

# 양자 상태의 동역학 해석을 위한 머신 러닝 기반 연구 분석

임채문, 김중헌

고려대학교

anscodla0314@korea.ac.kr, joongheon@korea.ac.kr

## A Study on Machine Learning-based Analysis on Quantum Dynamics

Chaemoon Im, Joongheon Kim

Korea Univ.

### 요약

양자 상태의 시간에 따른 동역학을 예측하는 것은 양자 통신 분야에 있어 필수적이지만, 양자 상태는 외부의 측정에 의해 상태가 교란되므로 이를 고려한 예측 방법이 필요하다. 이러한 측정으로 인한 문제를 해결하기 위해, 기계학습 기반의 양자 동역학 예측 알고리즘 제시된 바 있다. 본고는 이러한 기계학습 기반의 양자 동역학 해석 알고리즘의 특징을 분석한다.

### I. 서론

양자 통신 과정에 있어, 양자 채널 잡음으로 인해 시간에 따라 변하는 양자 상태를 추정하는 것은 매우 중요하다 [1]. 특히, 양자 순간이동 (Quantum Teleportation) 등의 양자 정보를 직접 전송하는 분야에 있어 시간에 따라 양자 채널에 의해 양자 정보가 어떻게 변하는지를 추적하는 일은 단순히 동역학을 이해하는 것을 넘어서 정보의 전송률을 결정하는데 중요한 요소이다. 그러나, 양자 상태는 외부 측정에 의해 쉽게 교란되어 얽힘 등 양자의 특성을 상실하게 되므로, 이러한 현상을 방지하면서도 양자 상태를 예측할 수 있는 기술의 필요성이 대두된다 [2].

이러한 양자 상태의 시간에 따른 변화를 분석하기 위해서, 기계학습 기반의 방법론이 제시된 바 있다. 특히, 미분방정식의 해를 구하기 위해 도입되었던 여러 방법론이 양자 상태의 변화를 추적하기 위해 사용되었다. 이러한 기계학습 기반 방법론은 기존에 양자 상태의 측정 데이터를 토대로, 특정 시간의 양자 상태가 어떤 방식으로 변화했는지 예측한다. 이러한 방법은 양자 상태의 동역학 분석을 위한 측정을 최소화함으로써, 불필요한 양자 상태에 대한 간섭을 최소화할 수 있다. 외부 측정이 양자 상태의 붕괴를 초래한다는 점을 고려하였을 때, 이러한 기계학습 기반 양자 동역학 추정 알고리즘은 효율적인 양자 정보 전송 및 검출을 위해 필수적인 알고리즘이다.

그러나, 모델링에 사용되는 기계학습 모델은 유클리드 공간에서 동작하므로, 양자 상태 공간의 기하학적 특성을 잘 반영하지 못하는 것이 한계점이다 [3]. 이에, 기하학적 특성을 반영할 수 있는 모델들이 양자 상태의 동역학을 예측하는 데 사용되고 있다. 특히 이러한 양자 상태의 집합은 수학적으로 다양체(Manifold)로 기술되므로, 다양체 위에 정의된 동역학을 학습하기 위한 모델들이 적극적으로 해당 분야에 사용되고 있다.

본고는 이러한 양자 상태의 동역학을 파악하는 것이 양자 통신 기술에 있어서 어떠한 의미를 가지는지 서술하고, 양자 상태의 동역학을 묘사하기 위한 기계학습 기반 기술들의 특징에 대해 분석한다.

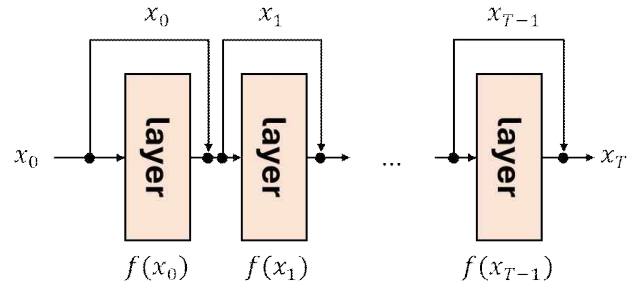


그림 1. Neural ODE의 개념도.

### II. 본론

양자 상태(density matrix)는 유한 차원의 힐베르트 공간 위에 정의되어 있으며, 그 중  $\rho = \rho^\dagger$ ,  $Tr(\rho) = 1$  이라는 조건을 만족하는 특수한 집합이다 [4]. 이러한 제약 조건을 만족하는 하에서 양자 상태의 동역학이 정의되어야 하므로, 양자 상태의 동역학은 다양체 위에서 기술되게 된다. 이 때, 양자 상태에 작용하여 한 양자 상태를 다른 양자 상태로 변환하는 모든 변환을 연산자(Operator)라고 한다. 특히, 양자 상태의 마르코프적 변화를 서술하는 연산자를 Lindbladian-Kossakowski 연산자라고 하며, 다음과 같이 정의된다 [5].

$$\dot{\rho} = L(\rho) = -i[H, \rho] + \sum_{i=1}^N (L_i \rho L_i^\dagger + \{L_i^\dagger L_i, \rho\})$$

이 때,  $[,]$  는 Lie bracket,  $\{, \}$  는 Jordan product를 의미하며, 전자의 식은 Hamiltonian, 후자의 식은 Dissipator라고 불린다. 전자의 경우 양자 상태의 Rank를 유지하는 변환인 반면, 후자의 경우 양자 상태의 Rank를 증가시키는 변환이다. 즉, 임의의 양자 상태는 Dissipator가 0이 아닌 경우 반드시 Rank가 증가하며 이는 혼합 상태(Mixed State)를 야기한다. 양자 통

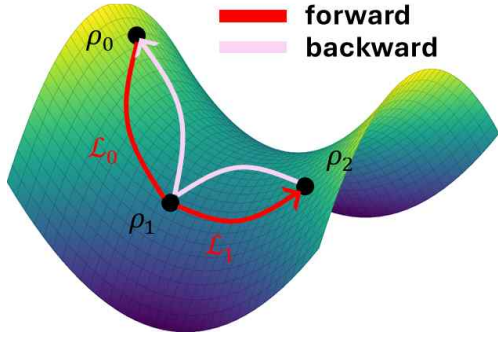


그림 2. 확산 모델 기반 양자 동역학 분석

신에서 이러한 혼합 상태는 양자 채널로 인한 양자 노이즈를 설명하는 현상이며, H는 양자 상태에 특정 정보를 인코딩하기 위한 외부의 조작을 의미한다. 만일 이러한 동역학을 예측할 수 있는 모델을 만들 수 있다면, 송신한 양자 정보가 어떻게 양자 채널에 의해 왜곡되는지를 예측할 수 있고 따라서 양자 정보의 송신률 분석 등 다양한 통신 분야에 기여할 수 있다.

이러한 동역학을 모델링하기 위해 최초로 도입된 알고리즘은 Neural Ordinary Differential Equation (Neural ODE)이다 [6]. Neural ODE는 ResNet 등 기존의 인공신경망 구조가 미분방정식의 수치적 해법에 쓰이는 Euler-Maruyama Simulation과 동일하다는 데서 착안한다. 즉, 이러한 신경망의 레이어 수가 충분히 많다면 연속 시간의 미분방정식의 수치적 해법과 동일한 형태를 가지며, 이를 기반으로 양자 상태의 역학을 해석하는 데 사용자는 것이다. 이러한 Neural ODE의 구조는 [그림 1]에 서술되어 있다. QNODE(Quantum Neural ODE)는 해당 방식을 양자 상태의 거동을 묘사하는 데 최초로 사용한 알고리즘이며, 양자 상태를 3차원 벡터로 표현한 블로흐 구 위에서의 동역학을 성공적으로 기술하였다 [7]. 그러나 해당 방법은 비교적 작은 규모의 양자 상태에 대해서 수행되었다는 단점이 존재하며, 여전히 유클리디언 공간 위에서 동작하므로 물리적인 정합성에 있어 한계점을 가지고 있다.

한편, 확산 모델(Diffusion Model)을 통해 해당 미분방정식을 해결하려는 움직임 또한 존재한다. 확산 모델은 그 원리상 데이터를 통해 해당 데이터를 생성하는 역과정(Backward Process)을 학습하는 모델이다. 따라서, 실제 물리 계측 데이터를 모아 학습을 수행하면 해당 물리 데이터를 설명하는 미분방정식의 수치적 해를 구할 수 있게 된다 [8]. 이러한 확산 모델 역시 기본적으로 유클리디언 공간 위에서 동작하므로, [그림 2]와 같이 수학적으로 다양체 위의 확률과정(Stochastic Process)을 정의하여 이러한 문제를 해결한 모델들이 존재한다 [9, 10]. 해당 모델들은 양자 상태의 거동뿐만 아니라 단백질 등 다양한 다양체 위에서 그 움직임이 서술되는 물리적 현상 역시 성공적으로 기술한 바 있으며, 이는 모델이 다양체 위에서 기술된 동역학에 대해서 학습에 성공했다는 것을 시사한다.

해당 모델 이외에도 Physics-Informed Neural Network(PINN) [11]이나 State-Space Model(SSM)[12] 등 다양한 모델이 양자 상태의 거동을 설명하기 위해 사용되고 있으며, 양자 상태의 기하학적인 구조를 반영하는 방법으로 변형되어 사용되고 있다.

### III. 결론

본 논문에서는 양자 상태의 동역학 해석을 위한 다양한 기계학습 모델의 사용처 및 각자의 특징, 장단점에 대해 논하였다. 기계학습 모델은 양자 및 양자 상태의 동역학이 가지고 있는 기하학적/확률적 특성을 보다 잘

다루는 방향으로 진화하였으며, 이에 따라 더욱 정밀한 예측에 성공하고 있다. 이는 양자 통신 분야에서 양자 상태의 보다 정확한 예측과 해석에 기여할 수 있을 것으로 기대된다.

### ACKNOWLEDGMENT

이 논문은 2024년도 정부(과학기술정보통신부)의 재원으로 정보통신기획평가원의 지원을 받아 수행된 연구임(RS-2024-00439803, SW컴퓨팅산업원천기술개발사업 (SW스타랩)); 이 성과는 정부(과학기술정보통신부)의 재원으로 한국연구재단의 지원을 받아 수행된 연구임(RS-2025-00561377). 본 논문의 교신저자는 김중현임.

### 참 고 문 헌

- [1] Bouchard, Frédéric, et al. "Quantum Process Tomography of a High-Dimensional Quantum Communication Channel." *Quantum*, Vol. 3, pp.138-150. May. 2019.
- [2] F. Xue, S. Yu, and C. Sun. "Quantum Control Limited by Quantum Decoherence," *Physical Review A*, Vol. 73, No. 1, pp.13403-13412, Jan. 2006.
- [3] H. Lucas, et al., "Geometry of Variational Methods: Dynamics of Closed Quantum Systems," *SciPost Physics*, vol. 9, no. 4, pp. 48-147, Oct. 2020.
- [4] K. Zyczkowski and I. Bengtsson, "An Introduction to Quantum Entanglement: a Geometric Approach," *ArXiv*. 2006.
- [5] A. Kossakowski, "On Quantum Statistical Mechanics of non-Hamiltonian Systems," *Reports on Mathematical Physics*, vol. 3, no. 4, pp. 274-274, Dec. 1972.
- [6] T. Q. Chen, Y. Rubanova, J. Bettencourt and D. K. Duvenaud, "Neural Ordinary Differential Equation," in *Proc. Advances in Neural Information Processing Systems*, Montreal, Canada, Dec. 2018. pp. 6572-6583.
- [7] M. Choi, D. Flam-Shepherd, T. H. Kyaw and A. Aspuru-Guzik, "Learning Quantum Dynamics with Latent Neural Ordinary Differential Equations," *Physics Review A*, Vol. 105, pp. 42403-42412, Apr. 2022.
- [8] P. Holderreith, Y. Xu and T. S. Jaakkola, "Hamiltonian Score Matching and Generative Flows," in *Proc. Advances in Neural Information Processing Systems*, Vancouver, Canada, Dec. 2024, pp. 110464-110493.
- [9] S. park, "Neural Hamiltonian Diffusions for Modelling Structured Geometric Dynamics," in *Proc. Advances in Neural Information Processing Systems*, Mexico city, USA, 2025.
- [10] J. Han, et al., "Geometric Trajectory Diffusion Models," in *Proc. Advances in Neural Information Processing Systems*, Vancouver, Canada, Dec. 2024. pp. 25628-25662.
- [11] A. Alsau, et al., "Physics-Informed Neural Networks for Quantum Internet Modeling: Concepts, Implementation, and Future Directions," *IEEE Communications Magazine*, Early Access, pp. 1-6, Dec. 2025.
- [12] H. Ma., B. Qi, I. Peterson, R. Wu, H. Rabitz and D. Dong, "Machine Learning for Estimation and Control of Quantum Systems," *National Science Review*, Vol. 12, No. 8, pp. Jul. 2025.