

12-13-2019

A method of manifold learning for Locality Preserving Projections based on geodesic

Lijun Xu

Navy Factory 902, shanghai 200083, China;

Jinghan Fang

Navy Factory 902, shanghai 200083, China;

Yiping Wang

Navy Factory 902, shanghai 200083, China;

Follow this and additional works at: <https://dc-china-simulation.researchcommons.org/journal>



Part of the Artificial Intelligence and Robotics Commons, Computer Engineering Commons, Numerical Analysis and Scientific Computing Commons, Operations Research, Systems Engineering and Industrial Engineering Commons, and the Systems Science Commons

This Paper is brought to you for free and open access by Journal of System Simulation. It has been accepted for inclusion in Journal of System Simulation by an authorized editor of Journal of System Simulation.

A method of manifold learning for Locality Preserving Projections based on geodesic

Abstract

Abstract: In order to solve the problem of under-fitting state of LPP algorithm in practical application, in this paper, the mapping principle of Locality Preserving Projections (LPP) is discussed in detail. The relationship of LPP method between the under-fitting state on certain dataset and adjacency graph is analyzed. *The LPP manifold learning method (ISOLPP) is proposed on the basis of geodesic.* The experiment results show that the good embedded effect is achieved by implementing ISOLPP method on multiple test data sets. It significantly improves the adaptability of the algorithm by not only inheriting the advantages of LPP algorithm with explicit projection matrix, but also solving the disadvantages of LPP algorithm in the under-fitting state.

Keywords

Locality Preserving Projections, under-fitting state, geodesic

Recommended Citation

Xu Lijun, Fang Jinghan, Wang Yiping. A method of manifold learning for Locality Preserving Projections based on geodesic[J]. Journal of System Simulation, 2019, 31(12): 2892-2900.

一种基于测地线的保局投影流形学习方法

徐礼俊, 方婧涵, 王亦平

(海军 902 厂, 上海 200083)

摘要: 为了解决在实际应用中 LPP 算法存在欠拟合状态的问题, 详细论述了保局投影(LPP)的映射原理; 分析了 LPP 方法在某些数据集下的欠拟合状态与邻接图之间的关系; 提出了基于测地线的 LPP(ISOLPP)流形学习方法。实验结果显示, ISOLPP 方法在多个测试数据集上取得了很好的嵌入效果, 不仅能够继承 LPP 具有显式投影矩阵的优点, 而且解决了 LPP 算法中存在欠拟合状态的问题, 显著提高了算法的适应性。

关键词: 保局投影; 欠拟合状态; 测地线

中图分类号: TP391.9 文献标识码: A 文章编号: 1004-731X (2019) 12-2892-09

DOI: 10.16182/j.issn1004731x.joss.19-FZ0387

A method of manifold learning for Locality Preserving Projections based on geodesic

Xu Lijun, Fang Jinghan, Wang Yiping

(Navy Factory 902, shanghai 200083, China)

Abstract: In order to solve the problem of under-fitting state of LPP algorithm in practical application, in this paper, the mapping principle of Locality Preserving Projections (LPP) is discussed in detail. The relationship of LPP method between the under-fitting state on certain dataset and adjacency graph is analyzed. *The LPP manifold learning method (ISOLPP) is proposed on the basis of geodesic.* The experiment results show that the good embedded effect is achieved by implementing ISOLPP method on multiple test data sets. It significantly improves the adaptability of the algorithm by not only inheriting the advantages of LPP algorithm with explicit projection matrix, but also solving the disadvantages of LPP algorithm in the under-fitting state.

Keywords: Locality Preserving Projections; under-fitting state; geodesic

引言

保局投影(LPP)线性流形学习方法能够通过显式投影矩阵获得新样本的低维映射, 但是 LPP 本身是一种局部学习方法, 在一些样本集上, 会将处于流形上的高维采样空间中相互远离的样本点映射到低维空间的一个局部邻域内。这使得在进行谱

图分析时, 重构点将由流形上相互远离的样本点进行平均得到, 因此与样本集之间存在较大的偏差, 这就是文献[1]定义的欠拟合状态。在特征提取任务下, 流形学习应当满足的两个准则是: 相似性保持准则与重构误差最小化准则。流形学习方法满足局部相似性保持准则, 但不能保证最小化重构误差, 因此可能会导致欠拟合现象。克服此问题的关键在于使得原本在数据流形上相距较远的样本的特征也相距较远。

1 保局投影的映射原理

给定一组样本集 $X = [x_1, x_2, \dots, x_N]$, $x_i \in R^D$,



收稿日期: 2019-05-30 修回日期: 2019-07-31;
作者简介: 徐礼俊(1975-), 男, 江苏兴化, 本科, 工程师, 研究方向为导航工程; 方婧涵(1986-), 女, 浙江临海, 硕士, 工程师, 研究方向为导航工程; 王亦平(1982-), 男, 江苏泰州, 博士, 工程师, 研究方向为导航工程。

<http://www.china-simulation.com>

• 2892 •

建立一个邻接图 $G=(V, E)$, 在这一图中, 邻接点间存在边缘连接。将邻接图 G 映射到一低维空间中, 使得相互连接的点尽可能保持较近的距离。令 $\mathbf{Y}=[\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \dots, \mathbf{y}_N]$, $\mathbf{y}_i \in R^d$ 为映射结果, 选择这一映射的标准是在适当的约束条件下最小化以下目标函数:

$$\sum_{ij} \|\mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j\|^2 \mathbf{W}_{ij} \quad (1)$$

式中: \mathbf{W}_{ij} 为样本点 \mathbf{x}_i 和样本点 \mathbf{x}_j 的连接权重系数, 若样本点 \mathbf{x}_i 和样本点 \mathbf{x}_j 相距很远, \mathbf{W}_{ij} 很小, 反之则很大。最小化上式目标函数的目的是如果样本点 \mathbf{x}_i 和样本点 \mathbf{x}_j 的距离很近, 则满足映射点 \mathbf{y}_i 和 \mathbf{y}_j 的距离也很近。假设 \mathbf{a} 为映射向量, 则 $\mathbf{Y} = \mathbf{a}^T \mathbf{X}$ 。将式(1)展开:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \sum_{ij} \|\mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j\|^2 \mathbf{W}_{ij} = \\ & \frac{1}{2} \sum_{ij} (\mathbf{a}^T \mathbf{x}_i - \mathbf{a}^T \mathbf{x}_j)^T (\mathbf{a}^T \mathbf{x}_i - \mathbf{a}^T \mathbf{x}_j) \mathbf{W}_{ij} = \\ & \sum_i \mathbf{a}^T \mathbf{x}_i \mathbf{D}_{ii} \mathbf{x}_i^T \mathbf{a} - \sum_{ij} \mathbf{a}^T \mathbf{x}_i \mathbf{W}_{ij} \mathbf{x}_j^T \mathbf{a} = \\ & \mathbf{a}^T \mathbf{X}(\mathbf{D} - \mathbf{W})\mathbf{X}^T \mathbf{a} = \\ & \mathbf{a}^T \mathbf{X}\mathbf{L}\mathbf{X}^T \mathbf{a} \end{aligned}$$

式中: \mathbf{D} 是一个对角矩阵; $\mathbf{D}_{ii} = \sum_j \mathbf{W}_{ij}$; $\mathbf{L} = \mathbf{D} - \mathbf{W}$ 为拉普拉斯矩阵。根据矩阵 \mathbf{D} 可以看出数据点的重要性, \mathbf{D} 的值越大, 样本点越重要, 因此加入一个约束条件:

$$\mathbf{Y}\mathbf{D}\mathbf{Y}^T = 1 \Rightarrow \mathbf{a}^T \mathbf{X}\mathbf{D}\mathbf{X}^T \mathbf{a} = 1$$

最小化问题就转换为找出映射向量 \mathbf{a} , 见式(2):

$$\arg \min_{\mathbf{a}^T \mathbf{X}\mathbf{D}\mathbf{X}^T \mathbf{a} = 1} \mathbf{a}^T \mathbf{X}\mathbf{L}\mathbf{X}^T \mathbf{a} \quad (2)$$

由此转换为求下面的特征解问题:

$$\mathbf{X}\mathbf{L}\mathbf{X}^T \mathbf{a} = \lambda \mathbf{X}\mathbf{D}\mathbf{X}^T \mathbf{a} \quad (3)$$

根据上面的推论和一些数学知识, 我们可以得出矩阵 $\mathbf{X}\mathbf{L}\mathbf{X}^T$ 和矩阵 $\mathbf{X}\mathbf{D}\mathbf{X}^T$ 都是正定阵。这样, 上式的前 d 个最小的特征值 $\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_d$ 所对应的特征向量 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_d$ 组成的矩阵即为映射矩阵 $\mathbf{A}=(\mathbf{a}_0, \mathbf{a}_1, \mathbf{L}, \mathbf{a}_d)$, 满足 $\mathbf{y}_i = \mathbf{A}^T \mathbf{x}_i$ 。

2 保局投影的欠拟合状态

如前所述, 当嵌入方法只能满足局部相似性保持准则, 而不能保证重构误差(式(1))最小化时, 就会导致欠拟合现象的发生。目前多数流形学习算法是基于局部邻域关系的(如 LLE, HLLE, LSTA, LE 以及 LPP), 即都是在保持局部拓扑结构的基础上最小化重构误差函数。LPP 线性流形学习通过对邻域样本点的搜索设置关系权值矩阵, 使得相互靠近的样本点在低维嵌入空间仍然相互靠近, 因此 LPP 首先遵循的是相似性保持准则。但是由于邻域点搜索使用的是欧式距离来判断是否为某一样本点的邻域点, 这种邻域搜索方法是对处于某一流形的各样本点之间相互距离的一种近似表述, 因此可能会发生误判, 从而使得在流形上相互远离的样本点映射到低维空间中的一个局部邻域内, 与流形的内在结构有较大的偏差。

论文将 swiss-roll 数据集在 z 轴方向缩小至 0.75 倍, 使得样本点在 z 轴方向彼此更“靠近”, 对流形学习方法的邻域判断要求更高。图 1 描述了 LPP 流形学习方法在 swiss-roll 数据集上出现的欠拟合情形。图 1(a)是在 3 维 swiss-roll 曲面上随机产生了 1 000 个样本点; 图 1(b)~(f)是 LPP 流形学习方法分别使用不同范围的 k 邻域搜索得到的 2 维映射结果, $k = \{5, 10, 15, 20, 25\}$ 。LPP 连接权重矩阵采用 $\mathbf{W}_{ij} = \exp(-\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2 / t)$ 设置, 且 $t = 5$ 。可以看到图 1(b)~(d)可以准确地将 3 维 swiss-roll 样本点映射到 2 维空间, 但是由于邻域搜索范围的扩大, 使得在流形上本来不处于邻域的蓝色与橙色样本点, 逐渐地被误判成了邻域, 因此在 2 维映射空间蓝色和橙色映射点在逐渐的接近。当邻域搜索范围增大到一定程度时, 如图 1(e)~(f), 可以较为明显地看出, 映射结果不能很好地逼近样本集, LPP 嵌入失败。

欠拟合状态产生的根本原因在于对邻域的选择, 如图 2 所示为 swiss-roll 数据集使用 k 最近邻判断样本点邻域的连接图, 可以看出当设定的 k

越来越大时，样本点的邻域出现了误判。对比图 1 和图 2， $k \leq 10$ 时样本点邻域判断正确，这时 LPP 算法能够获得很好的降维效果；当 $k = 15$ 时，出现了个别样本点的邻域判断失误，可以看

出在 LPP 降维过程中，邻域判断失误的样本点周围不能获得很好的降维；而当 $k \geq 20$ 时出现了大量的邻域判断失误，因此 LPP 映射失败，导致 LPP 欠拟合状态的产生。

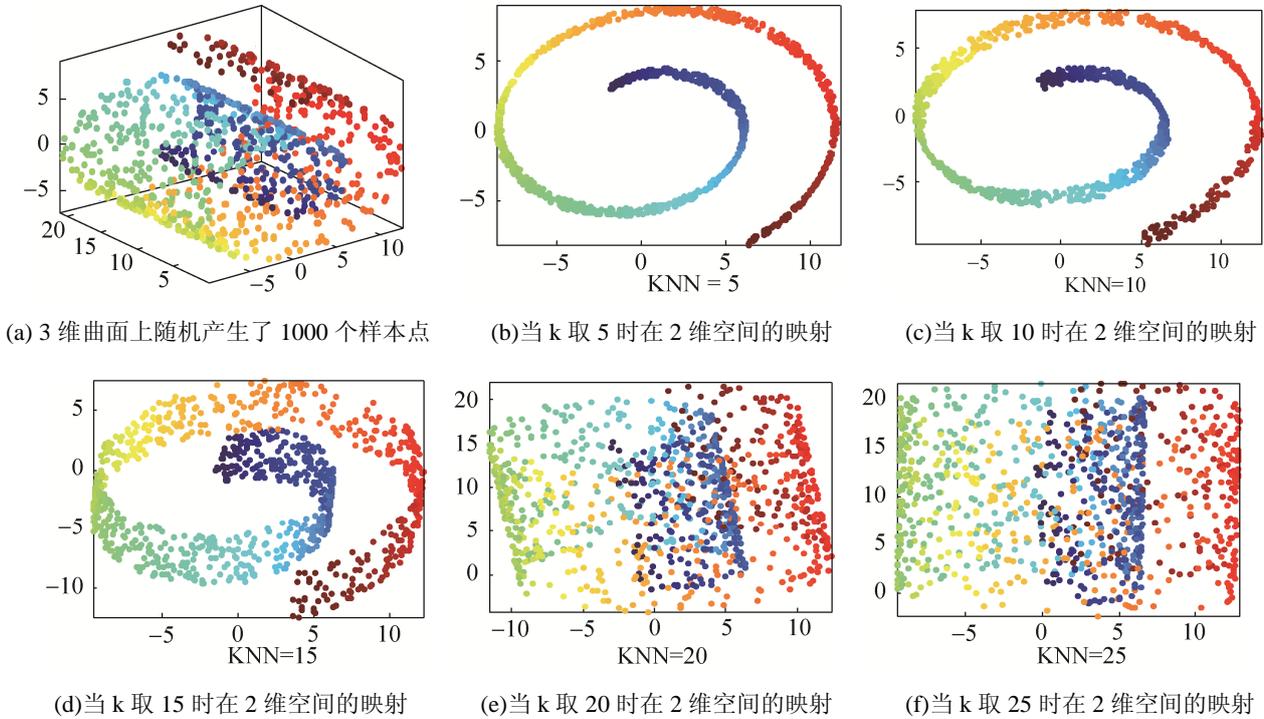


图 1 LPP 在不同邻域选择下的嵌入结果

Fig. 1 Embedding results of LPP under different neighborhood selections

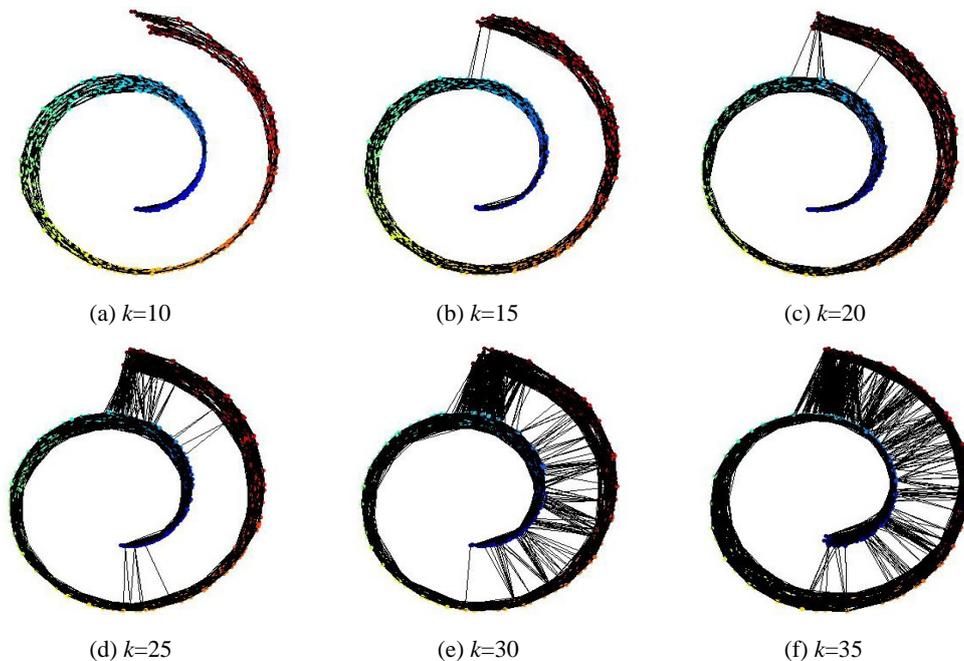


图 2 Swiss-Roll 数据集在不同 k -nearest 情况下的连接图

Fig. 2 Connection diagram of Swiss-Roll dataset in different k -nearest cases

3 基于测地线的保局投影思想及算法过程

3.1 基本思想

LPP 线性流形学习方法是一种局部方法仅考虑样本集的局部邻域信息, 即样本点与其近邻样本点之间的拓扑关系, 并在映射投影过程保持中这种局部拓扑关系。但是 LPP 并不考虑样本集的全局结构信息, 即样本点与其非近邻点之间的关系。因此, LPP 无法使得在流形上相距较远的样本点在嵌入低维空间也相距较远, 由此造成 LPP 的欠拟合状态。

为了避免 LPP 线性流形学习方法出现欠拟合状态, 论文采取的改进 LPP 基本思想是: 保证近邻样本点在嵌入低维空间仍然是近邻的条件下, 使得原本相互远离的样本在嵌入低维空间中也相互远离。定义在流形结构上的测地线距离是一种对流形全局结构的很好的度量方式, 论文考虑利用测地线距离代替用于近邻判断的欧式距离建立样本之间的连接关系, 从而使得在流形上相距较远的样本点映射到低维空间时, 也相距较远。论文将这种流形学习方法称作为基于测地线距离的保局投影(ISOLPP)。

为了重构流形结构, 首先根据样本集 X 构建一个最近邻域图 G 。计算图 G 中样本点对的最短路径。最短路径的计算能够提供一个关于流形全局结构的估计。

定义: 测地线距离 $d_M(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ 是定义在流形 M 表面连接 \mathbf{x}_i 和 \mathbf{x}_j 之间的最短曲线长度, $\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j \in R^D$, $M \subset R^D$ 。

显然, 如果流形结构是一个平面, 那么测地线是一条直线; 如果流形结构是一个球面, 那么测地线将是一段最短弧线。假设流形 M 嵌入在一个 D 维欧氏空间 R^D 上, 并考虑低维映射 $f: R^D \rightarrow R^d (d \ll D)$ 。对于 LPP 算法来讲, 映射 f 是线性的。令 d_{R^d} 为欧氏空间 R^d 的标准欧氏距离。为保持流形的内在几何结构, 定义如下关系^[2]:

$$d_M(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = d_{R^d}(f(\mathbf{x}_i), f(\mathbf{x}_j))$$

ISOLPP 的目的就是寻找一个线性映射 $\mathbf{y}_i = f(\mathbf{x}_i) = A^T \mathbf{x}_i$, 满足在低维空间 R^d 的欧氏距离 d_{R^d} 可很好地逼近流形 M 上的测地线距离 d_M , 则

$$f^* = \arg \min_f \sum_{i,j} (d_M(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) - d_{R^d}(f(\mathbf{x}_i), f(\mathbf{x}_j)))$$

实际上, 并不需要计算所有样本点对之间的测地线距离, 通过在全局寻找样本点的 k_g 个测地距离最近的邻域, 就可以使得非邻域样本点在嵌入空间相互远离, 从而减少计算量。因此论文提出的流形学习方法也可以称作基于局部测地线距离的保局投影。

寻找基于测地线的邻域点包含两个过程。

step 1: 在样本集中通过欧氏距离判断有连接的样本点构建权值图 G , 原则上任何相似度量都可以用来决定邻域关系, 通常采用欧氏距离 d_E 判断两样本点是否是邻域点。邻域点需满足以下 2 条件之一: 两样本点之间的距离小于一个固定值 ε (ε -graph), 或者其中一个样本点是另外一个的 k 最近邻 (k -graph)。样本点之间的关系被描述成带权值 $d_E(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ 的边。

step 2: 通过 Floyd 算法^[3](或者 Dijkstra 算法^[4]) 计算每个样本点的 k_g 个测地距离最近的邻域。Floyd 算法通过计算样本点之间在图 G 上的最短路径距离 $d_G(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ 来逼近流形 M 上的测地线距离 $d_M(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ 。首先令

$$d_{ij} = \begin{cases} d_E(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j), & \mathbf{x}_j \in N(i) \\ \infty & , \mathbf{x}_j \notin N(i) \end{cases}$$

然后用式(4)替换 $d_G(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$

$$\min\{d_G(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j), d_G(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_p) + d_G(\mathbf{x}_p, \mathbf{x}_j)\} \quad (4)$$

式中: $p = \{1, 2, \dots, N\}$ 。最终获得定义在图 G 上所有样本点对的最短路径, 根据下式设置, 连接权重矩阵:

$$W_{ij}^G = \exp(-d_G(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)/t), t \in R \quad (5)$$

为了获得低维映射 Y 及投影关系 A , 应用式(2)求解 $\text{trace}(Y^T(D^G - W^G)Y)$ 最小特征值问题, 其中 $D_{ii}^G = \sum_j W_{ij}^G$ 。

3.2 算法过程

给定样本集 $X = \{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^N \subset R^D$ ，和线性投影 $f(\mathbf{x}_i) = A^T \mathbf{x}_i$ ，ISOLPP 算法过程整理为：

(1) 奇异分解投影

当样本集 X 秩小于维数 D 时， XX^T 常常是奇异的。为了保证矩阵 XX^T 的非奇异性，应用奇异分解(SVD)将样本集投影到子空间，SVD 不会丢失样本集任何信息。

$$X = U \Sigma V^T$$

式中： $\Sigma = \text{diag}(\delta_1, \delta_2, L, \delta_r)$ ，且 $\delta_1 \geq \delta_2 \geq \dots \geq \delta_r \geq 0$ 是样本集 X 的特征值； $U = [u_1, u_2, L, u_r]$ 和 $V = [v_1, v_2, L, v_r]$ 分别是左右特征向量。通过丢弃特征值为零的部分将样本集映射到 SVD 映射子空间。记 $W_{SVD} = U$ 。为了表述方便仍将映射到 SVD 子空间的样本集记为 X 。

(2) 构造近邻图 G

如果 \mathbf{x}_i 与 \mathbf{x}_j 是近邻，那么用一条边将 \mathbf{x}_i 与 \mathbf{x}_j 连接起来。判定样本之间近邻关系的准则主要有两种： ϵ 近邻准则(ϵ -graph)或者 k 近邻准则。

(3) 构造连接权重矩阵。

给定图 G 后，根据式(4)寻找基于局部测地线距离的 k_g 最近邻样本点，并根据式(5)设定连接权重矩阵 W^G

(4) 计算特征值及映射

利用 W^G 替代式(3)中的 W ，并求解相应的最小特征值与特征向量获得线性映射 A 。则

$$\mathbf{y}_i = A^T W_{SVD}^T \mathbf{x}_i, \quad i = [1, 2, \dots, N]$$

$$W_{ij}^l =$$

$$\begin{cases} \exp\left(-\frac{d_G(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)}{t}\right) \left(1 + \exp\left(-\frac{d_G(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)}{t}\right)\right) & \mathbf{x}_j \in \mathbf{N}(\mathbf{i}) \cup \mathbf{l}(\mathbf{x}_i) = \mathbf{l}(\mathbf{x}_j) \\ \exp\left(-\frac{d_G(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)}{t}\right) \left(1 - \exp\left(-\frac{d_G(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)}{t}\right)\right) & \mathbf{x}_j \in \mathbf{N}(\mathbf{i}) \cup \mathbf{l}(\mathbf{x}_i) = \mathbf{l}(\mathbf{x}_j) \\ 0 & \text{else} \end{cases}$$

式中： $d_G(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ 表示样本点 \mathbf{x}_i 到样本点 \mathbf{x}_j 测地距

离； $\mathbf{N}(i)$ 表示样本点 \mathbf{x}_i 的测地线局部邻域； $\mathbf{l}(\cdot)$ 是关于样本点的类别信息； $t \in R$ 为调整参数。

可以看出权重矩阵 W_{ij}^l 整合了测地线局部邻域信息以及样本点类别信息。当测地线距离相等时，类内相似度大于类间相似度。由于 $1 \leq (1 + \exp(-d_G(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)/t)) \leq 2$ 且 $0 \leq (1 - \exp(-d_G(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)/t)) \leq 1$ ，这使得同一类别的样本获得更大的相似度，而不同类别的样本相似度将降低。

当连接权重矩阵 W_{ij}^l 确定后，利用 W_{ij}^l 替代式(3)中的 W ，并求解相应的最小特征值与的特征向量获得线性映射 A^l

4 ISOLPP 数值实验分析

本小节将在各类数据集上验证论文提出的 ISOLPP 及 S-ISOLPP 算法的有效性。ISOLPP 算法通过 5 种典型的三维空间数据集和用于高维数据可视化实验的 Freyface 数据集^[3]来验证；论文采用 UCI 数据库中的 Iris plant 数据库^[5]验证 S-ISOLPP 在分类中的效果。

实验选择了 6 种算法作为对比，包括非线性流形学习方法 ISOMAP^[3]，LLE^[6]和 LE^[7]，线性流形学习方法 LPP^[8]、统计数据学习方法 PCA^[9]和论文提出的线性流形学习方法 ISOLPP(S-ISOLPP)。

实验首先选择了 5 种具有代表性的三维空间数据集，如图 3 所示，包括 swiss-roll 数据集、swiss-hole 数据集、two-peaks 数据集、toroidal-helix 数据集、punctured-sphere 数据集。所有数据集样本数 $N=1000$ ，分别使用 ISOMAP, LLE, LE, LPP, PCA 和 ISOLPP 算法将三维空间数据集向二维空间映射， $d=2$ 。

其中，LLE、LE 和 LPP 采用 k 最近邻法确定邻域范围，且 $k=20$ ；LE 利用权图 G 直接确定连接权重矩阵，样本点之间如有连接则赋值为 1，否则赋值为 0。ISOMAP 和 ISOLPP 都是基于测地线的流形学习方法，其最短路径的计算都采用 Dijkstra 算法^[4]，构建 Dijkstra 算法所需的图 G 采用 k 最近邻法确定， $k_g=5$ 。LPP 和 ISOLPP 采用热核确定连接权重矩阵，热核参数选取 $t=5$ 。

(1) swiss-roll 数据集

图 3(a)是三维 swiss-roll 数据集, 为了更好地验证本文提出的 ISOLPP 的降维性能, 将 swiss-roll 数据集在 z 轴方向缩小至原样本点的 0.75 倍, 使得样本点在 z 轴方向彼此更为“靠近”, 对流形

学习方法的邻域判断要求更高。6 种方法对 swiss-roll 数据集的降维结果如图 4 所示, 可见 ISOMAP 以及论文提出的 ISOLPP 能够获得很好的降维效果, 而 LLE、LE 不能很好地保持原有的全局特性, LPP 和 PCA 则降维失败。

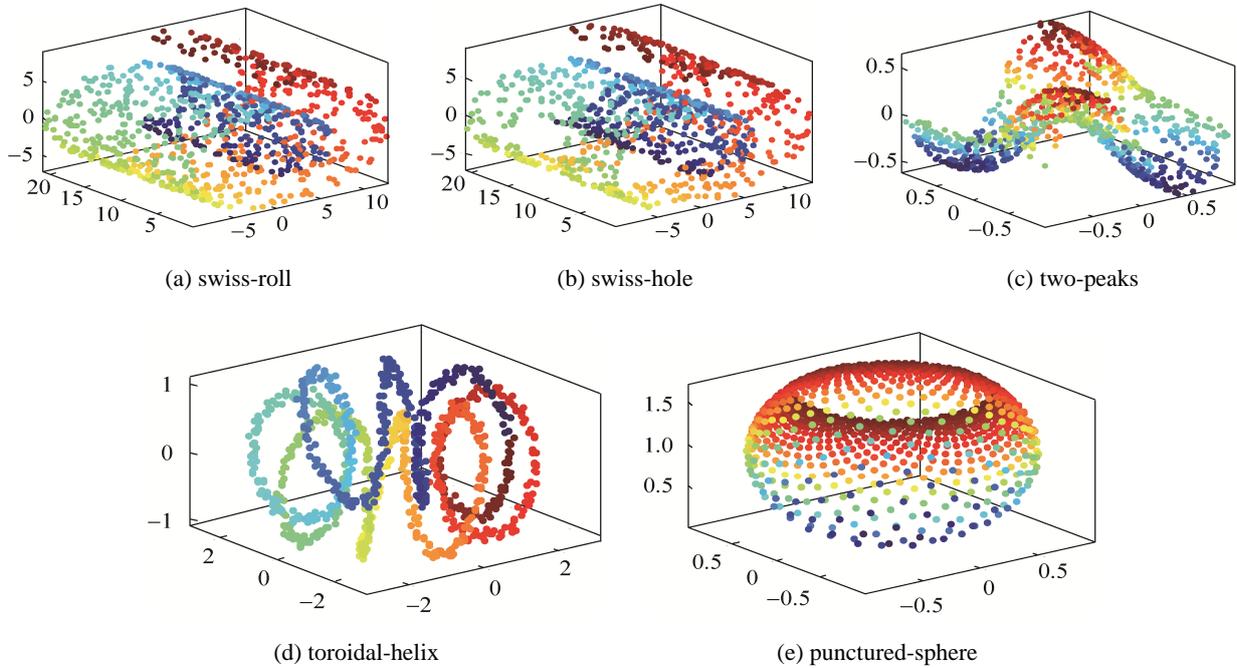


图 3 三维空间典型实验数据集

Fig. 3 Typical experimental data set in three-dimensional space

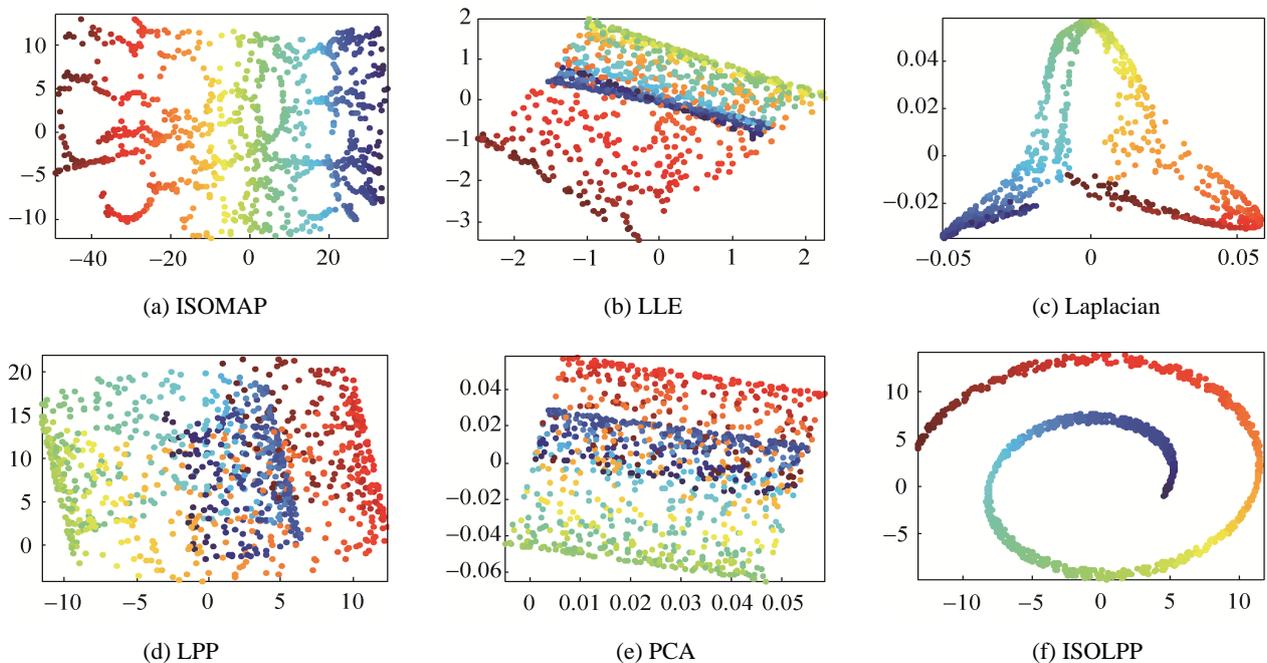


图 4 swiss-roll 数据集流形学习对比

Fig. 4 Comparison of manifold learning in swiss-roll dataset

<http://www.china-simulation.com>

• 2897 •

在第 2 节论文已就 LPP 在 swiss-roll 数据集上降维时产生的欠拟合状态进行过讨论，邻域参数 k 的选取对 LPP 的降维效果影响极大，同样对于基于局部邻域保持的 LE 和 LLE 算法也存在此类问题。PCA 算法是基于全局统计特征的线性降维方法，因此对 swiss-roll 这种非线性较强的数据集无能为力。ISOMAP 和 ISOLPP 算法都是以采取测地线距离为降维依据的流形学习方法，因此能够有效降低邻域样本点判断失误的风险，避免欠拟合状态的发生。2 种方法在寻找样本点之间最短路径时，都只需输入一个小的固定参数 k_g ，就可以较好的遍历整个样本点，获得流形的全局结构。

(2) swiss-hole 数据集

图 3(b)是三维 swiss-hole 数据集，数据集上有一个“孔洞”，6 种学习方法对 swiss-hole 数据集的降维结果见图 5。可见 LPP 和 ISOLPP 获得了较好的降维效果；LLE 虽是一种局部流形学习方法，但依然不能根据流形局部结构在二维空间获得很好的展开；ISOMAP、LE 受“孔洞”影响较大，PCA 方法不能对非线性较强的流形结构进行估计。

虽然 ISOMAP 和 ISOLPP 都是基于测地线距离的流形学习方法，但是 ISOLPP 采用的是热核方法来确定连接权重矩阵，较大的测地距离会使得

样本间连接权重呈指数衰减，由“孔洞”产生的较大测地距离对 ISOLPP 的影响并不大，因此相比于 ISOMAP，ISOLPP 能够获得更好的降维效果，同理 LPP 选择合适的邻域也能获得好的降维效果。LE 受“孔洞”影响较大的原因在于邻域判断时，原本在流形上相近的样本点，由于“孔洞”的影响而被判为在图 G 上没有任何连接关系的样本点，因此不能保持原有的流形结构。

(3) two-peaks 数据集

图 3(c)是三维 two-peaks 数据集，在 4 个极值处流形曲率较大，各种流形学习方法对 two-peaks 数据集的降维结果如图 6 所示。相比于其他五种学习方法，ISOLPP 获得了最好的降维效果。

在流形曲率较大的地方，LLE，LE 和 LPP 直接采用欧氏距离判断邻域范围，显然会造成样本点在低维空间的映射堆积，同时也破坏了流形的原有结构。ISOLPP 和 ISOMAP 都是基于测地线的流形学习方法，因此更能反映流形的全局特性。如前所述，ISOLPP 采用热核方法确定连接权重矩阵，测地距离较远的样本点之间的影响力较低，ISOLPP 更侧重于流形的局部特性，因此在 two-peaks 数据集上，ISOLPP 反映的局部特性要比 ISOMAP 要好。

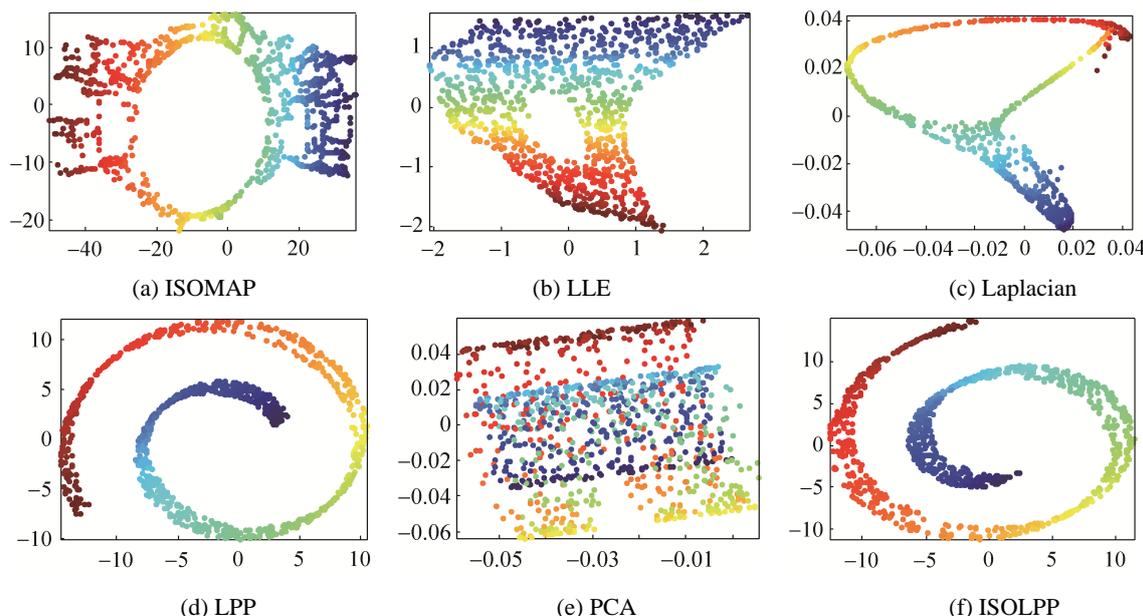


图 5 swiss-hole 数据集流形学习对比
Fig. 5 Comparison of manifold learning in swiss-hole dataset

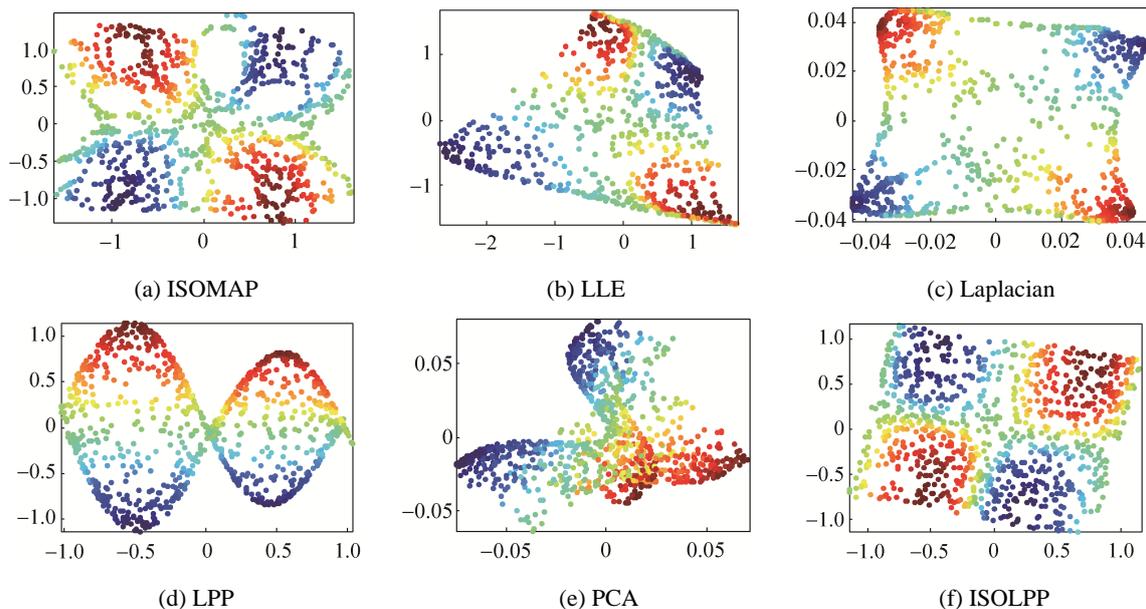


图 6 two-peaks 数据集流形学习对比

Fig. 6 Comparison of manifold learning in two-peaks dataset

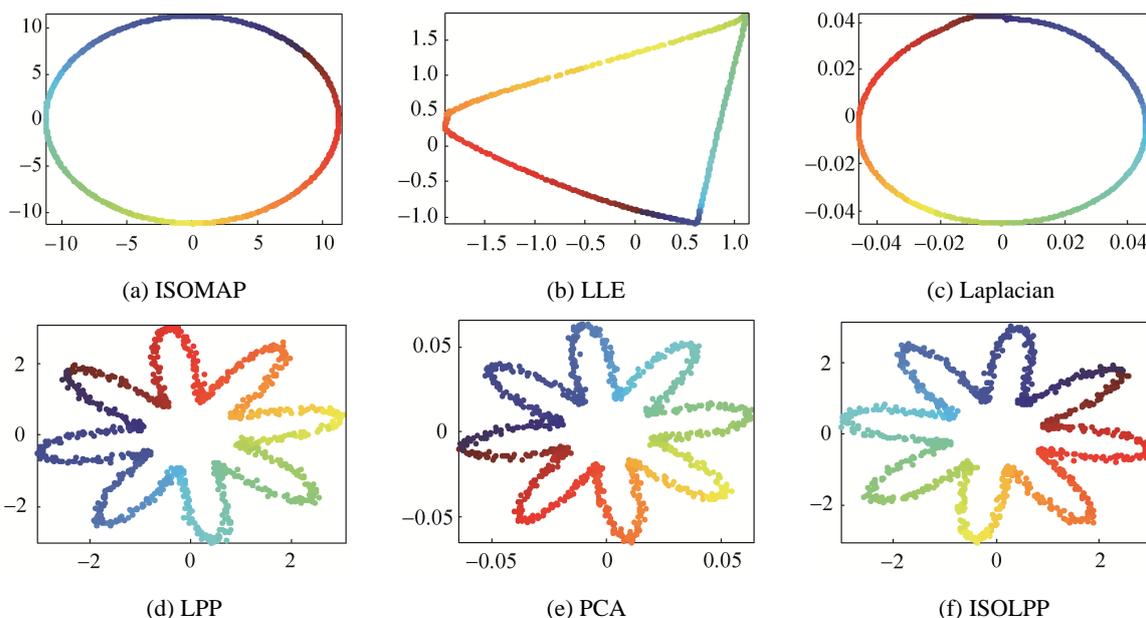


图 7 toroidal-helix 数据集流形学习对比

Fig. 7 Comparison of manifold learning in toroidal-helix dataset

(4) toroidal-helix 数据集

图 3(d)是三维 toroidal-helix 数据集, 所有样本点都处于一个闭合螺旋曲线上, 各种流形学习方法对 toroidal-helix 数据集的降维结果如图 7 所示, 可见 6 种方法从不同角度, 保持了原始流形的部分特性: ISOMAP 在测地线距离上将所有样本点在二维空间展开; LLE 在低维空间保持了邻域样本点之间的相对距离; LE 保持了样本集的权图 G 结构;

LPP 和 ISOLPP 则保持了邻域样本点之间的权重关系(欧式距离及测地距离度量); PCA 从数据集的全局统计特性出发, 保留了样本点的主要信息。

(5) punctured-sphere 数据集

图 3(e)是三维 punctured-sphere 数据集, 各种流形学习方法对 punctured-sphere 数据集的降维结果如图 8 所示。本文提出的 ISOLPP 能够获得与几种主要的非线性流形学习方法的相似降维效果。

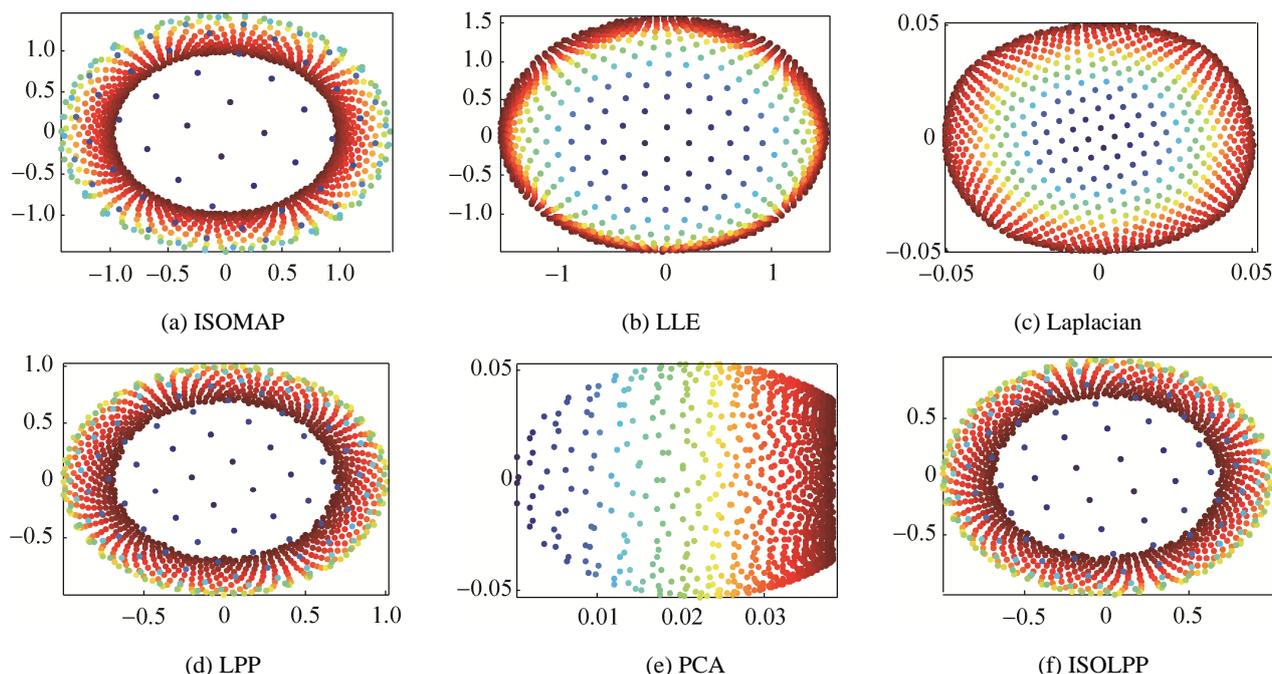


图 8 punctured-sphere 数据集流形学习对比
Fig. 8 Comparison of manifold learning in punctured-sphere dataset

5 结论

通过对 5 种典型数据集的数值实验，本文提出的 ISOLPP 不仅能够继承 LPP 具有显式投影矩阵的优点，而且通过利用测地线距离代替欧式距离建立样本之间的连接关系，可以克服欠拟合状态的发生。在某些数据集上，ISOLPP 方法甚至比几种经典的非线性流形学习方法的降维效果还要好，能够显著提高算法的适应性。

参考文献:

[1] 孙明明. 流形学习理论与算法研究[D]. 南京: 南京理工大学, 2007: 12-15.
Sun Mingming. Study on Theories and Algorithms in Manifold Learning[D]. Nanjing: Nanjing University of Science and Technology, 2007: 12-15.

[2] Cai D, He X, Han J. Isometric Projection[C]. Proceedings of the National Conference on Artificial Intelligence, 2007: 528-533.

[3] Tenenbaum J B, Silva V, Langford J C. A Global Geometric Framework for Nonlinear Dimensionality

Reduction[J]. Science (S1095-9203), 2000, 290(5500): 2319-2323.

[4] Dijkstra E W. A Note on two Problems in Connection with Graphs[J]. Numer Math (S0029-599X), 1959, 1: 269-271.

[5] Fisher R A. The Use of Multiple Measurements in Taxonomic Problems[J]. Annals of Eugenics (S1469-1809), 1936, 7: 179-188.

[6] Roweis S T, Saul L K. Nonlinear Dimensional Reduction by Locally Linear Embedding[J]. Science (S1095-9203), 2000, 290(5500): 2323-2326.

[7] Belkin M, Niyogi P. Laplacian Eigenmaps for Dimensionality Reduction and Data Representation[J]. Neural Computation (S0899-7667), 2003, 15(6): 1373-1396.

[8] He X, Niyogi P. Locality Preserving Projections[J]. Advances in Neural Information Processing Systems (S1049-5258), 2003, 16: 153-2.

[9] Turk M, Pentland A. Eigenfaces for Recognition[J]. Journal of Cognitive Neuroscience (S0898-929X), 1991, 3(1): 71-86.