

文章编号:1001-9081(2010)12-3301-03

## 保持全局和局部特性的黎曼流形改进算法

王伟,毕笃彦,熊磊

(空军工程大学 工程学院,西安 710038)

(wangwei0158@yeah.net)

**摘要:**黎曼流形学习(RML)是一种全局算法,但其不能较好地保持数据局部邻域的几何性质。为解决这个问题,提出一种基于黎曼流形学习(RML)的多结构算法。先对数据集进行主成分分析(PCA)投影,再构造邻域图,然后把整个数据集分为两个部分求低维嵌入坐标,对于基准点的 $k$ 近邻,采用能保持其和近邻点局部性质的权值矩阵得到低维嵌入;对于其他点仍采用RML算法,使其达到既能维持数据点的全局结构,又能最大限度地保持其局部几何性质的目的。实验结果验证了该算法的有效性和实时性。

**关键词:**维数约简;黎曼流形学习;低维嵌入;法坐标;权值

**中图分类号:** TP301.6 **文献标志码:** A

## Improved algorithm of preserving global and local properties based on Riemannian manifold learning

WANG Wei, BI Du-yan, XIONG Lei

(Institute of Engineering, University of Air Force Engineering, Xi'an Shaanxi 710038, China)

**Abstract:** An improved algorithm of preserving global and local properties based on Riemannian Manifold Learning (RML) was proposed, which could solve the problem that RML cannot reserve the local geometry property of neighbor data. In the algorithm, all points were projected by Principal component analysis (PCA) firstly, and then a neighbor graph was constructed. The most important step was that all data points were classified into two parts, for the  $k$  neighboring nodes of a base point, it adopted a weight which can preserve local property of the base point and neighboring nodes to get the low-dimensional embedding coordinates. As for the other points, the RML algorithm was still used. Thus the new algorithm could both preserve the metrics at all scales and keep the geometrical property of local neighbor to the maximum. The experimental results demonstrate the validity and real-time quality.

**Key words:** dimensionality reduction; Riemannian Manifold Learning (RML); low-dimensional embedding; normal coordinate; weight

### 0 引言

随着大量数字信息的出现,需要维数约简的学习算法及其应用的需求量在不断增加<sup>[1]</sup>。如何对高维数据进行维数约简成为需要迫切解决的问题。维数约简方法可以分为线性和非线性两类。线性方法主要有主成分分析(Principal Component Analysis, PCA)、多重判别分析(Multiple Discriminant Analysis, MDA)等,而从实际中获得的数据往往呈现出多元性和非线性性,这会引起线性模型失效,从而使得研究非线性维数约简方法变得更为迫切。流形学习是非线性维数约简方法的统称,它可以看成是高维空间中的曲面,从局部来看它与欧氏空间是同胚的,但从整体来看它却是弯曲的并具有全局非线性特点<sup>[2]</sup>。

基于对流形的定义,用数学语言可以这样描述流形学习。令 $Y \subset \mathbf{R}^d$ 且 $f: Y \rightarrow \mathbf{R}^D$ 是一个光滑的嵌套, $D > d$ 。数据集 $\{y_i\}$ 是随机产生的,且经过 $f$ 映射为观测空间的数据 $\{x_i = f(y_i)\}$ 。流形学习就是在基于 $\mathbf{R}^D$ 上的给定观察样本集 $\{x_i\}$ 的条件下恢复 $Y$ 与 $f$ <sup>[3]</sup>。

根据对低维嵌入所做不同的约束和限制,即可得到不同的流形学习算法。例如等距映射(Isometric mapping,

ISOMAP)<sup>[4]</sup>是建立在多维尺度变换(Multidimensional Scaling, MDS)的基础上,力求保持数据点的内在几何性质;局部线性嵌入(Locally Linear Embedding, LLE)<sup>[5]</sup>在低维空间中保持每个邻域中的权值不变,最小化重构误差;拉普拉斯特征映射(Laplacian Eigenmap, LE)<sup>[6-7]</sup>用一个无向有权图来描述一个流形,然后通过用图的嵌入来找低维表示;局部切空间排列(Local Tangent Space Alignment, LTSA)<sup>[8]</sup>通过最小化切空间的全局重构误差来获得低维嵌入;黎曼流形学习(Riemannian Manifold Learning, RML)<sup>[3]</sup>则是利用测地距离学习输入样本点间的测地结构,然后进行正则嵌入。

RML是一种全局算法,但是很多数据具有一些显著的细节信息,单纯应用RML算法会导致局部细节信息丢失,从而对数据的维数约简或数据可视化造成较大误差,不利于对数据的进一步分析。为了解决上述问题,本文提出一种基于RML并能保持全局和局部特性的算法。该算法首先进行PCA投影,以便使后续特征矢量不相关;然后对于 $k$ 近邻( $k$  Nearest Neighbor,  $k$ -NN)邻域内的点,引入权值表示数据的局部几何特性,把问题转化成求解特征方程问题,从而得到数据点的低维嵌入;对于 $k$ -NN邻域外的点,通过锚点求解最优化问题得到这些数据点的低维嵌入坐标。

收稿日期:2010-05-31;修回日期:2010-07-31。 基金项目:国家863计划项目(2007AA701206)。

作者简介:王伟(1983-),女,江苏徐州人,博士研究生,主要研究方向:图像识别、流形学习、维数约简; 毕笃彦(1962-),男,陕西扶峰人,博士生导师,主要研究方向:计算机视觉、图像处理; 熊磊(1976-),男,江西南昌人,讲师,主要研究方向:图像处理、计算机视觉。

## 1 黎曼流形学习算法

RML算法首先得出切空间原点处局部邻域的法坐标,再采用逐步向外扩展的方法找到其他点的法坐标,在某一点处,保持此点到其他邻域点的欧氏距离和夹角,然后转化成一个最小二乘问题求出此点的法坐标,这样未知的利用已知的逐步向外扩展,进而求出所有点的法坐标。其实质是利用测地距离学习输入样本点间的测地结构,然后进行正则嵌入<sup>[3]</sup>。该算法主要包括以下几步。

1) 选一个基准点  $p$  作为法坐标图的原始点。令  $x_0 = p$ , 通过 Dijkstra 算法找到基点  $p$  的其他  $k$  个邻接点。

2) 在点  $p$  的局部邻域  $\{x_0, x_1, \dots, x_k\}$ ,  $k > d$ , 通过 Gram-Schmidt 正交化得到  $p$  点处正切空间  $(p; e_1, \dots, e_d)$  的标准正交基。

3) 计算各点的法坐标。如果点  $q$  在点  $p$  的  $k$ -NN 邻域的有权边上, 设其投影记为  $q'$ , 直接通过求解最小均方问题  $\min_x$

$\|q - (p + \sum_{i=1}^d x_i e_i)\|_{R^n}^2$  来求  $q'$ , 其中  $x = \{x_1, x_2, \dots, x_d\} \in R^d$  就是  $q$  点在正切空间中的投影,  $\frac{\|q - p\|_{R^n}}{\|x\|_{R^d}} x$  是  $q$  点的法坐标。如果这个点不在  $p$  的有权边上, 可以先求一个锚点, 再通过计算有一个四边形限制的最小方差问题来求解。

## 2 基于黎曼流形的改进算法

在流形学习方法中, ISOMAP 等全局方法能更好地表示数据的整体结构, 理论上也更好理解; 而 LLE, LE 等局部方法计算更快捷, 并且可以表示局部为欧氏空间但整体不是的数据<sup>[9]</sup>。本文为了融合全局和局部方法的优点, 针对 RML 算法进行改进。

RML 算法的第 2) 步用 Gram-Schmidt 正交化得到  $p$  点处正切空间的标准正交基, 这需要不断迭代, 所以会花费较长时间。而本文算法对这部分数据点构建权值, 然后转化成求解特征值问题, 不仅可节省时间, 还能保留这些数据的局部几何性质。该权值思想来源于局部保局投影 (Locality Preserving Projection, LPP)<sup>[10]</sup>, LPP 相对于 LLE 和 LE 等局部流形方法, 有一个优势就是在样本集和测试集都可以应用, 而且它是 LE 方法的线性近似, 既克服了 PCA 等传统线性方法难以保持原始数据非线性流形的缺点, 又克服了非线性方法难以获得新样本点低维投影的缺点<sup>[11]</sup>。把 LPP 的思想引入到 RML 算法, 可以使算法具有更好的鲁棒性。改进算法描述如下。

输入 样本集  $X = \{x_1, x_2, \dots, x_N\}$ ,  $x_i \in R^D$ , 基准点  $p$ , 低维嵌入空间的维数  $d$ , 样本点的近邻数  $k$ 。

输出  $X$  的低维嵌入坐标  $Y = \{y_1, y_2, \dots, y_N\}$ ,  $y_i \in R^d$  ( $d < D$ )。

1) PCA 投影。把图像  $x_i$  投影到 PCA 子空间中 (该子空间通过去除零特征值对应的特征向量获得), 通过 PCA 投影, 可以使提取的特征之间是不相关的。

2) 创建近邻图。选一个基准点  $p$  作为法坐标图的原始点。令  $x_0 = p$ , 通过 Dijkstra 算法找到基点  $p$  的其他  $k$  个邻接点, 记为  $k$ -NN。

3) 确定权值。对于任意点  $x_i$  的  $k$ -NN, 首先计算该点和  $k$  个近邻点之间的权重  $w_{ij}$ , 用相似性权值矩阵  $W$  模拟图像的局部结构。如果节点  $i$  与  $j$  之间是相连的, 取  $w_{ij} = \exp\{\beta |x_i - x_j|^2\}$ ,  $\beta > 0$  是一个常量; 否则, 取  $w_{ij} = 0$ 。

4) 计算  $k$ -NN 的保局投影。根据  $w_{ij}$  计算低维嵌入空间的值  $y$ , 即求下列广义特征方程的特征值和特征向量:

$$XLX^T \alpha = \lambda XDX^T \alpha \quad (1)$$

其中:  $D$  是对角矩阵,  $D_{ii} = \sum_j w_{ij}$ ,  $L = D - W$  是 Laplacian 矩阵,  $W$  是权值矩阵,  $X$  的第  $i$  列由  $x_i$  构成, 求解式 (1), 得到一组特征值  $\lambda_0, \dots, \lambda_{d-1}$ , 相应的特征矢量为  $\alpha_0, \dots, \alpha_{d-1}$ , 从而得到低维嵌入为  $y_i = A^T x_i$ ,  $A = (\alpha_0, \dots, \alpha_{d-1})$ 。

5) 计算非  $k$ -NN 的 RML 嵌入。对于任意点  $x_i$  的非近邻点, 先找到锚点  $a$ , 对应的目标函数可以写成:

$$\min_x \|Bx - y\|^2 \quad \text{s. t. } \|x\| = \alpha \quad (2)$$

其中:  $x = q' - a'$ ,  $\alpha = \|q - a\|$ ,  $y = [\cos \theta_1, \dots, \cos \theta_k]^T$ ,  $q'$ ,  $a'$  分别是  $q$ ,  $a$  的法坐标,  $\theta_i$  是  $a$  的  $k$  个邻接点和  $q$  之间的内积;  $B$  是一个  $K \times d$  维的矩阵。本文采用 Lagrange 乘数法求解式 (2) 定义的目标函数, 即可得到 RML 嵌入。

6) 重复 3) ~ 5), 直到求得所有数据点的低维嵌入坐标。

## 3 仿真实验

为了验证算法的有效性和实时性, 本章给出所提算法在模拟数据集和 MNIST 数据集上的实验结果及分析。

### 3.1 模拟数据

本实验选用 Swiss-ball 数据和等边 3D clusters 数据, 这两类数据在整体结构上都有细节信息, 用该数据作仿真能显示出本文算法的基本思想。为了体现改进算法的优越性, 实验分别采用 RML + PCA 算法、Kernel LPP 算法和本文所提算法对两类数据进行维数约简。每个实验随机均匀采集 2000 个数据点, 取  $d = 2, k = 30$ 。所得的维数约简结果如图 1、2 所示, 表 1 给出了 3 种算法所用时间的对比。从实验结果可以看出, 本文算法和 RML + PCA 算法在保持数据的全局结构上效果差不多, 但在保持局部几何性质上, 本文算法比 RML + PCA 算法的效果要好。Kernel LPP 算法在保持局部性质方面占有优势, 但其全局性不如本文算法。同时, 本文算法所用时间要比其他算法少。

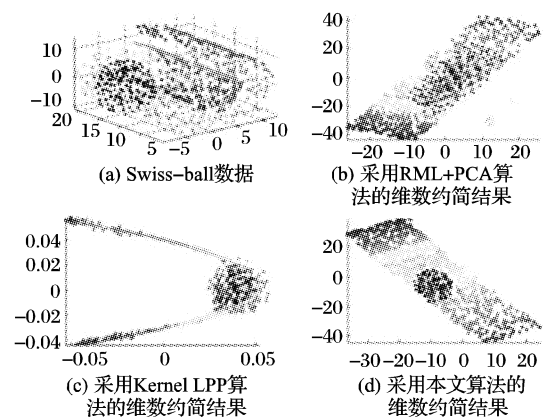


图1 对 Swiss-ball 数据的维数约简结果

### 3.2 MNIST 数据集

MNIST 数据集由 10 个手写数字的 60 000 个训练样本和 10 000 个测试样本组成, 每个样本都是一幅  $28 \times 28$  的灰度图像。本实验随机选取 800 幅数字“2”的图像, 用本文算法进行维数约简。实验中, 取  $d = 2, k = 30$ , 选取“2”的两个较为显著的特征: 上面曲率较小的平滑弧和下面曲率较大的弯折作为提取特征, 结果如图 3 所示。

为了验证本文算法的鲁棒性, 从 MNIST 数据集中选取

800 幅“2”、“5”、“9”的图像用做样本,100 幅用做测试样本,令  $d = 6, k = 30$ , 采用最近邻分类器,用 RML + PCA、Kernel LPP 和本文算法分别对其进行识别。表 2 为分别采用 3 种算法的平均识别率。结果显示本文算法的识别率普遍高于 RML + PCA 算法和 Kernel LPP 算法。

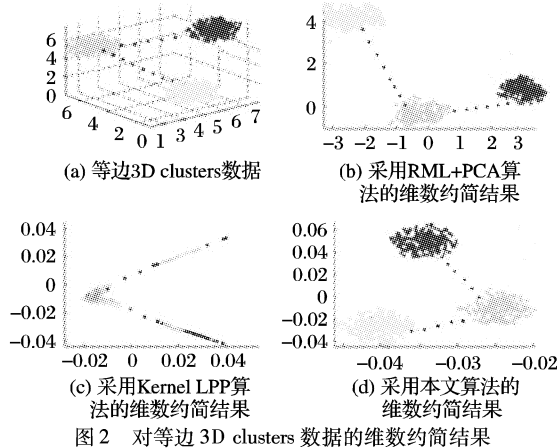


表 1 RML + PCA、Kernel LPP 和本文算法运行时间对比

数据类别	维数约简方法	运行时间/s
Swiss-ball	RML + PCA 算法	1.493 6
	Kernel LPP 算法	0.741 9
	本文算法	0.894 1
等边 3D clusters	RML + PCA 算法	1.427 3
	Kernel LPP 算法	0.695 2
	本文算法	0.862 4

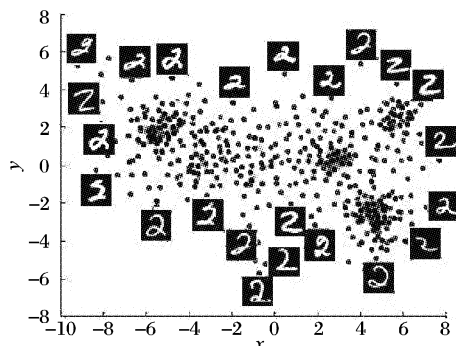


图 3 数字“2”运用改进算法计算所得的二维坐标

表 2  $d = 6, k = 30$  时手写体数字的平均识别率 %

类别	RML + PCA	Kernel LPP	本文算法
2	87.251 6	82.453 9	94.480 2
5	84.092 4	78.947 3	92.905 7
9	80.531 8	79.018 5	91.473 1

## 4 结语

本文提出一种基于 RML 并保持全局和局部特性的算法,该算法汲取了 RML 算法保留数据整体结构的性质,同时引入权值思想,保留部分数据的局部几何性质。模拟数据的实验结果显示 RML + PCA 算法维数约简结果对全局结构保持较好,但局部性质保留较弱,同时耗时长。Kernel LPP 算法运行速度很快,但运行结果相对差一些。本文所提算法的维数约简结果融合了全局结构和局部几何性质,取得了较好的可视化效果,而且运行时间相对较少。MNIST 数据集上的实验结果验证了该算法的鲁棒性和有效性。

## 参考文献:

- [1] SILVA C, RIBEIRO B. Selecting examples in manifold reduced feature space for active learning [C]// ICMLA'08: Proceedings of the Seventh International Conference on Machine Learning and Applications. California: IEEE, 2008: 54–59.
- [2] LIN T, ZHA H B. Riemannian manifold learning [J]. IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 2008, 30(5): 796–809.
- [3] 李波. 基于流形学习的特征提取方法及其应用研究[D]. 合肥: 中国科学技术大学, 2008.
- [4] TENENBAUM J B, SILVA V D, LANGFORD J C. A global geometric framework for nonlinear dimensionality reduction [J]. Science, 2000, 290(5500): 2319–2323.
- [5] ROWEIS S T, SAUL L K. Nonlinear dimensionality reduction by locally linear embedding [J]. Science, 2000, 290(5500): 2323–2327.
- [6] BELKIN M, NIYOGI P. Laplacian eigenmaps and spectral techniques for embedding and clustering [C]// Advances in Neural Information Processing System 15. Vancouver, Canada: MIT Press, 2002: 143–149.
- [7] DONOHO D, GRIMES C. Hessian eigenmaps: Locally linear embedding techniques for high dimensional data [J]. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 2003, 100(10): 5591–5596.
- [8] ZHANG Z, ZHA H. Principal manifolds and nonlinear dimension reduction via local tangent space alignment [J]. Scientific Computing, 2005, 26(1): 313–338.
- [9] SILVA V D, TENENBAUM J B. Global versus local methods in nonlinear dimensionality reduction [J]. Science, 2003, 174(82): 739–746.
- [10] HE X F, NIYOGI P. Locality preserving projections [C]// Proceedings of Neural Information Processing System. Vancouver, Canada, MIT Press, 2003: 153–160.
- [11] 冯海亮. 流形学习算法在人脸识别中的应用研究[D]. 重庆: 重庆大学, 2008.

(上接第 3297 页)

- [5] PAN JIA-YU, YANG HYUNG-JEONG, FALOUTSOS C, et al. GCap: Graph-based automatic image captioning[EB/OL]. [2010-01-01]. [http://www.cs.cmu.edu/~jypan/publications/old/MDDE04GCap\\_8pages.pdf](http://www.cs.cmu.edu/~jypan/publications/old/MDDE04GCap_8pages.pdf).
- [6] BARNARD K, DUYGULU P, FORSYTH D, et al. Matching words and pictures [J]. Journal of Machine Learning Research, 2003, 3: 1107–1135.
- [7] MILLER G, BECKWITH R, FELLBAUM C, et al. WordNet: An online lexical database [J]. International Journal of Lexicography,

1990, 3(4): 235–244.

- [8] AGRAWAL R, SRIKANT R. Fast algorithms for mining association rules [C]// Proceedings of the 20th International Conference on Very Large DataBases. Santiago, Chile: [s. n.], 1994: 478–499.
- [9] MILLER G. WordNet: A lexical database for English [J]. Communications of the ACM, 1995, 38(11): 39–41.
- [10] PUCHER M. Performance evaluation of WordNet-based semantic relatedness measures for word prediction in conversational speech [EB/OL]. [2010-01-01]. <http://mona.frw.at/papers/final-cs-workshop-semdistance.pdf>.