

# 동적 터널링 방법론을 이용한 변분 양자 알고리즘의 전역 최적화

한국전자통신연구원 이승진 박사

E seungjin.lee@etri.re.kr

고려대학교 박승 연구원

본 연구는 변분 양자 알고리즘(VQA)의 성능을 극대화하기 위해 동적 터널링(dynamic tunneling) 방법을 적용한 전역(전체 영역) 최적화 방안을 제시하고, 양자 상태 간 거리 측정을 활용하여 동적 터널링 방법의 적용 가능성을 확장한 내용이다. 특히 양자 상태 간 거리 측정을 포함한 개선된 최적화 방식은 기존 최적화 방식이 갖는 국소 최소점 문제를 해결함으로써, 전역 최소점으로의 수렴을 촉진한다. 이를 통해 VQA의 성능을 향상시키고, 다양한 양자 계산 문제에 효과적인 해결책을 제안하였다.

## 연구 배경

변분 양자 알고리즘(VQA)은 최근 양자화학, 물리학, 재료 과학 등에서 복잡한 최적화 문제를 해결할 수 있는 유망한 방법으로 주목받고 있다. 이 알고리즘은 고전적 최적화와 양자 연산을 결합하여 양자 상태의 에너지를 최소화하는 것을 목표로 한다. 그러나 VQA는 국소 최소점<sup>1)</sup>에 빠지기 쉬운 문제를 지니고 있으며, 이로 인해 최적화 과정이 전역 최소점<sup>2)</sup>으로 수렴하지 못하는 경우가 빈번하게 발생한다. 특히 기존의 경사도 (gradient) 기반 최적화 방법은 국소 최소점 문제에 취약한 접근법이라 이를 벗어나 전역 최적화 성능을 높일 수 있는 새로운 방식이 필요하게 되었다.

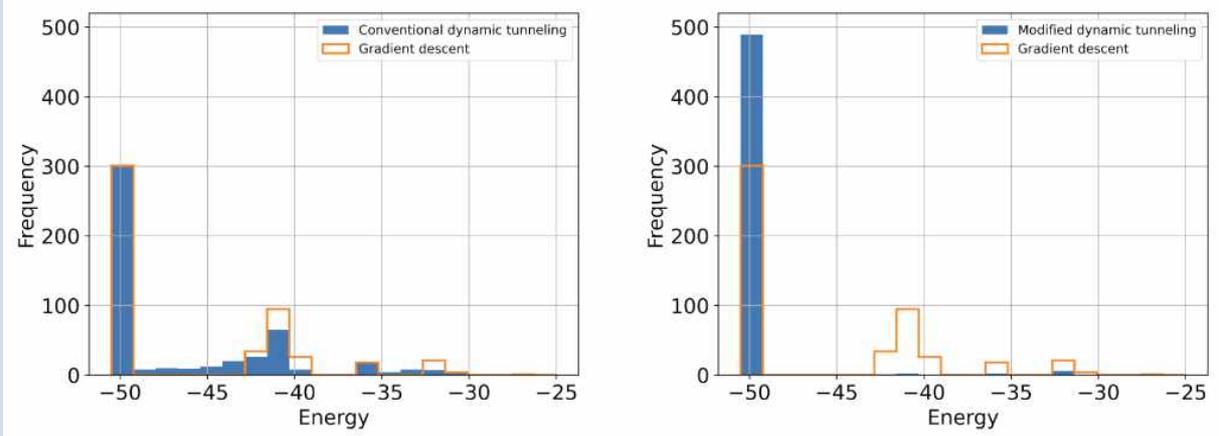
1) 국소 최소점 : 함수의 변수 공간의 국소한 영역에서의 함수가 가지는 최솟값

2) 전역 최소점 : 함수의 변수 공간 전체에서 함수가 가지는 최솟값

## 연구 내용

본 연구에서는 VQA의 최적화를 위한 새로운 접근 방식으로 동적 터널링(dynamic tunneling)<sup>3)</sup> 방법론을 도입하였으며, 특히 양자 상태 간 힐버트-슈미트(Hilbert-Schmidt) 거리<sup>4)</sup>를 사용하여 기존 방법의 한계를 보완하였다.

### 동적 터널링을 적용한 최적화 결과 비교



(a): 기존 동적 터널링

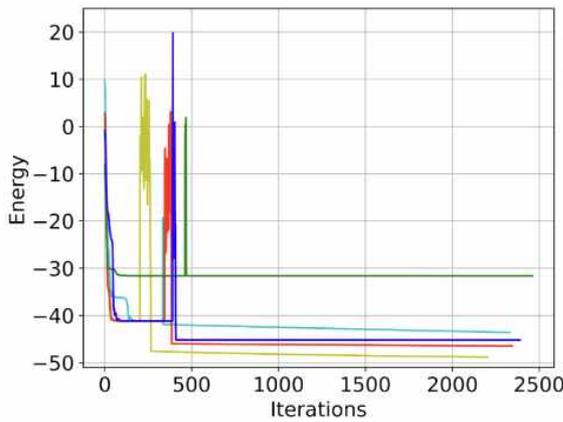
(b): 본 논문에서 제안한 동적 터널링

(a)와 (b) 모두 경사도 기법에 비해 국소 최소값에 빠지는 경향이 줄어드나, (a) 기존 동적 터널링의 경우 국소 최소값이 빠지는 경우가 존재하는 반면, (b) 본 논문의 동적 터널링 방법은 국소 최소값에 빠지는 경우가 없는 것을 확인할 수 있다.

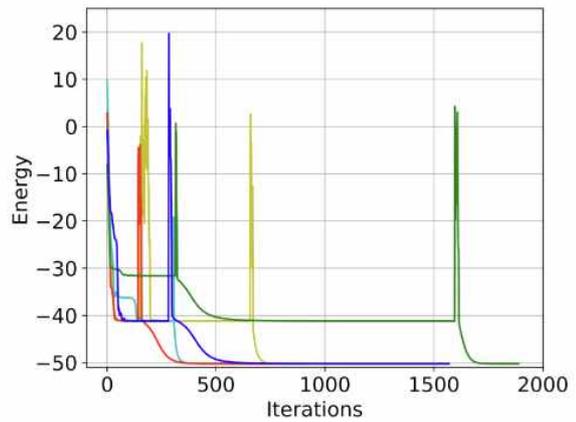
기존의 동적 터널링은 파라미터 공간의 유클리드(Euclid) 거리<sup>5)</sup> 측정을 통해 국소 최소점을 탈출하는 방식이었으나, 이는 VQA의 특성상 동일한 양자 상태를 유도하는 중복된 파라미터 집합들로 인해 최적화의 효율성을 저하시키는 문제가 있었다. 본 연구에서 제안한 개선된 동적 터널링은 이러한 문제를 해결하고자 양자 상태의 거리 측정 방식을 터널링에 도입하였으며, 이를 통해 파라미터 공간의 중복성을 제거하고 최적화의 효율을 높였다. 이러한 접근 방식을 바탕으로 본 연구는 수직장 이징(transverse-field Ising) 모델<sup>6)</sup>에 대한 시뮬레이션을 통해 성능을 검증하였으며, 실험 결과 기존 방식 대비 더 빠르게 전역(전체 영역) 최소점에 수렴함을 확인하였다.

3) 동적 터널링(dynamic tunneling) : 최적화 과정에서 도달한 국소 최소값들의 정보를 이용하여 더 낮은 최소값을 가지는 영역을 찾아 최적화를 수행하는 방법  
 4) 힐버트-슈미트(Hilbert-Schmidt) 거리 : 힐버트 공간에서 두 양자 상태 간의 차이를 정량화하는 값  
 5) 유클리드(Euclid) 거리 : 두 점 사이의 직선거리  
 6) 수직장 이징(transverse-field Ising) 모델 : 스핀들이 상호작용하는 전통적인 이징 모델에 횡 방향 자기장이 추가된 모델

## 기존 동적 터널링과 본 논문에서 제시한 동적 터널링 간의 최적화 결과 비교



(a): 기존 방법



(b): 본 논문 방법

그림1과 마찬가지로 (a) 기존 터널링의 경우 터널링 발생 후 다시 국소 최솟값으로 수렴하는 경우가 존재하나, (b) 본 논문의 터널링은 모두 전역(전체 영역) 최솟값으로 수렴한다.

### 논문

Global optimization in variational quantum algorithms via dynamic tunneling method(New Journal of Physics, 2024)

[논문 보기](#)

## 차별성 및 우수성

본 연구는 동적 터널링 방법론을 VQA에 최적화하여 기존 방법의 한계를 보완하고 전역(전체 영역) 최소점으로의 수렴 성능을 향상시킨 점에서 차별성을 가진다. 또한, 양자 상태의 힐버트-슈미트 거리 측정을 통해 동일한 양자 상태에 대응하는 중복된 국소 최소점 문제를 해결함으로써 VQA 전역 최적화 성능을 높였다.

## 파급효과 및 활용계획

본 연구에서 제안된 최적화 방법은 양자 기계 학습, 양자화학, 물리학 등 다양한 분야에서 활용될 수 있다. 특히 전역 최적화 기술이 필요한 양자 컴퓨팅 문제에 적용될 수 있으며, 향상된 전역 최적화 성능은 안정적이고 신뢰성 높은 양자 기저상태(바닥 상태, ground state) 시뮬레이션을 가능하게 할 것으로 기대된다.