arXiv:2305.03732v1 [math.NA] 2 May 2023

加权高维数据降维：有限元特征在腹主动脉瘤高压环境中的应用

预印本

克里斯托夫·施特里格尔
慕尼黑大学路德维希-马克西米利安大学数学、信息学与统计学院统计系，路德维希大街33号，80539 慕尼黑，
christoph.striegel@stat.uni-muenchen.de

G¨oran Kauermann
慕尼黑大学（Ludwig-Maximilians-Universität München）数学、信息学与统计学学院统计学系，Ludwigstr. 33，80539 慕尼黑

Jonas Biehler慕尼黑工业大学机械工程系计算力学研究所，德国慕尼黑

2023年5月1日

摘要

在这项工作中，我们提出一种高保真有限元模拟的低秩近似方法，通过利用与腹主动脉瘤（即发生变形的血管）高应力水平区域相对应的权重来实现。我们重点关注冯·米塞斯应力，它对应于主动脉破裂风险。我们将其建模为高斯马尔可夫随机场，并将近似定义为一组向量的基，这些向量通过求解一系列优化问题得到。每个问题都描述了对期望加权二次损失的最小化。权重体现了有限元中每个网格点的重要性，可自由选择——既可由数据驱动，也可结合领域知识。在更广泛地讨论数学性质的同时，我们还提供了一种有效的数值启发式方法，用于在一般条件下计算该基。我们明确探究了高保真有限元网格表面上的两种此类基，并展示了它们在压缩方面的效率。我们还利用该方法，通过低保真和高保真模拟预测感兴趣区域的冯·米塞斯应力。由于数据维度很高，我们必须格外注意，确保问题在数值上可行。这也是本工作的一个主要关注点。

关键词 降维 · 权重 · 计算机实验 · 多保真度模拟 · 高斯马尔可夫随机场

1 引言

我们在本文中提出的方法，起点是一个真实世界的应用问题，其性质与具体实现紧密相关。具体而言，我们处理的是一项计算成本高昂的高保真计算机模拟所产生的数据，该模拟返回腹主动脉瘤（AAA）对血压作出的形变和应力响应，参见 Biehler 等人（2014）。这项模拟十分复杂，但具有确定性，其返回向量 $\boldsymbol{y} = \left(\boldsymbol{y}(s_1) ..., \boldsymbol{y}(s_{m_y})\right)^T$，$\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^{m_y}$，其中 $\boldsymbol{y}(s_j)$ 表示位置 $s_j \in \mathcal{S}_y$ 处的结果，而 $\mathcal{S}_y$ 是一个三维有限元网格。因此，结果量是冯·米塞斯应力的大小，这是一种力学量，可将每个网格点处的张量应力概括为一个数值。该模拟取决于一个壁参数 $\boldsymbol{\xi}$（调节）参数向量，因此我们可以将其结果记为

该模拟记为 y_ξ。单次模拟的结果展示在图 1 的部分内容中（第一幅和第三幅图）。这些

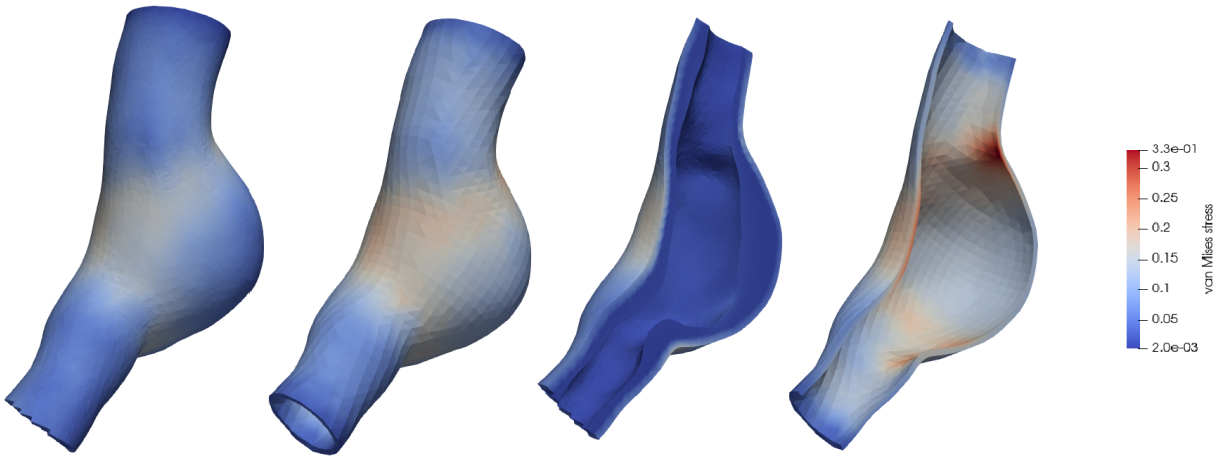


图 1：对于同一组参数，高保真度（第一和第三张图像）与低保真度（第二和第四张图像）的输出结果。图像分别从外部（左侧两张图像）和剖面（右侧两张图像）展示了动脉，体现了数据的三维结构。除其他简化处理外，低保真度模型还使用了比高保真度模型更粗的网格进行计算（上图未显示）。

有限元模拟 可用于评估血管破裂风险，并指导医疗治疗 n
在现实场景中。

由于高保真模拟的计算成本高昂，Striegel 等人（2022）（另见 Biehler 等（2016））提出了一种两步法，该方法在简化网格上使用经过调整的低保真模拟，作为高保真计算的替代模型。低保真模拟也可视为图 1 的一部分（第二张和第四张图像）。我们将低保真模拟记为 $x(\xi)$。虽然将整个低保真模拟 x 与其高保真对应基 y 联系起来可能很有用，如 Striegel 等人（2022）所做的那样，但这忽略了人们主要关注高应力水平，因为这些水平表明存在主动脉破裂的风险，进而导致内出血；如果不立即进行治疗，最终会导致患者死亡。换言之，我们的目标不是根据低保真模拟 x_ξ 预测整个高保真结果 y_ξ，而只是预测高应力区域。这正是下文所述论文的目标。为此，我们通过一个经过最优选择的基，对 y_ξ 进行加权降维，其中权重反映高保真网格上每个网格点的相关性，重点关注高应力以及由此产生的高破裂风险。该基以迭代方式计算，其中每个基向量都根据加权期望二次压缩误差求解一个优化问题。无权问题可通过简单的特征向量求解，而加入权重后则需要新的数值解。由于每个基向量的维度等于高保真网格的维度，即数千维，优化过程十分繁琐；而针对我们当前问题进行高度优化的数值解是本文的一项主要贡献。不过，本文给出的理论推导适用于任何高维高斯随机场，甚至更广泛地适用于具有给定协方差结构的任何场。

与我们的基计算在概念上相关的工作见 Gabriel 和 Zamir（1979）：他们利用加权最小二乘损失，对带有附加权重的矩阵进行近似。Tamuz 等（2005）采用这一方法，开发了一种有效的算法，用于滤除光变曲线中的系统效应。与这两篇论文类似，我们的工作可视为主成分分析的一种推广，并采用数值优化而非闭式解。我们的方法论以高斯随机场而非矩阵作为起点，并且损失函数针对向量的每个分量纳入逐元素误差，而不是针对矩阵所有元素的累积误差。沿着这一思路，我们将自己的工作视为对（一般）特征值分解及类似方法的直接扩展，这些方法见 Ghojogh 等（2019）；同样，我们的方法也支持对偶形式，不过其形式不是矩阵，而是更复杂的张量分解。从计算机视觉和机器学习等热门领域的视角来看，基计算可视为根据特定损失函数从网格中提取特征。全面综述可参见 Zebari 等（2020），而从三维人脸图像中提取特征的相关应用案例则可参见 Soltanpour 等（2017），其更

进一步的相关应用是从三维人脸图像中提取特征。然而，与这些领域中应用的大多数方法相比，我们的工作旨在处理极小样本量，通常只有数百个甚至更少；在这种情况下，机器学习通常并不适用。

本文其余部分安排如下：首先，我们将讨论现有数据的性质，以论证所采用的建模方法。第三部分将推导我们的数据驱动权重模型，为第四节讨论的加权基方法提供附加信息。在此，我们针对基向量定义相关问题，并提出高效的求解思路，同时给出适用于当前应用的示例基向量，并评估其质量。我们还将简要介绍基计算背后的数值计算。最后，在第五节中，我们将通过一个示例应用，评估加权基向量的用途：根据低保真对应值预测高保真应力值。论文最后将进行简短讨论。

2 数据概述

我们用 $\boldsymbol{y}_{<k>}$ 表示输入参数为 $\boldsymbol{\xi}_k$ 的第 k次高保真模拟运行，并相应地用 $\boldsymbol{x}_{<k>}$ 表示其匹配的低保真对应值。高保真结果 $\boldsymbol{y}$ 的维度为 80000，低保真对应值 $\boldsymbol{x}$ 的维度为 3500。请注意，计算单个高保真结果约需 10800 CPU秒（约 3 小时），而计算一次低保真模拟仅需 215 CPU秒（约 3。5 分钟）。这清楚地表明，能够根据低保真结果进行高保真预测的模型具有重要价值。因此，所开发方法论的最终目标是基于小样本开展工作，即仅有数量有限的高、低保真模拟可用。具体而言，我们只使用少数案例进行训练，并将训练集定义为 $\mathcal{N}_{train}$，其中 $n_{train} = |\mathcal{N}_{train}| = 50$。现有数据源自一项规模更大的实验，我们利用其余数据（共 850 条观测）来评估所提方法的性能。我们用 $\mathcal{N}_{test}$表示测试集。

如引言所述，我们关注较高的（冯·米塞斯）应力值。下文将以最高的 0.1% 和 0.5% 应力值为例进行考察。为分析这些应力值出现的位置，我们绘制简单的高应力频率，即测试集中在某一点出现高应力值的样本数除以模拟总次数：

$$\boldsymbol{f}(s_j) = |k \in \mathcal{N}_{train} : \boldsymbol{y}_{<k>}(s_j) > q|/n_{train}, \tag{1}$$

对于给定分位数 q 和点 s_j。我们关注的这两个百分位数的结果如图2所示 :

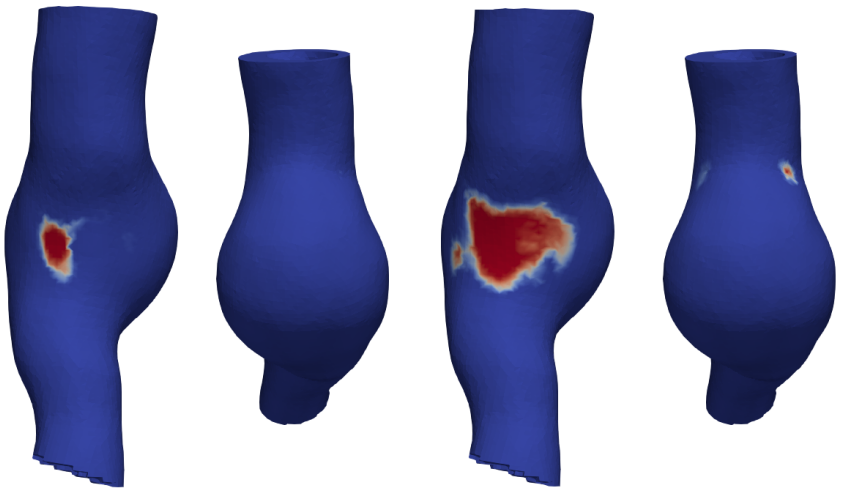


图2：平均位置频率 最高 0.1%（第一和第二幅）和最高 0.5%（第三和第四幅）应力值的频率 . 正面和背面视 ew.

我们可以看到，在这两种情况下，这些值都在网格上呈空间聚集分布。特别是，没有孤立的网格点。对于排名前 0.1% 的应力值，只有几何体的前部受到关注；而对于排名前 0.5% 的应力值，后部还存在一些较小的应力中心。乍看之下，弯曲部区域的应力显著较低这一事实可能令人惊讶，但实际上这是血栓的直接结果，即一层凝固血液增强了血管的这一部分。

图3给出了随着样本量增加，网格上高于分位数的点的平均数量。我们看到，冯·米塞斯应力的高值往往出现在相似区域，网格上的相关点数量也随之变化。

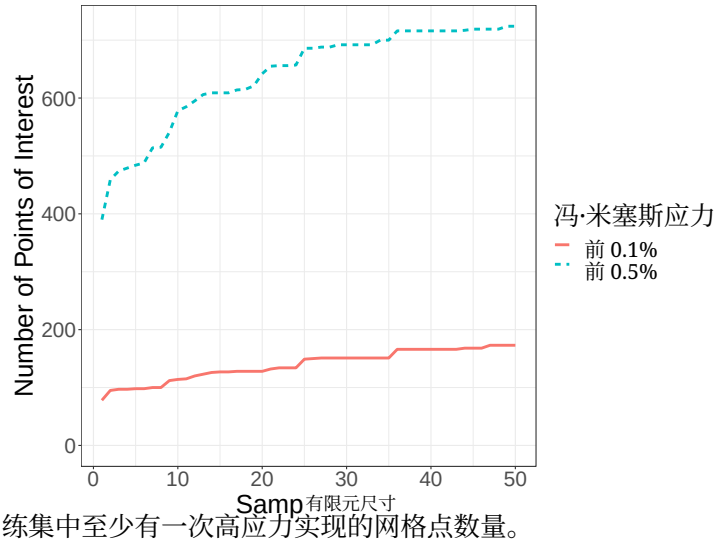


图3：训练集中至少有一次高应力实现的网格点数量。

在增加样本量时，结果似乎有界。这表明高应力区域的空间方差较低，因此我们可以可靠地预测网格中哪些部分与高应力相关。

总体而言，如图2所示，我们处理的是局部聚集区域，也就是说，某些网格点比其他网格点更受关注。在应用降维工具时，我们旨在将这一点纳入考量。事实上，对网格进行简单的特征向量分解，不太适合有效压缩相关信息。因此，本文的核心贡献是构建一个适用于降维的基，并纳入附加权重，以提取当前数据中出现的局部特征。

3 权重的建模

第一步是构建合适的权重向量。这些权重应反映每个网格点的重要性，并应通过数据驱动的方式确定，或者由专家知识确定。下文采用数据驱动的方法。相关推导适用于一般分位数 q。

在估计网格上某个特定点的相关性时，我们需要考虑多个因素。首先，训练集中出现高应力值的点最为重要。其次，高应力值局部邻域内的点同样具有信息价值。最后，正如我们在训练集中所观察到的以及图3所示，不同样本之间的高应力区域存在重叠，且沿边界仅有轻微变化。因此，这些网格上的点是我们重点关注的对象。

鉴于训练数据中已有大量信息，且数据具有空间结构，我们将采用高应力频率的平滑版本 $\boldsymbol{f}$ 作为权重向量 $\boldsymbol{w}$。我们提出使用高斯核进行标准核平滑。

$$K(s_j, s_l)_\sigma = exp\left(-\frac{dist(s_j, s_i)^2}{2\sigma^2}\right). \tag{2}$$

这里， $dist$ 定义了高保真网格上两点之间以边为单位的最短路径。平滑权重定义如下：

$$\boldsymbol{w}(s_j) = \frac{\sum_{l=1}^{m_y} K_\sigma(s_j, s_l)\boldsymbol{f}(s_j)}{\sum_{l=1}^{m_y} K_\sigma(s_j, s_l)} \tag{3}$$

其中， $\boldsymbol{f}(s_j)$的定义同式（1）。我们可以将该方程概括为向量矩阵形式： $\boldsymbol{w} = \boldsymbol{S}(\sigma^2)\boldsymbol{f}$。这里， $\boldsymbol{S}(\sigma^2)$是包含平滑权重的平滑矩阵。此外，我们可以使用标准广义交叉验证来选择带宽参数 σ^2 （参见 Golub 等人（1979）、Li（1986））。由于所得权重向量与图2略有差异，我们省略了其绘图。

4 使用附加权重的有限元特征

4.1 基定义

在概述一般解并考察一些示例向量之前，我们将高保真网格的加权基向量定义为一系列优化问题。在这一部分，我们假设存在一个权重向量

$\boldsymbol{w} \in \mathbb{R}^{m_y}$ 其中 $\sum_{i=1}^{m_y} \boldsymbol{w}(s_j) = 1$ 和 $\boldsymbol{w}(s_j) \geq 0, \ \forall j \in [m_y]$。我们进一步假设高保真输出满足高斯马尔可夫随机场（GMRF）假设，即 $\boldsymbol{y} \sim N(\mathbf{0}, \ \boldsymbol{\Sigma})$。均值向量是次要关注对象；对于协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$，我们假设其精度矩阵为 GMRF精度矩阵 $\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{\Sigma}^{-1}$，该矩阵由有限元结构构建。$\boldsymbol{Q}$除以下位置外均为零

$$\begin{aligned} \boldsymbol{Q}_{ij} &= -1 \iff \{s_j\} \text{ in } ne(s_i) \\ \boldsymbol{Q}_{ii} &= |ne(s_i)|. \end{aligned}$$

这里，$ne(s_i)$ 定义了网格上点 s_i 的邻域，详情请参阅 Rue and Held（2005）。目标是使用由向量 $\boldsymbol{B}_p = (\boldsymbol{b}_1, \cdots, \boldsymbol{b}_p)$ 组成的标准正交基来近似 $\boldsymbol{y}$，即 $\boldsymbol{b}_h \in \mathbb{R}^{m_y}$，其中 $\boldsymbol{b}_h^t \boldsymbol{b}_h = 1$，且对于 $1 \leq g < h \leq p$ 有 $\boldsymbol{b}_h^t \boldsymbol{b}_g = 0,$。该基取决于权重，以及——如前一部分所示——相应的应力分位数，即 $\boldsymbol{B}_p = \boldsymbol{B}_p(\boldsymbol{w}(q))$。

4.1.1 第一个向量

我们将迭代地计算该基，并从一个长度为一、由单个向量 $\boldsymbol{b}$ 组成的基开始。如果使用该基对 $\boldsymbol{y}$ 进行直接压缩，则有

$$\hat{\boldsymbol{y}} = \boldsymbol{b}\boldsymbol{b}^t \boldsymbol{y} \tag{4}$$

$$\boldsymbol{y} - \hat{\boldsymbol{y}} \sim N(0, \underbrace{(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{b}\boldsymbol{b}^t)\boldsymbol{\Sigma}(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{b}\boldsymbol{b}^t)}_{=:\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}(\boldsymbol{b})}). \tag{5}$$

利用该分布，我们定义如下平方风险函数，用于概括逐分量期望平方误差

$$\sum_{j=1}^{m_y} E\left((\boldsymbol{y}(s_j) - \hat{\boldsymbol{y}}(s_j))^2\right) = tr(\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}(\boldsymbol{b})). \tag{6}$$

我们选择基向量 $\boldsymbol{b}_1$ 以最小化期望 L2 损失（6），因此它满足优化问题

$$min_{\{\boldsymbol{b}\}} \left(\sum_{j=1}^{m_y} E\left((\boldsymbol{y}(s_j) - \hat{\boldsymbol{y}}(s_j))^2\right) \right) = min_{\{\boldsymbol{b}\}} \left(tr(\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}(\boldsymbol{b})) \right). \tag{7}$$

不难证明，该问题等价于一个特征向量问题，即求解该优化问题的向量 $\boldsymbol{b}_1$ 是与 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的最大特征值相对应的特征向量。

现在，我们不再使用公式（6），而是引入上文构造的权重向量 $\boldsymbol{w}$，从而得到具有加权逐分量压缩误差的风险函数:

$$\sum_{j=1}^{m_y} \boldsymbol{w}(s_j) E\left((\boldsymbol{y}(s_j) - \hat{\boldsymbol{y}}(s_j))^2\right) = tr(\boldsymbol{W}\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}(\boldsymbol{b})), \tag{8}$$

其中 $\boldsymbol{W} = Diag（\boldsymbol{w}）$。最优基底 $\boldsymbol{b}_1$ 随后满足优化问题:

$$min_{\{\boldsymbol{b}\}} \left(\sum_{j=1}^{m_y} \boldsymbol{w}(s_j) E\left((\boldsymbol{y}(s_j) - \hat{\boldsymbol{y}}(s_j))^2\right) \right) = min_{\{\boldsymbol{b}\}} \left(tr(\boldsymbol{W}\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}(\boldsymbol{b})) \right), \quad \|\boldsymbol{b}\| = 1. \tag{9}$$

该问题不等价于简单的特征值计算，因此我们必须采用数值优化算法。对于实际的数值计算，最好使用略有不同的目标风险函数 ˜。我们通过将 $\boldsymbol{\Sigma}$ 代入式（8）并进行化简得到该函数:

$$R(\boldsymbol{b}) := tr(\boldsymbol{W}\boldsymbol{\Sigma}) - 2\boldsymbol{b}^t\boldsymbol{W}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{b} + \boldsymbol{b}^t\boldsymbol{W}\boldsymbol{b}\boldsymbol{b}^t\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{b}. \tag{10}$$

由此得到梯度和海森矩阵

$$\frac{\partial R}{\partial \boldsymbol{b}} = -2(\boldsymbol{W}\boldsymbol{\Sigma} + \boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{W})\boldsymbol{b} + 2(\boldsymbol{b}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{b})\boldsymbol{W}\boldsymbol{b} + 2(\boldsymbol{b}\boldsymbol{W}\boldsymbol{b})\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{b} \tag{11}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial R}{(\partial \boldsymbol{b})^2} = &-2(\boldsymbol{W}\boldsymbol{\Sigma} + \boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{W}) + 2(\boldsymbol{b}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{b})\boldsymbol{W} + 2(\boldsymbol{b}\boldsymbol{W}\boldsymbol{b})\boldsymbol{\Sigma} \\ &+ 4\boldsymbol{W}\left(\boldsymbol{b}\boldsymbol{b}^t\right)\boldsymbol{\Sigma} + 4\boldsymbol{\Sigma}\left(\boldsymbol{b}\boldsymbol{b}^t\right)\boldsymbol{W}. \end{aligned} \tag{12}$$

4.1.2 从 p 到 (p+1)

给定基向量 $\boldsymbol{B}_p = (\boldsymbol{b}_1 \cdots \boldsymbol{b}_p)$，我们随后推导出基向量 $\boldsymbol{b}_{p+1}$，它是能够最优压缩余项且与先前基向量正交的向量，即

$$\begin{aligned} \hat{\boldsymbol{y}}_p &= \boldsymbol{B}_p \boldsymbol{B}_p^t \boldsymbol{y} \\ \hat{\boldsymbol{y}}_{p+1} &= \boldsymbol{b}\boldsymbol{b}^t \left(\boldsymbol{y} - \hat{\boldsymbol{y}}_p\right). \end{aligned} \tag{13}$$

于是有

$$\left(\boldsymbol{y} - \hat{\boldsymbol{y}}_p\right) - \boldsymbol{b}\boldsymbol{b}^t \left(\boldsymbol{y} - \hat{\boldsymbol{y}}_p\right) = \boldsymbol{y} - \hat{\boldsymbol{y}}_p - \boldsymbol{b}\boldsymbol{b}^t \boldsymbol{y} \sim N(0, \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_p(\boldsymbol{b})), \tag{14}$$

其中 $\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_p(\boldsymbol{b}) = (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{b}\boldsymbol{b}^t)(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{B}_p\boldsymbol{B}_p^t)\boldsymbol{\Sigma}(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{B}_p\boldsymbol{B}_p^t)(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{b}\boldsymbol{b}^t)$。类似于上文，我们可以定义一个风险函数，用于概括余项 $\boldsymbol{y} - \hat{}\boldsymbol{y}_p$ 的加权逐分量压缩误差

$$\sum_{j=1}^{m_y} \boldsymbol{w}(s_j) E\left(\left(\left(\boldsymbol{y}(s_j) - \hat{\boldsymbol{y}}_p(s_j)\right) - \hat{\boldsymbol{y}}_{p+1}(s_j)\right)^2\right) = tr(\boldsymbol{W}\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_p(\boldsymbol{b})). \tag{15}$$

给定基的前 p 个向量，基的下一个向量 $\boldsymbol{b}_{p+1}$ 可通过一个具有不同目标函数的优化问题求得：

$$min_{\{\boldsymbol{b}\}}\left(tr(\boldsymbol{W}\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_p(\boldsymbol{b}))\right) \quad \text{with} \quad \|\boldsymbol{b}\| = 1, \quad \boldsymbol{b}^t\boldsymbol{b}_h = 0 \quad \text{for} \quad 1 \le h \le p. \tag{16}$$

如果所有权重都相同，最优向量将是 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的第 $p+1$ 个特征向量。风险函数的简化版本、梯度和海森矩阵可参照式 (10)、(11) 和 (12) 类似地计算。更多详情请参阅随附代码。

4.1.3 超越高斯分布

严格来说，第 4.1 节中的推导只需要协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$。并不需要高斯分布，因为式 (6) 中的所有期望都可以表示为 $\boldsymbol{y}$ 的方差和协方差的线性组合。这为将方法应用于协方差矩阵已知且可进行数值处理的任意多元分布开辟了空间。事实上，我们甚至不需要分布，只需代入 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的经验估计即可。

4.2 启发式解

求解式 (9) 和 (16) 中定义的问题并非易事，需要额外加以关注。首先，导出基 $\boldsymbol{b}_1$、.....、$\boldsymbol{b}_p$ 的一系列优化问题并非凸问题。无约束情形和未加权情形也同样如此。这里不展开细节；根据 $\boldsymbol{W}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的性质，局部极小值的数量通常约为 $2m_y$。由于问题本身具有对称性，它们对应的压缩质量不同的基仅有 m_y 个，即 $R(\boldsymbol{b}) = R(-\boldsymbol{b})$。这意味着通常存在大量可能的局部极小值，使得蛮力数值优化方法难以奏效。采用拉格朗日乘子、在单位超立方体表面不同点之间迭代的标准方法，其结果很大程度上取决于起点的选择；与找到全局极小值相比，这类方法更容易落入风险函数的局部极小值。更深层的原因在于，无约束目标函数终究是标准特征值问题的一种扭曲形式：潜在基向量分布在原点周围，每个方向上至多有一个。然而，唯一能让我们自由访问所有这些向量的点——原点本身——并不属于可用向量集合。因此，一种可能的解决方案是舍弃归一化条件，并从零开始进行数值优化——直接沿最速下降方向前进。由于梯度在零点处本身也为零，我们将改用海森矩阵 (12) 的最小特征向量，即在零点处采用二阶泰勒近似。最后，为得到一个基向量，我们将所得向量归一化为单位长度。综上，第一个基向量可按以下启发式方法求得：

1. 计算 $\boldsymbol{v}_{max}$ $\boldsymbol{W}\boldsymbol{\Sigma} + \boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{W}$ 的最大特征值对应的特征向量2.
$\boldsymbol{b}_{start} = \epsilon \cdot \boldsymbol{v}_{max}$3. 使用从 $\boldsymbol{b}_{start}$ 开始的数值优化器求解 $min_{\{\boldsymbol{b}\}}\left(tr($
$\boldsymbol{W}\tilde{\boldsymbol{\Sigma}})\right)$ 4. $\boldsymbol{b}_1 = \boldsymbol{b}_{opt} / \|\boldsymbol{b}_{opt}\|$

我们对（16）中的以下优化问题采用类似的方法，最终得到相同的算法，但其依据的是不同的方差矩阵，并且增加了一个步骤，以确保所得向量与此前计算出的向量正交。该算法属于启发式方法，但正如我们将在下文中展示的，它在实践中效果良好。还需注意的是，这种方法背后的更广泛思路已在文献中多次采用，例如 Ma 等人（2019）。

最后，我们想强调，与等价于特征向量问题的无权情形类似，我们的加权基底也与张量分解有关。我们已将这一数学重构移至补充材料。

4.3 数值细节

为了使问题能够求解，必须处理一些细微的数值问题；我们已将这些问题移至附录。我们的启发式方法分为两个步骤：如 4.2 所述，为了计算起始点处的最速下降方向，我们使用 RSpectra（Xuan（2016））库。该库可以计算矩阵最负的特征向量，而矩阵仅通过定义其与任意向量乘积的函数来指定，因此无需知道完整的海森矩阵，也能计算起始点。

给定这个起始点后，每个问题都需要各自的优化流程。针对这一问题有多种求解器可供选择；正如我们在 4.2 中所示，该问题是非线性且非凸的。我们采用 L-BFGS 流程：当梯度可以用闭式形式表示、但海森矩阵不可用时，这是标准的拟牛顿算法。关于数值优化的概述，可参阅 Nocedal 和 Wright（2006）。也可以使用经典的牛顿法流程。我们将第 3 节中计算出的权重向量代入框架，并针对每个应力分位数计算 400 个基向量。图 4 展示了两组权重向量对应的每个向量的总计算时间。可以看出，计算时间随.....的数量线性增加

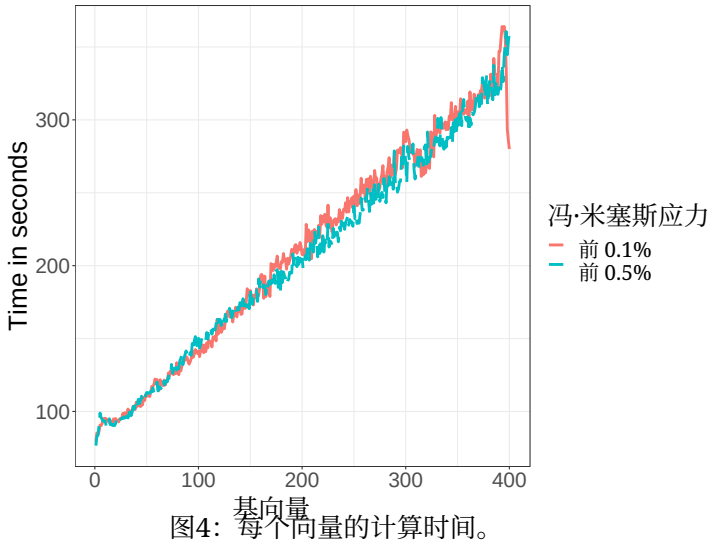


图4：每个向量的计算时间。

计算得到的基向量。这直接源于问题表述（16）：每个向量都取决于此前计算得到的所有向量，而这些向量逐一增加了目标函数的复杂度。比较两种权重向量时，计算成本没有显著差异，尽管对于应力值最高的 0.1%，成本可能略高。加权基的总体计算时间相当可观——长度为 400 的基平均需要约 16 小时，即 60000 秒。再加上新增基向量的效果逐渐减弱，计算时间却持续增加，因此更长的基并不理想。

4.4 基向量讨论

应力值最高的 0.5% 对应的前四个向量如图5所示。数值最高的 0.01% 对应的基向量呈现出类似的情况，因此这里省略。正如预期，基向量集中于前方权重较大的区域，并改变权重向量的分布模式，如图2的一部分所示。网格的其余部分则不太重要。

我们关注基所提供的近似质量，即其在压缩中的可用性，尤其是与普通的非加权高斯马尔可夫随机场基的比较。后者仅取高斯马尔可夫随机场协方差矩阵的主特征向量，并可视为权重相等的权重向量的一种特殊情况。我们考察经验误差，并将其定义为高应力值的简单均方压缩误差

$$\boldsymbol{e}_{comp}(s_j) = \frac{\sum_{k \in \mathcal{N}_{test}: \boldsymbol{y}_{<k>}(s_j) > q} (\boldsymbol{y}_{<k>}(s_j) - \hat{\boldsymbol{y}}_{<k>}(s_j))^2}{|k \in \mathcal{N}_{test} : \boldsymbol{y}_{<k>}(s_j) > q|}. \tag{17}$$

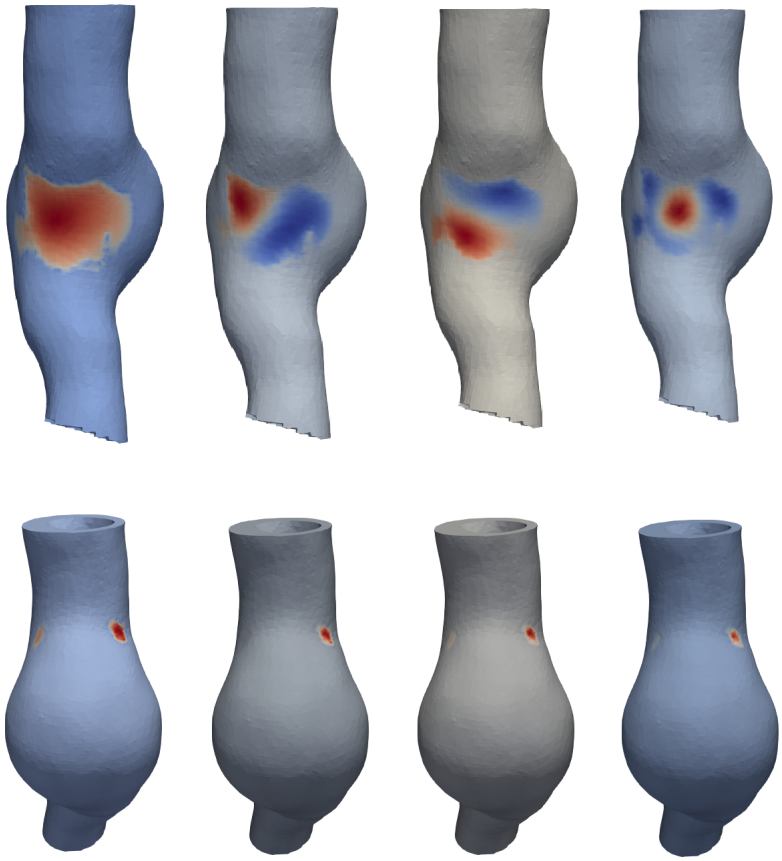


图5：从左到右：加权基底的前四个基向量，以及应力值最高的0.5%（正面在上，背面在下）。

请注意，我们只采用测试集，因为近似结果 $\hat{\boldsymbol{y}} = \boldsymbol{B}_p (\boldsymbol{B}_p)^t \boldsymbol{y}$ 取决于从训练集导出的权重。还需注意，实际应用中，我们必须按照 4.1 节中的假设，先减去样本均值，对应力向量进行标准化。结果如图6所示。图中显示，随着每增加一个向量，压缩质量的提升都会减小。此外，与前 0.1% 的应力值相比，前 0.5% 的应力值更容易通过加权基底进行压缩。这是预期之中的：对于特征数量可能接近网格点数量的小区域内的结果，加权基底的效果会更加显著。作为比较，我们还展示了无权降维（即使用标准特征向量）时的压缩误差。总体而言，这种比较表明，我们的方法确实能显著改善误差。特征向量基的近似误差比其加权基底对应项高一个数量级。对于长度相近的基，我们得到的误差最多可小三个数量级。无权基底中提取的特征向量包含全局特征，而截断会导致局部信息显著丢失。引入权重即可解决这一问题。

我们还在图7中，将经验压缩误差绘制在几何体上方，针对应力值最高的 0.5% 检查其空间分布。在此情形下，我们移除网格中与高应力预测无关的部分；也就是说，对于 850 个测试案例中从未出现过高应力值的所有点，我们将误差设为零。该误差展现了附加权重的影响。对于非加权基底，几何体前部的较高误差呈随机分布；而对于加权基底，误差则从中部向边缘逐渐降低。这是因为权重遵循图2所示的分布，并将大部分权重集中在中部。请注意，边缘上误差较高的点不一定会造成问题，因为图中所示的误差未根据高应力值出现的频率进行调整，而这些点出现高应力值的频率较低。观察几何体后部可见，非加权基底的误差结构再次较为随机，而加权基底的误差分布则更为均匀。总体而言，只要有足够的数据来缩小感兴趣区域的范围，而无需依赖足够的数据来估计实际分布，我们的加权基底就能实现高效压缩。

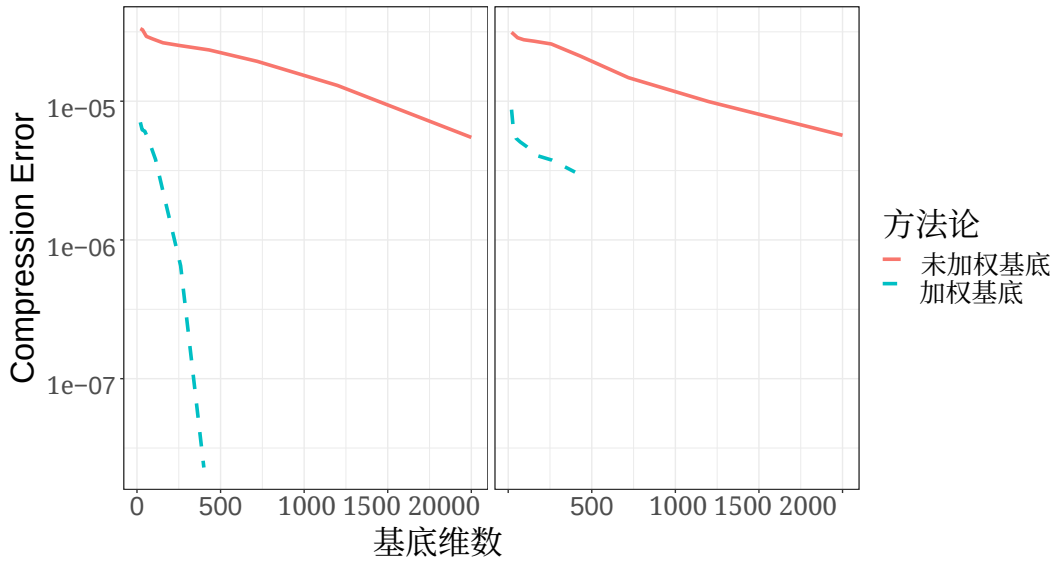


图6：测试集中最高应力值的 0.1%（左）和 0.5%（右）对应的平均平方压缩误差，分别采用加权基和未加权基。基的长度各不相同，误差以对数刻度显示。

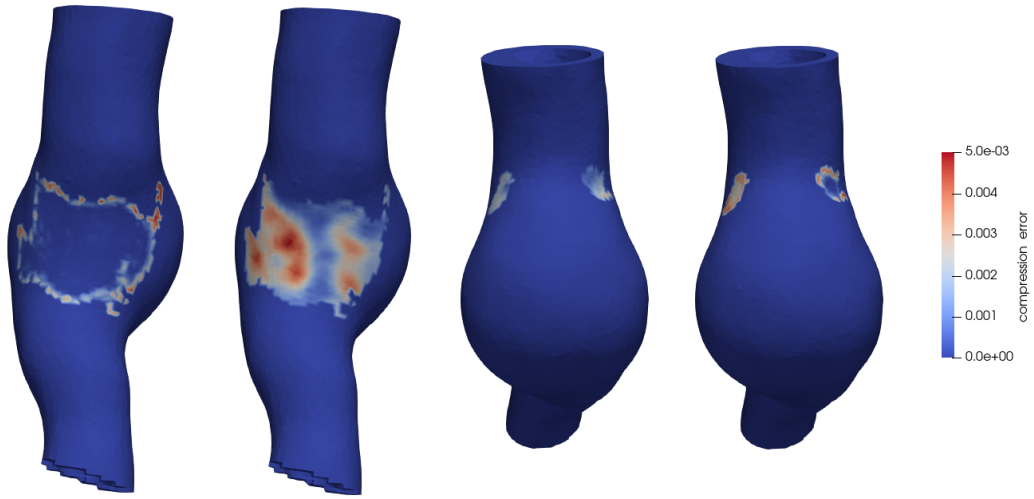


图7：加权基（第一幅和第三幅；100个基向量）与非加权基（第二幅和第四幅；1000个基向量）的测试集平均平方压缩误差。

5 应用：高应力预测

现在可以在实际应用中使用加权降维，其目标是根据低保真模拟预测高保真结果。如前所述，在这种情况下，我们几乎只关注较大的冯·米塞斯应力值。我们以 Striegel 等人（2022）为起点。该论文采用两步法，假设高斯马尔可夫随机场（GMRF），为低保真和高保真模拟分别构建基。这些基分别记为 $\boldsymbol{B}^x_{p_x}$（p_x 维低保真基）和 $\boldsymbol{B}^y_{p_y}$（其高保真对应基），与第 4 节所述方法中的无权情形等价；它们由图 1 所示两个网格对应的 GMRF 协方差矩阵的特征向量构成。第二步中，压缩结果 $\boldsymbol{u}_x = \tilde{\boldsymbol{B}}^x_{p_x}\left(\tilde{\boldsymbol{B}}^x_{p_x}\right)^t \boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{u}_y = \tilde{\boldsymbol{B}}^y_{p_y}\left(\tilde{\boldsymbol{B}}^y_{p_y}\right)^t \boldsymbol{y}$ 通过回归模型关联起来，如 ˜ 图 8 所示。本文在此方法基础上进行了改进，将高保真基底 $\boldsymbol{B}^y_{p_y}$ 替换为加权

$$\boldsymbol{x} \xrightarrow{\left(\tilde{\boldsymbol{B}}^{x}_{p_x}\right)^{T}} \boldsymbol{u}_x \xrightarrow{\text{回归}} \hat{\boldsymbol{u}}_y \xrightarrow{\tilde{\boldsymbol{B}}^{y}_{p_y}} \tilde{\boldsymbol{y}}$$

图 8：用于预测完整高保真结果的模型流程。

基 $\boldsymbol{B}^{y}_{p_y}(q)$，w 在第 4.4 节中此前用 $\boldsymbol{B}_p$ 表示，也取决于应力分位数 q。

我们再次使用包含 50 个案例的训练集，其余 850 个案例用于测试。此外，我们使用 $p_x = 100$，因为实验表明，这些向量足以有效压缩低保真结果，而该结果定义在一个小约 25 倍的网格上。关于低保真压缩误差与（未加权）基底长度之间关系的图，请参见附录。同时，我们改变用于高保真结果的基底长度 p_y。我们将平均预测误差定义为测试集中最高应力值与模型针对相关位置预测的值之间的均方误差：

$$\boldsymbol{e}_{pred}(s_j) = \frac{\sum_{k \in \mathcal{N}_{test}: \boldsymbol{y}_{<k>}(s_j) > q} (\boldsymbol{y}_{<k>}(s_j) - \tilde{\boldsymbol{y}}_{<k>}(s_j))^2}{|k \in \mathcal{N}_{test} : \boldsymbol{y}_{<k>}(s_j) > q|}. \tag{18}$$

~为了进行比较，我们分别计算加权基底 $\boldsymbol{B}^{y}_{p_y}$ 和未加权基底 $\boldsymbol{B}^{y}_{p_y}$的 $\boldsymbol{e}_{pred}$。预测误差如图9所示。总体趋势与图6所示的压缩误差一致：越容易预测的对象，其复杂程度就越低。

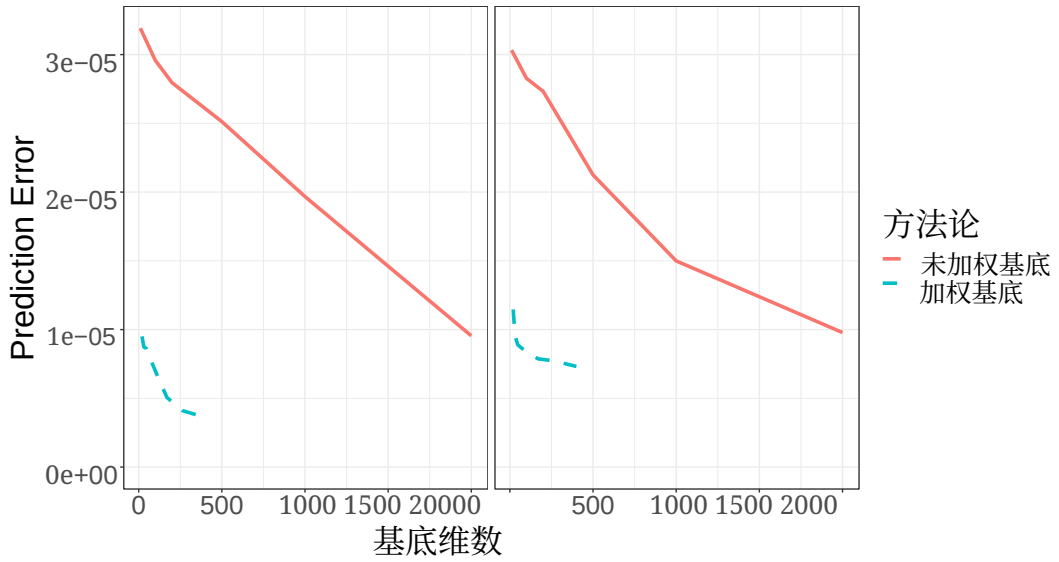


图 9：采用不同高保真基底长度的模型，对排名前 0.01%（左）和前 0.05% 应力值的平均平方预测误差。

在加权基底长度固定时，排名前 0.1% 的局部值优于排名前 0.5% 的值。与压缩的情况一样，对于非加权基底和加权基底，增加基向量所带来的效果都会逐渐减弱。然而，绝对误差显著更高，因为它也取决于低保真结果的预测能力。最后，与对应的非加权基底相比，加权基底的优势会随基底长度而变化。当非加权基底接近 2000 个特征向量时，在排名前 0.05% 的应力值上，我们得到的结果与加权方法相近。尽管如此，加权基底的性能仍略胜一筹，而且体积只有其四分之一。

为了进一步呈现预测质量，我们还在图10中绘制了加权基底和非加权基底的预测结果与真实结果的对比图。对于低保真结果，我们使用 $p_x = 100$ 个向量；对于非加权高保真基底，则使用 $p_y = 1000$。作为对比，我们加入了一个仅使用 $p_y = 100$ 个极为强大的加权基向量的模型，用于$\boldsymbol{B}^{y}_{p_y}(q)$。从上方的两张图可以看出，非加权方法不太能准确预测高应力值，尽管二者存在一定相关性。考虑到高应力水平意味着血管发生极其危险破裂的风险，这些结果并不令人满意。主要原因在于，用于高保真结果的基底不适合压缩和预测相关的局部高应力区域。下方加权基底的散点图表明，尽管误差仍然较大——这很可能是低保真结果所含信息有限所致——

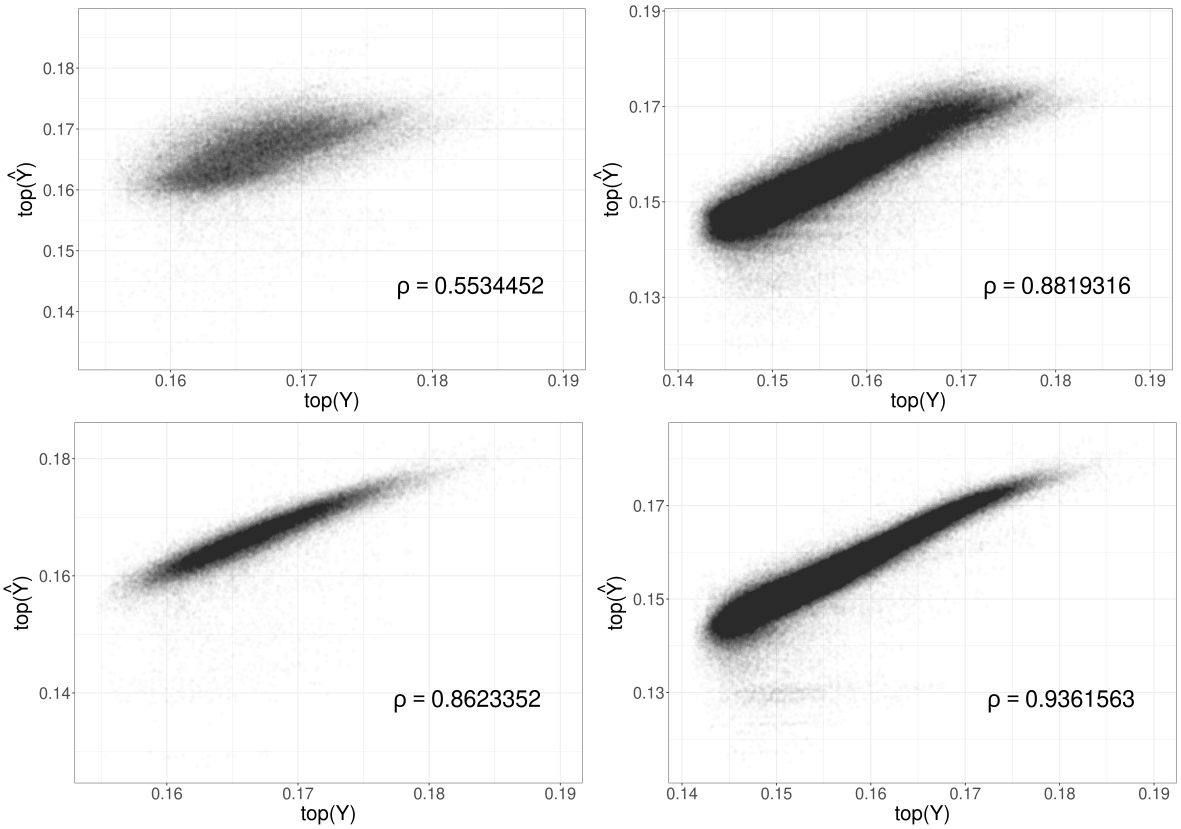


图10：利用未加权基（上）和加权基（下）得到的真实与预测的前 0.1%（最左）和 0.5%（最右）应力值散点图，包括相关系数。

但使用加权基向量显著改善了结果。尽管非加权基底的长度是其十倍，这一结论仍然成立。数据点更接近对角线，平均误差也更低。尽管如此，我们仍要强调，预测最高应力水平依然很困难。

6 讨论

本文提出了一种利用与观测相关性相对应的权重进行降维的方法。其出发点是利用协方差矩阵表示投影误差的公式，该公式允许广泛的应用。因此，我们利用其逆矩阵——精度矩阵的稀疏结构；这种结构源于同样稀疏的邻域结构。由此可以对所得优化问题进行数值求解。因此，我们的方法只需要在数值上可处理的协方差结构。在从低保真模拟预测高保真结果这一现实案例中，我们的方法展现出了优势。然而，该方法同样适用于其他场景：在这些场景中，需要进行降维，但数据点的重要性有所不同，这种重要性可通过权重衡量。

附录

杂项数值计算

为了让前文提出的基计算问题在实践中可解，还需要处理若干关键的数值问题。首先，我们只知道精度矩阵 $\boldsymbol{Q}$，却不知道它的逆矩阵——GMRF 协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$，如式（10）所示。 $\boldsymbol{Q}$，标准的 GMRF 精度矩阵（Rue and Held（2005））是稀疏的。此外，严格来说，该矩阵不可逆，因为常数向量是特征值为 0 的特征向量。不过，我们可以通过加上一个单位矩阵来解决这个问题，即在本文中我们使用

$$\tilde{\boldsymbol{Q}} = \boldsymbol{Q} + \epsilon \cdot \boldsymbol{I}_{m_y}, \tag{19}$$

其中 ϵ 是一个很小的常数，即 10^{-4}，而 $\boldsymbol{I}_{m_y}$ 是 m_y 维单位矩阵。

˜实际上对 $\boldsymbol{Q}$ 求逆既无用也不常见，因为这样计算开销很大，而且会产生一个稠密矩阵，占用大量内存。我们改为计算稀疏乔列斯基分解，这足以快速计算函数值和梯度公式（如式 (10) 和式 (11)）中涉及 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的矩阵/向量运算。该分解不足以实际计算完整的海森矩阵，如式 (12) 所示。不过，这并非必要，因为在我们的情形中，只需能够计算海森矩阵与给定向量的乘积即可。

针对高斯马尔可夫随机场类型的精度矩阵，有专门的例程。这些例程不仅利用了矩阵高度稀疏的特性，还利用了矩阵近似带状的结构（经过置换后），从而将计算成本降至 $O(n^{3/2})$。与常规的乔列斯基分解例程相比，这在计算时间上具有显著优势，而且常规例程也不会产生稀疏矩阵。关于此主题的全面参考资料，请参阅 Davis (2006)。计算时，我们使用基于 CHOLMOD（Davis (2021)）库的 R 包 Matrix。在配备 64 GB 随机存取存储器和 12 核 AMD Ryzen 9 3900X 处理器的机器上，对我们 80000 维的精度矩阵进行分解仅需 40 秒。

低保真压缩误差

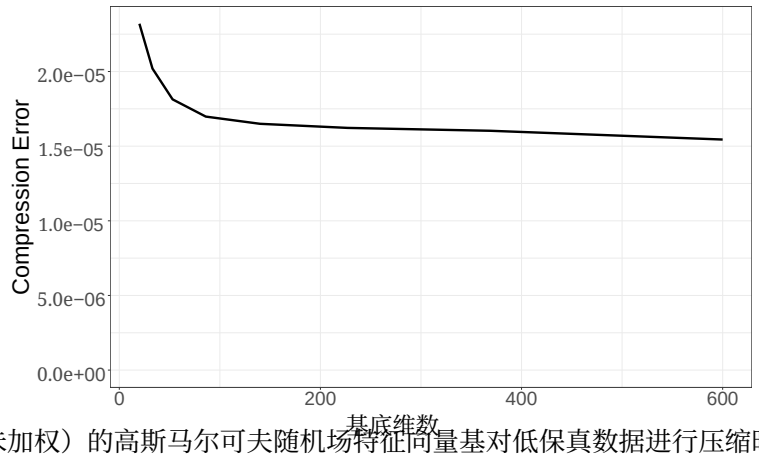


图 11：使用简单（未加权）的高斯马尔可夫随机场特征向量基对低保真数据进行压缩时的平方压缩误差。

声明与声明事项

未获得任何资金、拨款或其他支持。

补充材料

代码和数据：可在以下网址获取用于复现结果的完整代码和数据：
https://drive.google.com/drive/folders/1c68u1bATuOZEIAXuOYzIFb3urSNQwUav?usp=sharing。
重新表述为张量分解：reformulation tensor decomposition.pdf 包含将第一个基向量问题重新表述为张量分解的内容。
仿真研究：simulation study.pdf 包含一项规模较小的仿真研究，其中使用了采样的权重向量。

参考文献

Biehler J、Gee MW、Wall WA（2014）基于贝叶斯多保真方案，高效量化复杂大规模生物力学问题中的不确定性。《生物力学与机械生物学建模》14(3)：489–513

Biehler J、Kehl S、Gee MW、Schmies F、Pelisek J、Maier A、Reeps C、Eckstein HH、Wall WA（2016）利用贝叶斯回归对腹主动脉瘤壁特性进行概率性无创预测。《生物力学与机械生物学建模》

Davis TA (2006)《稀疏线性系统的直接方法》。工业与应用数学学会，DOI 10.1137/1.9780898718881，URL https://epubs.siam.org/doi/abs/10.1137/1.9780898718881，https: //epubs.siam.org/doi/pdf/10.1137/1.9780898718881

Davis TA (2021) SuiteSparse。https://github.com/DrTimothyAldenDavis/SuiteSparse，访问日期：2021-09- 22 Gabriel KR, Zamir S (1979) 通过最小二乘法和任意权重选择对矩阵进行降秩近似。Technometrics 21(4):489–498 Ghojogh B, Karray F, Crowley M (2019) 特征值与广义特征值问题：教程。1903.11240 Golub GH, Heath M, Wahba G (1979) 广义交叉验证作为选择合适岭参数的方法。Technometrics 21(2):215–223, DOI 10.1080/00401706.1979.10489751, URL https://www.tandfonline. com/doi/abs/10.1080/00401706.1979.10489751, https://www.tandfonline.com/doi/pdf/10.1080/ 00401706.1979.10489751 Li KC (1986) 岭回归中 cl 和广义交叉验证的渐近最优性及其在样条平滑中的应用。《统计年鉴》页码 1101–1112 Ma C, Wang K, Chi Y, Chen Y (2019) 非凸统计估计中的隐式正则化：梯度下降在线性收敛的同时解决相位恢复、矩阵补全和盲反卷积问题。计算数学基础 20(3):451–632, DOI 10.1007/s10208-019-09429-9, URL http://dx.doi.org/10.1007/ s10208-019-09429-9 Nocedal J, Wright SJ (2006)《数值优化》，第 2 版。Springer，美国纽约州纽约市 Rue H, Held L (2005)《高斯马尔可夫随机场：理论与应用》。Chapman & Hall/CRC，伦敦 Soltanpour S, Boufama B, Jonathan Wu Q (2017) 3D 人脸识别局部特征方法综述。Pattern Recognition 72:391–406, DOI https://doi.org/10.1016/j.patcog.2017.08.003, URL https://www. sciencedirect.com/science/article/pii/S0031320317303072 Striegel C, Biehler J, Wall W, Kauermann G (2022) 应用于腹主动脉瘤的多保真函数对函数模型。Technometrics 页码 1–26, DOI 10.1080/00401706.2021.2024453 Tamuz O, Mazeh T, Zucker S (2005) 校正大型测光光变曲线数据集中的系统效应。《皇家天文学会月报》356:1466 – 1470, DOI 10.1111/j.1365-2966.2004.08585.x Xuan Y (2016) Rspectra。https://github.com/yixuan/RSpectra/，访问日期：2018-08-09 Zebari R, Abdulazeez A, Zeebaree D, Zebari D, Saeed J (2020) 用于特征选择和特征提取的降维技术综述。《应用科学与技术趋势杂志》1(2):56– 70

arXiv:2305.03732v1 [math.NA] 2 May 2023

《Striegel 等人的〈有限元特征的加权高维数据降维——腹主动脉瘤高压应用〉》的补充材料

重新表述为张量分解

无权情形下基的计算等价于一个特征向量问题。同样，论文中讨论的一系列优化问题也可以用张量分解来重新表述。下面我们将以第一个基向量为例进行说明。具体而言，我们将证明， $\boldsymbol{b}_1$ 是一个多线性奇异值分解的第一个向量，该分解对应的张量将在下文推导。

我们将 $\boldsymbol{b}_1$ 定义为以下问题的解:

$$min_{\{\boldsymbol{b}\}}\left(tr(\boldsymbol{W}\tilde{\boldsymbol{\Sigma}})\right), \quad \|\boldsymbol{b}\| = 1 \tag{1}$$

其中 $\tilde{\boldsymbol{\Sigma}} = (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{b}\boldsymbol{b}^t)\boldsymbol{\Sigma}(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{b}\boldsymbol{b}^t)$。

那么（利用论文中的简化）有:

$$\begin{aligned} min_{\{\boldsymbol{b}\}}\left(tr(\boldsymbol{W}\tilde{\boldsymbol{\Sigma}})\right) &= min_{\{\boldsymbol{b}\}}\left(-2\left(\boldsymbol{b}\right)^t\boldsymbol{W}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{b} + \left(\boldsymbol{b}\right)^t\boldsymbol{W}\boldsymbol{b}\left(\boldsymbol{b}\right)^t\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{b}\right), \quad \|\boldsymbol{b}\| = 1 \\ &= min_{\{\boldsymbol{b}\}}\left(-2\left(\boldsymbol{b}\right)^t\boldsymbol{b}\left(\boldsymbol{b}\right)^t\boldsymbol{W}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{b} + \left(\boldsymbol{b}\right)^t\boldsymbol{W}\boldsymbol{b}\left(\boldsymbol{b}\right)^t\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{b}\right), \quad \|\boldsymbol{b}\| = 1. \end{aligned} \tag{2}$$

为了使多重线性形式更加明确，可以在零点附近对目标函数进行泰勒展开。

$$\begin{aligned} &min_{\{\boldsymbol{b}\}}\left(\boldsymbol{\mathcal{T}} \times_1 \boldsymbol{b} \times_2 \boldsymbol{b} \times_3 \boldsymbol{b} \times_4 \boldsymbol{b}\right), \quad \|\boldsymbol{b}\| = 1 \\ &\boldsymbol{\mathcal{T}} = \{\boldsymbol{\mathcal{T}}_{ijkl}\} = \left\{\frac{\partial f(\boldsymbol{b})}{\partial \boldsymbol{b}_{1,i}\partial \boldsymbol{b}_{1,j}\partial \boldsymbol{b}_{1,k}\partial \boldsymbol{b}_{1,l}}\right\}. \end{aligned} \tag{3}$$

此处 $\times_m$ 表示标准模 m 乘积。张量 $\boldsymbol{\mathcal{T}}$定义为

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\mathcal{T}} = &-4\boldsymbol{I} \times (\boldsymbol{W}\boldsymbol{\Sigma} + \boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{W}) - 4(\boldsymbol{W}\boldsymbol{\Sigma} + \boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{W}) \times \boldsymbol{I} \\ &+ 4\boldsymbol{W} \times \boldsymbol{\Sigma} + 4\boldsymbol{\Sigma} \times \boldsymbol{W}. \end{aligned} \tag{4}$$

则（4）的解 $\boldsymbol{b}_1$由使张量积下降最多的方向 $\boldsymbol{b}$ 给出，即对于$\boldsymbol{\mathcal{T}}$的多线性奇异值分解

$$\boldsymbol{\mathcal{T}} = \boldsymbol{\Lambda} \times_1 \boldsymbol{U} \times_2 \boldsymbol{U} \times_3 \boldsymbol{U} \times_4 \boldsymbol{U}, \tag{5}$$

其中， $\boldsymbol{\Lambda} \in \mathbb{R}^{m_y \times m_y \times m_y \times m_y}$ 是一个在对角线上包含奇异值 $\lambda_1 > \lambda_2 > , \ldots , > \lambda_{m_y}$的张量，而 $\boldsymbol{U}$是 $\mathbb{R}^{m_y}$的一组标准正交基。由此，我们得到解 $\boldsymbol{b}_1$ ，即 $\boldsymbol{U}$ 中与最负奇异值相关联的向量。有关该组合性质的详细信息，请参阅**?** 。

arXiv:2305.03732v1 [math.NA] 2 May 2023

Striegel 等人所著《腹主动脉瘤高压应用中的有限元特征加权高维数据降维》的补充材料

仿真研究

下面我们将介绍一项简短的仿真研究，探讨所提出的基计算方法在更广泛场景中的实用性：我们将为随机抽样得到的权重向量计算基，并采用下一节定义的理论误差率评估其性能。

理论误差率

我们的方法还有一个理论（压缩）误差比率，用于给出给定权重向量时风险的理论余项。对于非数据生成的权重向量（此时没有经验估计可用），或测试数据稀缺的情况，这种比率会非常有用。如果假设成立，这一质量度量更可取，因为它不依赖于测试样本。如果假设不成立，我们很可能会低估预期误差。

我们以一种直接明了的方式推导这一比率，依据的是主成分分析类压缩中广为人知的等价关系

$$r_{comp} = \frac{tr\left(\boldsymbol{W}(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{B}_p\left(\boldsymbol{B}_p\right)^t)\boldsymbol{\Sigma}(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{B}_p\left(\boldsymbol{B}_p\right)^t)\right)}{tr(\boldsymbol{W}\boldsymbol{\Sigma})}. \tag{1}$$

该比率将主成分分析误差率推广到了权重不相等的情况。通常，主成分分析误差率由与所计算特征向量对应的特征值之和除以协方差矩阵的迹得到。以排名前 0.5% 的值为例，对于 100 个向量，我们得到 ≈ 0.6，即该基包含了约 40% 的理论信息。

误差率数值计算

我们希望高效地计算 $tr(\boldsymbol{W}\boldsymbol{\Sigma})$，它是公式（1）中误差率的分母，同时也是添加到目标函数中的一个常数。它满足以下条件。

$$\begin{aligned} tr(\boldsymbol{W}\boldsymbol{\Sigma}) &= tr(\boldsymbol{W}^{0.5}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{W}^{0.5}) = tr(\boldsymbol{W}^{0.5}\boldsymbol{Q}^{-1}\boldsymbol{W}^{0.5}) \\ &= tr(\boldsymbol{W}^{0.5}\boldsymbol{C}^{-1}(\boldsymbol{C})^{-T}\boldsymbol{W}^{0.5}) \\ &= tr(\boldsymbol{W}^{0.5}\boldsymbol{C}^{-1}(\boldsymbol{C})^{-T}\boldsymbol{W}^{0.5}) \\ &= \left\|\boldsymbol{W}^{0.5}\boldsymbol{C}^{-1}\right\|_2^2. \end{aligned} \tag{2}$$

此处 $\boldsymbol{C}$ 表示下三角 Cholesky 矩阵。遗憾的是，无法避免计算其逆矩阵一次；不过，由于该矩阵具有三角结构，这个问题可以在合理的时间内解决。

仿真研究

由于我们的方法论依赖数值启发式，因此只有实际计算不同设置下的基（即计算各种权重向量 $\boldsymbol{w}$ 和协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$对应的基向量），才能进行公允的评估。本研究将仅计算高保真网格上若干权重向量对应的基。具体而言，我们将考察 8 种不同的权重向量。这些权重向量采用两步法计算：首先，在网格上选取固定数量的点（1，3，9，15）。然后，利用由 100 或 1000 个向量构成的特征向量基，对包含这些位置的向量进行平滑处理。此方法旨在考察该程序在权重向量于网格上的平滑度和分布不同的情况下的表现。每个基均计算 25 个基向量。

为了直观展示结果的空间特性，我们绘制了由 100 个特征向量平滑的 1 个中心的权重向量，以及由 1000 个特征向量平滑的 9 个中心的权重向量，并同时绘制了前 3 个基向量。

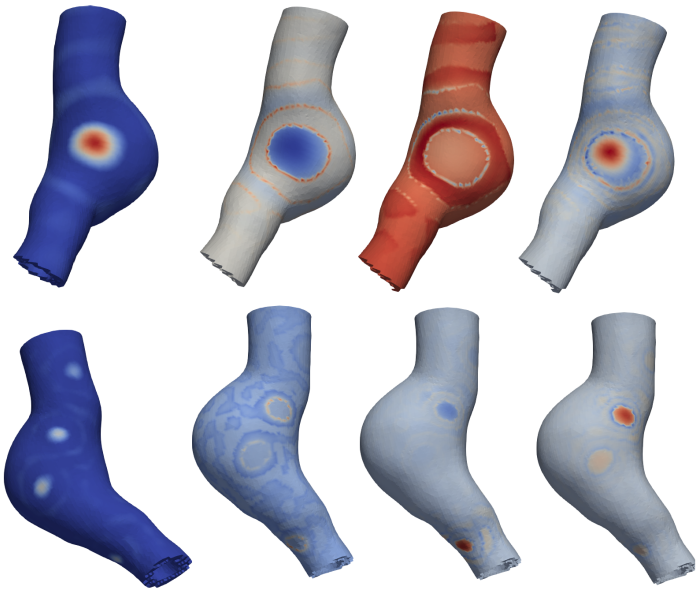


图 1：上图和下图均按从左到右的顺序展示：权重向量及其对应的前三个基向量。上图为 1 个中心，下图为 9 个权重中心。

基向量与权重向量紧密相关。它们遵循权重向量所呈现的模式，并在每次迭代中对其进行调整。

最后，我们还考察了计算所得基的质量，即式（1）的余项，我们称之为所包含的信息 i_c，并将其与基的长度进行比较。在此背景下，我们想指出两个关键事实：首先，信

息率无法恰当地评估数值启发式的质量，因为我们不知道最优基底。同样，我们也无法直接比较不同权重向量的信息率。原因在于，所需的向量数量会随权重的空间分布而异，才能表达相同的信息量。要解决这些问题，就需要用未知的最优信息率来调整信息率。

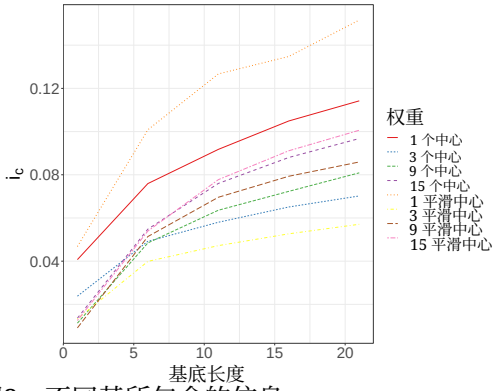


图2：不同基所包含的信息。

与标准主成分分析的情况一样，基底质量的提升会随着基的长度增加而呈指数级递减。由于前几个向量包含了主要特征，因此在实际应用中，将基的规模限制在较小范围内是有益的。更多空间分布的权重向量是否会使基计算更加困难，目前尚不清楚；也就是说，对于不同的权重向量，我们的方法似乎都能同样良好地发挥作用。

尽管绝对值难以解读，但考虑到共有 80000 个网格点，压缩率似乎令人满意。总体而言，基向量呈现出预期的特征。