論　文

グラフ・ネットワーク上での応用調和解析

斎藤 直樹

1　はじめに

近年，各種センサーネットワーク技術の発達やソーシャル・ネットワークのインフラストラクチャの充実により，複雑なネットワーク上で観測・測定されたデータの解析が急務となっている．例としては，拡散テンソル MRI 画像を基にした脳内の神経結合状態の推定，血管系・河川系・道路網などにおける流量の測定，ソーシャルネットワーク上のユーザー間の情報伝達のモニタリング等が挙げられる[44, 第 3 章].

一方で，フーリエ解析やウェーブレット解析に代表される調和解析の手法は，矩形や球などのユークリッド空間内の標準的な形状の領域やその離散化である規則的な格子上で観測・測定されたデータの解析にとって極めて重要な役割を果して来た．従って，これらの調和解析の手法をグラフやネットワーク上に拡張することが急務である．

2　グラフ・ラプラシアンの基礎

この節では，グラフ上での応用調和解析にとって基本的な役割を果すグラフ・ラプラシアンについて概説する．詳しくは，浦川による日本語での優れた文献[42][43]及び標準的な[7][25]等を参照されたい．

2.1　グラフ理論の基礎的用語・定義

まず，グラフ・ラプラシアンの解説のために必要なグラフ理論における基礎的用語を定義しておく．**グラフ** G とは，**頂点**の集合 $V=V(G)=\{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$ とそれらを結合する**辺**の集合 $E=E(G)=\{e_1, e_2, \ldots, e_m\}$ からなる．本稿では**有限グラフ**，即ち n, m が有限の場合のみを扱う．以下簡単のため，頂点 v_i をその添字 i で表記する．グラフ G の**部分グラフ** H とは，その頂点と辺が $V(H)\subseteq V(G)$ と $E(H)\subseteq E(G)$ を満たすようなグラフである．頂点とそれ自身を結合する辺を**ループ**，2 つ以上の辺が頂点対を結合している場合を**多重辺**と呼ぶ．ループや多重辺を含んだグラフを**多重グラフ**，そうでないグラフを**単純グラフ**と呼ぶ．

相異なる頂点対 $i, j\in V$ を結合する辺 $e\in E$ が i から j への方向を持つ場合，これを $e=(i, j)$ と書き，**有向辺**または**弧**と呼ぶ．この場合 i, j はそれぞれ辺 e の**始点**と**終点**と呼ばれる．もし辺 e が頂点対 i, j を結ぶ**無向辺**の場合は，これを $e=ij$ と書き，i, j は辺 e の**端点**と呼ばれる．辺 e が無向辺 $e=ij$ ならば，i, j は**隣接**していると言い，

［**筆者紹介**］

さいとう なおき．1982 年東京大学工学部計数工学科卒業．1984 年同大学大学院工学系研究科計数工学専攻修士課程修了．1984–86 年日本シュルンベルジェ(株)．1986–97 年シュルンベルジェ-ドル研究所(米・コネティカット州)．1994 年イェール大学大学院数学科・応用数学博士課程修了．Ph. D. 1997–2001 年カリフォルニア大学デイヴィス校数学科准教授．2001 年同校教授．現在に至る．2007–2012 年同校大学院応用数学専門課程主任．計算調和解析とその応用に関する研究に従事．日本応用数理学会，SIAM, IMS 会員．IEEE Senior Member.

$i \sim j$ と書く．一方，辺 e が有向辺 $e=(i, j)$ の場合は，i は j に隣接しているが，j は i に隣接していない．この場合を $i \Rightarrow j$ と表す．すべての辺が有向辺であるグラフを**有向グラフ**と呼ぶ．**無向グラフ**とはその辺がすべて無向辺であるグラフである．無向辺と有向辺を同時にもつようなグラフは**混合グラフ**と呼ばれる．

また，各辺 $e \in E(G)$ が**重み** w_e（通常 $w_e>0$）を持つようなグラフ G を**重みつきグラフ**という．グラフ G のすべての辺の重みが一定（例えば $w_e \equiv 1$）であると見做される時，G は**重みなしグラフ**と呼ばれる．重みなしグラフの場合は，そのグラフのトポロジー即ちグラフの構造や頂点の辺による繋がり方が，主な考察の対象となる．尚，辺の重みは問題によって，事前に設定されている場合とユーザーが各頂点に付随するデータから重みを設定する必要がある場合とがある．

グラフ G の頂点 i から頂点 j への**経路**とは，i から始まり j で終るような隣接した頂点系列からなる G の部分グラフである．頂点 i から始まり i で終るループでない経路のことを**閉路**という．任意の頂点対に対し，それらを結ぶ経路があるようなグラフを**連結グラフ**という．有向グラフでこの条件を満す場合は**強連結グラフ**と呼ばれる．連結グラフで閉路がないものを**木**と呼び，G の代わりに T で表すことが多い．任意の T に対し，$|E(T)| = |V(T)|-1$ という関係が成り立つ．ここで $|\cdot|$ はその集合の基数を表す．木における頂点で，他の唯一つの頂点と結合しているものを**葉**と呼ぶ．

経路 $P \subset G$ の**長さ**（あるいは**コスト**）$l(P)$ は P に属する辺の重みの総和，即ち $l(P) := \sum_{e \in E(P)} w_e$ で定義される．グラフ G の頂点 i から頂点 j へのすべての経路の集合を $\mathcal{P}_{ij}$ とする．この時，i から j への**グラフ距離** $d(i, j)$ は $d(i, j) := \inf_{P \in \mathcal{P}_{ij}} l(P)$ と定義される．無向グラフの場合，明らかに任意の頂点対に対し $d(i, j)=d(j, i)$ が成り立つが，有向グラフの場合はそのような対称性は一般には成り立たない．

本稿では簡単のため，与えられたグラフ G としては，有限・単純・連結・無向グラフのみを扱う．

2.2　グラフ理論に現れる行列，主にグラフ・ラプラシアンについて

ここでは与えられたグラフ G に関連した幾つかの行列について述べる．G の（重みつき）**隣接行列**は G の辺の重みからなる行列で $W(G)=(w_{ij}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ で定義される．ここで $ij \notin E(G)$ の時，$w_{ij}=0$ である．G は無向グラフと仮定しているので，明らかに $W(G)$ は対称行列である．頂点 i の（重みつき）**次数**は $d(i)$ あるいは d_i と書き，$d(i) := \sum_{j=1}^{n} w_{ij}$，即ち $W(G)$ の第 i 行和で定義される．対角行列 $\mathrm{diag}(d_1, \ldots, d_n)$ をグラフ G の**次数行列**といい，$D(G)$ と表す．

グラフ上での応用調和解析の第一歩として，以下のように定義された**グラフ・ラプラシアン**（単に**ラプラシアン**あるいは**ラプラス行列**とも呼ばれる）の固有値と固有ベクトルを計算・考察することが重要である：

$$L(G) := D(G) - W(G). \tag{1}$$

解析学における通常の $\mathbb{R}^p$ 上のラプラス作用素を $\Delta := \left(\frac{\partial}{\partial x_1}\right)^2 + \cdots + \left(\frac{\partial}{\partial x_p}\right)^2$ とすると，上記のグラフ・ラプラシアン L はグラフにおける $-\Delta$ の有限差分近似と考えられることに注意しておく．グラフ・ラプラシアンの固有値と固有ベクトルをグラフ上のデータ解析に使う主な理由は以下の二点である：1）グラフの本質的な幾何学的・トポロジカルな情報をその固有値から抽出することができる（例えば，連結性，連結成分の個数，グラフの直径，頂点間の平均距離，Cheeger 定数等[7][25][42]）; 2）その固有ベクトルの集合は，頂点上で測定されたデータの解析に使用できる正規直交基底を成すばかりでなく，グラフ分割のためにも重要な情報を供給する[4][11]．

(1)式の他，次のようなヴァリエーションもよく使われている[7][40][42]：即ち，**推移ラプラシアン**

$$L_{\mathrm{rw}}(G) := D^{-1}(G) L(G) = I - D^{-1}(G) W(G)$$

図 1　経路 P_n

(2)

と**対称正規化ラプラシアン**

$$
\begin{aligned}
L_{\mathrm{sym}}(G) &:= D^{-\frac{1}{2}}(G)L(G)D^{-\frac{1}{2}}(G) \\
&= I - D^{-\frac{1}{2}}(G)W(G)D^{-\frac{1}{2}}(G) \quad (3)
\end{aligned}
$$

である．これらの 3 つのグラフ・ラプラシアンとそれらの固有値・固有ベクトルの関係の詳細については，[40]を参照されたい．どのヴァージョンのグラフ・ラプラシアンを使うかは，問題に依存する．例えば，von Luxburg はグラフの分割には L_{rw}(の固有ベクトル)を使うことを勧めている[40].

$L(G)$ の固有値系列を，$\lambda_0 \leq \lambda_1 \leq \cdots \leq \lambda_{n-1}$，対応する固有ベクトルを $\phi_0, \phi_1, \ldots, \phi_{n-1}$ としよう．ここで，基本的なグラフ・ラプラシアンの固有値の特性を挙げておく：すべての固有値は非負である；最小固有値は 0 即ち，$\lambda_0=0$; この 0 固有値の重複度は G の連結成分の個数と一致する．更に，最小の正の固有値は G の**代数的連結度**(algebraic connectivity)と呼ばれ，グラフの連結の強さの定量的評価として使われている[12][13][25]．またそれに対応する固有ベクトルは **Fiedler ベクトル**と呼ばれ，スペクトラル・クラスタリングやグラフ分割に重要な役割を果す[14][40].

さてここで，簡単ではあるが重要な例を挙げたい．それは**図 1** に示すような n 個の頂点からなる重みなしの経路 P_n のグラフ・ラプラシアンの固有値・固有ベクトルである．この例は我々の目指すグラフ上のマルチ・スケール基底辞書を構築するのに重要な示唆を与えてくれる．グラフ・ラプラシアンはこの場合，以下のような行列となる．[27]で指摘したように，このグラフ・ラプラシアンの固有ベクトルは JPEG 画像圧縮標準で採用されている**離散コサイン変換**いわゆる DCT Type II の基底ベクトル[38]に他ならない．実際，$k=0, 1, \ldots, n-1$; $x=1, \ldots, n$ に対し，

$$
\underbrace{\begin{bmatrix}
1 & -1 & & & \\
-1 & 2 & -1 & & \\
 & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & -1 & 2 & -1 \\
 & & & -1 & 1
\end{bmatrix}}_{L(P_n)}
=
\underbrace{\begin{bmatrix}
1 & & & & \\
 & 2 & & & \\
 & & \ddots & & \\
 & & & 2 & \\
 & & & & 1
\end{bmatrix}}_{D(P_n)}
-
\underbrace{\begin{bmatrix}
0 & 1 & & & \\
1 & 0 & 1 & & \\
 & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & 1 & 0 & 1 \\
 & & & 1 & 0
\end{bmatrix}}_{W(P_n)}
$$

$$
\lambda_k = 4\sin^2\left(\frac{\pi k}{2n}\right);
$$

$$
\phi_k(x) = \sqrt{\frac{2}{n}}\cos\left(\frac{\pi k}{n}\left(x-\frac{1}{2}\right)\right), \quad (4)
$$

ここで，$\phi_k=(\phi_k(1), \cdots, \phi_k(n))^{\top} \in \mathbb{R}^n$ は固有値 λ_k に対応する固有ベクトルである．これから分るように，$L(P_n)$ の固有ベクトルは単純かつ大域的な振動であり，ウェーブレット基底関数のような局所性はない．また，n 個の頂点からなる重みなしの閉路を C_n とすると，$L(C_n)$ の固有ベクトルは正しく n 点からなる離散フーリエ変換の基底ベクトルと一致する．更に C_n(あるいは P_n)の直積からなる規則的な格子グラフの場合は，そのグラフ・ラプラシアンの固有ベクトルが離散フーリエ(あるいはコサイン)変換の基底ベクトルの直積と一致する．

3　大局的なグラフ・ラプラシアン固有ベクトルの問題点

従来の規則的な格子上や $\mathbb{R}^p$ 上の矩形領域における古典的ウェーブレット理論にとっては，こうした領域でのフーリエ解析が重要な役割を果たして来た[20, Chap. 2]．何故ならば，それは周波数領域の分割に基づく Littlewood-Paley 理論を援用して構築されているからである．一方，前節の最後に述べたような C_n(あるいは P_n)のグラフ・ラ

プラシアンの固有ベクトル系と離散フーリエ(あるいはコサイン)基底が一致する事実を考えると，一般のグラフやネットワーク上でのウェーブレット理論を，そのグラフ・ラプラシアンの固有値・固有ベクトルに基づいて構築する傾向があるのも頷ける[17].

しかしながら，グラフ上のウェーブレット理論構築にとって，そのような固有ベクトルをフーリエ解析における(正弦・余弦などの)基底関数の直接の代用と見做すことには，少なくとも2つの問題がある．第一に，グラフ・ラプラシアンの固有ベクトルは，そのグラフの形状・トポロジーに強く依存するため，実際に計算してみるまで，その本質的なサポート(台)を同定するのは難しいことである．実際，[35][27]に示した神経細胞の樹状突起のような枝分かれしたグラフや，(その構造は単純な閉路 C_n や経路 P_n であっても)辺の重みが一様でないグラフなどでは，固有ベクトルの**局在化**という現象が起る．こうした状況を考えると，ユーザーが基底ベクトルの局在化をある程度コントロールできるような手法が望ましいと考えられる．実際，この観点が，第5節に述べる再帰的グラフ分割に基づいた基底辞書の構築に繋がったのである．

グラフ・ラプラシアンの固有ベクトルをフーリエ解析における基底関数の直接の代用と見做すことの第二の問題点は，対応する固有値と「周波数」との微妙で込み入った関係である．単純な閉路 C_n や経路 P_n に対しては，(4)式に示したように，固有値は対応する固有ベクトルの周波数の単純増加関数となる．従って，C_n や P_n 上では，固有値の分布領域を適切に分割し，各分割領域に対応する固有ベクトルを組合せるという，いわゆる Littlewood-Paley 理論を援用した古典的なウェーブレット理論[20, Chap. 2]を構築することが可能になる．ところが，与えられたグラフが少しでも C_n や P_n より複雑になると状況は一変する．固有値が対応する固有ベクトルの周波数の単純増加関数とは見做せなくなるのである．例えば，$\mathbb{R}^2$ の横に細長い矩形上の格子 $P_m\times P_n (m>n)$ を考えよう．この場合のグラフ・ラプラシアンの固有対は，(4)式を使うと，以下のように求められる：

$$\lambda_k=4\left[\sin^2\left(\frac{\pi k_x}{2m}\right)+\sin^2\left(\frac{\pi k_y}{2n}\right)\right],$$

$$\phi_k(x, y)=\frac{2}{\sqrt{mn}}\cos\left(\frac{\pi k_x}{m}\left(x-\frac{1}{2}\right)\right)\cdot\cos\left(\frac{\pi k_y}{n}\left(y-\frac{1}{2}\right)\right),$$

但し，$k=0, \ldots, mn-1, k_x=0, \ldots, m-1, k_y=0, \ldots, n-1, x=1, \ldots, m, y=1, \ldots, n$, である．ここで固有値 λ_k は非減少順に並べられていると仮定しよう．その場合，明らかに最小固有値は，$\lambda_0=\lambda_{(0,0)}=0$ であり，次の固有値 λ_1 は，$\pi/2m<\pi/2n$ から $\lambda_{(1,0)}=4\sin^2(\pi/2m)$ であることが分る．さて，λ_2 はどうなるであろうか．このような簡単な場合でも，m と n の大小関係によって幾つかの可能性が出て来るのである．例えば，$m>2n$ の時，$\lambda_2=\lambda_{(2,0)}=4\sin^2(\pi/m)$ となるが，$n<m<2n$ ならば，$\lambda_2=\lambda_{(0,1)}=4\sin^2(\pi/2n)$ となる．これからも分るように，k と (k_x, k_y) の関係はノントリビアルなのである．特に，ある自然数 K に対し $Kn<m<(K+1)n$ ならば，$\lambda_k=\lambda_{(k,0)}=4\sin^2(k\pi/2m), k=0, \ldots, K$ である一方，$\lambda_{K+1}=\lambda_{(0,1)}=4\sin^2(\pi/2n), \lambda_{K+2}=\lambda_{(K+1,0)}=4\sin^2((K+1)\pi/2m)$ となる．即ち，全く振動の様子が違う固有ベクトルに対応する固有値が固有値列に突然混入して来るのである．従って，一般のグラフの場合，そのグラフ・ラプラシアンの固有値列 $\{\lambda_k\}_{k=0,1,\ldots}$ をその領域(の次元)に対応した物理的に意味のあるように分割するのは極めて困難であり，それが Littlewood-Paley 理論をグラフ上に適用するための最大の難関となる．実際，一般のグラフ上では，「周波数」という概念は明確に定義できない．従って，Hammond, Vandergheynst, Gribonval によるスペクトラル・グラフ・ウェーブレット変換(SGWT)[17]のような Littlewood-Paley 理論に依存したグラフ上のウェーブレット変換は，予期せぬ問題に遭遇する可能性が高くなる．

それでは，Littlewood-Paley 理論に直接依存しないウェーブレット構成法はどうであろうか．Coifman と Maggioni の拡散ウェーブレット(Diffusion Wavelets)[9]はグラフ上のランダム・ウォークを用いたボトムアップのアプローチで，すでに Bremer 等により，より適応的なウェーブレット・パケット基底辞書に一般化されている[5]．Sharon と Shkolnisky は，部分グラフ上でのラプラシアン固有ベクトルを用いて Haar ウェーブレット基底を含む多重ウェーブレット基底を構成した[36]．古典的なリフティング法や平均・内挿ウェーブレットもグラフ上に一般化されている[21][28][29]．更に，グラフやネットワーク上での Haar ウェーブレット的な変換も幾つか提案されている[26][22][15][8][39]．

第 5 節で解説するように，筆者とそのグループも，グラフ・ネットワーク上で観測された信号の解析のための基底辞書を提案・開発して来た．これらのグラフ・ネットワーク用の基底辞書は，前掲の様々なグラフ上のウェーブレット的変換と相補的なものと考えられる．

4 通常のユークリッド空間における マルチ・スケール基底辞書

この節では，ウェーブレット・パケット変換や局所コサイン変換に代表される，通常のユークリッド空間内の格子上で定義された**マルチ・スケール基底辞書**及びそのような基底辞書からの**最適基底選択**について解説する．詳しくは，[10][41][30][33][34][24]及び[23, Chap. 8], [20, Chap. 6, 7]等を参照されたい．

本稿の**基底辞書**とは，**図 2** に示すように，二分木構造に配列された $\mathbb{R}^n =: \Omega_0^0$ の部分空間の基底ベクトルの集合で，各部分空間の基底ベクトルはその部分空間に特有の空間-波数(あるいは時間-周波数)特性を持つ．通常の n 点サンプルからなるディジタル信号用に提案された基底辞書の例としては，ウェーブレット・パケット基底辞書; 階層的ブロック離散コサイン基底辞書; 局所コサイン基底辞書等が挙げられる．ウェーブレット・パケット基底辞書の場合は，**図 2** における各頂点に対応する部分空間が特定の周波数領域に対応し，それぞれが再帰的に 2 つの「子供」の周波数領域に分割される．階層的ブロック(あるいは局所)コサイン基底辞書の場合は，各頂点に対応する部分空間は特定の空間領域に対応し，それぞれが再帰的に 2 つの「子供」の空間領域に分割されることになる．即ちウェーブレット・パケット基底辞書と階層的ブロック(あるいは局所)コサイン基底辞書は双対的な関係にある．また，通常のウェーブレット基底はウェーブレット・パケット基底辞書に含まれ，**図 2** では，太字で示した部分空間の基底に対応する．

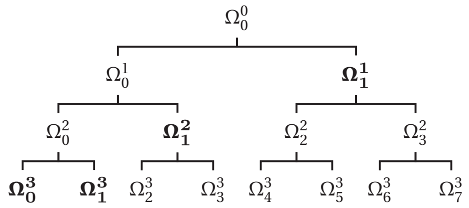


図 2 二分木構造を持つ基底辞書(分解の深さが 4 の場合)

このような基底辞書を構成する(即ち入力信号とそのすべての基底ベクトルとの内積をとる，あるいはそのすべての基底ベクトルを求める)にかかる計算コストは，ほぼ $O(n[\log n]^p)$ である．但し，ウェーブレット・パケット基底辞書の場合は $p=1$，コサイン基底辞書の場合は $p=2$ である．ここで，実用上重要な注意をしておきたい．これらの基底辞書を使うには入力信号のサンプル数 n が 2 の累乗数，即ちある $n_0 \in \mathbb{N}$ が存在して $n=2^{n_0}$ となるようなものでなければならないという制約がある(そうでない場合は，信号の前後に零を付け加えたり，信号を偶対称的に折り返したりして，n にもっとも近い 2 の累乗数の長さの信号に変える必要がある)．これに対し，第 5 節に述べる我々が開発したグラフ上の基底辞書は，2 の累乗数とは限らず，任意の n 点サンプルからなるディジタル信号に適用可能である．

各基底辞書は最大 $n(1+\log_2 n)$ 個の基底ベクトルを含み，それらを組み合わせることにより $2^{n/2}$ 以上の($\mathbb{R}^n$ の)正規直交基底を構成することができる．従って，このような莫大な数の正規直交基底の集合の中から，与えられた問題(例えば，データ圧縮，ノイズ除去，パターン認識，回帰分析等)に対して最適な正規直交基底を如何に素早く選択できるか，ということが重要になる．Coifman と Wickerhauser は，データ圧縮とノイズ除去に対し，**最適基底アルゴリズム**を提案した[10]．その後，斎藤と Coifman，また彼等の研究グループが最適基底アルゴリズムの選択基準をパターン認識や回帰分析のために一般化した[30][33][31][34][24]．

5　グラフ上のマルチ・スケール基底辞書

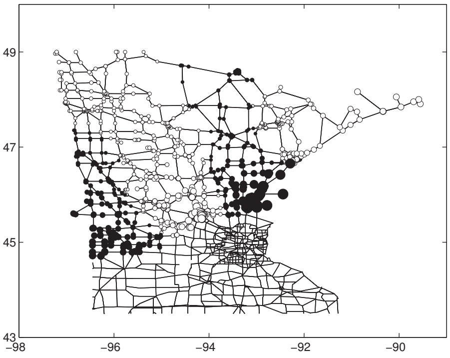
本節では，前節のマルチ・スケール基底辞書のグラフ上への拡張について考察する．前節で述べた Coifman-Wickerhauser の最適基底アルゴリズムが，グラフ上のマルチ・スケール基底辞書上でも適用できることは明白であろう．

5.1　階層的グラフ・ラプラシアン固有基底辞書

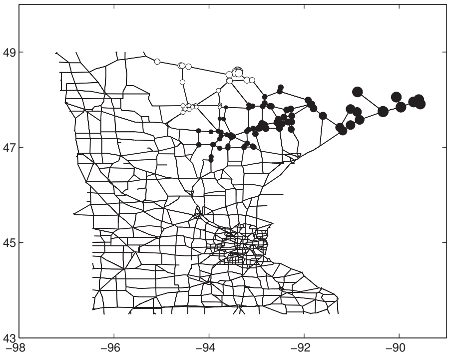
この項では，階層的ブロック離散コサイン基底辞書のグラフ上への拡張と位置づけられる**階層的グラフ・ラプラシアン固有基底辞書**(Hierarchical Graph Laplacian Eigenbasis Dictionary; HGLED)について述べる．詳しくは[19]を参照されたい．

与えられたグラフを G とし，それを基底辞書の根，即ち $G_0^0 := G$ とする(グラフ上の基底辞書の場合，古典的な場合の Ω_k^j の代わりに G_k^j と表すことにする)．HGLED 構成に向けての第一歩は，ラプラシアン行列 $L(G_0^0)$ の固有ベクトル $\phi_{0,0}^0, \phi_{0,1}^0, \ldots, \phi_{0,n-1}^0$，及び対応する固有値 $0=\lambda_{0,0}^0<\lambda_{0,1}^0\leq\cdots\leq\lambda_{0,n-1}^0$ を計算することである．次に G_0^0 を 2 つの互いに素な部分グラフに分割する．このようなグラフ分割の方法は数多く提案されているが，ここではそのうちで最も端的な Fiedler ベクトル $\phi_{0,1}^0$ の符号を使う手法[14]を採用する．即ち，$V(G_0^1) := \{k \in V(G_0^0) \mid \phi_{0,1}^0(k) \geq 0\}$，$V(G_1^1) := \{k \in V(G_0^0) \mid \phi_{0,1}^0(k) < 0\}$ となるように G_0^0 を G_0^1 と G_1^1 に分割するのである．ここで，Fiedler ベクトルの符号によるグラフ分割は RatioCut[16]と呼ばれる目的関数を最小化する分割を近似していることを注意しておきたい．

このグラフ分割・部分グラフのラプラシアン固有ベクトルの計算という手順を再帰的に繰り返すことにより，HGLED を構成するのである．構造的には**図 2** と同じ 2 分木構造の部分グラフ及びその上での正規直交基底の集合である．ここで幾つかの注意を述べておく．1)HGLED および次項で述べる一般化 Haar-Walsh ウェーブレット・パケット基底辞書においては，Fiedler ベクトルに基づくグラフ分割以外の如何なる再帰的グラフ二分割法を採用してもまったく問題とはならない．2) Fiedler ベクトルによるグラフ分割には，通常のグラフ・ラプラシアン $L(G_k^j)$ の代わりに，推移ラプラシアン $L_{\mathrm{rw}}(G_k^j)$ を使う方がよい分割となることも多い[40]．その場合の Fiedler ベクトルの符号による分割は，RatioCut ではなく，画像分割によく使われる Normalized Cut[37]を最小化する分割を近似する．但し，推移ラプラシアンを使った場合には，その固有ベクトルは重みつきの内積 $\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle_{D(G_k^j)} := \boldsymbol{y}^\top D(G_k^j)\boldsymbol{x}$ の下で正規直交しており，通常の内積の下では正規化も直交化もされていないことに注意する必要がある．通常の意味で正規直交する固有ベクトルを生成するためには，$D^{1/2}(G_k^j)$ を各固有ベクトルに掛けるだけでよく，結果は $L_{\mathrm{sym}}(G_k^j)$ の固有ベクトルと一致する．詳しくは[40]を参照のこと．3)第 4 節での古典的なウェーブレット・パケット基底辞書や局所コサイン基底辞書と同じように，HGLED も，グラフの頂点 $V(G)$ 上で観測された信号に対し，非常に冗長な数の，より正確に言えば，$2^{\lfloor n/2 \rfloor}$ 以上の正規直交基底を含む．ここで，n は 2 の累乗数である必要は全くない．勿論，HGLED に属する正規直交基底を構成する基底ベクトルは，各固



(a) $\phi^{1}_{0,5}$



(b) $\phi^{3}_{2,1}$

図 3 米ミネソタ州の道路網($n=2636$)における HGLED の基底ベクトル

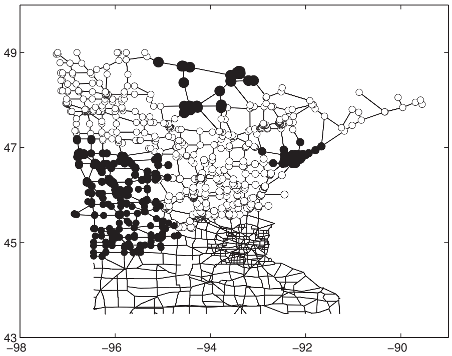
有ベクトル $\phi^{j}_{k,l}$ をそのサポート $V(G^{j}_{k})$ 以外の頂点上，即ち $V(G)\backslash V(G^{j}_{k})$ 上で 0 になるように拡張する必要がある．4) HGLED に属するすべての固有ベクトルを計算するのに必要なコストは，明らかに $O(n^3)$ である．5) 与えられたグラフが重みなしの経路 P_n の場合，HGLED は DCT Type II に基づいた階層的ブロック離散コサイン基底辞書と完全に一致する．言い換えれば，HGLED は階層的ブロック離散コサイン基底辞書のグラフへの拡張と言える．

図 3 に，米ミネソタ州の道路網における幾つかの HGLED の基底ベクトルを示す．グラフの辺の重みはその両端の頂点間のユークリッド距離の逆数，またグラフ・ラプラシアンとしては推移ラプラシアンを使用した．各頂点の円の直径は対応する基底ベクトルの成分の絶対値に比例しており，成分の正負により白黒に塗り分けられている．

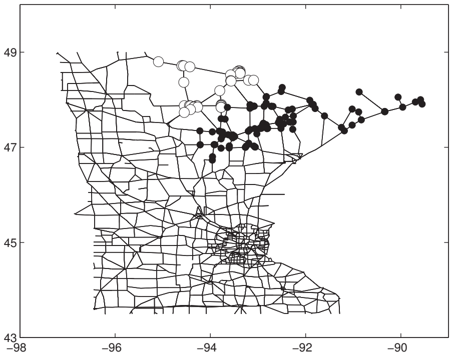
5.2 Haar-Walsh ウェーブレット・パケット基底辞書のグラフ上への拡張

本項では，規則的な格子上での信号処理に従来からよく使われて来た古典的な Haar-Walsh ウェーブレット・パケット基底辞書のグラフ上への拡張，**一般化 Haar-Walsh ウェーブレット・パケット基底辞書** (Generalized Haar-Walsh Wavelet Packet Dictionary; GHWWD) について概説する．詳細は[18]を参照されたい．

HGLED と同様に，GHWWPD も基本的には再帰的なグラフの二分割と各部分グラフ上での正規直交基底の構築の 2 つのステップから構成される．HGLED と異なり，分割の深さは各葉が単一頂点になるまで行う．従って，各葉上での基底ベクトルは $\mathbb{R}^n$ の標準基底ベクトルとなる．そこからうまくベクトルの和と差を計算して，各部分グラフ上で Haar-Walsh 関数のような矩形波となるような基底ベクトルからなるマルチ・スケールの基底辞書をグラフ上にボトムアップの方向に構築する．このアルゴリズムでは，各部分グラフにおいて必要な固有ベクトルは Fiedler ベクトルのみであることに注意する．従って[18]に示したように，この GHWWPD に属する全基底ベクトルの計算に必要なコストは $O(n^2)$ である．また，基底ベクトルを計算せずに，与えられたグラフ上の信号 $\boldsymbol{f} \in \mathbb{R}^n$ の GHWWPD に対する展開係数集合を求めるだけならば，そのコストは $O(n \log n)$ で済む．**図 4** に，米ミネソタ州の道路網上での幾つかの GHWWPD に属する基底ベクトルを示す．ここで，ひとつ注意を述べておきたい．この GHWWPD 構成のアルゴリズムでは，基底ベクトルの集合は，分解のレベルがグラフ全体から始まって単一頂点のみからなる葉の集合で終わる，所謂「粗密」(coarse-to-fine) に配列されている．従ってこのデフォールトのものを**粗密配列**の GHWWPD と呼ぶことにする．明らかに HGLED も粗密配列である．一方，HGLED では不可能であるが，GHWWPD の場合には，「密粗」(fine-to-coarse) の基底ベクトル配列に変換できる．これ

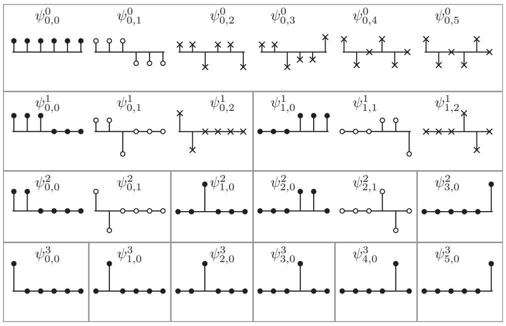


(a) $\phi^1_{0,5}$

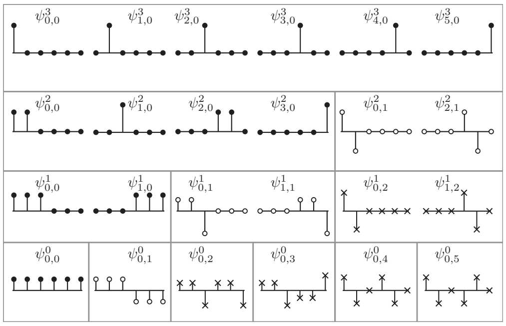


(b) $\phi^3_{2,1}$

図 4　米ミネソタ州の道路網(n＝2636)における GHWWPD の基底ベクトル



(a) 粗密配列



(b) 密粗配列

図 5　P_6 上の GHWWPD を構成する基底ベクトル
●，○，× はそれぞれスケーリング，Haar，Walsh ベクトルを表す．

を**密粗配列**の GHWWPD と呼ぶことにする．密粗配列された GHWWPD が，古典的な Haar-Walsh ウェーブレット・パケット基底辞書のグラフ上への真の一般化である．一方，粗密配列の GHWWPD は，HGLED において滑らかな振動をするグラフ・ラプラシアンの固有ベクトルを矩形振動波で直接置き換えたものと解釈できる．**図 5** に簡単な P_6 の場合のこれら 2 つの GHWWPD の基底ベクトルを示す．詳細は，[18]を参照されたい．

6　おわりに

本稿では，グラフ上での応用調和解析，特にマルチ・スケール基底辞書構築の際の注意点，及びその実際例として，階層的ブロック離散コサイン基底辞書と Haar-Walsh ウェーブレット・パケット基底辞書のグラフ上への拡張である HGLED と GHWWPD について解説した．ここでは，どちらの基底辞書も，「互いに素」になるようなシャープなグラフ分割を用いたが，今後，局所コサイン基底辞書や一般のより滑らかなウェーブレット・パケット基底辞書をグラフ上に拡張するためには，オーバーラップも許容した「滑らかな」グラフ分割の手法の研究が必要であると思われる．

残念ながら字数制限のため，HGLED 及び GHWWPD の応用について述べることができなかった．グラフ上のデータからのノイズ除去についての我々の予備的な数値実験の結果については[18]を参照されたい．現在我々のグループは，グラフ上のノイズ除去の大規模な数値実験を行っており，パターン認識への応用についても考察中である．これらの結果はまた別の機会に発表する予定である．

更に，グラフ上での関数や信号の近似やノイズ

除去のより理論的な考察も今後一層重要となると思われるが，その場合，グラフ上での関数の「滑らかさ」を規定する関数空間を如何に定義するかということが問題になる．これについては，未だ研究が十分になされていないのが現状である．通常のグラフに関しては，[15][36]等にその試みが見られる．勿論，量子グラフあるいは計量グラフといった連続体と考えられるものについては，その上でのソボレフ空間等も定義されているので[3]，今後この分野との更なる交流が待たれるところである．

最後に，最近その重要性を増している有向グラフ上での応用調和解析について一言述べておきたい．G が有向グラフの時は，一般に $W(G)$，従って $L(G)$ も非対称行列となり，その固有値・固有ベクトルは複素数値となり，無向グラフの時のような直感的な解釈をするのが難しくなる．この問題を解決するため，様々なグラフ・ラプラシアンが提案されているが[6][2][1]，それらは与えられた有向グラフの様々な特性(例えば強連結性等)に依存し，未だに一般的に有効な手立ては見つかっていない．筆者は，有向グラフの場合は，グラフ・ラプラシアンのような頂点間の局所的な微分作用素(の近似)ではなく**大局的な積分作用素**の考察が肝要であると考えている．グラフではないが，ユークリッド空間内の任意形状の領域において，このような考え方に基づいた筆者の論文[32]も参照して頂きたい．

謝 辞

本研究は，アメリカ合衆国海軍研究局(Office of Naval Research)からのグラント N00014-12-1-0177，及びアメリカ国立科学財団(National Science Foundation)からのグラント DMS-1418779 の支援を受けた．また数値計算・実験・作図の面で多大な協力をして頂いた本学大学院生の Jeff Irion 君に感謝する．

参 考 文 献

[1] Bapat, R. B., Kalita, D. and Pati, S., On weighted directed graphs, Linear Algebra and its Applications, 436[1] (2012), 99–111.

[2] Bauer, F., Normalized graph Laplacians for directed graphs, Linear Algebra and its Applications, 436 [11] (2012), 4193–4222.

[3] Berkolaiko, G. and Kuchment, P., Introduction to Quantum Graphs, AMS, Providence, RI, 2013.

[4] Bıyıkoğlu, T., Leydold, J. and Stadler, P. F., Laplacian Eigenvectors of Graphs, Springer, New York, 2007.

[5] Bremer, J. C., Coifman, R. R., Maggioni, M. and Szlam, A., Diffusion wavelet packets, Applied and Computational Harmonic Analysis, 21[1] (2006), 95–112.

[6] Chung, F., Laplacians and the Cheeger inequality for directed graphs, Annals of Combinatorics, 9[1] (2005), 1–19.

[7] Chung, F. R. K., Spectral Graph Theory, AMS, Providence, RI, 1997.

[8] Coifman, R. R. and Gavish, M., Harmonic analysis of digital data bases, Wavelets and Multiscale Analysis: Theory and Applications, Cohen, J. and Zayed, A. I. (eds.), Birkhäuser, Boston, MA, 2011, 161–197.

[9] Coifman, R. R. and Maggioni, M., Diffusion wavelets, Applied and Computational Harmonic Analysis, 21 [1] (2006), 53–94.

[10] Coifman, R. R. and Wickerhauser, M. V., Entropy-based algorithms for best basis selection, IEEE Transactions on Information Theory, 38[2] (1992), 713–719.

[11] Davies, E. B., Gladwell, G. M. L., Leydold, J. and Stadler, P. F., Discrete nodal domain theorems, Linear Algebra and its Applications, 336[1–3] (2001), 51–60.

[12] de Abreu, N. M. M., Old and new results on algebraic connectivity of graphs, Linear Algebra and its Applications, 423[1] (2007), 53–73.

[13] Fiedler, M., Algebraic connectivity of graphs, Czechoslovak Mathematical Journal, 23 (1973), 298–305.

[14] Fiedler, M., A property of eigenvectors of nonnegative symmetric matrices and its application to graph theory, Czechoslovak Mathematical Journal, 25 (1975), 619–633.

[15] Gavish, M., Nadler, B. and Coifman, R. R., Multiscale wavelets on trees, graphs and high dimensional data: theory and applications to semi supervised learning, Proceedings of the 27th International Conference on Machine Learning, Fürnkranz, J. and Joachims, T. (eds.), Omnipress, Haifa, Israel, 2010, 367–374.

[16] Hagen, L. and Kahng, A. B., New spectral methods for ratio cut partitioning and clustering, IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems, 11[9] (1992), 1074–1085.

[17] Hammond, D. K., Vandergheynst, P. and Gribonval, R., Wavelets on graphs via spectral graph theory, Applied and Computational Harmonic Analysis, 30 [2] (2011), 129–150.

[18] Irion, J. and Saito, N., The generalized Haar-Walsh tranform, Proceedings of the 2014 IEEE Workshop on Statistical Signal Processing, 2014, 472–475.

[19] Irion, J. and Saito, N., Hierarchical graph Laplacian eigen transforms, JSIAM Letters, 6 (2014), 21–24.

[20] Jaffard, S., Meyer, Y. and Ryan, R. D., Wavelets: Tools for Science & Technology, SIAM, Philadelphia, PA, 2001.
[21] Jansen, M., Nason, G. P. and Silverman, B.W., Multiscale methods for data on graphs and irregular multidimensional situations, Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Statistical Methodology), 71[1] (2008), 97–125.
[22] Lee, A., Nadler, B. and Wasserman, L., Treelets − an adaptive multi-scale basis for sparse unordered data, Annals of Applied Statistics, 2 (2008), 435–471.
[23] Mallat, S., A Wavelet Tour of Signal Processing, third edition, Academic Press, Burlington, MA, 2009.
[24] Marchand, B. and Saito, N., Earth Mover's Distance based local discriminant basis, Multiscale Signal Analysis and Modeling, Shen, X., and Zayed, A. I. (eds.), Springer, New York, 2013, 275–294.
[25] Merris, R., Laplacian matrices of graphs: A survey, Linear Algebra and its Applications, 197/198 (1994), 143–176.
[26] Murtagh, F., The Haar wavelet transform of a dendrogram, Journal of Classification, 24[1] (2007), 3–32.
[27] Nakatsukasa, Y., Saito, N. and Woei, E., Mysteries around the graph Laplacian eigenvalue 4, Linear Algebra and its Applications, 438[8] (2013), 3231–3246.
[28] Rustamov, R. M., Average interpolating wavelets on point clouds and graphs, arXiv:1110.2227v1 [math.FA], 2011.
[29] Rustamov, R. M. and Guibas, L., Wavelets on graphs via deep learning, Advances in Neural Information Processing Systems 26, Burges, C. J. C., Bottou, L., Welling, M., Ghahramani, Z. andWeinberger, K. Q. (eds.), Curran Associates, Inc., Red Hook, NY, 2014, 998–1006.
[30] Saito, N., Local feature extraction and its applications using a library of bases, Topics in Analysis and its Applications: Selected Theses, Coifman, R. (ed.), World Scientific Pub. Co., Singapore, 2000, 269–451.
[31] Saito, N., Image approximation and modeling via least statistically dependent bases, Pattern Recognition, 34[9] (2001), 1765–1784.
[32] Saito, N., Data analysis and representation on a general domain via eigenfunctions of Laplacian, Applied and Computational Harmonic Analysis, 25[1] (2008), 68–97.
[33] Saito, N. and Coifman, R. R., Local discriminant bases and their applications, Journal of Mathematical Imaging and Vision, 5[4] (1995), 337–358.
[34] Saito, N., Coifman, R. R., Geshwind, F. B. and Warner, F., Discriminant feature extraction using empirical probability density estimation and a local basis library, Pattern Recognition, 35[12] (2002), 2841–2852.
[35] Saito, N. and Woei, E., Analysis of neuronal dendrite patterns using eigenvalues of graph Laplacians, JSIAM Letters, 1 (2009), 13–16.
[36] Sharon, N. and Shkolnisky, Y., A class of Laplacian multiwavelets bases for high-dimensional data, Applied and Computational Harmonic Analysis, 38 [3] (2015), 420–451.
[37] Shi, J. and Malik, J., Normalized cuts and image segmentation, IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 22[8] (2000), 888–905.
[38] Strang, G., The discrete cosine transform, SIAM Review, 41[1] (1999), 135–147.
[39] Szlam, A. D., Maggioni, M., Coifman, R. R. and Bremer, J. C., Diffusion-driven multiscale analysis on manifolds and graphs: top-down and bottom-up constructions, Wavelets XI, Proc. SPIE 5914, Papadakis, M., Laine, A. F. and Unser, M. A. (eds.), 2005, Paper # 59141 D.
[40] von Luxburg, U., A tutorial on spectral clustering, Statistical Computing, 17[4] (2007), 395–416.
[41] Wickerhauser, M. V., AdaptedWavelet Analysis from Theory to Software, AK Peters, Ltd., Wellesley, MA, 1994.
[42] 浦川肇，ラプラス作用素とネットワーク，裳華房，1996.
[43] 浦川肇，スペクトル幾何学とグラフ理論，応用数理，12[1] (2002), 29–45.
[44] 増田直紀，今野紀雄，複雑ネットワーク：基礎から応用まで，近代科学社，2010.

[Abstract]

In recent years, the advent of new sensor technologies and social network infrastructure has provided huge opportunities and challenges for analyzing data recorded on such networks. For analyzing data recorded on regular lattices, computational harmonic analysis tools such as the Fourier and wavelet transforms have well-developed theories and proven track records of success. It is therefore quite important to extend such tools from the classical setting of regular lattices to the more general setting of graphs and networks. In this article, we first review basics of Laplacian matrices of a graph whose eigenpairs are often interpreted as the frequencies and the Fourier basis vectors on a given graph. We point out, however, that such an interpretation is misleading unless the underlying graph is unweighted path or cycle. We then discuss our recent effort of constructing *multiscale basis dictionaries* on a graph including the *Hierarchical Graph Laplacian Eigenbasis Dictionary* and the *Generalized Haar-Walsh Wavelet Packet Dictionary*, which are viewed as the generalization of the classical hierarchical block DCTs and the Haar-Walsh wavelet packets for the graph setting.