

氏 名 林 碧惟

学位(専攻分野) 博士(情報学)

学位記番号 総研大甲第 2662 号

学位授与の日付 2026 年 3 月 24 日

学位授与の要件 複合科学研究科 情報学専攻  
学位規則第6条第1項該当

学位論文題目 Characterizing and harnessing complex quantum dynamics for  
quantum machine learning

論文審査委員 主 査 添田 彬仁  
情報学コース 准教授  
宇野 毅明  
情報学コース 教授  
杉山 磨人  
情報学コース 准教授  
根本 香絵  
沖縄科学技術大学院大学  
量子アーキテクチャユニット 教授  
David Elkouss Coronas  
沖縄科学技術大学院大学  
ネットワーク型量子デバイスユニット 准教授

# 博士論文の要旨

氏 名：林 碧惟

論文題目：Characterizing and harnessing complex quantum dynamics for quantum machine learning

Quantum computation is a form of computation utilizing quantum mechanical phenomena. This idea originates from quantum simulation, that is, simulating quantum dynamics on a fully controllable quantum system, as it is generally a challenging task for classical digital computers. As of today, various nontrivial quantum dynamics that are almost intractable on classical computers have been realized experimentally, thanks to the rapid development of controllable quantum platforms within reach of thousands of physical quantum bits (qubits).

Towards more algorithmic tasks, a formal formulation of quantum computer was proposed in 1985, leading to novel quantum algorithms whose computation time scales better, with respect to the problem size, than the classical counterparts. Running these quantum algorithms requires advanced engineering in quantum systems, such as quantum error correction and fault-tolerant implementation of quantum logical gates to achieve accurate and reliable computation. It is, however, discussed that such engineering may prevent us from benefiting from those quantum algorithms in practice. This suggests, in addition to seeking faster quantum algorithms, the need to explore how to harness quantum systems more naturally without extensive engineering.

Quantum machine learning (QML) may be a promising information processing approach that can harness quantum systems without requiring extensive engineering. This is motivated by the fact that the success of neural networks has suggested the possibility of solving machine learning (ML) tasks more efficiently with non-digital computer designs. Several QML models that resemble neural networks utilize quantum systems in a manner distinct from digital quantum algorithms. However, training quantum systems in these models is fundamentally challenging, suggesting that it remains necessary to explore an alternative way of harnessing quantum systems for ML.

Along with this direction, the quantum reservoir model utilizes quantum systems in a unique way: nontrivial outputs from an untrained quantum system are exploited by a linear classical ML model to solve various tasks. Hence, the quantum part, referred to as the quantum reservoir, does not need to be programmable and can be

implemented using analog quantum dynamics. Although this significantly reduces the required engineering, designing quantum dynamics may still be necessary. Interestingly, without extensive engineering in the quantum reservoir, a quantum reservoir model was shown to be capable of performing nontrivial ML tasks, such as image classification, using physical dynamics as the reservoir, which had already been realized experimentally. Therefore, the quantum reservoir model should be one of the promising directions for pursuing another form of quantum information processing.

In this thesis, I investigate the computational capability of natural quantum dynamics in the quantum reservoir model framework. Important open questions in this context are (i) how well natural dynamics perform nontrivial ML tasks compared to engineered systems, and (ii) what kind of engineering in quantum dynamics is essential and appropriate for a given task. I address these questions through my four works, focusing on the quantum reservoir model that can solve image classification tasks.

In the first work, I investigate the learning performance of the quantum reservoir dynamics initially employed, known as the discrete time crystal (DTC) dynamics, in comparison to random quantum circuits, which require extensive engineering. This provides the baseline for tackling (i). I further characterize the quantum reservoir, thereby numerically revealing that a network property of the reservoir improves the test performance on these classification tasks.

In the second work, I show that the engineering required in the DTC dynamics can be further simplified without degrading high learning performance, revealing that the intrinsic dynamics in several quantum platforms, such as trapped ions and neutral atoms, are complex enough for the classification task. I also discuss the participation ratio, which is a well-known quantity in condensed-matter physics, and its meaning in classification tasks, thereby gaining insight into the learning behaviors of Hamiltonian dynamics.

In the third work, I investigate the impact of the qubit connectivity in a Hamiltonian on the learning performance. I show that, in the Hamiltonian, complex connectivity is not required for the classification task, in contrast to the Hamiltonians considered in the second work. This suggests the non-necessity of extensive engineering in other quantum platforms, such as superconducting qubits. I also numerically show that particular symmetries in a Hamiltonian can exhibit a tradeoff between model complexity and overfitting.

In the fourth work, I focus mainly on tackling the second question (ii), motivated by a machine learning theory, where the complexity of machine learning models is

quantified using data compression. I numerically show that, by compressing unitary matrices representing quantum dynamics, the learning behaviors of various quantum reservoirs can be explained, although there is an exception among our examples. I further develop the compression approach by discussing the significance of the classical representation of quantum objects. I then demonstrate that the approach has the potential to capture the reservoir complexity more reasonably. I finally discuss the operational interpretation of the complexity for quantum systems, suggesting appropriate engineering approaches to control model complexity.

These four works reveal that advanced engineering in quantum systems, such as random circuits, should not be required for solving ML tasks like the classification tasks considered in this thesis, suggesting the rich computational capability of natural quantum dynamics without extensive engineering. The fourth work provides a potential guideline for appropriately designing quantum dynamics, which may pave the definitive way for further exploring and developing alternative forms of quantum information processing for ML.

Results of the Doctoral Thesis Defense

博士論文審査結果

Name in Full

氏名 林 碧惟

Title

論文題目 Characterizing and harnessing complex quantum dynamics for quantum machine learning

本学位論文は、「Characterizing and harnessing complex quantum dynamics for quantum machine learning」と題し、全8章から構成されている。まず、第1章「Introduction」では、論文全体の導入と研究の動機が説明され、量子情報システムを実現するために必要な工学的複雑性と情報処理的実用性の関連について述べている。特に、デジタル量子コンピュータと呼ばれる量子情報システムには特定の問題に対して高い情報処理能力を発揮することが期待されている一方で、その技術的要件の高さ由来する実現困難性が存在することに言及し、量子情報システムへの技術的要件を抑えつつも、効率的な情報処理の実現の必要性について述べている。その観点から、ある種の量子機械学習モデル (quantum reservoir model) が有力な候補になる可能性について言及し、本論文の議論における方向性と具体的な章立てについて説明されている。

第2章「Preliminaries」では、必要な前提知識について解説がなされている。特に、量子情報の基礎理論の数理や量子力学の理論的枠組みについて解説し、Haar ランダムユニタリ、t-デザイン、ヒルベルト空間上のネットワークなど量子情報の中でも専門的な概念について説明がなされている。

第3章「Classical and quantum machine learning」では、古典と量子の機械学習について概観を述べている。教師あり学習とニューラルネットワークについて、本論文を理解する上で必要な粒度で解説したのち、過学習の問題についても説明している。以上は、標準的な機械学習の文脈を前提としているため、本論文での主題である量子機械学習と対比させて、古典機械学習と呼んでいる。量子機械学習に関しては、その中でも量子系を feature map として扱う方向性に着目し、まず機械学習の問題を量子情報システムに入力する際の符号化について言及している。その後、quantum circuit learning (QCL) を解説し、それに対する形で quantum reservoir model としての quantum extreme learning machine (QELM) と quantum reservoir computing (QRC) が導入されている。最後に、QELM の入力の符号化を principal component analysis (PCA) と量子情報システム上比較的実装が簡単とみなされている単一量子ビット操作の組み合わせで行う quantum extreme reservoir computation (QERC) が詳細に導入されている。

第4章「Impact of the form of weighted networks on the learning performance of QERC」では、量子ダイナミクスをハミルトニアンで記述した際に現れる係数によるネットワークの重みの分布が QERC の学習性能にもたらす影響に関しての解析結果と考察が述べられている。まず、ある quantum reservoir が与えられた時の、QERC としての性能を決定づける特徴の候補として、quantum reservoir の量子ダイナミクスを表現するユニタリ行列の特徴づけを行っている。これはユニタリ行列の自然対数をとったものから導出されるエルミート行列の要素に着目し、それをヒルベルト空間上のネットワークの重みとみなす。この重みの分布を Haar ランダムユニタリ、Cauchy ランダムユニタリ、離散時間結晶 (DTC) に相当する量子ダイナミクス、さらに無秩序 DTC (DDTC) につい

て解析し、DTC や DDTC が Haar ランダムユニタリ、Cauchy ランダムユニタリと同様の分布を示すことが報告されている。また、それぞれの quantum reservoir model について MNIST と Fashion MNIST に関して学習性能を調査し、同程度の性能が達成できていることを報告している。なお、それぞれのモデルについて過学習の度合いについても調査しており、重み分布の裾の長さについての関連性について報告されている。

第 5 章「Two-body Hamiltonian dynamics as a powerful quantum reservoir」では、第 4 章で検討した DTC をさらに単純化し、二体相互作用のみからなる Ising 型ハミルトニアンに基づくアナログ量子ダイナミクスを quantum reservoir として用いた場合の学習性能が体系的に検討されている。具体的には、ZZ 型・XX 型 Ising モデルやその変種、およびいくつかのデジタル量子計算的量子機械学習モデルとの比較を通じて、二体相互作用に基づく自然なハミルトニアン動力学であっても、画像分類タスクにおいて高い性能を示し得ることが示された。また、第 5.3 節では量子状態集合の participation ratio を導入し、quantum reservoir が生成する状態のヒルベルト空間内での有効な広がりや学習性能との関係が解析され、過度なランダム性や Haar ランダム性を必要とせずとも、適度に広がった状態分布が良好な性能に寄与する可能性を強く示唆している。

第 6 章「Roles of the interaction network of qubits and symmetries in QERC」では、quantum reservoir を構成する相互作用ネットワークの構造およびハミルトニアンの対称性が、QERC の学習性能に与える影響が詳細に検討されている。具体的には、XY 模型をグラフ上で定義した量子ダイナミクスを用い、ユニタリ写像の周期性、スペクトル構造、ブロック対角化構造といった性質と学習性能との関係が数値的に解析された。その結果、対称性に起因する過度な周期性や大きなブロック構造は、quantum reservoir の有効自由度を制限し、学習性能を劣化させ得る一方で、ブロック構造を適度に分割したり小さな摂動を加えたりすることで性能が改善されることが示された。

第 7 章「The quantum reservoir complexity by data compression」では、QERC に用いられる量子ダイナミクスの複雑性を評価する新たな視点として、quantum reservoir の表現の圧縮可能性に基づく情報論的指標が導入されている。具体的には、quantum reservoir を表すユニタリ行列やそれにより生成される状態集合をデータ圧縮の観点から評価し、その圧縮複雑性と学習性能との関係が解析された。行列表現や行列積状態 (MPS) による近似を通じて、量子ダイナミクスが適度な複雑性を持つときに高い学習性能が得られることが示され、従来の物理量 (エンタングルメント量やランダム性) とは異なる軸で quantum reservoir の能力を特徴づけられる可能性が示唆された。

第 8 章「Conclusion」では、本論文全体の成果が総括され、自然な量子ダイナミクスが QRC において有効な計算資源となり得ることが改めて強調されている。特に、過度に工学的に設計された量子回路を必要とせず、物理的に実現可能なハミルトニアンの性質を適切に評価・制御することの重要性が示された。併せて、将来の量子機械学習および実機量子デバイスへの展開に向けた展望が述べられている。

公開発表会では博士論文の章立てに従って発表が行われ、その後に行われた論文審査会及び口述試験では、審査員からの質疑に対して適切に回答がなされた。質疑応答後に審査委員会を開催し、審査委員で議論を行った。審査委員会では、出願者の博士研究が、QRC における学習性能を、実際に学習を実行して評価するのみならず、quantum reservoir を構成する量子ダイナミクスの特徴量から予測・理解しようとする点において、独創性が高く野心的な試みであることが高く評価された。特に、量子ダイナミクスをヒルベルト空間上のネットワークとして捉える新たな解析手法を導入すること

により、量子過程が機械学習性能に寄与するメカニズムを明らかにし、設計指針として活用可能であることを示した点は、量子機械学習分野における重要な貢献であると評価された。

以上を要するに本学位論文は、**QRC** における性能発現の機構を理論的・定量的に明らかにし、それに基づく量子機械学習モデルの設計可能性を示したものであり、量子情報、機械学習および複雑系科学の融合的発展に貢献しているという点で学術的価値が大きい。また、本学位論文の成果は、学術雑誌論文 5 件および、査読付き国際会議発表 3 件として発表され、社会的な評価も得ている。以上の理由により、審査委員会は、本学位論文が学位の授与に値すると判断した。