

高级算法设计与分析

张量网络

夏盟佶

Xia, Mingji

中科院软件所
计算机科学国家重点实验室

2016.6

张量网络

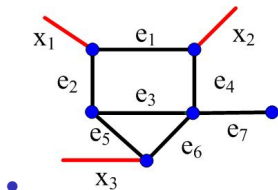


Figure: 图 $G(V, E \cup X)$

- 边是变量，点是函数，点 v 被赋予函数 F_v 。
- E 中边有两个顶点。 X 中边有一个顶点。 $E = \{e_j | j = 1, \dots, m\}$ 。
- 定义一个以 $X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\} \in D^n$ 为输入的函数 F_G 。

$$F_G(x_1, x_2, \dots, x_n) = \sum_{e_j \in D} \prod_{v \in V} F_v(e_{v,1}, e_{v,2}, \dots, e_{v,d_v})$$

- X 外部边， E 内部边。
- 无外部边时，是个0元函数，也定义了 $2^0 = 1$ 个值。

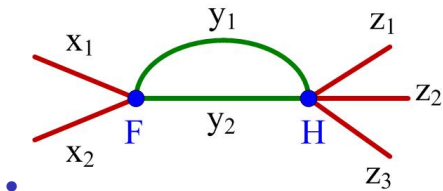
函数的矩阵形式

- 设 F 是一个 $n+m$ 元函数, $x_1, \dots, x_n, y_1, \dots, y_m$ 是它的输入。对应 $d^n \times d^m$ 的矩阵 $M = (M_{x_1 \dots x_n, y_1 \dots y_m})$, 其中

$$M_{x_1 \dots x_n, y_1 \dots y_m} = F(x_1, \dots, x_n, y_1, \dots, y_m)。$$

若取 $m = 0$ ($n = 0$), 就成了列 (行) 向量。

- 如下张量网络的函数可用矩阵乘法表示:

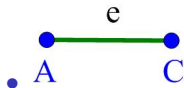


$$(F_{x_1 x_2, y_1 y_2})(H_{y_1 y_2, z_1 z_2 z_3})$$

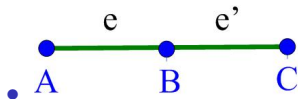
- 遵循行 (列) 标的变量边画在左 (右) 边。
矩阵转置后怎么画?

张量网络例子:向量矩阵乘法

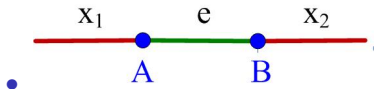
$$AC = \sum_{e \in [d]} A_e C_e$$



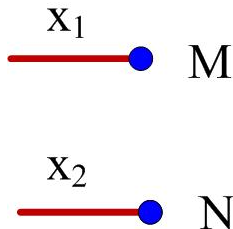
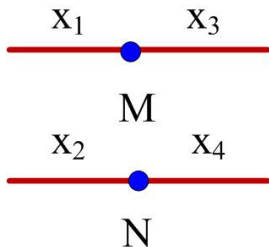
$$ABC = \sum_{e, e' \in [d]} A_e B_{ee'} C_{e'}$$



$$AB_{x_1, x_2} = \sum_{e \in [d]} A_{x_1 e} B_{e x_2}$$



张量积

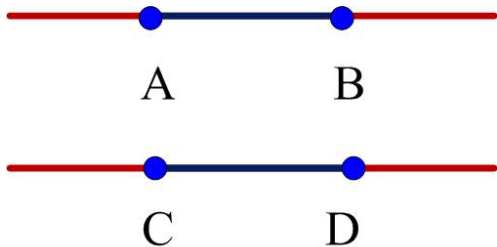


$$(M \otimes N)_{x_1 x_2, x_3 x_4} = M_{x_1, x_3} N_{x_2, x_4}$$

$$(M \otimes N)_{x_1, x_2} = M_{x_1} N_{x_2}$$

(记法 $M^{\otimes 3} = M \otimes M \otimes M$) 。

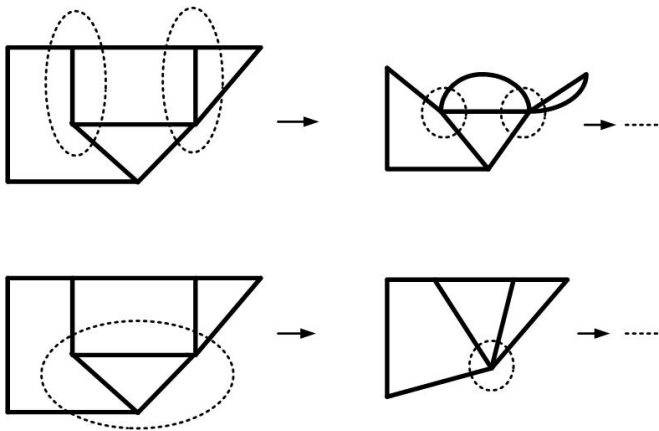
张量积与矩阵乘法



除了定义外，怎样用矩阵运算写出此张量网络的函数？

$$(A \cdot B) \otimes (C \cdot D) \quad \text{or} \quad (A \otimes C) \cdot (B \otimes D)$$

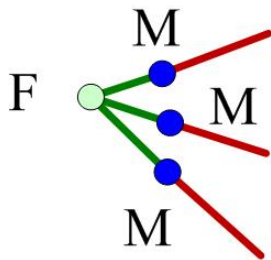
定义的不同嵌套次序，结果总相同



称之为张量网络的结合律。

矩阵乘法和张量积的联合使用例子

$$F(M^{\otimes 3})$$



零元函数的张量积

$$\bullet M \quad \bullet N$$

$$(M \otimes N) = MN$$

推论

一个无外部边的张量网络的值，是它各个连通分支的值的乘积。

Proof.

- 1、定义直接证明。
- 2、先用张量网络的结合律，把每个连通分支缩成点，然后零元函数的张量积。 □

布尔变量对称函数的表示

- F 是对称函数, 当且仅当对任意的置换 π , 任意 x_1, \dots, x_n ,

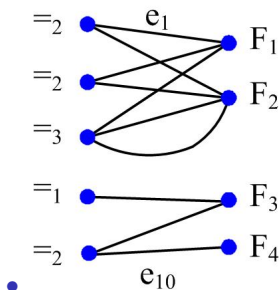
$$F(x_1, \dots, x_n) = F(x_{\pi(1)}, \dots, x_{\pi(n)})$$

- 布尔变量 $x_j \in \{0, 1\}$ 。
- F 值取决于输入中有多少个0和1。
- f_j 表示输入中有 j 个1时的 F 值, $j = 0, 1, \dots, n$ 。
- 记

$$F = [f_0, f_1, \dots, f_n]$$

#CSP问题与张量网络

- $=_k$ 表示 k 元相等关系函数。它要求所有输入变量的值相同。
- 布尔变量时，“ $=_k$ ” = $[1, 0, \dots, 0, 1]$ 。
- 对一个#CSP问题实例的图稍加改造，得到如下张量网络。

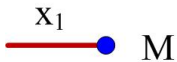


- 实例的答案就是这个张量网络的值。
- 不连通时，可先计算每个连通分支。（product type的算法）

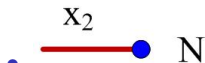
图同态数目问题的一个易解类

- 图 H 同态数目问题，问输入图 G 到 H 的同态映射数目。
- 就是一个二元函数 H 定义的 $\#CSP$ 问题。
- 如果二元函数 H 的矩阵形式的秩小于等于1，有多项式时间算法。
(值域非负实数时，假设 H 联通，这是二分定理的一个易解类。)

H秩为1时的算法



$$(M \otimes N)_{x_1, x_2} = M_{x_1} N_{x_2} \text{ or } MN'$$



- 因为H秩为1, 设 $H = ab'$ 。

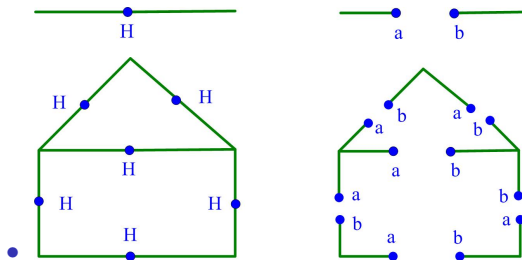


Figure: 作为输入的张量网络的两种等价形式

计算一个星

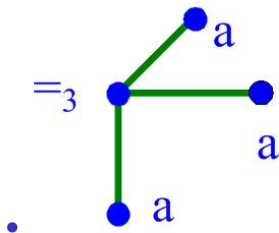


Figure: 每个连通分支是一个星

- 中心点函数是相等函数，只有两个赋值可以满足它。

图同态数目问题的另一个易解类简介

- H 是一个偶图，其邻接矩阵是

$$\begin{pmatrix} \mathbf{0} & A \\ B & \mathbf{0} \end{pmatrix}$$

- A 和 B 的秩是1。
- 算法：
 - 如果 G 不是偶图，不存在从 G 到 H 的同态映射。
 - 如果 G 是偶图， G 左顶点集合映射到 H 的左顶点集合或者右顶点集合。
两种情况之后的计算，都和 H 秩为1时的算法相同。

迹

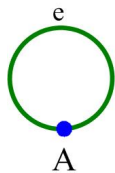


Figure: $\sum_e A_{e,e}$

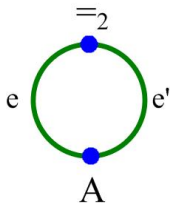
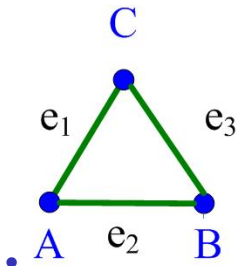


Figure: $\sum_{e,e'} A(e,e') = 2 \text{tr}(A)$

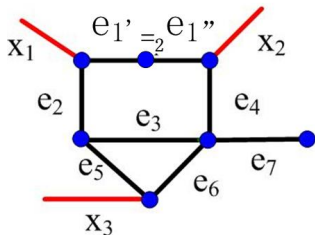
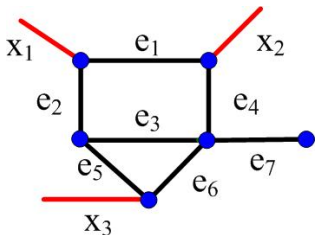
迹

$$\text{trace}(ABC) = \sum_{e_1, e_2, e_3 \in [d]} A_{e_1 e_2} B_{e_2 e_3} C_{e_3 e_1}$$



- 相同的张量网络图，不同的画法可表示 $\text{trace}(BCA)$ 和 $\text{trace}(C'B'A')$ 。
- 量子物理里用到partial trace。

边与二元相等函数



一条边实际上是一个出现两次的变量，
在其两个端点的函数中各出现一次，
也等价于一个二元相等函数“ $=_2$ ”。

不带外部边的张量网络与计数问题

- 一个函数都来自一个集合 \mathcal{F} 的张量网络求值问题，记为 $\#\mathcal{F}$ 。
(叫做Holant问题，或者Read-twice $\#\text{CSP}$ 问题)
- $\#\text{CSP}$ 中，变量可以使用多次。
Holant中，变量（一条边）只能用两次。

取定一个函数集合 \mathcal{F} 。

- $\#\mathcal{F}$ 的实例也是 $\#\text{CSP}(\mathcal{F})$ 的实例。
- 前者可归约到后者。所以，如果前者 $\#\text{P}$ 难，后者 $\#\text{P}$ 难；如果后者有算法，前者有算法。

\mathcal{F} 作为参数，定义两个问题集合：

Holant问题类 $\{\#\mathcal{F}\}$ ，和 $\#\text{CSP}$ 问题类 $\{\#\text{CSP}(\mathcal{F})\}$

- 后者是前者的子集。
- $\#\text{CSP}(\mathcal{F}) = \#\mathcal{F} \cup \{=1, =2, \dots, =k, \dots\}$ 。

计数问题的偶图输入

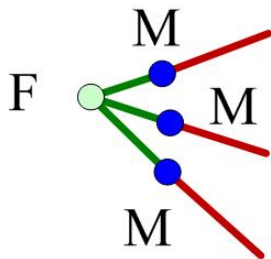
- #CSP问题和Holant问题的输入，都可以用偶图张量网络表示。
- #CSP(\mathcal{F})的实例，表示成偶图张量网络，左侧顶点的函数来自 $\{=_j \mid j \in \mathbb{N}\}$ ，右侧顶点的函数都来自 \mathcal{F} 。
 $\#\{=_j \mid j \in \mathbb{N}\} \mid \mathcal{F}$
- # \mathcal{F} 的实例，表示成偶图张量网络，左侧顶点的函数是 $=_2$ ，右侧顶点的函数都来自 \mathcal{F} 。
 $\#\{=_2\} \mid \mathcal{F}$
- 不同计数问题类的要求不一样，例如，天生自带（免费使用）的函数不同，图的要求（平面图、偶图等）不同。

构件与张量网络

- 最朴素的计数问题 $A \leq B$ 归约方法，就是构造 B 中的构件（Gadget,即张量网络）模拟 A 中的函数。原因是结合律。
- 平行的，把计数问题换成判定问题，张量网络中的 $\sum \prod$ 换成 $\vee \wedge$ ，也有归约，也有结合律。

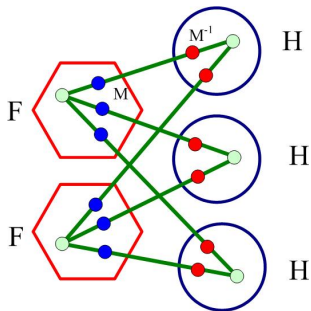
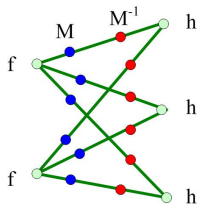
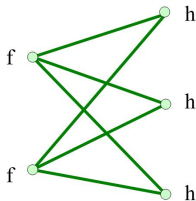
回顾一个张量网络

$$F(M^{\otimes 3})$$



全息归约：Holant定理

$AB = AEB = AMM^{-1}B = (AM)(M^{-1}B)$ 。(E是单位阵)



定理 (Valiant 2004)

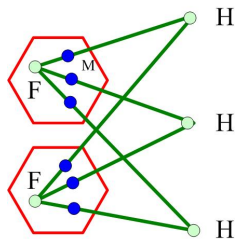
$\#\{F\}|\{G\}$ 和 $\#\{f\}|\{g\}$ 在相同的图上的值相等。其中,

$$F = fM^{\otimes 3},$$

$$(M^{-1})^{\otimes 2}h = H。$$

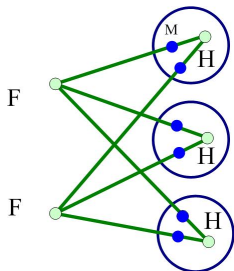
全息归约另一个一般形式

类比 $(AB)C = A(BC)$ 。



定理

$\#\{FM^{\otimes 3}\}|\{H\}$ 和 $\#\{F\}|\{M^{\otimes 2}H\}$ 值相同。



回顾——用图证明代数运算律

- 矩阵乘法和张量积的结合律，它们之间的分配律。
 - 迹与矩阵乘法的律。
 - 秩为1的矩阵，列向量乘行向量。（用于解释图同态易解类）
 - 全息归约。（张量网络中的基变换）
-
- Holan与#CSP问题
 - 简单情形的图同态二分定理易解情况

参考文献

- Matthew Cook, Networks of Relations, Ph.D Thesis 2005.
(判定问题)
- <http://arxiv.org/abs/1603.03039>
- <http://arxiv.org/abs/1306.2164>
- <https://simons.berkeley.edu/workshops/qhc2014-3>
(workshop "Tensor Networks and Simulations", in simons institute for the theory of computing)