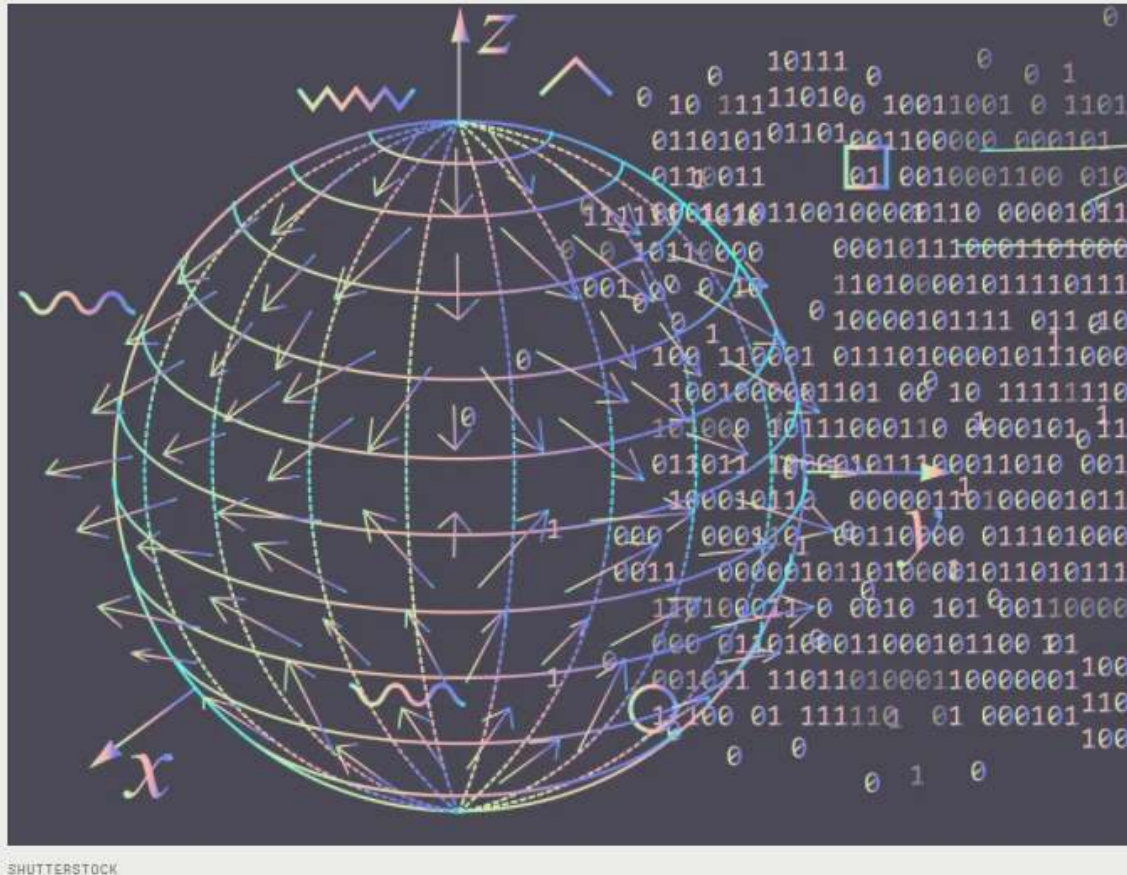


IEEE Spectrum FOR THE TECHNOLOGY INSIDER

Quantum Computers Getting Smarter at Simulating Chemistry > Largest simulations to date also scale back noise

BY CHARLES Q. CHOI | 17 MAR 2022 | 3 MIN READ | □



양자 컴퓨터, 화학 시뮬레이션 능력 향상 지금까지 가장 큰 시뮬레이션에서도 노이즈 축소

CHARLES Q. CHOI
2022년 3월 17일

Google의 Sycamore 양자 프로세서를 사용하여 과학자들은 지금까지 양자 컴퓨터와 관련된 가장 큰 화학 시뮬레이션을 수행했습니다. 그들은 양자 회로에서 흔히 볼 수 있는 노이즈에 저항하는 데 도움이 될 수 있는 새로운 기술을 사용했습니다.

양자 컴퓨터는 이론적으로 고전 컴퓨터로는 풀 수 없는 문제에 대한 답을 찾을 수 있는 양자 이점을 얻을 수 있습니다. 양자 컴퓨터에 큐비트라고 알려진 구성 요소가 많을수록 컴퓨터의 연산 능력은 기하급수적으로 증가할 수 있습니다.

양자 컴퓨터의 가장 가까운 기간의 응용 프로그램은 화학이 될 수 있습니다.- 예를 들어, 차세대 배터리 또는 신약에 대한 통찰력을 제공할 수 있는 분자 반응 시뮬레이션이 있습니다. 이러한 종류의 시뮬레이션을 수행하는 것은 분자가 커질수록 기하급수적으로 더 복잡해지며, 이는 기존 컴퓨팅에 있어서 압도적인 도전이 될 수 있지만, 양자 컴퓨터가 극복할 수 있는 것이기도 합니다.

새로운 연구에서 Google Quantum AI, Columbia 대학 및 Berkeley, California 대학의 연구원 그룹은 Monte Carlo 알고리즘을 사용했는데, 이는 기본적으로 이러한 게임의 많은 무작위 시뮬레이션을 통해 솔루션에 도달하는 게임으로 문제를 처리합니다. 특히, 그들은 전자를 포함한 입자 종류인 페르미온의 양자 물리학 모델을 위해 설계된 몬테카를로 알고리즘에 의존했습니다.

일반적으로 고전 컴퓨터에서 실행되는 페르미온 양자 몬테카를로 알고리즘은 더 큰 분자를 시뮬레이션하는 데 적합하지 않습니다. 연구원들은 고전 및 양자 연산을 결합한 하이브리드 접근 방식이 페르미온 양자 몬테카를로 알고리즘이 이러한 장애물을 극복하는 데 도움을 줄 수 있음을 발견했습니다.

실험에서 과학자들은 Google의 53큐비트 양자 컴퓨터에서 최대 16큐비트를 사용하여 에너지가 가장 적은 분자의 바닥 상태를 계산했습니다. 분자의 바닥 상태는 소유한 전자의 수와 이러한 전자가 핵을 도는 경로와 같은 요인에 의해 영향을 받습니다.

연구원들은 H4 분자, 질소 분자 및 고체 다이아몬드를 시뮬레이션했습니다. 여기에는 120개나 되는 오비탈이, 즉 하나 이상의 전자에 의해 원자나 분자에 형성된 전자 밀도 패턴인, 포함됩니다. 이것은 양자 컴퓨터의 도움으로 지금까지 수행된 가장 큰 화학 시뮬레이션입니다.

고전적인 컴퓨터는 실제로 이 페르미온 양자 몬테카를로 시뮬레이션의 대부분을 처리합니다. 양자 컴퓨터는 계산적으로 가장 복잡한 마지막 단계 - 양자 컴퓨터와 고전 컴퓨터에 의해 만들어진 바닥 상태 추정치 간의 차이를 계산하는 -에 들어갑니다.

양자 컴퓨팅을 사용한 화학 시뮬레이션에 대한 이전 기록은 12큐비트와 VQE(Variational Quantum Eigensolver)로 알려진 일종의 하이브리드 알고리즘을 사용했습니다. 그러나 VQE는 이 새로운 하이브리드 접근 방식에 비해 많은 제한 사항을 가지고 있습니다. 예를 들어, VQE에서 매우 정확한 답변을 원할 때, 양자 회로의 소량의 노이즈라도 "에너지 또는 기타 속성에 대한 추정치에서 너무 큰 오류를 유발할 수 있습니다"라고 캘리포니아 마운틴 뷰에 있는 Google Quantum AI의 양자 물리학자 William Huggins 공동 연구 저자는 말합니다.

또한 VQE는 "매우 정확한 답을 얻기 위해 충분한 측정을 수행하는 데 오랜 시간이 걸릴 수 있습니다"라고 연구 공동 저자인 뉴욕 컬럼비아 대학의 양자 물리학자인 이준호 공동 연구 저자는 말합니다. "게다가, 우리는 종종 기저 상태에 대한 좋은 근사치를 준비하기 위해 양자 회로의 매개

변수를 최적화해야 하며, 이는 전체 프로세스에 더 큰 오버헤드가를 추가할 수 있습니다."

이 접근 방식의 잠재적인 우려 사항 중 하나는 큐비트가 깨지기 쉽고 오류가 발생하기 쉽다는 것입니다. 그러나 VQE는 바닥 상태를 매우 정확하게 추정하기 위해 양자 회로에서 노이즈가 거의 없지만, 이 새로운 기술은 그렇지 않습니다. 즉, "때로는 더 많은 노이즈로 벗어날 수 있습니다"라고 Huggins는 말합니다. "우리는 이미 사람들이 수행할 수 있었던 가장 큰 VQE를 뛰어 넘었고, 오늘날 우리가 사용하는 시끄러운 양자 컴퓨터에서도 훨씬 더 크게 확장할 수 있다고 생각합니다."

"사실, 우리는 최대 규모의 실험에서도 칩의 노이즈가 제한 요소가 아니라는 증거를 논문에서 제공했습니다."라고 Lee는 말합니다. 오히려 우리는 바닥 상태에 근접하는 회로 설계에 대한 야심이 충분하지 않았습니다. 이것은 우리가 새로운 이론적 도구를 개발하지 않고도 현재 접근 방식을 더 확장할 수 있는 좋은 기회가 있음을 말하며, 잡음이 있는 장치에서 양자 화학의 정확한 계산을 수행하는 것이 얼마나 어려운지를 고려할 때 이는 희망의 진정한 등불입니다."

이 새로운 기술은 현재 가장 우수한 고전적 방법 못지않은 수준의 정확도를 달성했습니다. 향후 그들은 "고전적인 알고리즘에 도전이 되는 문제를 공격하는 것이 실용적이 되도록 우리가 충분히 발전할 수 있기를 바랍니다"라고 Huggins는 말합니다. 하지만, "결국, 우리는 오늘날 또는 심지어 미래에 우리가 가지고 있는 시끄러운 양자 컴퓨터를 사용하여 양자 화학에 대한 실질적인 이점을 얻는 것이 극도로 어려울 것으로 예상합니다."

연구원을 위한 다음 단계는 "현재 Sycamore 세대의 노이즈에 의해 부과된 한계에 도달하려고 시도하는" 더 큰 실험으로 가는 것이라고 Lee는 말합니다. "우리가 새로운 알고리즘을 개발하고 이해하는 데 진전을 보임에 따라, 하드웨어와 이를 제어하는 소프트웨어의 새로운 발전이 우리의 작업을 계속 더 쉽게 만들어 줄 것으로 기대하고 있습니다."

과학자들은 네이처(Nature) 저널에 3월 16일 온라인으로 그들의 발견을 자세히 설명했습니다.

[출처]

<https://spectrum.ieee.org/quantum-chemistry-largest>