

**MITIGASI QUANTUM ERROR BERBASIS MACHINE
LEARNING PADA SIMULASI VARIATIONAL
QUANTUM EIGENSOLVER (VQE) UNTUK
PERHITUNGAN ENERGI MOLEKUL H_2 , HeH^+ , DAN
 $HeHe^{2+}$**

Skripsi

**Disusun untuk memenuhi salah satu syarat
memperoleh gelar Sarjana Fisika**



**Maudina Rohmah
1306622016**

**PROGRAM STUDI FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS NEGERI JAKARTA
2026**

ABSTRACT

Maudina Rohmah. Machine Learning-Based Quantum Error Mitigation in Variational Quantum Eigensolver (VQE) Simulations for the Calculation of the Energy of H_2 , HeH^+ , and $HeHe^{2+}$ Molecules. Supervised by TEGUH BUDI PRAYITNO and YANOAR PRIBADI SARWONO

This research discusses about the application of machine learning-based quantum error mitigation in Variational Quantum Eigensolver (VQE) simulations for calculating the ground-state energies of H_2 , HeH^+ , and $HeHe^{2+}$ molecules. VQE is a hybrid quantum-classical algorithm designed for Noisy Intermediate-Scale Quantum (NISQ) devices, but its performance is limited by various noise sources. In this work, supervised learning approaches, namely Random Forest and XGB, are employed for error mitigation and compared with the conventional Zero Noise Extrapolation (ZNE) method. Simulations are performed using Qiskit Nature and PySCF with the STO-3G basis set and a TwoLocal ansatz. Noisy data are generated using the FakeAthensV2 backend, which emulates the characteristics of real quantum hardware. The mitigation performance is evaluated using Mean Square Error (MSE) and the coefficient of determination (R^2). The results demonstrate that machine learning-based mitigation improves the accuracy of VQE simulations by producing energies closer to ideal values. Among the evaluated methods, XGB achieves the best performance, yielding the lowest MSE and the highest R^2 . These findings indicate that machine learning is a promising and effective approach for quantum error mitigation in NISQ-era quantum computing.

Keywords: Variational Quantum Eigensolver (VQE), quantum error mitigation, machine learning, Zero Noise Extrapolation (ZNE), Quantum Computing

ABSTRAK

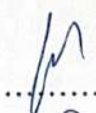
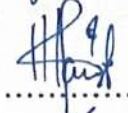
Maudina Rohmah. Mitigasi Quantum Error Berbasis Machine Learning pada Simulasi Variational Quantum Eigensolver (VQE) untuk Perhitungan Energi Molekul H_2 , HeH^+ , dan $HeHe^{2+}$. Dibawah bimbingan TEGUH BUDI PRAYITNO, YANOAR PRIBADI SARWONO

Penelitian ini bertujuan menerapkan mitigasi quantum error berbasis machine learning pada simulasi Variational Quantum Eigensolver (VQE) untuk perhitungan energi dasar molekul H_2 , HeH^+ , dan $HeHe^{2+}$. VQE merupakan algoritma hibrida kuantum-klasik yang sesuai untuk perangkat Noisy Intermediate-Scale Quantum (NISQ), namun akurasi masih dipengaruhi oleh berbagai sumber noise. Pada penelitian ini digunakan metode mitigasi error berbasis supervised learning, yaitu Random Forest dan XGB, serta dibandingkan dengan metode Zero Noise Extrapolation (ZNE). Simulasi dilakukan menggunakan Qiskit Nature dan PySCF dengan basis set STO-3G dan ansatz TwoLocal. Data noisy diperoleh melalui simulasi backend FakeAthensV2 yang merepresentasikan karakteristik perangkat kuantum nyata. Kinerja metode mitigasi dievaluasi menggunakan Mean Square Error (MSE) dan koefisien determinasi (R^2). Hasil penelitian menunjukkan bahwa metode machine learning mampu meningkatkan akurasi hasil simulasi VQE dengan menghasilkan energi yang lebih mendekati nilai ideal. Di antara metode yang diuji, XGB memberikan performa terbaik dengan nilai MSE terendah dan R^2 tertinggi dibandingkan Random Forest dan ZNE. Hasil ini menunjukkan bahwa machine learning berpotensi menjadi metode mitigasi error yang efektif untuk meningkatkan performa komputasi kuantum pada era NISQ.

Kata Kunci: Variational Quantum Eigensolver (VQE), Machine Learning, Mitigasi Error Kuantum, Zero Noise Extrapolation (ZNE), Komputer Kuantum

LEMBAR PENGESAHAN SKRIPSI
MITIGASI QUANTUM ERROR BERBASIS MACHINE LEARNING
PADA SIMULASI VARIATIONAL QUANTUM EIGENSOLVER (VQE)
UNTUK PERHITUNGAN ENERGI MOLEKUL H_2 , HeH^+ , DAN $HeHe^{2+}$

Nama : Maudina Rohmah
No. Registrasi : 1306622016

Nama	Tanda Tangan	Tanggal
Penanggung Jawab		
Dekan : Dr. Hadi Nasbey, S.Pd., M.Si. NIP. 197909162005011004		28-07-2026
Wakil Penanggung Jawab		
Wakil Dekan I : Dr. Meiliasari, S.Pd., M.Sc. NIP. 197905042009122002		28-07-2026
Ketua : Riser Fahdiran, S.Si., M.Si. NIP. 198307172009121008		10-07-2026
Sekretaris : Syafrima Wahyu, M.Si. NIP. 199110132023211021		10-07-2026
Anggota		
Pembimbing I : Dr. Teguh Budi Prayitno M. Si NIP.198205262008121001		07-07-2026
Pembimbing II : Yanoar Pribadi Sarwono, Ph. D NIP. 198201072022021001		07-07-2026
Penguji : Prof. Dr. Esmar Budi, M.T. NIP. 197207281999031002		14-07-2026

Dinyatakan lulus ujian skripsi pada tanggal 11 Juni 2026

LEMBAR PERNYATAAN ORISINALITAS

Saya yang bertanda tangan di bawah ini menyatakan dengan sebenarnya bahwa skripsi yang berjudul "**Mitigasi Quantum Error pada Simulasi Variational Quantum Eigensolver (VQE) untuk Perhitungan Energi Molekul H_2 , HeH^+ , dan $HeHe^{2+}$** " merupakan hasil karya ilmiah yang saya susun secara mandiri di bawah bimbingan dosen pembimbing sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Sains pada Program Studi Fisika, Universitas Negeri Jakarta.

Seluruh informasi yang berasal dari karya atau penulis lain yang telah dipublikasikan yang digunakan dalam teks skripsi ini, telah dicantumkan dalam "Daftar Pustaka" sesuai dengan norma, kaidah, dan etika penulisan ilmiah.

Jika dikemudian hari terbukti bahwa sebagian skripsi ini bukan hasil karya saya sendiri, saya bersedia menerima sanksi pencabutan gelar akademik yang saya peroleh dan sanksi-sanksi lainnya sesuai dengan peraturan perundang-undangan yang berlaku.

Jakarta, 11 Juni 2026



Maudina Rohmah



KEMENTERIAN PENDIDIKAN TINGGI, SAINS DAN TEKNOLOGI
UNIVERSITAS NEGERI JAKARTA
PERPUSTAKAAN DAN KEARSIPAN

Jalan Rawamangun Muka Jakarta 13220

Telepon/Faksimili: 021-4894221

Laman: lib.unj.ac.id

LEMBAR PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI
KARYA ILMIAH UNTUK KEPENTINGAN AKADEMIS

Sebagai sivitas akademika Universitas Negeri Jakarta, yang bertanda tangan di bawah ini, saya:

Nama : Maudina Rohmah
NIM : 1306622016
Fakultas/Prodi : Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam / Fisika
Alamat email : maudinarh7@gmail.com

Demi pengembangan ilmu pengetahuan, menyetujui untuk memberikan kepada Perpustakaan dan Kearsipan Universitas Negeri Jakarta, Hak Bebas Royalti Non-Eksklusif atas karya ilmiah:

☒ Skripsi ☐ Tesis ☐ Disertasi ☐ Lain-lain (.....)

yang berjudul :

Mitigasi Quantum Error Berbasis Machine Learning pada Simulasi Variational Quantum Eigensolver (VQE) untuk perhitungan Energi Molekul H_2 , HeH^+ , dan $HeHe^{2+}$

Dengan Hak Bebas Royalti Non-Eksklusif ini Perpustakaan dan Kearsipan Universitas Negeri Jakarta berhak menyimpan, mengalihmediakan, mengelolanya dalam bentuk pangkalan data (*database*), mendistribusikannya, dan menampilkan/mempublikasikannya di internet atau media lain secara *fulltext* untuk kepentingan akademis tanpa perlu meminta ijin dari saya selama tetap mencantumkan nama saya sebagai penulis/pencipta dan atau penerbit yang bersangkutan.

Saya bersedia untuk menanggung secara pribadi, tanpa melibatkan pihak Perpustakaan Universitas Negeri Jakarta, segala bentuk tuntutan hukum yang timbul atas pelanggaran Hak Cipta dalam karya ilmiah saya ini.

Demikian pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya.

Jakarta,

Penulis


(Maudina Rohmah)
nama dan tanda tangan

KATA PENGANTAR

Puji syukur ke hadirat Allah SWT atas segala rahmat, karunia, dan hidayah-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul “Mitigasi Quantum Error pada Simulasi Variational Quantum Eigensolver (VQE) untuk Perhitungan Energi Molekul H_2 , HeH^+ , dan $HeHe^{2+}$ ” sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Sains pada Program Studi Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Negeri Jakarta.

Penyusunan skripsi ini tidak terlepas dari bantuan, dukungan, bimbingan, serta doa dari berbagai pihak. Oleh karena itu, pada kesempatan ini penulis menyampaikan ucapan terima kasih yang sebesar-besarnya kepada:

1. Allah SWT yang telah memberikan kesehatan, kekuatan, dan kemudahan dalam menyelesaikan skripsi ini.
2. Kedua orang tua dan seluruh keluarga yang selalu memberikan doa, dukungan moral, motivasi, serta kasih sayang yang tiada henti kepada penulis.
3. Bapak Dr. Teguh Budi Prayitno, M.Si. selaku Dosen Pembimbing I sekaligus Koordinator Program Studi Fisika FMIPA Universitas Negeri Jakarta yang telah meluangkan waktu, tenaga, dan pikiran untuk memberikan arahan, masukan, serta bimbingan selama proses penyusunan skripsi.
4. Bapak Yanoar Pribadi Sarwono, Ph.D. selaku Dosen Pembimbing II yang telah memberikan saran, masukan, dan wawasan selama pelaksanaan penelitian.
5. Saudara Dewan Java Turis Repmi Tamsih sebagai rekan kerja BRIN penulis yang selalu mendukung secara emosional untuk tetap bertahan dalam penelitian.
6. Mbak Luthfiya Kurnia Permatahati sebagai senior BRIN yang turut mendukung dan menyemangati selama masa sulit penulis.

7. Untuk teman-teman rekan kerja BRIN seperti Mbak Ira Iryanti, Achmad Jaelani, Difa Farhani Hakim dan Rasyid Ustman Ramadhan sebagai senior yang memberikan referensi penelitian dan menunjukkan jalan penelitian.
8. Nabilah Khorunnisa, Armia, Hendra Maulana, Akmal Taqiyyuddin Azza'im selaku junior BRIN yang telah mendukung secara mental dan selalu terbuka dalam mendengar keluh kesah penulis.
9. Teman-teman fisika Habbiebie Robbi, Sayid, Syawal, Safta, Arini RNAE, Regita Nababan, Olivia Fauziah dan Melisa Oceane yang selalu memberikan informasi dalam menyusun penelitian ini.
10. Teman Organisasi seperti Masyithoh La Roiba Haq, Rizqina Tsabitah Kautsarrany, Alifah Widya, Nurul Nabila dan Novita Rahmadani yang telah memberikan emosi positif untuk kesehatan mental penulis.
11. Sahabat Isai Ariel S dan Ishak Yehuda S sebagai sahabat yang menghibur dikala kesedihan selama menyusun skripsi.
12. Teman-teman *awardee* WIC seperti Dianisa Zeinirmala, Vanessa Alexandra Hutagalung, Ninik Sri Mulyasari dan teman teman yang tidak bisa disebutkan namanya satu persatu yang memberikan kenangan manis untuk menghibur penulis selama menyusun skripsi ini.
13. Untuk Kak Dwi Meica Sari, Kak Annisa, Kak Yuka Azahra Amelya, Kak Nurul Nashiroh Amaliyah, Kak Salma, dan Kak Dilla Putri Maharani yang telah memberikan masukan dan saran untuk penulis selama proses bertumbuh dan berkembang untuk selalu kuat dalam menjalani hidup.
14. Untuk teman seperjuangan zaman PKKMB yaitu Ardes yang telah memberikan nasihat.

Penulis sadar bahwa masih banyak kekurangan dalam penulisan. Oleh karena itu, penulis mengharapkan kritik dan saran yang bersifat membangun sebagai bahan evaluasi dan perbaikan pada penelitian selanjutnya.

Jakarta, 11 Juni 2026

Maudina Rohmah

DAFTAR ISI

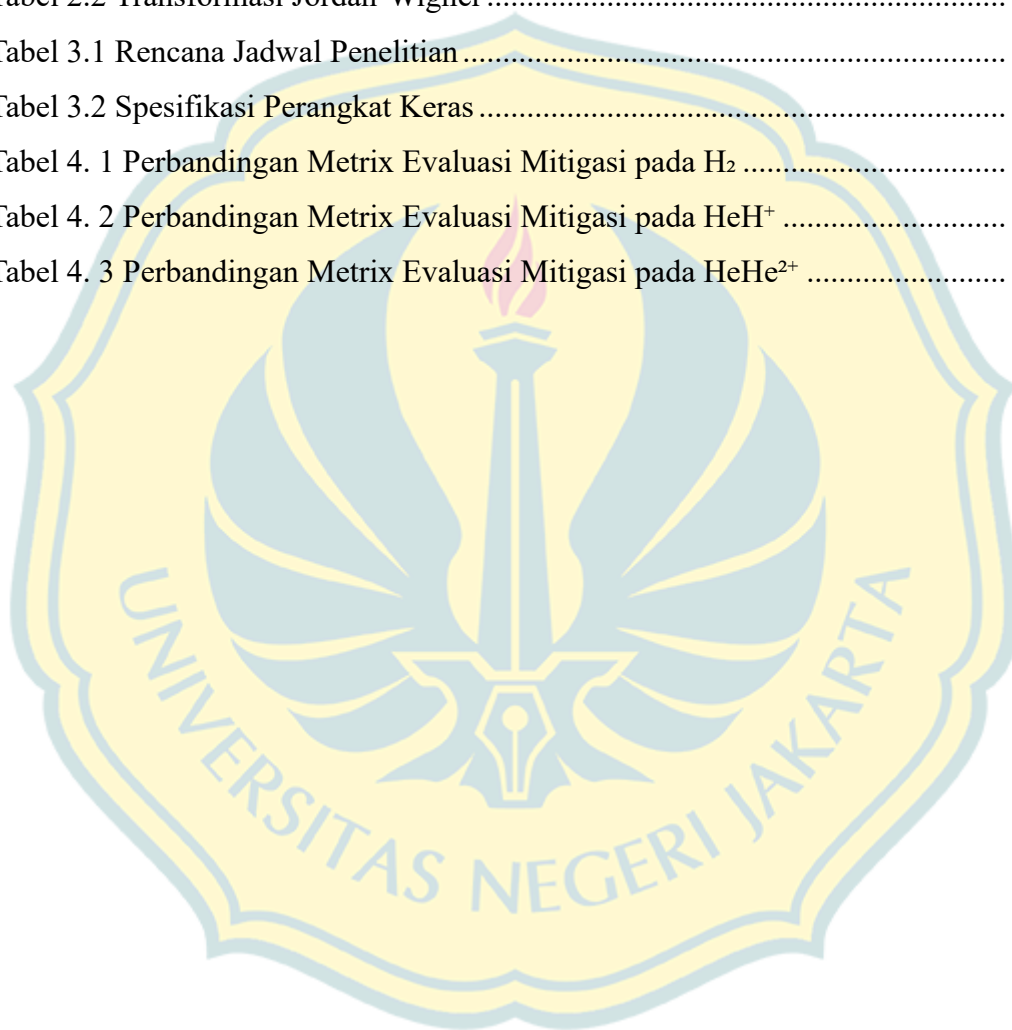
	Halaman
LEMBAR PENGESAHAN SKRIPSI	i
LEMBAR PERNYATAAN ORISINALITAS	ii
KATA PENGANTAR.....	iii
ABSTRAK	v
ABSTRACT.....	vi
DAFTAR ISI	vii
DAFTAR TABEL.....	x
DAFTAR GAMBAR	xi
DAFTAR LAMPIRAN	xii
DAFTAR SINGKATAN	xiii
BAB I	1
PENDAHULUAN	1
A. Latar Belakang.....	1
B. Rumusan Masalah	3
C. Batasan Masalah	3
D. Tujuan Penelitian	4
E. Manfaat Penelitian.....	4
BAB II.....	5
TINJAUAN PUSTAKA.....	5
A. Komputer Kuantum	5
1. Prinsip Kerja Komputer Kuantum	5
2. Superposisi	6
3. Entanglement.....	7
B. Molekul.....	7
1. Struktur elektronik molekul	7
2. Energi Keadaan Dasar (Ground State Energy)	8
3. Molekul (H_2)	9
4. Molekul HeH^+	10

5.	Molekul HeHe ²⁺	11
C.	Rangkaian Simulasi	13
1.	Gerbang Kuantum	13
2.	Basis Set	15
3.	Operator Pemusnahan dan Pembentukan	16
4.	Hamiltonian Molekul dalam Second Quantization	18
5.	Transformasi Jordan-Winger	19
6.	Variational Quantum Eigensolver (VQE)	20
7.	Ansatz	21
8.	State Overlap	21
9.	Qiskit	22
10.	PySCF	23
11.	Error Pada Komputer Kuantum	24
D.	Noise Pada Komputer Kuantum	24
1.	Jenis Noise pada Komputer Kuantum	24
E.	Mitigasi Error Pada Komputer Kuantum	26
1.	Machine learning untuk Mitigasi Error	26
2.	Supervised Learning	27
3.	Random Forest	28
4.	XGB	29
F.	Quantum Error Mitigation	31
1.	Zero Noise Extrapolation (ZNE)	31
G.	Mean Square Error (MSE)	32
H.	R-squared (R ²)	32
I.	Penelitian Relevan	33
BAB III		36
METODOLOGI PENELITIAN		36
A.	Jenis Penelitian	36
B.	Tempat dan Waktu Penelitian	36
C.	Metode Penelitian	37
1.	Alat Penelitian	38

2. Prosedur Penelitian.....	38
D. Teknik Pengumpulan dan Analisa Data.....	48
1. Teknik Pengumpulan Data	48
2. Teknik Mitigasi Error berbasis Machine Learning	49
3. Teknik Analisa Data	50
BAB IV	51
HASIL DAN PEMBAHASAN.....	51
A. Mitigasi Error pada Molekul H_2	51
B. Mitigasi Error pada Molekul HeH^+	54
C. Mitigasi Error pada Molekul $HeHe^{2+}$	58
BAB V.....	62
KESIMPULAN DAN SARAN.....	62
A. Kesimpulan.....	62
B. Saran.....	62
DAFTAR PUSTAKA.....	64
DAFTAR RIWAYAT HIDUP.....	77

DAFTAR TABEL

	Halaman
Tabel 2.1 Gerbang Kuantum Unary	14
Tabel 2.2 Transformasi Jordan-Wigner	19
Tabel 3.1 Rencana Jadwal Penelitian	37
Tabel 3.2 Spesifikasi Perangkat Keras	38
Tabel 4. 1 Perbandingan Metrix Evaluasi Mitigasi pada H_2	53
Tabel 4. 2 Perbandingan Metrix Evaluasi Mitigasi pada HeH^+	56
Tabel 4. 3 Perbandingan Metrix Evaluasi Mitigasi pada $HeHe^{2+}$	60



DAFTAR GAMBAR

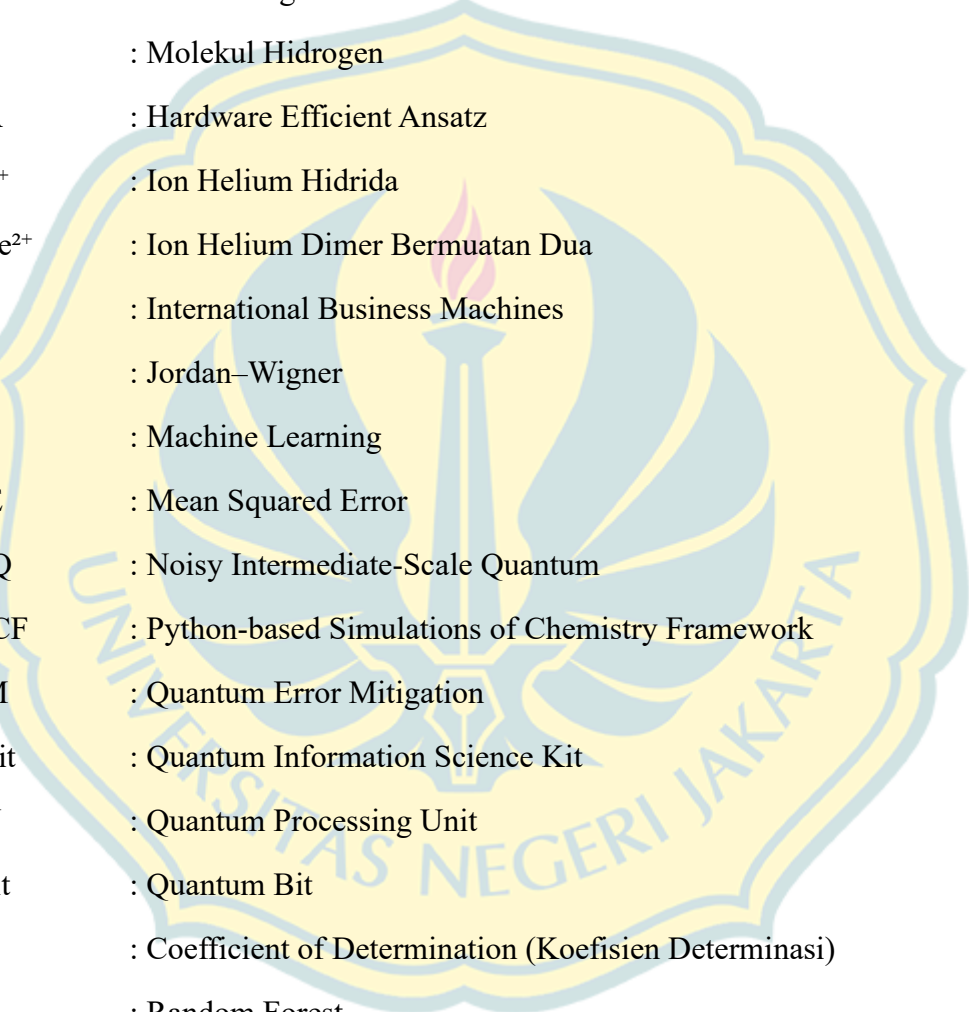
	Halaman
Gambar 2.1 Input dan Output pada Klasik Komputer dan Kuantum Komputer	5
Gambar 2.2 Ikatan Molekul H_2	9
Gambar 2.3 Ikatan Molekul HeH^+	11
Gambar 2.4 Ikatan Molekul $HeHe^{2+}$	12
Gambar 2.5 Diagram VQE.....	20
Gambar 2.6 Ansatz.....	21
Gambar 2.7 Qiskit.....	22
Gambar 2.8 Diagram Alir Random Forest.....	29
Gambar 2.9 Diagram Alir XGB	30
Gambar 3.1 Hardware Efficient Ansatz (HEA)	43
Gambar 3.2 Diagram VQE.....	44
Gambar 3.3 Diagram Alir Penelitian.....	47
Gambar 4. 1 Mitigasi Error pada Molekul H_2	52
Gambar 4. 2 Mitigasi Error pada Molekul HeH^+	55
Gambar 4. 3 Mitigasi Error pada Molekul $HeHe^{2+}$	59

DAFTAR LAMPIRAN

	Halaman
Lampiran 1	70
Lampiran 2	74
Lampiran 3	75



DAFTAR SINGKATAN



BO	: Born–Oppenheimer
CX	: Controlled-NOT Gate
FCI	: Full Configuration Interaction
H ₂	: Molekul Hidrogen
HEA	: Hardware Efficient Ansatz
HeH ⁺	: Ion Helium Hidrida
HeHe ²⁺	: Ion Helium Dimer Bermuatan Dua
IBM	: International Business Machines
JW	: Jordan–Wigner
ML	: Machine Learning
MSE	: Mean Squared Error
NISQ	: Noisy Intermediate-Scale Quantum
PySCF	: Python-based Simulations of Chemistry Framework
QEM	: Quantum Error Mitigation
Qiskit	: Quantum Information Science Kit
QPU	: Quantum Processing Unit
Qubit	: Quantum Bit
R ²	: Coefficient of Determination (Koefisien Determinasi)
RF	: Random Forest
RX	: Rotation-X Gate
RY	: Rotation-Y Gate
RZ	: Rotation-Z Gate
STO	: Slater-Type Orbital
STO-3G	: Slater-Type Orbital–3 Gaussian
VQE	: Variational Quantum Eigensolver

XGB : Extreme Gradient Boosting

ZNE : Zero Noise Extrapolation

