華東師範大學
EAST CHINA NORMAL UNIVERSITY

数据科学与工程算法基础

Algorithm Foundations of Data Science and Engineering

第五章 Sketch算法

$$(1+x)^n = 1 + \frac{nx}{1!} + \frac{n(n-1)x^2}{2!} + \cdots$$

课程提纲

Content

课程提纲

Content

课程引入

- 面向静态数据的分析与挖掘
  - 数据量大小固定
  - 存储在磁盘上的数据可多次访问
- 越来越多的动态数据场景
  - 科学大数据：天眼、大型强子对撞机等
  - 物联网设备感知数据：智慧城市应用中的视频流、传感器数据
  - 网络流量：电信交换机转发的流量包
  - 信令数据：基站接受到的移动手机信号
  - ……
- 快速产生海量的数据，而且持续不断地到达

数据流

- 流数据特征
  - 数据总量不受限制
  - 数据到达速度快
  - 数据到达次序不受约束
  - 除非刻意保存，否则每个数据项只能“看”一次
- 数据流可以看作一个无限的元组序列 $\sigma = \langle a_1, \ldots, a_m, \ldots \rangle$
- 在某个固定的时间点，一个数据流可以被视作一个长度为 d 的固定数组 $A[0,\ldots,d-1]$
- 随着后续数据的不断到达，数组 A 的长度或其中的元素都可能发生变化

数据流算法

- **目标：**在有限资源约束的情形下，处理海量的实时数据流
- **限制：**无法决定随机访问数据，只能根据数据流的顺序对数据进行 p 次扫描（在很多场景下 $p = 1$）
- **要求**
  - **实时性：**实时、连续地输出查询结果
  - **低空间复杂度：**数据流规模理论上是无限的，为了保证算法高效稳定运行，需降低算法的空间开销
  - **结果准确性：**数据规模大、速率快，因此对于一些复杂问题，不太可能通过数据的一次遍历就获得准确答案。实际应用中，往往不要求精准的查询结果
  - **适应性：**在很多应用中，涉及多个流数据的处理，需设计具备适应性的算法

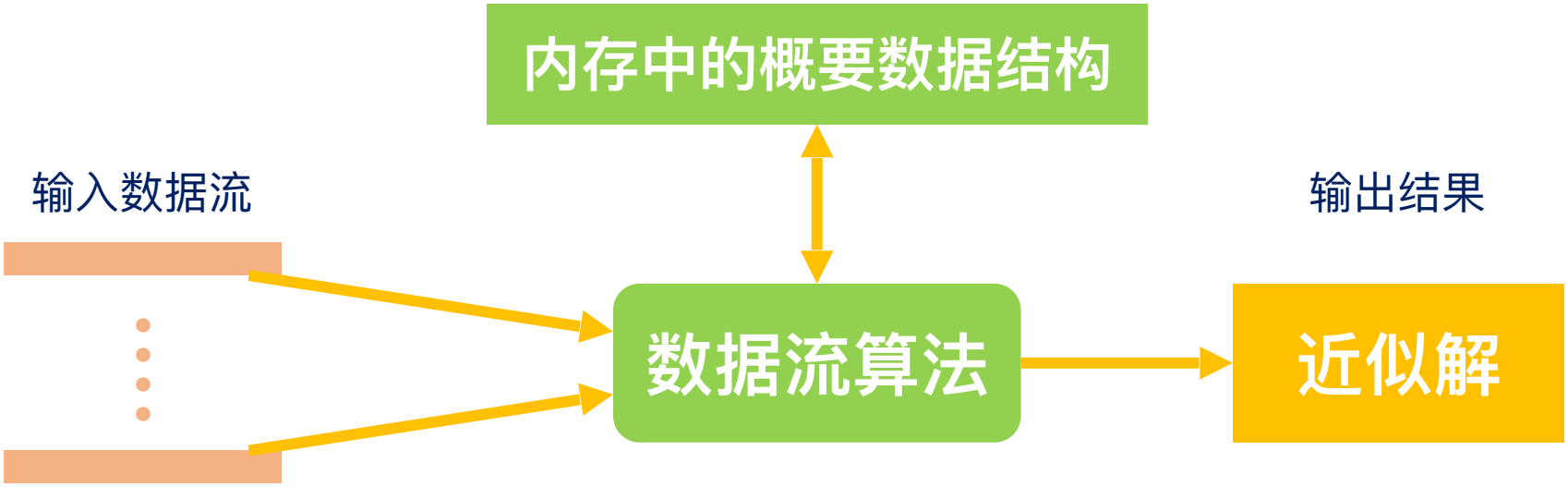
数据流算法 vs 传统算法

	传统算法	数据流算法
数据类型	有限 & 静态	无限 & 动态 & 高速
存储	硬盘	内存 & 空间限制
效率	非实时	实时 & Ad–hoc
返回值类型	精确值 / 近似值	近似值

- 数据流算法对时间、空间消耗要求高
  - 空间消耗是次线性的，或者与流的大小无关
  - 时间消耗是次线性的，或者与流的大小无关

概要数据结构

- 数据流 σ 的概要数据结构记为 $C(\sigma)$
  - 表示对数据流 σ 的压缩表示
  - 与求解问题有关



近似与随机算法

- 由于存储空间和时间的限制，在数据流上做到精确计算非常困难
- 近似算法：寻找误差在一定范围内的近似解
  - 例如，寻找一个误差在 10% 以内的解
  - 近似解落在真实值的 $(1 \pm \epsilon)$ 范围内，其中 $\epsilon = 0.1$
- 随机算法：比近似算法更宽松，允许小概率失败（解不在误差范围内）
  - 例如，估计值有 1/100 的概率不在误差范围内
  - 成功的概率为 $1 - \delta$，其中 $\delta = 0.01$
- 随机算法：(ϵ, δ)–近似算法

近似算法

- 给定输入的流数据 σ 和准确值 $\phi(\sigma)$，近似算法的输出结果记为 $\mathscr{A}(\sigma)$
- ϵ–近似算法（相对误差）：如果该算法的输出结果满足

$$|\mathscr{A}(\sigma) - \phi(\sigma)| < \epsilon\phi(\sigma)$$

- ϵ–近似算法（绝对误差）：如果该算法的输出结果满足

$$|\mathscr{A}(\sigma) - \phi(\sigma)| < \epsilon$$

随机算法

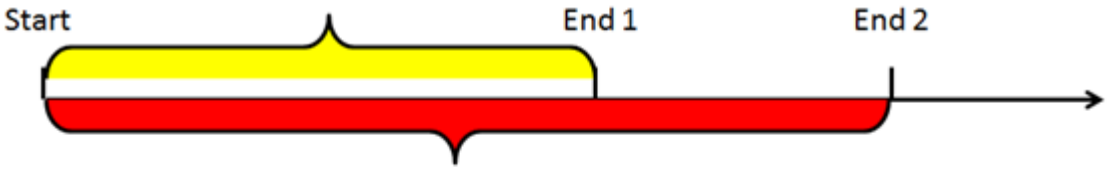
- 给定输入的流数据 σ 和准确值 $\phi(\sigma)$，近似算法的输出结果记为 $\mathscr{A}(\sigma)$
- (ϵ, δ)–近似算法（相对误差）：如果该算法的输出结果满足

$$\Pr\left[\left|\mathscr{A}(\sigma) - \phi(\sigma)\right| < \epsilon\phi(\sigma)\right] > 1 - \delta$$

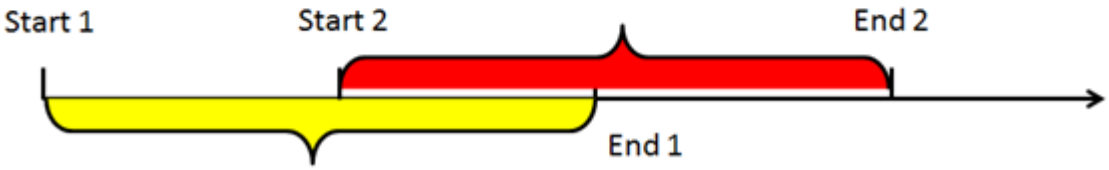
- (ϵ, δ)–近似算法（绝对误差）：如果该算法的输出结果满足

$$\Pr\left[\left|\mathscr{A}(\sigma) - \phi(\sigma)\right| < \epsilon\right] > 1 - \delta$$

数据流模型



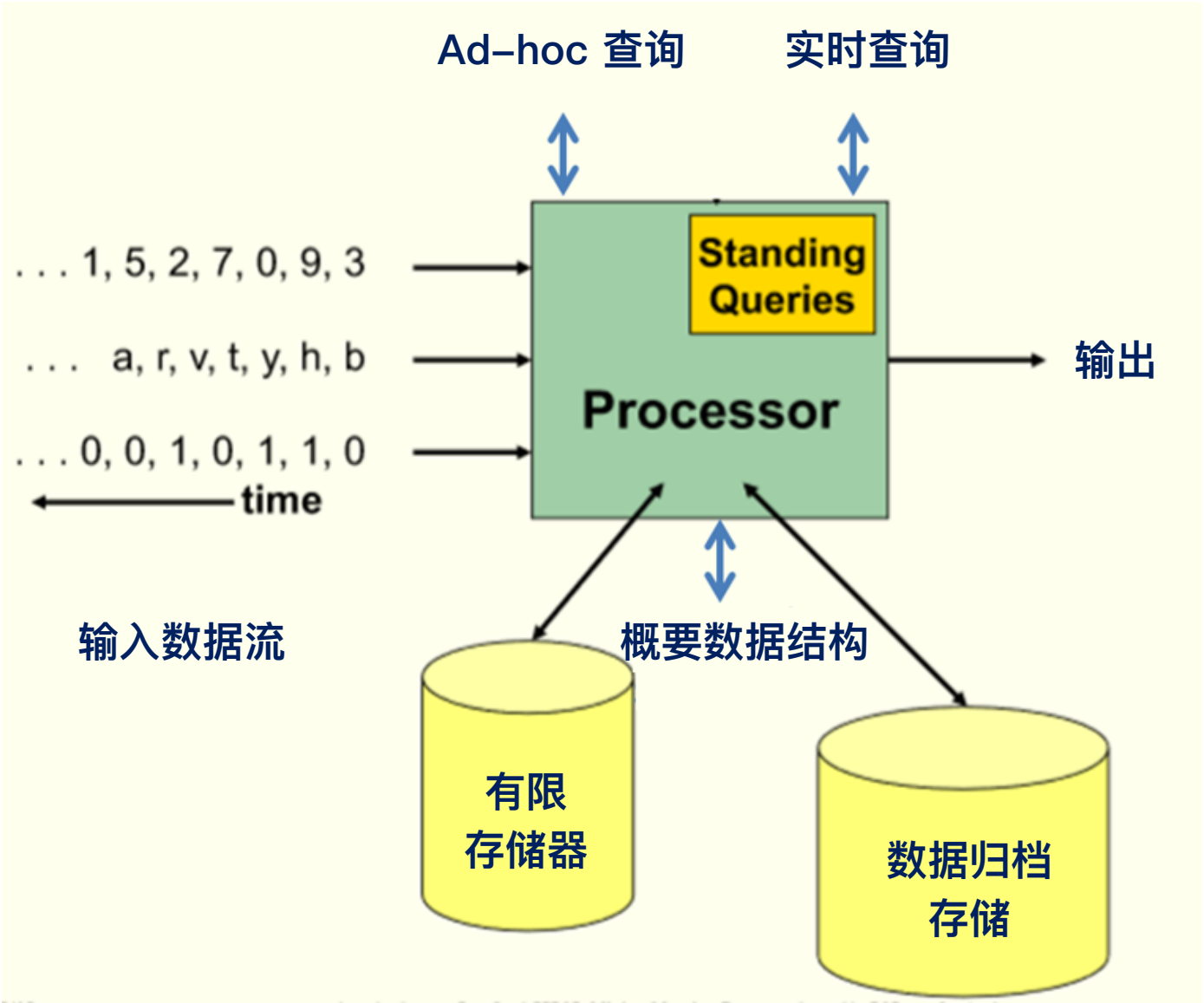
- 界标模型



- 滑动窗口模型

- 衰减窗口模型

数据流分析挖掘框架


Ad-hoc 查询
实时查询
. . . 1, 5, 2, 7, 0, 9, 3
. . . a, r, v, t, y, h, b
. . . 0, 0, 1, 0, 1, 1, 0
time
Standing Queries
Processor
输出
输入数据流
概要数据结构
有限
存储器
数据归档
存储

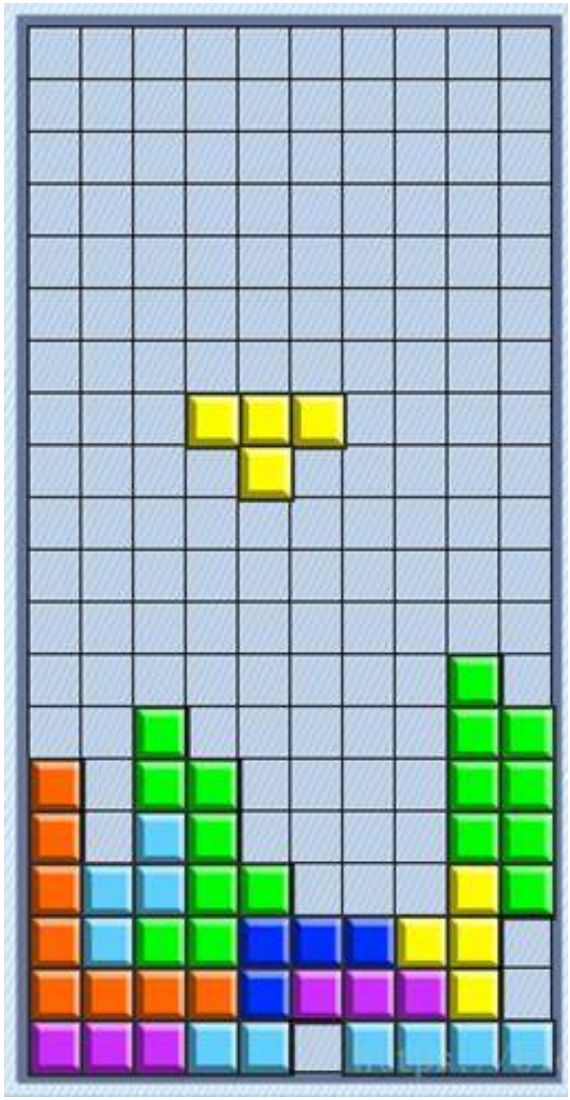
数据项频数估计

- 在数据流 $\sigma = \langle a_1, \ldots, a_m, \ldots \rangle, a_i \in [n]$ 中，定义频数向量 $f = (f_1, \ldots, f_n)$
- 其中 n 为 σ 中不同元素的个数，f_i 为元素 a_i 的频数且 $\sum_{i=1}^{n} = m$
- 大多数问题：如果 $\exists a_j : f_j > m/2$ ，则输出 a_j，否则输出 $\varnothing$
- 一般问题
  - 给定参数 k，输出集合 $\{a_j : f_j \geq m/k\}$
  - 或给定参数 ψ，输出集合 $\{a_j : f_j \geq \psi m\}$
- 例如：给定数据流 $\sigma = \langle a, b, a, c, c, a, b, d \rangle$，4 个不同元素的频数分别为 $f_a = 3$，$f_b = 2$，$f_c = 2$，$f_d = 1$
  - σ 中不存在大多数
  - 当 $k = 4$，频繁项是 a, b, c
  - 当 $\psi = 0.3$，频繁项是 a

课程提纲

Content

来自俄罗斯方块的启发



- 《俄罗斯方块》是一款由俄罗斯人阿列克谢·帕基特诺夫于1984年6月发明的休闲游戏
- 游戏规则
  - 小方块组成的不同形状陆续从屏幕上方落下来
  - 玩家通过调整对象的位置和方向，消去部分对象腾出空间
  - 没有被消除掉的方块不断堆积起来，直到游戏结束
- 类似于数据流

Misra-Gries 算法

输入: 数据流 $\sigma =< a_1, a_2, \cdots, a_m >$, $a_i \in [n]$, 正整数 k
输出: 数据流 σ 中的频繁元素集合 F

```
1  F ← ∅;
2  while 数据流 σ 非空 do
3      数据流 σ 中第 i 个元素到达;
4      if a_i ∈ keys(F) then
5          F_i ← F_i + 1;
6      else
7          if |keys(F)| < k − 1 then
8              F_i ← 1;
9          else
10             for a_j ∈ keys(F) do
11                 F_j ← F_j − 1;
12                 if F_j = 0 then
13                     从 F 中移除 a_j ;
14 return 频数估计数组 F;
```

计数器：俄罗斯方块游戏界面宽度

更新已有数据项的频数

一行未装满（计数器未满），新元素直接插入

一行装满（计数器装满），清除一行

Misra–Gries 算法示例

- 给定输入数据流 A, B, A, C, D, E, A, D， 且 $k = 3$

输入	操作	结果
A	插入	F={(A,1)}
B	插入	F={(A,1),(B,1)}
A	更新	F={(A,2),(B,1)}
C	删除	F={(A,1)}
D	插入	F={(A,1),(D,1)}
E	删除	F={}
A	插入	F={(A,1)}
D	插入	F={(A,1),(D,1)}

Misra–Gries 算法分析 I

- **定理 1**：Misra–Gries 算法中的计数器减操作至多执行 $\lfloor \frac{m}{k} \rfloor$ 次，其中 m 表示数据流中数据项个数，k 表示计数器个数
- **证明**
  - 每进行一次减操作计数器值之和比实际到达的数据项个数减少 k 个
  - 最终计数器值之和至少为 0，且数据项的个数为 m
  - 所以，减操作最多进行 $\lfloor \frac{m}{k} \rfloor$ 次

Misra–Gries 算法分析 II

- **定理 2**：当 $k = \lceil \frac{1}{\psi} \rceil$，所有的 ψ–频繁项都会被 Misra–Gries 算法输出
- **证明**
  - 由定理1可知，计算器减操作最多执行了 $\lfloor \frac{m}{k} \rfloor$ 次
  - 因此算法结束时，数据项的计数器值为 c_i，满足 $c_i \leq f_i \leq c_i + \frac{m}{k}$
  - 对未被输出的数据项 i，有 $c_i = 0$，则 $f_i \leq \frac{m}{k} \leq \psi m$
  - 所以，所有满足 $f_j > \psi m$ 的数据项 a_j，即所有的 ψ–频繁项，都会被 Misra–Gries 算法输出

Misra–Gries 算法分析 III

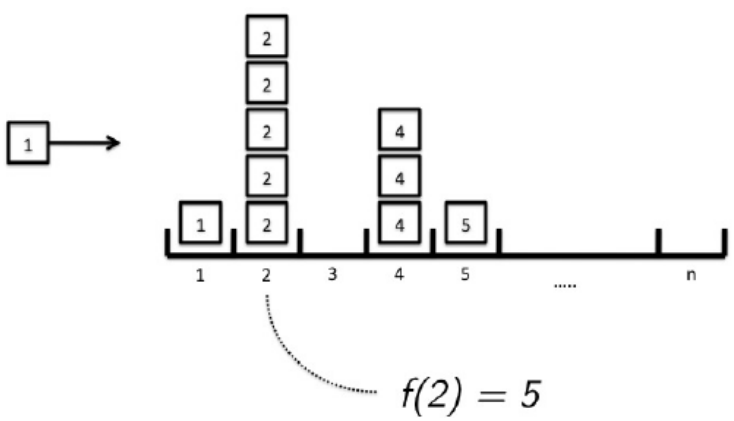
- Misra–Gries 算法是一个近似频繁项挖掘算法
- 优点
  - 逻辑简单
  - 高效算法
    - ✓空间复杂度为 $O(k)$，与数据流规模无关
    - ✓处理每个数据项的复杂度为 $O(k)$
  - 所有频繁项一定会被输出
- 缺点
  - 可能会出现误报：非频繁项也会被输出
  - 无法输出数据项的频数

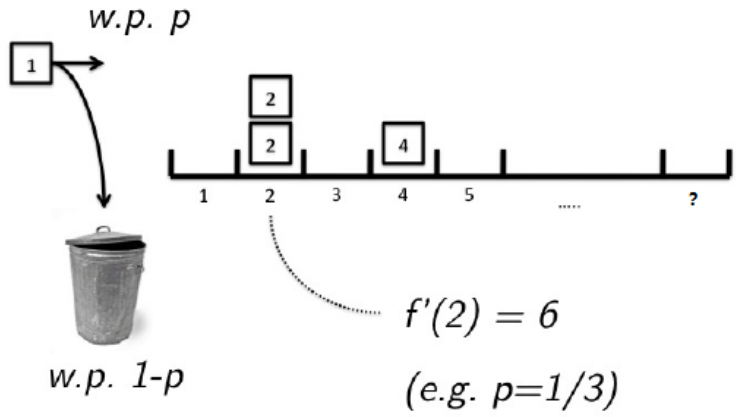
课程提纲

Content

问题定义

- 频数查询
  - 给定数据流 $\sigma = \langle a_1, \ldots, a_m, \ldots \rangle, a_i \in [n]$，元素 i 的频数为 $f_i = |\{j : a_j = i\}|$。对于元素 i，查询其频数 f_i
- 简单抽样算法
  - 对每个到达的数据项，以 $p = \frac{M}{m}$ 的概率对其频数加 1，否则将其丢弃，其中 M 表示抽样后的数据流大小





简单抽样方法分析

- 运用简单抽样方法，元素 i 频数的 (ϵ, δ)–近似估计的空间复杂度是 $M = O\left(\frac{m \log(1/\delta)}{\epsilon^2}\right)$，其中 m 为原数据流大小
- 证明：

定义随机变量 $X_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{if } a_j = i \text{ is sampled} \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$，定义 $g_j = \sum_{j=1}^{m} X_{ij}$ 为简单抽样后元素 i 的频数，则元素 i 的频数估计值 $\hat{f}_i = \frac{g_i}{p}$

证明续

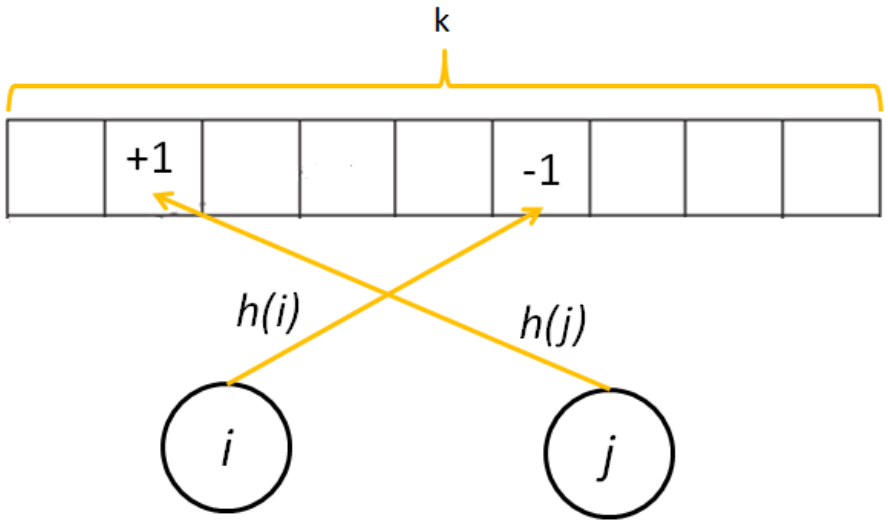
利用 Chernoff 不等式，得到

$$
\begin{aligned}
P(|\hat{f}_i - f_i| \geq \epsilon f_i) &= P(|g_i - pf_i| \geq \epsilon p f_i) \\
&= P(|\frac{g_i}{f_i} - p|) \geq \epsilon p \\
&< 2\exp(-p\epsilon^2/3) < \delta
\end{aligned}
$$

将 $p = \frac{M}{m}$ 代入，即可得到：$M > \frac{3m\ln(2/\delta)}{\epsilon^2}$

- 简单抽样算法的空间复杂度为 $M = O\left(\frac{m\log(1/\delta)}{\epsilon^2}\right)$
  - 时间复杂度与数据流大小有关
  - 无法确定抽样概率的大小（因为 m 可能未知）
  - 因此，简单抽样算法是无法应对快速到达的数据流

基本 Count Sketch



输入: 数据流，查询元素 a
输出: 元素 a 出现的频数

1 初始化：$C[1\cdots k] \leftarrow 0, k = O(\frac{1}{\delta\epsilon^2})$;
2 选择哈希函数$h : [n] \to [k]$
3 选择哈希函数$g : [n] \to \{-1, 1\}$
4 处理：(j, c)，其中$c = 1$;
5 **while** 有数据到达 **do**
6 $\quad C[h(j)] \leftarrow C[h(j)] + cg(j)$;
7 **return** $\widehat{f}_a = g(a)C[h(a)]$;

哈希表的大小

哈希表中的频数更新

- 两个元素被 hash 到同一个位置
  - 产生哈希冲突
  - 但发生碰撞的元素频率可能增加，也可能减少
  - 由于增加或减少是完全随机的，所以从期望来看是没有影响的

基本 Count Sketch 示例

- 假设输入数据流为 $\langle a,b,c,a,b,a\rangle$，计数器个数为 2，$h(a)=h(b)\neq h(c)$，试计算各元素的频数。
- 三个元素a,b,c，哈希函数 g 使得$\{a,b,c\}\rightarrow\{-1,1\}$ 有如下 8 种可能：

g(a)	g(b)	g(c)	$h(a)$ or $h(b)$	$h(c)$
+	+	+	+3 + 2 = 5	1
+	+	-	+3 + 2 = 5	- 1
+	-	+	+3 - 2 = 1	1
+	-	-	+3 - 2 = 1	- 1
-	+	+	-3 + 2 = -1	1
-	+	-	-3 + 2 = -1	- 1
-	-	+	-3 - 2 = -5	1
-	-	-	-3 - 2 = -5	-1

$$f_a=\frac{(5+5+1+1)-(-5-5-1-1)}{8}=3$$

$$f_b=\frac{(5+5-1-1)-(-5-5+1+1)}{8}=2$$

$$f_c=\frac{(1+1+1+1)-(-1-1-1-1)}{8}=1$$

基本 Count Sketch 分析

- 固定元素 a，对每个元素 $j \in [n]$
  - 定义随机变量 $Y_j = \begin{cases} 1, & \text{if } h(j) = h(a) \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$
  - Y_j 表示元素 j 和元素 a 是否被哈希到同一位置
  - $Y_j = 1$ 表示 $h(j) = h(a)$，即元素 j 对计数器 $C[h(a)]$ 有贡献
- 所有哈希到 $h(a)$ 位置上的元素都对 a 的频数估计都起到了作用，因此

$$\widehat{f_a} = g(a)C[h(a)] = g(a)\sum_{j=1}^{n} f_j \cdot g(j) \cdot Y_j$$

$$= f(a) + g(a) \sum_{j \in [n] \setminus \{a\}} f_j \cdot g(j) \cdot Y_j$$

基本 Count Sketch 分析（续）

- 对频数估计取期望 $E[\widehat{f_a}] = f(a) + g(a) \sum_{j \in [n] \setminus \{a\}} f_j \cdot E[g(j) \cdot Y_j]$
- 由于哈希函数 g 和 h 是独立的，所以
  $E[g(j) \cdot Y_j] = E[g(j)] \cdot E[Y_j] = 0 \cdot E[Y_j] = 0$
- 最终得到 $E[\widehat{f_a}] = f_a$
- 因此，基本 Count Sketch 算法输出结果是对实际频数的无偏估计

基本 Count Sketch 分析（续）

- 无偏估计 $\neq$ 好的估计
- 算法输出值可能偏离真实值太大，所以仍需分析算法输出结果的方差
- 下面我们计算基本 Count Sketch 输出结果的方差

$$\mathrm{Var}[\widehat{f_a}] = \mathrm{Var}\Big[f(a) + g(a)\sum_{j\in[n]\setminus\{a\}} f_j \cdot g(j) \cdot Y_j\Big] = g^2(a)\mathrm{Var}\Big[\sum_{j\in[n]\setminus\{a\}} f_j \cdot g(j) \cdot Y_j\Big]$$

$$= g^2(a)E\Big[\sum_{j\in[n]\setminus\{a\}} f_j \cdot g(j) \cdot Y_j\Big]^2 - g^2(a)\Big(E\Big[\sum_{j\in[n]\setminus\{a\}} f_j \cdot g(j) \cdot Y_j\Big]\Big)^2$$

$$= E\Big[\sum_{j\in[n]\setminus\{a\}} f_j \cdot g(j) \cdot Y_j\Big]^2$$

$$= E\Big[\sum_{j\in[n]\setminus\{a\}} f_j^2 Y_j^2 + 2\sum_{i,j\in[n]\setminus\{a\}\wedge i\neq j} f_i f_j g(i) g(j) Y_i Y_j\Big]$$

基本 Count Sketch 方差（续）

对 $j \in [n]\backslash\{a\}$，可以得到 $E[Y_j^2] = E[Y_j] = P[h(j) = h(a)] = \frac{1}{k}$

对 $i \neq j \in [n]\backslash\{a\}$，可以得到 $E[g(i)g(j)Y_iY_j] = E[g(i)]E[g(j)]E[Y_iY_j] = 0$

所以，$\mathrm{Var}[\widehat{f_a}]$ 可以计算为

$$\mathrm{Var}[\widehat{f_a}] = E\Big[\sum_{j\in[n]\backslash\{a\}} f_j^2 Y_j^2 + 2 \sum_{i,j\in[n]\backslash\{a\}\wedge i\neq j} f_i f_j g(i)g(j)Y_iY_j\Big]$$

$$= \sum_{j\in[n]\backslash\{a\}} \frac{f_j^2}{k} + 0 = \frac{\|f\|_2^2 - f_a^2}{k} := \frac{\|f_{-a}\|_2^2}{k}$$

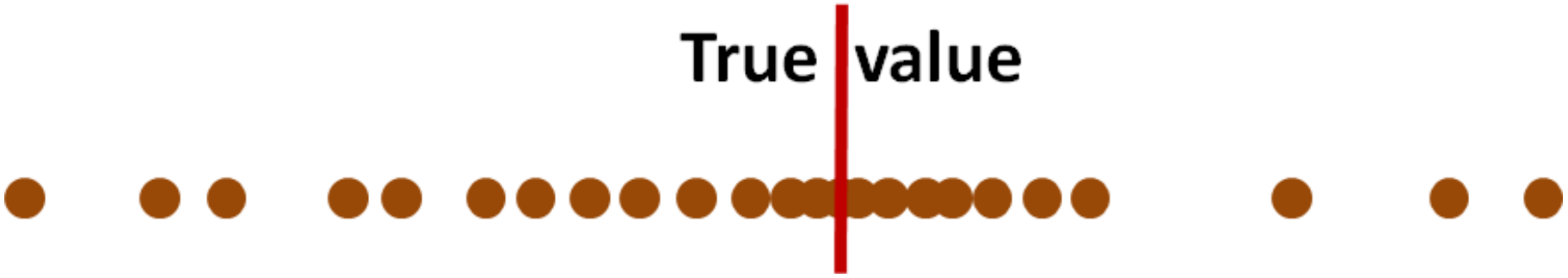
因此，随 k 值的增大，即存储计数数组的空间增大，方差随之减小

Count Sketch 算法

- 根据 Chebyshev 不等式，当 $k = O(\frac{1}{\delta\epsilon^2})$ 时，可以得到 f_a 的 (ϵ, δ)–近似估计

$$P[|\widehat{f_a} - f_a| \geq \epsilon\|f\|_2] \leq P[|\widehat{f_a} - f_a| \geq \epsilon\|f_a\|_2] \leq \frac{\mathrm{Var}[\widehat{f_a}]}{\epsilon^2\|f_a\|_2^2} = \frac{1}{k\epsilon^2} < \delta$$

- 运用 Tug of War 技术，改进算法



Count Sketch 算法

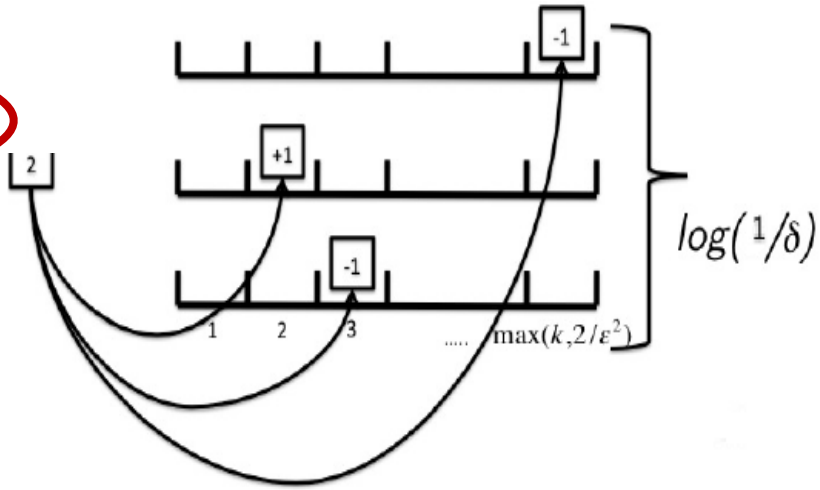
输入: 数据流，查询元素 a
输出: 元素 a 出现的频数

1 **初始化**: $C[1 \cdots k] \leftarrow 0, k = \frac{3}{\epsilon^2}, t = O(log(1/\delta))$;
2 选择 t 个哈希函数 $h_1, \cdots, h_t : [n] \rightarrow [k]$
3 选择 t 个哈希函数 $g_1, \cdots, g_t : [n] \rightarrow \{-1, 1\}$
4 **处理**: (j, c)，其中 $c = 1$;
5 **while** 有数据到达 **do**
6 **for** $i = 1$ *to* t **do**
7 $C[i][h_i(j)] \leftarrow C[i][h_i(j)] + cg_i(j)$;
8 **return** $\widehat{f_a} = median_{1 \le i \le t} g_i(a) C[i][h_i(a)]$;

比基本 Count Sketch 中的计数器数量要少

虽然单次可能不准，但是 Count Sketch 做了多次

输出多次基本 Count Sketch 输出结果的中位数



Count Sketch 算法分析

- 定义 $Y_i = \begin{cases} 1, & \text{if } |\widehat{f_a} - f_a| \geq \epsilon \|f\|_2 \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$
- 适当选择 $k = O(1/\epsilon^2)$，使得 $P(Y_i = 1) < 1/3$
- 注意 $\mu = E(\sum_i Y_i) < t/3$，由 Chernoff 不等式可得

$$P(\sum_i Y_i > t/2) \leq P(\sum_i Y_i > (1 + 1/2)\mu) \leq \exp(-\frac{\mu}{12})$$

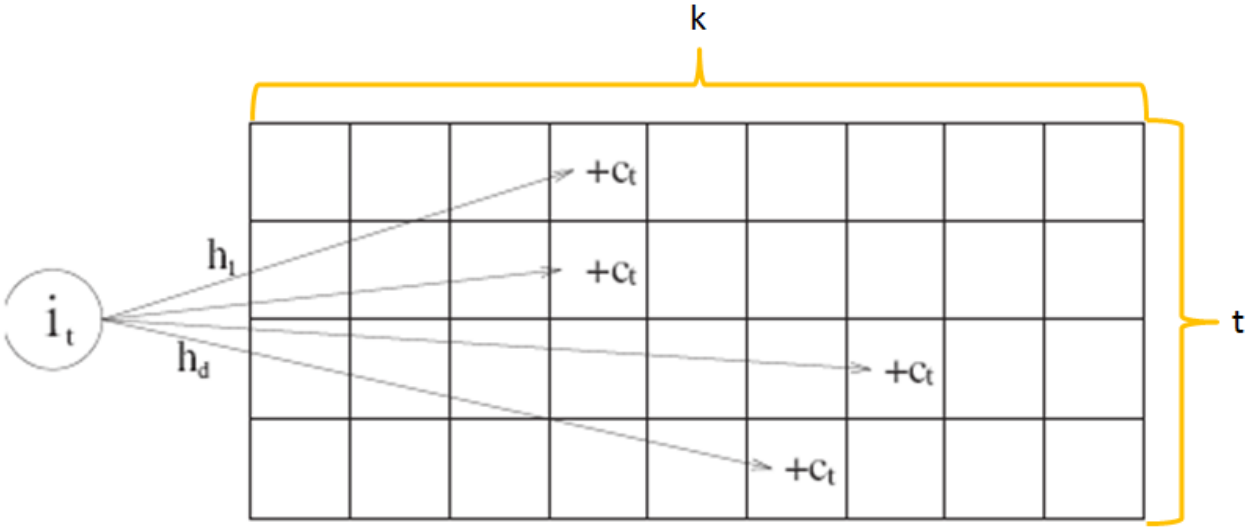
$$\exp(-\frac{t}{36}) \leq \exp(-\frac{\mu}{12}) < \delta, \text{ 即 } t = O(\log(1/\delta))$$

- 最终得到一个空间消耗为 $O\left(\frac{\log(1/\delta)}{\epsilon^2}\right)$ 的 (ϵ, δ)–近似估计

课程提纲

Content

Count-min Sketch



输入: 数据流，查询元素 a
输出: 元素 a 出现的频数

1 **初始化**：$C[1\cdots d][1\cdots w] \leftarrow 0, w = \frac{2}{\epsilon}, d = \lceil log(1/\delta) \rceil$; 选择$d$个独立的哈希函数$h_1, h_2, \cdots, h_d : [n] \rightarrow [w]$

2 **处理**：(j, c)，其中$c = 1$;

3 **for** i = *1 to* d **do**

4 $\quad C[i][h_i(j)] \leftarrow C[i][h_i(j)] + c$;

5 **return** $f_a = min_{1 \le i \le d} C[i][h_i(a)]$;

哈希表的大小

哈希函数的个数

返回 d 个哈希表中最小的值

CM Sketch 分析

- 对元素 $j \in [n] \backslash \{a\}$，定义 $Y_{i,j} = \begin{cases} 1, & \text{if } h_i(j) = h_i(a) \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$
- 当 $Y_{i,j} = 1$ 时，元素 j 在第 i 个哈希函数上与元素 a 发生了哈希冲突
- 给定元素 a 和哈希函数 h_i，定义随机变量 X_i 为第 i 个哈希函数上其他元素对元素 a 频数估计值的贡献，大小为 $X_i = \sum_{j \in [n] \backslash \{a\}} f_j Y_{i,j}$
- 根据期望的线性性质以及 $E[Y_{i,j}] = \frac{1}{k}$，我们得到

$$E[X_i] = X_i = \sum_{j \in [n] \backslash \{a\}} \frac{f_j}{k} = \frac{\|f\|_1 - f_a}{k} := \frac{\|f_{-a}\|_1}{k}$$

CM Sketch 分析

- 因为 $f_j \geq 0$，所以 $X_j \geq 0$，根据马尔科夫不等式，选择合适的 k 值，得到不等式 $P[X_i \geq \epsilon \|f\|_1] \leq P[X_i \geq \epsilon \|f_{-a}\|_1] \leq \frac{\|f_{-a}\|_1}{k\epsilon\|f_{-a}\|_1} = \frac{1}{2}$
- 对 d 个相互独立的哈希函数，若 $\widehat{f_a} - f_a \geq x$，则 $\min\{X_1, \ldots, X_d\} \geq x$，即 $P[\widehat{f_a} - f_a \geq \epsilon \|f_{-a}\|_1] = P[\min\{X_1, \ldots, X_d\} \geq \epsilon \|f_{-a}\|_1] = \prod_{i=1}^{d} P[X_i \geq \epsilon \|f_{-a}\|_1] \leq \frac{1}{2^d}$
- 可以选择适当 d 的值，使得上式概率上界至多为 δ，所以至少以 $(1-\delta)$ 的概率下式成立：$f_a \leq \widehat{f_a} \leq f_a + \epsilon \|f_{-a}\|_1$
- 该算法需要的计数器个数为 $M = O\left(\frac{\log(1/\delta)}{\epsilon}\right)$

本章小结

- 频繁项挖掘
  - Misra–Gries 算法
  - Count sketch 算法
  - Count–min sketch 算法
- 数据流场景下的查询与分析
  - 数据高速达到、容量不限，查询需要实时响应
  - 对算法空间和时间复杂度的要求很高
  - 通常设计小巧的 sketch 以达到目的
  - 而且需要深入的算法分析，保证算法精度
- 除了频繁项挖掘，还有其他的一些任务
  - 不同元素个数
  - Top–k 查询
  - 聚类
  - ……

课后作业

- 课本87–88页习题5
  - 第3，4，5，6题