

一种优化的近邻保持嵌入降维算法研究

李燕燕¹, 闫德勤²

(1. 河北建筑工程学院, 河北 张家口 075000;

2. 辽宁师范大学, 辽宁 大连 116081)

摘要:近邻保持嵌入算法 NPE 是流形学习领域中一种重要的降维算法, 现已成功应用于很多领域, 例如人脸识别、语音识别等, 但在处理局部邻域信息量不足、存在短路以及流形曲率大等稀疏数据时, 原始数据的几何拓扑结构损坏严重。其主要原因是在邻域选择中没有对数据类间信息进行很好的区分。基于此, 提出了一种优化的近邻保持算法 (ONPE), 在 NPE 算法中对数据类间信息进行优化, 构造类间权重矩阵; 并在低维局部重建时引入类内密度信息, 从数据类内和类间两个维度出发, 更好地避免数据在近邻选取方向上的缺失。将 ONPE 算法应用于图像检索等实验, 结果表明在图像检索的实验中该算法有较高的查准率和查全率。ONPE 相对于 NPE 降维的时间复杂度并没有增加, 验证了算法的实用性和有效性。

关键词:近邻保持嵌入; 流形学习; 稀疏; 降维; 类别信息

中图分类号: TP18; TP391

文献标识码: A

文章编号: 1673-629X(2023)06-0028-07

doi: 10.3969/j.issn.1673-629X.2023.06.005

Research on an Optimized Nearest Neighbor Preserving Embedding Algorithm for Dimensionality Reduction

LI Yan-yan¹, YAN De-qin²

(1. Hebei University of Architecture, Zhangjiakou 075000, China;

2. Liaoning Normal University, Dalian 116081, China)

Abstract: The nearest neighbor preserving embedding algorithm (NPE) is an important dimensionality reduction algorithm in manifold learning, which has been successfully applied to many fields, such as face recognition, speech recognition, etc. However, when dealing with sparse data such as insufficient local neighborhood information, short circuit and large manifold curvature, the geometric topology of the original data is seriously damaged. The main reason is that the information between data classes is not well differentiated in neighborhood selection. Based on this, we propose an optimized nearest neighbor preserving algorithm (ONPE), which optimizes the inter-class information in the NPE algorithm, constructs the inter-class weight matrix, and introduces the intra-class density information in the low-dimensional local reconstruction. Starting from the two dimensions of data class and inter-class, we can better avoid the absence of data in the direction of neighbor selection. The experiment results show that the proposed algorithm has higher precision and recall ratio in the experiment of image retrieval. The time complexity of ONPE is not increased compared with NPE, which verifies the practicability and effectiveness of the algorithm.

Key words: nearest neighbor preserving embedding; manifold learning; sparse; dimensionality reduction; category information

0 引言

大数据环境下的高维数据在人脸识别、图像检索^[1-3]等领域有着广泛的应用前景, 是数据挖掘和模式识别领域的研究热点。但是高维数据具有冗余度大、空间维数高等特点, 难以发现其内在的特征规律。降维是消除高维数据维度上冗余的一种技术手段, 目的是克服维数灾难, 获取数据本质特征, 以实现数据可

视化。

降维分为线性降维和非线性降维。线性降维算法主要有主成分分析 (principal component analysis, PCA^[4])、多维尺度变换 (multidimensional scaling, MDS^[5])、线性判别分析 (linear discriminant analysis, LDA^[6]) 等。这类方法的优势在于处理线性结构的数据集时具有很好的降维效果。但现实生活中大多都是

收稿日期: 2022-08-08

修回日期: 2022-12-14

基金项目: 国家自然科学基金项目 (61105085); 河北省高等学校科学技术研究项目资助 (ZC2022013)

作者简介: 李燕燕 (1986-), 女, 硕士, 通信作者, 研究方向为数据降维等; 闫德勤 (1962-), 男, 教授, 博士, 研究方向为模式识别和数据挖掘等。

高维非线性数据,例如人脸数据,因此非线性降维方法应运而生。基于特征值的非线性降维方法是其中一个重要研究方向。这类方法是保持高维数据与低维数据的某个“不变特征量”以找到低维特征表示。主要的基于特征值的非线性降维算法有等尺度映射(isometric feature mapping, ISOMAP^[7])、局部切空间算法(Local tangent space alignment, LTSA^[8])、局部线性嵌入(locally linear embedding, LLE^[9])、拉普拉斯特征映射(Laplacian eigenmaps, LE^[10])、近邻保持嵌入(neighborhood preserving embedding, NPE^[11])等。ISOMAP算法保持的不变特征量是测地距离;LTSA算法保持的不变特征量是利用局部PCA投影后的局部线性化;LLE算法和NPE算法类似,保持的不变特征量都是局部重构系数;LE算法保持的不变特征量则是数据邻域关系。

目前,学者们已经在人脸识别^[12]、语音识别^[13]等众多领域对NPE算法展开了广泛的应用研究。例如,王志强对非控环境下获取的高维人脸图像进行降维研究,期望寻找一种映射或者投影,得到高维复杂数据中的低维本质结构^[14];Zhen Ye等人提出了基于稀疏或协同表示的降维方法,将稀疏或协同系数作为图像的权值,有效地减少重建误差^[15]。但是在进行线性重构时没有考虑到类间的权值信息以及类内的密度信息,因此在数据降维上仍有局限性。梁春燕等人通过构建邻接图以获得数据的局部邻域结构,同时通过有监督训练对数据进行类别标注^[16]。尽管考虑到了数据类间之间的信息情况,进一步提高数据的识别性能,但对数据类内信息欠学习,算法的性能需进一步提高。Sumet Mehta等人^[17]提出了一种加权邻域保持嵌入算法(WNPEE),构造了一个相邻图的集合,使得最近邻的数目 k 的选择是变化的,这种方法对邻域大小参数的敏感性相比NPE要低得多,尽管敏感度有所下降,但没有有效考虑到数据的类别信息,算法的优越性也会有所下降。

上述降维算法都有较强的计算优势,但是在处理局部邻域信息量不足、存在短路以及流形曲率大等稀疏数据时,原始数据的几何拓扑结构损坏严重。基于此,本文对NPE算法中的数据类间信息进行优化,构造类间权值矩阵,在邻域选择中可对数据类间信息进行很好的区分;并在低维局部重建时引入类内密度信息。从数据类内和类间两个维度出发,更好地避免数据在近邻选取方向上的缺失,提出了一种优化的近邻保持嵌入算法(optimal NPE, ONPE)。

为了验证ONPE算法的实用性和有效性,将ONPE算法与LLE、NPE在Coil-20数据库上进行了对比实验,并对实验结果进行了分析,证明了新算法具

有较强的鲁棒性。

1 NPE 算法

1.1 NPE 算法的思想

NPE算法是一种非常重要的子空间学习算法,认为每一个数据点都可以由其近邻点的线性加权组合构造得到。因此,NPE算法的降维原理是试图在降维过程中保持样本局部的线性结构不变,以在低维空间中进行二次特征提取。

假设高维空间 R^D 中有 N 个样本训练集 $\mathbf{X} = [\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N]$, $\mathbf{x}_i \in R^D$,通过LLE算法寻求一个最优的映射变换矩阵 \mathbf{M} ,将 \mathbf{X} 映射到低维空间 R^d 中,从而得到低维数据集 $\mathbf{Y} = [\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \dots, \mathbf{y}_N]$, $\mathbf{y}_i \in R^d$,且 $d \ll D$ 。

NPE算法可以归结为三步:

(1) 寻找每个样本点的 k 个近邻点。

NPE算法把 \mathbf{x}_i 表示成如公式(1)所示的凸组合形式,也就是 \mathbf{x}_i 可由 k 个最近邻线性表示,所以要求数据所在流形为凸集。

$$\mathbf{x}_i = \sum_{j=1}^k W_{ij} \mathbf{x}_j \quad (1)$$

在高维空间中寻找每个样本点的 k 近邻点。距离公式通常可以用式(2)表示:

$$d_{ij} = \left[\sum_{k=1}^D |x_{ik} - x_{jk}|^p \right]^{1/p} = \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|_p \quad (2)$$

一般选用 $P=2$,采用欧氏距离表示两点之间的实际距离。

(2) 计算出样本点的局部重建权值矩阵。

定义一个误差函数 $\varepsilon(\mathbf{W})$,其中 \mathbf{W}_{ij} ($i=1, 2, \dots, N$)可以存储在 $N \times N$ 的稀疏矩阵 \mathbf{W} 中,这个矩阵并不是对称的,即 $\mathbf{W}_{ij} \neq \mathbf{W}_{ji}$,对于两个近邻的点而言,它们各自的近邻程度是不同的。

$$\min \varepsilon(\mathbf{W}) = \sum_{i=1}^N \left\| \mathbf{x}_i - \sum_{j=1}^k W_{ij} \mathbf{x}_j \right\|_2^2 \quad (3)$$

其中, \mathbf{x}_j ($j=1, 2, \dots, k$)为 \mathbf{x}_i 的 k 个近邻点; W_{ij} 是 \mathbf{x}_i 与 \mathbf{x}_j 之间的权值,且要满足条件:

$$\sum_{j=1}^k W_{ij} = 1 \Leftrightarrow \mathbf{W}_i^T \mathbf{1}_k = 1 \quad (4)$$

其中, $\mathbf{W}_i = [W_{i1}, W_{i2}, \dots, W_{iN}]$ 为第 i 个样本点的局部重建权值。

(3) 将所有的样本点映射嵌入到低维空间 R^d 中。映射嵌入满足如下条件:

$$\min \varphi(\mathbf{Y}) = \sum_{i=1}^N \left\| \mathbf{y}_i - \sum_{j=1}^k W_{ij} \mathbf{y}_j \right\|_2^2 \quad (5)$$

利用权值向量 \mathbf{W}_{ij} 重构数据间的局部几何拓扑结构,并使局部重建损失函数 $\varphi(\mathbf{Y})$ 取值最小,从而得到低维嵌入数据集 $\mathbf{Y} = [\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \dots, \mathbf{y}_N]$ 。

NPE算法其实是一个线性重建的过程,利用局部

的线性来逼近全局的非线性,通过相互重叠的局部信息提供全局结构的信息。

1.2 NPE 算法降维失效的原因

总的来说,NPE 算法对局部邻域信息量不足、存在短路以及流形曲率大等稀疏数据降维失效有两个原因:一是 NPE 算法在 k 近邻选择时只是单纯利用欧氏距离确定样本点的线性结构,没有考虑到数据间的类别信息,可能使得不同类别的数据交织在一起,影响降维效果。二是稀疏数据间的密度变化较大,仅单纯利用 W_{ij} 进行低维几何拓扑结构的重建,不能很好地反映 k 近邻的密度信息。基于上述原因导致局部信息难以正确刻画,难以反映数据间的几何拓扑结构,导致降维失败。

2 改进的近邻保持嵌入 (ONPE)

2.1 类间权值的刻画

NPE 算法是用两数据点间重构权值 W_{ij} 来保持数据在低维空间的几何拓扑结构不变。但是 NPE 算法没有考虑到数据间的类别信息,在近邻选择时,容易把不同类别的数据划分到一个近似线性的局部流形结构中,从而造成在实际应用中无法揭示数据内在的真实结构,如图 1 所示。

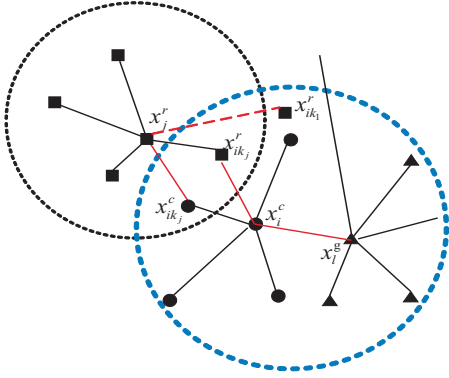


图 1 未考虑到类别信息的近邻选择情况

图 1 中用三种不同形状标识了三类数据集。当利用欧氏距离计算样本点 x_j^c 的 k 近邻时,会把与其不同类的 $x_{ik_j}^c$ 作为近邻,而把与其同类的 $x_{ik_i}^r$ 排除在外。同样地,在选择样本点 x_i^c 的近邻时,会把与其不同类的 $x_{ik_j}^r$ 和 x_j^s 作为近邻。也就是说,本不应该相连的样本点却连接在了一起,而本应该相连的样本点却没有连接在一起。这样利用两数据点间的重构权值 W_{ij} 进行低维嵌入时会造成不同类数据间的重叠,产生奇异现象(注:每个样本点仅属于一个类)。

为了解决上述问题,尽量使类内距离最小,而类间距离最大。因此,采取以下解决方案,一是在 ONPE 算法中引入了类间权值,以增加类间的离散度,使降维后不同类别之间具有最优的分离性。二是在类内引入密

度信息,并用密度信息来调整类内权值距离矩阵,以使类内分散度尽量小。

2.2 ONPE 算法的基本思想

假设高维空间中有数据集 $X = \{x_1, x_2, \dots, x_N\}$, $x_i \in R^D$, 将 X 嵌入映射得到低维空间中的数据集 $Y = \{y_1, y_2, \dots, y_N\}$, $y_i \in R^d$ ($d \ll D$)。将训练样本 X 分成 t 类, $X = (X_1, X_2, \dots, X_t)$, 低维嵌入为 $Y = (Y_1, Y_2, \dots, Y_t)^T$, ONPE 算法将公式(5)的目标函数定义为:

$$\begin{cases} \min \varphi(W) = \sum_{t=1}^t \sum_{i=1}^{n_t} \|y_i^t - \sum_{j=1}^{n_t} W_{ij}^t y_j^t\|_2^2 - \\ \sum_{t=1}^t \|u_t - \sum_{g=1}^g Z_{tg} u_g\|_2^2 \\ \text{s. t. } \sum_{j=1}^t W_{ij}^t = 1, \sum_{g=1}^g Z_{tg} = 1 \end{cases} \quad (6)$$

其中, y_i^t 和 y_j^t 分别是第 t 类的第 i 个和第 j 个嵌入向量; n_t 是第 t 类的嵌入向量总数; W_{ij}^t 为 y_i^t 和 y_j^t 之间的权值; u_t 和 u_g 分别是第 t 类和第 g 类的嵌入向量平均值, 且 $u_t = 1/n_t \sum_{i=1}^{n_t} y_i^t$, $u_g = 1/n_g \sum_{i=1}^{n_g} y_i^g$; Z_{tg} 是第 t 类和第 g 类之间的权值。

由于 NPE 算法的思想是要求每个局部邻域都是线性的,则有 $Y_t^T = M^T X_t$, 引入类间密度信息:

$$\alpha_i^* = \max \|x_i^t - x_j^t\|_2^2$$

$$\alpha_i^t = 1 - \alpha^* / \sum_{j=1}^k \|x_i^t - x_j^t\|_2^2$$

将上述公式(6)中的 $\varphi(W)$ 函数变化为:

$$\begin{aligned} \min \varphi(W) = & \sum_{t=1}^t \sum_{i=1}^{n_t} \|y_i^t - \alpha_i^t \sum_{j=1}^{n_t} W_{ij}^t y_j^t\|_2^2 - \\ & \sum_{t=1}^t \|u_t - \sum_{g=1}^g Z_{tg} u_g\|_2^2 \end{aligned} \quad (7)$$

对公式(7)进行化简:

$$\begin{aligned} \min \varphi(W) = & \sum_{t=1}^t \sum_{i=1}^{n_t} \|y_i^t - \alpha_i^t \sum_{j=1}^{n_t} W_{ij}^t y_j^t\|_2^2 - \\ & \sum_{t=1}^t \|u_t - \sum_{g=1}^g Z_{tg} u_g\|_2^2 = \\ & \|Y_t - W_t Y_t\|_2^2 - \sum_{t=1}^t \|s_t^T M - \\ & \sum_{g=1}^g Z_{tg} s_g^T M\|_2^2 = \\ & \|Y_t - W_t Y_t\|_2^2 - \|S^T M - Z S^T M\|_2^2 = \\ & \|(I - W_t) Y_t\|_2^2 - \|(I - Z) S^T M\|_2^2 = \\ & Y_t^T (I - W_t)^T (I - W_t) Y_t - \\ & M^T S (I - Z)^T (I - Z) S^T M = \\ & M^T X (I - W_t)^T (I - W_t) X^T M - \\ & M^T S (I - Z)^T (I - Z) S^T M = \\ & \text{tr}(M^T B_1 M - M^T B_1 M) = \\ & \text{tr}(M^T (B_1 - B_2) M) \end{aligned} \quad (8)$$

其中,

$$W_t = \begin{bmatrix} W_{11}^t & W_{12}^t & \cdots & W_{1n_t}^t \\ W_{21}^t & W_{22}^t & \cdots & W_{2n_t}^t \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ W_{n_t1}^t & W_{n_t2}^t & \cdots & W_{n_tn_t}^t \end{bmatrix} \in R^{n_t \times n_t}$$

s_t 和 s_g 是在高维 R^D 空间中第 t 类和第 g 类样本数据集的平均值。由于 $Y_t = MX_t^T$, 则有 $u_t = s_t^T M$, $u_g = s_g^T M$ 。

$$Z = \begin{bmatrix} Z_{11} & Z_{12} & \cdots & Z_{1g} \\ Z_{21} & Z_{22} & \cdots & Z_{2g} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ Z_{t1} & Z_{t2} & \cdots & Z_{tg} \end{bmatrix} \in R^{t \times g}$$

$$B_1 = X(I - W_t)^T(I - W_t)X^T$$

$$B_2 = S(I - Z)^T(I - Z)S^T$$

对于公式(8)的限制条件为 $YY^T = NI$, 结合约束条件, 将公式(8)改为:

$$L(M) = M^T(B_1 - B_2)M - \lambda(YY^T - NI) = M^T(B_1 - B_2)M - \lambda(M^TXX^TM)$$

利用 Lagrange 乘子, 则有:

$$\frac{\partial L}{\partial M} = 2(B_1 - B_2)M - 2\lambda XX^TM = 0$$

$$\Rightarrow 2(B_1 - B_2)M = 2\lambda XX^TM$$

根据上式可得 $M = (a_0, a_1, \dots, a_{d-1})$, 其中 a_0, a_1, \dots, a_{d-1} 为 $(XX^T)^{-1}(B_1 - B_2)$ 的广义特征值 $\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_{d-1}$ 所对应的特征向量。进而得到低维空间坐标为 $Y = M^T X$ 。

ONPE 算法的过程描述如下:

Step1: 初始数据集为 $X = \{x_1, x_2, \dots, x_N\} \in R^{D \times N}$, 并将原始数据集进行中心化处理, 使得原始数据集变为 $X(I - \frac{1}{n}ee^T)$;

Step2: 根据类标签信息, 计算每一类样本的类间

权重矩阵 W_t 和类内密度信息 α_t' ;

Step3: 计算 $(XX^T)^{-1}(B_1 - B_2)$, 将其进行特征分解, 得到特征值 $\lambda_0 > \lambda_1 > \dots > \lambda_d$ 及其对应的特征向量矩阵 $U = [a_0, a_1, \dots, a_d]$;

Step4: 取 U 的前 d 个最大特征值所对应的特征向量 $M = (a_0, a_1, \dots, a_{d-1})$, 得到 $Y = M^T X$ 。

3 实验结果及分析

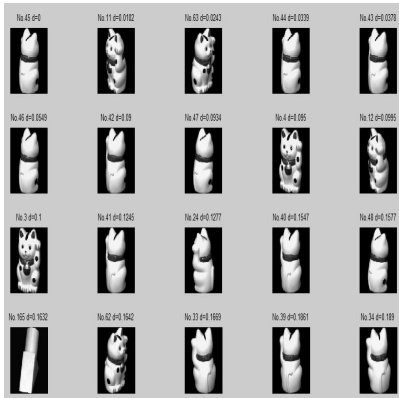
3.1 图像检索应用

实验采用 Columbia object image library 的 Coil-20 数据库作为实验对象, 此数据库共含 14 类不同的物体, 每类都是从 72 个不同角度拍摄得到的, 共 1 008 幅图像。

利用 LLE、NPE 和 ONPE 三种算法对 Coil-20 数据库进行图像检索。提取图像的 Zernike 矩作为图像的形状特征, 得到基于形状的特征空间。图 2 是分别利用 LLE、NPE 和 ONPE 三种算法对第 45 号图像作为目标图像进行检索的结果图, 并显示前 20 个图像的返回结果。

采用查准率 (Precision) 和查全率 (Recall) 作为图像相似度评价标准来验证 ONPE 算法的有效性^[18]。其中查准率 P 定义为检索结果队列中检索到的目标图像数与检索结果队列中所有的图像数之比, 即 $P = X/Y$, 其中 X 为目标图像数, Y 的值等于 20, 为结果队列中所有的图像数^[18]。查全率 R 定义为检索结果队列中检索到的目标图像数与数据库中全部的目标图像数之比, 即 $R = X/F$, F 的值等于 72, 为数据库中全部的目标图像总数^[18]。由精确度和查全率的定义可知, $P \in [0, 1]$, $R \in [0, 1]$ 。

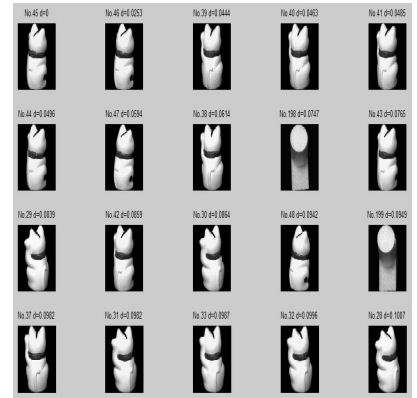
对 Coil-20 数据库中的 14 类图像分别进行图像检索, 并计算出各个图像的查准率和查全率, 如表 1 所示。通过表 1 的结果可以看出, 经过改进后的 ONPE 算法在查准率和查全率上明显优于 LLE 和 NPE。



(I) LLE



(II) NPE



(III) ONPE

图2 Coil-20 检索结果对比

表 1 LLE、NPE 和 ONPE 检索结果的查准率和查全率

图像	LLE			NPE			ONPE		
	相关图像 Y	查准率 P	查全率 R	相关图像 Y	查准率 P	查全率 R	相关图像 Y	查准率 P	查全率 R
招财猫	18	0.900	0.250	19	0.950	0.264	20	1.000	0.278
鸭子	17	0.850	0.236	18	0.900	0.250	20	1.000	0.278
Vaseline	12	0.600	0.167	17	0.850	0.236	19	0.950	0.264
轿车	5	0.250	0.069	7	0.350	0.097	18	0.900	0.250
ANAVIN	20	1.000	0.278	20	1.000	0.278	20	1.000	0.278
赛车	15	0.750	0.208	17	0.850	0.236	18	0.900	0.250
积木	14	0.700	0.194	14	0.700	0.194	20	1.000	0.278
药瓶	18	0.900	0.250	20	1.000	0.278	20	1.000	0.278
TYLENOL	13	0.650	0.181	14	0.700	0.194	17	0.850	0.236
圆瓶盖	6	0.300	0.083	9	0.450	0.125	17	0.850	0.236
小伞	10	0.500	0.139	13	0.650	0.181	20	1.000	0.278
小猪	11	0.550	0.153	20	1.000	0.278	20	1.000	0.278
杯子	20	1.000	0.278	20	1.000	0.278	20	1.000	0.278
跑车	8	0.400	0.111	12	0.600	0.167	16	0.800	0.222

再用排序方法作为评价指标,通过图像检索的结果,可得到与样本图像相关的图像 Y 的排序序号 P_i , 根据公式 $AVG = 1/R \sum_{i=1}^R P_i$ 可计算相关图像的平均排序, $AVGR = F/2$ 表示在理想情况下的相关图像平均排序。 $AVG/AVGR$ 表示相似图像排在前面的程度。

由于返回每类图像总数是 20 个,每类图像总数为 72 个,所以 $AVG/AVGR$ 越小越接近 0.300,越能证明检索效果优良。通过对比表 2、表 3 和表 4,可见 ONPE 的 $AVG/AVGR$ 的值是越小越接近于 0.300,检索效果较优。

表 2 LLE 的检索结果平均排序

图像	F	Y	P_i	AVG	AVGR	AVG/AVGR
招财猫	72	18	1-8,10-14,16-20	10.333	36	0.287
鸭子	72	17	1-4,7-10,12-20	11.059	36	0.307
Vaseline	72	12	1-3,8,14-20	11.083	36	0.308
轿车	72	5	1,6,17,19-20	12.600	36	0.350
ANAVIN	72	20	1-20	10.500	36	0.291
赛车	72	15	1,3-4,6-9,11-14,16-19	10.533	36	0.293
积木	72	14	1-4,6-10,13,15,17-19	9.429	36	0.262
药瓶	72	18	1-7,9-13,15-20	10.444	36	0.290
TYLENOL	72	13	1,7-11,13-15,17-20	12.462	36	0.346
圆瓶盖	72	6	1,3,5,14,17,19	9.833	36	0.273
小伞	72	10	1,4,7,10-14,16,18	10.600	36	0.294
小猪	72	11	1,3-5,11-14,17,19,20	10.818	36	0.301
杯子	72	20	1-20	10.500	36	0.291
跑车	72	8	1,5,12,14,16-17,19-20	13.000	36	0.361

表 3 NPE 的检索结果平均排序

图像	F	Y	P_i	AVG	AVGR	AVG/AVGR
招财猫	72	19	1-7,9,11-20	10.105	36	0.280
鸭子	72	18	1-3,5-9,11-20	10.899	36	0.302
Vaseline	72	17	1,2,4-10,12-19	11.529	36	0.320

续表 3

图像	F	Y	P_i	AVG	AVGR	AVG/AVGR
轿车	72	7	1,3,6,10,15,18-19	10.286	36	0.285
ANAVIN	72	20	1-20	10.500	36	0.291
赛车	72	17	1,3-11,13,17-20	10.706	36	0.297
积木	72	14	1,3,6,8-13,16-20	11.643	36	0.323
药瓶	72	20	1-20	10.500	36	0.291
TYLENOL	72	14	1-3,5,8-10,12-15,17-19	11.071	36	0.308
圆瓶盖	72	9	1-2,4-7,12-14,18	9.111	36	0.253
小伞	72	13	1-3,8-11,13-16,18-19	10.692	36	0.298
小猪	72	20	1-20	10.500	36	0.291
杯子	72	20	1-20	10.500	36	0.291
跑车	72	12	1,4,6-9,11,13-15,17,18	10.250	36	0.285

表 4 ONPE 的检索结果平均排序

图像	F	Y	P_i	AVG	AVGR	AVG/AVGR
招财猫	72	20	1-20	10.500	36	0.291
鸭子	72	20	1-20	10.500	36	0.291
Vaseline	72	19	1-15,17-20	10.211	36	0.284
轿车	72	18	1,3-13,15-20	10.778	36	0.299
ANAVIN	72	20	1-20	10.500	36	0.291
赛车	72	18	1-3,5-19	10.333	36	0.287
积木	72	20	1-20	10.500	36	0.291
药瓶	72	20	1-20	10.500	36	0.291
TYLENOL	72	17	1-8,10-16,19-20	9.765	36	0.271
圆瓶盖	72	17	1-6,8,10-11,13-20	10.706	36	0.297
小伞	72	20	1-3,8-11,13-16,18-19	10.692	36	0.298
小猪	72	20	1-20	10.500	36	0.291
杯子	72	20	1-20	10.500	36	0.291
跑车	72	16	1-4,6,8-9,12-20	11.063	36	0.307

最后再做进一步精确判断,由于检索出来的图像的显示顺序(由左到右,由上到下)是按照图像间的相似距离由小到大进行排列的。因此,当越排在前面的图像越与目标图像相似时,说明算法越优。通过图 2 可见,利用 ONPE 检索出的 20 个图像全都是想要得到的目标图像,并且与样本图像相似的图像均排在前 19 位,只有一个图像与样本图像稍有差别,它则是排在最后一位的。而 LLE 和 NPE 均没有这样的优势效果。这也体现出提出的 ONPE 算法在提取图像的 Zernike 矩作为图像的形状特征时,有效地保持了 Zernike 矩的旋转不变性。因此,在检索的精确性上来说相对于 LLE 和 NPE 较高。

3.2 实验结果分析

从上述实验可以看出,NPE 和 LLE 作为经典的流形学习算法,均能保持流形的局部结构不变。但 ONPE 在处理稀疏数据时降维效果却远优于 NPE 和

LLE,其主要原因分析如下:

(1) ONPE 算法考虑到数据间的类别信息,引入了类间权值矩阵,类间距离对数据类别的可分性起着重要作用。在特征选择和特征提取时,可确保使得类间分散度尽量大。

(2) NPE 算法在低维线性嵌入中认为高维空间中数据是等密度的,这样便丢失了某一类别数据 x_i^l 的 k 个近邻点的密度信息。因此,在 ONPE 算法中引入密度信息,并用密度信息来调整类内权值距离矩阵,以使类内分散度尽量小。

3.3 时间复杂度分析

降维算法的时间复杂度主要是由数据点的个数 N 、原始维数 D 以及近邻点的个数 k 进行确定。

LLE 和 NPE 算法的时间复杂度均是 $o(pN^2)$ (其中 p 是稀疏矩阵中非零元与零元的比率)。ONPE 同 NPE 在算法执行过程中不同之处在于类间权值矩阵

和类内密度信息的构造,计算类间权值矩阵所需时间为 $o(2DN^2)$,计算类内密度信息所需时间为 $o(kN)$ 。综上,ONPE 的时间复杂度亦是 $o(pN^2)$,类间权值矩阵和密度信息的计算并没有增加算法总的复杂度。

4 结束语

该文对经典的流形学习算法 LLE 和 NPE 进行研究,针对处理局部邻域信息量不足、存在短路以及流形曲率大等稀疏数据时失效的问题,提出了一种优化的近邻保持嵌入降维算法 ONPE。在 ONPE 算法中引入了类间权值,以增加类间的离散度,使降维后不同类别之间具有最优的分离性;在类内引入密度信息,并用密度信息来调整类内权值距离矩阵,以使类内分散度尽量小。ONPE 算法能够更好地保持稀疏数据的原始几何拓扑结构,具有鲁棒性。通过在手工流形、图像检索、可视化等实际领域中的应用,证明了算法的实用性和有效性。

对于该算法进一步的工作思路,是降低邻域大小参数的敏感性,由于 ONPE 算法对于每个样本点的 k 近邻的选取是固定的,因此对于不同类别数据间近邻选取方向上会造成偏差。当处理含有噪声或者局部信息量不足的数据集时,找到一个较恰当的邻域个数对于降维效果的影响还是非常大的。因此,可引入压缩感知技术进行子空间的优化,减少降维过程中由于近邻个数选取的不当带来的误差,从而增加了算法的稳定性。

参考文献:

- [1] 成亚丽,秦飞龙,李政文.改进 LDP 结合几何特征融合的人脸表情识别[J].计算机工程与设计,2021,42(9):2577-2584.
- [2] 张泓,范自柱,王松,等.特征空间中的拓展稀疏人脸识别[J].重庆大学学报,2020,43(11):21-28.
- [3] TONG Ying, ZHANG Jiachao, CHEN Rui. Discriminative sparsity graph embedding for unconstrained face recognition[J]. Electronics Newsweekly, 2019, 8(503):1479-1500.
- [4] JOLLIFFE I. Principal component analysis[M]. [s. l.]: John Wiley & Sons, Ltd., 2005.
- [5] COX T, COX M. Multidimensional scaling[M]. London: Chapman&Hall, 1994.
- [6] HOU Q L, WANG Y J, JING L, et al. Lineardis-criminant analysis based on kernel-based possibilistic c-means for hyperspectral images[J]. IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters, 2019, 16(8):1259-1263.
- [7] TENENBAUM J B, DE SILVA V, LAGFORD J C. A global geometric framework for nonlinear dimensionality reduction[J]. Science, 2000, 290(5500):2319-2323.
- [8] ZHANG Z, ZHA H. Principal manifolds and nonlinear dimensionality reduction via tangent space alignment[J]. Journal of Shanghai University (English Edition), 2004, 8(4):406-424.
- [9] ROWEIS S T, SAUL L K. Nonlinear dimensionality reduction by locally linear embedding[J]. Science, 2000, 290(5500):2323-2326.
- [10] BELKIN M, NIYOGI P. Laplacian eigenmaps for dimensionality reduction and data representation[J]. Neural Computation, 2003, 15(6):1372-1396.
- [11] SONG B, TAN S, SHI H B. Process monitoring via enhanced neighborhood preserving embedding[J]. Control Engineering Practice, 2016, 50:48-56.
- [12] HU Liangchen, ZHANG Wensheng. Orthogonal neighborhood preserving discriminant analysis with patch embedding for face recognition[J]. Pattern Recognition, 2020, 106:1-14.
- [13] VURAL E, GUILLEMOT C. A study of the classification of low-dimensional data with supervised manifold[J]. Journal of Machine Learning Research, 2018, 18:1-55.
- [14] 王志强.基于稀疏图映射的非控人脸图像降维识别研究[D].南京:南京邮电大学,2020.
- [15] YE Zhen, SHI Shihao, CAO Zhan, et al. Graph-based dimensionality reduction for hype-rspectral imagery: a review[J]. Journal of Beijing Institute of Technology, 2021, 30(2):91-112.
- [16] 梁春燕,曹伟.基于邻域保持嵌入算法的语种识别[J].陕西师范大学学报:自然科学版,2020,48(2):38-42.
- [17] MEHTA S, ZHAN Bisheng, SHEN Xiangjun. Weighted neighborhood preserving ensemble embedding[J]. Electronics, 2019, 8(2):1-18.
- [18] 李燕燕,闫德勤,刘胜蓝,等.一种基于局部线性嵌入的多流形学习算法[J].小型微型计算机系统,2012,33(8):1795-1799.