial k / \partial y$  の計算を行う格子点、黒丸は  $k$  や  $\partial u / \partial y$  の計算を行うセル中心をそれぞれ表す。

格子点およびセル中心での値を用いて式 (9) を離散化し、数値計算を行える形式にする。具体的な差分方程式は付録 B に示した。

### 2.4 連続量の量子化

量子アニーリングを用いる際には古典計算同様、観測後の古典的バイナリ情報  $q_i \in \{0, 1\}$  を扱う。そのため、連続量である  $u, \tilde{k}$  をバイナリ変数  $\{q_i\}$  の和で表す必要がある。本発表においては、線形最小二乗法

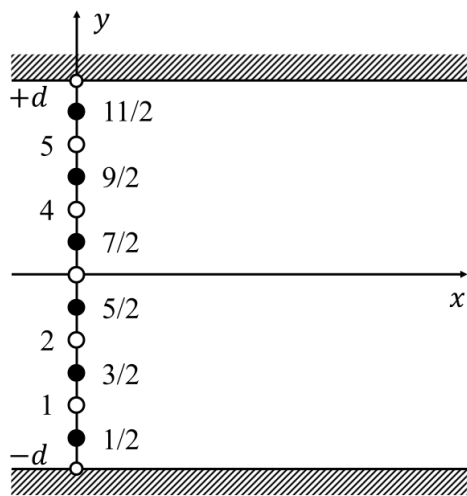


Figure 1  $N = 5$  の場合の計算点配置例。  $d$  はチャンネル半幅、白丸は  $u$  や  $\partial k / \partial y$  の計算を行う整数番号の格子点、黒丸は  $k$  や  $\partial u / \partial y$  の計算を行う半整数番号のセル中心をそれぞれ表す。

Table 1 流れ場の計算条件およびモデル定数.

圧力勾配 $-p_x$	$4 \times 10^{-5}$
粘性係数 $\mu$	$2 \times 10^{-5}$
密度 $\rho$	0.1
チャンネル半幅 $d$	1
Karman 定数 $\kappa$	0.4
$A^+$	26
$K$	0.0168
$C_{CP}$	1.6
$C_{WK}$	0.25
$C_{KLEB}$	0.3
$C$	0.56
$C_d$	0.18
$\sigma_k$	1.0

を用いた先行研究 [14, 16] と同様、二進法に近い方法によって連続量を表現する。

ある点  $i$  における流速  $u_i$  を、 $n$  個の量子ビット  $q_{n(i-1)+1}, q_{n(i-1)+2}, \dots, q_{ni}$  で表すことを考える。この時、二進法における各桁への重み付けを元に、

$$u_i = \frac{u_{\text{bound}}}{1 - 2^{-n}} \sum_{j=1}^n 2^{-j} q_{n(i-1)+j} \quad (10)$$

と定義することで、 $0 \leq u_i \leq u_{\text{bound}}$  の範囲を均等な  $2^n$  段階で表すことができる。ここで、 $u_{\text{bound}}$  は計算することのできる  $u_i$  の最大値である。重み付けのスケール  $u_{\text{bound}}$  は反復計算によって更新し、初期値を 1.2、2 回目以降は前の計算で得られた  $\{u_i\}$  の最大値の 1.2 倍とする。

乱流エネルギー  $\tilde{k}_{i+1/2}$  に関しても同様に  $n$  個の量子ビット  $q_{n(N+i)+1}, q_{n(N+i)+2}, \dots, q_{n(N+i)+n}$  で表すとき、

$$\tilde{k}_{i+1/2} = \frac{\tilde{k}_{\text{bound}}}{1 - 2^{-n}} \sum_{j=1}^n 2^{-j} q_{n(N+i)+j} \quad (11)$$

とし、計算できる  $\tilde{k}$  の最大値  $\tilde{k}_{\text{bound}}$  についても反復計算によって更新する。

式 (10), (11) をそれぞれ差分方程式に代入し、 $q_i$  を同じ値となる  $q_i q_i$  に置き換えると、式 (2) に示す QUBO 形式となる。従って、以上に示した変換により、式 (3), (7) を量子アニーリングで解くことができる。

## 3. 検証

### 3.1 計算条件

本発表では、QUBO ソルバーとして OpenJij [19] を用いた。OpenJij はオープンソースの QUBO ライブラ

リであり、量子アニーラーの動作をシミュレーションすることができる。

流れ場の計算条件および用いるモデル定数を表 1 に示す。圧力勾配  $p_x$ 、粘性係数  $\mu$ 、密度  $\rho$  は、層流状態におけるバルク Reynolds 数  $Re_{b,laminar}$  と摩擦 Reynolds 数  $Re_\tau$  がそれぞれ

$$Re_{b,laminar} \approx 3333.3, \quad Re_\tau = 100$$

となるよう設定されている。また、Karman 定数  $\kappa$ 、Baldwin–Lomax モデルで用いるモデル定数  $A^+, K, C_{CP}, C_{WK}, C_{KLEB}$ 、および  $k$  方程式モデルで用いるモデル定数  $C, C_d, \sigma_k$  はそれぞれ一般的に用いられるものを採用する [20, 21]。

反復計算の終了条件は、各点での  $u, k$  の値が計算前後で平均 1% 以上変動しなかった場合とする。反復計算を 1000 回行った時点で終了条件を満たさない場合、該当のモデルは収束しないと見なし、計算を終了する。

なお、アニーリングはランダム性のある計算方式であり、各試行において異なる解を出力する可能性がある。そのため、いずれのモデルにおいても各計算条件につき 700 個の解を出力し、うち式 (2) で示される目的関数  $F$  の値の小さいものを 10 個選び、計算結果とする。反復計算が必要な Baldwin–Lomax モデルと  $k$  方程式モデルにおいては、10 個の計算結果の各点での平均値を次の計算の入力値としている。

### 3.2 計算結果

本節では、層流状態、Baldwin–Lomax モデル、 $k$  方程式モデルのそれぞれについて、線形最小二乗法を用いる手法および本発表における提案手法を用いて計算した結果と、一次方程式を解く古典的な計算による結果との比較を行う。線形最小二乗法を用いる手法の概要は付録 C に示す。

図 2 に、各モデルをシミュレーテッドアニーリングで計算した結果を示す。各グラフ青線は線形最小二乗法を用いる手法、赤線は本発表における提案手法、明るい緑線は同じ格子点数で古典的に計算した結果、暗い緑線は十分格子点収束したと考えられる格子点数  $N = 500$  で古典的に計算した結果である。図 2 (a), (b), (c) は層流解、(d), (e), (f) は Baldwin–Lomax モデル、(g), (h), (i) は  $k$  方程式モデルを計算している。格子点数  $N$  は、(a), (d), (g) で  $N = 5$ 、(b), (e), (h) で  $N = 10$ 、(c), (f), (i) で  $N = 15$  としている。また、式 (10), (11) 中の量子化精度  $n$  は、全てのグラフにおいて  $n = 8$  としている。

図 2 より、いずれのモデルや格子点数においても、提案手法は線形最小二乗法を用いた手法より緑線に近く、ばらつきの小さな解を出力できている。古典的な計算においては、格子点数を大きくすることで大抵の場合は計算精度が向上するのに対し、アニーリングの場合は組合せ最適化であるために計算精度の悪化やば

らつきが大きくなる傾向にある。線形最小二乗法を用いた手法ではその傾向が顕著に見られ、特に  $k$  方程式モデルでは  $u, k$  と 2 つの変数を計算する必要があるために変数の数が約 2 倍と大きく増加したことから、図 2 (h), (i) では 1000 回の計算で解が収束しなかった。一方、提案手法においては格子点数の増加によって解のばらつきが大きくなるものの、古典的な計算で得られる解の付近に収まっており、高精度な計算ができている。

### 4. おわりに

本発表では、変分法を基にした、量子アニーリングによる流体計算手法を提案した。提案手法は数値的な処理を介さずに定義された、本質的に最適化アルゴリズムである。そのため、線形最小二乗法を用いる既存手法より高精度な計算を行えたといえる。

本発表では、簡単な例として層流解、Baldwin–Lomax モデル、 $k$  方程式モデルを扱った。航空産業で用いられる乱流モデルとしては他にも、1 方程式モデルとして Spalart–Allmaras モデルなどが挙げられる。このような実践的なモデルについても同様に、提案手法を適用することで計算が可能であると考えられる。また、 $k-\epsilon$  方程式モデル、 $k-\omega$  方程式モデルなどの 2 方程式モデルも、提案手法の単純な拡張によって計算できる可能性がある。

また、本発表では層流解についての変分原理からのアナロジーによって、RANS を計算する目的関数を定義した。そのため、渦粘性の更新は従来の古典的な計算と同様の方法で行うこととなった。今後、流体に関する変分原理を応用した厳密に物理的なモデル化や、高次の項の効率的な定式化などによって、反復回数が減少、あるいは従来反復計算が必要であった流体計算を反復計算無しに行うことが可能になる可能性もある。

### 付録 A Baldwin–Lomax モデルの詳細

Baldwin–Lomax モデル [17] では、乱流境界層内層での渦粘性を  $\nu_{t,in}$ 、外層での渦粘性を  $\nu_{t,out}$  として、

$$\nu_t = \begin{cases} \nu_{t,in}, & y < y_{crossover} \\ \nu_{t,out}, & y > y_{crossover} \end{cases}$$

と、別のモデルによって与える。ここで、内層と外層の境界  $y = y_{crossover}$  は、 $\nu_{t,in} = \nu_{t,out}$  となる点のうち、最も壁面から近い点である。

内層の渦粘性  $\nu_{t,in}$  は Van Driest モデルによって

$$\nu_{t,in} = l^2 \left| \frac{\partial u}{\partial y} \right|, \quad (12)$$

$$l = \kappa y \left[ 1 - \exp \left( \frac{-y^+}{A^+} \right) \right], \quad A^+ = \text{const.}$$

と与えられる。流れの乱れに間欠性が見られる外層に

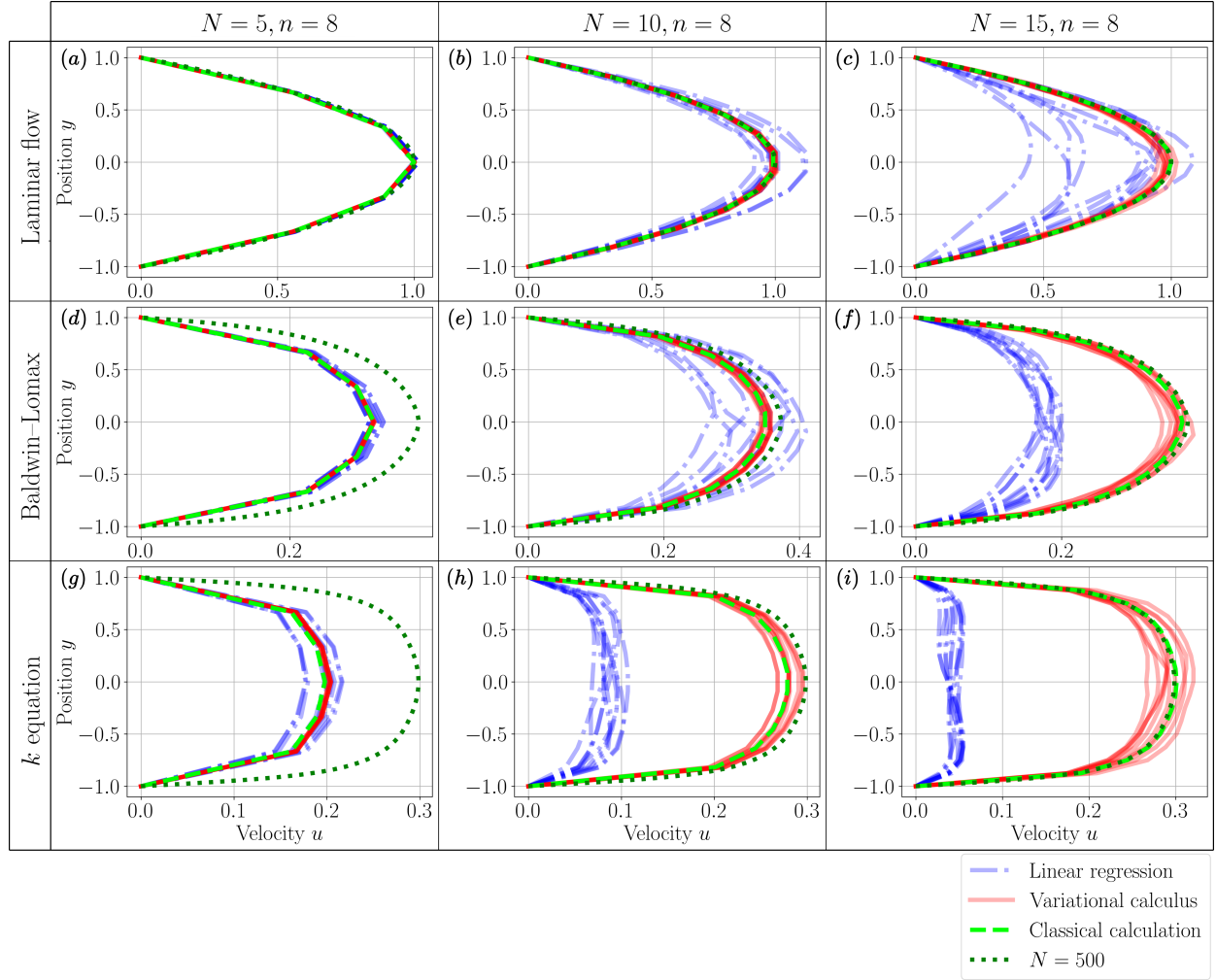


Figure 2 シミュレーテッドアニーリングによる各モデルの計算結果. (a): 層流解,  $N = 5, n = 8$ . (b): 層流解,  $N = 10, n = 8$ . (c): 層流解,  $N = 15, n = 8$ . (d): Baldwin-Lomax モデル,  $N = 5, n = 8$ . (e): Baldwin-Lomax モデル,  $N = 10, n = 8$ . (f): Baldwin-Lomax モデル,  $N = 15, n = 8$ . (g):  $k$  方程式モデル,  $N = 5, n = 8$ . (h):  $k$  方程式モデル,  $N = 10, n = 8$ . (i):  $k$  方程式モデル,  $N = 15, n = 8$ . ただし, (h), (i) において, 線形最小二乗法を用いる手法では解が収束しなかったため反復回数を 1000 回に制限している.

は, Clauser-Klebanoff モデルを用いて,

$$\begin{aligned} \nu_{t,\text{out}} &= K C_{\text{CP}} F_{\text{WAKE}} F_{\text{KLEB}}(y), \quad (13) \\ F_{\text{WAKE}} &= \min \left[ y_{\text{MAX}} F_{\text{MAX}}, C_{\text{WK}} y_{\text{MAX}} \frac{U_{\text{DIF}}^2}{F_{\text{MAX}}} \right], \\ F_{\text{KLEB}}(y) &= \frac{1}{1 + 5.5 \left( \frac{C_{\text{KLEB}} y}{y_{\text{MAX}}} \right)^6}, \\ K, C_{\text{CP}}, C_{\text{WK}}, C_{\text{KLEB}} &= \text{const.} \end{aligned}$$

とする. ここで,  $U_{\text{DIF}}^2$  は境界層内の最大速度と最小速度の差であり, 本発表では流速  $u$  の最大値としている. また,  $F_{\text{MAX}}, y_{\text{MAX}}$  は

$$F(y) = y \left| \frac{\partial u}{\partial y} \right| \left[ 1 - \exp \left( \frac{-y^+}{A^+} \right) \right]$$

の最大値および  $F(y)$  の最大値を与える  $y$  の値である.

## 付録 B 空間離散化の詳細

以下, 格子点には図 1 同様に整数番号, セル中心には半整数番号を割り当てる.

端点を除いた格子点の数を  $N$ , 格子幅を  $\Delta y = 2d/(N+1)$ , 点  $i$  における  $u, \tilde{k}$  の値をそれぞれ  $u_i, \tilde{k}_i$  とする. 式 (6), (8) について, 勾配  $\partial u / \partial y, \partial \tilde{k} / \partial y$  の項を二次精度中心差分で離散化し, 計算区間で積分す

ると,

$$\begin{aligned}
 F_u &= \int_{\text{channel}} L_u dy \\
 &\rightarrow \sum_{i=1}^N [p_x u]_i + \frac{1}{2} \rho \sum_{i=0}^N \left[ (\nu + \nu_t) \left( \frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 \right]_{i+\frac{1}{2}} \\
 &= \sum_{i=1}^N p_x u_i \\
 &\quad + \frac{1}{2} \rho \sum_{i=0}^N (\nu + \nu_t)_{i+\frac{1}{2}} \frac{u_{i+1}^2 - 2u_{i+1}u_i + u_i^2}{\Delta y^2} \\
 &\quad + D_u(y_{\frac{1}{2}}) + D_u(y_{N+\frac{1}{2}}), \tag{14}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 F_k &= \int_{\text{channel}} L_k dy \\
 &\rightarrow \sum_{i=0}^N \left[ -\nu_t \left( \frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 \tilde{k} + \frac{C_D}{2l_m} k^{\frac{1}{2}} \tilde{k}^2 \right]_{i+\frac{1}{2}} \\
 &\quad + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left[ \left( \nu + \frac{\nu_t}{\sigma_k} \right) \left( \frac{\partial \tilde{k}}{\partial y} \right)^2 \right]_i \\
 &= - \sum_{i=0}^N (\nu_t)_{i+\frac{1}{2}} \frac{u_{i+1}^2 - 2u_{i+1}u_i + u_i^2}{\Delta y^2} \tilde{k}_{i+\frac{1}{2}} \\
 &\quad + \sum_{i=0}^N \frac{C_D}{2l_m} k_{i+\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \tilde{k}_{i+\frac{1}{2}}^2 \\
 &\quad + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left( \nu + \frac{\nu_t}{\sigma_k} \right)_i \frac{\tilde{k}_{i+\frac{1}{2}}^2 - 2\tilde{k}_{i+\frac{1}{2}}\tilde{k}_{i-\frac{1}{2}} + \tilde{k}_{i-\frac{1}{2}}^2}{\Delta y^2} \\
 &\quad + \frac{1}{2} D_k(y_{\frac{1}{4}}) + \frac{1}{2} D_k(y_{N+\frac{3}{4}}) \tag{15}
 \end{aligned}$$

となる. ただし,  $D_u(y_{\frac{1}{2}})$  は点 1 と壁面の間の,  $D_u(y_{N+\frac{1}{2}})$  は点  $N$  と壁面の間の  $u$  の拡散項であり,

$$\begin{aligned}
 D_u(y_{\frac{1}{2}}) &= \frac{1}{2} \rho (\nu + \nu_t)_{\frac{1}{2}} \frac{u_1^2}{\Delta y^2} \\
 D_u(y_{N+\frac{1}{2}}) &= \frac{1}{2} \rho (\nu + \nu_t)_{N+\frac{1}{2}} \frac{u_N^2}{\Delta y^2}
 \end{aligned}$$

となる. また,  $D_k(y_{\frac{1}{4}})$  は点  $1/2$  と壁面の間の,  $D_k(y_{N+\frac{3}{4}})$  は点  $N + 1/2$  と壁面の間の  $k$  の拡散項であり,

$$\begin{aligned}
 D_k(y_{\frac{1}{4}}) &= \frac{1}{2} \left[ \nu + \frac{1}{2} \left( \frac{\nu_t}{\sigma_k} \right)_{\frac{1}{2}} \right] \frac{\tilde{k}_{\frac{1}{2}}^2}{(\Delta y/2)^2} \\
 D_k(y_{N+\frac{3}{4}}) &= \frac{1}{2} \left[ \nu + \frac{1}{2} \left( \frac{\nu_t}{\sigma_k} \right)_{N+\frac{1}{2}} \right] \frac{\tilde{k}_{N+\frac{1}{2}}^2}{(\Delta y/2)^2}
 \end{aligned}$$

となる. 壁面付近は範囲が格子幅の半分であるため,  $D_k(y_{\frac{1}{4}})$  と  $D_k(y_{N+\frac{3}{4}})$  は他の拡散項の半分だけ加える.

## 付録 C 線形最小二乗法を用いた定式化

本節では, 先行研究<sup>[14, 16]</sup>で提案された, 線形最小二乗法を用いた目的関数の定義を簡単に説明する.

線形な偏微分方程式は離散化することで, 計算対象となる変数  $\mathbf{x}$  の一次方程式

$$\mathbf{Ax} - \mathbf{b} = \mathbf{0} \tag{16}$$

と表すことができる. 式 (16) の両辺を 2 乗することで,  $\mathbf{x}$  に関する二次方程式,

$$\begin{aligned}
 (\mathbf{Ax} - \mathbf{b})^T (\mathbf{Ax} - \mathbf{b}) &= \mathbf{x}^T \mathbf{A}^T \mathbf{Ax} - 2\mathbf{b}^T \mathbf{Ax} + \mathbf{b}^T \mathbf{b} \\
 &= \mathbf{0} \tag{17}
 \end{aligned}$$

を得る. 式 (17) 左辺は  $\mathbf{x}$  が一次方程式の解である場合のみ 0 となり, そうでない場合は正の値を取るため, 最小化の目的関数となることができる. 式 (17) 左辺に式 (10), (11) などの量子化を行うことで QUBO 形式の目的関数となり, 量子アニーリングおよびシミュレーテッドアニーリングで解けるようになる.

離散化された式の両辺を 2 乗するという数値的处理が生む誤差要因の一つに, 計算対象の物理量についての計算誤差と方程式の残差の違いが挙げられる. 計算対象の物理量  $\mathbf{x}$  について, 正しい値を  $\mathbf{x}_0$ , 計算によって生じた誤差を  $\delta\mathbf{x}$  とする. この時,  $\mathbf{Ax}_0 - \mathbf{b} = \mathbf{0}$  より, 一次方程式 (16) の残差  $\delta\mathbf{r}$  は

$$\begin{aligned}
 \mathbf{A}(\mathbf{x}_0 + \delta\mathbf{x}) - \mathbf{b} &= \delta\mathbf{r}, \\
 \mathbf{A}\delta\mathbf{x} &= \delta\mathbf{r}
 \end{aligned}$$

となる. ノルムの劣乗法性より,

$$\begin{aligned}
 |\delta\mathbf{x}| &= |\mathbf{A}^{-1}\delta\mathbf{r}| \\
 &\leq |\mathbf{A}^{-1}| |\delta\mathbf{r}|, \\
 |\mathbf{b}| &= |\mathbf{Ax}_0| \\
 &\leq |\mathbf{A}| |\mathbf{x}_0|
 \end{aligned}$$

となることから, 計算誤差の相対ノルム  $|\delta\mathbf{x}|/|\mathbf{x}_0|$  と残差の相対ノルム  $|\delta\mathbf{r}|/|\mathbf{b}|$  の関係は

$$\frac{|\delta\mathbf{x}|}{|\mathbf{x}_0|} \leq |\mathbf{A}| |\mathbf{A}^{-1}| \frac{|\delta\mathbf{r}|}{|\mathbf{b}|} \tag{18}$$

と表される. ここで,  $|\mathbf{A}| |\mathbf{A}^{-1}|$  は条件数と呼ばれる定数で, 一次方程式の性質の良さの指標となる. 式 (18) より, 条件数が大きい場合には残差  $\delta\mathbf{r}$  を小さくするよう計算しても計算誤差  $\delta\mathbf{x}$  が小さくならない場合がある. 線形最小二乗法を用いた計算手法では, 計算誤差  $\delta\mathbf{x}$  ではなく残差  $\delta\mathbf{r}$  を最小化するため, 条件数の大きな系の場合は  $\delta\mathbf{x}$  が大きなまま残ってしまう可能性がある. 実際に, シミュレーテッドアニーリングを用いた場合は条件数が大きくなるに従って計算精度が悪化することが示されている<sup>[16]</sup>.

## 参考文献

- [1] Yoshinobu Yamamoto and Yoshiyuki Tsuji. Numerical evidence of logarithmic regions in channel flow at  $Re_\tau = 8000$ . *Physical Review Fluids*, Vol. 3, No. 1, p. 012602(R), 01 2018.
- [2] Konrad A. Goc, Oriol Lehmkuhl, George I. Park, Sanjeeb T. Bose, and Parviz Moin. Large eddy simulation of aircraft at affordable cost: a milestone in computational fluid dynamics. *Flow (Cambridge, England)*, Vol. 1, , 2021.
- [3] Carl F. Ollivier-Gooch and James G. Coder. Fourth AIAA high-lift prediction workshop: Fixed-grid Reynolds-Averaged Navier–Stokes summary. *Journal of aircraft*, Vol. 60, No. 6, pp. 1785–1797, 2023.
- [4] Jozef Gruska. *Quantum computing*. McGraw-Hill, London, 1999. (伊藤正, 今井克, 岩本宙, 外山政, 森田憲 (訳) . 量子コンピューティング, 森北出版, 東京, 2003) .
- [5] David Elieser Deutsch. Quantum theory, the church turing principle and the universal quantum computer. *Proceedings of the Royal Society of London, Series A, Mathematical and Physical Sciences*, Vol. 400, No. 1818, pp. 97–103, 1985.
- [6] 佐川弘幸, 吉田宣章. 量子情報理論 第3版. 丸善出版, 2019.
- [7] Frank Gaitan. Finding flows of a Navier–Stokes fluid through quantum computing. *npj Quantum Information*, Vol. 6, No. 1, 2020.
- [8] Jin-Peng Liu, Herman Ø. Kolden, Hari K. Krovi, Nuno F. Loureiro, Konstantina Trivisa, and Andrew M. Childs. Efficient quantum algorithm for dissipative nonlinear differential equations. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, Vol. 118, No. 35, pp. e2026–6, 2021.
- [9] Nikita Gourianov, Michael Lubasch, Sergey Dolgov, Quincy Y. van den Berg, Hessam Babaei, Peyman Givi, Martin Kiffner, and Dieter Jaksch. A quantum-inspired approach to exploit turbulence structures. *Nature Computational Science*, Vol. 2, No. 1, pp. 30–37, 2022.
- [10] Koji Fukagata. Towards quantum computing of turbulence. *Nature Computational Science*, Vol. 2, No. 2, pp. 68–69, 2022.
- [11] 西森秀稔, 大関真之. 量子アニーリングの基礎, 第18巻. 共立出版, 東京, 2018.
- [12] Tadashi Kadowaki and Hidetoshi Nishimori. Quantum annealing in the transverse ising model. *Physical Review E*, Vol. 58, No. 5, pp. 5355–5363, 1998.
- [13] D-wave systems, inc. <https://www.dwavequantum.com/> [アクセス日: (2025-04-23)].
- [14] Navamita Ray, Tirtha Banerjee, Balu Nadiga, and Satish Karra. On the viability of quantum annealers to solve fluid flows. *Frontiers in mechanical engineering*, Vol. 8, , 2022.
- [15] Yuichi Kuya, Kazuhiko Komatsu, Kouki Yonaga, and Hiroaki Kobayashi. Quantum annealing-based algorithm for lattice gas automata. *Computers & Fluids*, Vol. 274, pp. 106238–106238, 2024.
- [16] Kenichiro Takagi, Naoki Moriya, Shiori Aoki, Katsuhiko Endo, Mayu Muramatsu, and Koji Fukagata. Implementation of spectral methods on Ising machines: toward flow simulations on quantum annealers. *Fluid dynamics research*, Vol. 56, No. 6, p. 61401, 2024.
- [17] Barrett Baldwin and Harvard Lomax. Thin-layer approximation and algebraic model for separated turbulent flows. *AIAA Paper*, No. 78-257, 1978.
- [18] Ludwig Prandtl. *Über ein neues Formelsystem für die ausgebildete Turbulenz*. Nachrichten der Akademie der Wissenschaften zu Göttingen, Mathematisch-Physikalische Klasse. Vandenhoeck & Ruprecht, 1945.
- [19] Openjij. <https://www.openjij.org/> [アクセス日: (2025-04-23)].
- [20] 日本航空宇宙学会, 鈴木宏二郎, 安倍賢一, 亀田正治. 粘性流体力学. 航空宇宙工学テキストシリーズ. 丸善出版, 2017.
- [21] Peter A. Davidson. *Turbulence: an introduction for scientists and engineers*. Oxford University Press, Oxford, 2nd edition, 2015. (益田重明 (訳) . 乱流 第2版, 森北出版, 東京, 2016) .