

양자얽힘 측정을 이용한 효율적인 양자광학 VQE 시뮬레이터

한국과학기술연구원 김용수 박사

E yong-su.kim@kist.re.kr

본 연구는 단일 광자의 편광과 경로 자유도를 동시에 활용하는 양자광학 VQE(variational quantum eigensolver) 시스템을 구현하였다. 선형 광학 소자인 편광 빔 분리기를 이용하여 편광 큐비트와 경로 큐비트 간 결정론적 CNOT 연산을 구현하고 이를 통해 추가적인 2큐비트 연산 부담 없이 양자얽힘 측정이 가능한 시스템을 개발하였다. 2큐비트 반강자성 하이젠베르크 모델과 He-H^+ 양이온 해밀토니안에 대한 바닥 상태 에너지 계산 실험을 통해 측정 설정 수를 크게 줄이고 실험적 오류에 대한 내구성을 검증하였다.

연구 배경

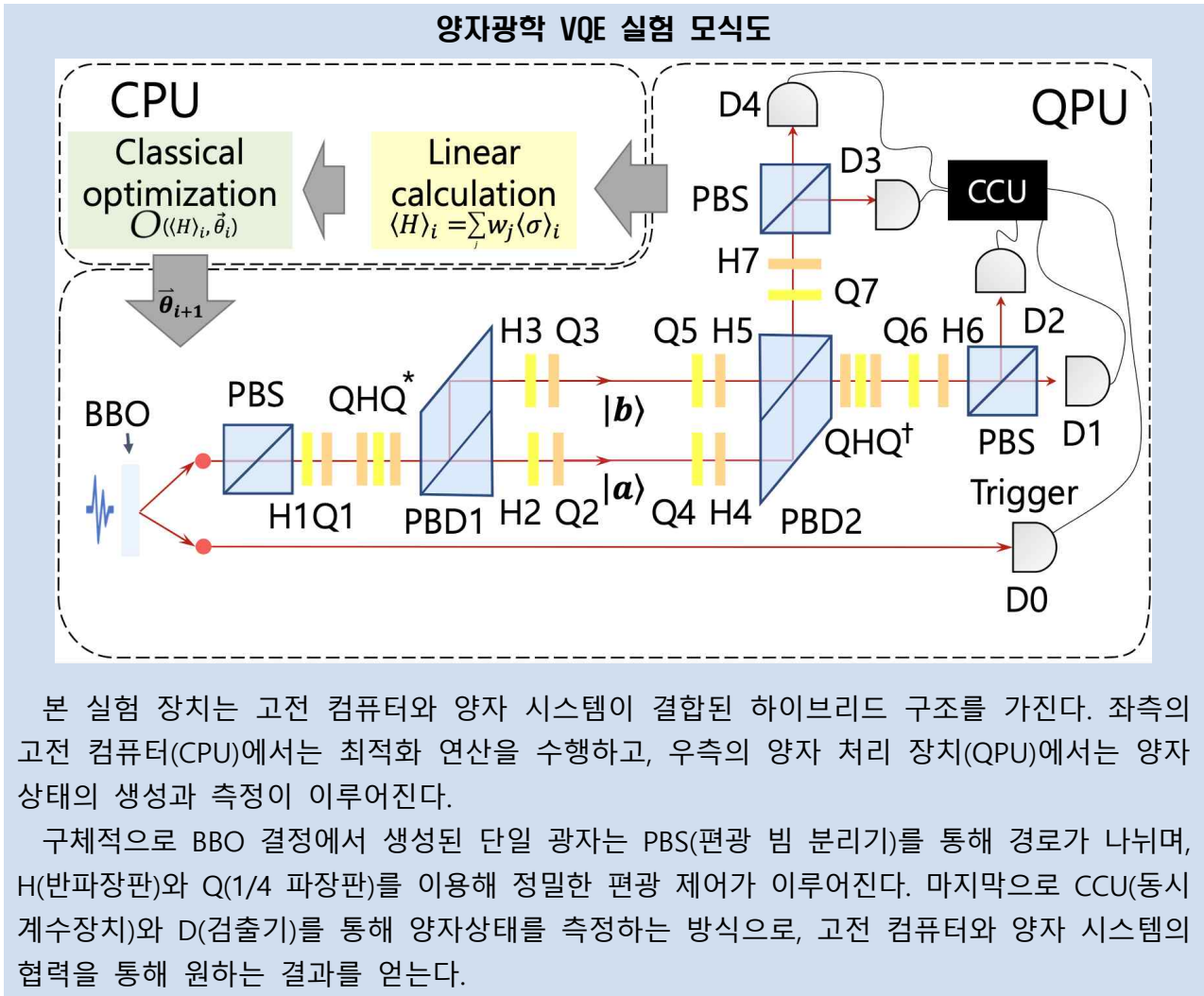
양자 컴퓨팅 기술의 급속한 발전으로 NISQ(noisy intermediate-scale quantum)¹⁾ 시대가 열렸으나, 현재는 제한된 큐비트 수와 상당한 수준의 오류로 인해 실용적 응용이 어려운 상황이다. 이러한 상황에서 양자 시스템과 디지털 컴퓨터의 장점을 결합한 하이브리드 알고리즘인 VQE(variational quantum eigensolver)는 NISQ 장치의 가장 유망한 응용 후보 중 하나로 주목받고 있다. VQE는 단일 큐비트 측정만으로도 구현이 가능하고, 최적화 과정에서 잘 발달한 고전 알고리즘을 활용할 수 있으며, 분자의 바닥 상태 에너지 계산과 같은 실용적 문제 해결이 가능하다는 장점이 있다.

VQE에서는 목표 상태에 최대한 근접한 양자상태를 생성하기 위해 양자 회로의 매개 변수들을 반복적으로 최적화하는 과정이 필수적이다. 그러나 VQE는 큐비트 개수가 증가함에 따라 필요한 측정 횟수와 최적화해야 할 매개변수가 급격히 증가하는 근본적인 한계가 있다. 이러한 문제를 해결하기 위해 양자얽힘 측정을 활용하여 측정 셋업 개수를 줄이는 방법이 제안되었으나, 이는 추가적인 2큐비트 게이트가 필요해 실험적 오류가 증가할 수 있다는 새로운 문제를 야기하고 있다.

1) NISQ(noisy intermediate-scale quantum) : 현재 개발 중인 양자 컴퓨터의 발전 단계를 일컫는 용어로 50~1,000개 정도의 큐비트를 가지고 있으나, 노이즈와 오류에 취약한 특성을 지닌 양자 컴퓨터

연구 내용

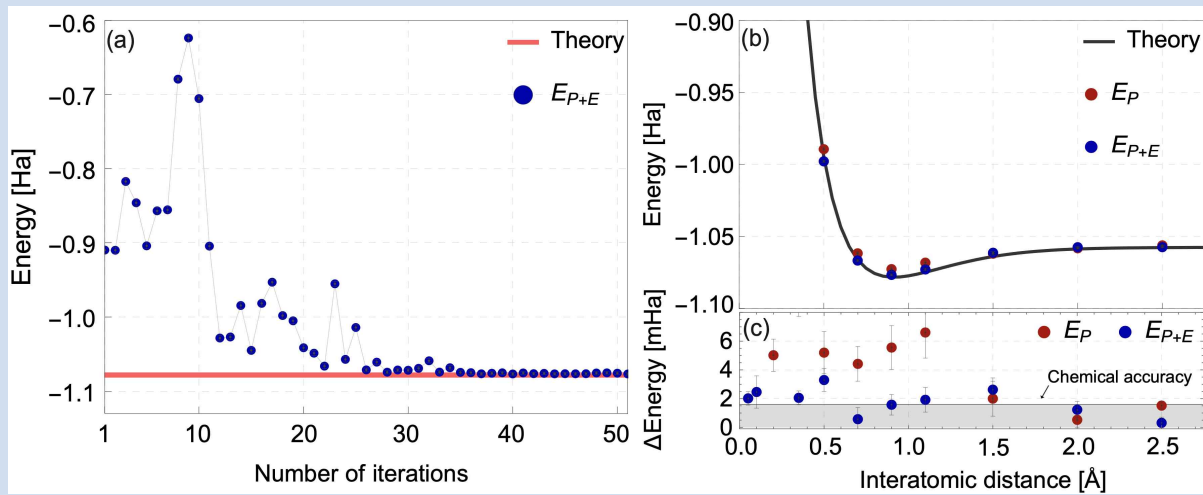
본 연구에서는 단일 광자의 편광과 경로 자유도²⁾를 동시에 활용하는 양자광학 VQE 시스템을 이용하여 구현하였다. 선형 광학 소자³⁾인 편광 빔 분리기(polarizing beamsplitter, PBS)를 활용하여 편광 큐비트와 경로 큐비트 간 결정론적 CNOT 연산⁴⁾을 구현했으며, 이를 통해 추가적인 2큐비트 연산 부담 없이 양자얽힘 측정이 가능해졌다.



- 2) **편광과 경로 자유도** : 빛의 특성을 나타내는 두 가지 성질로 편광은 빛의 전기장이 진동하는 방향을, 경로는 빛이 이동하는 공간상의 경로를 의미
- 3) **선형 광학 소자** : 빛의 진행 방향이나 특성을 바꾸는 장치로, 렌즈, 거울, 빔 분리기 등이 해당. 이러한 소자들은 빛의 기본적인 특성을 유지하면서 빛을 조작 가능
- 4) **결정론적 CNOT 연산** : CNOT(controlled NOT) 연산은 양자 컴퓨팅의 기본 연산 중 하나로, 두 큐비트 간의 상호작용을 통해 하나의 큐비트 상태에 따라 다른 큐비트의 상태가 변하는 연산. '결정론적'이란 연산이 100% 성공률로 수행됨을 의미

구체적으로 편광판을 이용한 정밀한 양자상태 제어, 단일 광자 검출 및 동시계수 시스템, 광경로의 상대적 위상 보정 시스템 등을 구축하였다. 실험 검증을 위해 2큐비트 반강자성 하이젠베르크 모델⁵⁾과 He-H⁺ 양이온 해밀토니안⁶⁾에 대한 바닥 상태 에너지 계산 실험을 수행하여, 각 모델에 대해 기존 파울리 측정 방식⁷⁾과 얽힘 측정 방식을 비교했다. 또한, 편광판 각도 오차와 같은 양자상태 측정 장치의 오류에 대한 내구성을 분석하고 몬테카를로 시뮬레이션⁸⁾을 통해 이를 검증했다.

양자광학 VQE를 이용한 He-H⁺ 양이온 바닥 상태 에너지 계산 결과



- (a) 반복 계산 횟수에 따른 에너지 변화를 나타내며, 약 50회의 반복 후 실험값(파란 점)이 이론값(빨간 선)과 거의 일치하는 결과를 보여준다.
- (b) 원자 간 거리에 따른 에너지 변화를 보여주며, 이론값(검은 선)과 두 가지 다른 측정 방식으로 얻은 실험값(빨간점과 파란점)이 잘 일치하는 것을 보여준다.
- (c) 원자 간 거리에 따른 에너지 차이를 나타내며, 화학적 정확도 범위 내에서 결과가 얻어졌음을 보여준다. 전체적으로 이 그래프들은 실험 결과가 이론적 예측과 잘 일치하며, 화학적으로 의미 있는 정확도를 달성했음을 입증한다.

논문

Photonic variational quantum eigensolver using entanglement measurements
(Quantum Science and Technology, 2024)

[논문 보기](#)

- 5) 2큐비트 반강자성 하이젠베르크 모델 : 자석의 성질을 띤 입자들이 서로 반대 방향으로 정렬하려는 경향을 보이는 양자 물리 모델
- 6) He-H⁺ 양이온 해밀토니안 : 헬륨과 수소로 이루어진 간단한 분자 시스템
- 7) 파울리 측정 방식 : 양자상태를 측정하는 기본적인 방법으로, X, Y, Z 세 가지 방향에서 큐비트의 상태를 개별적으로 측정하는 방식
- 8) 몬테카를로 시뮬레이션 : 무작위 표본 추출을 통해 복잡한 시스템의 행동을 예측하고 분석하는 수치적 계산 방법으로, 실험 결과의 신뢰성을 검증하는 데 사용

차별성 및 우수성

본 연구의 가장 큰 차별성은 선형 광학 소자만으로 결정론적 CNOT 연산을 구현하고, 추가적인 실험 장치 없이 양자얽힘 측정을 실현하고 이를 VQE 구현에 활용했다는 점이다.

단일 광자의 다중 자유도⁹⁾를 활용한 효율적 구현을 통해 양자 시스템의 에너지 상태를 측정하는 실험 구성의 수를 크게 줄일 수 있었다. 구체적으로, 자성 물질의 특성을 모사하는 2큐비트 하이젠베르크 모델의 경우 기존 3개의 측정 장치 설정이 필요했던 것을 1개로, 분자 구조 연구에 활용되는 He-H⁺ 양이온의 경우 4개의 측정 장치 설정이 필요했던 것을 3개로 줄일 수 있었다. 이는 양자상태를 측정하는 데 필요한 전체 실험 시간을 대폭 감소시키는 결과를 가져왔다.

특히 편광판 각도 오차와 같은 실험적 오류에 대해 기존 방식 대비 우수한 성능을 보였으며, 단일 측정 설정으로 인한 시스템적 오류 상쇄 효과를 확인했다. 또한, 이론적 제안에 그치지 않고 실제 구현 및 검증을 통해 화학적 정확도¹⁰⁾를 달성했다는 점에서 큰 의미가 있다.

파급효과 및 활용계획

본 연구 성과는 광학적 양자 처리 장치의 확장성을 향상시키고, 더 복잡한 양자 계산 구현을 위한 실험적 기반을 제공할 것으로 기대된다. 분자 구조 및 에너지 계산, 양자 화학 시뮬레이션, 최적화 문제 해결, 양자 머신러닝 알고리즘 구현 등 다양한 분야에 활용될 수 있다. 향후 상태 준비 과정의 실험적 자원 절감 방안 연구, 더 큰 규모의 시스템으로의 확장 연구, 오류 완화 기술과의 결합 연구 등을 진행할 예정이다.

산업적으로는 양자 컴퓨팅 하드웨어 개발, 실용적 양자 알고리즘 구현, 양자 센싱 및 계측 기술 향상 등에 활용될 수 있으며, 이는 NISQ 시대의 양자 컴퓨팅 실용화를 앞당기는 데 중요한 이바지할 것으로 기대된다.

9) **다중 자유도** : 하나의 물리계가 가질 수 있는 여러 가지 독립적인 특성을 의미하며, 이 연구에서는 빛의 편광과 경로라는 두 가지 특성을 활용

10) **화학적 정확도** : 화학 반응이나 분자의 특성을 예측하는 데 필요한 에너지 계산의 정확도 기준. 일반적으로 1kcal/mol(약 1.6mHa) 이내의 오차 범위를 의미