

INTISARI

Kajian Komputasi Algoritma Kuantum *Variational Quantum Eigensolver* untuk Simulasi Molekul H_2

Oleh

M. Sidik Augi Rahmat

17/422224/PPA/05534

Telah dilakukan telaah teoritis dan komputasi mengenai algoritma kuantum *variational quantum eigensolver* untuk simulasi molekul H_2 . Algoritma *variational quantum eigensolver* (VQE) adalah salah satu algoritma yang dapat diterapkan pada komputer kuantum sederhana pada masa kini dan merupakan algoritma yang cukup stabil dari efek dekoherensi. Algoritma VQE disebut sebagai *hybird quantum-clasical* karena sebagian algoritma dikerjakan pada komputer kuantum dan sebagian lagi pada komputer klasik. Prinsip dasar algoritma VQE adalah prinsip variasi, yaitu pencarian fungsi gelombang yang akan mengakibatkan energi sistem kuantum memiliki energi terendah. Fungsi gelombang dan Hamiltonan pada algoritma VQE disimulasikan dengan menggunakan gerbang-gerbang kuantum. Untuk dapat dioperasikan oleh gerbang kuantum, Hamiltonan dan fungsi gelombang pada penelitian ini menggunakan wakilan kuantisasi kedua. Penelitian ini menggunakan transformasi Jordan-Wigner dan Bravyi-Kitaevi dari operator fermionik menjadi operator kubit (*qubit*) atau gerbang kuantum.

Perhitungan atau komputasi energi sistem dilakukan menggunakan komputer kuantum, namun optimasi dilakukan pada komputer klasik menggunakan algoritma optimasi seperti Nelder-Mead, Powell dan BFGS. Penelitian ini akan mendekati fungsi gelombang sistem dengan beberapa basis fungsi dan metode, kemudian dari hasil yang diperoleh akan dilihat pendekatan seperti apa yang paling cocok untuk simulasi molekul H_2 . Simulasi numerik pada penelitian ini menggunakan paket pemrograman OpenFermion dan layanan komputasi awan kuantum Rigetti Computing.

Kata-kata kunci : kuantum, komputer kuantum, algoritma kuantum.

ABSTRACT

Computational Study of Quantum Algorithm Variational Quantum Eigensolver for H₂ Simulation

By

M. Sidik Augi Rahmat

17/422224/PPA/05534

A computational study of quantum algorithm variational quantum eigensolver to simulate H₂ has been carried out (VQE). VQE algorithm has notable property that it can run on nearly future quantum computer such as robust against decoherence. Because optimization routine still run on classical computer VQE algorithm often called as hybrid quantum classical algorithm. VQE algorithm works on second quantisation formalism because of that Hamiltonian which is used to simulate quantum system represented by creation and annihilation operator. The trial wavefunction in this algorithm approached by parameterized quantum gate called ansatz. Jordan-Wigner and Bravyi-Kitaev has been used to map fermionic operator to quantum gate so that Hamiltonian and wavefunction can be run on quantum computer.

Optimization algorithm which used in this work are Nelder-Mead, Powell and BFGS. This work aim to approximate trial wavefunction with different chemical basis set and encoding to present hybrid classical variational approach in more detail offering both theoretical and practical development. In this work we use Quantum Computer provide by Rigetti Computing and Openfermion to simulate H₂ molecule.

Keywords : quantum, quantum computer, quantum algorithm.