

Quantum Reservoir Computing, 신약 개발에 돌파구 제시

(2025.09.03., 양자정보연구지원센터)

□ Quantum Reservoir Computing, 데이터가 부족할 때 신약 개발에 새로운 돌파구 가능성 제시

○ 연구 개요

- 신약 개발 과정에서 데이터 부족은 큰 문제임. 희귀질환 연구나 초기 단계 신약 후보물질 발굴에서는 데이터 수집이 어렵고 비용도 많이 소요됨
- 머신러닝은 데이터가 풍부할 때 효과적이거나, 데이터가 작고 잡음이 많은 상황에서는 예측 불안정성이 커짐
- 기존 머신러닝의 한계를 극복하기 위해 양자 머신러닝의 한 갈래인 Quantum Reservoir Computing(QRC) 적용 가능성을 탐구
- 적은 데이터 환경에서 QRC가 안정적이고 신뢰할 수 있는 분류 성능을 제공할 수 있는지 검증

○ 연구 방법

- (데이터셋) Merck Molecular Activity Challenge 데이터셋 활용. 분자 구조를 수치화한 분자 지문(descriptor)과 생물학적 활성 데이터를 포함
- 특히 100~800개의 소규모 데이터셋을 추출해 실험 진행
- (방법론) QRC 접근법: 분자 지문 데이터를 중성 원자 배열(neutral-atom array) 기반 양자 시뮬레이터에 인코딩 → 양자역학적 진화 과정에서 새로운 특징(feature) 생성 → 측정값을 추출해 고전 머신러닝 모델(Random Forest 등)에 입력
- 비교 모델: (1) 고전 머신러닝 단독 모델, (2) 고전적 reservoir computing 모델
- 설명 가능성 확보: SHAP(Shapley Additive Explanations) 기법으로

주요 특징을 선별 후 실험

○ 실험 설계

- 데이터 크기: 100, 200, 800개 샘플 조건
- 평가: 여러 번 무작위 추출하여 결과의 일관성과 안정성 검증
- 시각화: UMAP 기법을 활용해 고차원 특징 공간을 2차원으로 투영하여 군집 형성 확인

○ 주요 결과

- (성능 비교) 소규모 데이터셋(특히 100~200개)에서는 QRC 기반 모델이 고전적 모델 대비 일관되게 우수한 성능을 보임
- 데이터셋이 800개로 커질 경우 성능 차이가 줄어들어 고전적 모델과 비슷한 수준으로 수렴
- 고전적 reservoir computing 대비 QRC는 양자 얽힘 효과 덕분에 더 나은 성능을 보여줌
- (데이터 표현력) QRC 임베딩 후 생성된 특징 공간은 원래 분자 지문보다 활성/비활성 분자의 분리도가 높아 예측을 용이하게 함
- (노이즈 내성) 하드웨어 잡음에 대해 비교적 강건성을 보였으나, 샘플링 노이즈(유한 측정 횟수에 따른 불확실성)에 민감
- 실험에서 요구되는 측정 횟수는 현재의 중성 원자 하드웨어 수준으로 충분히 실현 가능

○ 의의 및 한계

- 양자컴퓨팅이 반드시 속도나 확장성에서 고전을 압도하지 않아도, 데이터가 부족한 특수 상황에서 ‘틈새적 우위’를 제공할 수 있음을 보여줌
- 제약산업에서 고비용 실험 없이 소규모 데이터로도 초기 후보 물질 예측 성능을 개선할 가능성 제시
- QRC는 훈련 가능한 양자 회로 대신 자연스러운 양자 진화 동역

학을 활용하여, 훈련 안정성과 계산 효율성을 확보

- 성능 향상이 불확실성 구간과 근접한 경우가 있어 효과 크기가 제한적일 수 있음
 - QRC 단계 추가로 계산 부담이 늘어나, 빠른 응용보다는 연구용이나 초기 실험 단계에 적합
 - 현재 연구는 시뮬레이션 기반이며, 실제 하드웨어 적용은 향후 과제임
- 향후 연구 방향
- 실제 중성 원자 기반 양자 하드웨어 실험으로 확장 검증 필요
 - 더 다양한 데이터셋(약물 흡수, 독성, 대사 경로 등)에 적용해 일반화 가능성 탐구
 - QRC와 다른 머신러닝 기법의 하이브리드 모델 개발 가능성 검토
 - 피쳐 선택 기법의 다양화와 샘플링 최적화 전략 필요

○ 결론

- 본 연구는 Quantum Reservoir Computing(QRC) 이 소규모 데이터 환경에서 고전적 머신러닝보다 더 안정적이고 신뢰성 있는 예측 성능을 제공할 수 있음을 보여줌
- 이는 신약 개발 초기 단계에서 비용을 절감하고, 제한된 데이터로도 의미 있는 후보 물질 선별을 가능하게 하는 잠재력을 가짐
- “좋은-충분한 양자 우위(good-enough advantage)” 라는 새로운 양자 활용 패러다임을 제시함

(원문)

1. <https://thequantuminsider.com/2025/08/09/quantum-reservoir-computing-could-give-drug-discovery-a-boost-especially-when-data-is-scarce/>