

BAB I

PENDAHULUAN

A. Latar Belakang

Perkembangan komputasi modern menghadapi tantangan signifikan ketika menangani sistem fisika yang berkembang dan kompleks. Komputer klasik, yang bekerja berdasarkan bit biner, mengalami pertumbuhan permintaan sumber daya yang eksponensial ketika digunakan untuk mensimulasikan dinamika kuantum atau memodelkan sistem molekul berskala besar (Nielsen & Chuang, 2010). Keterbatasan ini menjadi salah satu faktor utama yang mendorong minat dan alasan memanfaatkan komputer kuantum. Komputer kuantum menggunakan qubit yang memiliki sifat superposisi dan entanglement sehingga memungkinkan mempercepat penyelesaian jenis masalah tertentu dibandingkan komputer klasik (Preskill, 2018).

Komputer kuantum menjanjikan keuntungan yang substansial dibandingkan komputer klasik pada umumnya. Walaupun menawarkan potensi yang menjanjikan, perangkat kuantum masih berada dalam fase *Noisy Intermediate-Scale Quantum* (NISQ), yaitu kondisi di mana jumlah qubit sudah cukup besar namun masih sangat rentan terhadap gangguan lingkungan dan ketidaksempurnaan operasi, sehingga menghasilkan *error* pada proses komputasi (Bharti, et al., 2021).

Salah satu algoritma yang relevan dalam pemrosesan kuantum perangkat NISQ adalah *Variational Quantum Eigensolver* (VQE), yang dirancang untuk mengeksplorasi struktur elektronik suatu sistem atomik berdasarkan prinsip variasi *Rayleigh-Ritz* (Peruzzo, et al., 2013). Tujuan utama algoritma ini adalah mencari nilai ekspektasi energi minimum dari sebuah sistem Hamiltonian (Anaya & Delgado, 2022). Dalam pelaksanaannya, VQE menggabungkan kekuatan komputasi klasik dan kuantum. Komputer klasik yang menggunakan bit berfungsi untuk menghitung nilai komponen Hamiltonian serta memperbarui parameter, sementara qubit pada komputer kuantum digunakan untuk menghitung nilai ekspektasi energi dengan parameter yang dioptimasi hingga ditemukan energi dasar minimum (Sharkey & Chance, 2022).

Sifat qubit yang sangat sensitif terhadap gangguan eksternal membuat komputer kuantum rentan terhadap kesalahan yang dapat mempengaruhi akurasi perhitungan. *Noise* yang muncul pada proses pengukuran maupun operasi kuantum menyebabkan perhitungan energi menyimpang dari nilai *ideal*. Oleh sebab itu, pengembangan metode mitigasi *error* menjadi krusial untuk meningkatkan performa perangkat kuantum. Teknik mitigasi *error* dikembangkan untuk mengatasi permasalahan tersebut, salah satunya adalah *Zero Noise Extrapolation* (ZNE), yaitu metode mitigasi yang bekerja dengan cara menskalakan tingkat *noise* pada sirkuit kuantum secara terkontrol dan kemudian mengekstrapolasi hasil pengukuran menuju kondisi *ideal* (Mohammadipour & Li, 2025). Meskipun metode ini terbukti efektif dalam meningkatkan akurasi hasil komputasi kuantum, penerapannya sering memerlukan *overhead* eksperimen tambahan serta menjadi kurang efisien ketika diaplikasikan pada sistem kuantum dengan ukuran yang lebih besar dan kompleks.

Seiring berkembangnya pendekatan yang berorientasi data, penerapan *machine learning* (ML) mulai menarik perhatian sebagai alternatif yang lebih adaptif. ML terkhususnya pada *supervised learning* seperti *random forest* dan XGB dipilih karena keduanya memiliki kemampuan untuk mempelajari pola nonlinear pada data *noisy* yang dihasilkan perangkat NISQ. *Random forest* menawarkan ketahanan terhadap *noise* dan *overfitting* melalui mekanisme *ensemble* pohon keputusan, sehingga cocok untuk dataset terbatas yang umum pada eksperimen VQE (Liao, et al., 2024). Sementara itu, XGB memberikan performa prediksi yang tinggi melalui teknik *gradient boosting* yang mampu menangkap hubungan kompleks antar-parameter, serta memiliki regularisasi internal yang membuatnya stabil terhadap fluktuasi data (Chen & Guestrin, 2016). Kombinasi kedua model ini menjadikannya kandidat yang kuat untuk memprediksi nilai energi yang mendekati kondisi *ideal* tanpa memerlukan *overhead* eksperimen yang besar.

Molekul sederhana seperti H_2 , HeH^+ , dan $HeHe^{2+}$ banyak digunakan sebagai sistem benchmark dalam kimia kuantum karena memiliki struktur elektronik yang relatif sederhana, sehingga sesuai untuk mengevaluasi kinerja algoritma komputasi kuantum. Molekul-molekul ini juga sensitif terhadap *noise*, sehingga sangat cocok

digunakan untuk mengevaluasi efektivitas teknik mitigasi *error* (McArdle, et al., 2020).

Oleh karena itu, penelitian ini bertujuan untuk menerapkan machine learning sebagai teknik mitigasi *error* pada algoritma VQE dalam perhitungan energi molekul H_2 , HeH^+ , dan $HeHe^{2+}$. Dengan mengevaluasi perbandingan energi noisy, energi *ideal*, nilai energi yang diperoleh melalui metode mitigasi konvensional yaitu *Zero Noise Extrapolation* (ZNE), serta hasil mitigasi berbasis ML. Hasil penelitian ini diharapkan dapat memberikan kontribusi terhadap pengembangan metode mitigasi yang lebih akurat dan skalabel pada era komputasi kuantum NISQ.

B. Rumusan Masalah

Penjelasan latar belakang sebelumnya bisa membantu menyusun rumusan masalah dalam penelitian ini seperti berikut.

1. Penerapan algoritma VQE dalam menghitung energi dasar molekul H_2 , HeH^+ , dan $HeHe^{2+}$.
2. Pengaruh *noise* pada hasil simulasi VQE dalam perhitungan energi molekul.
3. Penerapan machine learning dalam memitigasi *error* pada hasil perhitungan energi dasar menggunakan algoritma VQE.

C. Batasan Masalah

Merujuk pada rumusan masalah, penelitian ini perlu diberikan batasan agar tujuan yang ditetapkan dapat dicapai dengan jelas.

1. Molekul yang digunakan dalam penelitian ini dibatasi pada tiga sistem molekul, yaitu H_2 , HeH^+ , dan $HeHe^{2+}$.
2. Perhitungan dilakukan dengan memanfaatkan algoritma VQE dengan variational ansatz TwoLocal.
3. Basis set atau representasi Hamiltonian dibatasi pada basis model STO-3G.
4. Mitigasi *error* yang digunakan dalam penelitian ini mencakup metode konvensional yaitu *Zero Noise Extrapolation* (ZNE) serta pendekatan Machine Learning dengan menerapkan algoritma *Random forest* dan *XGB*.

D. Tujuan Penelitian

Berdasarkan perumusan masalah yang telah dijelaskan sebelumnya, penelitian ini memiliki tujuan sebagai berikut.

1. Menerapkan algoritma *Variational Quantum Eigensolver* (VQE) dengan variational ansatz *TwoLocal* untuk menghitung energi dasar molekul H_2 , HeH^+ , dan $HeHe^{2+}$ menggunakan basis set STO-3G.
2. Menganalisis pengaruh *noise* yang muncul pada simulasi perangkat komputasi kuantum menggunakan algoritma VQE.
3. Membandingkan akurasi hasil energi sebelum dan sesudah penerapan mitigasi *error*.

E. Manfaat Penelitian

Manfaat yang diinginkan dari penelitian ini berdasarkan tujuan yang ingin dicapai adalah sebagai berikut.

1. Memberikan pemahaman lebih mendalam mengenai pengaruh *noise* pada simulasi algoritma VQE dalam komputasi kuantum.
2. Menjadi referensi pengembangan metode mitigasi *error* yang dapat diterapkan pada sistem molekul kecil.
3. Menunjukkan efektivitas metode mitigasi *error* dalam meningkatkan akurasi hasil simulasi kuantum tanpa memerlukan penambahan sumber daya qubit.