

Лекция 10

Быстрый поиск ближайших соседей

Е. А. Соколов
ФКН ВШЭ

26 марта 2020 г.

1 Классификатор k ближайших соседей

Рассмотрим задачу классификации: $\mathbb{Y} = \{1, \dots, K\}$. Пусть дана обучающая выборка $X = (x_i, y_i)_{i=1}^\ell$ и функция расстояния $\rho : \mathbb{X} \times \mathbb{X} \rightarrow [0, \infty)$. Мы не будем требовать, чтобы функция расстояния являлась метрикой — достаточно, чтобы она была симметричной и неотрицательной. Не будем строить модель на этапе обучения, а вместо этого просто запомним обучающую выборку. Пусть теперь требуется классифицировать новый объект u . Расположим объекты обучающей выборки X в порядке неубывания расстояний до u :

$$\rho(u, x_u^{(1)}) \leq \rho(u, x_u^{(2)}) \leq \dots \leq \rho(u, x_u^{(\ell)}),$$

где через $x_u^{(i)}$ обозначается i -й сосед объекта u . Алгоритм *k ближайших соседей* (k nearest neighbours, k NN) относит объект u к тому классу, представителей которого окажется больше всего среди k его ближайших соседей:

$$a(u) = \arg \max_{y \in \mathbb{Y}} \sum_{i=1}^k [y_u^{(i)} = y]. \quad (1.1)$$

§1.1 Метод парзеновского окна

Проблема формулы (1.1) состоит в том, что она никак не учитывает расстояния до соседей. Действительно, если рассматривается 7 ближайших соседей, и для объекта u ближайшие два объекта находятся на расстоянии $\rho(u, x) \approx 2$, а остальные — на расстоянии $\rho(u, x) \geq 100$, то было бы логично обращать внимание только на первые два объекта. Чтобы добиться этого, можно ввести веса в модель:

$$a(u) = \arg \max_{y \in \mathbb{Y}} \sum_{i=1}^k w(i, u, x_u^{(i)}) [y_u^{(i)} = y]. \quad (1.2)$$

Веса можно делать затухающими по мере роста номера соседа i (например, $w(i, u, x) = \frac{k+1-i}{k}$), но лучше использовать расстояния при их вычислении. Это делается в *методе парзеновского окна*:

$$a(u) = \arg \max_{y \in \mathbb{Y}} \sum_{i=1}^k K \left(\frac{\rho(u, x_u^{(i)})}{h} \right) [y_u^{(i)} = y], \quad (1.3)$$

где K — это ядро, h — ширина окна.

2 Ядровая регрессия

В методе k ближайших соседей (1.3) мы, по сути, максимизировали взвешенную долю правильных ответов среди соседей при предсказании константой y . Иными словами, мы старались в каждой точке пространства выбрать такое значение модели, которое было бы оптимально для некоторой окрестности этой точки.

Попробуем воспользоваться этим соображением, чтобы обобщить подход на задачу регрессии. Будем выбирать в каждой точке такой ответ, который лучшим образом приближает целевую переменную для k ближайших соседей:

$$a(u) = \arg \min_{c \in \mathbb{R}} \sum_{i=1}^k K \left(\frac{\rho(u, x_u^{(i)})}{h} \right) (c - y_u^{(i)})^2.$$

Можно в явном виде выписать решение оптимизационной задачи:

$$a(u) = \frac{\sum_{i=1}^k K \left(\frac{\rho(u, x_u^{(i)})}{h} \right) y_u^{(i)}}{\sum_{i=1}^k K \left(\frac{\rho(u, x_u^{(i)})}{h} \right)} \quad (2.1)$$

Данную модель иногда называют формулой Надарая-Ватсона.

3 Методы поиска ближайших соседей

§3.1 Точные методы

Разберем методы поиска ближайших соседей для евклидовой метрики. Будем рассматривать задачу поиска одного ближайшего соседа, все методы несложно обобщаются на случай с $k > 1$.

Если просто перебирать все объекты обучающей выборки, выбирая наиболее близкий к новому объекту, то получаем сложность $O(\ell d)$.

Можно выбрать подмножество признаков, и сначала вычислить расстояние только по этим координатам. Оно является нижней оценкой на полноценное расстояние, и если оно уже больше, чем текущий наилучший результат, то данный объект можно больше не рассматривать в качестве кандидата в ближайшего соседа. Такой подход является чисто эвристическим и не гарантирует сублинейной сложности по размеру обучения.

kd-деревья. Одной из структур данных, позволяющих эффективно искать ближайших соседей к заданной точке, является *kd-дерево*. Оно разбивает пространство на области (каждая вершина производит разбиение по определенной координате), и каждый лист соответствует одному объекту из обучающей выборки. Обходя это дерево определенным образом, можно найти точку из обучения, ближайшую к заданной. Если размерность пространства небольшая (10-20), то данный подход позволяет находить ближайшего соседа за время порядка $O(\log \ell)$.

Экспериментально было установлено, что в пространствах большой размерности сложность поиска ближайшего соседа в kd-дереве сильно ухудшается и приобретает линейный порядок сложности [1].

§3.2 Приближенные методы

Есть два способа борьбы с высокой сложностью поиска ближайших соседей при большом числе признаков:

1. Запоминать не всю обучающую выборку, а лишь ее представительное подмножество. Существует большое число эвристических алгоритмов для отбора эталонных объектов (например, STOLP).
2. Искать k ближайших соседей приближенно, то есть разрешать результату поиска быть чуть дальше от нового объекта, чем k его истинных соседей. Ниже мы подробно разберем этот подход.

Опишем метод приближенного поиска ближайших соседей LSH (locality-sensitive hashing). Его идея заключается в построении такой хэш-функции для объектов выборки, которая с большой вероятностью присваивает одинаковые значения близким объектам и разные значения отдаленным объектам. Дадим формальное определение.

Опр. 3.1. Семейство функций \mathcal{F} называется (d_1, d_2, p_1, p_2) -чувствительным, если для всех $x, y \in \mathbb{X}$ выполнено:

- Если $\rho(x, y) \leq d_1$, то $\mathbb{P}_{f \in \mathcal{F}}[f(x) = f(y)] \geq p_1$.
- Если $\rho(x, y) \geq d_2$, то $\mathbb{P}_{f \in \mathcal{F}}[f(x) = f(y)] \leq p_2$.

Здесь под вероятностью $\mathbb{P}_{f \in \mathcal{F}}$ понимается равномерное распределение на всех функциях семейства \mathcal{F} .

Отметим, что определение имеет смысл лишь если $d_1 \leq d_2$ и $p_1 \geq p_2$.

Пример. Рассмотрим пример семейства хэш-функций для меры Джаккарда, которое носит название MinHash. Пусть объекты представляют собой множества, являющиеся подмножествами универсального упорядоченного множества $U = \{u_1, \dots, u_n\}$. Выберем перестановку π на элементах этого множества, и определим хэш-функцию $f_\pi(A)$ так, чтобы она возвращала номер первого элемента в данной перестановке, входящего в A :

$$f_\pi(A) = \min\{\pi(i) \mid u_i \in A\}.$$

Это преобразование можно интерпретировать следующим образом. Будем считать, что элементы наших множеств — это слова. Перестановка π задает *степени важности* слов (чем меньше $\pi(i)$, тем важнее i -е слово). Например, если мы решаем задачу классификации текстов на научные и ненаучные, то предлоги и союзы должны иметь малый уровень важности, а слова «аннотация», «бустинг», «переобучение» — высокий уровень важности, поскольку их наличие свидетельствует о научности текста.

Описанная хэш-функция возвращает для документа уровень важности самого важного слова в нем — в нашем примере это означает, что мы находим самое «научное» слово в тексте, и характеризуем документ именно этим словом.

Покажем, что множество всех MinHash-функций $\mathcal{F} = \{f_\pi \mid \pi \in \text{Sym}(U)\}$ является (d_1, d_2, p_1, p_2) -чувствительным.

Сначала докажем следующее утверждение: вероятность того, что случайно выбранная функция $f_\pi \in \mathcal{F}$ будет принимать одинаковые значения на двух заданных множествах A и B , равна коэффициенту Джаккарда $\frac{|A \cap B|}{|A \cup B|} = 1 - \rho_J(A, B)$ этих двух множеств. Разобьем элементы u универсального множества U на три типа:

1. $u \in A, u \in B$.
2. $u \in A, u \notin B$ или $u \notin A, u \in B$.
3. $u \notin A, u \notin B$.

Обозначим число объектов первого типа через p , а число объектов второго типа — через q . Заметим, что через p и q можно выразить коэффициент Джаккарда для множеств A и B : $1 - \rho_J(A, B) = \frac{p}{p+q}$.

Вероятность того, что значения случайно выбранной хэш-функции будут одинаковыми на множествах A и B , равна вероятности того, что в случайно выбранной перестановке множества U элемент первого типа встретится раньше элемента второго типа; элементы третьего типа на значение хэш-функции никак не влияют. Последняя же вероятность равна $\frac{p}{p+q}$. Утверждение доказано.

Пусть расстояние Джаккарда между двумя множествами $\rho_J(A, B)$ не превосходит d_1 . Тогда для коэффициента Джаккарда выполнено $1 - \rho_J(A, B) \geq 1 - d_1$, а значит, для вероятности p_1 того, что случайно выбранная функция из \mathcal{F} даст одинаковые хэши для этих множеств, выполнено $p_1 \geq 1 - d_1$. Отсюда получаем, что \mathcal{F} является $(d_1, d_2, 1 - d_1, 1 - d_2)$ -чувствительным семейством.

Композиция хэш-функций. Семейство хэш-функций уже можно использовать для поиска ближайших соседей. Выберем случайную хэш-функцию f , создадим таблицу T , и разместим каждый объект обучающей выборки x в ячейке $f(x)$ этой хэш-таблицы¹. Пусть теперь требуется найти k ближайших соседей для объекта u . Вычислим для него хэш $f(u)$, возьмем все объекты из соответствующей ячейки хэш-таблицы, и вернем из них k ближайших к u . Однако, как правило, разница между вероятностями p_1 и p_2 оказывается не очень большой, поэтому либо истинные k ближайших соседей не окажутся в ячейке $f(u)$, и результат будет далек от оптимального, либо в эту ячейку попадет слишком много лишних объектов, и тогда поиск окажется слишком трудозатратным.

Чтобы увеличить разницу между вероятностями p_1 и p_2 , можно объединять несколько простых хэш-функций из семейства в одну сложную. Выберем для этого m функций f_1, \dots, f_m из \mathcal{F} и построим новую функцию $g_1(x) = (f_1(x), \dots, f_m(x))$. Повторим процедуру L раз и получим L таких функций $g_1(x), \dots, g_L(x)$. Для каждой функции $g_i(x)$ создадим свою хэш-таблицу T_i , и поместим каждый объект обучающей выборки x в ячейку $g_i(x)$ этой таблицы. Чтобы найти k ближайших соседей

¹Поскольку множество значений хэш-функции может быть большим, обычно таблица T сама является хэш-таблицей.

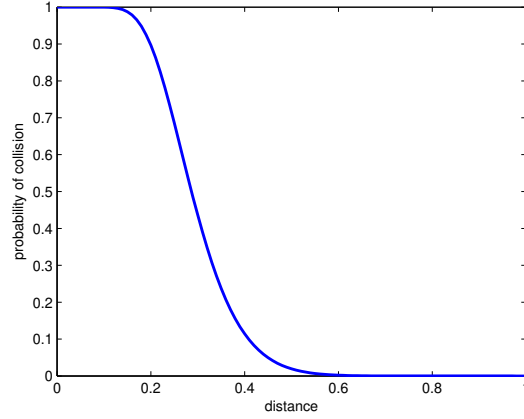


Рис. 1. Пример зависимости вероятности того, что два объекта будут признаны алгоритмом как схожие, от расстояния между этими объектами.

для нового объекта u , выберем объекты из ячеек $g_1(x), \dots, g_L(x)$ таблиц T_1, \dots, T_L соответственно, и вернем k наиболее близких из них.

Данный алгоритм имеет два параметра: число базовых функций в одной композиции m , и число таких композиций L . Увеличение параметра m приводит к уменьшению вероятности того, что два непохожих объекта будут признаны схожими. Действительно, для того, чтобы значения композиции совпали на двух объектах, необходимо, чтобы совпали значения m базовых хэш-функций. Если расстояние между этими объектами велико, т.е. $\rho(x, y) \geq d_2$, то вероятность совпадения значений m базовых функций не будет превышать p_2^m . В то же время чрезмерное увеличение параметра m может привести к тому, что практически все объекты попадут в разные ячейки хэш-таблицы, и для новых объектов не будет находится ни одного соседа.

Увеличение же параметра L приводит к увеличению вероятности того, что два схожих объекта будут действительно признаны схожими. Действительно, объект x будет рассмотрен нашим алгоритмом как кандидат в k ближайших соседей для u , если хотя бы один из хэшей $g_1(x), \dots, g_L(x)$ совпадет с хэшем $g_1(u), \dots, g_L(u)$ соответственно. Если объекты x и u действительно схожи, то есть $\rho(x, u) \leq d_1$, то вероятность того, что они будут признаны схожими, больше или равна $1 - (1 - p_1)^L$ (в случае $m = 1$). В то же время чрезмерное увеличение параметра L приведет к тому, что для нового объекта будет рассматриваться слишком много кандидатов в k ближайших соседей, что приведет к снижению эффективности алгоритма.

Итоговый алгоритм является $(d_1, d_2, 1 - (1 - p_1^m)^L, 1 - (1 - p_2^m)^L)$ -чувствительным. Вид зависимости вероятности коллизии от расстояния между объектами приведен на рис. 1 (для $m = 10, L = 20$). Видно, что описанный способ композиции базовых хэш-функций позволяет добиться того, что вероятность коллизии двух объектов как функция от расстояния имеет резкий скачок в определенной точке (в нашем примере 0.7). За счет выбора параметров L и m можно менять положение точки скачка, а также регулировать сложность алгоритма. На практике эти параметры выбирают с помощью кросс-валидации.

Отметим также, что биты хэшей $g_1(u), \dots, g_L(u)$ можно использоваться как признаки, над которыми будет запускаться метод k ближайших соседей.

Теоретические гарантии. Будем говорить, что алгоритм решает задачу поиска c -ближайшего соседа, если для нового объекта u он с вероятностью $1 - \varepsilon$ возвращает объект выборки, удаленный от u не более чем в c раз сильнее, чем ближайший к u объект выборки. Существует теоретический результат, который говорит, что можно выбрать параметры L и m так, что описанный алгоритм будет решать задачу поиска c -ближайшего соседа за $O(d\ell^r \log \ell)$, где r для многих функций расстояния имеет порядок $1/c$ [2].

Хэш-функции для косинусного расстояния. Для косинусного расстояния используют следующее семейство функций:

$$\mathcal{F} = \{f_w(x) = \text{sign}\langle w, x \rangle \mid w \in \mathbb{R}^d\}.$$

Каждая хэш-функция соответствует некоторой гиперплоскости, проходящей через начало координат, и возвращает для каждого вектора либо $+1$, либо -1 в зависимости от того, по какую сторону от этой гиперплоскости он находится.

Хэш-функции для евклидовой метрики. В данном случае хэш-функция соответствует некоторой прямой в d -мерном пространстве, разбитой на отрезки длины r . Функция проецирует объект x на эту прямую и возвращает номер отрезка, в который попала проекция. Формально, семейство хэш-функций имеет вид

$$\mathcal{F} = \left\{ f_{w,b}(x) = \left\lfloor \frac{\langle w, x \rangle + b}{r} \right\rfloor \mid w \in \mathbb{R}^d, b \in [0, r) \right\}.$$

При этом, в отличие от описанных выше семейств, функции выбираются не равномерно: каждая компонента проекционного вектора w выбирается из стандартного нормального распределения $\mathcal{N}(0, 1)$.

Данное семейство может быть обобщено на расстояния Минковского с $p \in (0, 2]$. В этом случае компоненты вектора w должны выбираться из p -устойчивого распределения [3]. Например, для $p = 1$ таковым является распределение Коши.

LSH forest. В методе LSH присутствует два параметра: размерность хэша m и число хэшей L . Оба следует подбирать под конкретную задачу, и от их выбора может сильно зависеть качество поиска соседей. Один из вариантов решения — алгоритм *LSH forest* [4], в котором предлагается применить каждую хэш-функцию g_i к выборке и построить префиксное дерево на её выходах. Затем в качестве ближайших соседей для нового объекта объявляются те объекты из выборки, с которыми он оказался в наиболее глубоких листовых вершинах. Такой подход позволяет устранить зависимость от размера хэша и количества хэш-функций и получать хорошее качество при их фиксированных значениях.

Список литературы

- [1] Weber, R., Schek, H. J., Blott, S. (1998). A Quantitative Analysis and Performance Study for Similarity-Search Methods in High-Dimensional Spaces. // Proceedings of the 24th VLDB Conference, New York C, 194–205.

- [2] *Andoni, A., Indyk, P.* (2008). Near-optimal hashing algorithms for approximate nearest neighbor in high dimensions. // Communications of the ACM, 51(1), 117.
- [3] *Datar, M., Immorlica, N., Indyk, P., Mirrokni, V. S.* (2004). Locality-sensitive hashing scheme based on p-stable distributions. // Proceedings of the twentieth annual symposium on Computational geometry - SCG '04, 253.
- [4] *Bawa, Mayank and Condie, Tyson and Ganesan, Prasanna* (2005). LSH Forest: Self-tuning Indexes for Similarity Search. // Proceedings of the 14th International Conference on World Wide Web.