

양자 컴퓨터에서 양자 화학 시뮬레이션

(2023.03.21., 양자정보연구지원센터)

□ 양자 컴퓨터에서 화학 시뮬레이션을 위한 그리드 기반 방법 연구

- 옥스퍼드 대학 재료, 화학 및 양자 광자 연구팀, 36큐비트 양자 컴퓨터 생성(Science Advances)
 - 리소스-절약(resource-frugal) 알고리즘 탐색, 단일 및 쌍 입자로 2차원 및 3차원 원자 모델일 위해 최대 36큐비트로 정확하게 에뮬레이션된 양자 컴퓨터 생성
 - 바닥 상태 준비 및 에너지 추정에서 전자의 산란 및 이온화 역학에 이르기까지 다양한 작업 탐색, 관심 분자의 양자 화학을 에뮬레이트하기 위해 분할 작동 시뮬레이션에서 다양한 방법 평가
- 실공간 그리드 접근법 통한 양자 컴퓨팅
 - 실제 공간 그리드 접근 방식을 기반으로 하는 양자 컴퓨터 초기 버전에서 화학 역학 시뮬레이션 가속화하는 기본 특성 연구
 - 초기 버전 양자 컴퓨터에는 제한된 수의 오류 수정 큐비트가 있음, 복잡하고 흥미로운 분자에 대한 최적의 리소스 스케일링 제공 위해 입자 대칭과 같은 기능을 인코딩함
 - 대부분의 양자 컴퓨터는 노이즈 있고 비용이 많이 듦, 기존 컴퓨팅 리소스 배치하여 작지만 잡음 없는 양자 컴퓨터를 에뮬레이션 하여 비용과 성능 측정을 직접 조사하는 다른 접근 방식을 취함
- 양자 화학에 대한 새로운 접근
 - 모방 비용은 양자 컴퓨터 에뮬레이션을 36개의 완벽한 큐비트 포함하는 보통 크기의 버전으로 제한, 실험 설정 사용하여 1-전자 및 2-전자 시스템의 2D 및 3D 시뮬레이션 위한 유익한 시나리오 탐색
 - 첫 번째 실험에서, 외부 필드 적용, 결과적으로 쌍극자 진동과 단

일 결합 전자의 이온화 발생, 광화학 및 레이저 여기 구상 중

- 두 번째 시나리오, 충돌 및 산란 과정은 매우 역동적이고 고전적인 모델링이 어려우므로, 분광학, 첫째 화학 및 제조 공정과 관련 전자 분자 산란 조사

○ 파형 시뮬레이션

- 분할 연산자 양자 푸리에 변환(SO-QFT, split-operator Quantum Fourier Transformation) Hamiltonian 시뮬레이션 접근 방식 사용하여 웨이브 패킷 작업 수행, 단일 입자와 쌍을 이룬 입자 2-3D 시스템에 대한 그리드 기반 방법에 적용되는 다양한 결과 제시
- 수치 결과는 QuEST, QuEST-link 및 pyQuEST 같은 오픈 소스 도구 통해 양자 프로세서 구현하여 에뮬레이션함, 주어진 정확도의 시뮬레이션을 달성하기 위해 큐비트 수 탐색 및 실행 기간 추정, 샘플링 기반 방법의 시나리오 연구

○ 방법 및 3D 시뮬레이션

- 여기 상태 예측하기 위해 단일 ancilla 반복 위상 추정(IPE, iterative phase estimation) 측정을 탐색, 결과는 에너지 추정에 사용함, 확률론적 가상 시간 진화(PITE, probabilistic imaginary time evolution) 기반으로 이 방법의 단점을 설명
- 강한 외부 장에 의한 이온화, 전자-전자 산란에 의존하는 두 가지 시나리오에 의한 양자 역학 시뮬레이션 수행
- 기본 SO-QFT 주기에 추가 요소를 제공하여 시뮬레이션의 충실도를 최적화하기 위해 증강 분할 연산자(ASO, augmented split-operator) 도입, 헬륨 원자의 역학을 3D로 시뮬레이션함
- 슈뢰딩거 방정식을 사용하여 헬륨 원자의 실제 전자 고유 상태를 근사화하고, Bhattacharya 계수 사용하여 헬륨 원자 시뮬레이션의 전자-전자 상호 작용 및 시간 전개를 나타냄

○ 양자 컴퓨팅 리소스 및 아키텍처

- 헥사플루오르 에탄(C_2F_6) 및 암모니아(NH_3) 분자에 대한 양자 시나리오 모델링에 필요한 큐비트 수 추정, C_2F_6 의 그리드 기반 시뮬레이션에는 약 2250 큐비트가 요한 반면, 암모니아 분자는 450 큐비트 미만이 필요함
- 시뮬레이션을 위한 시간 비용도 하드웨어 구현에 의존함, 가장 잘 이해된 코드는 심층 알고리즘 및 오류율과 관련하여 논리적 큐비트당 수백 개의 물리적 큐비트가 필요함
- 이론적인 대규모 큐비트를 지원하기 위해 멀티코어 네트워크 아키텍처를 추가로 고안함

○ 비전

- SO-QFT 접근 방식 탐색, 정확한 큐비트를 에뮬레이션하고 실제 공간 양자 화학 시뮬레이션 이면의 기술을 테스트함
- 초기 내결함성 양자 컴퓨터에서 디지털 실험을 실현하는 기반이 되는 리소스를 특성화함
- 결과는 화학적 발견을 가속화하기 위해 머신 러닝으로 물리적 실험을 강화함으로써 학습/예측 주기가 될 수 있음
- 고에너지 입자 모델링하는 특수 상대성 이론을 포함하여 다양한 양자 기술 분야로 이어질 수 있으며 금융 공학에서도 역할을 할 수 있음

(원문)

1. <https://phys.org/news/2023-03-quantum-chemistry-simulations.html>