

Quantinuum, AI 활용한 양자 알고리즘 자동 생성 협력 추진

(2025.12.22., 양자정보연구지원센터)

□ Quantinuum, AI 활용한 양자 알고리즘 자동 생성 협력 추진

○ 연구 배경 및 목적

- Quantinuum과 Hiverge는 대규모 언어모델(LLM)을 활용해 양자 알고리즘을 자동으로 설계할 수 있는 가능성을 실증함
- 이는 양자 하드웨어 발전과 달리, 실제 화학·물질 문제를 해결할 양자 알고리즘 설계가 여전히 어렵고 비용이 크다는 병목을 해소하기 위한 시도임
- 연구 결과는 향후 양자 소프트웨어 개발 방식 자체의 전환을 예고함

○ 기존 양자 알고리즘 개발의 한계

- (전문가 의존적 설계 구조) 변분 양자 알고리즘(VQA)은 근거리 (near-term) 양자 화학 계산의 핵심 도구이나, 연산자 선택, 매개 변수 최적화, 노이즈 제어 등 모든 단계가 전문가 판단과 반복적 시행착오에 크게 의존함
- 고충실도 양자 하드웨어 접근이 제한적이기 때문에, 불필요한 게이트나 회로 깊이는 곧바로 비용 증가로 이어짐
- (계산 복잡성 문제) 분자 전자 구조 문제(분자의 바닥상태 에너지 계산)는 전자 간 상호작용으로 인해 고전 컴퓨터에서는 계산 복잡도가 지수적으로 증가함
- 양자 컴퓨터가 이론적 해결책을 제공하지만, 실제 알고리즘은 노이즈와 깊은 회로로 인해 성능이 제한됨

○ Hive 플랫폼과 접근 방식

- (AI 기반 진화적 프로그램 합성) Hiverge의 Hive는 LLM을 ‘의사 결정자’가 아닌 “변이 연산자(mutation operator)”로 사용하는 분산 진화적 프로그램 합성 시스템임

- 연구진은 단순한 양자 화학 알고리즘 개요와 대상 분자 정보만 제공
- Hive는 단일 해답을 생성하는 대신, 실행 가능한 코드들을 진화시키며 알고리즘 공간을 탐색하고 성능이 우수한 설계를 선별함
- (자동 알고리즘 생성 성과) Hive는 최소 입력만으로도 근거리 하드웨어에서 효율적으로 동작하며, “화학적 정확도(chemical precision)”를 달성하는 성숙한 알고리즘을 생성함
- 기존 인간 설계 알고리즘 대비 양자 자원 소모를 10~100배 감소시킨 것으로 보고됨

○ Hive-ADAPT 알고리즘의 특징

- (전문가 수준의 화학적 휴리스틱 자동 발견) 생성된 알고리즘(Hive-ADAPT)은 잘 알려진 섭동 이론 기법인 “MP2(Møller-Plesset 2차 섭동)”를 초기 회로 파라미터 설정과 연산자 순서 결정에 활용함
- 이는 인간 전문가가 사용하는 전략과 유사하나, Hive는 이를 수많은 반복을 통해 체계적·정밀하게 자동 조정함
- (성능 검증 결과) 물(H_2O), 베릴륨 수소화물(BeH_2) 등 다양한 분자에서 기존 알고리즘을 안정적으로 상회하는 정확도를 달성함
- 결합 길이 변화 등 사전에 설계되지 않은 분자 구성에도 적응적 성능을 보임

○ 하드웨어 제약을 고려한 설계

- (노이즈 인지형 알고리즘 생성) Hive는 두 큐비트 게이트 수를 최소화하도록 설계 목표를 부여받음
- 이는 근거리 양자 시스템에서 가장 큰 오류 요인을 직접적으로 반영한 것임
- (실제 조건 기반 검증) 리튬 수소화물(LiH) 문제를 Quantinuum의 H2 에뮬레이터(이온트랩 기반)에서 테스트함
- 오류 완화 기법 적용 후, 계산된 에너지는 화학적 정확도 임계값 근처까지 도달함

- 양자 소프트웨어 개발에 대한 시사점
 - (개발 패러다임 전환 가능성) LLM 기반 자동 설계는 복잡한 알고리즘 공간을 수동 휴리스틱 대신 자동 탐색하는 새로운 접근을 제시함
 - Python 기반 코드와 Quantinuum InQuanto 라이브러리를 활용해 생성 결과의 투명성 · 검증 가능성을 유지함
 - (진입 장벽 완화) 사용자는 깊은 화학 · 양자 알고리즘 지식 없이도 개념적 알고리즘 개요만으로 실험 가능함
 - 이는 대규모 전문 인력을 보유하지 않은 조직에도 양자 화학 활용 기회를 제공함
- 향후 확장 및 전망
 - (완전 자동화 파이프라인 지향) 연구진은 향후 분자군 전체로의 일반화, 최적화 · 검증 · 벤치마킹까지 포함한 완전 자동 양자 알고리즘 설계 파이프라인 구축을 목표로 함
 - (화학 외 분야로의 확장) 최적화, 재료 시뮬레이션, 오류보정 양자 알고리즘 등으로 적용 범위 확장 가능성이 제시됨
 - 장기적으로는 인간이 방향을 제시하고, AI가 알고리즘을 진화 · 정제하는 인간-AI 협력형 양자 소프트웨어 개발 모델로의 전환이 기대됨
- 종합 평가 및 의의
 - (의의) 본 연구는 AI가 양자 알고리즘을 단순 보조가 아닌 창의적 설계 주체로 기능할 수 있음을 보여준 초기 사례임
 - (전망) 해당 접근이 확장될 경우, 차세대 양자 알고리즘은 인간이 직접 설계하기보다 AI가 진화적으로 생성 · 최적화하는 방식으로 발전할 가능성이 큼

(원문)

1. <https://thequantuminsider.com/2025/12/11/new-photonic-techniques-aim-to-break-through-longstanding-barriers-to-quantum-scale/>