根拉普拉斯特征映射及其在谱嵌入中的应用

Shouvik Datta Choudhury

shouvikdc8645@gmail.com

shouvik@capsulelabs.in

关键词：拉普拉斯算子、根拉普拉斯算子、微分几何、深度学习

摘要

根拉普拉斯算子，即拉普拉斯算子的平方根，可在 Gromov 意义下的完备黎曼流形上获得；在图论中也有对应概念，即图拉普拉斯算子的平方根。一些潜在应用已在几何深度学习（谱聚类）和图信号处理中得到展示。

1. 引言

我们的论文与 Belkin 和 Niyogi 的论文，其核心都是拉普拉斯算子等算子的谱定理。拉普拉斯算子是一种秩为 0 的伪微分算子，而积分微分算子是其子类。伪微分算子和积分微分算子都用于代数几何的微局部分析，在其中，它们被用作 D-模和凝聚层发展的一种不同表述。微局部分析是数学的一个分支，研究偏微分方程（PDE）在其定义域内奇异点（也称为特征点）附近的解的行为。它是理解偏微分方程的性质及其所产生解的有力工具，并应用于量子力学、光学和控制理论等领域。微局部分析所用的技术包括傅里叶积分算子、波前集和伪微分算子。层被用作分布式计算、拓扑信号处理和拓扑数据分析（机器学习的一个分支，由 Gunnar Carlsson 等人开创）理论表述中的数据结构。宽泛地说，在构造“预层”之后，层是由拓扑流形中不相交集合上的映射或函数汇集而成的集合，从而每个层中编码的局部数据都能传递到全局层。 在图信号处理中，层和预层的概念可用于建模图信号的局部变化和全局变化。层和预层是数学结构，使我们能够研究定义在拓扑空间（例如图）上的函数的行为，并且这种研究对于底层空间的变化具有稳健性。图上的预层是一组定义在图的开集（例如每个顶点的邻域）上的函数，并且这些函数与图的拓扑相一致。预层为每个顶点指定一个函数，称为局部截面，用来描述信号在该顶点邻域中的行为。预层还为图的每个开集指定一个函数，称为限制映射，用来描述不同顶点上的局部截面之间的关系。层是

还满足粘合性质的预层；该性质指出，不同顶点上的局部截面在其定义域的交集上必须一致。这一性质确保不同顶点上的局部截面可以“粘合”在一起，形成一个在整个图上都有定义的全局函数。层和预层提供了一种建模图信号变化的方法，并且这种方法对于底层图的变化具有稳健性。它们使我们能够研究信号在每个顶点处的局部行为，以及信号在整个图上的全局行为。这对于图信号去噪和压缩，以及图顶点的聚类和分类等任务都很有用。在本文中，我们致力于证明某类算子的唯一性和存在性：拉普拉斯算子的一个“平方根”。该平方根通过取拉普拉斯算子特征值的正平方根得到，其存在性既由巴拿赫代数的交换情形和冯·诺依曼代数的非交换情形所保证，也由加藤猜想的陈述和证明所确定的、它可能在希尔伯特空间中的“位置”所保证。 加藤平方根猜想是一项数学猜想，指出对于一大类微分算子，算子的平方根是定义良好且有界的算子。该猜想以日本数学家加藤敏夫命名，他于20世纪50年代首次提出了这一猜想。该猜想适用于对称且具有紧逆算子的微分算子。若一个微分算子等于其伴随算子，则称其为对称算子；若其逆算子将定义域的一个稠密子集映射到值域的一个紧子集，则称其具有紧逆算子。满足这些条件的算子包括黎曼流形上的拉普拉斯算子，以及量子力学系统中的薛定谔算子。该猜想指出，对于这类算子，其平方根是定义良好且有界的算子，也就是说，它将定义域的一个稠密子集映射到值域的一个稠密子集，且其范数有限。平方根的存在性和唯一性，使我们能够考虑在机器学习的谱嵌入场景以及 Bronstein 等人开创的几何深度学习场景中实现平方根。图数据结构构成了几何深度学习中最乐观和最务实场景的基础。几何深度学习力图涵盖黎曼结构和芬斯勒结构等非欧几里得数据，从而对神经网络作出广泛推广，使人们能比研究欧几里得情形时更好地理解数据或信号的不同特征，例如噪声和离群值。映射，尤其是嵌入的狄利克雷“能量”，衡量的是拉普拉斯“能量”，也就是连续情形中由拉普拉斯算子或黎曼流形上的拉普拉斯-贝尔特拉米算子所描述的映射程度或参与程度；在离散谱情形中，则由图的邻接矩阵“拓扑”所导出的图拉普拉斯算子来描述。在谱图论的情形下，图或离散狄利克雷能量衡量一条“线”或测地线的嵌入效应，因为根据霍普夫-里诺定理，任何紧黎曼流形在所有情况下都存在一条闭测地线。该定理是流形的基本定理，不依赖于任何结构（此处“结构”指具有长度测度的度量空间，其中长度测度既包括勒贝格意义下的，也包括黎曼意义下的测度，还包括博雷尔测度）。

一种称为拉普拉斯算子的微分算子，以颇具影响力的数学家皮埃尔-西蒙·拉普拉斯命名。微分算子是一种算子，其基础是线性、非线性，或更一般情况下的多重线性映射。在……的语境中，这种算子会将一个赋范或非赋范空间变换或“映变”为另一个空间

各种空间理论，例如巴拿赫空间和希尔伯特空间，在其指定的作用下转变为另一个空间；简单来说，这种作用就是微分的扩展。积分微分是积分与微分的结合，而微分算子是积分微分的一种。微分算子属于更大的积分微分类别。它们在科学和工程学中有着广泛的应用，例如用于许多数学变换和核变换，包括拉普拉斯变换。它们在微分几何中也有重要应用，特别是在研究著名的几何流时，例如里奇流、亚马贝流及其关键导数；这些都促进了对流形结构与行为的研究。拉普拉斯运算还能够实现映射的微分同胚结构，而这种结构是流形固有的。流形由其内在结构定义。此外，拉普拉斯算子在物理学中弦理论整体及量子场论泛函的发展过程中发挥着不可或缺的作用。这一作用至关重要。拉普拉斯算子也是数学和物理学中许多重要基础构件的重要组成部分，这一点在连续拉普拉斯流这一新兴几何流的构造中得到了充分体现。该流很好地展示了拉普拉斯算子如何在这些领域发挥重要作用。使用图像处理软件处理图像时，拉普拉斯算子可用作边缘检测算子。使用算子分析不确定或可变对象时，通常需要将其映射到另一语境或空间，以便全面分析其属性，无论这些属性多么细微。之所以需要使用函数或映射，道理也相同。每种物理现象及其内在的“变动”都可以用微分方程建模，这正是函数、映射或算子的核心思想。在这些方程中，拉普拉斯算子是其中大多数方程的重要特征。托普斯理论和 n-范畴理论中出现了“彻底的”极端推广，其抽象性带来了系统而统一的视角。范畴论提供了极端推广：在其中，通常语境下的每个函数或映射都被对象及其相关态射和其他微妙结构所取代。连续拉普拉斯算子也推广为拉普拉斯-贝尔特拉米算子，该算子在黎曼和芬斯勒两种视角下均适用于流形。可以从两个视角理解这一算子：黎曼视角和芬斯勒视角。代数的范畴论观点应用于多种情境，包括理论计算机科学、黎曼几何以及机器学习的各种理论层面，从而为抽象分析提供深刻的框架。每一种物理现象都可以还原为其本体，而本体是连续的底层基础。连续性概念为任意空间中的可微性提供了有效而可靠的支撑结构，也为随后探索完整的数学领域提供了基础。为复杂数据开发恰当的表示，是机器学习和模式识别中的核心难题之一。我们考虑如何为嵌入高维空间的低维流形上的数据生成表示这一问题。我们提出一种由几何驱动的方法，根据根拉普拉斯算子、流形上的拉普拉斯-贝尔特拉米算子及其与热方程之间的联系，来表示高维数据。该算法提出了一种计算效率高且保留局部性的非线性方法

降维，与聚类存在自然联系。本文探讨了若干潜在应用和示例。

2. 文献综述与后续比较

在本研究中，我们探讨了一种构建图的方法，该图融合了数据集中的邻域信息。借助图拉普拉斯算子的平方根这一概念，我们构建了数据集的低维表示，理想情况下可保留局部邻域信息。该方法生成的表示映射可视为一种连续映射的离散近似，而这种连续映射自然源自流形的形状。

此处所述分析的算法和框架有几个值得强调的特点：

基本算法相当简单。它需要进行若干次局部计算，并求解一个稀疏特征值问题。所得解表示流形内在的几何结构。然而，还需要在高维空间中搜索相邻对象。我们发现，已有多种有效的近似方法可用于寻找最近邻（例如 Indyk，2000年）。该算法的理论依据是拉普拉斯-贝尔特拉米算子能够为流形提供最佳嵌入。由数据点导出的邻接图对流形进行近似。拉普拉斯-贝尔特拉米算子与邻接图中恰当选取的加权拉普拉斯算子近似建立了联系。拉普拉斯-贝尔特拉米算子在热方程中的核心作用，使我们能够利用热核系统地选择权重衰减函数。因此，数据嵌入映射与拉普拉斯-贝尔特拉米算子的特征映射相联系；这些特征映射是在整个流形上内在定义的映射。为了从几何角度理解降维方法，本研究框架明确利用了这些联系。尽管拉普拉斯-贝尔特拉米算子与根图拉普拉斯算子之间的联系已为几何学家和谱图论专家所熟知（Chung，1997年；Chung、Grigor'yan 和 Yau，2000年），但除 Belkin 和 Niyogi 的框架外，我们尚未发现有人将其应用于降维或数据表示。Kondor 和 Lafferty（2002年）率先将扩散核应用于图及其他离散结构。由于拉普拉斯算子平方根特征映射技术能够保持局部性，因此对离群值和噪声相对不敏感。此外，由于它仅使用局部长度，因此不会受到短路效应的影响。我们证明，试图在嵌入中保持局部信息，会使该方法间接凸显数据的自然簇。由此便可清楚地看出，它与学习和计算机视觉领域中发现的谱聚类技术（即 Shi 和 Malik，1997年提出的方法）密切相关。本文将深入探讨降维与聚类之间的这种关系。相比之下，Tenenbaum 等人（2000年）提出的全局方法旨在保留位置之间所有成对的测地距离，并没有表现出任何聚类倾向。由于 Seung 和 Lee（2000年）、Roweis 和 Saul（2000年）以及 Tenenbaum 等人（2000年）的讨论，大多源于非线性降维在人体感知和学习中可能发挥的作用，因此有必要思考

前述观点在这一背景下的含义。生物感知装置必须从高维刺激中提取低维结构。如果恢复此类低维结构的策略本质上具有局部性（如所提出的算法），那么自然聚类便会出现，并可能成为生物感知中形成类别的基础。由于我们的方法基于流形的基本几何结构，因此其嵌入具有稳定性。只要嵌入保持等距，表示就不会改变。在移动摄像机的示例中，不同的摄像机分辨率（即对n的不同选取，在$n乘以n$图像网格中）应当会将同一个底层流形嵌入到维数大不相同的空间中。无论分辨率如何，我们的方法都会生成等价的表示。

随后，我们将问题缩小到降维这一综合性问题。给定 R^l 中的一组 k 个点 $\mathbf{p}_1$、…、$\mathbf{p}_k$，选择 R^m（$m \ll l$）中的一组点 $\mathbf{q}_1$、…、$\mathbf{q}_k$，使得 $\mathbf{q}_i$ “代表”$\mathbf{p}_i$。本文将研究范围转向特定情形：$\mathbf{p}_1$、…、$\mathbf{p}_k \in \mathrm{M}$，且 M 是嵌入 R^l 中的流形。针对这一特定情形，我们将开发一种最优算法，以可控的方式安排代表点 $\mathbf{q}_i$。

我们的框架与上述论文框架之间可能存在的差异非常细微。总体而言，区别在于我们创建了一个新矩阵，该矩阵由原矩阵的特征向量的平方根构造而成。需要事先说明，本文中对矩阵或特征向量所取的所有平方根均为正值，即对正的被开方数取正平方根。这个新矩阵的元素均为实数；但按照奇异值分解的术语，原矩阵的根特征向量就是原矩阵的平方根。由于原矩阵（即图拉普拉斯算子或组合拉普拉斯矩阵）具有半正定性，因此该平方根是唯一的。如果采用这种技术，它将在各个方面以及各种跨学科场景中有许多有趣的应用，本文后续将对此进行阐述。有趣的是，我们采用实数域，以避免数据“重复”；若在难以“去重”的复数域中进行运算，可能会因纳入过多重复数据而导致这一问题。

3. 算法

给定 k 个点 $\mathbf{p}_1, \ldots, \mathbf{p}_k \in \mathrm{R}^l$，我们构造一个包含 k 个节点的加权图，每个节点对应一个点，并用一组边连接相邻的点。现在，通过计算图拉普拉斯算子的平方根的特征向量来构造嵌入映射。算法步骤正式表述如下。

1 步骤 1（邻接图组装）。如果 $\mathbf{p}_i$ 和 $\mathbf{p}_j$ 处于近邻域内，我们就在节点 i 和 j 之间构造一条边。有两种视角：(a) $\epsilon -$ 邻域（参数为 $\epsilon \in \mathrm{R}$）。如果 $\|\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_j\|^2 < \epsilon$，则节点 i 和 j 通过一条边相连，其中空间的范数为 R^l 中的欧几里得范数。

(b) n 最近邻（参数为 $n \in \mathrm{N}$）。节点 i 和 j 通过一条边相连，当 i 属于 n 的最近邻 j 或 j 属于 n 的最近邻 i时成立。这种连接具有恰当的对称性。

2 步骤 2（权重选择）。1 边的权重有两种典型方案：(a) 热核（参数 $t \in \mathrm{R}$）。如果节点 i 和 j 相连，则设为

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

否则，设为 $W_{ij} = 0$。稍后将说明这种权重选择的理由。在计算机实现中，算法的步骤 1 和步骤 2 会同时进行。(b) 平凡情形（无参数（ t 视为 ∞））。如果顶点 $W_{ij} = 1$ 和 i 由一条边相连，则为 j； 如果顶点 i 和 j 之间没有边相连，则为 $W_{ij} = 0$ 。这种做法无需选择 t。

3 步骤 3（特征映射构造）。假设上述构造的图 G是连通的。否则，对每个连通分量分别执行步骤 3。求解广义特征向量问题，计算其特征值和特征向量：

$$\xi\mathbf{f} = \sqrt{|\lambda D\mathbf{f}|},$$

其中， D 是对角权重矩阵，其元素为 W、 $D_{ii} = \sum_j W_{ji}$的列和（或行和，因为 W 是对称的）。 $L = D - W$ 是典型的拉普拉斯矩阵。拉普拉斯矩阵是对称的半正定矩阵，可表示定义在图 G顶点上的函数所对应的算子。S 是一个半正定矩阵，是图拉普拉斯矩阵 L的平方根。其存在性和唯一性在 []中有详尽描述。 λ 已将拉普拉斯算子的特征值标记为。考虑 $\mathbf{f}_0$， ……， $\mathbf{f}_{k-1}$ 为方程 2.1 的解，并按其特征值排序：

$$\begin{aligned}
&\xi\mathbf{f}_0 = \sqrt{|\lambda_0 D\mathbf{f}_0|}\\
&\xi\mathbf{f}_1 = \sqrt{|\lambda_1 D\mathbf{f}_1|}\\
&\xi\mathbf{f}_{k-1} = \sqrt{|\lambda_{k-1} D\mathbf{f}_{k-1}|}\\
&0 = \sqrt{|\lambda_0|} \le \sqrt{|\lambda_1|} \le \cdots \le \sqrt{|\lambda_{k-1}|}
\end{aligned}$$

我们舍弃对应于特征值 $\mathbf{o}$ 的特征向量 $\mathbf{f}_0$ ，并使用接下来的 m 个特征向量，在 m 维欧几里得空间中进行嵌入：

$$\mathbf{p}_i \to (\mathbf{f}_1(i), \ldots, \mathbf{f}_m(i))$$

嵌入质量

映射的膨胀和失真概念由数学家 Mikhail Gromov 在度量空间的背景下提出。这些概念用于衡量两个度量空间之间的映射对点与点之间距离的拉伸或扭曲程度。两个度量空间之间映射的膨胀衡量的是它在多大程度上

扩大点与点之间的距离。它定义为两个点的图像之间的距离与原始点之间距离的最坏情况比值。更形式化地说，若 f 是从度量空间 (X,d) 到度量空间 (Y,d') 的映射，则 f 的膨胀定义为：

$$\text{dilation}(f) = \sup\{\frac{d'(f(x), f(y))}{d(x, y)}\}$$

其中，x 和 y 是 X 中的点，d'(f(x),f(y)) 是 x 和 y 在 Y 中的图像之间的距离。映射的膨胀始终大于或等于 1，其中 1
表示该映射保持点之间的距离，大于 1 的值则表示该映射扩大了距离。两个度量空间之间映射的失真是衡量该映射对向量之间夹角造成多大失真的指标。它定义为两向量图像之间的夹角与原向量之间夹角的最坏情况比值。两个度量空间之间映射的失真是衡量该映射对向量之间夹角造成多大失真的指标。它定义为两向量图像之间的夹角与原向量之间夹角的最坏情况比值。更正式地说，若 f 是从赋范向量空间 (X,||.||) 到赋范向量空间 (Y,||.||') 的映射，则 f 的失真定义为：

$$\text{失真}(f) = \sup\{||f(v)||'/||v||/||f(w)||'/||w||\}$$

其中 v 和 w 是 X 中的向量，||.||' 是 Y 中的范数。映射的失真总是大于或等于 1，其中 1 表示该映射保持向量之间的角度，而大于 1 则表示该映射扭曲了角度。Gromov 使用这些概念研究度量空间的大尺度几何，并定义了格罗莫夫双曲空间的概念。膨胀和失真可用于衡量度量空间之间映射的大尺度性质，并根据其行为对这些映射进行分类。Gromov 在这一领域的研究对几何群论领域以及度量空间几何性质的研究产生了重大影响。

失真的概念与线性算子的特征值密切相关，尤其是在特征值问题的背景下。失真衡量线性算子对向量之间角度的扭曲程度，而特征值衡量线性算子对向量的缩放程度。线性算子是将向量空间映射到其自身并保持该空间线性结构的函数。线性算子的特征值是满足以下方程的标量：

$$Av = \lambda v$$

其中，A 是算子，λ 是特征值，v 是特征向量。线性算子的特征值用于研究算子的性质，例如其稳定性、对称性和奇异性。线性算子的失真与特征值相关，因为它由算子的特征值之比决定。更具体地说，线性算子的失真是最大特征值与最小特征值之比。

$$\text{Distortion}(A) = \lambda_\text{max}/\lambda_\text{min}$$

信号处理操作的质量通常通过其保留图信号某些属性的程度来衡量，例如图频率内容或信号的平滑度。图拉普拉斯矩阵的特征值与图频率内容密切相关，可用于衡量信号处理操作的质量。图信号处理中常用的一个质量参数是谱失真，它衡量信号处理操作对图频率内容造成的失真程度。谱失真定义为信号处理操作后图拉普拉斯矩阵的最大特征值与原始图拉普拉斯矩阵最大特征值之比。

图信号处理中使用的另一种质量参数是顶点频率失真，它衡量信号处理操作对信号平滑度的影响。顶点频率失真定义为处理后信号的顶点频率分量之间最大绝对差值与原始信号的顶点频率分量之间最大绝对差值之比。图信号处理中还使用其他质量参数，例如能量失真，它衡量处理操作后信号能量的保留程度；方差失真

是用于衡量信号处理操作在多大程度上保留了图信号的某些属性（如图频率内容和信号平滑度）的质量参数。

在图信号处理中，信号定义在图的节点上，而非像传统信号处理中那样定义在规则网格上。图信号处理的目标是设计能够处理图上的信号并从中提取有用信息的算法。图信号处理中常用的关键操作包括滤波、去噪、压缩和分类。这些操作通常针对定义在图节点上的信号执行。

显然，在信号处理和流形上的图嵌入中，如果节点上的信号处理保持不变，那么当特征值均为正实数时，与较大的特征值相比，较小的特征值能够带来较低的失真。稀疏矩阵是指含有大量零元素的矩阵。与零元素相对较少的稠密矩阵相比，稀疏矩阵具有若干优势。稀疏矩阵的一项优势是比稠密矩阵占用更少的内存。由于稀疏矩阵含有大量零元素，因此，与维度相同的稠密矩阵相比，它所需的存储空间更少。在处理大型矩阵或计算资源有限时，这一点尤为有利。稀疏矩阵的另一项优势是，其运算效率可能高于稠密矩阵。许多涉及矩阵的数值算法（例如线性代数运算和矩阵分解）都可以利用矩阵的稀疏性，更高效地进行计算。这有助于缩短计算时间，并更有效地利用计算资源。稀疏矩阵在图信号处理中也很有用，其中图由邻接矩阵表示。在这种情况下，稀疏矩阵

便于存储和处理，因为与稠密矩阵相比，它们的非零元素更少。稀疏矩阵在机器学习和数据挖掘中也很有用，因为数据通常是高维且稀疏的，例如文本数据、图像和图。在这种情况下，稀疏矩阵用于表示数据和模型，并利用矩阵的稀疏性来降低模型的复杂度和计算时间。

总而言之，与稠密矩阵相比，稀疏矩阵有诸多优势。它们占用的内存更少，运算效率可能更高，并且适用于图信号处理、机器学习和数据挖掘等特定应用领域，因为这些领域中的数据通常是高维且稀疏的。

算法说明

最常见的索伯列夫空间是 k 阶索伯列夫空间，记为 H^{k}，它由 k 次弱可微且其 k 阶弱导数平方可积的函数组成。k 阶弱导数是经典 k 阶导数的一种推广，使我们能够纳入那些不一定光滑、但在弱意义下具有一定可微性的函数。索伯列夫空间作为方程解所在的函数空间，用于偏微分方程的研究。它们在椭圆方程和抛物方程理论中也发挥着核心作用，并且在索伯列夫不等式理论中同样重要；这些不等式能够提供有关微分方程解的正则性的信息。索伯列夫空间对于流形上的偏微分方程研究也很重要，因为它们为分析定义在弯曲空间上的方程解提供了自然的框架。它们还用于研究几何偏微分方程，例如平均曲率流和极小曲面方程。索伯列夫空间是研究偏微分方程及分析学其他领域的一种自然且用途广泛的工具，在数学、物理学、工程学及其他领域中得到广泛应用。

4.1. 狄利克雷能量。在数学领域，尤其是偏微分方程中，狄利克雷能量用于衡量函数的变化程度。它在更具体的索伯列夫空间 H_1, 中被视为一种二次泛函。德国数学家彼得·古斯塔夫·勒热纳·狄利克雷是狄利克雷能量的创始人，它与拉普拉斯方程密切相关。

定义 1. 给定一个开集 $\Omega \subseteq \mathbf{R}^n$ 和一个态射 $u: \Omega \to \mathbf{R}$，函数 χ 的狄利克雷能量是实数

$$E[\chi] = \frac{1}{2}\int_{\Omega} \| \nabla u(\chi) \|^2 \, dx$$

其中，$\nabla u: \Omega \to \mathbf{R}^n$ 表示函数 χ 的梯度向量场。

由于狄利克雷能量是对一个非负量进行积分，因此它非负，即 $E[u] \geq 0$ 对于 u。求解拉普拉斯方程 $-\Delta u(\chi) = 0$ 对所有 $\chi \in \Omega$成立，并满足适当的边界条件，这等价于求解如下变分问题：确定函数 u，使其满足边界条件且狄利克雷能量最小。这样的解称为调和函数，而此类解正是位势理论的研究对象。在更一般的情形下，若以任意黎曼流形 $\Omega \subseteq \mathbf{R}^n$ 替代 M，并以 $u\colon \Omega \to \mathbf{R}$ 替代 $u\colon M \to \Phi$，其中后者是另一个（多个）黎曼流形 Φ，则狄利克雷能量由σ模型给出。σ模型拉格朗日量的拉格朗日方程的解，是那些使狄利克雷能量达到最小值或最大值的函数 u。在这一特定情形 $u\colon \Omega \to \mathbf{R}$中，这表明拉格朗日方程（或等价地，哈密顿－雅可比方程）为求得极值解提供了基础要求和累积依据。

连续算子（如拉普拉斯-贝尔特拉米算子）的狄利克雷能量，以及其离散对应物中的图狄利克雷能量的最小化，是用于最小化图约束的标准步骤，也是上述算法的基础，并构成了通过拉普拉斯特征映射进行嵌入和谱聚类的基础。这两个过程是嵌入和谱聚类的基础。对于平方根算子，我们是在离散意义下，或从图矩阵的意义上，计算狄利克雷图能量矩阵。这有助于我们进一步降低能量，最终得到比 Belkin 和 Niyogi 所实现的嵌入更加稳定的结果。然而，在求图拉普拉斯矩阵的平方根时，可能会出现复数值。这个问题可以通过对相应函数（拉普拉斯矩阵）取模或绝对值来解决。在这种情况下，复数值的存在并不具有其应有的适当意义。因此，为了使这一技术性论述更加清晰，我们可以表述为：拉普拉斯嵌入等价于图狄利克雷能量的最小化，而平方根拉普拉斯嵌入等价于图狄利克雷能量或矩阵的平方根的最小化。这两种表述都可以在以下语境中成立：拉普拉斯嵌入等价于图狄利克雷能量的最小化。本文通篇所称的根均指矩阵的平方根。正如（Horn、Johnson）以及（Nair、Singh）中严格证明的那样，半正定算子的平方根的存在性及其作为半正定平方根的唯一性，以及半正定矩阵的平方根的存在性及其作为半正定平方根的唯一性，均已得到严格证明。在某些情况下，矩阵与算子之间可以存在等价关系，具体而言，是指与该算子相关的数学域为实数域的情况。在接下来的步骤中，由此得到的方法将具有明显且可行的推论。一个矩阵可能具有多个平方根，但半正定厄米矩阵只会有一个唯一且不同的平方根——即使对于 n 次根也是如此。

为辅助 Belkin 和 Niyogi 基于拉普拉斯特征映射所启动的降维过程，已投影到目标空间的数据集得到了精简。

此前，所考虑的大多数流形都是欧几里得空间的子流形。这引出了一个问题：这一结论是否普遍成立，也就是说，每个光滑流形是否都能嵌入某个欧几里得空间。H. Whitney 给出了肯定的回答，而定理 2 仅证明了惠特尼定理的一个较弱形式。

具体而言，在几何学中，嵌入（或称 imbedding）是某种数学结构包含于另一种结构中的一种实例，例如一个群是另一个群的子群。当称某个对象 X 嵌入另一个对象 Y时，这种嵌入由某个单射且保拓扑映射 $f\colon X \to Y$ 给出。“保拓扑”的确切含义取决于 X 和 Y 所属的数学结构类型。在范畴论的语境中，保结构映射称为态射。给定 X 和 Y，X 嵌入 Y 的方式可能有多种。在许多类似的有趣情形中，存在一种标准（或“规范”）嵌入，例如自然数嵌入整数、整数嵌入有理数、有理数嵌入实数，以及实数嵌入复数。在这种情况下，通常会将定义域 X 与其像 $f(X)$等同起来，并视为包含于 Y中，使得 $f(X) \subseteq Y$。

T定理 2. 紧致光滑流形可以嵌入欧几里得空间。

嵌入空间的维数大得惊人。对于射影空间 P^m，利用附加的可微结构和m 坐标图，该定理给出了一个嵌入 $\mathbf{R}^{m(m+1)}$。事实上，惠特尼定理断言如下：

定理 3 $f\ M \to N$ $C \subset$. 设 : 是一个光滑映射，且在闭 M ε 子集 上为嵌入；设 是 上的连续正函数。如果 dim dim M $M \geq 2$ $N+1$，那么存在一个嵌入 g，它逼近 $M \to N\varepsilon f$，并且满足 $f|C = g|C$。

5. 最优性

我们首先说明，根拉普拉斯特征映射算法所提供的嵌入会使局部信息最优性更加突出并得到增强。回顾一下，给定一个数据集，我们构造一个加权图 $G = (V, E)$，其中的边连接彼此相邻的点。为便于讨论，假设该图是连通的。考虑将加权图 G 映射到一条直线上，使相连的点尽可能彼此靠近。设 $\mathbf{q} = (q_1, q_2, \dots, q_n)^T$ 是这样一个映射。选择“优质”映射的一项合理且基础的准则是最小化以下目标函数，

$$\sqrt{\left|\sum_{ij} (q_i - q_j)^2 W_{ij}\right|}$$

在适当的约束条件下。采用我们所选权重 W_{ij} 的目标函数会在相邻点 $\mathbf{p}_i$ 和 $\mathbf{p}_j$ 映射到相距很远的位置时产生巨大的误差。因此，最小化

这是为了确保如果 $\mathbf{p}_i$ 和 $\mathbf{p}_j$ 彼此“接近”，那么 q_i 和 q_j 也彼此接近。上述根号内的量是图狄利克雷能量。与拉普拉斯算子相比，在离散情形下，对狄利克雷能量取平方根进一步降低了惩罚。结果表明，对于任意 q，我们根据 Belkin 和 Niyogi 推导出：

$$\sqrt{\left|\frac{1}{2}\sum_{i,j}\left(q_i - q_j\right)^2 W_{ij}\right|} = \sqrt{|\mathbf{q}^T L\mathbf{q}|}$$

其中 $L = D - W$ 是图论定义。为说明这一点，注意到 W_{ij} 是对称的，且 $D_{ii} = \sum_j W_{ij}$。继续展开时，平方根内的表达式取正值。因此，最小化问题归结为生成

$$\underset{\mathbf{y}}{\operatorname{argmin}} \sqrt{\mathbf{q}^T L\mathbf{q}}.$$
$$\frac{\mathbf{y}}{\sqrt{\mathbf{q}^T \mathbf{D}\mathbf{q}} = 1}$$

约束 $\sqrt{\mathbf{q}^T D\mathbf{q}} = 1$ 消除了嵌入中的一个“任意”缩放因子。矩阵 D 为图的顶点提供了一种自然的度量。值 D_{ii} （对应第 i 个顶点）越大，该顶点就越“重要”。由方程 3.1 可知，L 是一个半正定矩阵，而使目标函数最小的向量 y 由以下广义特征值问题的最小特征值解给出：

$$\xi\mathbf{y} = \sqrt{\lambda D\mathbf{q}}$$

这里，ξ 是 L（拉普拉斯矩阵）的正定平方根。令 $\mathbf{1}$ 表示在每个顶点处取值均为 1 的常函数。容易看出，$\mathbf{1}$ 是特征值为 0 的特征向量。如果图是连通的，那么 $\mathbf{1}$ 是对应于 $\lambda = 0$的唯一特征向量。为了消除这个平凡解（它会将 G 的所有顶点都映射到实数 1），我们添加一个正交性约束，并寻找

$$\operatorname{argmin} \sqrt{\mathbf{q}^T L\mathbf{q}}.$$
$$\sqrt{\mathbf{q}^T D\mathbf{q}} = 1$$
$$\sqrt{\mathbf{q}^T D\mathbf{1}} = 0$$

因此，现在的解由最小正特征值对应的特征向量给出。数学上的“状态” $\mathbf{q}^T D\mathbf{1} = 0$ 可解释为消除 q 中的平移不变性。现在考虑将图嵌入到 m^- 维欧几里得空间这一更一般的问题。该嵌入由$k \times m$ 矩阵 $Q = [\mathbf{q_1}\mathbf{q}_2,\ldots,\mathbf{q}_m]$给出，其中第 i 行提供第 i 个顶点的嵌入坐标。同样，我们需要最小化

$$\sqrt{\sum_{i,j} \|\mathbf{q}^{(i)} - \mathbf{q}^{(j)}\|^2 W_{ij}} = \sqrt{\mathrm{tr}(Q^T L Q)}$$

其中 $\mathbf{q}^{(i)} = [\mathbf{q}_1(i)、\ ...、\ \mathbf{q}_m(i)]^T$ 是第 i 个顶点的 m 维表示。这将归结为求解

$$\underset{Q^T D Q = I}{\mathrm{argmin}} \sqrt{\mathrm{tr}(Q^T L Q)}.$$

对于一维嵌入问题，该约束可防止映射坍缩到一个点。对于 m 维嵌入问题，上述约束可防止映射坍缩到维数小于 $m-1$ 的子空间（m 如果像一维情形那样，我们要求与常向量正交）。标准方法表明，该问题的解由广义特征值问题 $\xi\mathbf{q} = \sqrt{\lambda D\mathbf{q}}$ 中对应于最小特征值的特征向量矩阵给出。

6. 拉普拉斯-贝尔特拉米算子

从不同角度来看，图的根拉普拉斯算子与流形上的拉普拉斯-贝尔特拉米算子相互关联、相互耦合。设 M 是一个光滑、紧致的 m 维黎曼流形。若该流形嵌入于 R^l 中，则流形上的黎曼结构（度量张量）由 R^l 上的标准黎曼结构诱导。与处理图时一样，我们在此要寻找一个从流形到实数轴的映射，使得流形上彼此接近的点映射到实数轴上彼此接近的位置。设 f 是这样的一个态射。我们可以假设 $f: \mathrm{M} \to \mathrm{R}$ 是二阶可微的。考虑两个相邻的点 $\mathbf{p}$、$\mathbf{r} \in \mathrm{M}$。它们依次被投影到 $f(\mathbf{p})$ 和 $f(\mathbf{r})$。Belkin 和 Niyogi 证明了

$$|f(\mathbf{p}) - f(\mathbf{r})| \leq \mathrm{dist}_{\mathcal{M}}(\mathbf{p}, \mathbf{r}) \parallel \nabla f(\mathbf{p}) \parallel + o(\mathrm{dist}_{\mathcal{M}}(\mathbf{p}, \mathbf{r}))$$

梯度 $\nabla f(p)$ 是切空间 $T\mathrm{M}_p$ 中的一个向量，使得对于给定的另一个向量 $\mathbf{v} \in T\mathrm{M}_p$，有 $df(\mathbf{v}) = \nabla f(p), \mathbf{v}_{\mathcal{M}}$。因此，我们看到 $\parallel \nabla f \parallel$ 为我们提供了一种估计 f 映射的邻近点之间距离的方法。因此，我们试图寻找一种在近似中最大程度保留局部性的映射，并对此进行深入探讨

$$\underset{\|f\|_{L^2(\mathcal{M})}=1}{\mathrm{argmin}} \sqrt{\int_{\mathcal{M}} \parallel \nabla f(p) \parallel^2},$$

其中积分是相对于黎曼流形上的相应测度进行的。请注意，最小化 $\sqrt{\int_{\mathcal{M}} \parallel \nabla f(x) \parallel^2}$ 相当于在图上最小化 $S\mathbf{f} = \sqrt{\frac{1}{2}\sum_{i,\ j}(f_i - f_j)^2 W_{ij}}$。这里，$\mathbf{f}$ 是定义在顶点上的函数，f_i 是图中第 i 个节点上 $\mathbf{f}$ 的值。事实证明，最小化

上述方程可化简为求取拉普拉斯-贝尔特拉米算子L的平方根的特征函数。

$$\sqrt{\int_{\mathcal{M}} \| \nabla f \|^2} = \sqrt{\int_{\mathcal{M}} \mathcal{L}(f) f} = \sqrt{\int_{\mathcal{M}} \xi\text{^}2(f) f} = \sqrt{\int_{\mathcal{M}} \lambda f^3}$$

Now,

$$\sqrt{\int_{\mathcal{M}} \lambda f^3} = \sqrt{\lambda} f^2 / \sqrt{2} = \int_{\mathcal{M}} \xi(f) f$$

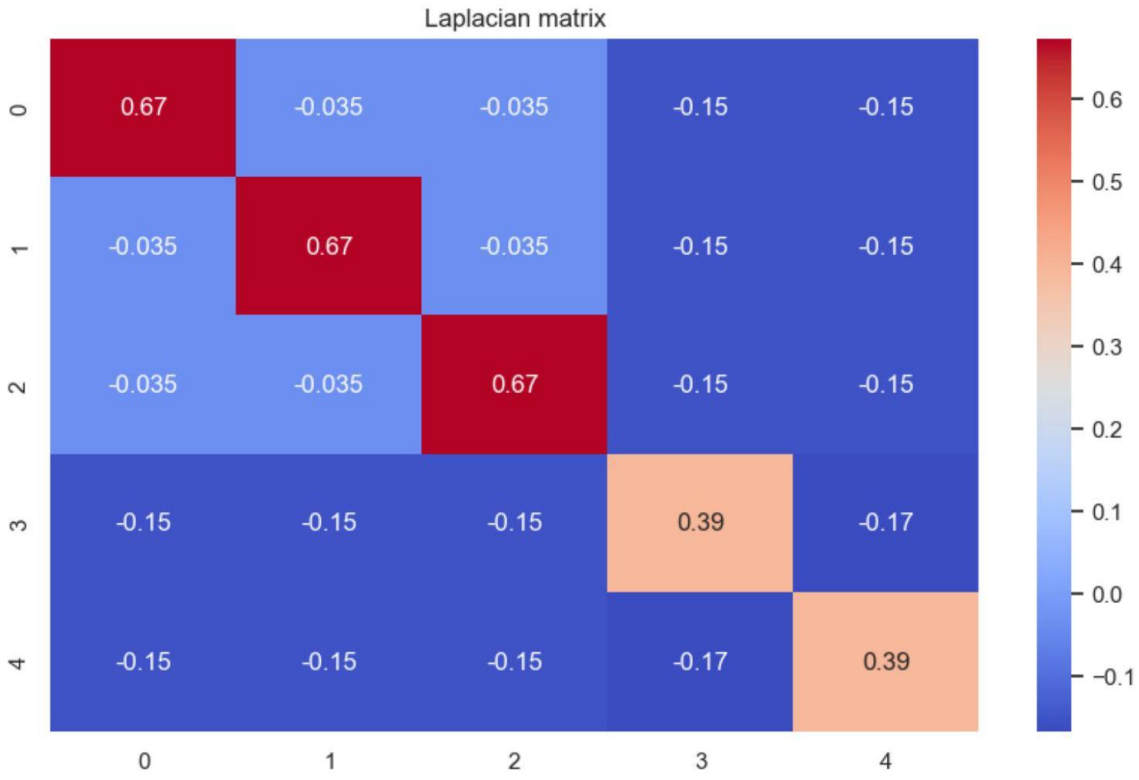
我们断言，ξ 是半正定的。使得$\sqrt{\int_{\mathcal{M}} \| \nabla f \|^2}$ 最小化的f 必定是ξ的一个特征函数。

已知紧流形 M 上 L 的谱是离散的（Rosenberg，1997年）。因此，紧流形 M 上$\mathcal{S}$的谱也同样是离散的。设特征值按递增顺序排列为$0 = \sqrt{\lambda}_0 \leq \sqrt{\lambda}_1 \leq \sqrt{\lambda}_2 \leq \cdots$，并设$f_i$ 是对应于特征值 λ_i的特征函数。不难看出，f_0 是一个常函数，它将整个流形映射到一个点。为避免这种情况，我们要求（与图的情形一样）嵌入映射f 与 f_0正交。由此立即可得，f_1 是最优嵌入映射。沿用上一节的论证，我们可以看到

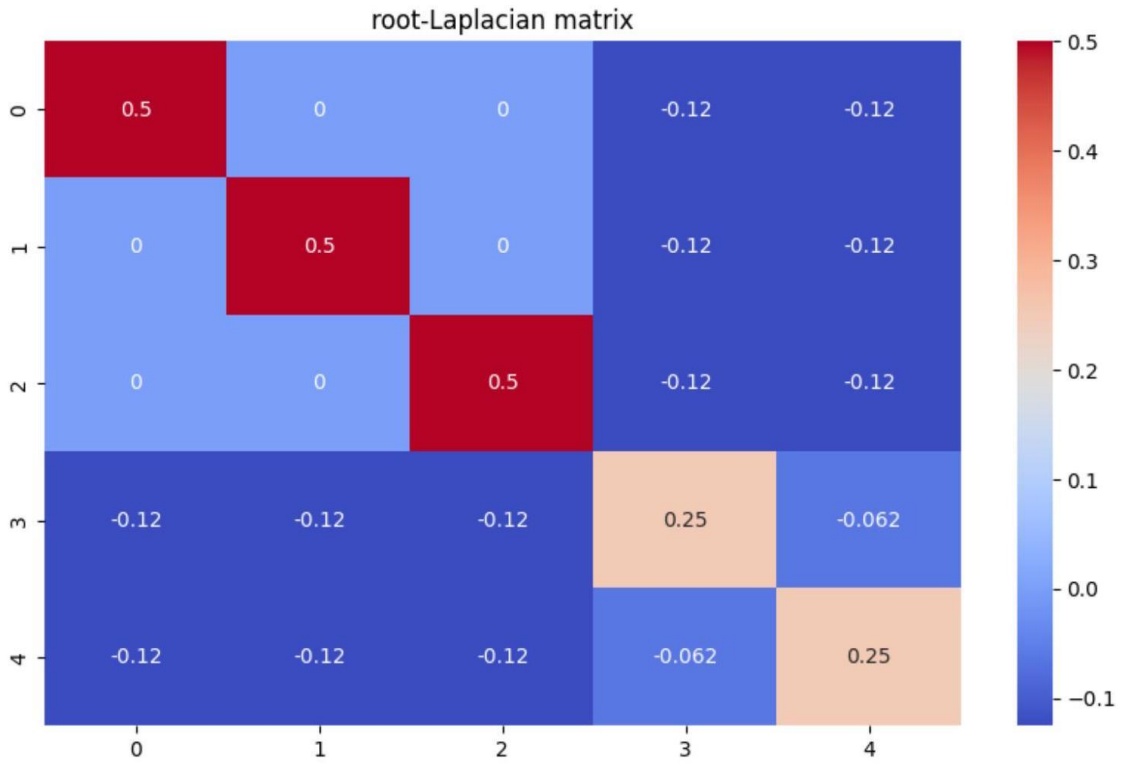
$$\mathbf{p} \rightarrow (f_1(\mathbf{p}), \ldots, f_m(\mathbf{p}))$$

给出最优的m维嵌入

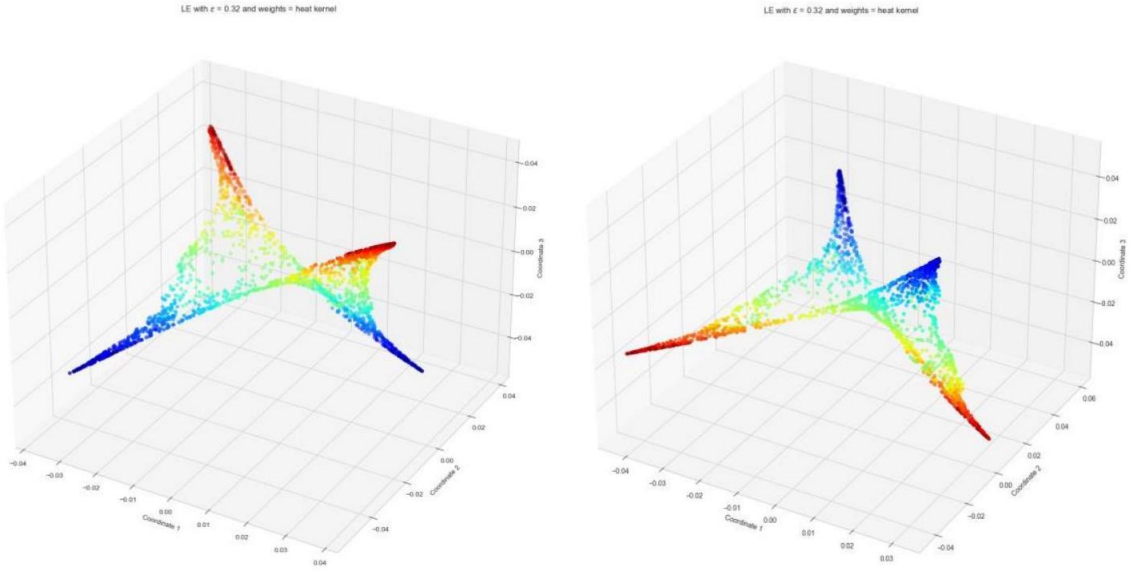
7. 谱嵌入图:



随机图的拉普拉斯矩阵的矩阵热图]



同一图的根拉普拉斯矩阵的矩阵热图



10. [分别对拉普拉斯算子和根拉普拉斯算子的相同热核进行二维谱嵌入]

智慧城市中一种可能的“物联网”应用

顾名思义，物联网是由各种“物件”组成的集合或网络。这里的“物件”指传感器、执行器、智能手机以及其他数字设备，例如静态和动态的计算工作站。这是一种“改进版”的移动计算，将所有组件视为某种程度上“平等”的对象。

智慧城市是利用先进技术和数据分析来提升市民生活质量、提高城市服务效率并减少城市环境影响的城市地区。

智慧城市通常会运用多种技术，例如物联网传感器、大数据分析、云计算和5G网络，收集并分析来自各种来源的数据，如交通流量、能源消耗、天气和空气质量。随后利用这些数据优化城市服务、改进决策和资源分配，并提升城市整体的宜居性和可持续性。

图信号处理是一个研究领域，主要研究定义在图的顶点上的信号处理。在这一语境中，这些信号通常称为图信号。图结构可用于表示不同顶点之间的交互，而图信号处理技术则能利用这种结构，从信号中提取有意义的信息。图信号处理中的常见任务包括对图信号进行滤波、去噪和压缩，以及对图的顶点进行聚类和分类。图信号处理应用于众多领域，包括计算机科学、工程学、社会科学和生物学。

在图信号处理中，傅里叶基用于在频域表示图信号。正如傅里叶级数用于将周期函数表示为正弦函数和余弦函数之和，图傅里叶变换用于将图信号表示为复指数函数之和。图中的每个顶点都对应一个频率，而复指数函数的系数表示该频率在信号中的振幅。

在图上定义傅里叶基有多种方法，其中一种常见做法是使用图拉普拉斯矩阵的特征向量作为基函数。图拉普拉斯算子是一个用于编码图结构的矩阵，其特征向量表示图信号的不同频率模态。

图傅里叶变换（GFT）是一种线性算子，可将定义在图顶点上的信号映射为其频域表示。图傅里叶变换可定义为信号与拉普拉斯矩阵特征向量的点积。

信号转换到频域后，可以对其进行滤波、去噪、压缩或其他处理。随后，可通过图逆傅里叶变换（IGFT）将其转换回顶点域；该变换是信号与拉普拉斯矩阵的特征向量的点积。

这使我们能够通过在频域中进行操作，以类似于传统信号处理中分析和处理信号的方式来分析和处理图信号。

最常见的傅里叶基是由复指数函数构成的集合，也称为正弦曲线，其定义如下：

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{2\pi ikt}$$

其中，t 是自变量，k 是整数，i 是虚数单位。这些函数的周期为 1，并构成完备正交归一集，这意味着任何函数都可以表示为这些函数之和，且该级数在均方意义下收敛到原函数。

另一种常见的傅里叶基是三角函数（正弦和余弦）集，其定义如下：

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \cos 2\pi ikt \sin 2\pi ikt$$

这些函数的周期同样为 1，并构成完备正交归一集。

在图信号处理中，傅里叶基由图拉普拉斯矩阵的特征向量定义。图拉普拉斯矩阵用于编码图的结构。图拉普拉斯算子是一个对称矩阵，其特征向量构成了定义在图上的函数空间的正交归一基。

图拉普拉斯矩阵定义为 L = D - A，其中 D 是顶点度的对角矩阵，A 是图的邻接矩阵。拉普拉斯矩阵的特征向量也称为图谐波或图模态。

给定一个图信号，也就是定义在图的顶点上的函数，图傅里叶变换（GFT）定义为该信号与拉普拉斯矩阵的特征向量的点积。点积用于计算信号在每个特征向量上的投影。得到的系数构成信号的频域表示，也称为图傅里叶系数。

图傅里叶变换和图逆傅里叶变换让我们能够在频域中分析和处理图信号，其方式类似于传统信号处理中分析和处理信号的方式。在图信号处理中，傅里叶基由图拉普拉斯矩阵的特征向量定义；该矩阵编码了图的结构。图拉普拉斯算子是一个对称矩阵，其特征向量构成定义在图上的函数空间的正交归一基。

图拉普拉斯矩阵定义为 L = D - A，其中 D 是顶点度的对角矩阵，A 是图的邻接矩阵。拉普拉斯矩阵的特征向量也称为图谐波或图模态。

给定一个图信号，即定义在图顶点上的函数，图傅里叶变换（GFT）被定义为信号与拉普拉斯矩阵特征向量的点积。点积用于计算信号在

每个特征向量上的投影。所得系数是信号的频域表示，也称为图傅里叶系数。

传统信号处理中涉及的频率概念，为信号分析提供了坚实的数学和逻辑基础。尽管从技术上讲，如前所述，可以为图信号定义频率概念，但要建立相应的理解以认识这些基本频率，并非易事。经验研究表明，概念上也有依据：由移位算子得到的频率基往往按照总变差准则排序。

到目前为止，我们主要关注由图的邻接矩阵得到的频率表示。这种方法既可用于有向图，也可用于无向图；对于环图，它还可以与数字信号处理的理念相联系。无向图的拉普拉斯矩阵可用作构建频率表示的基础。由于该矩阵是半正定的，且具有一组完备的正交特征向量，因此所有特征值都是实数且非负，这使我们能够写出根图傅里叶变换

$$\mathbf{S} = \sqrt[2]{|\boldsymbol{L}|} = \sqrt{|\mathbf{U}\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{U}^{\top}|}$$

$$\cong |\mathbf{U}\boldsymbol{\Lambda}^{\frac{1}{2}}\mathbf{U}^{\top}|$$

其中，U 是 L 的图傅里叶变换矩阵，在此情况下它是实值正交矩阵。由于特征值均为实数，因此可以自然地按照频率（其取值在图上的变化情况）对图傅里叶变换基向量排序。在这种情况下，特征值/特征向量对可视为瑞利商的连续优化解，其中第 k 对、λ_k、$\mathbf{u}_k$ 满足：

$$\mathbf{u}_k = \sqrt{|\arg \min_{\mathbf{x}^{\top}\mathbf{u}_{k'}=0, k'=0,\ldots,k-1} \frac{\mathbf{x}^{\top}\mathbf{L}\mathbf{x}}{\mathbf{x}^{\top}\mathbf{x}}|}$$

其中，如果将 $\mathbf{u}_k$ 归一化，则与 $\lambda_k = \sqrt{|\mathbf{u}_k^{\top}\mathbf{L}\mathbf{u}_{\mathbf{u}_k}|} \cong |\mathbf{U}\mathbf{L}^{\frac{1}{2}}\mathbf{U}^{\top}|$ 等价。因此，对于由拉普拉斯二次型所诱导的显式变化度量，GFT 提供了一个变化度递增的正交基，使得每个额外的基向量都能在保证正交性的同时，最小化变化度的增加。更一般地说，拉普拉斯算子的特征向量和特征值与图结构之间的关系，属于一个深邃而优美的数学领域，即谱几何。

平方根图傅里叶变换和平方根逆图傅里叶变换使我们能够通过在频域中进行处理，以类似于传统信号处理分析和处理信号的方式，分析和处理图信号。

物联网和图信号处理的结合可用于提升各种应用的性能，例如：

智慧城市：物联网传感器可用于收集城市各个方面的数据，例如交通流量、能源消耗和空气质量。图信号处理可用于分析这些数据并提取有用信息，例如交通模式、能源使用和空气质量趋势。

工业物联网：物联网传感器可用于收集工业过程中的数据，例如温度、湿度和振动。图信号处理可用于分析这些数据并提取有用信息，例如设备性能和维护需求。

健康监测：物联网设备可用于收集人类健康各方面的数据，例如心率、血压和睡眠模式。图信号处理可用于分析这些数据并提取有用信息，例如健康与福祉的模式。

总的来说，通过以利用数据图结构的方式收集和分析物联网设备的数据，物联网与图信号处理的结合可以提升各种应用的性能。

11. 参考文献

Belkin, M., & Niyogi, P.（2002年）。用于嵌入和聚类的拉普拉斯特征映射与谱技术。载于 T. K. Leen、T. G. Dietterich 和 V. Tresp（编），《神经信息处理系统进展》第 14 卷。马萨诸塞州剑桥：麻省理工学院出版社。

Bernstein, M., de Silva, V., Langford, J. C. 和 Tenenbaum, J. B.（2000年）。嵌入流形上测地线的图近似。在线获取：http:/ /isomap.stanford.edu/BdSLT.pdf。

Chung, Fan R. K.（1997年）。谱图论。美国罗得岛州普罗维登斯：美国数学学会。

Chung, Fan R. K., Grigor'yan, A. 和 Yau, S.-T.（2000年）。黎曼流形和图上的高阶特征值与等周不等式。《分析与几何通讯》，8，969-1026。

Hadley, S. W., Mark, B. L. 和 Vanelli, A.（1992年）。用于寻找网表划分的高效特征向量方法。《IEEE计算机辅助设计汇刊》，11(7)，885-892。

Haykin, S.（1999年）。《神经网络：全面基础》。新泽西州上萨德尔河：普伦蒂斯霍尔出版社。

Hendrickson, B., & Leland, R.（1993年）。《多维谱负载均衡》。载于《第六届工业与应用数学学会科学计算并行处理会议论文集》（第953-961页）。费城：工业与应用数学学会。

Indyk, P.（2000年）。《邻近问题的降维技术》。发表于旧金山举行的第十一届离散算法研讨会。

Kondor, R. I., & Lafferty, J.（2002年）。《图及其他离散输入空间上的扩散核》。载于《国际机器学习会议2002论文集》。

Nash, J.（1954年）。C^1 等距嵌入。《数学年刊》，56，383-396。

Nash, J.（1956年）。《黎曼流形的嵌入问题》。《数学年刊》，63，20-63。

Ng, A. Y., Jordan, M., & Weiss, Y.（2002年）。论谱聚类：分析与一种算法。载于 T. K. Leen、T. G. Dietterich 和 V. Tresp（编），《神经信息处理系统进展》，第14卷。美国马萨诸塞州剑桥：麻省理工学院出版社。

Rosenberg, S.（1997年）。黎曼流形上的拉普拉斯算子。剑桥：剑桥大学出版社。

Roweis, S. T. 和 Saul, L. K.（2000年）。通过局部线性嵌入实现非线性降维。《科学》，290，2323-2326。

Schölkopf, B., Smola, A., & Müller, K.-R.（1998年）。将非线性成分分析视为核特征值问题。《神经计算》，10(5)，1299-1319。Seung, H. S., & Lee, D. D.（2000年）。流形感知方式。《科学》，290，$2268 - 2269$。

Shi, J., & Malik, J.（1997年）。归一化割与图像分割。IEEE 会议 计算机视觉与模式识别（第731-737页）。Simon, H. D.（1991）。面向并行处理的非结构化问题划分。《工程学计算系统》，2，135-148。

Tenenbaum, J.、de Silva, V. 和 Langford, J.（2000）。非线性降维的全局几何框架。《科学》，290，2319-2323。

Hormander Lars，《线性微分算子分析 III》， 施普林格出版社（柏林-海德堡）2007年

Jeff Cheeger， Mikhail Gromov， Michael Taylor。拉普拉斯算子的函数的有限传播速度与核估计，以及完备黎曼流形的几何。《微分几何杂志》 17(1)：15-53 （1982年）。 DOI：10.4310/jdg/1214436699

Mikhail Gromov，《黎曼与非黎曼空间的度量结构》Birkhäuser Boston，马萨

《拓扑与数据》，Gunnar Carlsson，《美国数学学会公报》（新系列），第29卷，2009年1月。

《热核与狄拉克算子》Nicole Berline、Ezra Getzler、Michèle Vergne，施普林格出版社，柏林、海德堡，2004年

A. Ortega、P. Frossard、J. Kovačević、J. M. F. Moura 和 P. Vandergheynst，《图信号处理：概述、挑战与应用》，载于《IEEE会刊》，第 106 卷，第 5 期，第 808–828 页，2018 年 5 月，doi：10.1109/JPROC.2018.2820126。