De la transformée de Fourier discrète à la théorie spectrale des graphes : une histoire de Laplacien

Séminaire de Mathématiques - Ginette

Dan Meller

2022

Plan

1. La transformée de Fourier discrète
2. Théorie spectrale des graphes
3. Applications en "Machine Learning"

Équation de diffusion

Laplacien 3D : $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

Équation de diffusion

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \Delta u$$

Quelques exemples :

- Équation de la chaleur
- Loi de Fick
- Densité de présence du mouvement Brownien
- Équation de Schrödinger libre : $i\hbar\frac{\partial \Phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Phi$

Résolution dans un cas simple

- 1D :
$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$
- $u(t,x)$ est périodique en x de période 2π
- $u(0,x) = u_0(x)$

Décomposition en série de Fourier de u_0 :

$$u_0(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} C_n e^{inx}$$

On cherche les solutions sous la forme :

$$u(t,x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n(t) e^{inx}$$

Puis $\frac{dc_n}{dt} = (in)^2 c_n$ et donc :

$$u(t,x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} C_n \, e^{-n^2 t} \, e^{inx}$$

Résolution dans un cas simple

$$u(t,x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} C_n \; e^{-n^2 t} \; e^{inx}$$

Remarques :

- Chaque mode spatial s'estompe indépendamment des autres avec une constante de temps propre
- $\forall x \in [0,\pi[,\;\; u(t,x) \underset{t\to+\infty}{\longrightarrow} C_0$
- $H(u)(t) := -\int_0^{2\pi} u(t,x)\log(u(t,x))dx$ est croissante

Le cas discret

On cherche un vecteur $U(t) \in \mathbb{R}^N$ tel que :

$$\begin{cases} U(0) & = U_0 \\ \frac{dU}{dt} & = \Delta(U) \end{cases}$$

Q : Comment définir $\Delta : \mathbb{R}^N \longrightarrow \mathbb{R}^N$ dans le cas discret ?

- Δ est linéaire. On écrira donc plutôt ΔU avec $\Delta \in \mathbb{R}^{N \times N}$
- On pose la matrice de "shift" S telle que $\forall X \in \mathbb{R}^N, \ (SX)_i = X_{(i+1 \mod N)}$
- Par analogie avec le cas continu :

$$\Delta = S + S^{-1} - 2I_N$$

Le cas discret

$$\frac{dU}{dt} = \Delta U$$

On peut résoudre immédiatement l'équation dans le cas discret :

$$U(t) = \exp(t\Delta)U_0 = \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k \Delta^k}{k!}\right) U_0$$

Si on diagonalise : $\Delta = PDP^{-1}$ alors $\exp(t\Delta) = P\exp(tD)P^{-1}$
Comme $\Delta = S + S^{-1} - 2I_N$, il suffit de diagonaliser S !

Q : Quels sont les vecteurs propres de S ?

Diagonalisation de S

On pose $\omega := e^{\frac{2\pi i}{N}}$ Matrice contenant les vecteurs propres de S:
$F = \left(\omega^{kl}\right)_{k,l\in[|0,N|[^2} =$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & \omega & \cdots & \omega^{l} & \cdots & \omega^{N-1} \\ 1 & \omega^2 & \cdots & \omega^{2l} & \cdots & \omega^{2(N-1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \cdots \\ & \omega^k & \cdots & \omega^{kl} & \cdots & \omega^{k(N-1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \cdots \\ 1 & \omega^{(N-1)} & \cdots & \omega^{(N-1)l} & \cdots & \omega^{(N-1)(N-1)} \end{pmatrix}$$

Et on a : $F^{-1}SF = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & \omega & & \\ & & \ddots & \\ & & & \omega^{N-1} \end{pmatrix}$

La transformée de Fourier discrète

- $F = \left(\omega^{kl}\right)_{k,l \in [|0,N|[^2}$ diagonalise plus généralement toutes les matrices **circulantes**
- F est une matrice de Vandermonde symétrique.
- La transformée de Fourier d'un signal discret $X \in \mathbb{R}^N$ est simplement donnée par FX
- La FFT est juste un algorithme efficace pour calculer FX : $\mathcal{O}(N\log(N))$ au lieu de $\mathcal{O}(N^2)$
- $F\bar{F}^T = F\bar{F} = NI_N$ donc $\frac{1}{\sqrt{N}}F$ est unitaire
- Cela implique le théorème de Parseval : $||X||^2 = ||\frac{1}{\sqrt{N}}FX||^2$

La transformée de Fourier discrète

- $F = \left(\omega^{kl}\right)_{k,l\in[|0,N|[^2}$ diagonalise plus généralement toutes les matrices **circulantes**
- F est une matrice de Vandermonde symétrique.
- La transformée de Fourier d'un signal discret $X \in \mathbb{R}^N$ est simplement donnée par FX
- La FFT est juste un algorithme efficace pour calculer FX : $\mathcal{O}(N\log(N))$ au lieu de $\mathcal{O}(N^2)$
- $F\bar{F}^T = F\bar{F} = NI_N$ donc $\frac{1}{\sqrt{N}}F$ est unitaire
- Cela implique le théorème de Parseval : $||X||^2 = ||\frac{1}{\sqrt{N}}FX||^2$

La transformée de Fourier discrète

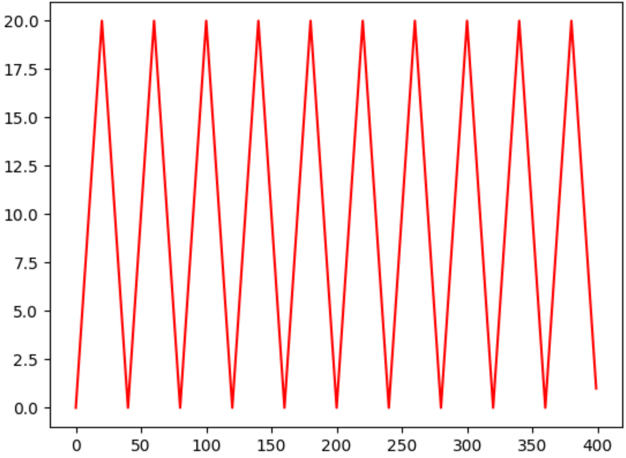

Figure: $X \in \mathbb{R}^{400}$: un signal en triangle répliqué 10 fois

La transformée de Fourier discrète

plt.plot(np.arange(N),np.log(np.abs(F@X)),'g')

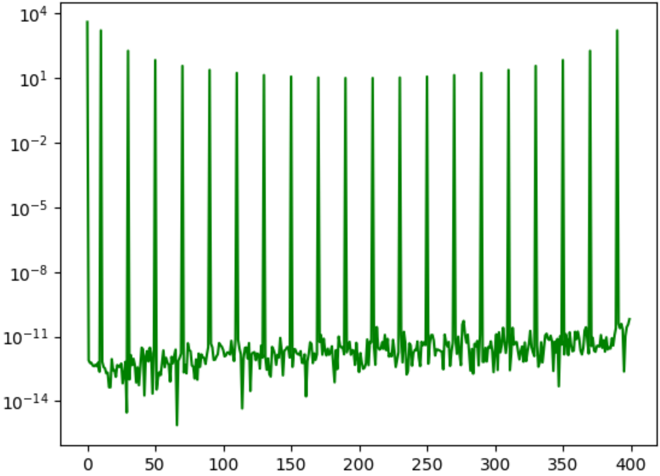

Figure: $|FX| \in \mathbb{R}^{400}$: spectre

La transformée de Fourier discrète

- $F = \left(\omega^{kl}\right)_{k,l \in [|0,N|[^2}$ diagonalise plus généralement toutes les matrices **circulantes**
- F est une matrice de Vandermonde symétrique.
- La transformée de Fourier d'un signal discret $X \in \mathbb{R}^N$ est simplement donnée par FX
- La FFT est juste un algorithme efficace pour calculer FX : $\mathcal{O}(N\log(N))$ au lieu de $\mathcal{O}(N^2)$
- $F\bar{F}^T = F\bar{F} = NI_N$ donc $\frac{1}{\sqrt{N}}F$ est unitaire
- Cela implique le théorème de Parseval : $||X||^2 = ||\frac{1}{\sqrt{N}}FX||^2$

Retour à nos moutons

Rappel :

$$U(t) = \exp(t\Delta)U_0$$

$$\Delta = S + S^{-1} - 2I_N$$

On diagonalise Δ :

$$\Delta = FDF^{-1} = F \begin{pmatrix} 0 & & & \\ & \omega + \bar{\omega} - 2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \omega^{N-1} + \bar{\omega}^{N-1} - 2 \end{pmatrix} F^{-1}$$

Si on réalise la transformée de Fourier inverse de U en posant $V = F^{-1}U$ alors

$$V(t)_k = e^{2t(\cos(2\pi k/N)-1)}(V_0)_k$$

Généralisation de la TFD

Q :Peut-on généraliser la transformée de Fourier pour des signaux dont le domaine correspond aux sommets d'un graphe non orienté ?
Observation clef : Les vecteurs de la base de Fourier dans le cas précédent sont des vecteurs propres du Laplacien.
On pose par analogie :

$$\Delta = A - \mathrm{diag}(A\mathbb{1})$$

avec A la matrice d'adjacence et $\mathrm{diag}(A\mathbb{1})$ la matrice diagonale contenant les degrés des sommets.
Δ est symétrique réelle et on peut donc écrire : $\Delta = FDF^{-1}$

Quelques propriétés

Pour un graphe G non orienté

Propriété : F est une matrice orthogonale

Propriété : Le spectre de Δ est négatif

Propriété : 0 est valeur propre de Δ, sa multiplicité est égale au nombre de composantes connexes de G

Théorème "Matrix-tree" : Tous les cofacteurs de Δ sont égaux et valent plus ou moins le nombre d'arbres couvrants de G

Une application : le clustering spectral

Application : le clustering spectral

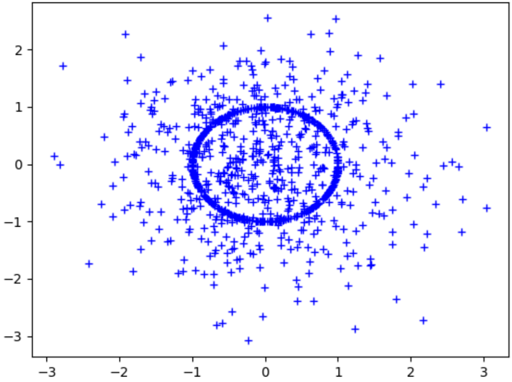

Figure: 500 points tirés selon $\mathcal{N}(0, I_2)$ et 500 points tirés selon $\mathcal{U}(S^1)$

But : Trouver une technique algorithmique pour séparer les deux distributions.

Application : le clustering spectral

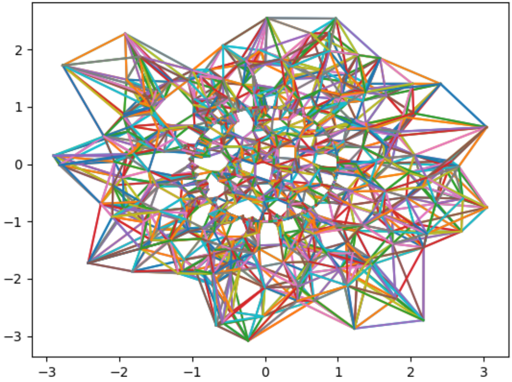

Figure: Construction du graphe des "8 plus proches voisins"

Idée : La colonne k de F^T encode dans une représentation vectorielle la situation topologique du sommet k.

Application : le clustering spectral

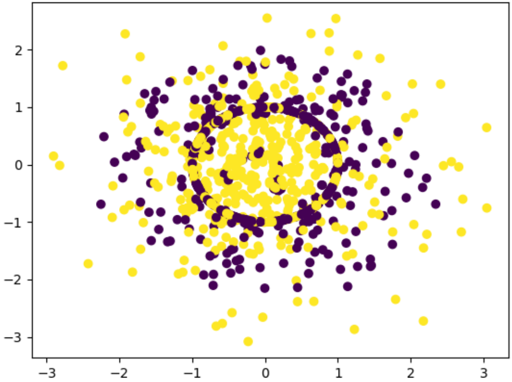

Figure: k-means avec $k = 2$ sur les colonnes de $|F^T|$

Application : le clustering spectral

Idée : Donner plus de poids aux valeurs propres les plus proches de 0

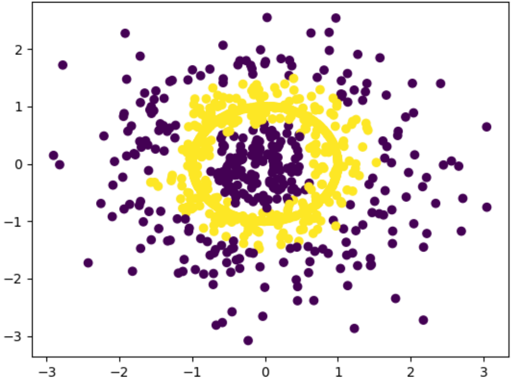

Figure: k-means avec $k = 2$ sur les colonnes de $|e^D F^T|$

Application : le clustering spectral

On a par définition :

$$\Delta = FDF^T$$

Donc $e^{\Delta} = Fe^{D}F^T$ donc :

$$e^{D}F^T = F^Te^{\Delta}$$

Donc les colonnes de $e^{D}F^T$ correspondent à la projection sur la base de Fourier des réponses impulsionnelles du système diffusif pour $t = 1$.
La technique précédente utilise la diffusion sur le graphe pour déterminer les *clusters* !

Application : le clustering spectral

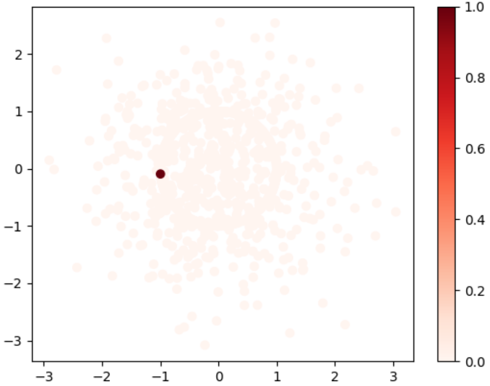

Figure: Un signal impulsionnel à t=0

Application : le clustering spectral

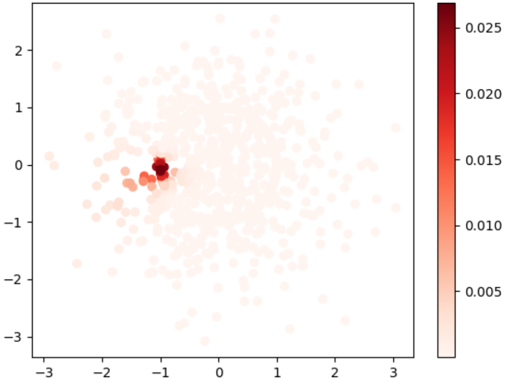

Figure: La réponse à un signal impulsionnel à t=1

Graph Convolutional Neural Networks

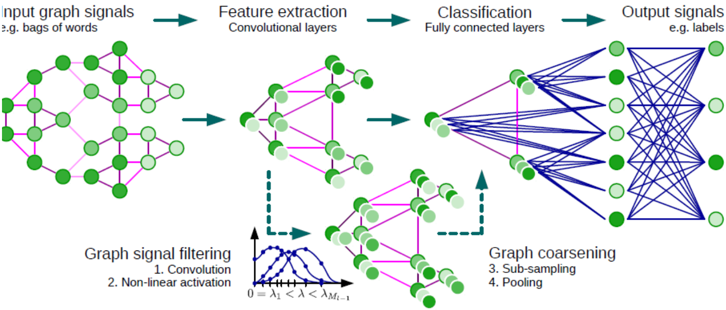

Figure: Architecture d'un GCN. *Source : Convolutional Neural Networks on Graphs with Fast Localized Spectral Filtering. Defferrard et al. 2016*

Détail d'une couche de convolution

On se donne un graphe avec V sommets et une matrice laplacienne Δ

Input : Un signal à valeurs vectorielles $X \in \mathbb{R}^{F_{in} \times V}$ défini sur les sommets.

Output : Un signal à valeurs vectorielles $Y \in \mathbb{R}^{F_{out} \times V}$ défini sur les sommets.

Pour $j \in [|1, F_{out}|]$ et un sommet s :

$$Y_{j,s} = \sigma \left(\sum_{i=1}^{F_{in}} \sum_{k=0}^{K} \theta_{i,j,k} \left(\Delta^k X_i \right)_s \right)$$

K : degré maximal du laplacien utilisé (K-localized filter)

$\theta \in \mathbb{R}^{F_{in} \times F_{out} \times K}$: matrice des paramètres entraînables

$\sigma : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$: fonction d'activation non linéaire

A retenir

- Le Laplacien de f en x mesure l'écart entre $f(x)$ et les valeurs de f sur les voisins de x
- Équation de diffusion : $\frac{\partial u}{\partial t} = \Delta u$
- Équation de propagation : $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \Delta u$
- La matrice de transformée discrète est $F = (\omega^{kl})_{k,l \in [|0,n|[^2}$ avec $\omega = e^{2i\pi/N}$
- La transformée de Fourier discrète d'un vecteur X est donnée par FX
- La transformée de Fourier discrète diagonalise les matrices circulantes (analogue discret du théorème de convolution)
- La base de Fourier correspond aux vecteurs propres du Laplacien ce qui permet de généraliser la TF sur les graphes

Quelques suggestions de lectures post-concours

[Bro+21] Michael M. Bronstein et al. "Geometric Deep Learning: Grids, Groups, Graphs, Geodesics, and Gauges". In: *ArXiv* abs/2104.13478 (2021).

[Nic18] Bogdan Nica. "A Brief Introduction to Spectral Graph Theory". In: 2018.

[Bro+21] [Nic18]