张量网络还是决策图?

经典量子电路模拟指南

Lukas Burgholzer* Alexander Ploier* Robert Wille†‡
*集成电路研究所，林茨约翰·开普勒大学，奥地利
†设计自动化讲席，慕尼黑工业大学，德国
‡Software CompetenceCenterHagenberg GmbH (SCCH)，奥地利
lukas.burgholzer@jku.at alexander.ploier@jku.at robert.wille@tum.de
https://www.cda.cit.tum.de/research/quantum/

arXiv:2302.06616v1 [quant-ph] 13 Feb 2023

摘要——**经典模拟量子电路对于开发或测试量子算法至关重要。由于其固有的指数级复杂度，高效的数据结构是进行此类模拟的关键。为此，**张量网络**和**决策图**从不同的视角出发，基于不同的术语体系和背景独立发展而来。虽然这为量子电路模拟带来了两种互补的数据结构，但迄今仍不清楚针对特定用例，哪一种是更好的选择。在这项工作中，我们**（1）**考察这些技术如何处理经典量子电路模拟，并**（2）**探究它们在最适用的**抽象层级、所需的模拟输出、计算顺序**的影响以及**工作负载分配**的便捷性方面的异同。因此，我们为经典量子电路模拟提供指导，说明何时更适合使用张量网络，何时更适合使用决策图。**

I. 引言

目前量子计算的发展现状往往使得我们无法在实际硬件上评估原型或应用，这主要是受成本、可靠性和可用性的限制。因此，经典模拟量子电路是量子算法/应用开发与测试过程中不可或缺的一环；它使我们能够访问完整的量子态（否则无法访问），并确定性地研究错误/噪声的影响，从而深入了解量子系统的功能与性能。

执行量子计算需要通过应用一系列操作（也称为量子门）来演化初始量子态，这一过程由量子电路描述。经典模拟此类计算的目标，是计算演化后系统状态的一种表示（或至少计算其中各个振幅）。为此，量子系统的状态可以用复振幅向量描述，而各个操作则可以用酉矩阵表示。因此，经典模拟量子电路本质上就是向量与矩阵的乘法。

然而，尽管概念上很简单，相应的向量和矩阵会随着量子比特数量的增加而呈指数级增长。例如，一个 32 量子比特系统的完整状态由 $2^{32} = 4\,294\,967\,296$ 个复振幅描述，存储这些振幅需要 64GiB 内存（假设复数采用 128 位表示）。因此，量子在经典计算机上以直接方式进行量子电路模拟，很快就会变得难以承受，尤其是对于较大的系统——即便借助强大的超级计算集群也是如此。

高效的数据结构对于应对量子力学系统固有的复杂性至关重要。量子计算是一门涉及物理学家、计算机科学家及许多其他领域人士的多学科领域，因此人们从不同视角应对这一挑战，动机、术语和背景也各不相同。受自然界在原子和亚原子粒子尺度上的行为启发，张量网络 [1]–[3]于1992年应运而生，成为高效表示量子力学系统的一种方法。更近些时候，受其在经典电路与系统设计中取得成功的启发，决策图 [4]–[7] 也被独立提出，作为一种通过利用底层表示中的冗余来紧凑表示并高效操作量子功能的方法。

在这项工作中，我们（1）考察了这些源自不同背景的技术如何应对量子电路经典模拟中固有的复杂性；（2）系统分析了它们在以下方面的相似之处与差异：

- **抽象层级：** 在不同抽象层上对量子电路进行经典模拟有多种应用场景，例如开发和测试高层应用，或对真实量子计算机进行底层验证。问题在于，张量网络和决策图各自最适用于哪些场景。
- **期望的模拟输出：**经典模拟所需的输出可以是从标量到完整状态向量的任何内容。了解相应技术的局限性至关重要。
- **计算顺序：** 两种技术的性能都在很大程度上取决于各项操作的执行顺序。尽管张量网络与决策图所处理的任务之间存在直接的对偶性，但问题在于，相应的技术是否能在不同领域之间互换使用。
- **分配工作负载：** 为了对大型量子电路进行经典模拟，相应的方法必须能够扩展到超级计算机。这引出了一个问题：这两种技术对可用资源的利用效果如何。

总的来说，这些考量为如何根据具体用例选择适当的数据结构来经典模拟量子电路提供了指导。

本文其余部分结构如下：第二节介绍经典量子电路模拟所需的背景知识。在此基础上，第三节介绍并探讨张量网络和决策图这两种互补方法，说明如何应对其固有的复杂性。随后，第四节根据前文介绍的各个方面比较这两种技术。最后，第五节总结全文。

II. 经典量子电路模拟

为使本文内容完整，本节简要回顾经典量子电路模拟的主要概念。尽管介绍较为简略，感兴趣的读者可参阅 [8] 了解更多详情。

与经典计算不同，量子比特的状态 $|\varphi\rangle$ 可以表示为基态 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$的复线性组合（或叠加），即，

$$|\varphi\rangle = \alpha_0 |0\rangle + \alpha_1 |1\rangle \text{ with } \alpha_0, \alpha_1 \in \mathbb{C} \text{ and } |\alpha_0|^2 + |\alpha_1|^2 = 1.$$

一般而言，一个由 n个量子比特组成的系统的状态 $|\varphi\rangle$ 由2^n 个复振幅描述，即，

$$|\varphi\rangle = \alpha_{0\ldots0} |0\ldots0\rangle + \cdots + \alpha_{1\ldots1} |1\ldots1\rangle$$

其中 $\alpha_{0\ldots0}, \ldots, \alpha_{1\ldots1} \in \mathbb{C}$和 $|\alpha_{0\ldots0}|^2 + \cdots + |\alpha_{1\ldots1}|^2 = 1$。这通常表示为列向量$[\alpha_{0\ldots0}, \ldots, \alpha_{1\ldots1}]^\top$，并称为状态向量。

可以通过施加量子操作（也称为量子门）来操纵这一状态。为此，作用于 k 个量子比特的操作可表示为一个大小为 $2^k \times 2^k$ 的酉矩阵。施加操作相当于计算该操作的酉矩阵与当前状态向量[1]的矩阵向量积。

量子电路 G 被描述为一系列量子门，即 $G = g_0, \ldots, g_{|G|-1}$，其中每个门 g_i 都由相应的酉矩阵 U_i 表示。给定一个初始态 $|\varphi_{init}\rangle$，执行电路 G 所描述的计算，需要将电路中的所有操作应用于初始态，也就是计算

$$|\varphi_{final}\rangle = U_{|G|-1} \times \cdots \times U_0 |\varphi_{init}\rangle = U |\varphi_{init}\rangle .$$

如果在经典计算机上执行此任务，通常称为经典量子电路模拟。由于底层表示具有指数级增长的特性——量子态由 2^n 个振幅描述 —— 人们可能只关心确定最终量子态的特定振幅。这需要计算

$\alpha_i = \langle i|U_{|G|-1} \times \cdots \times U_0|\varphi_{init}\rangle = \langle i|U|\varphi_{init}\rangle$，其中 $\langle i|$ 表示代表第 i个基态的行向量。

示例 1。 考虑图*1a*所示的3量子比特量子电路。首先，对最上方的量子比特应用单量子比特阿达马门（由标记为 H 的方框表示）。



(a) 量子电路　　（b）矩阵向量表示

图 1：GHZ态的 α_{000} 振幅计算

然后，应用两个受控非门（控制位和目标量子比特分别由 • 和 ⊕表示），使所有量子比特发生纠缠。使用全零初始态 $|000\rangle$ （显示在图*1a*左侧）模拟该电路，会得到众所周知的GHZ态 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|000\rangle + |111\rangle)$。因此，只需确定所得状态的 α_{000} 振幅（如图*1a*右侧所示），即可得到 $\frac{1}{\sqrt{2}}$。整个计算归结为向量与矩阵的乘法，如图*1b*所示。

III. 经典量子电路模拟的两种视角

量子计算是一个涉及物理学家、计算机科学家以及许多其他领域的多学科领域。因此，量子电路模拟存在多种不同视角，这些视角的动机、术语和背景各不相同。为弥合不同群体之间的鸿沟，下面将介绍两种旨在应对量子力学系统固有复杂性的解决方案。

A. 张量网络

量子计算建立在量子力学这一物理理论之上，该理论描述并解释了自然界在原子和亚原子粒子尺度上的行为。量子多体物理学例如研究相互作用粒子的集体行为。通常，彼此接近的粒子之间相互作用很强，而相距较远的粒子几乎不发生相互作用——由此产生了（拓扑）局域性的概念。这种局部结构自然促使人们将量子多体问题建模为张量网络 [1]–[3]。

就我们的讨论而言，张量 可以理解为由复数组成的多维数组。这里，张量的秩是其维数（或指标的数量），而张量的形状 则指定了每个维度中的元素数量。具有共同指标的两个张量可以通过对重复指标求和缩并为一个张量。

示例 2。 设 A、B、C 是 $\mathbb{C}^{N\times N}$ 中的矩阵。此外，设矩阵乘积 $C = AB$ 由 $C_{i,\ j} = \sum_{k=0}^{N-1} A_{i\,k} B_{k\,j}$ $i\ j = 0\ \ldots\ N-1$,, 给出，其中，, , 。那么，这对应于对共享指标 k 进行缩并，即将秩为 2 的张量 $A = [A_{i,k}]$和 $B = [B_{k,j}]$ 进行缩并。

张量网络是由共享指标连接的一组可数个张量。我们可以方便地用图形表示法来表示它：将各个张量表示为无向图的顶点。节点之间的边表示相应张量的共享指标。

[1]从技术上讲，为了使乘法有意义，任何仅作用于 $k < n$ 个量子比特的操作，都必须通过与单位矩阵进行适当的张量积，将其扩展到完整的系统规模，然后再执行乘法。

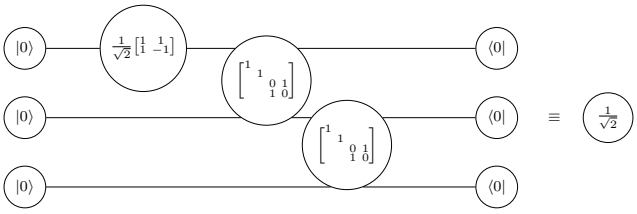
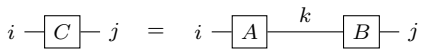


图 2：用于计算图 1a 所示内容的张量网络

示例 3。再考虑示例 2 中的情形。那么，矩阵乘法 $C = AB$ 可以用图形表示为：



从张量网络中提取有用信息，通常需要对其中所有单独的张量进行两两缩并，直到只剩下一个张量。在这方面，目标是选择一种缩并顺序，使缩并指标的维度（也称为键维数）和中间张量的形状尽可能小，因为缩并两个张量所需的计算开销与这些量直接相关。只要能将键维数和中间张量的大小控制在适中范围内，就可以利用张量网络高效地进行模拟。给定网络中张量的缩并顺序称为收缩计划。

据此，量子电路与张量网络之间可以直观地相互转换。为此，初始态向量和输出态向量（如果只需确定单个振幅）通常表示为一组秩一张量。此外，每个 k量子比特门都表示为一个秩$2k$ 张量[2]，，并通过共享指标与其前后相邻的张量相连。随后，按照某种收缩计划对生成的张量网络进行缩并，即对应于对量子电路进行模拟。

示例 4. 再来看图*1a*所示的计算。图*2*展示了如何将其转换为张量网络。为此，每个张量都用一个包含实际张量数据的“气泡”表示。请注意，与图*1b*所示的指数级表示不同，这种表示所需的内存仅随量子比特和量子门总数线性增长。

B. 决策图

一般而言，量子态和操作的表示相对于量子比特数量呈指数级增长。直接表示这些实体很快就会受到存储它们所需的大量内存的限制——即使使用超级计算集群也是如此。然而，相应的向量和矩阵通常是稀疏的，或者在其表示中存在固有冗余。决策图 [4]–[7][3] 被提出作为一种利用底层表示中这些冗余的方法，在许多情况下，它们能够紧凑地表示量子态和操作，并对其进行高效操作。

就我们的目的而言，决策图是一种带有复数边权重的有向无环图。给定的状态向量可以递归地分解为子向量，具体如下：

$$
\begin{array}{cc}
[\alpha_{0\ldots0}, \ldots, \alpha_{1\ldots1}]^\top & \\
[\alpha_{0\ldots}]^\top & [\alpha_{1\ldots}]^\top \\
[\alpha_{00\ldots}]^\top \quad [\alpha_{01\ldots}]^\top & [\alpha_{10\ldots}]^\top \quad [\alpha_{11\ldots}]^\top
\end{array}
$$

直到只剩下单个振幅。所得结构包含 n 层节点，标记为从 $n-1$ 到 0。从顶层到底层的一条路径上，层级为 i 的每个节点都表示一次决策，有两种选择——该路径通向量子比特 i 处于状态 $|0\rangle$ 还是 $|1\rangle$ 时对应的振幅。仅相差一个常数因子的子向量可以由决策图中的同一个节点表示。通常，这通过采用能够保证规范性的归一化方案，并使用哈希表追踪唯一节点来实现。

通过增加第二个维度，这种分解方案可以自然地扩展到量子门的表示。这相当于依据线性算子基，将相应的矩阵递归地拆分为四个大小相同的子矩阵。

$$
\left\{ \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \right\} = \{ |0\rangle\langle 0|, |0\rangle\langle 1|, |1\rangle\langle 0|, |1\rangle\langle 1| \}.
$$

如此一来，便能为许多量子态和操作构造出相当紧凑的表示。

此外，向量和矩阵上的大多数操作——乘法、加法、内积/外积、张量积等——都可以凭借其递归特性自然地转换为决策图。然而，决策图上的操作并非随向量和矩阵的维度扩展，而是随相应决策图中的节点数量扩展。因此，只要涉及的决策图保持紧凑，就能非常高效地进行计算。

示例 5. 如上所述，通过施加操作来改变量子系统的状态，需要将该操作的矩阵与当前状态向量相乘，即进行矩阵-向量乘法。这一操作可以依据以下方式递归分解：

$$
\begin{bmatrix} U_{00} & U_{01} \\ U_{10} & U_{11} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \alpha_{0\ldots} \\ \alpha_{1\ldots} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (U_{00} \cdot \alpha_{0\ldots}) + (U_{01} \cdot \alpha_{1\ldots}) \\ (U_{10} \cdot \alpha_{0\ldots}) + (U_{11} \cdot \alpha_{1\ldots}) \end{bmatrix},
$$

其中，对于 i， $U_{ij} \in \mathbb{C}^{2^{n-1} \times 2^{n-1}}$ 和 $\alpha_{i\ldots} \in \mathbb{C}^{2^{n-1}}$ 分别为 $j \in \{0, 1\}$。在相应的决策图中， U_{ij} 和 $\alpha_{i\ldots}$ 分别直接对应矩阵节点和向量节点的后继节点。因此，乘法的复杂度随相应节点数量的乘积增长。

[2]这只是一种塑造底层 $2^k \times 2^k$ 维量子门矩阵的特定方式。可以将这样的张量理解为具有 k 条入边和 k 条出边，每条边的维度均为 2。

[3]下文主要关注 [6] 提出的决策图。不过，所得结论也很容易推广到其他类型的决策图。

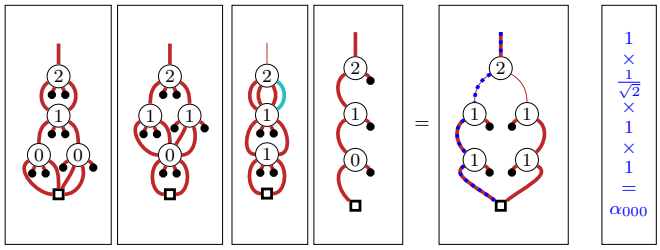
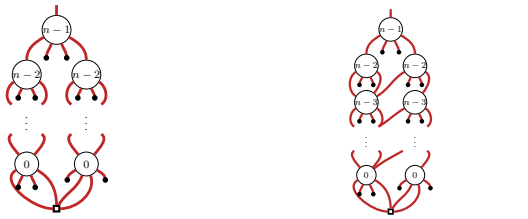


图3：图1b中的计算对应的决策图



(a) CX(q_{n-1}, q_0)　　(b) 多重控制非门（$q_{n-1}, \ldots, q_1, q_0$）

图 4：常见操作的决策图

与张量网络类似，使用决策图模拟量子电路，首先需要构建初始态向量和各个门矩阵的决策图表示。然后，按相应顺序将这些决策图相乘，即可得到最终状态向量的决策图表示。我们将各次乘法的执行顺序称为模拟路径。沿着从根节点到终端节点的一条路径累积边权重，即可从最终决策图中高效提取单个振幅。

示例6. 再次考虑图*1b*所示的计算。图*3*展示了如何将其转换为决策图。为此，采用了 *[9]* 中提出的可视化方法，其中边的粗细和颜色分别表示边权重的幅度和相位。可以看到，与图*1b*所示的指数级表示不同，所有表示中的节点数都随量子比特数线性增长。

IV. 系统分析

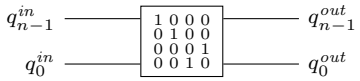
在考察了这两种互补的数据结构之后，本文接下来的目标是针对不同用例，为经典量子电路模拟建立选择合适数据结构的指导原则。下文将从最适用的抽象层级、所需的模拟输出、计算顺序的影响，以及工作负载的分配难易程度等方面，对这两种技术进行系统分析，以深入探讨这一问题。

抽象层级

在不同抽象层上对量子电路进行经典模拟有多种应用场景——包括开发或测试（高层）应用，以及对量子计算机进行（低层）验证。每个抽象层都有自身的特点，例如门集合的粒度各不相同，或需要考虑特定的硬件限制。

由于目前许多可用量子处理器的连接性有限，近期量子算法通常在较低的抽象层级上进行设计，也就是说，电路通常只包含单量子比特门和双量子比特门，并且具有较强的局部相互作用。张量网络非常适合这种情况，因为它能够捕捉量子电路的拓扑结构。任何此类仅作用于少数几个量子比特的操作都可以用一个紧凑的张量表示。相比之下，当前基于决策图的模拟技术要求将表示操作的每个决策图扩展到完整的系统规模，方法是与表示恒等算符的决策图进行适当的张量积。虽然这使其复杂度取决于量子比特的数量，但所得决策图通常仍然很紧凑——通常只需要线性数量的节点。

示例 7. 考虑一个 n 量子比特系统，并假设要执行一个受控非门操作，其中 q_{n-1} 和 q_0 分别作为控制位和目标位。对应的张量仅由众所周知的受控非门操作的 4×4 矩阵表示构成，即：



另一方面，扩展到完整系统规模后的形式为

$$P_0 \otimes \mathbb{I}^{\otimes(n-2)} \otimes \mathbb{I} + P_1 \otimes \mathbb{I}^{\otimes(n-2)} \otimes X$$

其中 $P_i = |i\rangle\langle i|$ 分别表示对0 和 1的投影算子。相应的决策图表示由 $2n-1$ 个节点组成，如图 *4a* 所示。

正如经典编程语言能够让人们不必直接处理汇编语言或机器码，开发量子算法时也会采用更高层次的抽象。这类算法的描述包含一些构建模块，例如（布尔）预言机、基变换或问题编码。虽然这些构建模块的功能通常具有某种结构，但这种结构不一定是拓扑结构或局部结构。由于作用于k 个量子比特的任何操作本质上都由一个 $2^k \times 2^k$ 矩阵表示，因此，基于张量网络的方法无法高效表示适用于大量 k的这些构造。相比之下，决策图旨在利用底层表示中的结构冗余，这往往使其能够高效表示高层次的非局部电路元件。

示例 8. 考虑对著名 *Grover* 算法的模拟。该算法在无结构搜索问题中，相较于经典方法可实现二次加速 *[10]*。*Grover* 算法的一个关键部分是预言机，它对所考虑问题的解进行编码。这样的预言机会“标记”所需的

量子态，并由一个酉矩阵 U_f 描述，其作用方式如下：

$$U_f |x\rangle \otimes |0\rangle = \begin{cases} |x\rangle \otimes |1\rangle & \textit{if } x \textit{ is the state searched for,} \\ |x\rangle \otimes |0\rangle & \textit{otherwise.} \end{cases}$$

最简单的情形之一是搜索全一态$|1\ldots1\rangle$。这项任务的预言机由一个多重控制非门（或托佛利门）构成，仅当所有控制量子比特都处于状态 $|1\rangle$ 时，才会翻转目标量子比特的值。对应的酉矩阵 U_f 由 $\mathbb{I}\otimes\cdots\otimes\mathbb{I}\otimes X$ 给出。因此，将该矩阵存储为张量所需的内存会随系统规模呈指数级增长。相比之下，只需线性数量的节点即可将其表示为决策图，如图*4b*所示。

结论：张量网络充分利用固有的拓扑结构，因此非常适合用于经典电路模拟的低层应用。相比之下，决策图利用底层表示中的结构冗余，而这与抽象层级无关。因此，决策图在高层应用场景中具有明显优势，同时也涵盖低层应用。

期望的模拟输出

经典量子电路模拟所需的输出可以是标量（例如单个振幅），也可以是完整的状态向量。下文将探讨所需输出对基于张量网络和决策图的经典模拟方法性能的影响。

首先，假设需要计算量子电路完整输出态向量的表示。使用张量网络时，这相当于将整个张量网络收缩为一个大小为 2^n的秩为n 的张量。

不可避免地，这会带来与第二节所示的直接矩阵－向量计算相同的指数级内存需求。因此，通常无法使用张量网络计算完整的输出态向量（或者更一般地说，指数多个振幅）。人们提出了多种专门的张量网络类型，例如矩阵乘积态（MPS）、树张量网络（TTN）、多尺度纠缠重整化拟设（MERA）或投影纠缠对态（PEPS），试图通过将整个态的表示分解为更小的张量来施加某种结构（参见 [11]–[12] 及其中的参考文献）。然而，这些技术通常旨在实现与本文所讨论目标略有不同的目的——即高效地近似量子力学系统的状态。

使用决策图时，单个量子操作通常可以用线性规模表示（如上一节所述）。要计算完整输出状态的表示，接下来需要将相应的决策图相乘。已有研究表明，在许多实际相关的情形下，模拟过程中（中间）图的规模相对于量子比特数 [13] 保持多项式增长。因此，在这些情形下，固有的指数级复杂度得以缓解。得到最终的决策图后，只需递归遍历该决策图并沿途累积边权重，就能以很小的额外开销提取任意数量的振幅。

另一方面，在光谱的另一端，人们可能希望确定一个单独的标量，例如某个振幅或某个可观测量的期望值。对于基于张量网络的方法，可以通过固定电路张量网络的输出指标来实现这一点。与计算完整输出态不同，对所得张量网络进行收缩会得到一个单独的零阶张量，即标量（例如图2所示）。只要能够采用一种收缩计划，使中间张量的大小和键维数保持在可控范围内，就可以非常高效地确定单个振幅。相比之下，当前基于决策图的模拟技术尚不能实现这种复杂度的降低。无论所需的是整个状态还是仅一个振幅，都必须独立地确定完整输出态向量（如图3所示）。

结论： 在没有先验假设的情况下，无法得出普遍性的结论，但以下趋势十分明显：在量子电路模拟中，如果能够确定合适的收缩计划，应优先使用张量网络来计算作为结果的标量。决策图则更适合态向量模拟，前提是所涉及的决策图在整个模拟过程中始终保持紧凑。

确定计算顺序

对于特定的量子电路模拟，张量网络的收缩计划（即张量被收缩的顺序）与决策图的模拟路径（即执行各次乘法的顺序）之间存在直接的对偶性。这两种技术的共同点是，其性能很大程度上取决于各项操作的执行顺序。针对这一问题，张量网络领域已开展了大量研究 [14]–[18]。尽管决策图领域的相关研究不如张量网络领域广泛，但也已有研究探讨这一方向 [19]–[22]，尤其是等价性检查这一应用场景。因此，接下来我们将等价性检查视为理想的应用场景，以探讨不同领域中确定计算顺序的策略是否可以互换。

为此，给定两个量子电路 G 和 G'，需要判断在固定输入 $|\varphi\rangle$下模拟这两个电路是否会产生等价的输出。一种可能的解决方案是，分别以输入 $|\varphi\rangle$ 模拟这两个电路，并比较得到的量子态。然而，一般而言，这种方法对于张量网络（由于其固有的指数级内存需求，且该需求与收缩计划无关）和决策图（由于其最坏情况下的复杂度呈指数级，且与模拟路径无关）都不可行。

Ta表 I：主要结果及由此产生的指南 则

	张量网络	决策图
抽象层级	适用于低层应用且高效 通过利用拓扑结构	可独立应用 通过利用结构冗余 对高层应用具有明显优势
所需的模拟输出	计算标量时应优先选择 前提是能够确定合适的收缩计划	应优先用于计算完整状态向量 前提是所涉及的决策图保持紧凑
计算顺序	已有大量方法旨在 控制张量的大小和形状	最初开发的方法旨在 尽可能保持中间决策图紧凑
分配工作负载	模拟有多种选择 在高性能计算系统上接近量子霸权阈值	已展现出潜力， 但台式计算机以外的解决方案仍有待探索

由于量子计算具有可逆性，检查这两个电路是否等价还有一种更有希望的方法。为此，将其中一个电路求逆，并与另一个电路串接，形成一个新电路 $\tilde{G} = GG'^{-1}$。如果两个原始电路对于输入 $|\varphi\rangle$确实~等价，那么以输入 $|\varphi\rangle$ 模拟电路 G 不会对量子态产生任何影响，即有 $|\langle\varphi|\tilde{G}|\varphi\rangle|^2 = 1$。此时，计算结果不再是一个（可能呈指数级规模的）表示，而是一个复数。因此，如何安排操作以得到这一紧凑结果就至关重要。

由于张量网络的拓扑结构，其性能与各个张量的实际内容无关，而仅取决于张量的大小和形状。因此，可以预先精确估算按照特定收缩计划收缩张量网络所需的内存和浮点运算量，也就是说，无需实际执行收缩即可得出估算结果。由此便能探索庞大的收缩计划搜索空间，目标是在收缩过程中尽可能减小共享指标的维数和中间张量的大小。然而，确定最优收缩计划的过程极其复杂，甚至已被证明是 NP困难 [14]。因此，人们提出了大量启发式方法，以寻找张量网络的高效收缩计划 [15]–[18]。一般而言，这些方法从“外部”入手，即从初始态的小张量和输出振幅开始，再“逐步向内推进”，以控制中间张量的大小。虽然估算两个决策图相乘的复杂度相当直接（其规模随决策图节点数的乘积增长），但在一般情况下，若不实际执行乘法，就极难估算所得决策图的大小（因为决策图高度依赖所得表示中存在的冗余程度）。因此，基于决策图的经典模拟无法得出明确的运行时间估算。不过，研究 [22], 已表明，将张量网络收缩计划转换为决策图的模拟路径，相较于既有模拟方法，可带来最高达数个数量级的加速。

决策图模拟路径的效率很大程度上取决于中间结果底层表示中存在的冗余量。尽管不如张量网络中的情况那么广泛，但已有研究表明，选择正确的模拟路径可能决定运行时间和空间 [19]–[22]是线性还是指数级。所得策略主要通过纳入有关所考虑模拟任务的某些特征来实现其效率。对于当前问题而言，关键在于尽可能使计算过程中出现的决策图接近单位算子[4]。具体做法是从 G 和 G'^{-1} “之间”开始，并根据某种方案，在应用来自 G 的量子门与来自 G' 的（逆）量子门之间交替进行操作。只要能够采用一种方案，即一种模拟路径，使中间决策图保持接近单位算子，就可以高效地得出两个电路等价。

虽然可以采用相同的策略来收缩相应的张量网络，但这几乎肯定无法得到高效的收缩计划。这是因为迟早所有量子比特都会参与计算，从而产生一个大小为$2^n \times 2^n$的最大张量。因此，反过来将模拟路径转换为相应的收缩计划，几乎不可能取得理想效果。

结论： 从表面上看，收缩计划和模拟路径似乎非常相似。但仔细观察后就会发现，它们追求的目标并不相同。高效的收缩计划会尽量控制中间张量的大小和形状。相比之下，模拟路径的目标是让中间决策图尽可能紧凑。研究表明，将用于张量网络的高效收缩计划转换为模拟路径，最高可带来数个数量级的加速；而反过来，将用于决策图的高效模拟路径转换为收缩计划，几乎不可能取得理想效果。

分配工作负载

为了对大型量子电路进行经典模拟，必须将相应的方法设计为能够在高性能超级计算集群上运行。因此，关键是将特定计算的工作负载分配给多个（异构）“工作者”，以充分利用可用资源。

[4]单位算子是矩阵决策图的最佳情形，因为每个量子比特只需要一个节点，而且不存在非平凡的边权重。

因此，由于结构规整，两个张量的收缩任务天生适合在 CPU 和 GPU 上并行执行。另一方面，已有研究表明 [23]，并行执行单个决策图操作并非易事（即使在 CPU 上也不例外）。直观而言，决策图利用冗余的方式削弱了其进行简单并行化的潜力，而常规矩阵和向量则具备这种潜力。

给定特定的收缩计划，可以高效地并行执行独立收缩 [24]。由于上一节所揭示的收缩计划与模拟路径之间存在直接的对偶性，这一点同样适用于决策图。然而，要始终并行维护多个决策图软件包，还需要付出一些额外努力。

此外，基于张量网络的方法还采用切片 或 切割 技术，这些技术本质上是通过固定某些指标的取值来细分张量网络 [15],[25], [26]。随后，整体收缩可化为对若干个更简单张量网络进行独立收缩的求和。为在决策图中实现此类方案， [27]已开展了富有前景的初步研究。

结论： 为将基于张量网络的方法扩展到百亿亿级计算领域，人们已开展了大量工作 [24], [28], [29]。相比之下，决策图的相应解决方案仍处于起步阶段，当前最先进的技术仍主要针对桌面系统——其极限尚待探索。因此，在可预见的未来，接近量子霸权阈值的经典计算可能仍将采用张量网络来处理；而决策图则适合在台式计算机上对量子电路进行经典模拟，例如在应用开发期间。

V. 结论

本文回顾并讨论了两种互补的方法，以应对经典模拟量子电路固有的复杂性——张量网络和决策图。为此，我们系统地分析了这两种技术，考察了它们最适用的抽象层级、期望的模拟输出、计算顺序的影响，以及分配工作负载的便利程度。表 I 总结了本次分析的主要结果，为设计者选择适用于不同用例的数据结构提供了指导。

致谢

本研究获得了欧洲研究委员会（ERC）通过欧盟地平线2020研究与创新计划提供的资助（资助协议编号：101001318）；本研究也是慕尼黑量子谷的一部分，该项目由巴伐利亚州政府通过巴伐利亚高科技议程Plus提供资金支持；此外，本研究还依据德国联邦议院的决议，通过QuaST项目获得德国联邦经济和气候保护部的支持，并在COMET计划框架内获得奥地利联邦气候保护、环境、能源、交通、创新与技术部、奥地利联邦数字化和经济事务部及上奥地利州的支持（由奥地利研究促进署管理）。

参考文献

[1] M. Fannes、B. Nachtergaele 和 R. F. Werner，《量子自旋链上的有限关联态》，Commun. Math. Phys.，1992年。[2] J. D. Biamonte 和 V. Bergholm，《张量网络简明指南》，2017年。arXiv：1708.00006。[3] J. C. Bridgeman 和 C. T. Chubb，《纸上谈兵与即兴舞蹈：张量网络入门课程》，J. Phys. A: Math. Theor.，2017年。[4] P. Niemann 等，《QMDD：高效的量子函数表示与操作》，IEEE Trans. on CAD of Integrated Circuits and Systems，2016年。[5] L. Chin-Yung、W. Shiou-An 和 K. Sy-Yen，《用于多值量子逻辑的扩展XQDD表示》，IEEE Trans. Comput.，2011年。[6] A. Zulehner、S. Hillmich 和 R. Wille，《如何高效处理复数值？量子计算决策图的实现》，载于Int'l Conf. on CAD，2019年。[7] G. F. Viamontes、I. L. Markov 和 J. P. Hayes，《基于QuIDD的量子电路高性能模拟》，载于Design, Automation and Test in Europe，2004年。[8] M. A. Nielsen 和 I. L. Chuang，《量子计算与量子信息》，剑桥大学出版社，2010年。[9] R. Wille、L. Burgholzer 和 M. Artner，《量子计算决策图的可视化》，载于Design, Automation and Test in Europe，2021年。[10] L. K. Grover，《一种用于数据库搜索的快速量子力学算法》，Proc. of the ACM，1996年。[11] G. F. Viamontes、I. L. Markov 和 J. P. Hayes，《检查量子电路与量子态的等价性》，载于Int'l Conf. on CAD，2007年。[12] I. Cirac 等，《矩阵乘积态与投影纠缠对态：概念、对称性与定理》，2021年。arXiv：2011.12127。[13] A. Zulehner 和 R. Wille，《量子计算的高级模拟》，IEEE Trans. on CAD of Integrated Circuits and Systems，2019年。[14] L. Chi-Chung、P. Sadayappan 和 R. Wenger，《关于带归约操作、用于并行执行的一类多维循环的优化》，Parallel Process. Lett.，1997年。[15] J. Gray 和 S. Kourtis，《超优化张量网络收缩》，Quantum，2021年。[16] C. Huang 等，《量子霸权电路的经典模拟》，2020年。arXiv：2005.06787。[17] S. Boixo 等，《将低深度量子电路模拟为复杂无向图模型》，2018年。arXiv：1712.05384。[18] D. Lykov 等，《具有步进依赖并行化的张量网络量子模拟器》，2020年。arXiv：2012.02430。[19] A. Zulehner 和 R. Wille，《矩阵-向量乘法与矩阵-矩阵乘法：基于决策图的量子计算模拟的潜力》，载于Design, Automation and Test in Europe，2019年。[20] L. Burgholzer 和 R. Wille，《量子电路的高级等价性检查》，IEEE Trans. on CAD of Integrated Circuits and Systems，2021年。[21] L. Burgholzer、R. Raymond 和 R. Wille，《验证IBM Qiskit量子电路编译流程的结果》，载于Int'l Conf. on Quantum Computing and Engineering，2020年。[22] L. Burgholzer、A. Ploier 和 R. Wille，《利用任意路径通过决策图模拟量子电路》，载于Design, Automation and Test in Europe，2022年。[23] S. Hillmich、A. Zulehner 和 R. Wille，《基于决策图的量子电路模拟中的并发性》，载于Asia and South Pacific Design Automation Conf.，2020年。[24] T. Vincent 等，《Jet：采用并行基于任务的张量网络收缩实现快速量子电路模拟》，2021年。arXiv：2107.09793。[25] B. Villalonga 等，《一种灵活的高性能模拟器，用于验证和基准测试在真实硬件上实现的量子电路》，Npj Quantum Inf.，2019年。[26] Z.-Y. Chen 等，《64量子比特量子电路模拟》，Science Bulletin，2018年。[27] L. Burgholzer、H. Bauer 和 R. Wille，《采用决策图的量子电路混合薛定谔-费曼模拟》，载于Int'l Conf. on Quantum Computing and Engineering，2021年。[28] T. Nguyen 等，《用于百亿亿级量子电路模拟的张量网络量子虚拟机》，2021年。arXiv：2104.10523。[29] J. Brennan 等，《百亿亿级张量网络电路模拟》，2021年。arXiv：2110.09894。