

Lecture 19: 多维尺度分析

2024.6.3

Lecturer: 丁虎

Scribe: 王运韬, 莫官霖

1 动机与基本概念

多维尺度分析 (MDS) 是一种非线性降维技术, 旨在将高维数据投影到低维空间, 同时尽可能保留数据点之间的相似性或距离关系。

核心思想: 给定一组对象间的相异度 (距离) 矩阵 $D \in \mathbb{R}^{n \times n}$, 其中 $D_{ij} = \text{dist}(x_i, x_j)$, MDS 寻找低维表示 $\{y_1, \dots, y_n\} \in \mathbb{R}^{n \times k}$ (通常 $k = 2$ 或 3), 使得这些点之间的欧氏距离尽可能接近原始距离。

2 经典 MDS 算法

2.1 输入与输出

- **输入:** 距离矩阵 $D \in \mathbb{R}^{n \times n}$, 其中 $D_{ij} = \text{dist}(x_i, x_j)$
- **输出:** 低维表示 $Y = \{y_1, \dots, y_n\} \in \mathbb{R}^{n \times k}$

2.2 算法步骤

1. 计算平方距离矩阵:

$$D^{(2)} = D \odot D$$

2. 构造双中心化矩阵:

$$B = -\frac{1}{2}JD^{(2)}J$$

其中 $J = I_n - \frac{1}{n}11^T$ 为中心化矩阵, 1 为全 1 向量

3. 特征分解:

$$B = V\Lambda V^T$$

其中 $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$, $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$

4. 选择前 k 个特征值及对应特征向量:

$$Y = V_k \Lambda_k^{1/2}$$

其中 V_k 为前 k 个特征向量组成的矩阵, $\Lambda_k = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_k)$

可以看到,MDS 算法实质上就是 PCA 的一种等价形式.

从距离矩阵 D 重建内积矩阵 B :

$$B_{ij} = \frac{1}{2}(\|x_i\|^2 + \|x_j\|^2 - D_{ij}^2)$$

3 ISOMAP 算法

ISOMAP (等距映射) 是 MDS 的扩展, 适用于非线性流形数据。

3.1 算法原理

1. 构建邻域图:

- 对每个点 x_i , 找到其 k 近邻或 ϵ -邻域
- 构建邻接图 G , 边权重为欧氏距离.

- ##### 2. 计算最短路径距离:
- 使用 Dijkstra 或 Floyd-Warshall 算法计算图上所有点对之间的最短路径距离 \tilde{D} , 从而近似测地距离, 如图 1. $\tilde{D}_{ij} = \begin{cases} D_{ij} & \text{如果 } j \in \mathcal{N}(i) \\ \text{最短路径距离} & \text{否则.} \end{cases}$

- ##### 3. 应用经典 MDS:
- 对 \tilde{D} 应用 MDS 得到低维嵌入.

缺点: 复杂度太高.

4 局部线性嵌入 (Locally Linear Embedding, LLE)

LLE 是另一种非线性降维方法, 强调局部线性结构的保持。

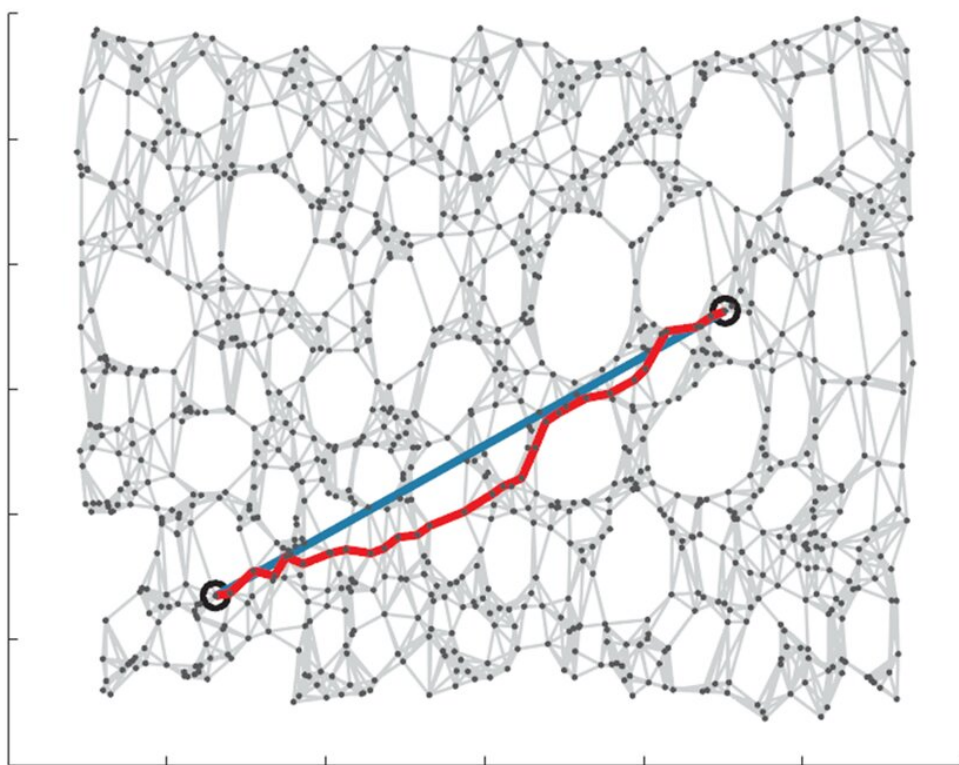


Figure 1: Isomap 算法中的距离为红线长度, 相比蓝线的欧氏距离更能体现内蕴性质.

4.1 算法步骤

1. **选择邻域**: 对每个点 $x_i \in \mathbb{R}^n$, 找到 k 近邻 $\mathcal{N}(i)$
2. **计算局部重建权重**, 其中 W_{ij} 为希望找到的权重:

$$\begin{aligned} \min_W \sum_{i=1}^n \|x_i - \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} W_{ij} x_j\|^2 \\ \text{s.t. } \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} W_{ij} = 1 \end{aligned}$$

这里的约束项, 从几何上看, 保证了在变换 $x \mapsto x + c$ 下目标函数的不变性.

3. **计算低维嵌入**. 求降维后的数据点矩阵 $Y \in \mathbb{R}^{n \times k}$, 使用一个简单的凸优化:

$$\begin{aligned} \min_Y \sum_{i=1}^n \|y_i - \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} W_{ij} y_j\|^2 \\ \text{s.t. } \frac{1}{n} Y^T Y = I, \quad \sum_{i=1}^n y_i = 0 \end{aligned}$$

Remark 4.1. 权重矩阵 W 的求解:

$$W_i = \frac{C^{-1} \mathbf{1}}{\mathbf{1}^T C^{-1} \mathbf{1}}$$

其中 $C_{jk} = (x_i - x_j)^T (x_i - x_k)$ 为局部协方差矩阵.

5 Doubling Dimension and R-Net

在各种计算几何领域的算法中, 我们常常要反复搜索一个点的邻居。在先前的课程中我们提到了可以用 LSH 来加速这一过程。进一步地, 当数据处于一个流形上, 我们是否可以使用其他方法来加速这一近邻搜索的过程?

5.1 Doubling Dimension

倍增维数 (Doubling Dimension) 是数据内蕴维度的一种。

若对于任意的 $p \in P$, $r > 0$, 有

$$\frac{|Ball(p, 2r)|}{|Ball(p, r)|} \leq 2^\lambda$$

则 λ 称为 P 的倍增维数. 一般地, \mathbb{R}^d 的倍增维数为 $\Theta(d)$, 但如果数据集 P 分布在一个低维流形上, 那么 P 的 Doubling Dimension 为 $\Theta(1)$. 对于这样的 P , 我们可以构造一个 r -net Q 来近似。

Definition 5.1 (r -net). 给定度量空间 (X, d) 和半径 $r > 0$, 子集 $N \subseteq X$ 称为 r -net 如果满足:

1. (覆盖性) 对所有 $x \in X$, 存在 $y \in N$ 使得 $d(x, y) \leq r$
2. (分离性) 对所有 $y, z \in N$, $d(y, z) > r$

由定义和三角不等式, 有如下结论:

Lemma 5.2. 对于集合 P 和它的 r -net Q

$$Ball(P, r) \subseteq \bigcup_{\substack{q' \in Ball(q, 3r) \\ q' \in Q}} Ball(q', r)$$

根据上述的结论, 我们可以将近邻的搜索范围降低到 $Q \cap Ball(q', r)$.

我们有重要的推论:

Lemma 5.3. 设度量空间 $M = (X, dist)$, $S \subset X$, 其中 $(S, dist)$ 仍然是一个度量空间. 令 N 为 S 的一个 r -net, 并设 S 的直径为 D , 则:

$$|N| \leq \left(\frac{2D}{r}\right)^{ddim(M)}$$

Proof. 由于 $S \subset X$, 我们至少需要 $\lambda(M)$ 个直径为 $D/2$ 的集合覆盖 S . 每个这样的子集 $S_i \subset S$ 仍然是 M 的子集, 因此根据相同的定义, 我们可以用 $\lambda(M)$ 个直径为 $D/4$ 的集合覆盖每个 S_i . 由于有 $\lambda(M)$ 个 S_i , 总共需要 $\lambda(M)^2$ 个直径为 $D/4$ 的集合覆盖 S .

重复这一过程, 我们可以覆盖 S 使用:

- $\lambda(M)$ 个直径为 $D/2$ 的集合;
- $\lambda(M)^2$ 个直径为 $D/4$ 的集合;
- $\lambda(M)^3$ 个直径为 $D/8$ 的集合;
- ...
- $\lambda(M)^{\log_2(\frac{2D}{r})}$ 个直径为 $D/2^{\log_2(\frac{2D}{r})} = \frac{r}{2}$.

由于 $\frac{r}{2}$ 直径的集合最多只能包含一个 r -net 中的点，因此 N 的大小受到以下限制：

$$|N| \leq \lambda(M)^{\log_2(\frac{2D}{r})} = (\frac{2D}{r})^{\text{ddim}(M)}.$$

□

r -net 的建立方法: Gonzalez 算法.

1. 从 P 中任取一个点 $p_1, S = \{p_1\}$
2. Do $p_j = \arg \max d(p_j, S), S = S \cup \{p_j\}$.
While $d(p_j, S) > r$
3. Return S

根据引理 5.3, $|S| < (\frac{D}{r})^\lambda$. 时间复杂度为 $\Theta((\frac{D}{r})^\lambda nd)$.

问题：如何降低建立 r -net 的复杂度？

Friend List 方法 [1].

核心理想：只在“局部”更新距离，而不是全局扫描。每次加入一个新的 center 时，那些“距离当前 center 集合的距离”会产生变化的数据点，只会存在于一些“可能受影响的簇”内。我们用 friend list 把“可能受影响的簇”限定在常数个 (与度量的倍增维度 λ 有关)，从而把一次迭代的代价降到 $\lambda^{O(1)}$ ，而非朴素 Gonzalez 中的 $O(nd)$ 。

数据结构：

1. Max heap H_α ：维护每个数据点 q 到类中心集合 S 的距离 α_q 。(大小为 n)
2. $C(p_i)$ ：维护每个类中心 p_i 负责的点集。(总大小为 n)
3. Friend list $F(p_i)$ ：与类中心 p_i 距离 $\leq 4r_k$ 的其他**类中心**。

单次迭代流程：

1. 从 H_α 弹出距离当前类中心集合 S 距离最远的点 p_j ，设其原本所属的类中心是 c 。
2. 建立新的类中心 p_j 。

3. 局部更新：只扫描两类簇中的所有数据点： c 负责的所有点、和 c 的 **friend list** 中的那些类中心负责的所有点。对每个需要更新的点 q ，我们重新计算 α_q ，并在需要时把 q 迁入新的簇 $C(p_j)$ 。

4. 生成 p_j 的 friend list。

时间复杂度改进：

由于每个类中心的 friend list 规模最多不超过 $O(c'^\lambda)$ (c' 为常数)，总的时间复杂度不超过 $O(c'^\lambda n \log n \log \frac{D}{r})$ ，进一步地，可以将这个复杂度降低至 $O(c'^\lambda n \log n)$ 。

References

- [1] S. Har-Peled and M. Mendel. Fast construction of nets in low dimensional metrics, and their applications. In *Proceedings of the twenty-first annual symposium on Computational geometry*, pages 150–158, 2005.