



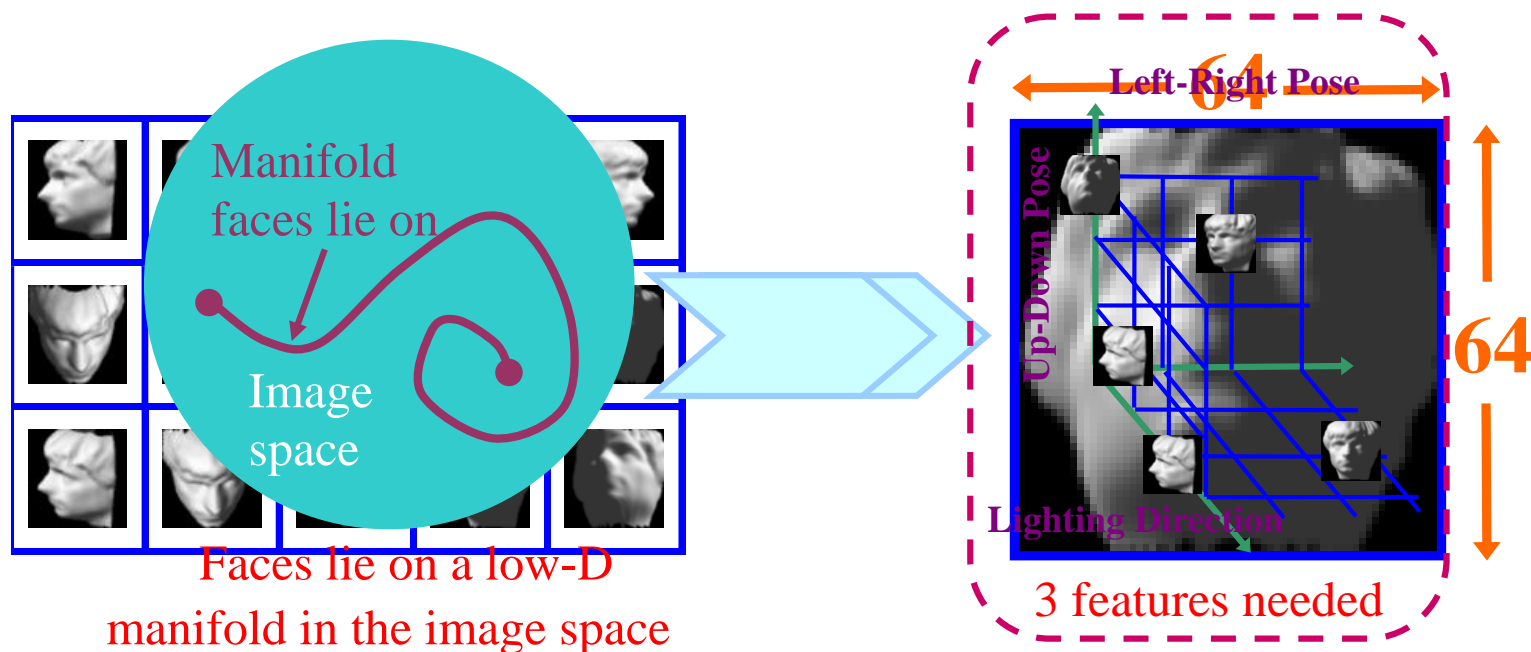
# 大数据挖掘与统计学习

软件工程系  
文化遗产数字化国家地方工程联合中心  
可视化技术研究所  
张海波  
讲师/博士(后)

- 研究背景
- 基本知识介绍
- 经典方法概览
- 总结讨论

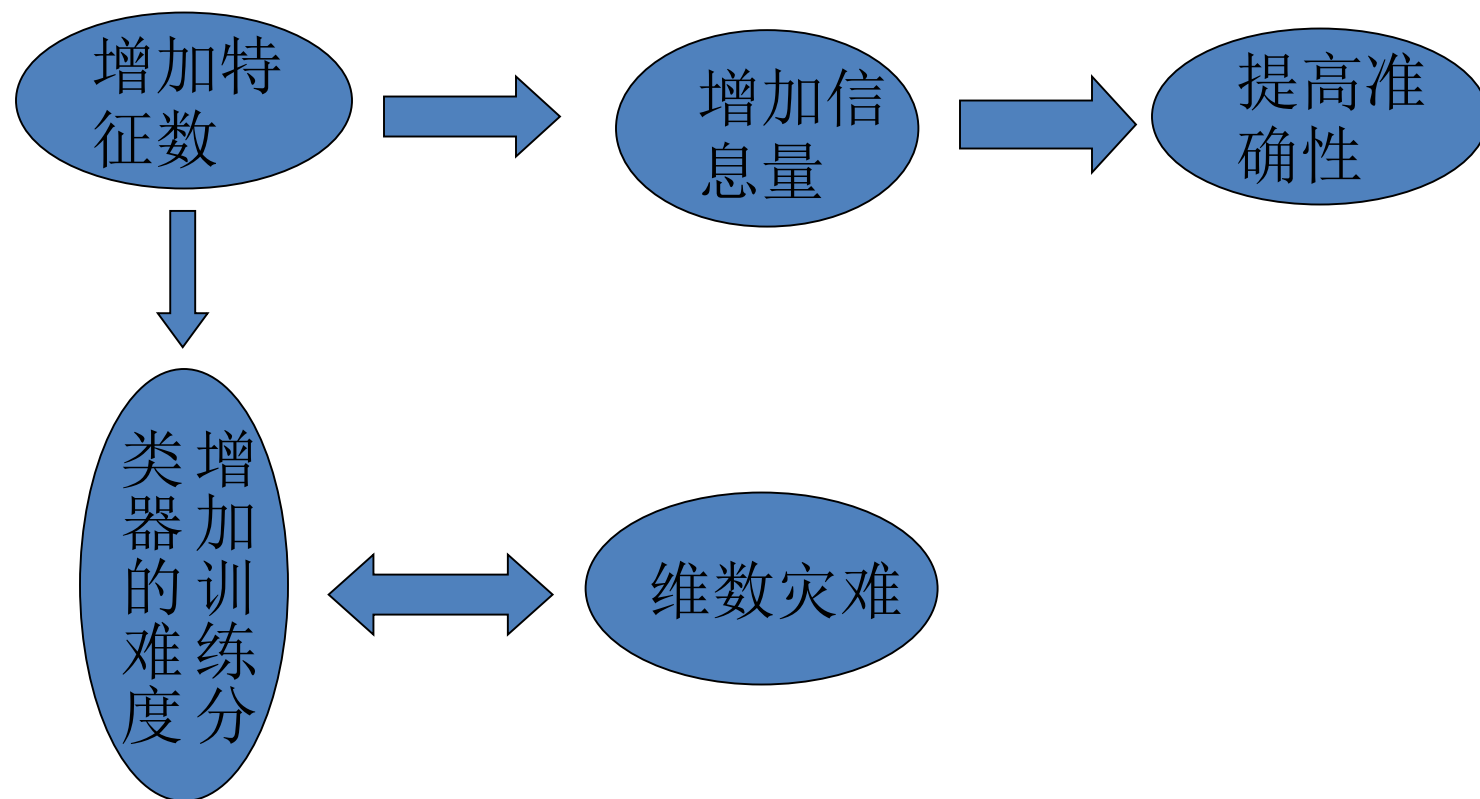
# 从降维问题说起

- 降维的动机
  - 原始观察空间中的样本具有极大的信息冗余
  - 样本的高维数引发分类器设计的“维数灾难”
  - 数据可视化、特征提取、分类与聚类等任务需求



# 从降维问题说起

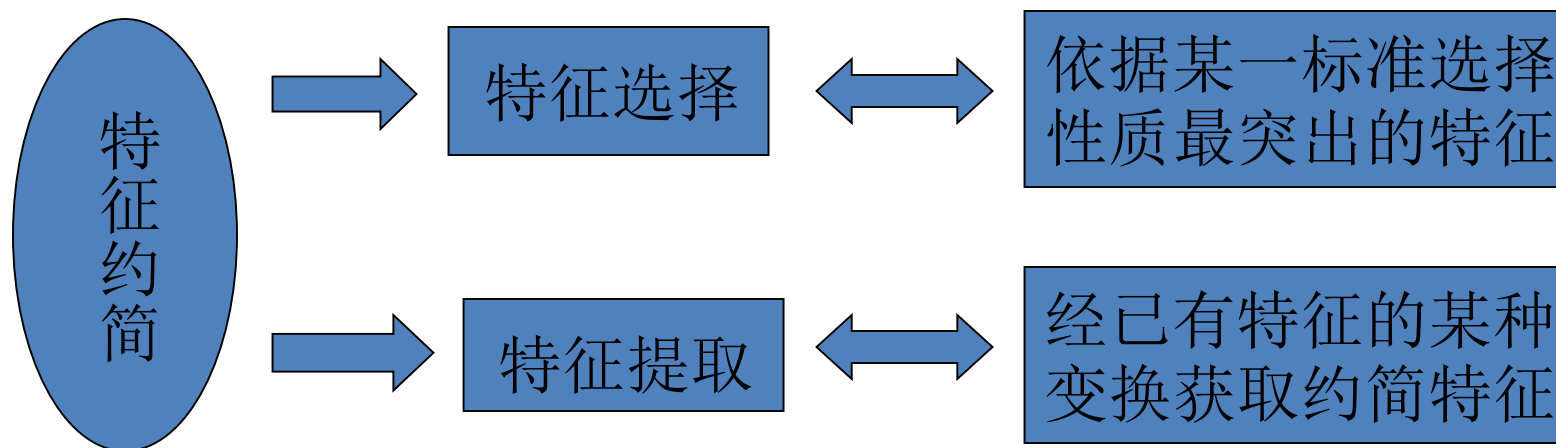
- 降维的动机



解决办法：选取尽可能多的，可能有用的特征，然后根据需要进行特征/维数约简.

# 从降维问题说起

- 降维的动机



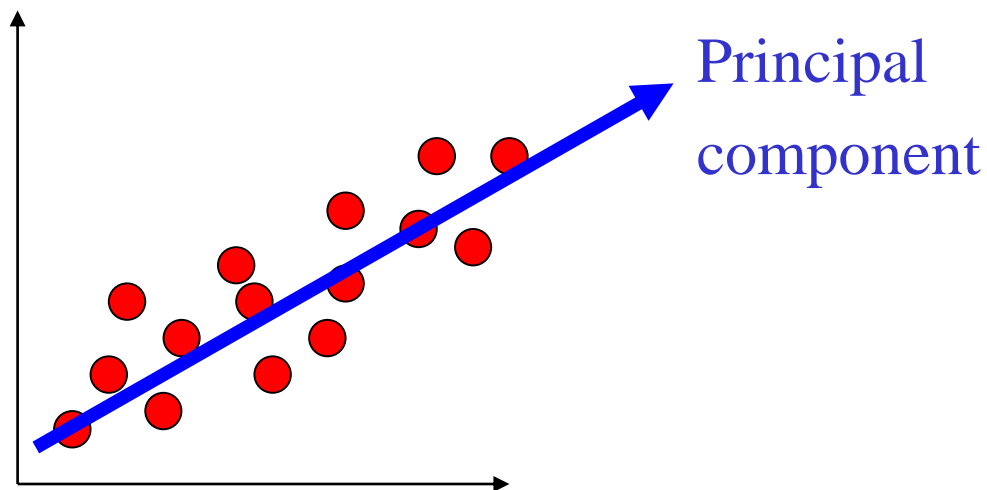
实验数据分析，数据可视化（通常为2维或3维）等也需要维数约简

# 降维方法概述

- 线性降维
  - 通过特征的线性组合来降维
  - 本质上是把数据投影到低维线性子空间
  - 线性方法相对比较简单且容易计算
  - 代表方法
    - 主成分分析(PCA)
    - 线性判别分析(LDA)
    - 多维尺度变换(MDS)

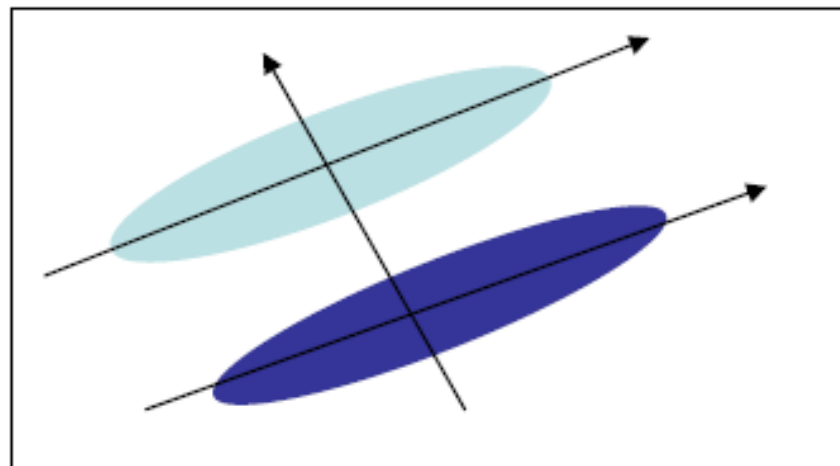
# 线性降维方法

- 主成分分析(PCA) [Jolliffe, 1986]
  - 降维目的：寻找能够保持采样数据方差的最佳投影子空间
  - 求解方法：对样本的散度矩阵进行特征值分解, 所求子空间为经过样本均值, 以最大特征值所对应的特征向量为方向的子空间



# 线性降维方法

- 主成分分析(PCA) [Jolliffe, 1986]
  - PCA对于椭球状分布的样本集有很好的效果, 学习所得的主方向就是椭圆的主轴方向.
  - PCA 是一种非监督的算法, 能找到很好地代表所有样本的方向, 但这个方向对于分类未必是最有利的

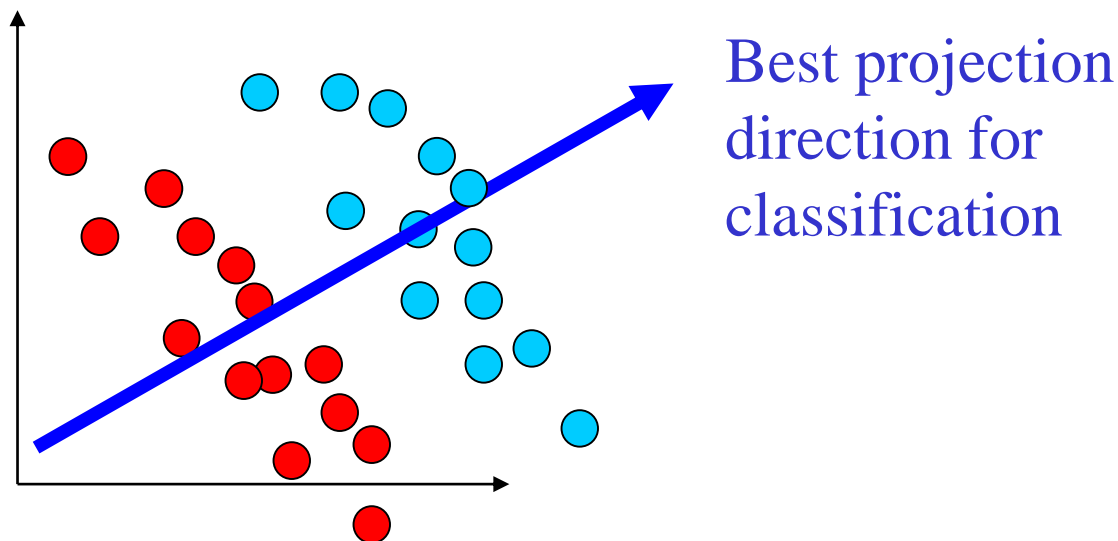




# 线性降维方法

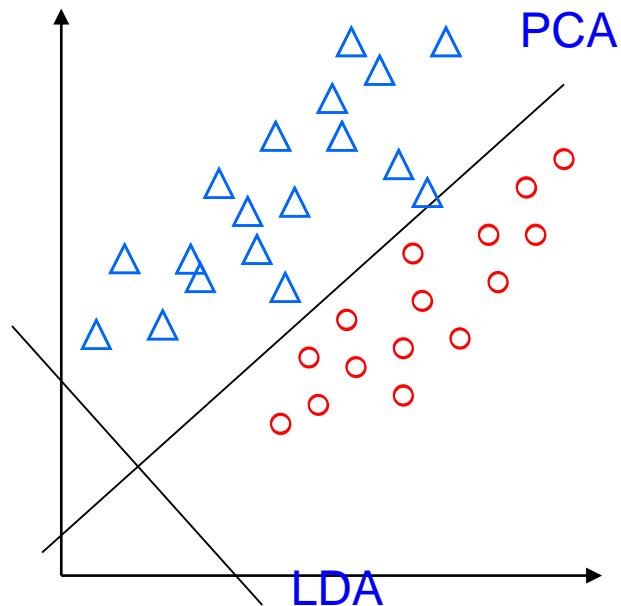
- 线性判别分析(LDA) [Fukunaga, 1991]

- 降维目的：寻找最能把两类样本分开的投影直线，使投影后两类样本的均值之差与投影样本的总类散度的比值最大
- 求解方法：经过推导把原问题转化为关于样本集总类内散度矩阵和总类间散度矩阵的广义特征值问题



# 降维方法概述

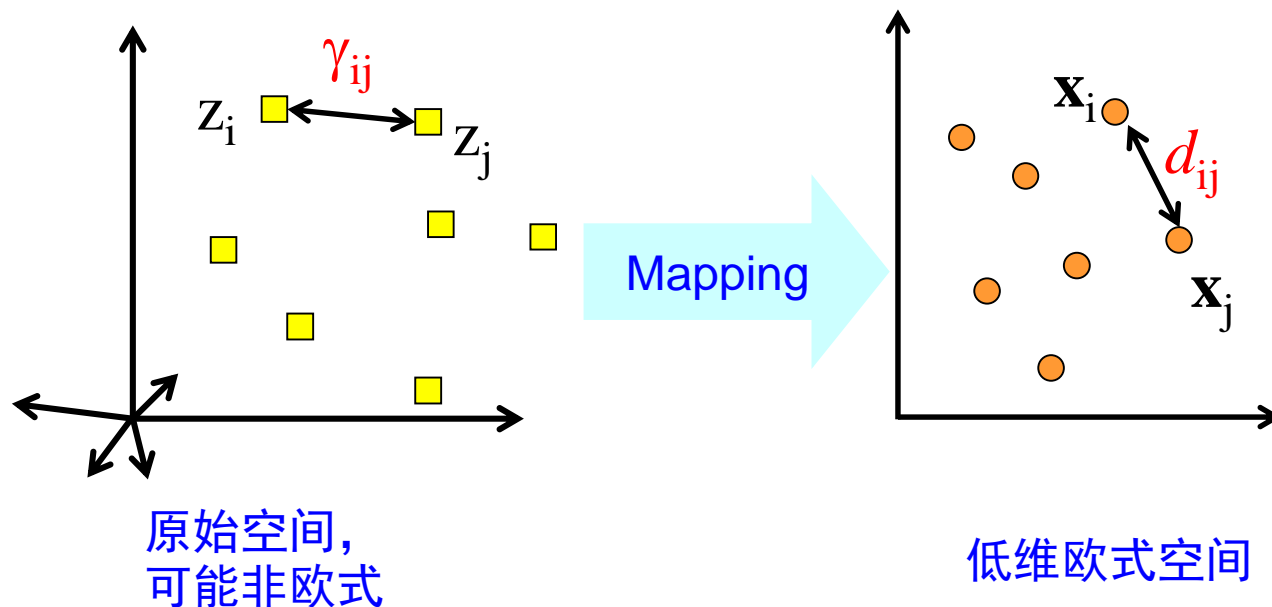
- 线性降维
  - 主成分分析 (PCA) [Jolliffe, 1986]
  - 线性判别分析 (LDA) [Fukunaga, 1991]



# 降维方法概述

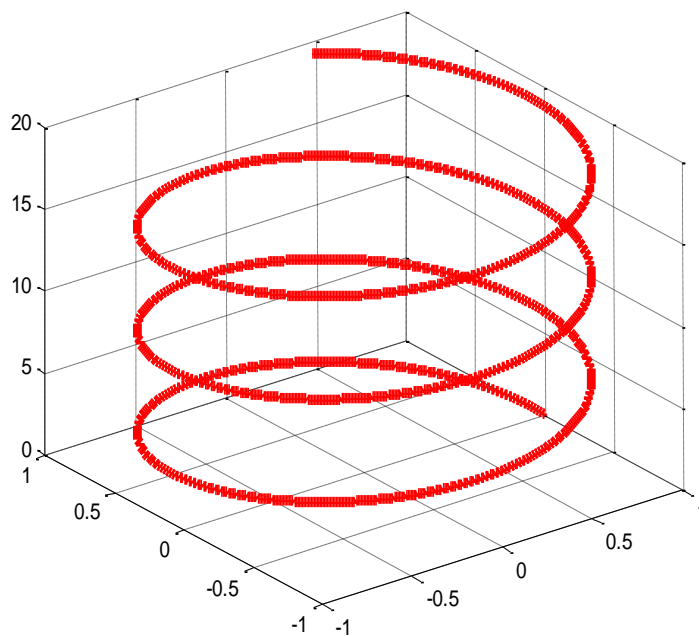
- 线性降维

- 主成分分析 (PCA) [Jolliffe, 1986]
- 线性判别分析 (LDA) [Fukunaga, 1991]
- 多维尺度变换 (MDS) [Cox, 1994]



# 线性降维方法的不足

- 原始数据无法表示为特征的简单线性组合
  - 比如：**PCA**无法表达**Helix**曲线流形



1-D Helix曲线流形

# 线性降维方法的不足

- 真实数据中的有用信息不能由线性特征表示
  - 比如：如何获取并表示多姿态人脸的姿态信息



#1

- 比如：如何获取运动视频序列中某个动作的对应帧



#2

#1 引自J.B. Tenenbaum et al. 2000

#2 引自Jenkins et. al, IROS 2002

# 降维方法概述

- 线性降维
- 传统非线性降维
  - 核主成分分析 (KPCA) [Scholkopf, 1998]
  - 主曲线 (Principal Curves) [Hastie, 1989] [Tibshirani, 1992]
  - 自组织映射 (SOM) [Kohonen, 1995]
  - 产生式拓扑映射 (GTM) [Bishop, 1998]
  - ...

# 降维方法概述

- 基于流形学习的非线性降维
  - 保距特征映射 (**ISOMAP**) [Tenenbaum, 2000]
  - 局部线性嵌入 (**LLE**) [Roweis, 2000]
  - 拉普拉斯特征映射 (**LE, Laplacian Eigenmap**) [Belkin, 2001]
  - Hessian LLE (**HLLE**) [Donoho, 2003]
  - 局部切空间对齐 (**LTSA, Local Tangent Space Alignment**) [Zhang, 2004]
  - 最大方差展开 (**MVU/SDE, Maximum Variance Unfolding**) [Weinberger, 2004]
  - 局部保持映射 (**Locality Preserving Projections**) [He, 2003]
  - ...

# 提纲


- 研究背景
- 基本知识介绍
- 经典方法概览
- 总结讨论



## 理论背景

➤ 海量数据：指数级增长的异构的信息量化符号，股票金融数据、全球气候模式、航天遥感数据！恒星光谱、人类基因分布、受光照影响的多姿态多表情人脸图像序列等。

特点：数据量大，维数高，增长快，非结构化，难以直接描述（直接处理）。

 对于上述非结构化的数据，采取一些有效手段提取这些数据的本质结构，进行快速、准确的描述和分析、处理势在必行（维数约简）。



- 受医学领域的神经生物学启发，Seung 等人在 Science 上发表的《感知的流形方式》文章中提出视觉感知的流形结构假说，他们认为**流形**是感知的基础，视觉记忆是以**稳态流形**（或连续吸引子）存贮的，人类的视觉感知神经系统具有捕获非线性流形结构的能力。相关实验也证明，连续吸引子的确存在于人脑中；而神经生理学家研究发现，在神经元群体中，各个神经元的激活率可以由少量变量组成的函数来描述。
- 表明：神经元群体活动被限定在一个**低维的光滑流形**上，并由其内在的低维结构所控制，因此暗示着流形学习可能是人类认知中一种自然的行为方式(Seung and Lee, 2000)。

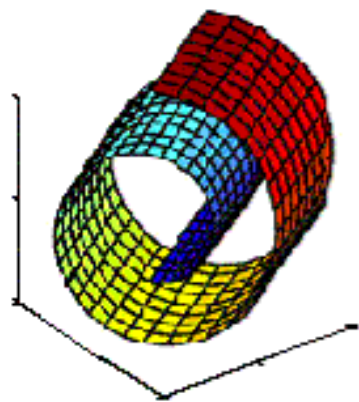


- 同期 Science 上的两篇论文《一种非线性维数约简的全局几何框架》和《局部线性嵌入的非线性维数约简》分别提出了等距特征映射算法 (Isometric Feature Mapping, ISOMAP) (Tenenbaum et al., 2000) 和局部线性嵌入算法 (Locally Linear Embedding, LLE) (Roweis and Saul, 2000)。
- Tenebaum 和 Roweis 等人分别从算法的层面上剖析了高维非线性结构数据中潜在的低维特征变量, 并强调了高维数据的学习实质上可以理解为对嵌入在高维空间的低维流形的学习 (Roweis and Saul, 2000; Tenenbaum et al., 2000)。

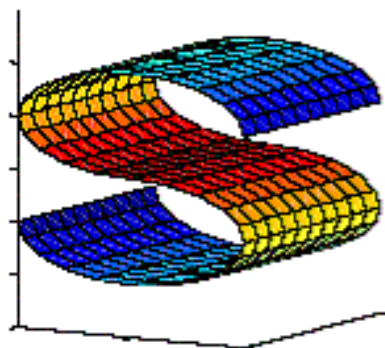
# 流形学习框架

## • 什么是流形？

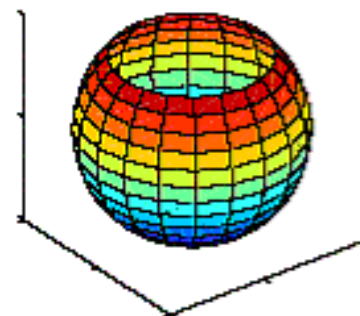
- 流形是线性子空间的一种非线性推广
- 拓扑学角度：局部区域线性，与低维欧式空间拓扑同胚
- 微分几何角度：有重叠chart的光滑过渡
- 黎曼流形就是以光滑的方式在每一点的切空间上指定了欧氏内积的微分流形



Swiss-roll



S-curve



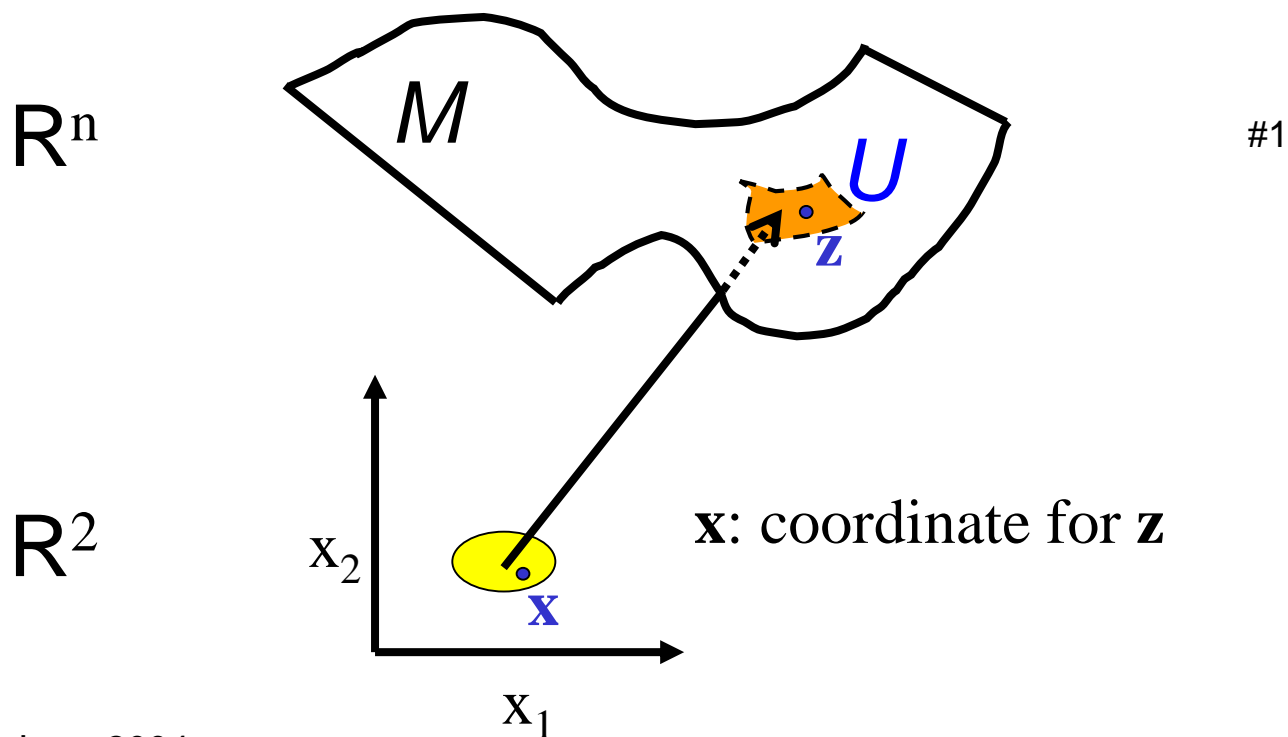
Fishbow

#1

# 流形学习框架

- 流形的数学定义

- 设  $M$  是一个 Hausdorff 拓扑空间, 若对每一点  $p \in M$  都有  $p$  的一个开邻域  $U$  和  $\mathbb{R}^d$  的一个开子集同胚, 则称  $M$  为  $d$  维拓扑流形, 简称为  $d$  维流形.

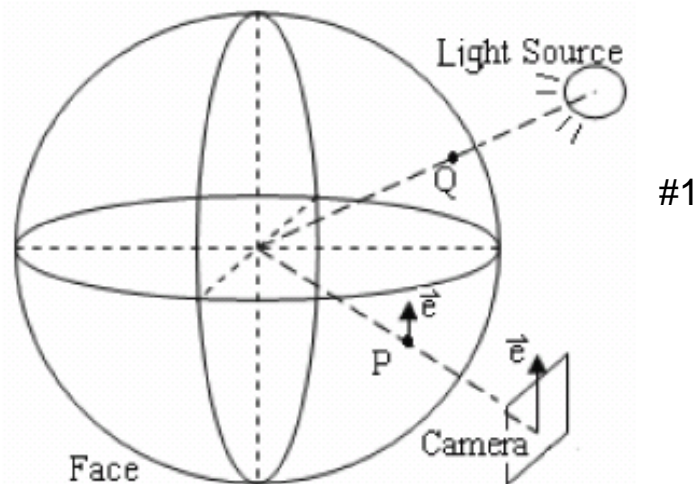


# 流形学习框架

- 一些基本数学概念
  - 拓扑, Hausdorff 空间, 坐标卡, 微分结构
  - 光滑函数, 光滑映射, 切向量, 切空间
  - ...
- 参考文献
  - 陈省身, 陈维桓, 微分几何讲义. 北京大学出版社, 1983
  - M Berger, B Gostiaux. **Differential Geometry: Manifolds, Curves and Surfaces**, GTM115. Springer-Verlag, 1974
  - 陈维桓, 微分流形初步(第二版). 高等教育出版社, 2001

# 流形学习框架

- 流形学习的目的
  - 流形学习是一种非线性的维数约简方法
  - 高维观察数据的变化模式本质是由少数几个隐含变量所决定的
    - 如：人脸采样由光线亮度、人与相机的距离、人的头部姿势、人的面部表情等因素决定
  - 从认知心理学的角度，心理学家认为人的认知过程是基于认知流形和拓扑：



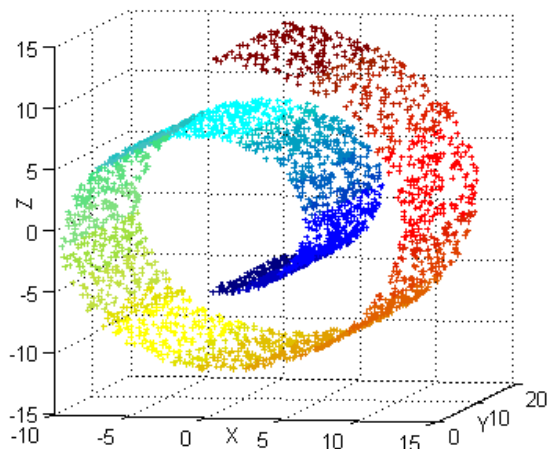
# 流形学习的数学定义

设  $Y \subset R^d$  是一个低维流形,  $f: Y \rightarrow R^D$  是一个光滑嵌入, 其中  $D > d$ . 数据集  $\{y_i\}$  是随机生成的, 且经过  $f$  映射为观察空间的数据  $\{x_i = f(y_i)\}$ . 流形学习就是在给定观察样本集  $\{x_i\}$  的条件下重构  $f$  和  $\{y_i\}$ .

**V. de Silva and J. B. Tenenbaum. Global versus local methods in nonlinear dimensionality reduction . *Neural Information Processing Systems 15 (NIPS'2002)*, pp. 705-712, 2003.**



# 流形学习示例

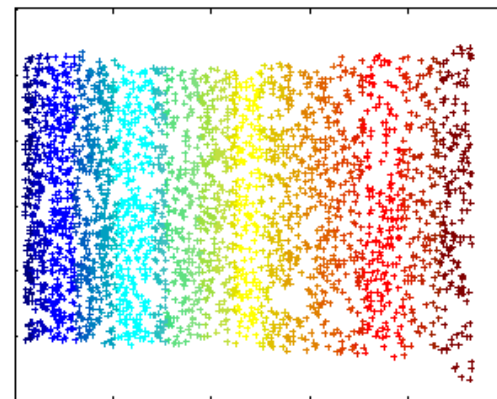


高维数据空间  
data / observation  
space

非线性降维



保持一定几何拓扑  
关系，如测地距离/  
邻域线性重构关系



低维嵌入空间  
embedding /  
coordinate space



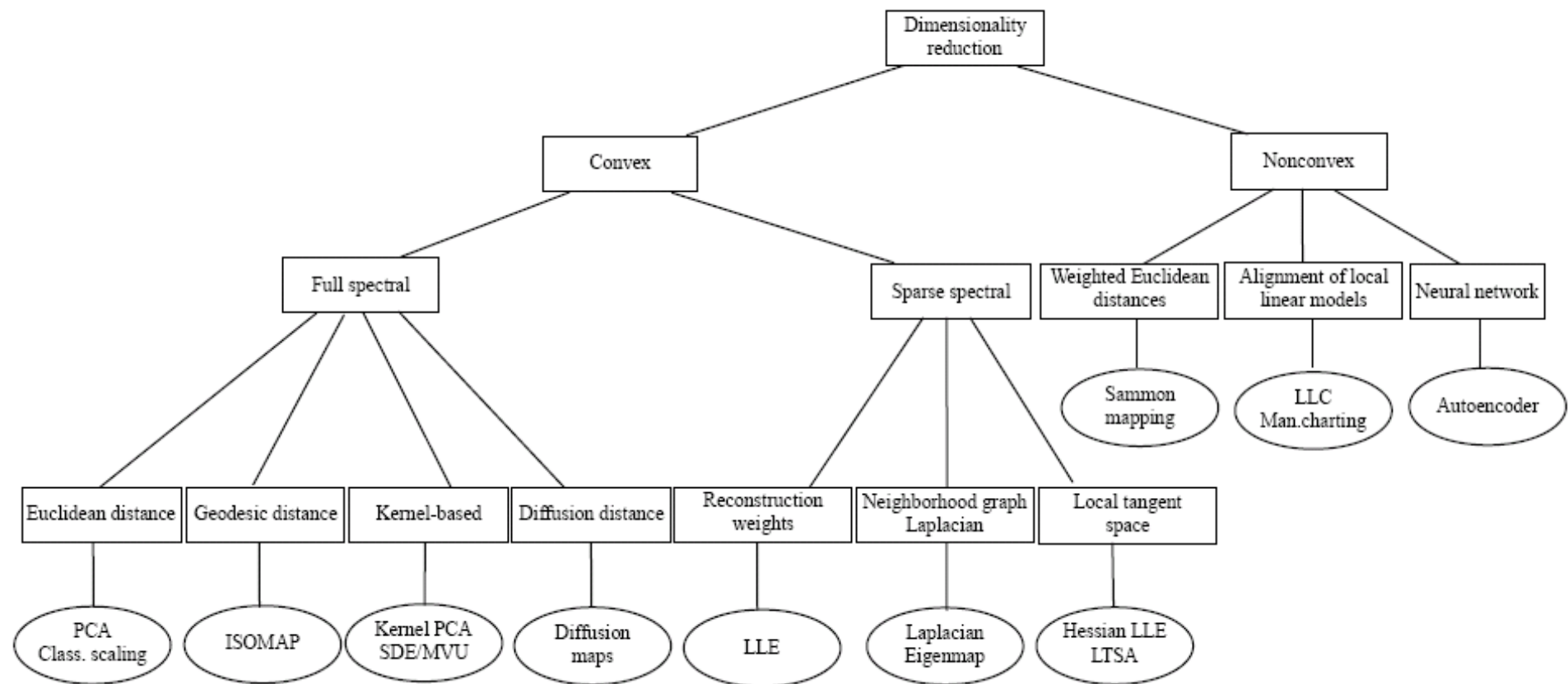
# 提纲

- 研究背景
- 基本知识介绍
- 经典方法概览
- 总结讨论

# 经典流形学习方法一览

方法简称	所保持的几何属性	全局/局部关系	计算复杂度
ISOMAP	点对测地距离	全局	非常高
LLE	局部线性重构关系	局部	低
LE	局部邻域相似度	局部	低
HLLE	局部等距性	局部	高
LTSA	局部坐标表示	全局+局部	低
MVU	局部距离	全局+局部	非常高
Logmap	测地距离与方向	局部	非常低
Diffusion Maps	diffusion距离	全局	中等

# 经典方法分类结构图



# 重点介绍的几个方法

## ➤等距映射(ISOMAP)

J.B. Tenenbaum, V. de Silva, and J. C. Langford. A global geometric framework for nonlinear dimensionality reduction. *Science*, vol. 290, pp. 2319--2323, 2000.

## ➤局部线性嵌入(LLE)

S. T. Roweis and L. K. Saul. Nonlinear dimensionality reduction by locally linear embedding. *Science*, vol. 290, pp. 2323--2326, 2000.

## ➤拉普拉斯特征映射(Laplacian Eigenmap)

M. Belkin, P. Niyogi, Laplacian Eigenmaps for Dimensionality Reduction and Data Representation. *Neural Computation*, Vol. 15, Issue 6, pp. 1373 –1396, 2003 .

# 重点介绍的几个方法

## ➤等距映射(ISOMAP)

J.B. Tenenbaum, V. de Silva, and J. C. Langford. A global geometric framework for nonlinear dimensionality reduction. *Science*, vol. 290, pp. 2319--2323, 2000.

## ➤局部线性嵌入(LLE)

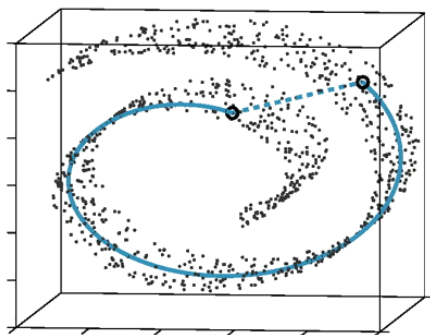
S. T. Roweis and L. K. Saul. Nonlinear dimensionality reduction by locally linear embedding. *Science*, vol. 290, pp. 2323--2326, 2000.

## ➤拉普拉斯特征映射(Laplacian Eigenmap)

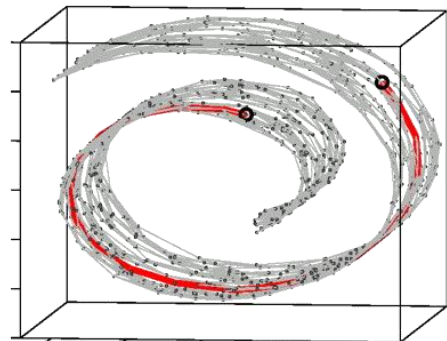
M. Belkin, P. Niyogi, Laplacian Eigenmaps for Dimensionality Reduction and Data Representation. *Neural Computation*, Vol. 15, Issue 6, pp. 1373 –1396, 2003 .

# 代表性算法-1

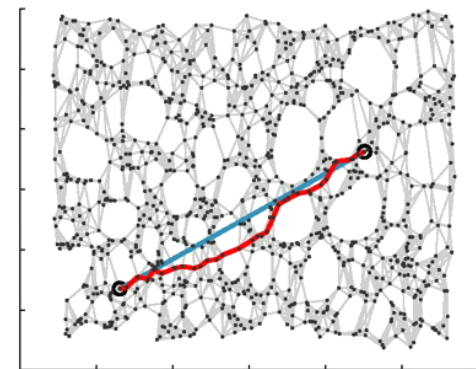
- ISOMAP (Isometric feature mapping)
  - 保持全局测地距离
    - 测地距离反映数据在流形上的真实距离差异
  - 等距映射
    - 基于线性算法MDS，采用“测地距离”作为数据差异度量



欧式距离 vs.  
测地距离



最短路径近  
似测地距离



降维嵌入空间

#1

# 多维尺度变换 (MDS)

- MDS 是一种非监督的维数约简方法.
- MDS的基本思想: 约简后低维空间中任意两点间的距离应该与它们在原高维空间中的距离相同.
- MDS的求解: 通过适当定义准则函数来体现在低维空间中对高维距离的重建误差, 对准则函数用梯度下降法求解, 对于某些特殊的距离可以推导出解析解法.



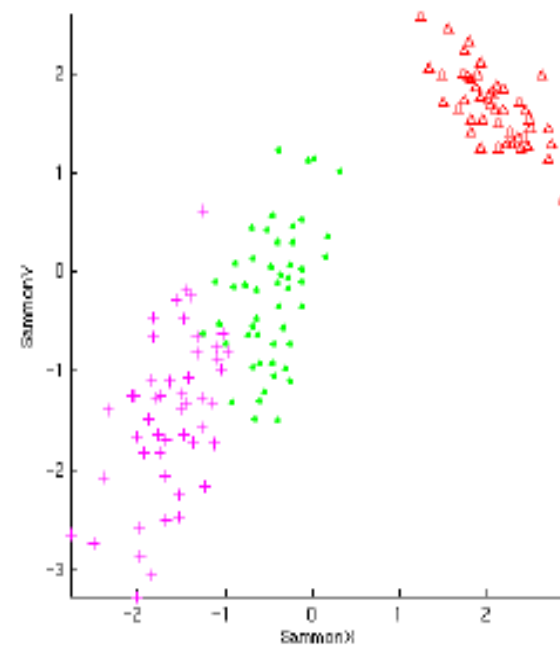
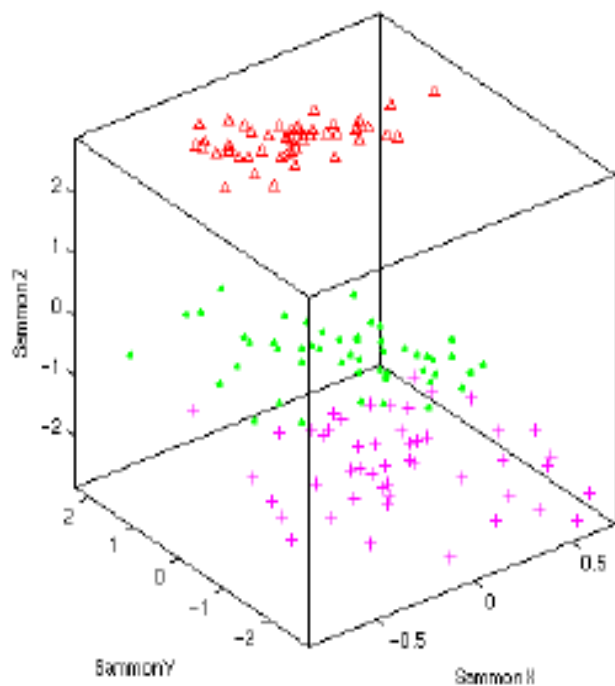
# MDS的准则函数

$$J_{ee} = \frac{\sum_{i < j} (d_{ij} - \delta_{ij})^2}{\sum_{i < j} \delta_{ij}^2},$$

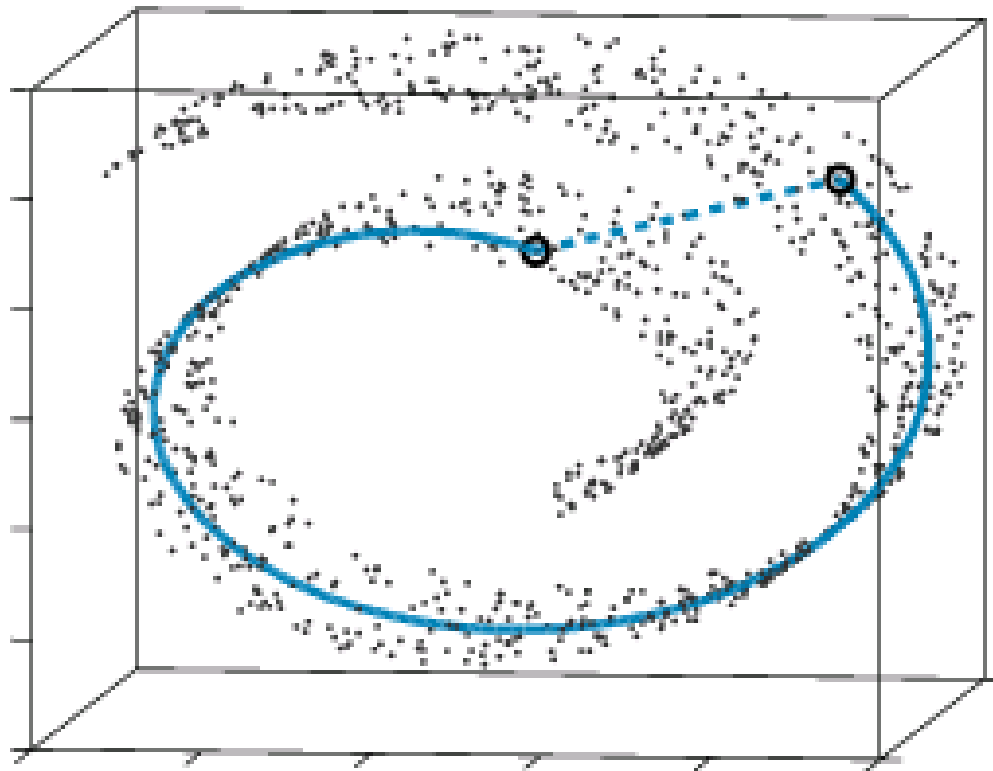
$$J_{ff} = \sum_{i < j} \left( \frac{d_{ij} - \delta_{ij}}{\delta_{ij}} \right)^2$$

$$J_{ef} = \frac{1}{\sum_{i < j} \delta_{ij}} \sum_{i < j} \frac{(d_{ij} - \delta_{ij})^2}{\delta_{ij}}$$

# MDS的示意图



# MDS的失效



# 测地距离

- 测地线：流形上连接两个点的最短曲线
  - 例如：球面上的测地线就是球面上的大圆弧
- 测地距离：测地线的长度

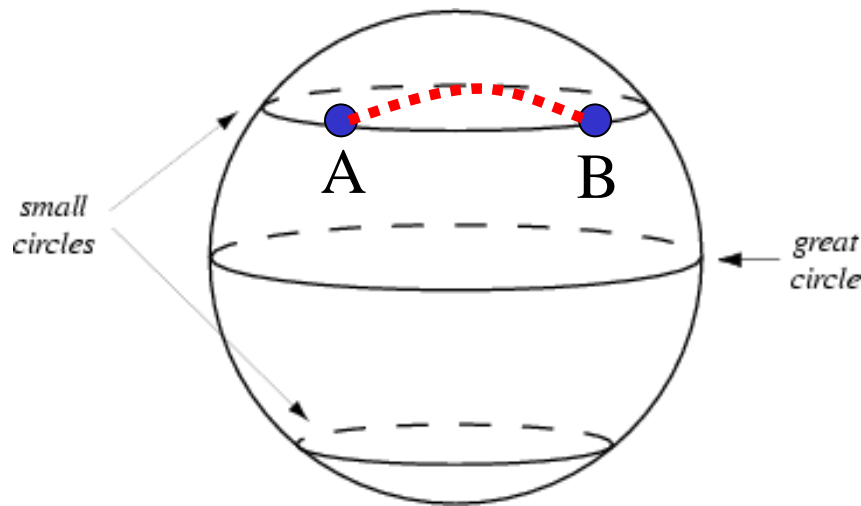


Figure from  
<http://mathworld.wolfram.com/GreatCircle.html>

# ISOMAP算法流程

- 1 计算每个点的近邻点 (用 $K$ 近邻或  $\varepsilon$  邻域).
- 2 在样本集上定义一个赋权无向图 如果  $x_i$  和  $x_j$  互为近邻点, 则边的权值为  $d_x(i, j)$ .
- 3 计算图中两点间的最短距离, 记所得的距离矩阵为  $D_G = \{d_G(i, j)\}$ .
- 4 用MDS求低维嵌入坐标 ,  
令  $S = (S_{ij}) = (D_{ij}^2)$ ,  $H = (H_{ij}) = (\delta_{ij} - 1/N)$ ,  $\tau(D) = -HSH / 2$ ,  
低维嵌入是  $\tau(D)$ 的第1大到第  $d$ 大的特征值所对应的特征向量.

# 图距离逼近测地距离

**M. Bernstein, V. Silva, J.C. Langford, J.B. Tenenbaum**

证明了如下的渐进收敛定理.

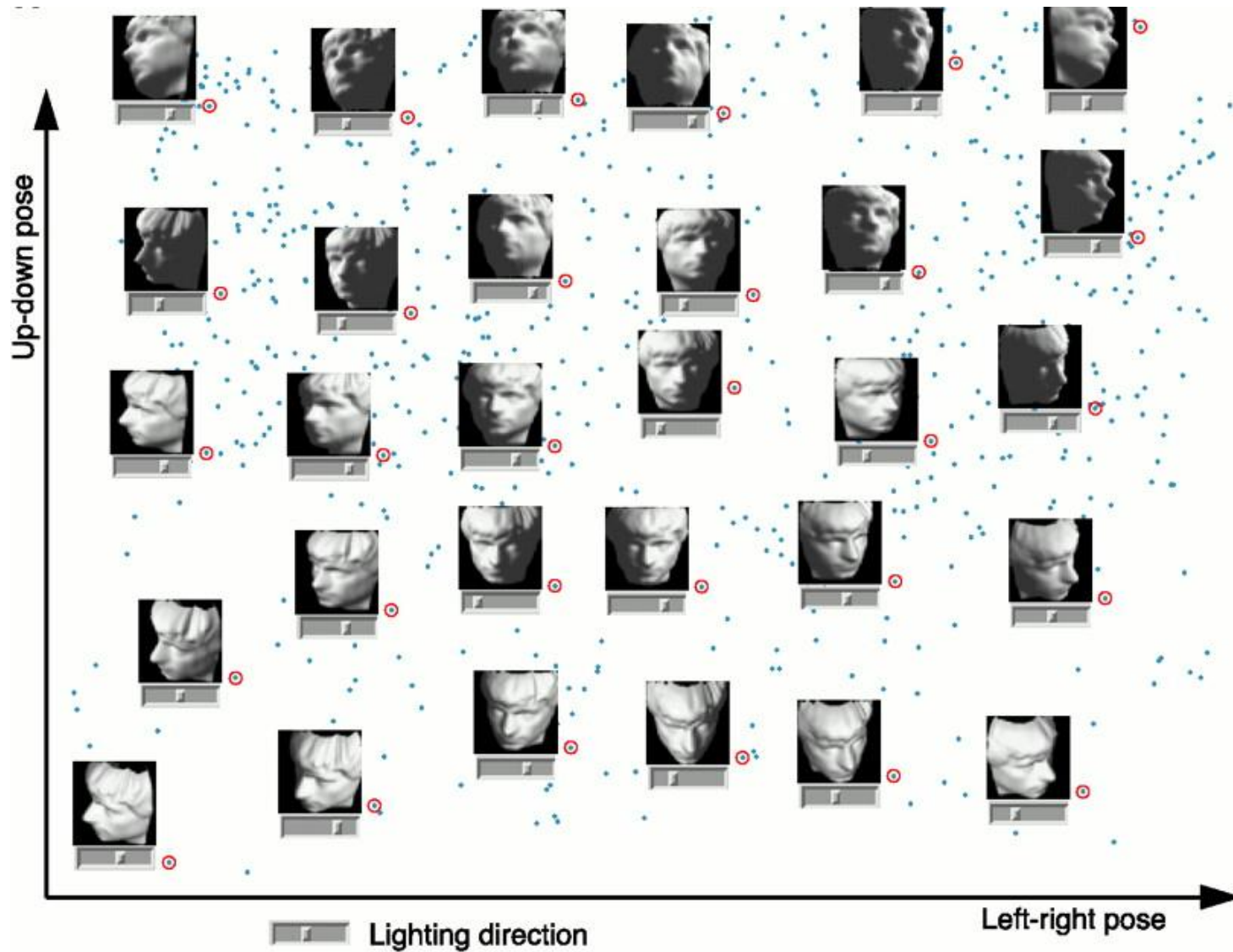
假设采样点是随机均匀抽取的, 则

**渐进收敛定理** 给定  $\lambda_1, \lambda_2, \mu > 0$ , 则只要样本集充分大且适当选择  $K$ , 不等式

$$1 - \lambda_1 \leq \frac{\text{graph distance}}{\text{geodesic distance}} \leq 1 + \lambda_2$$

至少以概率  $1 - \mu$  成立.

# ISOMAP实验结果



Figures from  
ISOMAP paper

# ISOMAP实验结果

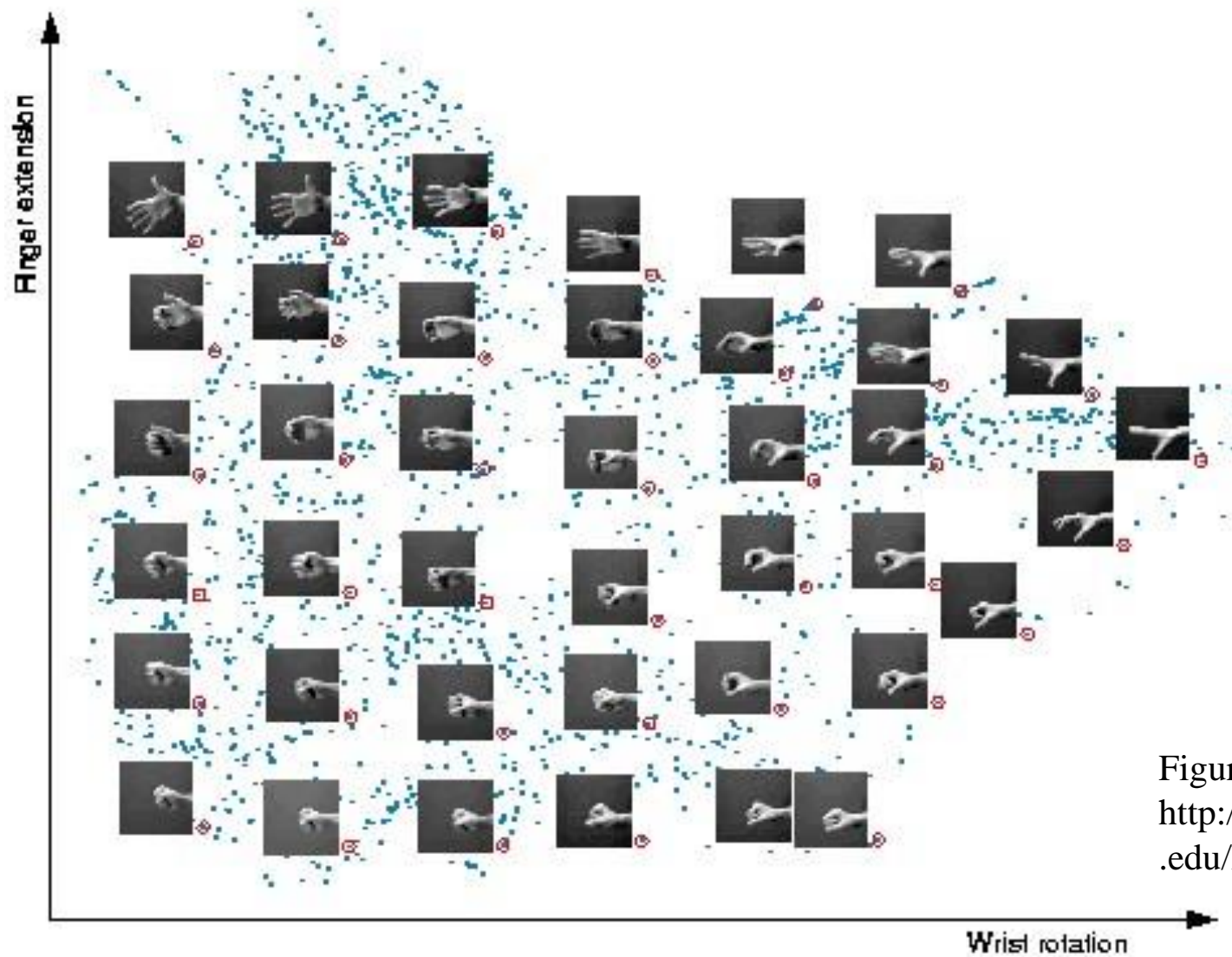
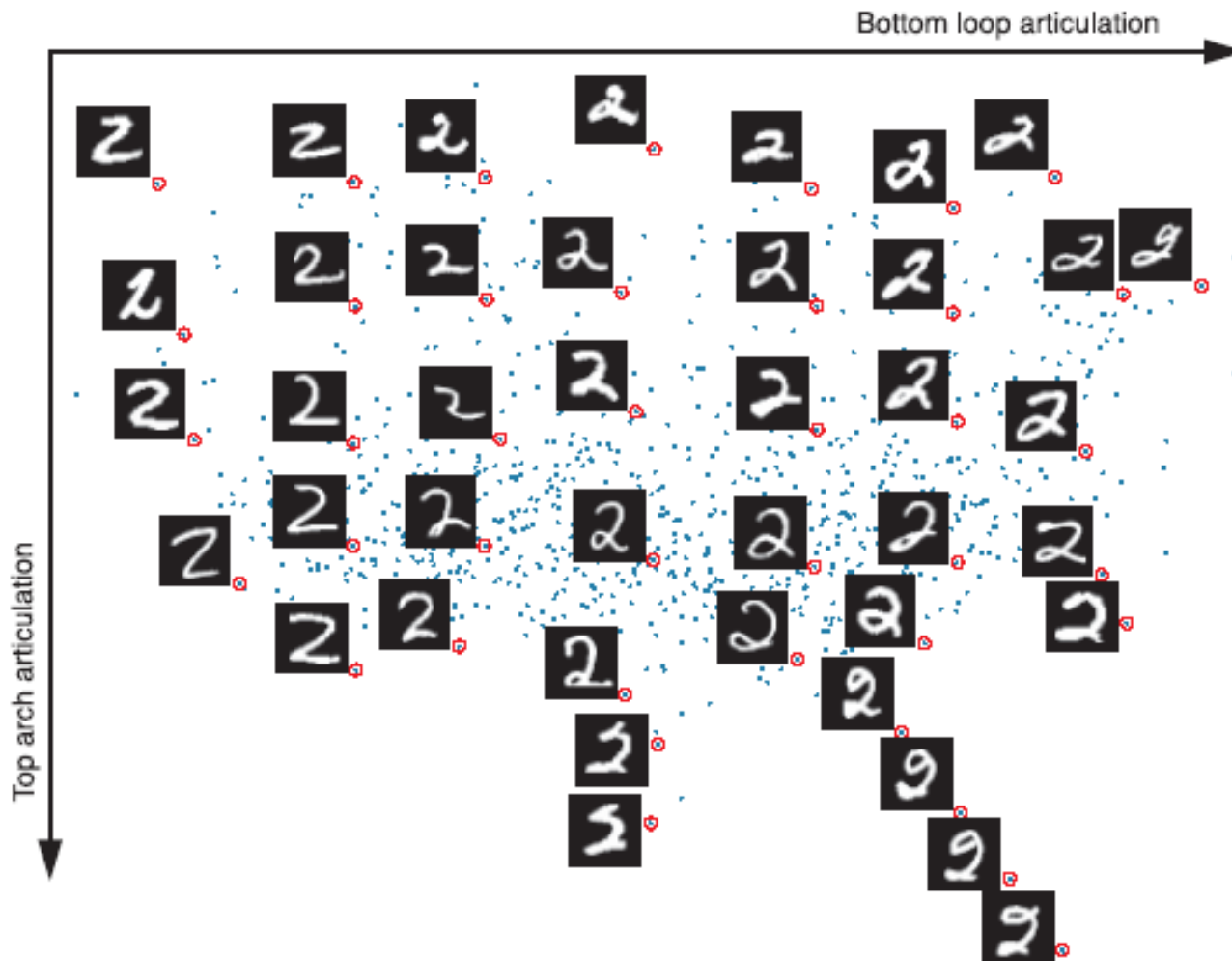


Figure from  
<http://isomap.stanford.edu/handfig.html>



# ISOMAP实验结果



Figures from  
ISOMAP paper

# Interpolation on Straight Lines in the Projected Co-ordinates



Figures from  
ISOMAP paper  
42

# 代表性算法-1

- **ISOMAP (Isometric feature mapping)**
  - 前提假设
    - 数据所在的低维流形与欧式空间的一个子集整体等距
    - 该欧式空间的子集是一个凸集
  - 思想核心
    - 较近点对之间的测地距离用欧式距离代替
    - 较远点对之间的测地距离用最短路径来逼近
  - 算法特点
    - 适用于学习内部平坦的低维流形
    - 不适于学习有较大内在曲率的流形
    - 计算点对间的最短路径比较耗时

# ISOMAP - summary

- Inherits features of MDS and PCA:
  - guaranteed asymptotic convergence to true structure
  - Polynomial runtime
  - Non-iterative
  - Ability to discover manifolds of arbitrary dimensionality
- Perform well when data is from a single well sampled cluster
- Few free parameters
- Good theoretical base for its metrics preserving properties

# Problems with ISOMAP

- Embeddings are biased to preserve the separation of faraway points, which can lead to **distortion of local geometry**
- Fails to nicely project data spread among **multiple clusters**
- **Well-conditioned algorithm but computationally expensive for large datasets**

# 重点介绍的几个方法

## ➤ 等距映射(ISOMAP)

J.B. Tenenbaum, V. de Silva, and J. C. Langford. A global geometric framework for nonlinear dimensionality reduction. *Science*, vol. 290, pp. 2319--2323, 2000.

## ➤ 局部线性嵌入(LLE)

S. T. Roweis and L. K. Saul. Nonlinear dimensionality reduction by locally linear embedding. *Science*, vol. 290, pp. 2323--2326, 2000.

## ➤ 拉普拉斯特征映射(Laplacian Eigenmap)

M. Belkin, P. Niyogi, Laplacian Eigenmaps for Dimensionality Reduction and Data Representation. *Neural Computation*, Vol. 15, Issue 6, pp. 1373 –1396, 2003 .

## 代表性算法-2

- **LLE (Locally linear embedding)**
  - 显式利用“局部线性”的假设
  - 保持局部邻域几何结构 – 重构权重
  - 权重对样本集的几何变换具有不变性

# 代表性算法-2

- **LLE (Locally linear embedding)**
  - 前提假设
    - 采样数据所在的低维流形在局部是线性的
    - 每个采样点均可以利用其近邻样本进行线性重构表示
  - 学习目标
    - 低维空间中保持每个邻域中的重构权值不变
    - 在嵌入映射为局部线性的条件下，最小化重构误差
    - 最终形式化为特征值分解问题



# LLE算法示意图

## LLE ALGORITHM

1. Compute the neighbors of each data point,  $\vec{X}_i$ .
2. Compute the weights  $W_{ij}$  that best reconstruct each data point  $\vec{X}_i$  from its neighbors, minimizing the cost in Equation (1) by constrained linear fits.
3. Compute the vectors  $\vec{Y}_i$  best reconstructed by the weights  $W_{ij}$ , minimizing the quadratic form in Equation (2) by its bottom nonzero eigenvectors.

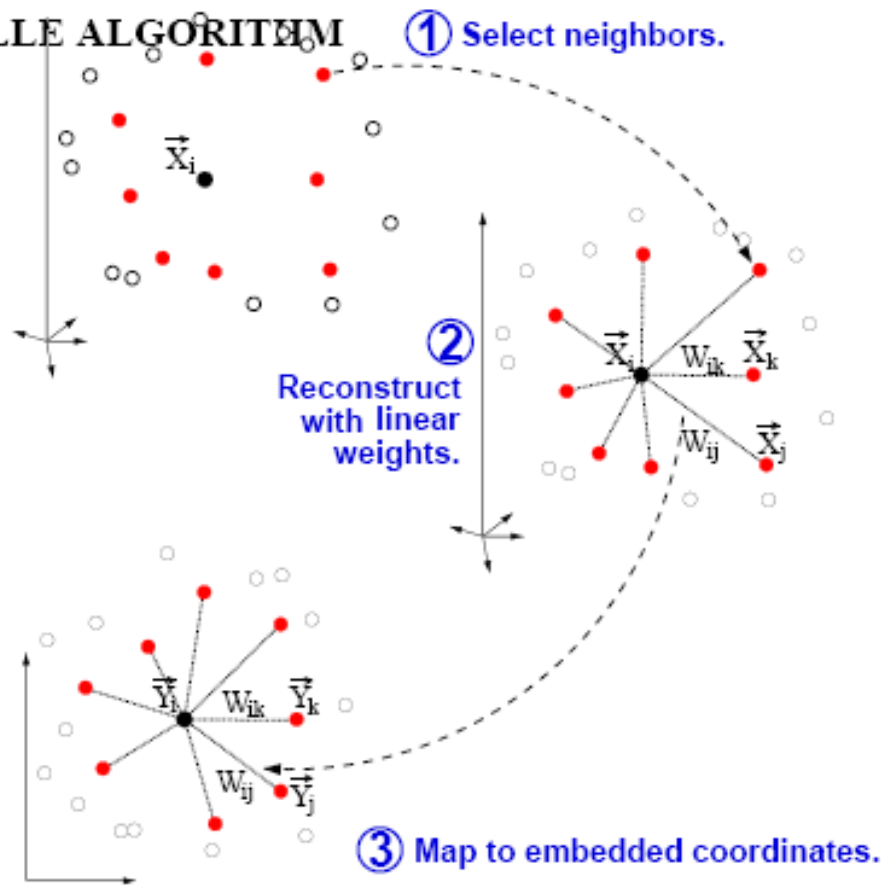


Figure 2: Summary of the LLE algorithm, mapping high dimensional inputs  $\vec{X}_i$  to low dimensional outputs  $\vec{Y}_i$  via local linear reconstruction weights  $W_{ij}$ .

# LLE算法流程

- 1 计算每一个点  $X_i$  的近邻点, 一般采用  $K$  近邻或者  $\varepsilon$  邻域.
- 2 计算权值  $W_{ij}$ , 使得把  $X_i$  用它的  $K$  个近邻点线性表示的误差最小, 即通过最小化  $\|X_i - W_{ij}X_j\|$  来求出  $W_{ij}$ .

$$\min \varepsilon(W) = \sum_i \left\| \mathbf{x}_i - \sum_j w_{ij} \mathbf{x}_{ij} \right\|^2$$

- 3 保持权值  $W_{ij}$  不变, 求  $X_i$  在低维空间的象  $Y_i$ , 使得低维重构误差最小.

$$\min \phi(Y) = \sum_i \left\| \mathbf{y}_i - \sum_j w_{ij} \mathbf{y}_{ij} \right\|^2$$

# LLE算法的求解

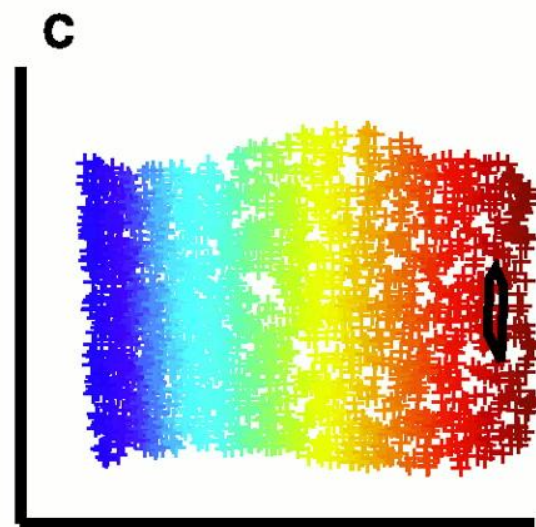
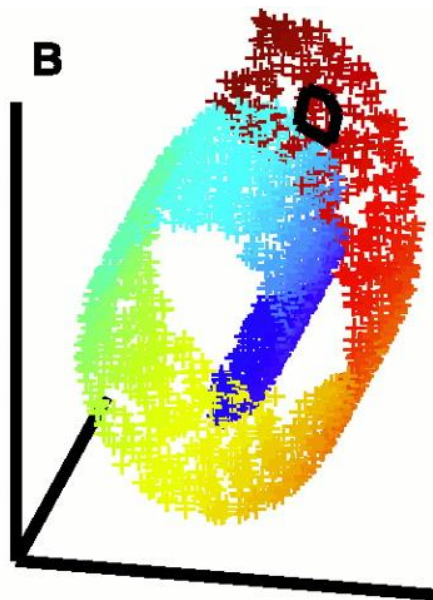
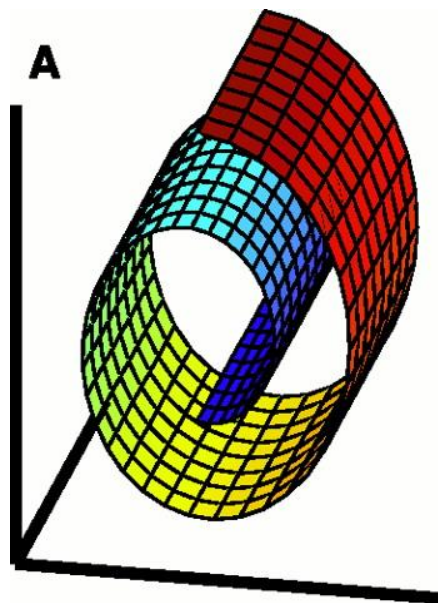
1 计算每一个点  $x_i$  的近邻点.

2 对于点  $x_i$  和它的近邻点的权值  $W_{ij}$ ,

$$W_{ij} = \frac{\sum_k G_{jk}^{i-1}}{\sum_{lm} G_{lm}^{i-1}}, \text{ 其中 } G_{jk}^i = (X_i - \eta_j) \bullet (X_i - \eta_l), \eta_j, \eta_l \text{ 为 } X_i \text{ 的近邻点.}$$

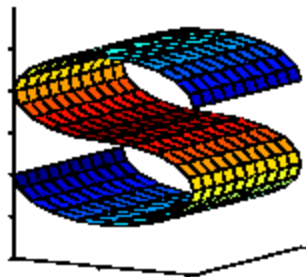
3 令  $W = (W_{ij})$ ,  $M = (I - W)^T (I - W)$ , 低维嵌入是  $M$  的最小的第 2 到第  $d+1$  个特征向量.

# LLE实验结果

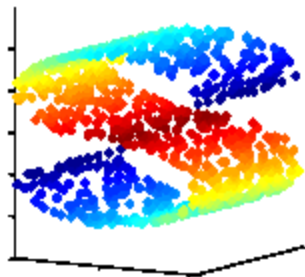


# LLE实验结果

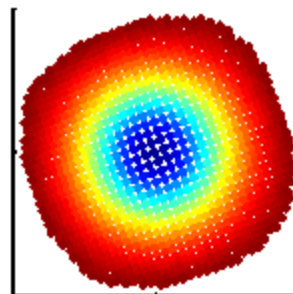
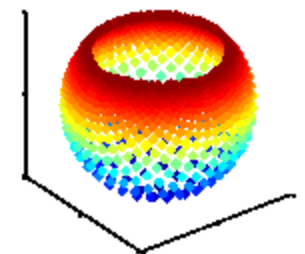
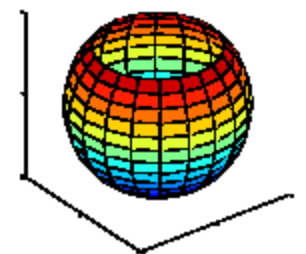
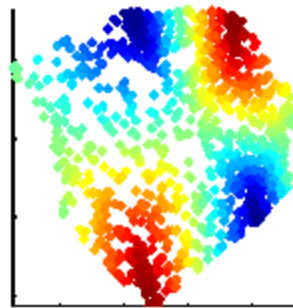
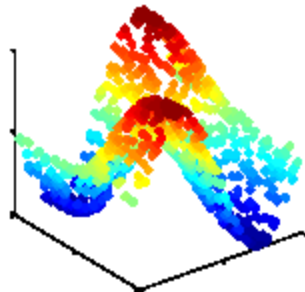
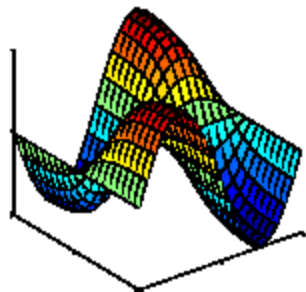
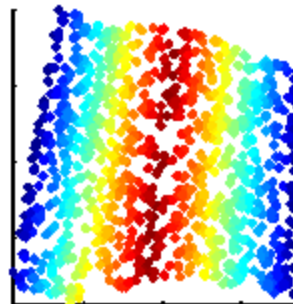
(A)



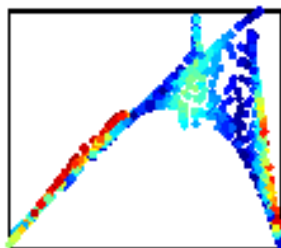
(B)



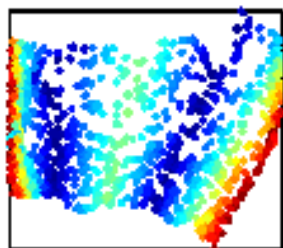
(C)



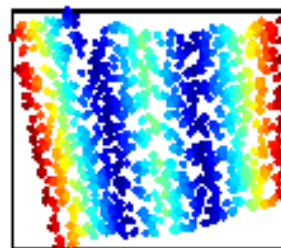
# LLE实验结果



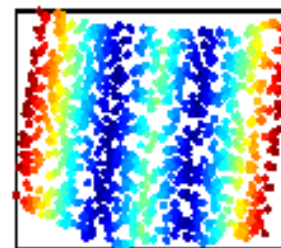
$K=5$



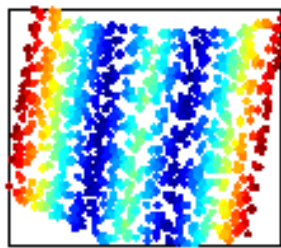
$K=6$



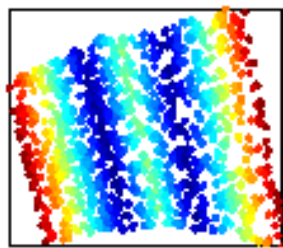
$K=8$



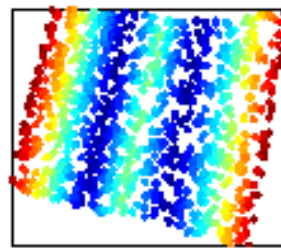
$K=10$



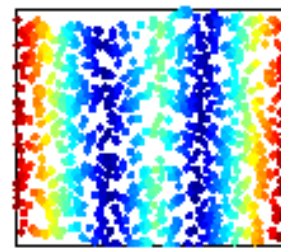
$K=12$



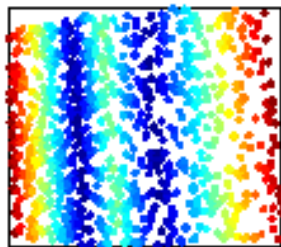
$K=14$



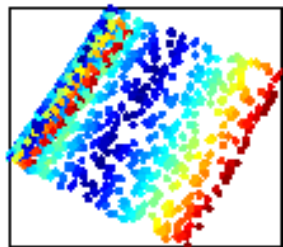
$K=16$



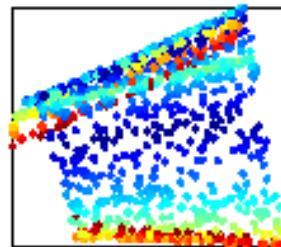
$K=18$



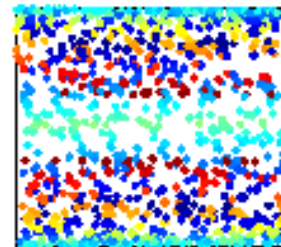
$K=20$



$K=30$



$K=40$



$K=60$

邻域参数的影响



# LLE实验结果

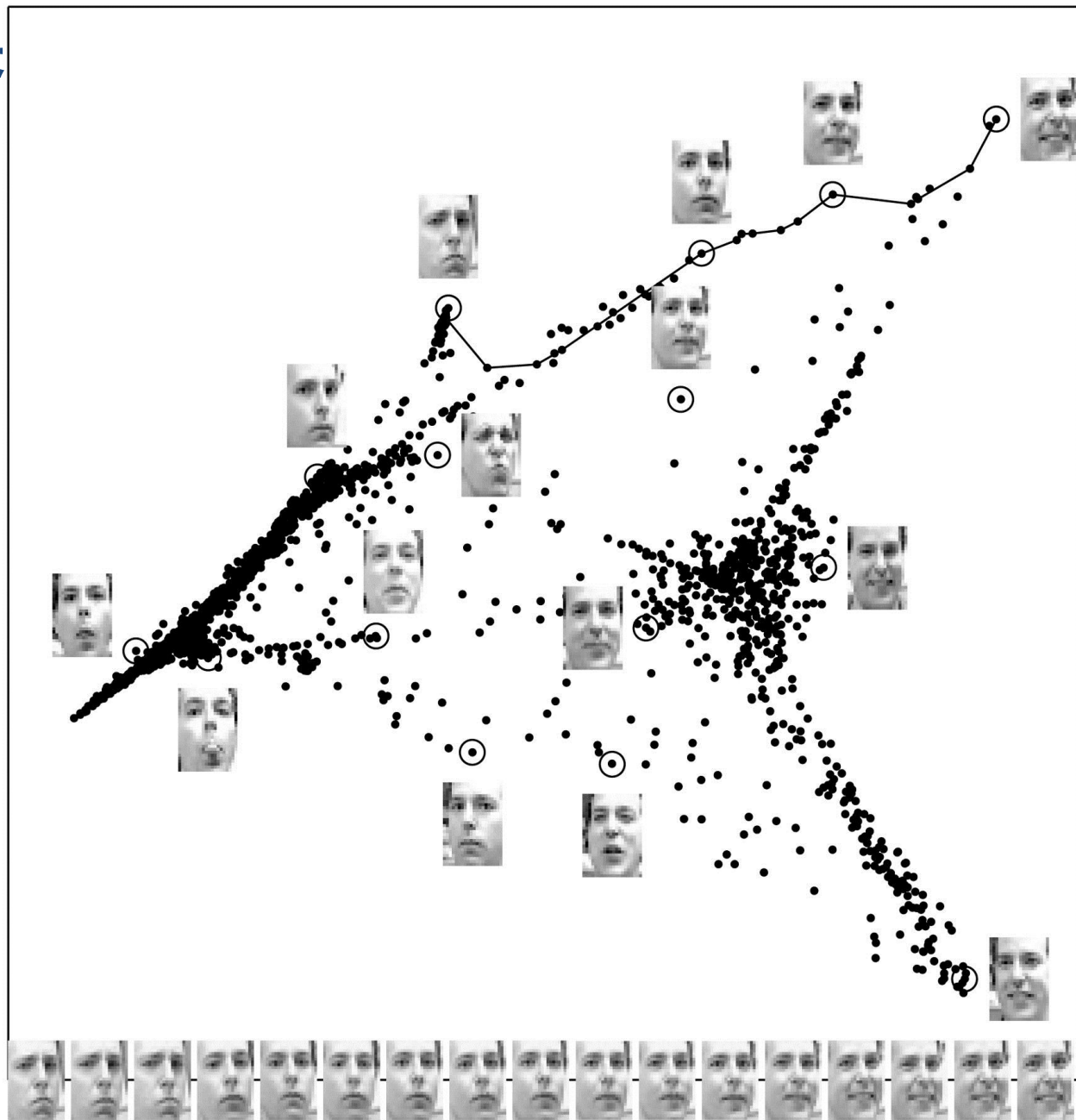
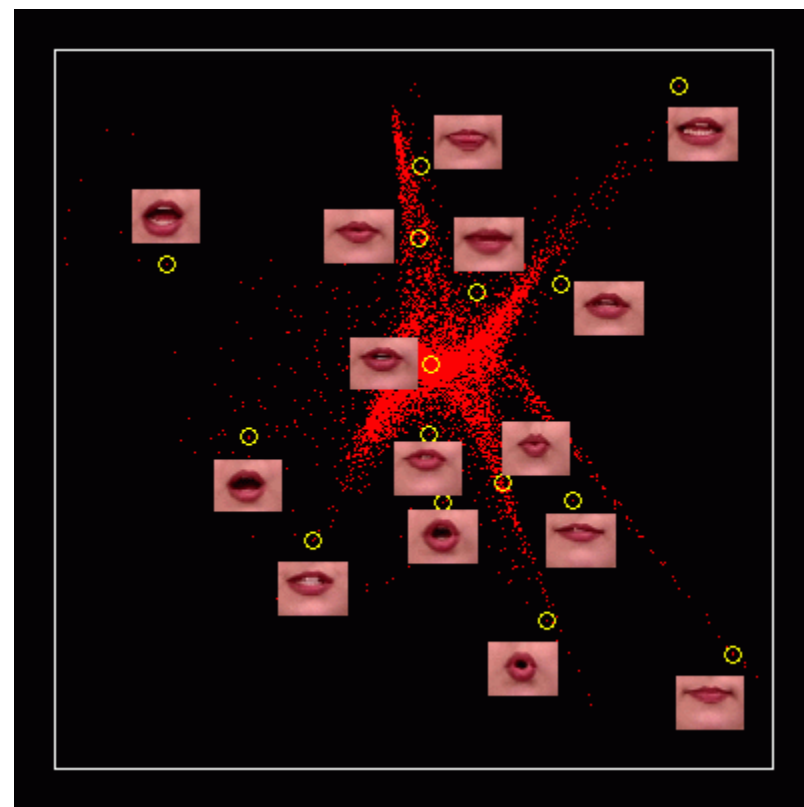
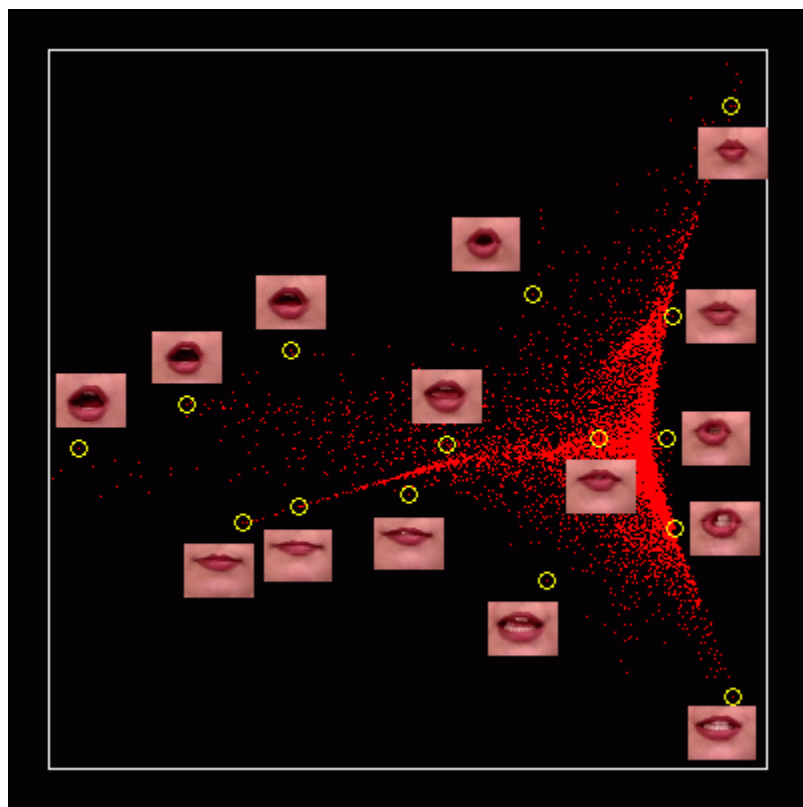


Figure from  
LLE paper

# LLE实验结果





## 代表性算法-2

- **LLE (Locally linear embedding)**
  - 优点
    - 算法可以学习任意维的局部线性的低维流形
    - 算法归结为稀疏矩阵特征值计算，计算复杂度相对较小
  - 缺点
    - 算法所学习的流形只能是不闭合的
    - 算法要求样本在流形上是稠密采样的
    - 算法对样本中的噪声和邻域参数比较敏感

# 重点介绍的几个方法

## ➤等距映射(ISOMAP)

J.B. Tenenbaum, V. de Silva, and J. C. Langford. A global geometric framework for nonlinear dimensionality reduction. *Science*, vol. 290, pp. 2319--2323, 2000.

## ➤局部线性嵌入(LLE)

S. T. Roweis and L. K. Saul. Nonlinear dimensionality reduction by locally linear embedding. *Science*, vol. 290, pp. 2323--2326, 2000.

## ➤拉普拉斯特征映射(Laplacian Eigenmap)

M. Belkin, P. Niyogi, Laplacian Eigenmaps for Dimensionality Reduction and Data Representation. *Neural Computation*, Vol. 15, Issue 6, pp. 1373 –1396, 2003 .

## 代表性算法-3

- **LE (Laplacian Eigenmap)**
  - 基本思想：在高维空间中离得很近的点投影到低维空间中的象也应该离得很近。
  - 求解方法：求解图拉普拉斯算子的广义特征值问题。

# 拉普拉斯算子

设  $M$  是光滑的黎曼流形,  $f$  是  $M$  上的光滑函数,  $\nabla f$  是  $f$  的梯度, 则称线性映射

$$\Delta: C^\infty(M) \rightarrow C^\infty(M), \quad \Delta f = -\operatorname{div}(\nabla f)$$

为  $M$  上的拉普拉斯算子, 其中  $\operatorname{div}$  是散度算子.

# 图上的拉普拉斯算子

设  $G$  是一个图,  $v$  是它的顶点,  $d_v$  是  $v$  的自由度,  $w(u,v)$  是连接顶点  $u,v$  的边的权值, 令

$$l(u,v) = \begin{cases} d_v - w(u,v) & u = v \\ -w(u,v) & u,v \text{ 是连接的} \\ 0 & \text{其它} \end{cases}$$

$L = T^{-1/2} l T^{-1/2}$ , 其中  $T$  是对角矩阵, 对角线的元素为  $\sum_{u \sim v} -w(u,v)$ , 则称  $L$  为图  $G$  上的拉普拉斯算子.

# Laplacian Eigenmap 算法流程

- 1 从样本点构建一个近邻图, 图的顶点为样本点, 离得很近两点用边相连 ( $K$ 近邻或  $\varepsilon$  邻域).
- 2 给每条边赋予权值 如果第  $i$  个点和第  $j$  个点不相连, 权值为0, 否则  $W_{ij} = 1$  ;
- 3 计算图拉普拉斯算子的广义特征向量, 求得低维嵌入.  
令  $D$  为对角矩阵  $D_{ii} = \sum_j W_{ji}$ ,  $L = D - W$ ,  $L$  是近邻图上的拉普拉斯算子, 求解广义特征值问题  $Lf = \lambda Df$ .

# Laplacian Eigenmap实验结果(1)

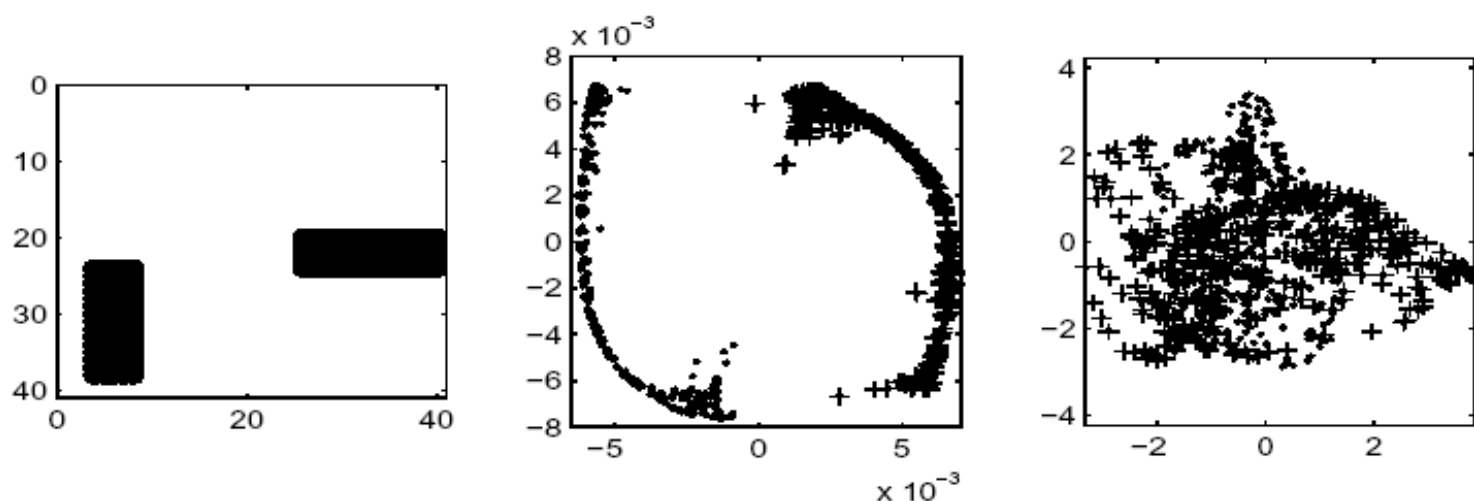
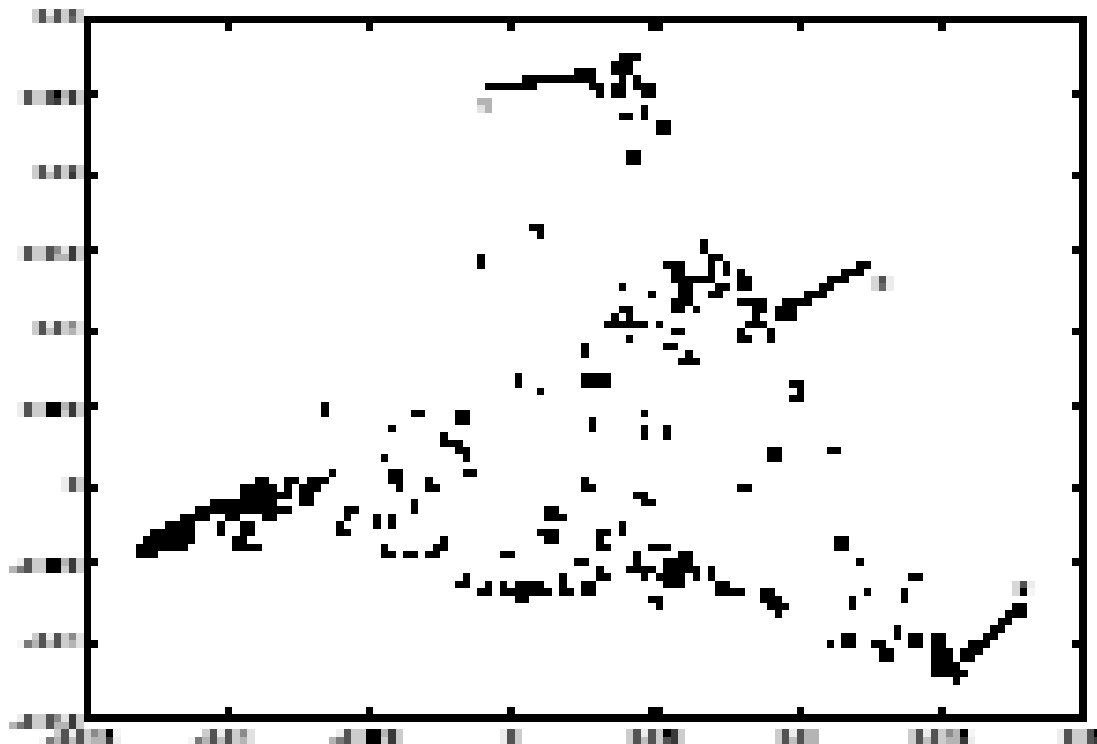


Figure 3: The left panel shows a horizontal and a vertical bar. The middle panel is a two dimensional representation of the set of all images using the Laplacian eigenmaps. The right panel shows the result of a principal components analysis using the first two principal directions to represent the data. Blue dots correspond to images of vertical bars and red '+' signs correspond to images of horizontal bars.

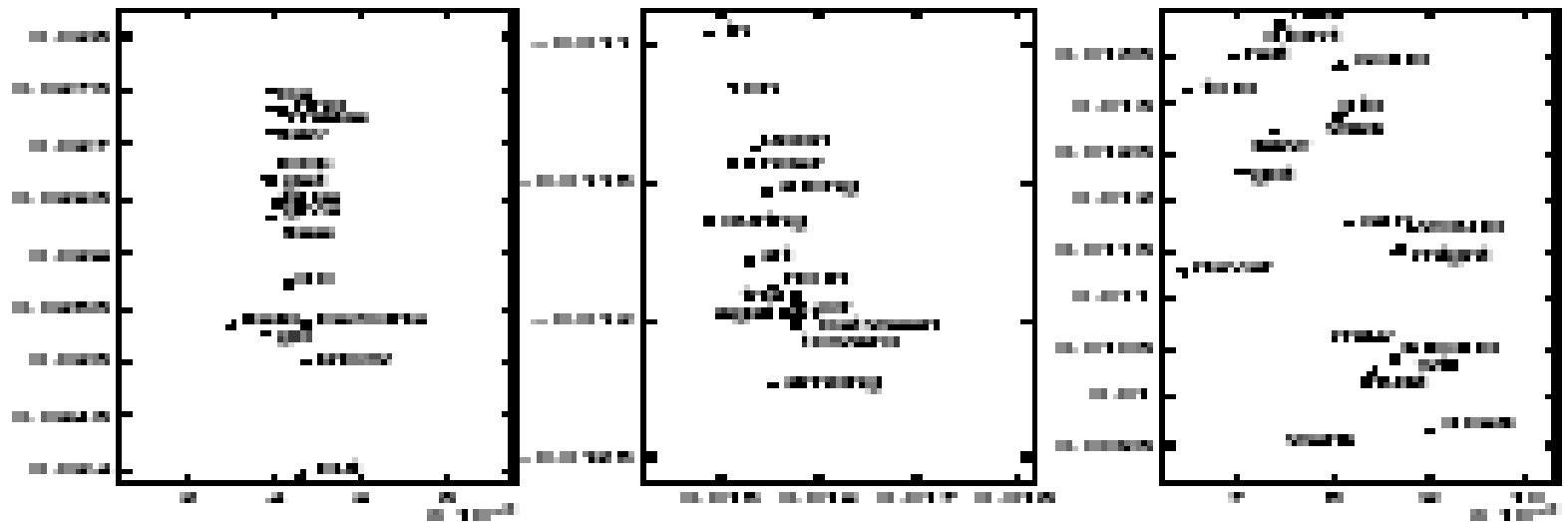
# Laplacian Eigenmap实验结果(2)



**300 most frequent words of the Brown corpus represented in the spectral domain**



## Laplacian Eigenmap实验结果(2)



**The first is exclusively infinitives of verbs, the second contains prepositions and the third mostly modal and auxiliary verbs. We see that syntactic structure is well-preserved.**

# 代表性算法-3

- **LE (Laplacian Eigenmap)**

- 优点

- 算法是局部非线性方法，与谱图理论有很紧密的联系.
    - 算法通过求解稀疏矩阵的特征值问题解析地求出整体最优解，效率非常高
    - 算法使原空间中离得很近的点在低维空间也离得很近, 可以用于聚类

- 缺点

- 同样对算法参数和数据采样密度较敏感
    - 不能有效保持流形的全局几何结构



# 提纲

- 研究背景
- 基本知识介绍
- 经典方法概览
- 总结讨论

## 经典方法小结

- 优点
  - 非参数：不需要对流形的很多参数作假设
  - 非线性：基于流形内在几何结构，体现现实数据的本质
  - 求解简单：转化为求解优化问题，通常采用特征值分解，而不需要采用迭代算法
- 缺点
  - 对观察数据存在流形结构的假设
  - 需要调节较多的算法参数，如k-NN的邻域参数k
  - 对数据采样稠密性、均匀性以及噪声数据的敏感性

## 研究难点与未来方向

- 如何进行统一有效的定量化评估
  - 真实数据 vs. 人工数据
  - 理论分析依据
  - 评估指标：一致性，收敛率，稳定性，复杂度...
- 如何求解测试数据的**out-of-sample**问题
  - 线性近似
  - 回归方法
- 如何确定低维目标空间的维数
- 如何进行监督式推广应用于分类问题

## 参考文献

- Roweis, S. T. and L. K. Saul (2000). "Nonlinear dimensionality reduction by locally linear embedding " Science 290(5500): 2323-2326.
- Tenenbaum, J. B., V. de Silva, et al. (2000). "A global geometric framework for nonlinear dimensionality reduction " Science 290(5500): 2319-2323.
- Vlachos, M., C. Domeniconi, et al. (2002). "Non-linear dimensionality reduction techniques for classification and visualization." Proc. of 8th SIGKDD, Edmonton, Canada.
- de Silva, V. and Tenenbaum, J. (2003). "Global versus local methods for nonlinear dimensionality reduction", Advances in Neural Information Processing Systems,15.
- Law, Martin. Nonlinear Dimensionality Reduction and Manifold Learning. 2005.
- Lin, Zhouchen. A Glance over Manifold Learning. 2008.
- 杨剑. 流形学习问题. 2004.

# 局部投影保持

*Locality Preserving Projections (LPP)*

## Face Recognition Using Laplacianfaces

---

Xiaofei He<sup>†</sup>, Shuicheng Yan<sup>‡</sup>, Yuxiao Hu\*, Partha Niyogi<sup>†</sup>, Hong-Jiang Zhang\*

<sup>†</sup>Department of Computer Science, The University of Chicago, 1100 E. 58<sup>th</sup> Street, Chicago, IL 60637  
{xiaofei, niyogi}@cs.uchicago.edu

\*Microsoft Research Asia, Beijing 100080, China  
{i-yuxhu, hjzhang}@microsoft.com

<sup>‡</sup>Department of Information Science, School of Mathematical Sciences, Beijing University, China  
scyan@msrchina.research.microsoft.com

降维前:  $\mathbf{x}$

降维后:  $\mathbf{y}$

$$\mathbf{x}_i \overset{\text{distance}}{\longleftrightarrow} \mathbf{x}_j$$

$$\mathbf{y}_i \overset{\text{distance}}{\longleftrightarrow} \mathbf{y}_j$$

$$\mathbf{y}_i = A^T \mathbf{x}_i$$

$$\sum_{ij} (y_i - y_j)^2 W_{ij} \longrightarrow \frac{1}{2} \sum_{ij} (y_i - y_j)^2 W_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{ij} (\mathbf{a}^T \mathbf{x}_i - \mathbf{a}^T \mathbf{x}_j)^2 W_{ij}$$

$$\longrightarrow \mathbf{a}^T X(D - W)X^T \mathbf{a} = \mathbf{a}^T X L X^T \mathbf{a}$$

$$\longrightarrow \arg \min_{\substack{\mathbf{a} \\ \mathbf{a}^T X D X^T \mathbf{a} = 1}} \mathbf{a}^T X L X^T \mathbf{a}$$

step one :Constructing the adjacency graph

a:  $\epsilon$ -neighborhoods.

$$\text{if } \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2 < \epsilon$$

step two :Choosing the Weights

a.Heat kernel.

$$W_{ij} = e^{-\frac{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2}{t}}$$



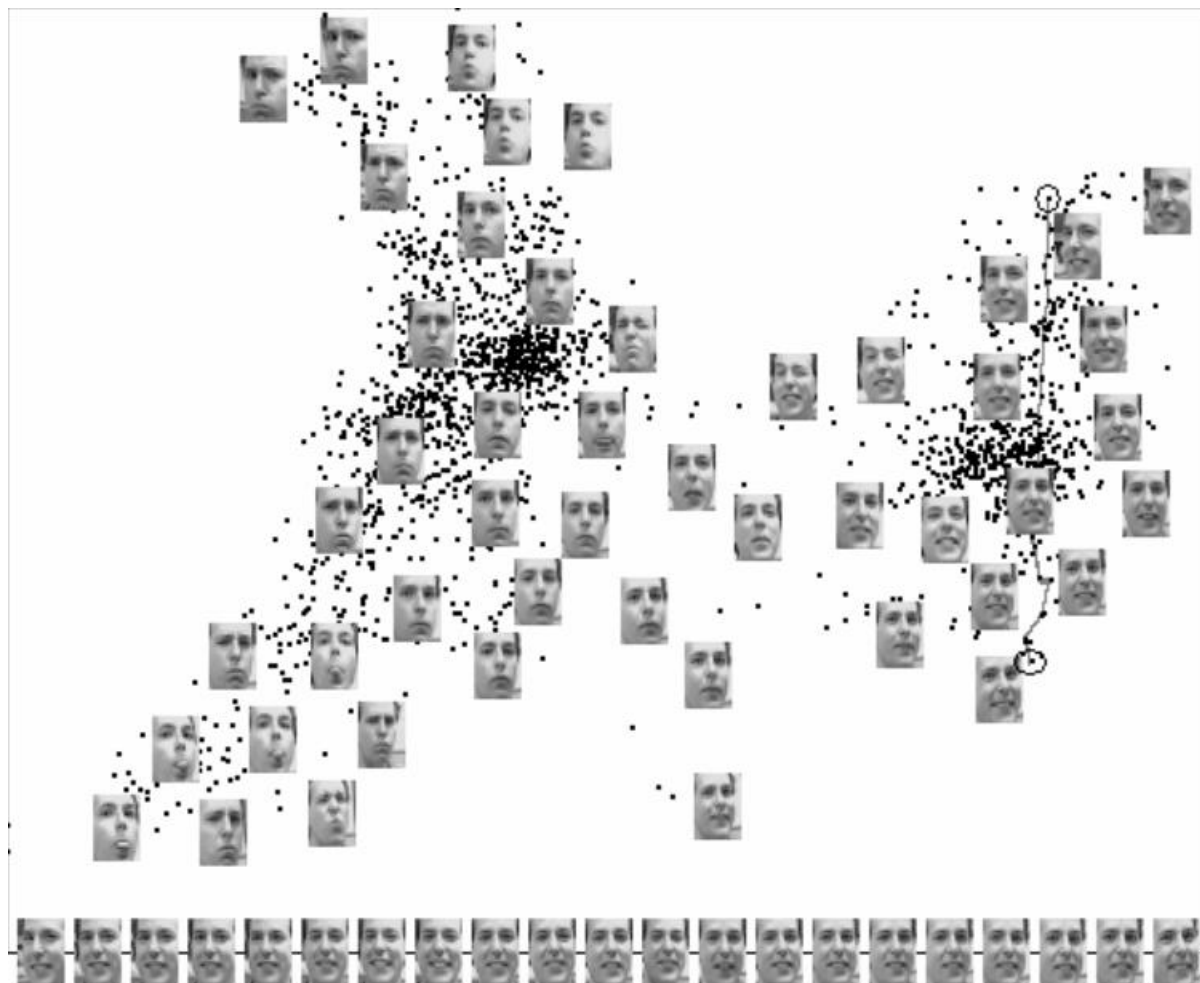
step three

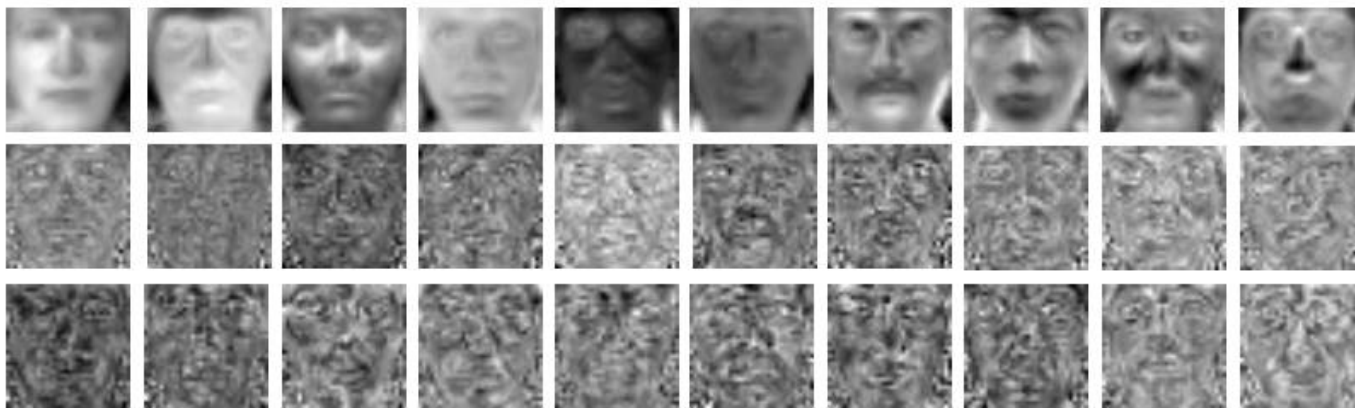
$XLX'a = \lambda XDX'a$  (等式由拉格朗日函数对a进行求导而得)

$$Ax = \lambda Bx$$



$x \rightarrow y = A'x, A = (a_0, a_1, \dots, a_{l-1})$





# 基于局部保留投影的快速荧光分子断层成像

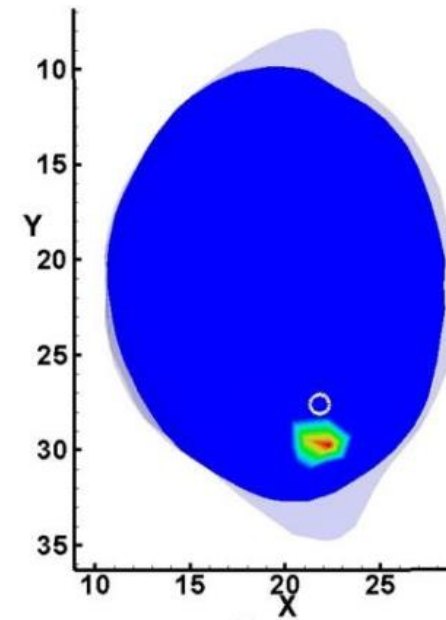
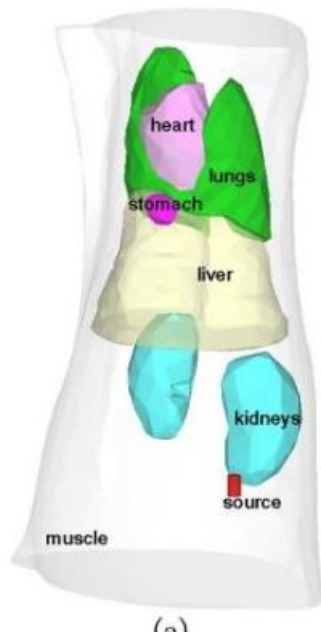
张旭 易黄建 张海波 侯榆青 贺小伟\*

西北大学信息科学与技术学院，陕西 西安 710127

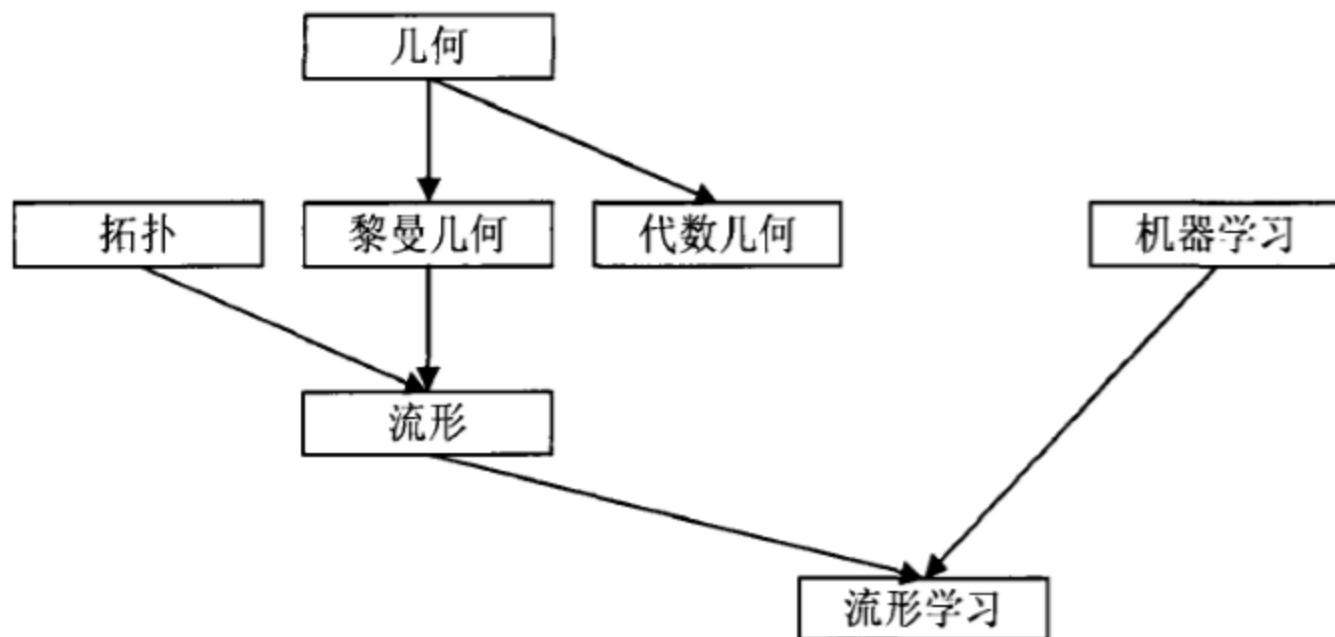
$$\mathbf{T}_s = \mathbf{A}^T \Phi_s$$

$$\mathbf{W}\mathbf{X} = \Phi \longrightarrow \Phi_s = \mathbf{W}_s \mathbf{X} \longrightarrow \mathbf{T} = \mathbf{Y}\mathbf{X}$$

$$\mathbf{T}_s = \mathbf{Y}_s \mathbf{X}$$



最后，附上流形学习和一些学科的主要关系：



此外，视觉神经学科的感知理论也至关重要，谢谢！

## 第三次作业

- 课程报告（**word**电子版）+源码
- 打印纸质版

1、简述什么是流形学习？举例介绍一到二个非线性流形学习算法的原理和思想。

2、实现一种非线性流形学习算法的实例。