

[혁신도전형] 소재 혁신 양자시뮬레이터 개발사업

광기반 양자회로 에뮬레이터 개발 및 고전-양자 통합 화학계산

한국표준과학연구원 이창협 박사

E changhyoup.lee@kriss.re.kr

한국과학기술정보연구원 최지은 연구원

충북대학교 박재우 교수

충북대학교 정상욱 연구원

광기반 양자 회로 에뮬레이터를 개발하여 컴퓨터 간의 실시간 통신 및 고전-양자 통합 화학 계산에 성공함으로써, 양자 시뮬레이터를 활용한 계산화학 문제 해결의 기틀을 마련하였다.

연구 배경

본 연구의 최종 목표는 양자 컴퓨터를 통해 계산화학 분야의 고난도 문제를 해결하는 것이다. 양자 컴퓨터는 기존의 고전 컴퓨터로는 어려운 복잡한 계산 문제를 훨씬 효율적으로 해결할 수 있는 잠재력을 가지고 있지만, 현재의 양자컴퓨팅 기술은 아직 초기 단계에 있다. 따라서 연구팀은 양자컴퓨팅의 가능성을 간단한 화학 계산 문제에 적용해 보며 기초적인 성과를 도출하고, 이를 기반으로 더 복잡한 문제로 확장해 나가는 것을 목표로 한다.

계산화학에서 분자의 오비탈을 최적화하는 일은 분자의 특성, 반응성, 에너지를 이해하는 데 매우 중요한 과정이다. 이를 위해 사용되는 CASSCF(complete active space self-consistent field) 방법론은 특정 공간 내에서 전자 간 상호작용을 정밀하게 계산하며, 에너지를 최소화하고 전자 밀도 행렬을 계산하는 반복적 과정을 통해 최적화된 결과를 얻는다. 이 과정에서 고전 컴퓨터와 양자 컴퓨터 간의 실시간 데이터 통신이 필수적인 요소가 된다.

연구팀은 이를 위해 고전 컴퓨터에서 양자 시뮬레이터를 모사하여 고전-양자 통합 실행의 가능성을 탐구하고, 향후 실제 양자 시뮬레이터로 이를 대체하는 것을 목표로 삼았다.

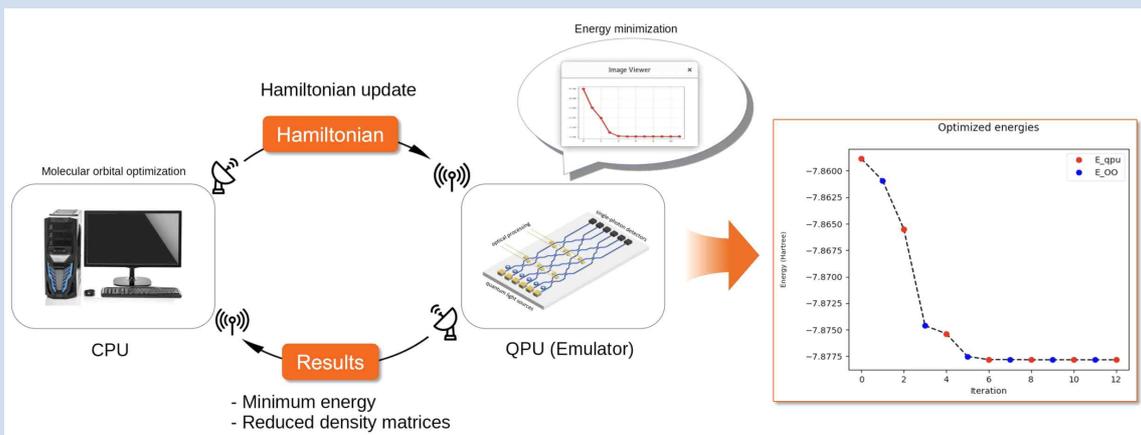
연구 내용

이번 연구를 통해 연구팀은 네 가지 주요 성과를 달성했다. 첫째, 양자 시뮬레이터의 하드웨어 특성을 반영하여 개발한 광 기반 양자 회로 에뮬레이터는 양자 회로의 실제적 동작을 시뮬레이션할 수 있도록 설계되었으며, 양자 시스템의 특성을 반영한 성능 테스트가 가능하다. 이 에뮬레이터는 고전 컴퓨터 환경에서 양자 회로의 동작을 미리 예측할 수 있어, 향후 양자 컴퓨터로의 전환을 준비하는 단계로 중요한 역할을 한다.

둘째, 고전 컴퓨터와 양자 컴퓨터가 실시간으로 상호작용할 수 있는 통합 실행 환경을 구축하였다. 이러한 환경을 통해 양자 컴퓨팅과 고전 컴퓨팅이 함께 작업할 수 있는 하이브리드 컴퓨팅이 가능해졌으며, 이는 고전적인 방식으로 해결하기 어려운 문제를 양자 컴퓨터와 협력하여 효율적으로 해결할 수 있는 가능성을 제시한다.

셋째, 화학 계산 문제 해결에 양자 시뮬레이터를 활용할 수 있는 방법론을 제안하였다. CASSCF와 같은 다체 양자 화학 문제에서 양자 시뮬레이터의 가능성을 탐구하였으며, 이를 통해 양자 컴퓨터가 계산화학의 복잡한 문제들을 해결하는 데 유용한 도구가 될 수 있음을 입증하였다. 마지막으로, 앞의 세 가지 개발 성과를 통합하여 고전-양자 통합 실행이 실제로 가능함을 검증하였다. 이 통합 작업을 통해 양자컴퓨팅의 실질적인 응용 가능성과 미래 발전 가능성을 확인하는 기초를 마련했다.

고전-양자 통합 기반 화학 문제 계산



위 그림은 CPU와 QPU(에뮬레이터)가 협력하여 화학 계산 문제를 해결하는 과정을 보여준다. CPU는 먼저 에너지 최적화를 위한 Hamiltonian 정보를 준비하여 QPU로 전송하고, QPU는 VQE 알고리즘을 사용해 Hamiltonian의 최소 에너지를 찾는다. QPU는 계산한 최소 에너지 값과 전자 밀도 행렬값을 CPU로 다시 전달하고, CPU는 이를 바탕으로 추가 계산을 수행한다. 이 과정은 CPU와 QPU 간에 여러 차례 반복되어 에너지값이 안정된 최저치에 도달하면 전체 계산이 종료된다.

이러한 고전-양자 통합 실행 방식은 고전 컴퓨터와 양자 컴퓨터가 함께 복잡한 화학 문제를 효율적으로 해결할 수 있음을 보여준다.

차별성 및 우수성

본 연구는 계산화학 문제에 양자컴퓨팅을 혁신적으로 적용한 점에서 차별성을 가진다. 특히, 양자 시뮬레이터의 하드웨어 특성을 반영한 광 기반 양자 회로 에뮬레이터는 기존의 고전적 컴퓨팅 방식과 차별화된 접근으로, 양자 컴퓨팅이 고전적 한계를 뛰어넘는 고효율 계산 방식을 제공할 수 있음을 보여주었다. 또한, CASSCF와 같은 복잡한 화학 계산 문제를 해결하기 위한 고전-양자 하이브리드 통합 실행 환경을 구축함으로써 고전적 계산을 넘어선 양자 계산의 가능성을 확인하였다.

이러한 점에서 본 연구는 단순히 새로운 방법을 제안하는 데 그치지 않고, 실제 문제 해결에 양자 컴퓨팅을 적용할 수 있는 실질적 방안을 제시하고 이를 검증한 성과를 통해, 향후 양자 시뮬레이터를 실제로 활용하는 기반을 마련한 연구로서 우수성을 갖춘다.

파급효과 및 활용계획

이번 연구는 향후 고성능 양자 시뮬레이터의 성능을 미리 시험하고 그 활용성을 검증하는 데 중요한 역할을 할 것이다. 현재 개발된 광 기반 양자 회로 에뮬레이터와 고전-양자 하이브리드 실행 환경은 계산화학의 다양한 문제뿐 아니라, 양자광학과 같은 다른 양자 연구 분야에도 폭넓게 응용 가능하다. 특히, 이번 연구에서 제안된 방법론은 CASSCF와 같은 복잡한 화학 계산 문제에 양자컴퓨팅을 적용할 수 있는 가능성을 열어, 고전적 계산 방식으로는 어려웠던 분자구조의 최적화, 전자 상관 계산 등 여러 난제를 해결할 수 있는 새로운 접근법을 제시한다.

이는 산업적·학술적 활용 범위를 확장할 수 있는 계기를 제공하여, 양자 기술을 필요로 하는 다양한 분야에 영향을 미칠 것이다. 궁극적으로, 양자 컴퓨터가 현재의 고전적 계산 한계를 넘어 새로운 가능성을 열어줄 수 있는 도구가 될 수 있음을 보여주며, 양자 시뮬레이터가 실제 양자 컴퓨터로 대체될 수 있는 기틀을 마련하는 데 이바지할 것이다.