

超伝導量子ビットに応用される量子デバイスの制御、校正、特性評価用統合ツールセット

Nicolas Wittler,^{1, 2, *} Federico Roy,^{1, 3, *} Kevin Pack,^{1, 2} Max Werninghaus,^{1, 3} Anurag Saha Roy,¹ Daniel J. Egger,³ Stefan Filipp,^{3, 4, 5} Frank K. Wilhelm,^{1, 2} and Shai Machnes^{1, 2}

ザールランド大学・理論物理学、66123ザールブリュッケン、ドイツ

ペーター・グリューンベルク研究所-量子コンピューティング解析 (PGI12)
、ユーリッヒ研究センター、D-52425ユーリッヒ、ドイツ

IBM Quantum, IBM Research GmbH, Zurich Research Laboratory, Säumerstrasse 4, 8803 Rüschlikon, Switzerland.

ミュンヘン工科大学物理学科、85748ガルヒング、ドイツ

ドイツ・ガルヒング 85748 バイエルン科学アカデミー Walther-Meißner-Institut

量子計算のスケールアップに向けた取り組みは、量子ビットの数ではなく、エンタングルゲートの不正確さが主な制限要因になるところまで来ています。しかし、根本的なエラーソースを理解するために必要な非常に詳細なシステム特性は、困難なプロセスであり、チップのサイズが大きくなると現実的ではありません。オープンループ最適制御技術はゲートの改良を可能にしますが、それらに基づいているモデルによって制限されています。この状況を改善するために、オープンループパルス最適化、モデルフリーキャリブレーション、モデルフィットティング、精密化が可能な、制御、キャリブレーション、特性評価 (C³) の統合オープンソースツールセットを提供します。これらのツールを組み合わせて、定量的に正確なシステムモデル、高忠実度のゲート、および近似的なエラーバジェットを見つけるための方法論を、高性能で機能豊富なシミュレータをベースに紹介する。その結果、1%以下の誤差でモデルパラメータを学習し、校正の必要なく 99.6% の忠実度を達成するコヒーレンス制限クロス共振 (CR) ゲートを導出した。

I. THE PROBLEM

量子プロセッシングユニット (QPU) のスケールアップは非常に大きな課題であり、ゲートファイデリティの向上や量子ビットの増加など、複数の面で進歩を遂げることが求められています。過去数年間、より大きなデバイスを作ることに重点が置かれ、大きな成功を収めてきました [1, 2]。しかし、量子ビットの数は、忠実度がその実用性に与える限界を超えていません： 1] では、64という記録的な量子体積 [3] が実証されましたが、これは、忠実度が $2 / 3$ を下回るまでに $\log_2 (64)^2 = 36$ 個のもつれゲートを実行できるデバイスであることを意味し、6量子ビットの配列としては比較的小さなゲート数でした。2014年 [4] に単独で実証された2量子ビットゲートファイデリティ (0.994) は、後者が大きな2次元量子ビット配列の同時ゲートであるにもかかわらず、2019年の [2] のもの (0.9938) と同等であるとさえ言えるかもしれません。

ゲートファイデリティの向上が比較的遅れているのは、誤差の原因に対する理解が不十分であることに起因しています。実際、QPU の特性評価とキャリブレーションを所望の精度で行うのは非現実的で面倒なことであり、また、増加するデバイスで動作させるのは難しい。

量子ビット数は、わずかに変化する特性を考慮し、個々のペアごとにエンタングルゲートを微調整することが必要です。その結果、詳細なモデルがないため、より忠実なゲートを実現するために努力すべき場所を特定することが難しくなります [5, 6]。

すべてのモデルは間違っているが、いくつかは有用である」 [7] ということを踏まえ、Good Modelを以下のように記述する：

良いモデルとは、我々が実行したい操作に対して、我々が気にする精度でシステムの挙動を予測するものである。

QPUの場合、良いモデルは、実現可能なゲート生成パルスの範囲と、そのようなゲートの長いシーケンスに対して、 10^5 のオーダーの忠実な精度で予測力を持つ必要があります。著者らの知る限り、超伝導QPUのこのようなグッドモデルは、これまで発表されていない。

モデルは開ループ最適制御における高忠実度ゲートを導き出すための基礎となるため [8-15]、モデルが不正確であれば必然的に得られるゲートの実験精度が低下する。この問題は、最適化されたパルスがモデルの不正確さに対して一次的に钝感であることによって、部分的にしか改善されません [16, 17]。適応型ハイブリッド最適制御 (Ad-HOC) プロトコル [18] のような方法論は、モデルベースのオープンループ最適化とクローズドループ実験キャリブレーション [12, 19] を組み合わせてこの問題に対処しますが、キャリブレーションの必要性がモデルの不十分さを証明するため、不満足な立場になります：残りの欠点の根本原因是説明されていません。

* c3@q-optimize.org.

Integrated tool-set for control, calibration, and characterization of quantum devices applied to superconducting qubits

Nicolas Wittler,^{1, 2, *} Federico Roy,^{1, 3, *} Kevin Pack,^{1, 2} Max Werninghaus,^{1, 3} Anurag Saha Roy,¹ Daniel J. Egger,³ Stefan Filipp,^{3, 4, 5} Frank K. Wilhelm,^{1, 2} and Shai Machnes^{1, 2}

¹ *Theoretical Physics, Saarland University, 66123 Saarbrücken, Germany*

² *Peter Grünberg Institut – Quantum Computing Analytics (PGI 12), Forschungszentrum Jülich, D-52425 Jülich, Germany*

³ *IBM Quantum, IBM Research GmbH, Zurich Research Laboratory, Säumerstrasse 4, 8803 Rüschlikon, Switzerland*

⁴ *Department of Physics, Technical University of Munich, 85748 Garching, Germany*

⁵ *Walther-Meissner-Institut, Bayerische Akademie der Wissenschaften, Garching 85748, Germany*

Efforts to scale-up quantum computation have reached a point where the principal limiting factor is not the number of qubits, but the entangling gate infidelity. However, the highly detailed system characterization required to understand the underlying error sources is an arduous process and impractical with increasing chip size. Open-loop optimal control techniques allow for the improvement of gates but are limited by the models they are based on. To rectify the situation, we provide an integrated open-source tool-set for Control, Calibration and Characterization (C^3), capable of open-loop pulse optimization, model-free calibration, model fitting and refinement. We present a methodology to combine these tools to find a quantitatively accurate system model, high-fidelity gates and an approximate error budget, all based on a high-performance, feature-rich simulator. We illustrate our methods using simulated fixed-frequency superconducting qubits for which we learn model parameters with less than 1% error and derive a coherence limited cross-resonance (CR) gate that achieves 99.6% fidelity without need for calibration.

I. THE PROBLEM

Scaling up quantum processing units (QUPUs) is a monumental task, that requires the community to make progress on multiple fronts, most importantly improving gate fidelities and increasing the number of qubits. Over the past few years, significant emphasis has been placed on creating larger devices, yielding great success [1, 2]. However, the number of qubits has outstripped the limits that fidelity places on their utility: In [1], a record quantum volume [3] of 64 was demonstrated, loosely translating to the device being able to perform $\log_2(64)^2 = 36$ entangling gates before fidelity drops below $2/3$, a relatively small number of gates for an array of six qubits; In [2] the circuit fidelity was 0.1% thus requiring 30 million repetitions to achieve the desired statistics. One could even argue that the two-qubit gate fidelities demonstrated in isolation in 2014 [4] (0.994) are comparable with those in 2019’s [2] (0.9938), even though the latter are for simultaneous gates in a large 2D qubit array.

The relatively slow progress in improving gate fidelities can be traced back to an incomplete understanding of the sources of error. Indeed, characterization and calibration of QUPUs to the desired accuracy is impractical and cumbersome, and operating on devices of increasing

qubit number requires entangling gates to be fine-tuned for each individual pair to account for slightly varying properties. The resulting lack of detailed models makes it harder to identify where efforts must be focused to achieve higher fidelity gates [5, 6].

Given that “all models are wrong, but some are useful” [7], we describe a Good Model as follows:

A *Good Model* is one that predicts the behavior of the system, for the operations we wish to perform, to accuracies we care about.

For a QPU, a Good Model has to have predictive power for the range of feasible gate-generating pulses and for long sequences of such gates, to a fidelity accuracy of the order of 10^{-5} . To the authors’ knowledge, no such Good Model for a superconducting QPU has ever been published.

Since models serve as the basis to derive high-fidelity gates in open-loop optimal control [8–15], any inaccuracies of the model will inevitably degrade the experimental accuracy of the resulting gates. This problem is only partially ameliorated by the first-order insensitivity of optimized pulses to model inaccuracies [16, 17]. Methodologies such as the adaptive hybrid optimal control (Ad-HOC) protocol [18] – which combines a model-based open-loop optimization with a closed-loop experimental calibration [12, 19] – address this issue but leave one in an unsatisfactory position as the need for calibration proves the inadequacy of the model: the root causes of the remaining infidelities are unexplained.

* These two authors contributed equally; c3@q-optimize.org

逆に、グッドモデルがわかっているれば、オープンループ最適制御で生成されたゲートは、定義上、実験上で動作し、さらなるクローズドループのキャリブレーションは必要ありません。これにより、通常であれば時間のかかるキャリブレーションが必要な複雑なパルスの使用が可能になる。このようなグッドモデルはまた、探索的な質問プロセスを通じてエラーバジェットを提供することになります。したがって、グッドモデルを効率的かつ高度に自動化された方法で抽出することは、忠実度を向上させる鍵であり、QPUスケールアップの重要なステップとなります。

本論文では、QPUの制御、校正、特性評価を行うために提案したC³を紹介する。本論文は以下のように構成されている： 第II部ではC³の概念的なステップを示し、第III部ではこれらのステップがどのように実装されるかを例示して方法論を説明する。第IV章では、モデリング、最適化手順、データ比較機能、関連する先行研究についての詳細な説明を含む。最後にVで、この取り組みの現状と長期的な方向性について述べる。

II. C³ – CONTROL, CALIBRATION, AND CHARACTERIZATION

現在の方法論は、システムのモデルの個々のパラメータを抽出したり（特性評価）、使用するパルスの特定のパラメータを微調整したり（校正）するために、カスタマイズされたルーチンに依存しています[20, 21]。この方法は、モデルやパルスのパラメーターの数が増えるにつれて煩雑になり、実用的ではなくなります。C³では、異なるパラダイムを提案します： C³では、次のような異なるパラダイムを提案します。それは、気になるパラメータのセットに敏感な功利の図を最適化することです。これにより、パラメータごとの計測を設計する必要がなくなり、より一般的なアプローチを提供することができます。C³は、制御、校正、特性評価のタスクをそれぞれ実装する3つの別々の最適化で構成されています：

C₁：モデルが与えられたとき、目標とする動作の忠実度を最大化するパルス形状を求める。パルス形状は、アナザツによって制約される場合もあれば、任意波形発生器（AWG）のパラメータを直接設定できる場合もあります。

C₂：パルス形状が与えられたとき、可能であれば同時にそのパラメータを校正し、実際の実験によって測定された功利値を最大にすることで、欠陥モデルの限界を超えて改善する。

C₃：制御パルスとその実験測定結果が与えられたとき、その結果を最もよく再現するようにモデルパラメータを最適化する。必要であれば、モデルを改良する。

オープンループ最適制御C₁とキャリブレーションC₂のタスクは、コミュニティでかなり確立されています[8–15, 18, 19]。

システムを特徴付け、良いモデルを提供するために、モデル予測と実験データを比較してモデルパラメータを最適化するツール、C₃を導入する。この作業をモデル学習と呼ぶことにする。この目的のために、実装されたパルスとそれに対応する測定結果に関する情報を含む実験データセットが必要である。モデルの精度をテストするために、データセットを再現し、同じパルスを実験のシミュレーションに適用し、結果の結果を比較します： これにより、最適化するためのモデルマッチスコアが得られます。最初は、過去の情報や直感をもとに、モデルの候補を立てます。そのモデルが実験を説明するのに適しているれば、最適化はほぼ完全に一致するように収束し、モデルパラメーターの数値が得られます。一方、マッチングが悪い場合、ユーザーは以前の候補を拡張または修正した新しいモデルを提供し、最適化が繰り返されます。ユーザーの選択により、学習した値は新しいモデルのパラメータに引き継がれるか、破棄される。

異種実験データはモデル学習の基礎となるため、図1に示すようにC³の3つのタスクを順番に使用することを提案します。しかし、その応用は

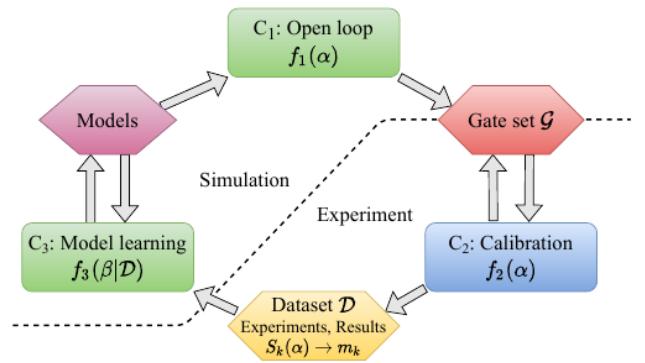


図1. 統合された特性評価ループにおけるC³ツールセットの図である。C₁はシミュレーションで目標関数 $f_1(\alpha)$ を最小化する制御パラメータ α を求め、最適なパルスを得るためにツールである。ゲートセットGには、理想的な論理演算とそれを実現する最適なパルスパラメータ α の情報を含め、実験に対して行いたい全ての演算が含まれている。C₂は、すべてのパラメータを一度に変化させて不貞関数 $f_2(\alpha)$ を最小化する勾配なし探索でパルス形状を最適化するモデルフリー実験適合手順である。データセットとは、使用したパルスパラメータ α 、実施したシーケンス S_k 、測定した最終結果 m_k に関する情報を含む、実験／結果のペアの集合体である。C₃は、データセットを最もよく説明するモデルパラメータ β を決定するモデル学習のためのツールである。実験 $S_k(\alpha)$ をシミュレーションで再現し、実験結果と比較することで得られる目標関数 $f_3(\beta | D)$ を最小化するものである。C³では、実験の様々な要素を表現するために、異なるパラメータ化されたモデルを用意し、実験を最もよく記述するモデルを見つけることができます。学習後、得られたモデルは別の特性評価ループの基礎となり、モデルと制御の両方を洗練させることができます。

Conversely, if a Good Model is known, gates generated by open-loop optimal control will, by definition, work on the experiment, not requiring further closed-loop calibration. This enables the use of complex pulses that would otherwise require time-consuming calibration. Such a Good Model would also provide an error budget through a process of exploratory interrogation – evaluating the potential performance of the system where certain limitations have been removed, i.e. asking “what if ...?”. Therefore, extracting a Good Model efficiently and in a highly automated manner is key to improving fidelities and a crucial step of QPU scale-up.

In this work we present \mathbb{C}^3 , our proposed approach to control, calibrate and characterize QPUs. The paper is organized as follows: We present the conceptual steps of \mathbb{C}^3 in Sec. II and illustrate the methodology by example in Sec. III, showing how these steps are implemented. Sec. IV includes a detailed description of the modeling, optimization procedures, the data comparison function and relevant prior work. We conclude in V with a discussion of the effort’s current status and long-term directions.

II. \mathbb{C}^3 – CONTROL, CALIBRATION, AND CHARACTERIZATION

Current methodology relies on tailored routines to extract individual parameters of the system’s model (characterization) or fine-tune specific parameters of pulses used (calibration) [20, 21]. This approach becomes cumbersome and impractical as the number of model and pulse parameters increases. With \mathbb{C}^3 we propose a different paradigm: Optimizing a figure of merit that is sensitive to the set of parameters we care about. This eliminates the need to design per-parameter measurements, and thus provides a more general approach. \mathbb{C}^3 at its core is composed of three separate optimizations, respectively implementing the tasks of control, calibration, and characterization:

C₁: Given a model, find the pulse shapes that maximize fidelity with a target operation. Pulse shapes may be constrained by an ansatz or allow direct arbitrary waveform generator (AWG) parameterization.

C₂: Given pulse shapes, calibrate their parameters, if possible simultaneously, to maximize a figure of merit measured by the actual experiment, thus improving beyond the limits of a deficient model.

C₃: Given control pulses and their experimental measurement outcome, optimize model parameters to best reproduce the results. Enhance the model if needed.

The tasks of open-loop optimal control, C₁, and calibration, C₂, are fairly established in the community [8–15, 18, 19]. To characterize the system and provide us

with a Good Model, we introduce C₃, a tool to optimize model parameters by comparing model prediction to experimental data. We refer to this task as model learning. For this purpose, one requires an experimental data-set containing information about the implemented pulses and the corresponding measurement outcomes. To test the model accuracy, we reproduce the data-set, applying the same pulses to a simulation of the experiment, and compare the resulting outcomes: This provides a model match score to optimize. Initially, a candidate model is formulated based on previous information or intuition. If the model is suitable to explain the experiment, the optimization will converge to a near perfect match, thus providing numeric values for the model parameters. Instead, if the match is poor, the user supplies a new model, that is either an extension or modification of the previous candidate, and the optimization is repeated. Depending on user choice, learned values are carried over to the parameters of the new model or discarded.

As heterogeneous experimental data is the foundation for model learning, we suggest using the three tasks of \mathbb{C}^3 in sequence, as shown in Fig. 1. However, their applica-

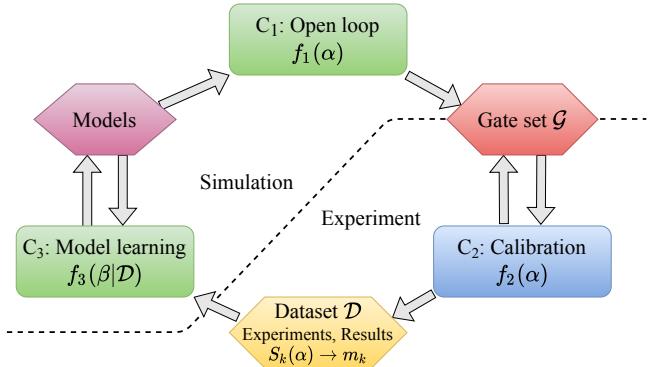


FIG. 1. Diagram of the \mathbb{C}^3 tool-set in an integrated characterization loop. **C₁** is a tool for obtaining optimal pulses by finding the control parameters α that minimize a goal function $f_1(\alpha)$ in simulation. The **gate-set** \mathcal{G} includes all the operation that one wishes to perform on the experiment, including the information of the ideal logical operations and the optimal pulse parameters α that implement them. **C₂** is a model-free experimental calibration procedure that optimizes pulse shapes with a gradient-free search to minimize an infidelity function $f_2(\alpha)$ by varying all parameters at once. A **data-set** is a collection of experiment/result pairs, including information about the pulses parameters used α , the sequences S_k performed and the final outcomes measured, m_k . **C₃** is a tool for model learning that determines the model parameters β that best explain the data-set. It minimizes a goal function $f_3(\beta|\mathcal{D})$ obtained by recreating experiments $S_k(\alpha)$ in simulation and comparing the results to the ones in the experiment. In \mathbb{C}^3 different parameterized models can be provided to represent various elements of the experiment to find the one that best describes it. After the learning, the resulting model can be the basis for another characterization loop, refining both model and controls.

また、 C_1 、 C_2 、 C_3 を実現するために使用される同じツールを使用して、最適化されたモデルの感度分析を得るためにシステムをさらに調べることができます。 C_1 、 C_2 、 C_3 を実現するために使用した同じツールは、実験データに照らして最適化されたモデルの感度分析および考えられるエラーソースの内訳を得るためにシステムをさらに調査するためにも使用することができます。

制御と特徴づけの絡みは、より一般的な制御理論の文脈で提起されていることに留意する[22–25]。量子技術では、3つのタスクのうち2つを組み合わせた作品がある：AdHOC[18]では、最適制御の後にキャリブレーションを行うことが求められている。[26, 27]では、モデルベースの勾配計算と実験的キャリブレーションの組み合わせが提案されているが、集められたデータはシステムモデルの改善には利用されていない。

III. SYNTHETIC APPLICATION EXAMPLE

以下の合成例では、 C^3 を使用して現実的な設定でGood Modelを取得する方法を説明します。制御離散化効果、エレクトロニクス伝達関数、マルコフノイズ、状態準備・測定(SPAM)誤差を含む「実」モデルと名付けられた基礎モデルを用いて、2量子ビットQPUデバイスをシミュレートしています。

この例では、模擬デバイスをブラックボックスとして扱い、 C^3 で質問する。 C_1 ）とキャリブレーション（ C_2 ）により最適な制御パルスを導出し、得られたデータを用いてブラックボックスを3つの候補と比較し、グッドモデル（ C_3 ）を抽出します：

Simple model: Two uncoupled qubits, closed system dynamics;

Intermediate model: Two coupled qubits, closed system dynamics;

完全なモデルです：2つの結合した量子ビット、オープンシステムダイナミクス、SPAMエラーを含む。実モデルと同じ構造だが、先驗的に未決定のパラメータ値。

C_2 で観測されたデバイスの挙動を再現できるまで、系統的にモデルを充実させる。そして、復元されたモデルを用いて、チューンアップの必要なくブラックボックスで良好な性能を発揮する2量子ビットゲートを設計する。

A. ブラックボックス装置（実機）。

実モデルは、A、Bとラベル付けされた2つの結合型3レベルダフィング振動子で構成され、それぞれが外場 $c_i(t)$ によって直接駆動されています。

初期化、ダイナミクス、読み出しが、Lindblad形式のマスター方程式を解くことにより、ドレスベースで行われる[29, 30]。

$$\dot{\rho} = -i[H, \rho] + \sum_{\substack{i=A,B \\ j=\phi,\kappa}} L_{i,j} \rho L_{i,j}^\dagger - \frac{1}{2} \left\{ L_{i,j} L_{i,j}^\dagger, \rho \right\} \quad (1)$$

with

$$H/\hbar = \sum_{i=A,B} \left[\omega_i b_i^\dagger b_i - \frac{\delta_i}{2} (b_i^\dagger b_i - 1) b_i^\dagger b_i \right] + g(b_A + b_A^\dagger)(b_B + b_B^\dagger) + \sum_{i=A,B} c_i(t) (b_i + b_i^\dagger), \quad (2)$$

ここで、 ω_i は量子ビット*i*の周波数、 δ_i は非調和性、 b_i （ b_i^\dagger ）は低下（上昇）演算子、 g は結合強さである。開放系効果は、デフェージングと緩和のリンドブラッド演算子 $L_{i,\phi} = \frac{q^2}{T_{i2}*} b_i^\dagger$ と $L_{i,\kappa} = \frac{q^1}{T_{i1}} b_i$ で表され、崩壊率 $1/T_i^1$ と $1/T_i^{2*}$ である。入力駆動信号 $\varepsilon_i(t)$ が与えられたら、有効制御場 $c_i(t) = \phi[\varepsilon_i(t)]$ を計算します。ここで伝達関数 ϕ [31]は、AWGによってもたらされる離散化、ハードウェアの帯域幅制限、および入力電圧を場の振幅に変換する一定のスケーリング ϕ_0 について説明します。各実験を熱状態から開始することにより、初期温度Tがゼロでないことによる状態準備誤差を実装します。

$$\rho_{\text{init}} = \frac{1}{Z} \left[|0\rangle\langle 0| + \exp\left\{-\frac{E_1}{k_B T}\right\} |1\rangle\langle 1| + \exp\left\{-\frac{E_2}{k_B T}\right\} |2\rangle\langle 2| \right] \quad (3)$$

ここで、 $Z = \sum_{k=0}^2 \exp\{-E_k/k_B T\}$ はエネルギー $E_{0,1,2} = 0, \omega_q, (2\omega_q + \delta)$ で、 k_B はボルツマン定数を表す分割関数。readout misclassificationが含まれ、状態 $|ni\rangle$ を状態 $|mi\rangle$ として確率 $p_{n\rightarrow m}$ で測定する。例えば状態 $\rho_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ を $|0ih0\rangle$ と測定する確率は

$$\Pi_0(\rho_\psi) = p_{0\rightarrow 0} \langle 0|\rho_\psi|0\rangle + p_{1\rightarrow 0} \langle 1|\rho_\psi|1\rangle + p_{2\rightarrow 0} \langle 2|\rho_\psi|2\rangle. \quad (4)$$

実験と同様に、母集団は複数の投影測定の結果を平均して推定され、確率 $\{\Pi_n\}$ の分布からの多項抽選としてシミュレーションされるため、有限の測定反復に由来するノイズ（一般に「ショットノイズ」と呼ばれる）が混入する。実際の「モデルパラメーターの値はTab. Iにまとめられている。I.

B. Open-loop Optimal Control, C_1

C^3 の手順の開始時に、システムのパラメータは大まかな精度でしか知られておらず、その量子ビット周波数と非調和性は「真の」値から数MHz以内になるように選択されると仮定しています。

tion is by no means limited to this use case and one may choose to view them as stand-alone routines. The same tools used to realize C_1 , C_2 and C_3 can also be used to further interrogate the system to obtain a sensitivity analysis of the optimized model in light of the experimental data and a breakdown of possible error sources.

We note that the intertwining of control and characterization has been raised in the more general context of control theory [22–25]. In quantum technology, there are some works which combine two of the three tasks: Ad-HOC [18] calls for optimal control followed by calibration; a combination of model-based gradient calculations and experimental calibrations is proposed by [26, 27], but the data gathered is not used to improve the system model; in [28] pulses are designed specifically for the purpose of reconstructing the noise spectrum.

III. SYNTHETIC APPLICATION EXAMPLE

The following synthetic example illustrates how \mathbb{C}^3 is used to obtain a Good Model in a realistic setting. We simulate a two-qubit QPU device using an underlying model, labeled the “real” model, which includes control discretization effects, electronics transfer functions, Markovian noise, and state preparation and measurement (SPAM) errors.

In this example, the simulated device is treated as a black-box, which we interrogate with \mathbb{C}^3 . We derive (C_1) and calibrate (C_2) optimal control pulses and use the resulting data to extract a Good Model (C_3) by comparing the black-box to three candidates:

Simple model: Two *uncoupled* qubits, *closed* system dynamics;

Intermediate model: Two *coupled* qubits, *closed* system dynamics;

Full model: Two *coupled* qubits, *open* system dynamics, including *SPAM* errors. Same structure as the “real” model, but *a priori* undetermined parameter values.

We systematically enrich the model until it reproduces the behavior of the device observed in C_2 . The recovered model is then used to design a two-qubit gate that performs well on the black-box without the need for tune-up.

A. The black-box device (“real” model)

The “real” model is composed of two coupled three-level Duffing oscillators, labeled by A and B , each directly driven by an external field $c_i(t)$. Initialization, dynamics

and readout are performed in the dressed basis by solving the master equation in Lindblad form [29, 30].

$$\dot{\rho} = -i[H, \rho] + \sum_{\substack{i=A,B \\ j=\phi,\kappa}} L_{i,j} \rho L_{i,j}^\dagger - \frac{1}{2} \left\{ L_{i,j} L_{i,j}^\dagger, \rho \right\} \quad (1)$$

with

$$H/\hbar = \sum_{i=A,B} \left[\omega_i b_i^\dagger b_i - \frac{\delta_i}{2} (b_i^\dagger b_i - 1) b_i^\dagger b_i \right] + \\ + g(b_A + b_A^\dagger)(b_B + b_B^\dagger) + \sum_{i=A,B} c_i(t) (b_i + b_i^\dagger), \quad (2)$$

where ω_i is the frequency of qubit i , δ_i is the anharmonicity, b_i (b_i^\dagger) is the lowering (raising) operator, and g is the coupling strength. Open-system effects are expressed by the dephasing and relaxation Lindblad operators $L_{i,\phi} = \sqrt{\frac{2}{T_i^{2*}}} b_i b_i^\dagger$ and $L_{i,\kappa} = \sqrt{\frac{1}{T_i^1}} b_i$ with decay rates $1/T_i^1$ and $1/T_i^{2*}$.

Given the input drive signals $\varepsilon_i(t)$, we calculate the effective control fields $c_i(t) = \varphi[\varepsilon_i(t)]$, where the transfer function φ [31] accounts for discretization introduced by the AWG, bandwidth limitations of hardware, and for a constant scaling φ_0 , which translates input voltages to field amplitudes. We implement state preparation errors due to a non-zero initial temperature T by starting each experiment from the thermal state

$$\rho_{\text{init}} = \frac{1}{Z} \left[|0\rangle\langle 0| + \exp\left\{-\frac{E_1}{k_B T}\right\} |1\rangle\langle 1| + \exp\left\{-\frac{E_2}{k_B T}\right\} |2\rangle\langle 2| \right] \quad (3)$$

where $Z = \sum_{k=0}^2 \exp\{-E_k/k_B T\}$ is the partition function with energies $E_{0,1,2} = 0, \hbar\omega_q, \hbar(2\omega_q + \delta)$, and k_B is the Boltzmann constant. readout misclassification is included, measuring state $|n\rangle$ as state $|m\rangle$ with probability $p_{n \rightarrow m}$. For example the probability of measuring a state $\rho_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ as $|0\rangle\langle 0|$ is

$$\Pi_0(\rho_\psi) = p_{0 \rightarrow 0} \langle 0|\rho_\psi|0\rangle + p_{1 \rightarrow 0} \langle 1|\rho_\psi|1\rangle + p_{2 \rightarrow 0} \langle 2|\rho_\psi|2\rangle. \quad (4)$$

Similarly to experiment, populations are estimated by averaging the results of multiple projective measurements, simulated as a multinomial draw from the distribution with probabilities $\{\Pi_n\}$, thus introducing noise stemming from a finite number of measurement repetitions (commonly known as ‘shot noise’). The values of the “real” model parameters are summarized in Tab. I.

B. Open-loop Optimal Control, C_1

We assume that at the start of the \mathbb{C}^3 procedure the parameters of the system are only known to a rough precision, with its qubit frequencies and anharmonicities chosen to be within a few MHz of their “true” values. In the

表1. 異なるデータセットに対するC₃学習前後の「実モデル」（基準値）と「候補モデル」のパラメータを概観する。候補モデルの値は、基準値との差で示される。ダッシュ（-）はモデルに存在しないパラメータ、引用符（”）は変更されないパラメータを示す。

Parameter	Real	Simple		Intermediate		Full (ORBIT)		ORBIT+QPT		Decoherence	
	Learning	Model	Before	After	Before	After	Before	After	Before	After	Before
$\omega^{(A)}$ (MHz)	5000	-1.000	-0.886	-1.000	-0.230	-0.230	+0.004	+0.004	-0.016	”	”
$\delta^{(A)}$ (MHz)	210	+1.000	+0.702	+1.000	+0.281	+1.000	+0.400	+0.4008	+0.017	”	”
$\omega^{(B)}$ (MHz)	5600	+1.000	+0.592	+1.000	+0.013	+0.013	-0.003	-0.003	+0.006	”	”
$\delta^{(B)}$ (MHz)	240	+1.000	+0.981	+1.000	+4.32	+1.000	-0.016	-0.016	-0.005	”	”
φ_0 (MHz/V)	159.2	+1.592	-1.634	+1.592	-0.802	-0.802	+0.123	+0.123	+0.246	”	”
g (MHz)	20	-	-	+1.000	-0.665	-0.665	+0.046	+0.046	-0.119	”	”
T (mK)	50	-	-	-	-	+5.000	-3.172	-3.172	-0.216	”	”
$T_1^{(A)}$ (μs)	27	-	-	-	-	+4.000	+4.439	+4.439	+0.021	+0.021	+0.738
$T_{2*}^{(A)}$ (μs)	39	-	-	-	-	+2.000	+1.994	+1.994	-2.353	-2.353	-0.020
$T_1^{(B)}$ (μs)	23	-	-	-	-	+3.000	+4.543	+4.543	+5.704	+5.704	+0.666
$T_{2*}^{(B)}$ (μs)	31	-	-	-	-	+5.000	+6.183	+6.183	+4.716	+4.716	+0.897
$p_{0 \rightarrow 0}^{(A)}$ (%)	97	-	-	-	-	-2.00	-0.84	-0.84	-0.11	”	”
$p_{1 \rightarrow 1}^{(A)}$ (%)	96	-	-	-	-	+0.20	+0.38	+0.38	+0.02	”	”
$p_{0 \rightarrow 0}^{(B)}$ (%)	96	-	-	-	-	-2.00	-0.62	-0.62	-0.03	”	”
$p_{1 \rightarrow 1}^{(B)}$ (%)	95	-	-	-	-	+0.20	+0.08	+0.08	+0.01	”	”

この単純なモデルでは、量子ビットは非結合3レベルダーフィング振動子であり、進化は閉じたシステムダイナミクスに従い、状態の準備と測定は完璧であると仮定します。ハミルトニアンは

$$H/\hbar = \sum_{i=A,B} \omega_i b_i^\dagger b_i - \frac{\delta_i}{2} (b_i^\dagger b_i - 1) b_i^\dagger b_i + c_i(t) (b_i + b_i^\dagger). \quad (5)$$

このモデルを前提に、C₁を用いた1量子ビットゲート用パルスを設計する。リークを軽減するために、ガウシアン形状のパルスアンサツを選び、DRAG (derivative removal by adiabatic gate) 法 [14] による補正を行う。

$$\varepsilon(t) = A \Omega_{\text{Gauss}}(t) \cos((\omega_d + \omega_{\text{off}})t + \phi_{xy}) - \frac{\eta}{\delta} A \dot{\Omega}_{\text{Gauss}}(t) \sin((\omega_d + \omega_{\text{off}})t + \phi_{xy}). \quad (6)$$

ここで、 ω_{off} はガウス包絡線、 ω_{off} (t)はその時間微分、Aは駆動の振幅、 ω_{off} は周波数オフセット、DRAGパラメータ η は第2励起状態への漏れを減らすために調整できる [14, 33]。駆動信号 ω_d t → ω_d t + ϕ_{xy} の位相を変えることにより、ユニタリー回転R(ϕ_{xy} , θ) = ex p{-i(cos φ_{xy} σ_x + sin φ_{xy} σ_y)θ}を実装し、回転軸はx-y平面に自由に選択できる。 $\phi_{xy} = n\frac{\pi}{2}$ とし、n = 0, 1, 2, 3 とし、 α (A, η, ω_{off}) を変えることにより、単一量子ビットゲートセットの実現を目指しています。

を各クビットに分けて、合計8ゲート、ここでX_{mx2} = {R(0, π/2)}などとする。C₁で、勾配降下法を用いて平均平均ゲート不貞を最小化するパラメータαを求める。

$$f_1(\alpha) = 1 - \frac{1}{|\mathcal{G}|} \sum_{U \in \mathcal{G}} f_{\text{av}}(U) = 1 - \frac{1}{|\mathcal{G}|} \sum_{U \in \mathcal{G}} \frac{\chi_{0,0} d + 1}{d + 1}, \quad (8)$$

ここで、 $\chi_{0,0}$ は理想ゲートUと実装ゲートU_e(α)の間のゲート誤差U[†]U_e(α)のカイ行列表現の(0, 0)番目の要素である[34]。勾配ベースのL-BFGSアルゴリズム[36]を用いて、両クビットのゲート長t_g = 7 nsのガウスパルスを最適化します。得られた最適パルスは、qubit Aとqubit Bそれぞれの単純なモデルにおいて、f₁(α) = 6.6 × 10⁻⁴とf₁(α) = 4.9 × 10⁻⁴という平均不貞度をもたらし、この単純なパラメトリゼーションによる高速ゲートの現実的な値となりました。実際、実験的に現実的なランダム化ベンチマーク(RB) [37-40]測定をデバイス上で行うと、ゲートあたりの誤差は2.3 × 10⁻³、1.3 × 10⁻³で、理論上の平均不忠実度に匹敵する結果となりました。最適制御シミュレーション(≈10⁻⁴)から実験(≈10⁻³)への性能劣化は、デバイスと単純モデルのミスマッチを明確に示している。

$$\mathcal{G} = \{X_{\pi/2}, Y_{\pi/2}, X_{-\pi/2}, Y_{-\pi/2}\}, \quad (7)$$

TABLE I. Overview of the parameters of the “real” model (reference values), and the candidate models, before and after the C₃ learning for different data-sets. Candidate model values are shown as difference from reference values. Dashes (–) indicate parameters not present in the model, quotation marks (") indicate parameters not being changed.

Parameter	Real	Simple		Intermediate		Full (ORBIT)		ORBIT+QPT		Decoherence	
		Learning	Model	Before	After	Before	After	Before	After	Before	After
$\omega^{(A)}$ (MHz)	5000	–1.000	–0.886	–1.000	–0.230	–0.230	+0.004	+0.004	–0.016	”	”
$\delta^{(A)}$ (MHz)	210	+1.000	+0.702	+1.000	+0.281	+1.000	+0.400	+0.4008	+0.017	”	”
$\omega^{(B)}$ (MHz)	5600	+1.000	+0.592	+1.000	+0.013	+0.013	–0.003	–0.003	+0.006	”	”
$\delta^{(B)}$ (MHz)	240	+1.000	+0.981	+1.000	+4.32	+1.000	–0.016	–0.016	–0.005	”	”
φ_0 (MHz/V)	159.2	+1.592	–1.634	+1.592	–0.802	–0.802	+0.123	+0.123	+0.246	”	”
g (MHz)	20	–	–	+1.000	–0.665	–0.665	+0.046	+0.046	–0.119	”	”
T (mK)	50	–	–	–	–	+5.000	–3.172	–3.172	–0.216	”	”
$T_1^{(A)}$ (μs)	27	–	–	–	–	+4.000	+4.439	+4.439	+0.021	+0.021	+0.738
$T_{2*}^{(A)}$ (μs)	39	–	–	–	–	+2.000	+1.994	+1.994	–2.353	–2.353	–0.020
$T_1^{(B)}$ (μs)	23	–	–	–	–	+3.000	+4.543	+4.543	+5.704	+5.704	+0.666
$T_{2*}^{(B)}$ (μs)	31	–	–	–	–	+5.000	+6.183	+6.183	+4.716	+4.716	+0.897
$p_{0 \rightarrow 0}^{(A)}$ (%)	97	–	–	–	–	–2.00	–0.84	–0.84	–0.11	”	”
$p_{1 \rightarrow 1}^{(A)}$ (%)	96	–	–	–	–	+0.20	+0.38	+0.38	+0.02	”	”
$p_{0 \rightarrow 0}^{(B)}$ (%)	96	–	–	–	–	–2.00	–0.62	–0.62	–0.03	”	”
$p_{1 \rightarrow 1}^{(B)}$ (%)	95	–	–	–	–	+0.20	+0.08	+0.08	+0.01	”	”

simple model, the qubits are *uncoupled* three-level Duffing oscillators, evolution follows *closed* systems dynamics, and state preparation and measurement are assumed perfect. The Hamiltonian is

$$H/\hbar = \sum_{i=A,B} \omega_i b_i^\dagger b_i - \frac{\delta_i}{2} (b_i^\dagger b_i - 1) + c_i(t) (b_i + b_i^\dagger). \quad (5)$$

Assuming this model, we design pulses for single-qubit gates using C₁. To mitigate leakage, we choose a pulse ansatz with a Gaussian shape and a correction given by the derivative removal by adiabatic gate (DRAG) method [14],

$$\varepsilon(t) = A \Omega_{\text{Gauss}}(t) \cos((\omega_d + \omega_{\text{off}})t + \phi_{xy}) - \frac{\eta}{\delta} A \dot{\Omega}_{\text{Gauss}}(t) \sin((\omega_d + \omega_{\text{off}})t + \phi_{xy}). \quad (6)$$

Here, Ω_{Gauss} is a Gaussian envelope, $\dot{\Omega}_{\text{Gauss}}(t)$ is its time derivative, A is the amplitude of the drive, ω_{off} is a frequency offset and the DRAG parameter η can be adjusted to reduce leakage into the second excited state [14, 33]. The rotation axis can be freely chosen in the x - y plane by changing the phase of the drive signal $\omega_d \rightarrow \omega_d t + \phi_{xy}$, implementing the unitary rotations $R(\phi_{xy}, \theta) = \exp\{-i(\cos \phi_{xy} \sigma_x + \sin \phi_{xy} \sigma_y)\theta\}$. By setting $\phi_{xy} = n\frac{\pi}{2}$ with $n = 0, 1, 2, 3$ and changing $\alpha = (A, \eta, \omega_{\text{off}})$ we aim to realize the single qubit gate-set

$$\mathcal{G} = \{X_{\pi/2}, Y_{\pi/2}, X_{-\pi/2}, Y_{-\pi/2}\}, \quad (7)$$

for each qubit separately, eight gates in total, where $X_{\pi/2} = \{R(0, \pi/2)\}$ and so on. With C₁ we use a gradient-descent method to find the parameters α that minimize the mean average gate infidelity

$$f_1(\alpha) = 1 - \frac{1}{|\mathcal{G}|} \sum_{U \in \mathcal{G}} f_{\text{av}}(U) = 1 - \frac{1}{|\mathcal{G}|} \sum_{U \in \mathcal{G}} \frac{\chi_{0,0} d + 1}{d + 1}, \quad (8)$$

where, $\chi_{0,0}$ is the (0, 0)-th element of the Chi matrix representation of the gate error $U^\dagger \circ \tilde{U}(\alpha)$ between the ideal gate U and the implemented gate $\tilde{U}(\alpha)$ [34]. We optimize Gaussian pulses with a gate length of $t_g = 7$ ns, for both qubits, using the gradient-based L-BFGS algorithm [36]. The obtained optimal pulses yield a mean infidelity of $f_1(\alpha) = 6.6 \times 10^{-4}$ and $f_1(\alpha) = 4.9 \times 10^{-4}$ on the simple model for qubit A and qubit B respectively, realistic values for fast gates using this simple parametrization. Next, we compare the performance of these pulses on the black-box device, where the gates instead yield a mean infidelity of 2.4×10^{-3} for qubit A and 1.5×10^{-3} for qubit B . In fact, performing an experimentally realistic randomized benchmarking (RB) [37–40] measurement on the device yields an error per gate of 2.3×10^{-3} and 1.3×10^{-3} comparable with the theoretical average infidelity. The degradation of performance from optimal control simulation ($\approx 10^{-4}$) to experiment ($\approx 10^{-3}$) shows a clear mismatch between the device and the simple model.

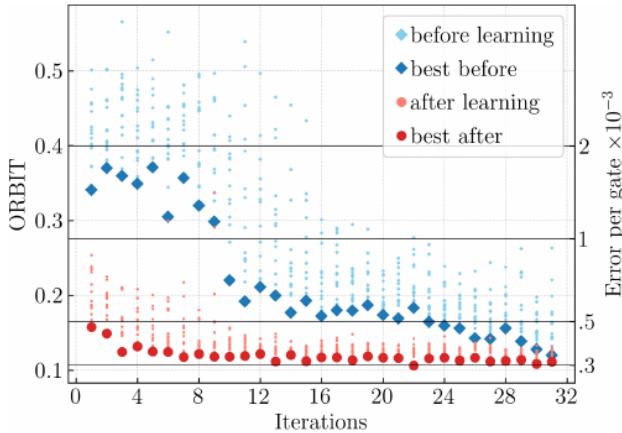


図2. 量子ビットBの単一量子ビットゲート用デバイスでの C_2 キャリブレーション。初期点は、モデルの学習前（後）の C_1 によって示唆されている。水色の菱形（水色の赤丸）は、探索アルゴリズムで選ばれたパルスパラメータ α を変化させた場合のORBITゴール関数（式(9)）の値を表しています。大きな青い菱形（大きな赤い円）は、各反復で生成されサンプリングされた25点の中で最も良いものを強調しています。実験的な実践では、このバッチ処理は、AWGプログラミングにおけるパルスのロードのオーバーヘッドを減らすのに役立ちます[32]。どちらのキャリブレーションも最終的には同じ忠実度を達成しますが、学習済みモデルから得られる最適なゲートは、より良い初期推測を提供します。SPAMエラーがないと仮定すると、ORBIT値はゲートあたりのエラーに変換することができ、右軸に示されます。ORBIT値が ≈ 0.5 の場合、ゲートあたりの誤差が最大となり、チャンネルが完全に脱分極してしまうことに注意することと、ゲートの性能の概算を知ることができます。

C. Calibration, C_2

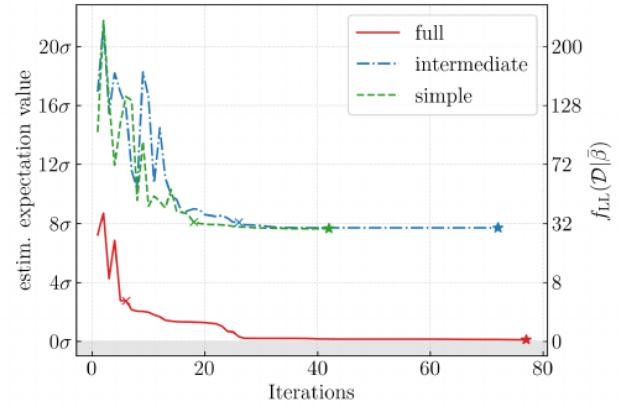
次のステップは、 C_1 によって導出されたパルスを校正し、デバイス上の性能を改善することである。 C_2 を使用し、実験的にアクセス可能な功労指数 f_2 に対して閉ループ、モデルフリー、勾配なしの最適化アルゴリズムを採用します。目的はゲートセットの評価なので、 f_2 はORBIT [19]（単長RB）関数とします。

$$f_2(\alpha) = f_{\text{ORBIT}}(\alpha) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N [1 - m_k(\alpha)], \quad (9)$$

を N 個の配列で平均化する。生存確率 $m_k = \prod_0 S_k(\alpha)$
 $\rho_{\text{init}} S_k^\dagger(\alpha)$ 、は...。を適用した後、状態 $|0\rangle$ (式4参照) を確認する。

$$S_k(\alpha) := \left\{ \prod_j^{L-1} C_{k,j} \right\} C_{\text{inv}} \quad (10)$$

L 個のクリフォードゲート[19]で構成され、初期熱状態 ρ_{init} になります。



$C_{k,j}$ は、図3からサンプリングしたランダムゲートである。 C_3 最適化のモデル階層での進行状況：本文にあるように、単純モデル（緑、破線）、中間モデル（青、点線）、完全モデル（赤、実線）である。モデル一致目標関数 f_{LL} （ β ）は、式(11)で定義される。十字はCMAESからL-BFGSへの切替を示す。CMA-ESアルゴリズムは、各反復で点のバッチを評価し（単純モデル、中間モデル、フルモデルでそれぞれ8, 9, 12）、各バッチのベストだけが表示されます。L-BFGSアルゴリズムは、3つのモデルすべてにおいて、1回の反復に平均約1.2回の評価を要する。関数 f_{LL} は、実験結果が描かれた二項分布の標準偏差で一致度を表現するように再スケールされている。シンプルなモデルは、中間モデルの分散近似に近く、最終的なマッチングスコアが似ていることから実証されています。関連するすべてのデバイス特性を含めることで、フルモデルはほぼ完全な一致スコアに達します。

をクリフォード群 C （単一量子ビット $|C| = 24$ ）とし、 C_{inv} は理想的な場合 $S_k \equiv I$ となるように選択する。式(7)の原子演算 G を用いてクリフォードゲートの集合、例えば $C_6 = X_{m2} \circ Y_{m2} \circ X_{m2}$ を構成し、それから長さ $L=100$ のRB配列 $N=25$ を構成する。生存確率 m_k は $s = 1000$ 回の射影計測を行い、平均化することで推定する。

f_2 を最小化するために、損失関数をバッチでサンプリングする勾配なし探索であるCMA-ES [41]アルゴリズムを採用し、局所最小値とノイズ [42]に対してかなり頑健である。実験的な実証は[32]を参照されたい。 C_1 から最適なパルスパラメータを最適化の出発点として使用し、パラメトリゼーションは式(6)のように維持する。各クビットのキャリブレーションを独立に行い、同様の結果を得ることができました。 C_1 が提案する初期点のORBIT不感度は0.50であり、最適化によって0.12まで改善された。SPAMの誤差を考慮し、完全なRB測定を行い、前後のゲートの不忠実度をそれぞれ 1.3×10^{-3} 、 3.4×10^{-4} と推定しています。Qubit Aでは、RBの推定誤差が 2.3×10^{-3} から 7.5×10^{-4} と同様に改善されています。

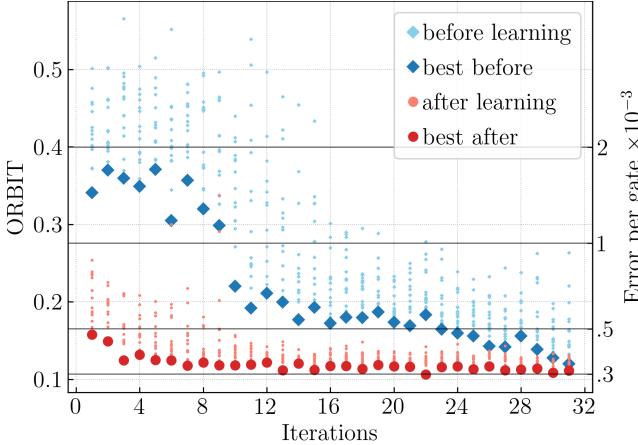


FIG. 2. C_2 calibration on the device for single-qubit gates of qubit B . The initial point is suggested by C_1 before (after) learning of the model. The light blue diamonds (light red circles) represent the values of the ORBIT goal function, Eq. (9), for varying pulse parameters α as chosen by the search algorithm. The larger blue diamonds (larger red circles) highlight the best of 25 points generated and sampled at each iteration. In experimental practice, this batching helps reduce the overhead of loading pulses in AWG programming [32]. Both calibrations achieve the same final fidelity, however the optimal gates derived from the learned model provide a better initial guess. Assuming no SPAM errors the ORBIT value can be translated into an error per gate, indicated on the right axis. This is only meant to provide a rough estimate of the performance of the gate, noting that an ORBIT value of 0.5 represents maximum error per gate, i.e. completely depolarizing channels.

C. Calibration, C_2

The next step is to calibrate the pulses derived by C_1 and improve their performance on the device. We use C_2 and employ a closed-loop, model-free, gradient-free optimization algorithm on an experimentally accessible figure of merit f_2 . Since the goal is to evaluate a gate-set, we choose f_2 to be the ORBIT [19] (single-length RB) function

$$f_2(\alpha) = f_{\text{ORBIT}}(\alpha) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N [1 - m_k(\alpha)], \quad (9)$$

averaging over N sequences. The survival probability, $m_k = \Pi_0(S_k(\alpha)\rho_{\text{init}}S_k^\dagger(\alpha))$, is the probability to measure the state $|0\rangle$ (see Eq. 4) after applying random sequences

$$S_k(\alpha) := \left\{ \prod_j^{L-1} C_{k,j} \right\} C_{\text{inv}} \quad (10)$$

composed of L Clifford gates [19], to the initial thermal state ρ_{init} . The $C_{k,j}$ are the random gates sampled from

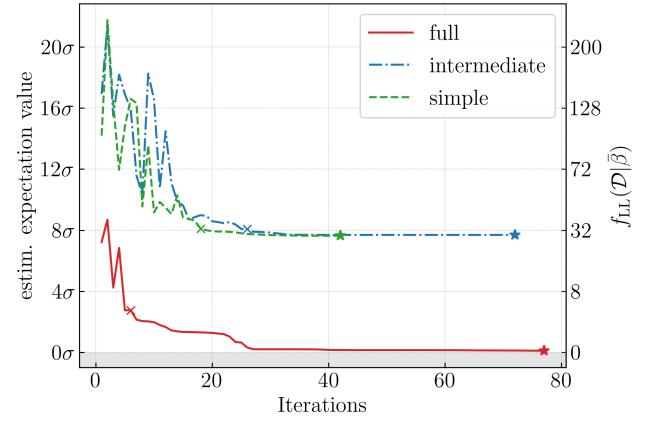


FIG. 3. Progress of the C_3 optimization on a hierarchy of models: Simple model (green, dashed), intermediate model (blue, dot-dashed) and full model (red, solid), as described in the text. The Model match goal function $f_{\text{LL}}(\beta)$ is defined in Eq. (11). The crosses show the switch-over from CMA-ES to L-BFGS. The CMA-ES algorithm evaluates a batch of points for each iteration (8, 9 and 12 for the simple, intermediate and full model respectively), only the best of each batch is shown. The L-BFGS algorithm takes on average approximately 1.2 evaluations per iteration, for all three models. The function f_{LL} is rescaled to express the match in terms of standard deviations of the binomial distribution that the experimental results are drawn from. The simple model is a close dispersive approximation of the intermediate model, demonstrated by their similar final match score. By including all relevant device properties the full model reaches an almost perfect match score.

the Clifford group C (for a single qubit $|C| = 24$), and C_{inv} is chosen so that $S_k \equiv \mathcal{I}$ in the ideal case. We use the atomic operations \mathcal{G} from Eq. (7) to construct the set of Clifford gates, e.g. $C_6 = X_{-\pi/2} \circ Y_{-\pi/2} \circ X_{\pi/2}$, and from them construct $N = 25$ RB sequences of length $L = 100$. The survival probabilities m_k are estimated by performing $s = 1000$ projective measurements and averaging.

To minimize f_2 , we employ the CMA-ES [41] algorithm, a gradient-free search that samples the loss function in batches, and is fairly robust to local minima and noise [42]. See [32] for an experimental demonstration. The optimal pulse parameters from C_1 are used as the starting point of the optimization, and the parametrization is kept as in Eq. (6). We perform the calibration for each qubit independently, with similar results. See Fig. 2 for the ORBIT calibration data of qubit B . The initial point suggested by C_1 has an ORBIT infidelity of 0.50 and is improved by the optimization to 0.12. To account for SPAM errors, we perform a full RB measurement and estimate the infidelity of the gates before and after as 1.3×10^{-3} and 3.4×10^{-4} respectively. Qubit A shows a similar improvement of RB estimated error from 2.3×10^{-3} to 7.5×10^{-4} .

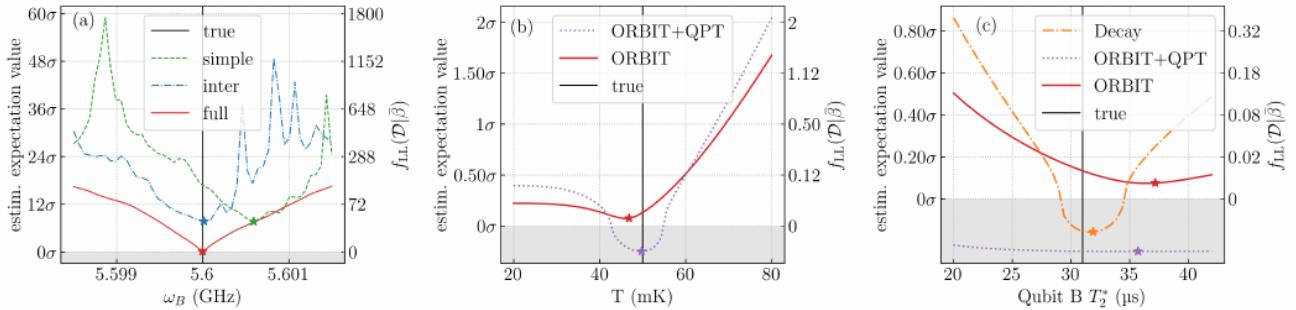


図4. 異なるモデルやデータセットに対する選択したパラメータの感度分析。(a)では、量子ビット周波数 ω_B を掃引し、各値の学習データでゴール関数 f_{LL} を評価します。中級モデル（青、点線）とフルモデル（赤、実線）は同じ周波数値を示し、シンプルモデル（緑、点線）の値は予想通り分散的にシフトしていることがわかる。(b)と(c)では、それぞれチップ温度と量子ビットBの T_2^* について同じスイープを行い、異なる学習データセットのフルモデルで評価しています。ORBITのデータは(a)のフルモデルで使用したものと同じです。量子プロセストモグラフィ(QPT)データ（紫、点線）を導入することで、より正確な温度の定義が可能になります。 T_2^* を決定するために、緩和とデフェーズのデータ（オレンジ、ドット破線）を使用します。0以下のマッチ値は、ノイズの多いデータ、有限のサンプリング、データのガウス分布の仮定からの逸脱のために起こりうる。より多くの感度プロットは補足資料[35]に示されています。

学習のために、 C_2 校正時に行われた実験の集合体であるデータセット $D := \{S_k(\alpha_j) \rightarrow m_{j,k}\}$ を定義します。パルスパラメータ α_j とゲートシーケンス $S_k(\alpha_j)$ 、それに対応する測定結果 $m_{j,k}$ からなります。

D. Characterization, C_3

C_3 では、ORBITのキャリブレーションで得られたデータセット D を用いて、システムのモデルを改善する。各測定結果 $m_{j,k}$ に対して、モデルパラメータ $\beta = (\omega_i, \delta_i, \dots)$ のセットが与えられたシーケンス $S_k(\alpha_j)$ のダイナミクスを計算することによって、同等のシミュレーション結果 $m_{ej,k}(\beta)$ を計算する。全データセットのシミュレーションは計算コストがかかるので、モデル学習のために、全データセットから8つのパルスパラメータセットj/quibitを選択します。各パラメーターセットには $k = 1, \dots, 25$ 個のシーケンスが含まれており、合計 $N = 400$ 個の測定結果から学習することになります(m_n と再表示されます)。次に、目標関数

$$f_3(\beta) = f_{LL}(D|\beta) = \frac{1}{2N} \sum_{n=1}^N \left[\left(\frac{m_n - \bar{m}_n}{\tilde{\sigma}_n} \right)^2 - 1 \right] \quad (11)$$

これは、標準偏差 σ_{en} を持つモデル予測 m_{en} が、記録された値 m_n とどれだけ一致するかを捉えたものです。測定数は有限であるため、平均化された m_n は平均 μ_n と標準偏差 σ_n を持つ、母集団のノイズの多い推定値である。したがって、すべてのモデルパラメータが正確であっても、完全に一致させることはできない。

しかし、全ての m_{en} が基礎となる真の値 μ_n から正確に与えられた標準偏差数だけ離れているシナリオにおいて、ゴール関数 f_{LL} の期待値を決定することができる。より直感的な指標を提供するために、同じスコアになる標準偏差の数で試合 f_{LL} を表現する。

$f_3(\beta)$ を最小化するために、我々は2つのアルゴリズムを組み合わせて使用する：勾配なし(CMA-ES)はローカルミニマムを回避するため、勾配ベース(L-BFGS)は正しい最小値が特定された後に素早く収束させるためです。図3は、異なるモデルに対する C_3 最適化の収束を示したものです。単純なモデルでは、最適化が約8標準偏差離れたところで終了しており、デバイスの結果を再現できていません。このことは、デバイスの実験には、単純なモデルでは捉えられない挙動が含まれていることを示しています。单一量子ビットの実験だけを行っても、スペクタクル効果が大きく、完全非結合モデルが不十分である可能性があります。この矛盾のもう一つの原因是、モデルで考慮されていないSPAMエラーで、実際の測定結果では大きな役割を果たしている可能性があります。この C_3 過程とそれに続くすべての過程から得られるパラメータ値を表Iに示す。

今後、モデルをどのように強化するかは、十分な情報を得た上で決定する必要があります。実験ではパラメータの真の値は分からないので、パラメータの学習精度を決定するためのツールが必要である。一次元スキャンを行い、モデル一致スコアの劣化 $f_{LL}(D|\beta^0 + \delta\beta)$ を観察することにより、最適値 β^0 付近でのモデルパラメータの変化に対する感度を見積もる。図4(a)は、量子ビットBの周波数の値を掃引すると、マッチスコア f_{LL} の非常に不規則な風景が生じることを示している。

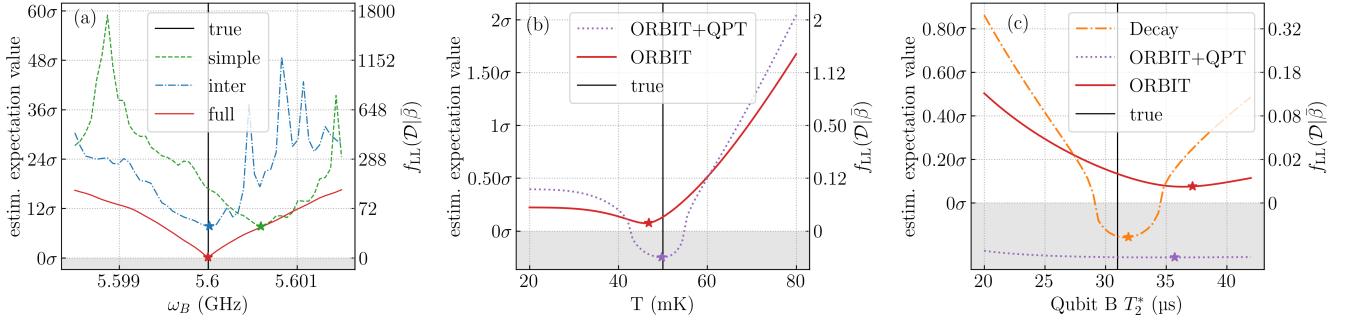


FIG. 4. Sensitivity analysis of selected parameters for different models and data sets. In (a) we sweep the qubit frequency ω_B and evaluate the goal function f_{LL} on the learning data at each value. The star represents the optimal value returned by C_3 . Intermediate (blue, dot-dashed) and Full (red, solid) models, show the same frequency value, while the value of the Simple model (green, dashed) is dispersively shifted, as expected. In (b) and (c) we perform the same sweep for the chip temperature and T_2^* of qubit B respectively, evaluated on the full model for different learning data-sets. The ORBIT data is the same used in the full model in (a). Introducing the Quantum Process Tomography (QPT) data (purple, dotted), allows a more precise definition of the temperature. To determine T_2^* we use relaxation and dephasing data (orange, dot-dashed). Match values below 0 can occur because of noisy data, finite sampling and deviation from the assumption of Gaussian distribution of the data. More sensitivity plots are shown in the Supplemental Material [35].

For the purpose of learning we define the data-set $\mathcal{D} := \{S_k(\alpha_j) \rightarrow m_{j,k}\}$, the collection of the experiments conducted during the C_2 calibration, consisting of pulse parameters α_j and gate sequences $S_k(\alpha_j)$, and the corresponding measurement outcomes $m_{j,k}$.

D. Characterization, C_3

In C_3 , we use the data-set \mathcal{D} obtained during ORBIT calibration to improve the model of the system. For each measurement result $m_{j,k}$ we compute the equivalent simulation result $\tilde{m}_{j,k}(\beta)$ by calculating the dynamics of the sequence $S_k(\alpha_j)$ given a set of model parameter values $\beta = (\omega_i, \delta_i, \dots)$. Since simulating the whole data-set is computationally costly, for the purpose of model learning we make a selection of eight pulse parameter sets j per qubit from the full data-set. Each parameter set includes $k = 1, \dots, 25$ sequences, meaning that we learn from a total of $N = 400$ measurement results, relabeled as m_n . We then construct a goal function

$$f_3(\beta) = f_{LL}(\mathcal{D}|\beta) = \frac{1}{2N} \sum_{n=1}^N \left[\left(\frac{m_n - \tilde{m}_n}{\tilde{\sigma}_n} \right)^2 - 1 \right] \quad (11)$$

that captures how well the model prediction \tilde{m}_n , with standard deviation $\tilde{\sigma}_n$, agrees with the recorded values m_n . Because of the finite number of measurements, the averaged m_n are noisy estimates of the population, with a mean μ_n and standard deviation σ_n . Thus, they cannot be matched perfectly even when all model parameters are exact. However, we can determine the expectation value of the goal function f_{LL} in the scenario where all \tilde{m}_n are

exactly a given number of standard deviations away from the underlying true value μ_n . A detailed mathematical discussion is presented in Sec. IV C. To provide a more intuitive measure, we express the match f_{LL} in terms of the number of standard deviations that would result in the same score.

To minimize $f_3(\beta)$, we use a combination of two algorithms: Gradient-free (CMA-ES) to avoid local minima and gradient-based (L-BFGS) to converge quickly once the right minimum has been identified. Fig. 3 shows the convergence of the C_3 optimization for different models. The simple model is not able to reproduce the device's results, as the optimization ends at approximately 8 standard deviations away. This demonstrates that the experiment on the device includes behavior not captured by the simple model. Spectator effects might be significant even when performing only single qubit experiments, making the completely uncoupled model insufficient. Another source of this inconsistency might be SPAM errors not accounted for in the model, that might play a large role in actual measurement results. The parameter values resulting from this C_3 process and all following ones are shown in Table I.

Going forward an informed decision has to be made about how to enhance the model. Since the true values of the parameters are not known in an experimental setting, we require a tool to determine the precision to which they are learned. We estimate the sensitivity to changes of model parameters around the optimal values β' by performing one-dimensional scans and observing the degradation in model match score, $f_{LL}(\mathcal{D}|\beta' + \delta\beta)$. Fig. 4(a) shows that sweeping the value of frequency of qubit B produces a highly irregular landscape of the match score f_{LL} .

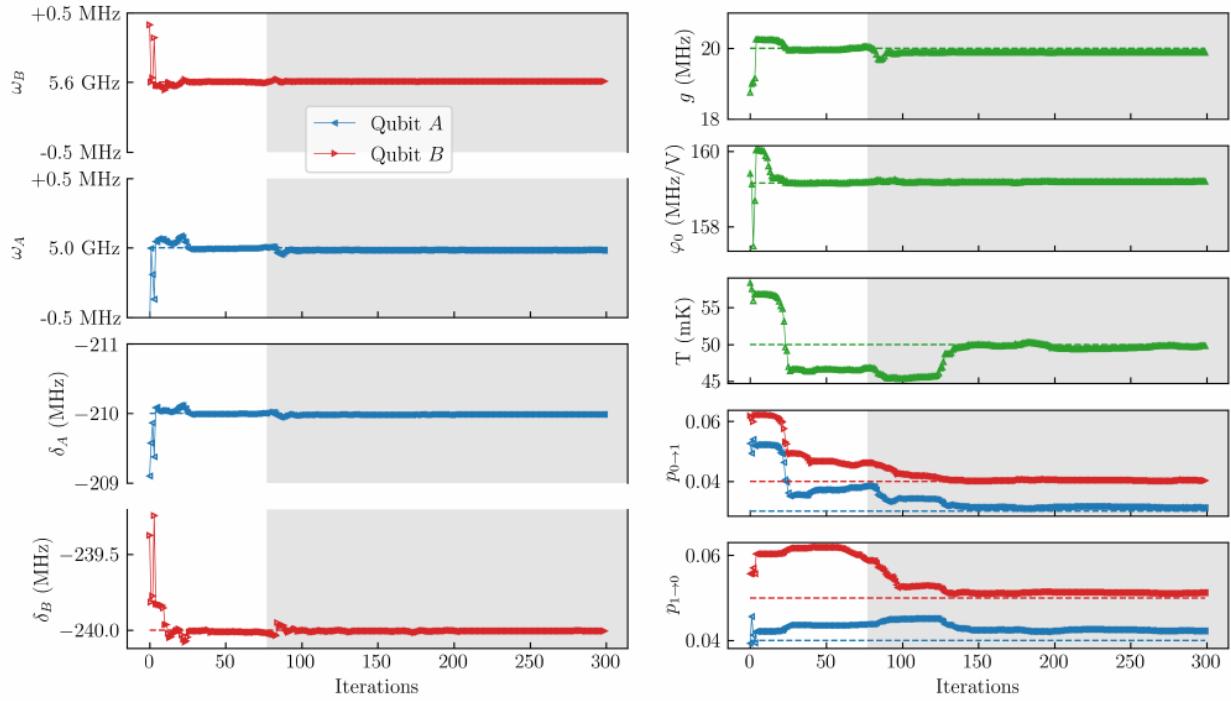


図5. C_3 による2量子ビットモデルパラメータの学習。青、左（赤、右）の三角形はそれぞれ量子ビットA（B）パラメータを示し、共有特性は緑の上向き三角形で示される。実際の「モデルの真の値は破線で示されている。学習は、量子ビットの周波数、非調和性、結合、線型伝達関数を真の値に固定したORBITデータ（左の白い部分）だけを用いて開始します。その後、2量子ビット実験のトモグラフィーデータを追加し（右のグレー部分）、チップ温度Tと誤分類定数 $p_{0 \rightarrow 1}$ 、 $p_{1 \rightarrow 0}$ をよりよく識別できるようにします。

この単純なモデルに、正確な値が不明な静的結合 g を追加して拡張したものが中間モデルである。 C_3 を繰り返す際には、モデルパラメータを初期の荒い値から初期化する。結合を導入することで、結合していない量子ビットの素の周波数と比較して、わずかに周波数がシフトすることが予想されるため、単純モデルから中間モデルへの学習パラメータの引き継ぎは行わない。それにもかかわらず、マッチングスコアの収束は単純モデルからの改善を示さず、実験結果（図3）から約8標準偏差以内にしか到達せず、図4(a)のような感度景観となりました。このことは、シンプルモデルが中間モデルの分散的な近似であることを示唆しています。実際、 $g' = 20\text{MHz}$ の結合と周波数差 $\omega_B - \omega_A = 600\text{MHz}$ を考えると、予想される $g^2 / (\omega_B - \omega_A) = 666\text{ KHz}$ と一致する593 KHzの分散型シフト [43] が観測されました。

最後に、3つの関連する機能を追加することで、モデルの複雑性を高めています： リンドブラッド・マスター方程式でシミュレートされたマルコフ・ノイズ、有限の動作温度による初期化エラー、誤分類という形の測定エラーです。システムモデルは、デバイスの「実」モデルと同じ構造になっています。

最適な中間モデルパラメータからスタートした C_3 手順は、0標準偏差のマークに近づき、満足のいく収束を見せる（図3）。

図5(a)では、最適化中のフルモデルの各パラメータの値を、異なる学習データ（次節以降）を導入して、その真の値（破線）と比較した結果を示している。ORBITデータ（各プロットの左側の白い部分）を用いてモデルパラメータを学習することにより、モデル周波数 $\omega_{A \oplus B}$ 、非調和性 $\delta_{A \oplus B}$ 、結合 g 、ライン伝達関数 ϕ_0 はそれらの真値に収束しています。温度と誤分類のパラメータは回復していないが、これは誤分類の効果である式(4)と初期熱分布の効果である式(3)が似ていて部分的に交換できるため、我々が行った実験では解決できない余分の自由度によるものと考えている。また、デフェーズや緩和時間（図示せず）も回復しない。実際、図4(c)では、量子ビットBのデフェーズ時間 T_2^* に対するデータの感度が最小であることが示されています。RB配列は効果的なランダムダイナミックデカップリング[44]を行い、この結果を説明する可能性があります。

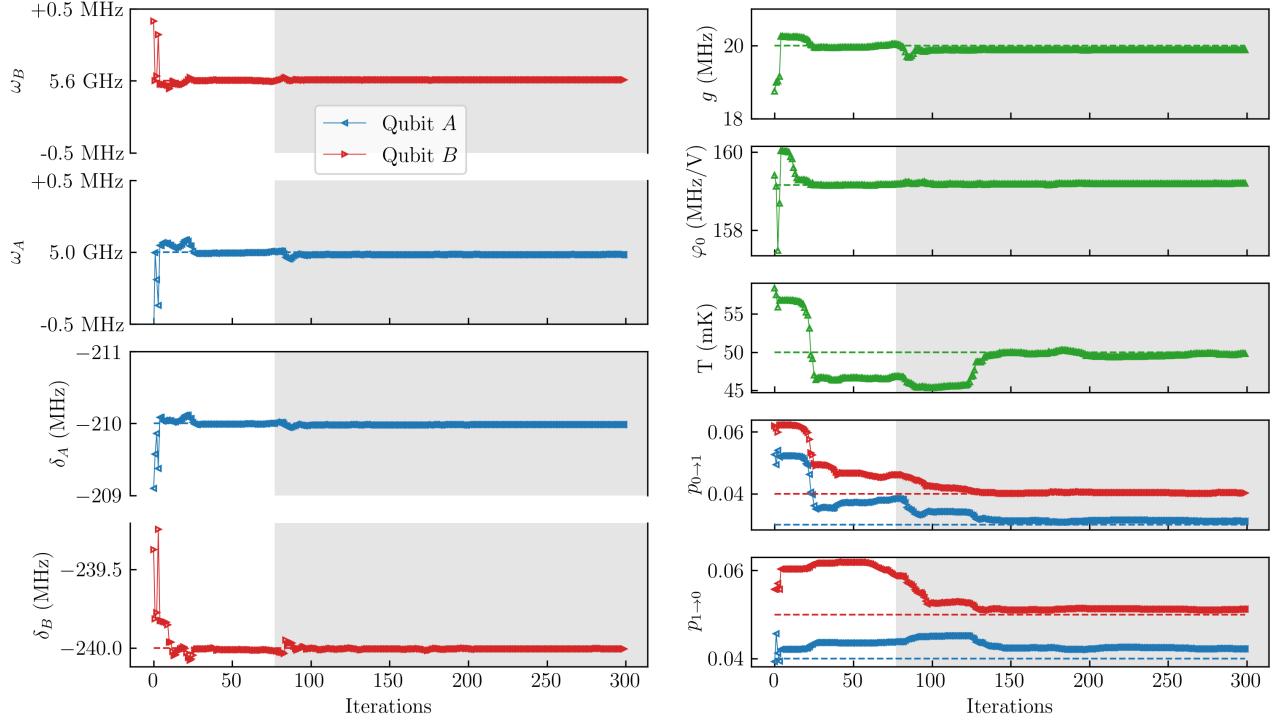


FIG. 5. C_3 learning of the two-qubit model parameters. Blue, left (red, right) triangles indicate qubit A (B) parameters, respectively, while shared properties are shown with green upwards triangles. The true values of the “real” model are indicated as dashed lines. Learning begins using just ORBIT data (left white section) that fixes qubit frequencies, anharmonicities, coupling and line transfer function to their true values. Then tomography data from a two qubit experiment is added (right gray section), which allows better identification the chip temperature T and the misclassification constants $p_{0 \rightarrow 1}$, and $p_{1 \rightarrow 0}$.

The simple model is then extended by adding the static coupling g of unknown exact value, resulting in the intermediate model. When repeating C_3 , we initialize model parameters from the initial, rough values. We do not carry over the learned parameters from the simple model to the intermediate model because, by introducing a coupling, we expect slightly shifted frequencies compared to the bare frequencies of the uncoupled qubits. Nonetheless, convergence of the match score shows no improvement from the simple model, still only reaching within approximately 8 standard deviations from experiment results (Fig. 3) and resulting in a similar sensitivity landscape in Fig. 4(a). This suggests that the simple model is a close dispersive approximation of the intermediate model. Indeed, we observe a dispersive shift [43] of 593 KHz, consistent with the expected $g^2/(\omega_B - \omega_A) \simeq 666$ KHz, given the coupling of $g \simeq 20$ MHz and the frequency difference $\omega_B - \omega_A \simeq 600$ MHz.

Finally, model complexity is increased by adding three relevant features: Markovian noise simulated by Lindblad master equation, initialization errors due to finite operating temperature and measurement errors in the form of misclassification. The system model is now of the same structure as the “real” model of the device. Starting from the best intermediate model parameters,

the C_3 procedure converges satisfactorily, approaching the 0 standard deviations mark (Fig. 3)

In Fig. 5(a) we show the value of each parameter of the full model during optimization, as we introduce different learning data (in the next sections), and compare with their true value (dashed lines). By learning the model parameters with the ORBIT data (white left section of each plot) the model frequencies $\omega_{A/B}$, anharmonicities $\delta_{A/B}$, coupling g and line transfer function φ_0 converge to their true value. The temperature and misclassification parameters are not recovered, and we believe this is due to an extra degree of freedom that is not resolved by the experiments we have performed, as the effects of misclassification, Eq. (4), and initial thermal distribution, Eq. (3), are similar and can be partially exchanged. Dephasing and relaxation times (not shown) are also not recovered. Indeed, in Fig. 4(c) we show that the sensitivity of the data to dephasing time T_2^* of qubit B is minimal. RB sequences perform an effective random dynamical decoupling [44], providing a possible explanation to this result.

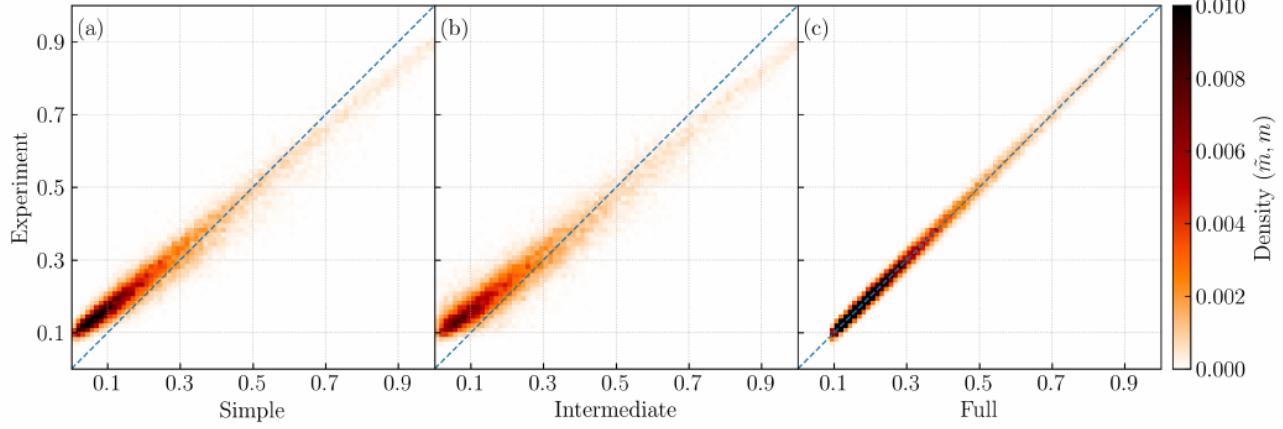


図6. (a)-(c)： シミュレーションと実験の相関を、 Simpleモデル、 e Intermediateモデル、 Fullモデルのそれぞれについて、点の密度 (m_k , m_k) で表したもの。このデータセットは、いわゆる検証セットである： モデルパラメーターの最適化に使われなかったデータ点kである。シンプルモデルとインターミディエイトモデルは、シミュレーションが各記録値に対して測定結果の幅広い分布を予測するため、相関性が低いことがわかります。また、モデルで考慮されていないSPAMエラーに起因する傾きも見られます。フルモデルだけが、対角線を中心とした一貫した高密度分布を生成し、ノイズの多いデータに起因する広がりは最小限であることがわかります。

E. Validation of the learned model

C_3 ステップでデータのサブセットに対してモデルマッチングを行った後、残りのデータセット（これは機械学習では検証セットとも呼ばれる）に対してスコアを計算することで、学習したモデルの予測力を評価することができます。これにより、選択した部分集合が関連するすべての動作を捉えていることが検証され、オーバーフィッティングの危険性が緩和される。

図6(a)～(c)は、校正データ点 $m_{j,k}$ とそのモデルによる再構成 $m_{ej,k}$ の相関を表している。目標関数 f_{LL} (β)をSimple, Intermediate, Fullモデルの検証セット上で評価したところ、それぞれ36.5 ($\approx 8.4\sigma$), 42.0 ($\approx 9.2\sigma$), 0.028 ($\approx 0.2\sigma$) という値が得られた。結論として、 C_3 によって一部のパラメータが復元されなかったとしても、学習されたフルモデルは、過去に記録されたすべてのデータ点におけるシステムの挙動を満足のいく精度で再現しており、確かにGood Modelであることがわかります。これは、追加的な測定データによってシステムの新しい挙動が明らかになることを妨げるものではない： グッドモデルという概念は、常に基礎となるデータセットと結びついている。

さらに、Good Modelで C_1 を繰り返すと (qubit AとBの平均ゲートインフィデリティはそれぞれ 6.3×10^{-4} と 1.1×10^{-3}) 、図2に見られるように、得られたパルスは実機でほぼ最適な性能を示し、 C_2 収束も速くなることが示されました。グッドモデルから得られるパルスは、実機ではまさに最適であることが予想されます。しかし、これはモデルが不正確なのではなく、 C_1 (平均忠実度) と C_2 (1量子ビットORBIT) で使用する数値にズレがあるためである。

平均忠実度は、システム全体の効果を捉えたもので、この場合、300MHz離れた $|02i\rangle$ と $|11i\rangle$ のわずかな反発による2量子ビット間の有効なZZ結合を含みます。校正の前後でRB（一度に1つの量子ビットだけを捕捉する）と平均不忠実性の両方を評価することで検証できるように、1量子ビットのORBIT不忠実性を最小化しても、この効果を調整することはできない。実際、qubit Bの平均不忠実度は 1.2×10^{-3} (Good Modelの 1.1×10^{-3} と同等) ですが、RBによるゲートあたりの誤差は 4.1×10^{-4} と見積もられています。キャリブレーション後のRB推定値は 2.9×10^{-4} に改善されましたが、平均不忠実度は 1.9×10^{-3} に悪化しています。同時RBを行うことで、この問題を解決できる可能性がある。

F. Entangling gate

我々は、 C_1 を持つ2量子ビット交差共振 (CR) ゲート[45, 46]を導き出すことによって、1量子ビット校正データのみを用いて決定されたグッドモデルをさらに調査する。両方の量子ビットを同時に ω_B (量子ビットBの共振周波数) で駆動し、量子ビットAの状態を条件として位相 $\pm\pi/2$ を蓄積させる[20]。両ドライブはフラットトップガウシアンでパラメータ化されています。その結果、CRパルスは $f_{av} = 3.8 \times 10^{-3}$ のゲートインフィデリティを持つ。実モデルで評価すると、ゲートの忠実度は $f_{av} = 4.3 \times 10^{-3}$ となり、学習したモデルが高精度にデバイスの動作を予測することが改めて示されました。

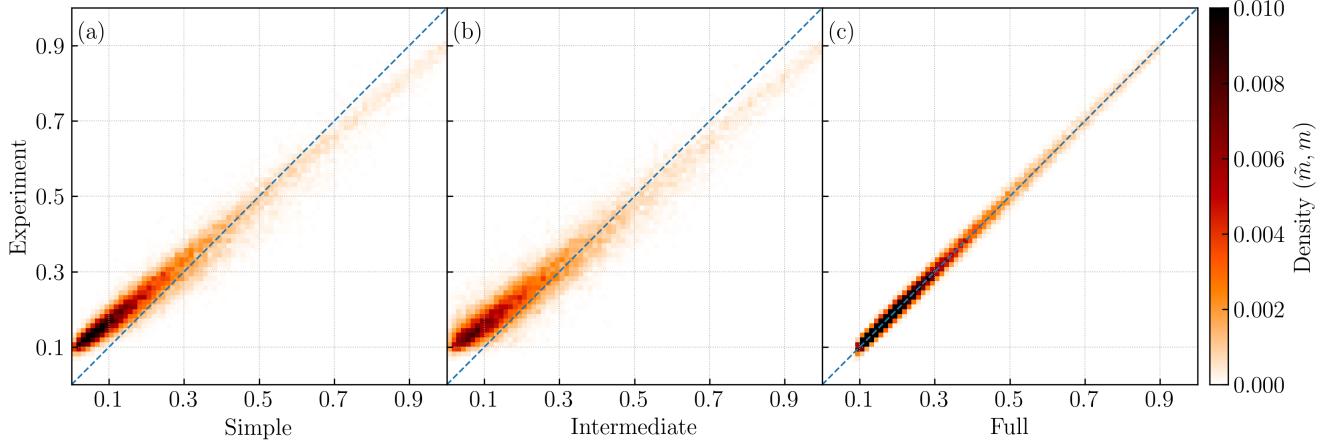


FIG. 6. (a)-(c): Correlation between simulation and experiment expressed as a density of points (\tilde{m}_k, m_k) for the Simple, Intermediate and Full model, respectively. The data-set is the so-called validation set: The data points k that were not used in optimization of the model parameters. The simple and intermediate models show poor correlation as the simulation predicts a wide distribution of measurement outcomes for each recorded value. They also exhibit a tilt that can be attributed to SPAM errors not considered in the models. Only the full model produces a consistently high density distribution centered around the diagonal, with minimal spread due to the noisy data.

E. Validation of the learned model

After model matching on a subset of the data in the C_3 step, we now evaluate the predictive power of the learned models by computing the score on the rest of the data set (this is also known as a validation set in machine learning). This verifies that the selected subset captures all relevant behavior and alleviates the danger of overfitting.

Figures 6(a) to 6(c) depict the correlation between calibration data points $m_{j,k}$ and their model-based reconstructions $\tilde{m}_{j,k}$. We evaluate the goal function $f_{\text{LL}}(\beta)$ over the validation set for the Simple, Intermediate and Full models and obtain values of $36.5 (\approx 8.4\sigma)$, $42.0 (\approx 9.2\sigma)$ and $0.028 (\approx 0.2\sigma)$ respectively. The conclusion is that, even though some parameters were not recovered by C_3 , the learned full model is indeed a Good Model, as it reproduces the behavior of the system on *all previously recorded data points* to satisfying accuracy. This does not prevent additional measurement data to expose new behavior in the system: The notion of the Good Model is always tied to the underlying data-set.

Furthermore, we now repeat the C_1 procedure on the Good Model (yielding average gate infidelities of 6.3×10^{-4} and 1.1×10^{-3} for qubit A and B respectively) and show that the resulting pulses give a near optimal performance on the actual device and allow for faster C_2 convergence, as seen in Fig. 2. One would expect the pulses derived from the Good Model to be exactly optimal on the actual device. Even though it is not the case here, this is not because of an inaccurate model,

but rather because of a disparity between the figures of merit used in C_1 (average infidelity) and C_2 (single-qubit ORBIT). Average fidelity captures effects of the whole system, including, in this case, an effective ZZ-coupling between the two qubits caused by a slight repulsion of the $|02\rangle$ and $|11\rangle$ states, that are 300 MHz apart. Minimizing a single-qubit ORBIT infidelity does not adjust for this effect, as we can verify by evaluating both RB (which captures only one qubit at a time) and average infidelity before and after calibration. Indeed, the average infidelity of qubit B is 1.2×10^{-3} (compatible with the performance of 1.1×10^{-3} on the Good Model) but the error per gate is estimated by RB as 4.1×10^{-4} . After the calibration the RB estimate is improved to 2.9×10^{-4} but the average infidelity is worsened to 1.9×10^{-3} . Performing simultaneous RB could resolve this issue.

F. Entangling gate

We further investigate the Good Model which was determined using only single-qubit calibration data by deriving a two-qubit cross-resonance (CR) gate [45, 46] with C_1 . Both qubits are driven simultaneously at ω_B , the resonant frequency of qubit B , to accumulate a phase $\pm\pi/2$ conditioned on the state of qubit A [20]. Both drives are parameterized by flattop Gaussians. The resulting CR pulse has a gate infidelity of $f_{\text{av}} = 3.8 \times 10^{-3}$. When evaluated on the “real” model the gate has an infidelity of $f_{\text{av}} = 4.3 \times 10^{-3}$, again showing that the learned model predicts device behavior to high accuracy. Notably, the

注目すべきは、1量子ビットデータのみを用いて学習したモデルで、デバイス上の2量子ビットゲートの性能を正確に予測することができたことです。これは、カップリングや有限温度による交換相互作用が原因であると推測しています： 1量子ビットゲートのみを実行した場合でも、有限温度によって高次状態が部分的に励起され、それが結合を介してもう一方の量子ビットと交換されるため、ORBITデータで見えるのです。

デバイス上のゲートの性能は、量子プロセストモグラフィ(QPT)で検証しています。CRゲートの前に、単一量子ビットゲートを適用して、基底状態の準備と測定を行います。 $S = X_{\pi/2} \otimes Y_{\pi/2} \circ CR \circ X_{-\pi/2} \otimes Y_{\pi/2}$ [47]、そして再びこれらの測定値を我々のデータセットに集める。エンタングルゲートにより、前述した誤分類と初期熱分布の間の自由度が高まったと考えられるので、今度はQPTデータ(256配列)と1量子ビットあたりのORBITパラメータ(2×25配列)を学習データとして、別のC₃最適化を実行することにしました。パラメータの収束は図5(a)のグレー部分に示されており、温度と混同行列の値がより真値に近づくように調整されています。

図4(b)は、ゲートデータを絡めることで、真値での谷が狭くなり、より正確にチップ温度を学習できるという主張を実証しています。ただし、T₁とT₂*のパラメータは、QPTの配列が短すぎて感度が悪いため、まだ学習できていません。

G. Relaxation and dephasing

C³内で特殊な測定がどのように定式化されているかを示すために、これらのパラメータに敏感であることが知られている単純な確立されたシーケンスを使用して、T₁とT₂*の値を決定します。崩壊寿命T₁は、量子ビットの励起状態を準備し、次に待ち時間を長くし、基底状態の人口を測定することで決定します。シーケンスは次のように書きます。

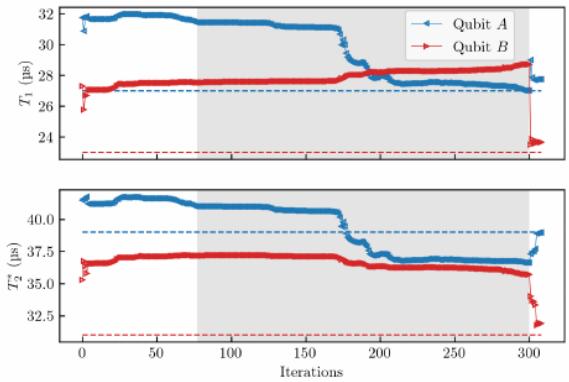
$$S_{T_1}^{(n)} = X_{\pi/2} \circ X_{\pi/2} \circ I^n \quad (12)$$

ここで、X_{π/2}は以前に最適化したπ/2ゲート、IⁿはアイデンティティゲートIのn回の繰り返しを意味する。

$$S_{T_2*}^{(n)} = X_{\pi/2} \circ I^{n/2} \circ X_{\pi/2} \circ X_{\pi/2} \circ I^{n/2} \circ X_{-\pi/2} \quad (13)$$

はラムゼイ・エコー・シーケンスを定義し、減衰時間T₂*を測定するために使用します。100から10000の間で対数間隔に51個のnをとり、完全な減衰曲線をとらえる。

このデータセットを用いて、これまで学習したすべてのモデルパラメータを凍結し、T₁とT₂*の値のみを変化させて、再度C₃最適化を実施しました。これにより、これらの値を真の値から1μs以内に決定することに成功しました(図7)。この手順は、一般的な指数関数的減衰のデータへの適合に相当するC³である。



しかし、図7に示すように 緩和(T₁)と減衰(T₂*)のパラメータのC₃学習。青、左(赤、右)の三角形はそれぞれqubit A (B) パラメータを示す。実」モデルの真の値は破線で示す。背景部分は異なる学習データセットを表す：ORBITデータのみ(左白色部分)、ORBITとQPTデータの混合(中央灰色部分)、崩壊とラムゼイのデータ(右白色部分)。減衰時間は、デコヒーレンス効果の影響を受けやすい特定のデータを学習に用いた場合にのみ正しく同定され、その時点で速やかに実数値に収束することがわかる。

C³では、実験結果の期待される構造、すなわち指数関数的な減衰についての予備知識は必要ありません。したがって、データをマッチングする際に、C³はフィッティング関数を調整する必要なく、SPAMの誤差も考慮することができます。

図4(c)は、量子ビットBのT₂*の値に対するf_{LL}の感度を示しています。新しいデータでは、得られる値の精度が明らかに向上し、最小値がより明確になりました。感度を上げるには、より多くの崩壊データから学習する必要がある。

H. Sources of error

グッドモデルは、モデルのどの特性がゲートの忠実度を上げることを妨げているのかを分解することができます。そこで、Good Modelを理想化することで、CRゲートの性能を制限している要素について調査する。

32]で行われているように、AWGのサンプルごとに1ピクセルずつ最適化することで、ガウシアンアサツツがゲートファイデリティを制限しているかどうかを調べます。平均忠実度はf_{av}^{DRAG} = 3.8 × 10⁻³からf_{av}^{PWC} = 3.6 × 10⁻³まで僅かに改善し、他の要因による制限を示唆した。fidelities.

デコヒーレンス効果によって性能が制限されるかどうかを調べるために、リンドブロッドダイナミクスを無効にしながらCRゲートを再最適化しました。この理想化されたコーヒーレント設定でのオープンループ最適化により、

model learned using only single-qubit data was sufficient to accurately predict the performance of the two-qubit gate on the device. We suspect this to be caused by exchange interactions due to coupling and finite temperature: Even when performing only single-qubit gates, the finite temperature causes a partial excitation of higher states, which are then exchanged with the other qubit via the coupling and thus visible in the ORBIT data.

The performance of the gate on the device is verified with Quantum Process Tomography (QPT): We apply the CR gate preceded and followed by single-qubit gates to prepare and measure in the basis states, e.g. $S = (X_{\pi/2} \otimes Y_{\pi/2}) \circ \text{CR} \circ (X_{-\pi/2} \otimes Y_{\pi/2})$ [47], and again collect these measurements into our data-set. We believe that the entangling gate lifts the degree of freedom between misclassification and initial thermal distribution discussed before, hence we now perform another C_3 optimization, using the QPT data (256 sequences) and one ORBIT parameter per qubit (2×25 sequences) as the learning data. Parameter convergence is shown in the gray areas of Fig. 5(a), where temperature and confusion matrix values are adjusted closer to the true values.

Fig. 4(b) substantiates the claim that the entangling gate data allows for a more precise learning of the chip temperature, exhibiting a narrower valley at the true value. However, we are still not able to learn the T_1 and T_2^* parameters, since the sequences in QPT are too short to be sensitive.

G. Relaxation and dephasing

To demonstrate how a specialized measurement is formulated within C^3 we determine the values of T_1 and T_2^* , using simple established sequences that are known to be sensitive to these parameters. The decay lifetime T_1 is determined by preparing the excited state of the qubit, followed by increasing wait times and then measuring the ground state population. We write the sequence as

$$S_{T_1}^{(n)} = X_{\pi/2} \circ X_{\pi/2} \circ \mathcal{I}^n \quad (12)$$

where $X_{\pi/2}$ is our previously optimized $\pi/2$ gate and \mathcal{I}^n signifies n repetitions of the identity gate \mathcal{I} . Similarly

$$S_{T_2^*}^{(n)} = X_{\pi/2} \circ \mathcal{I}^{n/2} \circ X_{\pi/2} \circ X_{\pi/2} \circ \mathcal{I}^{n/2} \circ X_{-\pi/2} \quad (13)$$

defines a Ramsey echo sequence, used to measure the dephasing time T_2^* . We take 51 logarithmically spaced values of n between 100 and 10000 to capture the full decay curves.

Using this data-set we perform another C_3 optimization, freezing all model parameters learned until now and varying only the values of T_1 and T_2^* . By doing so we manage to determine their values to within $1\mu\text{s}$ of the true values (Fig. 7). This procedure is the C^3 equivalent of a common exponential decay fit to the data. However, with

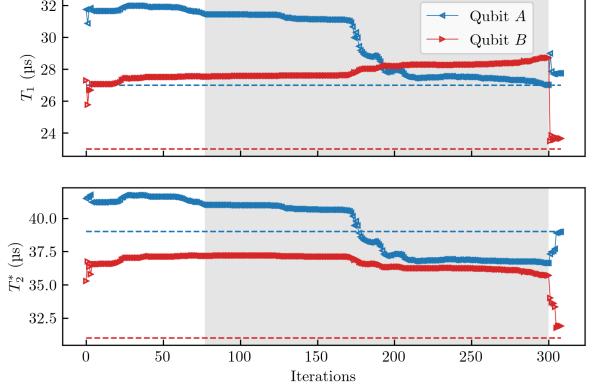


FIG. 7. C_3 learning of the relaxation (T_1) and dephasing (T_2^*) parameters. Blue, left (red, right) triangles indicate qubit A (B) parameters, respectively. The true values of the “real” model are indicated as dashed lines. Background sections represent different learning datasets: just ORBIT data (left white section), a mix of ORBIT and QPT data (center gray section), decay and Ramsey data (right white section). The decay times are correctly identified only when specific data, sensitive to the decoherence effects, is used for learning, at which point they quickly converge to the real value.

C^3 one does not require prior knowledge on the expected structure of the experimental results, i.e. an exponential decay. Hence, when matching the data C^3 also accounts for SPAM errors without the need to adjust the fitting function.

Fig. 4(c) shows the sensitivity of f_{LL} to the value of T_2^* of qubit B. The new data shows a clear improvement in the accuracy of the value obtained and the minimum is better defined. For increased sensitivity one would require more decay data to learn from.

H. Sources of error

The Good Model allows us to break down which of the model properties are preventing higher gate fidelities. To this end, we investigate the Good Model for components limiting the performance of the CR gate by idealizing aspects of the model.

We investigate whether the Gaussian ansatz is limiting gate fidelities by further refining the optimal pulses using a piece-wise constant optimization with one pixel per AWG sample (as is done in [32]). Average infidelity improves only marginally from $f_{av}^{\text{DRAG}} = 3.8 \times 10^{-3}$ to $f_{av}^{\text{PWC}} = 3.6 \times 10^{-3}$, suggesting other factors are limiting fidelities.

To find out if performance is limited by decoherence effects, we re-optimize the CR gate while disabling Lindbladian dynamics. By open-loop optimization in this

誤差は 3.8×10^{-3} から 1.3×10^{-5} に減少した。このように、今回検討した100 ns CRゲートは、ほとんどの実験的実装[20, 48]と同様にコヒーレンス制限を受けており、ゲート時間の改善が不可欠である[49]ことがわかります。

IV. C³ IN-DEPTH

以下、C³ツールセットの詳細な説明、そのモデリング機能、前節で説明した最適化問題の一般的な定式化について説明する。

A. Experiment modeling

C³では、制御と特性を両立させるために、信号処理、SPAM誤差、制御伝達関数、マルコフノイズなど、実験に関連するすべての実用的な考慮事項を包含するように努力した詳細なシミュレーションを提供します。このシミュレータは、オープンループ最適制御最適化 (C₁) とモデルパラメータ最適化 (C₃) の基礎として使用されます。いずれの場合も勾配ベースの最適化アルゴリズム[10, 50]を用いることが望ましい。しかし、量子ダイナミクスの完全な解析的勾配を手作業で導き出すのは、特に上記のような性質を含んでいる場合、非常に面倒である。C³では、自動微分[52]が可能な数値計算フレームワーク[51]を使用し、ツールセットをより柔軟で容易に拡張できるようにしています。同様のアプローチは[28, 53]でも制御と特徴づけのために使われています。

1. Signal processing

このシミュレーションでは、制御信号 $\varepsilon(t)$ を解析的な関数として、または直接、区別的に一定のAWGパラメータ化として指定することができます。解析的パラメトリゼーションは、制御線に印加される電圧を表すエンベロープ信号 $\varepsilon_i = \varepsilon(t_i)$ を生成する波形発生器の分解能でサンプリングされ、 $\{\cdot\}_i$ は AWG サンプルタイムとなる。この結果得られる信号は、制御電子回路の帯域幅が有限であるため、立ち上がり時間 τ を示すことになる。これをモデル化するために、コンボリューション（畠み込み）を適用します。

$$\tilde{\varepsilon}(t) = \int_{t_0}^{t_f} \text{interp}(\{\varepsilon_i\})(t) G\{t_f - t\} dt \quad (14)$$

with

$$G(t) = \frac{1}{N} \exp\left\{-\frac{(t - \tau/2)^2}{8\tau^2}\right\}, \quad (15)$$

modeling a Gaussian filter, and

$$\text{interp}(\{\varepsilon_i\})(t) = \{\varepsilon_i | t_i \leq t < t_{i+1}\} \quad (16)$$

を補間し、より高い分解能でシミュレーションを行うことができます。I/Q-Mixerはこのエンベロープを周波数 ω_{lo} の局部発振器信号と結合し、次のようにします。

$$u(t) = I(t) \cos(\omega_{lo}t) - Q(t) \sin(\omega_{lo}t) \quad (17)$$

ここで、同相成分および直交成分は

$$\begin{aligned} I(t) &= \tilde{\varepsilon}(t) \cos(\phi_{xy} - \omega_{off}t) \\ Q(t) &= \tilde{\varepsilon}(t) \sin(\phi_{xy} - \omega_{off}t) \end{aligned} \quad (18)$$

は制御パラメータ ϕ_{xy} で割り当てられ、駆動に周波数オフセット ω_{off} を導入するように変調されます。[54]で述べたように、実際には混合中にさらなる誤差が生じるが、これは現在モデル化されていない。この信号を実験に送信する際、様々な歪みが発生する可能性があり、応答関数 ϕ によってモデル化され、電界をライン電圧から振幅 $c(t) = [u(t)]$ に変換することもできます。

2. Time evolution

The system Hamiltonian is

$$H(t) = H_0 + \sum_k c_k(t) H_k, \quad (19)$$

ドリフト H_0 と任意の制御ハミルトニアン H_k を持つ。システムのダイナミクスは、時間順伝搬体である

$$U(t) = \mathcal{T} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t') dt'\right\}, \quad (20)$$

ここで、 $U_i = \exp -i H(t_i) \Delta t$ 、および全時間は、ハミルトニアンが区間で一定とみなせるよう、十分に細かい長さ Δt の N 個のスライスに分割されます。

アプリケーションでは、単一のゲートやパルスを単独で実行することはほとんどありません。ランダム化ベンチマークや様々なトモグラフィーのような実験では、長いパルスシーケンスが必要であり、全体としてシミュレーションするのは非効率的である。その代わり、C³シミュレータは、定義されたゲートセット G の各伝搬子 G を個別に計算し、これらの行列表現をシーケンスにコンパイルします。これにより、同じ正確なパルスに対して運動方程式を何度も解く必要がなくなります。伝搬子は（1粒子回転フレームではなく）ドレスラボラトリ・フレームで計算されるため、連続するゲートは回転する図 8 と再調整する必要がある。信号処理と読み出しのための実験手順をシミュレートするプロセス。

idealized coherent setting the error is decreased from 3.8×10^{-3} to 1.3×10^{-5} . Thus, the 100 ns CR gate considered here is coherence limited, as is the case in most experimental implementations [20, 48], making improvements in gate time essential [49].

IV. C³ IN-DEPTH

Following is a detailed description of the C³ tool-set, its modeling capabilities and a general formulation of the optimization problems discussed in the previous section.

A. Experiment modeling

To combine control and characterization, C³ provides a detailed simulation that endeavors to encompass all relevant practical considerations of the experiment such as signal processing, SPAM errors, control transfer functions and Markovian noise. The simulator is used as the basis of the open-loop optimal control optimization (C₁) and the model parameter optimization (C₃). In both cases it is desirable to use gradient-based optimization algorithms [10, 50]. However, it is extremely cumbersome to manually derive the full analytical gradients of the quantum dynamics, especially when it includes the properties described above. Instead, C³ uses a numerics framework [51] which allows for automatic differentiation [52], making the tool-set more flexible and easily extendable. A similar approach is also used by [28, 53] for control and characterization.

1. Signal processing

The simulation allows for the specification of control signals $\varepsilon(t)$ as either analytical functions or as direct, piecewise constant AWG parameterization. Analytic parametrizations are sampled at the resolution of the waveform generator producing the envelope signal $\varepsilon_i = \varepsilon(t_i)$, representing voltages being applied to the control line, where the $\{t_i\}$ are the AWG sample times. The resulting signal will exhibit a *rise time* τ , due to the finite bandwidth of the control electronics. We model this by applying a convolution

$$\tilde{\varepsilon}(t) = \int_{t_0}^{t_f} \text{interp}(\{\varepsilon_i\})(t) G\{t_f - t\} dt \quad (14)$$

with

$$G(t) = \frac{1}{N} \exp\left\{-\frac{(t - \tau/2)^2}{8\tau^2}\right\}, \quad (15)$$

modeling a Gaussian filter, and

$$\text{interp}(\{\varepsilon_i\})(t) = \{\varepsilon_i \mid t_i \leq t < t_{i+1}\} \quad (16)$$

interpolating the sampled signal to higher resolution for simulation. An I/Q-Mixer combines this envelope with a local oscillator signal of frequency ω_{lo} to

$$u(t) = I(t) \cos(\omega_{\text{lo}}t) - Q(t) \sin(\omega_{\text{lo}}t) \quad (17)$$

where the in-phase and quadrature components

$$\begin{aligned} I(t) &= \tilde{\varepsilon}(t) \cos(\phi_{xy} - \omega_{\text{off}}t) \\ Q(t) &= \tilde{\varepsilon}(t) \sin(\phi_{xy} - \omega_{\text{off}}t) \end{aligned} \quad (18)$$

are assigned by a control parameter ϕ_{xy} , and modulated to introduce a frequency offset ω_{off} on the drive. As noted in [54], in practice there will be additional errors during the mixing, which are not currently modeled. In transmitting this signal to the experiment, various distortions can occur, modeled by a response function φ , which also converts the field from line voltage to an amplitude $c(t) = \varphi[u(t)]$.

2. Time evolution

The system Hamiltonian is

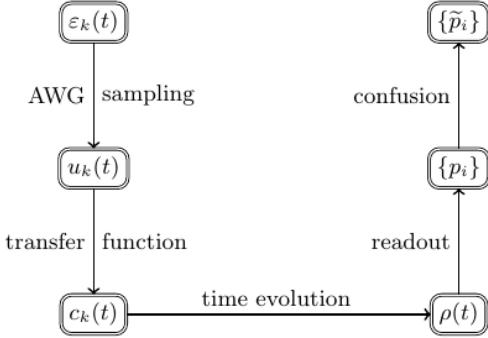
$$H(t) = H_0 + \sum_k c_k(t) H_k, \quad (19)$$

with a drift H_0 and optional control Hamiltonians H_k . The dynamics of the system are described by the time-ordered propagator

$$U(t) = \mathcal{T} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t') dt'\right\}, \quad (20)$$

given by solving the time-dependent Schrödinger equation, and approximated numerically by $U(t) \simeq \prod_{i=N}^0 U_i$. Here, $U_i = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} H(t_i) \Delta t\right\}$, and the total time is divided into N slices of length Δt that are fine enough so that the Hamiltonian can be considered constant in the interval.

In application, we will rarely perform a single gate or pulse in isolation. Experiments such as randomized benchmarking or the various flavors of tomography involve long pulse sequences, that are inefficient to simulate as a whole. Instead, the C³ simulator computes each propagator G of a defined gate-set \mathcal{G} individually and compiles these matrix representations into sequences. This avoids the need to solve the equations of motions multiple times for the same exact pulses. As the propagators are calculated in the dressed laboratory frame (as opposed to the single-particle rotating frame), consecutive gates need to be adjusted to realign with the rotating



k番目の制御関数は、何らかの関数 $\varepsilon_k(t)$ によって指定され、帯域幅が制限された任意波形発生器 (AWG) によってライン電圧 $u_k(t)$ を指定する。インピーダンスなどのセットアップの電気的特性は線路伝達関数 ϕ として表され、式(19)のように制御場 $c_k(t) = \phi [u_k(t)]$ となる。システムの運動方程式を解いた後、読み出しと誤分類は、式(24)に従って、模擬集団 $p_i = |\rho_{ii}|^2$ にリスケーリングと変換を適用してモデル化する。

の角度でZ回転させることで、駆動信号のフレームを構成することができる[54]。

オープンシステム効果を含めるために、等価手順を適用してプロセス行列を求めます。

$$\mathcal{E}(t) = \mathcal{T} \exp \left\{ \int_{t_0}^t \mathcal{L}(t') dt' \right\} \quad (21)$$

を、リンドブラッド形式のマスター方程式を解くことで実現します、

$$\dot{\rho} = \mathcal{L}(\rho) = -i[H, \rho] + \sum_j L_j \rho L_j^\dagger - \frac{1}{2} \{ L_j L_j^\dagger, \rho \}, \quad (22)$$

ここで、Hは式(19)のハミルトニアン、 L_j sはリンドブラッド演算子、 L は超演算子形式の発電機である[55]。状態の進化は、コヒーレント進化の場合は $\rho_f = U(t_g) \rho_i U^\dagger(t_g)$ 、インコヒーレント進化の場合は $\rho_f = E(t_g) [\rho_i]$ として伝播子をかけることで得られる。

3. Initialization and readout

デバイスの温度Tが与えられると、システムは混合状態で初期化される

$$\rho_{\text{init}} = \sum_k \frac{1}{Z} |\phi_k\rangle\langle\phi_k| \exp\{-E_k/k_B T\} \quad (23)$$

ここで、 $\{\phi_k\}$ は H_0 の固有ベーシス、正規化は正準分割関数 $Z = \sum_k \exp\{-E_k/k_B T\}$ で与えられる。

最終状態 ρ_f を後処理することで読み出しのシミュレーションを行う。ドレス基底で表される密度行列から、対角線の絶対二乗をとることで個体数 $\tilde{p}_j = (\rho_f)_{jj}$ のベクトルを得る。これは、実験における遅い（あるいは弱い）読み出し方式と一致する。測定誤差と分類誤差は、誤分類（混同）行列 $(p_{i \rightarrow j})_{ij}$ [56] でモデル化し、測定した個体数が

$$\tilde{p}_j = \sum_i p_{i \rightarrow j} p_i. \quad (24)$$

1回の繰り返しの平均を持つ実験測定をシミュレートするために、1個のトレイルの多項分布から、確率 p_{ej} で抽選します。

B. Optimizations

開閉ループ最適制御やモデル学習のためには、最適化処理を行うことが必要です。

1. オープンループのモデルベース制御 C_1

開ループ最適制御[8, 9]の典型的な設定では、システムのモデルが与えられたとき、システムを所望の状態に駆動したり、特定のゲートを生成するための最適な制御パルスを探索することになる。パルスは、解析的アナザツ（例えば、リークレベルに結合するフーリエ成分を除去するためにDRAG補正[14]を施したガウスパルス）、または直接AWGサンプルによってパラメータ化される。電力や帯域幅の制限など、実験的な実現可能性を考慮した制約が課されることもあります。最小化する目標関数は、指定された最適制御課題に応じて選択されます。例えば、状態遷移問題では状態不定性、量子ゲートではユニタリートレース不定性などです[9, 34]。平均ゲートインフィデリティは、RBやQPTを実行することで実験的にアクセス可能であり、シミュレーションと実験の性能を比較することができるため、目標関数として使用することを提案します。

形式的には、制御は実数 α のベクトルとしてパラメータ化される。ゴール関数 $f_1(\alpha)$ が与えられたとき、 $\min_\alpha f_1(\alpha)$ を探索する。収束を容易にするために勾配 $\partial f_1(\alpha)$ を決定するためにGRAPE[11], Krotov[13, 57-59], GOAT[10]などの最適制御方法が考案されている。これらの方法は、問題の具体的な定式化と、モデルに追加されたあらゆる要素の勾配を解析的に計算する必要がありますが、C³では、自動微分によって、例えば、線応答関数やSPAM誤差など、あらゆるモデルの特徴を体系的に考慮することができます。

勾配ベースのアルゴリズムの欠点は、局所的な極小値にとらわれる性質があることです。この問題の深刻さは、徐々に複雑になっていく制御の階層を使うことで軽減されます。

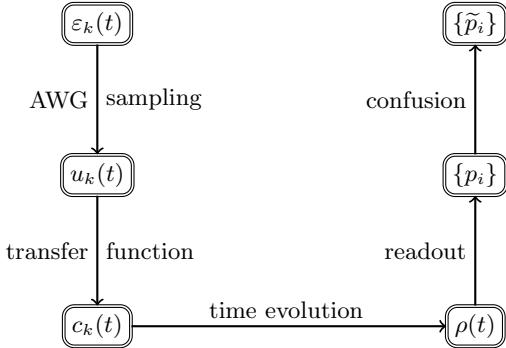


FIG. 8. The process of simulating experimental procedure for signal processing and readout. The k -th control function is specified by some function $\varepsilon_k(t)$ and specifies the line voltage $u_k(t)$ by an arbitrary waveform generator (AWG) with limited bandwidth. Electrical properties of the setup, such as impedances, are expressed as a line transfer function φ , resulting in a control field $c_k(t) = \varphi[u_k(t)]$, as in Eq. (19). After solving the equation of motion for the system, readout and misclassification are modeled by applying rescaling and transformations to the simulated populations $p_i = |\rho_{ii}|^2$, according to Eq. (24).

frame of the drive signal, by applying a Z rotation with an angle of $(\omega_{\text{lo}} + \omega_{\text{off}})t_g$ [54].

To include open-system effects, we apply the equivalent procedure to obtain the process matrix

$$\mathcal{E}(t) = \mathcal{T} \exp \left\{ \int_{t_0}^t \mathcal{L}(t') dt' \right\} \quad (21)$$

by solving the master equation in Lindblad form,

$$\dot{\rho} = \mathcal{L}(\rho) = -i[H, \rho] + \sum_j L_j \rho L_j^\dagger - \frac{1}{2} \{ L_j L_j^\dagger, \rho \}, \quad (22)$$

where H is the Hamiltonian from Eq. (19), the L_j s are Lindblad operators, and \mathcal{L} is the generator in superoperator form [55]. The evolution of a state is obtained by applying the propagator as $\rho_f = U(t_g)\rho_i U^\dagger(t_g)$ for coherent evolution or $\rho_f = \mathcal{E}(t_g)[\rho_i]$ for incoherent evolution.

3. Initialization and readout

Given the temperature T of the device, the system is initialized in a mixed state

$$\rho_{\text{init}} = \sum_k \frac{1}{Z} |\phi_k\rangle\langle\phi_k| \exp\{-E_k/k_B T\} \quad (23)$$

where $\{|\phi_k\rangle\}$ is the eigenbasis of H_0 and the normalization is given by the canonical partition function $Z = \sum_k \exp\{-E_k/k_B T\}$.

We simulate readout by post-processing the final state ρ_f : From the density matrix, represented in the dressed basis, we obtain a vector of populations $\vec{p} = (p_k)$ by taking the absolute square of the diagonal. This is consistent with a slow (or weak) readout scheme in experiment. Measurement and classification errors are modeled with a misclassification (confusion) matrix $(p_{i \rightarrow j})_{ij}$ [56] such that the measured populations are

$$\tilde{p}_j = \sum_i p_{i \rightarrow j} p_i. \quad (24)$$

To simulate an experimental measurement with an average of l repetitions, we draw from a multinomial distribution of l trials and with probabilities \tilde{p}_j .

B. Optimizations

For open and closed-loop optimal control as well as model learning, performing optimization processes is required.

1. Open-loop Model-based Control: C_1

In the typical setting of open-loop optimal control [8, 9], given a model of a system, we search for the optimal control pulses to drive the system to a desired state or generate a certain gate. Pulses are parameterized by an analytic ansatz (e.g. Gaussian pulse with DRAG correction [14] to remove Fourier components coupling to leakage levels), or by direct AWG samples. Constraints may be imposed to conform with experimental feasibility, such as power and bandwidth limitations. The goal function to be minimized is selected depending on the specified optimal control task, e.g. state infidelity for state transfer problems, or unitary trace infidelity for quantum gates [9, 34]. We suggest the use of average gate infidelity as the goal function, as it is experimentally accessible by performing RB or QPT, allowing comparison of performance in simulation and experiment.

Formally, the controls are parameterized as a vector of real numbers α . Given a goal function $f_1(\alpha)$, we search for $\min_\alpha f_1(\alpha)$. Optimal control methods such as GRAPE [11], Krotov [13, 57–59], and GOAT [10] have been devised to determine the gradient $\partial_\alpha f_1(\alpha)$ in order to facilitate convergence. These methods require a specific formulation of the problem and the analytical calculation of the gradient any additional elements in the model, whereas in \mathbb{C}^3 , automatic differentiation allows to systematically account for any model feature, including, for example, line response functions or SPAM error.

The disadvantage of gradient-based algorithms is their propensity to get trapped in local minima. The severity of the problem is reduced by using a hierarchy of

これが不十分な場合は、収束点を見つけるための短い予備的な勾配なし探索を行うことで、問題を解決できることがほとんどです。

2. 閉ループのモデルフリーキャリブレーション: C_2

キャリブレーションでは、実験的な測定結果から計算された功利指数 $f_2(\alpha)$ を改善するために、与えられたパルスが最適化される。勾配のない最適化アルゴリズムに加えて、勾配を近似する方法（例えば[60]）がありますが、そのようなアプローチは、一般的に、多くの評価数を必要とするため、勾配のないアルゴリズム [10, 61] より効率が悪い [62] とされています。最適化の初期点が C_1 で与えられる場合、これは既に確立されたAd-HOC [18]法を実装している。キャリブレーションでは、制御パラメータ α_j のセットが、現在の制御をどのように評価するかの指示とともに、実験セットアップに送信される。ゲートセットの評価には、ORBITの功労賞を推奨します。ORBITは、すべての誤差の原因を自然に調整し、最適化するための単一の数値を提供するためです。しかし、特定のニーズに合わせたプロトコルを使用することもできます。例えば、望ましい条件付き位相を得るために使用します[5]。 C_2 は次に、制御パラメータ α_j を最適化し、数値を最小化する。

特殊な測定は、特定のデバイス特性に関連する制御を微調整する簡単な方法を提供しますが、一般的に相互依存性を考慮することはありません。多くのパラメータを持つより複雑なセットアップの場合、このようなキャリブレーションは並大抵の努力では行えません[63]。これに対し、 C^3 では、CMA-ES（詳細は付録B参照）のような、数十のパラメータを同時に最適化できる最新の勾配なし最適化アルゴリズムを採用し、作業を自動化しています。

3. Model Learning: C_3

データセットDからモデルを抽出することは、形式的には C_1 最適化タスクに類似していると考えることができ、ここでは制御パラメータの代わりにモデルパラメータを変化させる。データセット中の各測定結果 m_k について、

$$\mathcal{D} = \{S_k \mapsto m_k\}_j, \quad (25)$$

の場合、制御パラメータ α_j を持つ対応するゲートまたはパルスシーケンス $S_k(\alpha_j)$ を用いて、モデルの予測値 $m_{ej, k} = m(S_k(\alpha_j), \text{beta})$ をシミュレートする。モデル学習の目標関数

$$f_3(\mathcal{D}|\beta) = f_3(\{\tilde{m}_k(\beta)\}, \{m_k\}) \quad (26)$$

σ_{ek} は平均 m_k の二項分布の標準偏差であり、マハラノビス距離[64]を変化させたものであることがわかる。

use a rescaled log-likelihood

$$f_{LL}(\mathcal{D}|\beta) = \frac{1}{2K} \sum_{k=1}^K \left(\left(\frac{m_k - \tilde{m}_k}{\tilde{\sigma}_k} \right)^2 - 1 \right), \quad (27)$$

この関数は、ガウス仮定と2値読み出しの上で厳密に正しい。複数結果の読み出しの拡張については、項番I V Cを参照。すなわち、各 m_k は、真の基礎となる μ_k の推定値である。したがって、現実的なデータセットDは決定論的なシミュレーションでは正確に一致させることができない。関数 f_{LL} は、n個のデータ点に対して、その期待値が、モデルが平均値 μ_k を正しく予測する場合は0、すべての k sに対して距離が $\mu_k - m_k = n\sigma_k$ である場合は $\frac{1}{2}n^2$ と、式 (33) に従って設計する。これは、 f_{LL} の抽象的な値よりも直感的にモデルの一致を測ることができる、つまり、「モデルは実験と約n標準偏差の差がある」というような記述が可能になる。

物理システムの複雑さ、相互依存するパラメータの数の多さ、ランドスケープの複雑な特徴により、最適化が大域的に最適に収束することは困難です。そこで、簡単なモデルから始めて、それを繰り返し改良するという、試行錯誤を重ねた実験的アプローチをとります。モデルを修正し、 C_3 フィットを繰り返し、最適化されたパラメータのうち、前のモデルと新しいモデルで共有されているものを保持することができます。また、追加データを収集し、同じモデルで最適化を繰り返すこともあります。これらの各ステップでは、最適化の結果を評価し、モデルを拡張または破棄し、追加データの収集が必要かどうかを決定するために、物理学者の洞察が必要であることを強調します。さらに、勾配ベースのアルゴリズムを採用すると、初期点によってはローカルミニマムが発生することがあります。今回紹介した最適化は、ローカルミニマムに対してロバストであることが知られている勾配なしのCMA-ES探索で開始し、有望なパラメータ領域が特定されたときに、収束の速い勾配ベースのL-BFGS法に切り替えることで成功しました。しかし、最適化戦略を見出すためには、さらなる研究が必要である。

無数のパラメータに特化した測定以外では、特性評価のタスクを自動化または一般化することを目的とした、以下のような多くのアプローチが存在する：ベイズ学習（ハミルトン記述 [65-74]、およびより汎用的な [75-81]）、システム識別 [82-87]、圧縮センシング [72, 88, 89]、ニューラルネットワーク [90-92] など [93]。

一方、 C^3 では、モデルはすべてのパラメータに明示的な値をとり、モデルパラメータ空間上の高次元分布として表現されないように注意する。この選択は、古典的な計算負荷の考慮によるものである：

progressively more complex control ansätze. If this is insufficient, a short preliminary gradient-free search to find the convergence basin most often resolves the problem.

2. Closed-loop Model-free Calibration: C_2

In calibration, a given pulse is optimized to improve a figure of merit $f_2(\alpha)$, computed from experimental measurement results. In addition to gradient-free optimization algorithms, there are methods to approximate the gradients (e.g. [60]), however, such approaches are generally less efficient than gradient-free algorithms [10, 61] as they require a high number of evaluations [62]. If the initial point of the optimization is given by C_1 , this implements the already established Ad-HOC [18] method. During calibration, sets of control parameters α_j are sent to the experimental setup, alongside instructions of how to evaluate the current controls. For evaluating gate-sets, we suggest the ORBIT figure of merit, as it naturally performs a twirling of all sources of error, providing a single number to optimize. However, protocols tailored to specific needs can also be used, e.g. to obtain a desired conditional phase [5]. C_2 then optimizes the control parameters α_j to minimize a figure of merit.

While specialized measurements provide a straightforward way to fine-tune controls related to specific device properties, they do not generally account for interdependency. For more complex setups with many parameters, such calibrations cannot be done without extraordinary effort [63]. In contrast, C^3 employs modern gradient-free optimization algorithms, such as CMA-ES (see App. B for further discussion), capable of optimizing dozens of parameters simultaneously, automating the task.

3. Model Learning: C_3

Extracting the model from a data-set \mathcal{D} can be thought of formally as analogous to the C_1 optimization task, where one varies the *model* parameters instead of the control parameters. For each measurement outcome m_k in the data-set,

$$\mathcal{D} = \{S_k \mapsto m_k\}_j, \quad (25)$$

the corresponding gate or pulse sequences $S_k(\alpha_j)$ with control parameters α_j are used to simulate the model's prediction $\tilde{m}_{j,k} = \tilde{m}(S_k(\alpha_j), \beta)$. The model learning goal function

$$f_3(\mathcal{D}|\beta) = f_3(\{\tilde{m}_k(\beta)\}, \{m_k\}) \quad (26)$$

quantifies the match between the data-set and the simulation of a system with parameters β . In this paper, we

use a rescaled log-likelihood

$$f_{LL}(\mathcal{D}|\beta) = \frac{1}{2K} \sum_{k=1}^K \left(\left(\frac{m_k - \tilde{m}_k}{\tilde{\sigma}_k} \right)^2 - 1 \right), \quad (27)$$

where the $\tilde{\sigma}_k$ is the standard deviation of a binomial distribution with mean \tilde{m}_k , resulting in a variation of the Mahalanobis distance [64]. This function is strictly correct under the Gaussian assumption and a two-level readout. See Sec. IV C for the extension for a multiple outcome readout. The measurement process on any physical device is noisy, i.e. each m_k is an estimate of a true underlying μ_k . Therefore, a realistic data-set \mathcal{D} cannot be matched exactly by a deterministic simulation. The function f_{LL} is designed such that, for n data points, its expectation value is 0 when the model predicts the means μ_k correctly, and $\frac{1}{2}n^2$ if the distance is $\mu_k - \tilde{m}_k = n\sigma_k$ for all k s, according to Eq. (33). This provides a more intuitive measure of model match than the abstract value of f_{LL} , i.e. it allows to make a statement like “the model differs from the experiment by approximately n standard deviations”.

Due to the complexity of the physical systems, a potentially high number of interdependent parameters and complex features of the landscape, it is difficult for the optimization to converge to the global optimum. Therefore, we take the tried-and-tested experimental approach of starting with a simple model and iteratively refining it. We modify the model and repeat the C_3 fit, optionally retaining the optimized parameters which are shared by the previous and new model. Alternatively, we collect additional data and repeat the optimization on the same model. We emphasize that at each of these steps the physicists' insights are required to evaluate the optimization's results, extend or discard models and decide whether collecting additional data is required. Furthermore, employing a gradient-based algorithm can, depending on the initial point, result in a local minimum. The optimizations presented here were successful when starting with a gradient-free CMA-ES search, known to be robust against local minima, switching over to the faster converging gradient-based L-BFGS method when a promising parameter region is identified. However, further research is required to find the best optimization strategy.

Outside the countless parameter-specific measurements, there are many approaches that aim to automate or generalize the task of characterization, such as: Bayesian learning (with Hamiltonian description [65–74], and more general-purpose [75–81]), system-identification [82–87], compressed-sensing [72, 88, 89], neural network [90–92], and others [93].

In contrast, we note that in C^3 a model takes explicit values for all its parameters, and is *not* represented as a high-dimensional distribution over model parameter space. This choice is driven by classical computation-load considerations: Because the C^3 model is highly de-

C^3 モデルは非常に尾を引いており、その結果、関連するシミュレーションは非自明であるため、 C^3 最適化のいずれに対しても完全なベイズ的アプローチは現時点では計算上実行不可能であると考えています。

C. C₃ Model Fitting Goal Function

量子デバイスで $k \in [1, \dots, K]$ の一連の実験を行う場合、各実験 k を何回か繰り返し、測定結果の正規化された発生回数を結果ベクトル \mathbf{m}_k に格納する。これらは $\{\mathbf{m}_k\}_{k=1,\dots,K}$ にまとめられ、省略形として $\{\mathbf{m}_k\}$ と呼ばれる。モデルとそのパラメータ β が与えられたとき、それが観測データの下敷きになる可能性がどの程度高いかを関数 $f_3(\{\mathbf{m}_k\} | \beta)$ で定量化することを目的とします。したがって、実験結果 \mathbf{m}_k とモデル予測 $\mathbf{m}_{ek}(\beta)$ の距離を求める必要があります。 \mathbf{m}_k は読み出し分布からサンプリングされるので、 $\mathbf{m}_k = \mathbf{m}_{ek}(\beta)$ とはならない。むしろ、 $\{\mathbf{m}_k\}$ が引き出された基礎分布がモデル予測PDFと同じであれば、その期待値 $E[f(\{\mathbf{m}_k\}, \beta)]$ がゼロとなるような関数 f を定義することを目指します。

1. The Gaussian Assumption

$E[f(\{\mathbf{m}_k\}, \beta)]$ の計算を簡単にするために、基礎となる分布についていくつかの仮定を置くことができます。自然な $p_k(\mathbf{m}_k | \beta)$ PDF は、量子ビットヒルベルト空間 d_k の次元によって決まる多項式です（漏洩レベルのない単一量子ビットを扱う場合は二項式）。多項のショットですべての読み出し値が出現する可能性があるという仮定のもと、中心極限定理（De Moivre-Laplace 定理）により、 p_k を多変数正規分布で近似することができる。多項分布は共分散行列が非対角であるが、対角化して一次元ガウス分布の積として分解することができる。そこで、PDF を $p_k(d_k - 1)$ の和として書き、 K を前回の $p_k(d_k - 1)$ と同じに、 $\{\mathbf{m}_k\}$ をそれらの平均と再定義する。

2. The model match distribution

ここでは、 $\{\mu_k(\beta)\}$ と $\{\sigma_k(\beta)\}$ を、モデル予測PDFの平均と標準偏差（ガウス仮定と多項対角化後）、 $\{\mu_k\}$ と $\{\sigma_k\}$ を相応の実験値で表すこととする。 μ_k と $\{\sigma_k\}$ は未知で未測定であり、 $\{\mathbf{m}_k\}$ は平均値の推定値しか提供しないことに注意する。

一方、シミュレーション値 $\{\mathbf{m}_{ek}\}$ は決定論的であるため、平均値の正確な推定値を表し、したがって $\{\mathbf{m}_{ek} \equiv \mu_{ek}\}$ である。

モデル予測PDFは正規化ガウス分布の積で与えられ、モデルパラメータ β を与えた $\{\mathbf{m}_k\}$ の尤度を次のように与える。

$$p(\{\mathbf{m}_k\} | \beta) = \prod_k p(m_k | \beta), \text{ where} \quad (28)$$

$$p(m_k | \beta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\tilde{\sigma}_k}} \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{m_k - \tilde{\mu}_k}{\tilde{\sigma}_k}\right)^2\right) \quad (29)$$

は個々のガウス分布である。そして、目標関数を平均対数尤度として構成し、望ましい期待値を与えるように再スケーリングする、

$$\begin{aligned} f_{LL}(\{\mathbf{m}_k\} | \beta) &= -\log \left[\sqrt[K]{p(\{\mathbf{m}_k\} | \beta) \prod_k \sqrt{2\pi\tilde{\sigma}_k} \sqrt{e}} \right] \\ &= \frac{1}{K} \sum_k \frac{1}{2} \left(\left(\frac{m_k - \tilde{\mu}_k}{\tilde{\sigma}_k} \right)^2 - 1 \right). \end{aligned} \quad (30)$$

ここで \sqrt{e} は log-likelihood の平均を与え、 $2\pi e \sigma_k$ は $\mathbf{m}_k - \mu_{ek} = 0$ で log likelihood が 0 となるようなガウス族の正規化を取り除き、 e は $\{\mathbf{m}_k\}$ 中のノイズによる期待の残差分を取り除く。

そして、一般的な場合、モデルによって決定されたガウシアンが、実験データのガウシアンと一致しないとき：

$$\begin{aligned} E[f_{LL}(\{\mathbf{m}_k\} | \beta)] \\ = \frac{1}{2K} \sum_k \left(\left(\frac{\mu_k - \tilde{\mu}_k}{\tilde{\sigma}_k} \right)^2 + \left(\frac{\tilde{\sigma}_k}{\sigma_k} \right)^2 - 1 \right), \end{aligned} \quad (31)$$

$$\begin{aligned} \text{Var}[f_{LL}(\{\mathbf{m}_k\} | \beta)] \\ = \frac{1}{K^2} \sum_k \left(\frac{\sigma_k}{\tilde{\sigma}_k} \right)^2 \left(\left(\frac{\mu_k - \tilde{\mu}_k}{\tilde{\sigma}_k} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\sigma_k}{\tilde{\sigma}_k} \right)^2 \right). \end{aligned} \quad (32)$$

両者の分布が同じ標準偏差 $\sigma = \sigma e$ である極限において

$$E[f_{LL}^{\sigma \leftarrow \tilde{\sigma}}(\{\mathbf{m}_k\} | \beta)] = \frac{1}{2K} \sum_k \left(\frac{\mu_k - \tilde{\mu}_k}{\tilde{\sigma}_k} \right)^2 \quad (33)$$

$$\text{Var}[f_{LL}^{\sigma \leftarrow \tilde{\sigma}}(\{\mathbf{m}_k\} | \beta)] = \frac{1}{2K} + \frac{1}{K^2} \sum_k \left(\frac{\mu_k - \tilde{\mu}_k}{\tilde{\sigma}_k} \right)^2. \quad (34)$$

tailed, and, as consequence, associated simulations are non-trivial, we believe a full Bayesian approach to any of \mathbb{C}^3 optimizations is not computationally viable at this time.

C. C_3 Model Fitting Goal Function

When performing a series of experiments, $k \in [1, \dots, K]$, on a quantum device, each experiment k is repeated a number of times and the normalized occurrences of the measurement outcomes are stored in a result vector m_k . These are collected in $\{m_k\}_{k=1, \dots, K}$, or $\{m_k\}$ for shorthand. Given a model and its parameters β , we aim to quantify how likely it is that it underlies the observed data with a function $f_3(\{m_k\}|\beta)$. Hence, we need to determine the distance between the experimental result, m_k , and the model prediction, $\tilde{m}_k(\beta)$. We define $p_k(m_k|\beta)$ be the model-predicted probability distribution function (PDF) for the result of experiment k . As the m_k are sampled from the readout distribution, we do not expect $m_k = \tilde{m}_k(\beta)$. Rather, we aim to define the function f such that its expectation value, $E[f(\{m_k\}, \beta)]$, is zero if the underlying distributions from which the $\{m_k\}$ are drawn are the same as the model-predicted PDFs.

1. The Gaussian Assumption

To simplify calculation of $E[f(\{m_k\}, \beta)]$, we can make some assumptions regarding the underlying distributions. The natural $p_k(m_k|\beta)$ PDF is multinomial, determined by the dimension of the qubit Hilbert space d_k (or binomial if dealing with a single qubit with no leakage levels). Under the assumption that for a large number of shots all possible readouts values are likely to appear, then by the central limit theorem (De Moivre–Laplace theorem), we can approximate p_k with a multivariate normal distribution. Although, the multinomial distribution has a non-diagonal covariance matrix, one can diagonalize the distribution and decompose it as a product of one-dimensional Gaussian distributions. Thus, we write the PDF as a sum of $\sum_k(d_k - 1)$ such distributions, redefine K to equal the previous $\sum_k(d_k - 1)$ and the $\{m_k\}$ to be their means.

2. The model match distribution

We shall use $\{\tilde{\mu}_k(\beta)\}$ and $\{\tilde{\sigma}_k(\beta)\}$ to denote the mean and standard deviation of the model-predicted PDFs (after Gaussian assumption and multinomial diagonalization), and $\{\mu_k\}$ and $\{\sigma_k\}$ to denote the commensurate experimental values. We note that $\{\mu_k\}$ and $\{\sigma_k\}$ are unknown and unmeasured, and $\{m_k\}$ only provides an

estimate of the mean. The simulation values $\{\tilde{m}_k\}$ on the other hand are deterministic and thus represent an exact estimate of the mean, hence $\{\tilde{m}_k \equiv \tilde{\mu}_k\}$.

The model-predicted PDF is given by the product of normalized Gaussian distributions, and gives the likelihood of the $\{m_k\}$ given the model parameters β as

$$p(\{m_k\}|\beta) = \prod_k p(m_k|\beta) , \text{ where} \quad (28)$$

$$p(m_k|\beta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\tilde{\sigma}_k} \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{m_k - \tilde{\mu}_k}{\tilde{\sigma}_k}\right)^2\right) \quad (29)$$

are the individual Gaussian distributions. We then construct the goal function as the average log-likelihood, rescaled to give the desired expectation value,

$$\begin{aligned} f_{\text{LL}}(\{m_k\}|\beta) &= -\log \left[\sqrt[K]{p(\{m_k\}|\beta) \prod_k \sqrt{2\pi}\tilde{\sigma}_k \sqrt{e}} \right] \\ &= \frac{1}{K} \sum_k \frac{1}{2} \left(\left(\frac{m_k - \tilde{\mu}_k}{\tilde{\sigma}_k} \right)^2 - 1 \right) . \end{aligned} \quad (30)$$

Here the $\sqrt[K]{\cdot}$ gives the average of the log-likelihoods, the $\sqrt{2\pi}\tilde{\sigma}_k$ removes the normalization of the Gaussians, such that they take value 1 when $m_k - \tilde{\mu}_k = 0$, and the log-likelihood is zero, and the \sqrt{e} removes the residual part of the expectation caused by the noise in the $\{m_k\}$.

Then, in the general case, when the Gaussians determined by the model are not the same as the Gaussians in the experimental data:

$$\begin{aligned} E[f_{\text{LL}}(\{m_k\}|\beta)] &= \frac{1}{2K} \sum_k \left(\left(\frac{\mu_k - \tilde{\mu}_k}{\tilde{\sigma}_k} \right)^2 + \left(\frac{\tilde{\sigma}_k}{\sigma_k} \right)^2 - 1 \right) , \end{aligned} \quad (31)$$

$$\begin{aligned} \text{Var}[f_{\text{LL}}(\{m_k\}|\beta)] &= \frac{1}{K^2} \sum_k \left(\frac{\sigma_k}{\tilde{\sigma}_k} \right)^2 \left(\left(\frac{\mu_k - \tilde{\mu}_k}{\tilde{\sigma}_k} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\sigma_k}{\tilde{\sigma}_k} \right)^2 \right) . \end{aligned} \quad (32)$$

In the limit that both distributions have the same standard deviation $\sigma = \tilde{\sigma}$

$$E\left[f_{\text{LL}}^{\sigma \leftarrow \tilde{\sigma}}(\{m_k\}|\beta)\right] = \frac{1}{2K} \sum_k \left(\frac{\mu_k - \tilde{\mu}_k}{\tilde{\sigma}_k} \right)^2 \quad (33)$$

$$\text{Var}\left[f_{\text{LL}}^{\sigma \leftarrow \tilde{\sigma}}(\{m_k\}|\beta)\right] = \frac{1}{2K} + \frac{1}{K^2} \sum_k \left(\frac{\mu_k - \tilde{\mu}_k}{\tilde{\sigma}_k} \right)^2 . \quad (34)$$

式 (33) はマハラノビス距離（標準化ユークリッド距離）の2乗を表し、モデル一致スコアを理解するために f_{LL} 関数をスケールする直感的な方法を与えています。実際、モデルが正確で $\mu_k = \mu_{ek}$ のとき、 $E [f_{LL}^{exact} (\{m_k\} | \beta)] = 0$ となります。しかし、正確な場合の分散は $\text{Var} [f_{LL}^{exact} (\{m_k\} | \beta)] = \frac{1}{2K}$ なので関数には 0 以下の値もありえることに注意。この値は、モデルで期待される標準偏差 σ_{ek} が、実験的に観測された標準偏差 σ_k より大きいことを示しています。

D. Model analysis

学習プロセス中と学習後の両方で、モデルの特性を推定し、それがシステムの動作に与える影響を調べることは有益です。 C^3 ツールセットの一部として、私たちはシステムパラメータの感度解析を実行します： 例えば、量子ビットの周波数など、1つのパラメータを対象範囲に渡って掃引し、他のパラメータは現在の最適値に保ちながら、各ポイントでモデルのマッチングスコアを評価します（図4 (a) 参照）。その結果、最適化ランドスケープを1次元的に切り取ったものが得られます。このランドスケープには、明確に定義された最小値、難しい最適化を示す複数の極値、あるいは、パラメータが現在の実験の動作に影響を与えない場合には平坦に見えることもあります。このランドスケープは、選択されたモデルと比較されるデータの両方に依存します。感度の厳しさに応じて、最初から勾配ベースのアルゴリズムを利用するか、あるいは最初に勾配なしの探索探索を行い、ローカルミニマムを回避するかを選択することができる。フラットな感度の場合、2つの対処法があります：もし、そのパラメータが連続した実験にあまり興味がないのであれば、そのパラメータを削除するか、フラットな範囲内の都合の良い値に設定することができる。そうでなければ、そのパラメータに感度のある追加データを生成する実験を設計する必要がある。物理学者の一般的な実験方法（例：Rabi、Ramsey、Hahnエコーチケンス）の知識と直感が、実験デザインの決定を導きます。パラメータ間の相関が疑われる場合、1次元のカットでは不十分で、より高次元のスイープが必要である。学習が成功すると、感度分析により、各パラメータがどの程度の精度で決定されたかを推定することができます。

さらに、シミュレーションによって、システムの挙動を把握することができます。時分割状態やプロセスのトモグラフィーのような確立された方法を用いれば、計算部分空間からの漏れ、過回転、ノイズの影響など、コヒーレントなエラーを特定することが可能である。良いモデルは、正確に予測する実験と同じ制限を含んでいます。エラーバジエットの基礎にもなります。このモデルは、忠実度の低い原因として疑われる特定の側面（例えば、 T_1 の設定が無限大になる）を理想化し、 C_1 最適化を用いて制御パルスを再導出することによって、外挿に使用することができます。

それぞれの忠実度の向上は、この側面が原因となる誤差の推定を与え、将来のデバイスの改善点を示唆する。

V. DISCUSSION AND OUTLOOK

最後に、量子デバイスの性能を向上させるために、特性評価、校正、制御を統合した手法である C^3 について説明した。そのアプローチと実装を詳述し、合成QPUデバイスを用いて、個々の手法とそれらがより統合された概念に統合される方法を実証しました。単一量子ビット校正データを分析し、線路伝達関数、制御電子機器の限界、読み出し誤差、有限の動作温度といった現実的な実験的考察を含む、デバイスの正確なモデルを抽出することに成功しました。このモデルから、さらなるキャリブレーションを必要としない、動作する高忠実度の2量子ビットゲートを導き出すことができました。

このアプローチは、複雑な量子コンピュータ実験の実験ワークフローを、実験ラボの異なるタスク間の相互作用を考慮して、全体的な理論的にとらえたものです。 C^3 は、システムの不完全な理解から出発して、高忠実度のパルスと正確なモデルの両方を達成する道筋を提供します。また、オーブンループ制御（すでに正確なモデルが必要）とキャリブレーション（実験に特化した微調整手順が必要）のタスクを統合しています。最も重要なことは、実験結果やゲートの性能を振り返るためのツールを提供し、システムのモデル記述を改善し、その挙動に対する洞察を提供することです。 C^3 は、物理学者やエンジニアに代わる「ブラックボックス」的な実験コントローラではなく、むしろ面倒な作業を軽減し、より構造的なレベルで量子デバイスと相互作用できるようにします。 C^3 は、単に忠実な操作を行うのではなく、システムのグッドモデルや、エラーバジエット、感度分析などのインサイトを提供することで、意味のある出力をています。この意味で、 C^3 は、単一の最適制御やベンチマーク技術と混同することなく、実際に高い忠実度に効率的に到達できる制御を作ることを目的としたこれらの分野の数十年の研究結果[8, 50]を含み、それらを一つのフレームワークに統合しています。

C^3 の応用は、まず、超伝導や半導体の量子ビットのような製造された固体システムに基づく量子プロセッサのスケーラブルな実装に役立つと期待されます。そこでは、モデルのパラメータが製造に依存するため、モデルの多くの要素が実際に不確実であることを意味します。一方、スケーラブルな量子コンピュータの他の実装では、そのような要素が量子記述に直接含まれています： イオントラップゲートにはトラップの自由度が含まれ、不純物スピニは詳細な位置に依存するなどである。したがって、 C^3 はそのようなシステムにおいても重要な役割を果たすと期待されています。

Equation (33) then represents the square of the Mahalanobis distance (standardized Euclidean distance), giving an intuitive way to scale the f_{LL} function to understand the model match score. Indeed, when the model is exact and $\mu_k = \tilde{\mu}_k$ we get $E[f_{\text{LL}}^{\text{exact}}(\{m_k\}|\beta)] = 0$. We note, however, that the function can take values below 0 as the variance for the exact case is $\text{Var}[f_{\text{LL}}^{\text{exact}}(\{m_k\}|\beta)] = \frac{1}{2K}$. Such values indicate the standard deviation expected by the model, $\tilde{\sigma}_k$ is larger than the standard deviation observed experimentally, σ_k .

D. Model analysis

Both during and after the learning process, it is beneficial to interrogate the model to estimate its properties and their impact on the system behavior. As part of the C^3 tool-set we perform sensitivity analysis for system parameters: Sweeping a single parameter, e.g. qubit frequency, across the range of interest, while keeping other parameters at their current best value, evaluating the model match score at each point, as seen in the example (Fig. 4(a)). The result is a 1-D cut through the optimization landscape that may exhibit a well-defined minimum, multiple extrema indicating a difficult optimization, or even appear flat in the case when a parameter does not affect the behavior of the current experiment. This landscape depends on both the selected model and data it is compared to. Depending on the ruggedness of the sensitivity, one might choose to utilize a gradient-based algorithm from the start or to first perform a gradient-free exploratory search to avoid local minima. In the case of a flat sensitivity, there are two courses of action: If the parameter is of little interest for successive experiments, it may be removed or set to a convenient value within the flat range; otherwise, one needs to design an experiment producing additional data that is sensitive to the parameter. The physicists' knowledge of common experimental practices (e.g. Rabi, Ramsey, Hahn echo sequences) and intuition guides the decision for the experiment design. When suspecting correlations between parameters, cuts in single dimensions are not enough and higher dimensional sweeps are necessary. After a successful learning process, the sensitivity analysis gives an estimate of the precision to which each parameter has been determined.

Furthermore, the simulation allows insight into the behavior of the system. Using well established methods such as time-resolved state and process tomography, it is possible to identify coherent errors, such as leakage out of the computational subspace, over-rotations, and the effects of noise. A Good Model also provides the basis for an error budget, as it contains the same limitations as the experiment it accurately predicts. The model can be used for extrapolation by idealizing certain aspects suspected as causes of infidelity (e.g. T_1 setting to infinity), and re-deriving control pulses using a C_1 optimization. The respective gain in fidelity gives an estimate of the

error that this aspect is responsible for, suggesting areas of improvement for future devices.

V. DISCUSSION AND OUTLOOK

In conclusion, we have described C^3 , an integrated methodology to improve quantum device performance that combines characterization, calibration and control. We have detailed its approach and implementation, demonstrating, on a synthetic QPU device, the individual methods and how they are synthesized into a more integrated concept. Analyzing single-qubit calibration data we successfully extracted an accurate model of the device, including realistic experimental considerations: line transfer functions, limitations of control electronics, readout error and finite operating temperature. From this model we were able to derive a working high-fidelity two-qubit gate, without requiring any further calibration.

This approach represents a holistic theoretical take on the experimental workflow of a complex quantum computing experiment, that takes into account interactions between different tasks of an experimental lab. C^3 provides a path to achieve, starting from an incomplete understanding of the system, both high-fidelity pulses and an accurate model. It integrates the tasks of open-loop control (that would require an already accurate model) and of calibration (that would require an experiment-specific fine-tuning procedure). Most notably, it provides the tools to reflect on the experiment outcome and gate performance, improving the model description of the system and providing insight into its behavior. C^3 is not a “black-box” experiment controller that replaces physicists or engineers – rather, it reduces tedious tasks allowing for interaction with the quantum device on a more structural level. Instead of simply producing high-fidelity operations, C^3 provides meaningful output in the form of a Good Model of the system, and other insights such as an error budget and a sensitivity analysis. In this sense, C^3 is not to be confused with any single optimal control or benchmarking technique, as it includes results from decades of research in these fields aimed at making controls that allow to actually reach high fidelities efficiently [8, 50], unifying them into one framework.

We expect that the application of C^3 will first benefit scalable implementations of quantum processors based on manufactured solid-state systems, such as superconducting and semiconducting qubits. There, the dependence of model parameters on fabrication means that many elements of the model are in fact uncertain. On the other hand, other scalable implementations of quantum computers contain such elements directly in their quantum description: Ion trap gates involve degrees of freedom of the trap, impurity spins depend on their detailed position etc. – thus we expect that C^3 will also play a key role in those types of systems.

近い将来、C³ツールセットの初期バージョンを、ロバスト制御の生成、自動実験デザイン、マルチパラメータ感度分析、アクティブモデル学習などに拡張する予定です。シミュレータは、非マルコフ型ノイズ、読み出しプロセスの詳細なシミュレーション、制御線上のエコーなど、実世界のシステムの「良いモデル」を作るために必要なあらゆる現象を含むように拡張される予定です。C³は現在、既存の量子コンピュータソフトウェアスタックと統合されており、これにより、例えばQiskit Ignis [95]を用いて、カスタムパルススケジュールの研究 [47, 94]や量子コンピュータから集めたデータに基づくモデル学習の実行が可能となる。C³の実験的応用は現在進行中である（例：[32]）。

C³は、現在の実験に洞察を与え、最適化を支援するだけでなく、手動または自動ハードウェア設計フレームワーク [76, 77, 96]に統合することによって、次世代量子デバイスの設計を導くことができることを期待しています。

ACKNOWLEDGEMENTS

本研究は、歐州委員会によるMarie Curie ETN QuSCo (Grant Nr. 765267) および OpenSuperQ project (Grant Nr. 820363)、IARPA (Intelligence Advanced Research Projects Activity) による LogiQ (Grant Nr. W911NF-16-1-0114) およびドイツ科学教育省 (BMBF) による project VERTICONS (Grant Nr. 13N14872) により支援を受けています。

Appendix A: Survey of parameter specific characterization

量子デバイスの特性評価は、一般に広く注目されています。そのため、ここでは、私たち自身の仕事に有益であると主観的に判断したモデル固有の手法のサブセットについて、非常に限定的に見ることにとどめることにします。

上記のような「良いモデル」の欠如に対処するための標準的なアプローチは、モデル固有の特性評価実験を数多く実施することであり、それぞれがモデルの異なるパラメータを測定するように設計されています：周波数スイープを使用して読み出し共振器のパラメータを測定する；量子ビット周波数測定と緩和時間T₁はRabi実験[97]を必要とする（余分な努力をすれば高いレベルを抽出することができる）；Ramsey [98] とHahn echo測定 [99] でデフェーズデータを得る（マルコフ仮定で、これは単純化しすぎであることが知られています [100, 101]）；制御線応答関数[102-106]、ノイズスペクトル[28, 101, 107, 108]、システムパラメータの連続ドリフト[109-112]、T₁などのパラメータの不連続ジャンプ[113, 114]の測定；

状態準備と測定誤差 (SPAM) はランダム化ベンチマーク (RB；例えば[37]) から抽出することができます。例えば[37] や[115]のような専用の手順で抽出できます。qubitクロストークは[116, 117]で説明されている方法で測定でき、その他にも多くのものがあります。また、スピンチェーン、格子ハミルトニアン、その他の多粒子系を、制限されたアクセス下であらかじめ定義されたネットワークトポジーで学習するためのモデル固有の方法も存在します[118-122]。

付録B：グラディエント・フリー・アルゴリズムの選択

当然ながら、校正の勾配なし最適化問題を解くために自動化されたアプローチを使用することは有望であると思われ、現在、多くの実験が校正タスクにNelder-Meadアルゴリズム [123, 124]を使用しています。例として、図9は、DRAG補正パルスのシミュレーションによって得られた、最適化の基礎となるパラメータランドスケープを示します。キャリブレーションは、オプティマイザーの開始位置によって、アルゴリズムがローカルミニマムを克服し、固有ノイズに対処しなければならないため、かなり難しい場合があります。さらに、このランドスケープは、使用するパラメトリゼーション、選択した目標関数、そして最終的には物理システムの特性によって、かなり独特なものとなることも注目すべき点です。勾配なしオプティマイザーの研究は広大で活発な分野であり、Evolutionary Strategies (ES), Particle Swarm Optimization (PSO), Differential Evolution (DE), Random Search, Simultaneous Perturbation Stochastics Approximation (SPSA), Nelder-Mead Method, Bayesian Optimizationなど、何百ものブラックボックス・オプティマイザーが発表されています。予備的な調査から、現在C₂でデフォルトになっているCMA-ESのような進化戦略を推奨します。このアルゴリズムは、ほとんどのケースで良好な結果を示し、ノイズに対して優れた頑健性を示し、局所的な極値を扱うことができ、比較的少ない評価回数で済む。同様の結論は[125]によっても独立して得られている。我々は、選択したオプティマイザーの最適性について主張することはなく、このテーマのより詳細な議論は将来の出版物に委ねる。

Appendix C: Open-source implementation

C³は、Apache 2.0ライセンスのもと、<https://q-optimize.org>で公開されているオープンソースプロジェクトとして実装されています。このソフトウェアは、一般的な実験コントローラと便利にインターフェースするためにPythonで書かれており、すでにPycQED [126], Labber [127], LabView [128]と連携して使用されています。インターフェースは、制御パラメータの共有からサンプリングされた波形値まで、様々な抽象化レベルで発生させることができます。

In the near future, we intend on extending the initial version of the \mathbb{C}^3 tool-set to the generation of robust controls, automatic experiment design, multi-parameter sensitivity analysis, active model learning, and more. The simulator will be enhanced to include non-Markovian noise, a detailed simulation of the readout process, echoes on control lines and all other phenomena needed to produce a Good Model of real-world systems. \mathbb{C}^3 is currently being integrated with existing quantum computing software stacks, which would allow users to study custom pulse schedules [47, 94] and perform model learning based on data gathered from quantum computers, for example, with Qiskit Ignis [95]. Experimental application of \mathbb{C}^3 is ongoing (e.g. [32]).

It is our hope that \mathbb{C}^3 will not only provide insights into, and assist optimization of, current experiments, but also help guide the design of next-generation quantum devices, be it manually or by integration into automatic hardware design frameworks [76, 77, 96].

ACKNOWLEDGEMENTS

This work was supported by the European Commission through the Marie Curie ETN QuSCo (Grant Nr. 765267) and the OpenSuperQ project (Grant Nr. 820363), by the Intelligence Advanced Research Projects Activity (IARPA) through the LogiQ (Grant Nr. W911NF-16-1-0114) and by the Germany Ministry of Science and Education (BMBF) through project VERTICONS (Grant Nr. 13N14872).

Appendix A: Survey of parameter specific characterization

The task of characterization of quantum devices in general has received extensive attention. It would be presumptuous of us to even attempt a complete survey, therefore, we shall limit ourselves to a very limited look at a subset of model-specific methods we have subjectively found informative to our own work.

The standard approach at addressing the lack of a Good Model, as defined above, is to perform a long list of model-specific characterization experiments, each designed to measure a different parameter of the model: measure parameters of the readout resonator using frequency sweeps; qubit frequency measurements and relaxation time T_1 require Rabi experiments [97] (and with some extra effort the higher levels can be extracted); Ramsey [98] and Hahn echo measurements [99] provide dephasing data (under the Markovian assumption, which is known to be an over-simplification [100, 101]); measuring the control line response functions [102–106], the noise spectra [28, 101, 107, 108], continuous drifts in

system parameters [109–112], and discontinuous jumps in parameters such as T_1 [113, 114]; state Preparation and Measurement Errors (SPAM) can be extracted from Randomized Benchmarking (RB; e.g. [37]) or dedicated procedures, such as [115]; qubit cross-talk can be measured by the method described in [116, 117] and many more. Model specific methods also exist for learning spin chain, lattice Hamiltonians and other multi-particle systems with a predefined network topology under limited access [118–122].

Appendix B: Choice of Gradient-Free Algorithms

Naturally, using an automated approach to solve the gradient-free optimization problem of calibration seems promising, and many experiments are currently using the *Nelder-Mead algorithm* [123, 124] for their calibration tasks. As an example, Fig. 9 shows an underlying parameter landscape of an optimization, obtained by simulating DRAG corrected pulses. Calibration can be rather difficult, as depending on the starting position the optimizer, algorithms will have to overcome local minima and deal with intrinsic noise. It is further noteworthy that this landscape is rather unique to the used parametrization, the chosen goal function and ultimately the properties of the physical system.

Research of gradient-free optimizers is a vast and active field, with hundreds of published black-box optimizers, including Evolutionary Strategies (ES), Particle Swarm Optimization (PSO), Differential Evolution (DE), Random Search, Simultaneous Perturbation Stochastics Approximation (SPSA), Nelder-Mead Method, Bayesian Optimization, and more. From a preliminary investigation, we recommend evolutionary strategies such as CMA-ES, which is currently the default in \mathbb{C}_2 . This algorithm performed well in most cases, exhibited good robustness to noise, can handle local extrema and requires relatively few evaluations. Similar conclusions have been reached independently by [125]. We make no claim as to the optimality of the optimizer chosen, and defer a more detailed discussion of the subject to future publications.

Appendix C: Open-source implementation

\mathbb{C}^3 is implemented as an open source project available at <https://q-optimize.org> under the Apache 2.0 license. The software is written in Python to interface conveniently with common experiment controllers, and has already been used in tandem with PycQED [126], Labber [127] and LabView [128]. The interface can occur at various levels of abstraction, from sharing control parameters to sampled waveform values. A modular design allows for Hamiltonian or Lindbladian descriptions of common physical systems (fixed and flux-tunable qubits, res-

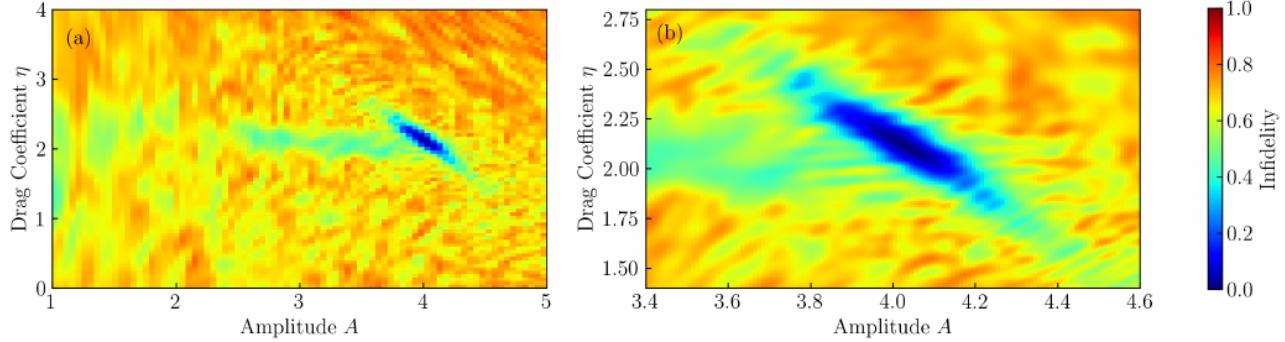


図9. 校正ゴル関数の風景を2次元的に切り取ったもの。選択したシステムは多値量子ビットであり、制御シーケンスは単一長のRB-シーケンスである。制御パラメータ α_j は、ガウシアンパルス振幅、DRAG係数、DRAG補正パルスの周波数オフセットである。RB系列は、理想的には量子ビットを基底状態のままにして、同一性演算を実行するために選ばれました。不忠実度（0から1までの色で表示）は、最終状態とシステムの基底状態との重なりとして定義される。(a) RB系列を固定した場合の、パルス振幅 A と DRAG係数 η の平面を切断したシミュレーションシステムの風景。複数の局所極小値が観察される。(b) 同じグラフをより高解像度でプロットしたもの。グローバルミニマムの近傍に、さらなるローカルミニマムが観察される。

モジュール設計により、一般的な物理系（固定および磁束調整可能な量子ビット、レスオネータ、異なるタイプの結合）のハミルトニアンまたはリンドブラッド記述、実験のシグナルチェーンをモデル化するデバイスリストの指定（ローカルオシレータ、AWG、ミキサ、歪みおよび減衰）、異なるタイプの読み出し処理、さまざまな忠実性関数が可能です。すべてのコンポーネントは、ユーザーが編集したり、参照ライブラリから取り出したりすることができます、さまざまなニーズに対応します。設定とデータはJSONファイルとして保存され、コマンドラインスクリプトとして全機能にアクセスできるため、簡単に自動化することができます。

数値計算はTensorFlow [51]を用いて行う。ダイナミクスシミュレーションとその前後の処理は、定義された入力（制御パラメータやモデルパラメータなど）と出力（目標関数值）を持つネットワークとして定式化され、それぞれが比較的単純な演算（行列の指数化など）を行う多数のノードによって接続されています。TensorFlowでは、計算のヤコビアン、つまりネットワーク入力に対するネットワーク出力のそれぞれの勾配の数値計算が可能です（この機能は、ニューラルネットワークにおけるバックプロパゲーション学習プロセスとして知られるものを進化させたものです[129]）。この自動分化のプロセスにより、新しいコンポーネントがこの特性を継承し、その勾配を解析的に導き出す必要性がなくなるため、モジュール構造が容易になります。さらに、TensorFlowシミュレータはスケーラブルであるため、様々な高性能コンピューティングハードウェアへの展開が可能です。

また、量子回路の大規模シミュレーション[131–133]など、自動微分可能な量子回路をシミュレートする先行研究にも注目したい。

制御スタックとモデルの各コンポーネントは、それがどのようなパラメータを含み、どのように使用されるかを指定する一般的な定型文に適合する必要があります。このモジュール設計では、各クラスは、入力を受け取り、

パラメータに依存した関数を適用して結果を返す実験のコンポーネントを表します。例えば、パルスのエンベロープ関数は次のような構造になっています：

```
import tensorflow as tf ... def my_envelope
    opencv_function(t, parameters): amplitude = parameters[ "amp" ] p2 = parameters[ "p2" ] ... return tf . some_math_
function( amplitude, p2, t ).
```

このコードの唯一の要件は、自動微分を可能にするために、数学関数がTensorFlowパッケージから取得されなければならないことです。制御スタック要素の例として、AWGの有限の立ち上がり時間を以下のコードで実現します：

```
class Response(Device):
def __init__(..., rise_time, ...):
...
self.params[ 'rise_time' ] = rise_time

def process(self, iq_signal):
... t = self.params[ 'rise
_time' ] sigma = t / 4 ... #
Gaussian を使ったCo
nvolution ...
return signal
```

信号処理チェーンは、1つの制御スタック要素の出力を次の要素に入れることで表現されます。功利度計算では、ライブラリの関数から選ぶか、自分で用意することができる。例えば、 $|\psi_i\rangle$ から $|\psi_{ideal}\rangle$ への状態遷移過程の忠実度は、模擬伝搬体Uによって次のように実装されます：

```
def state_transfer_infidelity(U, psi_ideal, psi_0): psi_actual = tf . matmul(U,
psi_0) [1] P. Jurcevic, A. Jayadi-Abhari, L. S. Bishop, I. Lauer, D. F. Bogorin, M. Brink, L. Capeluto, O. Günluuk, T. Itoko, N. Kanazawa, et al,
```

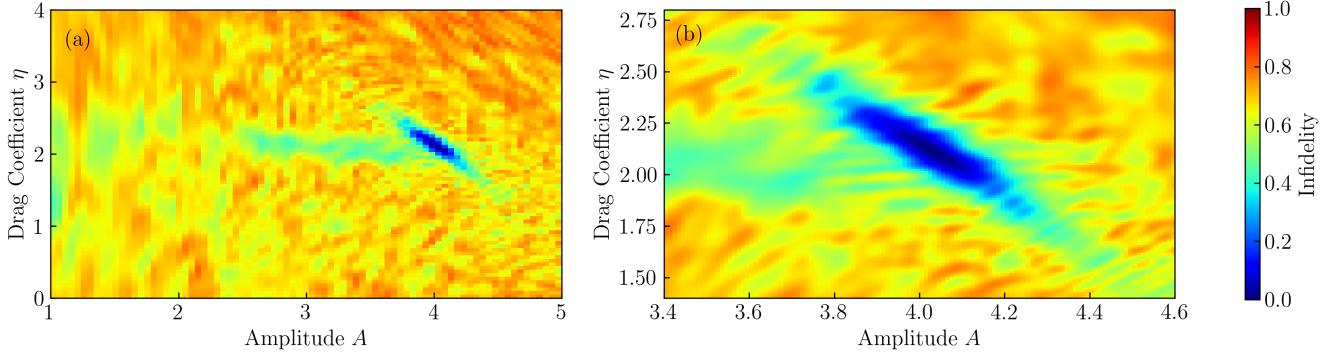


FIG. 9. A 2D cut through the landscape of a calibration goal function. The system chosen is a multi-level qubit, with the control sequence being a single length RB-sequence. Control parameters α_j were the Gaussian pulse amplitude, DRAG coefficient and frequency offset of a DRAG-corrected pulse. The RB-sequence was chosen to implement the identity operation, ideally leaving the qubit in the ground-state. The infidelity (seen as the color ranging from 0 to 1) is defined as the overlap of the final state with the system's ground state. (a) The landscape of the simulated system, as a cut through the plane of pulse amplitude A and DRAG coefficient η , for a fixed RB-sequence. Multiple local minima can be observed. (b) A higher resolution plot of the same landscape. Further local minima can be observed in the neighborhood of the global minimum.

onators, different types of coupling), specification of a list of devices to model the signal chain of the experiment (local oscillator, AWG, mixers, distortions and attenuations), different types of readout processing, and various fidelity functions. All components can be edited by the user or taken from reference libraries, accommodating to different needs. Configurations and data are stored as JSON files, and the full capabilities are accessible as command-line scripts, allowing for easy automation.

Numeric calculations are performed using TensorFlow [51]: The simulation of the dynamics and the pre and post processing are formulated as a network, with well-defined inputs (e.g. control and model parameters) and outputs (goal function values), connected by many nodes, each performing a relatively simple operation (e.g. matrix exponentiation). TensorFlow enables the numerical computation of the Jacobian of a calculation – the gradient of each of the network outputs with respect to the network inputs (this capability is the evolution of what is known as back-propagation learning process in neural networks [129]). This process of automatic differentiation facilitates the modular structure, as any new component inherits this property, removing the need to analytically derive its gradient. Furthermore, the TensorFlow simulator is scalable, allowing deployment on a variety of high-performance computing hardware.

We note prior efforts simulating quantum circuits which allow for automatic differentiation, e.g. [53, 130], as well as large-scale simulations of quantum circuits, e.g. [131–133].

Each component of the control stack and model needs to conform to a general boilerplate that specifies what parameters it contains and how they are used. In this modular design, each class represents a component of the experiment that takes an input applies some parameter-

dependent function to it and returns a result. For example, an envelope function for pulses would have this structure:

```
import tensorflow as tf
...
def my_envelope_function(t, parameters):
    amplitude = parameters["amp"]
    p2 = parameters["p2"]
...
return tf.some_math_function(amplitude, p2, t)
```

The only requirement to this code is that mathematical functions have to be taken from the TensorFlow package to allow for automatic differentiation. As an example of a control stack element, the finite rise time of an AWG is realized with the following code:

```
class Response(Device):
def __init__(..., rise_time, ...):
...
    self.params['rise_time'] = rise_time

def process(self, iq_signal):
...
    t = self.params['rise_time']
    sigma = t / 4
...
    # Convolution with a Gaussian
...
    return signal
```

A signal processing chain is represented by putting the output of one control stack element into the next. In calculating figures of merit, the user can choose from a library of functions or supply their own. For example, the infidelity of a state transfer process from $|\psi_0\rangle$ to $|\psi_{\text{ideal}}\rangle$, implemented by the simulated propagator U as follows:

```
def state_transfer_infid(U, psi_ideal, psi_0):
    psi_actual = tf.matmul(U, psi_0)
```

```

overlap = tf_abs(
tf.matmul(
    tf.linalg.adjoint(psi_ideal),
    psi_actual
)
infid = 1 - overlap
return infid

```

超伝導量子計算システムにおける量子ボリューム64の実証、量子科学技術 6, 025020 (2021). [2] F. Arute, K. Arya, R. Babbush, D. Bacon, J. C. Bardin, R. Barends, R. Biswas, S. Boixo, F. G. S. L. Brandao, D. A. Buell, et al., Quantum supremacy using a programmable superconducting process, Nature 574, 505 (2019). [3] A. W. Cross, L. S. Bishop, S. Sheldon, P. D. Nation, and J. M. Gambetta, Validating quantum computers using randomized model circuits, Phys. Rev. A 100, 032328 (2019). [4] R. Barends, J. Kelly, A. Megrant, A. Veitia, D. Sank, E. Jeffrey, T. C. White, J. Mutus, A. G. Fowler, B. Campbell, Y. Chen, Z. Chen, B. Chiaro, A. Dunsworth, C. Neill, P. O’Malley, P. Roushan, A. Vainsencher, J. Wenner, A. N. Korotkov, A. N. Cleland, and J. M. Martinis, Superconducting quantum circuits at the surface code threshold for fault tolerance, Nature 508, 500 (2014). [5] M. C. Collodo, J. Herrmann, N. La croix, C. K. Andersen, A. Remm, S. Lazar, J.-C. Besse, T. Walter, A. Wallraff, and C. Eichler, Implementation of conditional phase gates based on tunable zz interactions, Phys. Rev. Lett. 125, 240502 (2020). [6] M. Ganzhorn, G. Salis, D. J. Egger, A. Fuhrer, M. Mergenthaler, C. Müller, P. Müller, S. Paredes, M. Pechal, M. Werninghaus, and S. Filipp, Benchmarking the noise sensitivity of different parametric two-qubit gates in a single superconducting quantum computing platform, Phys. Rev. Research 2, 033447 (2020). [7] G. E. P. Box, 科学と統計, J. Am. Stat. 71, 791 (1976). [8] S. J. Glaser, U. Boscain, T. Calarco, C. P. Koch, W. Köckenberger, R. Kosloff, I. Kuprov, B. Luy, S. Schirmer, T. Schulte-Herbrüggen, D. Sugny, and F. K. Wilhelm, Training schrödinger’s cat: quantum optim control, Eur. Phys. J. D 69, 279 (2015). [9] S. Machnes, U. Sander, S. J. Glaser, P. de Fouquières, A. Gruslys, S. Schirmer, and T. Schulte-Herbrüggen, Comparing, optimizing, and benchmarking quantumcontrol algorithms in a unifying programming framework, Phys. Rev. A 84, 022305 (2011). [10] S. Machnes, E. Assémat, D. Tannor, and F. K. Wilhelm, Tunable, flexible, and efficient optimization of control pulses for practical qubits, Phys. Rev. Lett. 120, 150401 (2018). [11] N. Kha neja, T. Reiss, C. Kehlet, T. SchulteHerbrüggen, and S. J. Glaser, Optimal control of coupled spin dynamics: Design of nmr pulse sequences by gradient ascent algorithms, J. Magn. Reson. 172, 296 (2005).

- [12] P. Doria, T. Calarco, and S. Montangero, Optimal control technique for many-body quantum dynamics, Phys. Rev. Lett. 106, 190501 (2011). [13] R. Kosloff, S. A. Rice, P. Gaspard, S. Tersigni, and D. Tannor, Wavepacket dancing: 光パルスの整形による化学的選択性の達成, Chem. Phys. 139, 201 (1989). (14) F. Motzoi, J. M. Gambetta, P. Rebentrost, F. K. Wilhelm, Simple pulses for elimination of leakage in weakly nonlinear qubits, Phys. Rev. Lett. 103, 110501 (2009). [15] R. Schutjens, F. A. Dagga, D. J. Egger, および F. K. Wilhelm, Single-qubit gates in frequency-crowded transmon systems, Phys. Rev. A 88, 052330 (2013). [16] U. Dorner, T. Calarco, P. Zoller, A. Browaeys, and P. Grangier, Quantum logic via optimal control in holographic dipole traps, J. Opt. B: Quantum Semiclassical Opt. 7, S341 (2005). (17) D. J. エッガー、F. K. ウィルヘルム、共振器を介して結合した2つの超伝導量子ビットのための最適化制御Zゲート、Supercond. Sci. Technol. 27, 014001 (2013). [18] D. J. Egger and F. K. Wilhelm, Adaptive hybrid optimal quantum control for imprecisely characterized systems, Phys. Rev. Lett. 112, 240503 (2014). [19] J. Kelly, R. Barends, B. Campbell, Y. Chen, Z. Chen, B. Chiaro, A. Dunsworth, A. G. Fowler, I.-C. Hoi, E. Jeffrey, A. Megrant, J. Mutus, C. Neill, P. J. O’Malley, C. Quintana, P. Roushan, D. Sank, A. Vainsencher, J. Wenner, T. C. White, A. N. Cleland, and J. M. Martinis, Optimal quantum control using randomized benchmarking, Phys. Rev. Lett. 112, 240504 (2014). [20] S. Sheldon, E. Magesan, J. M. Chow, and J. M. Gambetta, Procedure for systematically tuning up cross-talk in the cross-resonance gate, Phys. Rev. A 93, 060302(R) (2016). [21] S. Sheldon, L. S. Bishop, E. Magesan, S. Filipp, J. M. Chow, and J. M. Gambetta, Characterizing errors on qubit operations via iterative randomized benchmarking, Phys. Rev. A 93, 012301 (2016). [22] M. Gevers, Identification for Control：初期の成果から実験デザインの復活まで、European Journal of Control 11, 335 (2005). [23] C. R. Rojas, J. S. Welsh, G. C. Goodwin, and A. Feuer, Robust optimal experiment design for system identification, Automatica 43, 993 (2007). [24] L. Ljung, Perspectives on system identification, Annual Reviews in Control 34, 1 (2010). [26] Q.-M. (注1)本論文は、(注2)本論文の一部である。Wu, X. Peng, I. Pelczer, and H. Rabitz, Combining the synergistic control capabilities of modeling and experiments：イラス

```

overlap = tf.abs(
    tf.matmul(
        tf.linalg.adjoint(psi_ideal),
        psi_actual
    )
)
infid = 1 - overlap
return infid

```

- [1] P. Jurcevic, A. Javadi-Abhari, L. S. Bishop, I. Lauer, D. F. Bogorin, M. Brink, L. Capelluto, O. Günlük, T. Itoko, N. Kanazawa, *et al.*, Demonstration of quantum volume 64 on a superconducting quantum computing system, *Quantum Science and Technology* **6**, 025020 (2021).
- [2] F. Arute, K. Arya, R. Babbush, D. Bacon, J. C. Bardin, R. Barends, R. Biswas, S. Boixo, F. G. S. L. Brandao, D. A. Buell, *et al.*, Quantum supremacy using a programmable superconducting processor, *Nature* **574**, 505 (2019).
- [3] A. W. Cross, L. S. Bishop, S. Sheldon, P. D. Nation, and J. M. Gambetta, Validating quantum computers using randomized model circuits, *Phys. Rev. A* **100**, 032328 (2019).
- [4] R. Barends, J. Kelly, A. Megrant, A. Veitia, D. Sank, E. Jeffrey, T. C. White, J. Mutus, A. G. Fowler, B. Campbell, Y. Chen, Z. Chen, B. Chiaro, A. Dunsworth, C. Neill, P. O’Malley, P. Roushan, A. Vainsencher, J. Wenner, A. N. Korotkov, A. N. Cleland, and J. M. Martinis, Superconducting quantum circuits at the surface code threshold for fault tolerance, *Nature* **508**, 500 (2014).
- [5] M. C. Collodo, J. Herrmann, N. Lacroix, C. K. Andersen, A. Remm, S. Lazar, J.-C. Besse, T. Walter, A. Wallraff, and C. Eichler, Implementation of conditional phase gates based on tunable zz interactions, *Phys. Rev. Lett.* **125**, 240502 (2020).
- [6] M. Ganzhorn, G. Salis, D. J. Egger, A. Fuhrer, M. Mergenthaler, C. Müller, P. Müller, S. Paredes, M. Pechal, M. Werninghaus, and S. Filipp, Benchmarking the noise sensitivity of different parametric two-qubit gates in a single superconducting quantum computing platform, *Phys. Rev. Research* **2**, 033447 (2020).
- [7] G. E. P. Box, Science and statistics, *J. Am. Stat. Assoc.* **71**, 791 (1976).
- [8] S. J. Glaser, U. Boscain, T. Calarco, C. P. Koch, W. Köckenberger, R. Kosloff, I. Kuprov, B. Luy, S. Schirmer, T. Schulte-Herbrüggen, D. Sugny, and F. K. Wilhelm, Training schrödinger’s cat: quantum optimal control, *Eur. Phys. J. D* **69**, 279 (2015).
- [9] S. Machnes, U. Sander, S. J. Glaser, P. de Fouquières, A. Gruslys, S. Schirmer, and T. Schulte-Herbrüggen, Comparing, optimizing, and benchmarking quantum-control algorithms in a unifying programming framework, *Phys. Rev. A* **84**, 022305 (2011).
- [10] S. Machnes, E. Assémat, D. Tannor, and F. K. Wilhelm, Tunable, flexible, and efficient optimization of control pulses for practical qubits, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 150401 (2018).
- [11] N. Khaneja, T. Reiss, C. Kehlet, T. Schulte-Herbrüggen, and S. J. Glaser, Optimal control of coupled spin dynamics: design of nmr pulse sequences by gradient ascent algorithms, *J. Magn. Reson.* **172**, 296 (2005).
- [12] P. Doria, T. Calarco, and S. Montangero, Optimal control technique for many-body quantum dynamics, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 190501 (2011).
- [13] R. Kosloff, S. A. Rice, P. Gaspard, S. Tersigni, and D. Tannor, Wavepacket dancing: Achieving chemical selectivity by shaping light pulses, *Chem. Phys.* **139**, 201 (1989).
- [14] F. Motzoi, J. M. Gambetta, P. Rebentrost, and F. K. Wilhelm, Simple pulses for elimination of leakage in weakly nonlinear qubits, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 110501 (2009).
- [15] R. Schutjens, F. A. Dagga, D. J. Egger, and F. K. Wilhelm, Single-qubit gates in frequency-crowded transmon systems, *Phys. Rev. A* **88**, 052330 (2013).
- [16] U. Dorner, T. Calarco, P. Zoller, A. Browaeys, and P. Grangier, Quantum logic via optimal control in holographic dipole traps, *J. Opt. B: Quantum Semiclassical Opt.* **7**, S341 (2005).
- [17] D. J. Egger and F. K. Wilhelm, Optimized controlled-Z gates for two superconducting qubits coupled through a resonator, *Supercond. Sci. Technol.* **27**, 014001 (2013).
- [18] D. J. Egger and F. K. Wilhelm, Adaptive hybrid optimal quantum control for imprecisely characterized systems, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 240503 (2014).
- [19] J. Kelly, R. Barends, B. Campbell, Y. Chen, Z. Chen, B. Chiaro, A. Dunsworth, A. G. Fowler, I.-C. Hoi, E. Jeffrey, A. Megrant, J. Mutus, C. Neill, P. J. J. O’Malley, C. Quintana, P. Roushan, D. Sank, A. Vainsencher, J. Wenner, T. C. White, A. N. Cleland, and J. M. Martinis, Optimal quantum control using randomized benchmarking, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 240504 (2014).
- [20] S. Sheldon, E. Magesan, J. M. Chow, and J. M. Gambetta, Procedure for systematically tuning up cross-talk in the cross-resonance gate, *Phys. Rev. A* **93**, 060302(R) (2016).
- [21] S. Sheldon, L. S. Bishop, E. Magesan, S. Filipp, J. M. Chow, and J. M. Gambetta, Characterizing errors on qubit operations via iterative randomized benchmarking, *Phys. Rev. A* **93**, 012301 (2016).
- [22] M. Gevers, Identification for control: From the early achievements to the revival of experiment design, *European Journal of Control* **11**, 335 (2005).
- [23] C. R. Rojas, J. S. Welsh, G. C. Goodwin, and A. Feuer, Robust optimal experiment design for system identification, *Automatica* **43**, 993 (2007).
- [24] L. Ljung, Perspectives on system identification, *Annual Reviews in Control* **34**, 1 (2010).
- [25] X. Bombois, M. Gevers, R. Hildebrand, and G. Solari, Optimal experiment design for open and closed-loop system identification, *Communications in Information and Systems* **11**, 197 (2011).
- [26] Q.-M. Chen, X. Yang, C. Arenz, R.-B. Wu, X. Peng, I. Pelczer, and H. Rabitz, Combining the synergistic control capabilities of modeling and experiments: Illus-

- tration of finding minimum-time quantum objective, Phys. Rev. A 101, 032313 (2020). R.-B. Wu, B. Chu,
- [27] D. H. Owens, and H. Rabitz, Datadriven gradient algorithm for high-precision quantum control, Phys. Rev. A 97, 042122 (2018). H. Ball, M. J. Biercuk, A.
- [28] Carvalho, J. Chen, M. Hush, L. A. D. Castro, L. Li, P. J. Liebermann, H. J. Slatyer, C. Edmunds, V. Frey, C. Hempel, and A. Milne, Software tools for quantum control : ノイズとエラーの抑制による量子コンピュータの性能向上, (2020), arXiv:2001.04060 [quant-ph]. G. Lindblad, On the generators of quantum dynamical semigroups, Commun. Math. Phys. 48, 119 (1976)
- [30] . V. ゴリーニ、A. コサコフスキー、E.C.G. スダルシャン、nレベルシステムの完全正動的半群, J. Math. Phys. 17, 821 (1976). B. Girod, R. Rabenstein, and A. Stenger, Signals and systems (Wiley, 2001). M. Werninghaus, D. J. Egger, F. Roy, S. Machnes, F. K. Wilhelm , and S. Filipp, Leakage reduction in fast superconducting qubit gates via optimal control, npj quantum information 7, 14 (2021). Z. Chen, J. Kelly, C. Quintana, R. Barends, B. Campbell, Y. Chen, B. Chiaro, A. Dunsworth, A. G. Fowler, E. Lucero, E. Jeffrey, A. Megrant, J. Mutus, M. Neeley, C. Neill, P. J. O’Malley, P. J. Roushan, D. Sank, A. Vainsencher, J. Wenner, T. C. White, A. N. Korotkov, and J. M. Martinis, Measuring and suppressing quantum state leakage in a superconducting qubit, Phys. Rev. Lett. 116, 020501 (2016). E. Magesan, R. Blume-Kohout, and J. Emerson, Gate fidelity fluctuations and quantum process invariants, Phys. Rev. A 84, 012309 (2011).
- [35]). 追加の感度プロットについては、[url]の補足資料を参考してください。J. Nocedal, Updating quasi-newton matrices with limited storage, Math. Comput. 35, 73 (1980). E. Knill, D. Leibfried, R. Reichle, J. Britton, R. B. Blakestad, J. D. Jost, C. Langer, R. Ozeri, S. Seidelin, and D. J. Wineland, Randomized benchmarking of quantum gate, Phys. Rev. A 77, 012307 (2008). J. M. Chow, J. M. Gambetta, L. Tornberg, J. Koch, L. S. Bishop, A. A. Houck, B. R. Johnson, L. Frunzio, S. M. Girvin, and R. J. Schoelkopf, Randomized Benchmarking and Process Tomography for Gate Errors in a Solid-State Qubit, Phys. Rev. Lett. 102, 090502 (2009). このように、量子プロセスのランダム化ベンチマークを行うことで、量子プロセスの信頼性を向上させることができる。106, 180504 (2011). その結果、量子ゲートの特性は、ランダムベンチマー킹によって決定された。そのため、本論文では、このような問題点を解決するために、様々な工夫を凝らしている
- [41] 。11, 1 (2003). M. Sinanovic, 量子ゲートのキャリブレーションアルゴリズムの評価, B. Sgc. Thesis (unpublished). A. Blais, R.-S. A.ブレイズ、R.-S.ホアン、A. ウオラフ、S.M.ガーヴィン、R.J.ショエルコップ、超伝導電気回路用キャビティ量子電気力学 :
- [43]
- [44]
- 量子計算のためのアーキテクチャ, Phys. Rev. A 69, 062320 (2004). J. J. Wallman and S. T. Flammia, Randomized benchmarking with confidence, New J. Phys. 16, 103032 (2014).
- [45] C. Rigetti and M. Devoret, Fully microwave-tunable universal gates in superconducting qubits with linear couplings and fixed transition frequencies, Phys. Rev. B 81, 134507 (2010). (46)J.M. チョウ、A.D. コルコール、J.M. ガンベッタ、C. リゲッティ、B.R. ジョンソン、J.A. Smolin, J.R. ローゼン、G.A. Keefe, M.B. Rothwell, M.B. Ketchen, and M. 斯テファン、Simple All-Microwave Entangling Gate for Fixed-Frequency Superconducting Qubits, Phys. Rev. Lett. 107, 080502 (2011). [47] T. Alexander, N. Kanazawa, D. J. Egger, L. Capelluto, C. J. Wood, A. Javadi-Abhari, and D. C. McKay, Qiskit pulse: programming quantum computers through the cloud with pulses, Quantum Science and Technology 5, 044006 (2020). [48] A. D. Córcoles, J. M. Gambetta, J. M. Chow, J. A. Smolin, M. Ware, J. Strand, B. L. T. Plourde, and M. Steffen, Process verification of twoqubit quantum gates by randomized benchmarking, Phys. Rev. A 87, 030301(R) (2013). [49] S. Kirchhoff, T. Keßler, P. J. Liebermann, E. Assémat, S. Machnes, F. Motzoi, and F. K. Wilhelm, Optimized cross-resonance gate for coupled transmon systems, Phys. Rev. A 97, 042348 (2018). [50] F. K. Wilhelm , S. Kirchhoff, S. Machnes, N. Wittler, and D. Sugny, An introduction into optimal control for quantum technologies, (2020), arXiv:2003.10132. [51] M. Abadi, A. Agarwal, P. Barham, E. Brevdo, Z. Chen, C. Citro, G. S. Corrado, A. Davis, J. Dean, M. Devin, S. Ghemawat, I. Goodfellow, A. Harp, G. Irving, M. Isard, TENSORFLOW: Large-scale machine learning on heterogeneous systems, (2015), software available from tensorflow.org. [52] G. Kedem, Automatic differentiation of computer programs, ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS) 6, 150 (1980). [53] N. L eung, M. Abdelhafez, J. Koch, and D. Schuster, Speedup for quantum optimal control from automatic differentiation based on graphics processing units, Phys. Rev. A 95, 042318 (2017). [54] D. C. McKay, C. J. Wood, S. Sheldon, J. M. Chow, and J. M. Gambetta, Efficient z gates for quantum computing, Phys. Rev. A 96, 022330 (2017). [55] D. A. Lidar, Lecture notes on the theory of open quantum systems, (2019), arXiv:1902.00967. [56] S. V. Stehman, Selecting and interpreting measures of thematic classification accuracy, Remote Sens. Environ. 62, 77 (1997). (2)量子力学系の最適制御.....量子力学系の最適制御は、量子力学系と量子力学系との間の相互作用に着目し、量子力学系と量子力学系との間の相互作用に着目し、量子力学系の最適制御を行う：(1)量子力学系の最適制御：存在、数値近似、応用, Phys. Rev. A 37, 4950 (1988). (58)D.M. ライヒ、M. シンドング、C.P. コッチ、krotovの方法による量子制御の単調収束最適化, The Journal of Chemical Physics 136, 104103 (2012). [59] M. H. Goerz, D. Basilewitsch, F. Gago-Encinas, M. G. Krauss, K. P. Horn, D. M. Reich, and C. P. Koch, Krotov: A Python implementation of Krotov’s method for quantum optimal control , SciPost Phys. 7, 80 (2019). [60] Z. Leng, P. Mundada, S. Ghadimi, and A. Houck, Robust and efficient algorithms for high-dimensional blackbox quantum optimization, (2019), arXiv:1910.03591.

- tration of finding a minimum-time quantum objective, *Phys. Rev. A* **101**, 032313 (2020).
- [27] R.-B. Wu, B. Chu, D. H. Owens, and H. Rabitz, Data-driven gradient algorithm for high-precision quantum control, *Phys. Rev. A* **97**, 042122 (2018).
- [28] H. Ball, M. J. Biercuk, A. Carvalho, J. Chen, M. Hush, L. A. D. Castro, L. Li, P. J. Liebermann, H. J. Slatyer, C. Edmunds, V. Frey, C. Hempel, and A. Milne, Software tools for quantum control: Improving quantum computer performance through noise and error suppression, (2020), arXiv:2001.04060 [quant-ph].
- [29] G. Lindblad, On the generators of quantum dynamical semigroups, *Commun. Math. Phys.* **48**, 119 (1976).
- [30] V. Gorini, A. Kossakowski, and E. C. G. Sudarshan, Completely positive dynamical semigroups of n-level systems, *J. Math. Phys.* **17**, 821 (1976).
- [31] B. Girod, R. Rabenstein, and A. Stenger, *Signals and systems* (Wiley, 2001).
- [32] M. Werninghaus, D. J. Egger, F. Roy, S. Machnes, F. K. Wilhelm, and S. Filipp, Leakage reduction in fast superconducting qubit gates via optimal control, *npj Quantum Information* **7**, 14 (2021).
- [33] Z. Chen, J. Kelly, C. Quintana, R. Barends, B. Campbell, Y. Chen, B. Chiaro, A. Dunsworth, A. G. Fowler, E. Lucero, E. Jeffrey, A. Megrant, J. Mutus, M. Neeley, C. Neill, P. J. J. O’Malley, P. Roushan, D. Sank, A. Vainsencher, J. Wenner, T. C. White, A. N. Korotkov, and J. M. Martinis, Measuring and suppressing quantum state leakage in a superconducting qubit, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 020501 (2016).
- [34] E. Magesan, R. Blume-Kohout, and J. Emerson, Gate fidelity fluctuations and quantum process invariants, *Phys. Rev. A* **84**, 012309 (2011).
- [35] See Supplemental Material at [url] for additional sensitivity plots.
- [36] J. Nocedal, Updating quasi-newton matrices with limited storage, *Math. Comput.* **35**, 773 (1980).
- [37] E. Knill, D. Leibfried, R. Reichle, J. Britton, R. B. Blakestad, J. D. Jost, C. Langer, R. Ozeri, S. Seidelin, and D. J. Wineland, Randomized benchmarking of quantum gates, *Phys. Rev. A* **77**, 012307 (2008).
- [38] J. M. Chow, J. M. Gambetta, L. Tornberg, J. Koch, L. S. Bishop, A. A. Houck, B. R. Johnson, L. Frunzio, S. M. Girvin, and R. J. Schoelkopf, Randomized Benchmarking and Process Tomography for Gate Errors in a Solid-State Qubit, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 090502 (2009).
- [39] E. Magesan, J. M. Gambetta, and J. Emerson, Scalable and robust randomized benchmarking of quantum processes, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 180504 (2011).
- [40] E. Magesan, J. M. Gambetta, and J. Emerson, Characterizing quantum gates via randomized benchmarking, *Phys. Rev. A* **85**, 042311 (2012).
- [41] N. Hansen, S. D. Müller, and P. Koumoutsakos, Reducing the time complexity of the derandomized evolution strategy with covariance matrix adaptation (cma-es), *Evol. Comput.* **11**, 1 (2003).
- [42] M. Sinanovic, Evaluation of calibration algorithms for quantum gates, B. Sgc. Thesis (unpublished).
- [43] A. Blais, R.-S. Huang, A. Wallraff, S. M. Girvin, and R. J. Schoelkopf, Cavity quantum electrodynamics for superconducting electrical circuits: An architecture for quantum computation, *Phys. Rev. A* **69**, 062320 (2004).
- [44] J. J. Wallman and S. T. Flammia, Randomized benchmarking with confidence, *New J. Phys.* **16**, 103032 (2014).
- [45] C. Rigetti and M. Devoret, Fully microwave-tunable universal gates in superconducting qubits with linear couplings and fixed transition frequencies, *Phys. Rev. B* **81**, 134507 (2010).
- [46] J. M. Chow, A. D. Córcoles, J. M. Gambetta, C. Rigetti, B. R. Johnson, J. A. Smolin, J. R. Rozen, G. A. Keefe, M. B. Rothwell, M. B. Ketchen, and M. Steffen, Simple All-Microwave Entangling Gate for Fixed-Frequency Superconducting Qubits, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 080502 (2011).
- [47] T. Alexander, N. Kanazawa, D. J. Egger, L. Capelluto, C. J. Wood, A. Javadi-Abhari, and D. C. McKay, Qiskit pulse: programming quantum computers through the cloud with pulses, *Quantum Science and Technology* **5**, 044006 (2020).
- [48] A. D. Córcoles, J. M. Gambetta, J. M. Chow, J. A. Smolin, M. Ware, J. Strand, B. L. T. Plourde, and M. Steffen, Process verification of two-qubit quantum gates by randomized benchmarking, *Phys. Rev. A* **87**, 030301(R) (2013).
- [49] S. Kirchhoff, T. Keßler, P. J. Liebermann, E. Assémat, S. Machnes, F. Motzoi, and F. K. Wilhelm, Optimized cross-resonance gate for coupled transmon systems, *Phys. Rev. A* **97**, 042348 (2018).
- [50] F. K. Wilhelm, S. Kirchhoff, S. Machnes, N. Wittler, and D. Sugny, An introduction into optimal control for quantum technologies, (2020), arXiv:2003.10132.
- [51] M. Abadi, A. Agarwal, P. Barham, E. Brevdo, Z. Chen, C. Citro, G. S. Corrado, A. Davis, J. Dean, M. Devin, S. Ghemawat, I. Goodfellow, A. Harp, G. Irving, and M. Isard, TensorFlow: Large-scale machine learning on heterogeneous systems, (2015), software available from tensorflow.org.
- [52] G. Kedem, Automatic differentiation of computer programs, *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)* **6**, 150 (1980).
- [53] N. Leung, M. Abdelhafez, J. Koch, and D. Schuster, Speedup for quantum optimal control from automatic differentiation based on graphics processing units, *Phys. Rev. A* **95**, 042318 (2017).
- [54] D. C. McKay, C. J. Wood, S. Sheldon, J. M. Chow, and J. M. Gambetta, Efficient z gates for quantum computing, *Phys. Rev. A* **96**, 022330 (2017).
- [55] D. A. Lidar, Lecture notes on the theory of open quantum systems, (2019), arXiv:1902.00967.
- [56] S. V. Stehman, Selecting and interpreting measures of thematic classification accuracy, *Remote Sens. Environ.* **62**, 77 (1997).
- [57] A. P. Peirce, M. A. Dahleh, and H. Rabitz, Optimal control of quantum-mechanical systems: Existence, numerical approximation, and applications, *Phys. Rev. A* **37**, 4950 (1988).
- [58] D. M. Reich, M. Ndong, and C. P. Koch, Monotonically convergent optimization in quantum control using krotov’s method, *The Journal of Chemical Physics* **136**, 104103 (2012).
- [59] M. H. Goerz, D. Basilewitsch, F. Gago-Encinas, M. G. Krauss, K. P. Horn, D. M. Reich, and C. P. Koch, Krotov: A Python implementation of Krotov’s method for quantum optimal control, *SciPost Phys.* **7**, 80 (2019).
- [60] Z. Leng, P. Mundada, S. Ghadimi, and A. Houck, Robust and efficient algorithms for high-dimensional black-box quantum optimization, (2019), arXiv:1910.03591.

- [61] *Numerical Optimization* (Springer New York, 2006).
- [62] G. Feng, F. H. Cho, H. Katiyar, J. Li, D. Lu, J. Baugh, and R. Laflamme, Gradient-based closed-loop quantum optimal control in a solid-state two-qubit system, *Phys. Rev. A* **98**, 052341 (2018).
- [63] J. Kelly, P. O’Malley, M. Neeley, H. Neven, and J. M. Martinis, Physical qubit calibration on a directed acyclic graph, (2018), arXiv:1803.03226.
- [64] P. C. Mahalanobis, On the generalized distance in statistics (National Institute of Science of India, 1936) p. 49–55.
- [65] S. G. Schirmer and D. K. L. Oi, Quantum system identification by bayesian analysis of noisy data: Beyond hamiltonian tomography, *Laser Phys.* **20**, 1203 (2010).
- [66] M. P. V. Stenberg, Y. R. Sanders, and F. K. Wilhelm, Efficient estimation of resonant coupling between quantum systems, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 210404 (2014).
- [67] M. P. V. Stenberg, O. Köhn, and F. K. Wilhelm, Characterization of decohering quantum systems: Machine learning approach, *Phys. Rev. A* **93**, 012122 (2016).
- [68] M. P. V. Stenberg and F. K. Wilhelm, Simultaneous model selection and parameter estimation: A superconducting qubit coupled to a bath of incoherent two-level systems, *Phys. Rev. A* **94**, 052119 (2016).
- [69] A. Sergeevich, A. Chandran, J. Combes, S. D. Bartlett, and H. M. Wiseman, Characterization of a qubit hamiltonian using adaptive measurements in a fixed basis, *Phys. Rev. A* **84**, 052315 (2011).
- [70] N. Wiebe, C. Granade, C. Ferrie, and D. G. Cory, Hamiltonian learning and certification using quantum resources, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 190501 (2014).
- [71] N. Wiebe, C. Granade, C. Ferrie, and D. Cory, Quantum hamiltonian learning using imperfect quantum resources, *Phys. Rev. A* **89**, 042314 (2014).
- [72] N. Wiebe, C. Granade, and D. G. Cory, Quantum bootstrapping via compressed quantum hamiltonian learning, *New J. Phys.* **17**, 022005 (2015).
- [73] J. Wang, S. Paesani, R. Santagati, S. Knauer, A. A. Gentile, N. Wiebe, M. Petruzzella, J. L. O’Brien, J. G. Rarity, A. Laing, *et al.*, Experimental quantum hamiltonian learning, *Nat. Phys.* **13**, 551 (2017).
- [74] J. H. Cole, S. G. Schirmer, A. D. Greentree, C. J. Wellard, D. K. L. Oi, and L. C. L. Hollenberg, Identifying an experimental two-state hamiltonian to arbitrary accuracy, *Phys. Rev. A* **71**, 062312 (2005).
- [75] C. E. Granade, C. Ferrie, N. Wiebe, and D. G. Cory, Robust online hamiltonian learning, *New J. Phys.* **14**, 103013 (2012).
- [76] M. Krenn, M. Malik, R. Fickler, R. Lapkiewicz, and A. Zeilinger, Automated search for new quantum experiments, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 090405 (2016).
- [77] A. A. Melnikov, H. P. Nautrup, M. Krenn, V. Dunjko, M. Tiersch, A. Zeilinger, and H. J. Briegel, Active learning machine learns to create new quantum experiments, *Proceedings of the National Academy of Sciences* **115**, 1221 (2018).
- [78] M. Krenn, M. Erhard, and A. Zeilinger, Computer-inspired quantum experiments, *Nature Reviews Physics* **2**, 649 (2020).
- [79] A. A. Gentile, B. Flynn, S. Knauer, N. Wiebe, S. Paesani, C. E. Granade, J. G. Rarity, R. Santagati, and A. Laing, Learning models of quantum systems from experiments, *Nature Physics* **17**, 837 (2021).
- [80] T. J. Evans, R. Harper, and S. T. Flammia, スケーラブルベイズハミルトニアン学習、(2019), arXiv:1912.07636. J. F. Ralph, S. Maskell, and K. Jacobs, Multiparameter estimation along quantum trajectories with sequential monte carlo methods [82], *Phys. Rev. A* **96**, 052306 (2017). R. L. Kosut and H. Rabitz, Identification of quantum systems, [83] IFAC Proceedings Volumes 35, 397 (2002). S. G. Schirmer, A. Kolli, and D. K. L. Oi, Experimental hamiltonian identification for controlled two-level systems, *Phys. Rev. A* **69**, 050306(R) (2004). D. K. L. Oi and S. G. Schirmer, Quantum system characterization with limited resources, *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **370**, 5386 (2012). D. Burgarth and K. Yuasa, Quantum system identification, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 080502 (2012). J. Zhang and M. Sarovar, Identification of open quantum systems from observable time t races, *Phys. Rev. A* **91**, 052121 (2015). S.-Y. Hou, H. Li, and G.-L. Long, Experimental quantum hamiltonian identification from measurement time t races, *Science Bulletin* **62**, 863 (2017). A. Shabani, M. Mohseni, S. Lloyd, R. L. Kosut, and H. Rabitz, Estimation of many-body quantum hamiltonians via compressive sensing, *Phys. Rev. A* **84**, 012107 (2011). K. Rudinger and R. Joynt, Compressed sensing for hamiltonian reconstruction, *Phys. Rev. A* **92**, 052322 (2015). B. Lusch, J. N. Kutz, and S. L. Brunton, Deep learning for universal linear embeddings of nonlinear dynamics, *Nat. Commun.* **9**, 1 (2018). E. Flurin, L. S. Martin, S. Hohen-Gourgy, and I. Siddiqi, Using a recurrent neural network to reconstruct quantum dynamics of a superconducting qubit from physical observations, *Phys. Rev. X* **10**, 011006 (2020). M. Dalgaard, F. Motzoi, J. J. Sørensen, and J. Sherson, Global optimization of quantum dynamics with alphazero deep exploration, *npj Quantum Inf.* **6**, 10.1038/s41534-019-0241-0 (2020). S. Krastanov, S. Zhou, S. T. Flammia, and L. Jiang, Stochastic estimation of dynamical variables, *Quantum Science and Technology* **4**, 035003 (2019). D. C. McKay, T. Alexander, L. Bello, M. J. Biercuk, L. Bishop, J. Chen, J. M. Chow, A. D. Córcoles, D. Egger, S. Filipp, J. Gomez, M. Hush, A. Javadi-Abhari, D. Moreira, P. Nation, B. Paulovicks, E. Winston, C. J. Wood, J. Wootton, and J. M. Gambetta, Qiskit backend specifications for openqasm and openpulse experiments, (2018), arXiv:1809.03452. G. Aleksandrowiczら, Qiskit :
- [97]
- [98]

- [61] *Numerical Optimization* (Springer New York, 2006).
- [62] G. Feng, F. H. Cho, H. Katiyar, J. Li, D. Lu, J. Baugh, and R. Laflamme, Gradient-based closed-loop quantum optimal control in a solid-state two-qubit system, *Phys. Rev. A* **98**, 052341 (2018).
- [63] J. Kelly, P. O’Malley, M. Neeley, H. Neven, and J. M. Martinis, Physical qubit calibration on a directed acyclic graph, (2018), [arXiv:1803.03226](#).
- [64] P. C. Mahalanobis, On the generalized distance in statistics (National Institute of Science of India, 1936) p. 49–55.
- [65] S. G. Schirmer and D. K. L. Oi, Quantum system identification by bayesian analysis of noisy data: Beyond hamiltonian tomography, *Laser Phys.* **20**, 1203 (2010).
- [66] M. P. V. Stenberg, Y. R. Sanders, and F. K. Wilhelm, Efficient estimation of resonant coupling between quantum systems, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 210404 (2014).
- [67] M. P. V. Stenberg, O. Köhn, and F. K. Wilhelm, Characterization of decohering quantum systems: Machine learning approach, *Phys. Rev. A* **93**, 012122 (2016).
- [68] M. P. V. Stenberg and F. K. Wilhelm, Simultaneous model selection and parameter estimation: A superconducting qubit coupled to a bath of incoherent two-level systems, *Phys. Rev. A* **94**, 052119 (2016).
- [69] A. Sergeevich, A. Chandran, J. Combes, S. D. Bartlett, and H. M. Wiseman, Characterization of a qubit hamiltonian using adaptive measurements in a fixed basis, *Phys. Rev. A* **84**, 052315 (2011).
- [70] N. Wiebe, C. Granade, C. Ferrie, and D. G. Cory, Hamiltonian learning and certification using quantum resources, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 190501 (2014).
- [71] N. Wiebe, C. Granade, C. Ferrie, and D. Cory, Quantum hamiltonian learning using imperfect quantum resources, *Phys. Rev. A* **89**, 042314 (2014).
- [72] N. Wiebe, C. Granade, and D. G. Cory, Quantum bootstrapping via compressed quantum hamiltonian learning, *New J. Phys.* **17**, 022005 (2015).
- [73] J. Wang, S. Paesani, R. Santagati, S. Knauer, A. A. Gentile, N. Wiebe, M. Petruzzella, J. L. O’Brien, J. G. Rarity, A. Laing, *et al.*, Experimental quantum hamiltonian learning, *Nat. Phys.* **13**, 551 (2017).
- [74] J. H. Cole, S. G. Schirmer, A. D. Greentree, C. J. Wellard, D. K. L. Oi, and L. C. L. Hollenberg, Identifying an experimental two-state hamiltonian to arbitrary accuracy, *Phys. Rev. A* **71**, 062312 (2005).
- [75] C. E. Granade, C. Ferrie, N. Wiebe, and D. G. Cory, Robust online hamiltonian learning, *New J. Phys.* **14**, 103013 (2012).
- [76] M. Krenn, M. Malik, R. Fickler, R. Lapkiewicz, and A. Zeilinger, Automated search for new quantum experiments, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 090405 (2016).
- [77] A. A. Melnikov, H. P. Nautrup, M. Krenn, V. Dunjko, M. Tiersch, A. Zeilinger, and H. J. Briegel, Active learning machine learns to create new quantum experiments, *Proceedings of the National Academy of Sciences* **115**, 1221 (2018).
- [78] M. Krenn, M. Erhard, and A. Zeilinger, Computer-inspired quantum experiments, *Nature Reviews Physics* **2**, 649 (2020).
- [79] A. A. Gentile, B. Flynn, S. Knauer, N. Wiebe, S. Paesani, C. E. Granade, J. G. Rarity, R. Santagati, and A. Laing, Learning models of quantum systems from experiments, *Nature Physics* **17**, 837 (2021).
- [80] T. J. Evans, R. Harper, and S. T. Flammia, Scalable bayesian hamiltonian learning, (2019), [arXiv:1912.07636](#).
- [81] J. F. Ralph, S. Maskell, and K. Jacobs, Multiparameter estimation along quantum trajectories with sequential monte carlo methods, *Phys. Rev. A* **96**, 052306 (2017).
- [82] R. L. Kosut and H. Rabitz, Identification of quantum systems, *IFAC Proceedings Volumes* **35**, 397 (2002).
- [83] S. G. Schirmer, A. Kolli, and D. K. L. Oi, Experimental hamiltonian identification for controlled two-level systems, *Phys. Rev. A* **69**, 050306(R) (2004).
- [84] D. K. L. Oi and S. G. Schirmer, Quantum system characterization with limited resources, *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **370**, 5386 (2012).
- [85] D. Burgarth and K. Yuasa, Quantum system identification, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 080502 (2012).
- [86] J. Zhang and M. Sarovar, Identification of open quantum systems from observable time traces, *Phys. Rev. A* **91**, 052121 (2015).
- [87] S.-Y. Hou, H. Li, and G.-L. Long, Experimental quantum hamiltonian identification from measurement time traces, *Science Bulletin* **62**, 863 (2017).
- [88] A. Shabani, M. Mohseni, S. Lloyd, R. L. Kosut, and H. Rabitz, Estimation of many-body quantum hamiltonians via compressive sensing, *Phys. Rev. A* **84**, 012107 (2011).
- [89] K. Rudinger and R. Joynt, Compressed sensing for hamiltonian reconstruction, *Phys. Rev. A* **92**, 052322 (2015).
- [90] B. Lusch, J. N. Kutz, and S. L. Brunton, Deep learning for universal linear embeddings of nonlinear dynamics, *Nat. Commun.* **9**, 1 (2018).
- [91] E. Flurin, L. S. Martin, S. Hacohen-Gourgy, and I. Siddiqi, Using a recurrent neural network to reconstruct quantum dynamics of a superconducting qubit from physical observations, *Phys. Rev. X* **10**, 011006 (2020).
- [92] M. Dalgaard, F. Motzoi, J. J. Sørensen, and J. Sherison, Global optimization of quantum dynamics with alphazero deep exploration, *npj Quantum Inf.* **6**, 10.1038/s41534-019-0241-0 (2020).
- [93] S. Krastanov, S. Zhou, S. T. Flammia, and L. Jiang, Stochastic estimation of dynamical variables, *Quantum Science and Technology* **4**, 035003 (2019).
- [94] D. C. McKay, T. Alexander, L. Bello, M. J. Biercuk, L. Bishop, J. Chen, J. M. Chow, A. D. Cárcoles, D. Egger, S. Filipp, J. Gomez, M. Hush, A. Javadi-Abhari, D. Moreda, P. Nation, B. Paulovicks, E. Winston, C. J. Wood, J. Wootton, and J. M. Gambetta, Qiskit backend specifications for openqasm and openpulse experiments, (2018), [arXiv:1809.03452](#).
- [95] G. Aleksandrowicz *et al.*, *Qiskit: An Open-source Framework for Quantum Computing* (2019).
- [96] B. P. MacLeod, F. G. L. Parlane, T. D. Morrissey, F. Häse, L. M. Roch, K. E. Dettelbach, R. Moreira, L. P. E. Yunker, M. B. Rooney, J. R. Deeth, V. Lai, G. J. Ng, H. Situ, R. H. Zhang, M. S. Elliott, T. H. Haley, D. J. Dvorak, A. Aspuru-Guzik, J. E. Hein, and C. P. Berlinguette, Self-driving laboratory for accelerated discovery of thin-film materials, *Sci. Adv.* **6**, 10.1126/sci-adv.aaz8867 (2020).
- [97] I. I. Rabi, Space quantization in a gyrating magnetic field, *Phys. Rev.* **51**, 652 (1937).
- [98] N. F. Ramsey, A molecular beam resonance method with separated oscillating fields, *Phys. Rev.* **78**, 695

- (1950).
- [99] E. L. Hahn, Spin echoes, *Phys. Rev.* **80**, 580 (1950).
- [100] B. Pokharel, N. Anand, B. Fortman, and D. A. Lidar, Demonstration of fidelity improvement using dynamical decoupling with superconducting qubits, *Phys. Rev. Lett.* **121**, 220502 (2018).
- [101] C. Ferrie, C. Granade, G. Paz-Silva, and H. M. Wiseman, Bayesian quantum noise spectroscopy, *New J. Phys.* **20**, 123005 (2018).
- [102] M. A. Rol, L. Ciocia, F. K. Malinowski, B. M. Tarasinski, R. E. Sagastizabal, C. C. Bultink, Y. Salathe, N. Haandbaek, J. Sedivy, and L. DiCarlo, Time-domain characterization and correction of on-chip distortion of control pulses in a quantum processor, *Appl. Phys. Lett.* **116**, 054001 (2020).
- [103] J. P. G. van Dijk, E. Kawakami, R. N. Schouten, M. Veldhorst, L. M. K. Vandersypen, M. Babaie, E. Charbon, and F. Sebastian, Impact of classical control electronics on qubit fidelity, *Phys. Rev. Applied* **12**, 044054 (2019).
- [104] M. Jerger, A. Kulikov, Z. Vasselin, and A. Fedorov, In situ characterization of qubit control lines: a qubit as a vector network analyzer, *Phys. Rev. Lett.* **123**, 150501 (2019).
- [105] I. N. Hincks, C. E. Granade, T. W. Borneman, and D. G. Cory, Controlling quantum devices with nonlinear hardware, *Phys. Rev. Applied* **4**, 024012 (2015).
- [106] S. Gustavsson, O. Zwier, J. Bylander, F. Yan, F. Yoshihara, Y. Nakamura, T. P. Orlando, and W. D. Oliver, Improving quantum gate fidelities by using a qubit to measure microwave pulse distortions, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 040502 (2013).
- [107] R. S. Gupta, C. L. Edmunds, A. R. Milne, C. Hempel, and M. J. Biercuk, Adaptive characterization of spatially inhomogeneous fields and errors in qubit registers, *npj Quantum Information* **6**, 53 (2020).
- [108] R. Harper, S. T. Flammia, and J. J. Wallman, Efficient learning of quantum noise, *Nature Physics* **16**, 1184 (2020).
- [109] J. Kelly, R. Barends, A. G. Fowler, A. Megrant, E. Jeffrey, T. C. White, D. Sank, J. Y. Mutus, B. Campbell, Y. Chen, *et al.*, Scalable in situ qubit calibration during repetitive error detection, *Phys. Rev. A* **94**, 032321 (2016).
- [110] L. Casparis, T. W. Larsen, M. S. Olsen, F. Kuemmeth, P. Krogstrup, J. Nygård, K. D. Petersson, and C. M. Marcus, Gatemon benchmarking and two-qubit operations, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 150505 (2016).
- [111] C. Miquel, J. P. Paz, and W. H. Zurek, Quantum computation with phase drift errors, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 3971 (1997).
- [112] R. C. Bialczak, R. McDermott, M. Ansmann, M. Hofheinz, N. Katz, E. Lucero, M. Neeley, A. D. O'Connell, H. Wang, A. N. Cleland, and J. M. Martinis, $1/f$ flux noise in josephson phase qubits, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 187006 (2007).
- [113] J. J. Burnett, A. Bengtsson, M. Scigliuzzo, D. Niepce, M. Kudra, P. Delsing, and J. Bylander, Decoherence benchmarking of superconducting qubits, *npj Quantum Inf.* **5**, 1 (2019).
- [114] M. Y. Niu, V. Smelyanskyi, P. Klimov, S. Boixo, R. Barends, J. Kelly, Y. Chen, K. Arya, B. Burkett, D. Bacon, Z. Chen, B. Chiaro, R. Collins, A. Dunsworth, B. Foxen, A. Fowler, C. Gidney, An Open-source Framework for Quantum Computing (2019). B. P. MacLeod, F. G. L. Parlane, T. D. Morrissey, F. Häse, L. M. Roch, K. E. Dettelbach, R. Moreira, L. P. E. Yunker, M. B. Rooney, J. R. Deeth, V. Lai, G. J. Ng, H. Situ, R. H. Zhang, M. S. Elliott, T. H. Haley, D. J. Dvorak, A. Aspru-Guzik, J. E. Hein, and C. P. Berlinguette, Self-driving laboratory for accelerated discovery of thin-film materials, *Sci. Adv.* **6**, 10.1126/sciadv.aaz8867 (2020).
- [115] ピ、旋回磁場における空間量子化、*Phys. Rev.* **51**, 652 (1937).
- [116] N. F. Ramsey, A molecular beam resonance method with separated oscillating fields, *Phys. Rev.* **78**, 695 M. Giustina, R. Graff, T. Huang, E. Jeffrey, D. Landhuis, E. Lucero, A. Megrant, J. Mutus, X. Mi, O. Naaman, M. Neeley, C. Neill, C. Quintana, P. Roushan, J. M. Martinis, and H. Neven, Learning non-markovian quantum noise from moiré-enhanced spectroscopy with deep evolutionary algorithm, (2019), arXiv:1912.04368. A. Zhang, J. Xie, H. Xu, K. Zheng, H. Zhang, Y. T. Poon, V. Vedral, and L. Zhang, Experimental self-characterization of quantum measurements, *Phys. Rev. Lett.* **124**, 040402 (2020).
- [117] P. Mundada, G. Zhang, T. Hazard, and A. Houck, Suppression of qubit crosstalk in a tunable coupling superconducting circuit, *Phys. Rev. Appl.* **12**, 054023 (2019).
- [118] P. Murali, D. C. McKay, M. Martonosi, and A. Javadi Abhari, Software mitigation of crosstalk on noisy intermediate-scale quantum computers, *Proceedings of the Twenty-Fifth International Conference on Architectural Support for Programming Languages and Operating System*, ASPLOS '20, 1001–1016 (2020).
- [119] D. Burgarth, K. Maruyama, and F. Nori, Coupling strength estimation for spin chains despite restricted access, *Phys. Rev. A* **79**, 020305(R) (2009). (注1)本論文は、(注2)本論文の一部であり、(注3)本論文は、(注4)本論文の一部である。102, 187203 (2009).
- [120] L. E. De Clercq, R. Oswald, C. Flühmann, B. Keitch, D. Kienzler, H.-Y. Lo, M. Marinelli, D. Nadlinger, V. Negnevitsky, および J. P. Home, Estimation of a general time-dependent hamiltonian for a single qubit, *Nat. Commun.* **7**, 1 (2016).
- [121] A. Sone and P. Cappellaro, Hamiltonian identifiability assisted by a single-probe measurement, *Phys. Rev. A* **95**, 022335 (2017).
- [122] P. Yang, M. Yu, R. Betzholz, C. Arenz, and J. Cai, Complete quantum-state tomography with a local random field, *Phys. Rev. Lett.* **124**, 010405 (2020).
- [123] J. A. Nelder and R. Mead, A simplex method for function minimization, *The Computer Journal* **7**, 308 (1965).
- [124] L. Han and M. Neumann, Effect of dimensionality on the nelder-mead simplex method, *Optim. Method. Softw.* **21**, 1 (2006).
- [125] J. Rapin, M. Gallagher, P. Kerschke, M. Preuss, and O. Teytaud, Exploring the mlda benchmark on the nevergrad platform, in *Proceedings of the Genetic and Evolutionary Computation Conference Companion*, GECCO '19 (Association for Computing Machinery, New York, NY, USA, 2019) p. 1888–1896.
- [126] M. A. Rol, C. Dickel, S. Asaad, N. K. Langford, C. C. Bultink, R. Sagastizabal, N. K. Langford, G. de Lange, X. Fu, S. R. de Jong, F. Luthi, W. Vlothuizen, and M. S. Moreira, Pycqed Py3 (2019). Labber.org, Labber – software for instrument control and lab automation (2020).
- [127] C. J. Kalkman, Labview: データ取得、データ解析、機器制御のためのソフトウェアシステム、*J. Clin. Monit.* **11**, 51 (1995).
- [128] D. E. Rumelhart, G. E. Hinton, and R. J. Williams, Learning representations by back-propagating errors, *Nature* **323**, 533 (1986).
- [129] M. Abdelhafez, D. I. Schuster, and J. Koch, Gradientbased optimal control of open quantum systems using quantum trajectories and automatic differentiation, *Phys. Rev. A* **99**, 052327 (2019).
- [130]

- (1950).
- [99] E. L. Hahn, Spin echoes, *Phys. Rev.* **80**, 580 (1950).
- [100] B. Pokharel, N. Anand, B. Fortman, and D. A. Lidar, Demonstration of fidelity improvement using dynamical decoupling with superconducting qubits, *Phys. Rev. Lett.* **121**, 220502 (2018).
- [101] C. Ferrie, C. Granade, G. Paz-Silva, and H. M. Wiseman, Bayesian quantum noise spectroscopy, *New J. Phys.* **20**, 123005 (2018).
- [102] M. A. Rol, L. Ciociaro, F. K. Malinowski, B. M. Tarasinski, R. E. Sagastizabal, C. C. Bultink, Y. Salathe, N. Haandbaek, J. Sedivy, and L. DiCarlo, Time-domain characterization and correction of on-chip distortion of control pulses in a quantum processor, *Appl. Phys. Lett.* **116**, 054001 (2020).
- [103] J. P. G. van Dijk, E. Kawakami, R. N. Schouten, M. Veldhorst, L. M. K. Vandersypen, M. Babaie, E. Charbon, and F. Sebastian, Impact of classical control electronics on qubit fidelity, *Phys. Rev. Applied* **12**, 044054 (2019).
- [104] M. Jerger, A. Kulikov, Z. Vasselin, and A. Fedorov, In situ characterization of qubit control lines: a qubit as a vector network analyzer, *Phys. Rev. Lett.* **123**, 150501 (2019).
- [105] I. N. Hincks, C. E. Granade, T. W. Borneman, and D. G. Cory, Controlling quantum devices with nonlinear hardware, *Phys. Rev. Applied* **4**, 024012 (2015).
- [106] S. Gustavsson, O. Zwier, J. Bylander, F. Yan, F. Yoshihara, Y. Nakamura, T. P. Orlando, and W. D. Oliver, Improving quantum gate fidelities by using a qubit to measure microwave pulse distortions, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 040502 (2013).
- [107] R. S. Gupta, C. L. Edmunds, A. R. Milne, C. Hempel, and M. J. Biercuk, Adaptive characterization of spatially inhomogeneous fields and errors in qubit registers, *npj Quantum Information* **6**, 53 (2020).
- [108] R. Harper, S. T. Flammia, and J. J. Wallman, Efficient learning of quantum noise, *Nature Physics* **16**, 1184 (2020).
- [109] J. Kelly, R. Barends, A. G. Fowler, A. Megrant, E. Jeffrey, T. C. White, D. Sank, J. Y. Mutus, B. Campbell, Y. Chen, *et al.*, Scalable in situ qubit calibration during repetitive error detection, *Phys. Rev. A* **94**, 032321 (2016).
- [110] L. Casparis, T. W. Larsen, M. S. Olsen, F. Kuemmeth, P. Krogstrup, J. Nygård, K. D. Petersson, and C. M. Marcus, Gatemon benchmarking and two-qubit operations, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 150505 (2016).
- [111] C. Miquel, J. P. Paz, and W. H. Zurek, Quantum computation with phase drift errors, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 3971 (1997).
- [112] R. C. Bialczak, R. McDermott, M. Ansmann, M. Hofheinz, N. Katz, E. Lucero, M. Neeley, A. D. O’Connell, H. Wang, A. N. Cleland, and J. M. Martinis, 1/f flux noise in josephson phase qubits, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 187006 (2007).
- [113] J. J. Burnett, A. Bengtsson, M. Scigliuzzo, D. Niepce, M. Kudra, P. Delsing, and J. Bylander, Decoherence benchmarking of superconducting qubits, *npj Quantum Inf.* **5**, 1 (2019).
- [114] M. Y. Niu, V. Smelyanskyi, P. Klimov, S. Boixo, R. Barends, J. Kelly, Y. Chen, K. Arya, B. Burkett, D. Bacon, Z. Chen, B. Chiaro, R. Collins, A. Dunsworth, B. Foxen, A. Fowler, C. Gidney, M. Giustina, R. Graff, T. Huang, E. Jeffrey, D. Landhuis, E. Lucero, A. Megrant, J. Mutus, X. Mi, O. Naaman, M. Neeley, C. Neill, C. Quintana, P. Roushan, J. M. Martinis, and H. Neven, Learning non-markovian quantum noise from moiré-enhanced swap spectroscopy with deep evolutionary algorithm, (2019), [arXiv:1912.04368](https://arxiv.org/abs/1912.04368).
- [115] A. Zhang, J. Xie, H. Xu, K. Zheng, H. Zhang, Y.-T. Poon, V. Vedral, and L. Zhang, Experimental self-characterization of quantum measurements, *Phys. Rev. Lett.* **124**, 040402 (2020).
- [116] P. Mundada, G. Zhang, T. Hazard, and A. Houck, Suppression of qubit crosstalk in a tunable coupling superconducting circuit, *Phys. Rev. Appl* **12**, 054023 (2019).
- [117] P. Murali, D. C. McKay, M. Martonosi, and A. Javadi-Abhari, Software mitigation of crosstalk on noisy intermediate-scale quantum computers, *Proceedings of the Twenty-Fifth International Conference on Architectural Support for Programming Languages and Operating Systems*, ASPLOS ’20, 1001–1016 (2020).
- [118] D. Burgarth, K. Maruyama, and F. Nori, Coupling strength estimation for spin chains despite restricted access, *Phys. Rev. A* **79**, 020305(R) (2009).
- [119] C. Di Franco, M. Paternostro, and M. S. Kim, Hamiltonian tomography in an access-limited setting without state initialization, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 187203 (2009).
- [120] L. E. De Clercq, R. Oswald, C. Flühmann, B. Keitch, D. Kienzler, H.-Y. Lo, M. Marinelli, D. Nadlinger, V. Negnevitsky, and J. P. Home, Estimation of a general time-dependent hamiltonian for a single qubit, *Nat. Commun.* **7**, 1 (2016).
- [121] A. Sone and P. Cappellaro, Hamiltonian identifiability assisted by a single-probe measurement, *Phys. Rev. A* **95**, 022335 (2017).
- [122] P. Yang, M. Yu, R. Betzholz, C. Arenz, and J. Cai, Complete quantum-state tomography with a local random field, *Phys. Rev. Lett.* **124**, 010405 (2020).
- [123] J. A. Nelder and R. Mead, A simplex method for function minimization, *The Computer Journal* **7**, 308 (1965).
- [124] L. Han and M. Neumann, Effect of dimensionality on the nelder-mead simplex method, *Optim. Method. Softw.* **21**, 1 (2006).
- [125] J. Rapin, M. Gallagher, P. Kerschke, M. Preuss, and O. Teytaud, Exploring the mlda benchmark on the nevergrad platform, in *Proceedings of the Genetic and Evolutionary Computation Conference Companion*, GECCO ’19 (Association for Computing Machinery, New York, NY, USA, 2019) p. 1888–1896.
- [126] M. A. Rol, C. Dickel, S. Asaad, N. K. Langford, C. C. Bultink, R. Sagastizabal, N. K. Langford, G. de Lange, X. Fu, S. R. de Jong, F. Luthi, W. Vlothuizen, and M. S. Moreira, *Pycqed-py3* (2019).
- [127] Labber.org, *Labber – software for instrument control and lab automation* (2020).
- [128] C. J. Kalkman, Labview: A software system for data acquisition, data analysis, and instrument control, *J. Clin. Monit.* **11**, 51 (1995).
- [129] D. E. Rumelhart, G. E. Hinton, and R. J. Williams, Learning representations by back-propagating errors, *Nature* **323**, 533 (1986).
- [130] M. Abdelhafez, D. I. Schuster, and J. Koch, Gradient-based optimal control of open quantum systems using quantum trajectories and automatic differentiation, *Phys. Rev. A* **99**, 052327 (2019).

- [131] D. Willsch, M. Nocon, F. Jin, H. De Raedt, and K. Michielsen, Gate-error analysis in simulations of quantum computers with transmon qubits, Phys. Rev. A 96, 062302 (2017). [132] D. Willsch, M. Willsch, F. Jin, H. De Raedt, and K. Michielsen, Testing quantum fault tolerance on small systems, Phys. Rev. A 98, 052348 (2018). [133] D. Willsch, Supercomputer simulations of transmon quantum computers, Dissertation, RWTH Aachen University, Aachen (2020), veröffentlicht auf dem Publikationsserver der RWTH Aachen University; Dissertation, RWTH Aachen University, 2020.

- [131] D. Willsch, M. Nocon, F. Jin, H. De Raedt, and K. Michelsen, Gate-error analysis in simulations of quantum computers with transmon qubits, *Phys. Rev. A* **96**, 062302 (2017).
- [132] D. Willsch, M. Willsch, F. Jin, H. De Raedt, and K. Michelsen, Testing quantum fault tolerance on small systems, *Phys. Rev. A* **98**, 052348 (2018).
- [133] D. Willsch, *Supercomputer simulations of transmon quantum computers*, Dissertation, RWTH Aachen University, Aachen (2020), veröffentlicht auf dem Publikationsserver der RWTH Aachen University; Dissertation, RWTH Aachen University, 2020.