



计算方法

刘景铨

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

- <https://tcs.nju.edu.cn/wiki/index.php?title=%E8%AE%A1%E7%AE%97%E7%90%86%E8%AE%BA%E4%B9%8B%E7%BE%8E> (Summer 2024)
- 第三届“计算理论之美”暑期讲习班
- 2024年7月13日至7月16日
- 主题：算法设计



回顾

上节课:

- 电路电阻网络
- “等效电阻” 距离

这节课:

- 随机游走的碰撞时间(**Hitting time**)和返程时间(**commute time**)
- 线性规划 **LP**



回顾：随机游走

1. 碰撞时间 (Hitting time): $H_{u,v} := \min\{t \geq 1 \mid X_1 = u \text{ and } X_t = v\}$
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； $\text{cover}_G := \max_v \text{cover}_v$



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 到节点 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 $\vec{h}_{*,t}$ 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 到节点 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 $\vec{h}_{*,s}$ 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 , $C_{s,t} = 2mR_{\text{eff}}(s,t)$, 其中 $m = |E(G)|$.

证明(cont'd):

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

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

令 $\phi = \frac{\vec{h}_{*,t} - \vec{h}_{*,s}}{2m}$, 有

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



Cover time

推论. $C_{u,v} \leq 2m$, 对于任意的 $uv \in E$ 成立.

定理. 连通图的遍历时间最多为 $2m(n - 1)$.



Approximating Cover Time by Resistance Diameter

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

$$m \cdot R(G) \leq \text{cover}(G) \leq 2e^3 m \cdot R(G) \cdot \ln n + n$$

Proof: Firstly,

$$\text{cover}(G) \geq \max\{h_{uv}, h_{vu}\} \geq \frac{C_{uv}}{2} = mR_{uv},$$

which is the lowerbound.

For the upperbound, notice that the maximum commute time from any vertex is at most $2mR(G)$

If the random walk is run for $2e^3 m \cdot R(G)$, by Markov's inequality, the probability that a vertex is not visited is at most $1/e^3$

If we repeat this $\ln n$ times, the probability that a vertex is not visited is at most $1/n^3$

By a union bound, the probability that there exists a vertex not visited is at most $1/n^2$

In such cases, we can pay for another pessimistic cover time of n^3

Combined, we have $\text{cover}(G) \leq 2e^3 m \cdot R(G) \cdot \ln n + \frac{1}{n^2} n^3$



Graph Connectivity (选讲)

Theorem. There is an $O(n^3)$ time algorithm to solve s - t connectivity using only $O(\log n)$ space
Using random walk, the space requirement is $O(\log n)$ and expected running time is $O(|V||E|) = O(n^3)$

You may wonder, is randomness necessary for checking graph connectivity in log-space?

Definition. A sequence σ is (d, n) -universal if for every labeled connected d -regular graphs and every starting vertex s , the walk defined by σ started from s covers every vertices

Theorem. There exists (d, n) -universal sequence of length $O(n^3 d^2 \log nd)$ for undirected graphs

HINT: Cover time is at most $O(n^2 d)$ for d -regular graphs

Reingold's Theorem For undirected graphs, one can explicitly construct such a universal sequence in log-space

It is an open problem to derandomize log-space connectivity
Though likely not through “directed” universal sequences



更多的联系与应用

- Spectral Embedding/Partitioning
 - 课堂上：拉普拉斯矩阵的特征值与图的连通性的关系
 - 上次作业：使用拉普拉斯矩阵的特征向量画图, elastic spring networks
 - 更一般地，拉普拉斯矩阵的特征向量包含的信息可用于做图的分解/分割
 - Cheeger's inequality and its generalizations
- 图的稀疏化 (Graph sparsification)
 - 等效电阻与均匀随机生成树
 - 根据等效电阻，对边进行采样
 - 更复杂的算法可以做到 $O(n)$ 条边
- 计算等效电阻: 解拉普拉斯方程组
 - 几乎线性时间里求解;
 - 作为对比：一般的线性方程组，高斯消元需要 $O(n^3)$ ；迭代法则需要条件数比较好；
- 网络流问题：近似线性时间
-

开放研究问题：如果对有向图增加或删掉一条边，Pagerank会变化多少？



Optimization

给定连续可导 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, 最小化 f

例子:

最小二乘法: $f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2$

向量投影: $f(c) = \|c\vec{a} - \vec{b}\|_2^2$

求伪逆(Pseudoinverse): $f(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x}\|_2^2$, subject to $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$

对称矩阵的特征值: $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^\top \mathbf{A} \mathbf{x}$, subject to $\mathbf{x}^\top \mathbf{x} = 1$

线性规划: $f(\mathbf{x}) = \mathbf{c}^\top \mathbf{x}$, subject to $\mathbf{Ax} \geq \mathbf{b}$

主成分分析 (Principal component analysis):

$$f(\mathbf{C}) = \|\mathbf{X} - \mathbf{CC}^\top \mathbf{X}\|_F, \text{ subject to } \mathbf{C} \mathbf{C}^\top = \mathbf{I}_{d \times d}$$

离散组合优化: 最小生成树, 最小割、最大流 (网络流), 最短路径, 最大匹配; 最大独立集、团、支配集, 最小覆盖, 背包问题, 最大割, max-SAT, 旅行商问题, 最长路径 (哈密顿路径)



线性规划 (Linear Programming)

例子：面包店

	面粉	糖	鸡蛋
甜甜圈 (Donuts)	2	2	7
蛋糕 (Cake)	5	9	12
现有原料	≤ 200	≤ 300	≤ 500

甜甜圈单个的利润=5， 蛋糕单个的利润=25
在现有的原料的限制下，如何最大化利润？



线性规划 (Linear Programming)

例子：电力供应

已知：发电厂传输电力到各个城市的电力损耗，和各个城市的电力需求

	城市A	城市B	城市C
发电厂1	4%	5%	1%
发电厂2	3%	2%	7%
电力需求	≥ 40	≥ 60	≥ 80

在满足电力需求的前提下，如何最小化电力损失？



线性规划的矩阵形式

- 线性的约束可以通过矩阵表示：如果有 m 个约束和 n 个变量, 则可以有 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, 它的第 i 行正是第 i 个约束
- 目标函数亦可以通过向量 $c \in \mathbb{R}^n$ 表示

$$\max \langle c, x \rangle$$

$$Ax \leq b$$

$$\max \langle c, x \rangle$$

$$Ax = b$$

$$x \geq 0$$



几何直观

Polytope (多胞体): LP的可行区域, 即满足所有约束的点集

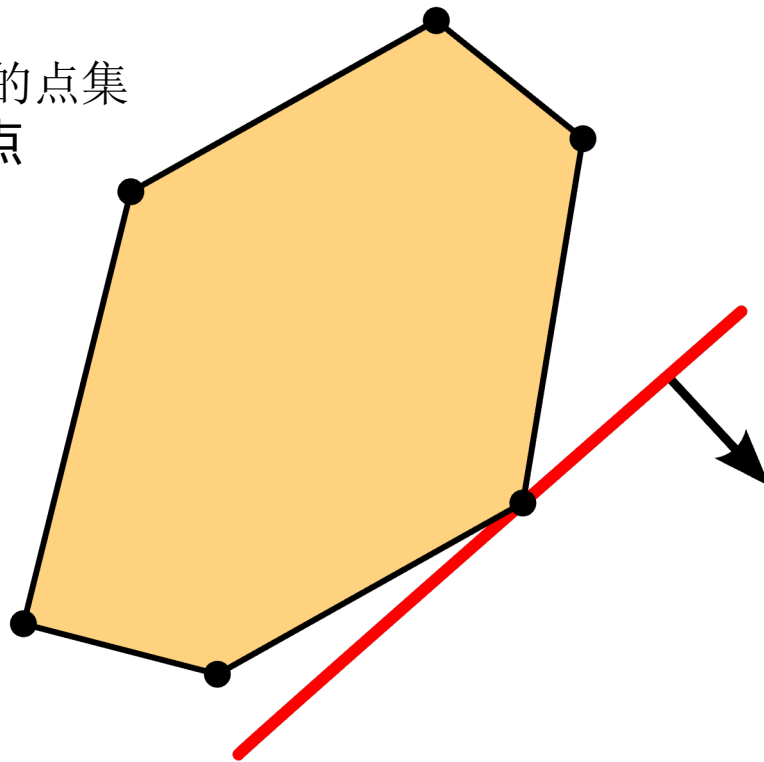
Vertex/Corner (顶点): 可行区域中n个超平面相交的点

每个约束定义一个半平面 (halfspace)

目标函数定义了一个方向:
找到该方向上最“远”的顶点 (可能不唯一)

事实1: LP的可行区域总是凸的 (convex)

事实2: LP一定存在一个最优解在顶点上



Source: Wikipedia CC0

凸集 (convex set): $\forall x, y \in S, \forall t \in [0, 1], tx + (1 - t)y \in S$



整数线性规划

很多组合优化问题都能通过整数线性规划表示出来

最大二分图匹配:

- $\max \sum_{e \in E} c_e x_e$
- $\sum_{e \in \delta(v)} x_e \leq 1 \quad \forall v \in V$
- $x_e \in \{0,1\} \quad \forall e \in E$

最大独立集:

- $\max \sum_{v \in V} c_v x_v$
- $x_u + x_v \leq 1 \quad \forall uv \in E$
- $x_v \in \{0,1\}$

包括NP-hard问题!



线性规划松弛化

最大独立集:

- $\max \sum_{v \in V} c_v x_v$
- $x_u + x_v \leq 1 \quad \forall uv \in E$
- $x_v \in \{0,1\}$

松弛化 (relaxation): $x_v \in \{0,1\}$ 松弛化为 $x_v \in [0,1]$ 。先找出一个分数解，然后再从分数解里面想办法找出一个整数解

最坏的情况下，松弛化可能引入非常大的误差。

考虑完全图上的最大独立集，最优的分数解和整数解之间相差多少？



线性规划松弛化

最大二分图匹配:

- $\max \sum_{e \in E} c_e x_e$
- $\sum_{e \in \delta(v)} x_e \leq 1 \quad \forall v \in V$
- $x_e \in \{0,1\} \quad \forall e \in E$

但是，松弛化对于很多多项式时间可解的组合优化问题，往往可以证明松弛化之后并没有误差

分数解也可以转化为整数解

LP因此被广泛认为是一个解决组合优化问题的“统一算法框架”

直观的解释：这些LP的polytope的顶点都在整数点上



LP的顶点

考虑 $\max\langle c, x \rangle$, 约束在 $P := \{Ax \leq b\}$ 这个polytope内

顶点可以有3种定义:

1. **边角(corner)**: 如果不存在 $y \neq 0$ 使得 $x + y \in P$ and $x - y \in P$, 则称点 x 是一个边角
2. **极值点**: 如果 $\exists c$ 使得 x 是该目标方向 c 的唯一最优解, 则称点 x 是一个极值点.
3. **基本解**: 如果 $\langle A_i, x \rangle = b_i$, 我们称第 i 个约束是紧致 (tight)的, 其中 A_i 是第 i 行.

对于给定的 $x \in P$, 记 $A^=$ 为 A 中关于 x 紧致的约束组成的子矩阵.

如果 $A^=$ 是满秩的, i.e. $\text{rank}(A^=) = n$, 那么我们称 x 是一个基本解.

事实上, 这3种定义是等价的。

LP的稳定性: 对 c 的扰动, 对 A 的扰动

顶点的个数: 一般情况下面可能是指数级别的, $\binom{m}{n}$



LP的顶点

考虑 $\max\langle c, x \rangle$, 约束在 $P := \{Ax \leq b\}$ 这个polytope内

1. **边角(corner)**: 如果不存在 $y \neq 0$ 使得 $x + y \in P$ and $x - y \in P$, 则称点 x 是一个边角

3. **基本解**: 紧致的约束组成的子矩阵 $A^=$ 是满秩的, i.e. $\text{rank}(A^=) = n$

1) \Rightarrow 3): 或者说是 $\neg 3) \Rightarrow \neg 1)$

假设存在 $\text{rank}(A^=) < n$, i.e., $\exists y \neq 0, A^=y = 0$

考虑 $x + \epsilon y, x - \epsilon y$, 注意到

$$A^=(x + \epsilon y) = A^=x$$

$$A^=(x - \epsilon y) = A^=x$$

取 ϵ 足够小, 使得其它的不等式约束不被违反

则有 $x + \epsilon y \in P, x - \epsilon y \in P$



LP的顶点

考虑 $\max\langle c, x \rangle$, 约束在 $P := \{Ax \leq b\}$ 这个polytope内

1. **边角(corner)**: 如果不存在 $y \neq 0$ 使得 $x + y \in P$ and $x - y \in P$, 则称点 x 是一个边角

3. **基本解**: 紧致的约束组成的子矩阵 $A^=$ 是满秩的, i.e. $\text{rank}(A^=) = n$

3) \Rightarrow 1): 或者说是 $\neg 1) \Rightarrow \neg 3)$

假设有 $y \neq 0$ 使得 $x + y \in P, x - y \in P$

$$A^=(x + y) \leq b^=$$

$$A^=(x - y) \leq b^=$$

其中 $A^=x = b^=$

因此有 $A^=y \leq 0, A^=y \geq 0$ 进而 $A^=y = 0$



LP的顶点

考虑 $\max\langle c, x \rangle$, 约束在 $P := \{Ax \leq b\}$ 这个polytope内

顶点可以有3种等价的定义:

1. **边角(corner):** 如果不存在 $y \neq 0$ 使得 $x + y \in P$ and $x - y \in P$, 则称点 x 是一个边角
2. **极值点:** 如果 $\exists c$ 使得 x 是该目标方向 c 的唯一最优解, 则称点 x 是一个极值点.
3. **基本解:** 如果 $\langle A_i, x \rangle = b_i$, 我们称第 i 个约束是**紧致 (tight)**的, 其中 A_i 是第 i 行.

对于给定的 $x \in P$, 记 A° 为 A 中关于 x 紧致的约束组成的子矩阵.

如果 A° 是满秩的, i.e. $\text{rank}(A^\circ) = n$, 那么我们称 x 是一个基本解.

Simplex算法: 从一个顶点开始; 找下一个顶点, 如果目标函数更优, 则选择移到该顶点; 重复;

邻居的选择: 最多 $(m-n)n$

如果所有邻居都更差, 则当前必定是最优的解: 对于凸优化问题, 局部最优即是全局最优

最坏情况下面, Simplex算法可能需要指数时间. 但是实践中表现往往不错, smoothed analysis

多项式算法: Ellipsoid algorithm, interior point methods



Perfect bipartite matching

定理：考虑二分图完美匹配的线性规划：

$\max \sum_{e \in E} c_e x_e$ subject to

$$\sum_{e \in \delta(v)} x_e = 1 \quad \forall v \in V$$

$$0 \leq x_e \leq 1 \quad \forall e \in E$$

该LP的最优解一定是整数解

注意：这个LP在一般图上面并不一定是整数解的



拓展：整数线性规划、松弛化、升维

最大二分图匹配：

- $\max \sum_{e \in E} c_e x_e$
- $\sum_{e \in \delta(v)} x_e \leq 1 \quad \forall v \in V$
- $x_e \in \{0,1\} \quad \forall e \in E$

最大独立集：

- $\max \sum_{v \in V} c_v x_v$
- $x_u + x_v \leq 1 \quad \forall uv \in E$
- $x_v \in \{0,1\}$

松弛化 (relaxation): $x_v \in \{0,1\}$ 松弛化为 $x_v \in [0,1]$, 然后再找出一个整数解

升维 (extended formulation)



Ellipsoid algorithm, separation oracle (选讲)

最小生成树的一种LP写法

- $\max \sum_{e \in E} c_e x_e$
- $\sum_{e \in E(S)} x_e \leq |S| - 1, \quad \forall S \subset V$
- $\sum_{e \in E(V)} x_e = |V| - 1$
- $0 \leq x_e \leq 1$

虽然是指数大小的LP，但是Ellipsoid algorithm只需要有 separation oracle，也能多项式时间解出来