KYOTO UNIVERSITY

アルゴリズムとデータ構造⑧
～ 近傍探索 ～

鹿島久嗣

DEPARTMENT OF INTELLIGENCE SCIENCE AND TECHNOLOGY

近傍探索：
あるデータに最も類似するデータを探すためのデータ構造

- ボロノイ図
- k-d木
- ランダム射影

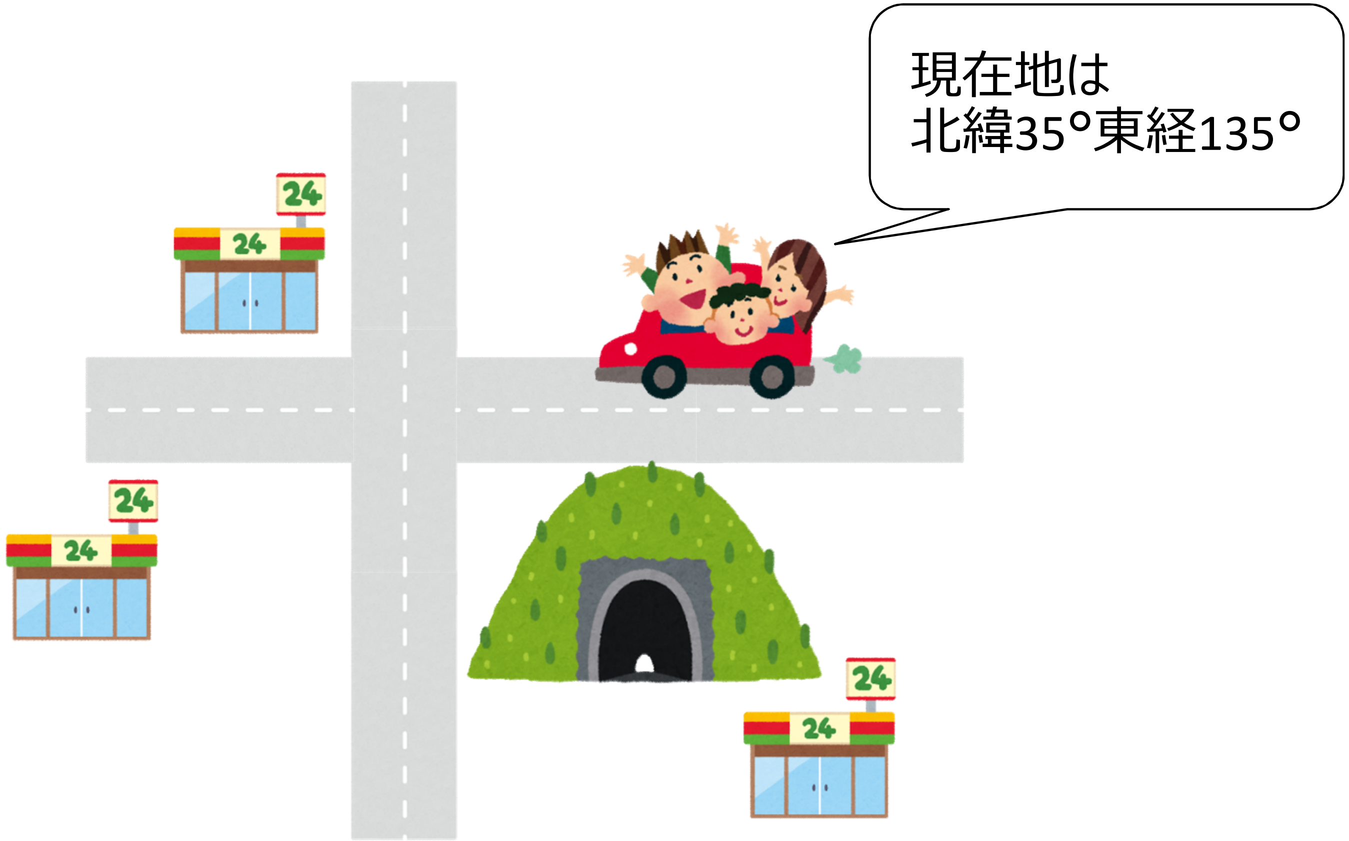
近傍探索問題

近傍探索：類似データを探す問題

- これまで考えてきた探索問題は、質問と<u>同一の</u>キーをもつデータを探す問題
- 近傍探索：質問に<u>類似した</u>データを探す
  - 最近傍探索：最も類似したデータを探す
  - もしくは一定度以上類似したデータを探す
- たとえば：
  - 近隣施設の検索（地理情報システム）
  - 文字認識（パターン認識）

最近傍探索の例：
近隣施設の検索

- 「OK、G☺☺gle。最寄りのコンビニはどこ？」



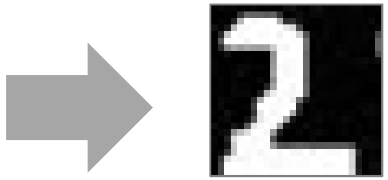
手書き文字認識：
過去の手書き文字データをもとに認識する

- 手書き数字認識：手書きの数字を読み込み０～９の数字を認識する

- 正解の分かっている手書き数字データをもとに、新たな手書き数字を認識する

収集した手書き文字データ

これは何？



手書き数字の表現:
手書き数字を多次元のベクトルとして表現

- 各数字を 16×20＝320次元の2値ベクトルとして表現

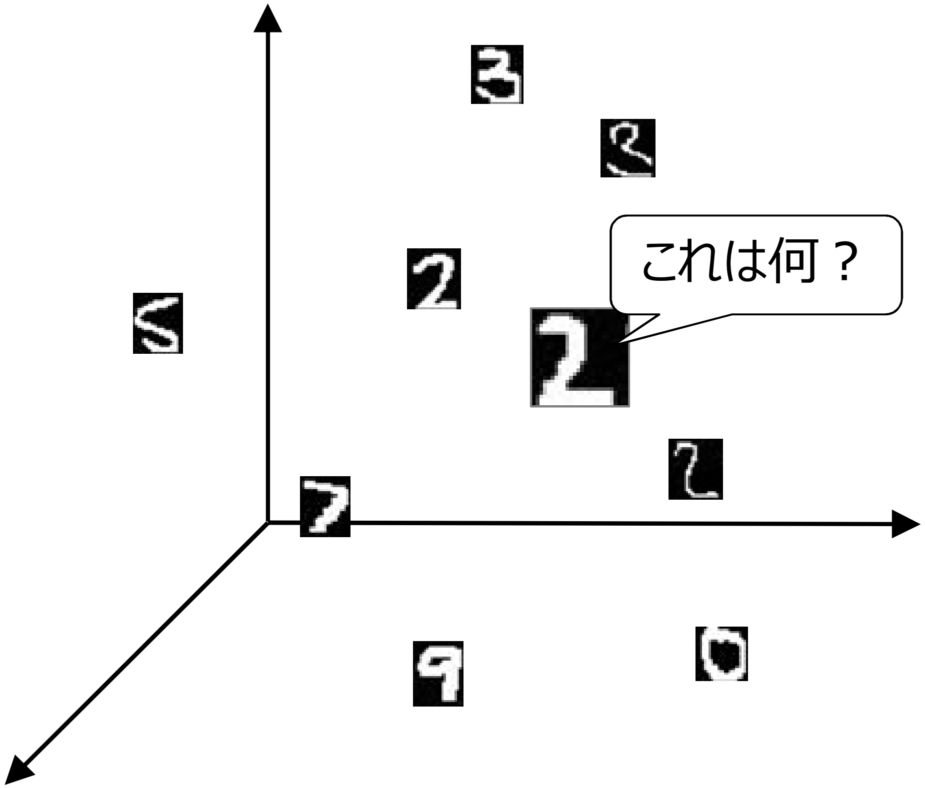
```
0,0,@,1,1,1,1,0,0,0,0,0,0,0,0,0
0,1,1,1,1,1,1,1,1,0,0,0,0,0,0,0
1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,0,0,0,0,0,0
1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,0,0,0,0,0,0
0,0,0,0,0,0,1,1,1,1,0,0,0,0,0,0
0,0,0,0,0,0,1,1,1,1,0,0,0,0,0,0
0,0,0,0,0,0,1,1,1,1,0,0,0,0,0,0
0,0,0,0,0,0,1,1,1,1,0,0,0,0,0,0
0,0,0,0,0,0,1,1,1,1,0,0,0,0,0,0
0,0,0,0,0,1,1,1,1,1,0,0,0,0,0,0
0,0,0,0,1,1,1,1,1,0,0,0,0,0,0,0
0,0,0,0,1,1,1,1,1,0,0,0,0,0,0,0
0,0,0,0,1,1,1,1,0,0,0,0,0,0,0,0
0,0,0,1,1,1,1,0,0,0,0,0,0,0,0,0
0,1,1,1,1,1,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0
0,1,1,1,1,1,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0
0,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1
1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1
1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1
1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1
```

```
0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0
0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,1,1,1
0,0,0,0,1,0,0,1,1,1,1,1,1,1,1,1
0,0,0,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1
0,0,0,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,0,0,0
0,0,1,1,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0
0,1,1,1,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0
0,1,1,1,0,1,1,1,0,1,1,1,0,0,0,0
0,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,0,0,0
1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,0
0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,1,1,1,0
0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,1,1,1,0
0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,1,1,0
0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,1,1,0
0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,1,1,1,0
0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,1,1,1,0
0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,1,1,1,0
0,1,1,0,0,0,0,0,0,0,1,1,1,1,1,0
0,1,1,1,1,1,0,0,0,0,1,1,1,0,0,0
0,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,0,0,0,0
```

- ピクセルの濃淡がある場合、実数値ベクトル
- あるいは局所的なパターンの出現で特徴ベクトルを構成する

手書き数字の認識：
過去の例の中から対象に最も近いものを見つける

- 対象の手書き文字に最も近いものを多次元空間内で発見する



ボロノイ図・ドロネー図

ボロノイ図・ドロネー図：
空間全体をn個の点のいずれに近いかで分割する

- 空間（通常2次元）全体を点集合$S = \{P_1, P_2, \dots, P_n\}$（母点とよぶ）のどれに近いかで分割したもの

- P_iのボロノイ領域： $d(P, P_i) < d\left(P, P_j\right)$ $(i \neq j)$となるP全体（ dは空間上の距離）
  - ボロノイ辺：2つのボロノイ領域を隔てる境界辺
  - ボロノイ点：3つ以上のボロノイ領域の境界が共有する点

- ドロネー図：ボロノイ領域が隣り合う母点同志を線分で結んでできる図形

ボロノイ図を使った最近傍点探索：
空間全体をn個の点のいずれに近いかで分割する

- アルゴリズム：検索点Pに対するSの最近傍点を出力

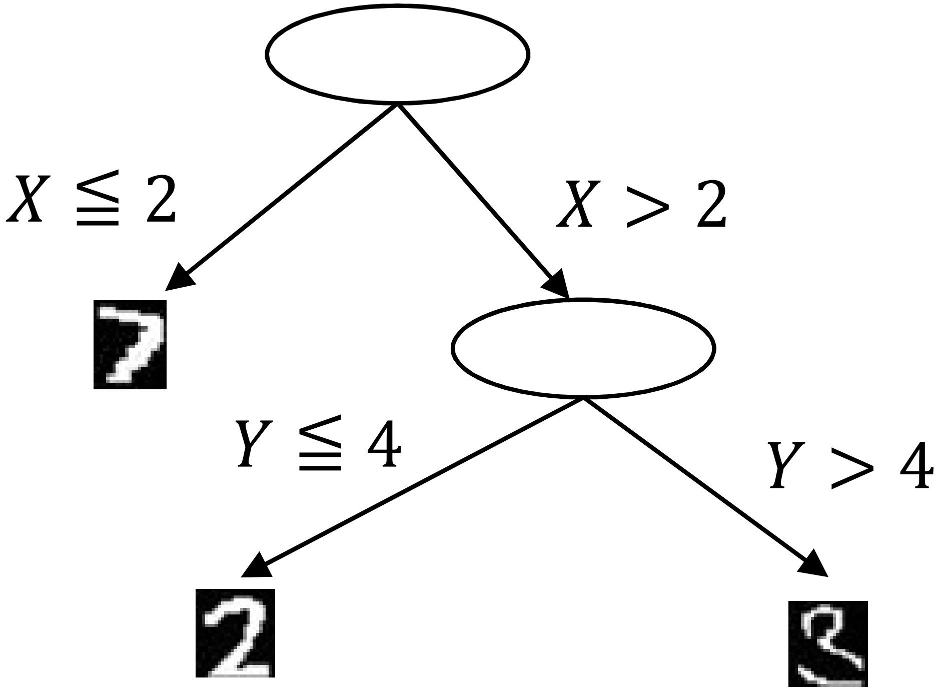
1. 任意の母点P_iを選ぶ
2. P_iに隣接する母点の中でPに最も近い点P_jを見つける
   - 隣接：ボロノイ領域が隣り合う（ドロネー辺がある）
3. $d(P, P_i) < d\left(P, P_j\right)$なら$P_i$を最近傍点として出力し終了
4. そうでなければ$P_i \leftarrow P_j$としてステップ2へ

- 点が概ね一様に分布しているとして$O(\sqrt{n})$

k-d木

2分木による近傍探索：空間探索のための探索木

- 空間を探索するための探索木をつくる
- 空間全体の領域分割を各次元における 2 分割を繰り返すことで行う



k-d木：
空間探索のための探索木

- k-d木： k次元の空間を探索するための2分探索木
- k-d木において、各々の分割はデータ点において行われる

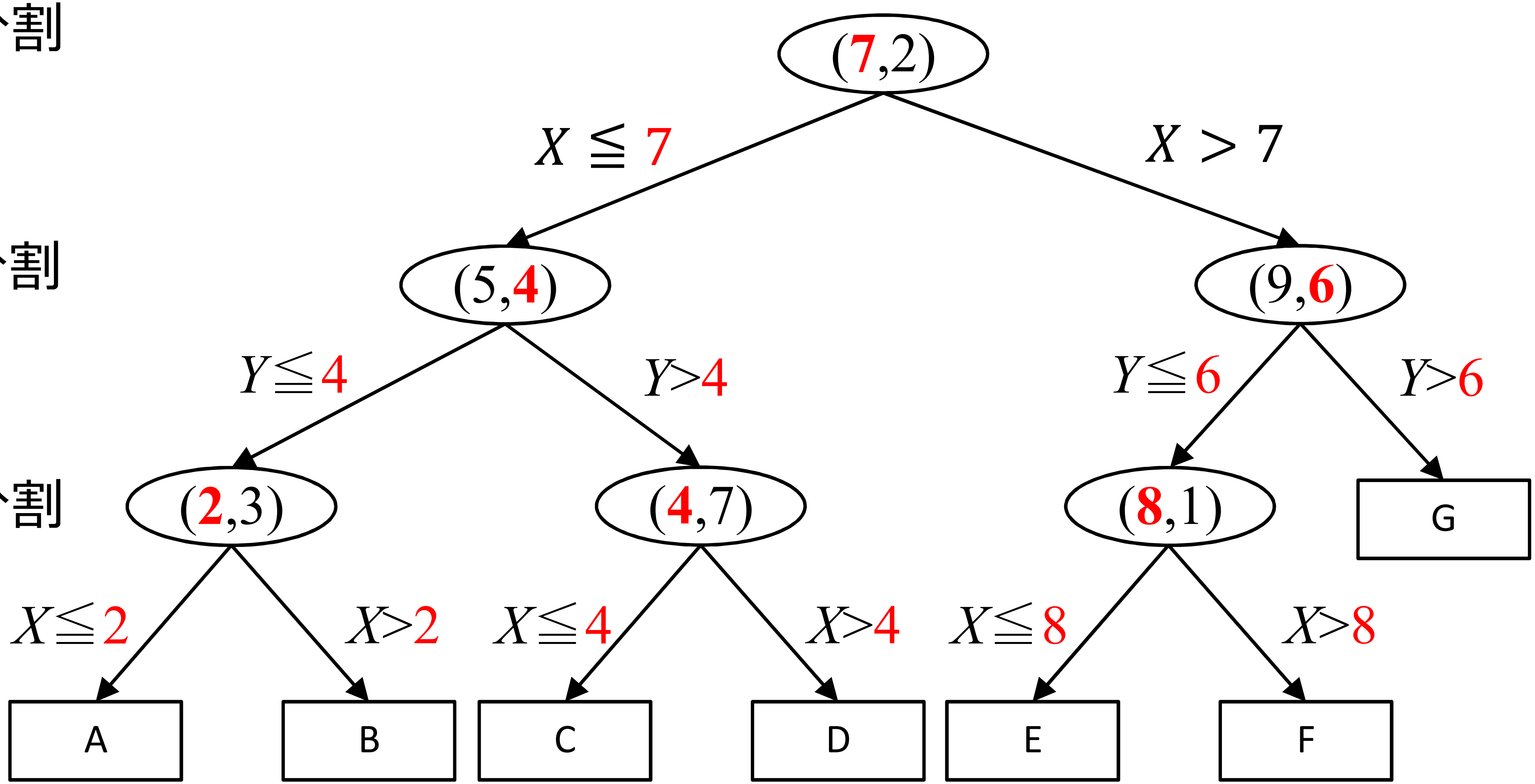
k-d木の例：
空間をデータ点で領域に分割

- 例：2次元データ (2,3), (5,4), (9,6), (4,7), (8,1), (7,2)

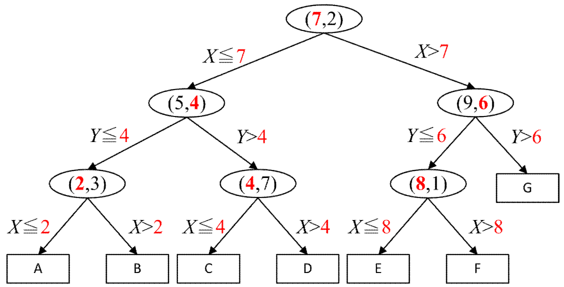
X軸で分割

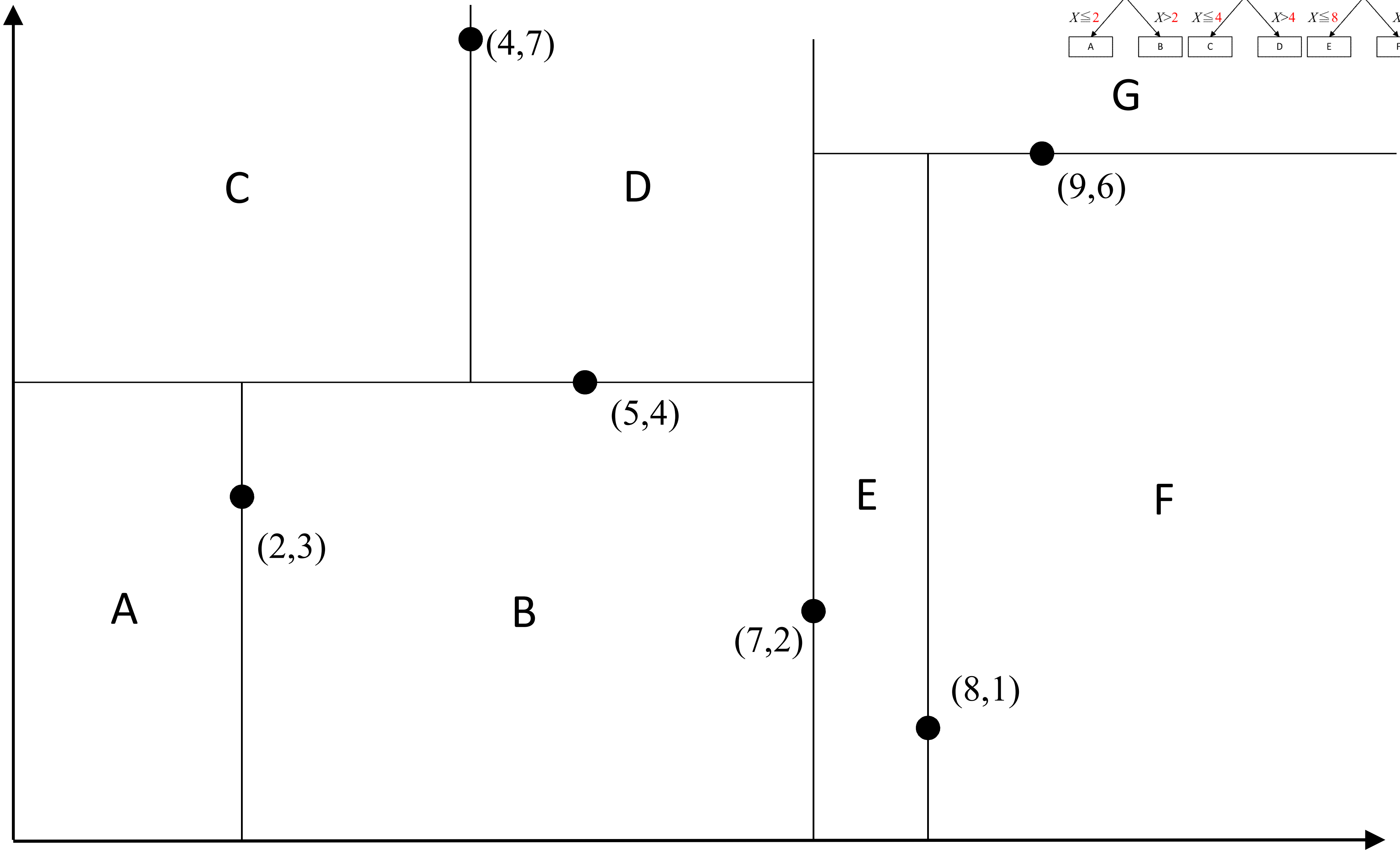
Y軸で分割

X軸で分割



k-d木の例：空間をデータ点で領域に分割

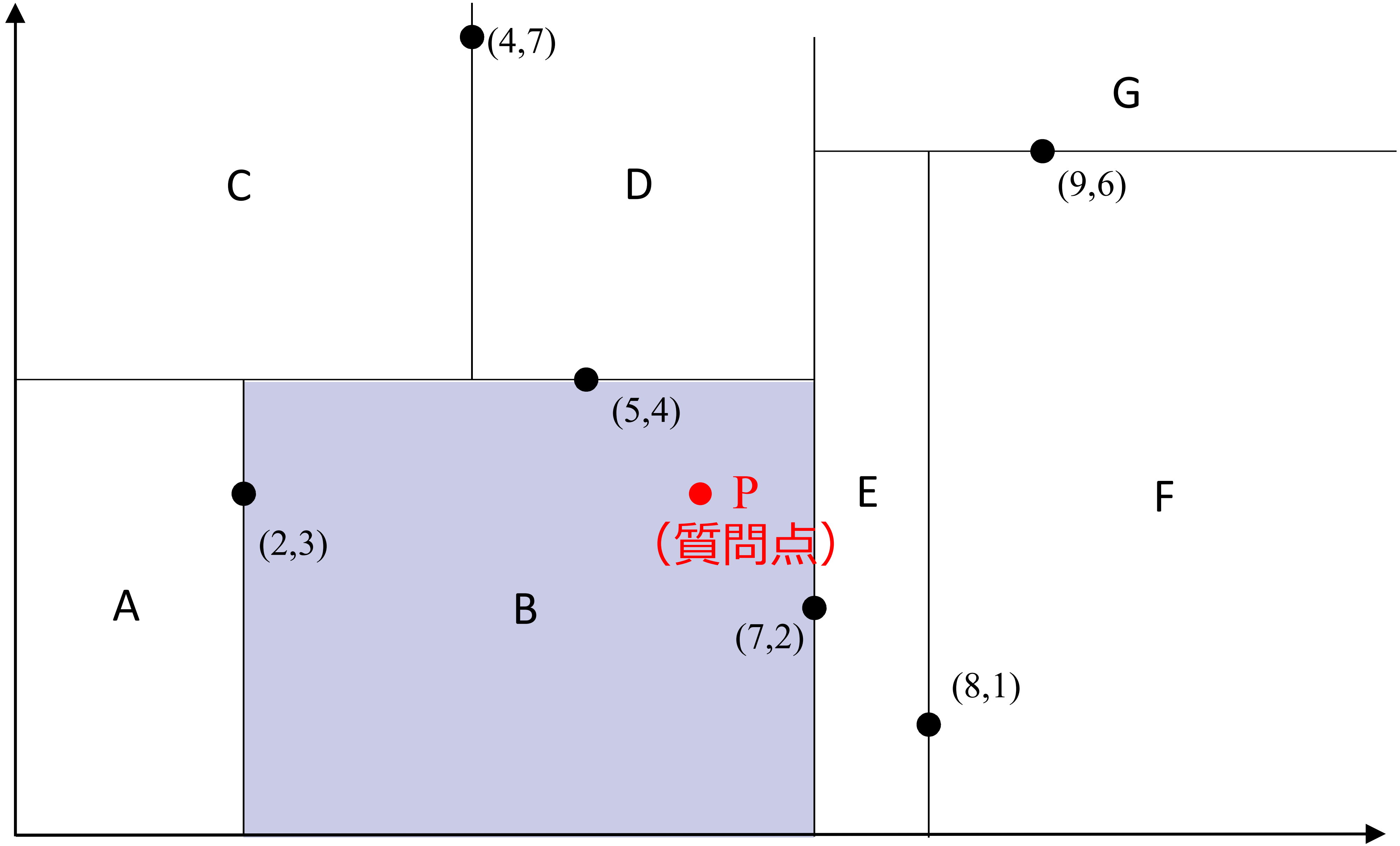




k-d木の構成：
分割軸を決めて中央値で分割する

- 構成法（のひとつ）
  - 軸を適当な順で選ぶ（たとえば分散が最大の軸）
  - 選んだ軸について、領域に含まれるデータの（その軸についての）中央値となるデータで分割
  - 再帰的に分割を繰り返して、これ以上分割できなくなったときに終了
- 探索木は平衡木が望ましい
  - 中央値で分割を繰り返すので、高さはおおむね $\log n$

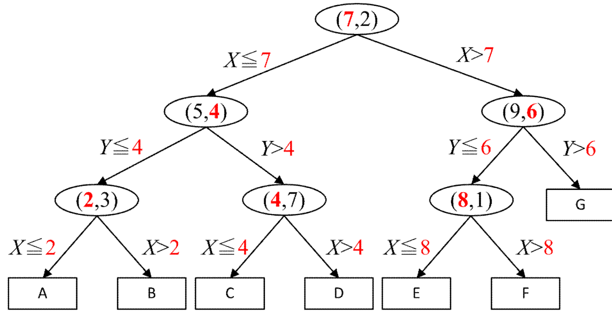
k-d木による質問点の探索：
探索木を下ることで質問点を含む領域を$O(\log n)$で発見

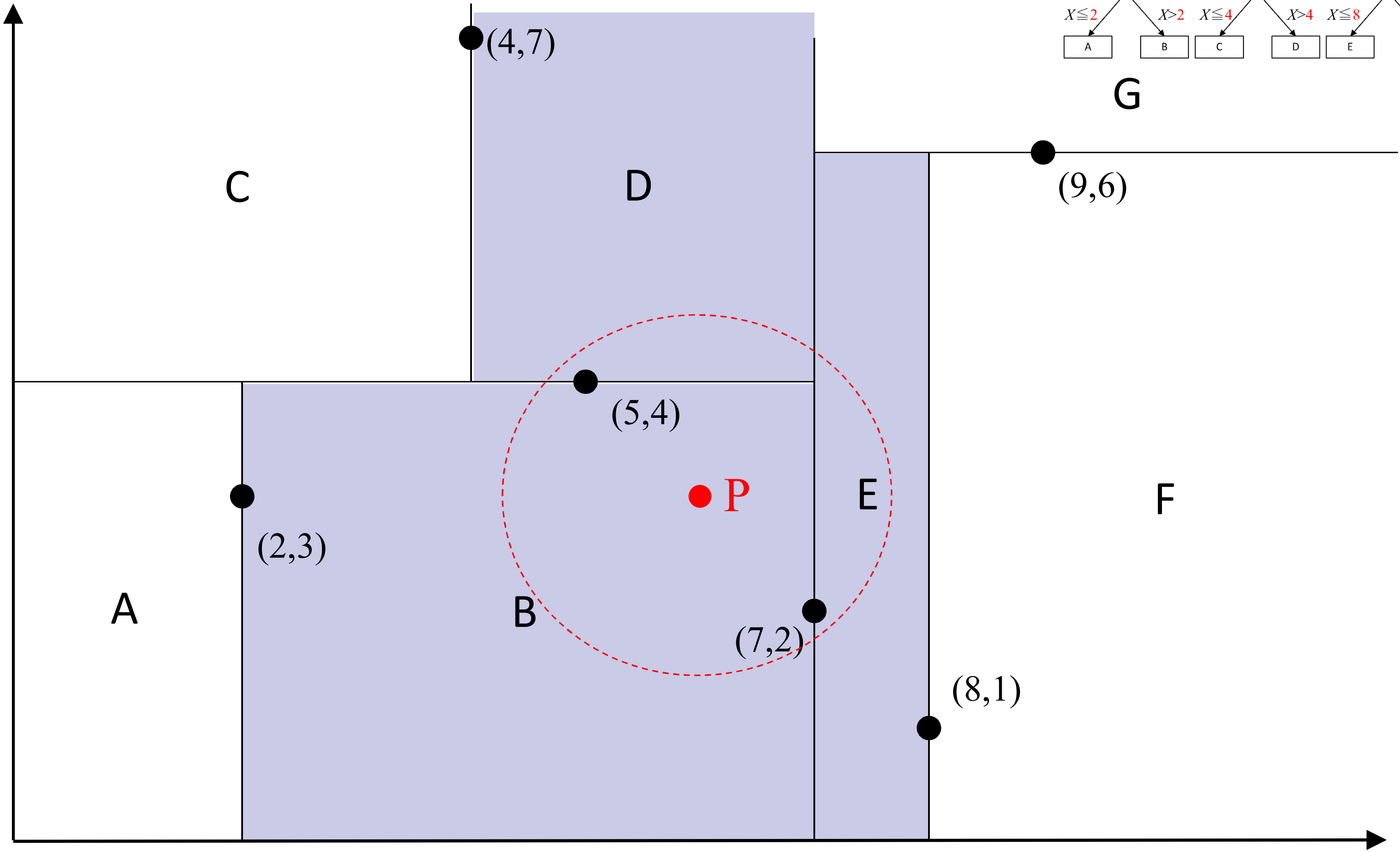


k-d木による近傍点の探索：枝刈りによって効率的に探索を行う

- 質問点Pを含む半径rの領域にデータがあるかを調べたい
- 基本方針：質問点Pを含む半径rの領域と、分割された各領域に重なりがあるかをチェックしながらk-d木を下る
- k-d木の各分岐において：質問点Pを含む半径rの領域に…
  - 分岐点が含まれれば解として記録しておく
  - 分岐先の領域が重なるなら、そちらの探索を続行する
    - 両方の分岐先の領域と重なるなら、両方探索する
    - 重ならない領域については、以降の分岐の探索は打ち切れる
- 最悪の場合、すべての分岐をチェックする必要が生じる

k-d木による近傍点の探索：
枝刈りによって効率的に探索を行う

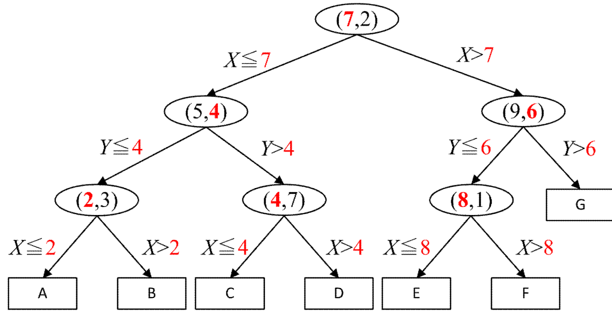


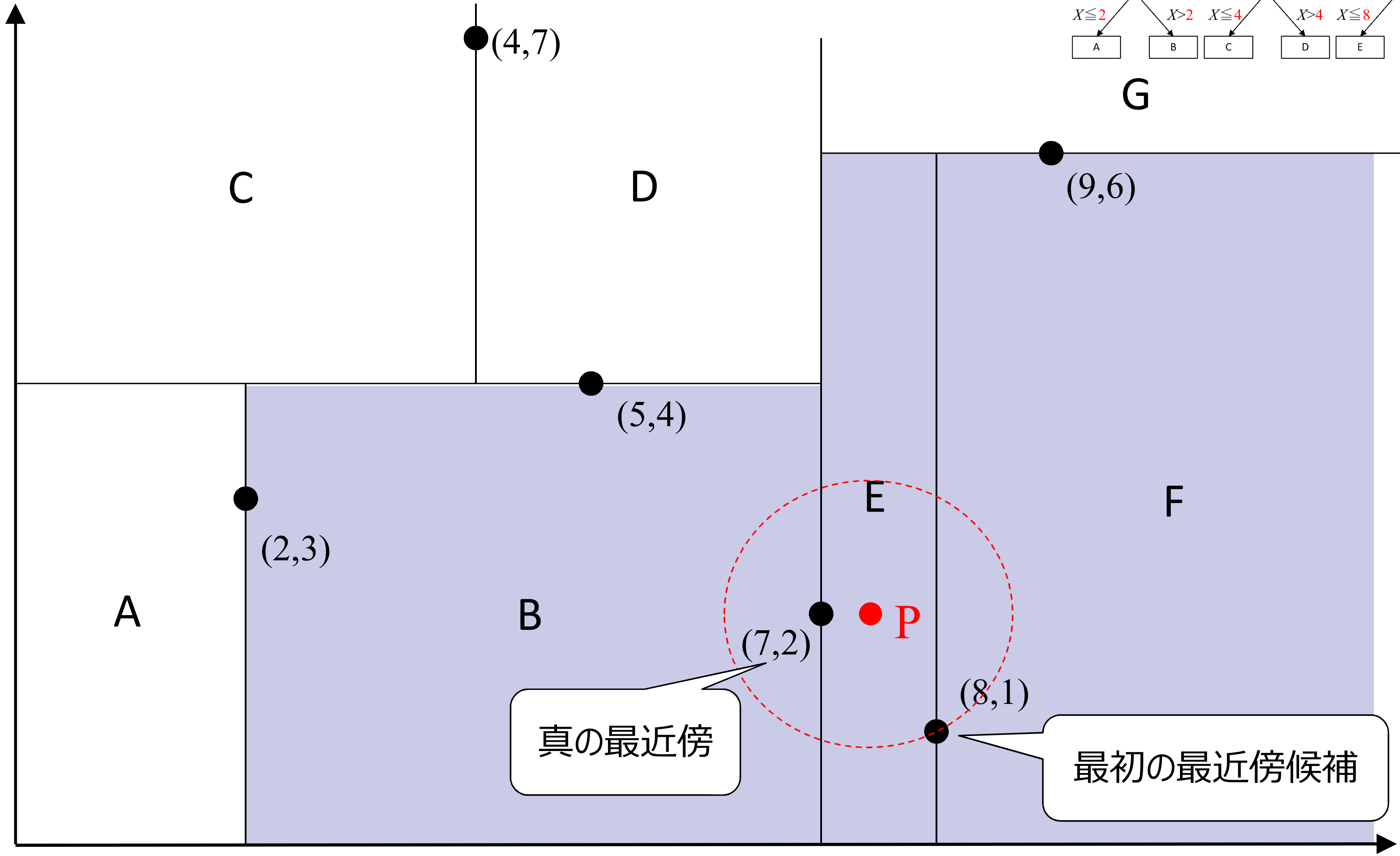


k-d木による最近傍点の探索：近傍点探索を少し変更

- Pに近い点が見つかる度に、暫定的な最近傍点P'と距離rを更新
  - 初めはPを含む領域を見つけ最も葉に近い分割点を初期P'とする
  - Pから半径r以内により近い点がなければP'が真の最近傍点
- もう少し効率のよい方法：深さ優先探索
  - 現在の領域から木を上に上がっていきながら分岐点をチェック
  - 分岐点の反対側の領域が、Pから半径r以内の領域と被っていれば、他方の分岐先も調べる
  - より近い点を見つけたら、P'とrを更新
  - 根において、探索すべき方向がなくなったら終了

k-d木による最近傍点の探索：枝刈りによって効率的に探索を行う





高次元の探索：
k-d木は高次元で効率が悪いので次元削減が必要

- k-d木が有効なのは数次元程度
  - データ数 $n \gg 2^k$ が望ましい
- 高次元の場合に、探索効率が悪くなる（多くの点を調べることになる）
- 次元削減によって次元を落としてからk-d木を適用する
  - ランダム射影
  - 主成分分析
  - …

ランダム射影

次元削減：
データの低次元表現を見つける

- D次元ベクトル$\mathbf{x}$に対し$D' \times D$行列AをかけてD次元ベクトル$\mathbf{x}'$に変換する：$\mathbf{x}' = A\mathbf{x}$
  - $D' < D$、つまり$\mathbf{x}'$の次元は$\mathbf{x}$より小さい
- Aの決め方：
  - $\mathbf{x}'$が元の$\mathbf{x}$の情報をできるだけ保持するようにAを決める
  - たとえば再構成誤差を最小化すると、主成分分析
    - $D \times D'$行列Bで再構成 $\tilde{\mathbf{x}} = B\mathbf{x}' = BA\mathbf{x}$
    - 再構成誤差$||\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{x}||$を最小化する$A$と$B$を決める

ランダム射影：
距離を保存する次元削減

- Aをランダムに決めてみる：
  Aの各要素を平均0の一様分布や正規分布で生成

- 定理：２つのD次元ベクトル$\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$の距離は、変換前後で「あまり」かわらない

$$\| \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2 \|_2 \approx \sqrt{\frac{D}{D'}} \| A\mathbf{x}_1 - A\mathbf{x}_2 \|_2$$

ランダム射影木：ランダム射影とk-d木の組み合わせ

- 分割軸を、もともとの次元の一つを選ぶのではなく、1次元へのランダム射影によってつくる
- 分割のたびに新しい軸を作って分割を行う

ボロノイ図を使った最近傍点探索：空間全体をn個の点のいずれに近いかで分割する

- n点が$[0,\sqrt{n}] \times [0,\sqrt{n}]$に分布している
- $\sqrt{n} \times \sqrt{n} = n$個のバケットを用意
  - それぞれのバケットにリストをつける
  - $P_i = (x_i, y_i)$とすると、$\lceil x_i \rceil \lceil y_i \rceil$　のバケットに入れる
- 検索点Pに対応するバケットはO(1)で見つけられる