

# 基于可信赖性和连续性的流形降维效果评价方法<sup>\*</sup>

刘丽娜<sup>1,2</sup>, 马世伟<sup>1†</sup>, 芮玲<sup>1</sup>

(1. 上海大学 机电工程与自动化学院, 上海 210072; 2. 山东理工大学 电气与电子工程学院, 山东 淄博 255049)

**摘要:** 针对采用主观分析法对基于流形学习的非线性降维效果进行评价存在主观性强, 缺乏必要的量化计算进行指导问题, 提出利用可信赖性和连续性两个指标对流形降维效果进行量化评价。其中, 可信赖性用于衡量流形降维可视化效果图的可信度, 连续性则旨在分析原邻域的保持性。对常用的基于流形学习的非线性降维方法进行分类和对比研究, 并在经典数据集 Swissroll、Swisshole、Twopeaks、Helix 和 Puncturedsphere 上利用可信赖性和连续性指标进行实验和对比分析, 实验结果验证了该方法的有效性。

**关键词:** 数据降维; 量化评价; 可信赖性; 连续性

**中图分类号:** TP391.4

**文献标志码:** A

**文章编号:** 1001-3695(2018)06-1707-05

doi:10.3969/j.issn.1001-3695.2018.06.023

## Evaluation method for manifold dimensionality reduction effect based on trustworthiness and continuity

Liu Lina<sup>1,2</sup>, Ma Shiwei<sup>1†</sup>, Rui Ling<sup>1</sup>

(1. School of Mechatronic Engineering & Automation, Shanghai University, Shanghai 210072, China; 2. School of Electrical & Electronic Engineering, Shandong University of Technology, Zibo Shandong 255049, China)

**Abstract:** In order to solve the problems of subjective error and lacking necessary quantify calculation for guidance by using subjective analysis method to evaluate the nonlinear data dimensionality reduction methods, this paper proposed an evaluative method based on two quantitative indicators to analysis the dimensionality reduction results. They were trustworthiness and continuity, the former aimed to quantify the trustworthiness of visual effect diagram for the manifold dimensionality reduction results, and the latter mainly analysed the original neighborhood preserving property. It classified and compared the existing nonlinear dimensionality reduction methods based on manifold learning. Meanwhile, based on trustworthiness and continuity, it implemented comparative experiments and analysis for some classical artificial datasets, such as Swissroll, Swisshole, Twopeaks, Helix and Puncturedsphere. The experimental results verify the efficiency of the proposed method.

**Key words:** data dimensionality; quantitative evaluation; trustworthiness; continuity

## 0 引言

大数据的主要特点是高维度、非线性和结构化, 如何从中提取描述事物本质特征的信息是大数据技术的核心问题<sup>[1,2]</sup>。通常, 对高维数据进行降维处理是解决此问题的关键技术之一。传统的数据降维方法主要通过线性变换来实现, 如主成分分析(principal components analysis, PCA)、多维尺度分析(multidimensional scaling, MDS)、因子分析等<sup>[3]</sup>。由于在实际应用中高维数据大多具有非线性特性, 线性降维技术受到了限制。所以, 许多学者提出了基于流形学习的非线性降维方法, 经典的流形学习算法包括等距特征映射(isometric feature map, ISOMAP)<sup>[4]</sup>、局部线性嵌入(local linear embedding, LLE)<sup>[5]</sup>、局部切空间排列(local tangent space alignment, LTSA)<sup>[6]</sup>等。近年来, 不少学者提出了新的流形学习算法和经典算法的改进方案: 文献[7]提出了一种基于自然邻居流形排序图像检索方

法; 文献[8]则提出了一种基于流形学习的高光谱图像降维方法, 取得了较好的效果; 文献[9,10]分别提出了基于核融合和边界检测的多流形学习算法; 文献[11]则提出了一种快速的流形学习算法; 而文献[12]提出了融合 LLE 和 ISOMAP 的非线性降维方法。可见, 基于流形学习的非线性降维算法仍是目前的研究热点, 不少学者对流形降维方法进行了综述和对比研究<sup>[3,13,14]</sup>, 但对流形降维效果的评价研究相对较少, 而降维效果的优劣直接影响到实际应用的效果。目前, 降维效果的评价方法主要有主观分析法和数值比较法<sup>[3,15]</sup>两种。数值比较法常用 1-NN 分类器的泛化误差和高维数据的重构误差进行对比研究。文献[3]指出, 当重构所得流形存在一定的非线性弯曲时, 其重构误差往往较大, 但数据的局部特性却得到了很好的保持。此外, 多数真实数据集的潜在流形是未知的, 导致重构误差无法计算。因此, 利用可视化效果图的主观分析法得到了广泛应用。但该方法主观性强, 缺乏必要的量化计算, 如可视化关系的可信赖性度量问题。基于此, 本文提出利用可信赖

收稿日期: 2017-02-15; 修回日期: 2017-03-24      基金项目: 国家自然科学基金资助项目(61671285, 61601266); 山东省自然科学基金资助项目(ZR2016FP04)

作者简介: 刘丽娜(1981-), 女, 山东邹平人, 讲师, 博士研究生, 主要研究方向为模式识别与信息处理自动化、图像处理; 马世伟(1965-), 男(通信作者), 教授, 博士, 主要研究方向为信号处理、模式识别与智能系统(masw@shu.edu.cn); 芮玲(1991-), 女, 硕士, 主要研究方向为模式识别、图像处理。

性和连续性两个指标对可视化关系的可信赖性和邻域的保持性进行分析,并对基于流形学习的非线性数据降维方法进行了对比研究。

## 1 降维方法的描述

### 1.1 降维方法的分类

根据目标函数的性质,可将现有的降维方法分为基于凸技术的方法和基于非凸技术的方法<sup>[3]</sup>。其中,基于凸技术的目标函数是凸的,其优化过程不包括局部最优,而基于非凸技术的目标函数是非凸的,其优化过程包含局部最优。基于凸技术的目标函数通常为广义 Rayleigh 商形式,可通过求解其广义特征值特征向量进行优化,根据特征分解矩阵的不同可将该技术分为全谱技术和稀疏谱技术两大类。降维方法的进一步分类如图 1 所示。

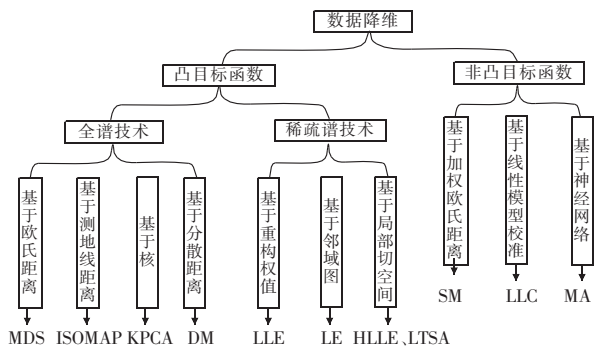


图 1 降维方法的分类示意图

### 1.2 典型的降维方法

令  $X = [x_1, \dots, x_n]$ ,  $x_i \in \mathbb{R}^n$  表示给定的高维空间观测数据集,  $Y = [y_1, \dots, y_n]$ ,  $y_i \in \mathbb{R}^d$  表示待求的低维嵌入空间数据集, 其中  $d \leq n$ 。针对上述分类依据,对数据降维方法进行简要介绍。

#### 1.2.1 基于全谱技术的方法

该类方法通过对一个全矩阵进行特征分解,求取数据点或数据对之间的协方差进行相似度量实现降维,主要包括基于欧氏距离的 PCA 和 MDS、基于测地线距离的等距映射 ISOMAP、基于核的 PCA(kernel PCA, KPCA) 和基于分散距离的扩散映射(diffusion map, DM)等方法。其中,PCA、MDS、KPCA 为经典算法,在此仅介绍 ISOMAP 和 DM。

1) 等距映射算法(ISOMAP) ISOMAP 是建立在 MDS 基础上的典型流形学习方法<sup>[4]</sup>,使用测地线距离代替欧氏距离度量数据点之间的相似度,测地线距离越小则相似度越大,反之则相似度越小,算法的步骤如下所示。该方法虽具有良好的局部保持能力,但不能解决流形上有孔洞的问题,且对短环路敏感。

##### 算法 1 ISOMAP 算法

输入:高维观测空间数据集  $X$ ;邻域选择参数  $k$  或  $\varepsilon$ 。

输出:低维嵌入空间数据集  $Y$ 。

a) 邻域选择。使用 KNN 或  $\varepsilon$ -ball 邻域选择方法确定每个数据点  $x_i$  的邻域。

b) 构造邻域图  $G$ 。每个数据点  $x_i$  与其  $k$  邻域内的点  $x_j$  ( $j = 1, 2, \dots, k$ ) 相连接。

c) 计算最短路径。计算任意两点之间的最短路径  $d_G(x_i, x_j)$ , 组成测地线距离矩阵  $D_G$ 。其中,

$$d_G(x_i, x_j) = \min \{d_G(x_i, x_j), d_G(x_i, x_l) + d_G(x_l, x_j)\}$$

d) 计算低维嵌入  $Y$ 。 $D_G$  作为相似度量矩阵,使用 MDS 计算低维欧氏空间上的嵌入。

2) 扩散映射算法(DM) DM 的主要思想源自动态系统<sup>[16]</sup>,首先定义数据邻域图上的马尔可夫路径,通过一定时间

的随机游走得到数据点的距离测度,该距离称为扩散距离,在降维过程中两两扩散距离得以保持。由于扩散距离是基于整体路径规划的,与 ISOMAP 中的测地距离相比,对短环路具有更好的鲁棒性。算法的具体步骤如下:

a) 构造数据点的邻接图。图中各边的权值  $\omega_{ij}$  可通过高斯核函数求得,即

$$\omega_{ij} = e^{-\frac{\|x_i - x_j\|^2}{2\sigma^2}} \quad (1)$$

其中: $\sigma$  为高斯函数的宽度参数。

b) 计算扩散矩阵。将权值矩阵  $W$  按照行和为 1 进行归一化,可得马尔可夫矩阵  $P^{(1)}$ ,表示数据点之间的转移概率,其中

$$p_{ij}^{(1)} = \frac{\omega_{ij}}{\sum_k \omega_{ik}} \quad (2)$$

进而,可得  $t$  步前向转移矩阵  $P^{(t)} = (P^{(1)})^t$ ,则扩散矩阵可定义为

$$D^{(t)}(x_i, x_j) = \sqrt{\frac{(p_{ik}^{(t)} - p_{jk}^{(t)})^2}{\sum_k \psi(x_k)^{(0)}}} \quad (3)$$

其中: $\psi(x_k)^{(0)} = \frac{m_i}{\sum_j m_j}$ ,  $m_i = \sum_j p_{ij}$ ,表示密度图的权重,密度越高,权重越大。由式(3)可以看出,数据点之间的前向转移概率越大,其扩散距离越小。

c) 计算  $P^{(t)}$  矩阵的前  $d$  个主要特征值和特征向量,可通过求解式(4)得到。

$$P^{(t)}u = \lambda u \quad (4)$$

由于所得的图是全连接的,最大特征值  $\lambda_1$  为平凡解,所以舍弃  $\lambda_1$  及其特征向量  $u_1$ 。

d) 计算  $d$  维低维嵌入  $Y$ 。

$$Y = \{\lambda_2 u_2, \lambda_3 u_3, \dots, \lambda_{d+1} u_{d+1}\} \quad (5)$$

#### 1.2.2 基于稀疏谱技术的方法

该类方法对一个稀疏矩阵进行特征分解,强调数据局部特征的保持,主要包括基于重构权值的 LLE<sup>[5]</sup>、基于邻域图的 LE (Laplacian eigenmaps, LE)<sup>[17]</sup>、基于局部切空间的海森 LLE (Hessian LLE, HLLE)<sup>[18]</sup> 和 LTSA<sup>[6]</sup> 等方法。其中,HLLE 是对 LLE 算法的改进,在此着重介绍 LLE 和 LTSA。

1) 局部线性嵌入算法(LLE) LLE 是一种典型的局部特性保持算法,旨在保持邻域中数据点之间的位置关系,它首先确定高维观测数据空间中数据点  $x_i$  的邻域,由于在局部范围内邻域可视做欧氏空间,则  $x_i$  可由邻域内其他数据点线性表示,假设在低维嵌入空间中该线性关系依然成立,则据此可得  $x_i$  在低维空间的嵌入坐标。算法的具体步骤如下:

a) 确定邻域。用 KNN 或  $\varepsilon$ -ball 邻域选择方法确定每个数据点  $x_i$  的邻域  $N_i = \{x_j\}, j \in k$ 。

b) 计算重构权值矩阵。数据点  $x_i$  与邻域点  $N_i$  之间的重构权值  $\omega_{ji}$  可通过求取重构误差的极小值获得。

$$W^* = \arg \min_{\omega} \varepsilon(W) = \arg \min \sum_i \|x_i - \sum_{j \in k} \omega_{ji} x_j\|^2 \quad (6)$$

s. t.  $\sum_j \omega_{ji} = 1$

c) 计算低维嵌入。重构权值矩阵保持不变,数据点  $x_i$  在低维空间的嵌入  $y_i$  可通过求解低维空间中重构误差函数的极小值获得。

$$\phi(Y) = \sum_i \|y_i - \sum_{j \in k} \omega_{ji} y_j\|^2 \quad (7)$$

与 ISOMAP 相比,LLE 计算简单,局部特征得到了良好的保持,但由于其并未约束距离较远的数据点之间的关系,所以

难以保持数据点的全局特征。

2) 局部切空间对齐算法(LTSA) LTSA 算法的基本思想是将流形上各个数据点的切空间进行对齐,从而得到低维全局结构。同其他流形学习算法类似,通过 KNN 或  $\varepsilon$ -ball 方法确定每个数据点  $x_i$  的邻域  $N_i$ 。之后,对邻域  $N_i$  的中心化矩阵  $X_i - \bar{x}_i \mathbf{1}_k^T$  作奇异值分解,前  $d$  个奇异值对应的左奇异向量即为局部邻域的投影坐标。最后,将局部坐标对齐获得全局坐标,具体为:计算排列矩阵  $B = \sum_{i=1}^N S_i W_i W_i^T S_i^T$  的  $d+1$  个最小的特征值对应的特征向量  $u_2, u_3, \dots, u_{d+1}$ , 则全局坐标  $Y = [u_2, \dots, u_{d+1}]^T$ 。该方法对噪声敏感,且要求邻域之间有足够的交叠,当数据稀疏且分布不均匀时,邻域间缺乏足够的交叠,降维效果会受到影响。

### 1.2.3 基于非凸技术的方法

前面介绍的基于全谱技术和稀疏谱技术的方法均为基于凸技术的方法,下面将介绍基于非凸技术的方法。该类方法的目标函数是非凸的,主要包括基于加权欧氏距离的 Sammon 映射(Sammon mapping, SM)<sup>[19]</sup>、基于线性模型校准的局部线性协调(locally linear coordination, LLC)<sup>[20]</sup>和基于神经网络的多层自编码(multilayer autoencoder, MA)<sup>[21]</sup>等方法。

1) Sammon 映射算法(SM) MDS 在降维过程中强调保持较大的两两距离而忽略了较小的两两距离,恰恰是较小的两两距离反映了数据的几何结构,SM 是对 MDS 的改进算法之一,取得了较好的效果<sup>[19]</sup>。该算法使用高维观测空间中数据点间两两距离  $d_{ij}$  的倒数对数据点两两距离进行加权组合构成新的代价函数。由于权值近乎相等,与 MDS 相比,该方法更好地保持了数据点的局部特征,相应的代价函数为

$$\phi(Y) = \frac{1}{\sum_{ij} d_{ij}} \sum_{i \neq j} \frac{(d_{ij} - \|y_i - y_j\|)^2}{d_{ij}} \quad (8)$$

该目标函数可使用拟牛顿法求解。

2) 局部线性协调算法(LLC) LLC 算法包括两个步骤:a) 利用期望最大化算法,即 EM 算法计算数据点的局部线性模型;b) 使用一种改进的 LLE 方法将局部线性模型进行全局对齐获得低维嵌入数据。算法的具体过程可参考文献[20]。

3) 基于多层神经网络的自编码算法(MA) 多层自编码器为一包含多个隐含层的前馈神经网络,虽然有时网络为非对称结构,但其顶层和底层的权值是共享的。其隐含层的输出数据即为低维嵌入数据  $Y$ , 包含  $d$  个节点;输入数据为高维观测空间的数据集  $X$ ;期望的输出为输入数据  $X$ , 包含的节点数目等于数据点  $x_i$  的维数,包含一个隐含层的自编码器如图 2 所示。

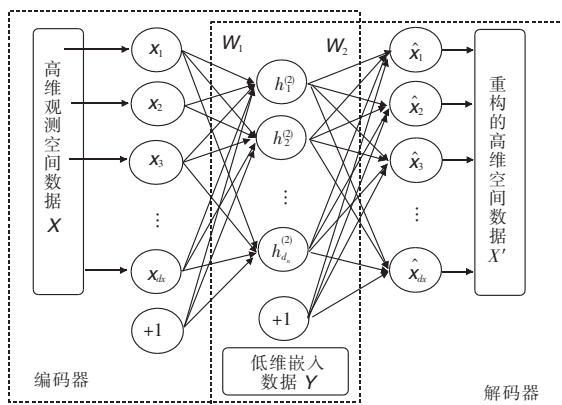


图2 自编码器示意图

多层自编码器包含一个编码器和一个解码器。编码器将高维输入  $X$  转换为低维嵌入  $Y$ , 解码器则将低维嵌入  $Y$  转换为重构的高维输入  $X'$ 。因此,多层自编码器的学习目标是使  $X$  与  $X'$  之间的误差尽可能小,学习一个关于  $X$  和  $Y$  的非线性映射。由于自编码神经网络的节点数目众多,误差反向传播算法容易陷入局部极小,且收敛速度很慢,采用深度学习技术可以很好地解决此问题<sup>[2,21]</sup>。

## 2 降维方法的比较

为了便于对各种方法进行对比,依据相关理论分析,本文从预设参数、计算复杂度、空间复杂度和主要特点四个方面对上述方法进行了总结,如表 1 所示。

表1 基于流形学习的非线性降维方法对比

降维方法	参数	计算复杂度	存储空间	主要特点
PCA	无	$O(D^3)$	$O(D^2)$	理论简单,计算方便,具有最优非线性误差,难以处理非线性数据
MDS	$k$	$O(n^3)$	$O(n^2)$	保留数据的全局性质,能较好地保持数据间的差异性,难以处理高维非线性数据,缺乏嵌入维数的评价标准
ISOMAP	$k$	$O(n^3)$	$O(n^2)$	保留数据的全局性质,使用测地距离代替欧氏距离,不能解决孔洞问题,且对短环路敏感
KPCA	核函数	$O(n^3)$	$O(n^2)$	保留全局性质,可以处理非线性数据,算法性能依赖于核函数的选择
DM	$\sigma, t$	$O(n^3)$	$O(n^2)$	保留全局性质,对短环路问题具有较好的鲁棒性
LLE	$k$	$O(pn^2)$	$O(pn^2)$	局部算法,计算量小,具有平移、旋转不变性,对噪声较敏感
LE	$k, \sigma$	$O(pn^2)$	$O(pn^2)$	与 LLE 类似,保持局部特征,可用于半监督学习,存在与 LLE 类似的缺点
HLLE	$k$	$O(pn^2)$	$O(pn^2)$	改进的 LLE 算法,旨在最小化高维数据的曲率,使用海森流形代替拉普拉斯流形,计算速度慢
LTSA	$k$	$O(pn^2)$	$O(pn^2)$	利用局部切空间来反映流形的局部几何结构,要求邻域间有足够的交叠,否则会影响降维效果
SM	无	$O(in^2)$	$O(n^2)$	对 MDS 算法的改进,旨在保持高维数据点的两两距离,具有较好的局部保持性能
LLC	$m, k$	$O(imd^3)$	$O(nmd)$	通过局部约束线性编码实现降维,其缺点是因子分析的拟合易受到局部极大值的影响
MA	网络大小	$O(in\omega)$	$O(\omega)$	旨在保持数据的全局性质,采用多层神经网络结构,利用深度学习进行训练,但网络大小的选择是难点

## 3 降维效果的评价

### 3.1 邻域保持和可视化关系的可信赖性

邻域或邻近关系的保持性是流形学习的数据降维方法的关键属性,目前大多采用启发式算法,根据可视化关系图对邻域保持性作出主观评价。但主观评价往往存在不足,即可视化关系的可信赖性问题。因此,有必要对降维方法的邻域保持问题进行衡量,并对可视化关系图的可信度进行量化评价。可通过两个指标来进行衡量:一是可信赖性,用于衡量可视化关系的可信度;二是连续性,用于衡量原邻域的保持性。

根据拓扑概念,邻域的定义是任意小的,对于离散数据可限制为有限的邻域。当  $k$  较小时,数据向量的  $k$  邻域即为包含  $k$  个最近邻的数据向量集。数据降维,其实质是将高维观测空间的数据点向低维嵌入空间进行投影的过程。在投影过程中,可能会出现两类误差,新的数据点可能进入到投影空间中的  $k$



邻域内,或者原空间中 $k$ 邻域内有些数据点可能被投影到邻域外。第二类误差可能会导致映射的不连续性。由于非连续性,并不是所有近邻的数据点在投影空间中是可视的。事实上,第一类误差更为严重,因为它降低了投影空间中可视图形近邻或邻域关系的可信性。有些数据点看起来接近彼此,但实际上是不具备相似性的。

原则上,上述两类误差由进入或离开投影空间中邻域的平均数据点数来计算。在此,将采用更有效的方法,即可视化关系的可信性通过测量新数据点进入的邻域与原邻域的距离来实现,该距离可通过次序来测量。而邻域的保持性也可采取类似方法进行衡量。

### 3.2 可视化关系的可信性计算

如果某一数据点 $k$ 邻域内所有点在降维图形中也是近邻的,则认为其可视化关系图是可信的。令 $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^n (i=1,2,\dots,N)$ 表示原始数据集; $C_k(\mathbf{x}_i)$ 表示原数据空间中数据 $\mathbf{x}_i$ 的 $k$ 个最近邻数据集; $\hat{C}_k(\mathbf{x}_i)$ 表示投影空间中数据 $\mathbf{x}_i$ 的 $k$ 个最近邻数据集; $U_k(\mathbf{x}_i)$ 为所有满足条件 $\mathbf{x}_j \in \hat{C}_k(\mathbf{x}_i) \wedge \mathbf{x}_j \notin C_k(\mathbf{x}_i)$ 的 $\mathbf{x}_j$ 集合。令 $r(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ ,其中 $i \neq j$ ,表示 $\mathbf{x}_j$ 与 $\mathbf{x}_i$ 在原数据空间中根据欧氏距离所确定的次序,则可信性可通过式(9)来计算:

$$M_1(k) = 1 - \frac{2}{Nk(2N-3k-1)} \sum_{i=1}^N \sum_{j \in U_k(\mathbf{x}_i)} (r(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) - k) \quad (9)$$

其中:求和项的系数是为了保证可信度的值在 $0 \sim 1$ 。需要说明的是,关于 $r(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ 的计算,需先确定集合 $U_k(\mathbf{x}_i)$ 中的元素 $\mathbf{x}_j$ ,然后计算 $\mathbf{x}_j$ 与 $\mathbf{x}_i$ 的欧氏距离在原数据空间中按最近邻距离规则所确定的次序,即为 $r(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ 。

### 3.3 原邻域的保持性计算

通过前面分析可知,原邻域的保持性,即连续性,可由第二类误差进行衡量。由不连续引起的误差可以通过类似的方法来计算,令 $V_k(\mathbf{x}_i)$ 表示所有满足条件 $\mathbf{x}_j \notin \hat{C}_k(\mathbf{x}_i) \wedge \mathbf{x}_j \in C_k(\mathbf{x}_i)$ 的 $\mathbf{x}_j$ 集合; $\hat{r}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ ,其中 $i \neq j$ ,为 $\mathbf{x}_j$ 与 $\mathbf{x}_i$ 在投影空间中根据欧氏距离所确定的次序。与 $M_1(k)$ 类似,只需要用 $V_k(\mathbf{x}_i)$ 代替 $U_k(\mathbf{x}_i)$ , $\hat{r}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ 代替 $r(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ 即可,具体如下:

$$M_2(k) = 1 - \frac{2}{Nk(2N-3k-1)} \sum_{i=1}^N \sum_{j \in V_k(\mathbf{x}_i)} (\hat{r}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) - k) \quad (10)$$

其中:求和项的系数是为了保证连续性的值在 $0 \sim 1$ , $\hat{r}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ 的计算与 $r(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ 类似,需先确定集合 $V_k(\mathbf{x}_i)$ 中的元素 $\mathbf{x}_j$ ,然后计算 $\mathbf{x}_j$ 与 $\mathbf{x}_i$ 的欧氏距离在投影空间中按最近邻距离规则所确定的次序,即为 $\hat{r}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ 。

## 4 仿真实验与对比分析

为验证本文提出的可信性和连续性两个量化评价指标,对降维效果评价的可靠性,本文在经典数据集瑞士卷(Swissroll)、瑞士洞(Swiss-hole)、双峰(Twopeaks)、螺旋(Helix)和穿孔球体(Punctured sphere)上进行实验,分别为几何流形(平面卷曲)、非凸流形、几何流形(平面对角)、非一致采样流形和稀疏非一致采样流形数据集。实验中用到五个数据集如图3所示,每个数据集包含2 000个样本点。

### 4.1 参数设置

针对上述五个数据集,采用表1中的方法进行降维实验,同时利用可信性和连续性对其降维效果进行评价。由表1可知,基于流形学习的非线性降维方法需要设置的参数包括

$k$ 、 $\sigma$ 、核函数和 $m$ 等,参数的具体设置如下:PCA、MDS、SM无参数设置;ISOMAP, $k=12$ ;KPCA,线性核函数;DM, $\sigma=1.0$ , $t=40$ ;LLE, $k=5$ ;LE, $k=7$ , $\sigma=1.0$ ;HLLC、LTSA, $k=12$ ;LLC, $m=20$ , $k=12$ ;MA,4个隐含层,其大小依次为9、7、3、2。

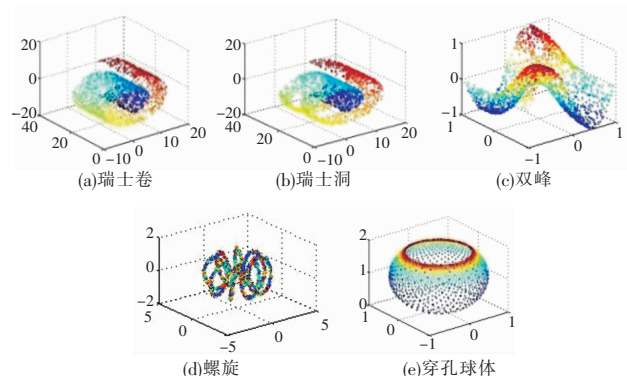


图3 实验中用到的数据集

为分析参数 $k$ 对可信性和连续性两个指标的影响,在Swiss-hole数据集上令 $k=1,2,\dots,10$ ,计算LTSA和LLE的指标,结果如图4所示。由图4可知,随着 $k$ 的增加,两个指标均无明显规律, $k$ 的变化对可信性影响较小,但对连续性的影响较大,当 $k=5$ 时,两者的可信性均达到了最大。为了便于比较,两个指标计算式(9)和(10)中的邻域大小均取 $k=5$ 。

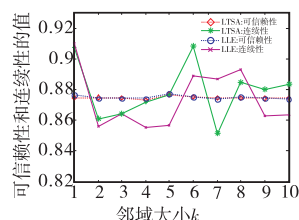


图4 Swiss-hole数据集上LTSA和LLE两种降维方法的指标计算结果( $k$ 变化时)

### 4.2 指标计算结果与分析

Swissroll数据集上的降维效果如图5所示。由图5可以看出,ISOMAP、LLE、HLLC和LTSA的降维效果较好,从色带分布上看,将Swissroll数据集进行展开,保持了数据点的连续性,主观上的降维效果较好。表1所列降维方法在不同数据集上可视化关系的可信性指标计算结果如表2所示,原邻域近邻关系的保持性,即连续性指标的计算结果如表3所示。

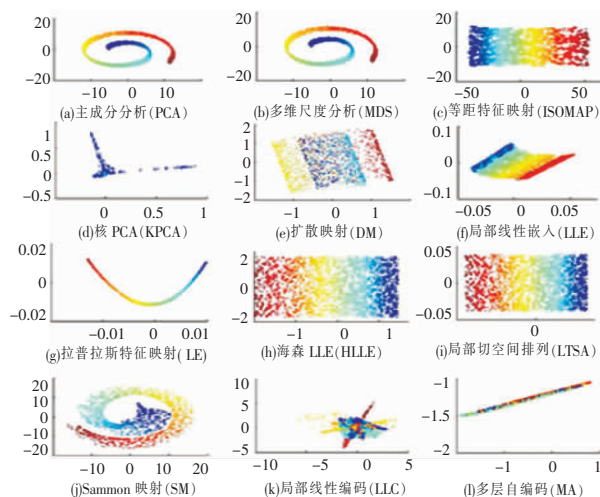


图5 Swissroll数据集的降维效果

表2 不同数据集的可信赖性指标计算结果( $k=5$ )

降维方法	瑞士卷	瑞士洞	双峰	螺旋	穿孔球
PCA	0.893	0.887	0.891	0.830	0.910
MDS	0.847	0.885	0.891	0.830	0.910
ISOMAP	0.898	0.873	0.900	0.901	0.906
KPCA	0.840	0.828	0.915	0.908	0.919
DM	0.817	0.887	0.870	0.834	0.910
LLE	0.897	0.856	0.897	0.859	0.903
LE	0.884	0.888	0.894	0.879	0.934
HLLE	0.891	0.877	0.897	0.878	0.921
LTSA	0.885	0.886	0.896	0.877	0.922
SM	0.849	0.874	0.850	0.837	0.839
LLC	0.919	0.850	0.864	0.933	0.939
MA	0.882	0.866	0.883	0.822	0.909

表3 不同数据集的连续性指标计算结果( $k=5$ )

降维方法	瑞士卷	瑞士洞	双峰	螺旋	穿孔球
PCA	0.881	0.875	0.876	0.876	0.845
MDS	0.875	0.877	0.876	0.877	0.845
ISOMAP	0.874	0.877	0.875	0.904	0.844
KPCA	0.875	0.875	0.876	0.877	0.863
DM	0.877	0.874	0.878	0.879	0.845
LLE	0.874	0.877	0.878	0.876	0.844
LE	0.875	0.878	0.875	0.874	0.845
HLLE	0.874	0.877	0.875	0.877	0.877
LTSA	0.874	0.877	0.876	0.876	0.877
SM	0.875	0.877	0.873	0.878	0.847
LLC	0.875	0.871	0.876	0.879	0.876
MA	0.873	0.875	0.876	0.877	0.844

通过观察表2、3可以得出如下结论:

a)由“瑞士卷”数据集的结果可以看出,基于邻域图或局部保持的方法,如ISOMAP、LLE、HLLE和SM具有良好的邻域保持能力,其可信赖性的值高于MDS、DM、KPCA、LLC等基于其他特征保持的方法。

b)由“双峰”数据集的结果可以看出,KPCA、ISOMAP、LLE、HLLE和LTSA可以有效地处理平面对角几何流形。而对于非凸流形,比如“瑞士洞”数据集,LE、DM可以处理。

c)由“螺旋”数据集的结果可以看出,虽然HLLE和LLE在“瑞士卷”数据集上表现良好,但是如果数据的潜在流形关于欧氏空间是非等距的,则其降维效果较差,可能的原因是其重构误差是基于欧氏距离计算的,如基于欧氏距离的线性降维方法PCA和MDS难以实现降维。而其他基于邻域图或局部保持的方法如ISOMAP、KPCA、LE、LLC、HLLE和LTSA则取得了较好的效果。

d)通过“穿孔球体”数据集的结果可以看出,对于稀疏数据,且数据采样为非一致采样时,LE、HLLE和LTSA可以取得较好的结果。

综上所述,基于流形学习的数据降维方法可以很好地复现原数据在低维空间的潜在流形,比如常用的“瑞士卷”数据集。然而,某些降维方法虽然在“瑞士卷”数据集上可以取得很好的结果,但针对更复杂的数据集,比如非光滑流形(“瑞士洞”),对欧氏空间不具备等距特性的流形(“螺旋”)和具有较高潜在维数的流形等,则不一定能取得较好的降维效果。因此,在实际应用中需要针对数据集的特征选择相应的方法。

## 5 结束语

针对主观分析法分析降维效果存在主观性强,缺乏量化计算指导的问题,本文提出了可信赖性和连续性两个指标对可视化效果图的可信赖性和邻域保持性进行评价,实现了降维效果的量化评价。在五个经典降维数据集上,对常用的基于流形学

习的非线性降维方法的降维效果进行了对比研究,验证了方法的有效性。基于流形学习的非线性数据降维方法,是目前应用较为广泛的非线性降维方法,不同的降维方法具有不同的特点。在实际应用中,应根据真实数据集的特点,如光滑性、欧氏空间是否具有局部等距特性及其潜在维数选择合适的方法进行降维。

## 参考文献:

- [1] Addo T R, Helo P T. Big data applications in operations/supply-chain management: a literature review[J]. *Computers & Industrial Engineering*, 2016, 101(11): 528-543.
- [2] 程学旗, 靳小龙, 王元卓, 等. 大数据系统和分析技术综述[J]. *软件学报*, 2014, 25(9): 1889-1908.
- [3] Laurens V D, Eric P, Jaap V D. Dimensionality reduction: a comparative review[J]. *Journal of Machine Learning Research*, 2009, 10(1): 1-22.
- [4] Balasubramanian M, Schwartz E L. The ISOMAP algorithm and topological stability[J/OL]. *Science*, 2002, 295(5552). (2001-04-23) [2001-11-20]. <https://doi.org/10.1126/Science.295.5552.7a>.
- [5] Roweis S T, Saul L K. Nonlinear dimensionality reduction by locally linear embedding[J]. *Science*, 2000, 290(5500): 2323-2326.
- [6] Zhang Zhenyue, Zha Hongyuan. Principal manifolds and nonlinear dimensionality reduction via local tangent space alignment[J]. *Journal of Scientific Computing*, 2004, 26(1): 313-338.
- [7] 朱庆生, 陈治, 张程. 基于自然邻居流形排序图像检索技术研究[J]. *计算机应用研究*, 2016, 33(4): 1265-1268, 1276.
- [8] Wang Yitan, Huang Shiqi, Wang Hongxia, et al. Dimensionality reduction for hyperspectral image based on manifold learning[M]//Image and Graphics. [S. l.]: Springer International Publishing, 2015: 164-172.
- [9] 刘元, 吴小俊. 基于核融合的多信息流形学习算法[J]. *计算机应用研究*, 2016, 33(3): 673-676.
- [10] 邹鹏, 李凡长, 尹宏伟, 等. 基于边界检测的多流形学习算法[J]. *模式识别与人工智能*, 2016, 29(11): 1037-1047.
- [11] Yu Liang, Shen Furao, Zhao Jinxi, et al. A fast manifold learning algorithm for dimensionality reduction[C]//Proc of the 28th IEEE International Conference on Tools with Artificial Intelligence. Piscataway, NJ: IEEE Press, 2016: 985-988.
- [12] 张少龙, 巩知乐, 廖海斌. 融合LLE和ISOMAP的非线性降维方法[J]. *计算机应用研究*, 2014, 31(1): 277-280.
- [13] Lunga D, Prasad S, Crawford M, et al. Manifold learning based feature extraction for classification of hyperspectral data: a review of advances in manifold learning[J]. *IEEE Signal Processing Magazine*, 2014, 31(1): 55-66.
- [14] Izenman A J. Introduction to manifold learning[J]. *Wiley Interdisciplinary Reviews Computational Statistics*, 2012, 4(5): 439-446.
- [15] Venna J, Kaski S. Visualizing gene interaction graphs with local multidimensional scaling[C]//Proc of European Symposium on Artificial Neural Networks Bruges. Belgium: D-Side Publication, 2006: 557-562.
- [16] Fernández Á, González A M, Díaz J, et al. Diffusion maps for dimensionality reduction and visualization of meteorological data[J]. *Neurocomputing*, 2015, 163(9): 25-37.
- [17] Liu Feng, Zhang Weijie, Gu Suicheng. Local linear Laplacian Eigenmaps: a direct extension of LLE[J]. *Pattern Recognition Letters*, 2016, 75(5): 30-35.
- [18] Zhang Lianbo, Tao Dacheng, Liu Weifeng. Supervised Hessian Eigenmap for dimensionality reduction[C]//Proc of the 16th IEEE International Conference on Communication Technology. Piscataway, NJ: IEEE Press, 2015: 903-907.
- [19] Li Yang. Sammon's nonlinear mapping using geodesic distances[C]//Proc of the 17th International Conference on Pattern Recognition. Piscataway, NJ: IEEE Press, 2004: 303-306.
- [20] Huang Qihong, Wang Haijiang, Xu Qing, et al. Semi-supervised learning with locally linear coordination for face recognition[C]//Proc of the 5th International Conference on Natural Computation. Piscataway, NJ: IEEE Press, 2009: 255-259.
- [21] 毛勇华, 桂小林, 李前, 等. 深度学习应用技术研究[J]. *计算机应用研究*, 2016, 33(11): 3201-3205.