

子空间结构保持的多层极限学习机自编码器

陈晓云¹ 陈媛¹

摘要 处理高维复杂数据的聚类问题, 通常需先降维后聚类, 但常用的降维方法未考虑数据的同类聚集性和样本间相关关系, 难以保证降维方法与聚类算法相匹配, 从而导致聚类信息损失. 非线性无监督降维方法极限学习机自编码器 (Extreme learning machine, ELM-AE) 因其学习速度快、泛化性能好, 近年来被广泛应用于降维及去噪. 为使高维数据投影至低维空间后仍能保持原有子空间结构, 提出基于子空间结构保持的多层极限学习机自编码器降维方法 (Multilayer extreme learning machine autoencoder based on subspace structure preserving, ML-SELM-AE). 该方法在保持聚类样本多子空间结构的同时, 利用多层极限学习机自编码器捕获样本集的深层特征. 实验结果表明, 该方法在 UCI 数据、脑电数据和基因表达谱数据上可以有效提高聚类准确率且取得较高的学习效率.

关键词 多层极限学习机, 自编码器, 子空间学习, 降维

引用格式 陈晓云, 陈媛. 子空间结构保持的多层极限学习机自编码器. 自动化学报, 2022, 48(4): 1091–1104

DOI 10.16383/j.aas.c200684

Multi-layer Extreme Learning Machine Autoencoder With Subspace Structure Preserving

CHEN Xiao-Yun¹ CHEN Yuan¹

Abstract To deal with the clustering problem of high-dimensional complex data, it is usually required to reduce the dimensionality and then cluster, but the common dimensional reduction method does not consider the clustering characteristic of the data and the correlation between the samples, so it is difficult to ensure that the dimensional reduction method matches the clustering algorithm, which leads to the loss of clustering information. The nonlinear unsupervised dimensionality reduction method extreme learning machine autoencoder (ELM-AE) has been widely used in dimensionality reduction and denoising in recent years because of its fast learning speed and good generalization performance. In order to maintain the original subspace structure when high-dimensional data is projected into a low-dimensional space, the dimensional reduction method ML-SELM-AE is proposed. This method captures the deep features of the sample set by using the multi-layer extreme learning machine autoencoder while maintaining multi-subspace structure of clustered samples by self-representation model. Experimental results show that the method can effectively improve the clustering accuracy and achieve higher learning efficiency on UCI data, EEG data and gene expression data.

Key words Multi-layer extreme learning machine, autoencoder, subspace learning, dimensional reduction

Citation Chen Xiao-Yun, Chen Yuan. Multi-layer extreme learning machine autoencoder with subspace structure preserving. *Acta Automatica Sinica*, 2022, 48(4): 1091–1104

自编码器 (Autoencoder, AE)^[1] 是一种非线性无监督神经网络, 也是一种无监督特征提取与降维方法, 通过非线性变换将输入数据投影到潜在特征空间中. AE 由编码器和解码器组成, 可将输入数据编码为有意义的压缩表示, 然后对该表示进行解码使得解码输出与原始输入相同, 即解码器输出和输

入数据间的重构误差最小. 当投影的潜在特征空间维数低于原始空间时, AE 可视为非线性主成分分析的一种表示形式^[1]. 随着深度学习的成功, 其在多个领域取得了重要突破^[2], 而深度自编码器作为一种无监督深度神经网络被用于数据降维^[3-4]、图像降噪^[5]和信号处理^[6-7]以提取数据的深层表示特征. 例如深度子空间聚类 (Deep subspace clustering, DSL- l_1)^[8] 通过深度自编码器对稀疏子空间聚类进行扩展, 在深度自编码器的编码器和解码器间引入自表达层, 用反向传播算法对编码器的输出进行自表示系数矩阵的学习, 以该自表示系数矩阵作为原始样本的相似度矩阵. DSL- l_1 模型是全连接卷积神经网络并使用 l_1 范数, 求解模型的反向传播算法时间及空间复杂度较高. 为提高计算效率, 需先执行

收稿日期 2020-08-26 录用日期 2021-01-26
Manuscript received August 26, 2020; accepted January 26, 2021
国家自然科学基金 (11571074) 资助
Supported by National Natural Science Foundation of China (11571074)
本文责任编辑 金连文
Recommended by Associate Editor JIN Lian-Wen
1. 福州大学数学与计算机科学学院 福州 350116
1. College of Mathematics and Computer Science, Fuzhou University, Fuzhou 350116

主成分分析法对数据降维。

无监督的极限学习机自编码器 (Extreme learning machine autoencoder, ELM-AE)^[9] 是一种单隐层前馈神经网络, 其输入层到隐层的权值和偏置值随机给定, 学习过程只需通过优化最小二乘误差损失函数即可确定隐层到输出层的权值. 最小二乘损失函数的优化问题有解析解, 可转化为 Moore-Penrose 广义逆问题求解^[10]. 因此本质上相当于直接计算网络权值而无需迭代求解, 相比反向传播和迭代求解的神经网络学习方法, 学习速度快、泛化性能好, 因此本文以 ELM-AE 作为基础自编码器.

极限学习机自编码器与极限学习机 (Extreme learning machine, ELM)^[11] 类似, 主要不同之处在于 ELM-AE 的网络输出为输入样本的近似估计, ELM 的网络输出为输入样本的类标签. 极限学习机自编码器虽然学习速度快, 但仅考虑数据全局非线性特征而未考虑面向聚类任务时数据本身固有的多子空间结构.

除极限学习机自编码器以外, 无监督极限学习机 (Unsupervised extreme learning machine, US-ELM)^[12] 也是一种重要的无监督 ELM 模型, 它采用无类别信息的流形正则项替代 ELM 模型中含类标签的网络误差函数, 经 US-ELM 投影后保持样本间的近邻关系不变. US-ELM 虽考虑了样本分布的流形结构, 但其流形正则项在高维空间中易出现测度“集中现象”且未考虑不同聚簇样本间的结构差异. 在 US-ELM 模型基础上, 稀疏和近邻保持的极限学习机降维方法 (Extreme learning machine based on sparsity and neighborhood preserving, SNP-ELM)^[13] 引入全局稀疏表示及局部近邻保持模型, 可以自适应地学习样本集的相似矩阵及不同簇样本集的子空间结构, 其不足之处在于需迭代求解稀疏优化问题, 运行时间较长.

综合上述分析, 本文以 ELM-AE 为基础自编码器, 引入最小二乘回归子空间模型 (Least square regression, LSR)^[14] 对编码器的输出样本进行多子空间结构约束, 提出子空间结构保持的极限学习机自编码器 (Extreme learning machine autoencoder based on subspace structure preserving, SELM-AE) 及其多层版本 (Multilayer SELM-AE, ML-SELM-AE), 使面向聚类任务的高维数据经过 ML-SELM-AE 降维后仍能保持原样本数据的多子空间结构, 并可获取数据的更深层特征.

1 极限学习机自编码器

极限学习机自编码器降维方法通过将输入作为

网络输出学习极限学习神经网络, 其学习过程分为编码和解码过程, 学习目标是最小化重构误差. 图 1 给出 ELM-AE 模型网络结构. 对于由 n 个样本组成的聚类数据集 $S = \{\mathbf{x}_i | \mathbf{x}_i \in \mathbf{X} \subseteq \mathbf{R}^{n \times m}, i = 1, \dots, n\}$, \mathbf{x}_i 是网络输入变量, 网络输出 $\hat{\mathbf{x}}_i$ 为 \mathbf{x}_i 的近似估计.

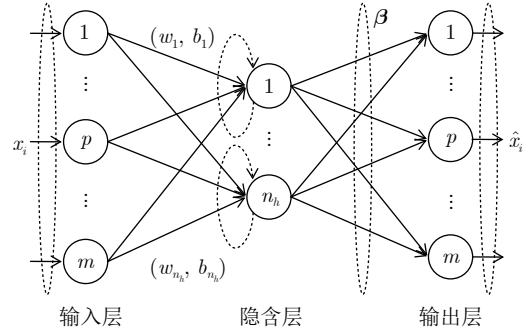


图 1 ELM-AE 网络结构

Fig.1 Network structure of ELM-AE

ELM-AE 网络的目标是计算最优的隐节点到输出节点的权值矩阵 β , 使得在该权值下的网络输出 $\hat{\mathbf{x}}_i$ 与期望输出 \mathbf{x}_i 间的误差最小. 对 n 个样本 \mathbf{x}_i ($i = 1, 2, \dots, n$) 组成的数据集 \mathbf{X} , ELM-AE 网络的优化模型定义为:

$$\min_{\beta \in \mathbf{R}^{n_h \times m}} \frac{1}{2} \|\beta\|^2 + \frac{c}{2} \|\mathbf{X} - \mathbf{H}(\mathbf{X})\beta\|^2 \quad (1)$$

其中, $\beta \in \mathbf{R}^{n_h \times m}$ 为隐层到输出层的权值矩阵, $\mathbf{H}(\mathbf{X}) \in \mathbf{R}^{n \times n_h}$ 为隐层输出矩阵:

$$\mathbf{H}(\mathbf{X}) = \begin{bmatrix} \mathbf{h}(\mathbf{x}_1) \\ \vdots \\ \mathbf{h}(\mathbf{x}_n) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g(w_1, b_1, \mathbf{x}_1) & \cdots & g(w_{n_h}, b_{n_h}, \mathbf{x}_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ g(w_1, b_1, \mathbf{x}_n) & \cdots & g(w_{n_h}, b_{n_h}, \mathbf{x}_n) \end{bmatrix}_{n \times n_h} \quad (2)$$

$\mathbf{h}(\mathbf{x}_i) = (g(w_1, b_1, \mathbf{x}_i), \dots, g(w_{n_h}, b_{n_h}, \mathbf{x}_i))$ 为隐层关于 \mathbf{x}_i 的输出向量, n_h 为隐节点个数; w_j 为第 j 个隐节点的输入权值, b_j 为第 j 个隐节点的偏差, 输入权值 w_j 和隐节点偏差 b_j 均随机产生, 其取值区间为 $[-1, 1]$; $g(w_j, b_j, \mathbf{x}_i)$ 为第 j 个隐节点的激励函数, 本文采用 Sigmoid 函数:

$$g(w_i, b_i, \mathbf{x}) = \frac{1}{1 + \exp(-w_i \mathbf{x} + b_i)} \quad (3)$$

模型 (1) 第 1 项与 ELM 模型相同, 最小化隐层到输出层的权值矩阵 β 的 l_2 范数, 以控制模型的复杂度; 模型第 2 项为重构误差, 表示 ELM-AE

网络的输出 $\mathbf{H}(\mathbf{X})\boldsymbol{\beta}$ 与原始输入数据 \mathbf{X} 的误差, 重构误差越小, $\boldsymbol{\beta}$ 越优. c 为平衡模型复杂度和误差项的参数. 理想情况下, ELM-AE 网络的输出 $\mathbf{H}(\mathbf{X})\boldsymbol{\beta}$ 与真实值 \mathbf{X} 相等, 即 $\mathbf{X} = \mathbf{H}(\mathbf{X})\boldsymbol{\beta}$, 此时误差为零.

ELM-AE 模型与 ELM 模型不同之处在于 ELM 隐层到输出层的最优权矩阵 $\boldsymbol{\beta}$ 通过最小化网络输出 $\mathbf{H}(\mathbf{X})\boldsymbol{\beta}$ 与真实类标签 \mathbf{Y} 的误差得到; 而 ELM-AE 隐层到输出层的最优权矩阵 $\boldsymbol{\beta}$ 通过最小化网络输出 $\mathbf{H}(\mathbf{X})\boldsymbol{\beta}$ 与输入数据矩阵 \mathbf{X} 的误差得到, 因此 ELM-AE 可以看成是对数据矩阵 \mathbf{X} 的非线性特征表示. 为实现数据降维, 增加对输入权向量 w 及偏置 b 的正交约束. 当样本 \mathbf{x}_i 原始维数 m 大于隐节点个数 n_h 时, 输入样本可被投影到较低维特征空间, 其对应的隐含层输出向量 $\mathbf{h}(\mathbf{x}_i)$ 为:

$$\begin{aligned} \mathbf{h}(\mathbf{x}_i) &= g(w \cdot \mathbf{x}_i + b) \\ \text{s.t. } w^T w &= \mathbf{I}, b^T b = 1 \end{aligned} \quad (4)$$

式 (1) 描述的 ELM-AE 模型是凸优化问题且该问题仅含单变量 $\boldsymbol{\beta}$, 对其目标函数关于 $\boldsymbol{\beta}$ 求导并令导数等于 0, 即可得到该问题的解析解如下:

$$\boldsymbol{\beta}^* = \left[\mathbf{H}^T(\mathbf{X})\mathbf{H}(\mathbf{X}) + \frac{1}{c} \right]^{-1} \mathbf{H}^T(\mathbf{X})\mathbf{X} \quad (5)$$

其中, $\boldsymbol{\beta}^*$ 是 $n_h \times m$ 矩阵. 据文献 [9], ELM-AE 通过对原始高维数据 \mathbf{X} 乘以隐含层与输出层间的权值矩阵 $\boldsymbol{\beta}$ 实现降维, 即 $\mathbf{X} = \mathbf{X}(\boldsymbol{\beta}^*)^T$ 就是所需的降维后样本.

2 子空间结构保持多层极限学习机自编码器

极限学习机自编码器 ELM-AE 虽然实现了无监督非线性降维, 但未考虑面向聚类任务的高维数据所蕴含的多子空间结构, 难以保证降维结果与聚类目标相匹配. 因此, 本文提出子空间结构保持极限学习机自编码器 SELM-AE, 该模型在 ELM-AE 输出层之后增加自表示层, 使 ELM-AE 输出 $\mathbf{H}(\mathbf{X})\boldsymbol{\beta}$ 保持输入数据 \mathbf{X} 的多子空间结构不变.

2.1 子空间结构的获取

为获取数据的子空间结构, 通常采用样本矩阵作为字典, 得到数据自表示模型 $\mathbf{X} = \mathbf{X}\mathbf{Z}$ ($\mathbf{Z} \in \mathbf{R}^{n \times n}$), 即每一样本用所有其他样本的线性组合表示, 所有样本的组合系数构成自表示系数矩阵. 由此学习到的自表示系数矩阵 \mathbf{Z} 隐含了样本间的相似关系与子空间结构, 理想情况下多簇数据的自表示系数矩阵具有块对角性.

文献 [15] 已证明, 在假设子空间独立情况下, 通过最小化 \mathbf{Z} 的 F 范数, 可以保证 \mathbf{Z} 具有块对角结构, 即当样本点 \mathbf{x}_i 和 \mathbf{x}_j 位于同一子空间时 $Z_{ij} \neq 0$, 位于不同子空间时 $Z_{ij} = 0$. 关于 \mathbf{Z} 的自表示优化模型可采用最小二乘回归 (LSR) 模型, 即

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{Z}} \|\mathbf{Z}\|_F \\ \text{s.t. } \mathbf{X} = \mathbf{X}\mathbf{Z}, (\text{diag}\{\mathbf{Z}\} = 0) \end{aligned} \quad (6)$$

在实际应用中, 观测数据通常包含噪声, 噪声情况下该模型可扩展为:

$$\min_{\mathbf{Z}} \|\mathbf{X} - \mathbf{X}\mathbf{Z}\|_F^2 + \lambda \|\mathbf{Z}\|_F^2 \quad (7)$$

模型 (7) 为凸优化问题, 有解析解, 其解为 $\mathbf{Z} = [\mathbf{X}^T \mathbf{X} + \lambda \mathbf{I}]^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{X}$.

2.2 子空间结构保持极限学习机自编码器 (SELM-AE)

由式 (7) 学习得到的自表示系数矩阵 $\mathbf{Z} = [\mathbf{Z}_1, \dots, \mathbf{Z}_n]$ ($\mathbf{Z}_i \in \mathbf{R}^n$ 为 \mathbf{x}_i 的表示系数), 包含数据的子空间结构信息. 为使极限学习机自编码器的网络输出 $\hat{\mathbf{X}}_1 = \mathbf{H}(\mathbf{X})\boldsymbol{\beta}$ 仍保持这种子空间结构, 在极限学习机自编码器的输出层之后增加自表示层, 使得网络输出与输入的自表示系数相同, 即 $(\mathbf{H}(\mathbf{X})\boldsymbol{\beta})^T = (\mathbf{H}(\mathbf{X})\boldsymbol{\beta})^T \mathbf{Z}$. SELM-AE 的网络结构如图 2 所示, 其中图 2(a) 用于根据式 (7) 学习 \mathbf{X} 的自表示系数矩阵 \mathbf{Z} ; 图 2(b) 在 ELM-AE 网络的输出层之后增加网络输出 $\mathbf{H}(\mathbf{X})\boldsymbol{\beta}$ 的自表示层, 使网络输出 $\mathbf{H}(\mathbf{X})\boldsymbol{\beta}$ 与输入 \mathbf{X} 有相同的子空间结构.

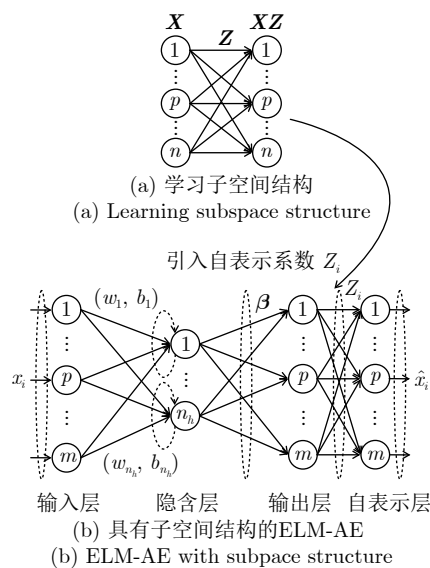


图 2 SELM-AE 网络结构

Fig.2 Network structure of SELM-AE

图 2(b) 将输入数据 \mathbf{X} 的自表示系数矩阵 \mathbf{Z} 引入子空间结构保持的极限学习机自编码器(SELA-AE)的自表示层, 其优化模型如下:

$$\min_{\beta} f(\beta) = \frac{1}{2} \|\beta\|_{\mathbb{F}}^2 + \frac{c}{2} \|\mathbf{X} - \mathbf{H}(\mathbf{X})\beta\|_{\mathbb{F}}^2 + \frac{\lambda}{2} \|(\mathbf{H}(\mathbf{X})\beta)^{\mathbf{T}} - (\mathbf{H}(\mathbf{X})\beta)^{\mathbf{T}}\mathbf{Z}\|_{\mathbb{F}}^2 \quad (8)$$

模型前两项与式 (1) 描述的 ELM-AE 模型相同, 第 3 项则为自表示误差项, 也称子空间结构保持项, 用以使 SELM-AE 的网络输出 $\mathbf{H}(\mathbf{X})\beta$ 保持原始数据的子空间结构, c 是自编码重构误差项的平衡参数, λ 是自表示误差项的平衡参数.

由于 $\|(\mathbf{H}(\mathbf{X})\beta)^{\mathbf{T}} - (\mathbf{H}(\mathbf{X})\beta)^{\mathbf{T}}\mathbf{Z}\|_{\mathbb{F}}^2 = \text{tr}[\beta^{\mathbf{T}}\mathbf{H}^{\mathbf{T}}(\mathbf{X})(\mathbf{I} - \mathbf{Z})(\mathbf{I} - \mathbf{Z})^{\mathbf{T}}\mathbf{H}(\mathbf{X})\beta]$, 则式 (8) 可改写为

$$\min_{\beta} f(\beta) = \frac{1}{2} \|\beta\|_{\mathbb{F}}^2 + \frac{c}{2} \|\mathbf{X} - \mathbf{H}(\mathbf{X})\beta\|_{\mathbb{F}}^2 + \frac{\lambda}{2} \text{tr}[\beta^{\mathbf{T}}\mathbf{H}^{\mathbf{T}}(\mathbf{X})(\mathbf{I} - \mathbf{Z})(\mathbf{I} - \mathbf{Z})^{\mathbf{T}}\mathbf{H}(\mathbf{X})\beta] \quad (9)$$

2.3 模型求解

为求解 SELM-AE 模型即式 (9), 可令 $\mathbf{A} = (\mathbf{I} - \mathbf{Z})(\mathbf{I} - \mathbf{Z})^{\mathbf{T}}$, 则式 (9) 等价表示为

$$\min_{\beta} f(\beta) = \frac{1}{2} \|\beta\|_{\mathbb{F}}^2 + \frac{c}{2} \|\mathbf{X} - \mathbf{H}(\mathbf{X})\beta\|_{\mathbb{F}}^2 + \frac{\lambda}{2} \text{tr}(\beta^{\mathbf{T}}\mathbf{H}^{\mathbf{T}}(\mathbf{X})\mathbf{A}\mathbf{H}(\mathbf{X})\beta) \quad (10)$$

式 (10) 是凸优化问题, 对其目标函数 $f(\beta)$ 关于 β 求导并令导数为 0 得到

$$\frac{df}{d\beta} = \beta - c\mathbf{H}^{\mathbf{T}}(\mathbf{X})(\mathbf{X} - \mathbf{H}(\mathbf{X})\beta) + \lambda\mathbf{H}^{\mathbf{T}}(\mathbf{X})\mathbf{A}\mathbf{H}(\mathbf{X})\beta = 0$$

整理上述方程得到

$$\beta + c\mathbf{H}^{\mathbf{T}}(\mathbf{X})\mathbf{H}(\mathbf{X})\beta + \lambda\mathbf{H}^{\mathbf{T}}(\mathbf{X})\mathbf{A}\mathbf{H}(\mathbf{X})\beta = c\mathbf{H}^{\mathbf{T}}(\mathbf{X})\mathbf{X}$$

提取公因子 β

$$[\mathbf{I} + c\mathbf{H}^{\mathbf{T}}(\mathbf{X})\mathbf{H}(\mathbf{X}) + \lambda\mathbf{H}^{\mathbf{T}}(\mathbf{X})\mathbf{A}\mathbf{H}(\mathbf{X})]\beta = c\mathbf{H}^{\mathbf{T}}(\mathbf{X})\mathbf{X}$$

解该方程得到以下解析解

$$\beta^* = [\mathbf{I} + c\mathbf{H}^{\mathbf{T}}(\mathbf{X})\mathbf{H}(\mathbf{X}) + \lambda\mathbf{H}^{\mathbf{T}}(\mathbf{X})\mathbf{A}\mathbf{H}(\mathbf{X})]^{-1}c\mathbf{H}^{\mathbf{T}}(\mathbf{X})\mathbf{X} \quad (11)$$

最优权值矩阵 β^* 与隐层输出 $\mathbf{H}(\mathbf{X})$ 相乘既可得到网络的输出 $\mathbf{H}(\mathbf{X})\beta$, 该输出是网络对输入 \mathbf{X} 的最佳估计. 网络权值矩阵 β 是隐含层到网络输

出层即输入数据的线性变换, 可通过最优权值矩阵 β^* 进行降维, 降维后样本为 $\mathbf{X}' = \mathbf{X}(\beta^*)^{\mathbf{T}}$.

2.4 多层极限学习机自编码器 (ML-SELM-AE)

由第 2.3 节讨论可知, 通过 SELM-AE 模型可以直接计算隐含层到输出层的最优权值矩阵 β^* , 计算速度快, 泛化性好. SELM-AE 网络以数据降维表示为目标, 其降维后样本维数与隐层节点数相等, 因此隐层节点数量通常远小于原始维数和样本数. 但作为单层神经网络, 较少的隐层节点会降低其对非线性投影函数的逼近能力. 受文献 [16] 的深度有监督极限学习机方法启发, 本文扩展单层子空间结构保持极限学习机自编码器 SELM-AE 为多层子空间结构保持极限学习机自编码器 ML-SELM-AE (如图 3), 以获取数据的深层特征.

图 3 所示的多层子空间结构保持极限学习机自编码器相当于多个 SELM-AE 自编码器的堆叠, 利用上述式 (11) 计算每一层最优权值矩阵 $\beta^{(l)} (l = 1, 2, \dots, L)$, 将上一层输出 $\mathbf{X}^{(l)} (\beta^{(l)})^{\mathbf{T}}$ 作为下一层输入. ML-SELM-AE 网络第 l 层 ($l = 1, 2, \dots, L$) 随机产生正交输入权矩阵 $\mathbf{W}^{(l)}$ 和偏置向量 $b^{(l)}$; 第 1 层初始输入为原始数据 $\mathbf{X}^{(1)} = \mathbf{X}$, 第 l 层 ($l = 1, 2, \dots, L$) 的权值矩阵 $\beta^{(l)}$ 根据式 (11) 改写为:

$$\beta^{(l)} = [\mathbf{I} + c\mathbf{H}^{\mathbf{T}}(\mathbf{X}^{(l)})\mathbf{H}(\mathbf{X}^{(l)}) + \lambda\mathbf{H}^{\mathbf{T}}(\mathbf{X}^{(l)})\mathbf{A}\mathbf{H}(\mathbf{X}^{(l)})]^{-1}c\mathbf{H}^{\mathbf{T}}(\mathbf{X}^{(l)})\mathbf{X}^{(l)} \quad (12)$$

第 $l+1$ 层输入 $\mathbf{X}^{(l+1)}$ 可通过下式计算:

$$\mathbf{X}^{(l+1)} = \mathbf{X}^{(l)}(\beta^{(l)})^{\mathbf{T}} \quad (13)$$

其中, $\beta^{(l)}$ 为第 l 层解码器的输出权矩阵. 若自编码器有 L 层, 则第 L 层的输出 $\mathbf{X}^{(L+1)} = \mathbf{X}^{(L)}(\beta^{(L)})^{\mathbf{T}}$, 即为降维后数据, 对降维后数据 $\mathbf{X}^{(L+1)}$ 使用 k -means 算法完成聚类.

多层子空间结构保持极限学习自编码器 ML-SELM-AE 求解算法归纳如下:

算法 1. ML-SELM-AE 算法

输入. 数据矩阵 $\{\mathbf{X}\} = \{x_i\}_{i=1}^n$, 隐层节点数 (维数) n_h , 参数 $c > 0$, $\lambda > 0$, 层数 L

输出. 降维后数据矩阵 $\mathbf{X}^{(L+1)}$

1) 计算 \mathbf{X} 自表示矩阵

$$\mathbf{Z} = [\mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{X} + \lambda\mathbf{I}]^{-1}\mathbf{X}^{\mathbf{T}}\mathbf{X};$$

2) 初始化第 1 层输入 $\mathbf{X}^{(1)} = \mathbf{X}$;

3) For $l=1$ to L

随机初始化第 l 层输入权重 $\mathbf{W}^{(l)}$ 和偏置 $b^{(l)}$;

通过式 (12) 计算第 l 层输出权值 $\beta^{(l)}$;

通过式 (13) 计算第 l 层输出, 作为第 $l+1$ 层输入, $\mathbf{X}^{(l+1)} =$

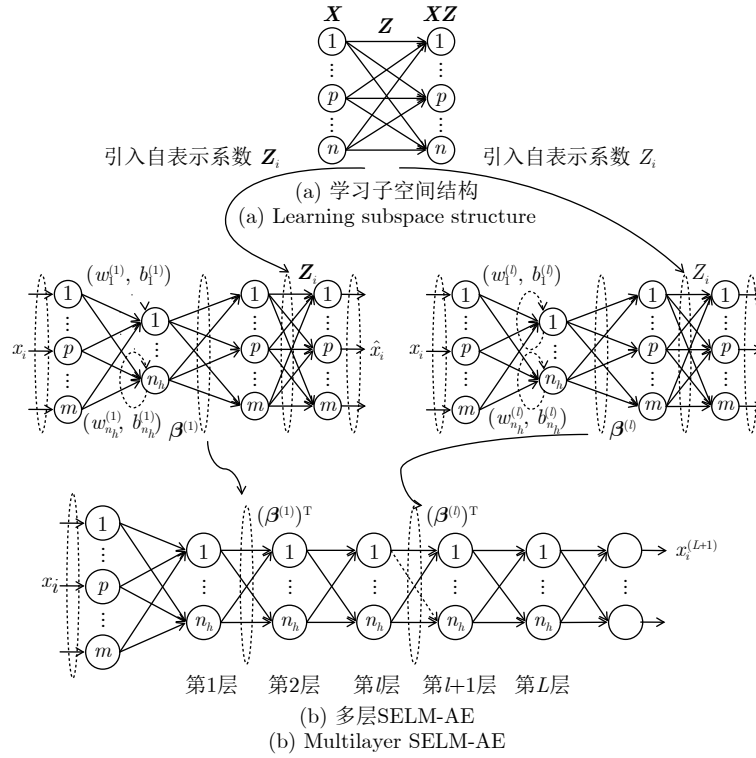


图3 ML-SELM-AE网络结构

Fig.3 Network structure of ML-SELM-AE

$\mathbf{X}^{(l)}(\boldsymbol{\beta}^{(l)})^T$;

end

4) 输出降维后数据矩阵 $\mathbf{X}^{(L+1)}$.

ML-SELM-AE 算法中步骤 1) 的时间开销主要用于矩阵乘法与 n 阶矩阵逆的计算, 时间复杂度分别为 $O(n^2m)$ 和 $O(n^3)$; 若多层极限学习机网络层数为 L , 则步骤 3) 需循环 L 次计算每一层 SELM-AE 的输出权值 $\boldsymbol{\beta}^{(l)}$ 及输出 $\mathbf{X}^{(l)}$, 每次循环的时间开销主要用于权值 $\boldsymbol{\beta}^{(l)}$ 的计算, 包括计算矩阵乘法与 n_h 阶矩阵的逆, 矩阵乘法计算时间复杂度分别为 $O(n_h^2m)$ 和 $O(n_hnm)$, 矩阵逆的计算时间复杂度为 $O(n_h^3)$. 对于高维小样本数据集, 样本数 n 远小于样本维数 m , 故而当样本维数 m 小于隐层节点数 n_h 时, 算法总时间复杂度为 $O(Ln_h^3)$; 当样本维数 m 大于隐层节点数 n_h 时, 算法总时间复杂度为 $O(Ln_h^2m)$.

3 实验

3.1 实验对比方法及参数设置

为验证本文所提的子空间结构保持单层极限学习机降维自编码器 SELM-AE 和多层极限学习机自编码器 ML-SELM-AE 的降维效果和有效性, 本文对两种方法进行数据可视化及高维数据降维聚类

实验.

实验对比的其他降维方法有以下几种:

1) 线性无监督降维

主成分分析法 (Principal component analysis, PCA)^[17]: 以最大化投影方差为目标, 方差虽可以刻画全局分布散度, 但无法描述样本间的近邻关系.

局部保持投影法 (Locality preserving projections, LPP)^[18]: 以保持降维前后样本间的近邻关系不变为目标.

近邻保持嵌入法 (Neighborhood preserving embedding, NPE)^[19]: 以最小化 k 近邻重构误差为目标, 旨在保持降维前后样本间的局部近邻结构.

2) 传统无监督 ELM

US-ELM: 无监督极限学习机, 利用无类别信息的流形正则项代替含类标签的误差函数, 将有监督极限学习机转化为无监督极限学习机, 实现原始数据向低维空间的非线性映射, 并能够得到显式的非线性映射函数. 但该方法预定义的近邻矩阵不具有数据自适应性.

ELM-AE: 极限学习机自编码器, 用原始数据替代误差函数中的类标签, 将有监督极限学习机转化为无监督式的极限学习机自编码器, 实现原始数据向低维空间的非线性映射. 但该方法仅考虑数据全局非线性特征.

ELM-AE 的多层版本 (Multilayer ELM-AE, ML-ELM-AE): 其多层扩展的思想与本文提出的 ML-SELM-AE 相同. 目的在于和 ML-SELM-AE(子空间结构保持的多层极限学习机自编码器) 进行对比.

3) 面向聚类的子空间结构保持无监督 ELM

SNP-ELM: 基于稀疏和近邻保持的极限学习机降维算法, 该方法引入稀疏及近邻保持模型学习 US-ELM 模型流形正则项所需的近邻矩阵, 具有较好的数据自适应性. 但需迭代求解稀疏优化问题, 运行时间较长.

SELM-AE: 本文提出的子空间结构保持极限学习机自编码器. 该模型在 ELM-AE 模型基础上, 采用样本自表示模型刻画样本数据的子空间结构和样本间近邻关系, 使网络输出数据保持子空间结构不变, 具有较好的数据自适应性.

ML-SELM-AE: 本文提出的 SELM-AE 模型多层版本.

3.2 实验数据集

实验采用 2 个脑电数据集、3 个高维基因表达谱数据及 UCI 中的 IRIS 数据集^[20] 进行测试, 脑电数据集包括 BCI 竞赛 II 数据集 IIb 中的 Session 10 和 Session 11、BCI 竞赛 III 数据集 II 中的 Subject A 训练集^[21], 基因表达数据集包括 DLBCL、Prostate0 和 Colon^[22].

研究表明, 脑电数据中 C3、Cz、C4、Fz、P3、Pz、P4、PO7、PO8 和 Oz 这 10 个电极的可分性更好^[23], 因此选取 BCI 竞赛 II 数据集 Data set IIb 的该 10 个电极通道每轮行或列刺激后 600 ms 的脑电数据作为实验数据并进行 0.5~30 Hz 的巴特沃斯滤波; 对 BCI 竞赛 III 数据集 Data set II 选取相同 10 个电极通道每轮行或列刺激后 1 s 的脑电数据作为实验数据并进行 0.1~20 Hz 的巴特沃斯滤波. 数据集具体描述如表 1 所示.

表 1 数据集描述

Table 1 The data set description

数据集	维数	样本数	类别数
IRIS	4	150	3
Data set IIb	1440	504	2
Data set II	2400	1020	2
DLBCL	5469	77	2
Colon	2 000	62	2
Prostate0	6033	102	2

3.3 可视化实验

本实验分别用 PCA、LPP、NPE、US-ELM、

ELM-AE、SNP-ELM 和 SELM-AE 七种方法将一个人造数据集和一个真实 UCI 数据集投影到一维和二维空间, 并选取每种降维方法的最优结果进行展示.

数据可视化及数据降维聚类实验采用相同的参数设置. LPP、NPE 和 US-ELM 的近邻数 k 均取 5. ELM-AE、SNP-ELM 和 SELM-AE 的平衡参数 c 和 λ 均采用网格搜索策略设置, 统一参数搜索范围为 $\{10^{-3}, 10^{-2}, \dots, 10^3\}$. 所有极限学习机算法的激励函数均采用 Sigmoid 函数, 含流形正则项的极限学习机降维方法 US-ELM 和 SNP-ELM 降维后样本维数由特征方程的特征向量个数决定, 其隐层节点数设为 1000. 极限学习机自编码器降维方法 ELM-AE 和 SELM-AE 隐层节点数与降维后样本维数相同. 多层算法 ML-ELM-AE 和 ML-SELM-AE 中每一层的隐节点数均与第 1 层相同, 隐含层数为 3.

3.3.1 一维可视化

本实验使用的二维人造双月数据集如图 4 所示, 该数据包含 2 类, 每类有 150 个样本. 该实验将双月数据用 7 种不同降维方法降至一维后的结果如图 5 所示.

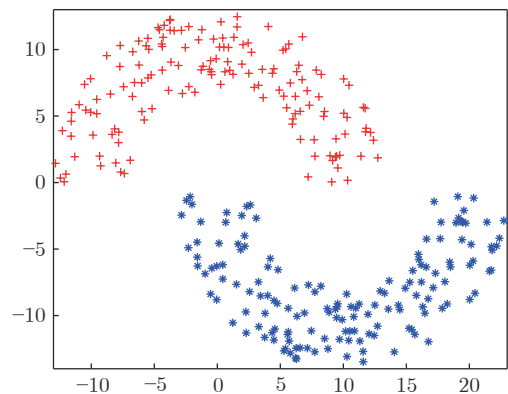


图 4 人造双月数据集

Fig. 4 Artificial double moon data set

从图 5 可以看出, PCA 以投影后的样本方差最大为目标, 其降维结果近似于将该数据投影到双月数据方差最大的 X 轴方向, 投影后 2 类样本交叠明显、可分性差; 基于流形思想的 LPP、NPE 和 US-ELM 均以降维后样本保持原样本的近邻结构为目的, 但 US-ELM 投影到 1 维后的可分性明显优于 LPP 和 NPE, 其降维后不同类样本的交叠程度较 LPP 和 NPE 更低. 原因在于双月数据是非线性数据, 而 US-ELM 包含非线性神经网络结构, 其对非线性特征的表示能力比仅采用流形思想的 LPP 和 NPE 更强. ELM-AE 也是基于极限学习机的非线

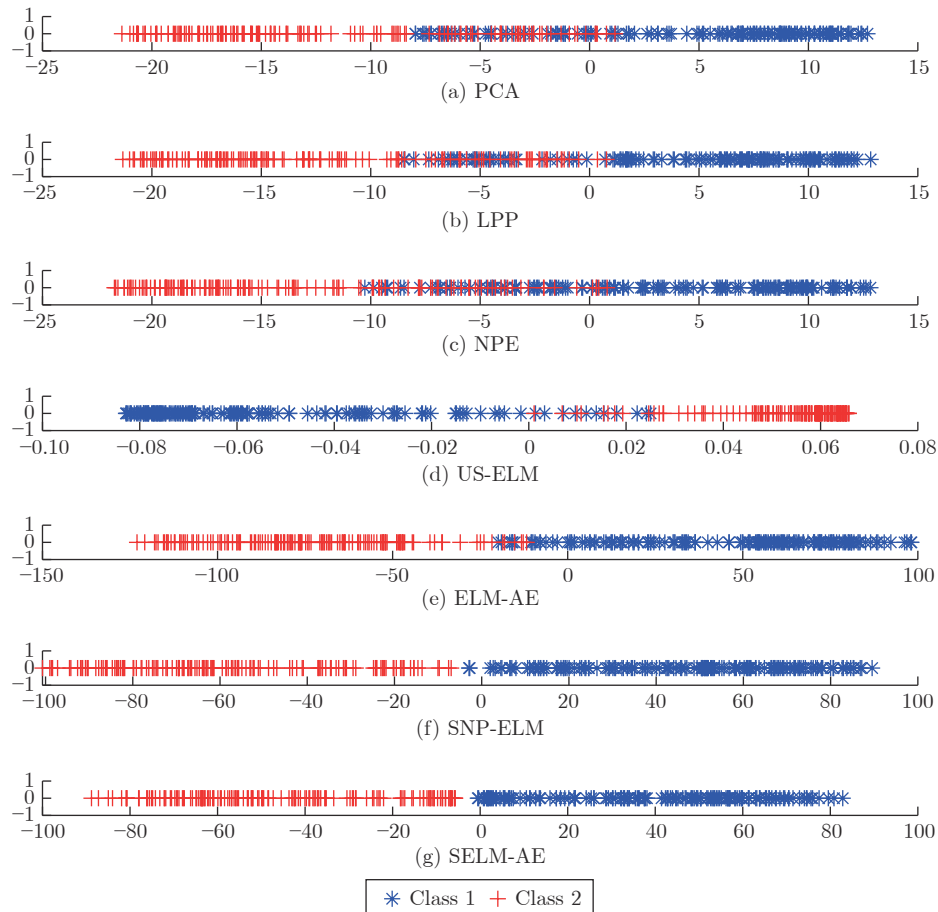


图5 人造双月数据集一维可视化

Fig.5 The 1D visualization of artificial double moon data set

性降维方法, 其通过自编码网络刻画数据全局非线性特征, 较之基于数据局部流形结构的 US-ELM 方法, 其降维后样本的可分性进一步改善.

SNP-ELM 和 SELM-AE 也是非线性降维方法, 均在极限学习机降维基础上引入子空间结构保持特性, SNP-ELM 使降维后样本同时保持数据的近邻结构和稀疏结构, SELM-AE 使自编码网络输出数据保持子空间结构不变, 这两种方法尽可能保持原样本的潜在结构使该数据投影到 1 维后 2 类样本完全分离, 不同类样本间没有交叠, 且本文提出的 SELM-AE 方法投影后样本的内聚度较之 SNP-ELM 更佳, 类间可分性最优.

3.3.2 二维可视化

本实验使用的 IRIS 数据包含 3 类 150 个样本, 每个样本有 4 个特征. 分别采用 PCA、LPP、NPE、US-ELM、ELM-AE、SNP-ELM 和 SELM-AE 七种降维方法将 IRIS 数据投影至 2 维后如图 6 所示. 从图 6 可以看出, 二维可视化与一维可视化实验结论类似, 即在七种降维方法中, SELM-AE 降维后样

本同类聚集性最好, 不同类样本交叠程度最低、可分性最优.

3.4 降维聚类对比实验

在 6 个实验数据集上分别采用本文方法 SELM-AE、ML-SELM-AE 与对比方法 PCA、LPP、NPE、US-ELM、ELM-AE、ML-ELM-AE、SNP-ELM 进行降维. 其中多层极限学习机自编码器 ML-ELM-AE 和 ML-SELM-AE 的层数 L 设为 3, 每层极限学习机的隐层节点数固定为降维维数. 所有模型的最优参数均通过网格搜索得到, 降维维数的搜索范围为 $\{2^1, 2^2, 2^3, \dots, 2^{10}\}$; 参数 c 和 λ 的搜索范围为 $\{10^{-3}, 10^{-2}, \dots, 10^3\}$; 模型 SNP-ELM 参数 η 和 δ 的搜索范围为 $[-1, 1]$, 搜索步长为 0.2.

3.4.1 k -means 聚类

对降维后样本进行 k -means 聚类, 为避免 k -means 随机选取初始中心导致聚类结果的随机性, 以 10 次聚类的平均准确率为最终准确率^[24]. 3 种传

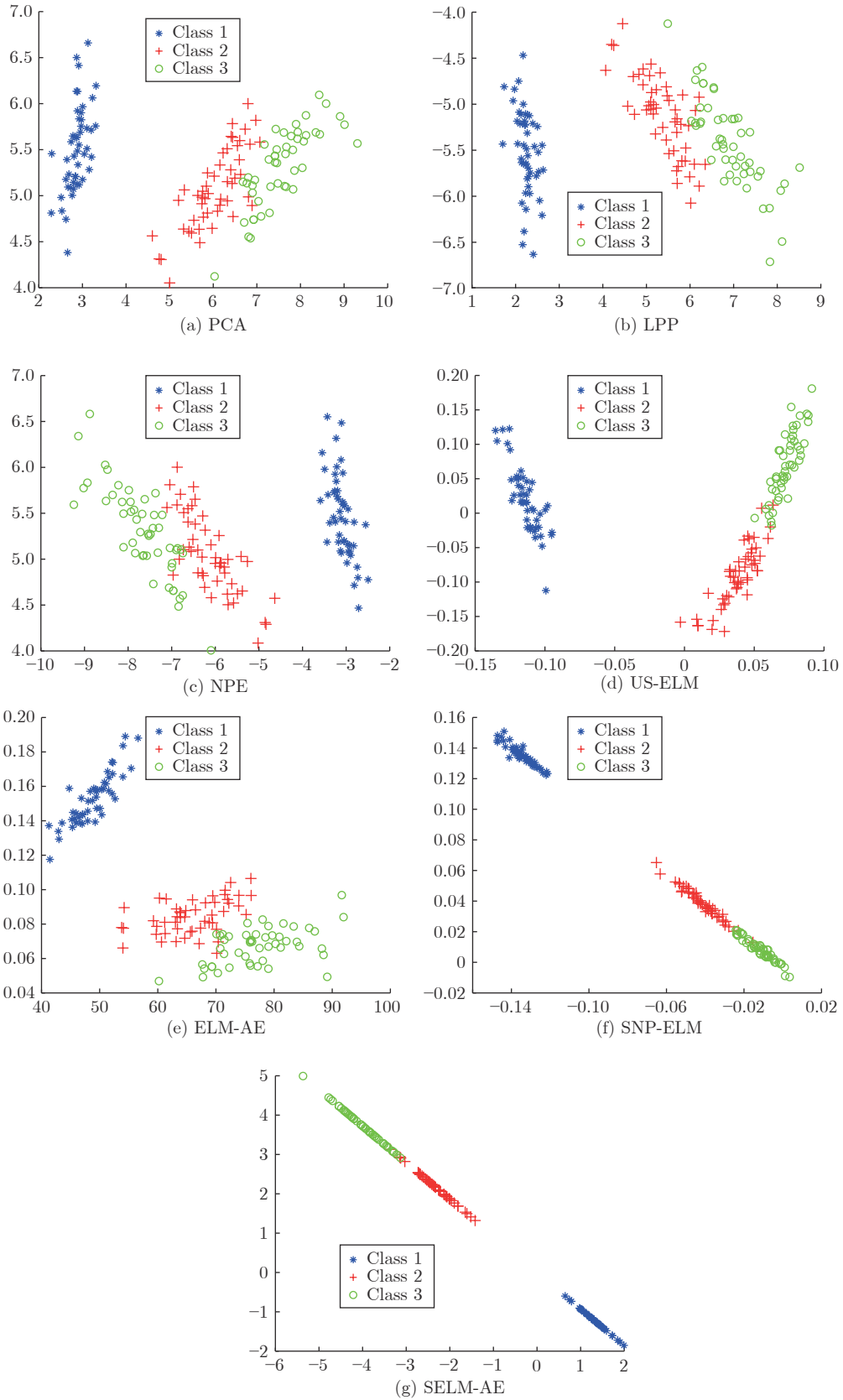


图 6 IRIS 数据集的二维可视化
Fig.6 The 2D visualization of IRIS data set

统降维方法 PCA、LPP 和 NPE 的聚类准确率 (方差, 维数) 如表 2 所示, 6 种 ELM 降维方法的聚类准确率 (方差, 维数) 如表 3 所示. 表 2 和表 3 是网格搜索最优参数得到的最佳平均聚类准确率、方差及对应维数.

表 3 中粗体值代表 9 种降维方法中聚类准确率最高者, 下划线值代表第 2 高者, 第 3 高者采用粗体加下划线标记. 由表 2 ~ 3 可以看出:

1) 经 3 种传统方法降维后的聚类准确率明显低于 6 种 ELM 降维方法. 原因在于 PCA、LPP 和 NPE 是全局线性降维模型, 其对非线性数据特征的描述能力低于非线性极限学习机降维方法.

2) 本文提出的 ML-SELM-AE 在 5 个数据集上取得最高的聚类准确率, 在 IRIS 数据集的准确率也接近最高值. 主要原因在于子空间结构保持项和多层编码器结构分别揭示了原始数据的子空间结

构和非线性特征. ML-SELM-AE 对应的单层方法 SELM-AE 和未引入子空间结构保持项的多层自编码器 ML-ELM-AE 聚类准确率均低于 ML-SELM-AE, SELM-AE 低 0.3% ~ 3.1%, ML-ELM-AE 低 1.6% ~ 5.6%, 说明在准确率提升方面子空间结构保持项的作用优于编码器层数的增加. 多层 ML-SELM-AE 与单层 SELM-AE 在多数数据集上的聚类准确率不相上下, 且单层 SELM-AE 的计算速度更快.

3) 对比方法 SNP-ELM 的聚类准确率略低于 ML-SELM-AE, 与 SELM-AE 相当, 但优于未考虑子空间结构保持项的其他降维方法, 且优势明显. 进一步说明子空间结构保持的重要性.

SNP-ELM 模型的局限在学习样本的近邻表示和稀疏表示存在迭代求解过程, 耗时较长. 而本文的 SELM-AE 模型有解析解, 计算效率明显高于

表 2 传统降维方法的聚类准确率 (%) (方差, 维数)

Table 2 Comparison of clustering accuracy of traditional methods (%) (variance, dimension)

数据集	k -means	传统算法		
		PCA	LPP	NPE
IRIS	89.13 (0.32)	89.07 (0.34, 4)	90.27 (0.84, 2)	88.67 (0.00, 2)
Data set IIb	86.47 (2.53)	88.21 (0.61, 4)	88.69 (7.33, 4)	89.58 (6.32, 256)
Data set II	72.38 (8.94)	79.31 (4.39, 2)	82.26 (0.13, 512)	82.62 (0.71, 256)
DLBCL	68.83 (0.00)	68.83 (0.00, 2)	63.55 (1.86, 8)	69.09 (0.82, 32)
Colon	54.84 (0.00)	54.84 (0.00, 2)	54.84 (0.00, 2)	56.45 (0.00, 2)
Prostate0	56.86 (0.00)	56.83 (0.00, 2)	56.86 (0.00, 2)	56.86 (0.00, 4)

表 3 ELM 降维方法聚类准确率 (%) (方差, 维数)(参数)

Table 3 Comparison of clustering accuracy of ELM methods (%) (variance, dimension)(parameters)

数据集	k -means	Unsupervised ELM			Subspace + unsupervised ELM		
		US-ELM(λ)	ELM-AE(c)	ML-ELM-AE(c)	SNP-ELM(λ, η, δ)	SELM-AE(c, λ)	ML-SELM-AE(c, λ)
IRIS	89.13 (0.32)	93.87	93.93	95.20	98.46	98.00	<u>98.40</u>
		(13.78, 2) (0.1)	(1.19, 2) (10)	(1.05, 2) (0.01)	(0.32, 2) (10, 0.6, -1)	(0.00, 2) (10, 0.01)	(0.56, 2) (10, 0.01)
Data set IIb	86.47 (2.53)	91.59	91.98	92.46	92.06	<u>95.29</u>	96.63
		(4.25, 4) (0.1)	(0.25, 4) (0.1)	(0.08, 16) (1)	(0.13, 16) (0.001, 0.8, 0.2)	(0.06, 8) (0.001, 1)	(0.00, 8) (0.001, 0.1)
Data set II	72.38 (8.94)	83.18	82.84	83.03	<u>83.92</u>	83.14	84.22
		(0.32, 256) (10)	(0.00, 2) (0.001)	(0.00, 2) (0.1)	(1.65, 2) (10, 0.2, -0.2)	(0.00, 2) (0.01, 1)	(0.00, 2) (0.001, 10)
DLBCL	68.83 (0.00)	76.62	78.05	82.46	<u>86.34</u>	83.63	86.71
		(0.00, 32) (0.001)	(0.73, 2) (0.001)	(0.68, 2) (0.001)	(1.78, 8) (0.001, -0.2, 0.6)	(2.51, 2) (10, 0.1)	(3.48, 2) (10, 1)
Colon	54.84 (0.00)	67.06	69.35	80.32	<u>85.95</u>	83.87	85.97
		(4.19, 32) (0.001)	(0.00, 2) (0.001)	(1.02, 2) (0.001)	(3.69, 8) (0.001, -0.8, 1)	(0.00, 4) (10, 0.1)	(0.78, 2) (10, 0.1)
Prostate0	56.86 (0.00)	64.09	75.98	79.61	82.92	<u>84.31</u>	85.29
		(5.83, 2) (0.01)	(0.51, 2) (0.01)	(1.01, 2) (0.01)	(2.19, 128) (0.1, 0.2, 0.8)	(0.00, 2) (10, 1)	(0.00, 2) (10, 0.01)

SNP-ELM, 即使在多层情况下也快于 SNP-ELM. 从表 4 给出的 SNP-ELM、SELM-AE 和 ML-SELM-AE 运行时间便可以看出, SNP-ELM 的运行时间明显高于 SELM-AE 和 ML-SELM-AE, 是二者的 100 倍~1 000 倍. 因此, 综合考虑准确率和效率, 本文提出的 SELM-AE 和 ML-SELM-AE 较之 SNP-ELM 更有优势.

表 4 运行时间对比 (s)

Table 4 Comparison of running time (s)

数据集	SNP-ELM	SELM-AE	ML-SELM-AE
IRIS	4.58	0.02	0.02
Data set IIb	4.64×10^3	0.16	0.33
Data set II	8.24×10^3	0.65	0.76
DLBCL	7.77	0.04	0.06
Colon	3.44×10^2	0.03	0.11
Prostate0	1.15×10^2	0.07	0.13

4) 对比 ELM-AE、SELM-AE 和相应的多层版本 ML-ELM-AE、ML-SELM-AE, 多层版本聚类准确率均高于对应的单层版本, 差距普遍在 0.2%~4.0% 之间, 说明增加网络层数可以提取更丰富的非线性特征, 提高降维样本的聚类准确率.

3.4.2 多种聚类方法对比实验

为观察不同聚类方法的影响, 进一步对降维前后数据应用三种子空间聚类方法进行聚类, 包括最小二乘回归子空间聚类 (LSR)^[14]、低秩表示子空间聚类 (LRR)^[25] 和潜在低秩表示子空间聚类 (LatLRR)^[26]. 为取得最优结果, 3 种聚类模型的最优参数 λ 均通过网格搜索得到, LSR 和 LRR 的参数搜索范围为 $\{10^{-3}, 10^{-2}, \dots, 10^3\}$, LatLRR 的参数搜索范围为 $\{10^{-5}, 10^{-4}, \dots, 1\}$.

在 6 个实验数据集上对未降维数据和采用 ML-SELM-AE 降至 2 维后数据进行聚类实验, 不同聚

类方法的聚类准确率及方差如表 5 所示.

从表 5 可以看出, 对于未降维高维数据, 子空间聚类方法 LSR 和 LRR 均优于 k -means 聚类. 但经过 ML-SELM-AE 降维后, k -means 聚类的准确率明显高于三种子空间聚类方法, 且比未降维时的聚类准确率有显著提高. 该实验结果进一步说明采用多层极限学习机和子空间结构保持可使降维数据蕴含更丰富的聚簇信息, 聚类划分更容易.

3.4.3 多层极限学习机隐层节点数对聚类结果的影响

为观察多层极限学习机隐层节点数的不同设置对聚类结果的影响, 将 ML-ELM-AE 和 ML-SELM-AE 两种三层极限学习机自编码器的隐层节点数分别设为 500-100-2、500-100-10、500-100-100 及 2-2-2、10-10-10、100-100-100, 并对高维数据集 Data set IIb、Data set II、DLBCL、Colon 和 Prostate0 进行降维和聚类, 取得的 k -means 聚类准确率如表 6 所示.

从表 6 可以看出, 在 5 个实验数据集上, 无论是 ML-ELM-AE 还是 ML-SELM-AE, 三层隐层节点数均取 2 时的聚类准确率最优. 且隐层节点数取固定值与非固定值的聚类准确率差别不明显, 固定隐层节点数的聚类准确率总体略好于不固定隐层节点数.

3.5 SELM-AE 模型参数分析

由表 5 的实验结果可知, 本文提的 SELM-AE 模型将数据投影到 2 维时便能取得较高的 k -means 聚类准确率, 因此取固定维数 2 情况下进行参数分析. SELM-AE 模型的参数 c 和 λ , 分别是目标函数中自编码重构误差项和子空间结构保持项的平衡参数.

3.5.1 目标函数值随参数 c 与 λ 的变化情况

SELM-AE 模型以最小化目标函数值为目标.

表 5 ML-SELM-AE 降维前后数据的聚类准确率 (%) (方差)

Table 5 Clustering accuracy before and after ML-SELM-AE dimensionality reduction (%) (variance)

数据集	k -means		LSR		LRR		LatLRR	
	未降维	已降维	未降维	已降维	未降维	已降维	未降维	已降维
IRIS	89.13 (0.32)	98.40 (0.00)	82.40 (0.69)	97.33 (0.00)	90.87 (0.00)	94.00 (0.83)	81.27 (1.03)	97.33 (0.00)
Data set IIb	86.47 (2.53)	93.25 (0.00)	83.13 (0.00)	86.59 (0.19)	83.13 (0.00)	86.11 (0.00)	83.13 (0.00)	86.48 (0.25)
Data set II	72.38 (8.94)	84.22 (0.00)	83.24 (0.08)	83.29 (0.05)	83.24 (0.00)	83.24 (0.00)	83.24 (0.00)	83.33 (0.00)
DLBCL	68.83 (0.00)	86.71 (3.48)	76.62 (0.00)	81.43 (0.63)	76.62 (0.00)	78.57 (0.68)	74.03 (0.00)	78.18 (3.23)
Colon	54.84 (0.00)	85.97 (0.78)	67.74 (0.00)	74.19 (0.00)	63.39 (0.00)	69.35 (0.00)	66.13 (1.67)	75.65 (4.06)
Prostate0	56.86 (0.00)	85.29 (0.00)	63.82 (1.37)	70.59 (0.00)	57.84 (0.00)	63.73 (0.00)	55.88 (0.00)	74.51 (0.00)

表 6 三层极限学习机自编码器隐层节点数与聚类准确率 (%) (方差)
Table 6 The number of hidden layer nodes and clustering accuracy for three-layer extreme learning machine autoencoder (%) (variance)

数据集	ML-ELM-AE (Multilayer ELM-AE)				ML-SELM-AE (Multilayer SELM-AE)			
	500-100-2	500-100-10	500-100-50	500-100-100	500-100-2	500-100-10	500-100-50	500-100-100
Data set IIb	88.69 (0.00)	91.98 (0.25)	90.89 (0.06)	87.66 (0.20)	95.44 (0.00)	94.92 (0.17)	95.44 (0.00)	94.80 (0.33)
Data set II	82.94 (0.00)	82.94 (0.00)	82.94 (0.00)	82.94 (0.00)	83.14 (0.00)	83.04 (0.00)	83.04 (0.00)	83.04 (0.00)
DLBCL	74.03 (0.00)	72.99 (3.29)	72.73 (0.00)	69.22 (0.88)	80.52 (0.00)	80.52 (0.00)	78.57 (2.05)	76.62 (0.00)
Colon	73.87 (1.67)	59.68 (0.00)	69.52 (7.35)	59.03 (0.83)	78.55 (2.53)	75.97 (7.81)	76.13 (9.46)	70.48 (4.37)
Prostate0	66.67 (0.00)	60.78 (0.00)	59.80 (0.00)	62.75 (0.00)	77.16 (0.47)	82.35 (0.00)	78.33 (6.51)	80.39 (0.00)
数据集	2-2-2	10-10-10	50-50-50	100-100-100	2-2-2	10-10-10	50-50-50	100-100-100
Data set IIb	92.46 (0.08)	90.48 (0.00)	90.16 (0.17)	90.40 (0.25)	96.63 (0.00)	95.83 (0.00)	95.44 (0.00)	94.84 (0.00)
Data set II	83.04 (0.00)	83.04 (0.00)	83.04 (0.00)	82.94 (0.00)	84.22 (0.00)	83.14 (0.00)	83.04 (0.00)	83.04 (0.00)
DLBCL	83.12 (0.00)	77.01 (0.63)	68.83 (0.00)	68.70 (0.41)	86.75 (4.23)	80.52 (0.00)	78.96 (0.82)	76.62 (0.00)
Colon	80.64 (0.00)	60.00 (2.50)	70.00 (1.36)	62.90 (0.00)	85.97 (0.78)	68.23 (0.78)	80.65 (0.00)	76.61 (9.48)
Prostate0	80.39 (0.00)	57.45 (0.83)	64.41 (0.47)	63.73 (0.00)	85.29 (0.00)	69.61 (0.00)	79.12 (6.67)	84.31 (0.00)

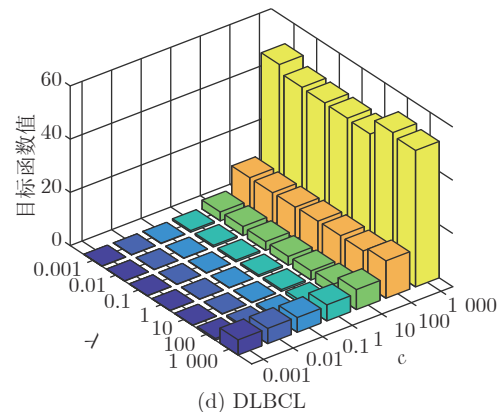
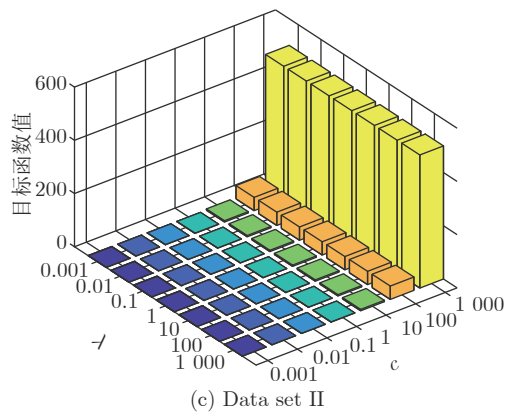
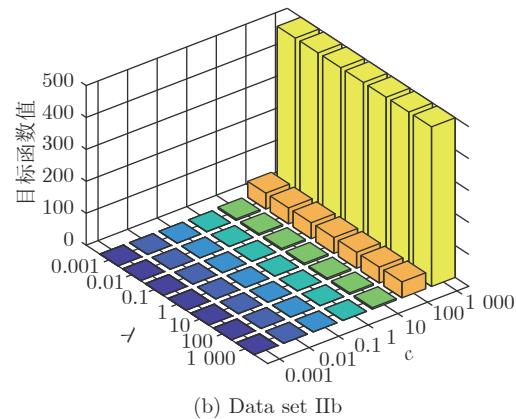
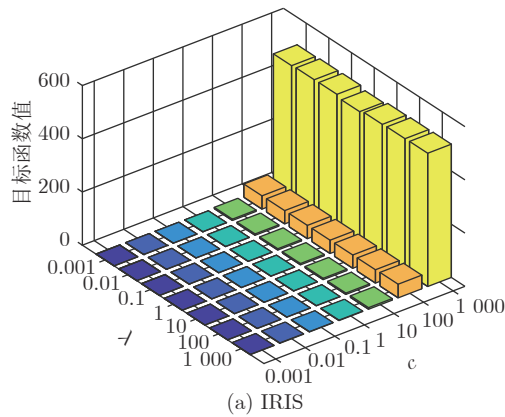
本实验目的在于观察模型的目标函数值随参数 c 和 λ 变化情况 (如图 7), c 和 λ 的取值范围均为 $\{10^{-3}, 10^{-2}, \dots, 10^3\}$.

由图 7 可以看出, 参数 λ 的变化对目标函数值的影响较小, 而参数 c 的变化对目标函数值的影响较大. 总体来看, 参数 c 和 λ 在区间 $[0.001, 10]$

内取值时, 目标函数值最小.

3.5.2 聚类准确率随参数 c 与 λ 的变化情况

为进一步观察 SELM-AE 模型聚类准确率随参数 c 和 λ 的变化情况, 图 8 给出参数 c 和 λ 取不同值时的 k -means 聚类准确率, 其中 c 和 λ 的变化范围为 $\{10^{-3}, 10^{-2}, \dots, 10^3\}$. 由图 8 可以看出, 参



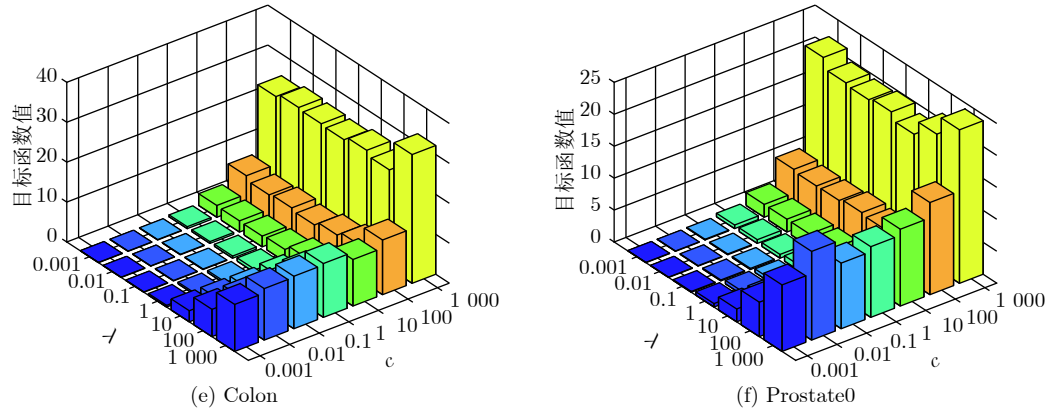


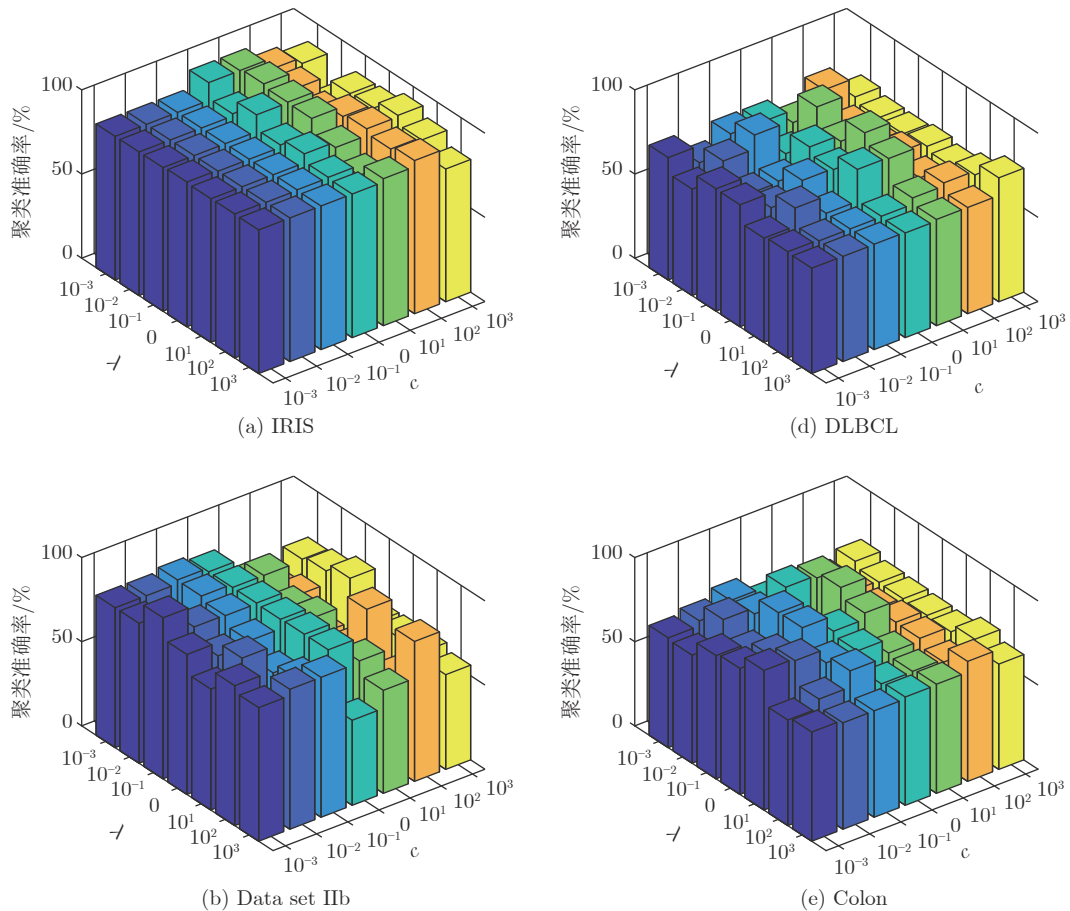
图 7 不同 c 和 λ 下的目标函数值
Fig.7 Objective function value under different c and λ

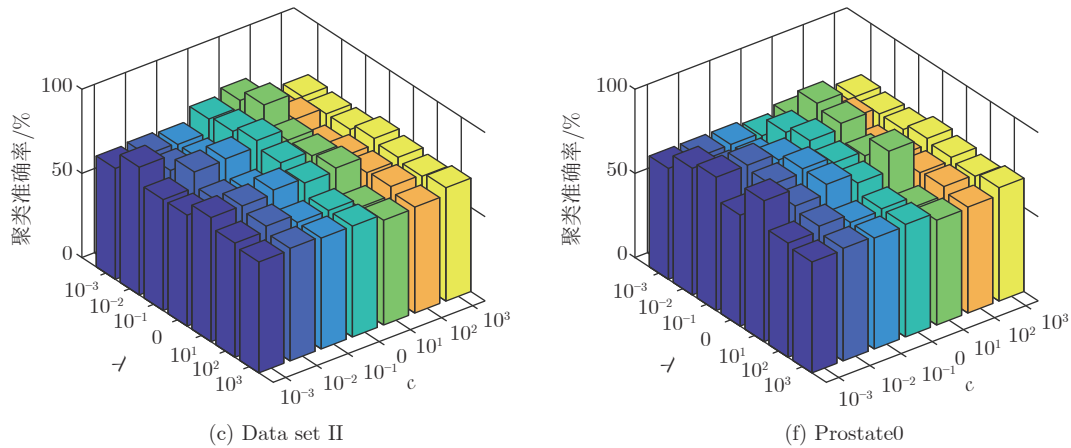
数 c 和 λ 在区间 $[0.001, 10]$ 内取值时, 能取得最高的聚类准确率, 该参数的最佳取值区间与图 7 的分析结论一致.

4 结束语

在极限学习机自编码器 ELM-AE 基础上, 本

文提出子空间结构保持的极限学习机自编码器 SELM-AE 及其多层版本 ML-SELM-AE. SELM-AE 在极限学习机自编码器的输出层增加自表示层, 引入最小二乘回归子空间结构模型, 使自编码器输出与输入的自表示系数相同. 多层子空间结构保持极限学习自编码器 ML-SELM-AE 通过增加 SELM-



图 8 不同 c 和 λ 取值下的聚类准确率Fig.8 Clustering accuracy under different values of c and λ

AE 自编码器层数获取数据的深层特征, 提高网络的特征提取能力. 在 6 个数据集上的实验结果表明, 经 SELM-AE 和 ML-SELM-AE 降维后的聚类准确率普遍优于经典降维方法和传统的 ELM 降维方法. 同时多层 ML-SELM-AE 因对非线性投影函数的逼近能力优于单层的 SELM-AE 模型, 其降维后数据的聚类准确率更高.

References

- Hinton G E, Salakhutdinov R R. Reducing the dimensionality of data with neural networks. *Science*, 2006, **313**(5786): 504–507
- Tian Juan-Xiu, Liu Guo-Cai, Gu Shan-Shan, Ju Zhong-Jian, Liu Jin-Guang, Gu Dong-Dong. Deep learning in medical image analysis and its challenges. *Acta Automatica Sinica*, 2018, **44**(3): 401–424
(田娟秀, 刘国才, 谷珊珊, 鞠忠建, 刘劲光, 顾冬冬. 医学图像分析深度学习方法研究与挑战. 自动化学报, 2018, **44**(3): 401–424)
- Rik D, Ekta W. Partition selection with sparse autoencoders for content based image classification. *Neural Computing and Applications*, 2019, **31**(3): 675–690
- Shao H D, Jiang H K, Zhao H W. A novel deep autoencoder feature learning method for rotating machinery fault diagnosis. *Mechanical Systems and Signal Processing*, 2017, **95**: 187–204
- Chiang H T, Hsieh Y Y, Fu S W, Hung K H, Tsao Y, Chien S Y. Noise reduction in ECG signals using fully convolutional denoising autoencoders. *IEEE Access*, 2019, **7**: 60806–60813
- Yildirim O, Tan R S, Acharya U R. An efficient compression of ECG signals using deep convolutional autoencoders. *Cognitive Systems Research*, 2018, **52**: 198–211
- Liu W F, Ma T Z, Xie Q S, Tao D P, Cheng J. LMAE: A large margin auto-encoders for classification. *Signal Processing*, 2017, **141**: 137–143
- Ji P, Zhang T, Li H, Salzmann M, Reid L. Deep subspace clustering networks. In: Proceedings of the 31st Conference on Neural Information Processing Systems. Long Beach, USA, 2017. 23–32
- Kasun L L C, Yang Y, Huang G B, Zhang Z Y. Dimension reduction with extreme learning machine. *IEEE Transactions on Image Processing*, 2016, **25**(8): 3906–3918
- Huang G B, Zhu Q Y, Siew C K. Extreme learning machine: A new learning scheme of feedforward neural networks. In: Proceedings of Internatinoal Joint Conference on Neural Networks. Budapest, Hungary: IEEE, 2004. 985–990
- Xu Su-Hui, Mu Xiao-Dong, Chai Dong, Luo Chang. Domain adaption algorithm with ELM parameter transfer. *Acta Automatica Sinica*, 2018, **44**(2): 311–317
(许凤晖, 慕晓冬, 柴栋, 罗畅. 基于极限学习机参数迁移的域适应算法. 自动化学报, 2018, **44**(2): 311–317)
- Huang G, Song S J, Gupta J N D. Semi-supervised and unsupervised extreme learning machines. *IEEE Transactions on Cybernetics*, 2014, **44**(12): 2405–2417
- Chen Xiao-Yun, Liao Meng-Zhen. Dimensionality reduction with extreme learning machine based on sparsity and neighborhood preserving. *Acta Automatica Sinica*, 2019, **45**(2): 325–333
(陈晓云, 廖梦真. 基于稀疏和近邻保持的极限学习机降维. 自动化学报, 2019, **45**(2): 325–333)
- Lu C Y, Min H, Zhao Z Q. Robust and efficient subspace segmentation via least squares regression. In: Proceedings of the 12th European Conference on Computer Vision. Berlin, Germany: Springer, 2012. 347–360
- Ji P, Salzmann M, Li H D. Efficient dense subspace clustering. In: Proceedings of Winter Conference on Applications of Computer Vision. Steamboat Springs, CO, USA: IEEE, 2014. 461–468
- Sun K, Zhang J S, Z C X, Hu J Y. Generalized extreme learning machine autoencoder and a new deep neural network. *Neurocomputing*, 2017, **230**: 374–381
- Ma J, Yuan Y Y. Dimension reduction of image deep feature using PCA. *Journal of Visual Communication and Image Representation*, 2019, **63**: 1–8
- Wang S J, Xie D Y, Chen F, Gao Q X. Dimensionality reduction by LPP-L21. *IET Computer Vision*, 2018, **12**(5): 659–665

- 19 Kong D D, Chen Y J, Li N, Duan C Q, Lu L X, Chen D X. Tool wear estimation in end milling of titanium alloy using NPE and a novel WOA-SVM model. *IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement*, 2020, **69**(7): 5219–5232
- 20 UCI Machine Learning Repository. [Online], available: <http://archive.ics.uci.edu>, September 8, 2020
- 21 NYS Department of Health. [Online], available: <http://www.bbc.de/competition/>, September 8, 2020
- 22 Gene Expression Model Selector. [Online], available: <http://www.gems-system.org>, September 8, 2020
- 23 Kaper M, Ritter H. Generalizing to new subject in brain-computer interfacing. In: Proceedings of the 26th Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society. San Francisco, USA: IEEE, 2004. 4363–4366
- 24 Chen X Y, Jian C R. Gene expression data clustering based on graph regularized subspace segmentation. *Neurocomputing*, 2014, **143**: 44–50
- 25 Liu G C, Lin Z C, Yu Y. Robust subspace segmentation by low-rank representation. In: the 27th International Conference on Machine Learning. Haifa, Israel, 2010. 663–670
- 26 Liu G, Yan S. Latent low-rank representation for subspace segmentation and feature extraction. In: Proceedings of International Conference on Computer Vision. Barcelona, Spain: IEEE, 2011. 1615–1622



陈晓云 福州大学数学与计算机科学学院教授。主要研究方向为数据挖掘, 机器学习和模式识别。本文通信作者。E-mail: c_xiaoyun@fzu.edu.cn
(**CHEN Xiao-Yun** Professor at the College of Mathematics and Computer Science, Fuzhou University.

Her research interest covers data mining, machine learning and pattern recognition. Corresponding author of this paper.)



陈媛 福州大学数学与计算机科学学院硕士研究生。主要研究方向为数据挖掘和模式识别。E-mail: cy_inohurry@163.com

(**CHEN Yuan** Master student at the College of Mathematics and Computer Science, Fuzhou Uni-

versity. Her research interest covers data mining and pattern recognition.)