Технический отчет команды «Три сигмы»

Состав команды: Елизарьев Ярослав Владимирович (ЭФ НГУ), Метлин Александр Дмитриевич (ФИТ НГУ), Кузнецов Никита Сергеевич (ЭФ НГУ)

Введение

Перед нами стояла довольно распространенная в наше время задача в области искусственного интеллекта – поиск ближайших соседей. Проблема заключается в том, что точный поиск ближайших соседей оказывается очень затратным с точки зрения памяти и времени, и необходимо ускорить этот процесс для быстроты работы основного алгоритма (например LLM). Очевидно, что для увеличения скорости придется чем-то пожертвовать, в нашем случае это была точность поиска. Мы должны были разработать алгоритм приближенного поиска ближайших соседей (ANN).

Существующие ANN-search алгоритмы

Очевидно, мы далеко не первые, кто решает подобную задачу. Существует множество ANN-search алгоритмов. Ниже представлена схема, опубликованная в статье [1], в которой авторы сделали некую классификацию существующих методов ANN search.

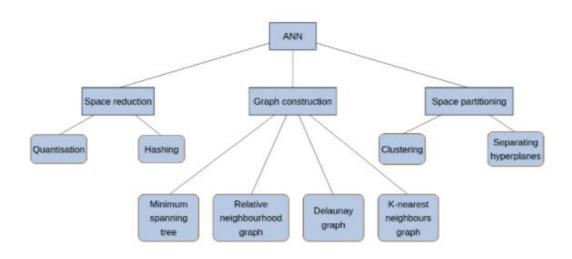
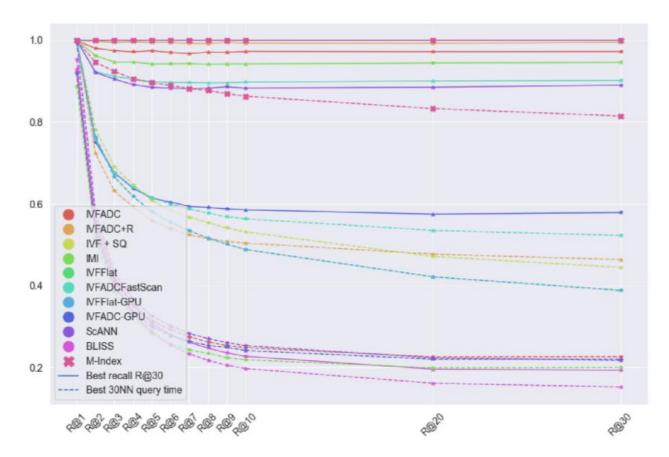


Рисунок 1. Таксономия ANN методов. Источник: [1]

В этой же статье авторы приводят примеры наиболее распространенных алгоритмов ANN search (IVFFlat, IVFFlatPQ, IVFADC, LSQ, ScaNN и др.). Также важно заметить, что авторы отмечают то, что использование ML алгоритмов не дает какого-либо значимого выигрыша и оптимизации в решении задачи поиска ANN, а иногда наоборот только увеличивают затраты времени и других ресурсов по причине того, что эти алгоритмы надо обучать.

Какой алгоритм мы выбрали и почему

Наш выбор пал на алгоритм IVFFlat и его модификацию - IVFFlatPQ. Второй алгоритм был реализован в упрощенном виде. Эти алгоритмы были выбраны в силу их относительной популярности (статья [1] приводит данные, согласно которым IVFFlat — метод ANN, наиболее часто упоминаемый в научной литературе), простоты и относительной эффективности. Ниже представлен график, на котором сравнивается перфоманс различных ANN алгоритмов на примере датасета Profiset-100k.



Pucyнок 2. Recall различных алгоритмов поиска ANN на примере датасета Profiset-100k. Источник: [1]

Можем видеть, что IVFFlat имеет очень хорошие метрики на этом датасете по сравнению с другими алгоритмами.

Как реализовали алгоритм

Выбрав алгоритм, мы приступили к его разбору и составили план его создания. План был таков:

- 1. Реализовать свой алгоритм KMeans;
- 2. Обучить модель KMeans на датасетах;
- 3. Реализовать сохранение размеченных датасетов на диск в подходящем формате;

- 4. Реализовать сохранение на диск обученной модели KMeans.
- 5. Реализовать парсинг вектора, для которого нужно найти соседей.
- 6. Реализовать поиск 10 предположительных ближайших соседей.

Экспериментируя с количеством кластеров в KMeans, мы обнаружили, что чем больше кластеров ставим, тем больше оперативной памяти расходуется при обучении модели. Мы на основе метода локтя решили для датасета SIFT поставить количество кластеров равным 4, а для GIST-5.

Датасет SIFT оказался довольно легким, и мы легко выгрузили его в оперативную память, обучили модель КМеапѕ для 100 тысяч векторов и разметили оставшиеся обученной моделью. Добавили для каждого вектора метку того, к какому кластеру он относится. Потом для нахождения 10 предположительных ближайших соседей наш алгоритм был спроектирован следующим образом:

- 1. Парсится вектор, для которого нужно искать соседей;
- 2. Для вектора предсказывается кластер, к которому он относится;
- 3. Выгружается размеченный датасет base;
- 4. Датасет просматривается построчно, и если вектор из датасета base входит в тот же кластер, что и поданный вектор, то вычисляется евклидово расстояние между ними и заносится в список расстояний вместе с индексом вектора из base;
- 5. Список расстояний сортируется и выводятся 10 индексов ближайший векторов среди найденных.

С датасетом GIST все оказалось гораздо сложнее, так как он очень тяжелый и сразу выгрузить его целиком не получилось. Мы решили читать его по батчам и применить технику плоской квантизации (Flat Quantization) для векторов этого датасета с целью уменьшения нагрузки на оперативную память. Flat Quantization используется в алгоритме IVFFlatPQ. Кодировались векторы в формат numpy.uint8. На первых 100 тысячах векторах мы также обучили KMeans, закодировали размеченные вектора, записали в файл. Потом оставшиеся 900 тысяч векторов считали по батчам, разметили, закодировали и записали в файл. Алгоритм для поиска 10 ANN был следующий в данном случае:

- 1. Парсится вектор, для которого нужно искать соседей;
- 2. Предсказывается кластер, к которому относится данный вектор
- 3. Вектор кодируется в формат uint8;
- 4. Датасет base выгружается по батчам и кажду батч читается построчно. Если вектора из одного кластера, то они оба декодировались обратно в float и между ними ищется евклидово расстояние, а в список расстояний записывается индекс вектора из base и расстояние.
- 5. Список расстояний сортируется и выводятся 10 индексов ближайший векторов среди найденных.

Результаты и выводы работы

Нам удалось добиться поставленной перед нами цели – реализовать алгоритм поиска ANN. Метрики на одном из тестов оказались следующие:

Статус отправки

AAAAAA

SIFT build (seconds): 6.0 SIFT Seq Recall: 0.96129

SIFT Seq QPS: 0.31

SIFT 2 Threads Recall: 0.945098

SIFT 2 Threads QPS: 0.49 SIFT 4 Threads Recall: 0.95

SIFT 2 Threads OPS: 0.66

GIST build (seconds): 233.0

GIST Seq Recall: 0.752941

GIST Seq QPS: 0.17

GIST 2 Threads Recall: 0.705263

GIST 2 Threads QPS: 0.36

GIST 4 Threads Recall: 0.75

GIST 4 Threads QPS: 0.46

Рисунок 3. Результаты работа алгоритма на одном из тестов. Источник: автор

Для алгоритма приближенного поиска, на наш взгляд, алгоритм показывает хорошую метрику recall, однако скорость его работы невысока, и это есть недостаток нашего решения. Возможно, стоило как-то еще больше снизить нагрузку на оперативную память, попробовать другие способы уменьшения объема памяти, занимаемой векторами. Либо, как вариант, реализовать решение на языке C++.

Список использованной литературы

1. HANKO B. C. J. Indexing Data Using Machine Learning.

Приложение

IVFADC	Name	KNN	Dist. f.	Citations	Year	Impl.
IVFADC+R ✓ Euclidean 272 2011 ✓[32] [33] CKM [34] Euclidean 340 2013 ✓[34] OPQ [22] Euclidean 285 2013 ✓[35] AQ [36] Euclidean 222 2014 ✓[32] LSQ [37] Euclidean 52 2016 ✓[35] RVQ [38] Euclidean 39 2010 ✓[32] RVPQ [39] Euclidean 65 2017 KSSQ [40] ✓ Euclidean 65 2017 KSSQ [41] Euclidean 5 2015 ScaNN [43] ✓ Euclidean 5 2015 ScaNN [43] ✓ Euclidean 59 2022 ✓[43] IMI [23] ✓ Euclidean 67 2016 ✓[44] [44] Neural Catal- General 63 2019 ✓[45] Neural Catal- General 62 2018 ✓[46] Learned k-d tree [47] General 30 2007 Boosted Search Forest [48] Euclidean <	IVFADC	✓	Euclidean	2558	2010	√[32]
[33] Euclidean 340 2013 √[34] OPQ [22] Euclidean 285 2013 √[35] AQ [36] Euclidean 222 2014 √[32] LSQ [37] Euclidean 52 2016 √[35] RVQ [38] Euclidean 39 2010 √[32] RVPQ [39] Euclidean 0 2022 √[32] MSQ [40] ✓ Euclidean 65 2017 KSSQ [41] Euclidean 20 2016 OTQ [42] Euclidean 5 2015 ScaNN [43] ✓ Euclidean/Cosine 59 2022 √[43] IMI [23] ✓ Euclidean 67 2016 √[44] [44] A General 63 2019 √[45] [45] A General 62 2018 √[46] Learned k-d tree [47] General 30 2007 Boosted Search Forest [48] Euclidean 25 2011	[15]					
CKM [34] Euclidean 340 2013 √[34] OPQ [22] Euclidean 285 2013 √[35] AQ [36] Euclidean 222 2014 √[32] LSQ [37] Euclidean 52 2016 √[35] RVQ [38] Euclidean 39 2010 √[32] RVPQ [39] Euclidean 0 2022 √[32] MSQ [40] ✓ Euclidean 65 2017 KSSQ [41] Euclidean 20 2016 OTQ [42] Euclidean 5 2015 ScaNN [43] ✓ Euclidean/Cosine 59 2022 √[43] IMI [23] ✓ Euclidean 67 2016 √[44] NeuralLSH [44] ✓ General 63 2019 √[45] Neural Catalyser [46] General 62 2018 √[46] Learned k-d tree [47] Euclidean 25 2011 Boosted Search Forest [48] Euclidean 25	IVFADC+R	✓	Euclidean	272	2011	√[32]
OPQ [22] Euclidean 285 2013 √[35] AQ [36] Euclidean 222 2014 √[32] LSQ [37] Euclidean 52 2016 √[35] RVQ [38] Euclidean 39 2010 √[32] RVPQ [39] Euclidean 0 2022 √[32] MSQ [40] ✓ Euclidean 65 2017 KSSQ [41] Euclidean 20 2016 OTQ [42] Euclidean 5 2015 ScaNN [43] ✓ Euclidean/Cosine 59 2022 √[43] IMI [23] ✓ Euclidean 399 2014 √[23] GNOIMI ✓ Euclidean 67 2016 √[44] [44] Neural Catalyser [46] General 63 2019 √[45] Neural Catalyser [46] General 62 2018 √[46] Learned k-d tree [47] General 30 2007 Boosted Search Forest [48] Euclidean 25 2011	[33]					
AQ [36] Euclidean 222 2014 √[32] LSQ [37] Euclidean 52 2016 √[35] RVQ [38] Euclidean 39 2010 √[32] RVPQ [39] Euclidean 0 2022 √[32] MSQ [40] ✓ Euclidean 65 2017 KSSQ [41] Euclidean 20 2016 OTQ [42] Euclidean 5 2015 ScaNN [43] ✓ Euclidean/Cosine 59 2022 √[43] IMI [23] ✓ Euclidean 399 2014 √[23] GNOIMI ✓ Euclidean 67 2016 √[44] [44] General 63 2019 √[45] [45] General 62 2018 √[46] Neural Catalyser [46] General 30 2007 Hearned k-d tree [47] General 25 2011 Boosted Search Forest [48] Euclidean 25 2011	CKM [34]		Euclidean	340	2013	√[34]
LSQ [37] Euclidean 52 2016 √[35] RVQ [38] Euclidean 39 2010 √[32] RVPQ [39] Euclidean 0 2022 √[32] MSQ [40] ✓ Euclidean 65 2017 KSSQ [41] Euclidean 20 2016 OTQ [42] Euclidean 5 2015 ScaNN [43] ✓ Euclidean/Cosine 59 2022 √[43] IMI [23] ✓ Euclidean 399 2014 √[23] GNOIMI ✓ Euclidean 67 2016 √[44] [44] — General 63 2019 √[45] [45] — General 62 2018 √[46] Learned k-d tree [47] General 30 2007 Boosted Search Forest [48] Euclidean 25 2011	OPQ [22]		Euclidean	285	2013	√[35]
RVQ [38] Euclidean 39 2010 √[32] RVPQ [39] Euclidean 0 2022 √[32] MSQ [40] ✓ Euclidean 65 2017 KSSQ [41] Euclidean 20 2016 OTQ [42] Euclidean 5 2015 ScaNN [43] ✓ Euclidean/Cosine 59 2022 √[43] IMI [23] ✓ Euclidean 399 2014 √[23] GNOIMI ✓ Euclidean 67 2016 √[44] [44] — Ceneral 63 2019 √[45] [45] — General 62 2018 √[46] Neural Catalyser [46] — General 30 2007 Learned k-d tree [47] — General 25 2011 Boosted Search Forest [48] Euclidean 25 2011	AQ [36]		Euclidean	222	2014	√[32]
RVPQ [39] Euclidean 0 2022 √[32] MSQ [40] ✓ Euclidean 65 2017 KSSQ [41] Euclidean 20 2016 OTQ [42] Euclidean 5 2015 ScaNN [43] ✓ Euclidean/Cosine 59 2022 √[43] IMI [23] ✓ Euclidean 399 2014 √[23] GNOIMI ✓ Euclidean 67 2016 √[44] [44] NeuralLSH ✓ General 63 2019 √[45] [45] General 62 2018 √[46] Neural Catalyser [46] General 30 2007 Learned k-d tree [47] General 30 2007 Boosted Search Forest [48] Euclidean 25 2011	LSQ [37]		Euclidean	52	2016	√[35]
MSQ [40] ✓ Euclidean 65 2017 KSSQ [41] Euclidean 20 2016 OTQ [42] Euclidean 5 2015 ScaNN [43] ✓ Euclidean/Cosine 59 2022 ✓ [43] IMI [23] ✓ Euclidean 399 2014 ✓ [23] GNOIMI ✓ Euclidean 67 2016 ✓ [44] [44] General 63 2019 ✓ [45] NeuralLSH [45] General 62 2018 ✓ [46] Learned k-d tree [47] General 30 2007 Boosted Search Forest [48] Euclidean 25 2011	RVQ [38]		Euclidean	39	2010	√[32]
KSSQ [41] Euclidean 20 2016 OTQ [42] Euclidean 5 2015 ScaNN [43] ✓ Euclidean/Cosine 59 2022 ✓ [43] IMI [23] ✓ Euclidean 399 2014 ✓ [23] GNOIMI [44] ✓ Euclidean 67 2016 ✓ [44] [44] ✓ General 63 2019 ✓ [45] Neural LSH [45] General 62 2018 ✓ [46] Learned k-d yer [46] General 30 2007 2007 Itree [47] Boosted Euclidean 25 2011 Search Forest [48] Forest [48] Euclidean 25 2011	RVPQ [39]		Euclidean	0	2022	√[32]
OTQ [42] Euclidean 5 2015 ScaNN [43] ✓ Euclidean/Cosine 59 2022 ✓ [43] IMI [23] ✓ Euclidean 399 2014 ✓ [23] GNOIMI [44] ✓ Euclidean 67 2016 ✓ [44] Interval LSH [44] ✓ General 63 2019 ✓ [45] Interval Catalyser [46] General 62 2018 ✓ [46] Interval Catalyser [46] General 30 2007 ✓ [46] Interval Catalyser [47] General 25 2011 Interval Catalyser [48] Euclidean 25 2011	MSQ [40]	✓	Euclidean	65	2017	
ScaNN [43] ✓ Euclidean/Cosine 59 2022 ✓ [43] IMI [23] ✓ Euclidean 399 2014 ✓ [23] GNOIMI [44] ✓ Euclidean 67 2016 ✓ [44] NeuralLSH [45] ✓ General 63 2019 ✓ [45] Neural Catalyser [46] General 62 2018 ✓ [46] Learned k-d tree [47] General 30 2007 Boosted Search Forest [48] Euclidean 25 2011	KSSQ [41]		Euclidean	20	2016	
IMI [23] ✓ Euclidean 399 2014 ✓ [23] GNOIMI [44] ✓ Euclidean 67 2016 ✓ [44] NeuralLSH [45] ✓ General 63 2019 ✓ [45] Neural Catalyser [46] General 62 2018 ✓ [46] Learned k-d tree [47] General 30 2007 Boosted Search Forest [48] Euclidean 25 2011	OTQ [42]		Euclidean	5	2015	
GNOIMI [44] ✓ Euclidean 67 2016 ✓ [44] NeuralLSH [45] ✓ General 63 2019 ✓ [45] Neural Catalyser [46] General 62 2018 ✓ [46] Learned k-d tree [47] ✓ General 30 2007 Boosted Search Forest [48] Euclidean 25 2011	ScaNN [43]	✓	Euclidean/Cosine	59	2022	√[43]
[44] NeuralLSH ✓ General 63 2019 ✓ [45] [45] Neural Catalyser [46] General 62 2018 ✓ [46] Learned k-d tree [47] General 30 2007 Boosted Search Forest [48] Euclidean 25 2011	IMI [23]	√	Euclidean	399	2014	√[23]
NeuralLSH [45] ✓ General 63 2019 ✓ [45] Neural Catalyser [46] General 62 2018 ✓ [46] Learned k-d tree [47] General 30 2007 Boosted Search Forest [48] Euclidean 25 2011	GNOIMI	✓	Euclidean	67	2016	√[44]
[45] Neural Catalyser [46] General 62 2018 √ [46] Learned k-d tree [47] General 30 2007 Boosted Search Forest [48] Euclidean 25 2011	[44]					
Neural Catalyser [46] General 62 2018 ✓ [46] Learned k-d tree [47] General 30 2007 Boosted Search Forest [48] Euclidean 25 2011	NeuralLSH	✓	General	63	2019	√[45]
yser [46] Learned k-d tree [47] Boosted Search Forest [48] Search Euclidean	[45]					
Learned k-d tree [47]✓General302007Boosted Search Forest [48]Euclidean252011	Neural Catal-		General	62	2018	√[46]
tree [47] Boosted Euclidean 25 2011 Search Forest [48]	yser [46]					
Boosted Euclidean 25 2011 Search Forest [48]	Learned k-d	✓	General	30	2007	
Search Forest [48]	tree [47]					
Forest [48]	Boosted		Euclidean	25	2011	
	Search					
Reinforcement \checkmark General 9 2019 \checkmark [49]						
	Reinforcement	. ✓	General	9	2019	√[49]
learning						
graph [49]						
AAQ [50] ✓ Cosine 0 2022		✓	Cosine	0	2022	
IVFADC + G \checkmark Euclidean 51 2018 \checkmark [51]		✓	Euclidean	51	2018	√[51]
+ P [51]	+ P [51]					
OPH [52] ✓ General 19 2013	OPH [52]	✓	General	19	2013	
Continued on the next page						

Name	KNN	Dist. f.	Citations	Year	Impl.
DCPQ [53]		Euclidean	7	2020	
IRLI [54]	✓	General	0	2021	√[54]
AUCH [55]		General	3	2021	
HPQ [56]	√	General	4	2019	
Unsupervised	√	General	0	2022	√[57]
space par-					
titioning					
[57]					
BLISS [58]	✓	General	0	2022	$\sqrt{2}$
CH [59]	√	Hamming	81	2011	
LOPQ [60]	✓	Euclidean	280	2014	$\sqrt{3}$
PTQ [61]	√	Euclidean	9	2015	
GNIDL [62]	√	Euclidean	9	2017	
QPQ [63]	✓	Euclidean	8	2019	
CQ [64]		Euclidean	212	2014	\checkmark^4
SCQ [65]		Euclidean	0	2015	
ADSH [66]	√	Hamming	89	2018	\checkmark^5
CompQ [67]	✓	Euclidean	24	2016	√[35]

Рисунок 4. Данные по некоторым алгоритмам ANN search. Источник: [1]