计算方法

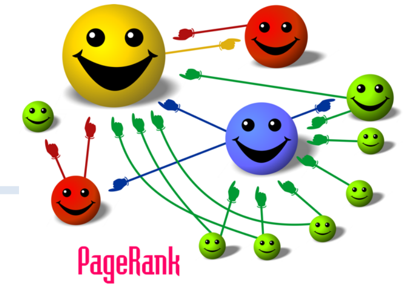
刘景铖

计算机软件新技术国家重点实验室
南京大学

广告：暑期讲习班

- http://njutcs.yuyiai.cn/
- 第二届“计算理论之美”暑期讲习班
- 2023年7月4日至7月7日
- 主题：概率与随机算法

谱图理论 (Spectral graph theory)



谱分析：特征值 + 特征向量 + 相关的线性代数

图论与组合结构:

- 连通性 (Cheeger不等式)
- 图染色
- 聚类(Clustering)
- Mixing of random walks
- Expander graphs (efficient network, superconcentrators)

计算机科学:

- Pagerank
- 迭代法解线性方程
- 纯电阻电路网络
- 稀疏化Sparsification
- Expander codes (LDPC, Tanner codes)
- 不可近似性(Dinur’s proof of the PCP theorem)
- 去随机化 (Derandomization)

回顾：Random walk on graphs

给定图$G = (V, E)$

图上的随机游走:

- **从一个给定的顶点出发**
- **接下来，**每一步都从当前顶点，移动到一个均匀随机选取的邻居
- **不断重复**

这个随机过程的“长期表现”是怎么样的呢？

1. 重复t步之后，当前顶点是某个顶点u的概率是多少？
2. 是否存在一个极限的随机分布，**随机游走会收敛到它？（稳态）**
3. 多久才会收敛？(混合时间，mixing time)
4. **从点s出发，多久才会到达点t? (hitting time)**
5. **多久才会遍历每个顶点至少一次？(遍历时间，cover time)**

回顾

上节课: 无向图上的马尔可夫链基本定理

随机游走的混合时间 (mixing time)与谱间隔 (spectral gap)

这节课：电路电阻网络

“等效电阻”距离

随机游走的碰撞时间(Hitting time)和遍历时间 (cover time)

电路网络

给定一个无向图，每条边上有一个电阻，电阻值为r_e。

电路网络可以由基尔霍夫定律(Kirchhoff's law)和欧姆定律(Ohm's law):

- **基尔霍夫定律:** 所有进入某节点的电流的总和，等于所有离开这节点的电流的总和
- 欧姆定律: 把节点的电压（电势）记为$\phi: V \to \mathbb{R}$，则有$\phi(u) - \phi(v) = i_{uv} r_{uv}$，其中$i_{uv}$**是$u$到$v$的方向电流**（特别地，有$i_{uv} = -i_{vu}$）

- **如何计算电路网络**？

电路网络的矩阵表示

给定电阻 r_e（或者电导率$w_e = 1/r_e$），如果从节点s注入1A的电流，并且从节点t流出，如何求解/模拟电路网络内部的电流和电压？

更一般地，记b_v为（从电路外部）流入到节点$v \in V$的方向电流

- $b_v > 0$意味着（从外部）注入电流
- $b_v < 0$意味着（向外部）流出的电流
- 除了源节点(source)和汇出节点(sink)，其它内部节点有$b_v = 0$

翻译一下电流和电压需要遵循的定律：

- 基尔霍夫定律:

$$\sum_{u:vu\in E} i_{vu} = b_v, \qquad \forall v \in V$$

对于每个节点
内部流出的电流=外部流入的电流

- 欧姆定律:

$$\phi(u) - \phi(v) = i_{uv} r_{uv} \quad \Leftrightarrow \quad i_{uv} = w_{uv}\big(\phi(u) - \phi(v)\big)$$

两相合并可得：

$$b_v = \sum_{u:vu\in E} i_{vu} = \sum_{u:vu\in E} w_{uv}\big(\phi(v) - \phi(u)\big) = \deg_w(v)\,\phi(v) - \sum_{u:vu\in E} w_{uv}\phi(u)$$

其中 $\deg_w(v) = \sum_{u:vu\in E} w_{uv}$是节点 v的加权的度数。特别地如果$w_{uv} = 1$，有$\vec{b} = L\vec{\phi}$

电路网络的矩阵表示

给定电阻r_e（或者电导率$w_e = 1/r_e$），如果从节点s注入1A的电流，并且从节点t流出，如何求解/模拟电路网络内部的电流和电压？

求解$\vec{b} = L\vec{\phi}$！

计算出电压$\vec{\phi}$之后，电流$i_{uv} = w_{uv}(\phi(u) - \phi(v))$可直接由欧姆定律得出

考虑incidence matrix B，有$\vec{i} = WB^T\vec{\phi}$

事实上，拉普拉斯矩阵亦可以写成$L = \sum_e w_e b_e b_e^T = BWB^T$

$\vec{b} = L\vec{\phi} = BWB^T\vec{\phi} = B\vec{i}$，基尔霍夫定律, **flow conservation**

注解：很多问题与电路网络的联系，正是从这些方程组开始

Pseudo-inverse of L

注意拉普拉斯矩阵L并不是满秩的， $L\vec{1} = \vec{0}$
所以 $L\vec{\phi} = \vec{b}$不一定有唯一的解
回顾：如果图是连通的，则L的第二小特征值严格大于0；因此L的零空间(nullspace)完全由 $\vec{1}$张成。

引理：如果存在向量$\vec{\phi}$ 使得$L\vec{\phi} = \vec{b}$，则$\vec{b} \perp \vec{1}$
证明：假设$\vec{\phi} = \sum_i c_i v_i$，其中$v_1 = \frac{1}{\sqrt{n}}\vec{1}$
则$L\vec{\phi} = c_2\lambda_2 v_2 + \cdots + c_n\lambda_n v_n$
因此 $L\vec{\phi} \perp \vec{1}$

对于电路网络来说，这也是合理的：外部流入的电流与流出的电流相等

Pseudo-inverse of L

引理：如果$\vec{b} \perp \vec{1}$，则存在向量$\vec{\phi}$使得$L\vec{\phi} = \vec{b}$

证明： 因为$\vec{b} \perp \vec{1}$，因此$\vec{b} = \sum_{i=2}^{n} a_i v_i$

考虑$\vec{\phi} = \sum_{i=2}^{n} \frac{a_i}{\lambda_i} v_i$， 可以验证$L\vec{\phi} = \vec{b}$

因此$L^{\ddagger} \coloneqq \sum_{i=2}^{n} \frac{1}{\lambda_i} v_i v_i^T$是一个pseudoinverse(伪逆)：

- 任意向量 $\vec{b} \perp \vec{1}$都被映射到一个唯一的$\vec{\phi}$使得 $L\vec{\phi} = \vec{b}$且 $\vec{\phi} \perp \vec{1}$
- $L\vec{\phi} = \vec{b}$ 全体解集为$\{L^{\ddagger}\vec{b} + c\vec{1}: c \in \mathbb{R}\}$, $\overrightarrow{L^{\ddagger} b}$的所有“平移”
- 特别地，如果固定一个节点的电压/电势$\phi(v) = 0$，有唯一解

Effective resistance (等效电阻)

节点s和t之间的等效电阻$R_{\text{eff}}(s,t) := \phi(s) - \phi(t)$，其中$\vec{\phi}$满足$L\vec{\phi} = \vec{b}$， $\vec{b}$对应于从s到t发送1A电流的向量

相当于把整个图看成一个等效的大电阻的时候，对应的等效的电阻

引理： $R_{\text{eff}}(s,t) = b_{st}^T L^{\ddagger} b_{st}$，其中向量$b_{st} \in \mathbb{R}^n$满足$b_{st}(s) = 1, b_{st}(t) = -1$，并且其它位置都为0

Energy (电势能)

$$\mathcal{E}(\vec{i}) := \sum_{e\in E} i_e^2 \cdot r_e$$

直观上，可以把整个网络看成从s到t的一个大电阻

<u>定理</u>. $\mathcal{E}(\vec{i}) = R_{\text{eff}}(s,t)$, 其中$i$是从$s$到$t$的单位电流.

证明：$\sum_{e\in E} i_e^2 \cdot r_e = \sum_e \frac{\left(\phi(u)-\phi(v)\right)^2}{r_e} = \phi^T L\phi$,

其中ϕ满足$L\phi = b_{st}$，因此$\phi = L^{\dagger} b_{st}$

进而有$\mathcal{E}(\vec{i}) = b_{st}^T L^{\dagger} b_{st} = R_{\text{eff}}(s,t)$

Thompson's Principle

定理. $R_{\text{eff}}(s,t) \le \mathcal{E}(\vec{g})$，其中$\vec{g}$是任意$s$-$t$流.

为简单起见，这里只考虑$r_e = 1, \forall r_e$的情形

证明(sketch)：考虑 $\min \mathcal{E}(\vec{g}) = \min \sum_{e\in E} g_e^2$, s.t. $B\vec{g} = b_{st}$

Optimality (KKT) requires that $\exists \phi \in \mathbb{R}^n\ s.t.\ B^T\phi = \vec{g}$

即流 $\vec{g}$是由某个电压向量 ϕ通过Ohm's law确定的

因此 $\vec{g}$是电流

单位s-t电流最小化所有能量

单调性

定理. 如果$\overrightarrow{r'} \geq \vec{r}$, 则有$R_{\mathrm{eff},\overrightarrow{r'}}(s,t) \geq R_{\mathrm{eff},\vec{r}}(s,t)$.

证明：设$\vec{\iota}$为电阻值$\vec{r}$的网络中从s到t的单位电流，

$\overrightarrow{i'}$为电阻值$\overrightarrow{r'}$的网络中从s到t的单位电流

$$R_{\mathrm{eff},\vec{r}}(s,t) = \mathcal{E}_{\vec{r}}(\vec{\iota}) \leq \mathcal{E}_{\vec{r}}\left(\overrightarrow{i'}\right) \leq \mathcal{E}_{\overrightarrow{r'}}\left(\overrightarrow{i'}\right) = R_{\mathrm{eff},\overrightarrow{r'}}(s,t)$$

这里第一个不等号使用了Thompson’s principle;

第二个不等号使用了$\overrightarrow{r'} \geq \vec{r}$以及 $\mathcal{E}_{\vec{r}}(\vec{\iota}) \coloneqq \sum_{e\in E} i_e^2 \cdot r_e$

Edge-disjoint paths

例子：如果s到t之间有k 条“边不相交”的路径，每个路径长度最多为l, 那么$R_{\text{eff}}(s,t) \leq \frac{l}{k}$

等效电阻距离

引理. $R_{\text{eff}}(a,b)+R_{\text{eff}}(b,c)\geq R_{\text{eff}}(a,c)$

（课后练习）

回顾：随机游走

1. 碰撞时间 (Hitting time): $H_{u,v} := \min\{t \geq 1 \mid X_1 = u \; and \; X_t = v\}$ and $h_{u,v} = \mathbb{E}[H_{u,v}]$.

2. 返程时间 (Commute time): $C_{u,v} := \; h_{u,v} + h_{v,u}$.

3. 遍历时间 (Cover time): cover_v 定义为：从v出发的随机游走访问每个节点至少一次需要的期望时间；$\text{cover}_G := \max_{\text{v}} \text{cover}_v$

Commute time

定理. 对任意的节点s 和 t，$C_{s,t}=2mR_{\text{eff}}(s,t)$，其中$m=|E(G)|$.
证明：固定节点 t ，记$h_{u,t}$为从点 u节点 t的hitting time，满足$\forall u\neq t$

$$h_{u,t}=1+\frac{1}{d_u}\sum_{v\sim u}h_{v,t}\Rightarrow d_u h_{u,t}-\sum_{v\sim u}h_{v,t}=d_u$$

考虑$\overrightarrow{h_{*,t}}$这一向量，它满足

$$\begin{pmatrix} & & \\ & D-A & \\ & & \end{pmatrix}\begin{pmatrix} h_{u,t} \\ \\ h_{t,t}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix} d_u \\ \\ d_t-2m\end{pmatrix}$$

(To be cont'd..)

Commute time

定理. 对任意的节点s 和 t，$C_{s,t}=2mR_{\text{eff}}(s,t)$，其中$m=|E(G)|$.

证明：固定节点 s，记$h_{u,s}$为从点 u节点 s的hitting time，满足$\forall u\neq s$

$$h_{u,s}=1+\frac{1}{d_u}\sum_{v\sim u}h_{v,s}\Rightarrow d_u h_{u,s}-\sum_{v\sim u}h_{v,s}=d_u$$

考虑$\overrightarrow{h_{*,s}}$这一向量，它满足

$$\begin{pmatrix} & & \\ & D-A & \\ & & \end{pmatrix}\begin{pmatrix} h_{s,s} \\ h_{u,s} \\ \\ h_{t,s}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix} d_s-2m \\ d_u \\ \\ d_t\end{pmatrix}$$

(To be cont'd..)

Commute time

定理. 对任意的节点s 和 t，$C_{s,t}=2mR_{\mathrm{eff}}(s,t)$，其中$m=|E(G)|$.

证明(cont'd)：

$$L(\overrightarrow{h_{*,t}}-\overrightarrow{h_{*,s}})=\begin{pmatrix} d_s \\ d_u \\ \vdots \\ d_t-2m \end{pmatrix}-\begin{pmatrix} d_s-2m \\ d_u \\ \vdots \\ d_t \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 2m \\ 0 \\ \vdots \\ -2m \end{pmatrix}$$

因此$\frac{L(\overrightarrow{h_{*,t}}-\overrightarrow{h_{*,s}})}{2m}=b_{s,t}$。回顾$L\phi=b_{st}$，有解，且解空间是一维的

令$\phi=\frac{\overrightarrow{h_{*,t}}-\overrightarrow{h_{*,s}}}{2m}$，有

$$R_{\mathrm{eff}}(s,t)=\phi(s)-\phi(t)=\frac{h_{s,t}-h_{s,s}}{2m}-\frac{h_{t,t}-h_{t,s}}{2m}=\frac{h_{s,t}+h_{t,s}}{2m}=\frac{C_{s,t}}{2m}$$

Cover time

Corollary. $C_{u,v} \leq 2m$ for every edge $uv \in E$.

Theorem. The cover time of a connected graph is at most $2m(n-1)$.

Approximating Cover Time by Resistance Diameter

Theorem. Let $R(G) \coloneqq \max_{u,v} R_{\text{eff}}(u,v)$ be the resistance diameter.

$$\text{Then, } m \cdot R(G) \le \text{cover}(G) \le 2e^3 m \cdot R(G) \cdot \ln n + n.$$

Graph Connectivity

There is an $O(n^3)$ time algorithm to solve s-t connectivity using only $O(\log n)$ space.