

Research Paper



**Dynamic Simulation of the photosynthetic Fenna-Matthew-Olson (FMO) complex using the variational quantum algorithm**



Hossein Davoudi Yeganeh\*<sup>1</sup>



This paper is an open access and licensed under the CC BY NC license.



DOI:10.22034/STRAP.2023.15721

**Reference to this article:** Davoudi Yeganeh, H. (2023). Dynamic Simulation of the photosynthetic Fenna-Matthew-Olson (FMO) complex using the variational quantum algorithm. *Scientific Researches in Theoretical and Applied Physics*, 1(1), 1-4.

**Keywords**

Dynamic simulation, Fenna-Matthew-Olson (FMO) complex, variational quantum algorithm, Quantum computer.

**Received:** 2022/08/28

**Accepted:** 2022/12/21

**Available:** 2023/06/10

**A B S T R A C T**

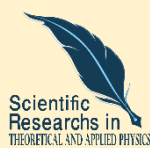
In the recent years, the study of biological systems in which quantum dynamics is visible has been attended recently. The theory of open quantum system is used to describe the dynamics of such systems commonly. By understanding these processes are performed, their mechanism can be used to build new nanostructures for quantum transfer and as well as to build optimal solar cells. One of these biological systems is photosynthesis that is main source of energy for plants algae and some kinds of bacteria. We will consider quantum dynamics of photosynthetic Fenna-Matthew-Olson (FMO) complex. For this purpose, we using the variational quantum algorithm consisting of quantum and classical computers. Parametric quantum state preparations and quantum measurements are performed on the quantum computer and parameters optimized on the classic computer. We obtain trace distance and fidelity between exact and hybrid states. The output of the algorithm is compatible with the exact calculation.

\* **Corresponding Author:** Hossein Davoudi Yeganeh

**E-mail:** h.yeganeh@tabrizu.ac.ir

1. Ph.D Student, Department of Astrophysics, Faculty of Physics, University of Tabriz, Tabriz, Iran.

## مقاله پژوهشی



## شبیه‌سازی دینامیک مجتمع فنا- میتو- السون موجود در فتوسنتز با استفاده از الگوریتم وردشی کوانتومی

حسین داودی یگانه\*<sup>۱</sup>

این مقاله به صورت دسترسی باز و با لایسنس CC BY NC کپی‌رایتو کامانز قابل استفاده است.



**ارجاع به این مقاله:** داودی یگانه، حسین (۱۴۰۱). شبیه‌سازی دینامیک مجتمع فنا- میتو- السون موجود در فتوسنتز با استفاده از الگوریتم وردشی کوانتومی. پژوهش‌های علمی در فیزیک نظری و کاربردی، ۱(۱)، ۴-۱.

DOI:10.22034/STRAP.2023.15721



## چکیده

در سال‌های اخیر مطالعه سیستم‌های زیستی که در آنها دینامیک کوانتومی قابل مشاهده است بسیار مورد توجه قرار گرفته‌است. عموماً برای توصیف دینامیک چنین سیستم‌هایی از نظریه سیستم‌های باز کوانتومی استفاده می‌شود. با درک چگونگی انجام این فرایندها می‌توان از سازوکار آنها در ساخت نانو ساختارهای جدید برای انتقال کوانتومی و همچنین ساخت سلول‌های بهینه خورشیدی استفاده کرد. یکی از این سیستم‌های زیستی فتوسنتز است که منبع تامین انرژی گیاهان است. در این مقاله ما دینامیک مجتمع فنا-میتو-السون موجود در فتوسنتز را مورد بررسی قرار می‌دهیم. برای این منظور از یک الگوریتم وردشی کوانتومی که شامل کامپیوترهای کلاسیکی و کوانتومی هست، استفاده می‌کنیم. آماده‌سازی حالت اولیه پارامتری و اندازه‌گیری بر روی کامپیوتر کوانتومی و بهینه‌سازی پارامترها روی کامپیوتر کلاسیکی انجام می‌شود. برای بررسی هم‌پوشانی جواب‌های بدست آمده از الگوریتم و جواب‌های دقیق، از متریک فاصله و فیدلیتی استفاده می‌شود که نتایج حاصل از الگوریتم سازگاری بسیار بالایی با جواب‌های دقیق دارد.

## کلیدواژه‌ها

شبیه‌سازی دینامیک،  
مجتمع فنا-میتو-السون،  
الگوریتم وردشی کوانتومی،  
کامپیوتر کوانتومی.

دریافت شده: ۱۴۰۱/۰۶/۰۶

پذیرفته شده: ۱۴۰۱/۰۹/۳۰

منتشر شده: ۱۴۰۲/۰۳/۲۰

\* نویسنده مسئول: حسین داودی یگانه

رایانامه: h.yeganeh@tabrizu.ac.ir

۱- گروه رمزنگاری و اطلاعات کوانتومی، دانشکده علوم مهندسی دانشگاه تهران، تهران، ایران.

## مقدمه

در سال‌های اخیر مطالعه و بررسی سیستم‌های زیستی که اثرات کوانتومی در آن قابل مشاهده است توجه زیادی را به خود جلب کرده است. یکی از این سیستم‌ها فرآیند فتوسنتز است. فتوسنتز سازوکار اصلی تامین انرژی گیاهان است. انرژی نور خورشید ابتدا به وسیله رنگدانه‌های نوری گیاهان جذب می‌شود. همه رنگدانه‌هایی که در فتوسنتز فعالیت دارند در کلروپلاست یافت می‌شوند. این انرژی جذب شده توسط مجتمع فنا-السون-میتوز (FMO) که به منزله‌ی سیم رابط است به مرکز واکنش منتقل می‌شود. ساختار FMO متشکل از سه مونومر تقریباً یکسان است [۱، ۲]. هر یک از آن مونومرها اولاً همچون یک سیستم دو ترازه عمل و ثانیاً با یکدیگر و با محیط پروتئینی اندرکنش می‌کنند. (پس ما یک سیستم هفت کیوبیتی داریم). اندرکنش سه مونومر با یکدیگر بسیار ناچیز و قابل چشم‌پوشی است. یک فوتون نور تنها توسط یک باکتری، آنکه از نظر هندسی و چیدمان به مجتمع آنتنی نزدیکتر و در حالت پایه است، جذب و باعث برانگیخته شدن آن می‌گردد. این انرژی یا تحریک به باکتری نزدیک به مرکز واکنش یعنی نزدیک به جایی که در آن فرآیندهای بیوشیمیایی رخ می‌دهد منتقل می‌شود. قسمت مهم در این فرآیند مجتمع FMO است. شبیه‌سازی دینامیک سیستم‌های کوانتومی با استفاده از پردازنده‌های کلاسیکی امری بسیار دشوار است چراکه تعداد متغیرهایی که برای توصیف یک سیستم کوانتومی به کار می‌رود به صورت نمایی رشد می‌کنند پس به فضای محاسباتی بسیار زیادی نیاز هست. برای رفع این مشکل ایده کامپیوترهای کوانتومی توسط فاینمن مطرح شد [۳]، که در آن از یک سیستم کنترل‌پذیر برای شبیه‌سازی دینامیک سایر سیستم‌های کوانتومی استفاده می‌شود. به عبارت ساده‌تر یک کامپیوتر کوانتومی متشکل از الگوریتم‌های کوانتومی است که شامل گیت‌های کوانتومی است که روی یک حالت اولیه معین اثر می‌کند و طوری تنظیم شده‌اند که حالت نهایی پس از اندازه‌گیری جواب یک مسئله معین را با احتمال بسیار خوب در برداشته‌باشد. به کارگیری الگوریتم‌های کوانتومی با توجه به محدودیت‌های آزمایشگاهی به‌طور کامل امکان‌پذیر نیست. از این رو نوع جدیدی از الگوریتم‌ها برای استفاده در محاسبات کوانتومی به کار گرفته شده‌است که با نام الگوریتم‌های ترکیبی وردشی کوانتومی شناخته می‌شوند [۴]. در الگوریتم‌های وردشی کوانتومی از کامپیوتر کوانتومی و کامپیوتر کلاسیکی به‌طور هم‌زمان استفاده می‌شود. آماده‌سازی حالت کوانتومی پارامتری و اندازه‌گیری کوانتومی در کامپیوتر کوانتومی انجام می‌شود و بهینه‌سازی پارامترها در کامپیوتر کلاسیکی صورت می‌گیرد. برای به کارگیری الگوریتم‌های ترکیبی وردشی کوانتومی از کامپیوتر کوانتومی مقیاس-متوسط نوفه‌ای استفاده می‌شود. این الگوریتم‌ها کاربرد وسیعی در محاسبات کوانتومی دارند برای مثال یافتن انرژی حالت پایه سیستم‌های مولکولی یا یافتن دینامیک کوانتومی یک سیستم کوانتومی با استفاده از این الگوریتم‌ها امکان‌پذیر است [۵-۸]. به دلیل وجود اثرات کوانتومی در این سیستم بازدهی بسیار بالایی دارد از این رو یافتن دینامیک و شبیه‌سازی دینامیک این سیستم مورد توجه است. مطالعات تحلیلی و عددی زیادی در مورد شبیه‌سازی دینامیک مجتمع FMO صورت گرفته‌است. در مراجع [۹، ۱۰] دینامیک مجتمع با استفاده

از دینامیک مولکولی مورد مطالعه قرار گرفته‌است. شبیه‌سازی دینامیک مجتمع با استفاده از طیف‌سنجی الکترونی دوبعدی [۱۱] و کیوبیت‌های ابررسانا [۱۲] و محاسبات کوانتومی NMR [۱۳] و همچنین با استفاده از شبیه‌سازی عددی آن انجام شده‌است. همچنین مفاهیم هم‌چون درهم‌تنیدگی و همدوسی در این سیستم مورد بحث قرار گرفته است [۲]. در این کار با استفاده از یک الگوریتم وردشی کوانتومی دینامیک مجتمع FMO شبیه‌سازی می‌شود. نتایج شبیه‌سازی با نتایج بدست‌آمده تحلیلی و عددی دقیق سازگاری بالایی دارد. این مقاله در بخش‌های زیر تنظیم شده‌است. در بخش دوم مجتمع FMO را معرفی می‌کنیم. در بخش سوم الگوریتم ترکیبی کوانتومی-کلاسیکی که برای یافتن دینامیک مورد استفاده می‌گردد را بیان می‌کنیم و در بخش چهارم نتایج و محاسبات شبیه‌سازی دینامیک را می‌آوریم و در نهایت در بخش پنجم نتیجه‌گیری و بحث بیان خواهد شد.

**مجتمع FMO:** دینامیک موثر مجتمع FMO با استفاده از یک هامیلتونی که تحول یکانی سیستم را مشخص می‌کند و جملات لیندبلاد موضعی که تحولات غیریکانی سیستم را مشخص می‌کند، بیان می‌گردد. تحولات غیریکانی مربوط به اندرکنش محیط با سیستم است که سبب اتلاف انرژی و میرایی فاز می‌شود. هامیلتونی مجتمع FMO شامل سه قسمت است: هامیلتونی مجموعه هفت باکتری و اندرکنش بین شان، هامیلتونی محیط پروتئینی ارتعاشی و هامیلتونی اندرکنش سیستم و محیط که بصورت زیر بیان می‌شود:

$$H = H_{sys} + H_{int} + H_{env} \quad (1)$$

که در آن  $H_{sys}$  هامیلتونی سیستم،  $H_{int}$  هامیلتونی اندرکنشی و  $H_{env}$  هامیلتونی محیط هست. در اینجا ما فقط روی  $H_{sys}$  تمرکز می‌کنیم و سایر قسمت‌ها را در نظر نمی‌گیریم.  $H_{sys}$  بصورت زیر بیان می‌شود:

$$H_{sys} = \sum_{j=1}^7 \hbar \omega_j \sigma_j^+ \sigma_j^- + \sum_{j \neq l}^6 v_{jl} (\sigma_j^+ \sigma_l^- + \sigma_j^- \sigma_l^+) \quad (2)$$

که در آن  $\sigma_j^+$  و  $\sigma_j^-$  به ترتیب عملگرهای بالا برنده و پایین برنده سایت  $j$  هستند.  $\hbar \omega_j$  انرژی برانگیختگی سایت  $j$  و  $v_{jl}$  نرخ گذار بین سایت‌های  $j$  و  $l$  است. توجه کنید که  $\sigma_j^+ = |j\rangle\langle 0|$  حالت پایه را به حالت برانگیخته می‌برد.

همچنین  $|j\rangle\langle 0| = \sigma_j^-$  حالت برانگیخته را به حالت پایه می‌برد، و  $|j\rangle$  در فضای تک برانگیختگی نوشته شده‌است یعنی در هر لحظه تنها یکی از سایت‌ها برانگیخته می‌شوند و بقیه سایت‌ها در حالت پایه باقی می‌مانند [۱].

ما با استفاده از انتقال پایه و با فرض اینکه  $\hbar = 1$  هامیلتونی را به فرم کیوبیتی زیر می‌نویسیم:

$$H_{sys} = \sum_{j=1}^7 \epsilon_j \sigma_j^z + \sum_{j \neq l}^6 v_{jl} (\sigma_j^x \sigma_l^x + \sigma_j^y \sigma_l^y) \quad (3)$$

این هامیلتونی از دو قسمت تشکیل شده‌است، قسمت اول مربوط به هامیلتونی تک کیوبیت هاست ( $H_0$ ) و هامیلتونی اندرکنش بین کیوبیت‌ها ( $H_I$ ) که در آن:

همانطور که اشاره شد  $|\psi(t)\rangle$  را با یک مجموعه از پارامترهای حقیقی  $\{\lambda_k(t)\}$  مشخص می‌کنیم. با در نظر گرفتن این مطلب می‌توانیم لاگرانژی را صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$L = i \sum_k \langle \psi | \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial \lambda_k} \dot{\lambda}_k - \langle \psi | H | \psi \rangle \quad (7)$$

که تابعیتی از پارامترهای  $\{\lambda_k\}$  دارد و مشتق زمانی پارامترها است و بصورت  $\dot{\lambda}_k = \frac{d\lambda_k}{dt}$  تعریف می‌شود. با استفاده از معادله اوایلر-لاگرانژ، معادله تحول پارامترها بصورت زیر به دست می‌آید:

$$\sum_i M_{ki} \dot{\lambda}_i = V_k \quad (8)$$

که در آن:

$$M_{k,q} = i \frac{\partial \langle \psi | \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial \lambda_k}}{\partial \lambda_q} + H.C \quad (9)$$

$$V_k = \frac{\partial \langle \psi | H | \psi \rangle}{\partial \lambda_k} + H.C$$

اینجا  $M$  و  $V$  حقیقی هستند، همچنین  $M$  یک ماتریس پادمتقارن است. معادله (۸) یک معادله دیفرانسیلی مرتبه اول است که به راحتی روی یک کامپیوتر کلاسیکی قابل حل است اما نکته مهم این است که  $M$  و  $V$  را باید روی کامپیوتر کوانتومی محاسبه کنیم [۶].

شبیه‌سازی دینامیک مجتمع FMO: برای استفاده از الگوریتم وردشی کوانتومی لازم است تا حالت اولیه پارامتری بیان شود که آن را بصورت زیر در نظر می‌گیریم.

$$|\psi_1\rangle = e^{i \sum_{j=1}^7 \lambda_1 \sigma_j^z} e^{i \sum_{j \neq l}^6 v_{jl} (\sigma_j^x \sigma_l^y)} |1000000\rangle \quad (10)$$

$$|\psi_2\rangle = e^{i \sum_{j=1}^7 \lambda_2 \sigma_j^x} e^{i \sum_{j \neq l}^6 v_{jl} (\sigma_j^x \sigma_l^y)} |0000001\rangle$$

که در آن  $\lambda_1$  و  $\lambda_2$  پارامترهای وردشی هستند. با رابطه (۹) عناصر ماتریسی را حساب می‌کنیم برای این کار از بسته کوانتومی کیوتیپ و پلتفرم پایکیول استفاده می‌کنیم که کیوتیپ<sup>۱</sup> یک بسته محاسباتی بر اساس زبان پایتون نوشته شده است و پایکیول<sup>۲</sup> پلتفرم کامپیوتر کوانتومی است که در فضای ابری (اینترنت) در دسترس می‌باشد. همچنین از یک کامپیوتر کلاسیکی برای حل معادله دیفرانسیلی به روش اوایلر استفاده شده است. با تعریف:

$$\rho(\lambda_1, \lambda_2) = |\psi_1\rangle\langle\psi_1| + |\psi_1\rangle\langle\psi_2| + |\psi_2\rangle\langle\psi_1| + |\psi_2\rangle\langle\psi_2| \quad (11)$$

و همچنین با در نظر گرفتن ماتریس چگالی که از حل دقیق  $\rho_{exact}$  مقدار هم‌پوشانی این دو حالت را با استفاده از متریک فاصله که بصورت  $D = Tr(\rho_{exact} - \rho(\lambda_1, \lambda_2))$  را به دست می‌آوریم. نتایج حاصل در شکل

$$H_0 = \sum_{j=1}^7 \epsilon_j \sigma_j^z \quad (4)$$

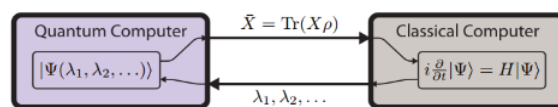
$$H_I = \sum_{j \neq l}^6 v_{jl} (\sigma_j^x \sigma_l^x + \sigma_j^y \sigma_l^y)$$

توجه کنید که در اینجا، فقط دینامیک قسمت یکانی بررسی می‌شود و اثرات محیط و تحولات غیریکانی نادیده گرفته شده است.

**الگوریتم وردشی کوانتومی:** هدف این الگوریتم ترکیبی حل معادله شرودینگر است.

$$\frac{i\hbar}{\partial t} |\phi(t)\rangle = H|\phi(t)\rangle, \quad \hbar = 1 \quad (5)$$

فرض می‌کنیم که  $|\phi(t)\rangle$  را بتوان با یک حالت  $|\psi(t)\rangle = |\psi(\lambda_1, \lambda_2, \dots)\rangle$  تقریب زد که پارامترهای وردشی هستند. در شکل زیر تصویر شماتیک از این الگوریتم نشان داده شده است که در آن هر دو کامپیوتر کلاسیکی و کوانتومی بکار رفته است.



شکل ۱. نمای شماتیکی از الگوریتم وردشی که برای یافتن دینامیک یک سیستم کوانتومی استفاده می‌شود [۶].

وظیفه کامپیوتر کلاسیکی یافتن پارامترها با توجه به معادله شرودینگر است که ماحصل آن تولید حالت  $|\psi(t)\rangle$  روی کامپیوتر کوانتومی است. با تکرار الگوریتم ترکیبی پارامترهای جدید به دست می‌آیند، پارامترها در زمان  $t(\{\lambda_k(t)\})$  به کامپیوتر کوانتومی فرستاده می‌شوند تا آن‌ها بتوانند مقادیری که در کامپیوتر کلاسیکی لازم است را به روزرسانی کنند سپس کامپیوتر کلاسیکی با استفاده از این مقادیر در لحظه  $t + \delta t(\{\lambda_k(t + \delta t)\})$  پارامترها را پیدا کند. در ادامه پارامترهای جدید به کامپیوتر کوانتومی برگردانده می‌شوند. با داشتن پارامترها در حالت اولیه  $\{\lambda_k(t)\}$  پارامترها در زمان  $T(\{\lambda_k(T)\})$  به دست می‌آید. اگر حالت  $|\psi(T)\rangle$  بتواند با دقت و خطای کم حالت  $|\phi(T)\rangle$  را تقریب بزند الگوریتم با موفقیت اجرا شده است.

با استفاده از نظریه وردشی اصول وردش وابسته به زمان برای معادله شرودینگر از رابطه  $\delta \int_{t_i}^{t_f} dt L = 0$  به دست می‌آید که در آن  $L$ ، لاگرانژی است و بصورت زیر تعریف می‌شود:

$$L = \langle \psi(t) | \frac{i\hbar}{\partial t} - H | \psi(t) \rangle \quad (6)$$

## 1. Qutip

## 2. Pyquil

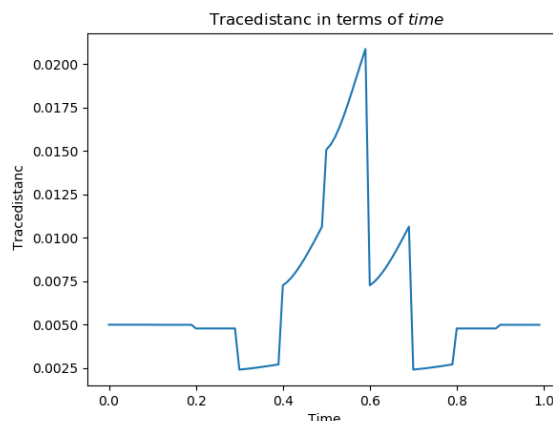
### بحث و نتیجه گیری

در این کار با استفاده از یک الگوریتم وردشی کوانتومی دینامیک مجتمع فنا-سون-میتوز شبیه سازی شد. بدین منظور با استفاده از چارچوب الگوریتم و انتخاب حالت اولیه پارامتری و استفاده از بسترهای کوانتومی، قسمت کوانتومی الگوریتم پیاده سازی شد. همچنین با استفاده از یک کامپیوتر کلاسیکی و بهره گیری از روش اوپلر معادله دیفرانسیل شد. برای بررسی دقت و کارایی الگوریتم از دو متریک فاصله و فیدلیتی که بیانگر هم پوشانی و نزدیکی دو حالت کوانتومی هستند، استفاده شد. نتایج نشان داد که با دقت بسیار بالایی می توان دینامیک مجتمع را با استفاده از الگوریتم ترکیبی شبیه سازی کرد.

### منابع و مراجع

- [1]. Caruso, F., et al., *Entanglement and entangling power of the dynamics in light-harvesting complexes*. Physical Review A, 2010. 81(6): p. 062346.
- [2]. Lambert, N., et al., *Quantum biology*. Nature Physics, 2013. 9(1): p. 10-18.
- [3]. Feynman, R.P., *Simulating physics with computers*. Int. J. Theor. Phys, 1999. 21(6/7).
- [4]. Peruzzo, A., et al., *A variational eigenvalue solver on a photonic quantum processor*. Nature communications, 2014. 5: p. 4213.
- [5]. O'Malley, P.J., et al., *Scalable quantum simulation of molecular energies*. Physical Review X, 2016. 6(3): p. 031007.
- [6]. Li, Y. and S.C. Benjamin, *Efficient variational quantum simulator incorporating active error minimization*. Physical Review X, 2017. 7(2): p. 021050.
- [7]. Higgott, O., D. Wang, and S. Brierley, *Variational quantum computation of excited states*. Quantum, 2019. 3: p. 156.
- [8]. Farhi, E., J. Goldstone, and S. Gutmann, *A quantum approximate optimization algorithm*. arXiv preprint arXiv:1411.4028, 2014.
- [9]. Moix, J., et al., *Efficient energy transfer in light-harvesting systems, III: The influence of the eighth bacteriochlorophyll on the dynamics and efficiency in FMO*. The Journal of Physical Chemistry Letters, 2011. 2(24): p. 3045-3052.
- [10]. Renger, T., et al., *Normal mode analysis of the spectral density of the Fenna-Matthews-Olson light-harvesting protein: how the protein dissipates the excess energy of excitons*. The Journal of Physical Chemistry B, 2012. 116(50): p. 14565-14580.
- [11]. Yeh, S.-H. and S. Kais, *Simulated two-dimensional electronic spectroscopy of the eight-bacteriochlorophyll FMO complex*. The Journal of chemical physics, 2014. 141(23): p. 12B645\_1.
- [12]. Mostame, S., et al., *Emulation of complex open quantum systems using superconducting qubits*. Quantum Information Processing, 2017. 16(2): p. 44.
- [13]. Mahdian, M. and H.D. Yeganeh, *Quantum simulation of Fenna-Matthew-Olson (FMO) complex on a nuclear magnetic resonance (NMR) quantum computer*. arXiv preprint arXiv:1901.03118, 2019.

۲ نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می شود این دو حالت هم پوشانی بسیار بالایی دارند.

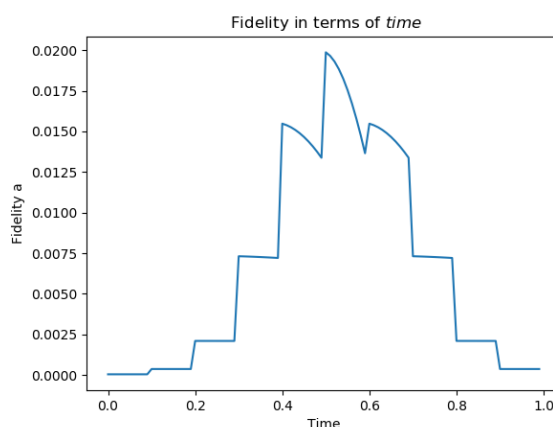


شکل ۲. نمودار متریک فاصله برحسب زمان؛ مقادیر اولیه برابر است با  $\lambda_1 = 0.01$  و  $\lambda_2 = 0$  و  $v_{j1} = 1$  و  $\epsilon_j = 0$ .

همچنین برای بررسی اینکه دو حالت چقدر بهم نزدیک هستند از متریک فیدلیتی استفاده می کنیم که به صورت زیر تعریف می شود:

$$F(\rho_{\text{exact}} \cdot \rho(\lambda_1, \lambda_2)) = \left[ \text{tr} \sqrt{\sqrt{\rho_{\text{exact}}} \rho(\lambda_1, \lambda_2) \sqrt{\rho_{\text{exact}}}} \right]^2 \quad (12)$$

نتایج حاصل در نمودار شکل ۳ نشان داده شده است که حاکی از فیدلیتی بالایی دارد.



شکل ۳. نمودار Fidelity فاصله برحسب زمان؛ مقادیر اولیه برابر است با  $\lambda_1 = 0.01$  و  $\lambda_2 = 0$  و  $v_{j1} = 1$  و  $\epsilon_j = 0$ .