

2024.06.07

理論談話会#11

GOT: An Optimal Transport framework for Graph comparison

グラフ比較のための最適輸送問題

Petric Maretic, H., El Gheche, M., Chierchia, G., & Frossard, P. (2019). GOT: an optimal transport framework for graph comparison. Advances in Neural Information Processing Systems, 32.

交通・都市・国土地理学研究室

M1 松永隆宏

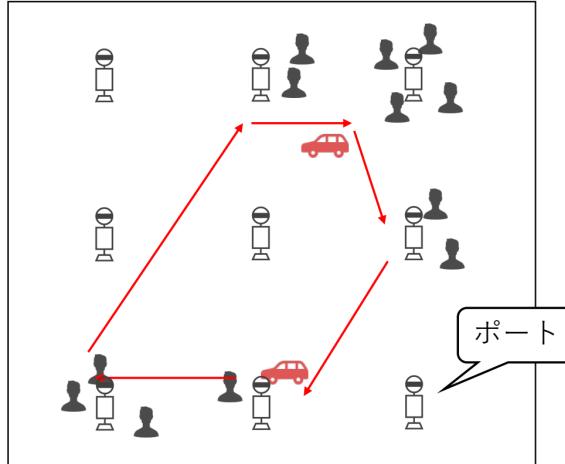
0. What is Optimal Transport?

オンデマンド交通のルーティング問題?

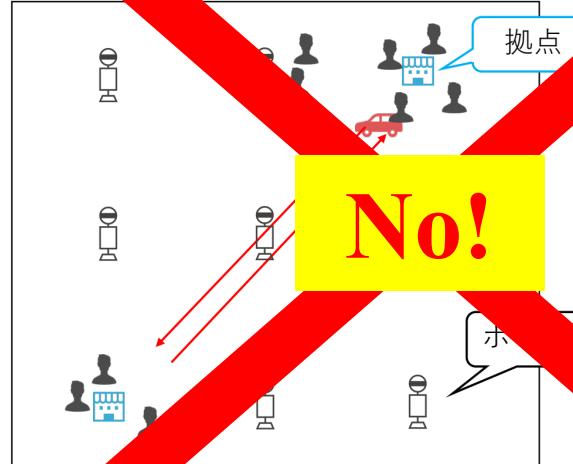
Vehicle Routing Problem of Demand Responsive Transportation?

□乗客の集まる拠点施設に車両を集める「相補的配車モデル」の提案

従前の配車方法
→車両2台、輸送できなかった人が3人



相補的配車モデル
→車両1台、輸送できなかった人なし



引用：平松卒論

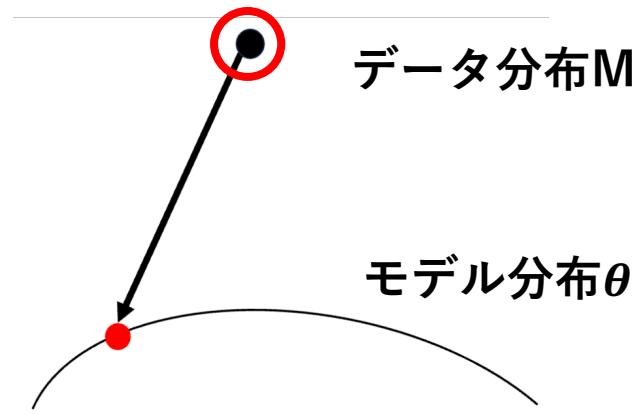


引用：付知デザインミュージアムHP

0. What is ‘Estimation’?

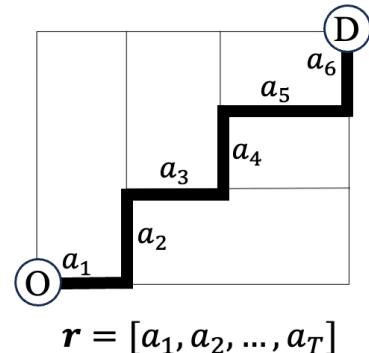
- データに近いモデルを作る / Developing a model that is close to input data
 - 例：歩行者の経路選択行動を記述 = 再現するRLモデルの推定
ex) estimation of mixed-RL model for explanation of individuals' activity scheduling pass
- 「近さ」をどう評価する？/ How to evaluate ‘closeness’?

いつも出てくるのは尤度最大化
maximization of loglikelihood



データ分布Mの確定

経路の確定



通過リンクを
0, 1で確定

モデル分布 θ の確定（推定）

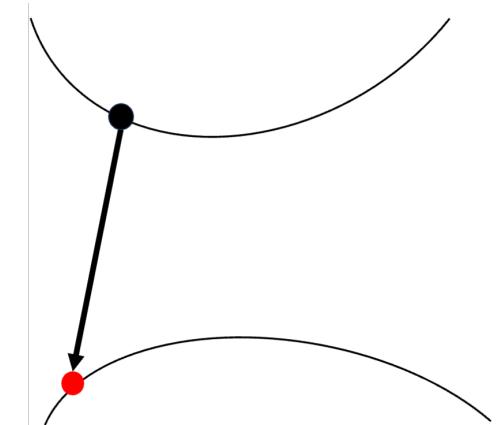
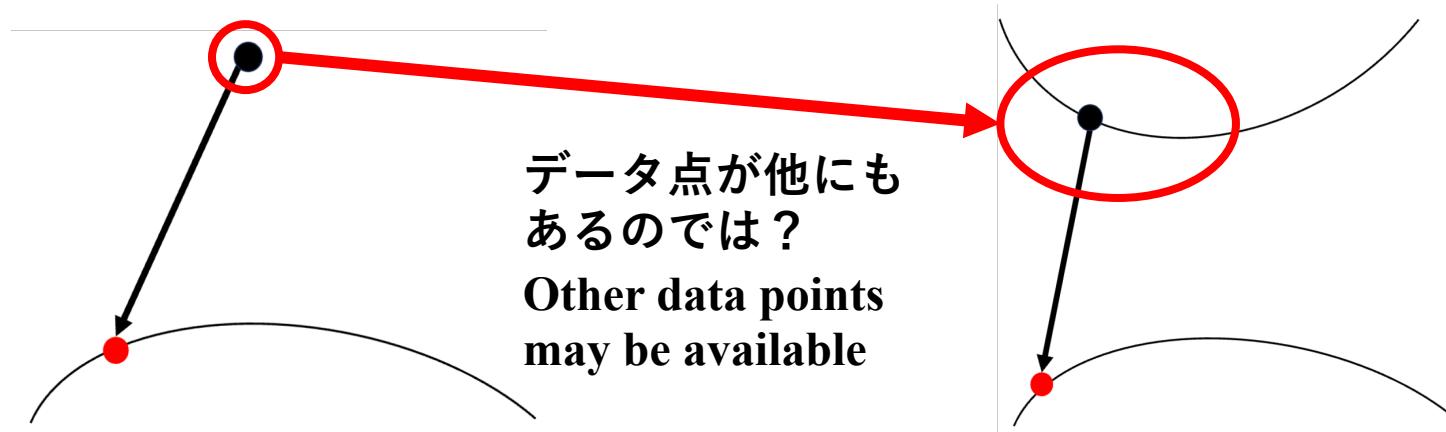
$$\operatorname{argmax}_{\theta} \delta_{a_t} \sum_{t=1}^T p(a_t)$$

0. Maximization of likelihood & KL divergence

- 普段の最尤法は、データ分布が決まってる時のKLダイバージェンス最小化
- 一般には、最尤法 = KLダイバージェンスの最小化
Generally, maximization of likelihood is equal to minimization of KL divergence

松永卒論：観測点の不確実性を考慮した推定方法を実装
My theme: how to consider the unconsciousness of data point

KLダイバージェンス最小化
minimization of KL divergence



0. Divergence & Distance

- ・ダイバージェンスは距離の公理を満たさない

Divergence does not satisfy the distance axiom

より細かな分布間の差異や構造を考慮できない
(前半の薬師神の発表参照)

- 距離の公理
- ・対称性
 - ・三角不等式
 - ・非退化性

- ・一方最適輸送は距離構造を考慮できる！

- ・しかも「あるケースでは」距離の公理を満たす

Optimal Transport can follow the proposition under the certain condition



ワッサーマン距離/Wasserstein distance

Abstract

- 最適輸送によるグラフ比較の方法論
Method of **Graph Comparison based on Optimal Transport**
- ワッサーライン距離によりグラフ構造全体を考慮した計量
Structurally meaningful measure **considering global structure of graphs using Wasserstein distance**
- 非凸なグラフ整列問題に対する効率的なアルゴリズム
Efficient algorithm for non-convex graph alignment problem

Novelty, Usefulness, Reliability

Novelty/新規性

- グラフ信号処理と最適輸送を組み合わせて、グラフ比較という困難な研究対象に新たな手法を提案した
Proposed a novel method for graph comparison, a difficult problem, by combining graph signal processing and optimal transport

Usefulness/有用性

- 実データをグラフで表現さえすれば様々な現象記述・制御・輸送に展開できそう？
By expressing in the form of graphs, lots of phenomena can be explained using the concept of this paper
- 推定ではAIRLの方が良いか？AIRL might be better for parameter estimation

Reliability/信頼性

- MINSTや生成グラフを用いて手法の優位性・有効性を実証（何をしてるのかイマイチわかりにくいが）
Conducting case study using MINST and graph data
- GOTの正式名称が見当たらない・・・What does GOT stands for...????

データの多様性を表現しきれない

Unable to express a diversity of data (Kim & Prateek, 2023)

👉門坂回&小川さん春大会発表
Ref) Kadosaka-san & Ogawa-san's presentation

1. Introduction

- 複雑化・構造化した情報→**グラフ表現**の台頭
More complicated and structured information → often expressed using graphs
- グラフ比較は有効な手段がなく非常に難しい
graph comparison is very difficult and there are no effective methods
- 本研究では**グラフ比較のための手法**を提案
This study proposes a method for graph comparison
 - **二つのグラフの距離とグラフ間輸送計画**が計算可能に
Enables the calculation the distance between two graphs and the transport map
- **直接比較するのではなく滑らかなグラフ信号分布に着目**
Focusing on smooth graph signal distribution instead of comparing graphs directly
- **分布間距離を考える際にWasserstein距離と最適輸送を援用**
Using Wasserstein distance for optimal transport in calculating distance between distributions
- グラフ対応問題の非凸性を解消するための新たな計算方法も提案
Proposing novel approach to tackle non-convexity of graph alignment problems

1.1 Related work

- **最適輸送(1781)。近年再考されている**
Optimal transport, proposed first in 1781 by Monge, is largely revised recently
 - 画像処理, データ分析, 機械学習
Image processing, data analysis, machine learning
- グラフマッチング問題の解法/ How to solve graph matching problems
 - 二次割当問題(NP-hard)としての定式化 → 近似解法が提案してきた
Formulation as a quadratic assignment(NP-hard) → method for approximate solution
 - スペクトルクラスタリング
 - 半正定値プログラミングの緩和
 - 凸緩和
 - ガンベルシンクホーンネットワーク
 - 最適輸送の観点から対応を考える手法：本研究に近い
 - Flamary et al., Gu et al., Nikolentzos et al.
 - グロモフ・ワッサースタイン距離
 - グラフ距離行列のグロモフ-ワッサースタイン距離と
グラフ信号のワッサースタイン距離を組み合わせた距離測定

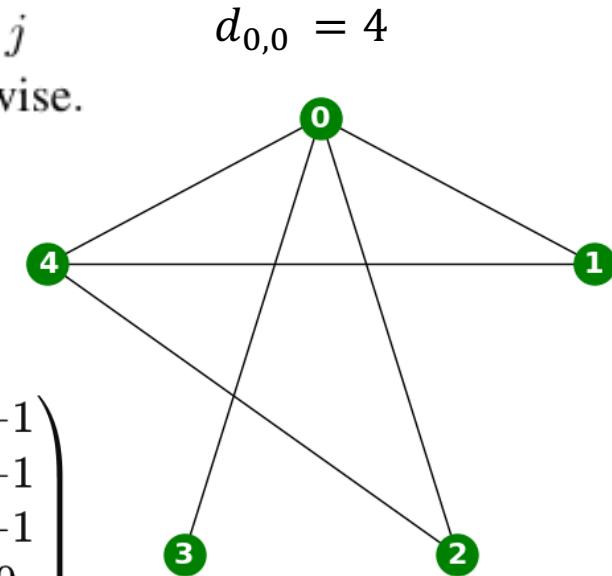
2.1 Preliminaries

- グラフ graph $\mathcal{G} = (V, E)$
- 隣接行列 Adjacency matrix W
- 度数行列 Degree matrix D
- グラフラプラシアン Graph Laplacian $L : L = D - W$

$$D = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} \quad W = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad L = \begin{pmatrix} 4 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 2 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ -1 & -1 & -1 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

重み付きグラフの場合、隣接行列の値は重みと対応する

$$D_{i,j} = \begin{cases} d(i) & \text{if } i = j \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases}$$



グラフ構造についての情報を詰め込んだ行列
Matrix of graph's structure

対角成分はノードについての情報
非対角成分はノード間エッジについての情報

2.1 Preliminaries

グラフと信号/Graph & Signal

信号値/ signal values

$$f: V \rightarrow \mathbb{R}^N$$

(デジタル) 信号処理

信号構造/ structure

$$G = (V, E)$$

グラフ理論、NW解析

要素 scalar $f(i)$: グラフの頂点 i に対応付けられたスカラー

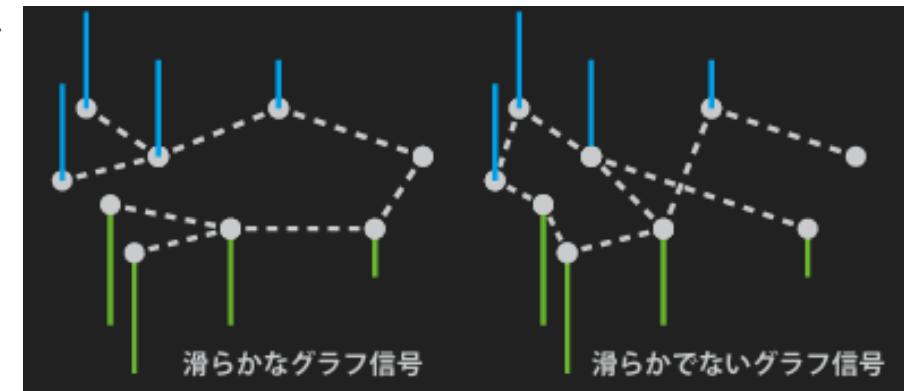
出典[1]より作成

グラフ信号の特徴付け: グラフ (構造) と信号値の両方が必要/
Graph signal needs both graph structures and signal values

滑らかなグラフ: 隣接ノードで徐々に信号が移行するグラフ
Smoothness: how slightly signals vary between connected nodes

強い接続: 接続エッジの重みが大きいノード間の関係

Strong connection: relationships among nodes with heavy weights



出典[1]

2.2 Smooth Graph Signals

ラプラシアン行列 L_1, L_2 のグラフ $\mathcal{G}_1, \mathcal{G}_2$ に対し、信号分布を定義

Define graph signal distributions for graph $\mathcal{G}_1, \mathcal{G}_2$ with Laplacian matrices L_1, L_2 .

$$\begin{aligned}\nu^{\mathcal{G}_1} &= \mathcal{N}(0, L_1^\dagger) && \text{mean: } 0, \text{ covariance matrix: } L_1^\dagger, L_2^\dagger \\ \mu^{\mathcal{G}_2} &= \mathcal{N}(0, L_2^\dagger).\end{aligned}$$

L_1^\dagger はグラフ信号の平滑性を捉えている

Laplacian matrix can capture the smoothness of graph signal distribution

- L_1^\dagger の対角成分が大きいほどそのノードの信号の分散が大きい
- L_1^\dagger の非対角成分が大きいほどその2ノード間の信号の相関が強い
 - ノード i, j が強く接続されているとき、共分散行列 L_1^\dagger の対応する成分 $(L_1^\dagger)_{i,j}$ は大きくなる（相関大）

L_1^\dagger : L_1 の擬似逆演算子
(逆行列の一般化)

<復習>
逆行列は正則でないと定義できない
→非正則な行列に対して逆行列（の役割をするもの）を定義
→擬似逆演算子

強く接続してるノード間から徐々に信号が変化するという仮定 → 一般的な仮定

Signal values vary slowly between strongly connected nodes → common assumption

2.3 Wasserstein Distance between graphs

グラフ $\mathcal{G}_1, \mathcal{G}_2$ そのものではなく信号分布 $\nu^{\mathcal{G}_1}, \mu^{\mathcal{G}_2}$ を比較

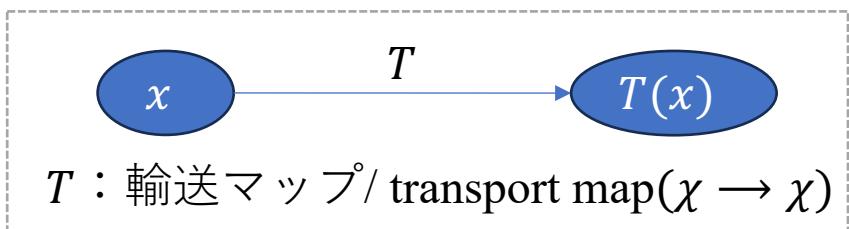
Focusing on signal distribution to compare graphs, instead of graphs themselves

分布 $\nu^{\mathcal{G}_1}, \mu^{\mathcal{G}_2}$ に関するワッサークイン距離
Wasserstein Distance of the distributions $\nu^{\mathcal{G}_1}, \mu^{\mathcal{G}_2}$

👉 Wasserstein距離は
距離の公理を満たす(p.2)

Wasserstein distance

$$W_2^2(\nu^{\mathcal{G}_1}, \mu^{\mathcal{G}_2}) = \inf_{T_{\#} \nu^{\mathcal{G}_1} = \mu^{\mathcal{G}_2}} \int_{\mathcal{X}} \|x - T(x)\|^2 d\nu^{\mathcal{G}_1}(x)$$



Reformulate with Laplacian matrices

$$W_2^2(\nu^{\mathcal{G}_1}, \mu^{\mathcal{G}_2}) = \text{Tr} \left(L_1^\dagger + L_2^\dagger \right) - 2 \text{Tr} \left(\sqrt{L_1^{\frac{1}{2}} L_2^\dagger L_1^{\frac{1}{2}}} \right)$$

Optimal transport map

$$T(x) = L_1^{\frac{1}{2}} \left(L_1^{\frac{1}{2}} L_2^\dagger L_1^{\frac{1}{2}} \right)^{\frac{1}{2}} L_1^{\frac{1}{2}} x$$

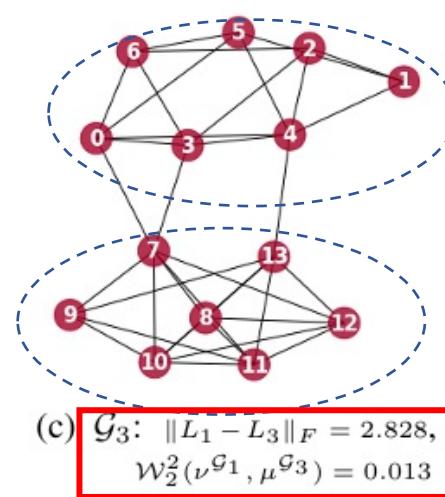
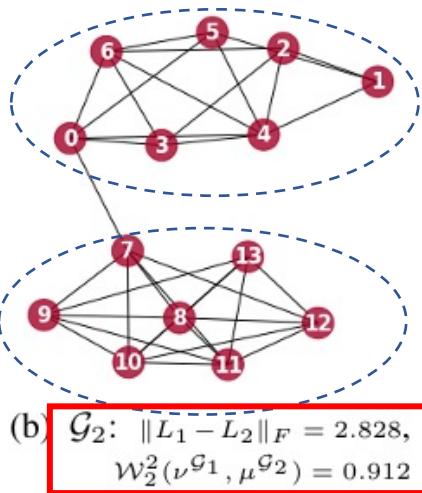
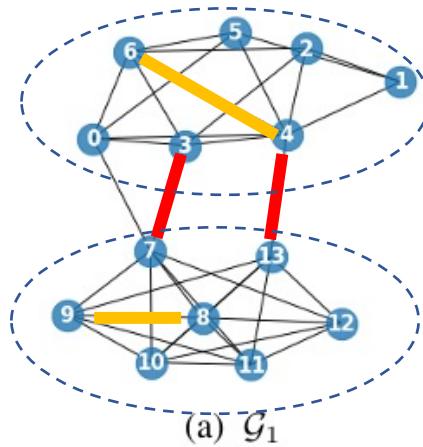
Advantages of reformulated: W_2^2

- 閉形で書ける → 計算量小
Closed form, meaning less calculation cost!
- L を直接利用してためグラフ性質を評価可能
graph laplacian is directly used, so we can evaluate graphs' character

2.3 Wasserstein Distance between graphs

Wasserstein距離はグラフ要素の大域的な接続条件への感度が高い

-Sensitive to differences that cause a global change in the graph components connection



構造的には2つのグループに分かれる
Can be divided into two communities

- ラプラシアン行列のユークリッド距離ではグループ構造の違いを検出できず
Euclid norm between the Laplacian matrices fails to detect the difference of group structures
- ワッサークイン距離では大域的な構造の差を捉えている
Wasserstein distance can capture the difference of the global graph structure

Wasserstein距離は信号分布を元にグラフを比較するための計量として望ましい

-Now we are equipped with a measure to compare aligned graphs of the same size through signal distributions

2.4 Graph Alignment

- グラフ \mathcal{G}_1 から \mathcal{G}_2 への最適輸送を考える ← グラフ ラプラシアン
Optimal Transport from graph \mathcal{G}_1 to \mathcal{G}_2

$$W_2^2(\nu^{\mathcal{G}_1}, \mu^{\mathcal{G}_2}) = \text{Tr} \left(L_1^\dagger + L_2^\dagger \right) - 2 \text{Tr} \left(\sqrt{L_1^{\frac{1}{2}} L_2^\dagger L_1^{\frac{1}{2}}} \right)$$

- ラプラシアンはノードの列挙法（配置）が変わると変化
Laplacian varies as the enumeration of nodes change
- 配置が動的に変化する状況で対応問題を考えるときに困難が生じる
Troublesome when considering the alignment of dynamic graph

- グラフ \mathcal{G}_2 のすべての状態を考慮するため、確率測度を定義

To evaluate all possible structures, we define probability measure of graph \mathcal{G}_2

- 可能性のある全ての \mathcal{G}_2 を確率的に考えることを意味する
Treating all the possible \mathcal{G}_2 stochastically

ノードの順番（配置）
が変化する置換を考え
るので確率測度を定義
することは重要

P は置換行列 → 次頁

$$\mu_P^{\mathcal{G}_2} = \mathcal{N}(0, (P^\top L_2 P)^\dagger) = \mathcal{N}(0, P^\top L_2^\dagger P)$$

2.4 Graph Alignment

置換行列について / About permutation matrix

$$L_2 = \begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

元のラプラシアン行列
Original Laplacian matrix

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

2, 3入れ替わる
1, 4入れ替わらない

ノード2と3を入れ替える置換行列
Permutation matrix that changes nodes 1 and 2

$$P^T L_2 P = \begin{pmatrix} 2 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

入れ替え後のラプラシアン行列
Laplacian matrix after permutation

結局、ワッサーライン距離を最小にするような置換行列を求めるべき

The goal is to estimate permutation matrix that minimize Wasserstein distance

$$W_2^2(\nu^{\mathcal{G}_1}, \mu^{\mathcal{G}_2}) = \text{Tr} \left(L_1^\dagger + L_2^\dagger \right) - 2 \text{Tr} \left(\sqrt{L_1^{\frac{1}{2}} L_2^\dagger L_1^{\frac{1}{2}}} \right) \quad \longrightarrow \quad \underset{P \in \mathbb{R}^{N \times N}}{\text{minimize}} \quad \mathcal{W}_2^2(\nu^{\mathcal{G}_1}, \mu_P^{\mathcal{G}_2}) \quad \text{s.t.}$$

$$\begin{cases} P \in [0, 1]^N \\ P \mathbb{1}_N = \mathbb{1}_N \\ \mathbb{1}_N^\top P = \mathbb{1}_N \\ P^\top P = I_{N \times N} \end{cases}$$

これでノード配列が変わる場合を考慮した定式化になる
Now we can consider probabilistic enumeration of nodes

3. GOT algorithm

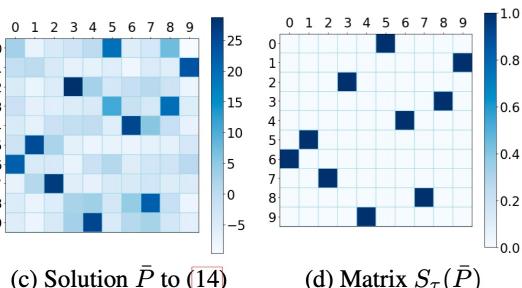
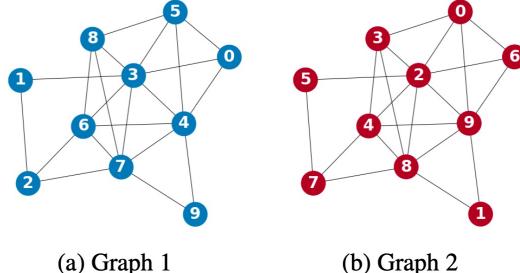
最適輸送の最適解を求める → **微分が必要**

Optimization of OT needs differentiation

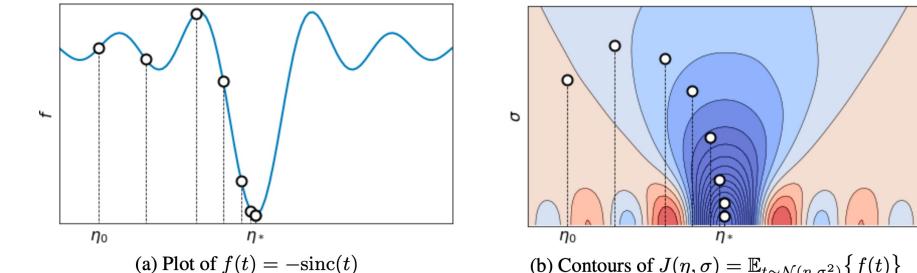
一般的に離散的なカップリング → 非連続的で微分可能性が失われる
(generally) discrete coupling → undifferentiable

3.1 微分可能な形に変形 by **シンクホーン演算子**
→ **勾配降下法**で最適化

Reformulate into differentiable form by Sinkhorn operator, then optimize by gradient descent



3.2 問題が非凸のためベイズ的探索を導入
Apply Bayesian exploration because the problem is nonconvex



3.1 Optimization

Now our goal is to solve

$$\underset{P \in \mathbb{R}^{N \times N}}{\text{minimize}} \quad \mathcal{W}_2^2(\nu^{\mathcal{G}_1}, \mu_P^{\mathcal{G}_2}), \text{ BUT...}$$

置換行列Pの解空間サイズがO(N!) の離散最適化・・・

A factorial number of feasible solutions for a permutation matrix



Pの制約を緩和し連続最適化に持ち込んで微分可能に
Constraint reformulation and make the problem differentiable

$$\text{シンクホーン演算子/ Sinkhorn Operator} \quad \mathcal{S}_\tau(P) = A \exp(P/\tau) B$$

$\exp\left(\frac{P}{\tau}\right)$ の各行和・各列和が1になるようにPを正規化 (A, Bは対角行列)

Sinkhorn operator \mathcal{S}_t normalizes the rows and columns of $\exp\left(\frac{P}{\tau}\right)$ with A, B

右の計算を、各行和・各列和が1になるまで反復

$$A^{[k]} = \text{diag}(P^{[k]} \mathbb{1}_N)^{-1}$$
$$B^{[k]} = \text{diag}(\mathbb{1}_N^\top A^{[k]} P^{[k]})^{-1}$$

$$P^{[k+1]} = A^{[k]} P^{[k]} B^{[k]},$$

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

ノードの並替えはN!通り

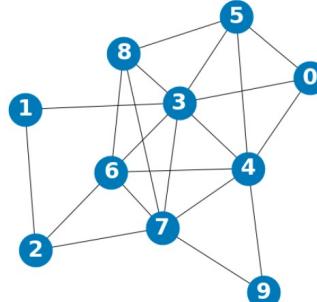
N! ways to change the alignment
of nodes with size N
node1 to 3, 2 to 1, 3 to 2.

3.1 Optimization

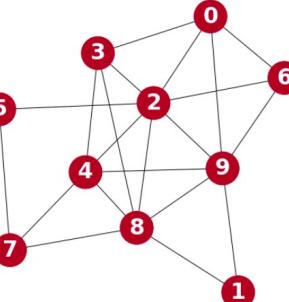
目的関数が連續化→微分可能に / Now the cost function is differentiable

$$\underset{P \in \mathbb{R}^{N \times N}}{\text{minimize}} \quad \mathcal{W}_2^2(\nu^{\mathcal{G}_1}, \mu_{S_\tau(P)}^{\mathcal{G}_2}) \quad (14)$$

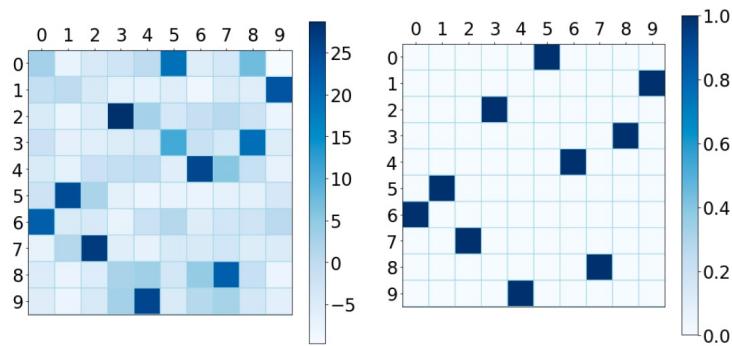
勾配降下で解ける / Can be solved by gradient descent



(a) Graph 1



(b) Graph 2



(c) Solution \bar{P} to (14)

(d) Matrix $S_\tau(\bar{P})$

- Graph 1, 2に関する(14)の最適解は図(c)：セルの値が割当尤度に対応
Solution \bar{P} to (14) of Graph 1, 2 is shown in fig(c). Cell's value corresponds to alignment likelihood
- $s_\tau(\bar{P})$ は図(d)：セルの値が確率値 (0, 1)
 $s_\tau(\bar{P})$ is shown in fig(d). Values are probability(0, 1)

3.2 Stochastic exploration/ 確率的探索

Now our goal is to solve

$$\underset{P \in \mathbb{R}^{N \times N}}{\text{minimize}} \quad \mathcal{W}_2^2(\nu^{\mathcal{G}_1}, \mu_{\mathcal{S}_{\tau}(P)}^{\mathcal{G}_2})$$

非凸！nonconvex!



置換行列 P をパラメタ θ の分布 q_{θ} で与え、 θ についての \mathcal{W}_2^2 の期待値最小化問題に変換
Reformulation into minimizing the expectation with regard to θ

$$\underset{\theta}{\text{minimize}} \quad \mathbb{E}_{P \sim q_{\theta}} \left\{ \mathcal{W}_2^2(\nu^{\mathcal{G}_1}, \mu_{\mathcal{S}_{\tau}(P)}^{\mathcal{G}_2}) \right\}$$

→ベイズ探索 Bayesian exploration

$$\theta = (\eta, \sigma) \in \mathbb{R}^{N \times N} \times \mathbb{R}^{N \times N}$$

$$q_{\theta} = \prod_{i,j} \mathcal{N}(\eta_{ij}, \sigma_{ij}^2)$$

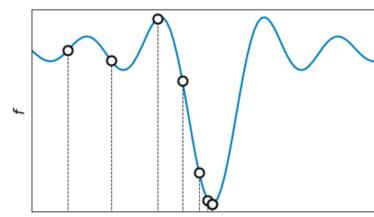
q_{θ} は多変量正規分布で与える q_{θ} is given from the multivariate normal distribution

$$(\forall (i, j) \in \{1, \dots, N\}^2) \quad P_{ij} \sim \underbrace{\mathcal{N}(\eta_{ij}, \sigma_{ij}^2)}_{q_{\theta}} \Leftrightarrow \begin{cases} \epsilon_{ij} \sim \mathcal{N}(0, 1) \\ P_{ij} = \eta_{ij} + \sigma_{ij}\epsilon_{ij} \end{cases}$$

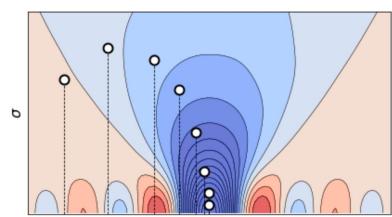
q_{unit} is parameter-less

$$q_{\text{unit}} = \prod_{i,j} \mathcal{N}(0, 1) \quad \underset{\eta, \sigma}{\text{minimize}} \quad \underbrace{\mathbb{E}_{\epsilon \sim q_{\text{unit}}} \left\{ \mathcal{W}_2^2(\nu^{\mathcal{G}_1}, \mu_{\mathcal{S}_{\tau}(\eta + \sigma \odot \epsilon)}^{\mathcal{G}_2}) \right\}}_{J(\eta, \sigma)}$$

$$\nabla J(\eta, \sigma) \approx \sum_{\epsilon \sim q_{\text{unit}}} \nabla \mathcal{W}_2^2(\nu^{\mathcal{G}_1}, \mu_{\mathcal{S}_{\tau}(\eta + \sigma \odot \epsilon)}^{\mathcal{G}_2})$$



(a) Plot of $f(t) = -\text{sinc}(t)$



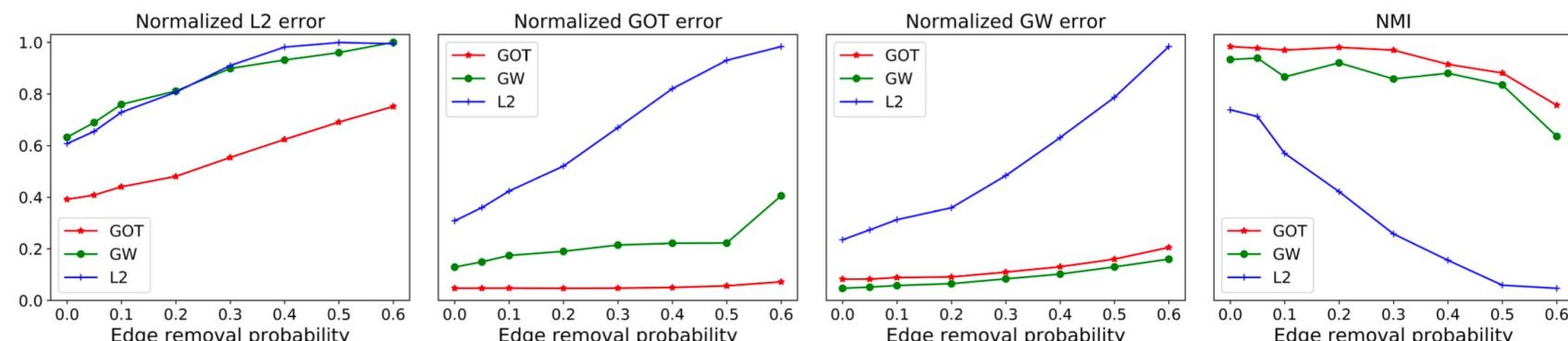
(b) Contours of $J(\eta, \sigma) = \mathbb{E}_{t \sim \mathcal{N}(\eta, \sigma^2)} \{f(t)\}$

確率的勾配降下で解ける
局所解に陥らず大域的な最適解に到達
can be solved by stochastic gradient descent

4.1 Alignment of structured graphs

- 構造化グラフの対応

- 40ノード, 4グループを持つ生成/ Generate graphs with 40 nodes and 5 communities
- エッジの削除でノイズを加えたグラフを作成/ Create noisy graphs by eliminating nodes
- これらのグラフのノード配置置換をランダムに生成/ Generate permutation randomly
- 3手法で比較/ Compare three methods (GOT, GW, L2)
- 評価手法を4種類用意/ Four types of evaluation criteria



0に近い方が良い The closer to 0, the better

1に近い方が良い
The closer to 1, the better

GOTは安定して良い性能
GOT performs good

4.2 Graph classification

- ランダムグラフの分類課題/ Random graph classification

- 5モデルに従って100個のグラフを出力/ Creating 100 graphs from five models(SBM2, SBM3, RG, BA, WS)
- どのグラフも20ノード, エッジ数も類似/ All graphs have 20nodes and a similar number of edges
- 置換をランダムに生成/ Creating P (permutation matrix) at random
- 置換グラフを分類させて比較/ Categorizing permuted graphs to an original class and comparing models

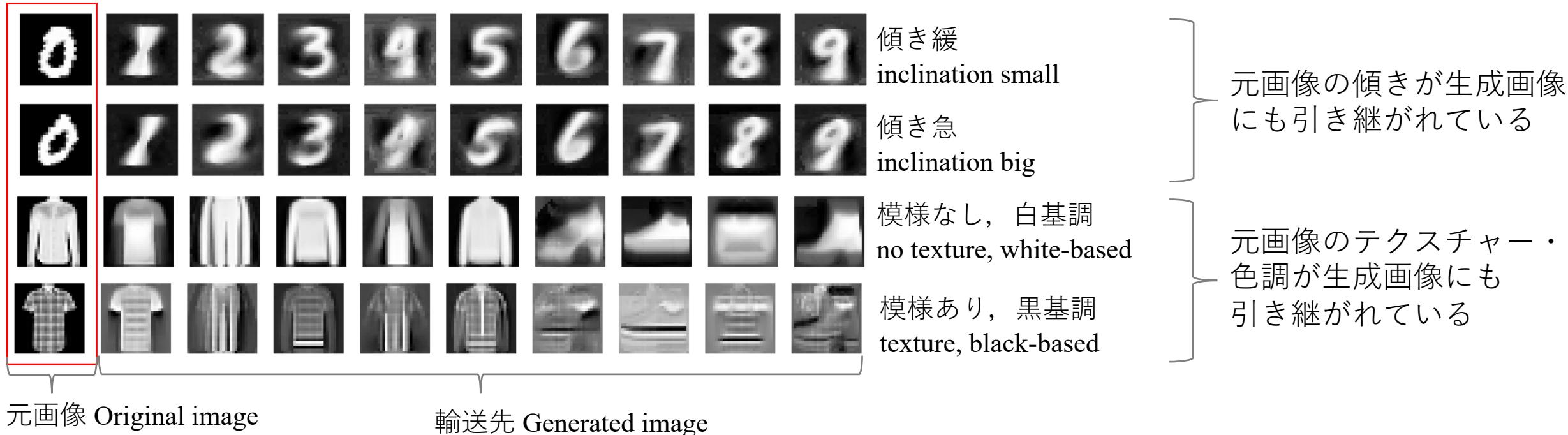


**提案手法が最も分類に成功
GOT(proposed) shows the best performance**

見方：行が実際のグラフに対応, 列が予測したグラフに対応。
色が明るい方が正解→対角線が明るくなるはず
Rows correspond to the actual graph, columns correspond to the predicted graph.
Lighter colors are correct — diagonals should be brighter.

4.3 Graph signal transportation

- MNISTを使用 / using MNIST



識別可能な画像を生成。またこれらが元画像と似ている

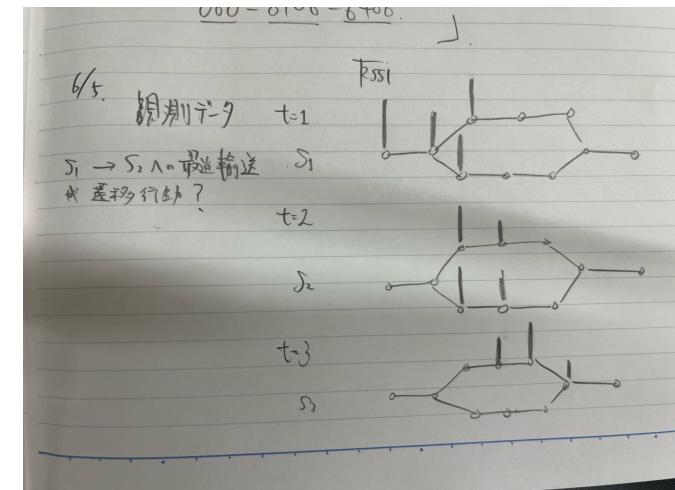
GOT model generated recognizable images, which have common features with original one.

5. Conclusion

- 最適輸送によるグラフ比較の方法論を、グラフ信号分布間のワッサーマン距離に着目して構築した
Method of **Graph Comparison based on Optimal Transport**
- 非凸なグラフ対応問題に対する効率的なアルゴリズムを提案した
Efficient algorithm for non-convex graph alignment problem
- ケーススタディで提案手法の有効性を確認した

どのように研究に使えそうか

- NW上のBLEの観測状況がそのままグラフ信号分布になる？
- 都市におけるポテンシャルをグラフで表現（利便性、など？）
- 「状態の輸送」という点では制御にも近い？
 - 制御といえば、可制御グラミアン（奥田さん修論）
- NW上でなんらかの「状態」を数値化したものをグラフ信号分布と解釈すれば本論文に通じる？



所感

- 推定とは何かという問いは統計・機械学習とも通じる本質的な議論であり、今年は門坂分・薬師神分を含めた3本で勉強できたのは良かった
 - 小川さんのAIRL研究とも密接
- 情報理論・情報幾何（多様体）などと絡めるとさらに奥深い（沼）
- グラフ理論とも関係が深そう

興味を持った方へ

- 最適輸送の理論とアルゴリズム、佐藤竜馬、講談社、2023
- 情報幾何学の新展開、甘利俊一、サイエンス社、2014