

# 전하 보존 알고리즘, 양자 시뮬레이션 간소화

(2024.11.06., 양자정보연구지원센터)

## □ 전하 보존 알고리즘, 더 빠른 결과를 위해 양자 시뮬레이션 간소화

- 양자 시스템에서 들뜬 상태 계산의 중요성
  - 양자 화학, 고에너지 물리학, 핵물리학 등 다양한 분야에서 필수적임
  - 전통적 계산 방법은 높은 계산 비용 및 깊은 회로, 다수의 제어 유니터리가 필요함
  - 현재의 양자 하드웨어에서 비실용적이며 오류와 노이즈에 취약함
- CPVQD(Charge-Preserving Variational Quantum Deflation) 알고리즘의 개발 배경과 특징
  - 연구팀: NVIDIA, Stony Brook 대학교, Brookhaven 국립 연구소
  - 기존의 변분 양자 디플레이션(VQD) 알고리즘은 들뜬 상태 계산에 효과적이나 제어 유니터리에 의존해 비효율적임
  - 전하 보존을 통해 효율성을 개선한 전하 보존 VQD(CPVQD) 알고리즘 개발
  - (CPVQD 핵심 개념) 대칭성과 보존 전하를 사용하여 계산의 효율성 향상, 특정 전하 섹터로 계산을 제한하여 문제의 차원 축소
- CPVQD 주요 방법론
  - (투영 방법, Projection Method) 해밀토니안을 원하는 전하 섹터에 투영하여 불필요한 상태 배제
  - (제약 방법, Constraint Method) 전하 보존을 보장하는 추가 항을 해밀토니안에 추가하여 최적화 과정 개선
  - 큐비트 수는 유지하되 계산의 초점이 적절한 상태로 제한됨
- 성능 및 적용 사례
  - 최대 24 큐비트 시스템에서 시뮬레이션을 통해 성능 향상 입증

- (양자 화학) 수소(H<sub>2</sub>) 및 헬륨 하이드라이드 이온(HeH<sup>+</sup>)의 들뜬 상태 계산
  - (핵물리학) Schwinger 모델(gauge theory in QED) 등 양자장 이론의 스펙트럼 및 질량 갭 계산
  - 문제의 차원을 줄여 계산 효율성을 높이고 정확성을 유지함
- 결과 및 실험 환경
    - NVIDIA의 CUDA-Q 플랫폼(open-source for hybrid quantum-classical computing) 및 NERSC의 Perlmutter 시스템 사용
    - 클래식 GPU와 양자 프로세서를 통합해 빠른 수렴과 최적화 달성
    - (한계점) 잡음과 결잃음은 양자 하드웨어에서 결과 정확도 저하시킬 가능성 있음
    - 노이즈 모델링 없이 GPU 기반 시뮬레이션이 수행되어 실제 환경에서는 제약이 따름
  - CPVQD의 한계와 향후 과제
    - (제한점) 제약 및 투영 방법은 특정 조건에서 알고리즘의 비수렴 문제 발생 가능
    - 복잡한 전하 분포를 가진 시스템에서 정확도 저하 가능성
    - (향후 발전 방향) 보다 큰 시스템으로 확장 시 추가적인 최적화 필요
    - Subspace Search VQE(SSVQE) 및 ADAPT-VQE 등의 다른 알고리즘으로의 확장 가능성 제시
  - 결론
    - CPVQD 알고리즘은 기존 방법의 한계를 극복하고 계산 효율성을 높이며, 다양한 분야의 양자 연구에 기여할 가능성이 큼

(원문)

1. <https://thequantuminsider.com/2024/10/21/charge-preserving-algorithms-streamline-quantum-simulations-for-faster-results/>