欧式空间的局部敏感哈希(LSH)应用分享

bourneli

2016年10月

大纲

- 应用背景
- 计算方法
- 实现与优化

应用背景

在很多应用领域中，我们面对和需要处理的数据往往是海量并且具有很高的维度，怎样快速地从海量的高维数据集合中找到与某个数据最相似（距离最近）的一个数据或多个数据成为了一个难点和问题。

LSH主要解决高纬度最邻近查找 问题，是一种近似算法，时间复杂度为线性，可大规模应用。应用场景举例：

1. 查找网络上的重复网页
2. 查找相似新闻网页或文章
3. 音乐检索
4. 指纹匹配
5. 图像检索
6. 相似用户匹配推荐

计算方法–核心思想

主要思路是设计一类局部敏感函数，将那些比较类似的对象hash到一起，不同的对象的hash到不同的地方。hash过程相当于一种过滤机制，缩小检索范围。

最近邻居蛮力计算方法需要的时间复杂度$O(n^2)$，而使用LSH，可以在保证错误率很低的情况下，时间复杂度降到$O(n)$。在不需要准确最近邻居的应用场景，可以大规模应用，比如n达到亿级甚至更多。

计算方法–局部敏感函数定义

定义：函数集合$H = \{h : S \to U\}$；任意向量$q, v \in S$；U是整数集合；
$B(v, r) = \{q \in X \| d(v, q) \le r\}$，表示以点$v$为中心，距离为r范围内的所有点的集合。

$$\text{如果} v \in B(q, r1), P(h(v) = h(q)) \ge p1$$
$$\text{如果} v \notin B(q, r2), P(h(v) = h(q)) \le p2$$

符合上述条件的函数h被称为$(r_1, r_2, p_1, p_2) - sensitive$。

直观解释就是将相距较近(r_1以内)的向量hash到一起的概率要大(p_1较接近1)；距离较远(r_2以外，且$r_2 > r_1$)的对象hash到一起的概率小(p_2较接近0)。

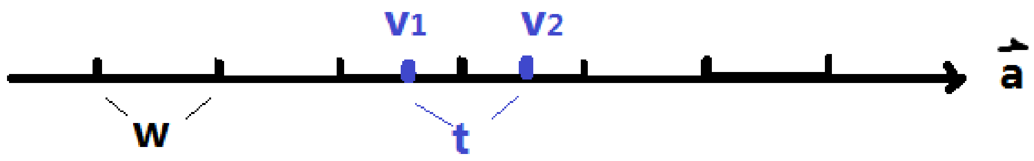
计算方法–欧式空间的局部敏感函数

将n维向量随机射到一个向量，使用向量点乘，由于投射向量不是单位向量，所以严格意义上不能称之为投影。投射算法如下:

$$h(v) = \left\lfloor \frac{a \bullet v + b}{w} \right\rfloor$$

- $b \in [0, w]$是随机量，
- $a \in R^n, a_i \sim N(0,1)$，是被投射的向量。

计算方法–欧式空间的局部敏感投射示意图



w是单位长度，十分重要！

- w太大，较远的对象也设hash到一个单位里，计算量仍然十分大；
- w太小，很近的对象也无法hash到一起，导致找不到相似的对象。

需要知道向量距离与投射碰撞概率的关系？

计算方法–常系数的概率密度函数变换

如果Y与cX具有相同分布,$c > 0$为常数，并且已知X的概率密度$f_X(x)$,计算Y的概率密度函数$f_Y(y)$?

核心思想是将概率密度函数转成累积分布概率函数，因为概率密度函数在任意一点的概率为0，直接代入没有意义，推导如下：

概率密度函数与累计分布函数的关系

$$F_X(x) = Pr(X \le x) = \int_{-\infty}^{x} f_X(t)dt \Rightarrow f_X(x) = \frac{dF_X(x)}{dx}$$

随机变量cY与X的关系

$$F_Y(y) = Pr(Y \le y) = Pr(cX \le y) = Pr(X \le \frac{y}{c}) = F_X(\frac{y}{c})$$

复合函数求导

$$f_Y(y) = \frac{dF_X(\frac{y}{c})}{dy} = \frac{1}{c} f_X(\frac{y}{c})$$

计算方法–稳定分布

如果分布D是稳定分布，那么必须满足任意n个D的独立同部分(iid)随机变量$X_1, X_2, \cdots, X_n$，在任意n个实数$v_1, v_2, \cdots, v_n$，有$\sum_{i=1}^{n}(v_i X_i)$与$(\sum \|v_i\|^s)^{\frac{1}{s}} X$(X也是D的一个随机变量)有相同的分布。

- 当s=1时，表示向量点积与向量曼哈顿距离的关系。
- 当s=2时，表示向量点积与欧式距离的关系。并且此时D是标准正太分布。

计算方法–欧式空间LSH函数概率分析

任意两向量v_1,v_2投射到a上的距离为t

$$t = a \bullet v_1 - a \bullet v_2 = a(v_1 - v_2) = \sum a_i(v_{1i} - v_{2i})$$

当$\|t\| \leq w$，且$t > 0$时，碰撞概率为$1 - \frac{t}{w}$。

令$u = (\sum \|v_{1i} - v_{2i}\|^2)^{\frac{1}{2}}$,那么t与ua同分布,且$f_A(a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{a^2}{2}}$,导出$f_T(t) = \frac{1}{u} f_A(\frac{t}{u})$。对于任意t的概率为$\frac{1}{u} f_A(\frac{t}{u})dt$。

碰撞概率公式

$$p(w, u) = 2\int_0^w \frac{1}{u} f_A(\frac{t}{u})(1 - \frac{t}{w})dt$$

当$t \in [-w, 0]$时，概率与$[0, w]$一致，所以乘以2；其他范围概率均为0。

计算方法–碰撞概率单调性与参数估计

碰撞概率概率解析形式

$$\begin{aligned} p(w,u) &= Pr(h(p)=h(q)) \\ &= 2\int_0^w \frac{1}{u} f_A(\frac{t}{u})(1-\frac{t}{w})dt \\ &= 1-2F(-\frac{w}{u})+\sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{u}{w}(e^{-\frac{w^2}{2u^2}}-1) \end{aligned}$$

其中f与F是分别是标准正太分布概率密度函数和累积分布函数。

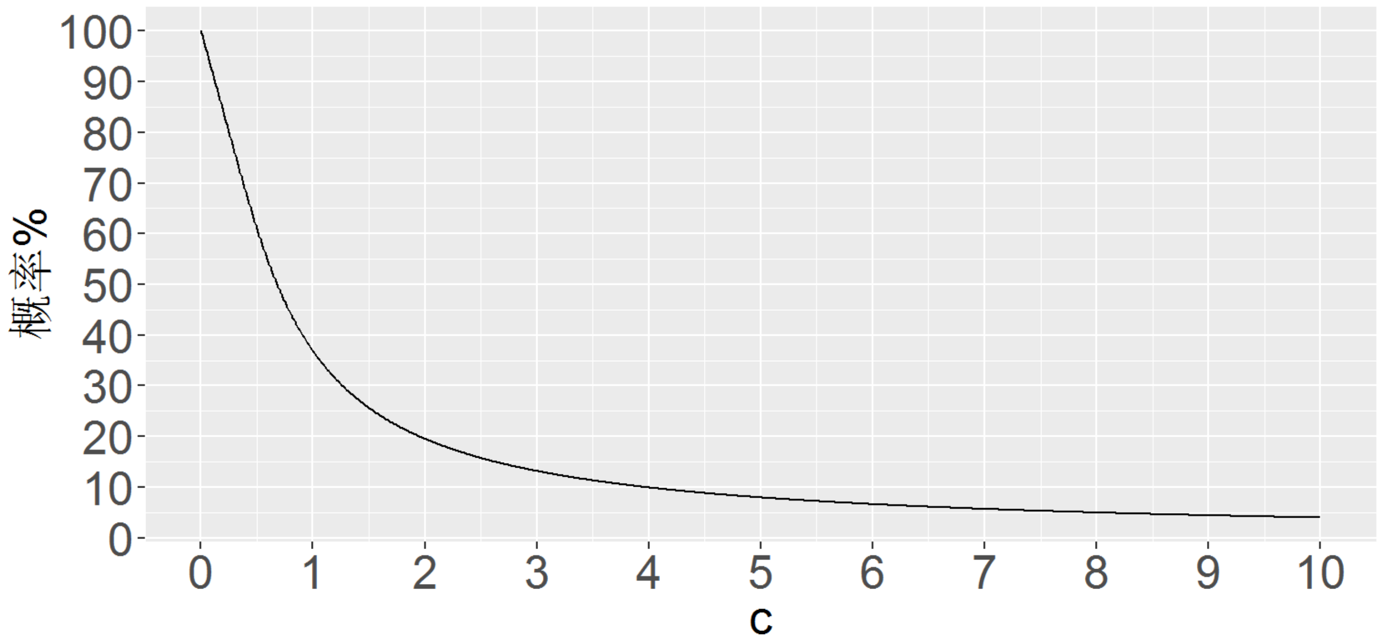
令$c=\frac{u}{w}$,

$$p(w,u)=g(c)=1-2F(-\frac{1}{c})+\sqrt{\frac{2}{\pi}}c(e^{-\frac{1}{2c^2}}-1)$$

概率只与**w,u**的比例有关，与绝对距离无关。

计算方法–碰撞概率函数单调性

概率函数导数 $g\prime(c) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}(e^{-\frac{1}{2c^2}} - 1) < 0$



w固定，**u**越大，碰撞概率越低，符合直觉 。

计算方法–估算w

给定$r_1 = 0.01, r_2 = 1.3, p_1 = 0.97, p_2 = 0.1$,根据单调性，可以得到w的范围，

$$\frac{r_1}{w} \le c_1, c_2 \le \frac{r_2}{w} \Rightarrow \frac{r_1}{g^{-1}(p_1)} \le w \le \frac{r_2}{g^{-1}(p_2)} \Rightarrow 0.27 \le w \le 0.33$$

- 如果没有倾向性，选取区间的中间。
- 如果需严格限制，w取下限
- 如果需要宽松的限制，w取上限。

并不是所有的参数都可以得到合适的w，比如上面的$p_2 = 0.05$，那么上界是0.16，小于下界，得不到合适的w。

计算方法–敏感函数强化

思路：使用逻辑与和逻辑或提高LSH函数的上界，降低LSH的下界。

逻辑与 $(r_1, r_2, p_1^r, p_2^r) - sensitive$，整体趋向0。

逻辑或 $(r_1, r_2, 1-(1-p_1)^r, 1-(1-p_2)^r) - sensitive$，整体趋向1。

逻辑与嵌套逻辑或 $(r_1, r_2, 1-(1-p_1^k)^L, 1-(1-p_2^k)^L) - sensitive$,上界趋向1，下界趋向0。去掉那些碰巧hash到一起的情况，如果真的很近，在L组计算中，总有一组k个hash均相等。

计算方法–估算L

k用来避免局部组合爆炸，一般$k = 10$。在k固定时，需要估算适当的L和组合后的概率。令ρ_1, ρ_2为强化后的上下界，

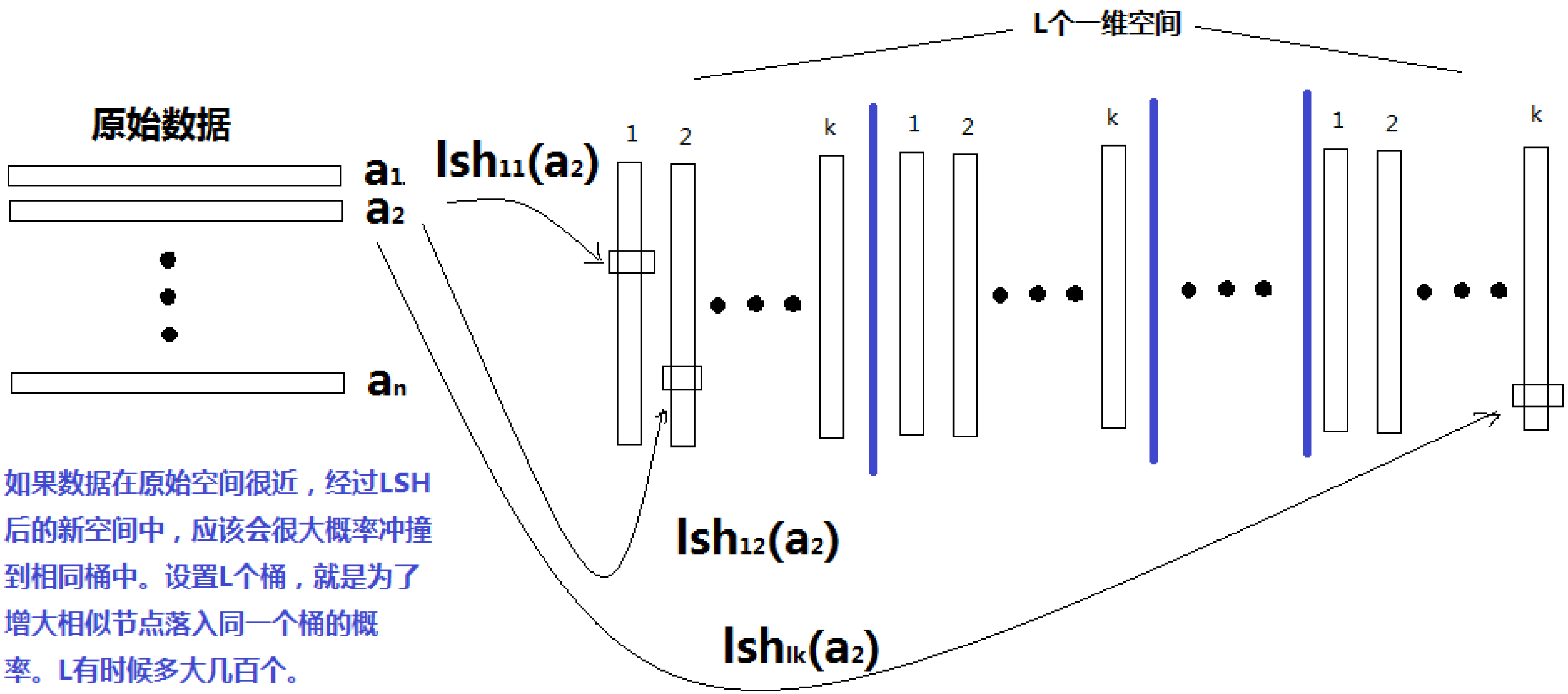
$$\rho_1 \leq 1-(1-p_1^k)^L, \rho_2 \geq 1-(1-p_2^k)^L$$

所以可以得到L的范围

$$\frac{\ln(1-\rho_1)}{\ln(1-p_1^k)} \leq L \leq \frac{\ln(1-\rho_2)}{\ln(1-p_2^k)}$$

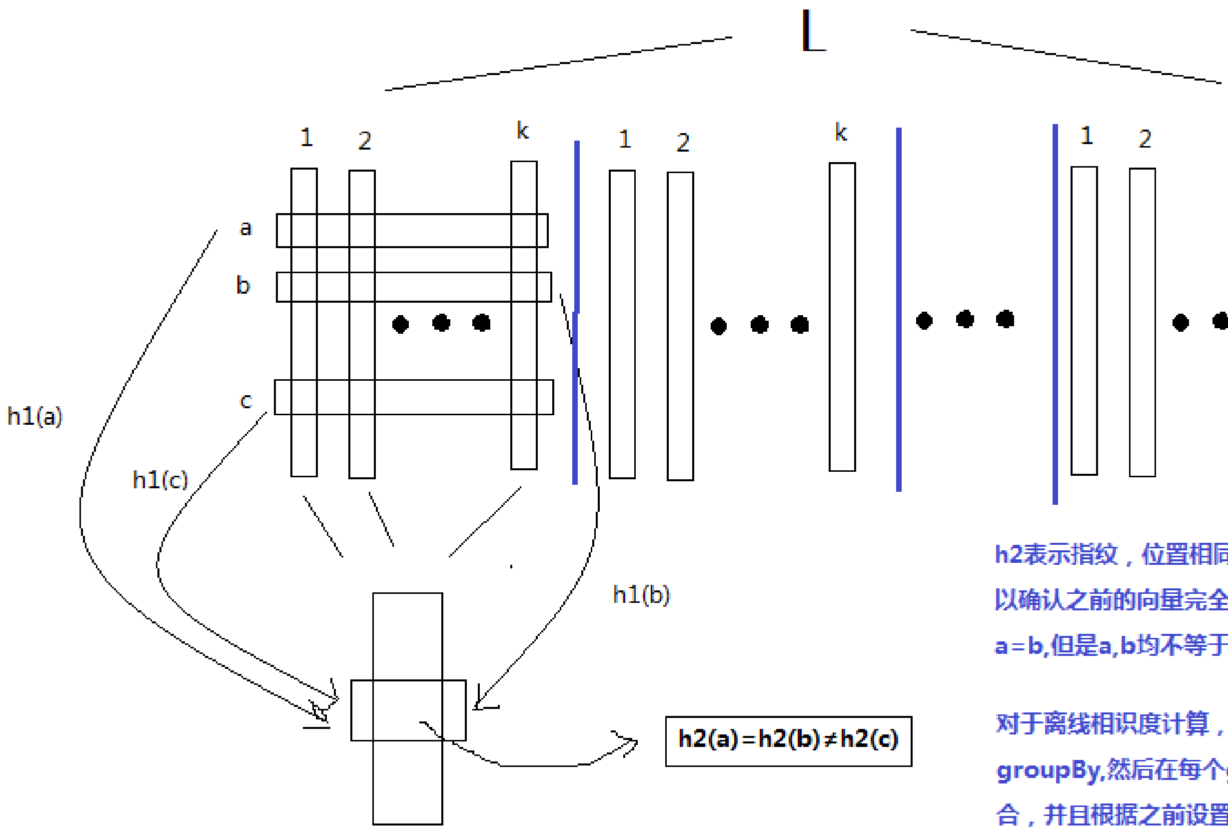
与w一样，并不是所有的目标都可以达到。假设目标是$\rho_1 = 0.99 > 0.97, \rho_2 = 0.01 < 0.1$,L至少为6可以达到此目标。

应用与实践–建表示意图



如果数据在原始空间很近，经过LSH后的新空间中，应该会很大概率冲撞到相同桶中。设置L个桶，就是为了增大相似节点落入同一个桶的概率。L有时候多大几百个。

应用与实践--查询示意图



h2表示指纹，位置相同，但是指纹不同，基本可以确认之前的向量完全不同。这个例子，说明向量a=b,但是a,b均不等于c。

对于离线相识度计算，可以直接根据键值groupBy,然后在每个group中，计算相等的组合，并且根据之前设置的范围过滤，既可以得到LSH相近的对象。

应用与实践–概况

性能

spark实现离线算法。3千万 $\times$ 15的数据，耗时13小时，138亿相似对。spark集群配置如下

```
num-executors 100
driver-memory 1G
executor-cores 2
executor-memory 10G
spark.default.parallelism=200
spark.storage.memoryFraction=0.8
spark.yarn.allocation.executor.maxMemory=35G
spark.driver.maxResultSize=4G
```

结果样本

坦克	战士	法师	刺客	辅助	射手	突进	收割	团控	远程消耗	先手	团队增益	其他	吸血	回复
0.08	0.31	0.05	0.39	0.02	0.16	0.44	0.22	0.22	0.05	0.03	0	0.03	0	0.02
0.11	0.26	0.13	0.34	0.00	0.16	0.42	0.21	0.18	0.05	0.08	0	0.05	0	0.00
0.00	0.37	0.06	0.37	0.00	0.21	0.40	0.23	0.22	0.08	0.08	0	0.00	0	0.00
0.04	0.34	0.09	0.33	0.01	0.19	0.43	0.20	0.20	0.06	0.07	0	0.02	0	0.01
0.08	0.29	0.08	0.34	0.05	0.16	0.45	0.18	0.21	0.03	0.08	0	0.05	0	0.00

应用与实践–优化I：分布合并**hash**桶

LSH算法在每个桶中，需要按k个键合并。总共需要合并L个hash桶。最开始是先分别将L个桶计算完后，然后合并去重。这样需要同时将L个桶的数据保存在内存中，非常消耗空间。所以，优化的方法是按每n(<L)个桶合并，这样最多也只需要同事保留n个hash桶的空间。

源代码参考这里

应用与实践–优化2：巨片随机化

在LSH过程中，如果数据分布非常集中，那么必然导致hash桶中一个hash key上聚集非常多的数据。比如在我的试验数据中，300万的数据，有一个hash key上聚集了1.7万的数据，称此现象为巨片。如果对这些数据进行排列组合，那么单个partition的突破spark 2GB限制，导致计算异常结束。解决方法是设置一个阀值，如果单个key聚集的对象数量高于这个阀值，就随机取样少量相识对象。这样效果不会太差，因为能够聚到一起的，说明本来就很相似。但是效率却得到了极大提升。

源代码参考这里

应用与实践–优化3：数据id变成整型

有些数据的id是字符串型，该数据十分消耗内存，建议通过hash的方法将其转成整型。比如我的试验数据集合，原始id是32个字符串，通过hash变成Long后，只有8个字节，空间节省了75%。虽然hash过程中可能存在一定冲撞，但应是小概率时间，可以忽略。

源代码参考这里

应用与实践–优化4：减少频繁Iterable转IndexedSeq

这个地方是没有注意的细节，修改后效率极大提升，所以还是记录于此。GroupByKey后得到的对象是Iterable，无法随机访问，必须转成IndexedSeq对象。修改之前，每次都在随机访问时转成IndexedSeq，相当消耗性能，尤其部分倾斜的分区计算相当滞后。修改后，只转换一次IndexedSeq，后续访问重复利用，性能得到了极大的提升。

源代码参考这里

应用与实践–优化5：手动Hash分区

这个问题可以参考StackoverFlow中问题。在优化1-分布合并**hash**桶时，结果需要调用partitionBy(new HashPartitioner(parts))，将结果转成ShuffledRDD。因为distinct操作可以最大化利用ShuffledRDD的，减少不必要的重新排序和网络传输。

源代码参考121和138行

参考文献

- LSH在欧式空间的应用(1)–碰撞概率分析
- LSH在欧式空间的应用(2)–工作原理
- LSH在欧式空间的应用(3)–参数选择
- LSH在欧式空间的应用(4)–算法实现与优化总结
- StackOverflow spark: How to merge shuffled rdd efficiently?
- Mining of Massive Datasets,第二版， 3.6.3节
- E^2LSH 0.1 User Manual, Alexandr Andoni, Piotr Indyk, June 21, 2005, Section 3.5.2
- (2004)Locality-Sensitive Hashing Scheme Based on p-Stable
- (2008)Locality-Sensitive Hashing for Finding Nearest Neighbors

附录I–碰撞函数推导

$$
\begin{aligned}
p(u) &= 2\left(\int_0^w \frac{1}{u} f\left(\frac{t}{u}\right) dt - \int_0^w \frac{1}{u} f\left(\frac{t}{u}\right) \frac{t}{w} dt\right) \\
&= 2\left(\int_0^w f\left(\frac{t}{u}\right) d\frac{t}{u} - \int_0^w \frac{1}{u\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{t^2}{2u^2}} \frac{t}{w} dt\right) \\
&= 2\left(\int_0^{\frac{w}{u}} f(x) dx - \frac{-u}{\sqrt{2\pi} w} \int_0^w e^{-\frac{t^2}{2u^2}} d\left(-\frac{t^2}{2u^2}\right)\right) \\
&= 2\left(\frac{1}{2} - F\left(-\frac{w}{u}\right) + \frac{u}{\sqrt{2\pi} w} e^{-\frac{t^2}{2u^2}} \Big|_0^w\right) \\
&= 2\left(\frac{1}{2} - F\left(-\frac{w}{u}\right) + \frac{u}{\sqrt{2\pi} w} \left(e^{-\frac{w^2}{2u^2}} - 1\right)\right)
\end{aligned}
$$

f和F分别为标准正太分布的概率密度函数和累积分布函数。

附录2–碰撞函数单调性

$$
\begin{aligned}
g\prime(c) &= -2f(-\frac{1}{c})(-1)(-1)c^{-2} + \sqrt{\frac{2}{\pi}}(e^{-\frac{1}{2c^2}} - 1) + \sqrt{\frac{2}{\pi}}c(e^{-\frac{1}{2c^2}}(-\frac{1}{2})(-2)c^{-3}) \\
&= -\frac{2}{c^2}f(-\frac{1}{c}) + \sqrt{\frac{2}{\pi}}(e^{-\frac{1}{2c^2}} - 1) + \sqrt{\frac{2}{\pi}}e^{-\frac{1}{2c^2}}c^{-2} \\
&= -\frac{2}{c^2}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{1}{2c^2}} + \sqrt{\frac{2}{\pi}}(e^{-\frac{1}{2c^2}} - 1) + \sqrt{\frac{2}{\pi}}e^{-\frac{1}{2c^2}}c^{-2} \\
&= \sqrt{\frac{2}{\pi}}(e^{-\frac{1}{2c^2}} - 1) < 0
\end{aligned}
$$

附录3–w估计R代码

```
# 碰撞函数
root_fun <- function(target) {
  function(c) {
    1-2*pnorm(-1/c) + (2*c/sqrt(2*pi))*(exp(-1/(2*c^2))-1) - target
  }
}
# 碰撞函数反函数
g_i <- function(p) {
  uniroot(root_fun(p),lower = 1e-10, upper = 10, tol = 1e-5)$root
}

r1 <- 0.01;r2 <- 1.3
p1 <- 0.97;p2 <- 0.1 #p2 <-  0.05

r1 / g_i(p1) # 下界
r2 / g_i(p2) # 上界
```

附录4–L估计R代码

```
k <- 10
p1 <- 0.97
p2 <-  0.1
rho1 <- 0.99
rho2 <- 0.01

log(1-rho1) / log(1-p1^k)
log(1-rho2) / log(1-p2^k)

L <- ceiling(log(1-rho1) / log(1-p1^k))
L
```