

바닥 상태 계산을 위한

난수 기반 거둬제공 양자 알고리즘의 개발 및 검증

고등과학원 최상국 교수

E sangkookchoi@kias.re.kr

기존의 바닥 상태 양자 알고리즘들이 가진 문제점인, 수렴성 불분명, 혹은 비싼 양자 회로 설계 의존성을 동시에 해결한 새로운 난수 기반 거둬 제공 양자 알고리즘을 개발하였다. 또한, 개발된 알고리즘을 실제로 적용하여 이론 및 수치적으로 검증하였다.

연구 배경

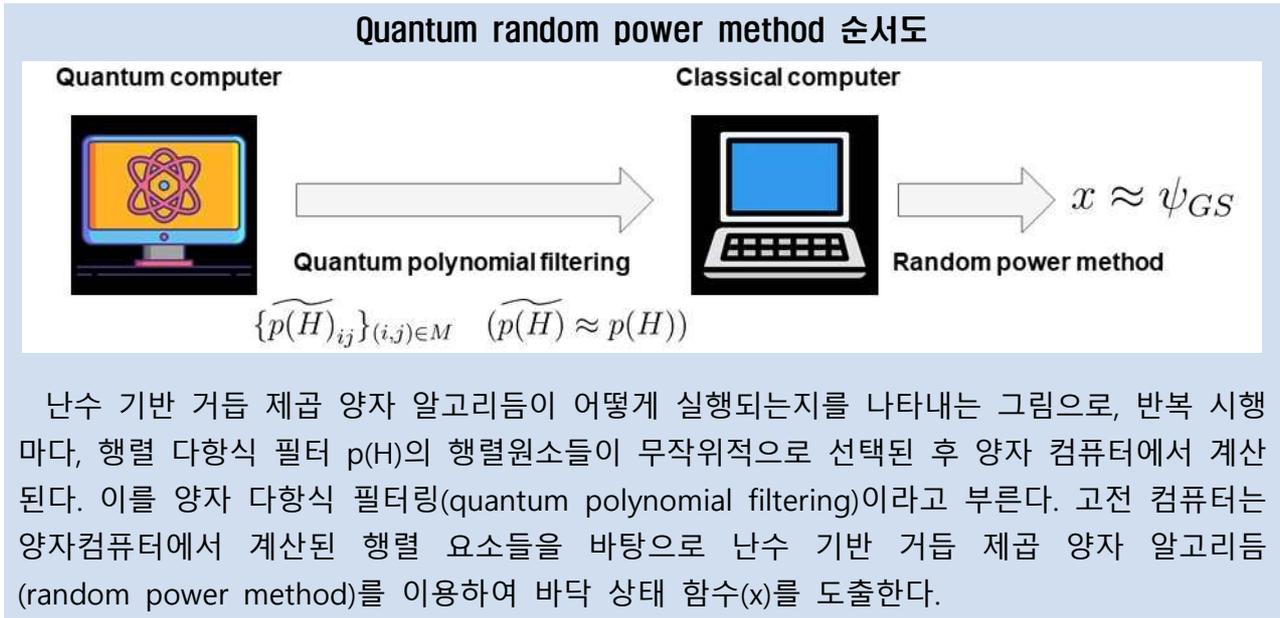
바닥 상태(ground state) 계산은 계산화학, 물질과학, 양자 정보 과학에서 오랫동안 연구되어 온 중요한 문제이다. 이와 관련하여, 최근 양자 컴퓨터 기술이 발전함에 따라 양자컴퓨팅을 기반으로 새로운 바닥 상태 알고리즘이 개발되고 있다. 이러한 알고리즘 중에서, 많은 주목을 받는 두 가지 방법으로 변분 양자 고유값 솔버(variational quantum eigensolver, VQE)와 양자 위상 계산(quantum phase estimation, QPE)이 있다.

VQE의 경우 현재 기술, 즉 NISQ(noisy intermediate-scale quantum)¹⁾ 기계에서 구현할 수 있는 알고리즘이지만, 바닥 상태로의 수렴성이 보장되어 있지 않다는 단점을 가지고 있다. QPE의 경우, 바닥 상태로의 수렴성 보장은 증명되었지만, 요구되는 양자 회로 복잡도가 현재 기술로는 구현하기 어렵다.

1) **Noisy Intermediate-Scale Quantum(NISQ)**은 양자 컴퓨터의 현재 상태를 설명하는 개념으로, 잡음(노이즈)이 많은 중간 규모의 양자 컴퓨터를 의미한다. 현재의 양자 컴퓨터는 수백 개의 큐비트를 다룰 수 있는 정도이지만, 아직 대규모 양자컴퓨팅(수천~수백만 개의 큐비트)을 실현할 수 있는 상태는 아니다. 그리고 계산 오류를 일으키는 잡음(노이즈)이 많으며 이는 계산의 정확성에 영향을 미친다. NISQ 시대의 양자 컴퓨터는 아직 실용적이진 않지만, 특정 문제나 최적화 작업에서 고전 컴퓨터보다 더 효율적인 결과를 낼 수 있는 가능성을 탐색하는 데 중점을 두고 있다.

연구 내용

연구팀은 이 연구를 통해 크게 두 가지 중요한 성과를 이루었다. 본 연구를 통해 개발한 난수 기반 거듭제곱 양자 알고리즘은 수렴성이 보장되면서, 합리적인 양자 회로 복잡도를 가진다.

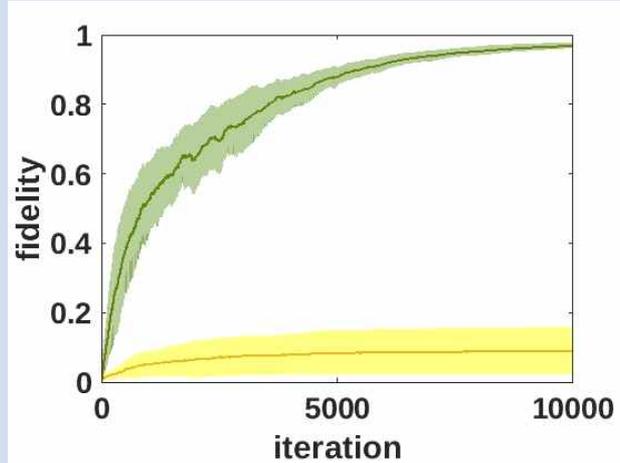


이 알고리즘은 크게 두 부분으로 나뉜다. 첫 번째로, 양자 다항식 필터링(quantum polynomial filtering) 기술을 제시하여 계산복잡도 측면에서 수렴성을 가속화하는 방법을 찾았다. 두 번째로, 이 기술을 활용하기 위한 확률적 알고리즘을 제시하였다. 본 알고리즘은 각 반복 시행 당(per-iteration) 문제 크기에 대해 다항 시간 계산복잡도²⁾를 따르면서 수렴성이 보장된다.

결과적으로 연구팀에서는 최초로 양자컴퓨팅 기반의 확률적 지수 방법인 난수 기반 거듭제곱 양자 알고리즘(quantum random power method)을 개발하였다.

2) **시간 계산 복잡도(computational time complexity)**은 알고리즘이 문제를 해결하는 데 필요한 계산 자원의 양이 입력 크기에 따라 어떻게 증가하는 가를 나타내는 개념이다. 일반적으로 입력 크기를 n 이라 하고, 알고리즘의 실행 시간이 n 에 대한 다항식 형태로 증가하면 다항 시간 계산복잡도를 갖는다고 말한다.

Hubbard model에 대한 바닥 상태 계산 시뮬레이션 결과



계산된 바닥 상태 함수(x)가 반복 시행에 따라 정답에 어떻게 근접하는지를 보여주는 그림이다. Fidelity는 그 값이 1에 가까울수록 계산 결과가 정답에 가까움을 보여준다. 양자 다항식 필터링(quantum polynomial filtering)을 사용한 경우(초록색 그래프), 양자 다항식 필터링을 적용하지 않은 경우(노란색 그래프)보다 1에 빠르게 수렴함을 알 수 있다.

논문 Quantum random power method for ground state computation
(arXiv, 2024)

[논문 보기](#)

차별성 및 우수성

연구팀이 개발한 새로운 바닥 상태 양자 알고리즘은 양자-고전 하이브리드 알고리즘으로, 기존의 바닥 상태 양자 알고리즘들의 단점을 수렴성 및 양자 회로 복잡도 측면에서 극복했다. 기존의 VQE와 비교하여, 이 알고리즘은 바닥 상태로의 수렴성이 보장된다. 그리고 QPE를 개선한 필터링 방식의 양자 알고리즘들과 비교하여 훨씬 더 낮은 양자 회로 복잡도를 요구하여 크게 개선된 구현 가능성을 가진다. 마지막으로, 이론적 증명에 그치지 않고 여러 시뮬레이션을 통해 제안한 알고리즘의 타당성을 검증했다.

파급효과 및 활용계획

바닥 상태 계산을 넘어 들뜬 상태 계산(excited state computation)에도 활용될 수 있고, 데이터 분석에서 주요소 분석(principal component analysis)에도 활용될 수 있다. 또한, 기존의 VQE는 수렴성 보장을 위해 더 깊은 양자 회로 설계를 요구할 수 있지만, 연구팀의 난수 기반 거듭제곱 양자 알고리즘을 통해 더 얇은 양자 회로를 가지고도 바닥 상태의 수렴성을 구현할 수 있기 때문에 국내외 많은 연구그룹의 양자 고유 벡터 계산 연구를 촉진할 것이라 기대된다.