

$\mu$ -izometrična aproksimacija difuzijskog preslikavanja  
prema M. Salhov et al., Applied and Computational Harmonic Analysis  
38 (2015)399–419

Doris Đivanović, Karlo Gjogolović i Maja Pavičić

# 1 Uvod

Difuzijska preslikavanja (DM) preslikavaju podatke iz prostora velike dimenzije u nižedimenzionalan euklidski prostor, tako da euklidske udaljenosti u kodomeni reprezentiraju difuzijske udaljenosti točaka početnog skupa. Kao i ostale jezgrene metode, oslanjaju se na spektralnu analizu jezgrene matrice sličnosti kako bi otkrili geometriju podataka i omogućili smanjenje dimenzije. No, kako je puna spektralna dekompozicija skupa za velike skupove podataka, u ovom radu iznesena je jedna aproksimativna metoda. Metoda  $\mu IDM$  konstruira mali podskup izvornog skupa podataka na kojem se egzaktno čuva geometrija dobivena originalnim difuzijskim ulaganjem (DM), takav da geometrija na njegovom komplementu dobivena proširenjem preslikavanja Nystromovom metodom ne odstupa više od  $\mu$ .

## 2 Formulacija problema i konstrukcija aproksimacije

### 2.1 Formulacija problema

Neka je  $\mathcal{M}$  neka nižedimenzionalna mnogostrukost uronjena u ambijentni prostor  $\mathbb{R}^m$ , intrinzične dimenzije  $\delta \ll m$ , te neka je  $M \subset \mathcal{M}$  diskretni skup s  $|M| = n$  točaka. Želimo aproksimirati difuzijsko preslikavanje  $\Phi : M \rightarrow \mathbb{R}^\delta$  preslikavanjem  $\hat{\Phi} : M \rightarrow \mathbb{R}^{\hat{\delta}}$  uz kontrolu greške na udaljenostima, tj. preslikavanjem takvim da euklidska udaljenost vrijednosti aproksimacije dovoljno dobro aproksimira euklidsku udaljenost vrijednosti difuzijskog preslikavanja, tj. da je greška manja od nekog dovoljno malog  $\mu$ .

Za preslikavanja  $\Phi : M \rightarrow \mathbb{R}^\delta$  i  $\hat{\Phi} : M \rightarrow \mathbb{R}^{\hat{\delta}}$  kažemo da su  $\mu$ -izometrična ako za svaki par  $x, y \in M$  vrijedi

$$\left| \|\hat{\Phi}(x) - \hat{\Phi}(y)\| - \|\Phi(x) - \Phi(y)\| \right| \leq \mu.$$

Dakle, želimo pronaći preslikavanje  $\hat{\Phi} : M \rightarrow \mathbb{R}^{\hat{\delta}}$  koje je  $\mu$ -izometrično difuzijskom preslikavanju  $\Phi : M \rightarrow \mathbb{R}^\delta$ .

### 2.2 Difuzijsko preslikavanje (*Diffusion Map* - DM)

Najprije pomoću Gaussove jezgre, za  $\varepsilon > 0$ , računamo sličnosti parova izvornih podataka

$$k(x, y) = \exp\left(-\frac{\|x - y\|^2}{\varepsilon}\right), \quad x, y \in M,$$

i pohranjujemo ih u matricu  $K$ .

Zatim računamo sume redaka matrice  $K$ , čime dobivamo stupanj povezanosti svakog podatka s preostalima:

$$q(x) = \sum_{y \in M} k(x, y)$$

te konstruiramo matricu

$$Q = \text{diag}(q(x_1), \dots, q(x_n)).$$

Normiranjem matrice  $K$  elementima iz  $Q$  dobivamo Markovljevu matricu

$$P = Q^{-1}K,$$

koja je slična simetričnoj matrici

$$A = Q^{1/2}PQ^{-1/2} = Q^{-1/2}KQ^{-1/2},$$

Zbog sličnosti, matrice  $A$  i  $P$  imaju isti spektar, a svojstveni vektori se razlikuju za faktor  $Q^{-1/2}$ . Difuzijsko preslikavanje želimo definirati preko svojstvenih parova matrice  $P$ , ali će nam određivanje spektralne dekompozicije matrice  $P$  biti jednostavnije računanjem spektralne dekompozicije simetrične matrice  $A$ .

Neka su  $1 = \sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_n > 0$  svojstvene vrijednosti i  $\phi_1, \dots, \phi_n$  pripadni ortonormirani svojstveni vektori od  $A$ .

Tada svakom podatku  $x \in M$  možemo pridružiti sljedeći vektor iz  $\mathbb{R}^n$ :

$$x \rightarrow \left[ q(x)^{-1/2} \sigma_1 \phi_1(x), \dots, q(x)^{-1/2} \sigma_n \phi_n(x) \right].$$

Budući da spektar matrice  $A$  jako brzo opada, dovoljno je promatrati svojstvene parove za  $\delta$  najvećih svojstvenih vrijednosti.

Za dovoljno mali  $\delta$ , difuzijsko preslikavanje (DM)  $\Phi : \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R}^\delta$  definiramo kao

$$\Phi(x) = \left[ q(x)^{-1/2} \sigma_1 \phi_1(x), \dots, q(x)^{-1/2} \sigma_\delta \phi_\delta(x) \right], \quad \forall x \in M.$$

Dakle,  $\delta$  je dimenzija nižedimenzionalnog prostora u koji ulažemo podatke iz prostora velike dimenzije  $M$ .

## 2.3 Konstrukcija aproksimacije

Računanje difuzijskog preslikavanja  $\Phi : M \rightarrow \mathbb{R}^\delta$ , za  $|M| = n$ , zasniva se, dakle, na računanju spektralne dekompozicije matrice dimenzije  $n \times n$ , što je za velike skupove podataka neefikasno, pa ga želimo aproksimirati preslikavanjem čije je računanje efikasnije.

Izložit ćemo računalno efikasnu konstrukciju  $\mu$ -izometrične aproksimacije difuzijskog preslikavanja koja se zasniva na dva računalno efikasnija koraka, za odabrani manji skup podataka  $S$ ,  $|S| = s < n$ : računanju parcijalnog difuzijskog preslikavanja  $\tilde{\Phi} : S \rightarrow \mathbb{R}^s$ , koje egzaktno čuva difuzijske udaljenosti na  $S$ , te njegovom efikasnom Nyströmovu proširenju  $\hat{\Phi} : M \rightarrow \mathbb{R}^s$  na cijeli skup,  $\mu$ -izometričnom difuzijskom preslikavanju, zasnovanom na računanju spektralne dekompozicije matrice dimenzije  $s \times s$ .

Dakle, dimenzija nižedimenzionalnog prostora u koji ulažemo podatke iz prostora velike dimenzije  $M$  bit će jednaka  $s$ .

### 2.3.1 Parcijalno difuzijsko preslikavanje (PDM)

Neka je  $S = \{x_1, \dots, x_s\} \subset M$ ,  $s < n$ . Označimo s  $\tilde{K}$  gornju  $s \times n$  podmatricu matrice  $K$ , a s  $\tilde{Q} = \text{diag}(\tilde{q}(x_i))$  dijagonalnu matricu gdje je  $\tilde{q}(x_i) = \sum_{j=1}^n \tilde{k}(x_i, x_j)$ ,  $i = 1, 2, \dots, s$ .

Neka je

$$\tilde{A} = \tilde{Q}^{-1/2} \tilde{K} \tilde{Q}^{-1/2}.$$

pravokutna  $s \times n$  matrica.

Matrica  $\tilde{A}\tilde{A}^T$  je kvadratna i simetrična, dimenzije  $s \times s$ , i njezine svojstvene vrijednosti jednake su kvadratima singularnih vrijednosti matrice  $\tilde{A}$ , a lijevi singularni vektori matrice  $\tilde{A}$  razlikuju se od svojstvenih vektora matrice  $\tilde{A}\tilde{A}^T$  za faktor  $\tilde{Q}^{-1/2}$ .

Parcijalno difuzijsko preslikavanje želimo definirati preko parova singularnih vrijednosti i lijevih singularnih vektora matrice  $\tilde{A}$ , ali će nam određivanje dekompozicije singularnih vrijednosti matrice  $\tilde{A}$  biti jednostavnije računanjem spektralne dekompozicije simetrične matrice  $\tilde{A}\tilde{A}^T$ .

Neka su  $1 = \tilde{\sigma}_1^2 \geq \tilde{\sigma}_2^2 \geq \dots \geq \tilde{\sigma}_s^2 > 0$  svojstvene vrijednosti i  $\tilde{\phi}_1, \dots, \tilde{\phi}_s$  pripadni ortonormirani svojstveni vektori od  $\tilde{A}\tilde{A}^T$ .

Parcijalno difuzijsko preslikavanje (PDM)  $\tilde{\Phi} : S \rightarrow \mathbb{R}^s$  definiramo kao

$$\tilde{\Phi}(x) = \left[ \tilde{q}(x)^{-1/2} (\tilde{\sigma}_1 \tilde{\phi}_1(x)), \dots, \tilde{q}(x)^{-1/2} (\tilde{\sigma}_s \tilde{\phi}_s(x)) \right], \quad \forall x \in S.$$

Može se lako pokazati da su za svaka dva podatka iz podskupa  $S$  euklidske udaljenosti njihovih slika po parcijalnom difuzijskom preslikavanju jednake euklidskim udaljenostima njihovih slika po difuzijskom preslikavanju, dakle da vrijedi

$$\|\tilde{\Phi}(x) - \tilde{\Phi}(y)\| = \|\Phi(x) - \Phi(y)\|, \quad \forall x, y \in S.$$

Dakle, parcijalno difuzijsko preslikavanje, jednako kao difuzijsko, čuva geometriju podataka na skupu  $S$ , tj. njihove difuzijske udaljenosti.

Računanje difuzijskog preslikavanja svodi se na računanje spektralne dekompozicije matrice dimenzije  $n \times n$ , a računanje parcijalnog difuzijskog preslikavanja svodi se na računanje spektralne dekompozicije matrice dimenzije  $s \times s$ , gdje je  $s < n$ , pa je difuzijske udaljenosti podataka iz skupa  $S \subset M$ ,  $|S| = s < n = |M|$ , očito puno efikasnije izračunati posredstvom parcijalnog nego posredstvom standardnog difuzijskog preslikavanja.

### 2.3.2 Nyströmovo proširenje PDM-a na cijeli skup

Sada nam je cilj gore definirano parcijalno difuzijsko preslikavanje  $\tilde{\Phi} : S \rightarrow \mathbb{R}^s$  proširiti do preslikavanja  $\hat{\Phi} : M \rightarrow \mathbb{R}^s$ , definiranog na cijelom skupu podataka, ali takvog da su za svaka dva podatka iz podskupa  $S$  euklidske udaljenosti njihovih slika po proširenom preslikavanju  $\hat{\Phi}$  jednake euklidskim udaljenostima njihovih slika po parcijalnom difuzijskom preslikavanju  $\tilde{\Phi}$ , budući da će onda, zbog takvog svojstva parcijalnog preslikavanja, i prošireno preslikavanje čuvati geometriju podataka na skupu  $S$ , tj. njihove difuzijske udaljenosti.

Rastavimo skup podataka  $M$  na skup  $S$  i njegov komplement  $\bar{S}$  te zapišimo matricu  $A$  u sljedećem blok-obliku:

$$A = \begin{bmatrix} A_{S,S} & A_{S,\bar{S}} \\ A_{\bar{S},S}^\top & A_{\bar{S},\bar{S}} \end{bmatrix}.$$

Blok  $A_{S,S} \in \mathbb{R}^{s \times s}$  sadrži difuzijske sličnosti između podataka unutar podskupa  $S$ , blok  $A_{\bar{S},\bar{S}} \in \mathbb{R}^{(n-s) \times (n-s)}$  sadrži sličnosti između podataka iz komplementa  $\bar{S}$ , dok blok  $A_{S,\bar{S}} \in \mathbb{R}^{s \times (n-s)}$  sadrži sličnosti između podataka iz  $S$  i podataka iz  $\bar{S}$ .

Sada matricu  $\tilde{A}$  možemo napisati u blok-obliku

$$\tilde{A} = \tilde{Q}^{-1/2} \tilde{K} \tilde{Q}^{-1/2} = \begin{bmatrix} A_{S,S} & A_{S,\bar{S}} \end{bmatrix}.$$

Klasična Nyströmova metoda proširenja difuzijskog preslikavanja polazi od spektralne dekompozicije matrice  $A_{S,S}$ ,

$$A_{S,S} = \tilde{\Psi} \tilde{\Lambda} \tilde{\Psi}^\top,$$

i svojstva da svaka svojstvena vrijednost  $\tilde{\lambda}$  zadovoljava jednakost

$$\tilde{\psi} = A_{S,S} \tilde{\psi} \tilde{\lambda}^{-1},$$

te, uzimajući u obzir zapis matrice  $A$ :

$$A = \begin{bmatrix} A_{S,S} & A_{S,\bar{S}} \\ A_{\bar{S},S}^\top & A_{\bar{S},\bar{S}} \end{bmatrix},$$

matricu  $A$  aproksimira na sljedeći način:

$$\hat{\Psi} = \begin{bmatrix} \tilde{\Psi} \\ A_{\bar{S},S}^\top \tilde{\Psi} \tilde{\Lambda}^{-1} \end{bmatrix}, \quad \hat{A} = \hat{\Psi} \tilde{\Lambda} \hat{\Psi}^\top = \begin{bmatrix} A_{(S,S)} & A_{(S,\bar{S})} \\ A_{(S,\bar{S})}^\top & A_{(S,S)}^{-1} A_{(S,\bar{S})} \end{bmatrix}.$$

Budući da se difuzijsko preslikavanje zasniva na spektralnoj dekompoziciji matrice  $A$ , možemo ga aproksimirati preslikavanjem koje se na analogan način zasniva na dekompoziciji matrice  $\hat{A}$ ,

$$\hat{A} = \hat{\phi} \Lambda \hat{\phi}^\top,$$

takvoj da je matrica  $\hat{\phi}$  dimenzije  $n \times s$  čiji su stupci ortonormalni, dakle vrijedi

$$\hat{\phi}^\top \hat{\phi} = I,$$

a  $\Lambda$  je dijagonalna matrica dimenzije  $s \times s$ .

U nastavku ćemo pokazati računski efikasan način računanja takve dekompozicije matrice  $\hat{A}$ , koji uključuje računanje spektralne dekompozicije matrice dimenzije  $s \times s$ . Stoga je računanje Nyströmova proširenja difuzijskog preslikavanja računalno efikasnije od računanja preslikavanja koje zahtijeva računanje spektralne dekompozicije matrice dimenzije  $n \times n$ .

Ortogonalno Nyströmovo preslikavanje (ONM)  $\hat{\Phi} : M \rightarrow \mathbb{R}^s$  definira se kao

$$\hat{\Phi}(x) = \left[ q(x)^{-1/2} \lambda_1 \hat{\phi}_1(x), \dots, q(x)^{-1/2} \lambda_s \hat{\phi}_s(x) \right] \quad \forall x \in M.$$

Može se lako pokazati da su za svaka dva podatka iz podskupa  $S$  euklidske udaljenosti njihovih slika po ortogonalnom Nyströmovu preslikavanju jednake euklidskim udaljenostima njihovih slika po parcijalnom difuzijskom preslikavanju, dakle da vrijedi

$$\|\hat{\Phi}(x) - \hat{\Phi}(y)\| = \|\tilde{\Phi}(x) - \tilde{\Phi}(y)\|, \quad \forall x, y \in S.$$

Stoga, budući da vrijedi

$$\|\tilde{\Phi}(x) - \tilde{\Phi}(y)\| = \|\Phi(x) - \Phi(y)\|, \quad \forall x, y \in S,$$

onda vrijedi i

$$\|\hat{\Phi}(x) - \hat{\Phi}(y)\| = \|\Phi(x) - \Phi(y)\|, \quad \forall x, y \in S.$$

Dakle, ortogonalno Nyströmovo preslikavanje, jednako kao parcijalno, odnosno standardno difuzijsko preslikavanje, čuva geometriju podataka na skupu  $S$ , tj. njihove difuzijske udaljenosti.

### 2.3.3 Efikasna konstrukcija Nyströмова preslikavanja

Najprije, može se pokazati da za svaku ortogonalnu matricu  $\Psi$  dimenzije  $s \times s$  i svaku nesingularnu matricu  $\Lambda$  dimenzije  $s \times s$  vrijedi da matrica

$$\hat{\phi} = \begin{bmatrix} A_{(S,S)} \\ A_{(\bar{S},S)}^T \end{bmatrix} A_{(S,S)}^{-1/2} \Psi \Lambda^{-1/2}$$

zadovoljava

$$\hat{A} = \begin{bmatrix} A_{(S,S)} & A_{(S,\bar{S})} \\ A_{(S,\bar{S})}^T & (A_{(S,S)})^{-1} A_{(S,\bar{S})} \end{bmatrix} = \hat{\phi} \Lambda \hat{\phi}^T.$$

Nadalje, takvu matricu  $\hat{\phi}$  moguće je konstruirati uz uvjet da su joj stupci ortogonalni, tj. da vrijedi

$$\hat{\phi}^T \hat{\phi} = I.$$

Konačno, u našem slučaju zahtijeva se i da su euklidske udaljenosti slika podataka iz skupa  $S$  po Nyströmovu preslikavanju  $\hat{\Phi}$  jednake euklidskim udaljenostima njihovih slika po parcijalnom difuzijskom preslikavanju  $\tilde{\Phi}$ .

Zbog

$$\|u - v\|^2 = (u, u) - 2(u, v) + (v, v), \quad \forall u, v \in \mathbb{R}^s,$$

za to je dovoljno da su skalarni produkti slika podataka iz skupa  $S$  po Nyströmovu preslikavanju  $\hat{\Phi}$  jednaki skalarnim produktima njihovih slika po parcijalnom difuzijskom preslikavanju  $\tilde{\Phi}$ , tj. da vrijedi

$$\langle \hat{\Phi}(x), \hat{\Phi}(y) \rangle = \langle \tilde{\Phi}(x), \tilde{\Phi}(y) \rangle, \quad \forall x, y \in S.$$

Tehnički gledano, matrice  $\hat{\phi}$  i  $\Lambda$  moraju zadovoljavati

$$A_{(S,S)}^{1/2} \psi \Lambda \psi^T A_{(S,S)}^{1/2} = A_{(S,S)} A_{(S,S)} + A_{(S,\bar{S})} A_{(S,\bar{S})}^T,$$

gdje lijeva strana predstavlja skalarne produkte Nyströmove aproksimacije

$$\hat{\phi} = \begin{bmatrix} A_{(S,S)} \\ A_{(\bar{S},S)}^T \end{bmatrix} A_{(S,S)}^{-1/2} \Psi \Lambda^{-1/2}, \quad \hat{A} = \hat{\phi} \Lambda \hat{\phi}^T$$

na skupu  $S$ , a desna strana predstavlja skalarne produkte  $\tilde{A}\tilde{A}^T$  parcijalnog difuzijskog preslikavanja na istom skupu.

Ova formulacija daje definiciju matrica  $\hat{\phi}$  i  $\Lambda$ , potrebnih za Nyströmovo preslikavanje, preko spektralne dekompozicije

$$C = \psi \Lambda \psi^T,$$

pri čemu je matrica  $C$  definirana kao

$$C := A_{(S,S)} + A_{(S,S)}^{-1/2} A_{(S,\bar{S})} A_{(S,\bar{S})}^T A_{(S,S)}^{-1/2}.$$

Primijetimo da je  $C$  matrica dimenzije  $s \times s$ , pa se računanje dekompozicije matrice  $\hat{A} = \hat{\phi} \Lambda \hat{\phi}^T$ ,  $\hat{\phi}^T \hat{\phi} = I$ , potrebne za Nyströmovo preslikavanje zasniva na računanju spektralne dekompozicije matrice dimenzije  $s \times s$ , pa je računalno efikasnije od računanja spektralne dekompozicije matrice  $A$ , koja je dimenzije  $n \times n$ .

### 3 $\mu$ -izometrična konstrukcija (algoritam $\mu$ IDM)

Sada predstavljamo metodu koja konstruira skup  $S$  iz  $M$ ,  $|S| = s$ , takav da je ortogonalno Nyströmovo preslikavanje dobiveno na temelju podskupa  $S$ , dakle  $\hat{\Phi} : M \rightarrow \mathbb{R}^s$ ,

$$\hat{\Phi}(x) = \left[ q(x)^{-1/2} \lambda_1 \hat{\phi}_1(x), \dots, q(x)^{-1/2} \lambda_s \hat{\phi}_s(x) \right], \quad \forall x \in M,$$

$\mu$ -izometrično difuzijskom preslikavanju.

Metoda iterativno konstruira skup  $S$  i odgovarajuće ortogonalno Nyströmovo preslikavanje jednim prolaskom po skupu  $M$ : u  $k$ -tom koraku testira se treba li novu točku dodati u skup  $S$  tako da preslikavanje ostane  $\mu$ -izometrično difuzijskom preslikavanju.

**Definicija 1** (MTM — *Map-to-Map transformacija*). Za preslikavanja  $\hat{\Phi}_\kappa$  i  $\hat{\Phi}_\ell$  definirane na istom skupu  $S_\kappa$ , linearna transformacija

$$T_{\kappa,\ell}(u) = u \left[ \hat{\Phi}_\kappa(S_\kappa) \right]^{-1} \left[ \hat{\Phi}_\ell(S_\kappa) \right]$$

preslikava koordinate iz prostora  $\mathbb{R}^{|S_\kappa|}$  u  $\mathbb{R}^{|S_\ell|}$  tako da  $\hat{\Phi}_\ell(x) = T_{\kappa,\ell} \circ \hat{\Phi}_\kappa(x)$  za  $x \in S_\kappa$ .

Gdje je

$$\left[ \hat{\Phi}_\kappa(S_\kappa) \right] = \underbrace{\begin{bmatrix} \dots & \hat{\Phi}_\kappa(y_1) & \dots \\ & \vdots & \\ \dots & \hat{\Phi}_\kappa(y_{n_\kappa}) & \dots \end{bmatrix}}_{n_\kappa \times n_\kappa}, \quad \left[ \hat{\Phi}_\ell(S_\kappa) \right] = \underbrace{\begin{bmatrix} \dots & \hat{\Phi}_\ell(y_1) & \dots \\ & \vdots & \\ \dots & \hat{\Phi}_\ell(y_{n_\kappa}) & \dots \end{bmatrix}}_{n_\kappa \times n_\ell}.$$

Dan je pseudo-kod izračuna  $\hat{\Phi}(x_i)$ ,  $i = 1, \dots, n$ :

---

**Algorithm 1:**  $\mu$ -izometrično difuzijsko preslikavanje ( $\mu$ IDM)

---

**Ulaz:** podatci  $x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R}^m$ ;  
parametri: granica pogreške  $\mu$ , širina Gaussove jezgre  $\varepsilon$   
**Izlaz:** aproksimirane koordinate difuzijskog preslikavanja  $\hat{\Phi}(x_i)$ ,  $i = 1, \dots, n$

- 1 Inicijaliziraj rječnik:  $S_1 \leftarrow \{x_1\}$
- 2 Inicijaliziraj  $Q$  i  $\tilde{A}$  s obzirom na  $S_1$
- 3  $\hat{\Phi} \leftarrow \text{ONM}(S_1)$
- 4 **for**  $\kappa \leftarrow 1$  **do**  $n - 1$  **do**
- 5      $S' \leftarrow S_\kappa \cup \{x_{\kappa+1}\}$   
       /\* Izračunaj  $Q'$  i  $\tilde{A}'$  za  $S'$  \*/
- 6      $\hat{\Phi}' \leftarrow \text{ONM}(S')$   
       /\* Test  $x_{\kappa+1}$  \*/
- 7      $T \leftarrow \text{MTM}(\hat{\Phi} \rightarrow \hat{\Phi}')$
- 8      $\beta \leftarrow \|T(\hat{\Phi}(x_{\kappa+1})) - \hat{\Phi}'(x_{\kappa+1})\|$
- 9     **if**  $\beta > \mu/2$  **then**
- 10          $S_{\kappa+1} \leftarrow S'$
- 11          $Q \leftarrow Q', \quad \tilde{A} \leftarrow \tilde{A}'$
- 12          $\hat{\Phi} \leftarrow \hat{\Phi}'$
- 13     **else**
- 14          $S_{\kappa+1} \leftarrow S_\kappa$
- 15 **return**  $\hat{\Phi}(x_1), \dots, \hat{\Phi}(x_n)$

---

U literaturi za ovaj seminar za ONM preslikavanje dobiveno ovim postupkom dokazano je da vrijedi:

**Teorem 1.** *Neka je  $\Phi$  DM ugradnja,  $S$  rječnik dobiven Algoritmom 5.1, a  $\hat{\Phi}$  pripadna ONM ugradnja. Tada za sve  $x, y \in \mathcal{M}$  vrijedi*

$$\|\hat{\Phi}(x) - \hat{\Phi}(y)\| \approx \|\Phi(x) - \Phi(y)\| \quad \text{uz pogrešku najviše } \mu.$$

Preslikavanje MTM svake transformacije  $\hat{\Phi}_\kappa(x)$ , za  $x \in S_\kappa$ , zadovoljava relaciju

$$\hat{\Phi}_\ell(x) = T_{\kappa, \ell} \circ \hat{\Phi}_\kappa(x).$$

Time se geometrija skupa  $S_\kappa$  očuva u prostoru  $\mathbb{R}^{n_\ell}$  pod transformacijom  $T_{\kappa, \ell}$ , koja je izometrija između  $\mathbb{R}^{n_\kappa}$  i svoje slike u  $\mathbb{R}^{n_\ell}$ . Za točke iz skupa  $S_\ell \setminus S_\kappa$  preslikavanja  $T_{\kappa, \ell} \circ \hat{\Phi}_\kappa$  i  $\hat{\Phi}_\ell$  mogu dati različita preslikavanja.

Za svaku takvu točku  $x$  definira se pogreška

$$\beta = \|T_{\kappa, \ell} \circ \hat{\Phi}_\kappa(x) - \hat{\Phi}_\ell(x)\|,$$

koja mjeri koliko dobro preslikavanja točaka iz  $S_\ell$  aproksimira ortogonalna Nyströмова metoda primijenjena na skup  $S_\kappa$ . Na temelju te pogreške određuje se kriterij za pripadnost rječniku i provjerava je li pogreška dovoljno mala u odnosu na zadanu granicu.

Konstrukcija  $\mu$ IDM algoritma redom prolazi točke  $x_1, x_2, \dots, x_n \in M$  i provjerava mogu



li se njihova preslikavanja dobro aproksimirati postojećim rječnikom ili ih treba u njega dodati. U početku rječnik sadrži samo točku  $x_1$ . U svakoj iteraciji  $\kappa$  točke  $M_\kappa = \{x_1, \dots, x_\kappa\}$ , koje su već obrađene, aproksimirane su rječnikom  $S_\kappa \subseteq M_\kappa$ . Algoritam uzima sljedeću točku  $x_{\kappa+1}$  i provjerava može li se njezino preslikavanje dovoljno precizno aproksimirati trenutnim rječnikom. Ako je pogreška manja od zadanog praga, rječnik ostaje nepromijenjen,  $S_{\kappa+1} = S_\kappa$ . Ako pogreška prelazi prag, točka se dodaje u rječnik, pa vrijedi  $S_{\kappa+1} = S_\kappa \cup \{x_{\kappa+1}\}$ .

Radi jednostavnosti, pretpostavlja se da skup  $M$  sadrži prvih  $\kappa$  i  $\ell$  točaka, koje čine skupove  $M_\kappa$  i  $M_\ell$ . Kriterij za uključivanje u rječnik temelji se na usporedbi aproksimacijske pogreške

$$\|\hat{\Phi}'(x_{\kappa+1}) - T \circ \hat{\Phi}(x_{\kappa+1})\|$$

s prilagodljivom granicom  $\mu$ . Ovaj kriterij jamči da će na kraju postupka ONM preslikavanje svake točke u  $M \setminus S$  biti  $\mu$ -izometrijsko u odnosu na difuzijsko preslikavanje.

## 4 Eksperimentalni rezultati

U literaturi za ovaj seminar testirane su sljedeće mnogostrukosti u  $\mathbb{R}^3$ : jedinična sfera, švicarska rolada i Möbiusova vrpca. Za svaki skup podataka uzeto je  $n = 10\,000$  točaka, a zatim je skup linearno projiciran u  $\mathbb{R}^{17}$  množenjem slučajnom matricom punog ranga.

Autori rada navode sljedeće rezultate:

- **Sfera:** za  $\epsilon = 1$  i  $\mu = 7.80 \cdot 10^{-6}$  dobiven je rječnik veličine  $|S| = 147$ .
- **Švicarska rolada:** za  $\epsilon = 70$  i  $\mu = 1.25 \cdot 10^{-4}$  dobiven je rječnik veličine  $|S| = 236$ .
- **Möbiusova vrpca:** za  $\epsilon = 1$  i  $\mu = 7.80 \cdot 10^{-6}$  dobiven je rječnik veličine  $|S| = 85$ .

U vlastitoj implementaciji koristili smo manji skup s  $n = 750$  točaka te smo dobili:

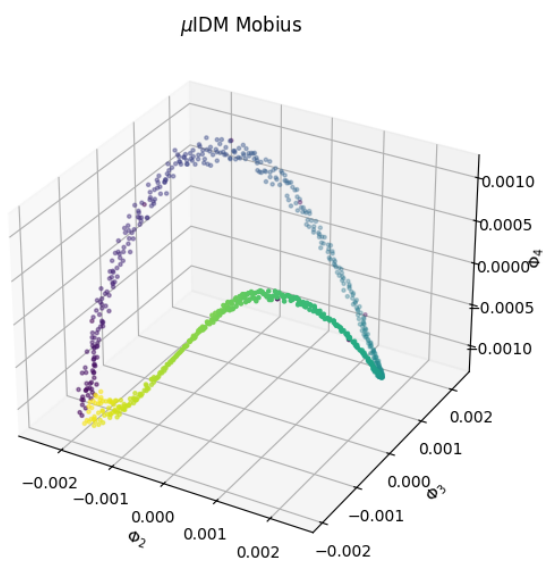
- **Möbiusova vrpca:** za  $\epsilon = 1$  i  $\mu = 2.80 \cdot 10^{-3}$  rječnik veličine  $|S| = 9$ .
- **Sfera:** za  $\epsilon = 3$  i  $\mu = 2.7936 \cdot 10^{-3}$  rječnik veličine  $|S| = 261$ .

Veća veličina rječnika u slučaju sfere vjerojatno je posljedica redoslijeda kojim su točke ulazile u algoritam.

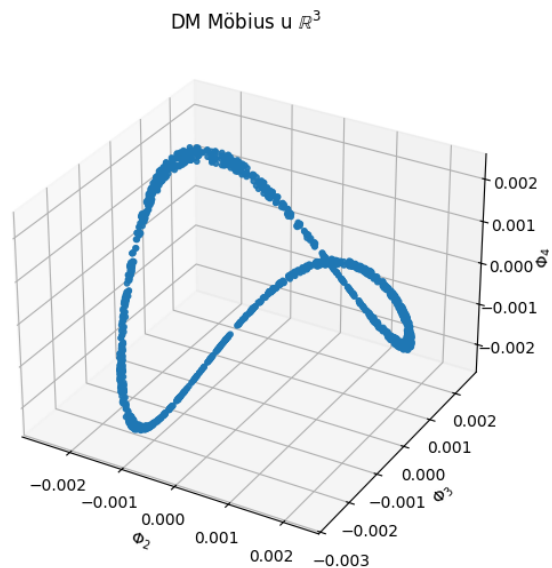
Slike rezultata dane su u nastavku.

## 5 zaključak

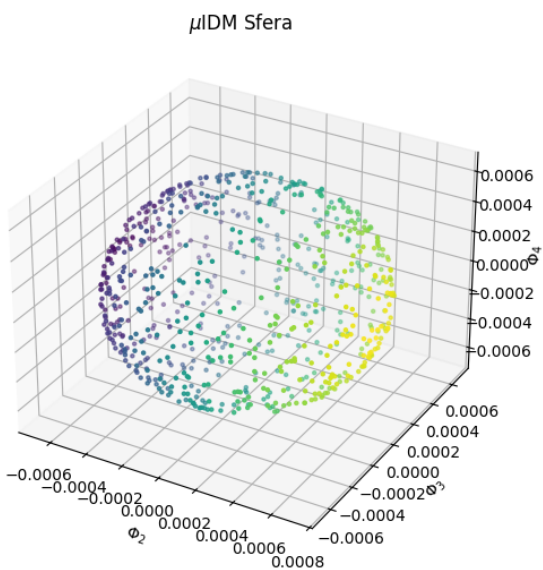
$\mu$ IDM pruža algoritamski okvir za skalabilno smanjenje dimenzije zasnovano na difuzijskim udaljenostima: rječnik i ONM proširenje omogućuju da se velik skup podataka preslika uz kontroliranu pogrešku  $\mu$ , pri čemu se geometrija na rječniku očuva točno, a na ostatku skupa do tolerancije. Metoda je pogodna za vizualizaciju, klasteriranje i druge zadatke gdje je bitna difuzijska metrika.



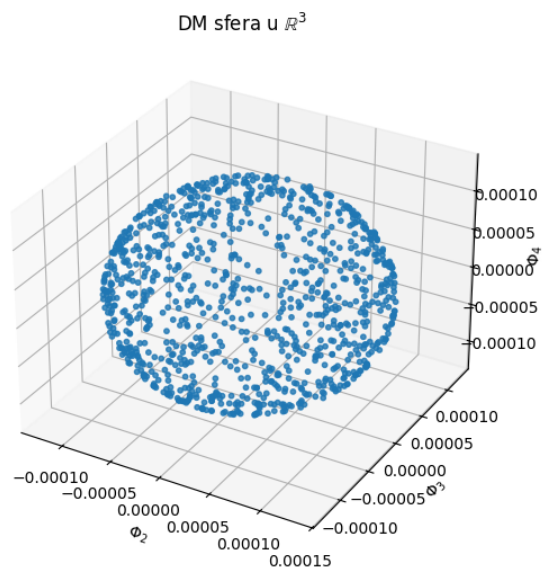
(a) Möbius  $\mu$ IDM



(b) Möbius DM



(c) Sfera  $\mu$ IDM



(d) Sfera DM

Slika 1: Usporedba difuzijskog preslikavanja i  $\mu$ IDM-a za Möbiusovu vrpču i sferu.