计算机应用数学课程论文

李新锋(11224014)

May 22, 2013

1 引言

Hessian LLE [1] 描述了一种将高维欧式空间流形M上的离散数据点，降到低维空间的方法。该方法从一个局部等距的概念框架中导出。在局部等距中流形M 被看做是欧式空间的一个黎曼子流形，对低维欧式空间连通子集也是局部等距的。由于该方法并不要求连通子集是凸集，因而该框架能够处理的情况比ISOMAP 方法更广泛。理论框架主要是求解方程$\mathcal{H}(f) = \int_M ||H_f(m)||_F^2$ 其中定义f:$M \to \mathcal{R}$, H_f表示f的Hessian矩阵, $\mathcal{H}f$对流形M上的Hessian矩阵的Frobenius范数求均值。为了定义Hessian，我们使用在流形M切平面上的正交坐标系。观察到，如果流形M确实是局部等距于低维欧式空间的一个连通子集，那么$\mathcal{H}f$有一个$(d+1)$维零空间，该零空间由一个常量函数和一个由原始等距坐标张成的d 维函数空间。因此等距坐标可以被恢复到线性等距。该方法可以看做是是LLE方法的修正，其理论框架可以看做是Laplacian eigenmaps框架的修正，其中将原来的Laplacian替换为基于Hessian的二次形式。

2 方法概述

LLE方法假设数据在流形M上，并且流形M被看做是周围欧式空间的黎曼子流形，与低维欧式空间的一个凸子集是全局等距的。然而存在不是全局等距的情况－－部分等距，因而凸子集的限制是不恰当的。HLLE主要解决部分等距的，非凸集的情况。

2.1 数学描述

假设有一个低维参数空间$\Theta \subset \mathcal{R}^d$ 和一个平滑映射$\psi : \Theta \to \mathcal{R}^n$,其中$d < n$. 那么称$M = \psi(\Theta)$为流形。向量$\theta$ 可以看做是一些控制参数，流形看做当参数改变时所有可能的测度信息$m = \psi(\theta)$. 关键工作是要从观测数据点m_i中恢复出潜在参数θ_i

给定流形上的数据点m_i 的集合，恢复出唯一的映射函数ψ和参数点θ_i，是不可能的。因为如果找到一个ψ是问题的解，那么总是可以找到另一个映射$\phi : \mathcal{R}^d \to \mathcal{R}^d$，那么将两个映射进行组合$\psi \circ \phi$就可以得到另外一个解。出于这种考虑我们需要做一些额外的假设从而使得取得的解唯一。

ISOMAP给出的两个假设是：

(ISO1)等距假设：映射函数ψ保留映射前后的两点之间的测地距不变，即

$$G(m, m') = |\theta - \theta'|, \forall m \leftrightarrow \theta, m' \leftrightarrow \theta'$$

(ISO2)凸集假设：参数空间Θ是$\mathcal{R}^d$空间的凸子集，即如果θ, θ' 是Θ空间的两个点，那么位于两点之间的线段$\{(1-t)\theta + t\theta' : t \in (0,1)\}$ 也位于Θ 内。

然而并非所有的问题中流形都是全局等距的，也并非所有的参数空间都是凸的，因而文章针对这些问题提出了更松的假设：

(LocISO1)等距假设：在每个点m足够小的范围内邻居，附近点m'到m的测地距等于其在参数空间内对应点θ和θ'之间的欧式距离。

(LocISO2)连通假设：参数空间Θ是$\mathcal{R}^d$中一个开放的连通子集。

假设$M \subset \mathcal{R}^n$是一个光滑流形，$T_m(M)$在点$m \in M$的切空间。考虑切空间是$\mathcal{R}^n$ 的一个子空间，我们可以讲每一个这样的切空间关联一个正交坐标系统通过使用内积的方式。

立即可以想到将$T_m(M)$看做是$\mathcal{R}^n$一个仿射子空间，与M相切于点m，原点$0 \in T_m(M)$等同于$m \in M$.m邻居中的每一个点$m' \in N_m$ 有唯一的最近邻点$v' \in T_m(M)$, 并且映射$m' \to v'$是光

滑的。在$T_m(M)$中的点的坐标由我们为$T_m(M)$选择的选择的正交坐标唯一确定。通过这种方式，我们可以获得$m \in M$邻居N_m的坐标，不妨设为$x_1^(tan, m), \cdots, x_d^(tan, m)$。

现在使用局部坐标来定义函数$f : M \rightarrow \mathcal{R}$的Hessian矩阵.假设$m' \in N_m$有局部坐标$x = x^(tan, m)$，那么规则$g(x) = f(m')$定义了一个函数$g : U \rightarrow \mathcal{R}$,其中$U$是$\mathcal{R}^d$中原点0的邻居。由于映射$m' \rightarrow x$是光滑的，因此函数$g$是二阶可导的。定义切平面坐标中$m$点出$f$的Hessian矩阵作为$g$的Hessian矩阵。

$$H_f^{tan}(m)_{i,j} = \frac{\partial}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial x_j}g(x)|_{x=0}$$

简而言之，在每一个点m处，我们使用切平面坐标和f的微分。我们把这种方式的构建简称为切Hessian矩阵.

现在我们考虑定义在C^2上的二次形式

$$\mathcal{H}(f) = \int_M \parallel H_f^{(tan)} \parallel_F^2 dm$$

其中dm表示在M上的有严格正密度的概率测度.$\mathcal{H}(f)$测度了f 在流形M上的平均弯曲程度。

定理. 假设$M = \psi(\Theta)$,其中Θ是$\mathcal{R}^d$的一个开放连通子集，ψ是将Θ局部等距嵌入$\mathcal{R}^n$的函数。那么$\mathcal{H}(f)$有一个$(d+1)$维零空间，包含一个常数函数空间和一个d维函数空间，由正交等距坐标张成。

推论. 在上述定理的假设之下，原始的等距坐标θ能够被恢复,通过为$\mathcal{H}(f)$的零空间设定一组合适的基。

2.2 算法步骤

HLLE algorithm:

Input: $(m_i$:$i = 1, ...N)$ a collection of N points in $\mathcal{R}_n$.
Parameters: d, the dimension of the parameter space; k, the size of the neighborhoods for fitting.
Constraints: $min(k, n) > d$.
Output: $(w_i : i = 1, 2, ..., N)$ a collection of N points in $\mathcal{R}^d$, the recovered parametrization.

Procedure:

- 确定邻居：对于每一个数据点$m_i, i = 1, ..., n$,确定其最近k 近邻的索引。记$\mathcal{N}_i$ 表示邻居节点的集合。对于每一个$\mathcal{N}_i, i = 1, ..., N$,组成一个$k * N$的矩阵$M^i$,每一行表示一个去中心化的邻居节点集合$m_j - \overline{m}_i, j \in \mathcal{N}_i$,其中$\overline{m}_i = Ave\{m_j : j \in \mathcal{N}_i\}$
- 获得切面坐标：对M_i做SVD分解，生成矩阵U,D,V; U是$k * min(k, n)$. U的前d列给出了点$\mathcal{N}_i$的切面坐标
- hjhj
- hjhj
- dhd
- ghgh

3 实验结果

4 小结与讨论

参考文献

[1] Donoho DL, Grimes C, Hessian eigenmaps:Locally linear embedding techniques for high-dimensional data, Proc Natl Acad Sci U S A. 2003 May 13: 100(10): 5591-5596