

BAB II

TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Landasan Teori

2.1.1 Teknologi Kuantum

Teknologi kuantum adalah bidang teknologi yang berkembang pesat dan berfokus pada penerapan prinsip-prinsip mekanika kuantum untuk berbagai aplikasi inovatif. Dari beberapa bidang teknologi kuantum, komputasi kuantum dinilai dapat mengoptimalkan keunggulan teknologi dalam bidang molekuler, khususnya dalam simulasi dan analisis sistem kimia yang kompleks.

Salah satu inovasi di dunia teknologi modern dan diyakini akan membawa umat manusia menuju era baru adalah komputasi kuantum (Hudedagaddi, 2016). Komputasi kuantum adalah bidang teknologi yang memanfaatkan prinsip-prinsip dasar mekanika kuantum, seperti superposisi dan keterikatan kuantum (*entanglement*), untuk melakukan perhitungan yang jauh melampaui kemampuan komputer klasik (IBM, 2024). Dengan mengintegrasikan konsep-konsep ini, teknologi kuantum telah menghasilkan potensi luar biasa dalam berbagai bidang, sehingga sering disebut sebagai generasi superkomputer yang lebih maju di masa depan.

Komputasi kuantum bukan hanya sekadar kemajuan teknis, melainkan sebuah disiplin interdisipliner yang menggabungkan fisika kuantum, ilmu komputer, dan teori informasi. Kombinasi ini menciptakan fondasi untuk pengembangan algoritma dan sistem komputasi baru yang mampu menyelesaikan masalah yang sebelumnya dianggap tidak mungkin atau memerlukan waktu yang sangat lama untuk diselesaikan dengan komputer konvensional (Rieffel, 2011). Fenomena ini membuka peluang besar untuk revolusi di berbagai sektor, termasuk kriptografi, pengoptimalan, simulasi molekuler, dan kecerdasan buatan.

Berbeda dengan komputer klasik yang menggunakan bit sebagai unit dasar perhitungan, komputer kuantum menggunakan qubit (quantum bit). Qubit memiliki kemampuan unik untuk berada dalam berbagai keadaan secara bersamaan melalui fenomena superposisi, berbeda dengan bit yang hanya dapat berada dalam salah satu dari dua keadaan, yaitu 0 atau 1. Kemampuan

ini memungkinkan komputer kuantum untuk melakukan berbagai perhitungan secara simultan, sehingga menghasilkan kecepatan pemrosesan yang jauh lebih unggul dibandingkan komputer digital konvensional (Gill, 2022).

Komputer kuantum sangat bermanfaat di bidang simulasi kuantum, terutama untuk simulasi molekul (Kassal, 2011), karena komputer kuantum dirancang untuk menangani masalah yang melibatkan fenomena kuantum secara langsung. Molekul dan sistem kimia beroperasi berdasarkan hukum mekanika kuantum, yang melibatkan interaksi kompleks antar elektron dan inti atom. Komputer klasik memiliki keterbatasan dalam menyelesaikan perhitungan semacam ini, terutama karena kompleksitasnya meningkat secara eksponensial dengan bertambahnya jumlah partikel dalam sistem.

2.1.2 Prinsip Dasar Komputasi Kuantum

Komputasi kuantum merupakan bidang multidisiplin yang melibatkan ilmu komputer, fisika, dan matematika (Yanofsky, 2008) untuk memanfaatkan mekanika kuantum dalam memecahkan masalah kompleks dengan kecepatan lebih tinggi dibandingkan komputer klasik. Bidang ini mencakup penelitian pada perangkat keras dan pengembangan aplikasi yang memanfaatkan efek-efek mekanika kuantum, seperti superposisi dan interferensi kuantum, untuk mencapai keunggulan komputasional.

Qubit dan Prinsip Superposisi

Komputer kuantum memanfaatkan fenomena unik dalam mekanika kuantum yang disebut superposisi (Khrennikov, 2021). Tidak seperti bit dalam komputer klasik yang hanya memiliki nilai bit 0 atau 1, qubit dalam komputer kuantum dapat berada dalam keadaan superposisi (Procopio, 2015). Superposisi pada qubit adalah salah satu konsep mendasar dalam teori komputasi kuantum. Ini mengacu pada kemampuan qubit untuk berada dalam keadaan campuran atau superposisi dari keadaan dasar yang mungkin. Misalnya, dalam sistem klasik, bit hanya dapat berada dalam salah satu keadaan, yaitu 0 atau 1. Namun, qubit dalam keadaan superposisi dapat berada dalam campuran kedua keadaan ini secara simultan dengan koefisien tertentu (Gill, 2022). Hal ini memungkinkan qubit untuk memproses sejumlah besar informasi secara paralel, memberi potensi untuk menyelesaikan masalah

kompleks yang jauh melampaui kemampuan komputer klasik (Saputra, 2009).

Secara matematis, jika $|0\rangle$ dan $|1\rangle$ adalah keadaan dasar dari qubit, maka qubit dapat diwakili sebagai kombinasi linear:

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, \quad (2.1)$$

di mana α dan β adalah koefisien kompleks yang memenuhi kondisi $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Ini berarti peluang untuk mengukur qubit dalam keadaan $|0\rangle$ adalah $|\alpha|^2$ dan untuk keadaan $|1\rangle$ adalah $|\beta|^2$ (LaPierre, 2021).

Konsep Bola Bloch di Qubit

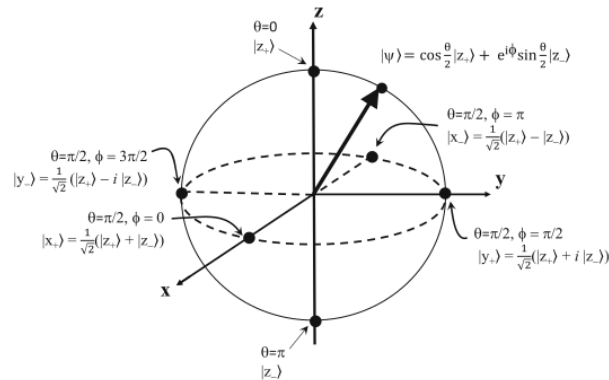
Konsep Bola Bloch adalah representasi visual dari keadaan kuantum sistem dua tingkat, seperti qubit dalam komputasi kuantum. Konsep ini dinamakan berdasarkan fisikawan teoritis Felix Bloch, yang mengembangkan ide tersebut pada tahun 1940-an sebagai cara untuk menggambarkan keadaan spin dalam sistem magnetik. Bola Bloch digunakan untuk menggambarkan keadaan kuantum dalam ruang vektor tiga dimensi, khususnya untuk spin atau qubit yang terdefinisi oleh dua basis yang saling ortogonal, yaitu keadaan dasar ($|0\rangle$) dan keadaan tereksitasi ($|1\rangle$). Bola Bloch divisualisasikan seperti pada Gambar 2.1.

$$|\psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|z+\rangle + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}|z-\rangle \quad (2.2)$$

Setiap keadaan spin dapat diperoleh dari Persamaan di atas dengan memilih nilai sudut θ dan ϕ yang sesuai (LaPierre, 2021). Misalnya,

Jika $\theta = 0$: $|\psi\rangle = |z+\rangle$

Jika $\theta = \pi$: $|\psi\rangle = |z-\rangle$



Gambar 2.1: Keadaan Spin dalam Bola Bloch

Sumber: (Ray LaPierre, 2021)

Sebuah qubit dalam komputasi kuantum dapat berada dalam superposisi dari kedua keadaan dasar ini, yaitu keadaan di mana amplitudo probabilitas untuk menemukan sistem dalam keadaan $|0\rangle$ atau $|1\rangle$ bukan hanya 0 atau 1, tetapi suatu nilai antara keduanya. Keadaan kuantum ini dapat ditulis dalam bentuk kombinasi linear dari kedua keadaan basis seperti pada persamaan 2.1, di mana α dan β adalah bilangan kompleks yang memenuhi kondisi normalisasi $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Dalam hal ini, Bola Bloch memberikan cara yang jelas untuk memvisualisasikan bagaimana keadaan kuantum ini berubah.

Bola Bloch menggambarkan keadaan ini sebagai sebuah vektor yang terletak pada permukaan bola tiga dimensi, di mana dua kutub bola melambangkan keadaan dasar $|0\rangle$ dan $|1\rangle$, dan seluruh permukaan bola mewakili semua kemungkinan keadaan superposisi dari $|0\rangle$ dan $|1\rangle$. Secara matematis, keadaan kuantum $|\psi\rangle$ dapat dituliskan dalam bentuk parametris sebagai:

$$|\psi\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|0\rangle + e^{i\phi}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|1\rangle, \quad (2.3)$$

di mana θ adalah sudut polar yang mengontrol amplitudo relatif antara keadaan $|0\rangle$ dan $|1\rangle$, sementara ϕ adalah sudut azimuthal yang menentukan komponen fase relatif antara kedua keadaan tersebut. Nilai θ berkisar antara 0 dan π , sementara ϕ berada pada interval $[0, 2\pi]$.

Bola Bloch tidak hanya berguna dalam komputasi kuantum, tetapi juga penting dalam memahami fenomena seperti superposisi kuantum dan

interferensi (Aerts, 2016). Setiap titik pada permukaan bola mewakili keadaan kuantum yang berbeda, dan dengan mengubah parameter θ dan ϕ , kita dapat menggambarkan transformasi yang terjadi pada qubit. Misalnya, rotasi qubit di sekitar sumbu bola Bloch akan mengubah amplitudo relatif antara $|0\rangle$ dan $|1\rangle$, serta fase antara keduanya, yang dapat mempengaruhi hasil pengukuran.

Operasi logika kuantum, yang dikenal dengan istilah *quantum gates*, dapat dilihat sebagai rotasi pada bola Bloch. Contoh yang paling sederhana adalah NOT *gate* (X *gate*) yang memutar keadaan qubit 180° di sekitar sumbu X bola Bloch, yang mengubah keadaan $|0\rangle$ menjadi $|1\rangle$, dan sebaliknya. *Quantum gate* lainnya seperti pintu Y dan Z, beroperasi dengan cara yang serupa, namun sepanjang sumbu yang berbeda. Proses-proses ini sangat penting dalam algoritma kuantum, di mana keadaan qubit seringkali dimanipulasi melalui urutan operasi untuk mencapai solusi dari masalah tertentu.

Konsep Entanglement

Entanglement atau keterikatan kuantum adalah fenomena unik dalam mekanika kuantum di mana dua atau lebih partikel terkait secara kuat satu sama lain, sehingga keadaan kuantum dari satu partikel tidak dapat dipisahkan atau dijelaskan secara independen dari keadaan kuantum partikel lainnya, meskipun jarak di antara mereka sangat jauh. Tingkat keterikatan ini dapat diukur menggunakan besaran yang disebut entropi keterikatan. Semakin tinggi nilai entropi keterikatan, semakin kuat hubungan keterikatan antara partikel-partikel tersebut (Gerry, 2023).

2.1.3 Hamiltonian Molekuler dan Energi Keadaan Dasar Molekul

Hamiltonian Molekuler

Hamiltonian molekul adalah operator dalam mekanika kuantum yang digunakan untuk menggambarkan energi total dari sebuah molekul dalam suatu sistem kuantum (Meyer, 2002). Dalam konteks molekul, Hamiltonian ini menggabungkan berbagai komponen energi yang relevan, seperti energi kinetik dari elektron dan inti atom, serta energi potensial yang muncul dari interaksi antara elektron dan inti tersebut. Hamiltonian ini sangat penting dalam

menentukan sifat-sifat molekuler, seperti struktur elektron dan energi molekul, melalui persamaan Schrödinger.

Secara umum, Hamiltonian molekuler (H) dapat dinyatakan sebagai berikut:

$$H = T_e + T_n + V_{e-e} + V_{n-n} + V_{e-n} \quad (2.4)$$

Di mana :

T_e : Energi kinetik elektron,

T_n : Energi kinetik inti,

V_{e-e} : Energi potensial repulsi antara elektron,

V_{n-n} : Energi potensial repulsi antara inti,

V_{e-n} : Energi potensial interaksi antara elektron dan inti.

Hamiltonian molekuler ini mencakup seluruh sistem molekuler, tetapi dalam praktiknya, Hamiltonian sering kali disederhanakan menggunakan pendekatan seperti *Born-Oppenheimer approximation*. Pendekatan ini mengasumsikan bahwa gerakan inti jauh lebih lambat dibandingkan gerakan elektron, sehingga memungkinkan kita memisahkan gerakan elektron dan inti. Dengan demikian, energi molekul dapat dihitung lebih efisien dengan fokus pada bagian elektroniknya saja. Dalam simulasi kuantum, Hamiltonian molekuler diterapkan untuk menghitung keadaan dasar (ground state) energi molekul, yang merupakan kondisi energi terendah dalam sistem (Meyer, 2002). Algoritma seperti VQE sering digunakan untuk mendekati solusi persamaan Schrödinger terkait Hamiltonian ini dalam konteks kuantum komputer.

Energi Keadaan Dasar Molekul Menggunakan Algoritma Kuantum VQE

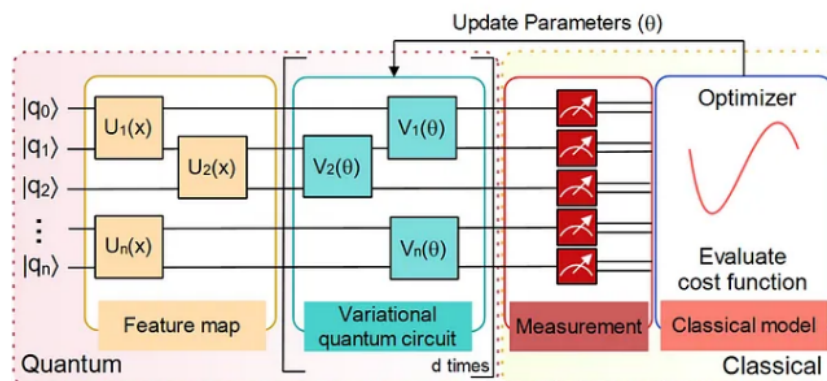
Keadaan dasar dalam sistem kuantum merujuk pada tingkat energi terendah yang dapat dicapai oleh suatu sistem. Dalam kondisi ini, sistem berada pada keadaan yang paling stabil dan tidak memiliki energi berlebih untuk berpindah ke tingkat energi yang lebih tinggi. Keadaan dasar memiliki peran penting dalam mekanika kuantum, terutama dalam memahami sifat fisik dan kimia suatu sistem. Secara matematis, keadaan dasar sistem kuantum dijelaskan oleh fungsi gelombang yang memenuhi persamaan Schrödinger. Fungsi gelombang ini menggambarkan distribusi probabilitas keberadaan partikel dalam sistem dan dikaitkan dengan energi keadaan dasar, yang

dikenal sebagai *ground state energy*. Energi ini sangat penting karena menjadi referensi utama untuk menghitung sifat energi lain dalam sistem tersebut.

Dalam konteks fisika dan kimia kuantum, penentuan energi keadaan dasar sangat penting, terutama untuk memahami sifat molekul, reaksi kimia, dan interaksi antarpartikel. Dalam bidang komputasi kuantum, seperti menggunakan algoritma Variational Quantum Eigensolver (VQE), pencarian energi keadaan dasar menjadi tantangan utama, terutama dalam sistem kompleks yang terpengaruh oleh gangguan seperti noise.

2.1.4 Algoritma *Variational Quantum Eigensolver* (VQE)

Variational Quantum Eigensolver (VQE), pertama kali dikembangkan oleh Peruzzo et al. di tahun 2014, telah mendapatkan perhatian signifikan dari komunitas penelitian dalam beberapa tahun terakhir (Peruzzo, 2014). VQE menggunakan prinsip variasi untuk menghitung energi keadaan dasar dari sebuah Hamiltonian, masalah yang sangat penting dalam kimia kuantum dan fisika materi terkondensasi. Metode komputasi konvensional dibatasi dalam akurasi karena batasan komputasi yang dihadapi dalam pemodelan tepat dari fungsi gelombang elektronik yang tumbuh secara eksponensial untuk sistem banyak elektron ini. VQE dapat digunakan untuk memodelkan fungsi gelombang kompleks ini dalam waktu polinomial, menjadikannya salah satu aplikasi jangka pendek yang paling menjanjikan untuk komputasi kuantum. Pada Gambar 2.2 menampilkan representasi skematis dari algoritma VQE.



Gambar 2.2: Representasi Skematis dari *Variational Quantum Circuit*

Sumber: (Pinaki Sen, 2021)

Algoritma VQE ini didasarkan pada prinsip variasi (lebih tepatnya pada fungsi Rayleigh–Ritz (Rayleigh, 1870), yang mengoptimalkan batas atas untuk nilai ekspektasi terendah dari sebuah observabel dengan menggunakan fungsi gelombang percobaan. Artinya, dengan memberikan Hamiltonian $\hat{H}$ dan fungsi gelombang percobaan $|\psi\rangle$, energi keadaan dasar yang terkait dengan Hamiltonian ini, E_0 dibatasi oleh

$$E_0 \leq \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (2.5)$$

Proses perhitungan nilai eigen dalam VQE dimulai dengan menentukan Hamiltonian sistem kuantum. Untuk kasus simulasi molekul, Hamiltonian diekspresikan dalam bentuk operator Pauli menggunakan basis fermionik atau qubit setelah transformasi Jordan-Wigner atau Bravyi-Kitaev:

$$H = \sum_i c_i P_i \quad (2.6)$$

Di mana c_i adalah koefisien yang dihitung dari simulasi klasik, dan P_i adalah himpunan operator Pauli atau tensor produk dari matriks Pauli (I, X, Y, Z). Setelah itu, dipilih sebuah ansatz, yaitu suatu bentuk fungsi gelombang parameterized $|\psi(\theta)\rangle$ yang direpresentasikan dalam rangkaian gerbang kuantum dengan parameter klasik θ . Pemilihan ansatz sangat penting dalam VQE karena mempengaruhi efektivitas algoritma dalam mendekati nilai eigen minimum. Setelah ansatz dipilih, nilai ekspektasi energi dihitung sebagai:

$$E(\theta) = \langle \psi(\theta) | H | \psi(\theta) \rangle \quad (2.7)$$

Nilai ekspektasi ini merupakan pendekatan terhadap nilai eigen minimum dari Hamiltonian.

Tujuan VQE adalah menemukan parameterisasi $|\psi\rangle$ sedemikian rupa sehingga nilai ekspektasi Hamiltonian diminimalkan (McClean, 2016). Nilai ekspektasi ini membentuk batas atas untuk energi keadaan dasar, dan dalam kasus ideal seharusnya tidak dapat dibedakan dari energi keadaan dasar dengan tingkat presisi yang diinginkan. Secara matematis, kita bertujuan untuk menemukan pendekatan terhadap vektor eigen $|\psi\rangle$ dari operator Hermitian $\hat{H}$

yang sesuai dengan nilai eigen terendah, E_0 (Tilly, 2020).

2.1.5 *Active Orbital* dan *Active Electron*

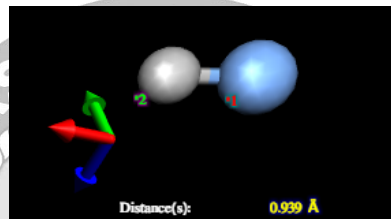
Dalam algoritma VQE, konsep *active orbital* dan *active electron* berperan penting dalam menyederhanakan representasi sistem kuantum yang kompleks (Lim et al., 2024). *Active orbital* merujuk pada orbital-orbital elektron yang secara eksplisit diperhitungkan dalam perhitungan kuantum. Orbital-orbital ini dipilih karena memiliki kontribusi signifikan terhadap sifat-sifat kimia atau fisika sistem, seperti orbital valensi dalam molekul. Dalam konteks VQE, *Active orbital* adalah subset dari semua orbital yang tersedia, dan pemilihannya membantu mengurangi kompleksitas perhitungan dengan memfokuskan hanya pada orbital yang paling relevan. Hal ini penting karena mengurangi jumlah qubit yang diperlukan dalam simulasi kuantum, sehingga membuat perhitungan lebih efisien.

Sementara itu, *active electron* adalah elektron-elektron yang berada dalam *active orbital* dan berperan aktif dalam proses kuantum. Elektron-elektron ini dianggap sebagai bagian dari sistem yang "aktif" karena mereka terlibat dalam interaksi kuantum yang signifikan, seperti pembentukan ikatan kimia atau eksitasi elektronik. Dalam VQE, *active electron* adalah elektron-elektron yang diperhitungkan dalam perhitungan energi dan sifat-sifat lain dari sistem. Elektron-elektron lain, seperti elektron inti atau elektron yang berada di orbital yang tidak aktif sering diabaikan atau diperlakukan secara klasik untuk menyederhanakan perhitungan. Dengan membatasi perhitungan hanya pada *active orbital* dan *active electron*, VQE dapat mengurangi sumber daya komputasi yang diperlukan, seperti jumlah qubit dan depth sirkuit, dengan tetap mempertahankan akurasi yang memadai.

2.1.6 Molekul Hidrogen Fluorida (HF)

Molekul HF (Hidrogen Fluorida) terdiri dari satu atom Hidrogen (H) dan satu atom Fluor (F) yang terikat melalui ikatan kovalen polar. Fluor dengan elektronegativitas yang sangat tinggi menarik pasangan elektron lebih kuat dibandingkan hidrogen, sehingga menciptakan distribusi muatan yang tidak merata. HF berbentuk linear dengan panjang ikatan sekitar 0,94 Å dan sudut 180°. Alasan digunakan molekul HF pada penelitian ini adalah karena struktur

molekul HF yang sederhana sehingga dapat disimulasikan pada perangkat yang digunakan oleh peneliti. Semakin kompleks senyawa yang digunakan maka membutuhkan *source* komputasi yang lebih besar. Karena struktur molekulnya yang sederhana ini, molekul HF masih dapat disimulasikan dengan diberi tambahan *noise* dan digunakannya teknik mitigasi *noise*. Pada Gambar 2.3 menampilkan visualisasi molekul Hidrogen Fluorida pada *Software* Avogadro.



Gambar 2.3: Molekul Hidrogen Fluorida Pada *Software* Avogadro

Sumber: (Dibuat Oleh Penulis)

2.1.7 *Noise* dalam Komputasi Kuantum

Depolarizing Channel Noise

Depolarizing Channel Noise adalah salah satu jenis *noise* yang dapat memengaruhi qubit dalam komputer kuantum. *Noise* ini merupakan model yang menggambarkan proses di mana qubit kehilangan informasi kuantumnya secara acak, baik melalui perubahan keadaan (*state*) atau melalui dekoherensi. Secara sederhana, *Depolarizing Channel Noise* dapat dianggap sebagai proses di mana qubit memiliki probabilitas tertentu untuk digantikan oleh keadaan campuran yang sepenuhnya acak. Probabilitas ini dinyatakan dengan parameter p , di mana qubit memiliki peluang p untuk mengalami depolarisasi dan peluang $1-p$ untuk tetap mempertahankan keadaan aslinya. Jika qubit mengalami depolarisasi, ia akan digantikan oleh keadaan campuran yang seragam, yang direpresentasikan oleh matriks densitas $\frac{p}{3}$, dengan matriks identitas (Oliv, 2022):

$$E(\rho) = (1 - p)I_{\rho}I + \frac{p}{3}(X_{\rho}X + Y_{\rho}Y + Z_{\rho}Z) \quad (2.8)$$

yang sesuai dengan operator Kraus:

$$E_0 = \sqrt{1-p}I, \quad E_1 = \sqrt{\frac{p}{3}}X, \quad E_2 = \sqrt{\frac{p}{3}}Y, \quad E_3 = \sqrt{\frac{p}{3}}Z \quad (2.9)$$

Amplitude Damping Noise

Amplitude Damping Noise menggambarkan disipasi energi ke lingkungan. *Amplitude Damping* menggambarkan proses di mana qubit dalam keadaan tereksitasi, direpresentasikan dengan $|1\rangle$ cenderung kehilangan energi dan bertransisi ke keadaan *ground state*, direpresentasikan dengan $|0\rangle$. Ini terjadi ketika qubit berinteraksi dengan lingkungannya, menyebabkan hilangnya energi secara eksponensial. Proses ini bisa dipahami sebagai emisi foton. *Amplitude damping noise* dapat diwakili oleh operator Kraus sebagai berikut (Oliv, 2022):

$$E_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{1-p_a} \end{pmatrix}, \quad E_1 = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{p_a} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

Di mana p_a adalah probabilitas untuk peredaman amplitudo dan ϵ menentukan probabilitas eksitasi jika terjadi kesalahan, sehingga setelah banyak interaksi dengan lingkungan, qubit berada dalam keadaan kesetimbangan (Oliv, 2022):

$$\rho_\infty = \begin{bmatrix} \epsilon & 0 \\ 0 & 1 - \epsilon \end{bmatrix} \quad (2.11)$$

Amplitude damping noise menggambarkan hilangnya informasi kuantum tanpa kehilangan energi, dengan kata lain, transisi menuju perilaku klasik. Dalam kerangka operator-sum, representasi yang mungkin adalah dengan operator Kraus:

$$E_0 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{1-p_\phi} \end{bmatrix}, \quad E_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{p_\phi} \end{bmatrix} \quad (2.12)$$

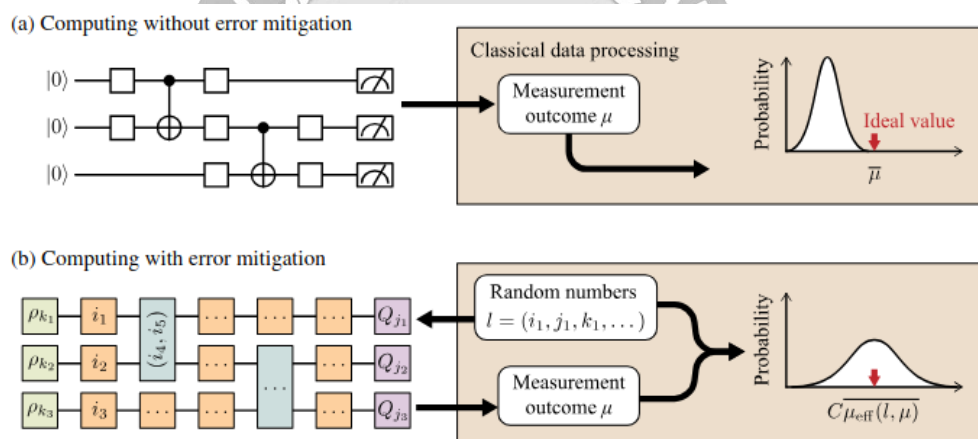
2.1.8 Teknik Mitigasi Noise (*Quantum Error Mitigation*): *Zero Noise Extrapolation* (ZNE)

Quantum Error Mitigation (QEM) adalah serangkaian teknik yang bertujuan untuk mengurangi dampak kesalahan dalam komputasi kuantum tanpa memerlukan implementasi penuh dari *quantum error correction* (QEC), yang biasanya membutuhkan *overhead* signifikan dalam jumlah qubit dan kontrol kuantum (Endo, 2018). Teknik ini sangat relevan dalam era *Noisy Intermediate-Scale Quantum* (NISQ), di mana perangkat kuantum saat ini masih memiliki banyak keterbatasan (Suzuki, 2022). Salah satu tantangan utama adalah *noise*, yaitu kesalahan akibat interaksi dengan lingkungan seperti *decoherence*, *depolarization*, dan *amplitude damping*. Selain itu, perangkat NISQ hanya memiliki puluhan hingga ratusan qubit, yang tidak cukup untuk mendukung QEC skala penuh, ditambah dengan *fidelity* operasi yang rendah, di mana operasi kuantum sering kali memiliki tingkat kesalahan yang signifikan. Karena keterbatasan ini, QEM menjadi pendekatan praktis untuk meningkatkan kualitas hasil komputasi kuantum tanpa memerlukan perangkat keras yang ideal atau bebas kesalahan.

Tidak seperti QEC yang bertujuan untuk mencegah atau mengoreksi kesalahan selama proses komputasi, QEM lebih berfokus pada *post-processing* data hasil pengukuran atau manipulasi sirkuit kuantum untuk memperbaiki efek kesalahan (Cai, 2023). Dalam praktiknya, QEM membutuhkan pemahaman yang baik terhadap *noise* pada perangkat kuantum melalui karakterisasi *noise*, melakukan redundansi pengukuran dengan menjalankan sirkuit secara berulang, serta menggunakan metode seperti ekstrapolasi atau koreksi untuk menghasilkan hasil yang lebih akurat. Manfaat utama QEM adalah kemampuannya untuk mengurangi kesalahan tanpa memerlukan tambahan qubit (Endo, 2018), sehingga sangat cocok untuk perangkat NISQ yang memiliki kapasitas terbatas. Teknik ini juga fleksibel karena dapat disesuaikan untuk jenis *noise* atau algoritma spesifik yang digunakan.

Pada penelitian yang dilakukan oleh Suguru et.al menunjukkan bahwa tanpa menggunakan teknik *quantum error mitigation* (QEM) seperti yang ditunjukkan pada Gambar 2.4(a) rangkaian kuantum diulang berkali-kali untuk

mengumpulkan hasil pengukuran (μ), kemudian dihitung rata-ratanya ($\bar{\mu}$) sebagai estimasi nilai harapan. Namun, karena implementasi rangkaian tidak sempurna, distribusi ($\bar{\mu}$) tidak berpusat pada nilai ideal, yaitu nilai harapan yang tepat ketika rangkaian kuantum diimplementasikan secara sempurna tanpa kesalahan. Sedangkan ketika digunakan QEM seperti yang ditunjukkan pada Gambar 2.4(b), alih-alih menggunakan rangkaian kuantum asli, diimplementasikan rangkaian yang dimodifikasi. Skema yang digambarkan dalam gambar ini relevan dengan metode QEM, tetapi juga dapat diterapkan pada metode ekstrapolasi sebagai cara untuk menurunkan error. Jika QEM berhasil, distribusi nilai efektif akan berpusat pada nilai ideal.



Gambar 2.4: Komputasi Kuantum dari Nilai Ekspektasi dari Sebuah Observasi (a) Tanpa Mitigasi Kesalahan Kuantum (QEM) dan (b) dengan QEM

Sumber: (Suguru et.al, 2018)

QEM memiliki banyak aplikasi, terutama dalam meningkatkan akurasi algoritma kuantum yang sensitif terhadap *noise* (Saputra, 2009). Contohnya adalah *Variational Quantum Algorithms*, seperti *Variational Quantum Eigensolver* (VQE) dan *Quantum Approximate Optimization Algorithm* (QAOA), yang digunakan untuk masalah optimasi atau menghitung energi dasar sistem fisik. Teknik ini juga berguna dalam *Quantum Machine Learning* untuk melatih model kuantum dengan hasil yang lebih stabil dan dalam simulasi sistem kuantum, seperti material atau kimia kuantum, yang memerlukan tingkat presisi tinggi.

Beberapa teknik populer dalam QEM meliputi *Zero Noise Extrapolation* (ZNE), yang menambahkan *noise* secara terkendali untuk mengekstrapolasi hasil ke kondisi tanpa *noise*, *Probabilistic Error Cancellation* (PEC) yang membalikkan efek *noise* secara probabilistik berdasarkan model *noise*, *Dynamical Decoupling* yang menggunakan pulsa kontrol untuk mengurangi *decoherence*, serta *Virtual Distillation*, yang menggabungkan hasil pengukuran untuk menyaring *noise* dan mendapatkan hasil yang lebih akurat.

Zero Noise Extrapolation (ZNE) adalah metode *quantum error mitigation* yang bertujuan untuk memperkirakan hasil ideal dari komputasi kuantum, yaitu hasil yang seharusnya diperoleh jika tidak ada *noise*. Teknik ini memanfaatkan data dari eksperimen yang dilakukan pada berbagai tingkat *noise*. Dengan memproses data ini, ZNE dapat memprediksi hasil pada kondisi tanpa *noise*, meskipun perangkat keras kuantum yang digunakan berada dalam lingkungan penuh gangguan. Proses ZNE melibatkan tiga langkah utama: amplifikasi *noise*, pengumpulan data, dan ekstrapolasi ke nol *noise* (Schultz, 2022).

a. Amplifikasi *Noise*

Amplifikasi *noise* dilakukan untuk menciptakan kondisi *noise* yang lebih besar daripada *noise* alami dalam perangkat kuantum. Hal ini memungkinkan pengamatan lebih luas tentang bagaimana *noise* memengaruhi hasil komputasi. Amplifikasi dapat dilakukan dengan berbagai cara, seperti menambahkan operasi yang tidak memengaruhi hasil ideal tetapi meningkatkan durasi atau kompleksitas sirkuit kuantum. Contohnya adalah pengulangan gerbang tertentu (*gate repetition*) yang meningkatkan paparan terhadap *noise* tanpa mengubah output ideal. Pendekatan lainnya melibatkan manipulasi parameter perangkat keras, seperti mengatur ulang waktu operasi (*gate duration*) atau mengubah medan kontrol. Hasilnya adalah data eksperimen yang mencerminkan tingkat *noise* yang berbeda.

b. Pengumpulan Data

Setelah *noise* diperbesar, hasil dari setiap eksperimen direkam untuk berbagai tingkat *noise*. Setiap tingkat *noise* menghasilkan output yang sedikit berbeda karena gangguan yang bertambah. Pengumpulan data yang akurat pada tahap ini sangat penting untuk memastikan hasil

ekstrapolasi yang baik. Eksperimen harus diulang beberapa kali untuk mengurangi fluktuasi statistik dan memastikan bahwa efek *noise* dapat dianalisis dengan baik. Dengan data yang cukup, hubungan antara tingkat *noise* dan hasil eksperimen dapat dibentuk, biasanya dalam bentuk grafik atau fungsi matematis.

c. Ekstrapolasi ke *Zero Noise*

Langkah terakhir adalah menggunakan data yang dikumpulkan untuk mengekstrapolasi hasil pada kondisi nol *noise*. Teknik ekstrapolasi matematis, seperti regresi polinomial, eksponensial, atau metode khusus lainnya, diterapkan untuk memodelkan bagaimana hasil komputasi berubah seiring dengan peningkatan *noise*. Dari model ini, nilai hasil pada tingkat *noise* nol diprediksi. Ekstrapolasi membutuhkan asumsi bahwa hubungan antara *noise* dan hasil cukup teratur untuk direpresentasikan secara matematis. Ketepatan ekstrapolasi sangat bergantung pada model yang digunakan dan jumlah data yang tersedia, sehingga pemilihan metode yang tepat sangat penting.

Dua pendekatan populer dalam ZNE antara lain ekstrapolasi regresi linear dan ekstrapolasi Richardson.

a. Ekstrapolasi Regresi Linear

Ekstrapolasi regresi linear adalah metode mitigasi *noise* dalam komputasi kuantum yang memanfaatkan regresi linear untuk memodelkan hubungan antara tingkat *noise* (biasanya direpresentasikan dengan faktor penskalaan *noise*) dan hasil komputasi. Prosesnya melibatkan pengukuran pada berbagai tingkat *noise* yang diperoleh dengan mengeskalasi operasi atau *gate*. Data hasil pengukuran ini kemudian diregresikan menggunakan model linear $f(\lambda) = a\lambda + b$, di mana λ adalah faktor penskalaan *noise*. Koefisien a dan b dihitung dari data, dan nilai bebas *noise* diperoleh dengan mengevaluasi $f(\lambda)$ pada $\lambda = 0$ (intercept b). Metode ini sederhana dan efisien, terutama jika *noise* meningkat secara linier terhadap penskalaan. Namun, ekstrapolasi regresi linear hanya cocok untuk sistem dengan perilaku *noise* yang linier dan sensitif terhadap fluktuasi statistik pada data hasil pengukuran, sehingga dapat menghasilkan estimasi yang kurang akurat dalam kondisi *noise* yang

lebih kompleks.

b. Ekstrapolasi Richardson

Metode ini menggunakan pendekatan berbasis deret Taylor untuk memodelkan efek *noise* pada hasil kuantum. Secara matematis, hasil $E(\lambda)$ pada tingkat *noise* λ diasumsikan dapat diekspresikan sebagai:

$$E(\lambda) = E(0) + c_1\lambda + c_2\lambda^2 + \dots \quad (2.13)$$

Di mana:

- $f(0)$ adalah hasil ideal tanpa *noise*.
- $c_1, c_2, \dots$ adalah koefisien deret Taylor.
- λ adalah parameter yang merepresentasikan tingkat *noise*.

Dengan menjalankan eksperimen pada berbagai tingkat *noise* $\lambda_1, \lambda_2, \dots$, kita dapat melakukan ekstrapolasi ke titik $\lambda = 0$ (tanpa *noise*) untuk memperkirakan $f(0)$.

Meskipun demikian, QEM tetap menjadi bagian penting dalam pengembangan teknologi kuantum di era NISQ. Dengan pendekatan yang efisien dan fleksibel, QEM memungkinkan perangkat kuantum saat ini untuk memberikan hasil yang lebih bermanfaat meskipun belum bebas dari *noise*, mendukung kemajuan dalam simulasi, optimasi, dan pengembangan algoritma kuantum.

2.2 Hasil Penelitian Terdahulu

Dalam penelitian mengenai komputasi kuantum ini terdapat pengembangan dari beberapa penelitian terdahulu yang dapat dilihat pada tabel berikut.

Tabel 2.1: Tabel Penelitian Terdahulu

No	Nama peneliti & Judul Penelitian	Metode Penelitian	Rangkuman dan Hasil	Perbandingan Penelitian
1	Daniel Claudino et.al (2020): Benchmarking Adaptive Variational Quantum Eigensolvers	Pembandingan algoritma AVQE untuk memecahkan masalah, khususnya dalam konteks penghitungan nilai eigen energi terendah dari sistem kuantum.	Algoritma AVQE menunjukkan peningkatan kinerja dan akurasi dibandingkan dengan algoritma VQE standar dalam beberapa skenario.	Penelitian Claudino berorientasi pada inovasi algoritma adaptif, sedangkan peneliti berfokus pada optimalisasi konfigurasi active space dalam algoritma VQE standar untuk mendekati hasil akurat FCI.

2	Tudor Giurgica-Tiron et.al (2020): Digital Zero-Noise Extrapolation for Quantum Error Mitigation	Berfokus pada ZNE sebagai teknik mitigasi error untuk perhitungan kuantum dengan noise. ZNE beroperasi tanpa sumber daya kuantum tambahan.	Teknik yang digunakan mencapai pengurangan noise hingga 18–24 kali dibandingkan sirkuit tanpa mitigasi.	Jenis ekstrapolasi yang digunakan berbeda dan menghasilkan pengurangan error yang berbeda juga.
3	Andre He et.al (2020): Zero-noise extrapolation for quantum-gate error mitigation with identity insertions	Metode mitigasi error pada komputasi kuantum dengan menggunakan pendekatan ZNE. peneliti memperkenalkan metode <i>Identity Insertion</i> .	ZNE dengan penyisipan identitas merupakan pendekatan yang praktis dan efisien untuk mitigasi error pada sirkuit kuantum moderat. RIIM menawarkan keunggulan dibandingkan FIIM dalam hal efisiensi penggunaan gerbang.	Metode ini kurang efektif untuk noise selain depolarisasi, seperti noise akibat peluruhan amplitudo atau <i>decoherence</i> .

2.3 Kerangka Berpikir

Perkembangan teknologi komputasi kuantum menawarkan potensi besar untuk menyelesaikan masalah-masalah yang sangat kompleks dalam berbagai disiplin ilmu, termasuk kimia dan fisika. Salah satu tantangan yang menonjol adalah perhitungan energi dasar atau *ground state energy* dari molekul, yang sangat penting dalam simulasi kimia kuantum untuk memahami sifat-sifat molekuler. Dalam upaya ini, penelitian berfokus pada penerapan algoritma *Variational Quantum Eigensolver* (VQE) sebagai metode yang efisien untuk mencari *ground state energy* dari suatu sistem kuantum. VQE memanfaatkan perpaduan antara komputer klasik dan kuantum untuk menyelesaikan masalah optimasi yang sulit dipecahkan oleh komputer klasik saja.

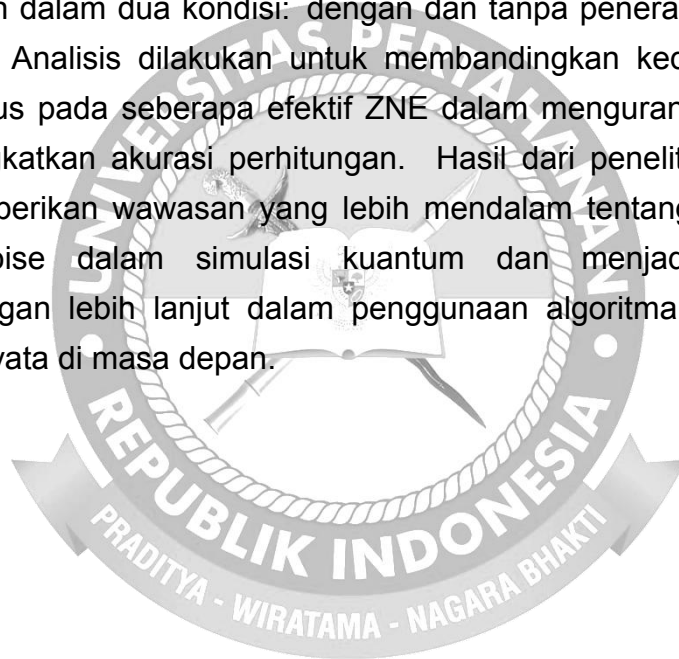
VQE menggunakan pendekatan *variational*, di mana sebuah *parameterized quantum circuit* digunakan untuk menghasilkan fungsi gelombang yang mendekati *ground state*, sementara komputer klasik bertugas untuk menyesuaikan parameter-parameter tersebut agar energi yang dihitung mendekati nilai minimum. Karena algoritma ini memerlukan interaksi antara komputer klasik dan kuantum, ia menjadi pilihan ideal untuk sistem kuantum berukuran menengah yang masih berada dalam tahap pengembangan, seperti pada era *Noisy Intermediate-Scale Quantum* (NISQ).

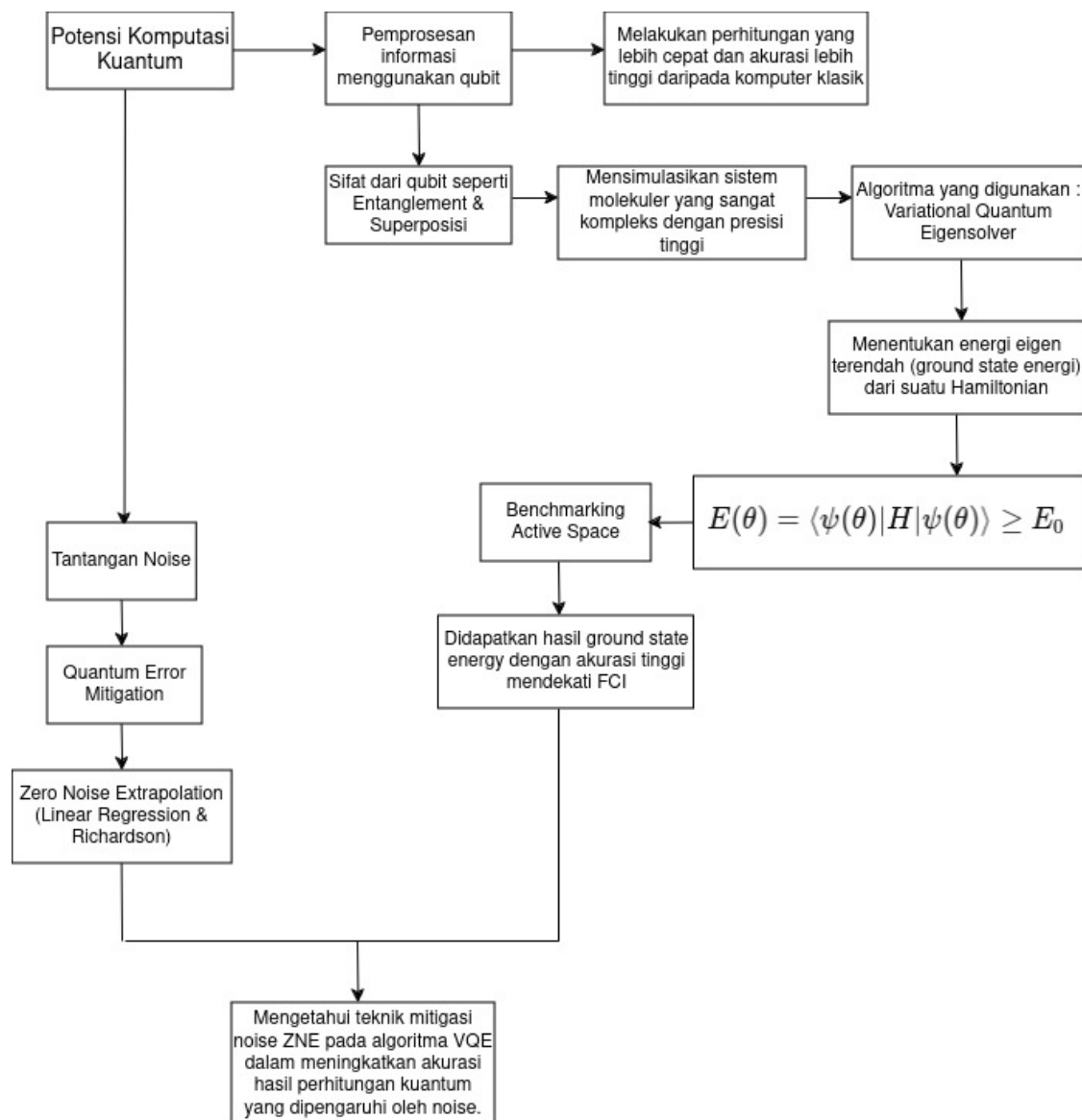
Namun, satu tantangan besar dalam komputasi kuantum adalah keberadaan *noise*, yang dapat memengaruhi keakuratan hasil perhitungan kuantum. *Noise* ini dapat disebabkan oleh berbagai faktor, seperti dekoherensi, fluktuasi lingkungan, atau kesalahan dalam qubit itu sendiri. Untuk mengatasi masalah ini, penelitian ini menerapkan teknik mitigasi *noise* yaitu *Zero Noise Extrapolation* (ZNE), yang bertujuan untuk meminimalkan efek *noise* tanpa memerlukan tambahan qubit untuk koreksi kesalahan penuh. ZNE bekerja dengan menjalankan perhitungan pada berbagai level *noise* buatan yang ditambahkan, kemudian mengekstrapolasi hasilnya ke kondisi ideal tanpa *noise*.

Penelitian ini dilakukan menggunakan *software* berbasis kuantum yang menjalankan simulasi sirkuit kuantum tanpa dipengaruhi oleh *noise* fisik, sehingga memungkinkan eksperimen dengan hasil yang ideal dan presisi tinggi. Dalam hal ini, perangkat lunak PennyLane digunakan sebagai simulator,

dikombinasikan dengan bahasa pemrograman Python dan NumPy, serta dijalankan pada *Jupyter Notebook*. Meskipun simulasi kuantum ini tidak terpengaruh oleh *noise* fisik, penelitian tetap menyimulasikan dua jenis *noise* yang umum terjadi pada quantum *hardware*, yaitu *depolarizing channel noise* dan *amplitude damping noise*, untuk melihat bagaimana *noise* memengaruhi hasil komputasi.

Dalam penelitian ini, data perhitungan *ground state energy* dari molekul dikumpulkan dalam dua kondisi: dengan dan tanpa penerapan teknik mitigasi *noise* ZNE. Analisis dilakukan untuk membandingkan kedua hasil tersebut, dengan fokus pada seberapa efektif ZNE dalam mengurangi pengaruh *noise* dan meningkatkan akurasi perhitungan. Hasil dari penelitian ini diharapkan dapat memberikan wawasan yang lebih mendalam tentang efektivitas teknik mitigasi *noise* dalam simulasi kuantum dan menjadi landasan bagi pengembangan lebih lanjut dalam penggunaan algoritma VQE di quantum *hardware* nyata di masa depan.





Gambar 2.5: Skema Kerangka Berpikir Penelitian

Sumber: (Dibuat Oleh peneliti)

2.4 Hipotesis

- Depolarizing Channel Noise* dan *Amplitude Damping Noise* memiliki pengaruh signifikan terhadap akurasi perhitungan energi keadaan dasar molekul HF menggunakan algoritma VQE dengan persentase *error* lebih dari 0.1%.
- Efektivitas teknik mitigasi noise ZNE dalam mengurangi pengaruh noise tergantung pada jenis dan intensitas noise.