

# 基于机器学习的半导体自旋量子比特自动调谐

## 摘要

摘要：复现论文提出了一种基于机器学习的自动化程序，用于半导体自旋量子比特的电荷调谐，旨在最小化人工干预，解决量子点技术规模化中一个重要挑战。该方法利用人工神经网络（ANN）识别稳定性图中的噪声过渡线，并通过神经网络的不确定性估计引导稳健的探索策略。该方法在三个不同的离线实验数据集上进行了测试，这些数据集代表了不同的单量子点技术。结果表明，在最优情况下该方法的调谐成功率超过99%，其中超过10%的成功可归因于不确定性利用。由于训练集较小且每个图之间的变异性较大，研究评估了所提出方法的能力和局限性。基于该方法，加入自适应的优化器以提升过渡线的检测速度。

**关键词：**自旋量子比特；机器学习；自动调谐

## 1. 引言

### 1.1. 量子计算机

量子系统的概念起源于20世纪初，随着量子力学的诞生而逐渐形成。量子力学的奠基人如普朗克、薛定谔、海森堡和狄拉克等人，通过他们的理论工作，揭示了微观粒子如电子和光子的行为与经典物理截然不同。这些发现为量子系统的研究奠定了基础，量子系统的奇特性质，如叠加态和量子纠缠，最初在理论物理和哲学上引起了广泛的讨论。随着时间的推移，科学家们开始探索如何利用这些量子特性来构建新的技术。进入21世纪，量子信息科学的发展使得量子系统的应用前景变得清晰，量子计算、量子通信和量子传感等领域的研究取得了显著进展。

量子计算机是一种利用量子力学原理，特别是量子叠加和量子纠缠现象，来执行计算任务的设备。与传统计算机使用比特（bits）作为信息的基本单位不同，量子计算机使用量子比特，或称为量子位（qubits）。量子位可以同时表示0和1的叠加状态，这种特性使得量子计算机在处理特定类型的问题时，能够比传统计算机更加高效。目前已经知道，量子计算机至少在解决某些类问题上，如分解大数质因子、随机数据库搜索等，相对经典计算机具有大规模加速作用。量子计算未来主要会应用在复杂的大规模数据处理与计算难题，以及基于量子加密的网络安全服务，例如：环境监测领域的气象预报，医学领域的基因测序与药物研发，金融领域的投资大数据分析、预测与风险建模，网络安全与即时通讯领域的量子加密，以及为人工智能提供强大的计算能力。

### 1.2. 量子点技术

基于半导体自旋量子比特的量子系统是构建量子计算机的技术之一，可以通过利用半导体材料中电子自旋状态来实现量子信息处理的物理系统。自旋量子比特是量子计算领域中的一种量子比特（qubit）实现方式，这些自旋量子比特是通过电场限制电子在量子点中（QDs）<sup>[1]</sup>形成的。

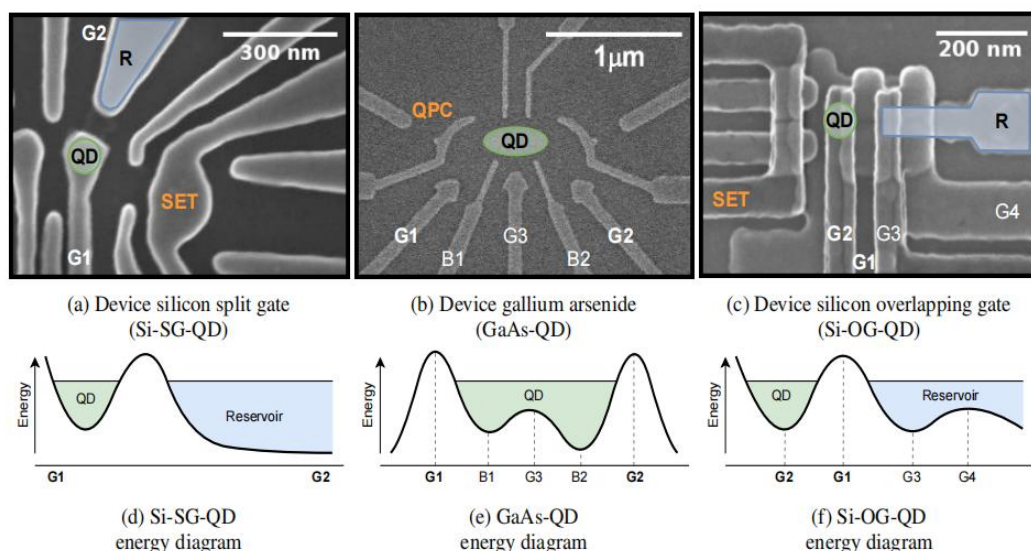


图 1 用于测量稳定性图的量子点（QD）装置

量子点技术具有多项优势，如高门控保真度、长相干时间、在超过一开尔文的温度下的热稳定性，以及与成熟的互补金属氧化物半导体（CMOS）技术的兼容性。后者进一步增强了其可扩展性潜力，并使其能够与工业电子设备共集成。然而，量子点技术仍处于初期阶段，最佳的材料、制造技术、使用案例和控制程序尚未被发现。

而量子点技术的大规模实现的瓶颈之一是电荷调谐<sup>[2]</sup>的复杂性与挑战性。这个调谐任务包括使用间接测量提供的信息来将特定数量的电荷载体限制在一个或多个量子点中，这些信息通常通过调节两个控制门（如图1中的G1和G2）上的电压获得。电压扫描的结果可以被可视化二维图像，称为稳定性图，其中像素编码的是通过单电子晶体管（SET）或量子点接触（QPC）测量的电流。可以在这些图像中识别出过渡线，这些线代表量子点内部电荷载体数量的变化。结合电子量子点在低电压下为空的知识，可以推导出电压空间每个区域内的电荷数量。

然而，这一任务难以自动化，因为稳定性图的参数空间庞大、噪声较大且设备依赖性强。因此，电荷调谐通常由实验人员手动完成，依赖于基于经验的猜测和人类启发式方法。虽然这种方法对于小型的原型研究已足够，但它不适用于大规模工业应用。虽然可以尝试通过经典算法和人类专业知识自动化调谐过程，但这种方法仍然需要人工干预，并且仅适用于特定硬件，因此无法满足技术规模化或加速新设计开发的要求。

## 2. 相关工作

近年来，随着人工智能和机器学习技术的飞速发展，卷积神经网络<sup>[3]</sup>（Convolutional Neural Networks, CNNs）作为一种强大的图像识别和处理工具，已经被广泛应用于各种领域。CNNs在处理具有空间层次结构的数据方面表现出色，这与量子点的物理特性相契合。因此，将CNNs应用于单量子点的自动调谐，不仅可以提高调谐过程的精确度和效率，还有可能实现量子点特性的实时监控和优化。

早期的研究主要集中在利用神经网络对稳定性图谱进行分类和分析<sup>[4]</sup>。通过对大量稳定性图的训练，神经网络能够识别出不同电压下的量子点状态和过渡线，从而为后续的调谐提供依据。通过使用深度学习，尤其是卷积神经网络，研究者能够在处理复杂的二维稳定性图谱时，有效地提取出有价值的特征，

进而进行精准的状态分类与调谐。与传统的手动方法相比，神经网络在识别和分类的准确性上具有显著优势，能够在不依赖人工干预的情况下自动完成稳定性图谱的分析和调整。

为了进一步提高自动调谐的可靠性，一些研究引入了不确定性估计的概念。例如，贝叶斯神经网络<sup>[5]</sup>能够在输出预测的同时提供不确定性量化，这对于自动调谐尤其重要。在量子比特调谐中，不确定性得到了广泛的应用，特别是在模型预测不确定的区域，贝叶斯神经网络能够为系统提供置信度分数，帮助判断哪些区域需要进一步探测或调整。这种方法的优势在于，它能够在调谐过程中有效地避免过度依赖错误的预测，特别是当量子点系统的特性存在噪声或物理缺陷时，贝叶斯方法能够有效降低调谐失败的风险。

近期研究<sup>[6]</sup>表明，可以使用机器学习方法，尤其是人工深度神经网络，来自动化调谐过程。这些方法展现出良好的前景，但仍不够可靠，无法考虑到完全自主的大规模量子点控制，其较高失败率可能归因于：

- (1) 在面对模糊、不属于分布、训练集过小或噪声较大的数据时，模型的过度自信；
- (2) 探索策略对错误的容忍度较低。

### 3. 本文方法

在本研究<sup>[7]</sup>中，作者选择了一种更具通用性的方案，通过训练一个小型的神经网络来同时检测过渡线并提供分类置信度分数（不确定性度量）。该方案所设计的神经网络规模较小，是由于虽然增加更多参数和数据集可以提高机器学习模型的性能，但一个非常大的模型可能难以与量子点设备集成，并且收集更多数据集的成本也非常高。

方案中提出了一种硬件无关的自动调谐程序：通过训练一个神经网络以识别稳定性图中的过渡线，利用神经网络的不确定性，并结合一个探索策略，显著增强了半导体自旋量子比特电荷调谐的鲁棒性，并最小化了人工干预。作者考虑了两种方法来估计神经网络的置信度分数，一种是来自经典神经网络的启发式方法，另一种是将贝叶斯框架应用于神经网络。

#### 3.1. 过渡线检测

程序的第一部分是自动检测离线实验稳定性图中的电荷过渡线。虽然图像分割模型可以用来识别线条，但这需要扫描较大的图形区域，预计会减慢自动调谐过程的速度。为了放宽输入尺寸的要求并降低模型的复杂性，可将该问题视为一个监督的二分类任务（“线”或“非线”）。

选择神经网络而非其他统计方法，首先是为了设计一个硬件无关的方法，能够适应量子点研究领域快速发展的需求。机器学习算法能够自动适应新数据特征，例如由新测量设置引起的新伪影，或者由于量子点硬件设计变化而引起的新过渡线模式。神经网络方法也有可采用迁移学习方法以便快速适应新引入的设备。此外，神经网络，尤其是卷积神经网络CNNs，在检测图像中的模式和滤除各种噪声方面表现出了卓越的性能。因此，它们非常适合用于在二维稳定性图中检测过渡线。最后，神经网络在问题规模和复杂性上的良好可扩展性，是在开发适用于大规模量子点阵列的解决方案时所需要的关键特性。

在此分类问题中，总共评估了三种神经网络架构的性能：CNN、贝叶斯卷积神经网络BCNN和前馈神经网络FF。CNN在图像分类任务中以其高效性著称，并在复杂度和性能之间提供了良好的折衷。BCNN预计能

够提供稳健的不确定性估计，这对于提高自动电荷调谐过程的可靠性非常有益。BCNN实现了变分推断方法和基于反向传播的贝叶斯学习规则。相较之下，较为简单的FF网络则作为一种对照，用于与更复杂的CNN和BCNN模型进行比较。

所有文中展示的神经网络都接受相同的输入，并具有相似的二进制输出。模型输入是电压空间的一个小子区域（也称为补丁），其中像素代表测量的电流值。补丁大小固定为 $18 \times 18$ 数据点，这在测量速度和模型精度之间提供了一种经验折衷。补丁是通过将稳定性图分割成均匀间隔的正方形块生成的，并将这些块分配到训练、验证和测试集。测试补丁是从一个独特的图中提取的，并且该图被排除在训练集之外；其他补丁则在训练（90%）和验证（10%）集之间随机分配。

在使用的神经网络中，最基本的是前馈神经网络FF，它通过两个全连接层传播输入。卷积神经网络CNN扩展了该模型，在全连接层之前增加了两个卷积层。贝叶斯卷积神经网络BCNN的架构与CNN相同，只是每个自由参数（权重和偏置）都被编码为高斯分布，定义了均值和方差。每个模型都被训练来推断补丁的类别作为二进制输出，并以置信度百分比表示该分类的不确定性。

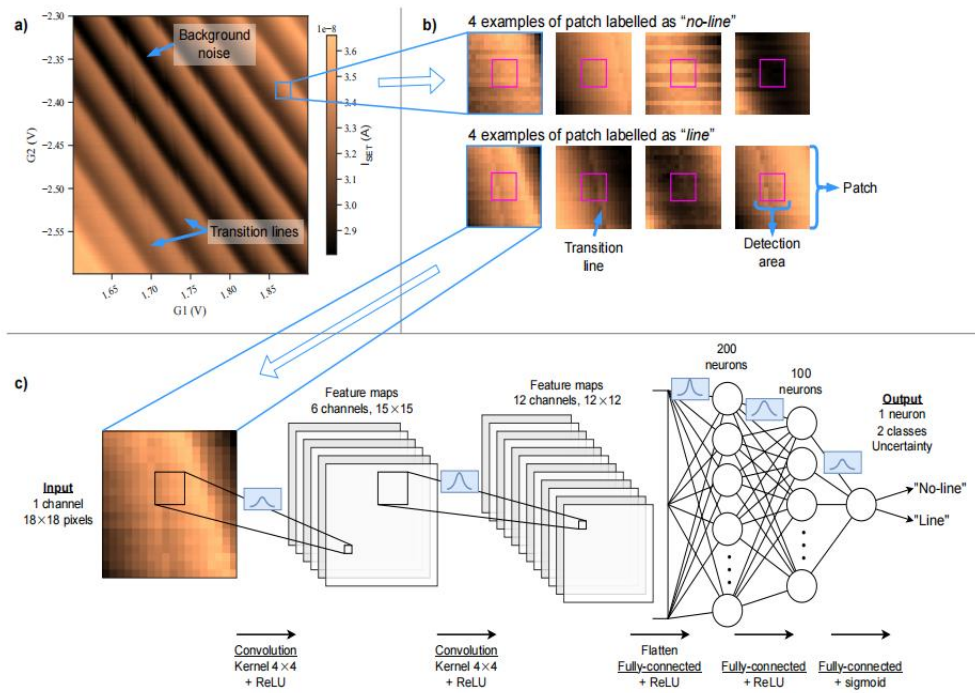


图 2 神经网络模型示意图

### 3.2. 置信度

引入置信度评分为模型提供了额外的信息层，这层信息在探索阶段用于显著降低误分类的影响，误分类通常会干扰自动调谐过程，而误分类主要来自三种类型的不确定性。

模型不确定性（也称为认知不确定性或系统性不确定性）是由于训练不完美而导致的知识缺失，其可能源自于次优的超参数或训练图表数量较少。这种不确定性可以通过使模型接触更多数据来减少，突显了全面训练过程的重要性。实际上，训练数据集的大小受到实验稳定性图的获取成本的限制。

数据不确定性（也称为偶然不确定性或统计不确定性）则与被测数据的固有随机性相关。对于过拟合分类任务，这可能源自测量工具的变动、制造缺陷或电容耦合等因素。这些因素通常是实验者无法控制的。

分布不确定性是由于测试集在训练集中未得到充分代表而产生的。在过渡线分类的背景下，当测试用的稳定性图呈现出训练集中不存在的噪声或特征时，可能会发生这种情况。未使用合成数据有助于减轻这种类型的不确定性，但图与图之间的差异仍然是分布不确定性的一种来源，这种不确定性永远无法完全避免。

置信度评分的计算方式在标准神经网络（CNN或FF）与贝叶斯神经网络之间有所不同。对于标准神经网络输出 $y$ ，使用简单的启发式评分公式（公式①）来根据神经网络输出与期望类别之间的距离来估计不确定性。对于BCNN，基于 $N$ 次重复推断（每次采用新的采样参数）计算标准差的标准化值（公式②）。这两个公式在二分类问题中（只有一个输出神经元时）是直接的，但它们可以推广到多类问题。

$$\text{Heuristic confidence score} = |0.5 - y| * 2 \quad \text{①}$$

$$\text{Bayesian confidence score} = 1 - (\text{std}(y_1, y_2, \dots, y_N) * 2) \quad \text{②}$$

此外，还进行了一个校准步骤以优化探索与利用之间的权衡。神经网络的校准通常通过训练期间的正则化方法，或通过训练后经验性地调整可靠性图的各个区间来完成，以确保置信度评分是实际正确概率的良好近似。例如，在所有置信度为80%的分类中，预计其中20%是错误的。由于某些情况下分类错误的数量较少，验证集并未始终覆盖置信度评分的范围，这使得基于区间的方法计算校准指标变得不可靠。为了应对这一问题，模型通过校准置信度阈值，而不是直接校准模型的置信度评分。该阈值定义了分类被认为不可靠的置信度值，在稳定性图的探索过程中，该分类将被视为“过于不确定”。每次训练后，阈值通过在验证集上的网格搜索优化，以最小化公式③中定义的得分，其中 $\tau$ 是一个元参数，定义了目标比例（在本研究中固定为0.2）。这种方法放宽了对校准样本数量的要求，同时保持了置信度评分的实际功能性。

$$\text{Threshold score} = \text{Err} + \text{UT} \times \tau \quad \text{③}$$

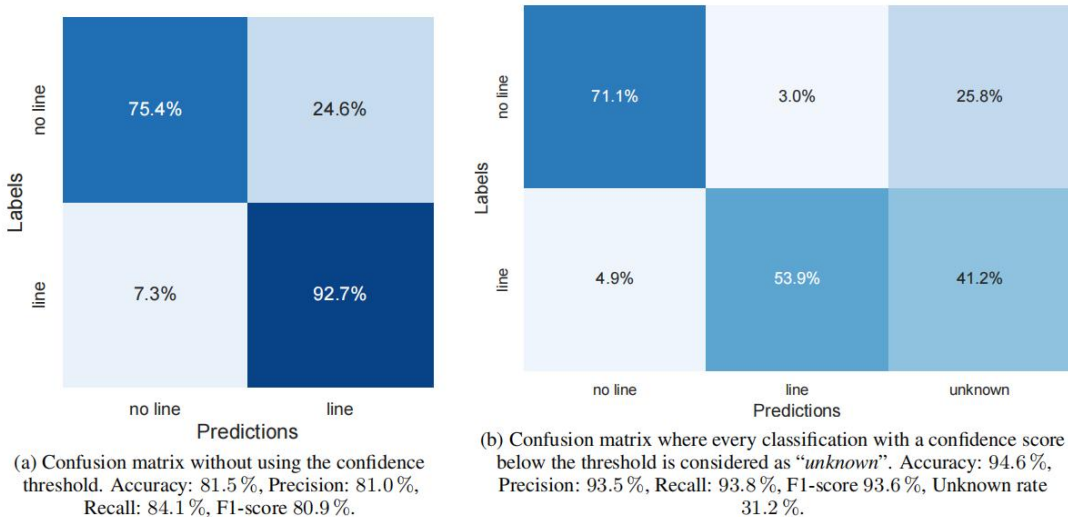


图 3 置信度阈值

通过排除低于置信度阈值的模型预测，可以提高有效的模型准确度。此时，模型输出可以解释为三类推断：“线”（输出=1且置信度 $\geq$ 阈值）、“非线”（输出=0且置信度 $\geq$ 阈值）和“未知”（置信度 $<$ 阈值）。



### 3.3. 探索策略

在建立了一个高精度的线检测方法之后，接下来需要定义一个探索策略，利用模型的分类结果和不确定性来高效地探索稳定性图谱空间，直到找到感兴趣的区域。

探索过程的包括：

- (i) 从设备上的电荷传感器测量补丁（在本研究中通过提取离线图表的数据来模拟）
- (ii) 用训练好的神经网络进行线检测
- (iii) 根据探索策略决定下一步的补丁坐标。

典型的探索策略是首先寻找零电子区，这通常表现为大范围内没有过渡线；找到第一个有“线”的块之后，大角度范围的寻找线可能的坡度；找出“线”的坡度后，垂直搜索平行的所有“线”，直到最大边界或持续空状态；最终找出所有可能的过渡线，以确定单量子点两个电压门的具体阈值。在单电子调谐的情况下，目标位置会在第一条和第二条线之间。

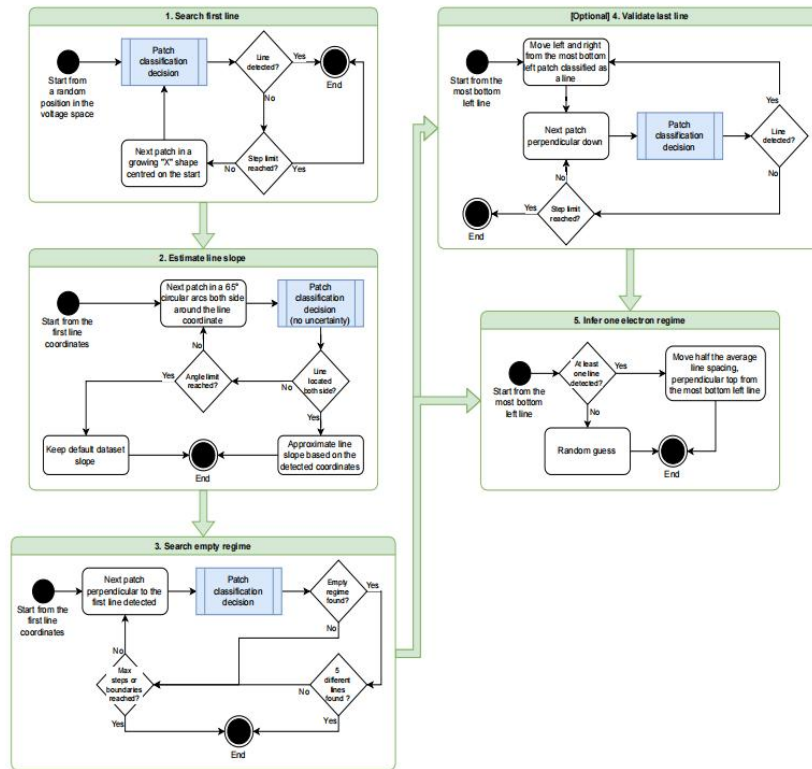


图 4 典型探索策略示意图

但是，这种简单的探索策略对于误分类或硬件变化非常脆弱。为了使探索更加稳健并兼容大多数量子点（QD）技术，根据图5中所示的方法对这一策略进行了适应性调整。该方法能够实时适应不同的线斜率和间距，同时检查可能存在的衰退线。当补丁的置信度低于阈值时会探索该补丁附近的区域，以减少由于神经网络误分类而导致的重大失败风险。

以在GaAs-QD数据集上的应用为例的探索策略：

(1) 搜索第一条线：首先通过在四个方向上探索电压空间来寻找第一条线，确定一条参考线的位置。

(2) 估算线的斜率：在找到第一条线之后，算法会通过扫描两组补丁，这些补丁沿着第一条线的圆弧方向分布，从而估算线的斜率。

(3)垂直方向探索：根据第一条线的位置和斜率，算法会在与该线垂直的方向上继续探索，获取线与线之间的距离信息。当在较低电压区域连续探测三倍平均距离而没有找到新线时，探索停止。

(4)寻找可能错过的线：通过扫描多个区域来寻找可能被漏掉的线。这些区域是根据平均线间距和斜率估算的。在这个例子中，图像底部有一条衰退线，模型的低置信度触发了验证程序。随后，进一步扫描了假设的线方向（紫色箭头所示），直到置信度较高的推断验证或否定了该线的存在。

(5)推断单电子区位置：根据最左侧线的位置、斜率和平均线间距（包括所有前面步骤的扫描结果），推断出单电子区的位置。

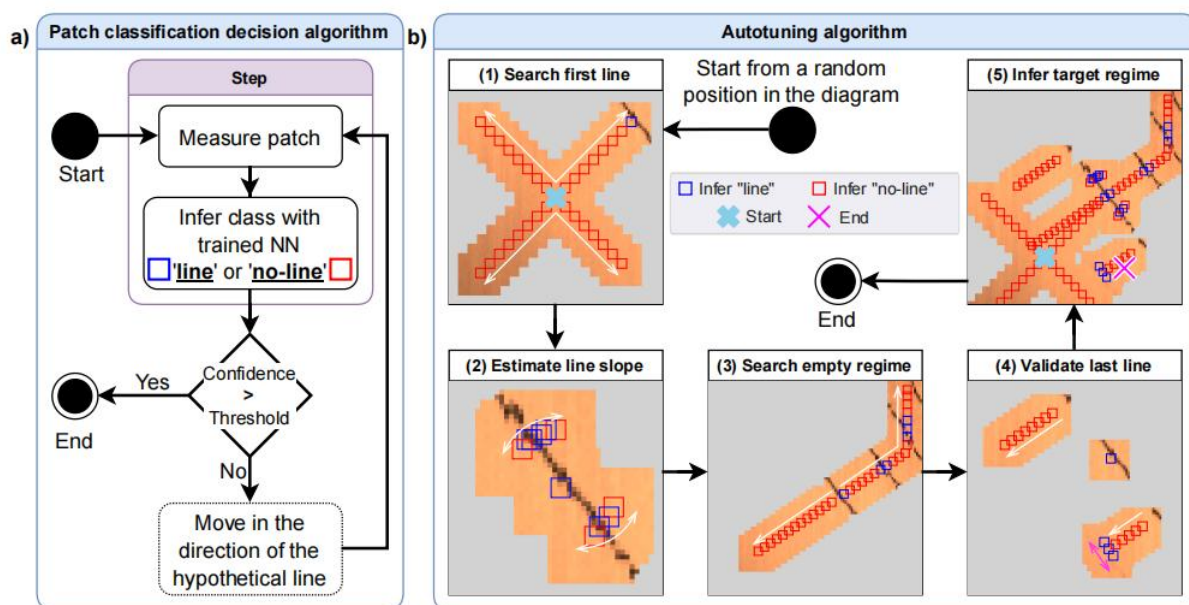


图 5 GaAs-QD数据集上的探索策略示意图

通过在假定的方向上进行额外的步骤验证或排除线的存在（见上图中的紫色箭头，步骤4），直到补丁被高置信度地分类为“线”。

对每个包含单电子区的图表（每个数据集9个）评估了此探索策略。为了测试该方法，采用了k折交叉验证方法，并确保测试补丁不包括在训练集内。

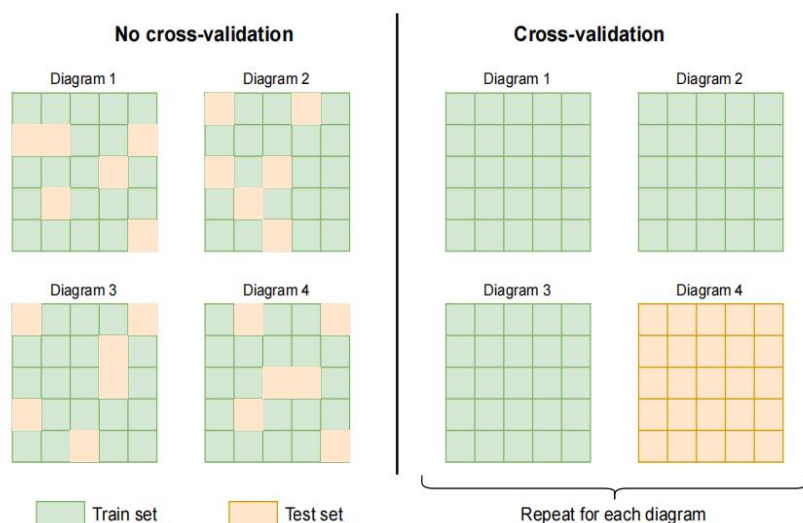


图 6 k折交叉验证方法

## 4. 复现细节

### 4.1. 源码配置

作者已提供代码，链接如下<https://github.com/3it-inpaqt/dot-calibration-v2/tree/offline-article>

### 4.2. 实验环境搭建

#### 4.2.1. 创建 Conda 环境并安装依赖项

项目中包含了 `environment.yml` 文件用于定义和管理 Python 环境，通过它可以直接创建和配置项目所需要的 Conda 环境。

#### 4.2.2. 安装pytorch

通过conda安装PyTorch，并安装与电脑CUDA兼容的PyTorch版本。

#### 4.2.3. 配置数据库

根据项目中的readme文件，配置数据集结构，并安装其余依赖项。

### 4.3. 创新点

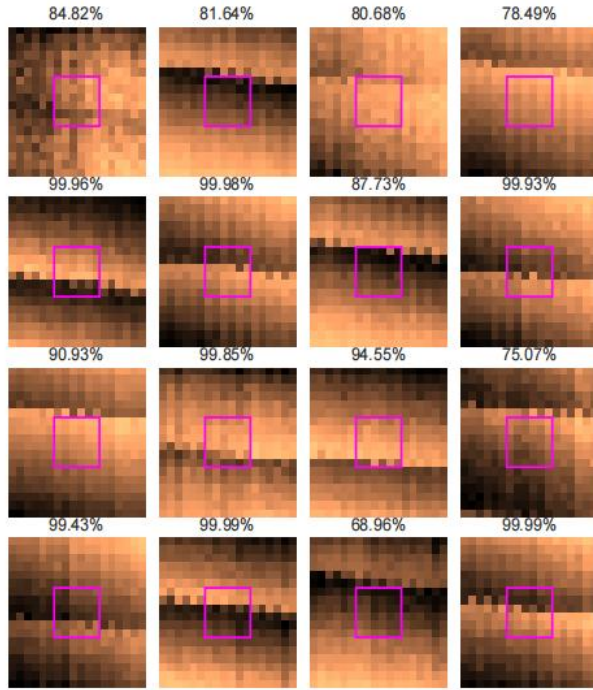
Adam (Adaptive Moment Estimation) 优化器是一种用于训练深度学习模型的算法，它结合了动量 (Momentum) 和自适应学习率的概念，以提高模型训练的效率和稳定性。Adam优化器由Kingma和Ba在2014年提出，它通过计算梯度的一阶矩估计（即均值）和二阶矩估计（即未中心化的方差），来调整每个参数的学习率。在Adam中，一阶矩估计相当于动量项，它帮助优化器在参数空间中沿着梯度下降的方向快速移动，减少震荡。二阶矩估计则用于调整学习率，使得不同参数的学习率可以根据其历史梯度信息自适应调整，这有助于优化器在复杂损失函数表面更平滑地下降。Adam优化器的更新规则包括两个关键步骤：首先，计算梯度的一阶和二阶矩估计的指数加权移动平均；然后，使用这些估计值来更新参数。这种更新方式使得Adam在处理稀疏梯度和非平稳目标时表现出较好的性能。

为了在调谐过程中更精确地控制电荷状态的更新步长，选择应用AdamW优化器，为每个参数自适应地调整学习率。AdamW在Adam的基础上增加了权重衰减（L2正则化），这有助于防止模型过拟合，提高调谐模型的泛化能力；同时，由于结合了动量和自适应学习率的优点，还可以加快电荷调谐过程的收敛速度。相较于Adam优化器，考虑到设备扫描速度有时可能过快导致产生特殊波形图像，当调谐过程中涉及到稀疏数据时，AdamW优化器的自适应学习率特性可能有助于更好地处理这些数据。

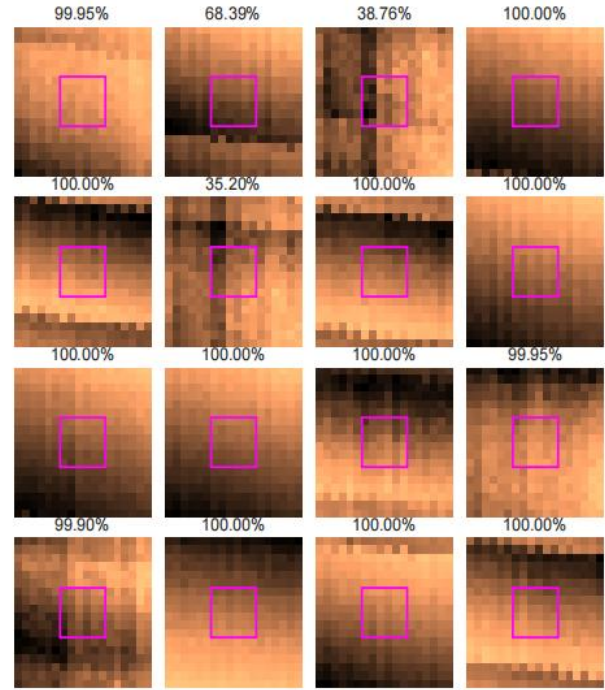


## 5. 实验结果分析

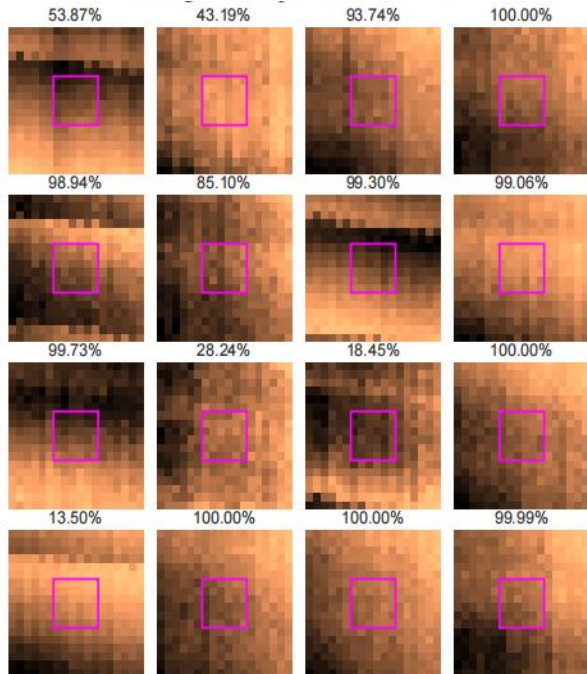
对于每个数据集的每个图表，进行了50个随机起始点的实验。整个实验重复进行了10次，每次使用不同的随机种子，这些随机种子影响神经网络的参数初始化、训练过程和随机起始点。总共评估了 $1.1 \times 10^7$ 步，进行了81,000次离线调谐模拟，并使用810个独立训练的神经网络。



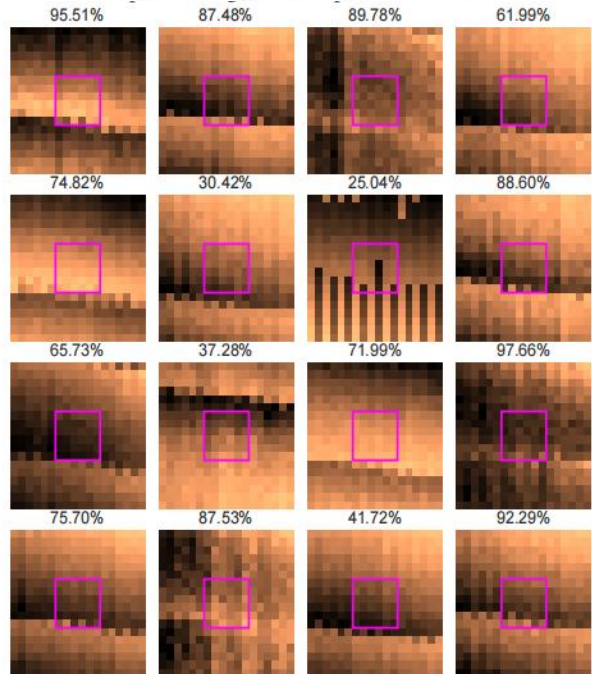
(a) Correctly classified patches labeled as “line”. 16 examples among the 947 patches in this case.



(b) Correctly classified patches labeled as “no-line”. 16 examples among the 1438 patches in this case.



(c) Badly classified patches as “no-line” (labeled as “line”). 16 examples among the 75 patches in this case.



(d) Badly classified patches as “line” (labeled as “no-line”). 16 examples among the 468 patches in this case.

图 7 测试结果

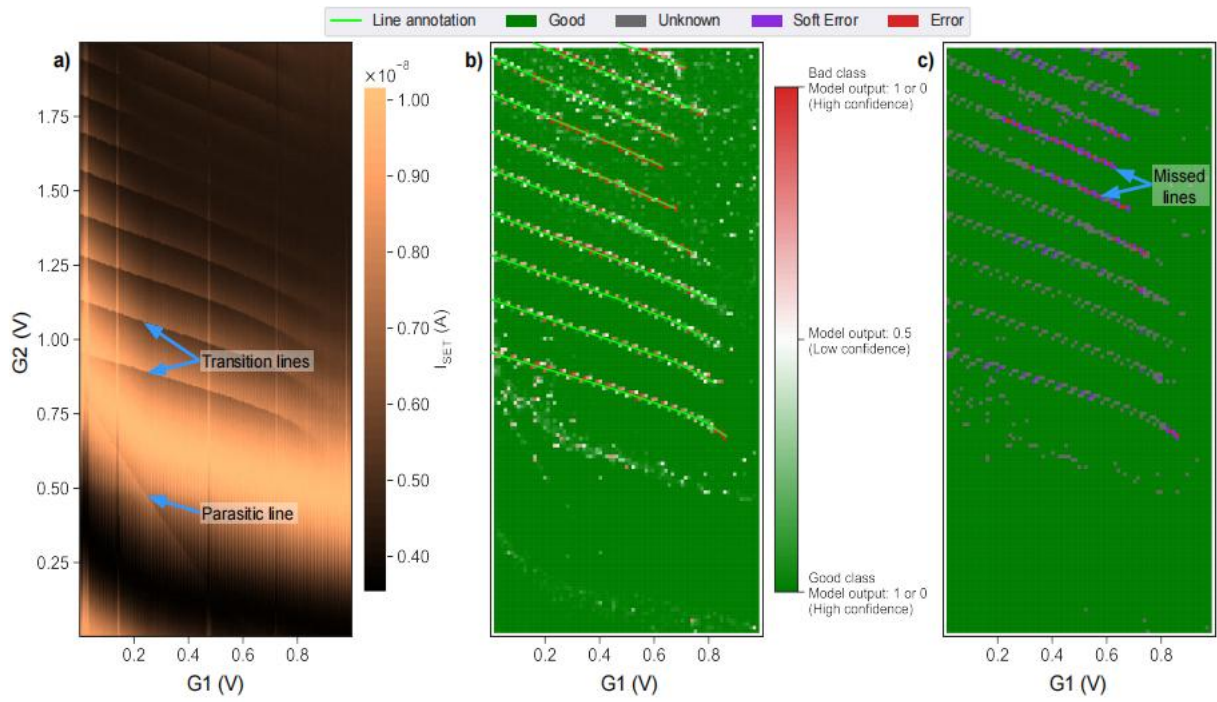


图 8 稳定性图示例分析

对于每种可能的“数据集-神经网络”组合，实验结果给出了使用或不使用神经网络置信度评分（基于不确定性）的自动调谐成功率。利用模型的不确定性信息，一致地减少了调谐失败的数量（平均减少53%），代价是增加了一些额外的步骤（平均增加22%）。最显著的改善出现在Si-SG-QD数据集上的CNN模型，其中，当自动调谐程序利用置信度评分时，调谐成功率（最终电压坐标位于单电子区的比例）从88.8%提高到99.5%（调谐失败减少了95%，步骤增加了8.5%）。

总体而言，噪声和硬件缺陷对于线检测任务来说相对容易管理，但在图表尺度上进行探索时更具挑战性。因此，自动调谐过程的可靠性主要受到过渡线形状和一致性的影响。

Dataset	Model	Line detection accuracy	Uncertainty-based tuning	Average step number	Tuning success
Si-SG-QD	BCNN	96.9% $\pm$ 0.1	Yes	164	99.2% $\pm$ 0.7
			No	148	88.2% $\pm$ 2.3
	CNN	96.9% $\pm$ 0.1	Yes	165	<b>99.5%</b> $\pm$ 0.7
			No	152	88.8% $\pm$ 2.4
	FF	90.4% $\pm$ 1.1	Yes	194	72.4% $\pm$ 6.3
			No	122	23.9% $\pm$ 5.4
GaAs-QD	BCNN	93.3% $\pm$ 0.5	Yes	104	75.3% $\pm$ 4.2
			No	92	55.9% $\pm$ 3.8
	CNN	94.6% $\pm$ 0.2	Yes	103	<b>80.6%</b> $\pm$ 3.9
			No	93	72.4% $\pm$ 2.9
	FF	93.1% $\pm$ 0.2	Yes	105	72.8% $\pm$ 4.5
			No	92	58.4% $\pm$ 3.4
Si-OG-QD	BCNN	92.5% $\pm$ 0.4	Yes	185	75.2% $\pm$ 2.5
			No	155	66.3% $\pm$ 3.4
	CNN	90.7% $\pm$ 0.3	Yes	193	<b>78.1%</b> $\pm$ 1.7
			No	150	61.7% $\pm$ 3.0
	FF	90.8% $\pm$ 0.2	Yes	200	78.0% $\pm$ 2.5
			No	151	59.3% $\pm$ 2.4

图 9 不同数据集上调谐成功率示意图

## 6. 总结与展望

本研究提出了一种基于机器学习的自动化程序，用于半导体自旋量子比特的电荷调谐，旨在最小化人工干预，解决量子点技术规模化中的一个重要挑战。该方法利用神经网络识别稳定性图中的噪声过渡线，并通过神经网络的不确定性估计引导稳健的探索策略。

随着量子比特阵列和多量子比特系统的发展，如何在大规模量子系统中实现自动调谐成为了一个重要课题。多量子比特系统的调谐需要考虑更多的相互作用和复杂的空间关系，并且在保证高效性的同时减少复杂度和计算资源消耗。

基于本文提到的单量子点自动调谐的过渡线检测以及探索策略，未来可以进一步在双量子点或多量子点设备形成的不同特征的稳定性图（例如，双量子点扫描出的稳定性图呈现的菱形状），应用类似的检测方法以及新的探索策略，通过神经网络的多任务学习方法，即通过一个模型同时优化多个量子比特的调谐过程，有效利用神经网络数据共享和跨任务学习的优势，在多量子比特系统中实现更为精确和高效的调谐。

## 参考文献

- [1]Stopa, Michael. “Quantum dot self-consistent electronic structure and the Coulomb blockade.” Physical review. B, Condensed matter 54 19 (1996): 13767–13783 .
- [2]Sadovskyy I A, Lesovik G B, Blatter G. Continuously tunable charge in Andreev quantum dots[J]. Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics, 2007, 75(19): 195334.
- [3]Chua L O. CNN: A vision of complexity[J]. International Journal of Bifurcation and Chaos, 1997, 7(10): 2219–2425.
- [4]Schug D, Kovach T J, Wolfe M A, et al. Explainable Classification Techniques for Quantum Dot Device Measurements[J]. arXiv preprint arXiv:2402.13699, 2024.
- [5]Redfern A J, Zhu L, Newquist M K. BCNN: a binary CNN with all matrix ops quantized to 1 bit precision[C]//Proceedings of the IEEE/CVF conference on computer vision and pattern recognition. 2021: 4604–4612.
- [6] Stefanie Czischek, Victor Yon, Marc-Antoine Genest, Marc-Antoine Roux, Sophie Rochette, Julien Camirand Lemyre, Mathieu Moras, Michel Pioro-Ladrière, Dominique Drouin, Yann Beilliard, and Roger G Melko. Miniaturizing neural networks for charge state autotuning in quantum dots. Machine Learning: Science and Technology, 3(1):015001, November 2021. ISSN 2632–2153. doi:10.1088/2632–2153/ac34db. URL <http://dx.doi.org/10.1088/2632–2153/ac34db>
- [7]Yon V, Galaup B, Rohrbacher C, et al. Robust quantum dots charge autotuning using neural networks uncertainty[J]. arXiv preprint arXiv:2406.05175, 2024.