

# 一种基于稀疏嵌入分析的降维方法

闫德勤<sup>1</sup> 刘胜蓝<sup>1</sup> 李燕燕<sup>1</sup>

**摘要** 近几年局部流形学习算法研究得到了广泛的关注, 如局部线性嵌入以及局部切空间排列算法等. 这些算法都是基于局部可线性化的假设而提出的, 但局部是否可线性化的问题没有得到很好有效的解决, 使得目前的降维算法对自然数据效果不佳. 自然数据中有很多是稀疏的, 对稀疏数据的降维是局部线性嵌入算法所面临的一个问题. 基于对数据自然属性的考虑, 利用数据的统计信息动态确定局部线性化范围, 依据数据的分布提出一种排列的稀疏局部线性嵌入算法 (Sparse local linear embedding algorithm, SLLEA). 在数据集稀疏的情况下, 该算法能够很好地把握数据的局部和整体信息. 将该算法应用于手工流形及图像检索等试验中, 验证了该算法的有效性.

**关键词** 线性化, 局部线性嵌入, 稀疏, 降维

**DOI** 10.3724/SP.J.1004.2011.01306

## An Embedding Dimension Reduction Algorithm Based on Sparse Analysis

YAN De-Qin<sup>1</sup> LIU Sheng-Lan<sup>1</sup> LI Yan-Yan<sup>1</sup>

**Abstract** In recent years, local manifold learning algorithms have been widely concerned, such as local linear embedding and local tangent space alignment algorithm. These algorithms are mostly based on the hypothesis of local linearization. However, the problem of whether local linearization can be realized has not been effectively solved, which makes the dimensionality reduction algorithms have poor results on natural data. In natural data, many of them are sparse, so it is important to deal with the dimension reduction for sparse data. Under the consideration of natural attributes with statistical information, an alignment of sparse local linear embedding algorithm (SLLEA) is proposed in this paper. In the algorithm, local linear range is determined dynamically according to the probability distribution of the data. For sparse data sets, the algorithm can effectively obtain local and global information. Experiments on handwork manifold and image retrieval test verify the effectiveness of the algorithm.

**Key words** Linearization, locally linear embedding (LLE), sparse, dimensionality reduction

随着信息及数字技术的飞速发展, 不可避免地要经常对大规模数据及高维数据进行处理及分析, 其计算量非常庞大, 甚至无法计算. 2000 年, 在 *Science* 上关于降维的论文引出了流形学习的概念<sup>[1]</sup>, 提供了解决高维问题的新途径. 由于真实世界的数据集大多是非线性结构, 很难通过全局的线性映射来寻求其在高维空间潜在的低维嵌入. 所以近些年涌现出一些著名的局部线性算法, 局部线性嵌入 (Locally linear embedding, LLE)<sup>[1]</sup> 利用线性表示出的思想构建权值矩阵, 使每个点所在邻域可以尽量的线性化, 并希望得到潜在的低维嵌入流形能保持数据点间的权值关系; 局部切空间排列 (Local tangent space alignment, LTSA)<sup>[2]</sup> 利用局部主成

分分析 (Principal component analysis, PCA)<sup>[3]</sup> 投影的方法将局部线性化, 得到局部低维坐标, 再通过仿射变换将这些低维的局部坐标进行整合, 进而得到全局的低维嵌入. 它们都基于数据集的局部可以有很好的线性近似的假设, 然后通过隐式的非线性映射达到降维的目的. 但是真实世界中往往存在局部线性化差或局部高曲率的邻域, 此时这种假设是不能被满足的, LLE, LTSA 的降维效果也就不再理想了. 对此, Wang 等提出了 Adaptive LTSA<sup>[4]</sup> 解决了 LTSA 不能学习局部高曲率流形的问题, 但是并没有给出邻域曲率过高或线性化程度不高的判断标准, 而且除了 LTSA 本身特征分解的计算量, 在估计曲率的过程中还要进行特征分解, 大大增加了算法的时间复杂度. 依照保持局部信息, 又能保持全局优化降维的思想, 该方面的方法还有局部线性对齐 (Locally linear coordination, LLC)<sup>[5]</sup> 和局部多维尺度变换 (Locally multidimensional scaling, LMDS)<sup>[6]</sup> 方法. 在这些文献中也未能针对局部线性化问题给以研究.

Laplace 特征映射 (Laplacian eigenmap, LE)<sup>[7]</sup> 利用高斯核函数构造样本近邻图, 得到稀疏的邻接矩阵, 使目标函数通过保持这种图结达到寻求

收稿日期 2010-12-20 录用日期 2011-04-13  
Manuscript received December 20, 2010; accepted April 13, 2011

中国科学院自动化研究所复杂系统与智能科学重点实验室开放课题基金 (20070101), 辽宁省教育厅高等学校科学研究基金 (2008344) 资助  
Supported by the Open Foundation of State Key Laboratory of Complex Systems and Intelligent Sciences of Institute of Automation, Chinese Academy of Sciences (20070101) and Higher Education Department of Liaoning Province Research Foundation (2008344)

1. 辽宁师范大学计算机与信息技术学院 大连 116029  
1. College of Computer and Information Technology, Liaoning Normal University, Dalian 116029

低维流形的目的. 而后出现了基于切空间的流形学习方法, 首先由 Donoho 等提出了 Hessian LLE (HLLE)<sup>[8]</sup>, 利用 Hessian 矩阵的能表达数据曲率的几何性质, 通过计算样本局部切空间坐标并将其进行 Gram-Schmidt 正交化来构建近似的 Hessian 阵, 得到最小化高维样本曲率的优化模型并嵌入到其潜在的低维流形.

近几年涌现出局部保持投影 (Locality preserving projection, LPP)<sup>[9]</sup>、邻域保持嵌入 (Neighborhood preserving embedding, NPE)<sup>[10]</sup>、正交的邻域保持投影 (Orthogonal neighborhood preserving projection, ONPP)<sup>[11]</sup> 等能够提取局部信息的线性流形学习算法, 这些算法都对应于已有的非线性算法, 将高维数据映射到低维子空间的非线性隐式映射明确为一种线性映射而得到的. 这些方法为局部信息研究提取提供了重要的启发. 此外, 李乐等<sup>[12]</sup> 提出的基于线性投影结构的非负矩阵分解 (Linear projection-based non-negative matrix factorization, LPBNMF), 以及 2DPCA<sup>[13]</sup> 等算法在真实世界的图像领域有着广泛的应用.

目前降维研究的一个重要问题是, 各种算法对自然数据降维效果不佳, 极大地影响着智能数据处理的进程. 基于  $k$  近邻选取以局部信息提取为基础的局部及改进算法如 LLE, LPP, HLLE 等不能很好地提取稀疏数据的信息; 而全局算法如黎曼流形学习 (Riemannian manifold learning)<sup>[14]</sup>、等距嵌入 (Isometric mapping, ISOMAP)<sup>[15]</sup> 等对数据的分布要求更高, 更是难于很好地提取稀疏数据的信息; 因此就不能得到很好的降维效果.

降维的有效性在于对数据信息的有效提取. 数据的稀疏性是自然数据的属性之一, 影响着降维算法的有效性<sup>[15-16]</sup>. 本文基于对数据自然属性的考虑, 利用数据的统计信息动态确定局部线性化范围, 依据数据的分布提出一种排列的稀疏局部线性嵌入算法 (Sparse local linear embedding algorithm, SLLEA), 使得在信息缺失严重的稀疏数据集中, 获得比较好的降维效果.

为了更好地说明本文算法的有效性, 在实验中分别利用 LLE, LTSA 及 SLLEA 进行降维. 在第 3.1 节的实验中选取了两个代表性的手工流形. 在第 3.2 节的实验中对 Frey 人脸数据库进行降维, 得到二维可视化效果图. 在第 3.3 节的实验中选择图像检索数据库, 对提取的形状特征进行降维, 并分析了 LLE, LTSA 及 SLLEA 的实验结果.

### 1 可线性化分析与邻域选取方法

可线性化的分析基于对相关降维方法中  $k$  近

邻选取以及局部线性化的研究. 这里采用 LLE 和 LTSA 公式推导中的相关约定.

**引理 1.** 设高维观测样本为  $X = [\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N] \in \mathbf{R}^{D \times N}$ , 其对应潜在的低维样本为  $Y = [\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \dots, \mathbf{y}_N] \in \mathbf{R}^{d \times N}$ . 假设所有样本  $Y \sim N_d(0, \Sigma)$ , 其中  $\Sigma$  为样本的协方差阵, 并且  $\Sigma$  为正定矩阵, 满足  $Y$  为正交阵的条件. 对  $\forall \mathbf{y}_i \in \mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \dots, \mathbf{y}_N, i = 1, 2, \dots, N$  及其局部  $Y_i = [\mathbf{y}_i, \mathbf{y}_{i1}, \dots, \mathbf{y}_{ik-1}]$ , 其中  $k$  为选取近邻点的个数, 设  $Y_{N-k} = \mathbf{y}_j | j \in 1, \dots, N \setminus i, i_1, \dots, i_{k-1}$ , 令  $M = Y_{N-k} Y_{N-k}^T$ , 则对  $\forall \mathbf{y}_i, \mathbf{y}_j \in Y_{N-k}$  在显著性水平  $\beta$  下的接受域为

$$\frac{\frac{\|\mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j\|_2^2}{d}}{N - k - d + 1} \leq F_\beta(d, N - k - d + 1)$$

其中,  $\alpha = \frac{\mathbf{y}^T \mathbf{y}}{\mathbf{y}^T M^{-1} \mathbf{y}}$ ,  $F_\beta$  为在显著性水平  $\beta$  下  $F$  分布的分位数.

**证明.** 对于任意的  $\mathbf{y}_i$ , 若有约束条件  $\sum_{i=1}^N \mathbf{y}_i = 0$ , 由于  $Y \sim N_d(0, \Sigma)$ , 有  $N - k \gg d$ , 则  $M \sim W_d(N - k, \Sigma)$ , 其中  $W_d$  为中心 Wishart 分布<sup>[17]</sup>, 对任意的  $\mathbf{y} \in Y_i$ , 显然有  $\mathbf{y} \sim N_d(0, \Sigma)$ , 并且所有  $\mathbf{y}$  都与  $M$  独立, 进而与  $M^{-1}$  独立 (见文献 [17] 第 44 页), 由  $T^2$  分布的定义知,  $(N - k)\mathbf{y}^T M^{-1} \mathbf{y} \sim T^2(d, N - k)$ .

为了方便证明, 我们将其改写为  $T^2(d, N - k) = \frac{(N - k)\mathbf{y}^T \mathbf{y}}{\alpha}$ , 其中  $\alpha = \frac{\mathbf{y}^T \mathbf{y}}{\mathbf{y}^T M^{-1} \mathbf{y}}$ . 由文献 [17] 中定理 2.3.1 的证明可得到:

$$\frac{(N - k)d}{N - k - d + 1} \frac{\frac{\mathbf{y}^T \mathbf{y}}{d}}{\frac{\alpha}{N - k - d + 1}} \sim \frac{(N - k)d}{N - k - d + 1} F(d, N - k - d + 1)$$

其中,  $F(d, N - k - d + 1)$  为  $F$  分布.

则在显著性水平  $\beta$  的接受域为

$$\frac{\frac{\|\mathbf{y}\|_2^2}{d}}{N - k - d + 1} \leq F_\beta(d, N - k - d + 1)$$

令  $\mathbf{y} = \mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j$ , 显然  $\mathbf{y} \in Y_{N-k}$ , 故有:

$$\frac{\frac{\|\mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j\|_2^2}{d}}{N - k - d + 1} \leq F_\beta(d, N - k - d + 1) \quad (1)$$

□

由于真实世界的数据均为在高维空间采样获得, 而引理 1 的结论中  $\|\mathbf{y}\|_2^2$  不能直接得到. 所以要找到高维观测数据之间距离和低维嵌入距离  $\|\mathbf{y}\|_2$  的关系.

**定理 1.** 若  $\mathbf{x}_i = f(\mathbf{y}_i)$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ , 在引理 1 条件下, 同时满足约束条件  $\frac{1}{N}YY^T = I$ , 则局部线性化程度较高的样本  $\mathbf{x}_i$  应满足:  $\|f(\mathbf{y}_i) - f(\mathbf{y}_{ij})\|_2^2 \leq cF_\beta(d, N - k - d + 1)$ , 其中,  $c = \frac{\lambda_{U^T \max} d(N - k)}{N - k - d + 1}$ ,  $\mathbf{y}_{ij} \in Y_i$ .

**证明.** 在一个以  $\mathbf{y}_i$  为中心的  $k$  邻域  $Y_i$  中, 由样本中心  $\mathbf{y}_i$  处的一阶 Taylor 展式, 对  $\mathbf{y}_i$  的任一近邻点  $\mathbf{y}$ , 有:

$$f(\mathbf{y}) - f(\mathbf{y}_i) = J_f(\mathbf{y} - \mathbf{y}_i) + o(\|\mathbf{y} - \mathbf{y}_i\|) \quad (2)$$

$J_f \in \mathbf{R}^{D \times d}$ , 由 LTSA 的算法, 考虑用  $f(\mathbf{y}_i)$  邻域的观测数据的局部切空间的标准正交基来近似得到,  $J_f \leftarrow U \in \mathbf{R}^{D \times d}$ , 其中,  $U^T U = I$ , 若该局部可线性近似, 则有<sup>[18]</sup>:

$$\begin{aligned} \|f(\mathbf{y}) - f(\mathbf{y}_i)\|_2^2 &= \|U^T(\mathbf{y} - \mathbf{y}_i)\|_2^2 \leq \\ &\|U^T\|_2^2 \|\mathbf{y} - \mathbf{y}_i\|_2^2 = \\ &\lambda_{U^T \max} (\mathbf{y} - \mathbf{y}_i)^T (\mathbf{y} - \mathbf{y}_i) \end{aligned}$$

□

$\lambda_{U^T \max}$  可通过局部协方差阵的分解求得, 或通过 Lanczos 迭代算法<sup>[8]</sup> 近似求得. 由于有约束条件  $\frac{1}{N}YY^T = I$ , 故在式 (1) 中可估计  $\alpha = N - k$ , 由式 (1) 在该局部  $Y_i$  中有:

$$\|f(\mathbf{y}_i) - f(\mathbf{y}_{ij})\|_2^2 \leq cF_\beta(d, N - k - d + 1) \quad (3)$$

其中,  $c = \frac{\lambda_{U^T \max} d(N - k)}{N - k - d + 1}$ ,  $\mathbf{y}_{ij} \in Y_i$ .

定理 1 的式 (3) 给出了在一个局部可以合理地线性化近似的判断标准. 可由如下算法来得到某个  $\mathbf{x}_i$  和其  $k_i$  个近邻点构成一个线性化近似较好的邻域  $N(\mathbf{x}_i)$ .

**算法 1.**

**步骤 1.** 初始化样本点个数  $N$ ,  $i = 1$ ,  $\mathbf{x}_i$  的  $k$  最近邻集  $N(\mathbf{x}_i) = \mathbf{x}_{i1}, \mathbf{x}_{i2}, \dots, \mathbf{x}_{ik}$ ;

**步骤 2.** 计算局部协方差阵, 由特征分解或 Lanczos 迭代算法求得  $\lambda_{U^T \max}$ ;

**步骤 3.** 计算定理 1 中的常数  $c$ , 令  $j = 1 : k$ , 判断  $N(\mathbf{x}_i)$  中的样本是否满足式 (3), 若  $\mathbf{x}_{ij}$  不满足式 (3), 则  $N(i) = N(i) - \mathbf{x}_{ij}$ ;

**步骤 4.** 若  $i < N$ , 令  $i \leftarrow i + 1$ , 转步骤 2; 否则输出全部  $N(\mathbf{x}_i)$ ,  $i = 1, 2, \dots, N$ , 结束.

## 2 SLLEA 算法的提出

### 2.1 局部结构的刻画及权值确定

样本之间的重叠信息量非常少, 这样就导致欠学习的效果. 我们考虑通过扩大  $k$  近邻为  $k - N(i)$  区域对原始数据集进行区域信息加强, 如图 1 所示,  $k - N(\mathbf{x}_i)$  区域为  $N(\mathbf{x}_i)$  及其对应的  $k$  最近邻点所构成, 这使得在样本较少的情况下, 也能达到重叠信息很丰富的目的, 进而达到重叠信息充足的流形学习效果. 把这样的信息以全局优化的形式实现, 本质上就是对局部线性坐标的排列.

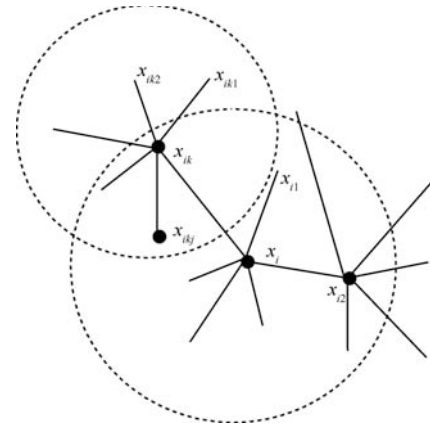


图 1 以  $\mathbf{x}_i$  为中心的  $k - N(i)$  域  
Fig. 1  $k - N(i)$  neighborhood of  $\mathbf{x}_i$

现令  $\mathbf{x}_i$  和其  $k_i$  个近邻点构成一个邻域, 下标集合为  $N(i)$ , 此邻域由算法 1 得到;  $\mathbf{x}_i$  和其  $k$  个近邻点构成一个邻域用来确定权值  $w_{ij}$ :

$$\begin{aligned} \min \varepsilon(W) &= \sum_{i=1}^N \left\| \mathbf{x}_i - \sum_{j=1}^k w_{ij} \mathbf{x}_{ij} \right\|^2 \\ \text{s.t. } \mathbf{e}^T \mathbf{w}_i &= 1, \quad i = 1, 2, \dots, N \end{aligned} \quad (4)$$

LLE 的相关文献中已经详细讨论了  $\mathbf{w}_i = (w_{i1}, \dots, w_{ik})^T$ ,  $i = 1, 2, \dots, N$  的求解过程:

由式 (4) 可得:  $\varepsilon(\mathbf{w}_i) = \sum_{i=1}^N \mathbf{w}_i^T Z_i \mathbf{w}_i$ , 其中  $Z_{jl} = (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)^T (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_l)$ ,  $j, l = 1, 2, \dots, k$ . 其约束的最优化问题可通过 Lagrange 乘子法求得:  $\mathbf{w}_i = \frac{Z_i^{-1} \cdot \mathbf{1}_N}{\mathbf{1}_N^T Z_i^{-1} \mathbf{1}_N}$ .

令  $W = [\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_N]$  为权值矩阵. 我们希望  $k - N(i)$  区域降维后区域样本的权值保持不变, 则第  $i$  个区域最小化代价函数为  $\min \varepsilon(Y_{N(i)}) = \sum_{l \in N(i)} \|\mathbf{y}_l - \sum_{j=1}^k w_{ij} \mathbf{y}_j\|^2$ , 对所有样本区域整合 (排列) 得到最终的约束优化函数:

$$\min \varepsilon(Y) = \sum_{i=1}^N \sum_{l \in N(i)} \left\| \mathbf{y}_l - \sum_j w_{lj} \mathbf{y}_j \right\|^2 \quad (5)$$

对式 (5) 进行整理, 由式 (5) 得:

$$\begin{aligned} \min \varepsilon(Y) &= \sum_{i=1}^N \sum_{l \in N(i)} \|Y_i(\mathbf{I}_l^T - \mathbf{w}_l^T)\|^2 = \\ &= \sum_{i=1}^N \sum_{l \in N(i)} \text{tr}(Y_i(\mathbf{I}_l^T - \mathbf{w}_l^T)(\mathbf{I}_l^T - \mathbf{w}_l^T)^T Y_i^T) = \\ &= \sum_{i=1}^N \text{tr}(Y_i \sum_{l \in N(i)} (\mathbf{I}_l^T - \mathbf{w}_l^T)(\mathbf{I}_l^T - \mathbf{w}_l^T)^T Y_i^T) = \\ &= \sum_{i=1}^N \text{tr}(Y_i(I - W_i)(I - W_i)^T Y_i^T) = \\ &= \sum_{i=1}^N \text{tr}(Y_i M_i Y_i^T) \end{aligned}$$

其中,  $\mathbf{I}_k^T$  为第  $k$  个分量为 1, 其他为 0 的  $k$  维列向量.  $M_i = (I - W_i)(I - W_i)^T$ . 为了方便计算机求解, 我们利用排列矩阵技术对上面的结果进一步化简:

$$\begin{aligned} \min \varepsilon(Y) &= \sum_{i=1}^N \text{tr}(Y_i M_i Y_i^T) = \\ &= \text{tr} \left( \sum_{i=1}^N (Y_i M_i Y_i^T) \right) = \\ &= \text{tr} \left( \sum_{i=1}^N Y S_i M S_i^T Y^T \right) = \\ &= \text{tr}(Y S M S^T Y^T) = \text{tr}(Y B Y^T) \end{aligned}$$

其中,  $S_i$  是满足  $Y_i = Y S_i$  的 0-1 选择矩阵,  $M = \text{diag}\{M_1, M_2, \dots, M_N\}$ ,  $B = S M S^T$ ,  $S = [S_1, S_2, \dots, S_N]$ .

对式 (4) 和式 (5), 由于该算法保持利用了 LLE 原有的算法框架, 故可用约束条件  $Y Y^T = N I$  (这里  $I$  为单位矩阵,  $N$  为样本数目), 得到最终的有约束优化问题:

$$\begin{aligned} \min \varepsilon(Y) &= \text{tr}(Y B Y^T) \\ \text{s.t.} \quad Y^T Y &= N I \end{aligned} \quad (6)$$

对矩阵  $B$  进行 EVD 分解<sup>[20]</sup>,  $B = Q \Lambda Q^T$ , 其中  $\Lambda = \text{diag}\{\lambda_1, \dots, \lambda_N\}$ ,  $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_N$ , 对应的特征向量矩阵为  $Q = [\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N]$ . 由于  $B$  的

最小特征值对应的特征向量为  $\mathbf{q}_1 = (1, \dots, 1)$ , 故最终的低维嵌入  $Y$  可由  $B$  的第 2 到第  $d+1$  个最小特征值对应的特征向量得到, 即  $Y = [\mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_{d+1}]^T$ , 得到最终的 SLLEA 算法.

### 算法 2.

**步骤 1.** 初始化数据集  $X$ , 选取适当的  $k, d$ , 利用  $k$ -邻域方法构建邻域集;

**步骤 2.** 对  $i = 1 : N$ , 计算  $\mathbf{w}_i = \frac{Z_i^{-1} \cdot \mathbf{1}_N}{\mathbf{1}_N^T Z_i^{-1} \mathbf{1}_N}$ , 得到权值阵  $W$ ;

**步骤 3.** 利用  $k$ -邻域集, 采用算法 1 构建  $k - N(i)$  区域;

**步骤 4.** 对矩阵  $B$  进行 EVD, 对其特征值进行排序  $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_N$ , 则  $B$  的第 2 到第  $d+1$  个最小特征值对应的特征向量为低维嵌入  $Y = [\mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_{d+1}]^T$ .

## 2.2 SLLEA 算法与 LLE, LLC 算法的形式对比

为适应数据的非线性结构, LLC 算法提出了局部线性排列的方法<sup>[16]</sup>. 本文算法在原理与公式结构两方面与 LLE, LLC 相关. 这里给出相关比较:

### 1) 原理

LLE 把高维数据的局部线性结构保持到低维结构中降维.

LLC 把局部结构排列起来利用优化降维. 首先把局部坐标线性映射, 然后利用 LLE 的降维结构整体优化. 简单地可以理解为对 PCA 的排列.

SLLEA 利用 LLE 结构提取局部信息, 然后对局部 LLE 得到的低维坐标排列优化. 简单地可以理解为对 LLE 的排列.

### 2) 公式

在 LLE 中, 提取权值的公式与降维公式具有相同的结构.

在 LLC 中, 提取局部结构信息的公式与排列公式结构不同.

在 SLLEA 中, 提取局部权值的公式与 LLE 相同, 降维排列式与 LLE, LLC 的结构都不同. 体现的排列原理更不同.

LTSA 算法是对 LLC 算法的一个重要发展, 是目前著名的局部排列算法. 因此, 本文算法与 LTSA 做了对比实验.

## 3 实验结果与分析

### 3.1 手工流形实验

在本节中, 我们利用稀疏的 Swiss-roll, S-curve 以及连通性较差的 3D 云等手工流形, 通过与 LLE 及 LTSA 的对比来测试 SLLEA 的性能.

### 3.1.1 Swiss-roll 及 S-curve

本节采用 Swiss-roll, 其生成函数为:  $t = (3\pi/2) \times (1 + 2\text{rand}(1, N))$ ;  $\text{height} = 21\text{rand}(1, N)$ ;  $X = [t \times \cos(t); \text{height}; t \times \sin(t)]$ ; 及 S-curve, 其生成函数为:  $t = \pi(1.5\text{rand}(1, N/2) - 1)$ ;  $\text{height} = 15\text{rand}(1, n)$ ;  $X = [[\cos(t), -\cos(t)]; \text{height}; [\sin(t), 2 - \sin(t)]]$ . 它们在不同样本数  $N$  及邻域样本数  $k$  下的实验结果如图 2 及图 3 所示.

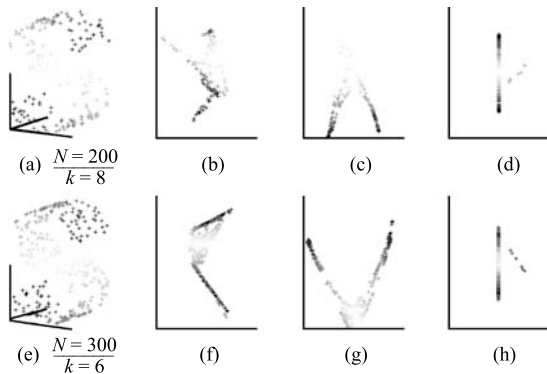


图 2 利用 LLE (第 2 列), SLLEA (第 3 列) 及 LTSA (第 4 列) 对 S-curve 降至 2 维

Fig. 2 Scatter diagram of S-curve using LLE (Column 2), SLLEA (Column 3), and LTSA (Column 4) algorithm to two-dimension

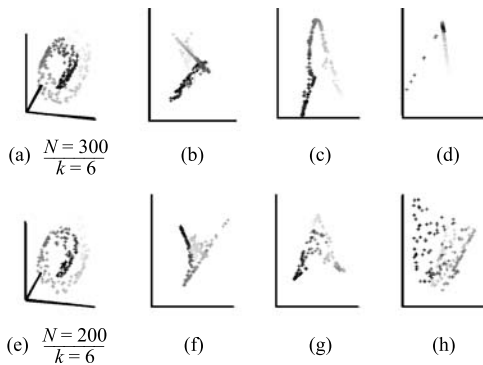


图 3 利用 LLE (第 2 列), SLLEA (第 3 列) 及 LTSA (第 4 列) 对 Swiss-roll 降至 2 维

Fig. 3 Scatter diagram of Swiss-roll using LLE (Column 2), SLLEA (Column 3), and LTSA (Column 4) algorithm to two-dimension

以上实验可以看出, 在样本数据稀疏的条件下, LLE 及 LTSA 很难保持数据的相互关系, 而 SLLEA 却可以基本保持数据间的几何关系.

### 3.1.2 降维效果的聚类实验

为了进一步说明新算法的降维效果, 我们把 SLLEA, LLE 及 LTSA 应用到一个有三类的三维空间数据中. 好的降维效果应该是对三类的数据降

维后仍然保持三类的区分. 图 4 给出了这个实验的结果比较. 其中采样数据为原始数据, 数据集由 3 类连接紧密且无重叠的聚类数据组成, 不同的聚类数据通过不同的灰度来标示; LLE, SLLEA 和 LTSA 分别表示由 3 种算法得到的降到 2 维的结果 (实验中邻域  $k = 12$ ). 通过图 4 可以看出 SLLEA 算法能很好地把 3 维的聚类数据嵌入到 2 维, 保持了 3 类数据的区分; 而 LLE, LTSA 则损失了原来的聚类信息 (3D 云数据大量交叠, 原因是算法执行过程中, 矩阵奇异值性所致).

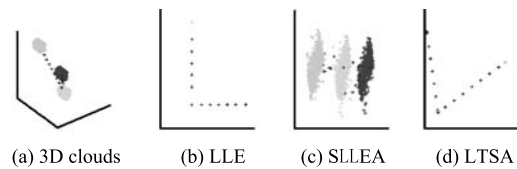


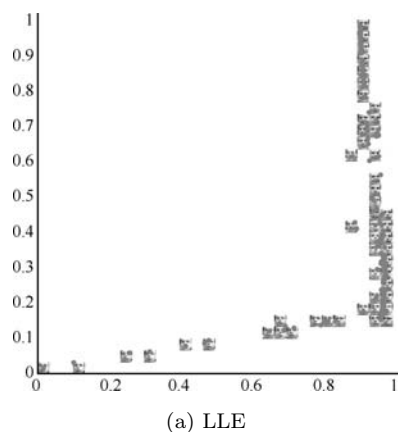
图 4 3D 云数据降维后的聚类效果比较

Fig. 4 clustering comparison on dimensionality reduction of 3D clouds

### 3.2 Frey 表情 2D 可视化

Frey 人脸库中共 1965 幅人脸, 每幅图像为 20 像素  $\times$  28 像素的灰度图片, 该表情库是由视频设备连续拍摄得到的, 包括一个人的各种表情, 如中性 (自然)、高兴和不高兴等. 在 Frey 人脸库中随机选取 300 幅图像, 选取近邻点个数 8, 降至 2 维, 得到低维样本分布的散点图, 如图 5 所示.

由于样本的随机选取, 一些连续变化的表情可能没有被选中, 实验中的表情在几何上的分布不一定能很好地满足流形学习的基本假设. 从可视化效果图中可以看出, 经典的 LLE 及 LTSA 算法在样本点不足、表情不连续的情况下, 有一些高兴的表情混在了吐舌及不高兴的表情中; 人脸在朝向上的非线性分布在 LLE 及 LTSA 中也没有得到体现, 而本文的 SLLEA 算法在此情况下能够得到很好的可视化效果图.



(a) LLE

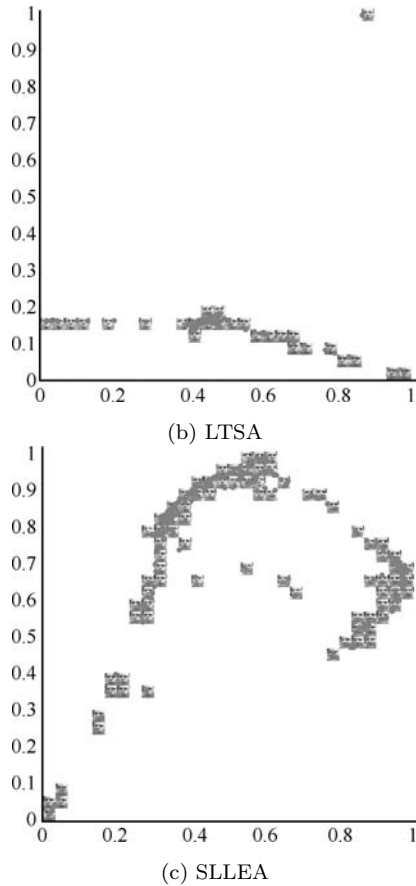


图 5 Frey 人脸表情库二维可视化效果图  $N = 300, k = 8$   
 Fig. 5 Two-dimensional visualization result drawings of Frey face when  $N = 300, k = 8$

3.3 Coil-20 数据库的图像检索

本实验采用 Columbia object image library 的 Coil-20 数据库, 共 20 个不同的物体, 每个物体从 72 个不同角度拍摄得到, 大小为 128 像素  $\times$  128 像素. 以全部样本为整体得到其形状的特征空间, 返回 40 幅按特征欧氏距离排序的检索图像. 我们实验所用的数据库中的 No. 40 含有招财猫的图像, 是降维和图像检索实验常用的数据. 在实验中, 分别选取邻域为  $k = 6, 12$  和  $15$ , 约简维数  $d = 2$  (这里  $d = 2$  可由极大似然估计算法得到该数据库的本征维数). 应用 SLLEA, LLE 及 LTSA 算法降维之后进行图像检索实验. 实验结果如图 6 所示 (这个实验中 LTSA 与 SLLEA 具有形似的实验效果, 这里就没有对 LTSA 列出). 对降维后图像检索的查全率及查准率对比由表 1 给出. 其中  $Y$  表示检索到的目标图像的个数.  $P$  表示查准率, 定义为检索结果队列中检索到的目标图像数与检索结果队列中所有的图像数之比, 即  $P = Y/X$ .  $A$  表示查全率, 定义为检索结果队列中检索到的目标图像数与数据库中全

部的目标图像数之比, 即  $A = Y/F$  (其中  $F$  为结果队列中所有的图像数). 表 1 说明当  $k$  较小时, LLE 的查全率和查准率都较小, 原因是邻域间没有充足的交互信息, SLLEA 表现比 LLE 较为出色, 查全率及查准率都较高. 说明了 SLLEA 算法体现了其算法理论思想. 当  $k$  增大时, SLLEA 的优势有所减弱, 因为邻域的扩张已经导致了数据邻域短路现象的发生.

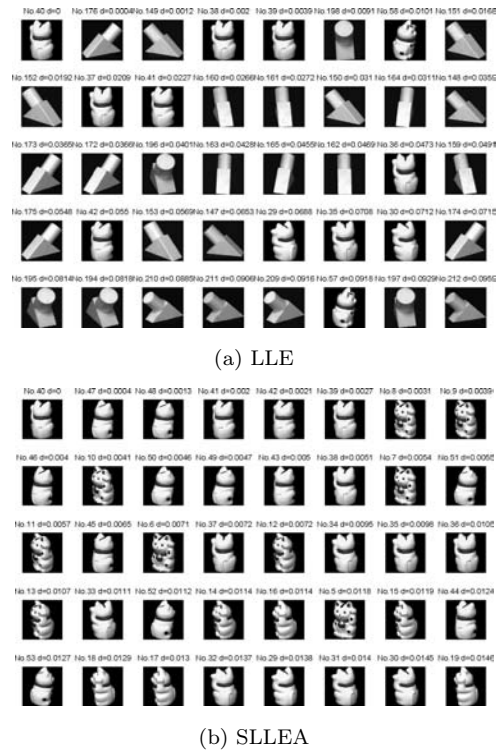


图 6 Coil-20 数据库图像检索效果图  
 Fig. 6 Results of Coil-20 database image retrieval

表 1 不同邻域下 LLE 及 SLLEA 查全率及查准率  
 Table 1 Recall rates and precision rates of LLE and SLLEA in different neighborhoods

参数 $k$	LLE			SLLEA		
	$Y$	$P$	$A$	$Y$	$P$	$A$
$k = 6$	12	0.300	0.167	40	1.000	0.556
$k = 12$	15	0.375	0.208	40	1.000	0.556
$k = 15$	26	0.650	0.361	35	0.875	0.486

以上实验表明这种算法对于稀疏的样本是有效的, 稀疏样本的局部  $k$  近邻邻域很难保证可以线性近似, 而且丢失很多邻域重叠部分的信息, 采用上述算法增强了重叠部分的信息. 对于稠密的样本而言, 采用这种算法效果会有所减弱, 很可能导致局部短路的现象进而发生几何形变, 有待进一步研究.

## 4 结束语

本文通过对经典的流形学习算法 LLE 及 LTSA 等的分析对局部可线性化进行了研究, 结合数据的统计特征, 给出了局部线性的判别条件; 基于对局部坐标排列的技术和思想提出了一种稀疏非线性降维算法 SLLEA. 实验证明该算法在数据集稀疏的情况下可以很好地进行学习, 为解决稀疏数据的降维提供了一种思路. 对于该算法, 邻域参数的完全自适应以及稀疏度与邻域参数的选取是一个有待研究的方面.

## References

- Roweis S T, Saul L K. Nonlinear dimensionality reduction by locally linear embedding. *Science*, 2000, **290**(5500): 2323–2326
- Zhang Z, Zha H. Principal manifolds and nonlinear dimensionality reduction via tangent space alignment. *SIAM Journal of Scientific Computing*, 2004, **26**(1): 313–338
- Jolliffe I T. *Principal Component Analysis*. New York: Springer-Verlag, 1986
- Wang J, Zhang Z Y, Zha H Y. Adaptive manifold learning. In: *Proceedings of the Neural Information Processing Systems*. Vancouver, Canada: The MIT Press, 2004. 1473–1480
- Teh Y W, Roweis S. Automatic alignment of local representations. In: *Proceedings of the Neural Information Processing Systems*. Vancouver, Canada: The MIT Press, 2002. 841–848
- Yang L. Alignment of overlapping locally scaled patches for multidimensional scaling and dimensionality reduction. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 2008, **30**(3): 438–450
- Belkin M, Niyogi P. Laplacian eigenmaps for dimensionality reduction and data representation. *Neural Computation*, 2003, **15**(6): 1373–1397
- Donoho D L, Grimes C. Hessian eigenmaps: locally linear embedding, techniques for high-dimensional data. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2003, **100**(10): 5591–5596
- He X F, Niyogi P. Locality preserving projections. In: *Proceedings of the Neural Information Processing Systems*. Vancouver, Canada: The MIT Press, 2003. 153–160
- He X F, Cai Deng, Yan S C, Zhang H J. Neighborhood preserving embedding. In: *Proceedings of the 10th IEEE International Conference on Computer Vision*. Beijing, China: IEEE, 2005. 1208–1213
- Kokopoulou E, Saad Y. Orthogonal neighborhood preserving projections: a projection-based dimensionality reduction technique. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 2007, **29**(12): 2143–2156
- Li Le, Zhang Yu-Jin. Linear projection-based non-negative matrix factorization. *Acta Automatica Sinica*, 2010, **36**(1): 23–39  
(李乐, 章毓晋. 基于线性投影结构的非负矩阵分解. *自动化学报*, 2010, **36**(1): 23–39)
- Wen Ying, Shi Peng-Fei. An approach to face recognition based on common vector and 2DPCA. *Acta Automatica Sinica*, 2009, **35**(2): 202–205  
(文颖, 施鹏飞. 一种基于共同向量结合 2DPCA 的人脸识别方法. *自动化学报*, 2009, **35**(2): 202–205)
- Lin T, Zha H. Riemannian manifold learning. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 2008, **30**(5): 796–809
- Balasubramanian M, Schwartz E L. The isomap algorithm and topological stability. *Science*, 2002, **295**(5552): 7
- Silva J G, Marques J S, Lemos J. Selecting landmarks points for sparse manifold learning. In: *Proceedings of the Neural Information Processing Systems*. Vancouver, Canada: The MIT Press, 2006. 1241–1248
- Zhang Run-Chu. *Multivariate Statistical Analysis*. Beijing: Science Press, 2006. 36–44  
(张润楚. 多元统计分析. 北京: 科学出版社, 2006. 36–44)
- Cheng Yun-Peng, Zhang Kai-Yuan, Xu Zhong. *Matrix Theory*. Xi'an: Northwestern Polytechnical University Press, 2006. 124–129  
(程云鹏, 张凯院, 徐仲. 矩阵论. 西安: 西北工业大学出版社, 2006. 124–129)
- Golub G H, Luk F, Overton M. A block Lanczos method for computing the singular values and corresponding singular vectors of a matrix. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 1981, **7**(2): 149–169
- Zhang Xian-Da. *Matrix Analysis and Applications*. Beijing: Tsinghua University Press, 2004  
(张贤达. 矩阵分析与应用. 北京: 清华大学出版社, 2004)



闫德勤 辽宁师范大学计算机与信息技术学院教授. 1999 年获南开大学博士学位. 主要研究方向为模式识别. 本文通信作者. E-mail: yandeqin@163.com  
(YAN De-Qin Professor at the College of Computer and Information Technology, Liaoning Normal University. He received his Ph. D. degree from Nankai University in 1999. His main research interest is pattern recognition. Corresponding author of this paper.)



刘胜蓝 辽宁师范大学计算机与信息技术学院硕士研究生. 主要研究方向为模式识别. E-mail: liushenglan-0787@163.com  
(LIU Sheng-Lan Master student at the College of Computer and Information Technology, Liaoning Normal University. His main research interest is pattern recognition.)



李燕燕 辽宁师范大学计算机与信息技术学院硕士研究生. 主要研究方向为模式识别. E-mail: liyanyan1016@126.com  
(LI Yan-Yan Master student at the College of Computer and Information Technology, Liaoning Normal University. Her main research interest is pattern recognition.)