

АНАЛИЗ СЛОЖНОСТИ АЛГОРИТМОВ ДЛЯ КВАНТОВЫХ НЕЙРОСЕТЕЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТЕНЗОРНЫХ СЕТЕЙ

Ежицкая Дарья Дмитриевна

Сочинский государственный университет
gubinadd18@gmail.com

COMPLEXITY ANALYSIS OF ALGORITHMS FOR QUANTUM NEURAL NETWORKS USING TENSOR NETWORKS

D. Ezhitskaya

Summary. This paper provides a comprehensive analysis of the computational complexity of algorithms underlying quantum neural networks (QNNs) using tensor network (TN) frameworks. QNNs represent a promising hybrid approach that combines the principles of quantum computing and machine learning, but their theoretical underpinnings and understanding of their superiority over classical analogs remain underdeveloped. We demonstrate that tensor networks, as a powerful tool for compactly representing multi-qubit quantum states, provide a natural and effective formalism for analyzing the expressiveness and training complexity of QNNs. The paper formalizes the relationship between QNN architectures and specific TN types (such as matrix product states (MPS) and tree tensor networks (TTNs)). Based on this, a detailed analysis of the capacity characteristics and computational complexity of forward and backward propagation operations is conducted for various QNN topologies. It has been shown that the key parameter determining complexity is the so-called «connectivity» of a quantum circuit, which directly correlates with the maximum connectivity of the corresponding deep neural network. It has been theoretically and numerically substantiated that quantum neural networks corresponding to finite-connectivity networks (e.g., MPS) can be efficiently simulated on classical computers, narrowing the potential range of problems where quantum supremacy can be expected. At the same time, a class of problems related to the modeling of highly entangled quantum systems or solving certain optimization problems has been identified, where quantum neural networks with moderate connectivity demonstrate a theoretical advantage over classical deep neural networks. The results of this study allow us to formulate criteria for designing effective quantum neural networks and identify promising areas for achieving practical quantum supremacy in machine learning.

Keywords: quantum neural networks, tensor networks, matrix product states, computational complexity, quantum machine learning, expressiveness, connectivity, quantum supremacy.

Аннотация. В данной работе проводится всесторонний анализ вычислительной сложности алгоритмов, лежащих в основе квантовых нейросетей (КНС), с привлечением аппарата тензорных сетей (ТС). КНС представляют собой перспективный гибридный подход, объединяющий принципы квантовых вычислений и машинного обучения, однако их теоретическое обоснование и понимание областей превосходства над классическими аналогами остаются недостаточно разработанными. Мы демонстрируем, что тензорные сети, являясь мощным инструментом для компактного представления многокубитных квантовых состояний, предоставляют естественный и эффективный формализм для анализа выразительной способности и сложности обучения КНС. В работе формализована связь между архитектурами КНС и конкретными типами ТС (такими как матричные продуктивные состояния — MPS, древовидные тензорные сети — TTN). На этой основе проведен детальный анализ емкостных характеристик и вычислительной сложности операций прямого и обратного распространения для различных топологий КНС. Показано, что ключевым параметром, определяющим сложность, является так называемая «связность» квантовой схемы, которая напрямую соотносится с максимальной связностью соответствующей ТС. Теоретически и численно обосновано, что КНС, соответствующие ТС с ограниченной связностью (например, MPS), могут быть эффективно смоделированы на классических компьютерах, что сужает потенциальный круг задач, где можно ожидать квантового превосходства. В то же время, выявлен класс задач, связанных с моделированием сильно запутанных квантовых систем или решением определенных оптимизационных проблем, где КНС со средней связностью демонстрируют теоретическое преимущество перед классическими глубокими сетями. Результаты работы позволяют сформулировать критерии для проектирования эффективных КНС и выделить перспективные направления для достижения практического квантового превосходства в машинном обучении.

Ключевые слова: квантовые нейросети, тензорные сети, матричные продуктивные состояния, вычислительная сложность, квантовое машинное обучение, выразительная способность, связность, квантовое превосходство.

Современное машинное обучение (МО), в особенности глубокое обучение, достигло значительных успехов в решении сложных задач, таких как распознавание образов, обработка естественного языка и игра в го [1]. Однако дальнейший прогресс упирается в фундаментальные ограничения классических вы-

числителей: экспоненциальный рост требуемых вычислительных ресурсов и объема данных для обучения моделей возрастающей сложности. В этом контексте квантовые вычисления предлагают принципиально новый подход, основанный на квантовой суперпозиции и запутанности, который потенциально может обеспе-

чить экспоненциальное ускорение для определенных классов алгоритмов [2].

Квантовые нейросети (КНС) сформировались в качестве гибридной парадигмы, которая использует параметризованные квантовые схемы (ПКС) в качестве аналогов классических нейронных сетей [3, с. 2]. Эти схемы состоят из последовательности квантовых гейтов, некоторые из которых параметризованы, и могут быть оптимизированы с помощью классических алгоритмов (например, градиентного спуска) для минимизации заданной функции потерь. Несмотря на растущее количество экспериментальных демонстраций, теоретическое понимание того, почему, когда и как КНС могут превосходить классические, остается фрагментарным. Ключевые вопросы касаются их **выразительной способности** (способности представлять сложные функции) и **сложности обучения** (вычислительных затрат на нахождение оптимальных параметров).

Параллельно, в области квантовой физики конденсированного состояния получил широкое распространение математический аппарат **тензорных сетей (ТС)** [5, с. 118]. ТС предоставляют компактное представление для определенных классов многокубитных квантовых состояний, эффективно факторизуя высокоразмерный тензор, описывающий состояние, в сеть меньших тензоров. Наиболее известными примерами являются матричные продуктные состояния (Matrix Product States, MPS) для одномерных систем и проективные анзацты спаренных пар (Projected Entangled Pair States, PEPS) для двумерных систем. Методы ТС позволяют эффективно моделировать системы с ограниченной запутанностью.

Недавние исследования показали глубокую связь между архитектурами КНС и ТС [7, с. 1; 8, с. 1]. Многие параметризованные квантовые схемы могут быть интерпретированы как конкретные типы ТС. Эта связь открывает мощный инструментарий для анализа КНС. Используя хорошо разработанную теорию ТС, можно количественно оценить выразительную способность КНС через призму запутанности, которую они могут генерировать, и проанализировать вычислительную сложность операций с ними.

Целью данной работы является систематический анализ сложности алгоритмов для КНС с использованием формализма тензорных сетей.

Задачи исследования:

1. Формализовать соответствие между различными архитектурами КНС и типами ТС (MPS, TTN).
2. Провести анализ емкостных характеристик (выразительной способности) КНС на основе понятия связности соответствующей ТС.

3. Оценить вычислительную сложность ключевых алгоритмических операций для КНС: вычисления амплитуд, прямого распространения и вычисления градиентов.
4. На основе анализа сложности сформулировать критерии и выделить классы задач, где КНС могут демонстрировать преимущество перед классическими нейросетями.

1. Теоретические основы: Квантовые нейросети и тензорные сети

1.1. Квантовые нейросети (КНС)

КНС можно представить как параметризованную квантовую схему $U(\vec{\theta})$, применяемую к начальному состоянию $|\psi_0\rangle$ (обычно $|0\rangle^{\otimes n}$), с последующим измерением для получения результата. Входные данные \vec{x} могут быть закодированы в квантовое состояние с помощью кодирующего слоя $U(\vec{x})$, а затем преобразованы параметризованной схемой $U(\vec{\theta})$.

$$|\psi(\vec{x}, \vec{\theta})\rangle = U(\vec{\theta})U(\vec{x})|0\rangle^{\otimes n}$$

Результатом схемы часто является математическое ожидание значения некоторого эрмитова оператора O (например, Z на определенном кубите):

$$f(\vec{x}, \vec{\theta}) = \langle \psi(\vec{x}, \vec{\theta}) | O | \psi(\vec{x}, \vec{\theta}) \rangle$$

Функция $f(\vec{x}, \vec{\theta})$ и играет роль модели машинного обучения, аналогичной классической нейросети. Обучение заключается в нахождении параметров $\vec{\theta}^*$, минимизирующих функцию потерь $\mathcal{L}(f(\vec{x}, \vec{\theta}), y)$ на заданном наборе данных $\{(\vec{x}_i, y_i)\}$

1.2. Тензорные сети (ТС)

Тензорная сеть — это графическое представление, где тензоры изображаются узлами, а их индексы (ранги) — ребрами. Соединение ребер между узлами обозначает операцию тензорного свертки (суммирования по общим индексам). Квантовое состояние n кубитов

$|\Psi\rangle = \sum_{s_1, \dots, s_n} \psi_{s_1, \dots, s_n} |s_1, \dots, s_n\rangle$ представляется как один тензор с n индексами. Для большинства состояний хранение этого тензора требует 2^n комплексных чисел.

Матричные Продуктные Состояния (MPS)

MPS факторизует n -индексный тензор в цепочку из n более мелких тензоров.

$$\Psi_{s_1, \dots, s_n} = \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_{n-1}} A_{\alpha_1}^{s_1} A_{\alpha_1 \alpha_2}^{s_2} \dots A_{\alpha_{n-1}}^{s_n}$$

Здесь s_i — физические индексы (спины/кубиты), а α_i — виртуальные индексы, связывающие соседние тензоры. Максимальная размерность виртуальных индексов \mathcal{X} называется **размерностью связи** (bond dimension). Она напрямую связана с количеством запутанности, которое может быть описано состоянием. Сложность хранения MPS составляет $O(n \cdot d \cdot \mathcal{X}^2)$, где d — размерность физического индекса (для кубитов $d = 2$).

Древовидные Тензорные Сети (TTN)

TTN обобщает MPS на древовидную структуру, что позволяет более эффективно описывать запутанность в системах с иерархической организацией.

Ключевая идея заключается в том, что любая квантовая схема, состоящая из двухкубитных гейтов, может быть представлена как ТС. Каждый гейт является тензором с 4 индексами (2 входных, 2 выходных), а вся схема — это контракция (свертка) всех этих тензоров.

2. Соответствие архитектур КНС и тензорных сетей

Архитектура КНС (последовательность и связность гейтов) напрямую определяет структуру соответствующей ТС.

- 1) **КНС с последовательной архитектурой** (Quantum Circuit Born Machines). Схемы, где гейты применяются последовательно к соседним кубитам, естественным образом отображаются на MPS с размерностью связи \mathcal{X} , растущей с глубиной схемы L . В пределе большой глубины \mathcal{X} может достигать $2^{\lfloor L/2 \rfloor}$, но для схем с ограниченной локальностью и глубиной, \mathcal{X} остается ограниченным полиномом от n .
- 2) **КНС с мерной архитектурой** (Tree Tensor Networks). Схемы, структура которых повторяет двоичное дерево, где гейты применяются к парам кубитов, а результаты агрегируются на следующих уровнях, в точности соответствуют TTN. Сложность симуляции такой схемы на классическом компьютере определяется шириной дерева и также полиномиальна от n для фиксированной глубины.
- 3) **КНС со случайной или полной связностью**. Схемы, где двухкубитные гейты могут связывать любые пары кубитов, порождают ТС с высокой связностью, которую трудно эффективно представить классически. В худшем случае такая схема соответствует тензору полного ранга, и ее симуляция требует $O(2^n)$ операций.

Определение 1. *Связность КНС* — это граф, узлы которого представляют кубиты, а ребра — двухкубитные гейты. Размерность связи \mathcal{X} соответствующей ТС является мерой максимальной запутанности, которую может создать схема между любым бисекцией этого графа.

Это соответствие позволяет нам перенести мощный аппарат анализа ТС на почву КНС.

3. Анализ емкостных характеристик и выразительной способности

Выразительная способность модели — это богатство семейства функций, которые она может представлять. Для КНС это напрямую связано с объемом гильбертова пространства, доступного схеме.

Теорема 1 (основанная на [7, 8]). Множество функций $f(\vec{x}, \vec{\theta})$, реализуемых КНС с архитектурой, соответствующей ТС с максимальной размерностью связи \mathcal{X} , является подмножеством функций, реализуемых классической нейросетью с числом параметров $O(\text{poly}(n) \cdot \text{poly}(\mathcal{X}))$.

Доказательство (схематично): КНС, соответствующая ТС с размерностью связи \mathcal{X} , может быть точно смулирована на классическом компьютере с затратами $O(\text{poly}(n) \cdot \text{poly}(\mathcal{X}))$. Классическая нейросеть достаточной ширины и глубины является универсальным аппроксиматором. Следовательно, существует классическая нейросеть с полиномиальным числом параметров, способная аппроксимировать такую КНС.

Следствие. КНС, которые могут быть эффективно представлены MPS или TTN (т.е. $\mathcal{X} = \text{poly}(n)$), не обладают экспоненциальным преимуществом в выразительной способности по сравнению с классическими нейросетями полиномиального размера. Их потенциальное преимущество может заключаться лишь в более эффективном **обучении** или в **индуктивном смещении**, благоприятном для определенных типов данных (например, квантовых).

Ограниченная размерность связи \mathcal{X} накладывает ограничение на запутанность, которую может создать схема. Функции, для вычисления которых требуется объем запутанности, экспоненциально растущий с n , не могут быть эффективно представлены КНС с полиномиальной \mathcal{X} .

4. Анализ вычислительной сложности алгоритмов для КНС

Используя формализм ТС, можно детально проанализировать сложность ключевых операций, необходимых для обучения КНС.

4.1. Сложность прямого распространения (вычисления ожидаемого значения)

Задача. Вычислить $f(\vec{x}, \vec{\theta}) = \langle \psi | O | \psi \rangle$ для данной КНС.

Решение: представить всю схему $|\psi\rangle$ в виде ТС и вычислить контракцию сети. Сложность определяется структурой графа ТС.

- 1) **Для КНС с 1D цепочечной архитектурой (MPS).** Контракция всей сети может быть выполнена последовательно с сложностью $O(n \cdot L \cdot d \cdot \chi^3)$. Здесь L — глубина схемы, $d = 2$. Это полиномиальная сложность.
- 2) **Для КНС с древовидной архитектурой (TTN).** Сложность контракции составляет $O(n \cdot \chi^w)$, где w — ширина дерева (максимальная степень узла). Для сбалансированного двоичного дерева $w = 2$, и сложность вновь полиномиальна $O(n \cdot \chi^4)$.
- 3) **Для КНС с полной связностью.** Граф ТС не имеет очевидной упорядоченной структуры. В худшем случае сложность точной контракции является экспоненциальной $O(2^n)$. На практике используются приближенные методы, но их точность падает с ростом n и связности.

Вывод: КНС, соответствующие ТС с ограниченной шириной дерева, могут быть эффективно смоделированы на классическом компьютере при прямом проходе.

4.2. Сложность вычисления градиентов

Для обучения КНС широко используется алгоритм параметрического правила сдвига [9], который позволяет выразить градиент функции потерь по параметру θ_i через разность двух ожидаемых значений:

$$\frac{\partial f}{\partial \theta_i} = \frac{1}{2} \left[f\left(\theta_i + \frac{\pi}{2}\right) - f\left(\theta_i - \frac{\pi}{2}\right) \right]$$

Таким образом, сложность вычисления одного градиента эквивалентна сложности двух прямых проходов. Следовательно, для КНС с полиномиальной сложностью прямого прохода, градиенты также могут быть вычислены за полиномиальное время на классическом компьютере.

Замечание. Хотя симуляция возможна, это не обязательно означает, что обучение классической модели-аналога будет столь же эффективным. КНС могут обладать более благоприятными ландшафтами функции потерь для определенных задач.

5. Области потенциального превосходства КНС

Проведенный анализ позволяет выделить сценарии, в которых КНС могут продемонстрировать преимущество:

1. **Моделирование квантовых систем.** Для задач, где данные по своей природе являются квантовыми (например, нахождение основного состояния гамильтониана), КНС с индуктивным смещением, отражающим физику системы (например, с архитектурой, аналогичной ТС для этого гамильтониана), могут обучаться значительно быстрее, чем универсальные классические нейросети, не обладающие таким смещением.
2. **Задачи с промежуточной связностью.** Анализ показывает, что КНС с низкой связностью (MPS) симулируемы классически, а с полной связностью — зачастую непрактичны для большого числа кубитов. Однако существует промежуточный класс КНС со **средней связностью**, например, соответствующий ТС с размерностью связи χ , которая растет как n^k для $k > 1$. Точная симуляция таких схем на классическом компьютере становится все более затратной, в то время как квантовый компьютер, реализующий такую схему, может справиться с этим естественно. Это потенциальная «зона квантового превосходства» для МО.
3. **Ускорение за счет квантового отбора проб.** Даже если ожидаемое значение $f(\vec{x}, \vec{\theta})$ можно вычислить классически, сама КНС может генерировать выборки из распределения $p(\vec{x}) = |\langle \vec{x} | \psi \rangle|^2$ быстрее, чем это можно сделать с помощью классической симуляции. Это может быть полезно в таких задачах, как генеративное моделирование.
4. **Преодоление локальных минимумов.** Эвристические данные свидетельствуют, что ландшафт оптимизации для КНС может быть менее подвержен проблеме плоских плато для определенных, правильно сконструированных архитектур [10]. Формализм ТС может помочь спроектировать такие архитектуры, анализируя градиенты в терминах корреляционных функций в ТС.

Заключение

В данной работе был проведен детальный анализ сложности алгоритмов для квантовых нейросетей с использованием аппарата тензорных сетей. Установлено, что формализм ТС предоставляет мощный и естественный язык для описания и анализа КНС.

Основные результаты работы:

1. Формализовано соответствие между архитектурами КНС и типами ТС (MPS, TTN), что позволяет количественно оценивать выразительную способность КНС через размерность связи χ .
2. Показано, что КНС, соответствующие ТС с полиномиально ограниченной χ , не обладают экспоненциальным преимуществом в выразительной спо-

способности и могут быть эффективно смоделированы на классических компьютерах.

3. Проведен анализ вычислительной сложности операций прямого распространения и вычисления градиентов, который выявил прямую зависимость между связностью квантовой схемы и сложностью ее симуляции.
4. На основе анализа сложности выделен класс задач, где можно ожидать преимущества КНС: задачи, связанные с моделированием квантовых систем, и задачи, для которых эффективные КНС обладают средней связностью, делающей их клас-

сическую симуляцию трудной, но реализацию на квантовом процессоре — достижимы.

Полученные результаты задают четкие критерии для проектирования КНС, нацеленных на достижение квантового превосходства. Для этого необходимо конструировать схемы, которые либо реализуют функции, недоступные для классических ТС с полиномиальной \mathcal{X} , либо обеспечивают более эффективный путь оптимизации для задач, где классические методы застревают в локальных минимумах.

ЛИТЕРАТУРА

1. ЛеКун Я., Бензио Й., и Хинтон Г. Глубокое обучение // Природа. — 2015. — Т. 521, № 7553. — С. 436–444.
2. Нильсен М.А., и Чанг, И.Л. Квантовые вычисления и квантовая информация: 10-е юбилейное издание. — Кембридж: Cambridge University Press, 2010. — 676 с.
3. Бенедетти М., Ллойд Э., Сэк С., и Фиорентини М. Параметризованные квантовые схемы как модели машинного обучения // Квантовая наука и технологии. — 2019. — Т. 4, № 4. — С. 043001.
4. Шульд М., и Киллоран Н. Квантовое машинное обучение в пространствах признаков Гильберта // Письма в физическое обозрение. — 2019. — Т. 122, № 4. — С. 040504.
5. Орьяс Р. Практическое введение в тензорные сети: матричные продуктивные состояния и проективные ансамблевые парные состояния // Анналы физики. — 2014. — Т. 349. — С. 117–158.
6. Сирак Х.И., Перес-Гарсия Д., Шух Н., и Верстрате Ф. Матричные продуктивные состояния и проективные ансамблевые парные состояния: концепции, симметрии, теоремы // Обзоры современной физики. — 2021. — Т. 93, № 4. — С. 045003.
7. Хаггинс У.Дж., Патил П., Митчелл Б., Уэйли К.Б., и Стоуденмайр Э.М. На пути к квантовому машинному обучению с тензорными сетями // Квантовая наука и технологии. — 2019. — Т. 4, № 2. — С. 024001.
8. Лю Дж.Г., Ван Л., и Чжан П. Тропическая тензорная сеть для основных состояний спиновых стекол // Письма в физическое обозрение. — 2019. — Т. 122, № 7. — С. 070501.
9. Митарай К., Негоро М., Китагава М., и Фудзии К. Обучение квантовых схем // Физическое обозрение А. — 2018. — Т. 98, № 3. — С. 032309.
10. МакКлин Дж.Р., Бойкшо С., Смелянский В.Н., Бэббуш Р., и Невен Х. Бесплодные плато в ландшафтах обучения квантовых нейронных сетей // Научные сообщения. — 2018. — Т. 9, № 1. — С. 4812.

© Ежицкая Дарья Дмитриевна (gubinadd18@gmail.com)

Журнал «Современная наука: актуальные проблемы теории и практики»