arXiv:2603.16568v1 [cs.LG] 17 Mar 2026

流形匹配自编码器

Laurent Cheret [1] **Vincent L´etourneau** [2] **Isar Nejadgholi** [3] **Chris Drummond** [3] **Hussein Al Osman** [1] **Maia Fraser** [1]

摘要

我们研究了一种简单的、用于自编码器的无监督正则化方案，称为流形匹配（MMAE）：通过最小化均方误差，使潜在空间中的成对距离与输入数据空间中的成对距离对齐。由于对齐针对的是成对距离而非坐标，因此该方法还可扩展到数据的低维表示，从而提高方法的灵活性。我们发现，与类似方法相比，这种正则化在基于最近邻距离保持情况的指标以及基于持久同调的度量上表现更佳。我们还观察到，MMAE 能够对“多维尺度分析”（MDS）进行可扩展的近似。

1. 引言

降维是现代数据分析的基础，有助于实现高维数据集的可视化与解读。自编码器（Hinton 和 Salakhutdinov，2006年；Chen 和 Guo，2023年）通过最小化重构误差来学习压缩表示，但仅凭这一目标并不能确保保留任何特定的几何或拓扑结构。如果编码器忽略这些结构，输入空间中相似的对象可能会被映射到潜在空间中彼此不同的区域，从而产生不连续性，负面影响解码器的重构能力（Batson 等人，2021年）。这一问题也会影响其他下游任务。例如，在异常检测、可视化单细胞数据中的发育轨迹（Chari 和 Pachter，2023年），或探索生成模型中的潜在空间时（Chadebec 和 Allassonni`ere，2022年；Xu 等人，2024年），都需要额外的正则化。

1.1. 自编码器中的拓扑与几何

继采用持久图等拓扑数据分析工具的统计方法取得成功之后（Su 等人），近期研究致力于提升自编码器对拓扑特征的保留能力；我们将这些方法归类为拓扑方法或几何方法。 **拓扑方法**（Moor等人，2020年b；Trofimov 等人，2023年）利用持久同调识别并保留多尺度结构特征，例如连通分支、环和空洞。**几何方法**（Singh 和 Nag，2021年；Nazari 等人，2023年；Lim 等人，2024年）侧重于保留局部角度和距离。

例如，嵌套球体数据集（Moor等人，2020b）是一个简单但高度非线性的合成案例：十个 100 维的小球体嵌套在一个更大的 100 维包围球体内。拓扑准确的二维表示应保留这种嵌套关系，即外层球体簇环绕着内层球体簇。迄今为止，只有拓扑自编码器变体能够稳定地在二维/三维空间中恢复这一结构。其他自编码器变体以及 UMAP（McInnes 等人，2018）、t-SNE（van der Maaten 与 Hinton， 2008）和 PHATE（Moon 等人， 2017）等非参数方法在此案例中均告失败。有趣的是，我们发现经典方法多维尺度分析（MDS）（Torgerson， 1952）也能成功恢复这种嵌套关系——据我们所知，此结果此前尚未见于相关研究。

1.2. 我们的方法：成对距离对齐

经典多维尺度分析（Torgerson，1952）利用整个数据集的成对距离矩阵来保持全局几何。相比之下，TopoAE（Moor等人，2020b）和 RTD-AE（Trofimov 等人，2023）等拓扑自编码器，则在小批量级别的成对距离矩阵上使用持久同调签名。前者侧重于几何距离——这可能会隐式捕捉拓扑——而后者优先关注多尺度结构连通性；研究表明，这种关注能更好地保持流形的全局几何。这些方法存在一个问题：MDS 由于计算 $n \times n$成对距离矩阵所需的内存，难以随数据规模扩展；而拓扑自编码器的拓扑变体也难以随批

[1]渥太华大学计算机科学系，渥太华，加拿大 [2]MILA，蒙特利尔，加拿大 [3]加拿大国家研究委员会，渥太华，加拿大。通信作者：LaurentCheret<lcher021@uottawa.ca>。

预印本。*2026*年*3*月*18*日。

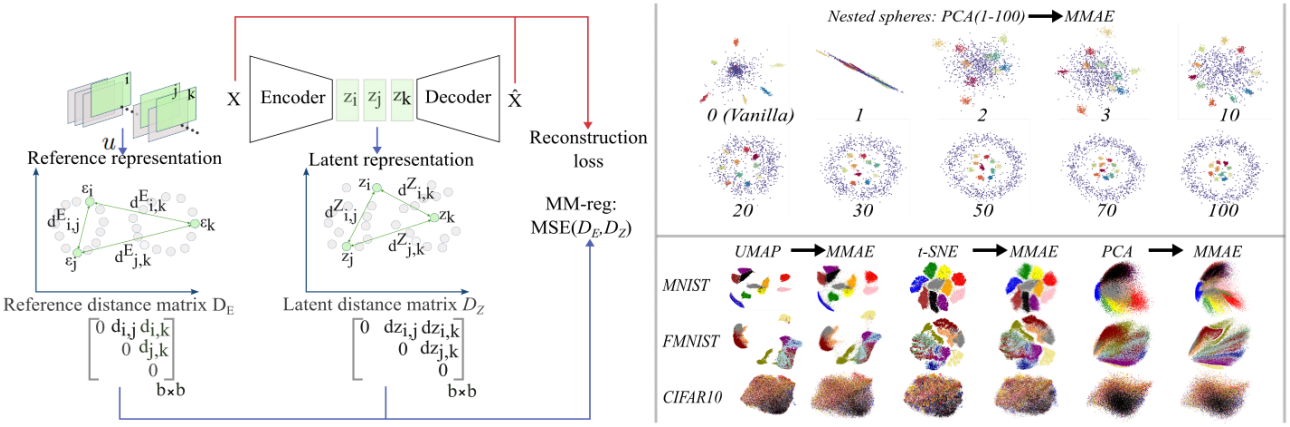


图 *1.* 左侧： 当前方法概览。流形匹配正则化 *MM-reg* 被加入标准自编码器的目标函数中，从而构成 MMAE。 右上： 嵌套球体数据集的二维潜空间（Moor等人，2020b）。标准自编码器 （原始版本）不使用 MM-reg；另有 9 个 MMAE 模型，其正则化中使用不同数量的主成分分析分量（$1 \to 100$）。右下： MMAE 的二维潜空间在 MNIST、F-MNIST 和 CIFAR10 数据集中“复制”UMAP、t-SNE 和主成分分析生成的二维嵌入。

量大小扩展 b，因为持久同调计算是按批次进行的。由此引出一个核心问题：在自编码器中施加全局几何保持时，潜在空间会发生什么变化？

我们通过引入一种称为流形匹配（MM-reg）的正则化项来解决这一问题，该项定义为潜在空间的成对距离矩阵 D_Z 与参考距离矩阵 D_E 之间的均方误差；参考距离矩阵由输入数据 X 本身或其对应的嵌入计算得到。关键在于，由于 D_Z 和 D_E 都是 $b \times b$ 矩阵（其中 b 为批量大小），参考空间的维度与瓶颈维度相互独立。这意味着，例如，可以使用来自 50D 或 100D 参考表示的距离，对二维潜在空间进行正则化。

请注意，用距离矩阵替代数据有着坚实的理论依据。简言之，距离保持意味着拓扑保持。这正是第2.2节的内容。

图1展示了这一效果在嵌套球面数据集上的表现。没有正则化时，标准自编码器会将内层球体投影到代表外层球体的簇之外，这与先前文献的结论一致。然而，使用 MM-reg 后，随着参考中的主成分分析成分数量增加，原始数据中的嵌套结构逐渐显现，内层球体簇也逐步被拉入外层球体簇之中。在参考嵌入为二维的情况下，可以看到一种“复制”效应：二维潜在空间近似于参考表示，使自编码器能够将已知表示扩展到新的数据点。

具体而言，我们的**贡献**如下：**(1)**我们提出了**流形匹配自编码器（MMAE）**，这是一种无监督的全局结构感知降维框架。**(2)** 我们研究了该框架在拓扑直观易懂的合成数据集上的可视化效果。**(3)**我们将实验扩展到真实世界基准数据集，结果表明，该方法的表现优于多种拓扑和几何自编码器变体。**(4)**我们讨论了将全局几何保持作为拓扑保持的替代指标。

2. 背景

我们回顾本方法所依据的关键概念：作为拓扑比较黄金标准的持续同调，以及距离保持与拓扑之间的关系。

2.1. 持久同调

自20世纪60年代以来，人们就已认识到理解数据拓扑的重要性（Rosenblatt，1962）。这一关切与流形假设密切相关：高维数据 $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^k$ 满足 $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^n$ 通常位于低维流形上或其附近 $\mathcal{M} \subset \mathbb{R}^n$。持久同调提供了一种有理论依据的方法，可在不同尺度上检测该流形的拓扑特征（Edelsbrunner 等，2002；Carlsson，2009）。

2.2. 从距离保持到拓扑保持

多维尺度分析（MDS）（Torgerson，1952）提供了一种经典方法，用于寻找一个低维点构型，使其成对距离尽可能保留输入距离矩阵中的距离。其关键洞见是：

尽管点$\mathbf{x}_i$，$\mathbf{x}_j \in \mathbb{R}^n$ 可能有许多坐标，但它们的欧氏距离 $d_{ij} = \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|_2$ 将它们之间的关系简化为一个标量值。值得注意的是，将所有此类成对距离汇集成矩阵$\mathbf{D}$ 后，便包含了足够的信息来恢复原始几何构型。经典多维尺度分析通过对相关 Gram 矩阵进行特征分解，将距离关系转换为几何构型，从而对此加以形式化（Borg 与 Groenen，2005；Schoenberg，1935）。

这种以距离为核心的观点，通过稳定性定理自然地与拓扑保持相联系。对于具有 Vietoris-Rips 持久图的有限度量空间：

定理 2.1(Cohen-Steiner 等人，2007年；Chazal 等人，2016年）。

$$d_B(Dgm_p(X), Dgm_p(Y)) \leq 2 \cdot d_{GH}(X, Y) \quad (1)$$

对所有同调维数 $p \geq 0$，其中 d_B 为瓶颈距离，d_{GH} 为 *Gromov-Hausdorff* 距离。

由于一致的距离保持对 d_{GH} 给出了界，我们得到：

推论 2.2 (距离保持蕴含拓扑保持)。若编码器 f_θ 满足$|d_X(x_i, x_j) - d_Z(f_\theta(x_i)\ f_\theta(x_j))| \leq \epsilon$ 对所有点对均成立，则$d_B(Dgm_p(X), Dgm_p(f_\theta(X))) \leq 2\epsilon$ 对所有 $p \geq 0$均成立。

这一结果揭示了我们的前进方向：与其在训练期间计算持久同调，不如通过保留距离来保留拓扑。流形匹配自编码器通过成对距离将潜在空间与参考几何对齐，从而将这一原则付诸实践。实际上，MMAE 在小批量层面应用这一原则，利用了这样一种理论依据：随着批量大小增加，批次拓扑会逼近全局拓扑。

实际需要考虑的是，训练使用的是小批量，而非完整数据集。TopoAE（Moor等人，2020b）通过两个关键结果为这种方法提供了理论依据。首先，他们证明，批次拓扑偏离完整数据集拓扑的概率受几何采样所界定：

$$\begin{aligned} &P(d_B(\mathrm{Dgm}(X), \mathrm{Dgm}(X^{(b)})) > \epsilon) \\ &\leq P(d_H(X, X^{(b)}) > \tfrac{\epsilon}{2}) \end{aligned} \quad (2)$$

其中，$X^{(b)}$ 是一个大小为 b 的小批量，d_H 为 Hausdorff 距离。其次，他们表明，随着批量大小接近数据集大小，期望 Hausdorff 距离收敛于零，这意味着批量级拓扑会越来越接近全局拓扑。这证明了将按批量的距离保持作为全局结构保持的代理是合理的。

3. 相关工作

学习拓扑正确表征这一挑战，推动了多种自编码器变体的发展。我们围绕核心问题回顾这些方法：如何高效地捕捉全局结构?

3.1. 拓扑自编码器

TopoAE（Moor等人，2020b）开创了将持久同调用作训练信号的方法。给定输入空间和潜在空间中的距离矩阵 D_X以及 D_Z，该方法会惩罚拓扑显著点对之间的差异：

$$\mathcal{L}_{\text{topo}} = \frac{1}{2} \sum_{(i,j) \in \mathcal{P}_X} (D_X^{ij} - D_Z^{ij})^2 + \frac{1}{2} \sum_{(k,l) \in \mathcal{P}_Z} (D_Z^{kl} - D_X^{kl})^2 \quad (3)$$

其中 $\mathcal{P}_X$，$\mathcal{P}_Z$ 表示在拓扑上显著的配对（持久图中的出生/死亡）。尽管理论上可以推广到一般情形，出于效率考虑，实现重点关注 H_0（连通分支），并借助最小生成树进行计算。该方法存在两项局限：（1）损失对点扰动不连续，因为微小变化就可能导致生成树突然改变（Trofimov 等人，2023）；（2）$\mathcal{L}_{\text{topo}} = 0$ 虽是拓扑等价的必要条件，却并非充分条件，无法捕捉环等高阶特征。

3.2. RTD-AE：表示拓扑散度自编码器

RTD-AE（Trofimov 等人，2023）通过提供更强的保证来解决这些局限：RTD 为零可确保所有 同调次数上的持久条形码均一致。关键在于，该损失是连续的，并考虑了特征的定位。该方法针对 $2n$个点构建联合距离矩阵：

$$D_{\text{joint}} = \begin{pmatrix} \mathbf{0}_{n \times n} & D_X^T \\ D_X & \min(D_X, D_Z) \end{pmatrix} \quad (4)$$

损失为 $\mathcal{L}_{\text{RTD}} = \sum_{(b,\ d) \in \text{持久图}\ (D_{\text{joint}})} |d - b|^p$，对持久区间的寿命求和。值得注意的是，他们的实验表明，在潜在维度较高时（64–128D），主成分分析与拓扑方法之间的差距会缩小。然而，RTD 的计算成本会随批量大小增加而大幅上升，通常需要分两阶段训练（先重构，再学习拓扑）。

3.3. 结构保持自编码器

结构保持自编码器（SPAE）（Singh 和 Nag，2021年）学习低维表示，使成对距离成为输入空间距离经过线性缩放后的版本。该方法定义距离比 $r_{ij} = d_Z(z_i, z_j) / d_X(x_i, x_j)$ 并通过最小化对数比的方差进行正则化：

$$\mathcal{L}_{\text{SPAE}} = \mathcal{L}_{\text{recon}} + \lambda \cdot \mathrm{Var}\left[\log r_{ij}\right]_{i<j} \quad (5)$$

通过对数运算，该损失具有尺度不变性：它允许任意统一缩放 $d_Z \approx c \cdot d_X$，同时惩罚非均匀失真。然而，它依赖原始输入距离，而这些距离在高维空间中会因维数灾难而变得不可靠。此外，对于较小的距离，比率形式会放大噪声：当 $d_X \approx \epsilon$时，比率 d_Z/d_X 会变得不稳定，而$\log(d_Z/d_X)$ 则会呈现较高的方差。
SPAE-图的变体用基于相似性图上最短路径计算的测地距离替代欧氏距离，但会对图稀疏性敏感：数据中的空洞会导致路径绕行，从而夸大距离并产生虚假的几何失真（Lim 等人，2024）。

3.4. 几何自编码器

GeomAE（Nazari 等人，2023）将关注重点从全局几何转向解码器的局部几何 $g: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^d$以防止可视化中出现不合理的拉伸。对于给定的潜在点 z，拉回度量 $G(z) = J_g(z)^\top J_g(z)$ 捕捉局部体积失真和各向异性。这种失真通过示性曲面进行可视化——即拉回度量中的单位球体，它们揭示了解码器压缩或扩展的方向。GeomAE通过最小化广义雅可比行列式的方差来实现这一点：

$$\mathcal{L}_{\text{geom}} = \text{Var}_z \left[\log \det(G(z))\right] \tag{6}$$

这有助于在整个嵌入中保持面积并实现均匀缩放。

3.5. 图几何保持自编码器

GGAE（Lim 等人，2024）用相似性图取代欧氏距离。通过定义权重为 $K_{ij} = \exp(-\|x_i - x_j\|^2/h)$的图，可以证明（Shi 与 Sun，2016年），如果分布支撑在光滑流形上，那么随着采样点数量趋于无穷，该加权图的图拉普拉斯算子将收敛到分布流形上的拉普拉斯–贝尔特拉米算子。黎曼失真损失：

$$\mathcal{L}_{\text{ggae}} = \mathbb{E}\left[\text{Tr}(H^2) - 2\text{Tr}(H) + n\right], \quad H = JL^{-1}J^\top \tag{7}$$

惩罚偏离等距性的情况。他们的批量核方法从预先计算的全局核中选取子矩阵，使小批量能够利用全局结构。然而，带宽 h 的最优选择仍高度依赖数据集——作者承认，将方法扩展到新数据集的负担很重。对于大型数据集，GPU 能高效计算带宽，但代价是较高的内存消耗。

4. 流形匹配自编码器

4.1. 概述

MMAE 由编码器 $f_\theta: \mathbb{R}^D \to \mathbb{R}^d$ 和解码器$g_\phi: \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^D$ 组成，训练时采用结合了重构损失与距离保持正则化的目标。

4.2. 参考空间

给定训练数据 $X \in \mathbb{R}^{n \times D}$，参考空间 E 定义了潜在空间应保留的目标距离结构。最简单的形式是，$E = X$ 直接使用原始输入空间，类似于Singh 和 Nag(2021年)。更一般地，E 可以是数据的任意嵌入：

$$E = u(X) \in \mathbb{R}^{n \times k} \tag{8}$$

其中 $u: \mathbb{R}^{n \times D} \to \mathbb{R}^{n \times k}$ 是一个嵌入。这种表述具有灵活性：可以选择嵌入 u 来强调不同的几何属性——线性投影保留全局结构，而 UMAP 等基于邻域的方法则保留局部拓扑。

对于高维数据，由于维数灾难，距离会趋于集中（Aggarwal 等人，2001年）；使用降维后的嵌入 $E = u(X)$ 和 $k < D$，相比原始空间，能够提供更有意义的距离比较。关键在于，u 充当预处理步骤，过滤噪声并提取相关几何结构，随后由自编码器学习匹配该结构。除原始输入外，我们主要关注主成分分析作为参考空间。

4.3. 流形匹配正则化（MM-reg）

对于一批 n 个点，其潜在表示为 $Z \in \mathbb{R}^{n \times d}$，参考表示为 $E \in \mathbb{R}^{n \times k}$（若使用原始输入，则 $k = D$），我们计算成对欧几里得距离矩阵：

$$D_Z^{ij} = \|z_i - z_j\|_2 \tag{9}$$

$$D_E^{ij} = \|e_i - e_j\|_2 \tag{10}$$

流形匹配正则化是这些距离矩阵之间的均方误差：

$$\mathcal{R}_{\text{MM}} = \frac{1}{n^2} \sum_{i,j} (D_Z^{ij} - D_E^{ij})^2 \tag{11}$$

这会直接惩罚潜在表示与参考表示之间成对距离的差异，从而促使编码器保留参考空间的度量结构。

4.4. 总目标函数

完整的 MMAE 目标函数结合了重构与流形匹配：

$$\mathcal{L}_{\text{MMAE}} = \mathcal{L}_{\text{recon}} + \lambda \cdot \mathcal{R}_{\text{MM}} \tag{12}$$

数据集	方法	DC↑	TA↑	$KL_{0.1}$↓
嵌套球体 (*101D*)	基础自编码器	-0.40	0.42	0.85
	MMAE（我们的方法）	**0.67**	**0.70**	**0.23**
	TopoAE	0.63	0.69	0.29
	RTD-AE	0.61	0.69	0.29
	GeomAE	-0.18	0.48	0.66
	GGAE	0.11	0.54	0.46
	SPAE	0.55	0.66	0.32
链接 Tori (*100D*)	基础自编码器	0.71	0.77	0.03
	MMAE（我们的方法）	**0.91**	**0.87**	**0.003**
	TopoAE	0.84	0.82	0.008
	RTD-AE	0.90	0.86	0.005
	GeomAE	0.77	0.78	0.01
	GGAE	0.80	0.81	0.02
	SPAE	0.89	0.85	**0.003**
同心球体 (*1000维*)	基础自编码器	0.51	0.66	0.37
	MMAE（我们的方法）	**0.61**	**0.68**	**0.30**
	TopoAE	0.59	0.67	0.31
	RTD-AE	**0.61**	**0.68**	0.31
	GeomAE	0.41	0.61	0.38
	GGAE	0.39	0.56	0.39
	SPAE	0.59	0.67	0.32
猛犸象 (*3D*)	基础自编码器	0.94	0.91	0.007
	MMAE（我们的方法）	**0.99**	**0.96**	**0.001**
	TopoAE	0.96	0.91	0.003
	RTD-AE	0.97	0.92	0.002
	GeomAE	0.95	0.91	0.007
	GGAE	0.95	0.91	0.004
	SPAE	0.98	0.93	0.002
地球 (*3D*)	基础自编码器	0.94	0.92	0.01
	MMAE（我们的方法）	**0.98**	**0.95**	**0.002**
	TopoAE	0.95	**0.95**	0.01
	RTD-AE	0.87	0.90	0.02
	GeomAE	0.94	0.92	0.009
	GGAE	0.87	0.87	0.03
	SPAE	**0.98**	0.93	**0.002**

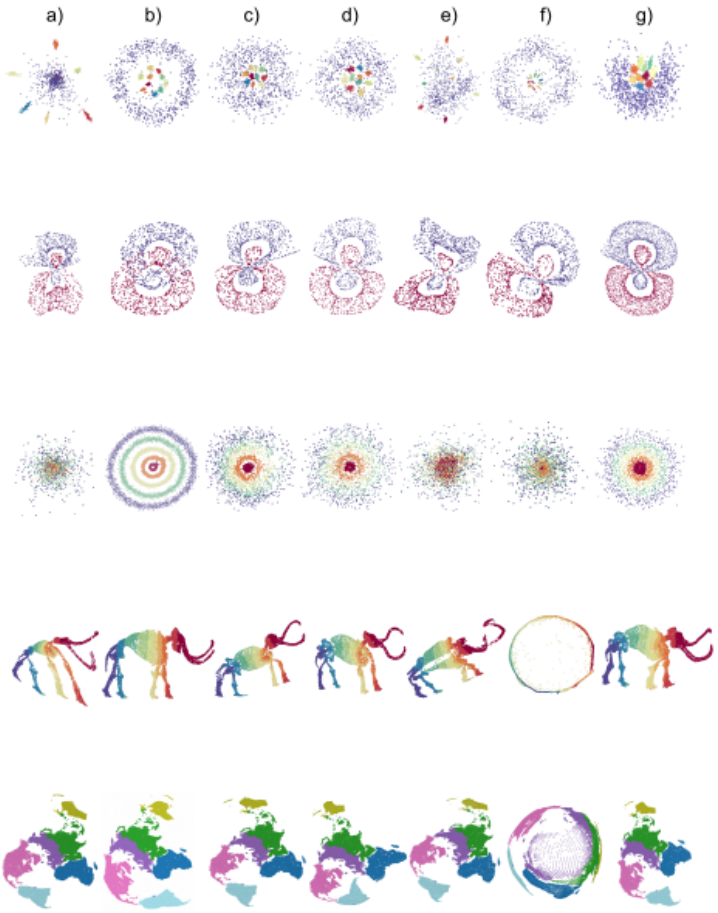


图 2. **合成形状的二维潜空间** 左侧： 定量指标。对 5 次运行取平均值（针对指标 $KL_{0.1}$ 进行优化）右侧： 二维潜在表示：**a)** 标准自编码器（原始版本）；**b)** MMAE；**c)** TopoAE；**d)** RTD-AE；**e)** GeomAE；**f)** GGAE；**g)** SPAE。

其中 $\mathcal{L}_{\text{recon}} = \frac{1}{n}\sum_i \|x_i - g_\phi(f_\theta(x_i))\|^2$ 和 λ 控制重构保真度与结构保持之间的权衡。

5. 实验

5.1. 数据集

合成数据集：球体(Moor等人，2020b）：101维空间中嵌入一个较大球体内的10个小球体，形成11个连通分支，是拓扑保持的标准基准。**相连环面**：通过随机正交投影，将两个相互交错的环面作为 Hopf链环嵌入100维空间。无论二维表示的视角如何，总会有一个环面与另一个环面重叠。**同心球体**：高维空间中中心重合的1000维嵌套球壳。**猛犸象**：形成猛犸象骨骼结构的三维点云（MNoichl，2025）。**地球**：地球仪的三维点云（Nazari 等人，2023），以六大洲着色：北美洲/中美洲、南美洲、欧洲、亚洲和大洋洲。

真实世界数据集。MNIST和 **Fashion-MNIST** (Le- cun 等人，1998年；Xiao 等人，2017年)： 28×28 灰度图像（784 个维度）。**CIFAR-10**(Krizhevsky，2009)：$32 \times 32 \times 3$ 彩色图像（3072 个维度）。**PBMC3k**：包含 1,838 个基因、2,700 个细胞的单细胞RNA测序数据（10xGenomics，2016年），以及 **Paul15：**包含 3,451 个基因、2,730 个小鼠骨髓细胞的数据（Paul 等人，2015），二者均体现生物 manifold 结构，并可通过 Scanpy 库获取（Wolf 等人，2018）。

5.2. 基线方法

我们将方法与拓扑和几何自编码器方法进行比较：**基础自编码器**：仅采用均方误差重构损失的标准自编码器。**TopoAE** (Moore 等人，2020b)：基于最小生成树上的持久同调进行拓扑正则化。**RTD-AE** (Trofimov 等人，2023)：采用联合过滤构造的表示拓扑散度。**GeomAE**(Nazari 等人，2023)：通过最小化解码器雅可比方差实现几何正则化。**GGAE**(Lim 等人，2024)：通过基于拉普拉斯算子的失真保持图几何。**SPAE** (Singh 和 Nag，2021年)：通过潜在空间与输入空间之间对数距离比的方差实现结构保持正则化。

5.3. 评估指标

我们使用以下指标评估方法：**距离相关性（DC）**和**三元组准确率（TA）**，用于衡量全局几何的保留情况；**KL 密度**（Moor等人，2020b），在尺度 $\sigma = 0.1$ 下衡量密度的保留情况（遵循Moor等人（2020b）和Trofimov 等人（2023），这是我们用于优化超参数的指标，因为该尺度在局部/全局密度之间实现了良好平衡）；**持久图上的 Wasserstein 距离**（W_0），用于衡量连通分支的拓扑保留情况；**可信度（Trust）**和**连续性（Cont）**（Venna 和 Kaski，2001）是互补指标，用于衡量尺度 $k \in \{5, 10, 50, 100\}$下局部邻域的保留情况；以及**重构误差（Rec）**，即均方误差。

5.4. 实现细节

所有方法均采用 Moor 等（2020b）所述的多层感知机架构：编码器配备对称解码器，使用 ReLU 激活函数、权重衰减、Adam 优化器（Kingma 和 Ba，2017）以及批归一化。CIFAR10 使用卷积神经网络。学习率、批量大小等超参数以及各模型的具体设置，均按照 Moor 等（2020b）和 Trofimov 等（2023）类似的优化流程选定。批量大小在 $[16;\ 256]$ 的范围内选取（RTD 除外，由于更大的批量会显著增加训练时间，其批量大小限制在最多 80），学习率为 $[10^{-4};\ 10^{-2}]$。对于 MMAE，在真实世界数据集上，我们允许选择超参数时使用 Scikit（Pedregosa 等，2011）PCA 实现，将数据降至原始数据维度的 80%，以减少距离中的噪声，并缓解维度灾难（Aggarwal 等人，2001）。每个模型在优化步骤中进行 20 次试验，优化指标为 KL 密度（$\sigma = 0.1$），与 Moor 等（2020b）和 Trofimov 等（2023）相同。该指标衡量整个表示中的密度保持情况，并与拓扑变体目标紧密相关。采用最佳配置的模型会重新训练 5 次，并报告测试集上的平均值。

5.5. 结果

合成数据集：在**嵌套球体**（图2）中，将外层球体和内层球体反转的模型得到负的 DC。只有 MMAE 和拓扑变体能够恢复嵌套关系；GGAE 的嵌套关系不一致（DC 为 0.11）。只有 MMAE 保留了球体之间的间隙，而 TopoAE 和 RTD-AE 生成了连续嵌入。在**相连环面**中，其他方法通过压缩重叠区域产生“蝴蝶结”效应，而 MMAE 则保持圆形形状不变。尽管两个环面在很大区域内重叠，MMAE 仍取得最高的 DC、TA 和最低的 $KL_{0.1}$，找到一种能够优化密度保持的非线性点排列。**MMAE 生成的同心球体**呈现五个清晰的圆盘，彼此之间有明显间隙；TopoAE、RTD-AE 和 SPAE 生成的则是没有间隙的连续嵌入。在**猛犸象**数据上，RTD-AE、TopoAE、GeomAE 和 SPAE 将胸廓和臀部展开，以保留局部结构。有趣的是，我们的投影似乎优于 MDS 投影：它像其他模型一样选择了猛犸象的侧视角，同时保留了整体比例，从而生成了更逼真的动物投影。尽管 MMAE 将胸廓一侧折叠到另一侧，而不是将其展开，但它仍取得最高的 DC、TA 和最低的 $KL_{0.1}$，兼顾了局部和全局结构。**地球**数据集补充了嵌套球体的结果：MMAE 扭曲了南美洲，以更好地保留其与非洲的相对距离；同时也扭曲了大洋洲，使其更接近亚洲，从而取得最佳表现。其他方法则将不同大陆朝不同方向拉伸，显著增加了海洋距离（例如马达加斯加到新西兰的距离）；RTD-AE 将南美洲的尖端几乎投影到了欧洲。SPAE 的正则化带来了均匀拉伸，表现也很好。GGAE 对两个三维数据集中的带宽选择都表现出高度敏感性，常常生成忽略数据拓扑的圆形表示。

真实世界数据集： MMAE 和 SPAE 的表现均颇具竞争力W_0，与 RTD-AE 和 TopoAE 相当，并且随着瓶颈维度增大而提升（在 **CIFAR10** 的 128D 设置中尤为明显）。与 GeomAE 和 GGAE 相比，这些基于距离的方法在信任度和连续性方面也表现更优。在 **Paul15**和**PBMC3K**上，MMAE 的 W_0 最低，同时 DC 和 TA 最高。这些高维、相对较小的数据集受益于基于 PCA的MM-reg，它通过降低参考维数来忽略噪声；使用原始距离的 SPAE 在 Paul15 上的表现显著较差（瓶颈为 2D），但瓶颈维度增大后，这一弱点便会消失。SPAE 对距离保持的要求较宽松，因此更灵活，能够实现更好的连通性（W_0），代价则是全局几何方面的表现（Ta-

表 *1.* 真实世界数据集上的表示质量。每个数据集的最佳结果以**粗体**显示。各数据集的潜在空间维度：*Paul15*（2D）、*MNIST*（16D）、*FMNIST*（64D）、*PBMC3K*（64D）、*CIFAR10*（128D）。

数据集	方法	Rec↓	DC↑	TA↑	$KL_{0.1}$↓	Trust↑	Cont↑	W_0↓
Paul15	基础自编码器	**0.94**	0.42	0.58	0.14	0.67	0.70	272.1
	MMAE（我们的方法）	**0.94**	**0.85**	**0.77**	**0.07**	**0.69**	**0.82**	**269.5**
	TopoAE	0.95	0.50	0.67	**0.07**	0.67	0.80	**269.5**
	RTD-AE	0.96	0.58	0.69	**0.07**	0.66	0.79	269.9
	GeomAE	**0.94**	0.37	0.59	0.12	0.68	0.71	273.2
	GGAE	**0.94**	0.23	0.57	0.13	0.63	0.65	277.2
	SPAE	0.96	0.59	0.68	0.08	0.65	0.76	**269.5**
MNIST	基础自编码器	0.15	0.95	0.82	0.002	0.93	0.95	85.65
	MMAE（我们的方法）	0.15	**0.99**	**0.89**	**0.001**	0.96	**0.98**	71.01
	TopoAE	0.17	0.90	0.85	0.005	0.96	0.97	68.19
	RTD-AE	**0.14**	0.97	0.87	**0.001**	**0.97**	**0.98**	56.69
	GeomAE	0.15	0.79	0.78	0.01	0.93	0.93	90.10
	GGAE	0.56	0.80	0.70	0.01	0.87	0.92	**43.02**
	SPAE	0.39	0.97	0.87	**0.001**	0.96	0.97	53.87
FMNIST	基础自编码器	0.12	0.92	0.86	0.005	0.98	0.98	26.46
	MMAE（我们的方法）	0.11	**0.99**	**0.95**	**0.001**	**1.00**	**1.00**	26.47
	TopoAE	0.12	0.94	0.86	0.004	0.98	0.98	31.81
	RTD-AE	**0.09**	**0.99**	**0.95**	**0.001**	**1.00**	**1.00**	**8.08**
	GeomAE	0.12	0.91	0.86	0.007	0.98	0.98	31.40
	GGAE	0.20	0.71	0.77	0.02	0.94	0.94	70.23
	SPAE	0.14	0.98	0.94	0.004	0.99	0.99	21.58
PBMC3K	基础自编码器	0.87	0.67	0.68	0.03	0.70	0.75	238.8
	MMAE（我们的方法）	**0.82**	**0.80**	0.73	**0.02**	**0.82**	0.86	**63.42**
	TopoAE	**0.82**	0.72	**0.74**	**0.02**	**0.82**	**0.87**	114.5
	RTD-AE	0.88	0.70	0.70	0.03	0.77	0.82	108.7
	GeomAE	**0.82**	0.63	0.69	0.03	0.71	0.78	213.5
	GGAE	0.87	0.15	0.54	0.17	0.62	0.53	175.2
	SPAE	0.86	0.68	0.69	0.03	0.75	0.79	75.38
CIFAR10	基础自编码器	0.27	0.93	0.89	0.01	0.98	0.98	21.73
	MMAE（我们的方法）	0.10	**1.00**	**0.98**	**0.000**	**1.00**	**1.00**	1.87
	TopoAE	0.14	**1.00**	0.97	0.001	**1.00**	**1.00**	2.95
	RTD-AE	0.16	0.99	0.95	0.005	1.00	1.00	5.80
	GeomAE	0.95	0.43	0.68	0.10	0.84	0.81	171.2
	GGAE	0.20	0.71	0.75	0.05	0.90	0.89	79.41
	SPAE	**0.09**	**1.00**	**0.98**	**0.000**	**1.00**	**1.00**	**1.57**

ble1）。这两种强制保持全局几何的正则化都会产生拓扑保持效果。

6. 讨论与结论

6.1. 可扩展性

图 3 展示了训练时间随批量大小的变化情况。RTD- AE 的批量大小最多只能设为 80，再大就难以承受；TopoAE 的扩展性也较差。由于只有随着批量大小增加，批次拓扑才会逐渐逼近全局拓扑（Moor等人，2020b;a），这些方法面临着根本性的两难。MMAE 的扩展性与原始版本自编码器及几何变体相近。通过按批次优化，MMAE 还能以显著更少的内存，实现与经典多维尺度分析相近的几何保真度。

6.2. 关于不可能嵌入的两种理念

拓扑方法（如 TopoAE 和 RTD-AE）会针对拓扑特征进行优化——即跨尺度的特征出生与死亡——从而确保潜在空间反映输入数据的连通性。它们允许存在变形，以维持数据中的连接。相连环面就是这种效果的一个例子，其中“蝴蝶结”形状的出现是因为重叠区域被最小化（此处除 MMAE 外的所有模型都表现出这一效果）。尽管这可能对下游任务（Hofer 等人，2017）有用，但它牺牲了视觉解释。

几何方法 如 GeomAE 和 GGAE 会控制表示的拉伸。在猛犸象案例中，这意味着 GeomAE 会压平骨架，生成拉伸均匀但失去比例关系的表示。在地球数据集中，这意味着所有大洲都会

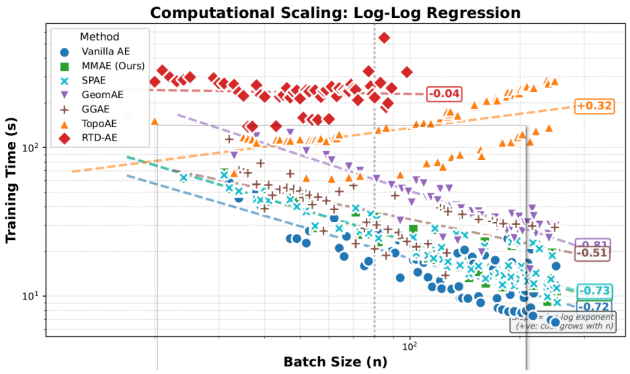


图*3*。 训练时间与批量大小的关系。MMAE 的扩展性与标准自编码器（原始版本）相似。RTD-AE 的批量大小限制为 80。

受到同等程度的拉伸，因此每个大洲的视觉效果可能各不相同。为实现均匀拉伸，这种方法会舍弃数据的全局结构。然而，GGAE 似乎保留了部分全局结构，但较难针对每个数据集进行微调，正如作者 Lim 等人（2024年）所指出的：在嵌套球体案例中，它生成了嵌套关系；但对于两个三维数据集（猛犸象和地球），它丢失了所有结构信息，限制了我们对结果的解读。相比之下，MMAE 和 SPAE 保留了全局几何关系；根据我们的结果，这表明它们具有保拓扑特性。与 SPAE（Singh 和 Nag，2021年）相比，后者测量距离的方差比，而 MMAE 更能保留全局几何比例。在 PBMC3K 和 Paul15 等含噪高维数据集上，SPAE 的 DC、TA、信任度和连续性指标较低。我们推测 MMAE 在此表现出色，是因为它可以降低 PCA 维度（最多降至原来的 80% ），从而减轻噪声的影响。

总而言之，我们的定量和定性结果似乎都证实了这一理论：通过在批次层面对齐成对距离矩阵，可以实现拓扑保持特性。我们推测，优化拓扑保持效果的一种方法是调整正则化强度：先采用较强的 MM-reg 正则化（较高的 λ，随后放宽该参数，使模型在达到理想表示后能够更好地重建。例如，在嵌套球体的情形中，一旦模型建立起嵌套关系，即使 $\lambda \to 0$，嵌套结构仍会保持。

6.3. 外部表示参数化

由于 MM-reg 只需要成对距离，因此可以对任意参考表示进行编码。 Duque 等人(2023) 强制自编码器直接匹配参考坐标，但图 1 表明，MM-reg 能达到类似效果：可以将 UMAP、t-SNE 和主成分分析得到的二维表示复制到潜在空间中。这种方法更加通用——Duque 等人(2023) 若不借助外部嵌入机制，便无法复现图2中的结果。

6.4. 局限性与未来方向

MMAE 保持的是全局几何，而非显式保持拓扑。它不会展开流形，而是最小化成对距离差异，因此结果会因数据集而异。或许存在一种折中方案：将 MM-reg 应用于随机点子集，从而放宽几何约束，在不使用持久同调的情况下平衡拓扑与几何。另一种值得探索的方法是结合上述方法，在获得两者优势的同时优化训练时间。例如，先使用计算开销不显著的 MM-reg 捕捉全局几何，然后在最后几个训练轮次中采用 TopoAE 或 RTD-AE 的正则化，以增强连通性。

鉴于 MDS 持续应用于聚类（Chen et al.，2025）和类 PCA 自编码器（Casella et al.，2022；Ladjal et al.，2019；Phamet al.，2022），以及潜在空间几何（Chadebec &Allassonni`ere，2022）和密度（Xu et al.，2024）可提升生成质量的证据，将 MMAE 扩展到生成场景具有广阔前景——尤其是在超越二维/三维瓶颈的情况下，插值和采样任务或可受益于拓扑保持。

6.5. 结论

我们提出了流形匹配自编码器，这是一个通过成对距离对齐实现全局几何保持的框架，能够在不显著增加计算开销的情况下产生拓扑保持效果。与 MDS 不同，它支持样本外扩展，并可扩展至大型数据集。使用 PCA 参考可在忽略高维数据固有噪声的同时，近似真实的全局几何。该方法还能够复制其他降维算法的表示，从而为非参数方法提供样本外扩展。在可视化之外的场景中，这种朴素的距离对齐在拓扑保持方面展现出越来越强的竞争力，为研究需要更大瓶颈的场景中的拓扑感知铺平了道路。

影响声明

本文旨在推动机器学习领域的发展。我们的工作可能带来许多社会影响，但我们认为没有哪一项需要在此特别指出。

参考文献

10x Genomics。来自健康供者的 3000 个外周血单个核细胞。单细胞

细胞基因表达数据集，版本 1.1.0，2016年。网址 https://www.10xgenomics.com/datasets/3-k-pbm-cs-from-a-healthy-donor-1-standard-1-1-0。

通过 Scanpy 数据集访问。

Aggarwal、C. C.、Hinneburg、A. 和 Keim、D. A.。论距离度量在高维空间中的惊人行为。载于《第八届国际数据库理论会议论文集》，ICDT '01，第 420–434 页，柏林、海德堡，2001 年。Springer-Verlag。ISBN 3540414568。

Batson、J.、Haaf、C. G.、Kahn、Y. 和 Roberts、D. A.。自编码的拓扑障碍。高能物理学杂志，2021年第4期，2021年。ISSN 1029-8479。doi：10.1007/jhep04(2021)280。URLhttp://dx.doi.org/10.1007/JHEP04(2021)280。

Borg, I. 和 Groenen, P. J. F. 现代多维尺度分析理论与应用。Springer，纽约，2005。ISBN 038728981X。doi: 10.1007/0-387-28981-X。

Carlsson, G. 拓扑与数据。美国数学会通报，46(2):255–308，2009。

Casella, M.、Dolce, P.、Ponticorvo, M. 和 Marocco, D. 从主成分分析到自编码器：基于心理测量模型模拟数据的比较。载于*2022* 年 *IEEE* 扩展现实、人工智能与神经工程计量国际会议（*MetroXRAINE*），第 377–381 页，2022。doi: 10.1109/MetroXRAINE54828.2022.9967686。

Chadebec, C. 和 Allassonni`ere, S. 关于变分自编码器的几何视角。神经信息处理系统进展，35:19618–19630，2022。

Chari, T. 和 Pachter, L. 单细胞基因组学中的似是而非之术。《*PLOS* 计算生物学》，19(8):1–20，2023年08月。doi: 10.1371/journal. pcbi.1011288。URLhttps://doi.org/10.1371/journal.pcbi.1011288。

Chazal, F.、De Silva, V.、Glisse, M. 和 Oudot, S. 持久模的结构与稳定性。Springer，2016年。

Chen, G.、Wang, X.、Sun, Q. 和 Tang, Z.-Z. 多维尺度分析可改进基于距离的微生物组数据聚类。《生物信息学》，41(2): btaf042，2025年01月。ISSN 1367-4811。doi: 10.1093/ bioinformatics/btaf042。URLhttps://doi.org/10.1093/bioinformatics/btaf042。

Chen, S. 和 Guo, W. 深度学习中的自编码器——综述与新视角。数学，11(8):1777，2023。doi: 10.3390/math11081777。URLhttps://doi.org/10.3390/math11081777。

Cohen-Steiner, D.、Edelsbrunner, H. 和 Harer, J. 持久图的稳定性。离散与计算几何，37(1):103–120，2007。Duque, A. F.、Morin, S.、Wolf, G. 和 Moon, K. R. 几何正则化自编码器。*IEEE*模式分析与机器智能汇刊，45(6):7381–7394，2023。doi: 10.1109/TPAMI.2022.3222104。Edelsbrunner、Letscher 和 Zomorodian。拓扑持久性与简化。离散与计算几何，28(4):511–533，2002。

Hinton, G. E. 和 Salakhutdinov, R. R. 使用神经网络降低数据的维度。《科学》，313(5786):504–507，2006。doi: 10.1126/science. 1127647。URLhttps://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.1127647。

Hofer, C.、Kwitt, R.、Niethammer, M. 和 Uhl, A. 使用拓扑特征进行深度学习。载于第*31*届神经信息处理系统国际会议论文集，NIPS'17，第1633–1643页，美国纽约州雷德胡克，2017年。Curran Associates Inc. ISBN 9781510860964。

Kingma, D. P. 和 Ba, J. Adam：一种随机优化方法，2017年。URL https://arxiv.org/abs/1412.6980。

Krizhevsky, A. 从微型图像中学习多层特征。技术报告，多伦多大学，2009年。

Ladjal, S., Newson, A. 和 Pham, C.-H. 一种类似 PCA 的自编码器，2019年。网址 https://arxiv.org/abs/1904.01277。

Lecun, Y., Bottou, L., Bengio, Y. 和 Haffner, P. 将基于梯度的学习应用于文档识别。*IEEE* 论文集，86(11):2278–2324，1998年。doi: 10.1109/5.726791。

Lim, J., Kim, J., Lee, Y., Jang, C. 和 Park, F. C. 图几何保持自编码器。载于 Salakhutdinov, R., Kolter, Z., Heller, K., Weller, A., Oliver, N., Scarlett, J. 和 Berkenkamp, F.（编），第*41*届国际机器学习会议论文集，第235卷，机器学习研究论文集，第29795–29815页。PMLR，2024年7月21日至27日。网址 https://proceedings.mlr.press/v235/lim24a.html。

McInnes、L.、Healy、J.、Saul、N. 和 Großberger、L. UMAP：均匀流形近似与投影。《开放源代码软件期刊》，3(29):861，2018。doi：10.21105/ joss.00861。URLhttps://doi.org/10.21105/joss.00861。

MNoichl。MNoichl/umap-examples-mammoth：0.0.1，2025 年 10 月。URLhttps://doi.org/10.5281/zenodo.17290165。

Moon, K. R., van Dijk, D., Wang, Z., Chen, W., Hirn, M. J., Coifman, R. R., Ivanova, N. B., Wolf, G., and Krishnaswamy, S. Phate：一种用于可视化高维生物数据中轨迹结构的降维方法。*bioRxiv*，2017年。doi：10.1101/120378。URLhttps://www.biorxiv.org/content/early/2017/03/24/120378。

Moor, M., Horn, M., Borgwardt, K., and Rieck, B. 对欧几里得拓扑自编码器的挑战。见*NeurIPS 2020*年拓扑数据分析及相关领域研讨会，2020a。URLhttps://openreview.net/forum?id=P3dZuOUnyEY。Moor, M., Horn, M., Rieck, B., and Borgwardt, K. 拓扑自编码器。见第*37*届国际机器学习大会（*ICML*）论文集，《机器学习研究论文集》。PMLR，2020b。Nazari, P., Damrich, S., and Hamprecht, F. A. 几何自编码器——所见即所解码。见 Krause, A., Brunskill, E., Cho, K., Engelhardt, B., Sabato, S., and Scarlett, J.（编），第*40*届国际机器学习大会论文集，第202卷《机器学习研究论文集》，第25834–25857页。PMLR，2023年7月23–29日。URLhttps://proceedings.mlr.press/v202/nazari23a.html。Paul, F., Arkin, Y., Giladi, A., Jaitin, D. A., Kenigsberg, E., Keren-Shaul, H., Winter, D., Lara-Astiaso, D., Gury, M., Weiner, A., David, E., Cohen, N., Lauridsen, F. K. B., Haas, S., Schlitzer, A., Mildner, A., Ginhoux, F., Jung, S., Trumpp, A., Porse, B. T., Tanay, A., and Amit, I. 髓系祖细胞中的转录异质性和谱系定向。《细胞》，163(7):1663–1677，2015年12月。doi：10.1016/j.cell.2015.11.013。PMID：26627738。Pedregosa, F., Varoquaux, G., Gramfort, A., Michel, V., Thirion, B., Grisel, O., Blondel, M., Prettenhofer, P., Weiss, R., Dubourg, V., Vanderplas, J., Passos, A., Courneau, D., Brucher, M., Perrot, M., and Duchesnay, E. Scikit-learn：Python中的机器学习。《机器学习研究杂志》，12:2825–2830，2011年。Pham, C.-H., Ladjal, S., and Newson, A. PCA-AE：用于整理生成网络潜在空间的主成分分析自编码器。《数学成像与视觉杂志》，64(5):569–585，2022年6月。doi：10.1007/s10851-022-01077-z。URLhttps://hal.science/hal-03713275。

Rosenblatt, F.《神经动力学原理：感知器与脑机制理论》。康奈尔航空实验室报告第 VG-1196-G-8 号。Spartan Books，1962年。原件来自密歇根大学，于 2007年11月27日数字化。Schoenberg, I. J. 对 Maurice Fréchet 文章《关于希尔伯特空间上可向量应用的距离空间类的公理化定义》的评论。《数学年刊》，36(3):724–732，1935年。Shi, Z. 和 Sun, J. 点云的拉普拉斯-贝尔特拉米算子的收敛性，2016年。网址https://arxiv.org/abs/1403.2141。Singh, A. 和 Nag, K. 基于保结构深度自编码器的数据可视化降维。载于*2021 IEEE/ACIS* 第*22*届软件工程、人工智能、网络与并行/分布式计算国际会议（*SNPD*），第43–48页，2021年。doi：10.1109/SNPD51163.2021.9705000。Su, Z., Liu, X., Hamdan, L. B., Maroulas, V., Wu, J., Carlsson, G. 和 Wei, G.-W. 超越持久同调的拓扑数据分析与拓扑深度学习：综述。59(2):58。ISSN 1573-7462。doi：10.1007/s10462-025-11462-w。网址https://doi.org/10.1007/s10462-025-11462-w。Torgerson, W. S. 多维尺度分析：I. 理论与方法。《心理计量学》，17(4):401–419，1952年。Trofimov, I., Cherniavskii, D., Tulchinskii, E., Bal- abin, N., Barannikov, S. 和 Burnaev, E. 学习保拓扑数据表示。载于国际学习表征会议，2023年。网址https://openreview.net/forum?id=lIu-ixf-Tzf。van der Maaten, L. 和 Hinton, G. 使用 t-SNE 可视化数据。《机器学习研究杂志》，9(86):2579–2605，2008年。网址https://jmlr.org/papers/v9/vandermaaten08a.html。Venna, J. 和 Kaski, S. 非线性投影方法中的邻域保持：一项实验研究。载于人工神经网络国际会议，第485–491页。Springer，2001年。Wolf, F. A., Angerer, P. 和 Theis, F. J. Scanpy：大规模单细胞基因表达数据分析。《基因组生物学》，19(1):15，2018年。doi：10.1186/s13059-017-1382-0。网址https://doi.org/10.1186/s13059-017-1382-0。PMID：29409532。Xiao, H., Rasul, K. 和 Vollgraf, R. Fashion-MNIST：用于机器学习算法基准测试的新型图像数据集，2017年。网址https://arxiv.org/abs/1708.07747。

Xu, J., Le, H. 和 Samaras, D. 通过生成模型的潜在空间评估样本质量。载于《计算机视觉——*ECCV 2024*：第*18*届欧洲计算机视觉会议，米兰，意大利，*2024*年*9*月*29*日至*10*月*4*日，论文集（第*LIX*部分）》，第449–464页，柏林、海德堡，2024年。Springer-Verlag。ISBN 978-3-031-73201-0。doi：10.1007/978-3-031-73202-7 26。网址 https://doi.org/10.1007/978-3-031-73202-7_26。