The arithmetic complexity of tensor contractions

Étienne MIQUEY

Revue de l'article de Florent Capelli, Arnaud Durand et Stephan Mengel dans le cadre du cours de Complexité Algébrique de Pascal Koiran

Table des matières

1	Introduction	3
2	Définitions2.1 Circuits arithmétiques2.2 Tenseurs	3 3 4
3	Des circuits arithmétiques aux $\{*\}$ -formules	6
4	Des {*}-formules vers VP 4.1 Formules de dimension maximale bornée	7 7 8
5	Remarques 5.1 À propos de la contraction avec les vecteurs	9 9
6	Conclusion	10

1 Introduction

La classe **VP**, introduite par Valiant dans les années 70, est définie comme étant l'ensemble des familles de fonctions polynomiales pouvant être calculées par des circuits arithmétiques de tailles polynomiales. Si toute une théorie de la complexité existe dans ce cadre, cette classe n'en est pas pour autant clairement comprise. On ne dispose notamment que de très peu d'autres caractérisations ou de problèmes naturels complets pour cette classe de complexité.

L'idée de l'article que nous étudions ici [1] est de s'intéresser à des itérations polynomiales de contractions tensorielles. En effet, l'itération polynomiale de produits matriciels présente un certain nombre de propriétés intéressantes (comparaison avec les programmes à branchement, ...), mais ne caractérise pas exactement **VP**. Il peut ainsi paraître naturel de considérer une forme de généralisation du produit matriciel. Il s'avère au final que non seulement le calcul par contractions tensorielles capture exactement **VP**, mais qu'en plus cette caractérisation est robuste, dans la mesure où l'on peut se donner certaines restrictions sur les tenseurs sans perdre en expressivité.

Nous suivrons ici linéairement le plan de l'article. Après une première partie de définitions (Section 2), nous étudierons comment passer de manière naturelle d'un circuit arithmétique de taille polynomiale à des contractions tensorielles calculant le même résultat (Section 3). Puis nous considérerons la réciproque, à savoir que nous montrerons que toute famille de fonctions polynomiales calculée par contractions tensorielles est dans **VP** (Section 4). Nous procéderons pour cela par étapes, en bornant tout d'abord certains paramètres, puis en éliminant une à une ces restrictions. Enfin (Section 5), nous terminerons par quelques remarques qualitatives sur la contraction tensorielle et la portée de ce travail.

De manière générale, nous ne rentrerons pas systématiquement dans le détail des preuves, et n'énoncerons que les grandes lignes permettant d'aboutir aux résultats principaux. Nous laisserons au lecteur le soin de vérifier que la taille des objets construits correspond bien à celle annoncée (souvent polynomiale), les preuves complètes étant données dans l'article.

2 Définitions

Nous rappelons ici quelques définitions préliminaires nécessaires à la bonne compréhension de l'article.

2.1 Circuits arithmétiques

Définition 1. Un circuit arithmétique est un graphe orienté acyclique dont les sommetss (que nous appelerons portes) sont de degré entrant 0 ou 2. Les

portes de degré entrant 0 sont appelées entrées et sont étiquetées par des variables ou des constantes. Les portes de degré entrant 2 sont étiquetées par l'opération + ou \times . On définit par induction le polynôme calculé par une porte du circuit. Enfin, on définit la taille d'un circuit $|\mathcal{C}|$ comme étant son nombre de portes.

Une famille $(f_n)_{n\in\mathbb{N}}$ de polynômes de degré polynomialement borné est dans \mathbf{VP} si il existe une famille de circuits $(\mathcal{C}_n)_{n\in\mathbb{N}}$) et un polynôme P tels que pour tout n, \mathcal{C}_n calcule f_n et $|\mathcal{C}_n| < P(n)$.

Par commodité, on s'intéresse parfois à des sous-classes des circuits arithmétiques en considérant certaines restrictions sur les portes de calculs. L'une d'entre elle nous intéressera particulièrement ici.

Définition 2. Un circuit est dit multiplicativement disjoint si pour chacune de ses portes \times , les deux sous-circuits d'entrée de la porte sont disjoints.

Cette classe de circuit permet aussi de capturer **VP**, comme le montre le théorème suivant :

Théorème 3 ([2]). Une famille $(f_n)_{n\in\mathbb{N}}$ de polynômes est dans **VP** si et seulement si il existe une famille $(C_n)_{n\in\mathbb{N}}$ de circuits multiplicativement disjoints, de taille polynomialement bornée, telle que pour tout n, C_n calcule f_n .

2.2 Tenseurs

Dans cet article, les auteurs font le choix d'interpréter les tenseurs comme des tableaux multi-dimensionnels, faisant abstraction de leur structure algébrique. On note [n] l'ensemble [1;n] des entiers entre 1 et n.

Définition 4. Un tenseur T de dimension k et d'ordre $(n_1, n_2, ..., n_k)$ est un tableau de dimension k dont les vecteurs sont de tailles respectives $n_1, ..., n_k : T : (i_1, ..., i_k) \in [n_1] \times ... \times [n_k] \mapsto T[i_1, ..., i_k] \in \mathbb{K}$. La taille d'un tenseur est le nombre possible de ses entrées : $||T|| = \prod_{j=1}^k n_j$.

Définition 5. Soit T un tenseur de dimension k et d'ordre (n_1, \ldots, n_k) , G un tenseur de dimension l et d'ordre (m_1, \ldots, m_l) , si $n_k = m_1$, on définit la contraction de T et G (que l'on notera T * G) comme étant le tenseur de dimension k + l - 2, d'ordre $(n_1, \ldots, n_{k-1}, m_2, \ldots, m_l)$, vérifiant

$$\forall \boldsymbol{t} \in [n_1] \times \ldots \times [n_{k-1}], \boldsymbol{g} \in [m_2] \times \ldots \times [m_l], (T * G)[\boldsymbol{t}, \boldsymbol{g}] = \sum_{i=1}^{n_k} T[\boldsymbol{t}, i]G[i, \boldsymbol{g}]$$

Remarque 1. Lorsque n = 2, un tenseur n'est autre qu'une matrice (vu comme un tableau à 2 dimensions), et les définitions ci-dessus correspondent

à celle que l'on peut avoir l'habitude de manipuler pour des matrices (et la contraction correspond notamment au produit matriciel usuel). De plus, on peut toujours se représenter une contraction tensorielle comme étant un produit matriciel, en considérant \mathbf{t} (resp. \mathbf{g}) comme étant des entiers de $[n_1 \times \ldots \times n_{k-1}]$ (resp. $[m_2 \times \ldots \times m_l]$).

Définition 6. Une $\{*\}$ -formule F est un arbre binaire enraciné dont on étiquete les feuilles par des tenseurs et les noeuds par *. On définit par induction de manière usuelle le tenseur T_v calculé par un noeud $v:si\ v$ est une feuille, T_v n'est autre que son étiquete, sinon v a deux fils v_1, v_2 , et $T_v:=T_{v_1}*T_{v_2}$.

Contrairement aux formules arithmétiques, on ne pourra effectuer arbitrairement toutes les rotations que l'on imagine sur l'arbre d'une formule, dans la figure 1, l'arbre gauche donne $\begin{pmatrix} 1\\0 \end{pmatrix}$ pour résultat, celui de droite $\begin{pmatrix} 0\\0 \end{pmatrix}$:

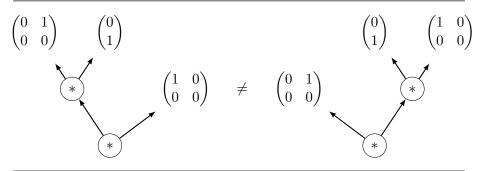


Figure 1 – Une rotation ne fonctionnant pas

En fait, le seul cas pathologique est celui des vecteurs (ie des tenseurs de dimension 1), ce qui sera fondamental par la suite. Dans tous les autres cas, l'associativité est préservée.

Proposition 7. Soient T, G, H des tenseurs avec $\dim(G) \geq 2$ et tels que (T * G) * H et T * (G * H) soient bien définis, alors

$$(T*G)*H = T*(G*H)$$

La preuve réside essentiellement dans la remarque 1, en considérant les matrices $G_{\mathbf{g}}[i,j] := (G[i,\mathbf{g},j])$ (en effet pour le calcul d'un coefficient de (T*G)*H, les coordonnées centrales de G (contenues dans \mathbf{g}) ne changent pas), le résultat découle de l'associativité du produit matriciel.

Définition 8. La taille |F| d'une formule F est définie comme le nombre de ses portes * plus la somme des tailles de ses entrées. La dimension de F (notée $\dim(F)$) est définie comme la dimension du tenseur calculé par F, et sa dimension maximale $\max \dim(F)$ est la dimension maximale des tenseurs calculés par ses portes. Enfin la dimension d'entrée de F est le maximum des dimensions de ses entrées.

3 Des circuits arithmétiques aux {*}-formules

Afin de montrer que les $\{*\}$ -formule capturent exactement \mathbf{VP} , les auteurs de l'article commencent par montrer que toute famille $(f_n)_{n\in\mathbb{N}} \in \mathbf{VP}$ peut être calculée par une $\{*\}$ -formule , soit en quelque sorte la complétude des $\{*\}$ -formules pour \mathbf{VP} .

Théorème 9. Soit $(f_n)_{n\in\mathbb{N}} \in \mathbf{VP}$. Il existe une famille $(F_n)_{n\in\mathbb{N}}$ de $\{*\}$ formules de dimension maximale 3 et de taille polynomiale telle que pour
tout n, F_n calcule f_n .

D'après le théorème 3, il suffit de trouver une manière de calculer le résultat d'un circuit multiplicativement disjoint par une {*}-formule. Pour cela, les auteurs ont proposé une première preuve, relativement complexe et reposant sur les parse tree d'un circuit multiplicativement disjoint, en se servant d'un résultat garantissant que ces parse tree peuvent être pris tous isomorphes. Nous présenterons ici une seconde preuve, plus récente et surtout beaucoup plus simple.

Démonstration. Soit \mathcal{C} un circuit multiplicativement disjoint, nous noterons $n = |\mathcal{C}|$. Nous allons raisonner par induction sur n et montrer que l'existence d'une $\{*\}$ -formule de dimension maximale 3, dont le résultat F est d'ordre n+1, de dimension 1, et vérifie F[n+1] = 1 et $\forall i \in [n], F[i] = P_{v_i}$, où v_1, \ldots, v_n est une numérotation des portes de \mathcal{C} , et P_v est le polynôme calculé par la porte v.

Si n=1, $\mathcal C$ est réduit à une entrée v_1 étique tée par s, et alors T:=[s,1] convient.

Sinon, on numérote C de sorte que la porte de sortie soit n+1, que le souscircuit droit aille de v_1 à v_p , le sous-circuit gauche de v_{p+1} à v_n , et l'on note n=m+p.

• Si v_{n+1} est une entrée étiquetée par s: soit F_n le tenseur de dimension 1 obtenu par hypothèse d'induction. On pose T le tenseur de dimension 2 et d'ordre (n+2), (n+1) suivant :

$$T[i,j] = \begin{cases} \delta_{i,j} & \text{si } i \leq n \\ \delta_{n+1,j} \cdot s & \text{si } i = n+1 \\ \delta_{n+1,j} & \text{si } i = n+2 \end{cases}$$

On montre alors facilement que $F_{n+1} := T * F_n$ convient.

• Si v_{n+1} est une porte +. Soit v_k et v_l les deux portes entrantes de v_{n+1} . Soit F_n obtenu par induction sur le circuit privé de v_{n+1} . On pose T le tenseur de dimension 2 et d'ordre (n+2,n+1) suivant :

$$T[i,j] = \begin{cases} \delta_{i,j} & \text{si } i \leq n \\ \delta_{k,j} + \delta k, l & \text{si } i = n+1 \\ \delta_{n+1,j} & \text{si } i = n+2 \end{cases}$$

Encore une fois, on a facilement que $F_{n+1} := T * F_n$ convient.

• Enfin, si v_{n+1} est une porte \times . \mathcal{C} étant multiplicativement disjoint, on peut considérer deux sous-circuits \mathcal{C}_p et \mathcal{C}_m dont les sorties respectives sont les entrées de v_{n+1} . Par commodité de notation, on considérera que le sommet numéroté par j dans \mathcal{C}_m est celui numéroté par p+j. Soient F_p, F_m obtenus par induction sur $\mathcal{C}_p, \mathcal{C}_m$. On pose T le tenseur de dimension 3 et d'ordre (p+1, n+2, m+1) suivant :

$$T[k, i, j] = \begin{cases} \delta_{j,m+1} \delta_{k,1} & \text{si } i \leq p \\ \delta_{k,p+1} & \text{si } p < i \leq n \\ \delta_{j,m} \delta_{k,p} & \text{si } i = n+1 \\ \delta_{j,m+1} \delta_{k,p+1} & \text{si } i = n+2 \end{cases}$$

Nous laissons au lecteur le soin de vérifier que $F_{n+1} := (F_p * T) * F_m$ convient, le point crucial étant de voir que l'on se sert du 1 en dernière case de F_p (resp. de F_m) pour copier F_m (resp. F_p) lors de la multiplication à droite (resp. gauche).

Au final, nous avons bien construit une $\{*\}$ -formule de taille polynomiale, de dimension maximale 3 et calculant la fonction polynomiale calculée par C.

4 Des {*}-formules vers VP

Dans la quatrième section de leur article, les auteurs montrent que toute {*}-formule de taille polynomiale appartient bien à **VP**. Pour ce faire, ils procèdent par étapes, en commençant par montrer le résultat pour des {*}-formules de dimension maximale bornée, puis en ne bornant plus que la taille des entrées, et finalement dans le cadre général (cf. théorème 14), ce qui constitue le résultat principal de cette section.

4.1 Formules de dimension maximale bornée

Remarque 2. Il faut bien noter la différence entre borner la dimension maximale de F et celle de ses entrées : si l'on considère par exemple T_1, \ldots, T_n des tenseurs de dimension 3 et d'ordre (n, n, n), alors $T_1 * (T_2 * (\ldots (T_{n-1} * T_n) \ldots))$ est de dimension n, d'ordre (n, \ldots, n) et engendre donc n^n calculs de coefficients.

Proposition 10. Soit F une $\{*\}$ -formule de dimension maximale k, d'ordre (n_1, \ldots, n_l) , soit n l'ordre maximal de ses entrées, alors il existe un circuit multiplicativement disjoint C de taille $O(n^{k+1}|F|)$ tel que pour tout $\mathbf{e} \in [n_1] \times \ldots \times [n_l]$, il existe une porte $v_{\mathbf{e}}$ de C calculant $F[\mathbf{e}]$

La preuve se fait par une induction classique sur F, où lorsque F est de la forme G*H, on rajoute à $\mathcal{C}_G \cup \mathcal{C}_H$ toutes les portes nécessaires au calcul de chacun des $F[\mathbf{e}] = \sum_{i=1}^m G[\mathbf{e}_1,i]H[i,\mathbf{e}_2]$, cette construction vérifiant la borne à chaque étape (G et H vérifiant les mêmes bornes).

4.2 Dimension non-bornée

La construction précédente repose sur la borne k de la dimension maximale de F. Cependant, de façon étonnante, on ne gagne rien en laissant croître arbitrairement les sous-formules de F, et donc la borne imposée sur la dimension maximale n'est pas réellement une restriction. C'est là l'un des apport principaux de cet article vis-à-vis des travaux qui avaient pu être effectués auparavant dans d'autres cadres sur le calcul tensoriel.

Définition 11. Une $\{*\}$ -formule F de dimension k et de dimension d'entrée p est dite docile si max $\dim(F) \leq \max(k, p)$, et totalement docile si toutes ses sous-formules sont dociles.

En reprenant les mêmes notations, on constate que si p > k, quelque soit T tenseur, si F est docile, alors T*F est docile. Le risque principale de perte du caractère docile provient du cas où $k \leq p$ et où l'on multiplie par un tenseur de dimension 1. Cependant, le lemme suivant nous montre que l'on peut dans ce cas trouver une formule équivalente en préservant la docilité.

Lemme 12. Soit F une formule totalement docile, avec $\dim(F) = k$ et de dimension d'entrée p. Pour toute formule E totalement docile de dimension 1, il existe des formules totalement dociles G_g, G_d telles que $|G_g| = |G_d| = |F * E| = |E * F|, G_g \simeq E * F$ et $G_r \simeq F * E$.

Démonstration. Montrons l'existence de G_g par induction sur F (on raisonne de façon similaire pour G_d). Le cas intéressant, lorsque F est de la forme $F_1 * F_2$, se traite par distinction de cas sur la dimension de F_1 . Nous passons ici sur la vérification du caractère docile des formules construites, il suffit à chaque fois d'examiner soigneusement les dimensions des sous-formules relativement à celles de F.

- Si dim $(F_1) = 1$, E * F convient.
- Si $\dim(F_1) = 2$, $(E * F_1)$ est de dimension 1 et est totalement docile. Or la Proposition 7 donne $E * F \simeq (E * F_1) * F_2$. L'hypothèse d'induction appliquée sur $(E * F_1)$ et F_2 permet de conclure.

• Si dim $(F_1) > 2$, on applique l'hypothèse d'induction une première fois sur E et F_1 pour obtenir $G \simeq E * F_1$ totalement docile. Alors $G * F_2$ convient. \square

De ce lemme on déduit la proposition suivante :

Proposition 13. Pour toute $\{*\}$ -formule F, il existe une $\{*\}$ -formule F' totalement docile telle que $F' \simeq F$ et |F'| = |F|

La preuve se fait de façon très simple par induction, pour $F = F_1 * F_2$, si $\dim(F_1) = 1$ ou $\dim(F_2) = 1$, on applique le lemme précédent à F'_1, F'_2 , sinon $F'_1 * F'_2$ convient.

Cependant, nous ne nous sommes pas encore affranchis de toutes les bornes, il en reste une sur la dimension d'entrée. On peut s'en débarasser assez aisément en montrant que l'on peut remplacer tout tenseur d'entrée de dimension r par le produit de r tenseurs de dimension $3: T_1 * ... * T_r$.

Ce qui permet, en utilisant les Propositions 10 et 13, d'aboutir au résultat final de cette section :

Théorème 14. $Si(F_n)$, une $\{*\}$ -formule de taille polynomiale, calcule une famille (f_n) de fonction polynomiale, alors $(f_n) \in \mathbf{VP}$.

5 Remarques

5.1 À propos de la contraction avec les vecteurs

Une remarque importante est à faire sur l'utilité des vecteurs dans les $\{*\}$ -formules. En effet, nous avons vu dans la Proposition 7 que l'associativité n'était pas valable pour certaines contractions faisant intervenir des vecteurs. En fait, cette rupture de l'associativité est absolument capitale : si l'on ne considère que des tenseurs de dimensions au moins 2, comme nous l'avions esquissé dans la remarque 1, tout se passe comme si l'on travaillait uniquement avec des produits matriciels. Et alors ces $\{*\}$ -formules restreintes ne captureront plus que $\mathbf{VP}_{\mathrm{WS}}$, caractérisable par des formules à base de produits matriciels [2]. Par associativité, on pourra en effet écrire toute formule sous la forme $F = A_1 * (A_2 * \ldots A_n) \ldots$), et alors la preuve de la Proposition 10 nous donnera cette fois-ci un circuit skew, et les autres résultats resteront valables.

5.2 À propos de la définition de contraction

La définition de contraction repose sur le choix arbitraire de contracter la dernière colonne d'un tenseur avec la première du suivant. On pourrait cependant imaginer de travailler avec des opérateurs $*_{i,j}$ qui effectueraient la contraction de la $i^{\text{ème}}$ colonne d'un tenseur avec la $j^{\text{ème}}$ de l'autre (notre

opérateur * correspond à $*_{n,1}$). Cependant, l'article montre que cela ne permettrait pas de gagner en expressivité. On pourrait obtenir un résultat analogue au Théorème 14 en suivant la même démarche. Le seul point technique serait dans l'adaptation du Lemme 12, puisque les $*_{i,j}$ ne sont en général pas associatifs. Cependant, les problèmes venant de contractions avec des vecteurs, les auteurs de l'article expliquent que l'on pourrait écrire des formules pour chaque cas problématiques, ce qui permet de conclure tout de même.

6 Conclusion

Dans cet article est présentée une notion de $\{*\}$ -formules qui permet de caractériser la classe \mathbf{VP} . Cette caractérisation est une forme de généralisation de celle de la classe \mathbf{VP}_{ws} comme étant l'ensemble des polynômes calculables par produits matriciels, et le gain en expressivité provient de la contraction avec des tenseurs de dimension 1. De plus, cette caractérisation est relativement robuste, puisque l'on peut ajouter un certain nombre de restrictions sur les entrées d'une $\{*\}$ -formule sans perdre en puissance calculatoire. En outre, elle reste valable en considérant des opérateurs $*_{i,j}$ légèrement différents.

Dans le prolongement de cet article, on pourrait aussi se demander si l'ajout de l'addition ou de la multiplication au calcul tensoriel permettrait de gagner en puissance calculatoire, la réponse n'apparaissant pas comme triviale au premier abord. Enfin, une caractérisation analogue à celle de $\mathbf{VP}_{\mathrm{WS}}$ par des programmes à branchements ne semble pas découler immédiatement de cette caractérisation, l'existence d'une telle caractérisation reste donc une question ouverte.

Références

- [1] Florent Capelli, Arnaud Durand, and Stefan Mengel, *The arithmetic complexity of tensor contractions*, CoRR **abs/1209.4865** (2012).
- [2] Guillaume Malod and Natacha Portier, *Characterizing valiant's algebraic complexity classes*, J. Complexity **24** (2008), no. 1, 16–38.