

子流形离散点云的切空间与第二基本形估计

曹越琦

2021年6月

中图分类号：O186.1

UDC分类号：514

子流形离散点云的切空间与第二基本形估计

作者姓名	曹越琦
学院名称	数学与统计学院
指导教师	孙华飞教授
答辩委员会主席	杨国孝教授
申请学位	理学硕士
学科专业	数学
学位授予单位	北京理工大学
论文答辩日期	2021年6月

Tangent space and the second fundamental form estimation for point clouds from submanifolds

Candidate Name:	<u>Yueqi Cao</u>
School or Department:	<u>Beijing Institute of Technology</u>
Faculty Mentor:	<u>Prof. Huafei Sun</u>
Chair, Thesis Committee:	<u>Prof. Guoxiao Yang</u>
Degree Applied:	<u>Master of Science</u>
Major:	<u>Mathematics</u>
Degree by:	<u>School of Mathematics and Statistics</u>
The Date of Defence:	<u>6, 2021</u>

子流形离散点云的切空间与第二基本形估计

北京理工大学

研究成果声明

本人郑重声明：所提交的学位论文是我本人在指导教师的指导下进行的研究工作获得的研究成果。尽我所知，文中除特别标注和致谢的地方外，学位论文中不包含其他人已经发表或撰写过的研究成果，也不包含为获得北京理工大学或其它教育机构的学位或证书所使用过的材料。与我一同工作的合作者对此研究工作所做的任何贡献均已在学位论文中作了明确的说明并表示了谢意。

特此申明。

作者签名： _____ 签字日期： _____

关于学位论文使用权的说明

本人完全了解北京理工大学有关保管、使用学位论文的规定，其中包括：① 学校有权保管、并向有关部门送交学位论文的原件与复印件；② 学校可以采用影印、缩印或其它复制手段复制并保存学位论文；③ 学校可允许学位论文被查阅或借阅；④ 学校可以学术交流为目的，复制赠送和交换学位论文；⑤ 学校可以公布学位论文的全部或部分内容（保密学位论文在解密后遵守此规定）。

作者签名： _____ 导师签名： _____

签字日期： _____ 签字日期： _____

摘要

大数据的高维度和复杂性是数据科学的难点。基于经典的流形假设，离散点云往往来自高维欧氏空间的一个低维子流形。通过研究子流形的几何结构来提取数据的有效特征，才能实现高效处理数据的目的。本文研究了子流形离散点云上的切空间和第二基本形估计。对于切空间的估计，给出了局部主成分分析的经验协方差矩阵的偏差-方差分解，并利用随机矩阵和扰动理论中的 Davis-Kahan 定理和 Weyl 定理，给出切空间估计的均方误差和最优收敛速率。对于第二基本形的估计，用 Weingarten 映射的性质构造了一个新的估计，并给出该估计的闭式解，在此基础上进一步设计了 WME 算法。通过建立统计模型，本文导出了优化问题的总体解和经验解，进而得到该估计的偏差和方差，在有限样本的情形下，给出该估计的最优收敛速度。与现有结果相比较，该估计在理论上收敛性更强，在应用中效率更高。在数值实验中，本文将 WME 算法应用于曲率估计、点云简化和脑曲面上的统计回归等问题。在曲率估计问题中，相比于传统的二次曲面拟合算法，WME 算法不仅精确度更高，而且对噪声更不敏感。在点云简化问题中，基于 WME 算法进一步地提出了基于曲率的曲率自适应简化算法。相比于传统的均匀简化算法，在相同的点云规模下，该方法对于点云的几何细节刻画更为精细。在脑曲面上的统计回归问题中，本文在传统的岭回归方法上加入了脑曲面第二基本型的算子谱作为新的回归特征。实验结果表明，加入该特征后预测的准确性有显著提高。

关键词：子流形；流形学习；切空间；Weingarten 映射；高维统计

Abstract

High dimensionality and complexity of big data are difficulties in data science. Based on the classical manifold assumption, discrete point clouds are sampled from a low dimensional submanifold in high dimensional Euclidean space. Extracting effective features from data by studying the geometric structure of the submanifold is the way to fulfill the goal of efficiently coping with data. This thesis studies the tangent space and the second fundamental form estimation on discrete point sets sampled from submanifolds in Euclidean spaces. For tangent space estimation, this thesis gives the bias-variance decomposition of the empirical covariance matrix from local PCA, and uses Davis-Kahan theorem and Weyl theorem from random matrix theory and perturbation theory to derive mean square error and optimal convergence rate for tangent space estimation. For the second fundamental form estimation, this thesis constructs a new second fundamental form estimator using the Weingarten map, and derives closed-form solution, while yields the WME algorithm. From the statistical model, this thesis derives the population solution and empirical solution for the optimization problem, which then gives the bias and variance for the estimator, and gives the optimal convergence rate under finite sample conditions. Compared with other recent results, the new estimator has stronger convergence in theory and better efficiency in practice. In experiments, this thesis applies WME algorithm to practical problems like curvature estimation, point cloud simplification and statistical regression on brain cortical surface. In curvature estimation, this thesis compares WME algorithm to classical quadratic surface fitting algorithm. Results show that WME is more precise and robust to noises. In point cloud simplification, a new curvature-adapted simplification algorithm is proposed. Results show that under the same number of points, the new algorithm preserves more geometric details than classical uniform simplification algorithm. In statistical regression on brain cortical surface, the operator norm of the second fundamental form is added as feature in ridge regression, which then proves to improve the performance of prediction in experiments.

Key Words: Submanifolds; Manifold Learning; Tangent Space; The Weingarten Map; High Dimensional Statistics

主要符号对照表

\mathcal{M}	m 维紧致流形
\mathbb{R}^d	d 维欧氏空间，带标准欧氏内积
R	\mathcal{M} 的黎曼曲率张量
∇	\mathcal{M} 的黎曼联络
$T_p\mathcal{M}$	\mathcal{M} 上 p 处的切空间
$T_p^\perp\mathcal{M}$	\mathcal{M} 上 p 处的法空间
ξ_p	p 处的法向量，其指标用 α, β, γ 等小写希腊字母表示
$\tilde{\xi}$	\mathcal{M} 上的法向量场，在收敛性的证明中简记为 ξ
X_p	p 处的切向量
$\mathfrak{X}(\mathcal{M})$	\mathcal{M} 上所有光滑切向量场的集合
\mathbb{II}	\mathcal{M} 上的第二基本形
A_{ξ_p}	在 p 点沿 ξ_p 的 Weingarten 映射
\mathbf{A}	Weingarten 映射的总体估计
$\tilde{\mathbf{A}}$	Weingarten 映射的经验估计
N	独立同分布的样本的数量，亦即点云的规模
h	估计第二基本形时的带宽
h_{PCA}	估计切空间时的带宽
P	取值在流形上的随机向量
\mathbb{E}_f	相对于密度函数 f 取期望
MSE	均方误差
exp	指数映射

目 录

摘要	I
Abstract	II
主要符号对照表	III
第 1 章 绪论	1
1.1 引言	1
1.2 国内外研究现状及发展趋势	1
1.2.1 切空间估计	1
1.2.2 第二基本形估计	2
1.2.3 曲率估计	3
1.3 主要结果	5
第 2 章 预备知识	6
2.1 黎曼几何基础	6
2.2 第二基本形	9
第 3 章 切空间估计	13
3.1 局部主成分分析	13
3.2 指数映射	15
3.3 协方差矩阵的偏差-方差分解	16
3.4 收敛性	20
第 4 章 Weingarten 映射估计	24
4.1 WME 算法	24
4.2 统计模型	28
4.3 算法收敛性	30
4.3.1 偏差估计	30
4.3.2 方差估计	33
4.3.3 均方误差	35

4.4	与其他方法比较	36
4.5	实验验证	37
4.5.1	核方法	37
4.5.2	k 近邻法	39
第 5 章	应用	41
5.1	曲率估计	41
5.1.1	环面	41
5.1.2	大脑皮层曲面	42
5.2	点云简化	43
5.3	大脑皮层与年龄预测	46
5.3.1	数据获取	47
5.3.2	数据处理流程	48
5.3.3	统计回归	50
结论	53
参考文献	54
攻读学位期间发表论文与研究成果清单	60
致谢	62

插图

图 3.1	斯坦福兔子, 颜色对应平均曲率	14
图 4.1	螺旋线上的平均曲率向量场	27
图 4.2	螺旋线, 环面以及椭球圆的 $\log(N) - \log(\text{MSE})$ 图, 斜率与收敛的阶一致	38
图 4.3	环面和椭球圆的 $\log(N) - \log(\text{MSE})$ 图, 斜率与收敛的阶一致	40
图 5.1	环面上 WME 算法和二次曲面拟合算法精确性的比较	42
图 5.2	环面上 WME 算法和二次曲面拟合算法鲁棒性的比较	42
图 5.3	大脑皮层上 WME 算法和二次曲面拟合算法鲁棒性的比较	43
图 5.4	杜克龙, 曲面重构于 6500 个点	46
图 5.5	斯坦福兔子, 曲面重构于 4,400 个点	47
图 5.6	怪兽狢狢, 曲面重构于 7,800 个点	48
图 5.7	用 FreeSurfer 处理之后的各个分割面点云	49
图 5.8	各回归模型岭迹图	51
图 5.9	各回归模型年龄预测图	52

第 1 章 绪论

1.1 引言

在流形学习领域，高维数据集通常假定取自一个低维的流形。因此推断流形的几何和拓扑成为一个至关重要的问题。流形的同调群、同伦群、体积、曲率、测地线、测地距离、微分算子等都是研究中关心的对象^[1-10]。数据的流形结构可以用各种方式恢复出来：测地距离可以通过等距特征映射 (ISOMAP) 得出，局部的线性结构可以用局部线性嵌入 (LLE) 或者 Hessian 特征映射表示^[11-13]。而在这些几何和拓扑不变量中，切空间和第二基本形尤其重要。切空间的估计在数据的降维和聚类有着广泛的应用；第二基本形的估计则与流形的曲率的估计密切关联，而曲率在曲面的重构、网格生成中扮演不可或缺的角色。对于欧氏空间中的曲线和曲面，学者们提出了大量的算法，然而这些算法和理论很难推广到高维，一些算法的收敛性和一致性也没有深入研究。

1.2 国内外研究现状及发展趋势

1.2.1 切空间估计

在切空间估计中，一个常用的方法是在点云每个点的局部用主成分分析 (PCA)，局部协方差矩阵的较大特征值所对应的特征向量被认为是切空间的一组基。这个步骤可以认为是具有扰动的 PCA，而扰动来自于流形的曲率：对于曲率较小的区域，流形本身就能够被切空间很好地逼近，所以扰动较小，PCA 能够很好地恢复切空间的信息；对于曲率较大的区域，流形在切空间处有较大的偏离，所以扰动较大，此时 PCA 的效果依赖于区域的大小，若选取的区域过大，则会产生较大的偏差。在随机扰动下对 PCA 的分析有大量成熟的结果。例如，Davis-Kahan 定理就描述了厄米特矩阵的特征子空间在扰动下如何偏离真实的子空间^[14]；Wedin 定理则将结果推广到非厄米特算子^[15]。V. Vu 将奇异向量的估计推广到低秩的带随机噪声的矩阵^[16]。N.M. Faber 等人则将观测数据的信噪比和 PCA 的随机误差联系起来^[17]。然而，这些对 PCA 的分析并没有考虑到数据的几何结构。还有一些 PCA 的分析考虑了来自特殊模型的数据，例如 T.W. Anderson, M.A. Gershick, D.N. Lawley 等人考虑了具有多元正态分布的数据的协方差矩阵的特征值和特征向量，然而这些特殊模型中没有涉及到流形^[18-20]。近年

来有少数学者研究了 PCA 和数据的几何之间的关系：A. Singer 和 H.T. Wu 的工作讨论了扩散映射和降维之间的联系^[6]，他们给出了用局部 PCA 估计切空间的渐进误差。假设 N 是点云的数量， m 是流形的维数， ϵ 是邻域的半径，当 $\epsilon = O(N^{-1/(m+2)})$ 时，切空间的估计误差为 $O(\epsilon^{3/2})$ 。这里没有考虑有噪声的情形。D. Kaslovsky 和 F. Meyer 则考虑了二次嵌入的流形和带高斯噪声的情形^[21]，此时局部 PCA 区域的大小依赖于噪声和曲率的影响，由于曲率的存在，区域太大会给出较大的偏差，而由于噪声的存在，区域太小则会给出较大的方差，因此在噪声和区域之间会存在一个最优的权衡。对于任意的光滑嵌入的情形，H. Tyagi 等人给出了更精细的结果^[22]：假设流形的维数是 m ，全空间的维数是 d ，点云的数量是 N ，区域的半径是 ϵ ，则当 m 趋于无穷时，选取

$$\begin{cases} N = O(\tau^{-2}d^2 \log(m)) \\ \epsilon = O(m^{1/2}d^{-1}|\kappa_{\max}|^{-1}) \end{cases}$$

其中 τ 是 $(0,1)$ 中的一个数， κ_{\max} 表示曲率，则估计的切空间和真实的切空间之间的夹角的为

$$\theta < \arccos \left(\sqrt{(1 - \tau^2 - O(m^{-1}d|\kappa_{\max}|^{-4}))^d} \right)$$

事实上，在数据具有较强的相关性时，二次嵌入和任意光滑嵌入给出的取样规模相同，但是当数据具有较弱的相关性时，H. Tyagi 等人证明，取样规模可以降低，从而更加高效，此时，对于二次的嵌入，取样规模和带宽满足

$$\begin{cases} N = O(\tau^{-2}md \log(m)) \\ \epsilon = O(d^{-1}|\kappa_{\max}|^{-1}) \end{cases}$$

而对于任意光滑的嵌入，取样规模和带宽满足

$$\begin{cases} N = O(m \log(m)) \\ \epsilon = O(m^{-1/3}d^{-5/6}|\kappa_{\max}|^{-1/3}) \end{cases}$$

1.2.2 第二基本形估计

第二基本形的估计相较于切空间的估计要困难得多。首先第二基本形是二阶光滑的几何量，从而方法更为复杂，对噪声更加敏感。另外，实际应用中具有几何结构的

数据大多为曲面或者曲线上的点，对第二基本形的估计直接化归为曲率的估计。然而随着越来越多的具有几何结构的高维数据的出现，在应用中，对第二基本形的估计成为一个亟待解决的问题。2018年 B. Buet, G.P. Leonardi 和 S. Masnou 利用几何测度论在 varifold 上定义了推广的第二基本形，并提出了基于 varifold 的估计第二基本形的方法^[23]：假设 V 是一个 varifold，首先用规范化的核函数 ρ_ϵ 与标准的一阶变分 δV 做卷积得到规范化一阶变分。类似地，用另一个核函数 ξ_ρ 与标准测度 $\|V\|$ 卷积定义规范化测度。规范化一阶变分与规范化测度的比值被定义为近似平均曲率场 $H_{\rho,\xi,\epsilon}^V$ ，其中 ϵ 刻画了对平均曲率的近似程度。通过近似平均曲率场可以定义弱第二基本形，当 varifold 为流形时，弱第二基本形可以收敛到真实的第二基本形。而在离散的数据的情形，他们证明了当核函数满足特定条件时，弱第二基本形的收敛速度是 $O(N^{-1/2})$ 。这种基于变分的算法具有很强的鲁棒性，然而论文给出的算法较为复杂，同时算法具有变分算法的共有缺点，准确性较差，需要对参数进行精细的控制。

A. Aamari 和 C. Levrard 提出了用多项式拟合对第二基本形进行估计^[10,24]。不同于经典的多项式拟合的情形，他们考虑所有的满足特定正则性条件的紧流形，并在这个范畴上考虑给出最小的最大误差的估计。这个方法虽然给出了漂亮的理论证明，文章并没有给出具体的算法。在收敛性上，考虑所有局部 k 阶正则、曲率有一致上界的欧氏空间的嵌入子流形，假设 x_1, \dots, x_N 是流形上均匀取样的独立样本，那么对第二基本形的算子范数有如下的最小最大误差

$$\inf_{\Pi} \sup_{\mathcal{M}} \mathbb{E} \max_{1 \leq j \leq N} \|\Pi_{x_j}^{\mathcal{M}} - \Pi_j\| \leq O\left(\left(\frac{1}{n}\right)^{\frac{k-1}{d}}\right)$$

1.2.3 曲率估计

从离散点云中估计曲面的法向量、主曲率、平均曲率、高斯曲率，并提取边界或者其它特征在计算机图形学、逆向工程等领域有大量的应用。在实际应用中，从深度扫描仪得到的离散数据重构曲面一直是工程中的重要问题，而估计曲率则是重构曲面中必要的环节。对曲率估计得越精确，在重构时就能得到越高质量的网格。在计算机图形学等领域中，大量的算法被提出用来估计曲率。早期的方法通常是先在每个点的邻域内估计方向曲率，然后对方向曲率积分得到主曲率和主方向，例如 C. Lange 和 K. Polthier 等人提出的 Anisotropic smoothing^[25]。对带噪声的和不规则点云，J. Huang 和 C.H. Menq 提出了移动最小二乘和局部加权的具有鲁棒性的方法^[26]；J. Berkmann 等

人提出用法向量的协方差矩阵逼近曲面的形状算子^[27]；E. Kalogerakis 等人通过在局部做法向量的变分来拟合曲率张量^[28]。这些算法通常以估计点云的法向量开始，在估计中的每个步骤产生的误差都会累计。一个同时计算法向量和第二基本形的方法是拟合局部的射丛。F. Cazals 和 M. Pouget 提出基于最小二乘的射丛拟合方法^[29]，这个算法的优点是复杂度低，同时算法有很好的收敛性，缺点是这个算法要求点云必须是均匀取自于一个曲面，然而从镭射扫描仪得到的点云通常是不均匀而且带有噪声的，所以该算法在实际问题中并不能保证得到精确的结果。为了克服这个方法的缺点，L. Guibas 等人提出了 Voronoi 协方差测度 (Voronoi covariance measure) 的概念^[30]，通过在每个 Voronoi 胞腔上对法向量的协方差矩阵做积分，这个方法一方面可以估计曲面的曲率，另一方面对噪声具有很强的鲁棒性。假设 χ 是一个有界的利普希茨核函数，那么对每个欧氏空间的紧子集 D 和参数 R ，存在一个只依赖于 D 和 R 的常数 $C(D, R)$ ，满足

$$\|V_D * \chi - V_{D'} * \chi\| \leq C(D, R)d_H(D, D')^{1/2}$$

其中 V_D 是 D 上的 Voronoi 测度， d_H 是集合之间的豪斯多夫距离。因此当两个紧子集的豪斯多夫距离足够近时，两个矩阵的算子范数被豪斯多夫距离所控制。

曲率估计是曲面重构中的重要步骤，它控制了生成网格的大小和尺度，因此与重构网格的质量紧密相关。除了曲面重构，曲率估计在点云上也有直接的应用。一个典型的应用是点云的特征提取。尖锐的边和角有异常的曲率，因此可以直接从曲率中得到形状的尖锐的特征。S. Fleishman 等人提出将曲面划分为不同的区域并在每个区域用曲率探测尖锐边角的方法^[31]；J. Daniel 等人进一步将这个方法进行推广，用分段光滑的折线提取特征曲线；Y. Lipman 等人提出用移动最小二乘投影的方法提取特征点的方法^[32]；P. Janke 等人则将在每个不同的区域进行光滑地拟合^[33]，对具有不同法向量的邻近区域计算交集，从而发现特征曲线。这些方法的共同特点是它们都直接或者间接用到了曲率的信息。对于没有做曲率估计的方法，它们用到了法向量的比较，而法向量的变化本质其实是曲率，因此曲率估计可以直接应用到特征提取之中。

曲率估计的另一个应用是点云简化，从高精度的镭射扫描仪或者深度扫描仪扫描得到的点云通常具有极大的规模，而这样的规模对后续处理显得极其笨重，尤其是在曲面重构的算法中，对点云的数量有着严苛的要求。如何降低点云的规模，同时又不影响点云的几何结构是一个必须解决的问题。T. Rabbani 等人归纳了三种不同的点云简化方法：聚类法、迭代法、粒子仿真^[34]。这些方法依赖于数据的局部协方差，虽然

T. Rabbani 在文中声明局部协方差与曲率有关，但是曲率具体如何影响简化过程没有显式写出来。因此 T. Rabbani 的方法与曲率估计结合起来将得到极大的改进。

1.3 主要结果

本文主要分成三个部分：第一部分介绍了子流形离散点云上的切空间估计。局部 PCA 是一个常用的估计点云的切空间和维数的方法，但是其理论分析并不令人满意。我们利用欧氏空间子流形上指数映射的泰勒展开给出经验协方差矩阵的偏差-方差分解，然后用随机矩阵和扰动理论中的 Davis-Kahan 定理和 Weyl 定理给出投影算子估计的均方误差，并确定有限样本条件下的最优收敛速率。

第二部分是关于子流形点云上的第二基本形估计。我们首先用局部 PCA 得到切空间的估计，然后利用 Weingarten 映射的性质，建立统计中的线性回归模型。该线性回归模型有简单的闭式解，使得我们能够给出快速的算法，我们称这个算法为 WME 算法。根据该统计模型，我们能直接给出问题的总体解和经验解，从而能对偏差和方差给出精确的估计，导出有限样本条件下的最优收敛速率。我们在实验中同时考虑了核方法和 k 邻域方法，并在环面、螺旋线和椭圆面上用实验验证了我们的理论结果。

第三部分是实验部分。首先，我们比较了 WME 算法和传统的二次曲面拟合算法在曲率估计上的精确性和鲁棒性，结果表明我们的算法更有优势。然后，我们将算法应用到点云简化上。不同于传统的均匀简化方法，我们提出基于曲率的曲率自适应简化方法，实验证明在相同的规模下，用曲率自适应简化方法得到的点云经过曲面重构后能保留更多的几何细节。最后，我们将算法应用到脑科学中的年龄预测问题上。我们加入大脑皮层曲面的曲率和第二基本形的算子谱作为回归模型的特征，再用岭回归对人的年龄作预测。实验证明加入几何量作为特征的模型在预测的精确度上有显著提升。

第 2 章 预备知识

2.1 黎曼几何基础

本节主要介绍所需要用到的黎曼几何中的一些基本概念和基本定理。首先引入拓扑流形和光滑流形的概念，然后介绍光滑流形上的光滑函数、切向量和切空间，接着引入黎曼流形，介绍黎曼度量、黎曼联络、测地线、指数映射和曲率张量，最后概述子流形的定义和相关性质。

定义 2.1. 一个 m 维拓扑流形 \mathcal{M} 是一个拓扑空间，满足

- \mathcal{M} 是豪斯多夫的，亦即，任给 \mathcal{M} 上两不同点 p_1, p_2 ，存在 p_1 的邻域 V_1 和 p_2 的邻域 V_2 使得 $V_1 \cap V_2 = \emptyset$ ；
- 任给 \mathcal{M} 上一点 p ，存在开邻域 V 同胚于欧氏空间 \mathbb{R}^m 的某个开集 U ；
- \mathcal{M} 是第二可数的，亦即， \mathcal{M} 有可数的拓扑基。

定义 2.2. 一个 m 维光滑流形 \mathcal{M} 是一个 m 维拓扑流形和一族参数化 $\phi_\alpha : U_\alpha \rightarrow \mathcal{M}$ ，其中 $U_\alpha \subseteq \mathbb{R}^m$ 是欧氏空间中的开集，满足

- 坐标邻域覆盖 \mathcal{M} ，即， $\cup_\alpha \phi_\alpha(U_\alpha) = \mathcal{M}$ ；
- 对任意的一对指标 α, β ，若

$$W := \phi_\alpha(U_\alpha) \cap \phi_\beta(U_\beta) \neq \emptyset$$

那么转移函数

$$\phi_\beta^{-1} \circ \phi_\alpha : \phi_\alpha^{-1}(W) \rightarrow \phi_\beta^{-1}(W)$$

$$\phi_\alpha^{-1} \circ \phi_\beta : \phi_\beta^{-1}(W) \rightarrow \phi_\alpha^{-1}(W)$$

是光滑的；

- 参数化族 $\mathcal{A} = \{(U_\alpha, \phi_\alpha)\}$ 在包含的意义下是极大的：若参数化 $\phi_0 : U_0 \rightarrow \mathcal{M}$ 满足对任意的 $\phi \in \mathcal{A}$ 都有 $\phi_0^{-1} \circ \phi$ 和 $\phi^{-1} \circ \phi_0$ 光滑，那么 (U_0, ϕ_0) 在 \mathcal{A} 中。

在光滑流形上我们可以讨论光滑映射的概念。

定义 2.3. 令 \mathcal{M} 和 \mathcal{N} 表示两个光滑流形, $F: \mathcal{M} \rightarrow \mathcal{N}$ 是一个映射。如果存在 $p \in \mathcal{M}$ 的一个坐标邻域 (U, ϕ) 和 $F(p)$ 的一个坐标邻域 (V, ψ) 满足 $\hat{F}: \psi^{-1} \circ F \circ \phi: U \rightarrow V$ 在 $\phi^{-1}(p)$ 处光滑, 则称 F 在点 p 处光滑。如果函数 F 在开子集 $W \subseteq \mathcal{M}$ 中的每一点都光滑, 则称 F 在 W 上光滑。

特别地, 若 \mathcal{N} 就是 \mathbb{R} , 则光滑映射 $f: \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R}$ 称为 \mathcal{M} 上的光滑函数。若 \mathcal{M} 是开区间 $(-\epsilon, \epsilon)$, 则光滑映射 $\gamma: (-\epsilon, \epsilon) \rightarrow \mathcal{N}$ 称为 \mathcal{N} 上的光滑曲线。

定义 2.4. 设 $\gamma: (-\epsilon, \epsilon) \rightarrow \mathcal{M}$ 是 \mathcal{M} 上的一条光滑曲线, 考虑所有在 $\gamma(0) = p$ 点处的光滑函数 f 构成的集合 $C^\infty(p)$, p 处的切向量 $\gamma'(0)$ 是 $C^\infty(p)$ 上的一个算子, 它在 f 上的作用定义为

$$\gamma'(0)(f) = \frac{d(f \circ \gamma)}{dt}(0)$$

点 p 处所有切向量的集合被称为 p 处的切空间, 记为 $T_p\mathcal{M}$ 。一个光滑切向量场 X 在流形 \mathcal{M} 上的每一点 p 都指定了一个切向量 X_p , 并且满足对任意的光滑函数 f , $(Xf)(p) = X_p(f)$ 也是流形 \mathcal{M} 上的光滑函数, 所有光滑切向量场的集合记为 $\mathfrak{X}(\mathcal{M})$ 。

定理 2.1. 令 \mathcal{M} 是一个 m 维光滑流形, 则 $T_p\mathcal{M}$ 是一个 m 维线性空间。

定义 2.5. 令 \mathcal{M} 是一个 m 维光滑流形, 一个黎曼度量 g 是一个映射 $g: \mathfrak{X}(\mathcal{M}) \times \mathfrak{X}(\mathcal{M}) \rightarrow \mathbb{R}$, 使得对任意的切向量场 X 和 Y , $g(X, Y)$ 是 \mathcal{M} 上的光滑函数, 并且 g 还满足

- (对称性) $g(X, Y) = g(Y, X)$;
- (正定性) $g(X, X) \geq 0$, 等号成立当且仅当 $X = 0$;
- (光滑线性) $g(fX, Y) = fg(X, Y)$, 其中 f 是任意的光滑函数。

带有黎曼度量 g 的光滑流形 \mathcal{M} 称为黎曼流形。

定义 2.6. 令 \mathcal{M} 是一个 m 维光滑流形, 一个仿射联络 ∇ 是一个映射 $\nabla: \mathfrak{X}(\mathcal{M}) \times \mathfrak{X}(\mathcal{M}) \rightarrow \mathfrak{X}(\mathcal{M})$ 满足

- $\nabla_{fX+gY}Z = f\nabla_XZ + g\nabla_YZ$
- $\nabla_X(Y+Z) = \nabla_XY + \nabla_XZ$

$$\bullet \nabla_X(fY) = (Xf)Y + f\nabla_X Y$$

其中 X, Y, Z 是任意的光滑向量场, f, g 是 \mathcal{M} 上任意的光滑函数。一个仿射联络是无挠的, 如果

$$\nabla_X Y - \nabla_Y X = [X, Y]$$

一个仿射联络称为与度量 g 相容, 如果

$$Xg(Y, Z) = g(\nabla_X Y, Z) + g(Y, \nabla_X Z)$$

定理 2.2. 令 (\mathcal{M}, g) 表示一个 m 维黎曼流形, 则 \mathcal{M} 上存在唯一一个无挠的, 与度量 g 相容的仿射联络。

这个唯一的联络被称为 Levi-Civita 联络或者黎曼联络。

定义 2.7. 令 $\gamma: [0, 1] \rightarrow \mathcal{M}$ 表示 \mathcal{M} 上的一条光滑曲线, 若 $\nabla_{\dot{\gamma}} \dot{\gamma}(t) = 0$, 则称 γ 为测地线。

定义 2.8. 固定 \mathcal{M} 上一点 p , 对任意的 $v \in T_p \mathcal{M}$, 若满足 $\gamma(0) = p, \dot{\gamma}(0) = v$ 的测地线 γ 在 $t = 1$ 处有定义, 则定义 $\exp_p(v) = \gamma(1)$ 。映射 \exp_p 称为指数映射。

定理 2.3. 存在 $T_p \mathcal{M}$ 的一个开集 U 使得 \exp_p 在 U 上是合理定义的, 并且 \exp_p 在 U 上是微分同胚。

我们将在2.2节详细讨论指数映射的性质。

定义 2.9. 令 (\mathcal{M}, g) 表示一个 m 维黎曼流形, ∇ 表示黎曼联络。对任意的光滑切向量场 X, Y , 我们定义一个映射 $R(X, Y): \mathfrak{X}(\mathcal{M}) \rightarrow \mathfrak{X}(\mathcal{M})$ 为

$$R(X, Y)Z = \nabla_X \nabla_Y Z - \nabla_Y \nabla_X Z - \nabla_{[X, Y]} Z$$

或等价地, 我们定义 $R: \mathfrak{X}(\mathcal{M}) \times \mathfrak{X}(\mathcal{M}) \times \mathfrak{X}(\mathcal{M}) \times \mathfrak{X}(\mathcal{M}) \rightarrow \mathbb{R}$ 为

$$R(X, Y, Z, W) = g(R(X, Y)Z, W)$$

R 称为黎曼曲率张量。

用黎曼曲率张量我们可以定义截面曲率。

定义 2.10. 令 Π 表示 $T_p\mathcal{M}$ 中的一个二维子空间, 令 X_p, Y_p 表示 Π 中的两个线性无关的向量, 那么 Π 处的截面曲率定义为

$$K(\Pi) = -\frac{R(X_p, Y_p, X_p, Y_p)}{\|X_p\|^2\|Y_p\|^2 - g(X_p, Y_p)^2}$$

最后我们介绍子流形的概念。

定义 2.11. 令 $F: \mathcal{M} \rightarrow \mathcal{N}$ 是光滑流形之间的光滑映射, 在每一点 $p \in \mathcal{M}$, F 诱导了线性映射 $DF_p: T_p\mathcal{M} \rightarrow T_{F(p)}\mathcal{N}$, 称为 F 的切映射。若 DF 在每一点都是单射, 则称 F 是浸入; 若 F 还是 \mathcal{M} 和 $F(\mathcal{M}) \subseteq \mathcal{N}$ 的同胚映射, 则称 F 是嵌入。

定义 2.12. 若 $\mathcal{M} \subseteq \mathcal{N}$ 是两个光滑流形, 而且包含映射 $i: \mathcal{M} \hookrightarrow \mathcal{N}$ 是嵌入, 则称 \mathcal{M} 是 \mathcal{N} 的嵌入子流形。

命题 2.1. 令 \mathcal{M} 是黎曼流形 (\mathcal{N}, g) 的一个嵌入子流形, 则包含映射 i 诱导了 \mathcal{M} 上的一个黎曼度量 i^*g , 此时在任意一点 $p \in \mathcal{M}$, 切空间 $T_p\mathcal{M} \subseteq T_p\mathcal{N}$ 有正交补空间 $T_p^\perp\mathcal{M}$, 称为 p 处的法空间, 我们有如下正交分解

$$T_p\mathcal{M} \oplus T_p^\perp\mathcal{M} = T_p\mathcal{N}$$

2.2 第二基本形

令 \mathcal{M} 是黎曼流形 \mathcal{N} 的子流形。 \mathcal{N} 上的黎曼联络记为 $\bar{\nabla}$, \mathcal{M} 上的黎曼联络记为 ∇ 。令 $\mathfrak{X}(\mathcal{M})$ 表示 \mathcal{M} 上所有切向量场的集合。对任意的切向量场 $X, Y \in \mathfrak{X}(\mathcal{M})$, 我们有高斯公式

$$\bar{\nabla}_X Y = \nabla_X Y + \Pi(X, Y) \tag{2.1}$$

其中

$$\nabla_X Y = (\bar{\nabla}_X Y)^\top, \Pi(X, Y) = (\bar{\nabla}_X Y)^\perp \tag{2.2}$$

定义映射

$$\Pi: \mathfrak{X}(\mathcal{M}) \times \mathfrak{X}(\mathcal{M}) \rightarrow \Gamma(T^\perp\mathcal{M}) \tag{2.3}$$

那么 Π 有如下性质:

$$\begin{cases} \Pi(X + Y, Z) = \Pi(X, Z) + \Pi(Y, Z) \\ \Pi(\lambda X, Y) = \lambda \Pi(X, Y), \lambda \in C^\infty(\mathcal{M}) \\ \Pi(X, Y) = \Pi(Y, X) \end{cases} \quad (2.4)$$

因此, Π 唯一对应了 \mathcal{M} 上的一个二阶对称协变张量场, 我们仍旧记为 Π 。

定义 2.13. 张量场 Π 称为子流形 \mathcal{M} 上的第二基本形。特别地, 在任意一点 $p \in \mathcal{M}$, 第二基本形定义了一个对称双线性映射

$$\Pi : T_p\mathcal{M} \times T_p\mathcal{M} \rightarrow T_p^\perp\mathcal{M} \quad (2.5)$$

设 $\tilde{\xi} \in \Gamma(T^\perp\mathcal{M})$ 是一个法向量场。我们有 *Weingarten* 公式

$$\bar{\nabla}_X \tilde{\xi} = -A_{\tilde{\xi}}(X) + \nabla_X^\perp \tilde{\xi} \quad (2.6)$$

其中

$$A_{\tilde{\xi}}(X) = \left(\bar{\nabla}_X^\perp \tilde{\xi} \right)^\top, \nabla_X^\perp \tilde{\xi} = \left(\bar{\nabla}_X \tilde{\xi} \right)^\perp \quad (2.7)$$

定理 2.4. 对每个 $\tilde{\xi} \in \Gamma(T^\perp\mathcal{M})$, 按下式定义的映射

$$A_{\tilde{\xi}} : \mathfrak{X}(\mathcal{M}) \rightarrow \mathfrak{X}(\mathcal{M}) \quad (2.8)$$

是一个光滑的 (1,1) 型张量场。在每一点 $p \in \mathcal{M}$, 假设 $\tilde{\xi}_p = \xi$, 它定义了一个自伴算子

$$A_\xi : T_p\mathcal{M} \rightarrow T_p\mathcal{M} \quad (2.9)$$

并且满足恒等式

$$\langle A_\xi(v), w \rangle = \langle h(v, w), \xi \rangle, v, w \in T_p\mathcal{M} \quad (2.10)$$

因此, 在每一点 $p \in \mathcal{M}$, 存在一个双线性映射 $A : T_p^\perp\mathcal{M} \times T_p\mathcal{M} \rightarrow T_p\mathcal{M}$ 满足

$$(\xi, v) \mapsto A(\xi, v) = A_\xi(v) \quad (2.11)$$

定义 2.14. 在 $p \in \mathcal{M}, \xi \in T_p^\perp \mathcal{M}$, 线性映射 $A_\xi : T_p \mathcal{M} \rightarrow T_p \mathcal{M}$ 称为 p 处沿 ξ 的形状算子或者 Weingarten 映射。

令 e_1, \dots, e_m 是切空间的一组基, ξ_1, \dots, ξ_{d-m} 是法空间的一组基。假设

$$A_{\xi_\alpha} e_i = \sum_{j=1}^m A_{\alpha i}^j e_j \quad (2.12)$$

那么

$$\mathbb{I}(e_i, e_j) = \sum_{\alpha=1}^{d-m} A_{\alpha i}^j \xi_\alpha \quad (2.13)$$

定义 2.15. 令

$$H = \frac{1}{m} \text{Tr}(\mathbb{I}) = \frac{1}{m} \sum_i \mathbb{I}(e_i, e_i) = \frac{1}{m} \sum_{i,\alpha} \mathbb{I}_{ii}^\alpha e_\alpha \quad (2.14)$$

那么 H 与正交向量场的选取无关, 称之为平均曲率向量场。

根据定义, 我们有

$$H = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \mathbb{I}(e_i, e_i) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \sum_{\alpha=1}^{d-m} A_{\alpha i}^i \xi_\alpha = \sum_{\alpha=1}^{d-m} \left(\frac{1}{m} \text{Tr}(A_{\xi_\alpha}) \xi_\alpha \right) = \sum_{\alpha=1}^{d-m} H^\alpha \xi_\alpha \quad (2.15)$$

其中 $H^\xi = \tilde{g}(H, \xi)$ 是沿 ξ 的平均曲率, H 的模长

$$\|H\| = \left(\sum_{\alpha} \|H^\alpha\|^2 \right)^{1/2} = \frac{1}{m} \left(\sum_{\alpha=1}^{d-m} \text{Tr}(A_{\xi_\alpha})^2 \right)^{1/2} \quad (2.16)$$

称为平均曲率。如果 \mathbb{I} 是一个超曲面, $\|H\| = \frac{1}{m} |\text{Tr}(A_{\xi_\alpha})|$ 。对于三维欧氏空间中的曲面, 它与绝对平均曲率一致。

令 R 和 \bar{R} 分别是 \mathcal{M} 和 \mathcal{N} 上的黎曼曲率张量。从式(2.1)和式(2.6)我们可以导出高斯方程

$$\bar{R}(X, Y, Z, W) = R(X, Y, Z, W) + \langle \mathbb{I}(X, Z), \mathbb{I}(Y, W) \rangle - \langle \mathbb{I}(Y, Z), \mathbb{I}(X, W) \rangle \quad (2.17)$$

特别地截面曲率可以表达为

$$\bar{K}(X, Y) = K(X, Y) - \langle \mathbb{I}(X, X), \mathbb{I}(Y, Y) \rangle + \|\mathbb{I}(X, Y)\|^2 \quad (2.18)$$

如果全空间是欧氏空间，那么 \bar{R} 恒为零。假设 e_i, e_j 生成一个二维向量空间 π_{ij} ，那么 π_{ij} 处的截面曲率是

$$K(\pi_{ij}) = -\|\mathbf{\Pi}(e_i, e_j)\|^2 + \langle \mathbf{\Pi}(e_i, e_i), \mathbf{\Pi}(e_j, e_j) \rangle = \sum_{\alpha=1}^{d-m} (-(A_{\alpha i}^j)^2 + A_{\alpha i}^i A_{\alpha j}^j) \quad (2.19)$$

从 A_{ξ_α} 我们可以抽取 2×2 子矩阵 $A_{\xi_\alpha}|_{\pi_{ij}}$ ，那么

$$K(\pi_{ij}) = \sum_{\alpha=1}^{d-m} \det(A_{\xi_\alpha}|_{\pi_{ij}}) \quad (2.20)$$

例 2.1 (超曲面). 如果 \mathcal{M} 是 \mathbb{R}^d 中的超曲面， $\tilde{\xi}$ 是一个 \mathcal{M} 上的单位法向量场。高斯映射 $g: \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{S}^{d-1}$ 将超曲面上的任意一点映射到 $d-1$ 维单位球面，定义为 $g(p) = \tilde{\xi}_p$ 。对任意的切向量 $X \in T_p\mathcal{M}$ ，我们有

$$A_{\tilde{\xi}_p}(X) = -dg(X) \quad (2.21)$$

换句话说， $-A_{\tilde{\xi}_p}$ 就是高斯映射的切映射。

超曲面 \mathcal{M} 的截面曲率是 $K(\pi_{ij}) = \det(A_{\xi}|_{\pi_{ij}})$ 。如果在基底 e_1, \dots, e_{d-1} 下 Weingarten 映射被对角化为 $\lambda_1, \dots, \lambda_{d-1}$ ，那么 $K(\pi_{ij}) = \lambda_i \lambda_j$ 。这些特征值称为主曲率，而特征向量称为主方向， A_ξ 的行列式称为 *Gauss-Kronecker* 曲率。

第 3 章 切空间估计

3.1 局部主成分分析

假设点云数据集 x_1, \dots, x_N 来自高维欧氏空间 \mathbb{R}^d 中的 m 维子流形 \mathcal{M} , 其中 $m \ll d$, 我们的目标是用点云本身所携带的信息来估计每一点 x_i 处的切空间 $T_{x_i}\mathcal{M}$ 。一个常用的方法是在每一点处做局部主成分分析 (PCA)。我们固定一个带宽 $h_{\text{PCA}} > 0$ 并定义 $I_{i, h_{\text{PCA}}}$ 与 x_i 的距离小于等于带宽 h_{PCA} 的点构成的集合, 亦即

$$I_{i, h_{\text{PCA}}} = \{x_j : 0 < \|x_j - x_i\| \leq h_{\text{PCA}}\} \quad (3.1)$$

记 x_i 的邻居为 $x_{i_1}, \dots, x_{i_{N_i}}$, 其中 $N_i = |I_{i, h_{\text{PCA}}}|$ 。定义如下矩阵

$$X_i = [x_{i_1} - x_i, \dots, x_{i_{N_i}} - x_i] \quad (3.2)$$

注意到在矩阵 X_i 中, 我们将原始点云数据平移了 x_i , 按照标准的 PCA 应当平移均值 $\bar{x}_i = \frac{1}{N_i} \sum_{j=1}^{N_i} x_j$, 在实际应用中这二者的差异不大, 但是平移 x_i 将对收敛性的证明带来极大的便利。

点 x_i 处的局部协方差就是 $X_i X_i^t$, 其中 t 表示矩阵转置。为了突出距离对协方差的影响, 我们加入核函数 $K_{h_{\text{PCA}}}$: 令 $K_{h_{\text{PCA}}}$ 是支撑在 $[0, 1]$ 上的一个单调递减的二阶光滑的函数, 定义一个 $N_i \times N_i$ 矩阵 D_i 为

$$D_i(j, j) = \sqrt{K_{h_{\text{PCA}}}\left(\frac{\|x_i - x_{i_j}\|}{h_{\text{PCA}}}\right)} \quad (3.3)$$

用 D_i 对 X_i 加权得到 $B_i = X_i D_i$, 这样得到的加权之后的局部协方差矩阵为

$$\text{Cov}_i = B_i B_i^t = \sum_{j=1}^{N_i} K_{h_{\text{PCA}}}\left(\frac{\|x_i - x_{i_j}\|}{h_{\text{PCA}}}\right) (x_i - x_{i_j})(x_i - x_{i_j})^t \quad (3.4)$$

由于核函数 $K_{h_{\text{PCA}}}$ 支撑在 $[0, 1]$ 上, 因此我们可以直接将 Cov_i 写为

$$\text{Cov}_i = \sum_{j=1}^N K_{h_{\text{PCA}}}\left(\frac{\|x_i - x_j\|}{h_{\text{PCA}}}\right) (x_i - x_j)(x_i - x_j)^t \quad (3.5)$$

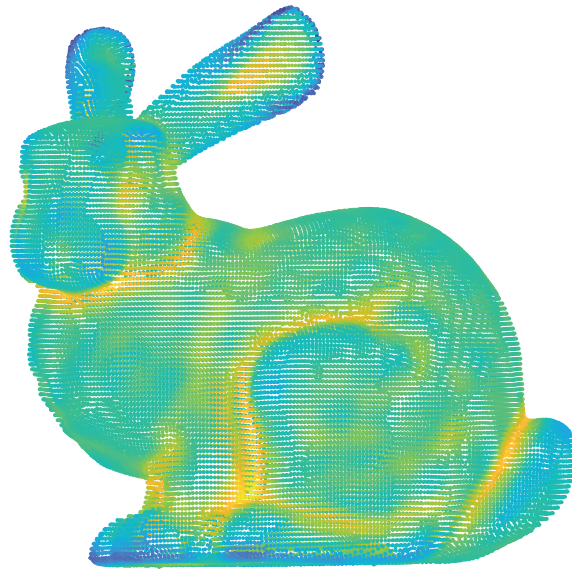


图 3.1 斯坦福兔子，颜色对应平均曲率

我们可以对 Cov_i 做特征值分解或者直接对 B_i 做奇异值分解。不妨设 Cov_i 的特征值分解为

$$\text{Cov}_i = U_i \Sigma_i U_i^t \quad (3.6)$$

其中 U_i 是一个 $d \times d$ 正交矩阵。我们认为 U_i 的前 m 列向量，亦即对应前 m 个最大特征值的特征向量，逼近了 x_i 处的切空间的一组基。具体而言，我们记

$$U_i = [u_{i_1}, \dots, u_{i_d}], E_i = [u_{i_1}, \dots, u_{i_m}] \quad (3.7)$$

并且令 $\pi_{T_{x_i} \mathcal{M}}$ 表示到切空间 $T_{x_i} \mathcal{M}$ 的正交投影。则所构造的投影算子的估计就是

$$\pi_{\widehat{T_{x_i} \mathcal{M}}} = E_i E_i^T \quad (3.8)$$

注 1. 在流形维数 m 也未知的情况下，局部 PCA 也可以用来估计流形的维数。事实上，如果流形 \mathcal{M} 在 x_i 处平坦，那么局部协方差矩阵的后 $d - m$ 个特征值均为 0，此时我们可以用非零特征值的数目来估计流形的维数。若 \mathcal{M} 在 x_i 处曲率不消失，当我

们选取的带宽足够小时, x_i 的局部仍旧可以近似为一个 m 维平面, 此时局部协方差矩阵的后 $d - m$ 个特征值会远远小于前 m 个特征值。具体的做法是, 设定一个阈值 $0 < \gamma < 1$, 选取最小的 d_i 使得

$$\frac{\sum_{j=1}^{d_i} \lambda_j}{\sum_{j=1}^d \lambda_j} > \gamma \quad (3.9)$$

d_i 就是对流形维数的估计。

3.2 指数映射

对于嵌入在欧氏空间的子流形, 指数映射有特殊的表达形式。固定一点 $p \in \mathcal{M}$ 。不失一般性, 我们施加一个 \mathbb{R}^d 中的等距变换使得 p 落在原点, 并且 \mathbb{R}^d 的前 m 个标准基向量 $\{e_1, \dots, e_m\}$ 生成了 p 处的切空间 $T_p\mathcal{M}$ 。考虑指数映射的各个坐标分量:

$$\mathbf{r}(u^1, \dots, u^m) = (r^1(u^1, \dots, u^m), \dots, r^d(u^1, \dots, u^m)) \quad (3.10)$$

下面这个命题说明, 我们可以用定义在 \mathcal{M} 上的几何量来表达坐标分量函数的导数。

命题 3.1. 令 $\mathbf{u} = (u^1, \dots, u^m, 0, \dots, 0) \in T_p\mathcal{M} \subseteq \mathbb{R}^d$ 。 \mathcal{M} 上的指数映射可以表达为

$$\mathbf{r}(\mathbf{u}) = p + \mathbf{u} + \frac{1}{2}\Pi(\mathbf{u}, \mathbf{u}) - \frac{1}{6}A_{\Pi(\mathbf{u}, \mathbf{u})}(\mathbf{u}) + \frac{1}{6}(\nabla_{\mathbf{u}}\Pi)(\mathbf{u}, \mathbf{u}) + O(\|\mathbf{u}\|^4) \quad (3.11)$$

进一步, 坐标分量的导数可以表达为

$$\begin{aligned} \frac{\partial r^j}{\partial u^i}(0) &= \delta_i^j, & \frac{\partial r^\alpha}{\partial u^i}(0) &= 0 \\ \frac{\partial^2 r^k}{\partial u^i \partial u^j}(0) &= 0, & \frac{\partial^2 r^\alpha}{\partial u^i \partial u^j}(0) &= \langle A_{e_\alpha} e_i, e_j \rangle \\ \frac{\partial^3 r^l}{\partial u^i \partial u^j \partial u^k}(0) &= -\langle A_{\Pi(e_i, e_j)}(e_k), e_l \rangle, & \frac{\partial^3 r^\alpha}{\partial u^i \partial u^j \partial u^k}(0) &= \langle (\nabla_{e_i} h)(e_j, e_k), e_l \rangle \end{aligned} \quad (3.12)$$

其中 $i, j, k, l = 1, \dots, m; \alpha = m + 1, \dots, d$ 。

证明. 首先, 因为 \mathbf{r} 的切映射在原点处是恒同映射, 则有

$$d\mathbf{r}_0(e_i) = (\partial_i r^1(0), \dots, \partial_i r^d(0)) = e_i \quad (3.13)$$

我们得到 $\partial_i r^j(0) = \delta_i^j$, 对 $i, j = 1, \dots, m$, 以及 $\partial_i r^\alpha(0) = 0$ 对 $\alpha = m + 1, \dots, d$ 。

对于二阶导数, 令 $\mathbf{u} = \sum_{i=1}^m u^i e_i$ 和 $\gamma(s) = \mathbf{r}(s\mathbf{u})$, 则有

$$\ddot{\gamma}(0) = \left(\sum_{i,j} \partial_i \partial_j r^1(0) u^i u^j, \dots, \sum_{i,j} \partial_i \partial_j r^n(0) u^i u^j \right) = \Pi(\mathbf{u}, \mathbf{u}) \quad (3.14)$$

因此, 对任意的 $i, j, k = 1, \dots, m$, $\partial_i \partial_j r^k(0) = 0$ 。令 $\Pi_\alpha(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \langle \Pi(\mathbf{u}, \mathbf{v}), e_\alpha \rangle = \langle A_{e_\alpha}(\mathbf{u}), \mathbf{v} \rangle$ 。我们发现 $[\partial_i \partial_j r^\alpha(0) = \langle A_{e_\alpha} e_i, e_j \rangle]_{i,j}$ 就是 Weingarten 映射的 A_{e_α} , $\alpha = m+1, \dots, d$ 的矩阵表示。

由公式(2.6), 则有

$$\ddot{\gamma} = -A_{\Pi(\dot{\gamma}, \dot{\gamma})}(\dot{\gamma}) + \nabla_{\dot{\gamma}}^\perp \Pi(\dot{\gamma}, \dot{\gamma}) \quad (3.15)$$

如果定义 $\nabla \Pi(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}) = \nabla_{\mathbf{w}}^\perp \Pi(\mathbf{u}, \mathbf{v}) - \Pi(\nabla_{\mathbf{w}} \mathbf{u}, \mathbf{v}) - \Pi(\mathbf{u}, \nabla_{\mathbf{w}} \mathbf{v})$, 那么有

$$\ddot{\gamma}(0) = -A_{\Pi(\mathbf{u}, \mathbf{u})}(\mathbf{u}) + (\nabla \Pi)(\mathbf{u}, \mathbf{u}, \mathbf{u}) \quad (3.16)$$

比较两边的分量我们得到

$$\begin{aligned} \partial_i \partial_j \partial_k r^l(0) &= -\langle A_{\Pi(e_i, e_j)}(e_k), e_l \rangle \\ \partial_i \partial_j \partial_k r^\alpha(0) &= \langle (\nabla_{e_i} \Pi)(e_j, e_k), e_l \rangle \end{aligned} \quad (3.17)$$

其中 $i, j, k, l = 1, \dots, m$ 以及 $\alpha = m+1, \dots, n$ 。 \square

令 $q = \mathbf{r}(s\mathbf{u})$, 其中 $\|\mathbf{u}\| = 1$ 。我们可以比较欧氏距离 $\|q - p\|$ 与黎曼距离 $s = d_{\mathcal{M}}(p, q)$ 。事实上, 从指数映射的泰勒展开可以发现

$$\|q - p\|^2 = s^2 + \frac{1}{4} \|\Pi(\mathbf{u}, \mathbf{u})\|^2 s^4 - \frac{1}{3} \langle A_{\Pi(\mathbf{u}, \mathbf{u})}(\mathbf{u}), \mathbf{u} \rangle s^4 + o(s^4) \quad (3.18)$$

因此有

$$\|q - p\| = s - \frac{1}{24} \|\Pi(\mathbf{u}, \mathbf{u})\|^2 s^3 + o(s^3) \quad (3.19)$$

3.3 协方差矩阵的偏差-方差分解

固定一点 $x \in \mathcal{M}$, 不失一般性我们假设 p 被放置在原点, 并且切空间 $T_p \mathcal{M}$ 与欧氏空间 \mathbb{R}^d 的前 m 维坐标平面重合。假设 P 是取值在流形 \mathcal{M} 的随机向量, 有光

滑的正密度函数 $f: \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R}$ 。令 $K: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ 是一个支撑在 $[0, 1]$ 的光滑函数，带宽 $h_{\text{PCA}} > 0$ 。为了估计 x 处的切空间，我们从寻找第一个主方向 v 开始，为此我们极大化如下误差

$$\mathbb{E}_f[\|(P - p) \cdot v\|^2 K_{h_{\text{PCA}}}(P - p)] \quad (3.20)$$

其中 \mathbb{E}_f 表示相对于 f 取期望，并且

$$\begin{aligned} K_{h_{\text{PCA}}} &: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R} \\ K_{h_{\text{PCA}}}(u) &= \frac{1}{h_{\text{PCA}}^m} K\left(\frac{\|u\|}{h_{\text{PCA}}}\right) \end{aligned} \quad (3.21)$$

考虑如下拉格朗日函数

$$f(v) = \mathbb{E}_f[\|(P - p) \cdot v\|^2 K_{h_{\text{PCA}}}(P - p)] - \lambda(\|v\|^2 - 1) \quad (3.22)$$

令 $df/dv = 0$ ，得到

$$\mathbb{E}_f[(P - p)(P - p)^t K_{h_{\text{PCA}}}(P - p)]v = \lambda v \quad (3.23)$$

令

$$\mathbb{H} = \mathbb{E}_f[(P - p)(P - p)^t K_{h_{\text{PCA}}}(P - p)] \quad (3.24)$$

因此第一个主方向就是 \mathbb{H} 的最大特征值对应的特征向量。

接下来我们找第二个主方向 v' ，它同样要极大化误差(3.20)，但要与第一个主方向 v 正交，相似的论证可以发现 v' 就是 \mathbb{H} 的第二个最大特征值对应的特征向量。如此下去，我们要找的切空间的基就是 \mathbb{H} 的前 m 个最大特征值对应的特征向量。我们称 \mathbb{H} 为总体协方差矩阵。

在实际应用中，总体协方差矩阵 \mathbb{H} 是无法得知的。假设 x_1, \dots, x_N 是来自 P 的独立同分布样本，我们将 \mathbb{H} 用它的均值版本替代

$$\text{Cov} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - p)(x_i - p)^t K_{h_{\text{PCA}}}(x_i - p) \quad (3.25)$$

称 Cov 为经验协方差矩阵。要讨论的是 Cov 的特征子空间与真实的切空间 $T_p\mathcal{M}$ 之间的误差。

对充分小的带宽 h_{PCA} ，在 Cov 中起作用的点都在 x 的法邻域内，因此我们可以用指数映射作为参数化，用3.2节中证明的指数映射的泰勒展开。令 $P = \exp_x(s_P\theta_P)$ 其中 $\|\theta_P\| = 1$ 。那么有

$$P - p = s_P\theta_P + \frac{1}{2}\mathbb{I}(\theta_P, \theta_P)s_P^2 - \frac{1}{6}A_{\mathbb{I}(\theta_P, \theta_P)}(\theta_P)s^3 + \frac{1}{6}(\nabla_{\theta_P}\mathbb{I})(\theta_P, \theta_P)s^3 + o(s^3) \quad (3.26)$$

因此对于 \mathbb{H} 有如下分解，

$$\begin{aligned} \mathbb{H} &= \underbrace{\mathbb{E}_f[(\theta_P\theta_P^t s_P^2 - \frac{1}{6}(\theta_P A_{\mathbb{I}}^t + A_{\mathbb{I}}^t \theta_P)s_P^4 + o(s_P^4))K_{h_{\text{PCA}}}(P - p)]}_{\mathbf{H}} \\ &+ \underbrace{\mathbb{E}_f[(\frac{1}{2}(\theta_P\mathbb{I}^t + \mathbb{I}\theta_P^t)s_P^3 + \frac{1}{6}(\theta_P(\nabla\mathbb{I})^t + (\nabla\mathbb{I})\theta^t)s_P^4 + o(s_P^4))K_{h_{\text{PCA}}}(P - p)]}_{\mathbf{B}_r} \\ &+ \underbrace{\mathbb{E}_f[(\frac{1}{4}\mathbb{I}\mathbb{I}\mathbb{I}^t s^4)K_{h_{\text{PCA}}}(P - p)]}_{\mathbf{B}_s} \end{aligned} \quad (3.27)$$

这里为了简化记号，用 \mathbb{I} 代表 $\mathbb{I}(\theta_P, \theta_P)$ ， $\nabla\mathbb{I}$ 代表 $\nabla_{\theta_P}\mathbb{I}(\theta_P, \theta_P)$ 。注意到 \mathbf{H} ， \mathbf{B}_r 和 \mathbf{B}_s 有如下形式

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} * & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \mathbf{B}_r = \begin{bmatrix} 0 & * \\ * & 0 \end{bmatrix}, \mathbf{B}_s = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & * \end{bmatrix} \quad (3.28)$$

我们称 \mathbf{H} 为真实的协方差矩阵，因为 \mathbf{H} 的非零特征值的特征向量给出了切空间的真正的基。我们称 \mathbf{B}_r 和 \mathbf{B}_s 为偏差矩阵，它来自于流形本身的弯曲。事实上，如果流形平坦，即第二基本形消失，则这两个矩阵恒为 0。

首先我们对组成 \mathbb{H} 的各个分块矩阵进行估计：

引理 3.1. 存在 $\tau > 0$ 使得当 $h_{\text{PCA}} < \tau$ 时，对 \mathbf{H} ， \mathbf{B}_r 和 \mathbf{B}_s 有如下估计

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} ch_{\text{PCA}}^2 I + O(h_{\text{PCA}}^4) & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \mathbf{B}_r = \begin{bmatrix} 0 & O(h_{\text{PCA}}^4) \\ O(h_{\text{PCA}}^4) & 0 \end{bmatrix}, \mathbf{B}_s = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & O(h_{\text{PCA}}^4) \end{bmatrix}$$

证明. 我们仅对 \mathbf{H} 进行证明，对于 \mathbf{B}_r 和 \mathbf{B}_s ，估计方法是相同的。

令 $e_i, i = 1, \dots, d$ 表示欧氏空间 \mathbb{R}^d 中的标准基，选取 $\tau > 0$ 使得对任意的

$h_{\text{PCA}} < \tau$, 指数映射都在半径为 h_{PCA} 的测地球内有定义。矩阵 \mathbb{H} 中任意一个元素 $\mathbb{H}(i, j)$ 都有如下形式

$$\mathbb{H}(i, j) = \int_{B(h_{\text{PCA}})(p)} K_{h_{\text{PCA}}}(y-p) \langle y-p, e_i \rangle \langle y-p, e_j \rangle f(y) dV(y) \quad (3.29)$$

当 $i > m$ 或者 $j > m$ 时, 由于 \mathbf{H} 的表达式中没有法分量, 所以恒为 0。当 $i, j \leq m$ 时, 令 $y = \exp(\theta)$, 我们有

$$\begin{aligned} \mathbb{H}(i, j) &= \frac{1}{h_{\text{PCA}}^m} \int_{\|\theta\| \leq h_{\text{PCA}}} K((\|\theta\| + O(\|\theta\|^3))/h_{\text{PCA}}) \times f(\theta + O(\|\theta\|^2)) \\ &\quad \times (\theta_i + O(\|\theta\|^3))(\theta_j + O(\|\theta\|^3)) d\theta \\ &= h_{\text{PCA}}^2 \int_{\|u\| \leq 1} (K(u) + O(h_{\text{PCA}}^2)) \times (f(0) + O(h_{\text{PCA}})) \\ &\quad \times (u_i u_j + O(h_{\text{PCA}}^2))(1 + O(h_{\text{PCA}}^m)) du \end{aligned} \quad (3.30)$$

当 $i = j$ 时, 主导项是 h_{PCA}^2 , 系数是

$$\int_{\|u\| \leq 1} K(u) u_1^2 f(0) du \quad (3.31)$$

而余下的项的阶为 $O(h_{\text{PCA}}^4)$ 。 \square

下面我们考虑 Cov 与 \mathbb{H} 之间的方差。由定义, $\mathbb{E}_f[\text{Cov}] = \mathbb{H}$ 。因此有

$$\text{Cov} = \mathbb{H} + V \quad (3.32)$$

其中 $\mathbb{E}_f[V] = 0$ 。对每个 V 中的元素, 其方差是

$$\text{Var}[V(i, j)] = \mathbb{E}_f[(\text{Cov}(i, j) - \mathbb{H}(i, j))^2] \leq \frac{1}{n} \mathbb{E}_f[(P-p)_i^2 (P-p)_j^2 K_{h_{\text{PCA}}}^2(P-p)] \quad (3.33)$$

类似于引理3.1的方法, 直接算出二阶矩为

$$\mathbb{E}_f[(X-x)_i^2 (X-x)_j^2 K_{h_{\text{PCA}}}(X-x)] = \begin{cases} O\left(\frac{h_{\text{PCA}}^4}{h_{\text{PCA}}^m}\right) & i, j = 1, \dots, m \\ O\left(\frac{h_{\text{PCA}}^8}{h_{\text{PCA}}^m}\right) & i, j = m+1, \dots, d \\ O\left(\frac{h_{\text{PCA}}^6}{h_{\text{PCA}}^m}\right) & \text{其它} \end{cases} \quad (3.34)$$

因此方差矩阵是

$$\text{Var}[V(i, j)] = \begin{cases} O\left(\frac{h_{\text{PCA}}^4}{nh_{\text{PCA}}^m}\right) & i, j = 1, \dots, m \\ O\left(\frac{h_{\text{PCA}}^8}{nh_{\text{PCA}}^m}\right) & i, j = m+1, \dots, d \\ O\left(\frac{h_{\text{PCA}}^6}{nh_{\text{PCA}}^m}\right) & \text{其它} \end{cases} \quad (3.35)$$

由切比雪夫不等式，观察到对任意的 $\epsilon > 0$,

$$\mathbb{P}\{|H(i, j) - \mathbb{H}(i, j)| > \epsilon\} \leq \frac{\text{Var}(V(i, j))}{\epsilon^2} \quad (3.36)$$

如果选取 ϵ 使得不等式的右边为 $O(1)$ ，那么以大概率 $V(i, j) = O(\epsilon)$ 。由此得到以大概率 V 有如下形式

$$V = \frac{h_{\text{PCA}}^2}{\sqrt{nh_{\text{PCA}}^m}} \begin{bmatrix} O(1) & O(h_{\text{PCA}}) \\ O(h_{\text{PCA}}) & O(h_{\text{PCA}}^2) \end{bmatrix} \quad (3.37)$$

综上，我们得到协方差矩阵 Cov 的偏差-方差分解如下

定理 3.1. 存在 $\tau > 0$ 使得当 $h_{\text{PCA}} < \tau$ 时，以大概率 Cov 可以分解为

$$\begin{aligned} \frac{1}{h_{\text{PCA}}^2} \text{Cov} &= C_0 \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \\ &+ h_{\text{PCA}}^2 \begin{bmatrix} O(1) & O(1) \\ O(1) & O(1) \end{bmatrix} + \frac{1}{\sqrt{nh_{\text{PCA}}^m}} \begin{bmatrix} O(1) & O(h_{\text{PCA}}) \\ O(h_{\text{PCA}}) & O(h_{\text{PCA}}^2) \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (3.38)$$

其中 C_0 是一个正常数。

3.4 收敛性

由之前的讨论，真实的切空间 $T_p\mathcal{M}$ 就是前 m 个标准向量 e_1, \dots, e_m 生成的 m 维线性空间，其对应的投影算子是

$$\pi_{T_p\mathcal{M}} = EE^t \quad (3.39)$$

其中 $E = [e_1, \dots, e_m]$ 是一个 $d \times m$ 维矩阵。而通过局部 PCA 得到的估计切空间 $\widehat{T_p \mathcal{M}}$ 是 Cov 的前 m 个特征向量 u_1, \dots, u_m 生成的 m 维线性空间，其对应的投影算子是

$$\pi_{\widehat{T_p \mathcal{M}}} = UU^t \quad (3.40)$$

于是估计切空间和真实切空间之间的误差由下式定义

$$\text{MSE}_{\text{PCA}} = \|\pi_{\widehat{T_p \mathcal{M}}} - \pi_{T_p \mathcal{M}}\|_F^2 \quad (3.41)$$

其中 $\|\cdot\|_F$ 是 Frobenius 范数。

首先我们定义两个线性空间之间的夹角。

定义 3.1. 令 $E = [e_1, \dots, e_m]$ 和 $U = [u_1, \dots, u_m]$ 都是由 m 个两两正交的单位向量组成的矩阵。则 E 和 U 之间的夹角 $\Theta_{E,U}$ 定义为

$$\Theta_{E,U} = \arccos(E^t U) \quad (3.42)$$

投影算子之间的误差可以由两个线性空间之间的夹角表示。

命题 3.2. 令 $E = [e_1, \dots, e_m]$ 和 $U = [u_1, \dots, u_m]$ 都是由 m 个两两正交的单位向量组成的矩阵，则我们有

$$\|EE^t - UU^t\|_F = \sqrt{2} \|\sin(\Theta_{E,U})\|_F \quad (3.43)$$

证明. 根据定义我们有

$$\begin{aligned} \|EE^t - UU^t\|_F^2 &= \text{Tr}\left((EE^t - UU^t)(EE^t - UU^t)^t\right) \\ &= \text{Tr}\left((EE^t - UU^t)^2\right) \\ &= \text{Tr}\left(EE^t\right) + \text{Tr}\left(UU^t\right) - 2\text{Tr}\left((E^t U)(E^t U)^t\right) \\ &= 2m - 2\|\cos(\Theta_{E,U})\|^2 \\ &= 2\|\sin(\Theta_{E,U})\|^2 \end{aligned} \quad (3.44)$$

□

Davis-Kahan 定理告诉我们，给一个对称矩阵 S 加上对称误差 ε 所得到的矩阵

\widehat{S} , 其前 m 维特征子空间与 S 的前 m 维特征子空间夹角的误差正比于 $\|\varepsilon\|$, 反比于 $\delta = |\lambda_m(S) - \lambda_{m+1}(\widehat{S})|$, 其中 λ_i 表示矩阵的第 i 个最大特征值。事实上, 我们有

定理 3.2. 令 S 和 ε 为对称矩阵, $\widehat{S} = S + \varepsilon$, 令 Θ 表示 \widehat{S} 和 S 的前 m 维特征子空间之间的夹角, 则

$$\|\sin(\Theta)\|_F \leq \frac{\|\varepsilon\|_F}{\delta} \quad (3.45)$$

对于 Cov 和 \mathbf{H} , 要使用 Davis-Kahan 定理, 我们需要先得到特征值的估计, 而这可以由 Weyl 定理得到。

定理 3.3. 令 S 和 ε 为对称矩阵, $\widehat{S} = S + \varepsilon$, 令 λ_i 表示第 i 个最大的特征值, 则

$$|\lambda_i(\widehat{S}) - \lambda_i(S)| \leq \|\varepsilon\|_{op} \quad (3.46)$$

其中 $\|\cdot\|_{op}$ 表示矩阵的谱范数。

综上, 我们得到局部 PCA 在估计切空间时的收敛速率。

定理 3.4. 当 $h_{\text{PCA}} \rightarrow 0$ 并且 $Nh_{\text{PCA}}^m \rightarrow \infty$ 时, 以大概率成立如下估计

$$\text{MSE}_{\text{PCA}} \leq O(h_{\text{PCA}}^4) + O\left(\frac{1}{Nh_{\text{PCA}}^m}\right) \quad (3.47)$$

如果取 $h_{\text{PCA}} = N^{-\frac{1}{m+4}}$, 则最优的收敛速率是 $N^{\frac{4}{m+4}}$ 。

证明. 由定理 3.1 可知,

$$\frac{1}{h_{\text{PCA}}^2} \text{Cov} = C_0 \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \varepsilon \quad (3.48)$$

其中

$$\varepsilon = h_{\text{PCA}}^2 \begin{bmatrix} O(1) & O(1) \\ O(1) & O(1) \end{bmatrix} + \frac{1}{\sqrt{nh_{\text{PCA}}^m}} \begin{bmatrix} O(1) & O(h_{\text{PCA}}) \\ O(h_{\text{PCA}}) & O(h_{\text{PCA}}^2) \end{bmatrix} \quad (3.49)$$

由 Weyl 定理, 可得

$$\left| \lambda_{m+1}\left(\frac{1}{h_{\text{PCA}}^2} \text{Cov}\right) \right| \leq \|R\|_{op} \leq O(h_{\text{PCA}}^2) + O\left(\frac{1}{\sqrt{Nh_{\text{PCA}}^m}}\right) \quad (3.50)$$

注意到当 $h_{\text{PCA}} \rightarrow 0$ 并且 $Nh_{\text{PCA}}^m \rightarrow \infty$ 时, $\lambda_{m+1}(\text{Cov}/h_{\text{PCA}}^2) \rightarrow 0$, 因此特征值间隙趋于常数 C_0 , 这样由 Davis-Kahan 定理, 可得

$$\begin{aligned}
 \text{MSE}_{\text{PCA}} &= \|\pi_{\widehat{T_p \mathcal{M}}} - \pi_{T_p \mathcal{M}}\|_F^2 \\
 &= 2\|\sin(\Theta_{\widehat{T_p \mathcal{M}}, T_p \mathcal{M}})\|_F^2 \\
 &\leq O(\|\varepsilon\|_F^2) \\
 &\leq O(h_{\text{PCA}}^4) + O\left(\frac{1}{Nh_{\text{PCA}}^m}\right)
 \end{aligned} \tag{3.51}$$

这样就得到了想要的估计。 □

第 4 章 Weingarten 映射估计

4.1 WME 算法

令 $\mathcal{M} \subseteq \mathbb{R}^d$ 是 d 维欧氏空间中的 m 维子流形，并赋予诱导黎曼度量。在每一点 p 处，我们有如下分解

$$T_p\mathcal{M} \oplus T_p^\perp\mathcal{M} = \mathbb{R}^d \quad (4.1)$$

令 $\bar{\nabla}$ 是欧氏空间 \mathbb{R}^d 上的标准联络。对任意的法向量 $\xi \in T_p^\perp\mathcal{M}$ ，将 ξ 延拓为 \mathcal{M} 上的法向量场 $\tilde{\xi}$ 。点 p 处相对于 ξ 的 *Weingarten* 映射定义为

$$\begin{aligned} A_\xi &: T_p\mathcal{M} \rightarrow T_p\mathcal{M} \\ A_\xi(X) &= -(\bar{\nabla}_X \tilde{\xi})^\top \end{aligned} \quad (4.2)$$

其中 $^\top : \mathbb{R}^d \rightarrow T_p\mathcal{M}$ 是到切空间 $T_p\mathcal{M}$ 的正交投影。由预备知识 2.2 可知 A_ξ 的定义与 ξ 的延拓无关。

Weingarten 映射描述了流形上法向量场的变化。事实上，从如下法向量场的“泰勒展开”我们发现 *Weingarten* 映射扮演着函数导数的角色。

命题 4.1. 令 $\tilde{\xi}$ 是子流形 $\mathcal{M} \subseteq \mathbb{R}^d$ 上的法向量场。假设 p 是 \mathcal{M} 上一点， q 是 p 的测地邻域中的一点。记 $^\top$ 是到切空间 $T_p\mathcal{M}$ 的正交投影。我们有

$$(\tilde{\xi}_q - \tilde{\xi}_p)^\top = -A_{\tilde{\xi}_p}((q-p)^\top) + O(\|q-p\|^2) \quad (4.3)$$

证明. 令 $\mathbf{r} : U \subseteq T_p\mathcal{M} \cong \mathbb{R}^m \rightarrow \mathcal{M}$ 是定义在开集 U 上满足 $\mathbf{r}(0) = p$ 的指数映射。记 $\mathbf{u} = (u^1, \dots, u^m) \in U$ 。那么向量场 $\{\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u^i}\}_{i=1}^m$ 构成了一个局部切标架。将 $\tilde{\xi}(\mathbf{r}(\mathbf{u}))$ 简记为 $\tilde{\xi}(\mathbf{u})$ 。考虑如下展开

$$\begin{aligned} \tilde{\xi}(\mathbf{u}) &= \tilde{\xi}(0) + \sum_{i=1}^m u^i \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial u^i}(0) + O(\|\mathbf{u}\|^2) \\ \mathbf{r}(\mathbf{u}) &= \mathbf{r}(0) + \sum_{i=1}^m u^i \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u^i}(0) + O(\|\mathbf{u}\|^2) \end{aligned} \quad (4.4)$$

由 $A_{\tilde{\xi}_p}$ 的定义我们有

$$A_{\tilde{\xi}_p} \left(\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u^i}(0) \right) = - \left(\nabla_{\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u^i}(0)} \tilde{\xi} \right)^\top = - \left(\frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial u^i}(0) \right)^\top \quad (4.5)$$

将其带入(4.4)我们得到

$$\left(\tilde{\xi}(\mathbf{u}) - \tilde{\xi}(0) \right)^\top = \left(\sum_{i=1}^m u^i \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial u^i}(0) + O(\|\mathbf{u}\|^2) \right)^\top = -A_{\tilde{\xi}_p} \left((\mathbf{r}(\mathbf{u}) - \mathbf{r}(0))^\top \right) + O(\|\mathbf{u}\|^2) \quad (4.6)$$

由指数映射的性质, 注意到 $\|\mathbf{u}\|$ 表示了流形上的测地距离, 根据命题3.1 (见附录3.2), 在局部测地距离和欧氏距离有相同的阶。因此(4.3)成立。 \square

假设点集 $\{x_1, \dots, x_N\} \subseteq \mathbb{R}^d$ 独立同分布地取自于流形 \mathcal{M} 上的某个分布。我们的目标是从点集 $\{x_1, \dots, x_N\}$ 中估计每一点 x_i 处的 Weingarten 映射。因此, 我们首先需要估计每个点处的切空间和法空间, 否则在没有说明法方向的情况下, Weingarten 映射的估计将不是一个合理定义的问题^[6]。其次, 在估计完切空间和法空间之后, 从命题4.1可以构建一个简单的线性模型从数据点估计 Weingarten 映射, 对于这个线性模型可以直接用最小二乘法给出闭式解。因此, 我们的 WME 算法包括了如下步骤:

局部 PCA 估计切空间和法空间: 对每个数据点 $x_i, i = 1, 2, \dots, N$ 估计切空间的基底 e_i^1, \dots, e_i^m 和法空间的基底 $\xi_i^1, \dots, \xi_i^{d-m}$ 。固定一个参数 $h_{\text{PCA}} > 0$ 并且定义集合 $I_i = \{j \in \mathbb{N} \mid \|x_j - x_i\| \leq h_{\text{PCA}}\}$ 。局部协方差矩阵定义为

$$\text{Cov} = \sum_{j \in I_i} (x_j - \bar{x}_i)(x_j - \bar{x}_i)^\top \quad (4.7)$$

其中每个数据点视为一个 \mathbb{R}^d 中的列向量并且 $\bar{x}_i = \frac{1}{|I_i|} \sum_{j \in I_i} x_j$ 是近邻点的均值。Cov 对应前 m 个最大特征值的特征向量组成了 x_i 处切空间的基底, 而 Cov 的后 $d-m$ 个最小特征值对应的特征向量组成了 x_i 处的法空间的基底。

法向量的延拓: 选取任意一个法向量 $\xi_i^\alpha, i = 1, 2, \dots, N, \alpha = 1, 2, \dots, d-m$, 估计沿 ξ_i^α 的 Weingarten 映射。将 ξ_i^α 按照如下方式延拓为 \mathcal{M} 上的法向量场 $\tilde{\xi}_i^\alpha$

$$\tilde{\xi}_i^\alpha(x_j) = \sum_{\beta=1}^{d-m} \langle \xi_i^\alpha, \xi_j^\beta \rangle \xi_j^\beta \quad (4.8)$$

其中 $j = 1, 2, \dots, N$ 。亦即，我们简单地讲 ξ_i^α 投影到 x_j 的法空间 $T_{x_j}^\perp \mathcal{M}$ 。因为投影算子光滑地依赖于流形上的点，用这种方式构造出一个光滑的法向量场。

最小二乘求解 Weingarten 映射: 假设 $K: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ 是一个支撑在 $[0, 1]$ 上的二次可微的函数，例如， K 可以是 $[0, 1]$ 上的截断高斯核函数或者 Epanechnikov 核函数。令 $y \in \mathbb{R}^d$ ，给定 $h > 0$ ，定义 $K_h: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$

$$K_h(y) = \frac{1}{h^m} K\left(\frac{\|y\|}{h}\right) \quad (4.9)$$

令 $E_i = [e_i^1, \dots, e_i^m]$ 是包含 x_i 处切空间的基底的 $d \times m$ 矩阵。根据命题4.1，如果 x_j 与 x_i 接近，我们有

$$(\tilde{\xi}_i^\alpha(x_j) - \tilde{\xi}_i^\alpha(x_i))^t E_i = -(x_j - x_i)^t E_i A_{\xi_i^\alpha} + O(\|x_j - x_i\|^2) \quad (4.10)$$

其中此处的 $A_{\xi_i^\alpha}$ 应理解为一个 $m \times m$ 矩阵。因此，我们想要找到一个矩阵 $\tilde{A}_{\xi_i^\alpha}$ ，它极小化如下误差

$$\sum_{j=1}^N \|(\tilde{\xi}_i^\alpha(x_j) - \tilde{\xi}_i^\alpha(x_i))^t E_i - (x_j - x_i)^t E_i \tilde{A}_{\xi_i^\alpha}\|^2 K_h(x_j - x_i) \quad (4.11)$$

令

$$\begin{aligned} \tilde{\Delta}_i &= E_i^t [x_1 - x_i, \dots, x_n - x_i] \\ \tilde{\Xi}_i^\alpha &= E_i^t [\tilde{\xi}_i^\alpha(x_1) - \tilde{\xi}_i^\alpha(x_i), \dots, \tilde{\xi}_i^\alpha(x_n) - \tilde{\xi}_i^\alpha(x_i)] \\ W_i &= \text{diag}\{K_h(x_1 - x_i), \dots, K_h(x_n - x_i)\} \end{aligned} \quad (4.12)$$

问题(4.11)有如下的闭式解

$$\tilde{A}_{\xi_i^\alpha} = -\tilde{\Xi}_i^\alpha W_i \tilde{\Delta}_i^t (\tilde{\Delta}_i W_i \tilde{\Delta}_i^t)^{-1} \quad (4.13)$$

例 4.1 (平面曲线). 一条平面曲线是嵌入在二维平面的一维流形。令 \mathbf{t} 是单位切向量场， \mathbf{n} 是单位法向量场，我们有

$$A_{\mathbf{n}} \mathbf{t} = -(\bar{\nabla}_{\mathbf{n}} \mathbf{t})^\top = \kappa \mathbf{t} \quad (4.14)$$

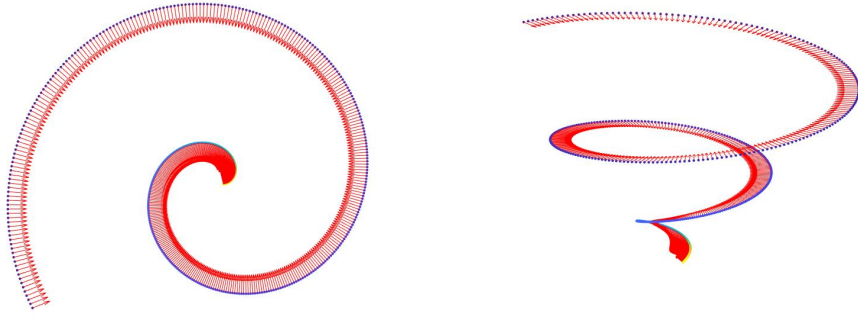


图 4.1 螺旋线上的平均曲率向量场

其中 κ 是曲线的曲率，因此 Weingarten 映射的估计是

$$\hat{A} = \frac{\Delta \mathbf{n} \cdot \mathbf{t}}{\Delta p \cdot \mathbf{t}} \approx \kappa \quad (4.15)$$

例 4.2 (空间曲线). 一条空间曲线是嵌入在三维欧氏空间中的一维流形。令 \mathbf{t} 是单位切向量场， \mathbf{n} 是单位主法向量场， \mathbf{b} 是单位副法向量场。我们有如下的 Frenet 公式：

$$\frac{d}{ds} \begin{pmatrix} \mathbf{t} \\ \mathbf{n} \\ \mathbf{b} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \kappa & 0 \\ -\kappa & 0 & \tau \\ 0 & -\tau & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{t} \\ \mathbf{n} \\ \mathbf{b} \end{pmatrix} \quad (4.16)$$

其中 κ 是曲率， τ 是挠率。令 $\xi = \cos(\theta)\mathbf{n} + \sin(\theta)\mathbf{b}$ 是任意的单位法向量场，我们有

$$A_{\xi} \mathbf{t} = \cos(\theta)A_{\mathbf{n}} \mathbf{t} + \sin(\theta)A_{\mathbf{b}} \mathbf{t} = \cos(\theta)\kappa \mathbf{t} \quad (4.17)$$

类似地，令 $\xi_{\perp} = -\sin(\theta)\mathbf{n} + \cos(\theta)\mathbf{b}$ 是与 ξ 垂直的法向量场，那么

$$A_{\xi_{\perp}} \mathbf{t} = -\sin(\theta)\kappa \mathbf{t} \quad (4.18)$$

由定义可知，平均曲率向量场是 $H = \cos(\theta)\kappa\xi - \sin(\theta)\kappa\xi_{\perp} = \kappa\mathbf{n}$ ，因此平均曲率是 $\|H\| = \kappa$ 。

注 2. 由 WME 算法可以计算出沿任何法方向的 Weingarten 映射。因为每个 Weingarten 映射是一个 $m \times m$ 矩阵，而法空间的基包含了 $d - m$ 个向量，整个算法在每一点给出 $m \times m \times (d - m)$ 个系数（事实上是 $\frac{m(m+1)}{2} \times (d - m)$ 个系数，因为 Weingarten 映

射是对称的)。用这些系数我们可以给出流形 \mathcal{M} 的第二基本形、平均曲率和截面曲率等几何量。如果我们假设流形的维数很低 (m 很小), 那么所有的系数是 $O(dN)$ 的量级, 其中 d 是全空间的维数, N 是点云的规模。

注 3. 因为 Weingarten 映射是切空间上的自伴算子, 矩阵 $\tilde{A}_{\xi_i^\alpha}$ 理应对称的, 因此问题(4.11)自然应该放在对称矩阵全体上求解。然而, 正如我们将要看见的, (4.11)的解依照任何矩阵范数收敛到真正的矩阵, 因此我们不必要在对称矩阵空间上考虑一个更复杂的优化问题。在对称性必要的场合, 例如在估计平均曲率或者算子谱时必须要求实特征值, 我们总是可以用 $\frac{1}{2}(\tilde{A}_{\xi_i^\alpha}^t + \tilde{A}_{\xi_i^\alpha})$ 去做对称化。

4.2 统计模型

在本节及收敛性的证明中, 我们用 ξ 表示流形 \mathcal{M} 上的法向量场。令 P 表示取值在流形 \mathcal{M} 上的随机向量, 有光滑的取值为正的密度函数 f 。固定一点 $p \in \mathcal{M}$, 为了记号简洁, 我们省略下标, 直接用 $A: T_p\mathcal{M} \rightarrow T_p\mathcal{M}$ 表示在 p 点的沿 ξ_p 的 Weingarten 映射。我们将命题4.1重新写成: 当 P 在 p 的测地邻域时, 我们有

$$(\xi_P - \xi_p)^\top = -A((P - p)^\top) + \eta(P)\|P - p\|^2 \quad (4.19)$$

其中 $\eta: \mathcal{M} \rightarrow \mathbb{R}^m$ 假定为定义在 p 的测地邻域上的有界光滑函数。另外, 假设 e_1, e_2, \dots, e_m 是切空间 $T_p\mathcal{M}$ 给定的一组基底。设 $\Xi = (\xi_P - \xi_p)^\top$, $\Delta = (P - p)^\top$ 表示基下的坐标, 并且设 $\mathbf{K}_P = K_h(P - p)$ 。考虑如下的优化问题

$$\arg \min_{\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times m}} \mathbb{E}_f [\|\Xi + \mathbf{A}\Delta\|^2 \mathbf{K}_P] \quad (4.20)$$

亦即, 想要找到如下函数的极小值

$$\begin{aligned} F(\mathbf{A}) &= \mathbb{E}_f [\text{Tr}(\Xi\Xi^\top + \Xi\Delta^\top\mathbf{A}^\top + \mathbf{A}\Delta\Xi^\top + \mathbf{A}\Delta\Delta^\top\mathbf{A}^\top)\mathbf{K}_P] \\ &= \text{Tr}(\mathbb{E}_f[\Xi\Xi^\top\mathbf{K}_P]) + 2\text{Tr}(\mathbb{E}_f[\Xi\Delta^\top\mathbf{K}_P]\mathbf{A}) + \text{Tr}(\mathbf{A}\mathbb{E}_f[\Delta\Delta^\top\mathbf{K}_P]\mathbf{A}^\top) \end{aligned} \quad (4.21)$$

令 $\frac{dF}{d\mathbf{A}} = 0$, 优化问题的总体解 (population solution) 有如下的闭式解

$$\mathbf{A} = -\mathbb{E}_f[\Xi\Delta^\top\mathbf{K}_P](\mathbb{E}_f[\Delta\Delta^\top\mathbf{K}_P])^{-1} = -\mathbf{L}\mathbf{D}^{-1} \quad (4.22)$$

其中 $\mathbf{L} = \mathbb{E}_f[\boldsymbol{\Xi}\boldsymbol{\Delta}^t\mathbf{K}_P]$ 以及 $\mathbf{D} = \mathbb{E}_f[\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{\Delta}^t\mathbf{K}_P]$ 。将坐标分量 $\boldsymbol{\Xi} \cdot e_j$ 记为 $(\boldsymbol{\Xi})_j$ ，坐标分量 $\boldsymbol{\Delta} \cdot e_j$ 记为 $(\boldsymbol{\Delta})_j$ ，其中 $j = 1, 2, \dots, m$ 。在矩阵形式下我们有

$$\begin{aligned} \mathbf{L} &= \begin{bmatrix} \mathbb{E}_f[(\boldsymbol{\Xi})_1(\boldsymbol{\Delta})_1\mathbf{K}_P] & \cdots & \mathbb{E}_f[(\boldsymbol{\Xi})_1(\boldsymbol{\Delta})_m\mathbf{K}_P] \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbb{E}_f[(\boldsymbol{\Xi})_m(\boldsymbol{\Delta})_1\mathbf{K}_P] & \cdots & \mathbb{E}_f[(\boldsymbol{\Xi})_m(\boldsymbol{\Delta})_m\mathbf{K}_P] \end{bmatrix} \\ \mathbf{D} &= \begin{bmatrix} \mathbb{E}_f[(\boldsymbol{\Delta})_1^2\mathbf{K}_P] & \cdots & \mathbb{E}_f[(\boldsymbol{\Delta})_1(\boldsymbol{\Delta})_m\mathbf{K}_P] \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbb{E}_f[(\boldsymbol{\Delta})_m(\boldsymbol{\Delta})_1\mathbf{K}_P] & \cdots & \mathbb{E}_f[(\boldsymbol{\Delta})_m^2\mathbf{K}_P] \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (4.23)$$

设 x_1, \dots, x_N 是从 P 得到的独立同分布的样本。令 $\boldsymbol{\Xi}_i, \boldsymbol{\Delta}_i$ 是将 $\boldsymbol{\Xi}, \boldsymbol{\Delta}$ 中的随机向量替换为样本之后得到的量。将期望替换为样本均值，我们得到优化问题的经验解 (empirical solution)。

$$\tilde{\mathbf{A}} = -\tilde{\mathbf{L}}\tilde{\mathbf{D}}^{-1} \quad (4.24)$$

其中

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{L}} &= \begin{bmatrix} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\boldsymbol{\Xi}_i)_1(\boldsymbol{\Delta}_i)_1\mathbf{K}_{x_i} & \cdots & \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\boldsymbol{\Xi}_i)_1(\boldsymbol{\Delta}_i)_m\mathbf{K}_{x_i} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\boldsymbol{\Xi}_i)_m(\boldsymbol{\Delta}_i)_1\mathbf{K}_{x_i} & \cdots & \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\boldsymbol{\Xi}_i)_m(\boldsymbol{\Delta}_i)_m\mathbf{K}_{x_i} \end{bmatrix} \\ \tilde{\mathbf{D}} &= \begin{bmatrix} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\boldsymbol{\Delta}_i)_1^2\mathbf{K}_{x_i} & \cdots & \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\boldsymbol{\Delta}_i)_1(\boldsymbol{\Delta}_i)_m\mathbf{K}_{x_i} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\boldsymbol{\Delta}_i)_m(\boldsymbol{\Delta}_i)_1\mathbf{K}_{x_i} & \cdots & \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\boldsymbol{\Delta}_i)_m^2\mathbf{K}_{x_i} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (4.25)$$

容易验证经验解与(4.13)给出的解相同。也就是说，经验解是如下优化问题的闭式解

$$\arg \min_{\tilde{\mathbf{A}} \in \mathbb{R}^{m \times m}} \sum_{i=1}^N \|\boldsymbol{\Xi}_i - \tilde{\mathbf{A}}\boldsymbol{\Delta}_i\|^2 \mathbf{K}_{x_i} \quad (4.26)$$

最后，我们定义均方误差 (MSE) 为

$$\text{MSE} = \mathbb{E}_f \left[\|\tilde{\mathbf{A}} - \mathbf{A}\|_F^2 \right] \leq 2 \left(\underbrace{\mathbb{E}_f \left[\|\tilde{\mathbf{A}} - \mathbf{A}\|_F^2 \right]}_{\text{方差}} + \underbrace{\|\mathbf{A} - \mathbf{A}\|_F^2}_{\text{偏差}^2} \right) \quad (4.27)$$

其中 $\|\cdot\|_F$ 表示 Frobenius 范数。

4.3 算法收敛性

在方差和偏差的估计中，主要的困难在于如何控制逆矩阵 \mathbf{D}^{-1} 和 \tilde{D}^{-1} 的范数。这里的技巧受到统计机器学习中的核密度估计的启发。当带宽 h 很小的时候，积分区域集中在 p 的测地邻域上。用指数映射的参数化，可以将积分区域转移到切空间的一个有界集合上，然后再对被积函数和积分区域进行泰勒展开，找到主导项，确定范数的阶。这里先证明一个引理来比较测地距离和欧氏距离。

引理 4.1. 令 d_p 和 ρ_p 是到点 p 的黎曼距离和欧氏距离。存在一个函数 $R_p(h)$ 和正常数 δ_{R_p} 、 C_{R_p} 使得当 $h < \delta_{R_p}$ 时， $d_p(y) \leq R_p(h)$ 对所有的满足 $\rho_p(y) \leq h$ 的 y 成立，进一步，我们有

$$h \leq R_p(h) \leq h + C_{R_p} h^3 \quad (4.28)$$

证明. 由命题3.1可知，存在 $h_0 > 0$ 和 $a_0 > 0$ 使得当 $h < h_0$ 时，

$$d_p(q) - a_0 d_p(q)^3 \leq \rho_p(q) \leq d_p(q) \quad (4.29)$$

定义 $\vartheta_p(r) = \inf\{\|p-q\| \mid r \leq d_p(q)\}$ ，以及 $R_p(h) = \sup\{r \mid \vartheta_p(r) \leq h\}$ 。一方面，若点 q 使得 $d_p(q) = h$ ，由式(4.29)可知， $\vartheta_p(h) \leq h$ ，从而 $R_p(h) \geq h$ 。另一方面，设 $\zeta(t) = t - a_0 t^3$ ，则在 $[0, 1/\sqrt{3a_0}]$ 上函数 ζ 单调递增，令 $\delta_{R_p} = \min\{h_0, 1/\sqrt{3a_0}, \zeta(h_0), \zeta(1/\sqrt{3a_0})\}$ ，则当 $h < \delta_{R_p}$ 时， ζ 的反函数存在，记为 β 。若 $d_p(q) \geq \beta(h)$ ，由 ζ 单调增可知 $\zeta(d_p(q)) \geq h$ ，由式(4.29)可知， $\rho_p(q) \geq h$ ，从而 $\vartheta_p(\beta(h)) \geq h$ 。这说明 $R_p(h) \leq \beta(h)$ 。简单的求导可知 $\beta(0) = 0$ ， $\beta'(0) = 1$ ， $\beta''(0) = 0$ 。存在 C_{R_p} 使得 $\beta(h) \leq h + C_{R_p} h^3$ 在 $h < \delta_{R_p}$ 时成立。 \square

引理4.1说明当 h 足够小时，如果 $\|P - p\| \leq h$ ，那么存在一个函数 R_p 使得 P 和 p 之间的测地距离是由 $R_p(h)$ 控制。

4.3.1 偏差估计

首先我们给出 \mathbf{D}^{-1} 的估计。一些指数映射的性质可以参见3.2。

引理 4.2. 存在一个正的常数 h_0 使得当 $h < h_0$ 时,

$$\mathbf{D} = h^2 \left(f(p) \int_{\|\mathbf{z}\| \leq 1} (z^1)^2 K(\|\mathbf{z}\|) \mathbf{d}\mathbf{z} \right) (I + o(1)) \quad (4.30)$$

其中 I 是恒同矩阵。因此, 逆矩阵由下式给出

$$\mathbf{D}^{-1} = \frac{1}{h^2 \left(f(p) \int_{\|\mathbf{z}\| \leq 1} (z^1)^2 K(\|\mathbf{z}\|) \mathbf{d}\mathbf{z} \right)} (I + o(1)) \quad (4.31)$$

证明. 选取 h_0 使得对 $h < h_0$, 指数映射在半径为 $R_p(h)$ 的测地球上合理定义的。对矩阵 \mathbf{D} 中任意一个元素 \mathbf{D}_{kl} , 令 \mathbf{r} 表示指数映射, 有

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_f[(\Delta)_k(\Delta)_l \mathbf{K}_P] &= \int_{\mathcal{M}} ((P-p) \cdot e_k)((P-p) \cdot e_l) K_h(P-p) f(P) dv \\ &= \frac{1}{h^m} \int_{\|\mathbf{u}\| \leq R_x(h)} (u^k + o(\|\mathbf{u}\|))(u^l + o(\|\mathbf{u}\|)) \\ &\quad \times K\left(\frac{\|\mathbf{u}\| + o(\|\mathbf{u}\|)}{h}\right) f(\mathbf{r}(\mathbf{u})) \sqrt{\det(g(\mathbf{u}))} \mathbf{d}\mathbf{u} \end{aligned} \quad (4.32)$$

其中 $g(\mathbf{u})$ 表示黎曼度量矩阵。在法坐标下, $g_{ij}(\mathbf{u}) = \delta_{ij} + o(\|\mathbf{u}\|)$ 。作变量替换 $\mathbf{u} = h\mathbf{z}$, 我们得到

$$\begin{aligned} (4.32) &= \int_{\|\mathbf{z}\| \leq R_x(h)/h} (hz^k + o(h\|\mathbf{z}\|))(hz^l + o(h\|\mathbf{z}\|)) \\ &\quad \times K\left(\|\mathbf{z}\| + o(h\|\mathbf{z}\|)/h\right) f(\mathbf{r}(h\mathbf{z})) \sqrt{g(h\mathbf{z})} \mathbf{d}\mathbf{z} \end{aligned} \quad (4.33)$$

积分的区域可以分成两个部分: 第一部分是单位球 $Q_1 = \{\mathbf{z} \mid \|\mathbf{z}\| \leq 1\}$, 第二部分是 $Q_2 = \{\mathbf{z} \mid 1 \leq \|\mathbf{z}\| \leq R_x(h)/h\}$ 。在 Q_1 上, 积分是

$$h^2 \left(\int_{\|\mathbf{z}\| \leq 1} z^k z^l K(\|\mathbf{z}\|) f(x) \mathbf{d}\mathbf{z} + o(1) \right) = h^2 (\delta_{kl} f(x) \int_{\|\mathbf{z}\| \leq 1} (z^1)^2 K(\|\mathbf{z}\|) \mathbf{d}\mathbf{z} + o(1)) \quad (4.34)$$

其中我们用到了积分区域和被积函数的对称性, δ_{kl} 表示 Kronecker 记号。在 Q_2 上, 注意到被积函数的数量级是 $O(h^2)$, 而由引理 4.1 积分区域是 $O(h^2)$ 。总之, 我们说明了

$$\mathbb{E}_f[(\Delta)_k(\Delta)_l \mathbf{K}_P] = h^2 (\delta_{kl} f(x) \int_{\|\mathbf{z}\| \leq 1} (z^1)^2 K(\|\mathbf{z}\|) \mathbf{d}\mathbf{z} + o(1)) \quad (4.35)$$

这就证明了公式(4.30)。逆矩阵由 Neumann 级数给出： $(I - D)^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} D^k$ 对充分小的 D 成立。□

利用这些结果可以给出偏差的收敛速率。

引理 4.3. 当 $h \rightarrow 0$ 时， $\|\mathbf{A} - A\|_F^2 = O(h^4)$ 。

证明. 根据模型假设(4.19)，如果设 $\Theta = \Xi - A\Delta = \eta(P)\|P - p\|^2$ ，那么有

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \mathbb{E}_f[(A\Delta + \Theta)\Delta^t \mathbf{K}_P](\mathbb{E}_f[\Delta\Delta^t \mathbf{K}_P])^{-1} \\ &= A + \mathbb{E}_f[\Theta\Delta^t \mathbf{K}_P](\mathbb{E}_f[\Delta\Delta^t \mathbf{K}_P])^{-1} \end{aligned} \quad (4.36)$$

因此只需要估计 $\mathbb{E}_f[\Theta\Delta^t \mathbf{K}_P]$ 。类似引理4.2的证明，对 $h < h_0$ ，积分是

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_f[(\Theta)_k(\Delta)_l \mathbf{K}_P] &= \int_{\mathcal{M}} \eta^k(P)\|P - p\|^2((P - p) \cdot e_l)K_h(P - p)f(P)dv \\ &= \frac{1}{h^m} \int_{\|\mathbf{u}\| \leq R_x(h)} \eta^k(\mathbf{r}(\mathbf{u}))(\|\mathbf{u}\|^2 + o(\|\mathbf{u}\|^2))(u^l + O(\|\mathbf{u}\|^2)) \\ &\quad \times K\left(\frac{\|\mathbf{u}\| + o(\|\mathbf{u}\|)}{h}\right)f(\mathbf{r}(\mathbf{u}))\sqrt{\det(g(\mathbf{u}))}d\mathbf{u} \end{aligned} \quad (4.37)$$

作变量替换 $\mathbf{u} = h\mathbf{z}$ ，由对称性得到

$$\int_{\|\mathbf{z}\| \leq 1} z^l \|\mathbf{z}\|^2 K(\|\mathbf{z}\|) d\mathbf{z} = 0 \quad (4.38)$$

因此 h^3 前的系数消失。令

$$\begin{aligned} \partial_l \eta^k(0) &= \left. \frac{\eta^k(\mathbf{r}(\mathbf{u}))}{\partial u^l} \right|_{\mathbf{u}=0} \\ \partial_j \partial_s r^i(0) &= \left. \frac{\partial r^i(\mathbf{u})}{\partial u^j \partial u^s} \right|_{\mathbf{u}=0} \end{aligned} \quad (4.39)$$

主导项是

$$h^4 \left(\left(\partial_l \eta^k(0) + \frac{1}{2} \eta^k(x) \sum_{i,j} \partial_j \partial_j r^i(0) \partial_l r^i(0) \right) f(x) \int_{\|\mathbf{z}\| \leq 1} (z^1)^2 \|\mathbf{z}\|^2 K(\|\mathbf{z}\|) d\mathbf{z} \right) \quad (4.40)$$

利用 \mathbf{D} 的估计, 可以得到

$$\|\hat{A} - A\|_F^2 \leq \|\mathbb{E}_f[\Theta \Delta^t \mathbf{K}_P]\|_F^2 \|\mathbf{D}^{-1}\|_F^2 = O(h^4) \quad (4.41)$$

□

4.3.2 方差估计

对矩阵 \tilde{D} , 估计的误差主要来自于随机取样。而对于随机性的误差, 我们只能保证它在“大概率”下很小, 这里“大概率”的数学定义为: 对任意的 $\epsilon > 0$, 某断言成立的概率大于 $1 - \epsilon$ 。为了描述简洁, 我们省略包含 ϵ 的项的具体计算。

引理 4.4. 当 $h \rightarrow 0$ 以及 $Nh^m \rightarrow \infty$ 时, 下面等式以大概率成立

$$\tilde{D} = \mathbf{D} + O\left(\frac{h^2}{\sqrt{Nh^m}}\right) \quad (4.42)$$

因此矩阵的逆由下式给出

$$\tilde{D}^{-1} = \mathbf{D}^{-1} - \mathbf{D}^{-1} O\left(\frac{h^2}{\sqrt{Nh^m}}\right) \mathbf{D}^{-1} \quad (4.43)$$

证明. 对矩阵 \tilde{D} 中的任意一个元素 \tilde{D}_{kl} , 注意到

$$\mathbb{E}_f[\tilde{D}_{kl}] = \mathbf{D}_{kl} \quad (4.44)$$

方差是

$$\mathbb{E}_f \left[(\tilde{D}_{kl} - \mathbf{D}_{kl})^2 \right] = \frac{1}{n} \mathbb{E}_f \left[((\Delta)_k (\Delta)_l \mathbf{K}_X - \mathbf{D}_{kl})^2 \right] \leq \frac{1}{n} \mathbb{E}_f \left[((\Delta)_k (\Delta)_l \mathbf{K}_P)^2 \right] \quad (4.45)$$

类似于引理4.2的证明, 可以找到主导项为

$$\frac{1}{h^m} \left(h^4 f(x) \int_{\|\mathbf{z}\| \leq 1} (z^1)^2 (z^2)^2 K^2(\|\mathbf{z}\|) d\mathbf{z} + o(h^4) \right) \quad (4.46)$$

由切比雪夫不等式，对任意的 $\epsilon > 0$ ，可知

$$\mathbb{P}\left(|\tilde{D}_{kl} - \mathbf{D}_{kl}| \geq \epsilon\right) \leq \frac{1}{\epsilon^2} O\left(\frac{h^4}{Nh^m}\right) \quad (4.47)$$

当 $h \rightarrow 0$ 以及 $Nh^m \rightarrow \infty$ 时成立。令不等式右端为 $O(1)$ ，我们说明大概率 $|\tilde{D}_{kl} - \mathbf{D}_{kl}| \leq h^2/\sqrt{Nh^m}$ ，这就证明了等式(4.42)。逆矩阵由如下恒等式给出

$$\begin{aligned} \left(\mathbf{D} + O\left(\frac{h^2}{\sqrt{Nh^m}}\right)\right)^{-1} &= \left(I + \mathbf{D}^{-1}O\left(\frac{h^2}{\sqrt{Nh^m}}\right)\right)^{-1} \mathbf{D}^{-1} \\ &= \left(I - \mathbf{D}^{-1}O\left(\frac{h^2}{\sqrt{Nh^m}}\right)\right) \mathbf{D}^{-1} \\ &= \mathbf{D}^{-1} - \mathbf{D}^{-1}O\left(\frac{h^2}{\sqrt{Nh^m}}\right) \mathbf{D}^{-1} \end{aligned} \quad (4.48)$$

□

用以上结果，可以给出方差的估计。

引理 4.5. 假设 $h \rightarrow 0$ 以及 $Nh^m \rightarrow \infty$ ，以大概率方差是 $O(\frac{1}{Nh^m})$

证明. 首先插入一个混合项，有

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_f \left[\|\mathbf{A} - \tilde{A}\|_F^2 \right] &= \mathbb{E}_f \left[\|\mathbf{A} - \tilde{\mathbf{L}}\mathbf{D}^{-1} + \tilde{\mathbf{L}}\mathbf{D}^{-1} - \tilde{A}\|_F^2 \right] \\ &\leq 2 \left(\underbrace{\mathbb{E}_f \left[\|\mathbf{A} + \tilde{\mathbf{L}}\mathbf{D}^{-1}\|_F^2 \right]}_{(*)} + \underbrace{\mathbb{E}_f \left[\|\tilde{\mathbf{L}}\mathbf{D}^{-1} + \tilde{A}\|_F^2 \right]}_{(**)} \right) \end{aligned} \quad (4.49)$$

对第一项有

$$(*) = \mathbb{E}_f \left[\|(\mathbf{L} - \tilde{\mathbf{L}})\mathbf{D}^{-1}\|_F^2 \right] \leq \mathbb{E}_f \left[\|\mathbf{L} - \tilde{\mathbf{L}}\|_F^2 \right] \|\mathbf{D}^{-1}\|_F^2 \quad (4.50)$$

对 $\mathbf{L} - \tilde{\mathbf{L}}$ 中的任意一项，有

$$\begin{aligned} &\mathbb{E}_f \left[\left(\frac{\sum_{i=1}^N (\Xi_i)_k (\Delta_i)_l K_{x_i}}{n} - \mathbb{E}_f [(\Xi)_k (\Delta)_l \mathbf{K}_P] \right)^2 \right] \\ &= \frac{1}{n} \text{Var}_f [(\Xi)_k (\Delta)_l \mathbf{K}_P] \leq \frac{1}{n} \mathbb{E}_f [(\Xi)_k^2 (\Delta)_l^2 \mathbf{K}_P^2] \end{aligned} \quad (4.51)$$

当 $h < h_0$ 时, 由模型假设(4.19), (4.51)有如下控制

$$\begin{aligned} & \frac{\|A\|_F^2}{h^{2m}} \int_{\|\mathbf{u}\| \leq R_x(h)} (u^k + o(\|\mathbf{u}\|))^2 (u^l + o(\|\mathbf{u}\|))^2 \\ & \quad \times K^2 \left(\frac{\|\mathbf{u}\| + o(\|\mathbf{u}\|)}{h} \right) f(\mathbf{r}(\mathbf{u})) \sqrt{\det(g(\mathbf{u}))} d\mathbf{u} \end{aligned} \quad (4.52)$$

其中主导项为

$$f(x) \frac{\|A\|_F^2}{h^{m-4}} \int_{\|\mathbf{z}\| \leq 1} (z^1)^2 (z^2)^2 K(\|\mathbf{z}\|)^2 d\mathbf{z} \quad (4.53)$$

再利用 \mathbf{D}^{-1} 的估计, 我们发现 $(*) = O(\frac{1}{Nh^m})$ 。

对第二项有

$$\begin{aligned} (**) &= \mathbb{E}_f \left[\|\tilde{\mathbf{L}}(\mathbf{D}^{-1} - \tilde{\mathbf{D}}^{-1})\|_F^2 \right] = \mathbb{E}_f \left[\|\tilde{\mathbf{L}}\mathbf{D}^{-1}(\tilde{\mathbf{D}} - \mathbf{D})\tilde{\mathbf{D}}^{-1}\|_F^2 \right] \\ &\leq \mathbb{E}_f \left[\|\tilde{\mathbf{L}}\|_F^2 \right] \mathbb{E}_f \left[\|\tilde{\mathbf{D}} - \mathbf{D}\|_F^2 \right] \mathbb{E}_f \left[\|\tilde{\mathbf{D}}^{-1}\|_F^2 \right] \|\mathbf{D}^{-1}\|_F^2 \end{aligned} \quad (4.54)$$

现在(4.54)中每一个量的阶是

- (1) 类似于引理4.4的证明, 注意到 $\mathbb{E}_f[\tilde{L}_{kl}] = \mathbf{L}_{kl}$ 以及大概率方差由一个阶为 $O(\frac{h^4}{Nh^m})$ 的量控制, 则

$$\mathbb{E}_f \left[\|\tilde{\mathbf{L}}\|_F^2 \right] \leq O(h^4) \quad (4.55)$$

- (2) 用与控制 $\|\mathbf{L} - \tilde{\mathbf{L}}\|_F^2$ 相同的方法, 大概率它由 $O(\frac{1}{Nh^{m-4}})$ 控制;

- (3) 由引理4.4可知, 该项大概率是 $O(\frac{1}{h^4})$;

- (4) 由引理4.2可知, 该项是 $O(\frac{1}{h^4})$ 。

因此 $(**)$ 大概率是 $O(\frac{1}{Nh^m})$ 。这就证明了方差的估计。 \square

4.3.3 均方误差

综合以上结果, 我们给出了 MSE 的收敛速率。

定理 4.1. 令 ξ 是 M 上的法向量场, 令 P 是取值于 M 中, 有光滑的正密度函数 f 的随机向量。假设 $K: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ 是支撑在 $[0, 1]$ 上的二次可微的核函数。进一步, 假设给

定切空间 $T_p\mathcal{M}$ 的基底 e_1, e_2, \dots, e_m 。令 x_1, \dots, x_N 是来自于 P 的独立同分布的样本。当 $h \rightarrow 0$ 以及 $Nh^m \rightarrow \infty$ 时, 按照式(4.27)定义的均方误差为

$$\text{MSE} = O(h^4) + O\left(\frac{1}{Nh^m}\right) \quad (4.56)$$

如果 h 选取为 $N^{-\frac{1}{m+4}}$, 则最优收敛速率是 $O(N^{-\frac{4}{m+4}})$ 。

注 4. 在定理中我们假设法向量场是精确的。如果我们加入切空间和法空间的误差, 模型会变得极其复杂。然而在实际应用中参数 h_{PCA} 的选取对结果的影响不是特别敏感。我们依照 A.V. Little 等人的方法选取 $h_{\text{PCA}} = O(n^{-\frac{1}{m}})$ 以确保 I_i 包含足够多的点^[5]。

注 5. k 近邻方法相对于核方法更加直观和简单, 复杂度较低, 常常用于实验和算法中。由定理4.1和关系式 $\frac{k}{N} \sim h^m$, 我们在实验中设定 k 近邻的参数为 $k = O(n^{\frac{4}{m+4}})$ 以确保达到最优收敛速率 $O(n^{-\frac{4}{m+4}})$ 。

4.4 与其他方法比较

B. Buet 等人在 2018 年提出了基于几何测度论的 varifold 上的推广的第二基本形和平均曲率^[23]。因此, 即使背景空间有奇异点 (例如有自交点), 他们也能够计算推广的平均曲率。具体而言, 一个 m 维 varifold 是空间 $\mathbb{R}^d \times \mathbb{G}_{m,d}$ 上的一个 Radon 测度, 其中 $\mathbb{G}_{m,d}$ 是 \mathbb{R}^d 中的所有 m 维平面组成的格拉斯曼流形。对一个 m 维 varifold V , 推广的平均曲率场由下式定义

$$\begin{aligned} \delta V : C_c^1(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^d) &\rightarrow \mathbb{R} \\ X &\mapsto \int_{\mathbb{R}^d \cap \mathbb{G}_{m,d}} \text{div} X(x) dV(x, S) \end{aligned} \quad (4.57)$$

如果 V 是流形 \mathcal{M} 上的标准测度并且 $\delta V = -H\mathcal{H}_{\mathcal{M}}^m$, 推广的平均曲率退化为经典的平均曲率。然而, 在一般情形下一阶变分很难给出具体表达。对于一个点云 varifold, 即 $V = \sum_j 1^n m_j \delta_{x_j} \otimes \delta_{P_j}$, 一阶变分 δV 不是一个测度。因此, B. Buet 等人提出用下面的量来逼近点云的平均曲率

$$H_{\alpha, \beta, \epsilon}^V = \frac{C_\beta \sum_{x_j \in B_\epsilon(x) \setminus \{x\}} m_j \alpha'(\frac{\|x_j - x\|}{\epsilon}) \prod_{P_j} \frac{x_j - x}{\|x_j - x\|}}{C_\alpha \epsilon \sum_{x_j \in B_\epsilon(x)} m_j \beta(\frac{\|x_j - x\|}{\epsilon})} \quad (4.58)$$

其中 α, β 是支撑在 $[-1, 1]$ 上的函数, 满足 $\int_{\mathbb{R}^d} \alpha(x) dx = \int_{\mathbb{R}^d} \beta(x) dx = 1$, 并且 C_α, C_β 是与 α, β 相关的常数。他们证明了 $H_{\alpha, \beta, \epsilon}^V$ 在特定条件下收敛到 H 。特别地, 如果点是均匀采样并且每一点的切空间是给定的, 那么当 $n\epsilon \rightarrow \infty$ 时, 收敛速率是 $\frac{1}{n\epsilon} + \epsilon$ 。因此, 最优的带宽是 $\epsilon = n^{-\frac{1}{2}}$, 最优的收敛速率也是 $n^{-\frac{1}{2}}$ 。与 WME 算法相比较, 这个方法在流形维数很高的时候有更快的收敛速率, 但是对于曲线和曲面, WME 算法的收敛速率更快。另外, 该方法的收敛条件更加苛刻, 而 WME 的收敛条件则相对宽松, 在算法实现时更为方便。

A. Aamari 等人在 2019 年提出了基于多项式拟合的切空间估计、第二基本形估计和支集估计, 并且给出了在有限样本条件下的收敛速率。令 \mathcal{M} 是满足某些正则性条件的子流形, 并且假设数据均匀采样, 那么第二基本形的收敛速率是 $O(n^{-\frac{k-2}{m}})$, 其中 k 是流形的正则性参数, m 是流形的维数。然而他们的方法无法给出估计的闭式解, 在实验过程中还要求解复杂的非凸优化问题, 所以相比于 WME 他们缺少一个快速有效的算法。

4.5 实验验证

我们将 WME 算法应用到多个人造数据上并验证定理 4.1 中的最优收敛速率: 首先验证核方法给出的最优带宽, 然后再验证 k 近邻法给出的最优参数 k 。

4.5.1 核方法

我们在如下三个人造数据集上验证收敛速率:

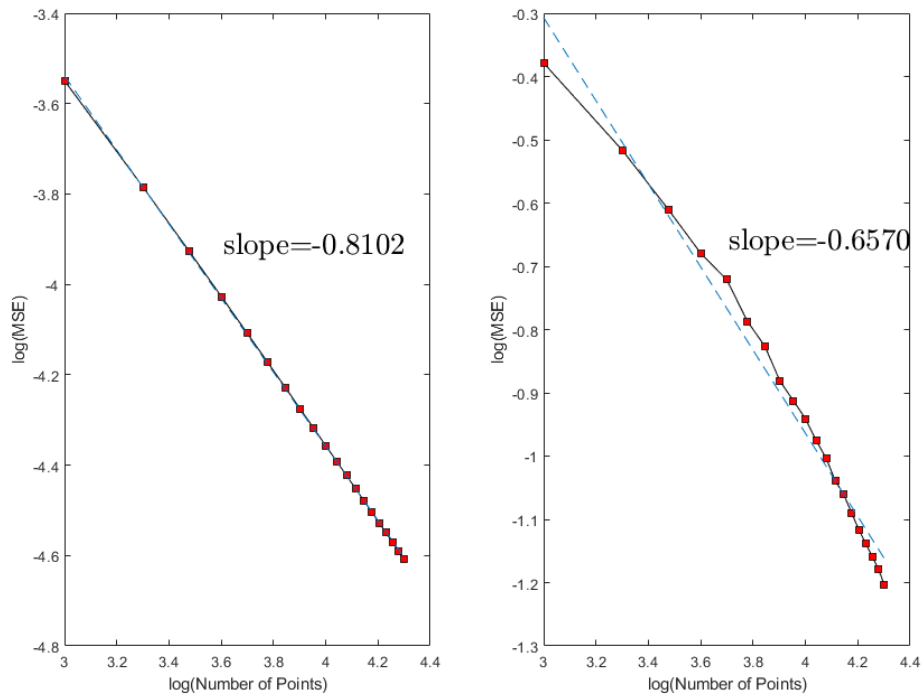
螺旋线: 三维空间中的螺旋线的参数方程由下式给出:

$$\gamma(t) = (rt \cos(at), rt \sin(at), t) \quad (4.59)$$

其中 $r, a > 0$ 为给定参数, 在实验中我们设置 $r = 1$ 及 $a = 1.5$ 。这是嵌入在三维欧氏空间中的一维流形。如果选取 h 正比于 $N^{-1/5}$, 那么最优收敛速率是 $O(N^{-4/5})$ 。

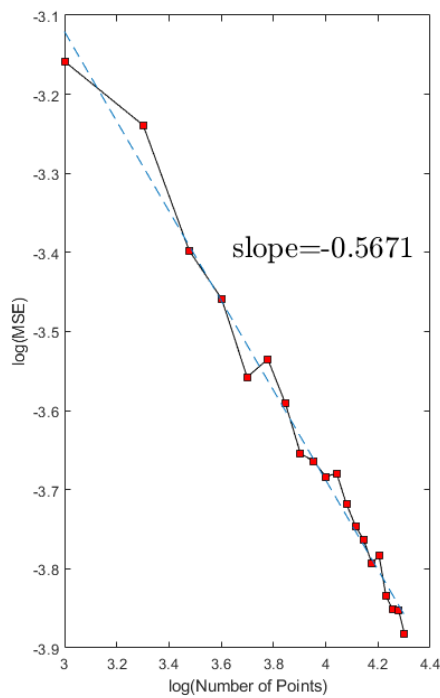
环面: 二维环面的参数方程由下式给出:

$$F(\theta, \alpha) = (R + r \cos(\theta) \cos(\alpha), (R + r \cos(\theta)) \sin(\alpha), r \sin(\theta)) \quad (4.60)$$



(a) 螺旋线

(b) 环面



(c) 椭球面

图 4.2 螺旋线，环面以及椭球圆的 $\log(N) - \log(\text{MSE})$ 图，斜率与收敛的阶一致

其中 $R > 2r > 0$ 为给定参数，这里我们设 $R = 4$ 及 $r = 0.5$ 。因此如果选取 h 正比于 $N^{-1/6}$ ，那么最优收敛速率是 $O(N^{-2/3})$ 。

椭球圆： 三维椭球圆的参数方程由下式给出：

$$F(\theta, \alpha, \beta) = (a \cos(\theta), b \sin(\theta) \cos(\alpha), c \sin(\theta) \sin(\alpha) \cos(\beta), d \sin(\theta) \sin(\alpha) \sin(\beta)) \quad (4.61)$$

其中 $a, b, c, d > 0$ 为给定参数，这里我们设 $a = 1, b = 1.15, c = 1.31$ 以及 $d = 1.7$ 。如果选取带宽正比于 $N^{-1/7}$ ，那么最优收敛速率是 $O(N^{-4/7})$ 。

用以上的参数方程均匀地采样 1,000 ~ 20,000 个点。选取带宽使得收敛速率达到最优。在作图时分别对点云规模和 MSE 取对数，亦即，作 $\log(\text{MSE})$ 相对于 $\log(N)$ 的图。因此拟合直线的斜率就对应收敛的阶，实验结果展现在图4.2中。

4.5.2 k 近邻法

我们在二维环面和二维椭球面上检测 k 近邻法给出的最优收敛速率。对二维环面设主半径为 5，副半径为 2，均匀采样 1,000 到 20,000 个点。对二维椭球面设主轴参数分别为 6, 6, 8，并且均匀采样 7,000 到 30,000 个点。参数 k 正比于 $N^{2/3}$ 。图4.3展现了 $\log(N) - \log(\text{MSE})$ 图，我们发现斜率与理论上导出的收敛的阶一致。

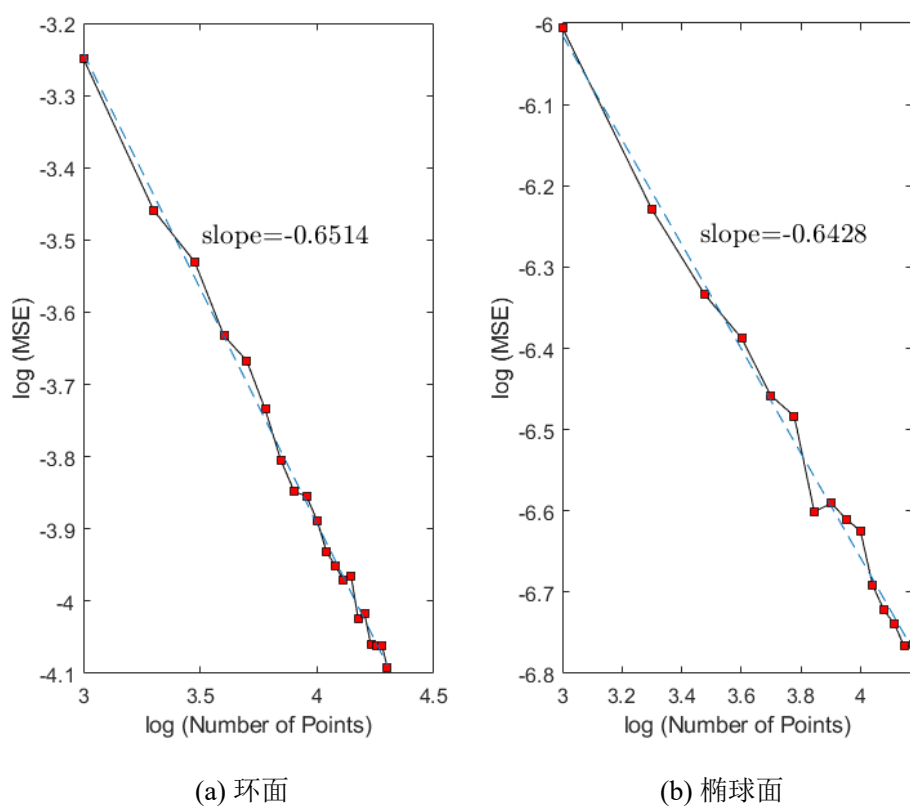


图 4.3 环面和椭球圆的 $\log(N) - \log(\text{MSE})$ 图，斜率与收敛的阶一致

第 5 章 应用

5.1 曲率估计

WME 算法的一个重要应用是做点云数据的曲率估计。在计算机图形学等领域,点云或者三角网格的高斯曲率和平均曲率是非常重要的两个量。对于 WME 算法而言,在得到 Weingarten 映射之后,只需要对矩阵取行列式和迹即可得到高斯曲率和平均曲率。在实验中,我们将 WME 算法与曲率估计中一个常用的方法——二次曲面拟合法——进行比较。选择二次曲面拟合法的有两个理由:其一是在算法实现上,二次曲面拟合法较为简单,需要调整的参数较少;其二是根据 E. Magid 等人的研究,在常用的五个估计高斯曲率和平均曲率的算法中,二次曲面拟合法的精度最高^[35]。实验结果表明,WME 算法在精确性和鲁棒性上优于二次曲面拟合法。

二次曲面拟合法的具体步骤如下:首先将一个邻域内的点做平移和旋转使得要估计的点的法向量与欧氏空间的 z 坐标轴重合,然后用最小二乘法拟合参数曲面 $z = ax^2 + bxy + cy^2$,此时原点处的高斯曲率和平均曲率由下式给出

$$K = 4ac - b^2, H = a + c. \quad (5.1)$$

我们在环面(人造数据)和大脑皮层曲面(真实数据)上比较 WME 算法和二次曲面拟合法。

5.1.1 环面

我们用如下方法比较 WME 算法和二次曲面拟合法的精确性:在环面上均匀采样 1,000 ~ 20,000 个点,对两个算法,设置相同的 k 近邻参数(实验中均为 100)。图 5.1 的结果说明 WME 算法给出的均方误差比二次曲面拟合法给出的均方误差小,因此 WME 算法的精确性更高。

用如下方法比较 WME 算法和二次曲面拟合法的鲁棒性:同样地,在环面上均匀采样 1,000 ~ 20,000 个点,此时再加上零均值的高斯噪声,其协方差是 $\sigma^2 I_3$,其中 $\sigma^2 \in \{0.01, 0.05, 0.001\}$ 。对于不同的噪声,图 5.2 表明 WME 算法给出的均方误差更小,因此具有更高的鲁棒性。

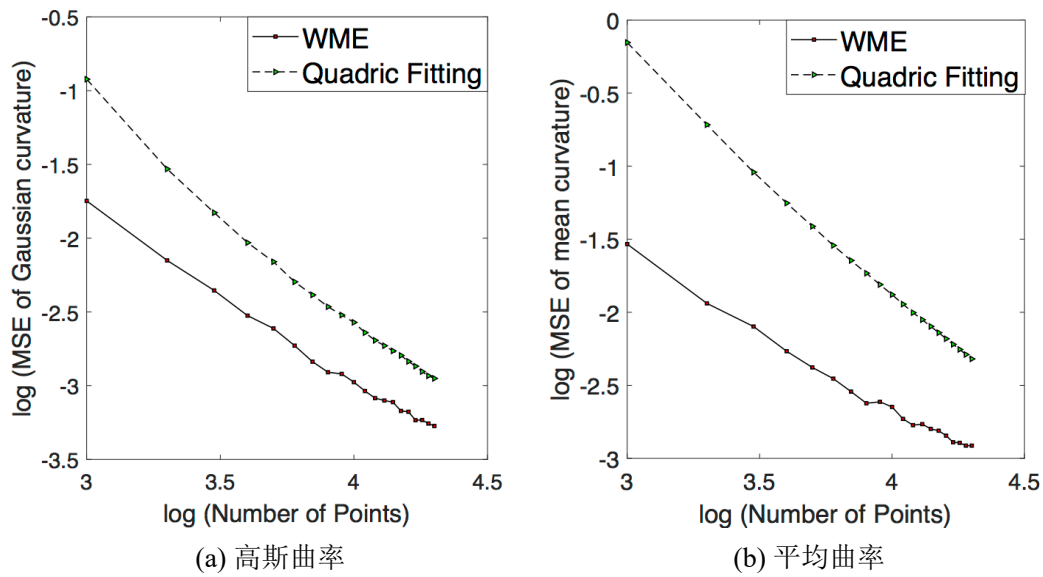


图 5.1 环面上 WME 算法和二次曲面拟合算法精确性的比较

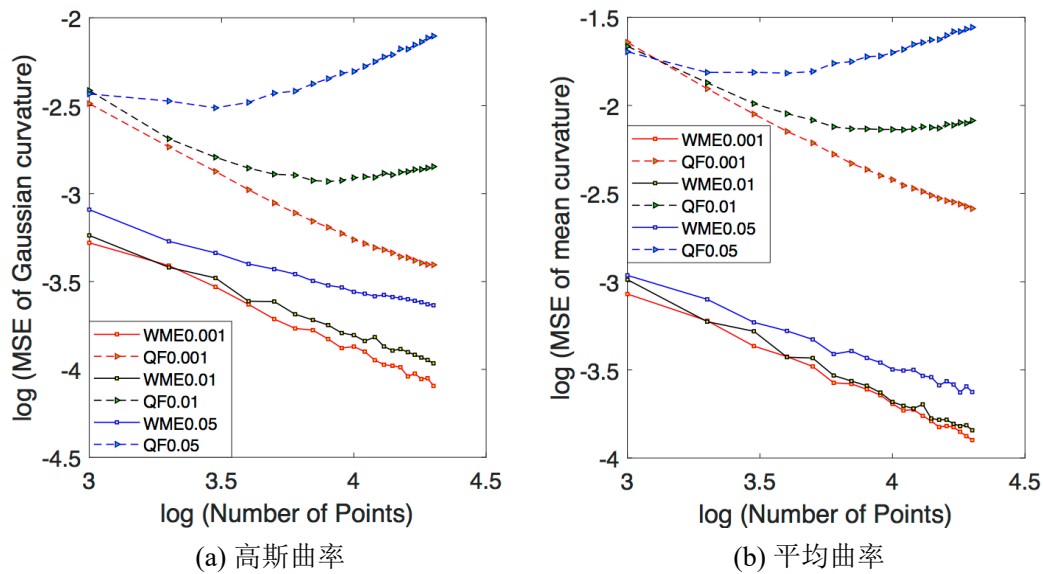


图 5.2 环面上 WME 算法和二次曲面拟合算法鲁棒性的比较

5.1.2 大脑皮层曲面

为了进一步比较两个算法的鲁棒性，我们在真实的大脑皮层数据上测试两个算法。我们从 Human Connectome Projects (s3://hcp-openaccess/HCP_1200/100206/MNINonLinear/Native/) 得到左侧大脑皮层点云，这个点云包含 166,737 个点。这个数据是有噪声的，并且我们无从得知大脑皮层曲面的真实曲率，所以也无

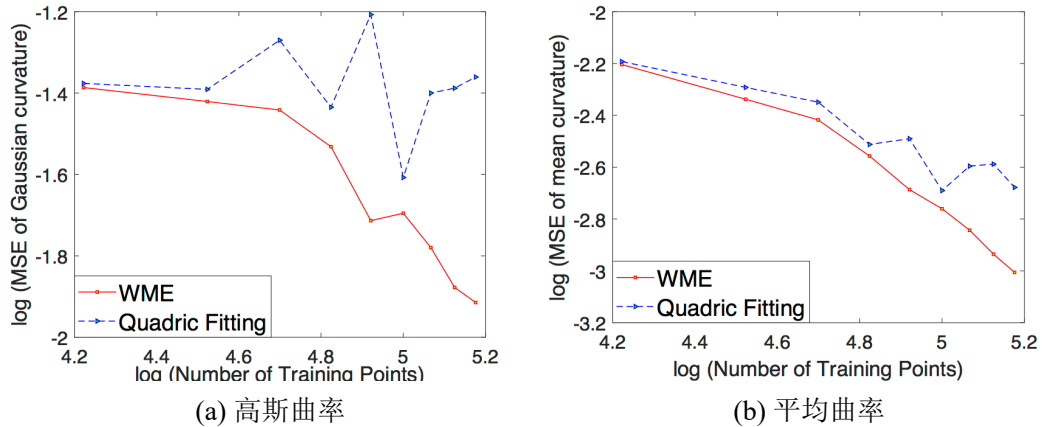


图 5.3 大脑皮层上 WME 算法和二次曲面拟合算法鲁棒性的比较

法直接计算均方误差。我们采取如下间接的方法来衡量每个算法的表现：首先在整个数据集（166,737 个点）上估计点云的高斯曲率和平均曲率，这个结果被视为大脑皮层表面上的真实曲率。然后将数据分成训练集和测试集。在训练集上重新计算高斯曲率和平均曲率，对测试集中的每一点，寻找其在训练集中最近的 k 个点，并用着 k 个点的曲率的平均值作为测试集中该点的曲率的估计。最后，计算测试集上的曲率的均方误差。从图 5.3 可以发现，从 WME 得到的均方误差随着测试集的增加是单调递减的，而从二次曲面拟合得到的误差则是上下浮动的，这说明在真实的复杂数据集上，WME 算法具有更强的鲁棒性。

5.2 点云简化

点云数据通常被转化为连续的曲面表示，例如多边形网格或者样条曲面，该转化过程称为曲面重构。由于大多数曲面重构算法要求计算机大量的内存，并且计算复杂度较高，所以点云的规模不能太大。在对点云进行预处理的过程中，一个重要的步骤是降低点云的规模，这个过程被称为点云简化。M. Pauly 等人提出了三种类型的简化方式^[36]：聚类法、迭代简化和粒子仿真。这些方法依赖于一个由局部协方差矩阵决定的量，他们称之为点云的“曲率”，但是实际上该量并不是曲率。这里我们提出一个依赖于真正的曲率的点云简化算法，并且与均匀聚类简化算法进行比较。

均匀聚类简化算法的过程如下：随机选择一个种子点，逐步加入最近邻点形成类 C_0 ，当聚类达到阈值时停止。删除 C_0 中的所有点，在剩余的点中随机选择一个点，用相同的方式构造下一个类 C_1 。重复这个过程直到所有点都被聚类。计算每个类中的

均值作为该类的代表，所有的代表合起来就是简化之后的点云。伪代码见算法1。

算法 1 均匀简化算法

输入: 点云 $P = \{x_1, \dots, x_N\}$, 阈值 T

输出: 简化点云 S

```

1:  $S \leftarrow \emptyset$ 
2: while  $|P| > 0$  do
3:    $seed \leftarrow \text{rand}(P)$ 
4:    $C \leftarrow \{seed\}$ 
5:   repeat
6:     搜索  $C$  的最近邻  $x_C$ 
7:      $C \leftarrow C \cup \{x_C\}$ 
8:      $P \leftarrow P \setminus C$ 
9:   until  $|C| \geq T \parallel |P| == 0$ 
10:   $S \leftarrow S \cup \{\frac{1}{|C|} \sum_{i \in C} x_i\}$ 
11: end while

```

从直观上讲，为了保持点云的几何特征，在高度弯曲的区域内的点应当尽可能地保留，而对于平坦区域的点则尽可能地删除。因此，如果种子点处的曲率很大，其聚类的阈值应当设定的很小。令 Ω 代表某种曲率（高斯曲率，平均曲率或者主曲率）。假设 $|\Omega|_{\max}$ 是整个曲面上曲率绝对值的最大值。从某个种子点 p 开始，假设这一点曲率的绝对值是 $|\Omega|_p$ ，设定类 C_p 的阈值为，

$$\#C_p = \left\lceil \left(1 - c \frac{|\Omega_p|}{|\Omega|_{\max}}\right) T \right\rceil \quad (5.2)$$

其中 $0 < c < 1$ 是某个尺度参量， T 是预先设定的全局参量， $\lceil \cdot \rceil$ 代表上取整函数。同样地，用类的均值作为代表，而所有的代表合起来成为简化后的点云。通过这个过程得到一个非均匀聚类简化方法，我们称之为曲率自适应简化算法。伪代码见算法2。

为了量化简化的效果，我们定义如下两种误差：假设 P 和 P' 是两个点云，定义距离误差为

$$\Delta_{dist}(P, P') = \max \left\{ \max_{x \in P} d(x, P'), \max_{x' \in P'} d(x', P) \right\} \quad (5.3)$$

注意在 M. Pauly 等人的文章中，他们定义的是单边豪斯多夫距离，所以当 P' 是 P 的子集时，误差会恒等于 0。这里我们用 $\Delta_{dist}(P, P')$ 可以有效地规避这种情况。

接下来我们考虑曲率的损失。特别地，假设 P 是一个点云， \mathcal{C} 是 P 的聚类构成的集合。对每个类 $C \in \mathcal{C}$ ，令 \bar{p} 是 C 的中心， $\bar{\Omega}$ 是 \bar{p} 处的曲率。那么 C 处的曲率损失定

算法 2 曲率自适应简化算法

输入: 点云 $P = \{x_1, \dots, x_N\}$, 曲率 Ω , 阈值 T , 参数 c

输出: 简化点云 S

```

1:  $S \leftarrow \emptyset$ 
2: while  $|P| > 0$  do
3:    $seed \leftarrow \text{rand}(P)$ 
4:    $C \leftarrow \{seed\}$ 
5:    $T_C = \lceil (1 - c \frac{|\Omega_p|}{|\Omega|_{\max}})T \rceil$ 
6:   repeat
7:     搜索  $C$  的最近邻  $x_C$ 
8:      $C \leftarrow C \cup \{x_C\}$ 
9:      $P \leftarrow P \setminus C$ 
10:  until  $|C| \geq T_C \vee |P| == 0$ 
11:   $S \leftarrow S \cup \{\frac{1}{|C|} \sum_{i \in C} x_i\}$ 
12: end while

```

义为

$$\Delta\Omega_C = \sum_{p \in C} |\Omega_p - \bar{\Omega}| \quad (5.4)$$

点云 P 的曲率损失定义为

$$\Delta_{curv}(P) = \frac{\sum_{C \in \mathcal{C}} \Delta\Omega_C}{\#P} \quad (5.5)$$

我们将两个算法用于三个标准数据集: 杜克龙 (Duke Dragon)、斯坦福兔子 (Stanford Bunny) 和怪兽犰狳 (Armadillo)。这里采用绝对平均曲率来做曲率自适应简化算法。

最终的结果展现在表5.1中。注意到对于曲率损失, Δ_{curv} 越小表明几何特征保留

表 5.1 均匀简化算法和曲率自适应简化算法的性能比较

怪兽 Armadillo (包含 172,974 个点)					
方法	聚类规模	简化点云规模	时间	Δ_{curv}	Δ_{dist}
均匀	22	7863	14m12s	0.0714	3.1906
非均匀	7~69	7858	13m17s	0.0694	4.5451
斯坦福兔子 (包含 35,947 个点)					
方法	聚类规模	简化点云规模	时间	Δ_{curv}	Δ_{dist}
均匀	8	4494	1m24s	0.0396	3.6258
非均匀	4~39	4443	1m27s	0.0374	5.9572
杜克龙 (包含 100,250 个点)					
方法	聚类规模	简化点云规模	时间	Δ_{curv}	Δ_{dist}
均匀	15	6684	6m27s	0.0673	4.4642
非均匀	5~49	6575	6m56s	0.0642	5.6068

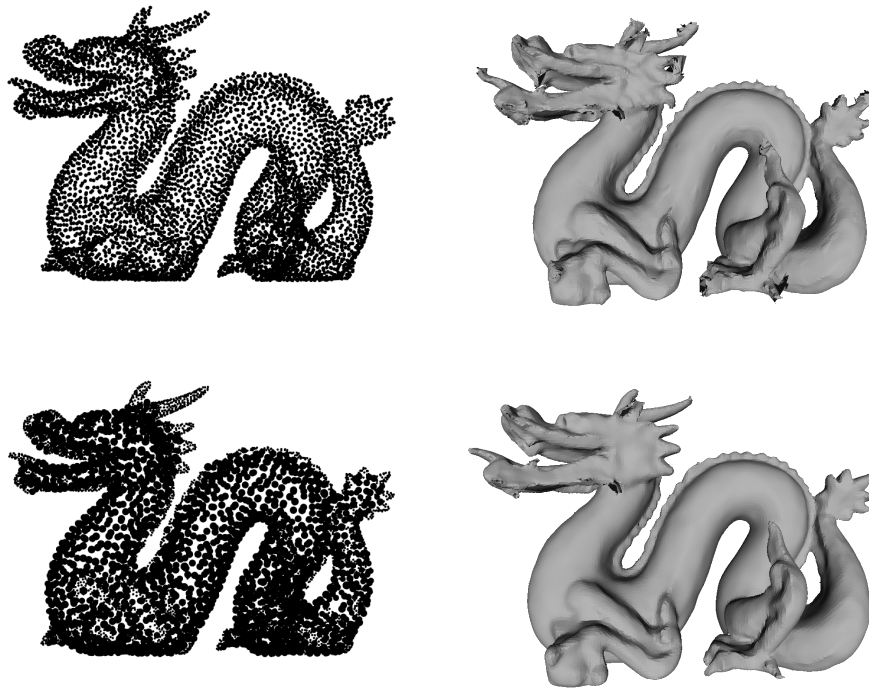


图 5.4 杜克龙，曲面重构于 6500 个点

的越多，而对于距离误差， Δ_{dist} 越大则表明简化的程度越深。

在简化之后，我们用移动最小二乘法 (MLS) 对曲面进行重构，重构后的结果展现在图5.4、图5.5和图5.6中。在每一幅图中，第一个子图代表了用均匀聚类简化算法得到的点云，第二个子图则代表在均匀简化之后重构出的曲面。类似地，第三个子图代表了用曲率自适应简化算法得到的点云，最后一个子图代表在非均匀简化之后重构出的曲面。我们发现从曲率自适应简化后的点云重构出的曲面保留了更多的细节，尤其是在曲率大的地方（耳朵、手指、牙齿等），重构出的效果要远远好于均匀简化后点云重构的曲面。

5.3 大脑皮层与年龄预测

研究表明，随着人的年龄的增长，大脑的结构也会不断地发生变化，研究表明，大脑的结构和人的年龄存在某些特定的联系，因此用大脑皮层的几何形状来做年龄预测是合适的。

年龄预测的重要性在于：很多与脑部相关的疾病，如精神分裂症和阿兹海默症等，都与大脑的结构发生异变有关。有疾病的大脑会偏离正常的大脑模式。如果我们对一

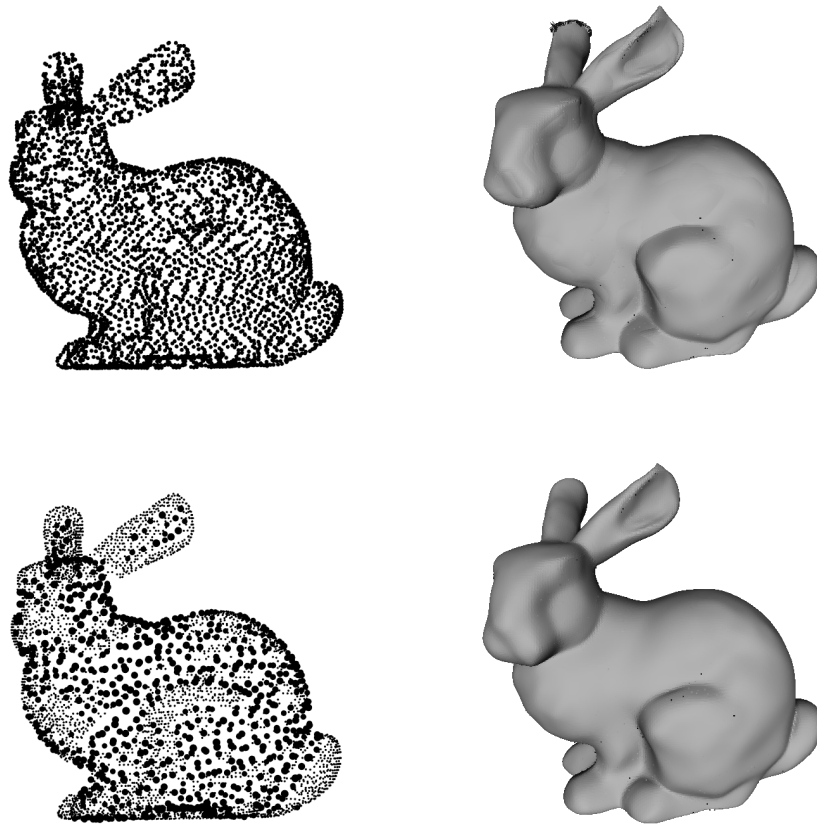


图 5.5 斯坦福兔子，曲面重构于 4,400 个点

组大脑做年龄预测，那些估计年龄与正常年龄有明显偏离的大脑就意味着出现了结构上的异变，这样我们就能挑选出可能还有疾病的大脑，从而帮助医生对疾病进行诊断。

基于大脑的结构 MRI 数据做年龄预测的研究较少，而在这些研究中，大部分也没有采用大脑的几何量作为特征，而是采用大脑的体素 (voxel) 或者体积 (volume) 作为特征。用大脑皮层的曲率做年龄预测的文章可以参见^[37]。

5.3.1 数据获取

我们选取两个公开的数据集：一个是 IXI 数据集，另一个是 HCP Lifespan 数据集。我们删除没有年龄记录的数据，以及无法提取曲面特征的数据 (用 freesurfer 处理后 surf 文件夹为空)。由于从 MRI 数据得到大脑皮层曲面的过程非常耗时 (处理一个数据大约 3-4 小时)，我们没有处理所有的数据，最终从 HCP Lifespan 得到的 27 个大脑曲面，从 IXI 得到 115 个大脑曲面。

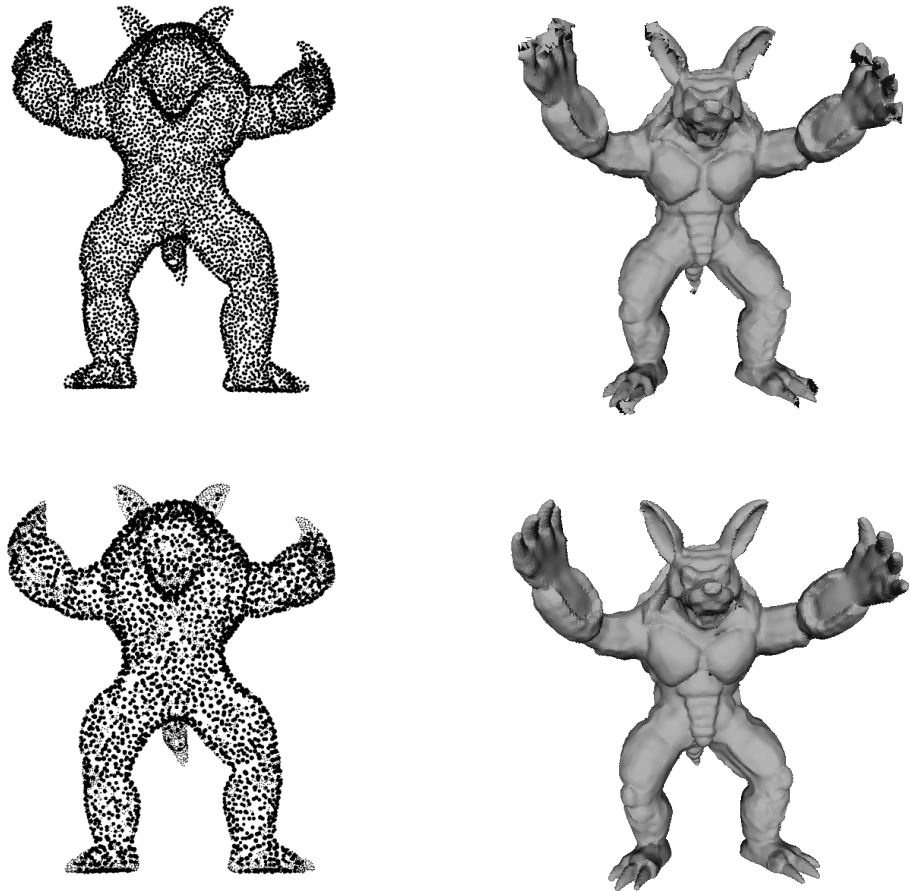


图 5.6 怪兽狃狃，曲面重构于 7,800 个点

5.3.2 数据处理流程

我们用FreeSurfer软件处理原始的 T1 图像数据。FreeSurfer 是美国哈佛-麻省理工卫生科学与技术部和马萨诸塞州总医院共同开发的一款磁共振数据处理软件包，是基于 Linux 平台的全免费开源软件。为了缩短运行时间，我们只执行步骤 15-23(完整工作流程见 FreeSurfer 的recon-all 帮助文档)，如果执行全部的步骤，处理一个数据的时间至少是 20 个小时 (见 FreeSurfer 的运行时间比较文档)。我们用 Matlab 读取 FreeSurfer 处理过的文件 (见 Freeurfer 的Matlab 帮助文档)。从 FreeSurfer 可以得到的数据包括 (但不限于):

- 灰质/白质分割面点云 (white surface), 见图5.7a;
- 灰质/脑脊液分割面点云 (pial surface), 见图5.7b;
- 膨胀大脑皮质表面 (inflated surface), 见图5.7c;

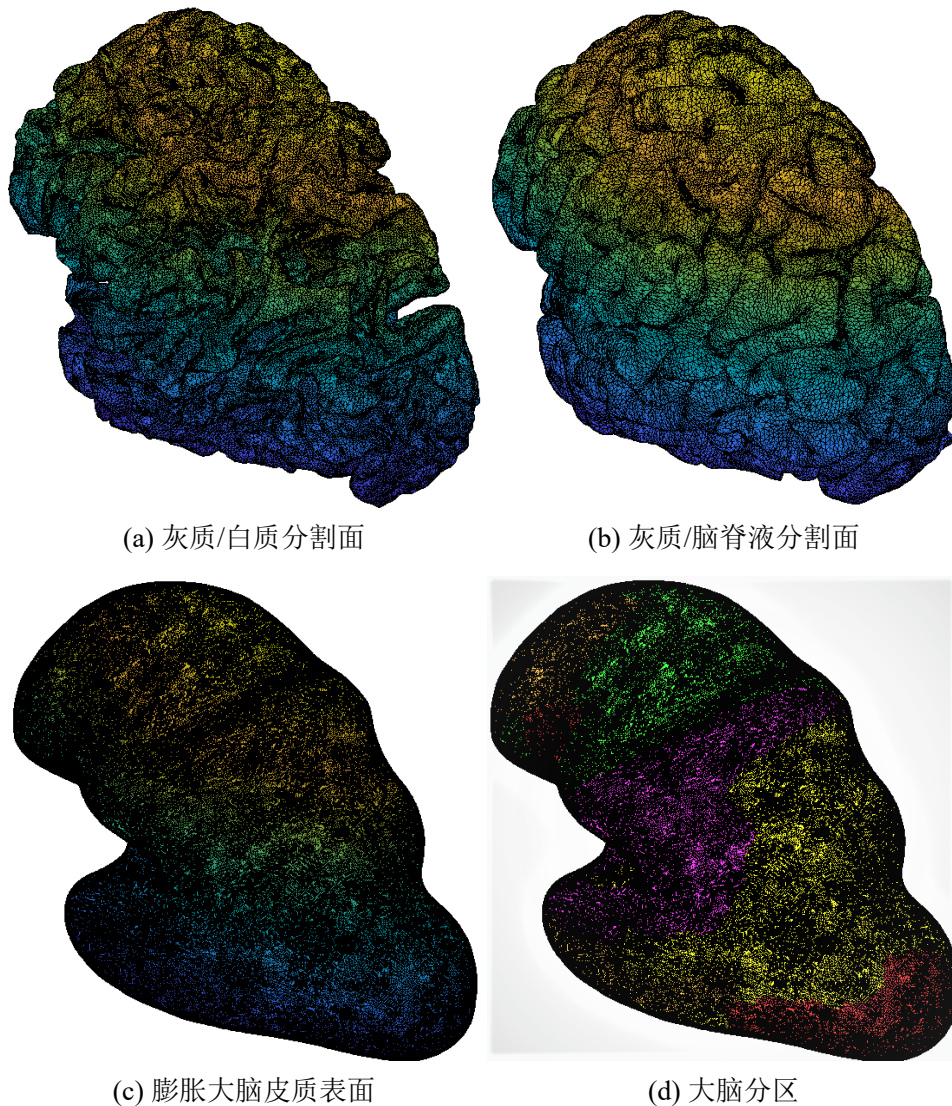


图 5.7 用 FreeSurfer 处理之后的各个分割面点云

- 大脑分区 (region of interest), 见图5.7d;
- 皮层厚度 (cortical thickness): 每一点处的皮层厚度定义为灰质/白质分割面和灰质/脑脊液分割面对应点之间的距离;
- 区域面积 (region area): 对灰质/白质分割面先光滑化, 然后每个区域的面积等于该区域的三角网格的面积;
- 曲率 (curvature): 通过分割面的三角网格可以得到曲面的高斯/平均/主曲率。

我们并不使用 FreeSurfer 算出的曲率, 而是用 WME 重新计算曲面点云的高斯曲率 K 、平均曲率 H 、第二基本形的算子谱 ρ 。

我们使用 Desikan-Killiany 图册对大脑进行分区 (见 FreeSurfer 的皮层分割文档), 通过取平均的方法得到每个区域的特征:

- 区域 ROI_i 的面积

$$S_{ROI_i} = \sum_{j \in ROI_i} S_j$$

- 区域 ROI_i 的平均厚度

$$T_{ROI_i} = \frac{\sum_{j \in ROI_i} T_j S_j}{S_{ROI_i}}$$

- 区域 ROI_i 的平均高斯曲率

$$K_{ROI_i} = \frac{\sum_{j \in ROI_i} K_j S_j}{S_{ROI_i}}$$

- 区域 ROI_i 的平均平均曲率

$$H_{ROI_i} = \frac{\sum_{j \in ROI_i} H_j S_j}{S_{ROI_i}}$$

- 区域 ROI_i 的平均算子谱

$$\rho_{ROI_i} = \frac{\sum_{j \in ROI_i} \rho_j S_j}{S_{ROI_i}}$$

5.3.3 统计回归

我们将 IXI 的 115 个数据作为训练数据集, HCP Lifespan 的 27 个数据作为测试数据集, 由于特征的数量多于训练数据集的数量, 通常的线性回归并不适用, 这里采用岭回归的方法做年龄预测。令 y 表示响应变量 (年龄), y 是 115 维的列向量, 令 X 表示自变量 (特征), X 是 $115 \times p$ 的矩阵, 其中 p 是特征的维数, 考虑如下模型:

- 皮层厚度 (T); 此时 $p = 70$;
- 皮层厚度 + 区域面积 (TS); 此时 $p = 140$;
- 皮层厚度 + 区域面积 + 曲率 (TSC); 此时 $p = 210$;
- 皮层厚度 + 区域面积 + 曲率 + 算子谱 (TSCO); 此时 $p = 280$ 。

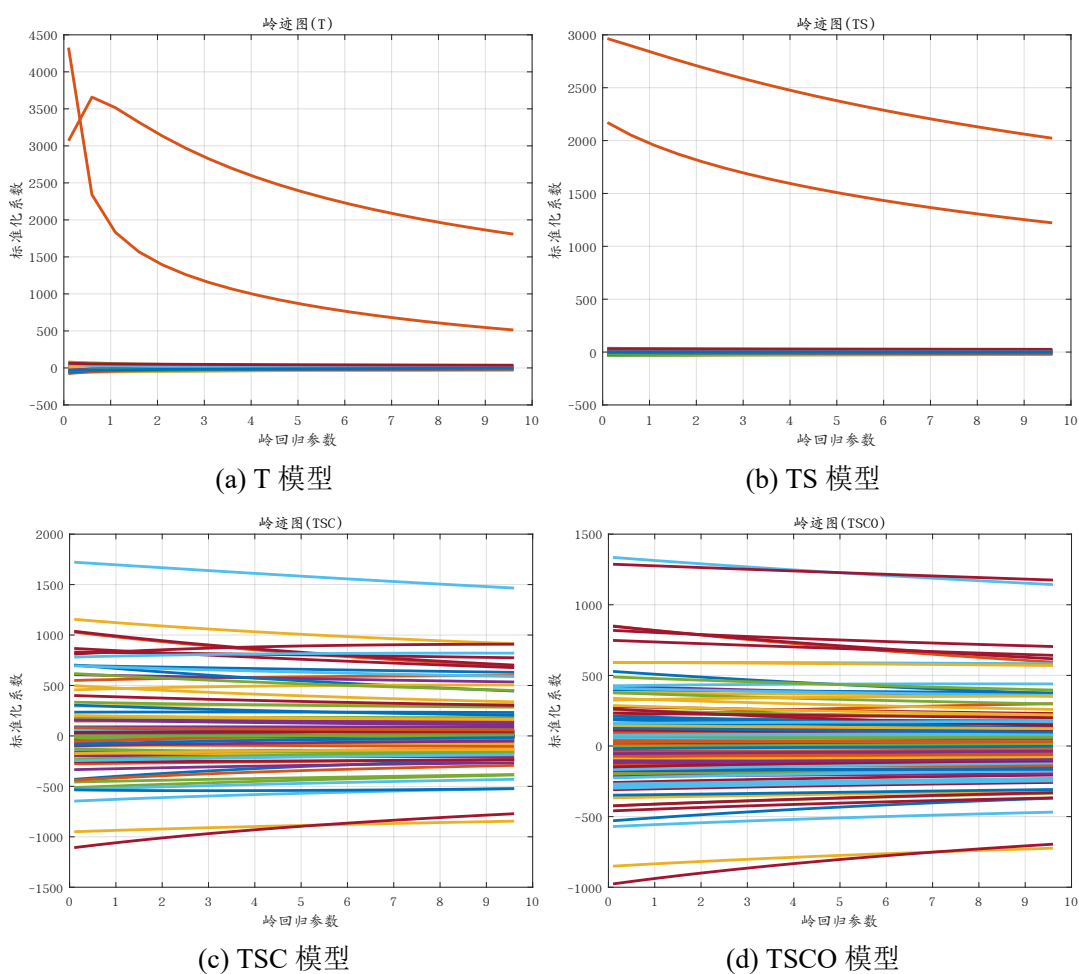


图 5.8 各回归模型岭迹图

在每个模型中，我们极小化如下误差

$$\min_{\beta} f(\beta, \lambda) = \|y - X\beta\|^2 + \lambda\|\beta\|^2 \quad (5.6)$$

其中第二项为 L^2 正则项， λ 是正则化系数。这个优化问题的闭式解为

$$\hat{\beta} = (X^T X + \lambda I)^{-1} X^T y \quad (5.7)$$

为了找到最优的参数 λ ，我们作出岭迹图 (见图5.8)。

岭迹图中曲线趋于稳定时对应的参数就是我们要找的最优的参数。用训练好的模型做预测，对四个模型分别作出真实年龄-预测年龄图 (见图5.9)。

四个模型对应的均方根误差见表5.2。

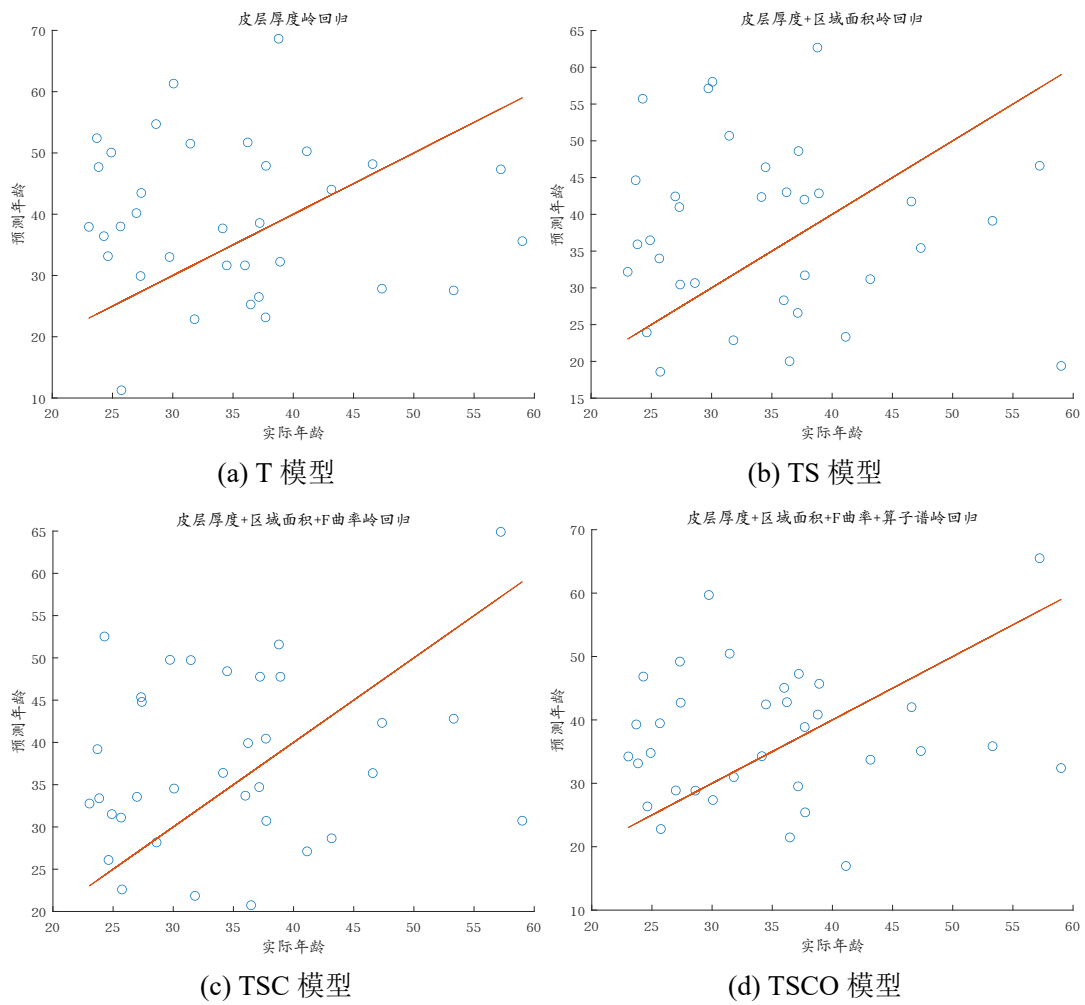


图 5.9 各回归模型年龄预测图

表 5.2 各回归模型预测的均方根误差

	T	TS	TSC	TSCO
RMSE	16.2397	15.6339	13.9210	13.9209

可以看出加入曲率和算子谱之后回归的效果更好。

结论

本文研究了子流形离散点云上的切空间估计和第二基本形估计。对于切空间估计，局部 PCA 是一个常用的方法，但是其收敛性鲜有研究，本文用指数映射的性质给出了经验协方差矩阵的偏差-方差分解，并用 Davis-Kahan 定理和 Weyl 定理给出了切空间估计的最优收敛速率。对于第二基本形估计，本文利用 Weingarten 映射的性质给出了一个快速的算法，并通过建立统计模型给出了这个估计的最优收敛速率。然后将这个算法用于曲率估计、点云简化、统计回归等实际问题，实验结果说明了这个估计的精确性和算法的鲁棒性。

Weingarten 映射是研究子流形不可或缺的工具，它帮助研究者从一个外蕴的角度来研究背景空间。同时，Weingarten 映射与黎曼几何中很多其它重要的概念相关联，曲率只是其中之一。因此，我们希望在未来的工作中探索更多与 Weingarten 映射相关的应用，下面这些课题是值得关心的：

流形上的优化：A. Absil 等人证明了 Weingarten 映射和函数的黎曼 Hessian 有重要联系^[38]，而黎曼 Hessian 在黎曼流形的优化中扮演了重要的角色。特别地，黎曼 Hessian 在二阶优化方法中是极其重要的^[39,40]。我们希望把本文的方法应用于黎曼优化问题，例如低秩矩阵补全^[41]、高维张量补全^[42]和独立子空间分析^[43]。

基于拉普拉斯算子的学习方法：拉普拉斯算子经常出现在各类流形学习方法中，尤其是图拉普拉斯算子，其理论和应用已经得到了长足的发展，并在各个领域发挥其强大的力量，例如计算机视觉^[44]、网络分析^[45]和统计机器学习^[8,9,46]。而在黎曼几何中，Weingarten 映射和拉普拉斯算子有着密切的联系，我们希望能够用 Weingarten 映射来构造点云上的拉普拉斯算子的估计。

点云上的统计推断：在神经科学和脑科学等领域，最近的研究表明曲率可以作为重要的指标出现在统计推断和回归中^[47,48]。我们希望能将 WME 算法应用到生物统计、医学影像处理和神经科学等领域。

参考文献

- [1] Edelsbrunner H, Harer J. Persistent homology – a survey[J]. *Contemporary Mathematics*, 2008, 453: 257–282.
- [2] Zomorodian A, Carlsson G. Computing persistent homology[J]. *Discrete & Computational Geometry*, 2005, 33(2): 249–274.
- [3] Letscher D. On persistent homotopy, knotted complexes and the alexander module[C]. *Proceedings of the 3rd Innovations in Theoretical computer Science Conference*. [S.l.: s.n.], 2012: 428–441.
- [4] Batan M A, Pamuk M, Varli H. Van kampen theorem for persistent fundamental group and interleaving[J]. *arXiv preprint arXiv:1909.08865*, 2019.
- [5] Little A V, Maggioni M, Rosasco L. Multiscale geometric methods for data sets i: Multiscale svd, noise and curvature[J]. *Applied and Computational Harmonic Analysis*, 2017, 43(3): 504–567.
- [6] Singer A, Wu H T. Vector diffusion maps and the connection laplacian[J]. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 2012, 65(8): 1067–1144.
- [7] Li D, Dunson D B. Classification via local manifold approximation[J]. *Biometrika*, 2020, 107(4): 1013–1020.
- [8] Belkin M, Niyogi P. Laplacian eigenmaps and spectral techniques for embedding and clustering[C]. *Advances in Neural Information Processing Systems*. [S.l.: s.n.], 2002: 585–591.
- [9] Belkin M, Niyogi P. Convergence of laplacian eigenmaps[C]. *Advances in Neural Information Processing Systems*. [S.l.: s.n.], 2007: 129–136.
- [10] Aamari E, Levrard C. Nonasymptotic rates for manifold, tangent space and curvature estimation[J]. *The Annals of Statistics*, 2019, 47(1): 177–204.
- [11] Tenenbaum J B, Silva V d, Langford J C. A global geometric framework for nonlinear dimensionality reduction[J]. *Science*, 2000, 290(5500): 2319–2323.
- [12] Roweis S T, Saul L K. Nonlinear dimensionality reduction by locally linear embedding[J]. *Science*, 2000, 290(5500): 2323–2326.
- [13] Donoho D L, Grimes C. Hessian eigenmaps: Locally linear embedding techniques for high-dimensional data[J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2003, 100(10): 5591–5596.
- [14] Davis C, Kahan W M. The rotation of eigenvectors by a perturbation. iii[J]. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 1970, 7(1): 1–46.
- [15] Wedin P. Perturbation bounds in connection with singular value decomposition[J]. *BIT Numerical*

- Mathematics, 1972, 12(1): 99–111.
- [16] Vu V. Singular vectors under random perturbation[J]. *Random Structures & Algorithms*, 2011, 39(4): 526–538.
- [17] Faber N M, Meinders M J, Geladi P, et al. Random error bias in principal component analysis. part i. derivation of theoretical predictions[J]. *Analytica Chimica Acta*, 1995, 304(3): 257–271.
- [18] Anderson T W. Asymptotic theory for principal component analysis[J]. *The Annals of Mathematical Statistics*, 1963, 34(1): 122–148.
- [19] Girshick M A. On the sampling theory of roots of determinantal equations[J]. *The Annals of Mathematical Statistics*, 1939, 10(3): 203–224.
- [20] Lawley D N. Tests of significance for the latent roots of covariance and correlation matrices[J]. *Biometrika*, 1956, 43(1/2): 128–136.
- [21] Kaslovsky D N, Meyer F G. Non-asymptotic analysis of tangent space perturbation[J]. *Information and Inference: a Journal of the IMA*, 2014, 3(2): 134–187.
- [22] Tyagi H, Vural E, Frossard P. Tangent space estimation for smooth embeddings of riemannian manifolds[J]. *Information and Inference: A Journal of the IMA*, 2013, 2(1): 69–114.
- [23] Buet B, Leonardi G P, Masnou S. Discretization and approximation of surfaces using varifolds[J]. *Geometric Flows*, 2018, 3(1): 28–56.
- [24] Aamari E, Levrard C. Stability and minimax optimality of tangential delaunay complexes for manifold reconstruction[J]. *Discrete & Computational Geometry*, 2018, 59: 923–971.
- [25] Lange C, Polthier K. Anisotropic smoothing of point sets[J]. *Computer Aided Geometric Design*, 2005, 22(7): 680–692.
- [26] Huang J, Menq C. Combinatorial manifold mesh reconstruction and optimization from unorganized points with arbitrary topology[J]. *Computer-Aided Design*, 2002, 34(2): 149–165.
- [27] Berkmann J, Caelli T. Computation of surface geometry and segmentation using covariance techniques[J]. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 1994, 16(11): 1114–1116.
- [28] Kalogerakis E, Simari P, Nowrouzezahrai D, et al. Robust statistical estimation of curvature on discretized surfaces[C]. *Proceedings of The Fifth Eurographics Symposium on Geometry Processing*. [S.l.: s.n.], 2007: 13–22.
- [29] Cazals F, Pouget M. Estimating differential quantities using polynomial fitting of osculating jets[J]. *Computer Aided Geometric Design*, 2005, 22(2): 121–146.
- [30] Mériqot Q, Ovsjanikov M, Guibas L J. Voronoi-based curvature and feature estimation from point

- clouds[J]. *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics*, 2011, 17(6): 743–756.
- [31] Fleishman S, Cohen-Or D, Silva C T. Robust moving least-squares fitting with sharp features[J]. *ACM Transactions on Graphics*, 2005, 24(3): 544–552.
- [32] Lipman Y, Cohen-Or D, Levin D. Data-dependent mls for faithful surface approximation[C]. *Proceedings of The Fifth Eurographics Symposium on Geometry Processing*. [S.l.: s.n.], 2007: 59–67.
- [33] Jenke P, Wand M, Straßer W. Patch-graph reconstruction for piecewise smooth surfaces[C]. *Vision, Modeling, and Visualization 2008*. [S.l.: s.n.], 2008: 3–12.
- [34] Rabbani T, Van Den Heuvel F A, Vosselmann G. Segmentation of point clouds using smoothness constraint[J]. *International Archives of Photogrammetry, Remote Sensing and Spatial Information Sciences*, 2006, 36(5): 248–253.
- [35] Magid E, Soldea O, Rivlin E. A comparison of gaussian and mean curvature estimation methods on triangular meshes of range image data[J]. *Computer Vision and Image Understanding*, 2007, 107(3): 139 – 159.
- [36] Pauly M, Gross M, Kobbelt L P. Efficient simplification of point-sampled surfaces[C]. *IEEE Visualization, 2002. VIS 2002*. [S.l.: s.n.], 2002: 163–170.
- [37] Wang J, Li W, Miao W, et al. Age estimation using cortical surface pattern combining thickness with curvatures[J]. *Medical & Biological Engineering & Computing*, 2014, 52(4): 331–341.
- [38] Absil P A, Mahony R, Trumpp J. An extrinsic look at the riemannian hessian[C]. *International Conference on Geometric Science of Information*. [S.l.]: Springer, 2013: 361–368.
- [39] Boumal N. An introduction to optimization on smooth manifolds[J]. Available online, 2020.
- [40] Huang W, Gallivan K A, Absil P A. A broyden class of quasi-newton methods for riemannian optimization[J]. *SIAM Journal on Optimization*, 2015, 25(3): 1660–1685.
- [41] Vandereycken B. Low-rank matrix completion by riemannian optimization[J]. *SIAM Journal on Optimization*, 2013, 23(2): 1214–1236.
- [42] Steinlechner M. Riemannian optimization for high-dimensional tensor completion[J]. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 2016, 38(5): S461–S484.
- [43] Nishimori Y, Akaho S, Plumbley M D. Riemannian optimization method on the flag manifold for independent subspace analysis[C]. *International Conference on Independent Component Analysis and Signal Separation*. [S.l.]: Springer, 2006: 295–302.
- [44] Dinesh C, Cheung G, Bajić I V. Point cloud denoising via feature graph laplacian regularization[J]. *IEEE Transactions on Image Processing*, 2020, 29: 4143–4158.
- [45] Grindrod P, Higham D J, Noferini V. The deformed graph laplacian and its applications to network

- centrality analysis[J]. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 2018, 39(1): 310–341.
- [46] Belkin M, Niyogi P. Semi-supervised learning on riemannian manifolds[J]. *Machine learning*, 2004, 56(1-3): 209–239.
- [47] Luders E, Thompson P M, Narr K L, et al. A curvature-based approach to estimate local gyrification on the cortical surface[J]. *NeuroImage*, 2006, 29(4): 1224–1230.
- [48] Yue X, Robert S, Ungerleider L G. Curvature processing in human visual cortical areas[J]. *NeuroImage*, 2020: 117295.
- [49] Rusinkiewicz S. Estimating curvatures and their derivatives on triangle meshes[C]. 2nd International Symposium on 3D Data Processing, Visualization and Transmission. [S.l.]: IEEE, 2004: 486–493.
- [50] Taubin G. Estimating the tensor of curvature of a surface from a polyhedral approximation[C]. *Proceedings of IEEE International Conference on Computer Vision*. [S.l.]: IEEE, 1995: 902–907.
- [51] Yang H B. Industrial design applications of surface reconstruction algorithm based on three dimensional point cloud data[C]. 2017 International Conference on Robots & Intelligent System (ICRIS). [S.l.: s.n.], 2017: 178–181.
- [52] Kim S J, Kim C H, Levin D. Surface simplification using a discrete curvature norm[J]. *Computers & Graphics*, 2002, 26(5): 657 – 663.
- [53] Yamany S M, Farag A A. Surface signatures: an orientation independent free-form surface representation scheme for the purpose of objects registration and matching[J]. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 2002, 24(8): 1105–1120.
- [54] Yuan T Y, Peng X B, Zhang D D. Direct rapid prototyping from point cloud data without surface reconstruction[J]. *Computer-Aided Design and Applications*, 2017, 15: 1–9.
- [55] Meek D S, Walton D J. On surface normal and gaussian curvature approximations given data sampled from a smooth surface[J]. *Computer-Aided Geometric Design*, 2000, 17(6): 521 – 543.
- [56] Dyn N, Hormann K, Kim S J, et al. Optimizing 3d triangulations using discrete curvature analysis [J]. *Mathematical Methods for Curves and Surfaces*, 2001, 1: 135–146.
- [57] Sander P T, Zucker S W. Inferring surface trace and differential structure from 3-d images[J]. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 1990, 12(9): 833–854.
- [58] Stokely E M, Wu S Y. Surface parametrization and curvature measurement of arbitrary 3-d objects: five practical methods[J]. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 1992, 14(8): 833–840.
- [59] Milnor J W, Stasheff J D. *The annals of mathematics studies: Characteristic classes*[M]. Princeton, N.J.: Princeton University Press, 1974: 55–73.

- [60] Rao C R. Springer series in statistics: Linear models and generalizations : least squares and alternatives[M]. 3rd extended ed. Berlin ; New York: Springer, 2008: 73–99.
- [61] Lee S G, Zou F, Wright F A. Convergence and prediction of principal component scores in high-dimensional settings[J]. *The Annals of Statistics*, 2010, 38(6): 3605–3629.
- [62] Hoffman R, Jain A K. Segmentation and classification of range images[J]. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 1987, PAMI-9(5): 608–620.
- [63] Hoppe H, DeRose T, Duchamp T, et al. Surface reconstruction from unorganized points[C]. *Proceedings of The 19th Annual Conference on Computer Graphics and Interactive Techniques*. [S.l.: s.n.], 1992: 71–78.
- [64] Huang J B, Menq C H. Automatic data segmentation for geometric feature extraction from unorganized 3-d coordinate points[J]. *IEEE Transactions on Robotics and Automation*, 2001, 17(3): 268–279.
- [65] Milroy M J, Bradley C, Vickers G W. Segmentation of a wrap-around model using an active contour [J]. *Computer-Aided Design*, 1997, 29: 299–320.
- [66] OuYang D S, Feng H Y. On the normal vector estimation for point cloud data from smooth surfaces [J]. *Computer-Aided Design*, 2005, 37(10): 1071–1079.
- [67] Tang C K, Medioni G. Curvature-augmented tensor voting for shape inference from noisy 3d data [J]. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 2002, 24(6): 858–864.
- [68] Yang H, Lee E. Segmentation of measured point data using a parametric quadric surface approximation[J]. *Computer-Aided Design*, 1999, 31: 449–457.
- [69] do Carmo M P. *Differential geometry of curves and surfaces*[M]. Englewood Cliffs, N.J.: Prentice-Hall, 1976: 125–134.
- [70] Mitra N J, Nguyen A, Guibas L. Estimating surface normals in noisy point cloud data[J]. *International Journal of Computational Geometry & Applications*, 2004, 14(4-5): 261–276.
- [71] Amenta N, Bern M. Surface reconstruction by voronoi filtering[J]. *Discrete & Computational Geometry*, 1999, 22(4): 481–504.
- [72] Dey T K, Giesen J, Goswami S, et al. Shape dimension and approximation from samples[J]. *Discrete & Computational Geometry*, 2003, 29(3): 419–434.
- [73] Golub G, Loan C V. *Matrix computations*[M]. Baltimore: John Hopkins University Press, 1996: 35–55.
- [74] Levin D. The approximation power of moving least-squares[J]. *Mathematics of Computation*, 1998, 67(224): 1517–1531.

- [75] Mack Y P, Rosenblatt M. Multivariate k-nearest neighbor density estimates[J]. *Journal of Multivariate Analysis*, 1979, 9(1): 1–15.
- [76] Woo H, Kang E, Wang S Y, et al. A new segmentation method for point cloud data[J]. *International Journal of Machine Tools and Manufacture*, 2002, 42(2): 167–178.
- [77] Wang W P, Pottmann H, Liu Y. Fitting b-spline curves to point clouds by curvature-based squared distance minimization[J]. *ACM Transactions on Graphics*, 2006, 25(2): 214–238.
- [78] Berger M, Tagliasacchi A, Lee M S, et al. A survey of surface reconstruction from point clouds[J]. *Computer Graphics Forum*, 2016, 36(1): 301–329.
- [79] Tang Y Z, Feng J Q. Multi-scale surface reconstruction based on a curvature-adaptive signed distance field[J]. *Computers & Graphics*, 2018, 70: 28 – 38.
- [80] Ozakin A, Gray A G. Submanifold density estimation[C]. *Advances in Neural Information Processing Systems*. [S.l.: s.n.], 2009: 1375–1382.
- [81] Fan K, Hoffman A J. Some metric inequalities in the space of matrices[J]. *Proceedings of the American Mathematical Society*, 1955, 6(1): 111–116.
- [82] Alexander S B, Bishop R L. Gauss equation and injectivity radii for subspaces in spaces of curvature bounded above[J]. *Geometriae Dedicata*, 2006, 117(1): 65–84.
- [83] Niyogi P, Smale S, Weinberger S. Finding the homology of submanifolds with high confidence from random samples[J]. *Discrete & Computational Geometry*, 2008, 39(1-3): 419–441.
- [84] Cao Y, Li D, Sun H, et al. Efficient weingarten map and curvature estimation on manifolds[J]. *Machine Learning*, 2021.

攻读学位期间发表论文与研究成果清单

期刊论文

- [1] **Y. Cao**, D. Li, H. Sun, A.H. Assadi, S. Zhang, Efficient Weingarten Map and Curvature Estimation on Manifolds, *Machine Learning*, 2021, doi: <https://doi.org/10.1007/s10994-021-05953-4>. (SCI)
- [2] F. Sun, **Y. Cao**, S. Zhang, H. Sun, The Bayesian Inference of Pareto Models Based on Information Geometry, *Entropy*, 2021, 23(1), 45, doi: <https://doi.org/10.3390/e23010045>. (SCI)
- [3] N.W. Aung, **Y. Cao**, S. Zhang, H. Sun, The Geometric Approach of Riccati Equations. *Transactions of Beijing Institute of Technology*, 2020, 40(4):448-451, doi: [10.15918/j.tbit1001-0645.2019.028](https://doi.org/10.15918/j.tbit1001-0645.2019.028). (EI)
- [4] J. Yi, S. Zhang, **Y. Cao**, E. Zhang, H. Sun, Rigid Shape Registration Based on Extended Hamiltonian Learning, *Entropy*, 2020, 22(5):539, doi: <https://doi.org/10.3390/e22050539>. (SCI)
- [5] Y. Wang, H. Sun, **Y. Cao**, S. Zhang, Torsion Discriminance for Stability of Linear Time-Invariant Systems, *Mathematics*, 2020, 8(3):386, doi: <https://doi.org/10.3390/math8030386>. (SCI)
- [6] N.W. Aung, S. Zhang, **Y. Cao**, H. Sun, Applications of Jacobi Matrices in Kinematics of Robots. *Transactions of Beijing Institute of Technology*, 2020, 40(5):576-580, doi: [10.15918/j.tbit1001-0645.2017.168](https://doi.org/10.15918/j.tbit1001-0645.2017.168). (EI)
- [7] Y. Luo, S. Zhang, **Y. Cao**, H. Sun, Geometric Characteristics of Wasserstein Metric on SPD(n). arXiv: 2012.07106.
- [8] Y. Wang, H. Sun, Y. Song, **Y. Cao**, S. Zhang, Description of Stability for Two and Three-Dimensional Linear Time-Invariant Systems Based on Curvature and Torsion. arXiv: 1808.00290
- [9] H. Sun, S. Zhang, M. He, J. Chen, M. Li, **Y. Cao**, Radar Optimal Deployment Based on Graph Theory. *Transactions of Beijing Institute of Technology*, 2020, 40(9):1026-1032,

doi: [10.15918/j.tbit1001-0645.2018.371](https://doi.org/10.15918/j.tbit1001-0645.2018.371). (EI)

国际会议

- [10] Y. Cao, S. Zhang, F. Yan, W. Li, F. Sun, H. Sun, Unsupervised Environmental Sound Classification Based On Topological Persistence, *IEEE International Conference on Signal, Information and Data Processing 2019(ICSIDP 2019)*, Chongqing, China, pp. 1-5, doi: [10.1109/ICSIDP47821.2019.9173135](https://doi.org/10.1109/ICSIDP47821.2019.9173135). (EI)
- [11] S. Zhang, Y. Cao, W. Li, F. Yan, Y. Luo, H. Sun, A New Riemannian Structure in SPD(n), *IEEE International Conference on Signal, Information and Data Processing 2019(ICSIDP 2019)*, Chongqing, China. pp. 1-5, doi: [10.1109/ICSIDP47821.2019.9173017](https://doi.org/10.1109/ICSIDP47821.2019.9173017). (EI)

科研项目

- [12] 国家重点研发计划子课题《主动健康与老龄化科技应对》，参加，2020-2023，20万元；
- [13] 国家自然科学基金面上项目《完备非紧流形上的里奇流》，参加，2020-2023，48万元；
- [14] 横向课题《流形几何度量与高效计算方法》，参加，2020-2021，120万元；
- [15] 中央军委科技委专项《基于信息几何的非欧数据处理方法》，参加，2019-2022，180万元。

致谢

我要非常感谢孙华飞老师对我一直以来的帮助，七年之前当我成为北理工的一名本科生的时候，我就有幸认识了孙老师，我想这是奇妙的缘分，是我的幸运。本科阶段我在孙老师的指引下阅读了很多和几何有关的书籍，诸多美妙的理论让我在几何的世界流连忘返，这是属于我的最宝贵的精神财富。在研究生阶段我又在孙老师的建议下将研究目标投向应用数学和统计，并且很幸运地做出一些原创性的成果。在 2021 年的最难申请季，也正是孙老师的推荐和帮助，我才能突破重围，拿到诸多美英名校的 PhD 全奖 offer。我一定要坚持奋斗，断不能辜负孙老师的栽培和期望。

我还要感谢李帝东师兄在硕士期间对我的帮助。我的第一篇论文经历异常坎坷，从大四暑假到研三，这篇论文被拒稿和修改无数次，最后总算是被接受了。如果没有师兄的帮助和敦促，它势必早被我放弃。在撰写这篇文章的过程中，我从师兄那学到了很多宝贵的知识和技巧，这些都是无法从书本上体会到的。师兄一直是我的榜样和目标，我希望通过我的不懈努力跟上他的脚步。

我要感谢所有爱我和支持我的人。读到硕士我才明白，理想不是做研究的充分条件，甚至也不是必要条件。没有人能超越生活，尤其是并不富裕的生活。我要感谢默默支持我的父母，尽管他们更想让我尽早找一份稳定的工作。我要感谢我的室友，没有他我的生活将会缺少很多欢乐，我也很羡慕他拥有杀死一切负面情绪的能力。我要感谢我的女朋友，和她在一起的时候我卸下了所有的负累，和她在一起的时候永远是快乐的。

最后我要感谢不断前行的自己。每个人都要学习如何与别人相处，也要学会如何与自己相处。我最向往诗人米沃什所描述的一种状态：

“想到故我今我同为一并不使我难为情

在我身上没有痛苦

直起腰来，我望见蓝色的大海和帆影”