

谱图傅里叶变换与谱图小波变换基分析研究

李社蕾^{1,2}, 杨博雄^{1,2}, 陆娇娇^{1,2}

(1. 三亚学院 信息与智能工程学院, 海南 三亚 572022;

2. 三亚学院 陈国良院士工作站, 海南 三亚 572022)

摘要:卷积神经网络在欧氏数据上取得巨大成功之后,开始在图结构、几何流行等非欧数据上泛化。当前图卷积神经已成为研究热点。在数字图像去噪、压缩、增强、融合以及加密方面傅里叶变换与小波变换是不可或缺的处理手段,在图卷积神经中有卷积定理将傅里叶变换用于实现图上的卷积运算,谱图小波变换也只是实现了卷积的快速算法,都是围绕如何在图结构上做卷积而展开的研究,没有真正发挥其作用,大大限制了图卷积神经网络性能的发挥。该文对谱图傅里叶变换与谱图小波变换基进行分析研究,同时研究基与图结构之间的关系。实验表明通过谱图傅里叶变换和谱图小波变换可以获得图结构的特征信息,为谱图小波变换和谱图傅里叶变换更深入地与图卷积神经网络结合提供了参考。

关键词:谱图;小波变换;图卷积神经网络;傅里叶变换;卷积定理;本征函数;拉普拉斯算子

中图分类号:TN911.30-39

文献标识码:A

文章编号:1673-629X(2021)05-0085-05

doi:10.3969/j.issn.1673-629X.2021.05.015

Analysis and Study of Spectral Fourier Transform and Spectral Wavelet Transform Basis

LI She-lei^{1,2}, YANG Bo-xiong^{1,2}, LU Jiao-jiao^{1,2}

(1. School of Information & Intelligence Engineering, University of Sanya, Sanya 572022, China;

2. Chen Guoliang Academician Workstation, University of Sanya, Hainan 572022, China)

Abstract: After achieving great success in Euclidean data, convolutional neural network began to generalize on non-Euclidean data such as graph structure and geometric popularity. At present, the graph convolutional nerve has become a research hotspot. In the digital image denoising, compression, enhancement, fusion and encrypted, Fourier transform and wavelet transform are indispensable means of processing. There is a convolution theorem in the graph convolutional nerve to realize the convolution operation on the graph by spectral Fourier transform and fast convolution algorithm by spectral wavelet transform. The study is over how to convolutions on the graph structure, which does not really play its role and greatly limits the performance of the graph convolutional neural network. Therefore, we analyze and study the Fourier transform and wavelet transform basis of spectrogram and also the relationship between the basis and graph structure. The experiment shows that the characteristic information of the graph structure can be obtained by the Fourier transform and wavelet transform of the spectrum, which provides a reference for the deeper combination of the wavelet transform and Fourier transform of the spectrum with the convolutional neural network of the graph.

Key words: spectral; wavelet transform; graph convolutional neural network; Fourier transform; convolution theorem; eigenfunction; Laplace operator

0 引言

在现实世界中,大量数据是以图或者网络的形式存在的,比如社交网络、知识图谱、蛋白质相互作用网、世界贸易网等等。2012年,Imagenet图像识别大赛中,Hinton组的Alexnet^[1]引入了全新的深层结构和dropout方法,将错误率从25%以上提升至15%,颠覆了图像识别领域。图数据结构的 researchers 开始尝试将

卷积神经网络泛化后应用在这样的数据集上,就产生了图卷积神经网络,比如GNN、GCN、GAE、GRNN等。

傅里叶变换和小波变换在数字图像及信号处理领域应用非常成功^[2],诸多研究者也已将傅里叶变换、二进小波和正交小波泛化到了图结构上,Kipf & Welling^[3]提出的GCN利用图上的傅里叶变换,由卷积定理,实现了谱图傅里叶变换的卷积快速算法,

收稿日期:2020-02-17

修回日期:2020-06-22

基金项目:海南省自然科学基金资助项目(619MS076)

作者简介:李社蕾(1979-),女,副教授,研究方向为智能算法、人工智能。

Hammond 等^[4]将二进小波泛化到了图结构上, Xu B^[5]等利用谱图小波变换,并结合热扩散理论^[6-7]实现了谱图小波变换的卷积快速算法^[8]。迄今为止,谱图理论在图卷积神经网络应用中^[9-12]仅仅是为了解决在图结构上做卷积的问题,没有真正发挥谱图理论——这一强大理论体系的作用,同时也大大限制了图卷积神经网络性能的发挥。因此,该文结合数据集(Coar)在分析其图结构的基础上,对谱图傅里叶变换与谱图小波变换基进行研究,为谱图小波变换和谱图傅里叶变换更深入的与图卷积神经网络结合提供参考。

1 引文数据集 Cora 图结构分析

1.1 Cora 数据集分析

引文数据集 Cora 的图结构是由论文和论文之间的关系构成的网络,其中关系包括引用关系、共同作者等,每篇论文作为一个节点,关系作为边,就形成了天然的图结构。在 Cora 数据集中,有 2 708 个节点,有 5 268 条边,构成无向图,节点特征维数 1 433,共 7 类标签,其图结构如图 1 所示。

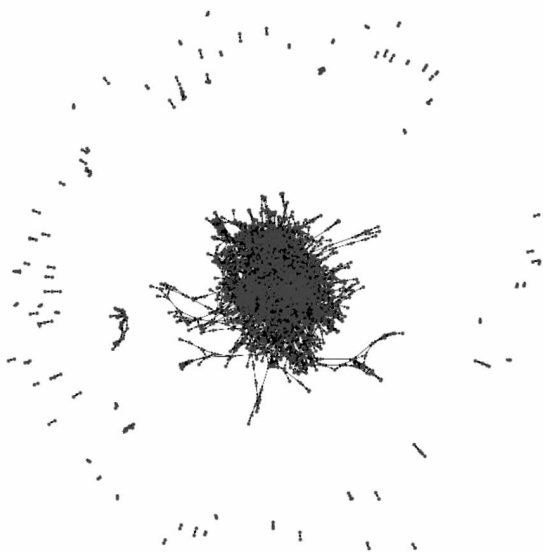


图 1 Cora 数据集图结构

1.2 Cora 数据集加载

在 Pytorch 和 Pytorch Geometric(PyG)框架下,加载 Cora 数据集的代码是很简单的,具体代码如下:

```
import os
import os.path as osp
from torch_geometric.datasets import Planetoid
import torch_geometric.transforms as T
dataset = 'Cora'
path = osp.join(osp.dirname(osp.realpath('__file__')),
'data', dataset)
##加载数据集
dataset = Planetoid(path, dataset, T.NormalizeFeatures())
```

```
data = dataset[0]
```

2 谱图傅里叶基分析研究

2.1 传统傅里叶变换

根据传统傅里叶变换^[13]:

$$F(\omega) = F(f(t)) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) e^{-i\omega t} dt \quad (1)$$

即,信号 $f(t)$ 与 $e^{-i\omega t}$ 为基函数的积分,这组基函数从数学上看 $e^{-i\omega t}$ 是拉普拉斯算子的本征函数,因为 $e^{-i\omega t}$ 满足:

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

其中, ω 与特征值密切相关。

由传统傅里叶变换可知,如果能够在图上找到一组和 $e^{-i\omega t}$ 等价的基向量,就可以实现图上的傅里叶变换。

2.2 谱图傅里叶变换

为了在图上寻找一组实现傅里叶变换的基向量,需要去图上寻找图的拉普拉斯算子。

2.2.1 图上的拉普拉斯算子

传统拉普拉斯算子定义如下:

$$\Delta = \sum_{i=1}^n \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \quad (3)$$

从公式上看,含义很明确,为所有非混合二阶偏导数的和。下面分析拉普拉斯算子在数字图像处理中的近似情况:

$$\begin{aligned} \Delta &= \frac{\partial^2 f(x,y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f(x,y)}{\partial y^2} \approx \\ &[f(x+1,y) + f(x-1,y) - 2f(x,y)] + \\ &[f(x,y+1) + f(x,y-1) - 2f(x,y)] = \\ &f(x+1,y) + f(x-1,y) + f(x,y+1) + \\ &f(x,y-1) - 4f(x,y) \end{aligned} \quad (4)$$

式(4)可以总结为拉普拉斯算子是在所有自由度上进行微扰之后获得的增益。现在开始考虑,拉普拉斯算子在图上的近似情况,对于无向图 $G(V,E)$, 设有 N 顶点, $V = \{v_1, v_2, \dots, v_N\}$, E 为边, W 为其邻接矩阵, D 为其度矩阵, $d_{ij} = \sum_j A_{ij}$, 如果图是一个连通图,则任意节点之间都有边,那么对一个节点进行微扰,它可能变成任意一个节点。那么上面的函数 f 就理所当然是一个 N 维的向量,即:

$$\mathbf{f} = (f_1, f_2, \dots, f_n)$$

其中, f_i 即表示函数 f 在节点 i 的值。类比图像中 $f(x, y)$ 即为 f 在 (x, y) 处的值,对于任意节点 i , 对 i 节点进行微扰,它可能变为任意一个与它相邻的节点 $j \in N_i$, 其中 N_i 表示节点 i 的一阶邻域节点的集合。

对于 Graph 来说,从节点 i 变化到节点 j 的增益就

$f_j - f_i$ 和边权 A_{ij} 相关,对于节点 i 来说,其变化的增益就是: $\sum_{j \in N_i} A_{ij}[f_j - f_i]$ 。

所以对于 Graph 来说,其拉普拉斯算子如下:

$$\Delta f = \sum_{i=1}^n \frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2} \approx \sum_{j \in N_i} A_{ij}[f_j - f_i] \quad (5)$$

上式中 $j \in N_i$ 可以去掉,因为节点 i 和 j 如果不直接相邻,则 $W_{ij} = 0$ 。

继续简化一下:

$$\sum_{j \in N_i} A_{ij}[f_j - f_i] = \sum_j A_{ij}f_j - \sum_j A_{ij}f_i = (Af)_i - (Df)_i = (A - Df)_i \quad (6)$$

即:

$$\Delta f = (A - Df)_i$$

对于任意 i 都成立,则:

$$-\Delta f = (D - Af)_i \quad (7)$$

所以图上的拉普拉斯算子就是: $D - A$, 也称为拉普拉斯矩阵: $L = D - A$ 。

对于无向图,其拉普拉斯算子为实对称矩阵,它的特征向量两两正交,并且很容易证明其特征值全部大于等于 0,即 $0 = \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$,这样就找到了图上的一组基。

2.2.2 谱图傅里叶变换

仿照传统傅里叶定义,得到 Graph 上的傅里叶变换:

$$F(\lambda_\ell) = \hat{f}(\lambda_\ell) = \sum_{i=1}^N f(i) u_\ell^*(i) \quad (8)$$

其中, i 为第 i 个顶点; λ_ℓ 为第 ℓ 个特征值; u_ℓ 为第 ℓ 个特征向量; f 为待变换信号(向量), f 尖为其对应的傅里叶变换, f 和 f 尖与顶点 i 一一对应。

f 是图上的 N 维向量, $f(i)$ 与图上的节点一一对应, $u_\ell^*(i)$ 表示第 ℓ 个特征向量的第 i 个分量,那么特征值(频率) λ_ℓ 下的 f 的图傅里叶变换就是与 λ_ℓ 对应的特征向量 u_ℓ 进行内积运算。

利用矩阵乘法将图上的傅里叶变换推广到矩阵形式:

$$\begin{pmatrix} \hat{f}(\lambda_1) \\ \hat{f}(\lambda_2) \\ \vdots \\ \hat{f}(\lambda_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_1(1) & u_1(2) & \cdots & u_1(n) \\ u_2(1) & u_2(2) & \cdots & u_2(n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_n(1) & u_n(2) & \cdots & u_n(n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f(1) \\ f(2) \\ \vdots \\ f(n) \end{pmatrix}$$

即 f 在图上的傅里叶变换的矩阵形式为:

$$F(f) = \hat{f} = U^T f \quad (9)$$

逆变换形式为:

$$F^{-1}\{\hat{f}\} = \hat{f} \quad (10)$$

图 2 为包含 10 个节点的 path 图,图邻接关系及图

结构如图 2 所示,图的谱图傅里叶谱如图 3 所示,特征值 0 对应的特征向量为 $U[:,0]$,等价于传统傅里叶变换直流成分,特征值小的为低频成分,特征值大的为高频成分。

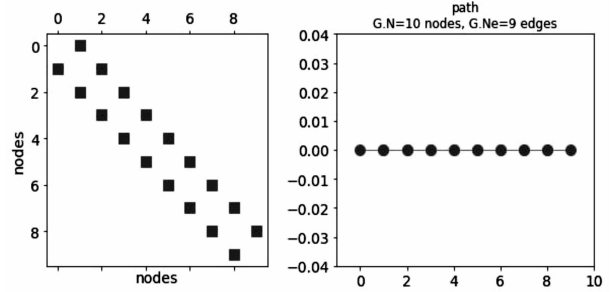


图 2 path(10 个节点)图邻接关系及图结构

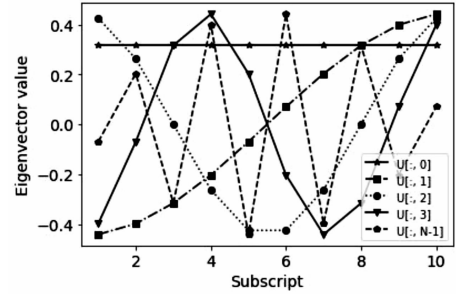


图 3 path 图的谱图傅里叶谱

3 谱图小波基分析研究

Hammond^[3,14-15]将二进小波泛化到了图结构上,谱图小波变换由小波算子生成,小波算子是拉普拉斯算子的值函数。利用连续泛函微积分可以在 Hilbert 空间上定义有界自伴线性算子的可积函数。使用算子的谱表示来实现的,在设置中,它等价于图的傅里叶变换。特别地,对于谱图小波核 g ,小波算子 $T_g = g(L)$ 通过每个傅里叶模式调制作用于特定函数 f :

$$\hat{T}_g f(\ell) = g(\lambda_\ell) \hat{f}(\ell) \quad (11)$$

采用反傅里叶变换得到:

$$T_g f(m) = \sum_{\ell=0}^{N-1} g(\lambda_\ell) \hat{f}(\ell) x_\ell(m) \quad (12)$$

然后定义尺度为 t 的小波算子: $T_g = g(L)$ 。应该强调的是,即使图的“空间域”是离散的,但核 g 的域还是连续的,因此尺度可以定义为任意正实数 t 。然后通过将这些算子应用于单个顶点上的脉冲,即通过定位这些算子来实现谱图小波。

$$\psi_{s,n} = T_g \delta_n \quad (13)$$

在图域中显式地展开此项为:

$$\psi_{s,n}(m) = \sum_{\ell=0}^{N-1} g(t\lambda_\ell) x_\ell^*(n) x_\ell(m) \quad (14)$$

$$(n=m \Rightarrow \psi_{t,n}(m) \neq 0, n \neq m \Rightarrow \psi_{t,n}(m) = 0)$$

形式上,小波系数是由给定函数 f 与这些小波的内积产生的,如:

$$W_f(t, n) = \langle \psi_{t, n}, f \rangle \quad (15)$$

利用 $\{x_\ell\}$ 的正交性, 可以看出小波系数也可以直接从小波算子中实现, 如:

$$W_f(t, n) = T_g f(n) = \sum_{\ell=0}^{N-1} g(t\lambda_\ell) \hat{f}(\ell) x_\ell(n) \quad (16)$$

($T_g f(n) = \sum_{\ell=0}^{N-1} g(t\lambda_\ell) \hat{f}(\ell) x_\ell(n)$) 谱图小波变换公式:

$$T_g f(n) = U g(t\lambda_\ell) U^T f(n) \quad (17)$$

从而得到了谱图小波变换基 $\psi_s = U G_s U^T$, $g_s =$

λs , 其中 $G_s = \text{diag}\{\lambda_1 s, \lambda_2 s, \dots, \lambda_n s\}$ 。由于拉普拉斯算子矩阵有 0 特征值, 导致矩阵不可逆, 文献[4]中设 $g_s = e^{-\lambda s}$, 是一个具有尺度参数 s 的过滤器内核, 这里用的热核, 则谱图小波变换基定义为:

$$\psi_s = U G_s U^T \quad (18)$$

谱图小波逆变换基为:

$$\psi_{-s} = U G_{-s} U^T \quad (19)$$

其中, $G_s = \text{diag}\{e^{-\lambda_1 s}, e^{-\lambda_2 s}, \dots, e^{-\lambda_n s}\}$, 不同尺度下小波和扩散情况如图 4 所示。

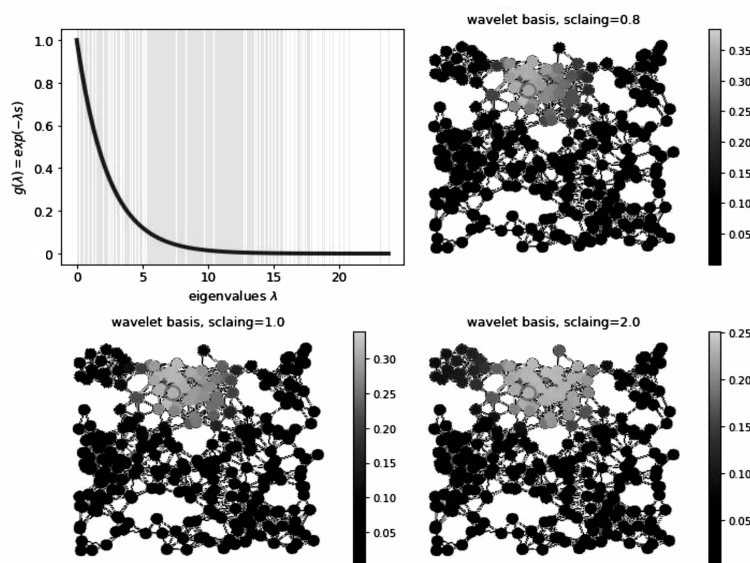


图4 不同尺度下的小波扩散情况

4 实验结果与分析

本实验对 Cora 数据集图结构的谱图傅里叶变换谱和谱图小波变换谱进行了仿真, 为了方便展示, 图 5 和图 6 分别展示了特征值 ($\lambda_0, \lambda_1, \lambda_{100}, \lambda_{2707}$) 对应的特征向量的前 500 个元素的谱。对于特征值, λ_0, λ_1 的值都为 0, 根据图 1 的 Coar 数据集图结构, 可知 Coar 数据集图结构为非连通图, 图 1 的外部存在很多连通子图, 一部分连通子图只有两个节点组成, 从而出现了大量值为 0 的特征向量, 给半监督节点分类带来了很大挑战。另外根据图 5 和图 6 可以发现, 谱图傅里叶变换谱展示了图的谱域分布情况, 特征值小的对应低

频成分, 特征值大的对应高频成分, 而谱图小波变换谱展示了图结构局部突变特性。实验表明通过谱图傅里叶变换和谱图小波变换可以获取图结构的特征信息。

卷积神经网络泛化到图结构上, 首先考虑的问题就是如何在图上做卷积, 而卷积神经网络在对数字图像进行处理的时候, 在图像上做卷积是为了提取特征, 不同卷积核提取不同的特征, 通过多个卷积通道, 提取图像多方位的特征进行训练, 从而在图像分割、语义分割等方面取得很大成功。卷积神经网络在图结构上进行泛化时, 可以转换一下思路, 可以考虑更有效的图上提取特征的手段, 对图结构进行训练。

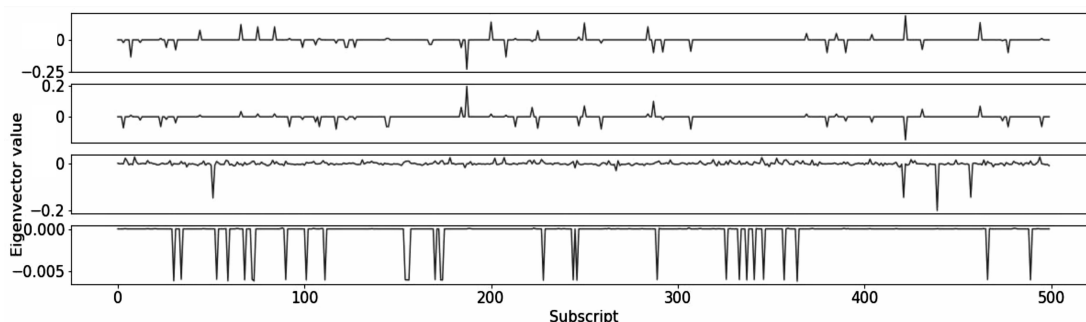


图5 Cora 数据集部分谱图傅里叶谱

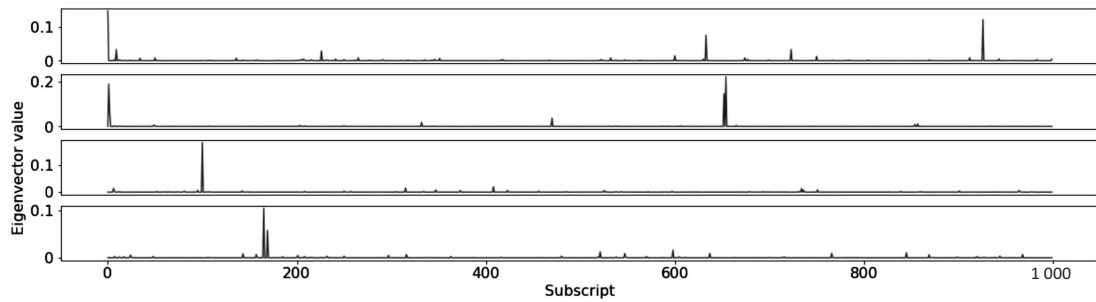


图6 Cora数据集部分谱图小波变换谱

5 结束语

通过对谱图傅里叶变换与谱图小波变换基的分析,发现谱图傅里叶变换可以提取图结构高频成分和低频成分,谱图小波变换可以提取图结构的局部快变成分,两种变换从不同角度提取图结构的特征,为图卷积神经网络的特征提取方法提供参考。后续将研究用不同的方式提取图结构的多方位特征,进而提升图卷积神经网络的性能。

参考文献:

- [1] KRIZHEVSKY A, SUTSKEVER I, HINTON G. ImageNet classification with deep convolutional neural networks[J]. Advances in Neural Information Processing Systems, 2012, 25(2): 1097-1105.
- [2] 刘玉淑. 基于多尺度变换的图像去噪及融合算法研究[D]. 济南: 山东大学, 2013.
- [3] KIPF T N, WELING M. Semi-supervised classification with graph convolutional networks[C]//5th international conference on learning representations, ICLR2017. Toulon, France: [s. n.], 2017.
- [4] HAMMOND D K, VANDERGHEYNST P, GRIBONVAL R. Wavelets on graphs via spectral graph theory[J]. Applied & Computational Harmonic Analysis, 2011, 30(2): 129-150.
- [5] XU B, SHEN H, CAO Q, et al. Graph wavelet neural network[C]//Proceedings of the international conference on learning representations. New Orleans, USA: [s. n.], 2019: 1-13.
- [6] DONNAT C, ZITNIK M, HALLAC D, et al. Learning structural node embeddings via diffusion wavelets[C]//KDD'18: Proceedings of the 24th ACM SIGKDD international conference on knowledge & data mining. London: ACM, 2018: 1320-1329.
- [7] ZOU D, LERMAN G. Graph convolutional neural networks via scattering[J]. Applied and Computational Harmonic Analysis, 2020, 49(3): 1046-1074.
- [8] 冉启文. 小波与量子小波(第一卷)[M]. 北京: 科学出版社, 2019: 280-305.
- [9] YAN S, XIONG Y, LIN D. Spatial temporal graph convolutional networks for skeleton-based action recognition[C]//Proceedings of thirty-second AAAI conference on artificial intelligence. New Orleans: AAAI, 2018: 7444-7452.
- [10] HAMILTON W, YING Z T, LESKOVEC J. Inductive representation learning on large graphs[C]//Advances in neural information processing systems30: annual conference on neural information processing systems 2017. Long Beach, CA, USA: Curran Associates Inc., 2017: 1025-1035.
- [11] 周进凡, 刘宇红, 张荣芬, 等. 基于卷积神经网络的肺炎检测系统[J]. 现代电子技术, 2019, 42(23): 35-39.
- [12] 郭玲玲, 赵其昌, 杨勇, 等. 星载傅里叶变换红外光谱仪的脉冲噪声抑制方法[J]. 光学学报, 2020, 40(8): 0830003.
- [13] 黄金平, 张正炳. 卷积定理与傅里叶变换性质及其应用的关系探讨[J]. 长江大学学报: 自科版, 2016, 13(19): 29-31.
- [14] CHARLES R Q, SU H, KAICHUN M, et al. PointNet: deep learning on point sets for 3D classification and segmentation[C]//Proceedings of the 2017 IEEE conference on computer vision and pattern recognition. Honolulu, HI, USA: IEEE, 2017: 77-85.
- [15] SHUMAN D I, VANDERGHEYNST P, FROSSARD P. Chebyshev polynomial approximation for distributed signal processing[C]//International conference on distributed computing in sensor systems & workshops. Barcelona: IEEE, 2011: 1-8.