SF-SGL：_基于线性测量的无求解器光谱图学习

Ying Zhang*、Zhiqiang Zhao* 和 Zhuo
Feng史蒂文斯理工学院电气与计算机工程系美国
新泽西州霍博肯{yzhan232、zzhao76、
zhuo.feng}@stevens.edu

arXiv:2302.04384v1 [cs.LG] 9 Feb 2023

摘要—**本文介绍了一种高度可扩展的谱图稠密化框架（SGL），用于根据线性测量值（例如节点电压和电流）学习电阻网络。我们证明，所提出的图学习方法等价于求解具有类拉普拉斯精度矩阵的经典图形 Lasso 问题。我们证明，给定$O(\log N)$对电压和电流测量值，可以恢复稀疏的N节点电阻网络，并且该网络能够良好地保留原始图上的有效电阻距离。此外，学习得到的图还能保留原始图的结构（谱）特性，这些特性有望应用于许多电路设计和优化任务。**

为实现更好的可扩展性，我们还提出了一种无求解器方法（SF-SGL），利用图的多层谱近似，将待学习的整个图谱灵活、可扩展地分解为多个不同的特征值簇（频带）。这种无求解器方法能够更高效地识别谱关键边，以减少不同范围的谱嵌入失真。通过对多种真实测试用例进行大量实验，我们证明，所提出的方法能够以高度可扩展的方式学习稀疏电阻网络，同时不牺牲解的质量。我们还提出了一种数据驱动的电子设计自动化算法，用于无向量功率/热完整性验证；该算法利用少量电压/温度测量值，估算整个芯片范围内最坏情况下的电压/温度（梯度）分布。

索引词—**谱图理论、图拉普拉斯矩阵估计、图形 Lasso、数据驱动的电子设计自动化、无向量验证**

I. 引言

近年来，图上的机器学习日益受到关注，其目标是将与节点、边或（子）图相关的高维数据编码为低维向量表示，同时充分保留原始图的结构（流形）信息。图学习技术已在多种重要应用中展现出良好前景，例如顶点（数据）分类[2], [3], 链接预测（推荐系统） [4], [5],社区检测 [6]–[8], 药物发现 [9], [10],求解偏微分方程（PDE） [11]–[13], 以及电子设计自动化（EDA） [14]–[17]。

现代图学习任务（不具备已知的输入图拓扑）通常涉及以下两个关键任务：（1）图拓扑学习，将高维节点特征（属性）数据转换为图表示；以及（2）图嵌入，将图结构数据（例如图拓扑和节点特征）转换为低维向量表示，以促进下游机器学习或数据挖掘任务。

尽管已有大量关于图嵌入技术的研究 [1], [18], [19]，但从给定数据集学习有意义的图拓扑仍然颇具挑战。为此，研究者提出了著名的图形 Lasso 方法，将其作为多元椭圆分布[20]的浓度矩阵或精度矩阵（协方差矩阵的逆矩阵）的稀疏惩罚最大似然估计量。近期还提出了基于图信号处理（GSP）的学习技术来估计稀疏图拉普拉斯矩阵，并取得了非常有前景的结果 [21]，[22]。例如，有研究通过将精度矩阵（样本协方差矩阵的逆矩阵）限制为类图拉普拉斯矩阵，并最大化吸引型高斯马尔可夫随机场（GMRF）的后验估计来解决图拓扑学习问题，同时利用 ℓ_1 正则化项促进图稀疏性 [21]；另有研究通过施加额外的谱约束 [23] 提出一种图拉普拉斯矩阵学习方法；还有研究基于交替最小化（AM）算法提出一种图拓扑学习方法（GLAD） [24]，；而 [25] 则尝试基于学习优化（L2O）的理念，学习从节点数据到图结构的映射 [26], [27]。

然而，最先进的图拓扑学习方法 [21], [22], [24]无法扩展到大型数据集，因为其算法复杂度很高。例如，近期基于拉普拉斯矩阵估计的图拓扑学习方法需要求解凸优化问题，对于 N 个数据点，每次迭代的时间复杂度至少为 $O(N^2)$，因此只能用于规模较小、包含数百个数据点的数据集 [21], [22], [24]；最先进的深度学习方法（GLAD）在高性能 GPU 上也只能处理数千个节点 [24]。因此，考虑到现代集成电路系统规模庞大，通常包含数百万甚至数十亿个元件，现有图拓扑学习方法无法高效应用于电子设计自动化（EDA）任务。

据我们所知，本文基于线性电压和电流测量，提出了首个用于学习电阻网络的可扩展谱方法（SF-SGL），

*这些作者对本研究的贡献相同

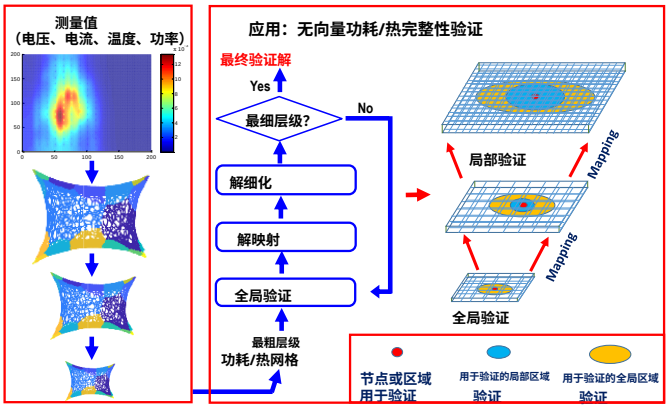

图1. 用于数据驱动无向量验证的谱图学习。

该方法建立在我们近期提出的 SGL 框架 [28]之上。原始 SGL 框架中有一个不可或缺的步骤：计算拉普拉斯特征值/特征向量，以估计谱嵌入失真 [28]，；借助谱图理论的最新理论成果，这一步有望得到加速。然而，最先进的谱算法高度依赖快速拉普拉斯求解器，而这类求解器通常难以在实践中实现，且本质上难以通过并行处理器加速。例如，基于有效电阻的谱稀疏化方法 [29]需要多次求解拉普拉斯矩阵，才能计算每条边的杠杆（采样）分数；而最新的基于谱扰动的算法 [30] 则利用拉普拉斯求解器来估计每条边的谱重要性。本文提出的算法（SF-SGL）基于一个可扩展的多层谱图稠密化框架，用于估计吸引型高斯马尔可夫随机场（GMRF）。SF-SGL 通过迭代纳入影响力最大的边，大幅降低谱嵌入失真，从而高效求解具有类拉普拉斯精度矩阵的图形 Lasso 问题 [20] 。学习得到的图具有一项独特性质：在构建的图上进行谱嵌入或计算有效电阻距离，可以表征原始输入数据点（节点电压测量）之间的相似性。我们的方法可将每次迭代的耗时控制在 $O(N \log N)$，而现有最先进的方法 [21], [22] 每次迭代至少需要 $O(N^2)$。我们的样本复杂度分析表明，借助所提出的谱算法，仅需 $O(\log N)$ 个电压（和电流）测量向量，就能准确估计稀疏电阻网络。

所提出的无求解器方法（SF-SGL）还将为开发全新的、融入物理知识的数据驱动电子设计自动化算法及应用带来新的机遇，如图1所示。在本研究中，我们利用 SF-SGL 提出了一种用于无向量功率/热完整性验证的数据驱动电子设计自动化算法。该算法仅利用少量可能由片上电压/温度传感器获取的电压/温度测量值 [31]–[33]，即可估计整个芯片范围内最坏情况下的电压/温度（梯度）分布。

本工作的主要贡献总结如下

如下：

1) 本文提出了一种用于通过线性测量值学习电阻网络的谱图致密化框架（SGL）。我们证明，给定 $O(\log N)$ 对电压和电流测量值，便可恢复稀疏的 N 节点电阻网络，同时良好保留原始图上的有效电阻距离。2) 为实现更具可扩展性的性能，本文提出了一种无求解器谱图学习框架（SF-SGL），利用多层谱图致密化框架构建学习得到的图。与需要借助拉普拉斯求解器估计谱嵌入失真的先前 SGL 方法相比，所提出的 SF-SGL 能够更高效地识别用于构建学习得到的图的关键边。3) 大量实验结果表明，对于各种真实世界的大规模图和电路网络，所提出的方法能够以近线性时间生成一系列高质量的学习得到的图。与先前最先进的谱方法（如 SGL[28],）相比，所提出的 SF-SGL 能够以快得多的速度构建学习得到的图，同时取得更好的图质量。4) 本文还通过将数据驱动的电子设计自动化算法应用于无矢量电网和热完整性验证，对所提出的方法进行了验证。该算法用于估计整个芯片的最坏情况电压/温度分布，结果表明其验证精度可靠、效率高。

本文其余部分安排如下：第二节介绍图学习技术的背景。第三节介绍原始单层谱图学习框架（SGL）的理论基础，并分析样本复杂度和算法复杂度。第四节通过引入一种更具可扩展性的无求解器多层图学习方法（SF-SGL），扩展 SGL 框架。第五节展示了针对各种真实世界大规模图问题以及数据驱动的无向量完整性验证任务的广泛实验结果；第六节总结全文。

II. 背景

A. 图拓扑学习简介

给定数据矩阵$X = [x_1, ..., x_M] \in \mathbb{R}^{N \times M}$中关于 N 个数据实体的 M 观测结果，每个列向量 X都可以视为图上的信号。例如，MNIST 数据集 [34], 包含 70,000 张手写数字图像，每张图像有 784 个像素，因此会得到一个特征矩阵 $X \in \mathbb{R}^{N \times M}$，其 $N = 70{,}000$ 且 $M = 784$。近期基于 GSP 的图学习方法 [21], [22]以[35]–[37]从 X 估计图拉普拉斯矩阵，以实现以下两个期望特性：

1) **图信号的平滑性**。对应现实世界数据的图信号在学习得到的图结构上应足够平滑：信号值在相连的相邻节点之间只会逐渐变化。

2)估计拉普拉斯矩阵的稀疏性。 图稀疏性是图学习中的另一项关键考量。学习图的一个重要动机是将其用于下游计算任务。因此，理想的图拓扑学习算法应能更好地捕捉和理解数据集的全局结构（流形），同时生成足够稀疏的图，以便于存储并在下游算法中高效操作，例如电路仿真/优化、网络划分、降维、数据可视化等。

B. 现有图拓扑学习方法

问题表述。 考虑一个随机向量 $x \sim N(0, \Sigma)$，其概率密度函数为：

$$f(x) = \frac{\exp\left(-\frac{1}{2}x^\top \Sigma^{-1} x\right)}{(2\pi)^{N/2}\det(\Sigma)^{(1/2)}} \propto \det(\Theta)^{1/2}\exp\left(-\frac{1}{2}x^\top \Theta x\right), \tag{1}$$

其中，$\Sigma = \mathbb{E}[xx^\top] \succ 0$ 表示协方差矩阵，$\Theta = \Sigma^{-1}$ 表示精度矩阵（协方差矩阵的逆矩阵）。以往的图拓扑学习方法旨在根据可能具有高维特征的输入数据估计稀疏精度矩阵 Θ，主要分为以下两类：

（A）图形套索 方法旨在通过凸优化估计稀疏精度矩阵 Θ，以最大化 $f(x)$ [20]的对数似然：

$$\max_{\Theta} : \log\det(\Theta) - Tr(\Theta S) - \beta\|\Theta\|_1, \tag{2}$$

其中，Θ 表示半正定精度矩阵，S表示样本协方差矩阵，β 表示正则化参数。前两项结合起来可解释为 GMRF 下的对数似然。$\|\bullet\|_1$表示逐元素 ℓ_1 范数，因此 $\beta\|\Theta\|_1$ 成为稀疏性促进正则化项。该模型通过最大化惩罚对数似然来学习图结构。当样本协方差矩阵 S 由 M 个 i.i.d.（独立同分布）样本 $X = [x_1, ..., x_M]$得到时，其中$X \sim N(0, S)$服从均值为零的 N维高斯分布，精度矩阵中的每个元素$\Theta_{i,j}$都编码了变量 X_i 与X_j之间的条件依赖。例如，若$\Theta_{i,j} = 0$ 则意味着在给定其余变量的情况下，变量 X_i 与 X_j条件独立。

（B）基于 GSP 的拉普拉斯矩阵估计方法最近被提出，可更高效地求解以下凸优化问题 [22], [38]:

$$\max_{\Theta} : F(\Theta) = \log\det(\Theta) - \frac{1}{M}Tr(X^\top \Theta X) - \beta\|\Theta\|_1, \tag{3}$$

其中 $\Theta = L + \frac{1}{\sigma^2}I$，$L$ 表示有效拉普拉斯矩阵的集合，其中 $Tr(\bullet)$ 表示矩阵迹，I 表示单位矩阵，$\sigma^2 > 0$ 表示先验特征方差。式（3）中的三项分别对应式（2）中的 log det(Θ)、$Tr(\Theta S)$ 和 $\beta\|\Theta\|_1$。当数据矩阵 X 中的每个列向量都被视为图信号向量时，式（3）的表述与原始图形套索问题[20]密切相关。由于 $\Theta = L + \frac{1}{\sigma^2}I$ 是对称正定矩阵

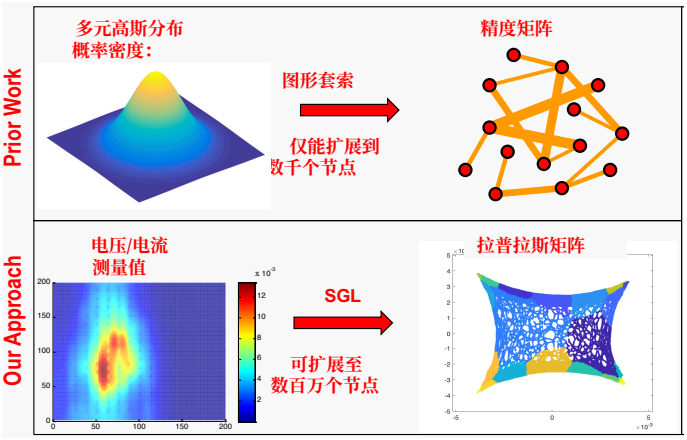

图 2。 所提出的图拓扑学习框架概览 。

（PSD）矩阵（或 M 矩阵），且非对角元素非正，因此该表述将导出对吸引型高斯马尔可夫随机场 [22], [39] 的估计。当 X 是非高斯的，式（3）的表述可视为一种拉普拉斯估计方法：通过最小化由函数 $\Theta \mapsto -\log\det(\Theta)$ [39] 诱导的正定矩阵之间的布雷格曼散度来实现。

III. SGL：一种谱学习方法

考虑存储在数据矩阵 $X \in \mathbb{R}^{N\times M}$和 $Y \in \mathbb{R}^{N\times M}$中的 M 个线性测量值，这些测量值对应于 N维的电压和电流向量，其中第 i列向量 $X(:, i)$ 是与第 i个输入电流向量 $Y(:, i)$ 相对应的电压响应（图信号）向量。本文通过利用如图 2 所示的线性电压（X）和电流（Y）测量值 [28], ，提出了一种用于拉普拉斯矩阵估计的谱图学习方法（SGL）。

为了量化图信号向量 x 在无向图 $G = (V, E, w)$ 上的平滑性，可以采用以下拉普拉斯二次型：

$$x^\top Lx = \sum_{(s,t)\in E} w_{s,t}(x(s) - x(t))^2, \tag{4}$$

其中，$L = D - W$ 表示图拉普拉斯矩阵，$w_{s,t} = W(s, t)$表示边（s, t）的权重，而 D和 W 分别表示度矩阵和加权邻接矩阵。一组信号 X 在图G上的平滑性可使用以下矩阵迹 [36]计算：

$$Q(X, L) = Tr(X^\top LX). \tag{5}$$

A. 基于扰动分析的梯度估计

将图拉普拉斯矩阵表示如下

$$L = \sum_{(s,t)\in E} w_{s,t}e_{s,t}e_{s,t}^\top, \tag{6}$$

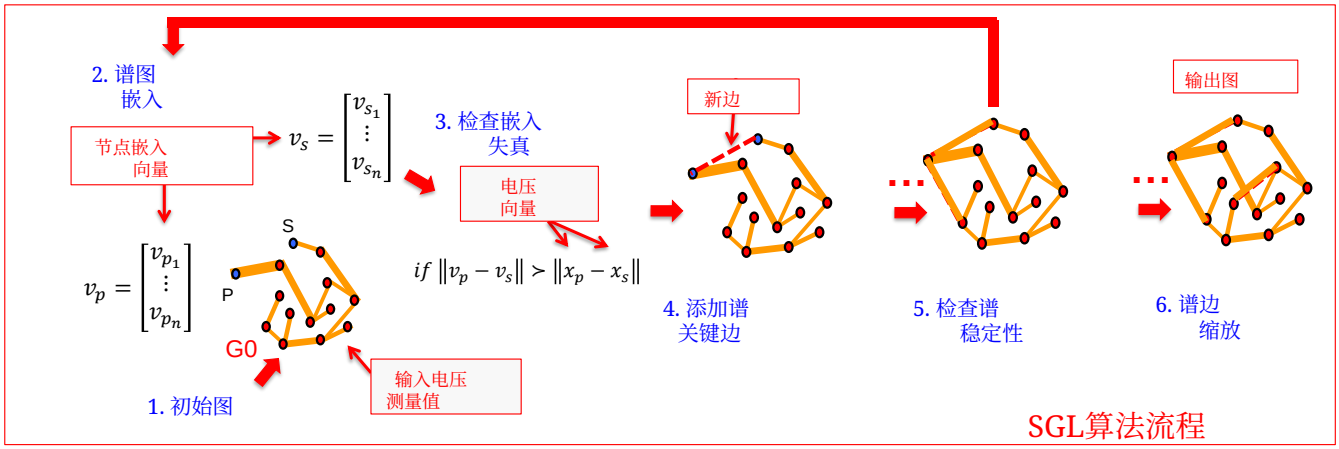

图3. 基于电压/电流测量值进行谱图拓扑学习的 SGL。(v_p 和 v_s 是节点 p 和 s的节点嵌入向量，x_p 和 x_s 是节点 p 和 s的电压向量。)

其中，$e_s \in \mathbb{R}^N$ 表示除第 s 个元素为 1 外其余元素均为 0 的标准基向量，且 $e_{s,t} = e_s - e_t$。将 (6) 代入 (3)，可得：

$$F = \sum_{i=1}^{N} \log(\lambda_i + \frac{1}{\sigma^2}) - \frac{1}{M}\left(\frac{Tr(X^\top X)}{\sigma^2} + \sum_{(s,t)\in E} w_{s,t}\|X^\top e_{s,t}\|_2^2\right) - 4\beta \sum_{(s,t)\in E} w_{s,t}, \tag{7}$$

其中，λ_i 是 L在 i =1, $\cdots, N$上的非递减特征值。给定特征值 λ_i及其对应的特征向量 u_i，满足：

$$Lu_i = \lambda_i u_i. \tag{8}$$

对式（7）关于 $w_{s,t}$ 求偏导数可得：

$$\frac{\partial F}{\partial w_{s,t}} = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{\lambda_i + 1/\sigma^2}\frac{\partial \lambda_i}{\partial w_{s,t}} - \frac{1}{M}\|X^\top e_{s,t}\|_2^2 - 4\beta. \tag{9}$$

(9) 中最后两项都对图稀疏性施加了约束：增加更多边会导致迹$Tr(X^\top \Theta X)$增大。因此，在本文余下部分中，我们可以放心地选择 $\beta = 0$，而不会影响候选边的排序，进而也不会影响 SGL 的最终解质量。

定理 III.1. 在最新的图中添加一条候选边(s,t) 所导致的谱扰动 $\delta\lambda_i$ 为：

$$\delta\lambda_i = \delta w_{s,t}\left(u_i^\top e_{s,t}\right)^2. \tag{10}$$

证明。 考虑以下谱扰动分析：

$$(L + \delta L)(u_i + \delta u_i) = (\lambda_i + \delta\lambda_i)(u_i + \delta u_i), \tag{11}$$

其中，由于加入一条新边 (s,t)，对 L施加了一个小扰动 δL，从而使 $i = 1, \ldots, N$分别对应的特征值和特征向量 $\lambda_i + \delta\lambda_i$和 $u_i + \delta u_i$发生扰动。仅保留一阶项后，我们得到：

$$L\delta u_i + \delta L u_i = \lambda_i \delta u_i + \delta\lambda_i u_i. \tag{12}$$

将 δu_i 表示为 i =1, …, N对应的原始特征向量 u_i 的形式：

$$\delta u_i = \sum_{i=j}^{N} \alpha_j u_j. \tag{13}$$

将 (13) 代入 (12)，可得：

$$L\sum_{j=1}^{N} \alpha_j u_j + \delta L u_i = \lambda_i \sum_{j=1}^{N} \alpha_j u_j + \delta\lambda_i u_i. \tag{14}$$

在 (14) 两边同时乘以 $u_i^\top$，可得：

$$\delta\lambda_i = \delta w_{s,t}\left(u_i^\top e_{s,t}\right)^2. \tag{15}$$

□

随后，我们使用前 $r-1$个非平凡拉普拉斯特征向量，构造以下用于谱图嵌入的特征子空间矩阵

$$U_r = \left[\frac{u_2}{\sqrt{\lambda_2 + 1/\sigma^2}}, \ldots, \frac{u_r}{\sqrt{\lambda_r + 1/\sigma^2}}\right]. \tag{16}$$

定理 III.1 允许将每条边在 ( ) 中的**谱敏感度**

$\frac{\partial F}{\partial w_{s,t}}$ 9 $s_{s,t} = , .$ 写为：

$$\begin{aligned} s_{s,t} &= \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{\lambda_i + 1/\sigma^2}\frac{\partial \lambda_i}{\partial w_{s,t}} - \frac{1}{M}\|X^\top e_{s,t}\|_2^2 \\ &= \|U_N^\top e_{s,t}\|_2^2 - \frac{1}{M}\|X^\top e_{s,t}\|_2^2 \\ &\approx \|U_r^\top e_{s,t}\|_2^2 - \frac{1}{M}\|X^\top e_{s,t}\|_2^2 \\ &= z_{s,t}^{emb} - \frac{1}{M} z_{s,t}^{data}, where \quad r \ll N. \end{aligned} \tag{17}$$

在上述表达式中，$z_{s,t}^{emb} = \|U_r^\top e_{s,t}\|_2^2$ 和 $z_{s,t}^{data} = \|X^\top e_{s,t}\|_2^2$，分别表示谱嵌入空间以及数据（电压测量）向量空间中的距离。式 (17) 中的偏导数项 $s_{s,t}$ 可用于通过基于梯度的方法求解式 (3) 中的优化任务，例如用于群组结构化学习的通用逐阶段算法 [40]。

B. 用于图拓扑学习的谱致密化

谱关键边。我们将边 $(s,\ t)$ 的谱嵌入失真 $\eta_{s,\ t}$ 定义为：

$$\eta_{s,t} = M\frac{z_{s,t}^{emb}}{z_{s,t}^{data}}. \tag{18}$$

我们还将具有相对较大谱敏感度（$s_{p,\ q}$）或嵌入失真 $\eta_{p,\ q} = Mz_{p}^{emb}{}_{,\ q}\ /z_{p\ q}^{data}{}_{,}$ 的候选边（$p,\ q$）称为谱关键边。

所提出的 SGL 迭代。考虑用于寻找若干谱敏感度（或嵌入失真）最大的谱关键候选边，并将其加入最新图 $G_k = (V_k,\ E_k,\ w_k)$ 的第 $(k+1)$ 次 SGL 迭代。(17) 表明，将此类边加入最新图 G_k 能够更有效地改进目标函数，并显著减轻谱嵌入失真。

谱图稀疏化（先前工作）。先前研究表明，对于每个无向图，都存在一个具有 $O(N\log_{\epsilon^2}N)$ 条边的稀疏化图，该图可通过以与有效电阻成比例的概率（杠杆分数）p_e对每条边（$p,\ q$）进行采样而获得 [29]:

$$p_e \propto \frac{R_{p,q}^{eff}}{R_{p,q}} = w_{p,q}R_{p,q}^{eff}, \tag{19}$$

其中 $R_{p,q} = 1/w_{p,q}$ 表示原始电阻，$R_{p}^{eff}{}_{,q}$ 是边的有效电阻。此外，以下不等式成立 [29]:

$$\forall x \in \mathbb{R}^N \quad (1-\epsilon)x^\top Lx \le x^\top \tilde{L}x \le (1+\epsilon)x^\top Lx, \tag{20}$$

其中，L 和 $\tilde{L}$ 分别是原始图和稀疏化图的图拉普拉斯矩阵。

谱图致密化。对于每次 SGL 迭代中基于谱敏感度选出的任意候选边，将其权重设置为：

$$w_{p,q} \propto \frac{1}{z_{p,q}^{data}}, \tag{21}$$

谱嵌入失真可估计如下

$$\eta_{p,q} = M\frac{z_{p,q}^{emb}}{z_{p,q}^{data}} \propto w_{p,q}R_{p,q}^{eff}, \tag{22}$$

这就成为谱图稀疏化的杠杆分数 [29]。因此，与谱稀疏化不同，SGL 可视为一种谱图致密化过程，旨在识别并纳入 $O(N\log\ N)$ 条谱关键边，这些边具有较大的谱敏感度（嵌入失真）。

算法收敛。当式（17）中的最大边敏感度（s_{max}）变为零，或者等价地，当式（18）中的最大谱嵌入失真（η_{max}）变为一时，即可得到式（3）的最优解。此外，SGL迭代收敛后，学习得到的图上的谱嵌入（有效电阻）距离将编码原始数据点（电压测量值）之间的 ℓ_2 距离，这可用于许多重要任务，例如超大规模集成电路计算机辅助设计、流形学习、降维和数据可视化 [41]–[44]。

C. SGL算法的样本复杂度

通过分析实现准确图学习所需的电压向量（测量值）数量，可以得到 SGL 的样本复杂度。我们假设 $\sigma^2 \to +\infty$。对于真实图 G_*，我们将其边权重矩阵 W_*定义为对角矩阵，其对角元素为 $W_*(i,i) = w_i$，其注入矩阵定义为：

$$B_*(i,p) = \begin{cases} 1 & \text{if } p \text{ is i-th edge's head} \\ -1 & \text{if } p \text{ is i-th edge's tail} \\ 0 & \text{otherwise .} \end{cases} \tag{23}$$

因此，G_* 的拉普拉斯矩阵可写为

$$L_* = B_*^\top W_* B_*. \tag{24}$$

因此，节点 s和 t之间的有效电阻 $R_*^{eff}(s,t)$可表示为：

$$R_*^{eff}(s,t) = e_{s,t}^\top L_*^+ e_{s,t} = \|W_*^{\frac{1}{2}} B_* L_*^+ e_{s,t}\|_2^2, \tag{25}$$

其中，L_*^+表示 L_*的 Moore–Penrose伪逆。根据 Johnson-Lindenstrauss引理，每对节点之间的有效电阻距离满足 [29]:

$$(1-\epsilon)R_*^{eff}(s,t) \le \|X^\top e_{s,t}\|_2^2 \le (1+\epsilon)R_*^{eff}(s,t), \tag{26}$$

其中，数据（电压测量）矩阵 $X \in \mathbb{R}^{N\times M}$ 通过以下步骤构建：

1) 令 C $\pm\frac{1}{\sqrt{M}}$ $M \times |E|$ $|E|$ $M =$ 为一个维度为 的随机矩阵，其中 表示边数，$24\log\frac{N}{\epsilon^2}$ 表示电压测量次数；2) 构造$Y^- = CW_*^2 B_*$，其第 i行向量记为 $y_i^\top$；3) 对 C $(1 \le i \le M)$中的所有行求解 $L_* x_i = y_i$，并使用 x_i 作为其第 i列向量来构造 X 矩阵。

显然，（26）表明，给定通过上述过程获得的 $M \ge O(\log N/\epsilon^2)$ 个电压向量（测量值），可通过以下方式计算 $(1\pm\epsilon)$- 近似有效电阻：

$$\tilde{R}_*^{eff}(s,t) = \|X^\top e_{s,t}\|_2^2 \tag{27}$$

对于原始图 G_* 中任意一对节点 $(s,\ t)$。考虑有效电阻与谱图性质（例如前几个拉普拉斯特征值/特征向量）之间的以下密切联系：

$$R_{s,t}^{eff} = \|U_N^\top e_{s,t}\|_2^2, \text{ where } U_N = \left[\frac{u_2}{\sqrt{\lambda_2}}, ..., \frac{u_N}{\sqrt{\lambda_N}}\right]. \tag{28}$$

因此，使用 $O(\log\ N)$ 个电压测量值就足以让 SGL 学习一个 N 节点图，并良好保留原始图的有效电阻距离。

D. SGL算法的关键步骤

为在可能涉及大量节点的图学习任务中实现良好的运行时间和内存效率，本文提出的 SGL 算法力求通过以下关键步骤（如图3所示），迭代识别并将最具影响力（在谱意义上至关重要）的边加入最新的图中，直至找不到此类边为止：

步骤 1：初始图构建。(17) 表明，通过迭代识别并将影响最大的边（敏感度最高的边）添加到最新的图中，图谱嵌入（或有效电阻）距离将编码原始数据（电压测量）向量之间的 ℓ_2 距离。理想的候选边集合应包含所有可能的边连接，例如，为 N 个数据样本构成一个包含 $O(N^2)$ 条边的完全图。通过以下步骤可以更好地理解所提出的图学习算法：a) 将完全图中每条初始边的权重设为一个非常小的值（接近于零）；b) 将谱敏感度最高的边的权重更新为较大的值；c) 重复步骤 b)，直到没有边可以更新（不存在正的边敏感度）。上述迭代方案等价于从不存在边连通性的状态开始。不过，考虑所有可能的边连接将需要二次复杂度，这可能导致运行时间可扩展性较差。为提高运行时间可扩展性，可以利用 k近邻（kNN）图 [45] 作为稀疏化的完全图。请注意，当有效电阻距离能够编码数据样本之间的欧几里得距离时，所提出的图学习迭代将会收敛。这意味着，当学习得到的图具有树状结构时，有效电阻距离将近似匹配最短路径距离，从而编码数据样本之间的欧几里得距离。因此，欧几里得距离是构建 kNN 图的自然选择。

然而，对于一般的图学习任务，选择最优的 k 值（最近邻的数量）来构建 k近邻图仍然颇具挑战： k 过大，虽然能够很好地近似原始数据点（电压测量值）的流形全局结构，但会导致图相当稠密； k 过小，则可能产生许多彼此孤立的小图，从而减慢迭代速度。由于电路网络通常具有非常稀疏的结构（例如二维或三维网格），电压或电流测量值（向量）通常位于低维流形附近，因此可以为我们的图学习任务选择合适的 k 。为在复杂度与质量之间取得良好平衡，初始图将通过以下步骤构建：**(1)** 使用相对较小的 k 值（例如 $5 \leq k \leq 10$）构建连通的 k 近邻图，足以近似与原始测量数据相对应的流形全局结构；**(2)** 通过提取最大生成树（MST）对 k近邻图进行稀疏化，在实践中将其用作质量合理的初始图。随后，SGL 将通过迭代地从初始 k近邻图中添加最具影响力的非树边，逐步改进该图，直至收敛。如图18所示，经过所提出的图学习迭代后，使用不同的 k 值不会显著影响最终的目标函数值。

步骤 2：谱图嵌入。谱图嵌入利用前几个拉普拉斯特征向量，将节点映射到低维空间 [42]。拉普拉斯矩阵的特征值分解通常是谱图嵌入中计算开销最大的步骤，尤其是在处理大型图时。为提高可扩展性，可以利用近期提出的、时间复杂度近乎线性的快速拉普拉斯特征值求解器 [46]。

步骤 3：关键边识别。 给定前几个拉普拉斯特征值和特征向量，SGL 将通过考察公式 (17) 中定义的每条候选边的敏感度分数，高效地识别最关键的非树边。具体而言，属于 k近邻图的每条非树边将根据其边敏感度进行排序。只有少数敏感度最大的关键边会被加入最新的图中。注意，当 $r \ll N$ 时，对于任意边 $(s,\ t)$，以下不等式成立：

$$\|U_r^\top e_{s,t}\|_2^2 = z_{s,t}^{emb} < \|U_N^\top e_{s,t}\|_2^2 \leq R^{eff}(s,t), \qquad (29)$$

这意味着，使用前 r 个特征向量近似计算的边敏感度 ($s_{s,t}$) 将始终低于实际值。显然，在谱嵌入中使用更多特征向量将得到更准确的边敏感度估计。对于典型的电路网络，仅使用少量（例如 $r < 10$ 个）特征向量计算的边敏感度，就足以对非树边进行准确排序。

步骤 4：收敛检查。 在本文中，我们检查由公式 (17) 计算得到的最大边敏感度，以判断 SGL迭代是否收敛。如果不存在敏感度大于给定阈值 ($s_{max} \geq tol$) 的非树边，则 SGL迭代将终止。我们注意到，选择不同的容差 (tol) 层级将得到具有不同密度的图。例如，选择更小的阈值会使更多边被纳入，从而使学习得到的图上的最终谱嵌入距离能够更准确地编码原始数据点（电压测量）之间的距离。

步骤 5：谱边缩放。为了进一步提高谱近似质量，我们选择对通过 SGL 得到的学习图的边权重进行全局放大。给定真实拉普拉斯矩阵 L_*，节点 s 和 t 之间的有效电阻可表示为 $R_s^{eff}{}_{,t} = e_{s,t}^T L_*^+ e_{s,t}$。如果将图视为电阻网络，并令每条边的电导值对应其边权重，则 $R_s^{eff}{}_{,t}$ 可视为单位电流流入节点 s 并从节点 t 流出时电阻网络的功率耗散。将向量 $e_{s,t}$ 放宽为与全一向量正交的随机向量 y_i 后，可以证明，使原始图与学习图的功率耗散相匹配，将直接改善学习图的谱近似。给定归一化电流向量 $Y = (y_1, \cdots, y_M)$，可分别为原始图和学习图计算相应的测量（电压）向量 $X = (x_1, \cdots, x_M)$ 和 $\tilde{X} = (\tilde{x}_1, \cdots, \tilde{x}_M)$，其中 $x_i = L_*^+ y_i$ 和 $\tilde{x}_i = L^+ y_i$。为了更好地匹配原始图的结构属性，我们提出对学习图中的边权重进行全局放大：

$$w_{s,t} = w_{s,t} * \alpha' \qquad (30)$$

采用以下缩放因子 α'：

$$\alpha' = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{M} \frac{y_i^\top L^+ y_i}{y_i^\top L_*^+ y_i} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{M} \frac{y_i^\top \tilde{x}}{y_i^\top x_i}. \qquad (31)$$

*E. SGL*的算法流程与复杂度

详细的 SGL算法流程如算法 1 所示。通过利用近期用于 kNN 图构建的高性能算法 [45]、用于关键边识别的谱图嵌入算法[41], [46], 以及用于边缩放的快速拉普拉斯求解器 [47]、[48], SGL 中上述所有步骤都能以近线性时间完成。因此，每次 SGL迭代都能以近线性时间完成，而最先进的方法至少需要 $O(N^2)$ 时间 [22]。

算法 1 SGL算法流程。

输入： 电压测量矩阵 $X \in \mathbb{R}^{N\times M}$、输入电流测量矩阵 $Y \in \mathbb{R}^{N\times M}$, k （用于初始 kNN 图构建）、 r （用于构建式 (16) 中的投影矩阵）、最大边灵敏度容差（tol）以及边采样率（$0 < \beta \leq 1$）。**输出：** 学习得到的图 $G = (V, E, w)$。

1：根据 X 构建 kNN 图 $G_o = (V, E_o, w_o)$。2：从 G_o 中提取最小生成树子图 T。3：将 $G = T = (V, E, w)$ 设为初始图。4：**当** $s_{max} \geq tol$ **时**5：使用式 (16)，根据最新的图 G 计算投影矩阵 U_r 。6：根据 $G_o =$„ 使用式 (17) 计算敏感度，并对非树边 (s, t) 排序

r

。7：若非树边 (s, t) 的 $s_{s,t} > tol$ 且排名位于前 $\lceil N\beta \rceil$ 条边之内，则将其加入 G 。8：记录最大边敏感度 s_{max}。

9: **结束循环**

10: 使用 X 和 Y，按照（30）进行谱边缩放；11: 返回学习得到的图 G。

IV. SF-SGL：无求解器光谱图学习

SF-SGL概述。在本研究中，我们通过引入一种无求解器的多层谱图学习方案（SF-SGL）扩展了SGL。SF-SGL的关键步骤如下：（1）给定测量向量，例如电压和电流矩阵 X 和 Y，利用可扩展谱图粗化框架 [46]，构建粗层次近邻图层级，如图4所示；（2）从最粗层级开始，采用SGL算法进行图学习：首先提取一棵最小生成树，然后识别嵌入失真较大的谱关键非树边（属于最粗层级的k近邻图）；通过无求解器的局部谱图嵌入方案，可以高效计算这些嵌入失真；（3）在SGL于最粗层级收敛后，将学习得到的图逐步映射到更细层级，如图5所示；在这些层级中，将识别额外的候选边（属于粗化后的k近邻图），并将其纳入最新的图中，同时更新局部嵌入向量，如图6所示。获得学习得到的图后，所提出的框架和学习得到的图可高效应用于不同任务。其中

表 I SF-SGL 框架中的符号汇总（$l = 0, 1, \ldots\ldots, l_f, \ i = 1, \ldots\ldots, \ n_l$）。

符号	描述	符号	描述
Θ	精度矩阵	C	样本协方差矩阵
H_l	粗化算子	X_l	第 l层特征矩阵
$z_{p,q}^{data}$	数据距离	$z_{p,q}^{emb}$	嵌入距离
$s_{p,q}$	谱敏感度	$\eta_{p,q}$	失真
$G_l = (V_l, E_l)$	l层级的无向图	$P_l = (V_l, E_l)$	学习得到的图
$\omega_l(p, q)$	G_l的边 (p, q) 权重	$\tilde{\omega}_l(p, q)$	P_l的边 (p, q) 权重
E_l	G_l的边集	E_l	P_l的边集
$m_l = \lvert E_l \rvert$	G_l中的边数	$\tilde{m}_l = \lvert \tilde{E}_l \rvert$	P_l中的边数
V_l	层级 l的节点集	$n_l = \lvert V_l \rvert$	节点数
L_{G_l}	图 G_l的拉普拉斯矩阵	L_{P_l}	图 P_l的拉普拉斯矩阵
$u_l^{(i)}$ 和 $\tilde{u}_l^{(i)}$	L_{G_l} 和 L_{P_l}的特征向量	$\lambda_l^{(i)}$ 和 $\tilde{\lambda}_l^{(i)}$	L_{G_l} 和 L_{P_l}的特征值

一项直接应用是促进无矢量电网和热完整性验证，如图1所示。

在本文余下部分中，给定初始 k近邻图 $G_0 = G$，将通过谱图粗化 [41],生成一系列粗化后的 k近邻图 $G_1, \ G_2, \ldots\ldots G_{l_f}$，其中 G_{l_f}表示最粗层级的 k近邻图。多层级的学习得到的图记为 $P_0, \ P_1, \ldots\ldots P_{l_f}$。为简洁起见，本文中使用的所有符号均汇总于表 I。

A. 谱图粗化

用于图粗化的节点聚合集。如图4所示，将图从 G_{l-1} 粗化至 G_l 需要把 G_{l-1} 的节点集 V_{l-1} 划分为 n_l 个不同的节点聚合集 $S_{l-1}^{(i)}$，其中 $i = 1, \ldots\ldots, \ n_l$。每个节点聚合集 $S_{l-1}^{(i)}$ 诱导的子图 $G_{l-1}[S_{l-1}^{(i)}]$将在图 G_{l-1}中构成一个强连通分量，并被聚合为粗化图 G_l中的单个节点。因此，一旦确定节点聚合集，就可以据此唯一构造节点映射矩阵 H_l ，并按如下方式生成 G_l ：

$$L_{G_l} := H_l^{\mp} L_{G_{l-1}} H_l^{+}, \quad x_l := H_l x_{l-1}, \tag{32}$$

其中， $H_l \in \mathbb{R}^{n_l \times n_{l-1}}$、 $x_l \in \mathbb{R}^{n_l \times 1}$、 $l = 1, \ldots\ldots, \ l_f$ 和 $H_l^{\top}$， H_l^{+}， $H_l^{\mp}$ 分别表示 H_l 的转置、伪逆和转置伪逆。 H_l 和 H_l^{+} 可按如下方式构造 [49]:

$$H_l(i,p) = \begin{cases} \frac{1}{|S_{l-1}^{(i)}|} & \text{if p} \in S_{l-1}^{(i)} \\ 0 & \text{otherwise .} \end{cases}, \ H_l^{+}(p,i) = \begin{cases} 1 & \text{if p} \in S_{l-1}^{(i)} \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases} \tag{33}$$

通过局部嵌入进行谱粗化。SF-SGL 中谱粗化的关键在于确定节点聚合集。为此，我们采用了一种低通图滤波方案来进行局部谱嵌入，该方案可在线性时间内实现 [41]。令 $b_l^{(k)} \in \mathbb{R}^{n_l \times 1}$ with $k = 1, \ \cdots, \ K$ 为与全一向量正交的初始随机向量。在对用于求解线性方程组 $L_{G_l} b_l^{(k)} = 0$ with$k = 1, \ \cdots, \ K$ [50]进行若干步高斯-赛德尔松弛后，我们可以利用嵌入矩阵 $B_l = [b_l^{(1)}, ..., b_l^{(K)}]$, 为图$G_l$ 中的每个节点关联一个 K 维向量。由于经过平滑（低通滤波）后，每个 $b_l^{(k)}$ 都可以视为前几个拉普拉斯特征向量的线性组合，因此嵌入矩阵 B_l

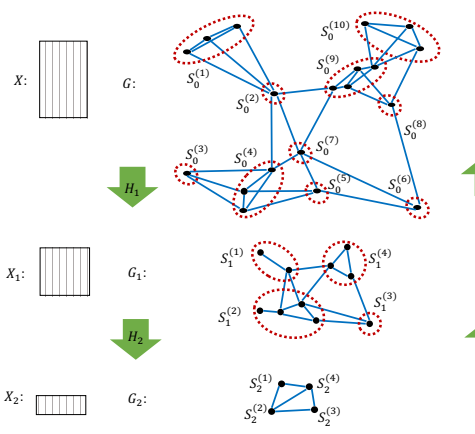

图4。通过局部嵌入进行图粗化。

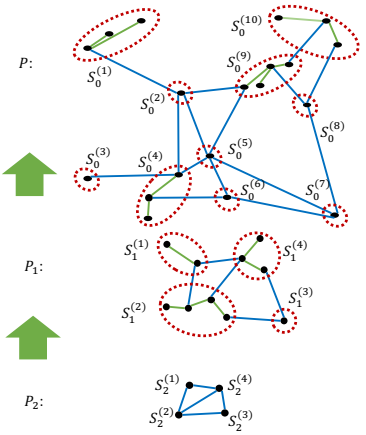

图5。自底向上进行图学习。

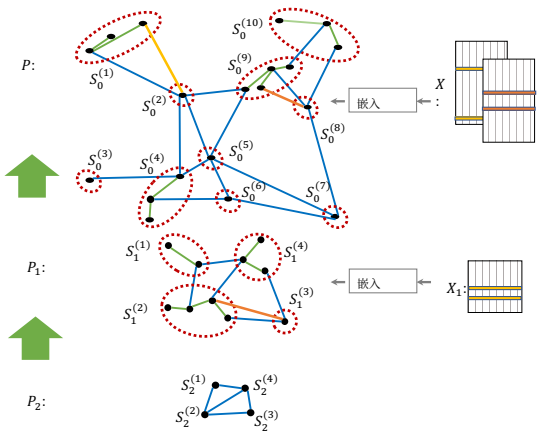

图6。重要非树边识别。

可以很好地近似式（16）中的特征子空间矩阵 U_r 。因此，在谱嵌入空间中彼此接近的节点可以聚类到同一个聚合集。找到所有节点聚合集后，即可构造唯一确定粗化图的节点映射矩阵 H_l 。随后，还可以通过 $X_l = H_l X_{l-1}$ 得到层级 l 的节点特征矩阵，如图4所示。为了更好地编码粗化图上的特征信息，我们提出以下方案，根据相邻节点 s 和 t 的特征距离更新它们之间的边权重：

$$\omega_l(s,t) = 1/\|X_l^\top e_{s,t}\|_2^2. \tag{34}$$

近似误差界定。为确保所提出图学习框架的解的质量，必须估计并界定由谱图粗化引起的误差。若满足以下条件，则认为图 G_l 是其细化版本 G_{l-1} 的良好近似 [49]:

$$\begin{aligned} \gamma_1\lambda_{l-1}^{(i)} \le \lambda_l^{(i)} \le \gamma_2 \frac{(1+\epsilon)^2}{1-\tau\epsilon^2}\lambda_{l-1}^{(i)} \\ \frac{1}{\sigma_{l-1}}\|u_{l-1}^{(i)}\|_{L_{G_{l-1}}} \le \|u_l^{(i)}\|_{L_{G_l}} \le \sigma_{l-1}\|u_{l-1}^{(i)}\|_{L_{G_{l-1}}}, \end{aligned} \tag{35}$$

其中 $l = 1, \ldots\ldots l_f$、$\lambda_l^{(1)}, \ldots\ldots \lambda_l^{(K)}$ 表示 L_{G_l}、$\tau = \lambda_{l-1}^{(K)}/\lambda_{l-1}^{(2)}$、$\epsilon = (\sigma_{l-1}^2 - 1)/(\sigma_{l-1}^2 + 1)$ 的 K 非递减特征值，其中 $\sigma_{l-1} \le (\frac{1+\sqrt{\tau}}{1-\sqrt{\tau}})^{\frac{1}{2}}$，而 $\gamma_1(\gamma_2)$ 表示 $(H_l H_l^\top)^{-1}$ 的最小（最大）特征值。

B. 通过自底向上方法进行图拓扑学习

一种谱分解视角。如 [51],所示，经过谱粗化的图将具有不同的 G原始图频谱带宽。举例来说，最粗层级的图拉普拉斯矩阵 $L_{G_{l_f}}$ 仅保留 G_0的关键谱性质，例如前几个拉普拉斯特征值和特征向量；而越来越精细的图所对应的拉普拉斯矩阵，则会匹配L_{G_0}的低到中等特征值。因此，粗化后的图可以视为一系列低通图滤波器，其带宽逐渐减小：最精细的图保留最高带宽，而最粗层级的图保留最低带宽。

将学习得到的图映射到更细层级。SF-SGL 致力于逐步构建一系列粒度越来越细的图，从而显著减轻谱嵌入失真。如图5所示，要将学习得到的图 P_l 映射到更细层级，将构建两种不同类型的边来构造第 $(l-1)$ 层的图 P_{l-1}：(1) P_l 中的任意节点都对应于 P_{l-1}中的一个节点聚合集合，并从中提取一棵最小生成树，以形成**簇内边**；(2) P_l 中的任意边都对应于连接 P_{l-1}中两个节点聚合集合的至少一条边，但仅保留权重最大的边作为**簇间边**来构造 P_{l-1}。

粗粒度层级中的谱关键边。如图6所示，为了识别并纳入具有较大谱嵌入失真的谱关键子图外边，将对图 P_{l-1} 应用上述局部谱嵌入，以生成其嵌入矩阵 $B'_{l-1} = [b_{l-1}^{(1)}, \cdots, b_{l-1}^{(K)}]$。粗粒度层级图 P_{l-1} 的谱嵌入失真可计算为

$$\eta_{s,t} = z_{s,t}^{emb}/z_{s,t}^{data}, \tag{36}$$

其中 $z_{s、t}^{emb} = \|B_{l-1}^{'\top} e_{s、t}\|_2^2$ 和 $z_{s、t}^{data} = \|X_{l-1}^\top e_{s、t}\|_2^2$。子图外边的嵌入失真越大，表明将该边纳入学习得到的图中，越能准确地编码数据点之间的距离。请注意，SF-SGL 在最粗层级的图中识别出的边往往连接距离最远的节点，以大幅减轻长程谱嵌入失真，从而仅影响前几个拉普拉斯特征值（低频带）；另一方面，在最细层级的图中识别出的边往往只连接局部节点，以减轻短程嵌入失真，从而影响相对较大的特征值（高频带）。

*C. SF-SGL*的算法流程与复杂度

所提出的多层次图学习框架（SF-SGL）能够灵活地将整个图

谱（待学习）分解为多个不同的特征值簇，从而能够更高效地识别出对缓解不同范围的谱嵌入失真至关重要的谱关键边。算法 2 展示了所提出的 SF-SGL 框架的算法流程。通过利用近期高性能的 kNN 图构建算法、 [45], 无求解器谱图粗化与嵌入算法，以及快速拉普拉斯求解器，SF-SGL 中上述所有步骤均可在线性时间内近似完成。因此，SF-SGL 可在线性时间内近似完成。

算法 2 SF-SGL算法流程。

输入： 电压和电流测量矩阵：X， $Y \in \mathbb{R}^{N\times M}$, k 用于初始 kNN 图构建；

输出： 学习得到的图 P;

1: $P_l = \emptyset$ 对于 $l = 0, ..., l_f$;
2: 基于 X 构建初始 kNN 图 G ，其中 G_0 ；
3: 执行谱图粗化，得到一系列粗化后的 k近邻图 $G_1,...,G_{l_f}$ 以及粗化算子 $H_1, ..., H_{l_f}$ ；
4: 令 $X_0 = X$，并通过 $X_l = HX_{l-1}$ 计算 $l = 1, ..., l_f$的特征矩阵 $X_1, ..., X_{l_f}$；
5: 设置 $l = l_f$，并通过 SGL迭代学习稀疏图 P_l ；
6: **当** $l \geq 1$ **时，执行**
7: **对** 每个节点 $i \in V_l$ **执行**
8: 找出相对于聚合集合 $S_{l-1}^{(i)}$的诱导子图 $S_{l-1}^{(i)}$;
9: 提取诱导子图 $G_{l-1}[S_{l-1}^{(i)}]$ 的最小生成树，并将其边加入 P_{l-1} ；
10: **结束循环**
11: **对**每条边（s， t） $\in \tilde{E_l}$ **执行**
12: 在集合 $S_{l-1}^{(s)}$ 和之间添加权重最大的边 $S_{l-1}^{(t)}$ 加入图 P_{l-1} ；
13: **结束循环**
14: 为每条候选边 (s， t) $\in E_{l-1}$ \计算 $\eta_{s,\ t}$ $\tilde{E}_{l-1}$;
15: 将权重较大的候选边添加到 P_{l-1}中$\eta_{s,\ t}$ ；
16: $l = l - 1$
17: **</style}结束 while**
18: 放大 P_0 中的边权重，并返回学习得到的图 P。

V. 实验结果

所提出的 SGL 和 SF-SGL 算法已在 Matlab 和 C++ 中实现。本文中的测试用例选自大量用于电路仿真和有限元分析问题的矩阵。值得注意的是，先前最先进的图学习算法 [21] 即使处理非常小的图也可能耗时过长。例如，使用 CGL 算法学习包含 4，253 个节点的“airfoil”图 [21]，12 小时后仍无法完成；而所提出的 SGL 算法仅需约 4 秒即可获得高质量解。使用 CGL 学习包含 1，059 个节点的“yaleShieldBig”图需要 1，235 秒，而 SGL 仅需约

仅需 2 秒（加速 600× 倍）即可达到相近的解（谱保持）质量。因此，在本研究中，我们只与基于标准 kNN 算法的图构建方法进行比较。所有实验均在计算平台上使用单个 CPU核心完成，该平台运行 64 位 RHE W 7.2，配备 2.67GHz 12 核 CPU 和 50GB 内存。

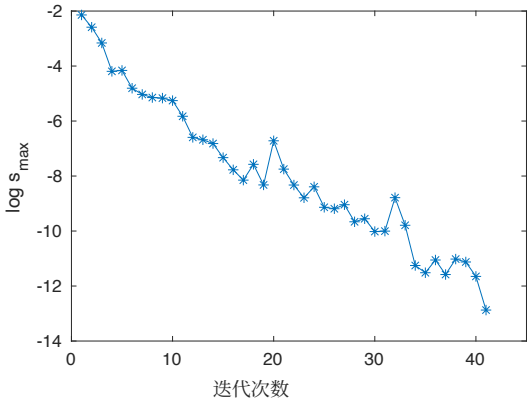

图7。“二维网格”图的最大灵敏度逐渐降低。

A. 实验设置

为生成线性电压和电流测量，我们采用了以下流程：(1) 首先随机生成 M 个电流源向量，每个元素均从标准正态分布中采样；(2) 将每个电流向量归一化，并对其进行正交化，使其与全 1 向量正交；(3) 将 M 个电流向量作为（右端）输入向量，通过求解原始图拉普拉斯矩阵，收集 M 个电压向量测量；(4) 分别将电压向量和电流向量存储在数据矩阵 $X = [x_1, ..., x_M]$ 和 $Y = [y_1, ..., y_M] \in \mathbb{R}^{N\times M}$ 中，作为所提出的 SGL 和 SF-SGL 算法的输入数据。默认情况下，使用 $M = 50$ 生成电压和电流测量。对于 SGL 中的所有测试用例，默认选择 $k = 5$ 来构建 k近邻图，并设置 $r = 5$ 来构建式 (16) 中的谱嵌入矩阵。采用了边采样率 $\beta = 10^{-3}$ 。如果 $s_{max} < tol = 10^{-12}$，则终止 SGL 迭代。在近似计算目标函数值 (3) 时，使用前 50 个非零拉普拉斯特征值。

为可视化每个图的结构，我们采用谱图绘制技术 [52]: 生成二维图布局时，将前两个非平凡拉普拉斯特征向量（u_2、 u_3）的各个分量分别用作嵌入每个节点（数据点）的 x 或 y 坐标。我们还将属于同一节点簇的节点标记为相同颜色，这些节点簇由谱图聚类确定 [46]。

B. 使用 *SGL* 进行图学习的全面结果

算法收敛。如图7所示，对于“二维网格”图（$|V| = 10$、000， $|E| = 20$、000）的学习任务，若从一个 5近邻图的最小生成树初始化，SGL 约需 40 次迭代即可收敛到 $s_{max} \leq 10^{-12}$。

与 k 近邻图的比较。如图8所示，对于“fe 4elt2”图（$|V| = 11$，143, $|E| = 32$，818）学习任务，以 5 近邻图的初始最小生成树作为起点时，SGL 约在 90 次迭代后收敛。对于 5 近邻图，我们采用相同的谱边缩放。如图8和图9所示，与 5 近邻图相比，SGL学习得到的图取得了更优的目标函数值和显著更好的谱近似。可以观察到，SGL学习得到的图具有

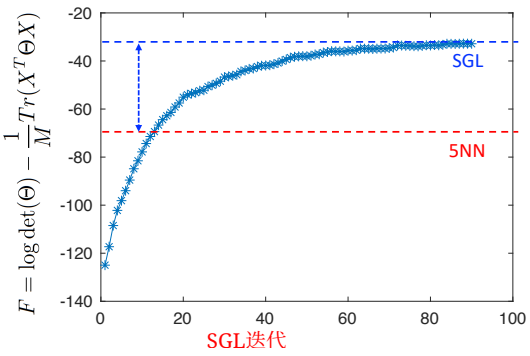

图8。“fe 4elt2”图的目标函数值。

与生成树相近的密度，因此比 5 近邻图稀疏得多。

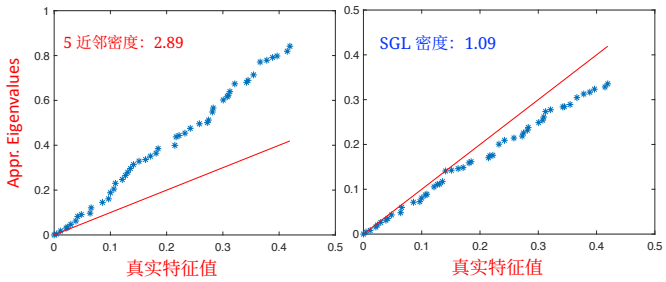

图9。与 5近邻图（“fe 4elt2”图）的比较

学习电路网络。如图10、11和12所示，对于“翼型”（$|V|=4$，253, $|E|=12$，289）、“裂纹”（$|V|=10$，240, $|E|=30$，380）和“G2电路”（$|V|=150$，102, $|E|=288$，286）图，SGL能够稳定地学习到稀疏图，其密度略高于生成树，同时保留关键的图谱属性。在图13中，将原始图上计算得到的有效电阻与SGL学习得到的图进行比较时，我们观察到结果高度相关。

学习约简网络。如图14所示，通过随机选取少量节点电压测量值（不使用 Y矩阵中的任何电流测量值）进行图学习，SGL能够学习尺寸小得多、谱性质相似的图：使用20%和10%的节点电压测量值进行图学习时，分别可以构建 $5\times$ 和$10\times$ 个更小的电阻网络，同时保留原始图的关键谱（结构）属性。

基于含噪测量进行学习。我们展示了使用含噪电压测量进行“二维网格”图学习的结果。对于每个 SGL 图学习任务，每个输入电压测量（向量） $\tilde{x}$将按以下方式计算：$\tilde{x}=x+\zeta\|x\|_2\epsilon$，其中 ϵ 表示归一化的高斯噪声向量， ζ 表示噪声水平。如图15所示，噪声水平不断增加会导致对原始谱性质的近似效果变差。还可以观察到，即使噪声水平高达 $\zeta=0.5$，所提出的 SGL算法学习到的图仍能保留前几个

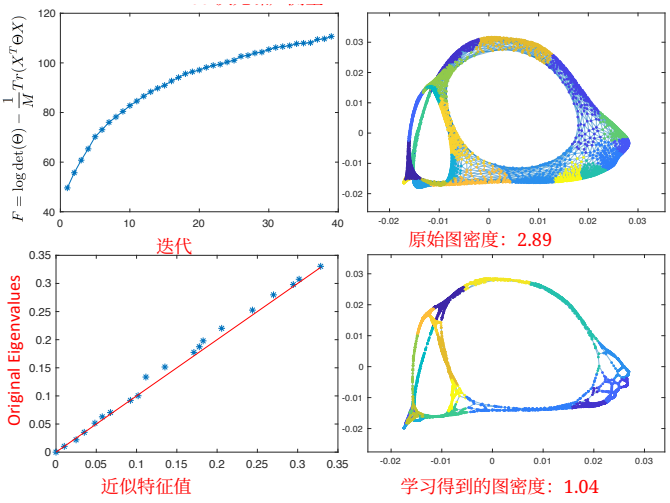

图10。“airfoil”图的学习结果。

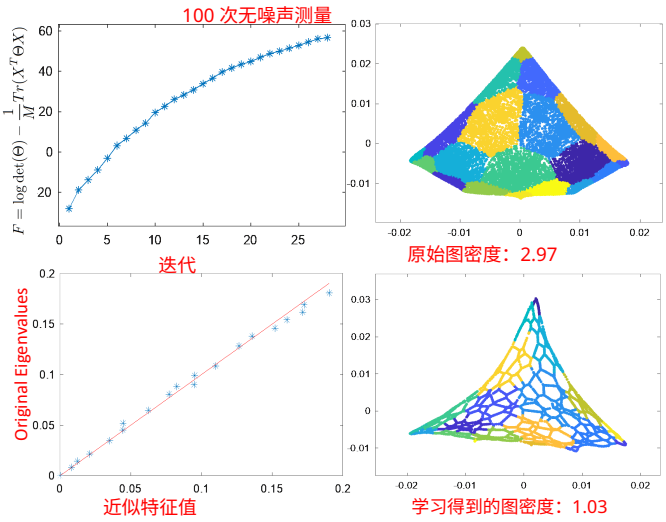

图11。“crack”图的学习结果。

对图结构（全局）性质至关重要的拉普拉斯特征值。

样本复杂度与运行时间可扩展性图16展示了样本复杂度（测量值数量）对图学习质量的影响。可以观察到，随着样本（测量值）数量增加，对图谱属性的近似显著改善。最后，我们在图17中展示了所提出的SGL算法的运行时间可扩展性。运行时间包括步骤2至步骤5的总耗时，但不包括步骤1的耗时。请注意，现代k近邻算法能够实现高度可扩展的运行时间表现 [45]。

SGL 的消融分析。我们对所提出的 SGL 算法进行了全面的消融分析。图18表明，构建 k近邻图时采用不同的最近邻数量，只会对 SGL 最终的解的质量（目标函数值）产生轻微影响。图19展示了前 50 个

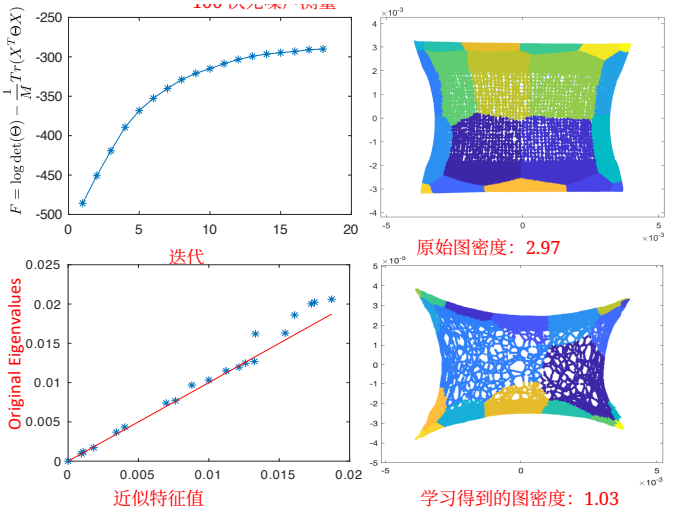

图12。“G2电路”图学习结果。

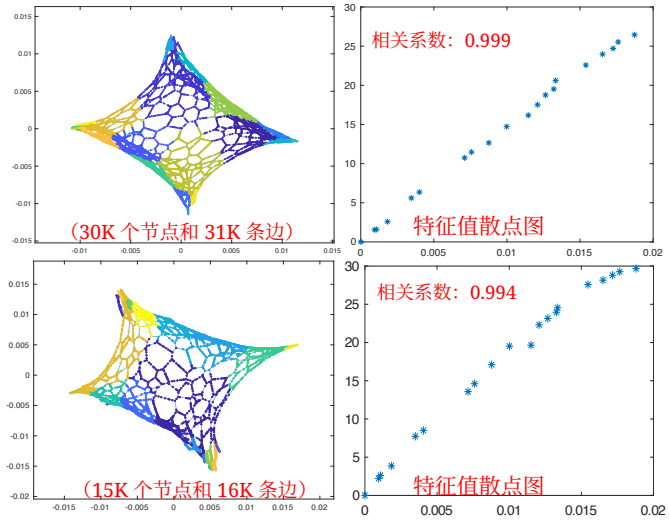

图14。SGL学习得到的约简图（“G2电路”）。

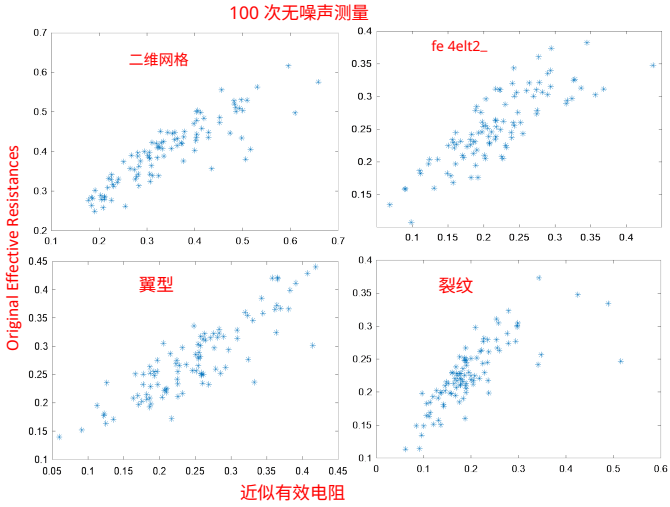

图13。有效电阻相关性（散点图）。

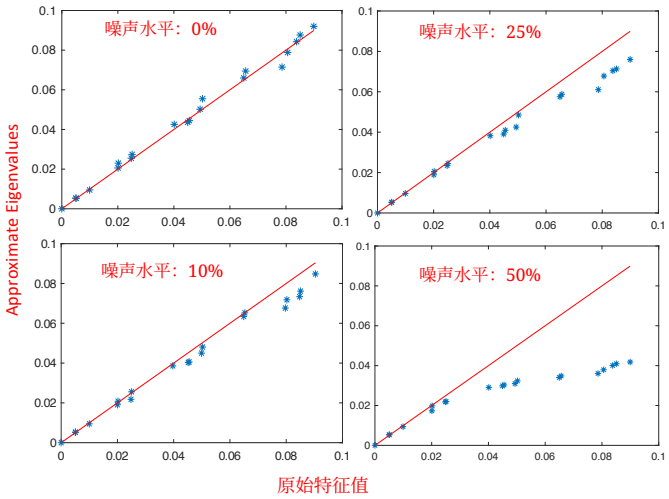

图15. 加入噪声后学习得到的图（“二维网格”图）。

个特征值在学习得到的图与原始图之间的平均相对误差，其中采用了不同的最近邻数量 k。例如，˜给定学习得到的图和原始图各自前 50 个特征值 λ_i 与 λ_i，平均相对误差˜可按 $\frac{1}{50}\sum_{i=1}^{50}\frac{|\lambda_i-\lambda_i|}{\lambda_i}$ 计算。可以观察到，对于初始 k近邻图采用不同的 k 时，学习得到的图都能很好地保留原始图的谱性质。在图20中可以看到，谱图嵌入的维度 r越高，学习得到的网络对拉普拉斯矩阵特征值的保留就越准确。在图21中，我们展示了在每次 SGL 迭代中增加边的数量，可以显著缩短整体图学习运行时间，同时不损害解的质量。

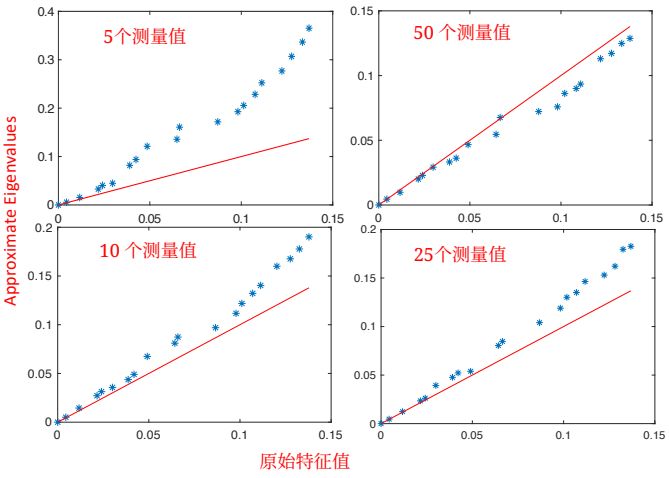

图16. 测量值数量的影响（“fe 4elt2”图）。

*C. SF-SGL*图学习的综合结果

谱/电阻保持。 图22展示了使用所提出的SF-SGL与

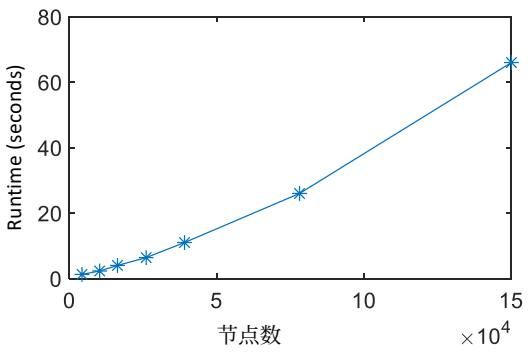

图17。SGL算法的运行时间可扩展性。

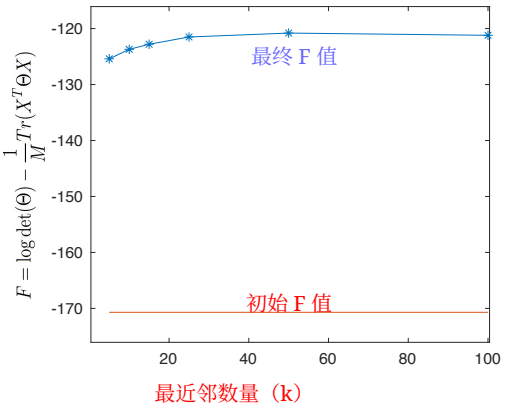

图18。使用各种kNN图得到的最终目标函数值。

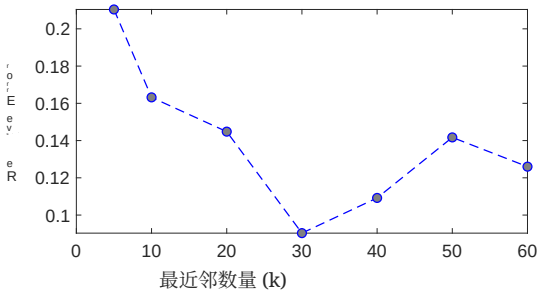

图19。不同 k 下，学习得到的图与原始图之间前50个特征值的平均相对误差（“fe 4elt”图）。

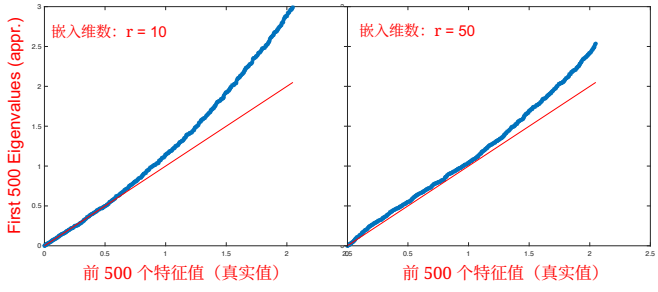

图20。不同谱嵌入维度 r下的SGL结果。

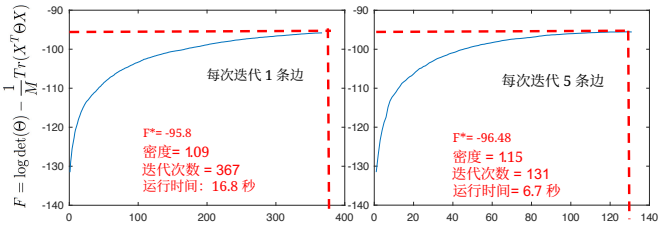

图21。每次迭代添加不同边数时的SGL迭代。

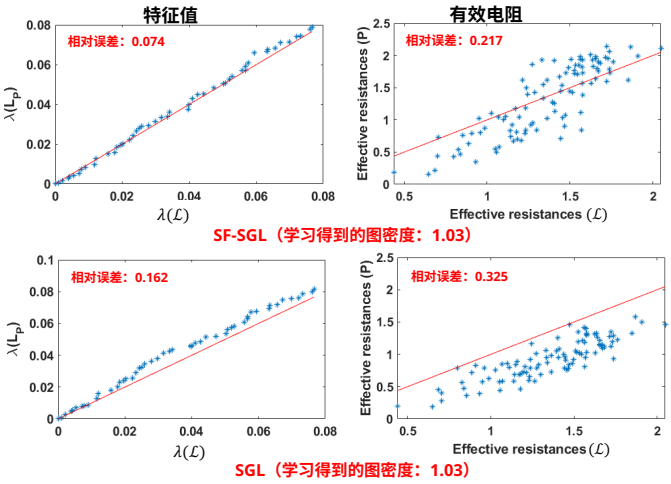

图22。学习得到的图（“fe 4elt”）上的SF-SGL与SGL对比。

SGL算法在图“四边形有限元”上的学习得到的图比较，其中比较了学习得到的图与原始图之间前50个特征值。同时，我们随机抽取100对节点，计算它们在学习得到的图和原始图上的有效电阻。**相对误差** 表示近似解 $\tilde{a}$ 与真实解 a给出的 k 对结果的平均相对误差，使得**相对误差** $= \frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k}\frac{|\tilde{a}-a|}{a}$。在此条件下，$k$ 在特征值比较中为50，在有效电阻比较中为100。可以观察到，使用SF-SGL学习得到的图能够更好地保持原始图的谱性质。

含噪学习。图23展示了使用含噪电压测量进行“airfoil”图学习的结果，其中学习得到的图的图密度为1。04。我们观察到，测量噪声会导致对原始谱图性质的近似效果变差。然而，即使测量数据中的噪声水平达到30%，学习得到的图仍然能够很好地保留原始图的关键谱性质。

更详细的结果。表 II 展示了使用所提出的 SF-SGL 和 SGL 算法学习得到的图的更多比较结果，其中 τ_G 和 τ_P 分别表示原始图和学习得到的图的图密度（$|E|/|V|$）；Err（λ）表示原始图与学习得到的图之间前 50 个特征值的平均相对误差，而 Err（R）表示在 100 对随机

表 II SF-SGL 与 SGL 的谱图学习结果比较。

测试用例	$\|V\|$	$\|E\|$	τ_G	τ_P	SGL				SF-SGL			
					$Err(\lambda)$	$Err(R)$	T_P	T	$Err(\lambda)$	$Err(R)$	T_P	T
翼型	$4.3E3$	$1.2E4$	2.89	1.04	0.228	0.296	$5.5s$	$7.5s$	**0.125**	**0.223**	$0.2s$ $(27X)$	$0.3s$ $(25X)$
三角形有限元	$1.1E4$	$3.3E4$	2.97	1.03	0.162	0.325	$10.6s$	$16.8s$	**0.074**	**0.217**	$0.5s$ $(21X)$	$0.7s$ $(24X)$
裂纹	$1.0E4$	$3.0E4$	2.97	1.04	**0.049**	0.271	$10.1s$	$15.8s$	0.176	**0.141**	$0.7s$ $(14X)$	$0.9s$ $(17X)$
有限元球体	$1.6E4$	$4.9E4$	3.00	1.05	0.084	0.243	$19.5s$	$29.9s$	**0.078**	**0.163**	$1.3s$ $(15X)$	$1.8s$ $(16X)$
二维网格	$2.5E5$	$5.0E5$	2.00	1.02	0.136	0.263	$356.7s$	$2,464.7s$	**0.062**	**0.119**	$21.3s$ $(17X)$	$31.6s$ $(78X)$
三维网格	$2.5E5$	$7.4E5$	2.95	1.12	0.207	0.577	$1,054.7s$	$3,155.7s$	**0.125**	**0.260**	$36.8s$ $(28X)$	$47.8s$ $(66X)$
mat3	$4.0E5$	$1.2E6$	2.89	1.13	-	-	-	-	0.236	0.350	$67.7s$	$86.7s$

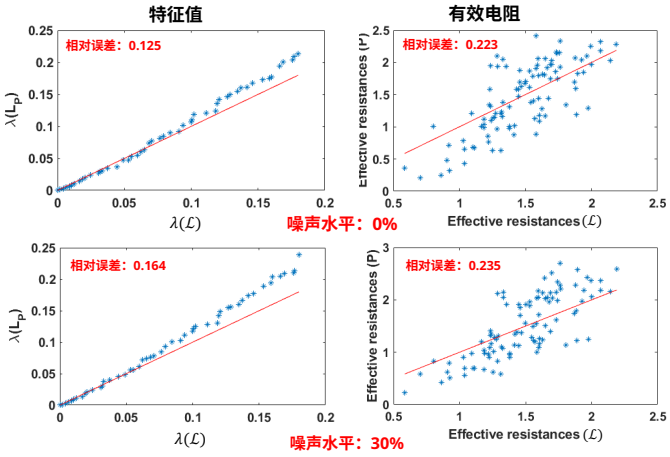

图23. 含噪声时学习得到的图（“airfoil”图）。

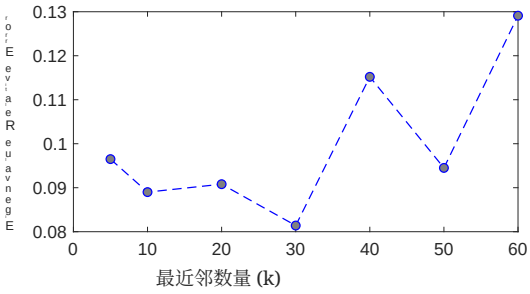

图24. 不同 k 下，学习得到的图与原始图的前 50 个特征值的平均相对误差（“fe 4elt”图）。

选定节点上测得的有效电阻的平均相对误差，表中突出显示了较好的结果； T_P 和 T 分别表示相应图学习算法的图学习时间（不包括初始 kNN 图构建时间）和总运行时间。表中还列出了 SF-SGL 相对于 SGL 的运行时间加速比。我们观察到，SF-SGL 学习得到的图能够更准确地保留原始图的谱性质，同时运行时间远短于 SGL。例如，SF-SGL 成功为“mat3”图生成了学习得到的图，而 SGL 则因内存资源有限而失败。

使用不同 kNN 图进行学习。给定原始“fe 4elt”图，以及 SF-SGL 在图密度为 1.05 时生成的学习得到的图，图24显示了在最近邻数量不同的情况下，学习得到的图与原始图之间前 50 个特征值的平均相对误差

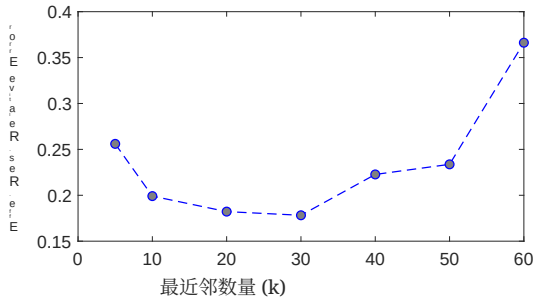

图25. 不同 k 下，学习得到的图与原始图之间有效电阻（100 对）的平均相对误差（“fe 4elt”图）。

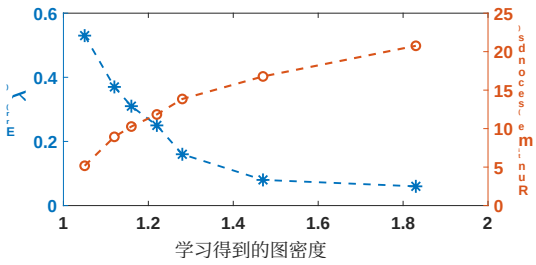

图26. 不同图密度下学习得到的图（“mat1”图）。

。图25则显示了在最近邻数量不同的情况下，学习得到的图与原始图中随机选取的 100 对节点的有效电阻值的平均相对误差 k。可以观察到，对于采用不同最近邻数量构建的初始 kNN 图，学习得到的图都能很好地保留原始图的谱性质。

权衡分析。图26展示了 SF-SGL 为“mat1”图学习得到的图密度与特征值平均相对误差/运行时间之间的权衡。可以看出，尽管更高的图密度会导致更长的运行时间，但能更好地保持原始图的谱。

运行时间可扩展性。图27展示了所提出的 SF-SGL算法即使在非常大的图上，运行时间也近乎呈线性增长。

D. 数据驱动的无矢量完整性验证

必须在整个设计过程中验证配电网络的完整性，以确保

表 III SF-SGL 在无向量完整性验证任务中的应用。

测试用例	$\|V\|$	$\|E\|$	原始图				学习得到的图					
			τ_G	$T(chol)$	$T(sol)$	$T(lp)$	τ_P	T	$T(chol)$	$T(sol)$	$T(lp)$	Err
ibm4	$9.5E5$	$1.6E6$	1.63	$11.86s$	$52.82s$	$171.60s$	1.02	$237.94s$	$1.19s$	$3.00s$	$162.57s$	0。01%
thu1	$5.0E6$	$8.2E6$	1.66	$134.91s$	$618.52s$	$1,469.92s$	1.03	$1,338.41s$	$7.70s$	$16.03s$	$1,025.85s$	0.01%
mat1	$1.0E5$	$2.8E5$	2.88	$3.75s$	$15.66s$	$14.07s$	1.09	$19.09s$	$0.25s$	$0.56s$	$12.62s$	0。84%
mat2	$2.0E5$	$5.8E5$	2.93	$16.60s$	$56.77s$	$23.82s$	1.07	$43.63s$	$0.59s$	$1.15s$	$23.07s$	0.99%
mat3	$4.0E5$	$1.2E6$	2.89	$27.29s$	$89.04s$	$69.21s$	1.07	$90.19s$	$1.21s$	$2.15s$	$79.90s$	0.45%
mat4	$9.0E5$	$2.6E6$	2.89	$169.40s$	$333.96s$	$531.38s$	1.04	$235.79s$	$3.28s$	$6.91s$	$196.98s$	0.10%
mat5	$1.6E6$	$4.6E6$	2.90	$1,031.42s$	$38,062.90s$	$1623.62s$	1.04	$511.16s$	$9.01s$	$9.99s$	$379.10s$	0。46%

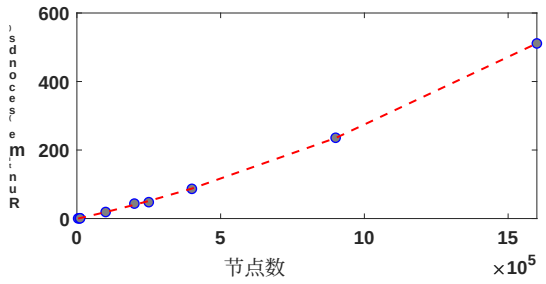

图27。SF-SGL算法的运行时间可扩展性。

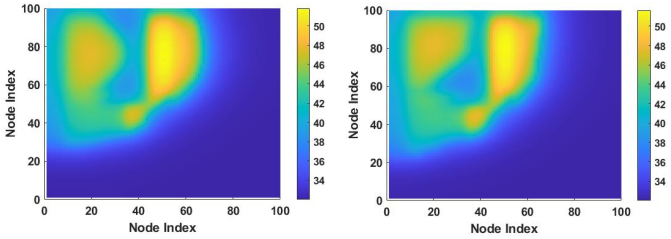

图 28。使用原始热网格（左）和学习得到的网格（右）进行无向量验证得到的最坏情况温度分布。

电源电压波动处于特定阈值范围内。为达到预期的芯片可靠性和功能水平，计算密集型全芯片热分析和完整性验证不可或缺，通常需要估算各种工作负载和功率预算下的热分布。在本研究中，我们提出了一种数据驱动的无向量功率/热完整性验证框架：**(1)**给定一组可能由片上电压/温度传感器获取的电压/温度测量值 [32], [33],，所提出的数据驱动方法首先利用所提出的图拓扑学习方法构建稀疏功率/热网格网络；**(2)** 接下来，将利用无向量功率/热完整性验证框架来估算最坏情况下的电压/温度（梯度）分布 [53], [54]。

表 III 展示了学习得到的图与原始图之间的单层无向量完整性验证结果，其中“ibm4”和“thu1”是功率网格测试用例，“mat1”至“mat5”是三维热网格； T、 T（$chol$）、 T（sol）和 T（lp）分别表示SF-SGL、Cholesky分解、使用矩阵因子的伴随灵敏度计算以及线性规划（LP）计算的运行时间。 T（sol）和 T（lp）是通过累加验证随机选取的100个节点所需运行时间得到的运行时间结果。 Err表示与使用原始图得到的结果相比的平均相对解误差。与原始图上的验证结果相比，SF-SGL学习得到的图实现了非常相近的结果，同时大幅降低了总运行时间。

图 28 展示了对“mat1”图使用原始热网格（左）和学习得到的网格（右）进行无向量验证所获得的最坏情况温度分布。可以看出，使用 SF-SGL 学习得到的图也能获得非常相似的最坏情况热分布。

VI. 结论

本研究提出了可高度扩展的谱算法，用于根据线性电压和电流测量学习大型电阻网络。我们证明，所提出的图学习方法等价于求解具有类拉普拉斯精度矩阵的经典图形 Lasso 问题。所提方法的一个独特特点是，学习得到的图具有谱嵌入或有效电阻距离，能够编码原始输入数据点（电压测量值）之间的相似性。作为一项重要扩展，我们还提出了一种可扩展性更强的无求解器谱图学习（SF-SGL）算法。这一可扩展框架使得能够以近线性时间学习由谱约简图和稀疏化图构成的层级结构，从而有望成为加速许多基于图的数值计算任务的关键。所提出的谱方法易于实现，且天然适合并行计算。所提出的谱算法可使每次迭代在 $O(N\log\ N)$ 时间内完成，而现有最先进的方法每次迭代至少需要 $O(N^2)$ 时间。我们还提供了样本复杂度分析，证明仅需 $O(\log\ N)$ 个电压测量值（向量），便有可能准确恢复电阻网络。大量实验结果表明，与以往最先进的谱方法相比，对于各种真实世界的大规模图和电路网络，所提出的方法能够以近线性时间生成一系列高质量的学习得到的图。

VII. 致谢

本工作部分受美国国家科学基金会资助，项目编号为 CCF-2021309、CCF-2011412、CCF- 2212370和CCF-2205572。

参考文献

[1] William L Hamilton、Rex Ying和Jure Leskovec。图表示学习：方法与应用。IEEE数据工程通报，2017年。[2] Thomas N. Kipf和Max Welling。利用图卷积网络进行半监督分类。国际学习表征会议（ICLR），2017年。[3] Aditya Grover和Jure Leskovec。node2vec：面向网络的可扩展特征学习。载于第22届ACM SIGKDD知识发现与数据挖掘国际会议论文集，第855–864页。ACM，2016年。[4] Rex Ying、Ruining He、Kaifeng Chen、Pong Eksombatchai、William L Hamilton和Jure Leskovec。用于网络规模推荐系统的图卷积神经网络。知识发现与数据挖掘国际会议（KDD），第974–983页，2018年。[5] Muhan Zhang和Yixin Chen。基于图神经网络的链接预测。载于神经信息处理系统进展，第5165–5175页，2018年。[6] Jie Zhou、Ganqu Cui、Zhengyan Zhang、Cheng Yang、Zhiyuan Liu和Maosong Sun。图神经网络：方法与应用综述。arXiv预印本arXiv:1812.08434，2018年。[7] Hongyun Cai、Vincent W Zheng和Kevin Chen-Chuan Chang。图嵌入的综合综述：问题、技术与应用。IEEE知识与数据工程汇刊，30(9):1616–1637，2018年。[8] Palash Goyal和Emilio Ferrara。图嵌入技术、应用与性能：综述。基于知识的系统，151:78–94，2018年。[9] Prakash Chandra Rathi、R Frederick Ludlow和Marcel L Verdonk。利用图卷积深度神经网络为药物发现生成实用的高质量静电势表面。药物化学杂志，2019年。[10] Jaechang Lim、Seongok Ryu、Kyubyong Park、Yo Joong Choe、Jiyeon Ham和Woo Youn Kim。利用具有三维结构嵌入图表示的新型图神经网络预测药物—靶标相互作用。化学信息与建模杂志，59 3988，2019 9 3981( ): –。[11] Filipe de Avila Belbute-Peres、Thomas Economon和Zico Kolter。结合可微偏微分方程求解器和图神经网络进行流体流动预测。载于国际机器学习会议，第2402–2411页。PMLR，2020年。[12] Zongyi Li、Nikola Kovachki、Kamyar Azizzadenesheli、Burigede Liu、Andrew Stuart、Kaushik Bhattacharya和Anima Anandkumar。用于参数化偏微分方程的多极图神经算子。神经信息处理系统进展，33，2020年。[13] Valerii Iakovlev、Markus Heinonen和Harri L¨ahdesm¨aki。利用图神经网络从稀疏数据中学习连续时间偏微分方程。载于国际学习表征会议，2020年。[14] Y. Ma、H. Ren、B. Khailany、H. Sikka、L. Luo、K. Natarajan和B. Yu。高性能图卷积网络及其在可测试性分析中的应用。设计自动化会议（DAC），2019年。[15] Guo Zhang、Hao He和Dina Katabi。Circuit-GNN：用于分布式电路设计的图神经网络。载于国际机器学习会议，第7364–7373页。PMLR，2019年。[16] Hanrui Wang、Kuan Wang、Jiacheng Yang、Linxiao Shen、Nan Sun、Hae-Seung Lee和Song Han。GCN-RL电路设计器：结合图神经网络和强化学习的可迁移晶体管尺寸确定。载于2020年第57届ACM/IEEE设计自动化会议（DAC），第1–6页。IEEE，2020年。[17] Azalia Mirhoseini、Anna Goldie、Mustafa Yazgan、Joe Wenjie Jiang、Ebrahim Songhori、Shen Wang、Young-Joon Lee、Eric Johnson、Omkar Pathak、Azade Nazi等。一种用于快速芯片设计的图布局方法。《自然》，594(7862):207–212，2021年。[18] Will Hamilton、Zhitao Ying和Jure Leskovec。大型图上的归纳式表示学习。载于神经信息处理系统进展，2017年。[19] Chenhui Deng、Zhiqiang Zhao、Yongyu Wang、Zhiru Zhang和Zhuo Feng。GraphZoom：一种用于精确且可扩展图嵌入的多层谱方法。载于国际学习表征会议，2019年。[20] Jerome Friedman、Trevor Hastie和Robert Tibshirani。利用图形套索进行稀疏逆协方差估计。《生物统计学》，9(3):432–441，2008年。[21] Hilmi E Egilmez、Eduardo Pavez和Antonio Ortega。在拉普拉斯矩阵和结构约束下从数据中进行图学习。IEEE信号处理精选主题期刊，11(6):825–841，2017年。[22] Xiaowen Dong、Dorina Thanou、Michael Rabbat 和 Pascal Frossard。从数据学习图：信号表示视角。IEEE信号处理杂志，36(3):44–63，2019年。[23] Sandeep Anil Kumar、Jiaxi Ying 等。通过拉普拉斯谱约束进行结构化图学习。神经信息处理系统进展 32（Nips 2019），2019年。[24] Harsh Shrivastava、Xinshi Chen、Binghong Chen、Guanghui Lan、Srinivas Aluru、Han Liu 和 Le Song。GLAD：学习稀疏图恢复。发表于国际学习表征会议，2019年。[25] Xingyue Pu、Tianyue Cao、Xiaoyun Zhang、Xiaowen Dong 和 Siheng Chen。学习如何学习图拓扑。神经信息处理系统进展，34，2021年。[26] Ke Li 和 Jitendra Malik。学习优化。arXiv预印本arXiv:1606.01885，2016年。[27] Tianlong Chen、Xiaohan Chen、Wuyang Chen、Howard Heaton、Jialin Liu、Zhangyang Wang 和 Wotao Yin。学习优化：入门指南与基准。arXiv预印本arXiv:2103.12828，2021年。[28] Zhuo Feng。SGL：基于测量值的谱图学习。发表于 IEEE/ACM设计自动化会议（DAC），2021年。[29] Daniel Spielman 和 Nikhil Srivastava。通过有效电阻进行图稀疏化。《SIAM计算杂志》，40(6):1913–1926，2011年。[30] Zhuo Feng。GRASS：利用可扩展谱扰动分析的图谱稀疏化。IEEE集成电路与系统计算机辅助设计汇刊，39(12):4944–4957，2020年。[31] Ching-Che Chung 和 Cheng-Ruei Yang。一种用于芯片上热监测的自动校准全数字温度传感器。IEEE电路与系统汇刊第二辑：简报，58(2):105–109，2011年。[32] Md Toufiq Hasan Anik、Mohammad Ebrahimabadi、Hamed Pirsiavash、Jean-Luc Danger、Sylvain Guilley 和 Naghmeh Karimi。用于安全性、可靠性和可移植性的芯片上电压与温度数字传感器。发表于2020年IEEE第38届国际计算机设计会议（ICCD），第506–509页。IEEE，2020年。[33] Chia-Yuan Ku 和 Tsung-Te Liu。一种用于芯片上热监测的电压可扩展低功耗全数字温度传感器。IEEE电路与系统汇刊第二辑：简报，66(10):1658–1662，2019年。[34] Yann LeCun、L´eon Bottou、Yoshua Bengio 和 Patrick Haffner。应用于文档识别的基于梯度的学习。IEEE会议录，86(11):2278–2324，1998年。[35] Xiaowen Dong、Dorina Thanou、Pascal Frossard 和 Pierre Van-dergheynst。在平滑图信号表示中学习拉普拉斯矩阵。IEEE信号处理汇刊，64 6173，2016 23 6160( ): – 。[36] Vassilis Kalofolias。如何从平滑信号中学习图。发表于人工智能与统计会议，第920–929页，2016年。[37] Vassilis Kalofolias 和 Nathana¨el Perraudin。从平滑信号中进行大规模图学习。国际学习表征会议（ICLR 2019），2019年。[38] Brenden Lake 和 Joshua Tenenbaum。通过学习稀疏图发现结构。2010年。[39] Martin Slawski 和 Matthias Hein。正定M矩阵的估计及吸引型高斯马尔可夫随机场的结构学习。《线性代数及其应用》，473:145–179，2015年。[40] Ryan J Tibshirani。快速分阶段算法的一般框架。《机器学习研究杂志》，16(1):2543–2588，2015年。[41] Zhiqiang Zhao 和 Zhuo Feng。保持有效电阻的图谱约简。发表于第56届年度设计自动化会议（DAC '19）论文集，第109:1–109:6页，纽约，美国，2019年。ACM。[42] Mikhail Belkin 和 Partha Niyogi。用于降维和数据表示的拉普拉斯特征映射。神经计算，15(6):1373–1396，2003年。[43] CJ Carey。用于流形发现的图构建。2017年。[44] Martin Imre、Jun Tao、Yongyu Wang、Zhiqiang Zhao、Zhuo Feng 和 Chaoli Wang。用于大型图可视化的保谱稀疏化。《计算机与图形学》，87:89–102，2020年。[45] Yury A Malkov 和 Dmitry A Yashunin。利用分层可导航小世界图进行高效且鲁棒的近似最近邻搜索。IEEE模式分析与机器智能汇刊，2018年。[46] Zhiqiang Zhao、Ying Zhang 和 Zhuo Feng。通过谱粗化实现可扩展谱嵌入与数据可视化。ACM国际网络搜索与数据挖掘会议（WSDM）论文集，2021年。[47] I. Koutis、G. Miller 和 R. Peng。趋近最优地求解SDD线性系统。发表于IEEE FOCS会议录，第235–244页，2010年。

[48] Zhiqiang Zhao、Yongyu Wang 和 Zhuo Feng。SAMG：用于求解大型对称对角占优（SDD）矩阵的稀疏化图论代数多重网格。发表于第*36*届国际计算机辅助设计会议（*ICCAD*）论文集。ACM，2017年。[49] Andreas Loukas。具有谱保证和割保证的图约简。《机器学习研究杂志》，20(116):1–42，2019年。[50] O. Livne 和 A. Brandt。精简代数多重网格（LAMG）：快速图拉普拉斯线性求解器。《*SIAM*科学计算杂志》，34(4):B499–B522，2012年。[51] Ying Zhang、Zhiqiang Zhao 和 Zhuo Feng。Sf-grass：无求解器图谱稀疏化。发表于*2020*年*IEEE/ACM*国际计算机辅助设计会议（*ICCAD*），第1–8页。IEEE，2020年。[52] Yehuda Koren。论谱图绘制。发表于国际计算与组合学会议，第496–508页。Springer，2003年。[53] Zhiqiang Zhao 和 Zhuo Feng。一种可扩展无矢量热完整性验证的谱方法。发表于*2020*年欧洲设计、自动化与测试会议暨展览会（*DATE*），第412–417页。IEEE，2020年。[54] Zhiqiang Zhao 和 Zhuo Feng。一种可扩展无矢量电网完整性验证的谱图稀疏化方法。发表于第*54*届年度设计自动化会议（*2017*）论文集，第1–6页，2017年。