

Penerapan Algoritma Kuantum Variational Quantum Eigensolver (VQE) untuk Menentukan Energi Keadaan Dasar Dimer Helium

Nanik Andelita, I Wayan Sudiarta[✉], dan Dian Wijaya Kurniawidi

Program Studi Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Mataram, Jalan Majapahit No. 62 Mataram 83125

Info Artikel

Sejarah Artikel:
Diterima:
10 Mei 2021
Disetujui:
28 Desember 2021
Dipublikasikan:
29 Desember 2021

Keywords:
Basis sets, ground state energy, quantum computation, VQE quantum algorithm.

ABSTRAK

Perkembangan teknologi informasi, komputasi dan ilmu fisika, khususnya fisika kuantum, diharapkan dapat melahirkan teknologi baru yang berguna untuk mewujudkan komputer kuantum sebagai komputer masa depan. Pada penelitian ini, algoritma kuantum telah diterapkan *Variational Quantum Eigensolver* (VQE) untuk menghitung energi keadaan dasar molekul dimer helium (He_2). Komputasi menggunakan algoritma kuantum VQE dikerjakan dalam bahasa pemrograman Python dengan modul Qiskit. Untuk memastikan program algoritma kuantum VQE telah bekerja dengan baik pada sistem molekul, validasi program dilakukan terlebih dahulu untuk kasus molekul hidrogen (H_2). Hasil validasi program pada molekul H_2 menunjukkan hasil yang sesuai dengan metode diagonalisasi dan literatur. Energi keadaan dasar molekul He_2 yang diperoleh dengan metode algoritma VQE yaitu sebesar $-5,74032590 E_h$ pada jarak equilibrium $2,3 \text{ \AA}$.

ABSTRACT

The developments of information technology, computing and physical sciences, especially quantum physics, are expected to give birth to new technologies useful for realizing quantum computers as the computers of the future. In this study, a quantum variational quantum eigen solver (VQE) algorithm has been developed to calculate the energy of the ground state of the helium dimer (He_2). Calculation is done in the Python programming language with the Qiskit module. To ensure the programs for VQE quantum algorithm has worked well on the molecular system, the program validation is first carried out for cases of the hydrogen molecule (H_2). The validation results of the program on the hydrogen molecule show results that are in agreement to the diagonalization method and literature. Ground state energy of the molecule He_2 is obtained by the VQE algorithm method of $-5,74032590 E_h$ at equilibrium distance of $2,3 \text{ \AA}$

[✉] Alamat korespondensi:
Program Studi Fisika, Fakultas MIPA, Universitas Mataram
E-mail: wayan.sudiarta@unram.ac.id

PENDAHULUAN

Teknologi informasi dan komputasi telah berkembang pesat pada dua puluh tahun terakhir ini. Telah dikembangkan juga komputer dengan menggunakan prinsip fisika kuantum yang diharapkan dapat melahirkan teknologi baru untuk mewujudkan komputer masa depan. Dua fenomena kuantum yaitu superposisi dan *entanglement* dimanfaatkan dengan tujuan supaya komputer kuantum dapat melakukan banyak perhitungan secara simultan sehingga dapat lebih cepat daripada komputer klasik (Nielsen dkk., 2010; Saputra, 2009). Komputer kuantum tidak lepas dari penggunaan algoritma komputasi dengan model realistik sistem kuantum. Algoritma kuantum telah diterapkan dalam beberapa aplikasi, salah satunya yaitu untuk menentukan energi keadaan dasar sistem atom dan sistem molekul. Energi keadaan dasar merupakan keadaan ketika elektron-elektron dalam molekul berada pada energi terendah. Karakterisasi energi keadaan dasar diperlukan untuk memahami sifat dari atom dan molekul (Rahmat dan Nurwantoro, 2020).

Energi keadaan dasar dari suatu sistem kuantum dapat ditentukan dengan menyelesaikan persamaan Schrödinger dari sistem tersebut. Untuk sistem kuantum dengan jumlah partikel yang banyak, korelasi antar elektron-elektron dan elektron-inti atom menyebabkan persamaan Schrödinger menjadi rumit (Siregar, 2014). Selain itu, penyelesaian persamaan Schrödinger juga membutuhkan memori komputer yang besar dan waktu komputasi yang lama. Komputer kuantum diharapkan dapat mempercepat perhitungan energi keadaan dasar sistem kuantum. Bogaart (2019) memberikan solusi dengan menerapkan algoritma kuantum *Variational Quantum Eigensolver* (VQE). Peruzzo dkk. (2014) menyajikan pertama kali pendekatan alternatif untuk menghitung energi keadaan dasar sistem molekul. Eksperimen yang dilakukan Peruzzo dkk. mengimplementasikan algoritma VQE dengan menggabungkan processor kuantum fotonik yang dikonfigurasi dengan komputer konvensional. Hasil penelitiannya menunjukkan bahwa algoritma VQE mampu menentukan energi keadaan dasar dari Hamiltonian molekul HeH^+ dengan fungsi *ansatz* tertentu.

Penerapan algoritma kuantum VQE kembali dilakukan oleh Bogaarts pada tahun 2019 untuk menghitung energi keadaan dasar dari molekul H_2 . Simulasi komputer kuantum dilakukan dengan menggunakan kombinasi bahasa pemrograman Python dan Matlab, transformasi fermion Jordan-Wigner, dan bentuk variasi *Unitary Coupled Cluster* (UCC). Berdasarkan hasil penelitian, Bogaarts menemukan bahwa konvergensi nilai energi keadaan dasar molekul H_2 menggunakan algoritma kuantum VQE dapat ditingkatkan dengan menggunakan keadaan Hartree-Fock sebagai keadaan awal.

Pada penelitian ini algoritma kuantum VQE untuk menentukan energi keadaan dasar molekul Dimer Helium (He_2). Dimer Helium merupakan molekul Van der Waals yang terdiri dari dua atom Helium (He) yang stabil, netral dan memiliki empat buah elektron (Schollkopf dan Toennies, 1994). Dimer helium memiliki potensial interaksi $He - He$ yang sangat lemah yaitu 1 meV. Energi ikat ini 5000 kali lebih lemah dari ikatan kovalen dalam molekul H_2 (Przybytek, 2010). Dimer Helium juga dikenal sebagai molekul yang tidak terikat karena memiliki energi keadaan dasar yang lebih besar dari energi keadaan eksitasinya (Zeller, 2016). Selain itu, jarak antar atom $He - He$ yang relatif jauh dengan energi ikat yang sangat kecil membuat molekul He_2 menjadi sistem model yang unik untuk mengeksplorasi korelasi elektron pada jarak yang jauh (Onishi, 2016). Hal ini menjadikannya sebagai kasus uji untuk algoritma kuantum VQE (Komasa, 2001).

METODE

Prinsip dasar algoritma kuantum VQE dalam menentukan energi keadaan dasar (E_0) yaitu menggunakan prinsip variasi. Nilai ekspektasi hamiltonian \hat{H} yang ditentukan terhadap fungsi gelombang $|\psi\rangle$ akan selalu lebih besar dari atau sama dengan nilai eigen terendah (Griffiths dan Schroeter, 2018) yang secara matematis diberikan pada Persamaan (1).

$$\langle \hat{H} \rangle_{|\psi\rangle} = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \geq E_0 \quad (1)$$

Adapun proses komputasi untuk menentukan energi keadaan dasar menggunakan algoritma kuantum VQE dilakukan dalam beberapa langkah yaitu: (1) menentukan Hamiltonian molekul elektronik dan fungsi basis set molekul; (2) mentransformasikan operator Hamiltonian fermion sistem kuantum ke bentuk operator qubit (gerbang kuantum); (3) mempersiapkan *trial ansatz* dengan parameter variasi θ ; melakukan pengukuran nilai ekspektasi Hamiltonian terhadap *trial ansatz*; serta (4) melakukan pengoptimalan untuk memperbarui parameter variasi sehingga keadaan kuantum dengan parameter baru ini memiliki nilai ekspektasi Hamiltonian yang lebih rendah (Chen dkk., 2020; Lolur dkk., 2021).

1. Menentukan Hamiltonian Fermion dan Basis Set Molekul

Sistem fermion yang saling berinteraksi dalam molekul dirumuskan dengan Hamiltonian fermion dalam bentuk kuantisasi kedua yang diungkapkan pada Persamaan (2) (Ryabinkin dkk., 2019)

$$\hat{H} = \sum_{pq} h_{pq} \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_q + \frac{1}{2} \sum_{pqrs} g_{pqrs} \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_r^\dagger \hat{a}_s \hat{a}_q \quad (2)$$

h_{pq} pada Persamaan (2) adalah energi kinetik elektron dan energi potensial yang dialami di dalam inti atom yang diberikan pada Persamaan (3)

$$h_{pq} = \int \psi_p^*(x_1) \left(-\frac{1}{2} \nabla_1 + \sum_i \frac{Z_i}{|r_{1i}|} \right) \psi_q(x_1) dx_1 \quad (3)$$

Energi interaksi Coulomb antar elektron diberikan pada Persamaan (4)

$$g_{pqrs} = \iint \frac{\psi_p^*(x_1) \psi_q(x_1) \psi_r^*(x_2) \psi_s(x_2)}{|r_{12}|} dx_1 dx_2 \quad (4)$$

Nilai konstanta pada Persamaan (3) dan (4) bergantung pada pemilihan basis set molekul (Rahmat dan Nurwantoro, 2020).

Pada penelitian ini digunakan basis set STO-3G untuk molekul H_2 dan basis set 6-31G untuk molekul He_2 . Integral pada Persamaan (3) dan (4) dapat dihitung menggunakan bahasa pemrograman Python dan modul PySCF (*Python based Simulation of Chemistry Framework*).

2. Transformasi Hamiltonian Fermion ke Hamiltonian Qubit Menggunakan Transformasi Fermion Jordan-Wigner.

Supaya hamiltonian dari sistem fermion pada Persamaan (2) dapat dimodelkan dalam simulasi komputer kuantum, maka perlu dilakukan transformasi ke dalam bentuk gerbang-gerbang kuantum (hamiltonian qubit). Pemodelan harus dibuat dari operator kreasi dan anihilasi fermion ke operator spin qubit. Teknik untuk mengubah operator kreasi dan anihilasi menjadi gerbang kuantum disebut dengan transformasi fermion. Proses ini melibatkan transformasi Fermion Jordan-Wigner, yaitu pemetaan operator kreasi \hat{a}_p^\dagger dan anihilasi \hat{a}_p ke kombinasi matriks Pauli, dan didefinisikan sesuai Persamaan (5) (Keijzer, 2019).

$$\begin{aligned} a_j &= I^{\otimes j-1} \otimes \sigma^- \otimes Z^{\otimes N-j}, \\ a_j^\dagger &= I^{\otimes j-1} \otimes \sigma^+ \otimes Z^{\otimes N-j}, \end{aligned} \quad (5)$$

Dengan N jumlah qubit dan operator σ^\pm diberikan pada Persamaan (6).

$$\sigma^\pm = \frac{X \pm iY}{2} \quad (6)$$

Sedangkan operator I , X , Y , dan Z adalah matriks standar Pauli. Pada penelitian ini, proses tranformasi ini dilakukan dengan menggunakan pustaka *qiskit aqua chemistry*.

3. Fungsi Trial Ansatz $|\psi(\theta)\rangle$ dengan Pendekatan UCCSD

Fungsi gelombang *ansatz* sistem kuantum didekati menggunakan *Unitary Coupled Cluster Single Double* (UCCSD). UCCSD bersifat variasional sehingga dapat diterapkan dalam algoritma kuantum VQE. Secara umum, fungsi gelombang *ansatz* yang didekati dengan metode UCCSD diberikan pada Persamaan (7) (Sokolov dkk., 2020),

$$|\psi(\theta)\rangle = e^{\hat{T}(\theta) - \hat{T}^\dagger(\theta)} |\Psi_{\text{HF}}\rangle \quad (7)$$

dengan operator $\hat{T}(\theta)$ adalah operator kluster, $\hat{T}^\dagger(\theta)$ adalah operator eksitasi yang anti-Hermitan dan $|\Psi_{\text{HF}}\rangle$ merupakan keadaan referensi dalam keadaan dasar Hartree-Fock. Sedangkan θ merupakan parameter yang menentukan bobot kluster, sehingga perlu dioptimasi untuk meminimalkan nilai ekspektasi Hamiltonian.

4. Sistem Optimasi Constrained Optimization by Linear Approximation (COBYLA)

Parameter θ pada fungsi *trial ansatz* harus dioptimasi untuk meminimalkan nilai ekspektasi Hamiltonian. COBYLA merupakan metode optimasi numerik yang disediakan pada *library qiskit aqua components optimizers*. Dengan demikian, energi keadaan dasar molekul yang diperkirakan menggunakan algoritma kuantum VQE bergantung pada parameter θ . Sehingga Persamaan (1) dapat ditulis ke dalam bentuk Persamaan (8),

$$\langle H \rangle_{|\psi(\theta)\rangle} \geq E_0 \quad (8)$$

Pada Persamaan (8), optimasi COBYLA mengubah input dengan memvariasikan parameter θ pada fungsi *Ansatz* $|\psi(\theta)\rangle$ dan algoritma kuantum VQE menghitung nilai ekspektasi \hat{H} . Parameter θ yang dioptimasi oleh COBYLA ini kemudian digunakan kembali untuk menghitung nilai ekspektasi, hingga mendapatkan nilai energi keadaan dasar yang diharapkan (Kumar dkk., 2019).

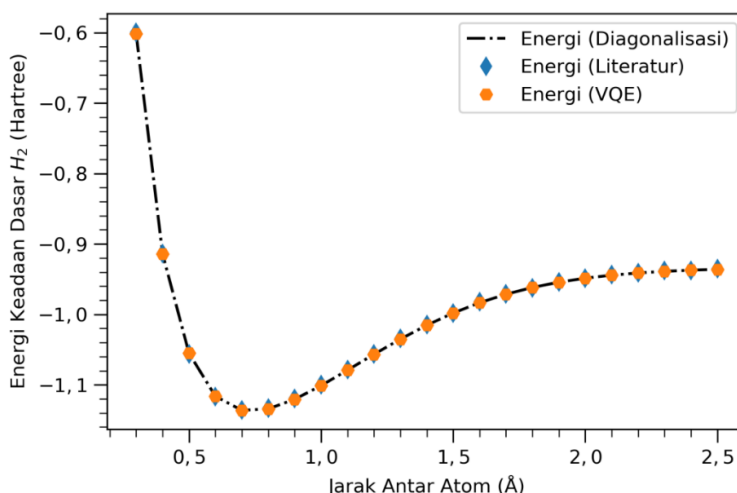
Komputasi menggunakan algoritma kuantum VQE dikerjakan dalam bahasa pemrograman Python dengan modul Qiskit. Qiskit merupakan *open-source software framework* untuk bekerja dengan simulator komputer kuantum pada level algoritma. Pada penelitian ini algoritma kuantum VQE diimplementasikan oleh Qiskit Aqua. Perhitungan dengan metode ini disimulasikan pada komputer klasik.

HASIL DAN PEMBAHASAN

Pada bagian ini diberikan hasil komputasi menggunakan algoritma kuantum VQE untuk dimer helium, He_2 . Untuk memastikan perhitungan telah sesuai, kode program algoritma kuantum VQE divalidasi dengan cara menghitung terlebih dahulu untuk molekul hydrogen dan kemudian membandingkan hasilnya dengan referensi.

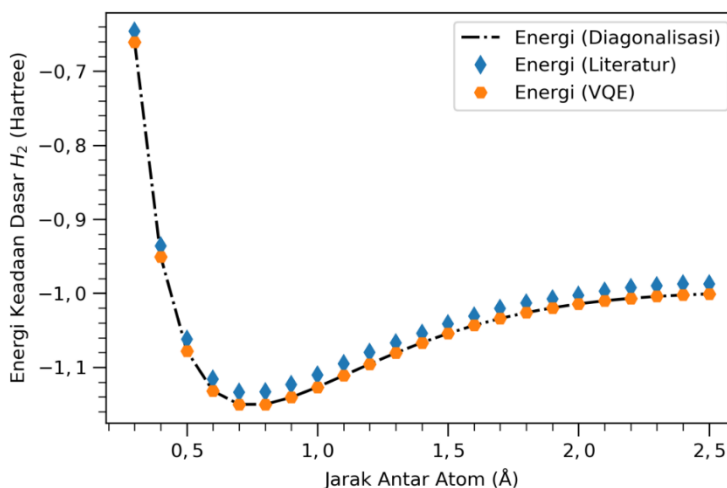
Validasi Algoritma Kuantum VQE pada Molekul H_2

Hasil validasi program algoritma kuantum VQE ditunjukkan oleh Gambar 1 dan Gambar 2, dengan menggunakan parameter yang sesuai dengan literatur (Rahmat dkk., 2020; Wei dkk., 2020).



Gambar 1. Variasi nilai E_0 molekul H_2 terhadap jarak antar atom menggunakan basis set STO-3G.

Gambar 1 menunjukkan hasil perhitungan nilai E_0 molekul H_2 menggunakan basis set STO-3G. Basis set ini menggambarkan orbital masing-masing atom yang didekati dengan jenis *Slater Type Orbital* (STO) menggunakan tiga fungsi Gaussian. Nilai energi keadaan dasar molekul H_2 diperoleh pada jarak antar atom 0,7 Å baik menggunakan algoritma kuantum VQE, diagonalisasi, maupun literatur, yaitu berturut-turut sebesar $-1,13619 E_h$, $-1,13619 E_h$, dan $-1,13554 E_h$. Pada kasus ini, nilai hasil diagonalisasi dijadikan sebagai acuan keakuratan hasil dari algoritma VQE. Nilai yang diperoleh menggunakan algoritma VQE ini sama dengan hasil nilai diagonalisasi. Nilai ini lebih rendah dari nilai yang diberikan oleh Rahmat dkk. (2020).



Gambar 2. Variasi nilai E_0 molekul H_2 terhadap jarak antar atom menggunakan basis set 6-31G. Energi (literatur) diperoleh dari Rahmat dkk. (2020)

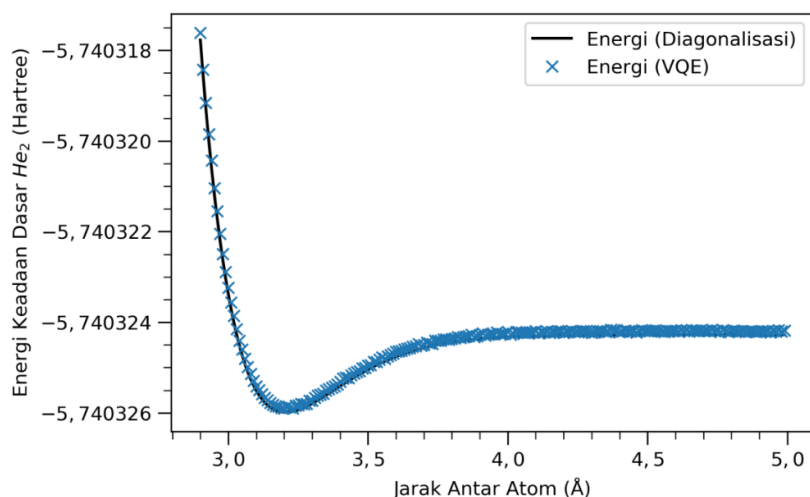
Pada Gambar 2 ditunjukkan bahwa nilai E_0 molekul H_2 menggunakan algoritma kuantum VQE dengan basis 6-31G lebih akurat dibandingkan dengan nilai dari Rahmat dkk. (2020). Hal ini dikarenakan pada perhitungan Rahmat dkk. (2020) jumlah qubit dikurangi menggunakan metode

active space 4 (AS 4) sehingga jumlah fungsi yang digunakan untuk mendekati orbital masing-masing atom pada molekul H_2 menjadi lebih sedikit (Setia dkk., 2020).

Hasil pada Gambar 1 dan 2 telah menunjukkan kesesuaian hasil algoritma kuantum VQE dengan metode diagonalisasi, sehingga program algoritma kuantum VQE telah tervalidasi dan dapat diterapkan untuk menghitung energi keadaan dasar sistem dimer helium He_2 .

Energi Keadaan Dasar Molekul He_2 Menggunakan Algoritma VQE

Hasil energi elektronik untuk dimer helium He_2 pada Gambar 3 menunjukkan bahwa nilai E_0 yang diperoleh menggunakan algoritma kuantum VQE hampir sama dengan perhitungan secara diagonalisasi untuk semua jarak antar atom helium. E_0 molekul He_2 untuk keadaan ekuilibrium dengan energi minimum diperoleh pada jarak antar atom sebesar 3,2 Å dengan nilai energi sebesar $-5,74032590 E_h$ untuk algoritma kuantum VQE dan $-5,74032599 E_h$ untuk metode diagonalisasi. Hasil kedua energi ini menunjukkan bahwa algoritma kuantum VQE akurat untuk menghitung keadaan dasar sistem kuantum. Akurasi ini ditunjukkan dengan perhitungan nilai galat relatif maksimum kedua metode yaitu sebesar 3×10^{-8} .



Gambar 3. Variasi nilai E_0 dimer helium He_2 terhadap jarak antar atom menggunakan basis set 6-31G

SIMPULAN

Algoritma kuantum VQE telah berhasil diterapkan untuk menentukan energi keadaan dasar molekul. Kode program algoritma VQE terlebih dahulu divalidasi dengan cara membandingkan hasil energi keadaan dasar molekul hidrogen (H_2) menggunakan metode algoritma VQE, metode diagonalisasi dan literatur. Hasil validasi program menunjukkan kesesuaian hasil dengan metode diagonalisasi dan literatur. Energi keadaan dasar untuk molekul He_2 yang diperoleh yaitu sebesar $-5,74032590 E_h$ pada jarak equilibrium 2,3 Å.

REFERENSI

- Bogaarts, T. J. (2019). *Quantum chemistry and the variational quantum eigensolver*. Netherlands: Department of Applied Physics, Eindhoven University of Technology.
- Chen, R., Mezzacapo, A., & Wood, S. (2020). *Qiskit*. https://github.com/Qiskit/qiskit-tutorials/blob/master/legacy_tutorials/aqua/chemistry/programmatic_approach.ipynb

- Griffiths, D. J., & Darrell, F. S. (2018). *Introduction to quantum mechanics*. Cambridge: Cambridge University Press.
- Keijzer, R. D. (2019). *Optimization of variational quantum eigensolver*. Netherlands: Department Applied Physics & Applied Mathematics, Eindhoven University of Technology .
- Komasa, J. (2001). Exponentially correlated Gaussian functions in exponentially correlated gaussian functions in variational calculations. momentum space properties of the ground state helium dimer. *Journal of Chemical Physics*, 116, 158-165.
- Kumar, S., Singh, R. P., Behera, B. K., & Panigrahi, P. K. (2019). Quantum simulation of negative hydrogen ion using variational quantum eigensolver on IBM quantum computer. 15–17.
- Lolur, P., Rahm, M., Skogh, M., García-Álvarez, L., & Wendin, G. (2021). Benchmarking the variational quantum eigensolver through simulation of the ground state energy of prebiotic molecules on high-performance computers. *The Journal Chemical Physics*, 1-10.
- Nielsen, M. A. (2005, July 29). The fermionic canonical commutation relations and the Jordan-Wigner transform.
- Nielsen, M. A., & Chuang, I. L. (2010). *Quantum computation and quantum information*. Cambridge: Cambridge University Press.
- Onishi, T. (2016). A molecular orbital analysis on helium dimer and helium-containing materials. *Journal of the Chinese Chemical Society*, 63, 83-86.
- Peruzzo, A., McClean, J., Shadbolt, P., Yung, M.-H., Zhou, X.-Q., Love, P. J., ... O'Brien, J.L. (2014). A Variational *eigenvalue* solver on a photonic quantum processor. *Macmillan Publishers Limited*, 1-7.
- Rahmat, M. S., & Nurwantoro, P. (2020). Kajian komputasi algoritma kuantum quantum variational eigensolver untuk simulasi molekul H₂. *Jurnal Fisika Indonesia*, 24, 17-23.
- Ryabinkin, I. G., Genin, S. N., & Izmaylov, A. F. (2019). Constrained variational quantum eigensolver: quantum computer search engine in the fock space. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 15, 249-255.
- Saputra, H. (2009). Kajian tentang komputer kuantum sebagai pengganti komputer konvensional di masa depan. *Jurnal Generic*, 4, 15-18.
- Schöllkopf, W., & Toennies, P. J. (1994). Nondestructive Mass Selection of Small Van der Waals Clusters. *Science*, 266, 1345-1348.
- Setia, K., Chen, R., Rice, J. E., Mezzacapo, A., Pistoia, M., & Whitfield, J. D. (2020). Reducing qubit requirements for quantum simulation using molecular point group symmetries. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 1-21.
- Siregar, R. E. (2014). *Mekanika kuantum molekul: struktur elektronik atom dan molekul*. Bandung: UNPAD Press.
- Sokolov, I. O., Barkoutsos, P. K., Ollitrault, P. J., Greenberg, D., Pistoia, M., Tavernelli, I. (2020). Quantum orbital-optimized unitary coupled cluster methods in the strongly correlated regime: Can quantum algorithms outperform their classical equivalents? *The Journal Chemical Physics*, 152, 1-17.
- Wei, S., Li, H., & Long, G. (2020). A full quantum *eigensolver* for quantum chemistry simulations. *AAAS Research*, 1-11.
- Zeller, S., Kunitski, M., Voigtsberger, J., Kalinin, A., Schottelius, A., Schober, C., ... Dörner, R. (2016). Imaging the He₂ quantum halo state using a free electron laser. *Proceeding of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 113, 14651-14655.