

グラフ信号処理：
複雑・大規模なデータの周波数解析
Graph Signal Processing: Vertex-Frequency Analysis of
High-Dimensional Complex-Structured Data

東京農工大学・生物システム応用科学府 田中 雄一

Yuichi Tanaka

Graduate School of Bio-Applications and Systems Engineering
Tokyo University of Agriculture and Technology

概要

ソーシャルネットワーク・センサネットワーク・神経網等をはじめとする、複雑かつ大規模なデータに対する信号処理手法として、グラフ信号処理が注目されている。本稿では、グラフ信号処理を「伝統的な」信号処理と対比しながら、グラフフーリエ変換、フィルタリング、サンプリング定理等の紹介を行う。また、グラフ信号処理を利用した雑音除去やセンサ配置問題などの工学的応用にも触れる。

1 はじめに

ネットワーク——電力網、センサネットワーク、神経網、交通網などの「物理的」なネットワークにとどまらず、ソーシャルネットワークや WWW，研究者間のコラボレーションなどを含むあらゆるネットワーク——上のデータ解析は、制御、機械学習、パターン認識、ロボティクス、コンピュータグラフィックス・コンピュータビジョン、バイオインフォマティクス、電力システム、地理情報システムなど無数の科学・工学分野で必要とされている。信号処理は高速フーリエ変換の例を持ち出すまでもなく、データ（信号）解析の中心となる技術であるが、これらネットワーク上のデータ解析に対する貢献は限定的

であった。これは、信号処理においては時系列データが主な研究の対象であったことが一因である。一方、ネットワーク上のデータは、一般に信号値が不均一に分布することがほとんど^{*1}であり、さらに、信号数（次元）が非常に大きいことが多い。このような複雑な構造を持つ高次元信号の解析に対する理論の構築は、信号処理分野で近年大きな注目を集めている [1]。

グラフ信号処理 [2, 3] では、信号値間の関係をグラフを用いて明に定義した上で信号処理理論を構築することを目的としている。しかしながら、信号の構造が明に指定されているために、通常の信号処理における信号解析のための強力なツールであるフーリエ変換やウェーブレット変換をそのまま利用することはできない。グラフ信号処理の目的は、調和解析と（スペクトル）グラフ理論の知見を元に、複雑・高次元信号の効率的な保存・伝送・解析手段を提供することにある。本稿では、グラフ信号処理の基礎理論をまず簡単に説明した後に、各種応用に関して概説を行う。

2 グラフ

2.1 グラフとグラフラプラシアン

有限無向グラフ G は頂点集合 $\mathcal{V}$ と辺集合 $\mathcal{E}$ を用いて以下で定義される。

$$G = \{\mathcal{V}, \mathcal{E}\} \quad (1)$$

ここで頂点数 $N = |\mathcal{V}|$ とする。また、本稿においては多重辺のないグラフを考える。

グラフの構造を数理的に解析するにあたっては、その構造を行列で表すことが多い。 $N \times N$ の隣接行列 $\mathbf{A}$ の m 行 n 列の要素は以下で定義される。

$$[\mathbf{A}]_{mn} = \begin{cases} w_{mn} > 0 & \text{if vertices } m \text{ and } n \text{ are connected,} \\ 0 & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (2)$$

ここで w_{mn} は頂点 m と n 間の辺の重みであり、例えば頂点間の類似度や距離などによって決定される。 $w_{mn} = 0$ の場合、頂点 m と n 間には辺が存在しない。隣接行列 $\mathbf{A}$ はグラフを行列で表現する上で直感的には最も自然な行列であるが、その振る舞いの良さから、スペクトルグラフ理論 [4, 5] では後述するグラフラプラシアンが主に利用される。

度数行列 $\mathbf{D}$ は対角行列であり、各要素は $[\mathbf{D}]_{mm} = \sum_n w_{mn}$ で定義される。 $\mathbf{A}$ および $\mathbf{D}$ を用いて、グラフラプラシアンは

$$\mathbf{L} := \mathbf{D} - \mathbf{A} \quad (3)$$

^{*1} 例えばソーシャルネットワーク上のユーザの空間的な「座標」は普通既知ではない。

で定義される。頂点上に定義された関数 $\mathbf{f} \in \mathbb{R}^N$ に対して、ラプラシアン二次形式は以下で表される。

$$\mathbf{f}^T \mathbf{L} \mathbf{f} = \sum_{j \in \mathcal{N}_k} w_{kj} (f(k) - f(j))^2 \quad (4)$$

ここで $\mathcal{N}_k$ は頂点 k と辺を共有する隣接頂点である。この二次形式は関数 $\mathbf{f}$ の「滑らかさ」を示す。例えば $\mathbf{f} = [1, 1, 1, \dots]^T$ の場合、 $\mathbf{f}^T \mathbf{L} \mathbf{f} = 0$ となるのはグラフラプラシアンの定義より明らかである。

$\mathbf{L}$ は実対称行列である。また、正規化グラフラプラシアンは以下で定義される。

$$\mathcal{L} := \mathbf{D}^{-1/2} \mathbf{L} \mathbf{D}^{-1/2} \quad (5)$$

$\mathcal{L}$ もまた実対称行列であり、その対角成分は全て 1 となる。

ここで注意すべきなのは、隣接行列、グラフラプラシアンともに、頂点の座標（位置）は必ずしも明に与えられていないことである。すなわち、辺の重み w_{mn} はあくまで頂点間の相対的な関係を表しているだけであり、大きい重みの辺は必ずしも空間的な位置が近いことを意味しない。

2.2 グラフラプラシアンの固有値と固有ベクトル

ここで式 (4) の二次形式を考える。明らかに任意の $\mathbf{f}$ に対し式 (4) は非負である。また、前述したように、 $\mathbf{f}$ の要素が全て同一の場合、式 (4) は 0 となる。すなわち、グラフラプラシアンの最小固有値 λ_0 は 0 である。さらに、 $\lambda_1 > 0$ となる必要十分条件は、グラフが接続されていることである。仮にグラフが接続されていない場合、固有値 0 に対応する直交する固有ベクトルが少なくとも 2 本取れる。

ここで λ_i および $\mathbf{u}_{\lambda_i}$ ($i = 0, \dots, N-1$) を $\mathbf{L}$ の固有値および固有ベクトル ($\mathbf{L} \mathbf{u}_{\lambda_i} = \lambda_i \mathbf{u}_{\lambda_i}$, $0 = \lambda_0 < \lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_{N-1} := \lambda_{\max}$) とする。グラフラプラシアンは実対称行列であるから、 $\mathbf{L}$ は固有ベクトルで構成された行列 $\mathbf{U} = [\mathbf{u}_{\lambda_0}, \dots, \mathbf{u}_{\lambda_{N-1}}]$ を利用して、

$$\mathbf{L} = \mathbf{U} \mathbf{\Lambda} \mathbf{U}^* \quad (6)$$

と書ける^{*2}。ここで、 $*$ は共役転置を表す。以下では、簡単のため $\mathbf{U}$ を直交行列とする。また、 $\mathbf{\Lambda} = \text{diag}(\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_{N-1})$ である。グラフのスペクトル $\sigma(\mathbf{L})$ は以下で定義される。

$$\sigma(\mathbf{L}) := \{\lambda_0, \dots, \lambda_{N-1}\} \quad (7)$$

^{*2} $\mathbf{U}$ は直交行列（つまり $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{N \times N}$, $\mathbf{U} \mathbf{U}^T = \mathbf{I}$ ）とすることが多い。また、実対称行列の特性より常に固有ベクトルを実ベクトルとできる。

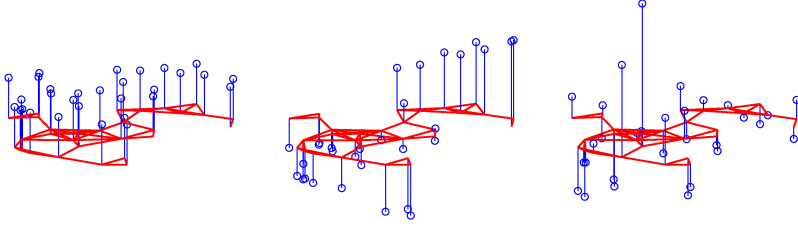


図1 グラフラプラシアン固有ベクトルの各成分を、対応する各頂点に配置した。グラフから上に伸びている信号は正、下に伸びている信号は負を表す。左から u_{λ_0} , u_{λ_1} , $u_{\lambda_{10}}$ 。

また、正規化グラフラプラシアンも同様に実対称行列であるから、 $\mathcal{L}\hat{\mathbf{u}}_{\lambda_i} = \hat{\lambda}_i\hat{\mathbf{u}}_{\lambda_i}$ となるような固有値 $\hat{\lambda}_i$ と固有ベクトル $\hat{\mathbf{u}}_{\lambda_i}$ が存在する。正規化グラフラプラシアンは $\hat{\lambda}_i \in [0, 2]$ となる特徴がある。また、 $\hat{\lambda}_{\max} = 2$ となるのは、グラフが2部グラフのときのみである。

3 グラフ信号とグラフフーリエ変換

3.1 グラフ信号

グラフ信号は $\mathbf{f} \in \mathbb{R}^N$ で表され、各要素 $f(i)$ はグラフの i 番目の頂点 $v_i \in \mathcal{V}$ と対応付けられる。通常の離散信号と異なり、グラフ信号の信号値間の関係はグラフ $\mathcal{G}$ によって明に指定する必要がある。グラフ信号の解析にはグラフラプラシアン（ないし隣接行列）が必要であるから、グラフが与えられていない場合、得られた信号（群）からグラフを作成する必要がある。

3.2 グラフフーリエ変換

時間領域の連続信号 $f(t)$ に対するフーリエ変換は以下で定義された。

$$F(\omega) := \langle f, e^{j\omega t} \rangle = \int_{\mathbb{R}} f(t) e^{-j\omega t} dt \quad (8)$$

ここで $j = \sqrt{-1}$ である。上式で現れる複素正弦波 $e^{j\omega t}$ は、以下のように1次元のラプラス作用素 $\frac{\partial^2}{\partial t^2}$ の固有関数である。

$$-\frac{\partial^2}{\partial t^2} e^{j\omega t} = \omega^2 e^{j\omega t} \quad (9)$$

つまり、フーリエ変換はラプラス作用素の固有関数による $f(t)$ の展開である。ここで固有値 $\omega^2 = (2\pi\xi)^2$ は周波数に相当し、 ξ が 0 に近いほど（周波数が低いほど）、固有関数は滑らかで緩やかに振動する。また逆に ξ が大きいほど固有関数は激しく振動する。

上述した通常の信号処理におけるフーリエ変換と同様の変換を、グラフ信号に対して行うことを考える。時間領域の信号と異なり、グラフ信号においては信号間の関係は信号のインデックスと無関係であったから、通常の離散フーリエ変換 (DFT) の基底を用いることは適当でない。

ここで、グラフ信号を「周波数」領域へ変換する基底として、グラフラプラシアン of 固有ベクトルを用いることを考える。例えば、式 (4) より、固有値 0 に対応する固有ベクトル $\mathbf{u}_{\lambda_0}$ は $\mathbf{u}_{\lambda_0} = \frac{1}{\sqrt{N}}\mathbf{1}_N$ となる。すなわち、 $\langle \mathbf{f}, \mathbf{u}_{\lambda_0} \rangle$ は「直流成分」(最低周波数成分) を抽出する。同様に、小さい固有値に対応する固有ベクトルは緩やかに振動する。つまり、2 頂点 m と n が大きな重みで接続されているとき、 $\mathbf{u}_{\lambda_i}(m)$ と $\mathbf{u}_{\lambda_i}(n)$ の値は似通っている。逆に固有値が大きいとき、辺で接続された 2 頂点 m と n の固有ベクトルの要素 $\mathbf{u}_{\lambda_i}(m)$ と $\mathbf{u}_{\lambda_i}(n)$ は大きく異なる。つまり激しく振動する。

図 1 に、各固有値に対応する $\mathbf{u}_{\lambda_i}$ をグラフ信号としてグラフ上に表現したものを示す。前述したように、 $\mathbf{u}_{\lambda_0}$ の各要素は全て同じ値だということが見て取れる。更に、固有値が大きくなるに従って、隣接頂点間の固有ベクトルの成分の正負が反転する数 (zero crossings) が増加することも分かる。

上述の議論から、グラフ $\mathcal{G}$ の頂点 $\mathcal{V}$ 上のグラフ信号 $\mathbf{f} \in \mathbb{R}^N$ に対するグラフフーリエ変換 (Graph Fourier Transform: GFT) は、グラフラプラシアン of 固有ベクトルを用いて以下のように定義される [6].

$$F(\lambda_i) := \langle \mathbf{f}, \mathbf{u}_{\lambda_i} \rangle = \sum_{k=0}^{N-1} f(k) u_{\lambda_i}(k) \quad (10)$$

また、逆 GFT (Inverse GFT: IGFT) は以下で表される。

$$f(k) = \sum_{i=0}^{N-1} F(\lambda_i) u_{\lambda_i}(k) \quad (11)$$

同様の議論は 1990 年代のコンピュータグラフィックス・コンピュータビジョン分野の研究においても見ることができる [7, 8].

また、図 2 に *Minnesota Traffic Graph* のグラフ周波数領域 (グラフフーリエ領域) と頂点領域の信号を示す。図ではグラフ周波数領域の信号を $F(\lambda_i) = e^{-(\lambda_i-1)^2}$ とし、IGFT を行うことによって頂点領域の信号を求めた。ここで、図 2(b) 上に示したグラフ

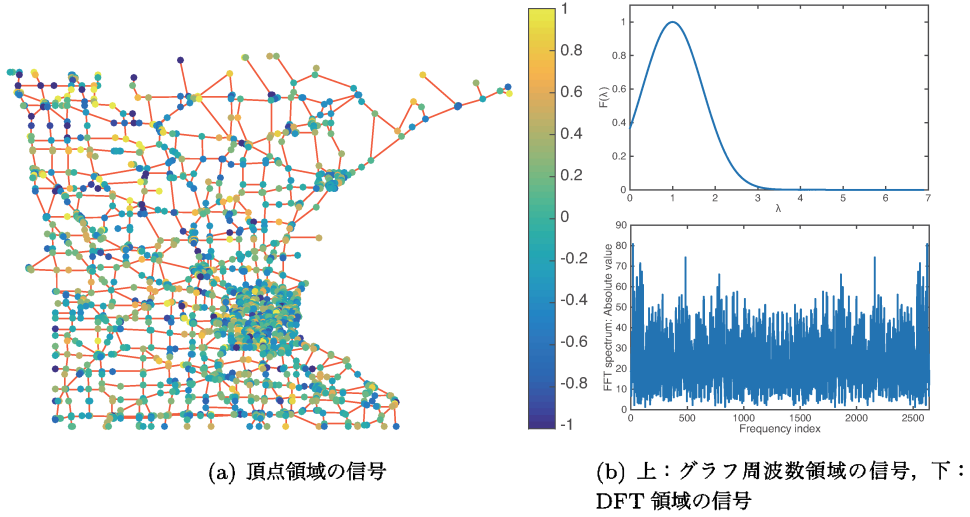


図2 グラフ信号の各領域での表現

周波数領域の信号は低「周波数」領域へエネルギーが集中している。また、同様に頂点領域の信号（図 2(a)）も隣接頂点間の信号値が類似していることが見て取れる。一方、頂点領域の信号をインデックス順に並べた後に DFT を行って得られたスペクトルは図 2(b) 下のようになり、グラフ信号の滑らかさが、通常の信号処理においては必ずしも明確ではないことが分かる。

3.3 グラフフーリエ変換と離散フーリエ変換の関係

上述の GFT の定義は、固有ベクトルと固有関数のある意味「直感的な」関係に基づいているものの、実際には GFT と DFT には深い関係がある。以下に通常の離散信号 $f \in \mathbb{R}^N$ に対する DFT を示す。

$$F(i) = \sum_{k=0}^{N-1} f(k) W_N^{ik} \quad (12)$$

ここで $W_N = \exp(j\frac{2\pi}{N})$ である。また、DFT は離散時間フーリエ変換のスペクトル

$$F(\omega) = \sum_{k=0}^{N-1} f(k) e^{-j\omega k} \quad (13)$$

を間隔 $\frac{2\pi}{N}$ でサンプリングしたものと等価になることはよく知られている。

ここで図 3 に示されるような長さ N の ring graph を考える. このグラフのグラフラプラシアンは以下で表される.

$$\mathbf{L}_{\text{ring}} = \begin{bmatrix} 2 & -1 & & -1 \\ -1 & 2 & -1 & \\ & & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ -1 & & & -1 & 2 \end{bmatrix} \quad (14)$$

$\mathbf{L}_{\text{ring}}$ の固有ベクトルは, 以下で示すような N 点 DFT の基底ベクトルとなる [9].

$$\mathbf{v}_k = [1, W_N^k, W_N^{2k}, \dots, W_N^{(N-1)k}]^T, \quad k = 0, \dots, N-1 \quad (15)$$

つまり, 離散信号の DFT による展開は, 信号値が ring graph の頂点上に存在していると仮定して GFT を行っていることと等価である*3.

また, ring graph と同じく図 3 に示した path graph のグラフラプラシアンは以下で示される.

$$\mathbf{L}_{\text{path}} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & & \\ -1 & 2 & -1 & \\ & & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 1 \end{bmatrix} \quad (16)$$

Ring graph との違いは境界条件である. すなわち, ring graph においては v_0 と v_{N-1} は辺で接続されていたのに対し, path graph では両端の頂点同士は接続されていない. このグラフの固有ベクトルは, 以下の離散コサイン変換 (DCT) の基底ベクトルと一致する.

$$c_{k,n} = \cos \left(\left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{k\pi}{N} \right)$$

DFT・DCT は様々な行列を対角化可能である. すなわち, 様々なグラフの GFT と成り得る. DFT・DCT の基底ベクトルがどのような行列を対角化可能か, は文献 [10, 11] に詳しい.

3.4 グラフサンプリング定理

シャノンのサンプリング定理 [12] は, 通常の信号処理において鍵となる理論である. グラフ信号処理においても, $\mathcal{V}$ の部分集合 $\mathcal{S}$ 上の信号 $\mathbf{f}_{\mathcal{S}}$ から, 信号全体 $\mathbf{f}$ を完全に復元するための理論やアルゴリズムである, グラフサンプリング定理が活発に研究されている.

*3 通常の信号処理において, DFT は信号の周期性を仮定しているので当然ではあるが…….

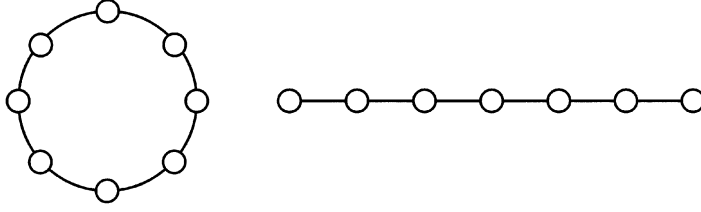


図3 単純なグラフ. (左) ring graph ($N = 8$), (右) path graph ($N = 7$).

グラフ周波数（グラフラプラシアン固有値）が ω より大きい GFT 係数を持たない信号は、 ω -bandlimited な信号と呼ばれる。また、全ての ω -bandlimited な信号が構成する空間は、Paley-Wiener 空間と呼ばれ、 $PW_\omega(\mathcal{G})$ で表される [13, 14]。明らかに $PW_\omega(\mathcal{G})$ は $\mathbb{R}^N$ の部分空間である。

ここで、頂点の部分集合を $\mathcal{S} \subset \mathcal{V}$ ，その補集合 $\mathcal{V} \setminus \mathcal{S}$ を $\mathcal{S}^c$ ， $L_2(\mathcal{S}^c)$ を $\mathcal{S}$ 上の信号値が全て 0 であるすべての信号が構成する空間とし、 $L_2(\mathcal{S}^c)$ 内の信号を ϕ とする。さらに、 $\omega(\phi)$ をグラフ信号 ϕ の帯域幅、すなわち最大の非零グラフ周波数の値とする。このとき、以下の定理が成り立つ。

定理 3.1（グラフ信号のサンプリング定理 [15]） 正規化グラフラプラシアン $\mathcal{L}$ で特徴付けられるグラフ $\mathcal{G}$ 上の ω -bandlimited な信号 $\mathbf{f} \in PW_\omega(\mathcal{G})$ が、 $\mathcal{S} \subset \mathcal{V}$ 上の信号から完全に復元できる必要十分条件は、 ω が以下を満たすことである。

$$\omega < \omega_c(\mathcal{S}) := \inf_{\phi \in L_2(\mathcal{S}^c)} \omega(\phi) \quad (17)$$

ここで $\omega_c(\mathcal{S})$ はカットオフ周波数と呼ばれる。

4 グラフ信号のフィルタリング

本項ではグラフ信号のフィルタリングについて述べる。通常の信号処理において、フィルタリングは時間領域での畳込み

$$f_{\text{out}}(i) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} h(i-k)f_{\text{in}}(k) \quad (18)$$

で定義される。ここで $\mathbf{h}$ はフィルタのインパルス応答である。式 (18) に相当する処理をグラフ信号で直接実現するためには、頂点領域において信号のシフトが必要となる。しかしながら、時間領域の信号においては信号のシフトが一意に決定できるのに対し、グラフ

信号ではシフトは必ずしも明確な処理にはならない。なぜなら、頂点に接続されている辺の数が各頂点によって異なる上に、辺の重みもそれぞれ異なるからである。

一方で、時間領域の（巡回）畳込みは、DFT 領域における積として表現できる。

$$F_{\text{out}}(i) = H(i)F_{\text{in}}(i) \quad (19)$$

ここで $H(\cdot)$, $F_s(\cdot)$, $s = \{\text{in}, \text{out}\}$ はそれぞれ $h(\cdot)$, $f_s(\cdot)$ の DFT 係数である。

通常の信号処理における DFT 領域でのフィルタリングと同様に、グラフ信号 $\mathbf{f}_{\text{in}}$ のグラフ周波数領域におけるフィルタリングは GFT 領域で以下のように表現される。

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_{\text{out}} &= \mathbf{H}\mathbf{f}_{\text{in}} \\ &= \underbrace{\mathbf{U}}_{\text{IGFT}} \underbrace{\begin{bmatrix} H(\lambda_0) & & & \\ & H(\lambda_1) & & \\ & & \ddots & \\ & & & H(\lambda_{N-1}) \end{bmatrix}}_{\text{Spectral filtering}} \underbrace{\mathbf{U}^T \mathbf{f}_{\text{in}}}_{\text{GFT}} \end{aligned} \quad (20)$$

ここで $H(\lambda)$ はグラフ周波数領域におけるフィルタカーネルである。すなわち、通常の信号処理における周波数領域でのフィルタリングと同様に、グラフ周波数領域において、信号とフィルタ応答の積（の IGFT）としてフィルタリングが定義できる。

通常の信号処理におけるインパルス応答 $h(n)$ の離散時間フーリエ変換 $H(\omega)$ と同様に、フィルタカーネル $H(\lambda)$ は連続関数であり、 $\lambda \in [0, \lambda_{\max}]$ における応答が通常のデジタルフィルタ $H(\omega)$ の周波数特性に対応する。しかしながら、通常の信号処理においては常に $\omega \in [-\pi, \pi]$ であるのに対し、グラフ信号処理の場合、グラフによって最大固有値 $\lambda_{\max}$ が変化するため注意が必要である（正規化グラフラプラシアンの場合、前述したように $\lambda_{\max} \leq 2$ となる）。また、通常の信号処理の場合、 $H(\omega)$ をサンプリングした $H(i)$ と $H(i+1)$ のサンプリング間隔は全て $\frac{2\pi}{N}$ の等間隔であるが、グラフ信号処理の場合、 λ_i と λ_{i+1} の間隔はグラフラプラシアンの固有値の分布によって決まる^{*4}。

4.1 頂点領域でのフィルタリングとグラフ周波数領域でのフィルタリングの関係

グラフ周波数領域でのフィルタリングは、頂点領域でのそれと深いつながりがある。頂点領域におけるフィルタリングは、着目頂点周辺の信号の線形結合として以下の式で表さ

^{*4} 例えば ring graph の場合、固有値は $\lambda_i = 2 - 2 \cos \frac{2i\pi}{N}$ となる [9]。

れる.

$$f_{\text{out}}(k) = c_{kk}f_{\text{in}}(k) + \sum_{j \in \tilde{\mathcal{N}}_k} c_{kj}f_{\text{in}}(j) \quad (21)$$

ここで c_{kj} は重みであり, $\tilde{\mathcal{N}}_k$ は頂点 k の周辺頂点 (必ずしも辺を共有していなくても良い) を表す. 一方, 式 (20) で表されるグラフ周波数領域におけるフィルタリングは, 式 (10) と (11) を利用し, 以下のようにも表現できる.

$$f_{\text{out}}(k) = \sum_{i=0}^{N-1} F_{\text{in}}(\lambda_i) H(\lambda_i) u_{\lambda_i}(k) \quad (22)$$

頂点領域とグラフ周波数領域のフィルタリングの関係を表すために, 式 (22) で用いられるグラフ周波数領域のフィルタが, λ の K 次多項式 $H(\lambda) = \sum_{p=0}^K \alpha_p \lambda^p$ だと仮定する. ここで式 (22) を以下のように書き換える.

$$\begin{aligned} f_{\text{out}}(k) &= \sum_{i=0}^{N-1} F_{\text{in}}(\lambda_i) H(\lambda_i) u_{\lambda_i}(k) \\ &= \sum_{l=0}^{N-1} f_{\text{in}}(l) \sum_{p=0}^K \alpha_p \sum_{i=0}^{N-1} \lambda_i^p u_{\lambda_i}^*(l) u_{\lambda_i}(k) \\ &= \sum_{l=0}^{N-1} f_{\text{in}}(l) \sum_{p=0}^K \alpha_p [\mathbf{L}^p]_{kl} \end{aligned} \quad (23)$$

結果として, グラフ周波数領域でのフィルタリングは, 式 (21) の係数 a_{kj} を以下のように設定した際の頂点領域のフィルタリングと一致する.

$$a_{kl} := \sum_{p=0}^K \alpha_p [\mathbf{L}^p]_{kl} \quad (24)$$

頂点 k と l 間の最短経路距離が p より大きいとき, $[\mathbf{L}^p]_{kl} = 0$ となることに注意すると, グラフ周波数領域のフィルタカーネルが K 次多項式で表されるとき, フィルタリングされた信号 $f_{\text{out}}(k)$ は頂点 k の周辺 K -hop の信号の線形結合となる. 一方, フィルタカーネルが多項式でない場合, 頂点領域の変換は大域的な変換, つまり, グラフの頂点上の全ての信号の線形結合として表される.

4.2 多項式近似によるフィルタリング

グラフ信号のフィルタリングは GFT 領域で定義されることを述べた. また, グラフ周波数領域のフィルタカーネルが多項式の場合, 頂点領域における周辺の信号の線形結合と

等価になることも示した。しかしながら、フィルタカーネル $H(\lambda)$ は必ずしも多項式とは限らない。特にグラフ信号のためのウェーブレット変換・フィルタバンク [6, 16–23] では、完全再構成条件等の様々な制約から、原理的にフィルタカーネルを多項式として表現できない場合も多い。これら多項式で表現できないフィルタに対し、実際に係数を計算するためには、グラフラプラシアン固有値分解が必要となる。しかしながら、特に大規模なグラフの場合、一般に固有値分解は非常に困難となる。

そこで必要となるのが（非多項式で表される）フィルタ応答の多項式近似である。特にグラフ信号処理では、shifted Chebyshev 多項式を用いてフィルタ応答の近似を計算することが多い [6]。次数 K の Chebyshev 多項式近似を用いて、グラフ信号 $\mathbf{f}_{\text{in}}$ のフィルタリングは以下で計算できる。

$$\tilde{\mathbf{f}}_{\text{out}} = \frac{1}{2}c_0\mathbf{f}_{\text{in}} + \sum_{p=1}^K c_p\bar{\mathbf{T}}_p(\mathbf{L})\mathbf{f}_{\text{in}} \quad (25)$$

ここで c_p は以下の Chebyshev 係数である。

$$c_p = \frac{2}{\pi} \int_0^\pi \cos(p\theta) H\left(\frac{\lambda_{\max}(\cos\theta + 1)}{2}\right) d\theta \quad (26)$$

また、 $\bar{\mathbf{T}}_p(\mathbf{L})$ は以下で表される、次数 p における shifted Chebyshev 多項式である。

$$\bar{\mathbf{T}}_p(\mathbf{L}) = \frac{1}{\lambda_{\max}}(\mathbf{L} - \mathbf{I}_N)\bar{\mathbf{T}}_{p-1}(\mathbf{L}) - \bar{\mathbf{T}}_{p-2}(\mathbf{L}) \quad (27)$$

多項式近似においてはミニマックス多項式がよく用いられるが、Chebyshev 多項式近似はミニマックス多項式の良い近似であることが知られている [24]。また、ミニマックス多項式の場合、その特性から近似区間全体にわたって一定の誤差が生じる。一方、Chebyshev 多項式近似においては、最大誤差はミニマックス近似より僅かに大きいものの、その誤差は最大誤差を生じる位置から離れるに従って急激に減衰する。そのため、グラフ信号処理でのフィルタリングにおいては Chebyshev 多項式近似が多用される。

ここで計算量を考えてみよう。一般にグラフはスパースである。すなわち、各頂点において、非零の重みで接続された辺の数は頂点数と比較して非常に少ない。この場合、 $\bar{\mathbf{T}}_p(\mathbf{L})\mathbf{f}$ を計算するためには、辺の数 $|\mathcal{E}|$ に比例した計算量が必要となる。結局 K 次多項式で近似した場合、計算量は $O(K|\mathcal{E}|)$ となる。また、Chebyshev 係数を乗じるために $O(N)$ の計算量が必要となるため、全体として $O(K|\mathcal{E}| + N)$ の計算量が必要となる。特に $|\mathcal{E}|$ が N に対し線形の場合、 $O(N)$ となる。一方、グラフを例えば QR アルゴリズムで固有値分解するためには $O(N^3)$ の計算量が必要である。このことから、特に頂点数が多い場合、多項式近似の効果は非常に大きい。

5 応用

5.1 グラフ信号のノイズ除去

通常の信号処理において、DFT 領域での積によるフィルタリング（時間領域での畳込み）の表現は、フィルタのインパルス応答が信号値に依存しないことを前提として存在していた。すなわち、信号値に依存してフィルタ係数が決定されるフィルタは、（一つのフィルタとして）周波数領域で表現することができなかった。一方、例えばコンピュータビジョンなどで広く用いられている平滑化フィルタの一種であるバイラテラルフィルタ [25] は、信号値（画素値）によってフィルタ係数が異なることが知られている。このような場合にも、グラフ信号処理の考え方を利用することで、信号値依存型のフィルタはグラフ周波数領域のフィルタとしてその特性が表現できる。

バイラテラルフィルタによる平滑化は以下で表される。

$$f_{\text{out}}(i) = \frac{1}{C_b} \sum_{j \in \mathcal{N}_i} \exp\left(-\frac{\|p_i - p_j\|^2}{2\sigma_s^2}\right) \times \exp\left(-\frac{\|f_{\text{in}}(i) - f_{\text{in}}(j)\|^2}{2\sigma_r^2}\right) f_{\text{in}}(j) \quad (28)$$

ここで p_k は座標、 σ_s および σ_r は座標位置と信号値に対するそれぞれのガウシアンフィルタの拡がりをコントロールするパラメータである。また、 C_b はスケーリング項

$$C_b = \sum_{j \in \mathcal{N}_i} \exp\left(-\frac{\|p_i - p_j\|^2}{2\sigma_s^2}\right) \exp\left(-\frac{\|f_{\text{in}}(i) - f_{\text{in}}(j)\|^2}{2\sigma_r^2}\right) \quad (29)$$

である。バイラテラルフィルタによる平滑化を行列表記すると、

$$\mathbf{f}_{\text{out}} = \mathbf{D}^{-1} \mathbf{W} \mathbf{f}_{\text{in}} \quad (30)$$

と表される。ここで

$$[\mathbf{W}]_{ij} = \exp\left(-\frac{\|p_i - p_j\|^2}{2\sigma_s^2}\right) \exp\left(-\frac{\|f_{\text{in}}(i) - f_{\text{in}}(j)\|^2}{2\sigma_r^2}\right) \quad (31)$$

$$[\mathbf{D}]_{ii} = \sum_{j=0}^{N-1} [\mathbf{W}]_{ij} \quad (32)$$

である。式 (30) を変形すると、

$$\begin{aligned}
 \mathbf{f}_{\text{out}} &= \mathbf{D}^{-1} \mathbf{W} \mathbf{f}_{\text{in}} \\
 &= \mathbf{D}^{-1/2} \mathbf{D}^{-1/2} \mathbf{W} \mathbf{D}^{-1/2} \mathbf{D}^{1/2} \mathbf{f}_{\text{in}} \\
 &= \mathbf{D}^{-1/2} \mathbf{D}^{-1/2} (\mathbf{I} - \mathbf{L}) \mathbf{D}^{-1/2} \mathbf{D}^{1/2} \mathbf{f}_{\text{in}} \\
 &= \mathbf{D}^{-1/2} (\mathbf{I} - \mathcal{L}) \mathbf{D}^{1/2} \mathbf{f}_{\text{in}} \\
 \mathbf{D}^{1/2} \mathbf{f}_{\text{out}} &= (\mathbf{I} - \mathcal{L}) \mathbf{D}^{1/2} \mathbf{f}_{\text{in}}
 \end{aligned} \tag{33}$$

となり、結局バイラテラルフィルタは以下のグラフフィルタと等価になる [26].

$$\hat{\mathbf{f}}_{\text{out}} = (\mathbf{I} - \mathcal{L}) \hat{\mathbf{f}}_{\text{in}} = \mathbf{U}(\mathbf{I} - \mathbf{A}) \mathbf{U}^T \hat{\mathbf{f}} \tag{34}$$

ここで $\hat{\mathbf{f}}$ は度数で正規化された入力信号 $\hat{\mathbf{f}} = \mathbf{D}^{1/2} \mathbf{f}$ である。つまり、バイラテラルフィルタはフィルタ係数を辺の重みとして持つグラフ上の信号に対する、線形に減衰するグラフ低域通過フィルタ $H(\lambda) = 1 - \lambda$ によるフィルタリングとして表現できることが分かる。

また、小貫らは、グラフ信号のノイズ除去のためのグラフトライラテラルフィルタおよびパラメータ最適化手法を提案した [27]。トライラテラルフィルタはバイラテラルフィルタと比較し、高勾配領域でも強い平滑化性能を持つことが知られており、バイラテラルフィルタと同様にグラフフィルタとして表現可能である。ノイズ除去の正則化パラメータは、近似的に平均二乗誤差を最小化するように自動的に決定される。図 4 に、多様体 *Swiss Roll* 上の信号をグラフ信号とみなし、ノイズ除去を行った結果を示す。図より、グラフバイラテラルフィルタではノイズ除去性能が限定的である一方、グラフトライラテラルフィルタでは、信号値が大きく変化する境界は保存しながらも良好なノイズ除去性能が得られていることが分かる。

グラフ信号処理においては、信号の構造とフィルタカーネルは別々に設定できるから、バイラテラルフィルタ（やトライラテラルフィルタ）のカーネル $H(\lambda)$ も応用によって異なるフィルタ特性を持ちうる。Gadde らは、以下の評価関数を最小化するようなグラフバイラテラルフィルタのカーネルを提案した [26].

$$\arg \min_{\mathbf{f}} \{ \|\mathbf{f} - \mathbf{f}_{\text{noisy}}\|_2^2 + \rho \|h_{\text{reg}}(\mathcal{L}) \mathbf{f}\|_2^2 \} \tag{35}$$

ここで $\mathbf{f}_{\text{noisy}} = \mathbf{f} + \mathbf{e}$ 、 $\mathbf{e}$ は i.i.d. の雑音信号である。また、 $h_{\text{reg}}(\mathcal{L})$ は正則化項であり、任意のグラフ高域通過フィルタである。この評価関数を最小化する解は以下となる。

$$\mathbf{f}_{\rho} = \mathbf{U}(\mathbf{I} + \rho h_{\text{reg}}^2(\mathcal{L}))^{-1} \mathbf{U}^T \mathbf{f}_{\text{noisy}} \tag{36}$$

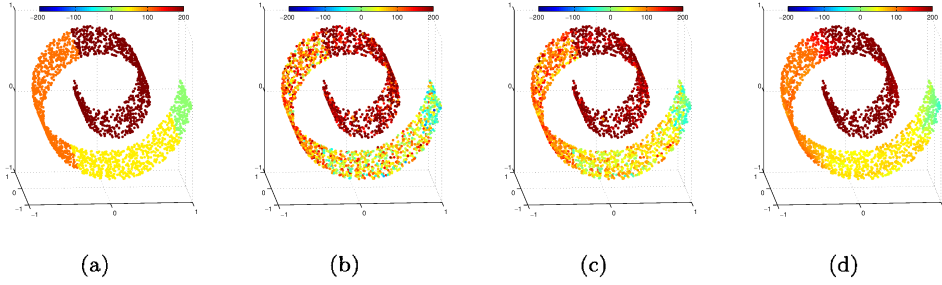


図4 グラフ信号のノイズ除去. (a) 原信号, (b) 劣化信号 (白色ガウス雑音, $\sigma = 50$), (c) グラフバイラテラルフィルタ, (d) グラフトライラテラルフィルタ.

ここで $H_\rho(\mathcal{L}) = (\mathbf{I} + \rho h_{\text{reg}}^2(\mathcal{L}))^{-1}$ がグラフ周波数領域のグラフフィルタであり, $h_{\text{reg}}(\mathcal{L})$ が高域通過フィルタであることに注意すると, $H_\rho(\mathcal{L})$ はグラフ周波数領域における低域通過フィルタとなる.

5.2 グラフサンプリング定理を利用したセンサ配置問題

センサ配置問題 [28–30] は理論的に興味深い研究対象であるのみにとどまらず, スマートグリッドを含む電力網, ロボティクス, 目標追跡, 化学プラント制御, 無線ネットワークなど様々な応用分野がある. 崎山らは, センサ配置問題をグラフ信号処理におけるカットオフ周波数最大化として定式化し, 従来のセンサ配置問題で用いられる評価関数との関係性を一部明らかにした [31].

センサ配置問題に対し, グラフサンプリング定理を利用して選択されたセンサ S^* は以下で表される.

$$S^* = \arg \max_S \omega_c(S) \quad \text{subject to } |S| = F \quad (37)$$

ここで F はセンサの個数である. グラフ信号処理において, 式 (37) の評価関数を最適化する手法が複数提案されている [15, 32, 33].

従来手法である, エントロピーを基準として選択されたセンサ [28] は,

$$S^* = \arg \max_{S \subset \mathcal{V}: |S|=F} H(\mathbf{f}_S) \quad (38)$$

で, 相互情報量を基準として選択されたセンサ [29] は,

$$S^* = \arg \max_{S \subset \mathcal{V}: |S|=F} H(\mathbf{f}_{S^c}) - H(\mathbf{f}_{S^c} | \mathbf{f}_S) \quad (39)$$

で表される。ここで $H(\cdot)$ はエントロピーである。

上記の評価関数の最適化は組合せ最適化となるため、通常はヒューリスティックな手法が用いられる。すなわち、選択済みのセンサ S を空集合として初期化し、各繰り返しのにおいて、上記の評価関数を最大化するようなセンサ y^* を1個ずつ S に追加していく。

崎山らは、式 (38), (39) を基準としたセンサ選択がグラフ信号処理における頂点領域の手法として表現可能であるのに対し、式 (37) を基準としたセンサ選択はグラフ周波数領域の手法であることを明らかにした [31]。

エントロピーを基準とした評価関数である式 (38) を用いた場合、 y^* は以下のように選択される。

$$y^* \leftarrow \arg \max_{y \in S^c} \frac{1}{[\mathbf{L}^y]_{yy} + \delta^y} \quad (40)$$

ここで $\mathbf{L}^y$ は頂点 $S \cup y$ および原グラフに含まれる $S \cup y$ 間の辺からなるグラフのグラフラプリアンである。エントロピー基準によるセンサ選択では、既選択のセンサからの度数が最小の（すなわち、関係が最も弱い）センサが選択されることになる。

さらに、相互情報量基準（式 (39)）の場合は、

$$y^* \leftarrow \arg \max_{y \in S^c} \frac{[\bar{\mathbf{L}}^y]_{yy} + \bar{\delta}^y}{[\mathbf{L}^y]_{yy} + \delta^y} \quad (41)$$

となる。ここで $\bar{\mathbf{L}}^y$ は頂点 S^c と、 S^c 間の辺からなるグラフから構成されたグラフラプリアンである。相互情報量を基準としたセンサ配置では、既選択のセンサと最も関係が弱く、未選択のセンサと最も関係が強いセンサが選ばれる。

図 5 に、センサ配置問題の計算時間と実際に選択されたセンサ位置を示した。図より、エントロピーとグラフサンプリング定理に基づく手法は、相互情報量に基づく手法と比較して高速にセンサ位置を選択可能であることが分かる。また、エントロピー基準によって決定されたセンサ位置は、センサ位置が領域の境界上に存在する一方、相互情報量基準およびグラフカットオフ周波数基準では、センサ位置がより均一に分布していることが分かる。

5.3 その他の応用

上で紹介した応用の他にも、グラフ信号処理は幅広い分野で応用が発見されている。例えば脳波信号処理においては、グラフ周波数領域における制約を用いることで脳波の識別精度が向上することが示されている [34, 35]。グラフサンプリング定理の応用では、センサ配置問題の他に半教師あり学習に対しても応用が行われており、手書き文字の識別に対

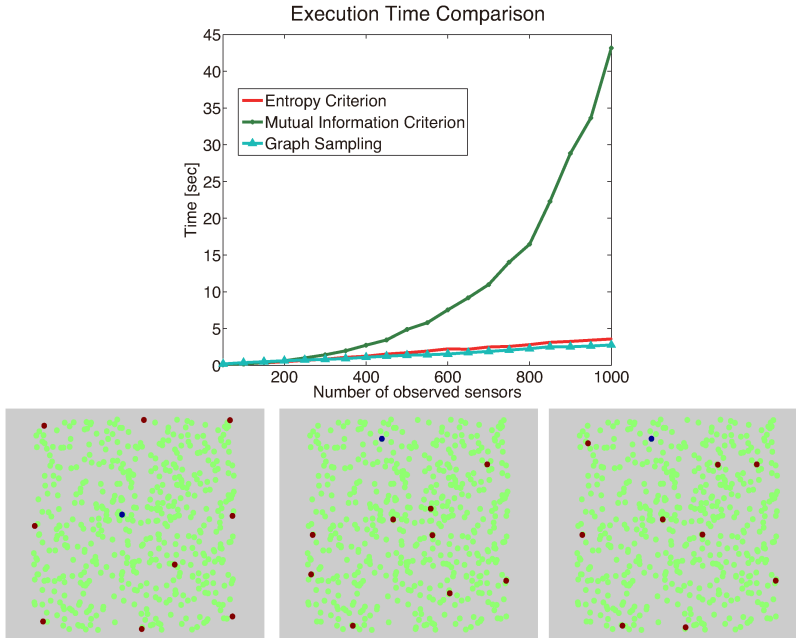


図5 センサ配置問題。上：各手法による計算時間の比較。横軸はセンサ候補数 $|V|$ を表しており、 $|S| = |V|/10$ 個のセンサを選択するための計算時間を比較している。下：500 個のセンサ候補から選択された 10 個のセンサ。左からエントロピー基準、相互情報基準、グラフカットオフ周波数基準。

して性能の向上が見られる [36]。さらに、ネットワークの異常検知などにもグラフ信号処理は用いられ、一定の成果を挙げている [37]。

6 おわりに

本稿では、信号処理分野での hot topic であるグラフ信号処理に関して、その基礎的事項といくつかの応用に関して概説を行った。本稿に含まれていない理論的事項、応用、最近の発展に関しては [2, 3] を参照されたい。

謝辞

本研究の一部は文部科学省科学技術人材育成費補助金「テニユアトラック普及・定着事業」の支援を受けて行われた。

参考文献

- [1] *IEEE Signal Process. Mag.*, *Special Section on Signal Processing for Big Data*, vol. 5, Sep. 2014.
- [2] D. I. Shuman, S. K. Narang, P. Frossard, A. Ortega, and P. Vandergheynst, “The emerging field of signal processing on graphs: Extending high-dimensional data analysis to networks and other irregular domains,” *IEEE Signal Process. Mag.*, vol. 30, no. 3, pp. 83–98, 2013.
- [3] 田中雄一, “グラフ信号処理のすゝめ,” *Fundamentals Review*, vol. 8, no. 1, pp. 15–29, 2014.
- [4] F. R. K. Chung, *Spectral Graph Theory (CBMS Regional Conference Series in Mathematics, No. 92)*. American Mathematical Society, 1997.
- [5] D. Spielman, “Spectral graph theory,” 2012. [Online]. Available: <http://www.cs.yale.edu/homes/spielman/561/>
- [6] D. K. Hammond, P. Vandergheynst, and R. Gribonval, “Wavelets on graphs via spectral graph theory,” *Applied and Computational Harmonic Analysis*, vol. 30, no. 2, pp. 129–150, 2011. [Online]. Available: <http://wiki.epfl.ch/sgwt>
- [7] G. Taubin, “A signal processing approach to fair surface design,” in *Proc. SIGGRAPH’95*, 1995, pp. 351–358.
- [8] G. Taubin, T. Zhang, and G. H. Golub, “Optimal surface smoothing as filter design,” in *Proc. ECCV’96*, 1996, pp. 283–292.
- [9] G. Strang, “The discrete cosine transform,” *SIAM Rev.*, vol. 41, no. 1, pp. 135–147, 1999.
- [10] V. Sánchez, P. Garcia, A. M. Peinado, J. C. Segura, and A. J. Rubio, “Diagonalizing properties of the discrete cosine transforms,” *IEEE Trans. Signal Process.*, vol. 43, no. 11, pp. 2631–2641, 1995.
- [11] P. C. Hansen, J. G. Nagy, and D. P. O’leary, *Deblurring images: matrices, spectra, and filtering*. SIAM, 2006.
- [12] C. E. Shannon, “Communication in the presence of noise,” *Proc. Inst. Radio. Eng.*, vol. 37, no. 1, pp. 10–21, 1949.
- [13] I. Pesenson, “Sampling in Paley-Wiener spaces on combinatorial graphs,” *Transactions of the American Mathematical Society*, vol. 360, no. 10, pp. 5603–5627,

2008.

- [14] I. Pesenson and M. Pesenson, "Sampling, filtering and sparse approximations on combinatorial graphs," *Journal of Fourier Analysis and Applications*, vol. 16, no. 6, pp. 921–942, 2010.
- [15] A. Anis, A. Gadde, and A. Ortega, "Towards a sampling theorem for signals on arbitrary graphs," in *Proc. ICASSP'14*, 2014, pp. 3864–3868.
- [16] S. K. Narang and A. Ortega, "Perfect reconstruction two-channel wavelet filter banks for graph structured data," *IEEE Trans. Signal Process.*, vol. 60, no. 6, pp. 2786–2799, 2012. [Online]. Available: http://biron.usc.edu/wiki/index.php/Graph_Filterbanks
- [17] —, "Compact support biorthogonal wavelet filterbanks for arbitrary undirected graphs," *IEEE Trans. Signal Process.*, vol. 61, pp. 4673–4685, 2013. [Online]. Available: http://biron.usc.edu/wiki/index.php/Graph_Filterbanks
- [18] N. Leonardi and D. Van De Ville, "Tight wavelet frames on multislice graphs," *IEEE Trans. Signal Process.*, vol. 16, pp. 3357–3367, 2013.
- [19] Y. Tanaka and A. Sakiyama, " M -channel oversampled perfect reconstruction filter banks for graph signals," in *Proc. ICASSP'14*, 2014, to be presented.
- [20] A. Sakiyama and Y. Tanaka, "Oversampled graph Laplacian matrix for graph filter banks," *IEEE Trans. Signal Process.*, vol. 62, no. 24, pp. 6425–6437, 2014.
- [21] —, "Critically sampled graph wavelets converted from linear-phase biorthogonal wavelets," in *Proc. ICASSP'15*, 2015, pp. 4130–4134.
- [22] D. I. Shuman, C. Wiesmeyr, N. Holighaus, and P. Vandergheynst, "Spectrum-adapted tight graph wavelet and vertex-frequency frames," *IEEE Trans. Signal Process.*, vol. 63, no. 16, pp. 4223–4235, 2015. [Online]. Available: <http://documents.epfl.ch/users/s/sh/shuman/www/publications.html>
- [23] D. Tay, Y. Tanaka, and A. Sakiyama, "Near orthogonal oversampled graph filter banks," *IEEE Signal Process. Lett.*, vol. 23, no. 2, pp. 277–281, 2015.
- [24] G. M. Phillips, *Interpolation and Approximation by Polynomials*. New York: Springer, 2003.
- [25] C. Tomasi and R. Manduchi, "Bilateral filtering for gray and color images," in *Proc. ICCV'98*, 1998, pp. 839–846.
- [26] A. Gadde, S. K. Narang, and A. Ortega, "Bilateral filter: graph spectral interpretation and extensions," in *Proc. ICIP'13*, 2013, pp. 1222–1226.

- [27] M. Onuki, S. Ono, M. Yamagishi, and Y. Tanaka, "Graph signal denoising via tri-lateral filter on graph spectral domain," *IEEE Trans. Signal Inf. Process. Netw.*, accepted.
- [28] M. C. Shewry and H. P. Wynn, "Maximum entropy sampling," *Journal of applied statistics*, vol. 14, no. 2, pp. 165–170, 1987.
- [29] A. Krause, A. Singh, and C. Guestrin, "Near-optimal sensor placements in gaussian processes: Theory, efficient algorithms and empirical studies," *Journal of Machine Learning Research*, vol. 9, pp. 235–284, 2008.
- [30] S. Joshi and S. Boyd, "Sensor selection via convex optimization," *IEEE Trans. Signal Process.*, vol. 57, no. 2, pp. 451–462, 2009.
- [31] A. Sakiyama, Y. Tanaka, T. Tanaka, and A. Ortega, "Efficient sensor position selection using graph signal sampling theory," in *Proc. ICASSP'16*, 2016.
- [32] S. Chen, R. Varma, A. Sandryhaila, and J. Kovačević, "Discrete signal processing on graphs: Sampling theory," *IEEE Trans. Signal Process.*, vol. 63, no. 24, pp. 6510–6523, 2015.
- [33] H. Shomorony and A. S. Avestimehr, "Sampling large data on graphs," in *Proc. GlobalSIP'14*, 2014, pp. 933–936.
- [34] H. Higashi, T. Tanaka, and Y. Tanaka, "Smoothing of spatial filter by graph fourier transform for eeg signals," in *Proc. APSIPA ASC'14*, 2014, pp. 1–8.
- [35] H. Higashi, T. Rutkowski, T. Tanaka, and Y. Tanaka, "Subspace-constrained multilinear discriminant analysis for erp-based brain computer interface classification," in *Proc. APSIPA ASC'15*, 2015, pp. 1–8.
- [36] A. Gadde, A. Anis, and A. Ortega, "Active semi-supervised learning using sampling theory for graph signals," in *Proc. KDD'14*, 2014, pp. 492–501.
- [37] H. E. Egilmez and A. Ortega, "Spectral anomaly detection using graph-based filtering for wireless sensor networks," in *Proc. ICASSP'14*, 2014, pp. 1085–1089.