

하이브리드 양자-고전 알고리즘 단백질 폴딩 문제 해결 가능성 제시

(2023.01.04., 양자정보연구지원센터)

- 고전 및 양자 컴퓨팅 기술 조합 사용, 사면체 격자 단백질 폴딩 문제 해결
 - Basque Kipu quantum 대학, Shanghai 대학 및 Basque 과학재단 연구팀
 - 단백질 폴딩 문제는 주어진 아미노산 서열에 대한 가장 낮은 에너지 구성을 찾는 것으로, 화학, 생물학 및 약물 설계 분야에서 NP-hard 최적화 문제
 - 단백질은 유기체의 다양한 기능에 중요, 폴딩 역학은 잘못 접힘으로 인해 발생하는 질병(알츠하이머병, 헌팅턴병 및 파킨슨병) 이해 및 치료 가능성
 - 복잡, 미묘한 3차원 모양으로 바뀌는 단백질의 폴딩 문제의 복잡성
 - 고전 컴퓨터에서 어려움, 특정 유형의 복잡성으로 인한 문제를 양자 계산을 통해 해결할 수 있음
 - 단백질 폴딩은 적절한 2D 또는 3D 격자로 모델링되는 반면, 아미노산은 상호작용 에너지가 최소화되도록 배치
 - 주어진 격자에서 관련 단백질 구성을 나타내는 기저 상태 Hamiltonian 문제로 변환 가능
 - PQC 매개변수 최적화 위한 고전적 최적화 루틴과 결합, 매개변수화된 양자 회로(PQC, parametrized quantum circuit) 사용
 - Quantinuum의 이온 트랩, Google 및 IBM 초전도 회로를 포함한 다양한 양자 하드웨어 플랫폼에서 최대 17큐비트 사용, 최대 9개 아미노산 가진 단백질에서 테스트
 - 알고리즘이 높은 성공 확률과 NISQ 시대(제한적 큐비트, 노이즈에 취약한) 사용에 적합한 양자 컴퓨터
 - 초기 매개변수 민감도와 단일 게이지 풀에서 적절한 CD(counter

diabatic) 항 선택의 문제가 해결되면, 실제 사용에 양자 도입, 단백질 폴딩 문제 해결에 슈퍼컴퓨터 성과 능가할 수 있음

- 단백질 폴딩을 위한 디지털화된 항단열(Digitized-Counterdiabatic) 양자 알고리즘(ArXiv pre-print server)
 - 기존의 양자 알고리즘을 능가하기 위해 양자 알고리즘을 압축하는 방법인 디지털화된 항단열 양자 컴퓨팅 사용
- VQA(Variational quantum algorithms)
 - 단기(near-term) 양자 컴퓨터에서 노이즈 많은 큐비트 문제 해결 목표의 하이브리드 고전 양자 알고리즘
 - 매개변수화된 양자 회로(PQC) 또는 회로 ansatz(시범 양자 상태 생성), 문제 해결 위한 최적의 매개변수 찾는 고전적 최적화 루틴으로 구성
 - 매개변수화된 양자 회로(PQC)는 해밀토니안 문제 속성 활용하는 문제 영감형 (problem-inspired)과 심층 회로 및 구현 불가능한 연결에서 발생하는 노이즈 감소 위해 장치 연결을 고려하는 하드웨어 효율적(hardware-efficient)인 두 가지 범주로 나뉨
- DCQC(digitized-counterdiabatic quantum computation)
 - 최첨단 양자 알고리즘 개선 및 압축에 사용, 포트폴리오 최적화 및 정수 분해 같은 산업 응용 분야에서 개선 입증
 - CD 프로토콜 사용, 단열 양자 알고리즘 가속화, 다체 바닥 상태 생성하지만, 적절한 초기 매개변수 및 최적의 CD 항 찾는 문제가 있음

(원문)

1. <https://thequantuminsider.com/2022/12/30/hybrid-quantum-classical-algorithm-shows-promise-for-unraveling-the-protein-folding-problem/>
2. <https://quantumzeitgeist.com/protein-folding-takes-a-step-forward-with-quantum-computing/>