L基于信息函数的拉普拉斯网络优化

Samuel Rosa 和 Radoslav Harman

2025年12月23日

arXiv:2512.19279v1 [cs.SI] 22 Dec 2025

摘要

设计网络以优化鲁棒性及其他性能指标，是一个成熟的问题，其应用领域涵盖电气工程和通信网络等。许多此类性能度量依赖于拉普拉斯谱；典型例子包括总有效电阻、生成树的数量以及代数连通度。本文借鉴统计学中实验设计的思想，推进了基于拉普拉斯矩阵的网络优化研究。我们提出一个理论框架，通过引入信息函数这一概念来分析性能度量，该概念概括了这些度量所具有的一系列理想性质。随后，我们构造了一个新的参数化信息函数族——Kiefer 测度，其中涵盖了三种最常见的谱目标。我们给出拉普拉斯优化问题的一种正则化重构，并利用该重构计算 Kiefer 测度的方向导数。方向导数为拉普拉斯优化中反复出现的量提供了统一处理方法，例如梯度和次梯度；我们还表明，这些量与基于拉普拉斯矩阵的节点距离度量相关，我们将其称为节点差异度。我们运用节点差异度推导出 Kiefer 准则的高效秩一更新公式，并设计了一种新的网络优化边交换方法。这些更新公式使得能够采用渐近时间复杂度更低的贪心算法和交换算法。

关键词： 图、网络设计、拉普拉斯谱、鲁棒性、可靠性、有效电阻 ce

1 引言

用于评估网络的拉普拉斯谱指标已应用于众多领域，包括电气工程、通信系统、机器人学和动力网络 [1–4]。在这些领域中，此类指标在连通性、鲁棒性或网络动力学方面具有明确的含义。此外，许多拉普拉斯优化问题也可视为数理统计中研究的最优实验设计问题的特例，这种联系早在数十年前就已被指出 [1,5,6]。为简洁起见，我们将这些领域称为网络设计（ND）和实验设计（ED）。

尽管网络设计（ND）不同领域中的底层问题往往相似，甚至在数学上等价，但分析和算法工具通常各自独立发展，术语也各不相同。例如，有效电阻 [1] 也称为网络关键性 [2], 范数 [7], 和基尔霍夫指数 [8]。因此，ND 各领域中存在许多针对拉普拉斯优化的临时性结果，有些领域尚缺乏研究这类问题的整体理论框架。此外，由于 ND 是一个相对年轻的领域，其拉普拉斯优化的某些方面不如实验设计（ED）文献中的相关研究成熟。本文借鉴 ED 中的概念，为 ND 提出新的贡献，尤其是拓展现有理论框架，并提出一种新的优化算法，详见第 1.2 节。为联系 ND 中采用拉普拉斯谱指标的不同领域，并强调一些已研究问题之间的等价性，我们首先进行简要综述，概括不同术语并指出共同结果。

1.1 网络设计中的拉普拉斯矩阵优化

拉普拉斯谱优化涉及构建网络，使选定的谱测度达到最大（或最小）。具体而言，我们考虑向

一个预先存在的（可能为空的）网络中添加 A条边的问题。最常用的基于拉普拉斯特征值的度量可分为三类，分别等价于：(i) 有效电阻；(ii) 生成树的数量；(iii) 代数连通度。在 ED语境中，有效电阻对应于 A-最优性，生成树的数量对应于 D-最优性，而代数连通度对应于 E-最优性。为了清晰地区分这三类，我们采用 ED 中的字母记法，从而能够进行简单且统一的处理。

这些性能度量有许多动机和解释。下面我们作一概述。在每种情况下，这些度量不一定相同，但相应的优化问题是等价的。

- A 最优性：总有效电阻 [1], 预期平均往返时间 [1], 网络关键性[2], 基尔霍夫指数 [8, 9]， $\mathcal{H}_2$ 范数 [4, 7, 10], 网络鲁棒性的度量 [11], 平均中心性的度量 [12]。

- D 最优性：生成树的数量， t 最优性，树连通度 [13], 图复杂度[13], 可行母线注入的体积 [14], 网络鲁棒性的度量 [15], 不确定性体积 [16], 稳态熵 [16]。

- E 最优性：代数连通度 [1, 17], 网络鲁棒性的度量 [11], 汉克尔范数[18]。

我们还概述了能导出网络拉普拉斯矩阵A、 D或 E最优性的领域及相应的优化问题，相关度量标注于括号中：

- 一般网络（例如交通网络、计算机网络）的鲁棒性和可靠性：最大化鲁棒性 [11, 15, 19–22] (A, D, E)，最大化可靠性 [23] (D)。
- 一致性网络（动力网络）：最优拓扑结构 [24] (E)，最小化 $\mathcal{H}_2$-范数[4, 7] (A)，最大化鲁棒性 [4, 18] (A, D, E)，最小化不确定性体积 [16, 18] (D)，最小化稳态熵 [16] (D)。我们注意到，线性一致性网络的问题会导出本文所研究的拉普拉斯优化问题 [4, 18]；其他类型的一致性网络通常会导出更复杂的问题。
- 图上的估计、同步定位与建图（SLAM）：最大化连通性[13, 25–27] (D, E)。
- 一般图论：最小化总有效电阻 [1] (A)，最大化代数连通度 [1, 28, 29] (E)，最大化生成树的数量 [30] (D)。
- 电网络：最小化总有效电阻 [1] (A)，最大化可行母线注入的体积 [14](D)，最小化基尔霍夫指数 [31] (A)。
- 通信网络：最小化网络关键性 [2](A)，最小化平均出行成本 [2] (A)，最大化鲁棒性 [7] (A)。
- 多车辆或多机器人巡逻：最小化平均预期通勤时间 [3, 32](A)。
- 马尔可夫链：最小化平均预期通勤时间 [1, 33] (A)。
- 两两比较网络：最大化排名的信息量 [34] (A, D, E)。
- 航空运输：最大化鲁棒性 [35, 36] (A, E)。
- 图神经网络：最小化过度压缩 [37] （A）。
- 社交网络中的好友推荐：优化内容传播 [38]（E）。
- 化学中异构体的结构：最大化化学反应性 [8] (A)。

拉普拉斯谱优化在一般网络、动力网络和同步定位与建图的鲁棒性与可靠性研究中尤为深入。然而，这三个领域大多独立发展，常常得出相似的结果，而其他领域也出现了一些部分研究成果。下面我们列举一些值得注意的例子，但全面分析网络设计不同领域的研究发现超出了本文的讨论范围。

A、 D和 E最优网络问题的计算方法通常包括序贯贪心算法，或通过凸规划求解的连续凸松弛。贪心方法已分别应用于一般网络 [31, 39], 、一致性网络 [40], 、同步定位与建图 [13],以及航空运输 [36]。网络科学各领域尚未广泛了解的一些重要成果包括 D最优性的子模性，这使得人们能够保证贪心解 [13, 18, 41], 的质量，并利用随机化方法加速多次计算中的贪心算法 [31, 39]。混合整数规划方法也已得到应用 [10, 29],，但通常仅适用于规模较小的网络。凸松弛方法已分别在一般图论 [1], 、鲁棒网络 [15], 、同步定位与建图 [13, 27], 、动态网络 [4, 16] 以及航空运输 [35]中得到发展。这些松弛问题通常使用半定规划 [28]或Frank-Wolfe方法 [27]求解。

在实验设计中也得到了类似的发现，例如贪心方法的子模保证 [42], 凸松弛（称为近似设计） [43] 、半定规划表述 [44], 以及 Frank-Wolfe 方法 [45, 46]。

为保持讨论重点，本文不讨论凸松弛方法，并将其留待未来研究作更详细的考察。

1.2 贡献与相关工作

拉普拉斯谱优化概述 我们在第1.1节简要综述了用于网络设计的拉普拉斯谱优化，并总结了网络设计领域的不同术语和方向。值得一提的相关综述包括 [1], ，但该综述早于上述许多研究成果；以及 [21], ，该文回顾了多个类别网络（如道路网络）的鲁棒性与可靠性文献。尽管许多研究承认其他领域存在相关工作，但优化问题之间潜在的等价性及其带来的结果相似性往往未得到足够强调。

网络度量的公理化研究我们提出一组性能度量应具备的理想属性，并以信息函数的概念加以刻画（类似于实验设计；见 [43], 第5章）。在动力网络中，这些属性的若干子集曾用于刻画“系统性性能度量” [4, 18]。在其他网络领域，似乎尚未确立类似的研究结果。事实上，在可靠性与鲁棒性领域，“对鲁棒性度量所需属性进行公理化研究”被视为未来研究的一个重要方向 [21]。

新度量受实验设计启发（见 [43], 第2.4.10节中的第6章 [47]），我们提出 Kiefer 的Φ_p 度量，这是一类自然的参数化基于特征值的信息函数，其中包括 A-、D-和 E-最优性。这种参数化凸显了三种常见度量之间的差异与相似之处，并提供了折中度量（例如，介于 A-最优性与D-最优性之间的度量）。在动力网络中，这些准则的一个子类被称为谱 ζ 函数，它们等价于 Hardy-Schatten 系统范数或 $\mathcal{H}_p$ 范数 [4,18]。然而，谱 ζ 函数既不包含介于 A-最优性与 D-最优性之间的折中度量，也不包含D-最优性本身。

正则化重构与方向导数 我们提出了最优网络问题的一种正则化重构，便于进行理论分析。类似的技术已用于处理一致性网络 [7] 以及等价于网络优化的那部分实验设计问题 [48,49]。其他正则化方法包括使用约化（或接地）拉普拉斯矩阵，或通过一个非奇异矩阵的逆来表示拉普拉斯矩阵的伪逆 [1]。

利用这种重构，我们计算了拉普拉斯度量的方向导数，这些导数是网络理论分析和算法优化的重要工具。它们为不同领域中采用的各类量提供了统一框架，例如梯度、次梯度和小型网络扰动（例如，[2, 35, 50] 用于 A-最优性； [14, 15, 19] 用于 D-最优性； [19, 27, 28, 38] 用于 E-最优性）。我们表明，方向导数与基于拉普拉斯矩阵的节点间距离度量密切相关，我们称之为节点差异度。此外，我们给出了所有 Φ_p 度量的方向导数公式，其中包括 A-、 D-和 E-最优性等特殊情形。方向导数曾用于近似动力网络中性能度量的变化 [18], ，其中给出了 A-最优性的方向导数，但未提供其他 Φ_p 度量的方向导数。

秩一更新与高效实现 移除或添加单条边会使网络的拉普拉斯矩阵发生秩一更新。利用节点差异度，我们为所有 Φ_p 度量提供高效的更新公式，适用于 p取整数值的情形，包括 A最优性和 D最优性。对于 A最优性和 D最优性，这类公式较为常见 [18, 31], ，但其他Φ_p 度量尚无此类公式。因此，我们给出了贪心方法的高效版本，其渐近时间复杂度低于直接实现。

交换算法 我们提出 KL 交换方法，这是一种利用节点差异度进行网络优化的基于边交换的启发式算法，其灵感来自实验设计（ED）中的交换算法（见 [51], 第12.6节）。利用秩一更新公式，我们为 Φ_p 度量提供了该方法的高效版本，并降低了时间复杂度。随后，我们通过示例说明，KL 交换方法能够在相对较短的计算时间内改进贪心算法给出的解。 [52], 提出了一种用于优化A最优性的边交换启发式算法；然而，该方法仅考虑了我们算法所采用的可能交换操作的一个子集。EdgeRewire 方法 [19], 也采用了边交换，但其针对的是不同且限制更多的优化设置，包括固定交换次数且保持节点度不变。

2 背景

2.1 矩阵记法

我们用大写粗体字母表示矩阵，用小写粗体字母表示（列）向量。符号 $\mathbb{R}^{m\times n}$、 $\mathcal{S}^n$ 和 $\mathcal{S}^n_+$ 分别表示所有 $m \times n$ 矩阵、 $n \times n$ 对称矩阵和 $n \times n$ 半正定矩阵的集合。对于矩阵 A， $\mathcal{C}$(A) 是其列空间，A^+ 是其 Moore-Penrose 伪逆；如果 $\mathrm{A} \in \mathcal{S}^n$，则 $\lambda_1(\mathrm{A}) \geq \ldots \geq \lambda_n(\mathrm{A})$ 是其特征值。对于 $\mathrm{A} \in \mathcal{S}^n$，$\mathrm{A}^0$ 是到 $\mathcal{C}$(A) 的投影矩阵。上标 $\perp$ 表示正交补。对称矩阵的 Loewner 序记作 $\succeq$ （即，$\mathrm{A} \succeq \mathrm{B}$ 当且仅当 $\mathrm{A} - \mathrm{B} \in \mathcal{S}^n_+$）。对角线元素为 x 的对角矩阵记作 diag(x)。符号 I_n 和 J_n 分别表示 $n \times n$ 单位矩阵和元素全为 1 的 $n \times n$ 矩阵。全零矩阵或零向量记作 0。 $n \times 1$ 全 1 向量记作 $\mathbf{1}_n$，e_i 表示第 i个元素等于 1、其余元素均为零的向量。

2.2 图论

令 $G = (V, E, \mathbf{w})$ 为一个（单重无向）加权图，其中 $V = \{1, \ldots, n\}$ 是节点集合，$E \subseteq \binom{V}{2}$ 是带有权重 $w_e \geq 0$、 $e \in E$ 的 m 边集合。为简化记号，我们将边权重与非负向量 $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^m$ 等同。 G 的关联矩阵是一个 $n \times m$ 矩阵 $\mathbf{Q}$，其通过任意为各条边指定方向得到；当边 e 通向节点 i 时，其元素为 $q_{ie} = 1$；当 e 从 i 通出时，其元素为 $q_{ie} = -1$ ；其他情况下为 $q_{ie} = 0$ 。拉普拉斯矩阵 $\mathbf{L} \in \mathbb{R}^{n\times n}$

随后定义为 $\mathbf{L} = \mathbf{Q}\mathrm{diag}(\mathbf{w})\mathbf{Q}^T \in \mathbb{R}^{n\times n}$，其元素满足

$$\ell_{i,j} = \begin{cases} \sum_{e\sim i} w_e, & i = j, \\ -w_{(i,j)}, & (i,j) \in E, \\ 0, & \text{otherwise}, \end{cases}$$

其中，$e \sim i$ 表示与 i相接的边 e。拉普拉斯矩阵$\mathbf{L}$ 至少有一个特征值为零（即，$\mathrm{rank}(\mathbf{L}) \le n-1$），且当且仅当图 G 连通时，$\mathbf{L}$ 的秩达到最大值 $n-1$。

2.3 最优网络

网络设计的拉普拉斯优化问题可表述如下。给定一组节点 V、完全图 K_n上的边权重$\mathbf{w}$ 以及已有边 $E_0 \subset \binom{V}{2}$，从 $\binom{V}{2} \setminus E_0$ 中选择 N 条边E，使 $\Phi(\mathbf{L}_E)$最大化。这里，$\mathbf{L}_E$ 是与 $G = (V, E_0 \cup E, \mathbf{w})$对应的加权拉普拉斯矩阵，而 Φ 是预先选定的、用于衡量网络“质量”的指标。稍微滥用一下记号，G 中的权重$\mathbf{w}$ 是通过将原始权重$\mathbf{w}$ 限制到完全图 $K_n = (V, \binom{V}{2}, \mathbf{w})$的子图 G 上得到的。考虑边权重是一种常见做法 [4, 13, 27]；这类权重用于描述连接的强度或重要性（例如，SLAM 中测量的精度 [13]）。

形式上，

$$\begin{aligned} \max_{E} \quad & \Phi(\mathbf{L}_E) \\ s.t. \quad & E \subseteq \binom{V}{2} \setminus E_0, \\ & |E| = N. \end{aligned} \tag{1}$$

一个 Φ-最优网络记作 E^*。没有已有边的情形 E_0 只需令 $E_0 = \emptyset$即可实现；没有边权重的情形则只需对所有边 e令 $w_e = 1$。为简便起见，我们将网络（或图） $G = (V, E_0 \cup E, \mathbf{w})$ 简称为网络（或图） E。

一些最常用的函数 Φ 基于 $\mathbf{L}$ 的非平凡特征值 $\lambda_1 \ge \ldots \ge \lambda_{n-1}$。假设 $\mathbf{L}$ 的秩为 $n-1$（即网络连通）。那么，最常用的三种度量是 $\Phi_A(\mathbf{L}) = (n-1)(\sum_{i=1}^{n-1} \lambda_i^{-1})^{-1}$、$\Phi_D(\mathbf{L}) = (\prod_{i=1}^{n-1} \lambda_i(\mathbf{L}))^{1/(n-1)}$ 和 $\Phi_E(\mathbf{L}) = \lambda_{n-1}$。这三种度量在不同语境中有不同名称（见第1.1节）；本文分别将其称为 A-、D- 和 E- 最优性。除各自领域的具体解释外，A- 和 D- 最优性分别表示正拉普拉斯矩阵特征值的调和平均数和几何平均数。尽管这些准则还有其他形式（例如，D-最优性可采用 $\log(\prod_{i=1}^{n-1} \lambda_i)$），但我们有意采用这些形式，因为它们满足信息函数的条件（第3节）。

2.4 最优试验设计

最优实验设计的通常目标是选择 N 次试验，以最大化从实验中获得的信息。形式上，给定一组 k 设计点 $\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^n$，优化问题为

$$\begin{aligned} \max_{\mathbf{d}} \quad & \Phi(\mathbf{M}(\mathbf{d})) \\ s.t. \quad & \mathbf{M}(\mathbf{d}) = \mathbf{M}_0 + \sum_{e=1}^{k} d_e \mathbf{x}_e \mathbf{x}_e^T, \\ & \mathbf{d} \in \{0,1\}^k, \quad \sum_{e=1}^{k} d_e = N. \end{aligned} \tag{2}$$

其中，$\mathbf{d}$ 是设计（也称为“精确”设计），d_e 表示在设计点$\mathbf{x}_e$进行的试验次数，$\mathbf{M}(\mathbf{d})$是信息矩阵，用于表示通过

按照$\mathbf{d}$运行实验所传递的信息量，矩阵$\mathbf{M}_0$ 表示某种形式的先验信息，而$\mathbf{x}_e\mathbf{x}_e^T$ 是与在$\mathbf{x}_e$处进行单次试验相对应的基本信息矩阵。值 $\Phi(\mathbf{M}(\mathbf{d}))$则将信息量化为一个实数。 Φ最优设计，即式（2）的解，记为$\mathbf{d}^*$。

问题 (2) 最简单的统计学解释是，它对应于为线性回归模型 $y = \mathbf{x}^T\boldsymbol{\beta} + \varepsilon$ 寻找最优设计；在满足 $d_e = 1$ 的设计点 $\mathbf{x}$ $=\mathbf{x}_e$ 上收集相互独立的同方差观测y 。在此设定下，$\mathbf{M}(\mathbf{d})$ 是费舍尔信息矩阵的一个常数倍；若其非奇异，则 $\mathbf{M}^{-1}(\mathbf{d})$ 与 $\boldsymbol{\beta}$ 的最小二乘估计量的协方差矩阵成正比。因此，问题 (2) 表示对该协方差矩阵的某种实值指标进行最小化，从而使估计量按照 Φ 所定义的意义尽可能精确。更多信息请参阅专著 [43, 46, 47, 51, 53]。

为比较 (1) 和 (2)，令 $E_0^c = \binom{V}{2} \setminus E_0$, $k = |E_0^c|$，并设 $\mathbf{L}_0$ 为初始网络 $(V, E_0, \mathbf{w})$ 的拉普拉斯矩阵。对于一条边 $e = (i, j)$，令 $\mathbf{q}_e = \mathbf{e}_i - \mathbf{e}j$ 和 $\mathbf{x}_e = \sqrt{w_e}\mathbf{q}_e$。请注意，本文始终使用这一记号。于是，拉普拉斯矩阵$\mathbf{L}_E$ 可表示为

$$\mathbf{L}_E = \mathbf{L}_0 + \sum_{e \in E_0^c} d_e w_e \mathbf{q}_e \mathbf{q}_e^T = \mathbf{L}_0 + \sum_{e \in E_0^c} d_e \mathbf{x}_e \mathbf{x}_e^T,$$

其中$\mathbf{d}$ 是网络设计：当 $e \in E$时为 $d_e = 1$ ，否则为 $d_e = 0$ 。由此可知，正如第1节所述，网络设计问题（1）是问题（2）的一种特殊情形。事实上，最优网络问题对应于最优区组设计问题（区组大小为二），其中节点代表处理，边代表区组 [5]。该问题还与 Bradley-Terry模型的实验设计密切相关 [54, 55]。

尽管拉普拉斯优化对应于实验设计中的一类重要问题，但它并不完全代表实验设计问题。最值得注意的是，拉普拉斯矩阵的秩至多为 $n - 1$，而实验设计中的最优信息矩阵通常具有满秩（区组设计是例外）。因此，需要采用某种正则化形式（第5节），才能将实验设计中的结果转换到网络设计情境中。此外，实验设计中的信息矩阵维度通常远小于网络设计中所遇到的拉普拉斯矩阵维度。

与网络设计类似，实验设计中最常用的度量（“最优性准则”）是 A-和 D-最优性，而 E-最优性也位列其中。从实验设计的角度来看，条件$d_e \in \{0, 1\}$ 对应于二元（无重复）设计，即每个设计点最多进行一次试验。允许 d_e取值于 $\{0, 1, \ldots, N\}$，则可在每个设计点进行多次试验。已有边 E_0 必须存在于最终网络中的假设，对应于实验设计中的受保护、必需或现有试验。此类情形下的最优试验设计称为最优增补设计（ [51]中的第19节）或含受保护试验批次的最优设计（ [43]中的第11.7节），并且与贝叶斯最优设计密切相关（ [43]中的第11节； [56]）。实验设计中的凸松弛对应于所谓的近似实验设计 [43],，其通过令 $d_e \in [0, 1]$ 和 $\sum_e d_e = 1$ 而非 $d_e \in \{0, 1\}$和 $\sum_e d_e = N$得到。

3 信息函数

我们提出，合理的拉普拉斯度量是信息函数，其定义满足以下条件。设 $\mathcal{L}^n$ 为所有 $n \times n$ 势拉普拉斯矩阵的集合： $\mathcal{L}^n = \{\mathbf{L} \in \mathcal{S}_+^n \,|\mathbf{L}\mathbf{1}_n = \mathbf{0}\}$，它是 $\mathcal{S}_+^n$中的一个凸锥。那么，函数 $\Phi : \mathcal{L}^n \to \mathbb{R}$ 是 $\mathcal{L}^n$ 上的信息函数，当且仅当它不是常数函数，并满足以下性质：

1. 保序性：若对某个$\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2 \in \mathcal{L}^n$有$\mathbf{L}_1 \succeq \mathbf{L}_2$ ，则 $\Phi(\mathbf{L}_1) \geq \Phi(\mathbf{L}_2)$；
2. 正齐次性：对所有$\mathbf{L} \in \mathcal{L}^n$ 和 $\alpha > 0$， $\Phi(\alpha\mathbf{L}) = \alpha\Phi(\mathbf{L})$；
3. 凹性：对所有$\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2 \in \mathcal{L}^n$ 和 $\alpha \in [0, 1]$， $\Phi(\alpha\mathbf{L}_1 + (1 - \alpha)\mathbf{L}_2) \geq \alpha\Phi(\mathbf{L}_1) + (1 - \alpha)\Phi(\mathbf{L}_2)$；
4. 上半连续性：对于所有 $\alpha \in \mathbb{R}$，水平集 $\{\mathbf{L} \in \mathcal{L}^n \mid \Phi(\mathbf{L}) \geq \alpha\}$ 都是闭集。

请注意，信息函数必然非负：对于所有 $\mathbf{L} \in \mathcal{L}^n$， $\Phi(\mathbf{L}) \geq 0$。信息函数 Φ 的保序性直接意味着，当向网络中添加任意数量的边时， Φ不会减小。正齐次性使我们能够通过网络测度值之比，对网络进行有意义的比较。事实上，对于任意两个网络 E_1 和 E_2，以及任意正齐次的 Φ，比值 $\Phi(\mathbf{L}_{E_1})/\Phi(\mathbf{L}_{E_2})$ 在将边权重乘以同一个常数 $\alpha > 0$ 后保持不变（或者当 α 为整数时，将所有边复制 α 次也会如此）。也就是说，正齐次性确保网络之间的比较不受图中的权重是否经过归一化影响。

凹性与正齐次性保证 Φ 具有超可加性： $\Phi(\mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2) \geq \Phi(\mathbf{L}_1) + \Phi(\mathbf{L}_2)$。这体现了网络性能的“协同”特性：两个边集不相交的网络，其并集的质量至少等于各个网络质量之和。上半连续性是一项更具技术性的性质，它与其他性质共同保证，在 $\mathcal{L}^n$的任意紧子集上，都存在一个 Φ-最优拉普拉斯矩阵 $\mathbf{L}^*$。关于信息函数的更详细分析，请参见 [43] 的第5章。

如上所定义的函数 Φ_A、 Φ_E 和 Φ_D都是信息函数。 D-最优性度量通常采用对数形式 $\log(\prod_{i=1}^{n-1} \lambda_i)$定义，但该形式不具备正齐次性，因此不是信息函数。因此，当存在边权重且希望通过度量之比来比较网络时， D-最优性的对数形式并不适用。

本文聚焦于仅取决于$\mathbf{L}$特征值的信息函数 Φ，这显然涵盖了 A、 E和 D最优性。该要求等价于正交不变性，即对于任意$\mathbf{L} \in \mathcal{L}^n$ 以及任意正交$\mathbf{U}$ [57]矩阵， $\Phi(\mathbf{U}\mathbf{L}\mathbf{U}^T) = \Phi(\mathbf{L})$。

针对动力网络提出的“凸系统度量” [4] 与信息函数完全对应（不过采用的是最小化而非最大化设定），但我们的定义还额外要求半连续性和非恒定性。类似地，“正交不变系统性能度量” [18] 与正交不变（基于特征值）的信息函数相对应，但并未要求正齐次性、上半连续性和非恒定性。

4 Kiefer测度

我们定义了一类丰富的正交不变信息函数，涵盖 A、 D和 E最优性：Kiefer的 Φ_p 测度

$$\Phi_p(\mathbf{L}) = \begin{cases} (\prod_{i=1}^{n-1} \lambda_i(\mathbf{L}))^{1/(n-1)}, & p = 0; \\ (\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n-1} \lambda_i^{-p}(\mathbf{L}))^{-1/p}, & p \in (0, \infty); \\ \lambda_{n-1}(\mathbf{L}), & p = \infty \end{cases}$$

对于秩为 $n-1$ 的$\mathbf{L} \in \mathcal{L}^n$。对于秩较低的$\mathbf{L} \in \mathcal{L}^n$，我们定义 $\Phi_p(\mathbf{L}) = 0$。 $p = 1$、 $p = 0$ 和 $p = \infty$ 分别对应 A-、 D-和 E-最优性。类 Φ_p 强调了三种最流行度量之间的联系，因为当 $p \to 0_+$ 和 $p \to \infty$ 分别趋于极限时， $\Phi_p(\mathbf{L})$ 的极限为 $\Phi_0(\mathbf{L})$ 和 $\Phi_\infty(\mathbf{L})$（参见 [43]中的第 6.6 和 6.7 节）。同样，它们也提供了 A-、 D-和 E-最优性之间的“折中”度量。文献 $[4, 18]$, 为动力网络提供了等效度量，但仅适用于 $p \geq 1$。

对于连通网络，将 Kiefer 准则针对 $p \in (0, \infty)$ 等价地表示为下式会比较方便：

$$\Phi_p(\mathbf{L}) = \left(\frac{\mathrm{tr}((\mathbf{L}^+)^p)}{n-1} \right)^{-1/p}.$$

这些判据的另一种改写形式基于恒等式 $\mathbf{L}^+ = (\mathbf{L} + \mathbf{J}_n/n)^{-1} - \mathbf{J}_n/n$，对于连通网络 [1]而言，这种形式对于实际计算尤其有用。于是，矩阵 $\mathbf{N} := \mathbf{L} + \mathbf{J}_n/n$与 $\mathbf{L}$具有相同的正特征值，此外还多出一个等于 1 的特征值。因此，

Φ_p(**L**) 对于秩为 $n-1$ 的 **L**，可以用 **N**表示为:

$$\Phi_p(\mathbf{L}) = \begin{cases} \det(\mathbf{N})^{1/(n-1)}, & p=0; \\ (\frac{1}{n-1}(\mathrm{tr}(\mathbf{N}^{-p})-1))^{-1/p}, & p\in(0,\infty); \\ \lambda_{n-1}(\mathbf{N}-\mathbf{J}_n/n), & p=\infty. \end{cases} \tag{3}$$

注意， λ_{n-1}(**N** − $\mathbf{J}_n/n$)只是**N** 在舍弃一个恰好等于 1 的特征值后所得的最小特征值。

5 正则化重构

拉普拉斯矩阵总是奇异的，这使得对 (1) 的分析变得复杂；因此，我们针对基于特征值的准则提出一种正则化重构。我们发现，对于此类准则的理论分析，尤其是将实验设计结果转换为网络设计结果时，这种重构比使用上述矩阵 **N** 更方便。设**K** $\in \mathbb{R}^{n\times(n-1)}$ 为任意固定矩阵，其列相互正交归一，且均与 $\mathbf{1}_n$正交。那么，不必优化**L**的特征值，也可以等价地优化 $\widetilde{\mathbf{L}}:=\mathbf{K}^T\mathbf{L}\mathbf{K}$的特征值；对于连通网络，该矩阵等于 $(\mathbf{K}^T\mathbf{L}^+\mathbf{K})^{-1}$，如下述定理所述。

定理1. 设 **L** 为秩为 $n-1$ 的拉普拉斯矩阵，**K** $\in \mathbb{R}^{n\times(n-1)}$ 为一个矩阵，其列相互正交归一且均与 $\mathbf{1}_n$正交，并且 $\widetilde{\mathbf{L}}=\mathbf{K}^T\mathbf{L}\mathbf{K}$。那么，(a) $\widetilde{\mathbf{L}}$是正定矩阵；(b) $\mathbf{K}^T\mathbf{L}^+\mathbf{K}$是正定矩阵，且 $\widetilde{\mathbf{L}}=(\mathbf{K}^T\mathbf{L}^+\mathbf{K})^{-1}$；(c) **L**与 $\widetilde{\mathbf{L}}$的正特征值相同，包括重数。

定理1的证明及所有其他证明均推迟至附录9。从统计学角度来看，矩阵 $\mathbf{K}^T\mathbf{L}\mathbf{K}$ 对应于一个带有 $\widetilde{\mathbf{x}}_e=\mathbf{K}^T\mathbf{x}_e$的重新参数化模型的信息矩阵，而 $(\mathbf{K}^T\mathbf{L}^+\mathbf{K})^{-1}$ 是原始模型中针对感兴趣参数 $\mathbf{K}^T\boldsymbol{\beta}$的信息矩阵（参见 [43], 第3节）。根据定理1，对于任意秩为$n-1$的$\mathbf{L}\in\mathcal{L}^n$，有 $\Phi_p(\mathbf{L})=\widetilde{\Phi}_p(\widetilde{\mathbf{L}})$，其中 Φ_p 是 Φ_p-准则的满秩版本:

$$\widetilde{\Phi}_p(\widetilde{\mathbf{L}}) = \begin{cases} (\det(\widetilde{\mathbf{L}}))^{1/(n-1)}, & p=0; \\ (\frac{1}{n-1}\mathrm{tr}(\widetilde{\mathbf{L}}^{-p}))^{-1/p}, & p\in(0,\infty); \\ \widetilde{\lambda}_{n-1}(\widetilde{\mathbf{L}}), & p=\infty, \end{cases}$$

其中 $\widetilde{\lambda}_{n-1}(\widetilde{\mathbf{L}})$是非奇异 $\widetilde{\mathbf{L}}\in\mathbb{R}^{(n-1)\times(n-1)}$的最小特征值。因此，当且仅当 E 在正则化问题中达到最优时，它才是Φ_p-最优的。

$$\begin{aligned} \max_{E} \quad & \widetilde{\Phi}_p(\widetilde{\mathbf{L}}_E) \\ s.t. \quad & \widetilde{\mathbf{L}}_E = \mathbf{K}^T\mathbf{L}_0\mathbf{K} + \sum_{e\in E}\widetilde{\mathbf{x}}_e\widetilde{\mathbf{x}}_e^T, \\ & E\subseteq\binom{V}{2}\setminus E_0; \quad |E|=N. \end{aligned} \tag{4}$$

6 方向导数

第5节中的重新参数化方法使我们能够计算任意谱测度 Φ 在$\mathbf{L}_1$ 沿$\mathbf{L}_2$ 方向的方向导数（更准确地说，是沿 $\mathbf{L}_2$ –$\mathbf{L}_1$方向的方向导数）:

$$\partial\Phi(\mathbf{L}_1,\mathbf{L}_2) = \lim_{\alpha\to 0_+}\frac{\Phi(\mathbf{L}_1+\alpha(\mathbf{L}_2-\mathbf{L}_1))-\Phi(\mathbf{L}_1)}{\alpha},$$

其中 $\mathbf{L}_1$ 和 $\mathbf{L}_2$ 是拉普拉斯矩阵。方向导数使得我们能够轻松地将微分学工具应用于谱指标，尽管它们的定义域仅限于锥 $\mathcal{L}^n$。下述定理给出了 $\Phi_p, p\neq\infty$ 的显式表达式，而关于 $p=\infty$ 的结果将在后文介绍。

定理 2. 设 $p \in [0, \infty)$，设 $\mathbf{L}_1$ 是连通图的拉普拉斯矩阵，且 $\mathbf{L}_2$ 是一个拉普拉斯矩阵。那么，

$$\partial \Phi_p(\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2) = \Phi_p(\mathbf{L}_1) \left(\frac{\operatorname{tr}((\mathbf{L}_1^+)^{1+p} \mathbf{L}_2)}{\operatorname{tr}((\mathbf{L}_1^+)^p)} - 1 \right). \tag{5}$$

注意，对于 $p = 0$，我们有 $\operatorname{tr}((\mathbf{L}_1^+)^p) = n - 1$，因为 $(\mathbf{L}_1^+)^0$ 是到 $\mathbf{1}_n^\perp$ 的投影矩阵。尤其重要的是沿 $\mathbf{L}_2 = \mathbf{L}_1 + \mathbf{x}_e \mathbf{x}_e^T$ 方向的方向导数。直观地说，当向网络中添加一条“无穷小”的边 e 时，该方向导数表示函数 Φ_p 的变化率；这相当于在较小的 $\delta > 0$ 下，将 $\mathbf{L}_1$ 更新为 $\mathbf{L}_1 + \delta \mathbf{x}_e \mathbf{x}_e^T$。

推论 1。 设 $p \in [0, \infty)$，令 $\mathbf{L}_1$ 为一个连通图的拉普拉斯矩阵，并令 $e \in \binom{V}{2} \setminus E_0$。则

$$\partial \Phi_p(\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_1 + \mathbf{x}_e \mathbf{x}_e^T) = \frac{(\Phi_p(\mathbf{L}_1))^{1+p}}{n-1} \mathbf{x}_e^T (\mathbf{L}_1^+)^{1+p} \mathbf{x}_e. \tag{6}$$

量 $\mathbf{x}_e^T (\mathbf{L}^+)^{1+p} \mathbf{x}_e$ 在方向导数中以及下面的多个结果中发挥着重要作用；我们将其记为

$$v_{\mathbf{L},p}(e) := \mathbf{x}_e^T (\mathbf{L}^+)^{1+p} \mathbf{x}_e = w_{(i,j)} (b_{ii} + b_{jj} - 2b_{ij}), \tag{7}$$

其中，$e = (i, j)$、b_{ij} 是 $(\mathrm{L}^+)^{1+p}$ 的各项元素，第二个等式成立是因为 $\mathbf{x}^e = \sqrt{w_{(i,j)}} (\mathbf{e}_i - \mathbf{e}_j)$。值 $v_{\mathbf{L},p}(e)$ 度量了节点 i 和 j 之间基于拉普拉斯矩阵的距离，因此我们称其为节点差异度。特别地，对于 D-最优性，$v_{\mathbf{L},0}(e) = \mathbf{x}_e^T \mathrm{L}^+ \mathbf{x}_e$ 是节点 i 和 j 之间的有效电阻（也称为电阻距离 [58]）；而对于 A-最优性，$v_{\mathbf{L},1}(e) = \mathbf{x}_e^T (\mathrm{L}^+)^2 \mathbf{x}_e$ 是节点 i和 j 之间的双调和距离平方（参见 [59]）。在实验设计中，$v_{\mathbf{L},0}(e)$ 称为方差（或敏感度）函数，因为它与预测响应的方差有关。为简洁起见，我们也用$v_{E,p}$ 表示 $v_{\mathbf{L}_E,p}$。

由于 E-最优性通常不可微（如果 $\mathbf{L}$ 的特征值 λ_{n-1}（$\mathbf{L}$）的重数大于一，则Φ_∞ 不可微），因此需要单独分析。

定理 3。 设$\mathbf{L}_1$ 为连通图的拉普拉斯矩阵，且$\mathbf{L}_2$ 为一个拉普拉斯矩阵。设 s为 $\lambda_{n-1}(\mathbf{L}_1)$的重数，设 $\mathbf{u}_1, \ldots, \mathbf{u}_s$ 为$\mathbf{L}_1$ 中对应于$\lambda_{n-1}(\mathbf{L}_1)$的一组标准正交特征向量，并设$\mathbf{U} = [\mathbf{u}_1, \ldots, \mathbf{u}_s] \in \mathbb{R}^{n \times s}$。那么，

$$\partial \Phi_\infty(\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2) = \lambda_s(\mathbf{U}^T \mathbf{L}_2 \mathbf{U}) - \lambda_{n-1}(\mathbf{L}_1). \tag{8}$$

特别地，若 $\lambda_{n-1}(\mathbf{L}_1)$为单重，且$\mathbf{u} = (u_1, \ldots, u_n)^T$为对应的归一化特征向量，则

$$\partial \Phi_\infty(\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2) = \mathbf{u}^T \mathbf{L}_2 \mathbf{u} - \lambda_{n-1}(\mathbf{L}_1). \tag{9}$$

此外，

$$\partial \Phi_\infty(\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_1 + \mathbf{x}_e \mathbf{x}_e^T) = \begin{cases} (\mathbf{x}_e^T \mathbf{u})^2, & \text{if } \lambda_{n-1}(\mathbf{L}_1) \text{ is simple;} \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \tag{10}$$

对于任意边 $e \in \binom{V}{2} \setminus E_0$。

如定理 3 所示，E-最优性在 L_1 处的表现会随 $\lambda_{n-1}(\mathrm{L}_1)$ 的重数而变化。设 $\mathbf{u}$ 是 L_1 的一个菲德勒向量（即对应于 $\lambda_{n-1}(\mathrm{L}_1)$ 的归一化特征向量之一）。那么，无论 $\lambda_{n-1}(\mathrm{L}_1)$ 是否为单重，$n^{-1}\mathrm{J}_n + \mathbf{u}\mathbf{u}^T$ 都是用于构造 $\partial \Phi_\infty(\mathrm{L}_1, \mathrm{L}_2)$ 的超梯度之一（见定理 3 的证明）。因此，在 ND 算法 [25], [27] 中有时会将这个超梯度用作“代表性”超梯度。相应的值 $b := \mathbf{u}^T \mathrm{L}_2 \mathbf{u} - \lambda_{n-1}(\mathrm{L}_1)$ 在 $\lambda_{n-1}(\mathrm{L}_1)$ 为单重时等于 $\partial \Phi_\infty(\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2)$；而当 $\lambda_{n-1}(\mathrm{L}_1)$ 的重数更大时，b 是该方向导数的上界。对于 $\mathrm{L}_2 = \mathrm{L}_1 + \mathbf{x}_e \mathbf{x}_e^T$，$b$ 变为 $(\mathbf{x}_e^T \mathbf{u})^2$。因此，我们使用这个代表性方向导数值来定义节点差异度：

$$v_{\mathbf{L},\infty}(e) = (\mathbf{x}_e^T \mathbf{u})^2 = w_{(i,j)} (u_i - u_j)^2, \tag{11}$$

其中 $\mathbf{u}$ 是对应于 $\lambda_{n-1}(\mathbf{L})$ 的一个固定归一化特征向量，且 $e=(i,\ j)$。与 D-最优性和 A-最优性一样，$v_{\mathbf{L},\ \infty}(e)$ 具有简洁的图解释：它是节点 i 和 j [60] 的菲德勒距离的平方。

如式（10）所示，当 $\lambda_{n-1}(\mathbf{L}_1)$ 不是单重时，$\partial\Phi_\infty(\mathbf{L}_1,\mathbf{L}_1+\mathbf{x}_e\mathbf{x}_e^T)=0$，这并没有特别大的用处（直观而言，秩一更新不足以增大多个相等的特征值），而且$v_{\mathbf{L},\infty}(e)$通常不等于这个方向导数。这表明，对于那些在算法运行过程中预计 $\lambda_{n-1}(\mathbf{L})$ 会出现更高重数的问题，使用$v_{\mathbf{L},\infty}(e)$（或像 [28], [25], [27]中那样使用相应的超梯度）来构造E-最优网络算法，可能并不理想。尽管如此，我们仍在第7.3节的 E-最优算法中采用了这种方法，其他方法则留待未来研究。

7 算法

假设网络 E 是连通的。如第4节所述，$\mathbf{L}_E^+=(\mathbf{L}_E+\mathbf{J}_n/n)^{-1}-\mathbf{J}_n/n$，我们的所有计算均基于$\mathbf{N}_E:=\mathbf{L}_E+\mathbf{J}_n/n$。$\Phi_p(\mathbf{L}_E)$的表达式见式（3）；$v_{E,\ p}(e)=\mathbf{x}_e^T\mathbf{N}_E^{-1-p}\mathbf{x}_e$，且$v_{E,\ \infty}(e)=(\mathbf{x}_e^T\mathbf{u})^2$,，其中$\mathbf{u}$是对应于$\lambda_{n-1}(\mathbf{N}_E-\mathbf{J}_n/n)$的归一化特征向量（这是舍弃一个恰好等于1的特征值后$\mathbf{N}_E$的最小特征值）。

7.1 Φp 的秩一更新

网络优化方法通常通过添加或删除边，或交换一对边 [19,39,52]来修改网络。这些变化会导致拉普拉斯矩阵发生秩一更新，或发生一对秩一更新。我们将说明，对于 p取整数值的 Kiefer 测度，所有相关量也都可以高效更新，从而显著缩短计算时间。

添加或删除一条边 e 会导致将$\mathbf{N}_E$更新为$\mathbf{N}_E\pm\mathbf{x}_e\mathbf{x}_e^T$。可以使用 Sherman-Morrison公式更新 $\mathbf{N}_E^{-1}$：

$$(\mathbf{N}_E\pm\mathbf{x}_e\mathbf{x}_e^T)^{-1}=\mathbf{N}_E^{-1}\mp\frac{\mathbf{N}_E^{-1}\mathbf{x}_e\mathbf{x}_e^T\mathbf{N}_E^{-1}}{1\pm v_{E,0}(e)}. \tag{12}$$

当$\mathbf{N}_E-\mathbf{x}_e\mathbf{x}_e^T$时，只有在$\mathbf{N}_E-\mathbf{x}_e\mathbf{x}_e^T$非奇异时，才能使用 (12)，即当$v_{E,0}(e)\neq 1$时（下文的 (13) 同理）。分别使用 (12) 和矩阵行列式引理，也可以轻松更新 A-最优性和 D-最优性的度量（见 [61], 15.10(d)）：

$$\operatorname{tr}((\mathbf{N}_E\pm\mathbf{x}_e\mathbf{x}_e^T)^{-1})=\operatorname{tr}(\mathbf{N}_E^{-1})\mp\frac{v_{E,1}(e)}{1\pm v_{E,0}(e)}, \tag{13}$$

$$\det(\mathbf{N}_E\pm\mathbf{x}_e\mathbf{x}_e^T)=(1\pm v_{E,0}(e))\det(\mathbf{N}_E). \tag{14}$$

也就是说，对$\mathbf{N}_E^{-1}$ 的秩一更新可以很容易地在 $O(n^2)$而非朴素实现所需的 $O(n^3)$次运算内完成计算。对 $\Phi_0(\mathbf{L}_E)$和 $\Phi_1(\mathbf{L}_E)$的更新只需 $O(1)$次运算即可完成，因为每个节点差异度$v_{E,j}(e)$的计算仅需 $O(1)$次运算（见(7)），前提是$\mathbf{N}_E^{-j}$ 已经计算完毕。

对于一般的 Φ_p 度量（$p\in(0,\infty)$），$\Phi_p(\mathbf{L}_E)$的公式涉及$\mathbf{N}_E^{-p}$，这需要 $O(n^3)$次运算。然而，对于整数 p，对 Φ_p 的秩一更新可以使用以下定理来完成。

定理 4. 设 E 为一个连通网络，并设 e 为一条边。则，

$$\operatorname{tr}((\mathbf{N}_E\pm\mathbf{x}_e\mathbf{x}_e^T)^{-p})=\operatorname{tr}(\mathbf{N}_E^{-p})+\sum_{k=1}^{p}\frac{(\mp1)^k}{(1\pm v_{E,0}(e))^k}\sum_{\substack{i_0,\ldots,i_k\geq 0\\ i_0+\ldots+i_k=p-k}}v_{E,i_0+i_k+1}(e)\left(\prod_{j=1}^{k-1}v_{E,i_j+1}(e)\right) \tag{15}$$

对于任意正整数 p。(15) 中的最后一个乘积在 $k=1$ 时视为 1；而对于 $\operatorname{tr}((\mathbf{N}_E-\mathbf{x}_e\mathbf{x}_e^T)^{-p})$，该公式仅在 $v_{E,0}(e)\neq 1$（即 $E\setminus\{e\}$ 仍然连通）时有效。

当 $\mathbf{N}_E^{-1},\ldots,\mathbf{N}_E^{-p-1}$ 已经计算完成后，使用定理 4 更新 $\Phi_p(\mathbf{L}_E)$ 只需 $O(1)$ 次运算，与 D 最优性和 A 最优性的情况相同。可以通过以下定理高效地更新 $\mathbf{N}_E^{-p}$。为简洁起见，本节将任意 $\mathbf{A}\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 的零次幂理解为 $\mathbf{A}^0=\mathbf{I}$，这与本文其他部分的约定不同。

定理 5. Let E 是一个连通网络，令 e 为一条边，并令 p为一个正整数。

$$(\mathbf{N}_E \pm \mathbf{x}_e\mathbf{x}_e^T)^{-p} = \mathbf{N}_E^{-p} \mp \sum_{j=0}^{p-1}\left(\mathbf{N}_E^{-1} \mp \frac{\mathbf{N}_E^{-1}\mathbf{x}_e\mathbf{x}_e^T\mathbf{N}_E^{-1}}{1\pm v_{E,0}(e)}\right)^j \frac{\mathbf{N}_E^{-1}\mathbf{x}_e\mathbf{x}_e^T\mathbf{N}_E^{-(p-j)}}{1\pm v_{E,0}(e)}. \tag{16}$$

对于 $(\mathbf{N}_E-\mathbf{x}_e\mathbf{x}_e^T)^{-p}$，只有当 $v_{E,0}(e)\neq 1$（即 $E\setminus\{e\}$ 仍然连通）时，(16) 才有效。

应用定理 5 需要维护矩阵幂列表 $\mathbf{N}_E^{-1},\mathbf{N}_E^{-2},\ldots,\mathbf{N}_E^{-p}$。随后，可以通过 (16) 使用上一轮迭代的矩阵幂以及已计算出的更新后矩阵幂，以 $O(n^2)$次运算对这些矩阵幂逐一进行秩一更新；参见算法1 中的函数 EffUpd。为了同时使用定理 4 和定理 5，可以使用 EffUpd维护 $\mathbf{N}_E^{-1},\mathbf{N}_E^{-2},\ldots,\mathbf{N}_E^{-p-1}$。我们注意到，更新公式足够简单，因此可以采用向量化实现（即使用矩阵和向量运算而非循环），从而进一步加快计算。

算法1 整数次幂的高效更新 $\mathbf{N}_E^{-1}$

Input: p, $\mathbf{N}_E^{-1},\ldots,\mathbf{N}_E^{-p}$, e, $c\in\{-1,+1\}$
Output: $(\mathbf{N}_E+c\,\mathbf{x}_e\mathbf{x}_e^T)^{-1},\ldots,(\mathbf{N}_E+c\,\mathbf{x}_e\mathbf{x}_e^T)^{-p}$
function EffUpd(p, $\mathbf{N}_E^{-1},\ldots,\mathbf{N}_E^{-p}$, e, c)
  $\mathbf{u}\leftarrow\mathbf{N}_E^{-1}\mathbf{x}_e$
  $\mathbf{v}\leftarrow\mathbf{u}/(1+c\,v_{E,0}(e))$
  $\mathbf{y}_i\leftarrow\mathbf{N}_E^{-1}\mathbf{v}\quad(i=1,\ldots,p-1)$
  $\mathbf{B}_1\leftarrow\mathbf{N}_E^{-1}-c\,\mathbf{u}\mathbf{v}^T$
  $\mathbf{z}_1\leftarrow\mathbf{B}_1\mathbf{u}$
  $\mathbf{B}_2\leftarrow\mathbf{N}_E^{-2}-c\,\mathbf{u}\mathbf{y}_1^T-c\,\mathbf{z}_1\mathbf{v}^T$
  for $r=3$ to p **do**
    $\mathbf{z}_{r-1}\leftarrow\mathbf{B}_{r-1}\,\mathbf{u}$
    $\mathbf{B}_r\leftarrow\mathbf{N}_E^{-r}-c\,\mathbf{u}\mathbf{y}_{r-1}^T-c\,\mathbf{z}_{r-1}\mathbf{v}^T-c\sum_{j=1}^{r-2}\mathbf{z}_j\,\mathbf{y}_{r-j-1}^T$
  end for
  return $(\mathbf{B}_1,\ldots,\mathbf{B}_p)$
end function

上述公式表明，与添加或移除边 e 相对应的秩一更新与整数 p时的节点差异度 $v_{E,p}(e)$ 密切相关。对于 E-最优性，没有显式的更新公式，但如果 $(\mathbf{L}_E)$ 是单重的，$v_{E,\infty}$ 可以近似表示 Φ_∞ 的变化：$\lambda_{n-1}(\mathbf{L}_E)=\lambda_{n-1}(\mathbf{L}_E)=\mathbf{u}^T\mathbf{L}_E\mathbf{u}$ 且

$$\Phi_\infty(\mathbf{L}_E\pm\mathbf{x}_e\mathbf{x}_e^T)\approx\mathbf{u}^T(\mathbf{L}_E\pm\mathbf{x}_e\mathbf{x}_e^T)\mathbf{u}=\lambda_{n-1}(\mathbf{L}_E)\pm(\mathbf{x}_e^T\mathbf{u})^2=\Phi_\infty(\mathbf{L}_E)\pm v_{E,\infty}(e),$$

其中 $\mathbf{u}$ 是 Fiedler 向量。对于其他 Φ_p准则，也有类似的近似关系，例如 $\Phi_p(\mathbf{L}_E\pm\mathbf{x}_e\mathbf{x}_e^T)-\Phi_p(\mathbf{L}_E)\approx\pm\partial\Phi_p(\mathbf{L}_E,\mathbf{L}_E\pm\mathbf{x}_e\mathbf{x}_e^T)$。由于 $\partial\Phi_p(\mathbf{L}_E,\mathbf{L}_E\pm\mathbf{x}_e\mathbf{x}_e^T)$ 与$v_{E,p}(e)$ 成正比，因此，$v_{\mathbf{L},p}(e)$ 值较大（或较小）的边，在添加（或移除）时可能会使目标函数大幅增加（或小幅下降）。我们提出的边交换算法利用了这一观察结果。

7.2 高效贪心算法

贪心算法通过依次添加能够最大幅度提升 Φ 值的边来构建网络。也就是说，从一个连通图 $G=(V,E\cup E_0,\mathbf{w})$ 开始，其中有 $E=\emptyset$，在所有 $(E\cup E_0)$ 中，能够

使 $\Phi(\mathbf{L}^{E\cup\{e\}})$ 最大化的边会在每次迭代中被添加到 E，直至 $|E| = N$。因此，在本节中，我们假设 E_0 是连通的。

采用朴素实现的贪心方法进行Φ_p-最优性优化时，单次迭代的时间复杂度涉及对每条 k 候选边计算 $\Phi(\mathbf{L}_E + \mathbf{x}_e\mathbf{x}_e^T)$。由于直接计算 $\Phi(\mathbf{L}_E + \mathbf{x}_e\mathbf{x}_e^T)$ 需要 $O(n^3)$ 次运算，每次迭代的时间复杂度为 $O(kn^3)$，因此该方法的总体时间复杂度为 $O(Nkn^3) = O(Nn^5)$，因为k 至多为 $O(n^2)$。

我们针对整数 p的 Kiefer测度提出了贪心算法的快速版本，见算法 2。对于 A-最优性，$\Phi_p(\mathbf{L}_E + \mathbf{x}_e\mathbf{x}_e^T)$ 的计算通过式 (13) 完成；对于 D-最优性，通过式 (14) 完成；对于其他整数 p，则通过式 (15) 完成，这需要计算 $v_{E,0}(e) \ldots, v_{E,p}(e)$。由于节点差异度 $v_{E,j}(e)$ 需要 $\mathbf{N}_E^{-j}$，矩阵 $\mathbf{N}_E^{-1}, \ldots, \mathbf{N}_E^{-p-1}$ 会在每次迭代结束时更新；对于 D- 最优性，更新通过式 (12) 完成；对于其他整数值 p，则通过 EffUpd 完成，需要$O(n^2)$次运算。此时，计算一个节点差异度 $v_{E,j}(e)$ 的复杂度为 $O(1)$，所有候选边 e 对应的此类值可通过 $O(k)$ 次运算计算得出。随后，Φ_p 的更新也可通过 $O(k)$ 次运算完成。因此，每次迭代的时间复杂度从朴素方法的 $O(kn^3)$ 降低至 $O(k + n^2)$。初始计算 $\mathbf{N}_E, \mathbf{N}_E^{-1}, \ldots, \mathbf{N}_E^{-p-1}$ 需要 $O(n^3)$ 次运算，因此高效贪心方法的总时间复杂度为 $O(n^3 + Nk + Nn^2)$；由于 k至多为 $O(n^2)$，该复杂度可简化为 $O(n^3 + Nn^2)$；相比之下，朴素版本需要 $O(Nkn^3) = O(Nn^5)$ 次运算。

算法 2 高效贪心算法

输入： 连通 $(V, E_0, \mathbf{w})$；整数 p
输出： 关于 (1) 的近似解 E，以及 $\Phi = \Phi_p$
$E \leftarrow \emptyset$
计算 $\mathbf{N}_E$、$\mathbf{N}_E^{-1}$、.....、$\mathbf{N}_E^{-p-1}$
对于 $i = 1$ 至 N，**执行**
  为所有 $e \notin (E \cup E_0)$ 和 $j = 0$、.....、p计算 $v_{E,j}(e)$
  使用公式 (13)、(14) 或 (15) 为所有 $e \notin (E \cup E_0)$ 计算 $\Phi_p(\mathbf{N}_E + \mathbf{x}_e\mathbf{x}_e^T)$
  $e^* \leftarrow$参数 $\max_{e\notin(E\cup E_0)} \Phi_p(\mathbf{N}_E + \mathbf{x}_e\mathbf{x}_e^T)$
  $E \leftarrow E \cup \{e^*\}$
  $\mathbf{N}_E \leftarrow \mathbf{N}_E + \mathbf{x}_{e^*}\mathbf{x}_{e^*}^T$；计算 $\Phi_p(\mathbf{N}_E)$
  $(\mathbf{N}_E^{-1}, \ldots, \mathbf{N}_E^{-p-1}) \leftarrow \text{EffUpd}(p+1, \mathbf{N}_E^{-1}, \ldots, \mathbf{N}_E^{-p-1}, e^*, +1)$
结束循环

7.3 KL交换算法

为了改进已经具有所需边数的网络（例如通过贪心算法得到的网络），我们提出一种称为 KL交换算法的边交换启发式算法。我们针对 Φ_p 度量（$p \in [0, \infty]$）来表述该方法，但只要已知相应的方向导数，也可以将其扩展到其他函数。在每次迭代中，该算法都会用一条当前网络中不存在的边替换一条已有边。为避免考察所有$O(n^2)$对边，算法首先从 E中找出 K 条边，移除这些边预计只会使 Φ略有下降；然后从 $(E \cup E_0)^c$中找出 L 条边，加入这些边预计会使 Φ大幅上升。由于 $\Phi_p(\mathbf{L}_E \pm \mathbf{x}_e\mathbf{x}_e^T)$ 与节点差异度v_E大致成正比，$_p(e)$（见第7.1节），因此我们考虑移除v_E、$_p(e)$取值最小的 K 条边，并将取值最大的边加入网络。在 KL 个候选边对中，选择使 $\Phi_p(\mathbf{L}_E)$ 增幅最大的边对；见算法 3。重复这一过程，直到 Φ_p 无法再提高。与贪心方法不同，即使 $(V, E_0, \mathbf{w})$ 不连通，也可以使用KL交换算法，不过，算法的输入网络 $(V, E_0 \cup E_1, \mathbf{w})$，即算法的初始可行解，必须是连通的。如果 $(V, E_0, \mathbf{w})$ 尚未连通，可以在构造初始E_1时，例如利用生成树算法使其连通。

算法3 KL交换算法

输入： 初始 E_1：$(V,\ E_0 \cup E_1,\ \mathbf{w})$ 连通；$\delta > 0$；K, L, p

输出： E 的近似解，用于(1)，其中 $\Phi = \Phi_p$

$E \leftarrow E_1$；$\mathbf{L} \leftarrow \mathbf{L}_E$

cont $\leftarrow$真

当$cont$ **时执行**

计算$v_{E,\ p}(e)$的所有边 e

$I_K \leftarrow$ E 中 K 最小的边$v_{E,\ p}(e)$

$I_L \leftarrow$ 不在（$E \cup E_0$）中的 L 最大的边 $v_{E,\ p}(e)$

$(e^*, f^*) \leftarrow \arg \max_{e \in I_K,\ f \in I_L} \Phi_p\left(\mathbf{L} - \mathbf{x}_e\mathbf{x}_e^T + \mathbf{x}_f\mathbf{x}_f^T\right)$

$\mathbf{L}_{\text{temp}} \leftarrow \mathbf{L} - \mathbf{x}_{e^*}\mathbf{x}_{e^*}^T + \mathbf{x}_{f^*}\mathbf{x}_{f^*}^T$

如果 $\Phi_p(\mathbf{L}^{\text{temp}}) > (1+\delta)\Phi_p(\mathbf{L})$ **则**

$E \leftarrow (E \cup \{f^*\}) \setminus \{e^*\}$

$\mathbf{L} \leftarrow \mathbf{L}^{\text{temp}}$

else

继续 $\leftarrow$ 假

结束如果

结束循环

[52] 中的交换算法与KL交换算法类似，只是 $K = 1$（即每次迭代中，仅考虑删除使 Φ 下降最少的那一条边）。相反，若要在每次迭代中考虑所有可行的边对，只需设置 $K = N$ 和$L = k - N$；由此得到的方法称为实验设计（ED）中的费多罗夫交换算法 [46]。实验设计（ED）中还有许多KL交换算法的变体（例如 [51], 第12节）。

7.4 高效 KL 交换算法

为加快 KL 交换算法的速度，我们会提前终止对 $\Phi_p(\mathbf{L}_E - \mathbf{x}_e\mathbf{x}_e^T + \mathbf{x}_f\mathbf{x}_f^T)$ 的最大化：一旦找到任何一对 $e \in I_K, f \in I_L$，使其能令 Φ_p 显著增加，就执行交换。我们还注意到，由于 KL 交换方法是一种启发式方法，可以采用多起点方法（即从不同的随机生成的 E_1 出发，反复运行该方法），以获得更优的网络。对于 p 的整数值，我们提供了 KL 交换方法的高效版本（见算法 4），该版本使用了第 7.1 节中详述的更新公式。为简洁起见，在这些算法中，$\Phi_p(\mathbf{N})$ 表示根据式 (3) 计算的 $\Phi_p(\mathbf{L})$。

在 KL 算法中，首先使用 $O(n^3)$ 次运算计算 $\mathbf{N}_E^{-1}, \ldots, \mathbf{N}_E^{-p-1}$。每次迭代中，$v_{E,j}(e)$ $(j = 0, \ldots, p)$ 的值在 $O(N + k)$ 内计算得出。对于每个潜在添加的边 $f \in I_L$，利用式 (12) 或式 (16)，在 $O(n^2)$ 内更新 $\mathbf{N}_E^{-1}, \ldots, \mathbf{N}_E^{-p-1}$，需要进行 $O(Ln^2)$ 次运算，从而可以在随后移除边 $e \in I_K$ 后更新 Φ_p 度量。对于每个$f \in I_L$，随后通过式 (13)、(14) 或 (15) 计算每个 $e \in I_K$ 对应的 $\Phi_p(\mathbf{L} - \mathbf{x}_e\mathbf{x}_e^T + \mathbf{x}_f\mathbf{x}_f^T)$，总共需要 $O(KL)$ 次运算。选出最佳交换后，在 $O(n^2)$ 内更新 $\mathbf{N}_E^{-1}, \ldots, \mathbf{N}_E^{-p-1}$。因此，每次迭代的总体复杂度从 $O(KLn^3)$ 降至 $O(N + k + Ln^2 + KL + n^2)$，可简化为 $O(Ln^2)$，因为 k, N 和 K 至多为 $O(n^2)$。

8 示例

本节中的所有计算均在配备英特尔酷睿 i5-13400F 处理器的 64 位 Windows 11 系统上，使用统计软件 R 完成。

8.1 小型网络

我们首先通过一个小型示例展示我们的结果。我们选取了 $n = 10$ 个节点，并从 (0，1) 上的均匀分布中独立生成边权重$\mathbf{w}$。初始网络（$V,\ E_0,\ \mathbf{w}$）是一棵随机树，所考虑的目标是向该网络添加 $N = 5$ 条边。我们应用了

算法 4 高效 KL 交换算法

输入： 初始 E_1: $(V,\ E_0 \cup E_1,\ \mathbf{w})$ 是连通的； $\delta > 0$； K、 L; 整数 p

输出： 近似解 E ，满足(1)，其中 $\Phi = \Phi_p(\mathbf{N})$

$E \leftarrow E_1$; $\mathbf{N} \leftarrow \mathbf{N}_E$; $\Phi^* \leftarrow \Phi_p(\mathbf{N})$

cont $\leftarrow$真

$\mathbf{M}_j \leftarrow \mathbf{N}^{-j}$对于 $j = 1,\ ...,\ p+1$

当继续**执行时**

继续 $\leftarrow$假

计算 $v_{E,j}(e)$，针对所有边 e 以及 $j = 0, .., p$

$I_K \leftarrow$ 在 E 中具有最小$v_{E,p}(e)$ 的 K 条边

$I_L \leftarrow$ 不在 $(E \cup E_0)$ 中且具有最大 $v_{E,p}(e)$ 的 L 条边

对所有 $f \in I_L$ **执行**

$\mathbf{N}^{(f)} \leftarrow \mathbf{N} + \mathbf{x}_f \mathbf{x}_f^T$

$(\mathbf{M}_1^{(f)}, \ldots, \mathbf{M}_{p+1}^{(f)}) \leftarrow \textsc{EffUpd}(p+1, \mathbf{M}_1, \ldots, \mathbf{M}_{p+1}, f, +1)$

对所有 $e \in I_K$ **执行**

使用 $\mathbf{N}^{(f)}$、$\mathbf{M}_j^{(f)}$ 和 (13)、(14) 或 (15) 计算 $\Phi^{(e,f)} = \Phi_p(\mathbf{N}^{(f)} - \mathbf{x}_e \mathbf{x}_e^T)$

如果 $\Phi^{(e,f)} > (1+\delta)\Phi^*$ **，则**

$E \leftarrow (E \cup \{f\}) \setminus \{e\}$

$\mathbf{N} \leftarrow \mathbf{N}^{(f)} - \mathbf{x}_e \mathbf{x}_e^T$

$\Phi^* \leftarrow \Phi^{(e,f)}$

$(\mathbf{M}_1, \ldots, \mathbf{M}_{p+1}) \leftarrow \textsc{EffUpd}(p+1, \mathbf{M}_1^{(f)}, \ldots, \mathbf{M}_{p+1}^{(f)}, e, -1)$

cont $\leftarrow$真

中断

结束条件判断

结束循环

如果继续**则跳出如果语句**

结束循环

结束 while 循环

表 1：第 8 节网络的贪心（g）和 KL（KL）算法结果 .1.

p	0 (D)	1 (A)	3	∞ (E)
$\Phi_p(E_{KL})/\Phi_p(E_g)$	1.000	1.062	1.068	1.274
$\Phi_p(E_{KL})/\Phi_p(E^*)$	1.000	0.9995	–	–
$\Phi_p(E_g)/\Phi_p(E^*)$	1.000	0.941	–	–

贪心算法来构造关于 D-、 A-、 Φ_3-和 E-最优性的高效网络，然后使用KL交换算法（算法 4）以及 $K = N$、 $L = 36 - N$ （即实际上是费多罗夫交换算法）来尝试改进贪心解。也就是说，贪心算法的输出被用作算法 4 的初始解。通过交换法获得的网络如图 1 所示。由于 Φ_p 准则是信息函数，因此可以通过 Φ_p-值之比有意义地衡量网络的相对质量，这些值显示在表 1 中。尽管问题十分简单，KL 交换算法通常能够改进贪心解，最高提升达 27%。

表 1 还展示了对于 D-和 A-最优性，网络相对于实际最优网络的质量（在实验设计语境中，这种相对于全局最优解的质量称为效率）。最优网络是通过对正则化ED模型应用混合整数二阶锥规划公式 [49] ，在 $\tilde{\mathbf{x}}_e = \mathbf{K}^T \mathbf{x}_e$条件下构造的，所用软件为 R软件中的 OptimalDesign软件包 [62]。针对 D-最优性的贪心方法所生成的网络实际上是 D-最优的，而 KL 算法也自然找到了相同的网络。对于 A-最优性方法，所得网络并非 A-最优，但 KL 交换方法得到的网络几乎是最优的，质量为 99.95%。

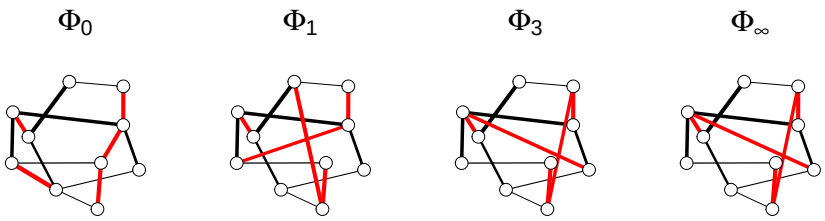

图1：通过 KL交换算法得到的 D-、 A-、 Φ_3-和 E-最优网络。黑色边表示原始网络 E_0 ，红色边表示新增的 E。边的宽度与权重w成正比。

表2：第8.2节中网络的特征。

网络	n	N_0	N	k
1	500	995	500	123,755
2	1,000	1,998	500	497,502
3	1,500	2,995	500	1,121,255

8.2 更大的网络

对于每个 $n = 500$，1000、1500，我们从 (0，1) 上的均匀分布中生成边权重 w，并将同一组 n 个节点上的一棵随机树与一张 Erd˝os-R´enyi 图的并集构造为初始网络 E_0 ，其中包含 $m = n$ 条边。因此，初始网络是连通的，包含 n个节点，初始边数 N_0 约为 $2n$。每种情况下，目标都是向 E_0 中添加 $N = 500$条边。请注意，我们没有限制候选边的集合；因此，候选边数 k 约为 $n(n-5)/2$。这些设置汇总于表 2。我们使用高效贪心算法，针对 D-、 A-和 Φ_3-最优性构造网络，随后使用高效 KL 交换算法（采用 $K = L = 20$）尝试改进该网络；见表 3。此处未考虑 E-最优性，因为对于E-最优性，我们没有高效的秩一更新，因此，对于如此大的网络，这些算法往往会变得极其缓慢。结果表明，算法 4 通常能够在相对较短的时间内改进贪心解。

9 讨论

我们给出了理论和算法方面的结果，这些结果有助于分析和构造性能良好的网络，通常是通过利用网络设计与实验设计之间的联系。方向导数和节点差异度，p 在所呈现的结果中发挥了关键作用；因此，我们强调它们是优化拉普拉斯谱的有用工具。

我们的部分结果是全新的，另一些则是在现有研究发现基础上的拓展。即使在后一种情况下，这些发现也往往仅在单一网络设计（ND）领域内为人所知，尽管第1.1节所述的拉普拉斯优化问题在这些领域之间具有数学等价性。因此，在任何一个网络设计（ND）场景中证明的结果——包括我们的工作、先前的研究成果以及未来的进展——都可直接应用于所有等价实例，无需针对每个领域分别重新推导。

所呈现的结果可以沿某些方向直接推广。具体而言，为简洁起见，我们假设任意边都可以添加到网络中，但这些结果也可直接推广到潜在边构成的图不完整的问题。同样，相关分析也可以轻松扩展到多重图。具有非平凡性质的拓展，以及未来研究中其他有趣的方向包括：

1. 尽管我们简要概述了拉普拉斯谱优化在网络设计（ND）不同领域中的多种应用，但开展一项更全面的综述既有价值，也正逢其时。2. 除了 Φ_p 度量，其他准则也值得关注。在实验设计（ED）中，常用的度量包括MV-、 G-和 c-最优性（ [47], 第2节），这些准则并非基于特征值。此外，Kiefer的

表3：第8.2节中网络的贪心算法（g）和 KL 算法（KL）结果。

p	网络	时间$_g$ (秒)	时间$_{KL}$ (秒)	$\Phi_p(E_{KL})/\Phi_p(E_g)$
0 (D)	1	2.99	3.56	1.0006
	2	23.45	11.16	1.0001
	3	60.65	31.17	1.0003
1（A）	1	29.63	3.75	1.0019
	2	56.35	4.71	1.0004
	3	237.45	11.78	1.0000
3	1	67.50	7.98	1.0012
	2	174.96	17.39	1.0003
	3	329.94	22.93	1.0001

度量可以扩展到 $p \in [-1, 0)$（ [43]第6章），但其性质有显著差异；例如，即使对于非连通网络，它们也不为零。

3. 一个特别有趣的方向是针对特定比较系统进行网络优化；例如，最小化预定义节点子集 S 与其补集 $V \setminus S$ 之间的平均电阻距离。在实验设计中，这类目标称为“部分”最优性准则或“感兴趣的子系统” [43]。

4. 对于 E-最优性，我们在交换法中使用节点差异度 $v_{\mathbf{L},\infty}(e)$ 进行边选择；这是 E-最优性算法中的常见做法。然而，我们在第6节指出，当 $\lambda_{n-1}(\mathbf{L})$ 不是单重时，节点差异度和秩一方向导数 $\partial\Phi_\infty(\mathbf{L}, \mathbf{L} + \mathbf{x}_e\mathbf{x}_e^T)$ 可能并不适用。因此，值得考察基于其他方向导数、超微分或其他根本不同方法的启发式方法。另一种做法是，对适用于 $v_{\mathbf{L},\infty}(e)$ 的交换法或贪心启发式方法进行深入的理论分析。

5. 我们有意避开了连续凸松弛，这种方法在网络设计和实验设计中都很常见。不过，我们计划今后研究网络设计中的连续松弛方法。

6. 为实验设计开发或采用的其他优化技术也可能适用，例如元启发式方法 [63, 64], 分支定界法 [65–67], 以及混合整数二阶锥规划方法 [49]。

致谢

本研究得到斯洛伐克科学资助机构（VEGA）资助项目1/0480/26的支持。

附录：证明

定理1的证明

证明。 矩阵 $\mathbf{K}$ 满足 $\mathbf{K}^T\mathbf{K} = \mathbf{I}_{n-1}$，且 $\mathbf{K}\mathbf{K}^T = \mathbf{I}_n - \mathbf{J}_n/n$，这是一个投影矩阵，指向$\mathbf{1}_n^\perp$。后一个结论源于以下事实：$[\mathbf{K}\mathbf{1}_n/\sqrt{n}]$ 是一个正交矩阵。因此$\mathbf{K}\mathbf{K}^T\mathbf{L} = \mathbf{L}$，因为 $\mathcal{C}(\mathbf{L}) = \mathbf{1}_n^\perp$。

此外，$\mathbf{K}^T\mathbf{L}^+\mathbf{K}$ $= (\mathbf{K}^T\mathbf{L}\mathbf{K})^+ = \mathbf{Z}^T\mathbf{L}\mathbf{Z} + \mathbf{J}_{n-1} = (\mathbf{K}^T\mathbf{L}\mathbf{K} + \mathbf{J}_{n-1})^{-1} - \mathbf{J}_{n-1} = \mathbf{K}^T\mathbf{L}^+\mathbf{K}$。此外，假设 $\mathrm{rank}(\mathbf{L}) = n - 1$ 保证了 $\mathcal{C}(\mathbf{L}) = \mathcal{C}(\mathbf{K})$，这意味着存在一个矩阵$\mathbf{Z}$，使得$\mathbf{K} = \mathbf{L}\mathbf{Z}$。因此，$\mathbf{K}^T\mathbf{L}\mathbf{K} = \mathbf{Z}^T\mathbf{L}\mathbf{L}\mathbf{L}\mathbf{Z} = \mathbf{Z}^T\mathbf{L}\mathbf{K} = \mathbf{K}^T\mathbf{K} = \mathbf{I}_{n-1}$，从而证明了(b)和(a)。$\mathbf{K}^T\mathbf{L}\mathbf{K}$ 的正特征值与$\mathbf{L}\mathbf{K}\mathbf{K}^T$ 的正特征值相同（见 [61], 例6.54(b)），而后者正是矩阵$\mathbf{L}$。 □

定理 2 的证明

为了用原始拉普拉斯矩阵表述基于正则化拉普拉斯矩阵的结果，我们将采用以下技术引理。

引理 1. 设 $p \in [0, \infty)$，并令 $\mathbf{L}$ 和 $\mathbf{K}$ 如定理1中所定义。则，

$$(\mathbf{K}^T\mathbf{L}\mathbf{K})^{-p} = \mathbf{K}^T(\mathbf{L}^+)^p\mathbf{K}. \tag{17}$$

证明。设 $p \in [0, \infty)$，并令 $\mathrm{L} = \mathrm{V}\mathbf{\Lambda}\mathrm{V}^T$ 为 L 的谱分解，其中 $\mathrm{V} = [\mathrm{v}1, \ldots, \mathrm{v}_{n-1}, \mathbf{1}_n/\sqrt{n}]$。则 $\mathrm{L}^+ = \mathrm{V}\mathbf{\Lambda}^+\mathrm{V}^T$，且 $\mathrm{K}^T\mathrm{v}1, \ldots, \mathrm{K}^T\mathrm{v}_{n-1}$ 是 $\mathrm{K}^T\mathrm{L}\mathrm{K}$ 的特征向量，其特征值为 $\lambda_1, \ldots, \lambda_{n-1}$。记 $\bar{\mathrm{V}} = [\mathrm{v}1, \ldots, \mathrm{v}_{n-1}]$ 和 $\bar{\mathbf{\Lambda}} = \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_{n-1})$；因此 $\mathrm{K}^T\bar{\mathrm{V}}\,\bar{\mathbf{\Lambda}}\,\bar{\mathrm{V}}^T\mathrm{K}$ 是 $\mathrm{K}^T\mathrm{L}\mathrm{K}$ 的谱分解。于是，

$$\begin{aligned}(\mathbf{K}^T\mathbf{L}\mathbf{K})^{-p} &= \mathbf{K}^T\bar{\mathbf{V}}\bar{\mathbf{\Lambda}}^{-p}\bar{\mathbf{V}}^T\mathbf{K} = \mathbf{K}^T\mathbf{V}\begin{bmatrix}\bar{\mathbf{\Lambda}}^{-p} & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}\mathbf{V}^T\mathbf{K}\\ &= \mathbf{K}^T\mathbf{V}(\mathbf{\Lambda}^+)^p\mathbf{V}^T\mathbf{K} = \mathbf{K}^T(\mathbf{L}^+)^p\mathbf{K}.\end{aligned}$$

□

现在，我们可以证明定理 2。

证明。回忆一下，$\mathbf{K}\mathbf{K}^T = \mathbf{I}_n - \mathbf{J}_n/n$ 是到 $\mathbf{1}_n^\perp$ 的投影矩阵，由此可得

$$\mathbf{K}\mathbf{K}^T\mathbf{L}_i = \mathbf{L}_i\mathbf{K}\mathbf{K}^T = \mathbf{L}_i, \quad i = 1, 2. \tag{18}$$

此外，$\Phi_p(\mathbf{L}_i) = \widetilde{\Phi}_p(\mathbf{K}^T\mathbf{L}_i\mathbf{K})$（定理1）。$\widetilde{\Phi}_p$ 的方向导数公式为

$$\partial\widetilde{\Phi}_p(\mathbf{A}, \mathbf{B}) = \widetilde{\Phi}_p(\mathbf{A})\left(\frac{\mathrm{tr}(\mathbf{A}^{-p-1}\mathbf{B})}{\mathrm{tr}(\mathbf{A}^{-p})} - 1\right) \tag{19}$$

[68]。由此可得

$$\begin{aligned}\partial\Phi_p(\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2) &= \partial\widetilde{\Phi}_p(\mathbf{K}^T\mathbf{L}_1\mathbf{K}, \mathbf{K}^T\mathbf{L}_2\mathbf{K})\\ &= \widetilde{\Phi}_p(\mathbf{K}^T\mathbf{L}_1\mathbf{K})\left(\frac{\mathrm{tr}((\mathbf{K}^T\mathbf{L}_1\mathbf{K})^{-p-1}\mathbf{K}^T\mathbf{L}_2\mathbf{K})}{\mathrm{tr}((\mathbf{K}^T\mathbf{L}_1\mathbf{K})^{-p})} - 1\right)\\ &= \Phi_p(\mathbf{L}_1)\left(\frac{\mathrm{tr}(\mathbf{K}^T(\mathbf{L}_1^+)^{1+p}\mathbf{K}\mathbf{K}^T\mathbf{L}_2\mathbf{K})}{\mathrm{tr}(\mathbf{K}^T(\mathbf{L}_1^+)^p\mathbf{K})} - 1\right) \quad [(17)]\\ &= \Phi_p(\mathbf{L}_1)\left(\frac{\mathrm{tr}((\mathbf{L}_1^+)^{1+p}\mathbf{L}_2)}{\mathrm{tr}((\mathbf{L}_1^+)^p)} - 1\right) \quad [(18)].\end{aligned}$$

□

定理 3 的证明

在开始证明之前，我们先将函数 Φ_∞ 扩展到整个集合 $\mathcal{S}^n$：对于 $\mathbf{A} \in \mathcal{S}^n$，$\Psi(\mathbf{A}) = \lambda_{n-1}(\mathbf{A}) + \lambda_n(\mathbf{A})$。显然，对于任意 $\mathbf{L} \in \mathcal{L}^n$，$\Phi_\infty(\mathbf{L}) = \Psi(\mathbf{L})$。由此可得，对于任意 $\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2 \in \mathcal{L}^n$，$\partial\Phi_\infty(\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2) = \partial\Psi(\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2)$。注意，$\Psi$ 即使在 $\mathcal{L}^n$ 中秩为 $n-1$ 的某些矩阵处也不可微。

函数 $f\colon \mathcal{S}^n \to \mathbb{R}$ 在 $\mathbf{A}$ 处的超微分是集合

$$S_f(\mathbf{A}) = \{\mathbf{G} \in \mathcal{S}^n \mid f(\mathbf{B}) \le f(\mathbf{A}) + \mathrm{tr}(\mathbf{G}(\mathbf{B} - \mathbf{A}))\ \forall\, \mathbf{B} \in \mathcal{S}^n\}.$$

$S_f(\mathbf{A})$ 中的任意元素都称为 f 在 $\mathbf{A}$ 处的超梯度。当 f 为凹函数，但在 $\mathbf{A}$ 处不一定可微时，

$$\partial f(\mathbf{A}, \mathbf{B}) = \inf_{\mathbf{G} \in S_f(\mathbf{A})} \mathrm{tr}(\mathbf{G}(\mathbf{B} - \mathbf{A})) \tag{20}$$

（参见 [69] 中的定理 23.4）。

引理 2. 设 $\mathbf{L}$ 为一个连通图的拉普拉斯矩阵，设 s 为 λ_{n-1}（$\mathbf{L}$）的重数。那么，

$$S_\Psi(\mathbf{L}) = \left\{ \frac{1}{n}\mathbf{J}_n + \sum_{i=1}^{s} \gamma_i \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^T \;\middle|\; [\mathbf{u}_1, \ldots, \mathbf{u}_s] \in \mathcal{U}, \boldsymbol{\gamma} \in \Gamma \right\},$$

其中，$\mathcal{U}$ 是列向量为$\mathbf{L}$ 对应于 $\lambda_{n-1}(\mathbf{L})$的标准正交特征向量的$(n-1) \times s$ 矩阵集合，且 $\Gamma = \{\boldsymbol{\gamma} \in \mathbb{R}^s \mid \sum_{i=1}^{s} \gamma_i = 1, \gamma_i \in [0,1]\, \forall i\}$。

证明。 将其记号中的 $k = 2$ 设为 [57], ，即可直接由命题 3 得出该结果。 □

定理 3 的证明如下。

证明。

$$\begin{aligned}\partial\Phi_\infty(\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2) = \partial\Psi(\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2) &= \inf_{\mathbf{G} \in S_\Psi(\mathbf{L}_1)} \operatorname{tr}(\mathbf{G}(\mathbf{L}_2 - \mathbf{L}_1)) \\ &= \inf_{\boldsymbol{\gamma} \in \Gamma, (\mathbf{u}_1, \ldots, \mathbf{u}_s) \in \mathcal{U}} \sum_{i=1}^{s} \gamma_i \mathbf{u}_i^T \mathbf{L}_2 \mathbf{u}_i - \lambda_{n-1}(\mathbf{L}_1)\end{aligned}$$

由引理 2，$\mathbf{J}_n \mathbf{L}_i = \mathbf{0}$，且 $\operatorname{tr}(\mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^T \mathbf{L}_1) = \lambda_{n-1}(\mathbf{L}_1)$。对于固定的 $[\mathbf{u}_1, \ldots, \mathbf{u}_s] \in \mathcal{U}$，我们有

$$\inf_{\boldsymbol{\gamma} \in \Gamma} \sum_{i=1}^{s} \gamma_i \mathbf{u}_i^T \mathbf{L}_2 \mathbf{u}_i = \min_{i=1,\ldots,s} \mathbf{u}_i^T \mathbf{L}_2 \mathbf{u}_i.$$

此外，

$$\inf_{(\mathbf{u}_1, \ldots, \mathbf{u}_s) \in \mathcal{U}} \min_{i=1,\ldots,s} \mathbf{u}_i^T \mathbf{L}_2 \mathbf{u}_i = \inf_{\mathbf{u}} \mathbf{u}^T \mathbf{L}_2 \mathbf{u}, \tag{21}$$

其中，右侧的下确界是在 $\mathbf{u}$ 的所有单位长度特征向量上取得的，$\mathbf{L}_1$ 这些特征向量对应于 $\lambda_{n-1}(\mathbf{L}_1)$。我们求得了连续函数在紧集上的下确界；因此，它实际上就是（有限的）最小值。为求解式（21）中的优化问题，注意到 $\mathbf{L}_1\mathbf{u} = \lambda_{n-1}(\mathbf{L}_1)\mathbf{u}$等价于 $\mathbf{u} = \mathbf{U}\mathbf{z}$ ，其中某个 $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^s$满足该式。于是，$1 = \|\mathbf{u}\|^2 = \|\mathbf{z}\|^2$，因为 $\mathbf{U}$ 的列是正交归一的，并且 $\mathbf{u}^T\mathbf{L}_2\mathbf{u} = \mathbf{z}^T\mathbf{U}^T\mathbf{L}_2\mathbf{U}\mathbf{z}$。此外，

$$\min_{\|\mathbf{z}\|^2 = 1} \mathbf{z}^T \mathbf{U}^T \mathbf{L}_2 \mathbf{U} \mathbf{z} = \lambda_s(\mathbf{U}^T \mathbf{L}_2 \mathbf{U}).$$

如果 $\lambda_{n-1}(\mathbf{L}_1)$ 是单重的，那么 $\mathbf{U} = \mathbf{u}$ 且 $\lambda_s(\mathbf{U}^T\mathbf{L}_2\mathbf{U}) = \mathbf{u}^T\mathbf{L}_2\mathbf{u}$。

令 $\mathrm{L}_2 = \mathrm{L}_1 + \mathrm{x}_e\mathrm{x}_e^T$，即可得到等式（10）。如果 $\lambda_{n-1}(\mathrm{L}_1)$ 是单重的，那么 $\mathrm{u}^T\mathrm{L}_2\mathrm{u} = (\mathrm{x}_e^T\mathrm{u})^2 + \lambda_{n-1}(\mathrm{L}_1)$。如果它不是单重的，那么 $\lambda_s(\mathrm{U}^T\mathrm{L}_2\mathrm{U}) = \lambda_s(\mathrm{U}^T\mathrm{x}_e\mathrm{x}_e^T\mathrm{U}) + \lambda_{n-1}(\mathrm{L}_1)$。于是，$\lambda_s(\mathrm{U}^T\mathrm{x}_e\mathrm{x}_e^T\mathrm{U}) = 0$，因为 $\mathrm{U}^T\mathrm{x}_e\mathrm{x}_e^T\mathrm{U} \in \mathcal{S}_+^s$ 的秩至多为 1。 □

定理 4 的证明

我们首先提出一个技术引理。

引理 3。 设 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ 为非奇异矩阵，并设 $\mathbf{u}$、$\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$。则，

$$(\mathbf{A} + \mathbf{u}\mathbf{v}^T)^p = \mathbf{A}^p + \sum_{k=1}^{p} \sum_{\substack{i_0, \ldots, i_k \geq 0 \\ i_0 + \ldots + i_k = p-k}} \mathbf{A}^{i_0}\mathbf{u} \left(\prod_{j=1}^{k-1} \mathbf{v}^T \mathbf{A}^{i_j} \mathbf{u} \right) \mathbf{v}^T \mathbf{A}^{i_k} \tag{22}$$

and

$$\operatorname{tr}((\mathbf{A} + \mathbf{u}\mathbf{v}^T)^p) = \operatorname{tr}(\mathbf{A}^p) + \sum_{k=1}^{p} \sum_{\substack{i_0, \ldots, i_k \geq 0 \\ i_0 + \ldots + i_k = p-k}} \mathbf{v}^T \mathbf{A}^{i_0 + i_k} \mathbf{u} \left(\prod_{j=1}^{k-1} \mathbf{v}^T \mathbf{A}^{i_j} \mathbf{u} \right). \tag{23}$$

对于任意正整数 p。这里，i_0、.....、i_k均为整数；若 $k = 1$，则约定关于 $j \in \{1, \ldots, k-1\}$ 的乘积等于 1。

证明。可用数学归纳法证明该结论。显然，该公式在 $p=1$ 时成立。现在假设它在 p 时成立；我们要证明

$$(\mathbf{A}+\mathbf{u}\mathbf{v}^T)^{p+1}=\mathbf{A}^{p+1}+\sum_{k=1}^{p+1}\sum_{\substack{i_0,\ldots,i_k\geq 0\\ i_0+\ldots+i_k=p-k+1}}\mathbf{A}^{i_0}\mathbf{u}\left(\prod_{j=1}^{k-1}\mathbf{v}^T\mathbf{A}^{i_j}\mathbf{u}\right)\mathbf{v}^T\mathbf{A}^{i_k}. \tag{24}$$

我们有

$$\begin{aligned}(\mathbf{A}+\mathbf{u}\mathbf{v}^T)^{p+1}&=(\mathbf{A}+\mathbf{u}\mathbf{v}^T)(\mathbf{A}+\mathbf{u}\mathbf{v}^T)^p\\&=\mathbf{A}^{p+1}+\sum_{k=1}^{p}\sum_{\substack{i_0,\ldots,i_k\geq 0\\ i_0+\ldots+i_k=p-k}}\mathbf{A}^{i_0+1}\mathbf{u}\left(\prod_{j=1}^{k-1}\mathbf{v}^T\mathbf{A}^{i_j}\mathbf{u}\right)\mathbf{v}^T\mathbf{A}^{i_k}+\mathbf{u}\mathbf{v}^T\mathbf{A}^p+\\&+\sum_{k=1}^{p}\sum_{\substack{i_0,\ldots,i_k\geq 0\\ i_0+\ldots+i_k=p-k}}\mathbf{u}\mathbf{v}^T\mathbf{A}^{i_0}\mathbf{u}\left(\prod_{j=1}^{k-1}\mathbf{v}^T\mathbf{A}^{i_j}\mathbf{u}\right)\mathbf{v}^T\mathbf{A}^{i_k}\\&=\mathbf{A}^{p+1}+\sum_{z=1}^{p}\sum_{\substack{\ell_0\geq 1,\ell_1\ldots,\ell_z\geq 0\\ \ell_0+\ldots+\ell_z=p-z+1}}\mathbf{A}^{\ell_0}\mathbf{u}\left(\prod_{j=1}^{z-1}\mathbf{v}^T\mathbf{A}^{\ell_j}\mathbf{u}\right)\mathbf{v}^T\mathbf{A}^{\ell_z}+\mathbf{u}\mathbf{v}^T\mathbf{A}^p+\\&+\sum_{z=2}^{p+1}\sum_{\substack{\ell_1,\ldots,\ell_z\geq 0\\ \ell_1+\ldots+\ell_z=p-z+1}}\mathbf{u}\left(\prod_{j=1}^{z-1}\mathbf{v}^T\mathbf{A}^{\ell_j}\mathbf{u}\right)\mathbf{v}^T\mathbf{A}^{\ell_z},\end{aligned} \tag{25}$$

其中，最后一个等式是通过适当的代换得到的。式 (24) 中主和式的每一项（其中 k 从 1 变化到 $p+1$）都可以拆分为包含 $i_0=0$ 的部分和包含 $i_0\geq 1$ 的部分。式 (25) 中的第二项对应于 $i_0\geq 1$ 时式 (24) 中的主和式；第三项对应于 $i_0=0$ 和 $k=1$ 时式 (24) 中的主和式；最后一项对应于 $i_0=0$ 和 $k\geq 2$ 时式 (24) 中的主和式；因此，式 (25) 等于式 (24)。(23) 是 (22) 的直接推论 □

定理 4 由 (23) 和 (12) 结合得到。

定理 5 的证明

我们再次从一个技术引理开始。

引理 4。设 $\mathbf{A}\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 为非奇异的，并设 $\mathbf{u}$，$\mathbf{v}\in\mathbb{R}^n$。那么，

$$(\mathbf{A}+\mathbf{u}\mathbf{v}^T)^p=\mathbf{A}^p+\sum_{j=0}^{p-1}(\mathbf{A}+\mathbf{u}\mathbf{v}^T)^j\mathbf{u}\mathbf{v}^T\mathbf{A}^{p-j-1}$$

对于任意正整数 p。

证明。 可以用数学归纳法来证明。对于 $p=1$，结论显然成立。假设公式对 p成立；那么

$$\begin{aligned}(\mathbf{A}+\mathbf{u}\mathbf{v}^T)^{p+1}&=(\mathbf{A}+\mathbf{u}\mathbf{v}^T)^p(\mathbf{A}+\mathbf{u}\mathbf{v}^T)=\mathbf{A}^{p+1}+\sum_{j=0}^{p-1}(\mathbf{A}+\mathbf{u}\mathbf{v}^T)^j\mathbf{u}\mathbf{v}^T\mathbf{A}^{p-j}+(\mathbf{A}+\mathbf{u}\mathbf{v}^T)^p\mathbf{u}\mathbf{v}^T\\&=\mathbf{A}^{p+1}+\sum_{j=0}^{p}(\mathbf{A}+\mathbf{u}\mathbf{v}^T)^j\mathbf{u}\mathbf{v}^T\mathbf{A}^{p-j},\end{aligned}$$

至此，证明完成。 □

定理 5 可由引理 4 与式 (12) 结合得出。

参考文献

[1] A. Ghosh、S. Boyd 和 A. Saberi，“最小化图的有效电阻”，*SIAM Review*，第 50 卷，第 37–66 页，2008年。[2] A. Tizghadam 和 A. Leon-Garcia，“通信网络中的中介中心性与电阻距离”，*IEEE Network*，第 24 卷，第 10–16 页，2010年。[3] L. Echefu、T. Alam 和 A. Newaz，“具有单向可见性的随机多机器人巡逻”，载于第*21*届国际普适机器人会议。IEEE，2024年，第 324–329 页。[4] M. Siami 和 N. Motee，“大规模互联动力网络的性能与鲁棒性系统性度量”，载于第*53*届 *IEEE* 决策与控制会议，加利福尼亚州，2014年，第 5119–5124 页。[5] C.-S. Cheng，“最大化图中的生成树总数：图论与最优设计理论中的两个相关问题”，组合理论杂志*B*辑，第 31 卷，第 240–248 页，1981年。[6] K. Khosoussi、S. Huang 和 G. Dissanayake，“关于图结构对同步定位与建图影响的新见解”，载于*2014*年 *IEEE/RSJ*智能机器人与系统国际会议。伊利诺伊州：IEEE，2014年，第 2707–2714 页。[7] G. F. Young、L. Scardovi 和 N. E. Leonard，“通过重组树实现鲁棒一致性”，载于第*50*届 *IEEE* 决策与控制会议暨欧洲控制会议。佛罗里达州：IEEE，2011年，第 1000–1005 页。[8] Y. Yang 和 D. J. Klein，“关于 S、T-异构体的电阻距离与基尔霍夫指数的比较定理”，《离散应用数学》，第 175 卷，第 87–93 页，2014年。[9] W. Ellens、F. M. Spieksma、P. Van Mieghem、A. Jamakovic 和 R. E. Kooij，“有效图电阻”，线性代数及其应用，第 435 卷，第 2491–2506 页，2011年。[10] S. Bhela、D. Deka、H. Nagarajan 和 V. Kekatos，“设计用于最小化网络扰动的电网拓扑：精确的混合整数线性规划公式”，载于*2019*年美国控制会议。IEEE，2019年，第 1949–1956 页。[11]W. Ellens 和 R. E. Kooij，“图度量与网络鲁棒性”，arXiv 预印本 arXiv:1311.5064，2013年。[12] E. Bozzo 和 M. Franceschet，“电阻距离、接近中心性与中介中心性”，社交网络，第 35 卷，第 460–469 页，2013 年。[13] K. Khosoussi 、 G. S. Sukhatme 、 S. Huang 和 G. Dissanayake，“设计稀疏且可靠的位姿图同步定位与建图：一种图论方法”，载于机器人算法基础*XII*：第十二届机器人算法基础研讨会论文集。尚：Springer，2020年，第 17–32 页。[14] F. B. Thiam 和 C. L. DeMarco，“通过最大化可行母线注入的体积来扩建输电系统”，电力系统研究，第 116 卷，第 36–44 页，2014年。[15] J. S. Baras 和 P. Hovareshti，“用于网络化系统中分布式决策的高效且鲁棒的通信拓扑”，载于第*48*届 *IEEE* 决策与控制会议暨第*28*届中国控制会议论文集。IEEE，2009年，第 3751–3756 页。[16] M. Siami 和 N. Motee，“动力网络中的 Schur凸鲁棒性度量”，载于*2014*年美国控制会议。俄勒冈州：IEEE，2014年，第 5198–5203 页。

[17] Y. Wan、S. Roy、X. Wang、A. Saberi、T. Yang、M. Xue 和 B. Malek，“优化代数连通度的图边设计结构”，载于第*47*届 *IEEE* 决策与控制会议，墨西哥，2008年，第 805–810 页。[18] M. Siami 和 N. Motee，“基于谱系统性能指标的线性动力网络增长”，*IEEE* 自动控制汇刊，第 63 卷，第 2091–2106 页，2018年。[19] H. Chan 和 L. Akoglu，“通过边重连优化网络鲁棒性：通用框架”，数据挖掘与知识发现，第 30 卷，第 1395–1425 页，2016年。[20] K. Yamashita、Y. Yasuda、R. Nakamura 和 H. Ohsaki，“基于谱指标预测网络鲁棒性”，信息处理学报，第 28 卷，第 551–561 页，2020年。[21] S. Freitas、D. Yang、S. Kumar、H. Tong 和 D. H. Chau，“图脆弱性与鲁棒性：综述”，*IEEE* 知识与数据工程汇刊，第 35 卷，第 5915–5934 页，2023年。[22]C. Pizzuti 和 A. Socievole，“通过链路保护增强复杂网络鲁棒性的遗传算法”，载于复杂网络及其应用 *VII*：第 *1* 卷论文集——第七届复杂网络及其应用国际会议（复杂网络 *2018*）。Springer，2019年，第 807–819 页。[23] G. Weichenberg、V. W. Chan 和 M. M´edard，“承压网络的高可靠性拓扑架构”，*IEEE* 通信选定领域期刊，第 22 卷，第 1830–1845 页，2004年。[24] R. Dai 和 M. Mesbahi，“动态网络的最优拓扑设计”，载于第*50*届 *IEEE* 决策与控制会议暨欧洲控制会议。佛罗里达州：IEEE，2011年，第 1280–1285 页。[25] K. Doherty、D. Rosen 和 J. Leonard，“位姿图 SLAM 的谱测量稀疏化”，载于*2022*年 *IEEE/RSJ* 智能机器人与系统国际会议。IEEE，2022年，第 6412–6419 页。[26] P. Kaveti、M. Giamou、H. Singh 和 D. Rosen，“Oasis：SLAM 感知的最优布置”，载于*2024*年 *IEEE* 机器人与自动化国际会议。IEEE，2024年，第 13 818–13 824 页。[27] K. Doherty、A. Papalia、Y. Huang、D. Rosen、B. Englot 和 J. Leonard，“MAC：通过最大化代数连通度进行图稀疏化”，arXiv 预印本 arXiv:2403.19879，2024年。[28] A. Ghosh 和 S. Boyd，“构建良连通图”，载于第*45*届 *IEEE* 决策与控制会议论文集。IEEE，2006年，第 6605–6611 页。[29] N. Somisetty、H. Nagarajan 和 S. Darbha，“最优鲁棒网络设计：最大化代数连通度的公式与算法”，载于*IEEE* 网络系统控制汇刊。IEEE，2024年。[30] H. Li、S. Patterson、Y. Yi 和 Z. Zhang，“最大化连通图中的生成树数量”，*IEEE* 信息论汇刊，第 66 卷，第 1248–1260 页，2019年。[31] X. Zhou、A. N. Zehmakan 和 Z. Zhang，“通过添加边高效地最小化基尔霍夫指数的算法”，*IEEE* 知识与数据工程汇刊，第 37 卷，第 3342–3355 页，2025年。[32] T. Alam、M. M. Rahman、L. Bobadilla 和 B. Rapp，“在视野和通信约束有限的情况下进行多车辆巡逻”，载于*MILCOM 2017 - 2017*年 *IEEE* 军事通信会议。IEEE，2017年，第 465–470 页。

[33] A. Chandra、P. Raghavan、W. Ruzzo、R. Smolensky 和 P. Tiwari，“图的电阻刻画了其通勤时间和覆盖时间”，载于第*21*届计算机科学基础年会论文集，纽约，1989年，第 574–586 页。[34] B. Osting、C. Brune 和 S. J. Osher，“用于信息丰富排名的最优数据收集揭示了良连通图”，机器学习研究杂志，第 15 卷，第 2981–3012 页，2014年。[35] C. Yang、J. Mao、X. Qian 和 P. Wei，“通过最小化总有效电阻设计鲁棒航空运输网络”，*IEEE*智能交通系统汇刊，第 20 卷，第 2353–2366 页，2019年。[36] P. Wei、L. Chen 和 D. Sun，“航空运输网络代数连通度最大化：航线的增加与删除问题”，《交通研究*E*辑：物流与交通评论》，第 61 卷，第 13–27 页，2014年。[37] M. Black、A. Wan、Z. 和 Nayyeri 以及 Y. Wang，“通过有效电阻视角理解图神经网络中的过度压缩”，载于第*40*届国际机器学习大会论文集。PMLR，2023年，第 2528–2547 页。[38] Z. Yu、C. Wang、J. Bu、X. Wang、Y. Wu 和 C. Chen，“社交网络中增强内容传播的好友推荐”，《信息科学》，第 309 卷，第 102–118 页，2015年。[39] M. Predari、L. Berner、R. Kooij 和 H. Meyerhenke，“通过全局和局部边插入，贪心优化基于电阻的图鲁棒性”，《社会网络分析与挖掘》，第 13 卷，第 130 页，2023年。[40] D. Deka、H. Nagarajan 和 S. Backhaus，“电网扰动最小化的最优拓扑设计”，载于*2017*年美国控制会议（*ACC*）。IEEE，2017年，第 2719–2724 页。[41] K. Khosoussi、M. Giamou、G. S. Sukhatme、S. Huang、G. Dissanayake 和 J. P. How，“用于 SLAM 的可靠图”，《国际机器人研究杂志》，第 38 卷，第 260–298 页，2019年。[42] G. Sagnol，“涉及谱函数的最大子模覆盖问题的近似算法及其在实验设计中的应用”，《离散应用数学》，第 161 卷，第 258–276 页，2013年。[43] F. Pukelsheim，试验的最优设计。纽约：Wiley，1993年。[44] L. Vandenberghe 和 S. Boyd，“半定规划的应用”，《应用数值数学》，第 29 卷，第 283–299 页，1999年。[45] H. P. Wynn，“D最优试验设计的序贯生成”，《数理统计年刊》，第 41 卷，第 1655–1664 页，1970年。[46] V. V. Fedorov，最优试验理论。纽约：Academic Press，1972年。[47] J. L´opez-Fidalgo，《最优试验设计：研究者简明导论》，统计学讲义丛书。Springer 尚，2023年。[48]R. Harman 和 L. Filov´a，“使用整数二次规划计算高效的精确试验设计”，《计算统计与数据分析》，第 71 卷，第 1159–1167 页，2014 年。[49] G. Sagnol 和 R. Harman，“ 通过混合整数二阶锥规划计算精确 D 最优设计”，《数理统计年刊》，第 43 卷，第 2198–2224 页，2015年。[50] A. Tizghadam、A. Bigdeli、A. Leon-Garcia 和 H. Naser，“面向最小电阻的资源与路线联合优化：从通信网络到电网”，载于《复杂网络优化手册》。纽约：Springer，2011年，第 97–142 页。

[51] A. C. Atkinson、A. Donev 和 R. Tobias，《最优试验设计：使用 SAS》。纽约：牛津大学出版社，2007年。[52] A. Hackett、D. Ajwani、S. Ali、S. Kirkland 和 J. Morrison，“基于基尔霍夫指数优化的网络配置算法”，载于《2013年IEEE第27届并行与分布式处理国际研讨会》。IEEE，2013年，第407–417页。[53] A. P´azman，《最优试验设计基础》。多德雷赫特：Reidel出版社，1986年。[54] U. Graßhoff、H. Großmann、H. Holling 和 R. Schwabe，“线性成对比较模型中主效应的最优设计”，《统计规划与推断杂志》，第126卷，第361–376页，2004年。[55] U. Graßhoff 和 R. Schwabe，“Bradley–Terry成对比较模型的最优设计”，《统计方法与应用》，第17卷，第275–289页，2008年。[56] K. Chaloner 和 I. Verdinelli，“贝叶斯试验设计：综述”，《统计科学》，第10卷，第273–304页，1995年。[57] R. Harman，“正交不变信息准则类别下设计的最低效率”，《Metrika》，第60卷，第137–153页，2004年。[58] R. B. Bapat，《图与矩阵》。纽约：Springer，2010年。[59] M. Black、L. Lin、W.-K. Wong 和 A. Nayyeri，“图的双调和距离及其高阶变体：理论性质及其在中心性和聚类中的应用”，载于《第41届机器学习国际会议论文集》。PMLR，2024年。[60] C. S. Oliveira、F. M. P. Junior 和 J. Brito，“应用于顶点可靠性的谱启发式方法”，arXiv:2211.08514，2022年。[61] G. A. Seber，《统计学家矩阵手册》。新泽西州：约翰·威立父子公司，2008年。[62] R. Harman 和 L. Filov´a，《OptimalDesign：用于计算高效试验设计的工具箱》，2019年，R软件包版本1.0.1。[63] L. M. Haines，“退火算法在线性回归模型精确最优设计构造中的应用”，《Technometrics》，第29卷，第439–447页，1987年。[64] C. D. Lin、C. M. Anderson-Cook、M. S. Hamada、L. M. Moore 和 R. R. Sitter，“使用遗传算法设计实验：综述”，《国际质量与可靠性工程》，第31卷，第155–167页，2015年。[65] W. J. Welch，“基于D-最优性及其他准则的试验设计分支定界搜索”，《Technometrics》，第24卷，第41–48页，1982年。[66] B. P. Duarte、J. F. Granjo 和 W. K. Wong，“通过混合整数非线性规划求解精确最优试验设计”，《统计与计算》，第30卷，第93–112页，2020年。[67] S. D. Ahipasaoglu，“精确最优试验设计问题的分支定界算法”，《统计与计算》，第31卷，第1–11页，2021年。[68] N. Gaffke，“凸设计理论中最优性准则在奇异矩阵处的方向导数”，《统计学》，第16卷，第373–388页，1985年。[69] R. Rockafellar，《凸分析》。新泽西州：普林斯顿大学出版社，1970年。