Recuperación de Información Multimedia

Índices Multidimensionales

(Árboles, Hashing, Filling Curves)

CC5213 – Recuperación de Información Multimedia
Departamento de Ciencias de la Computación
Universidad de Chile
Juan Manuel Barrios – https://juan.cl/mir/ – 2020

Índices Multidimensionales

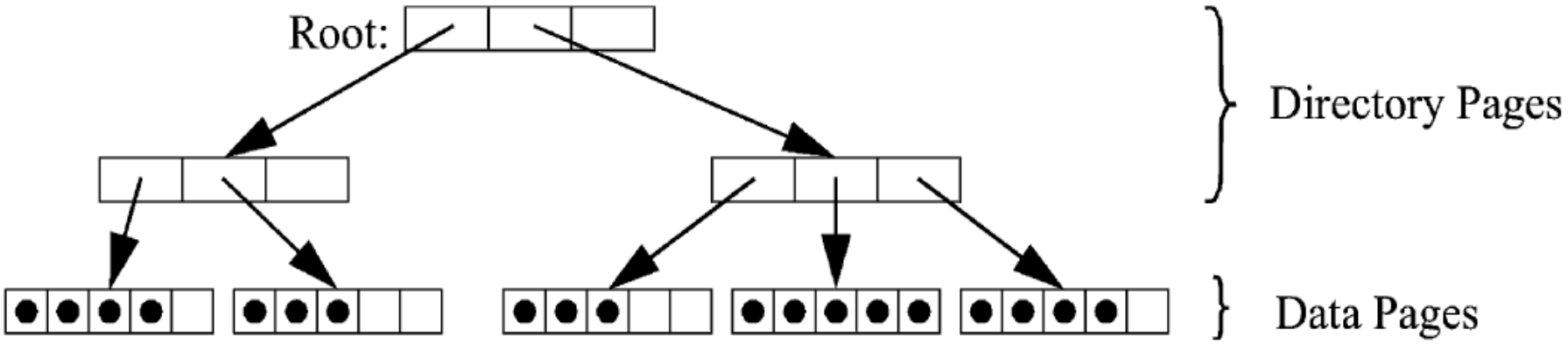
- Asumen que los datos son vectores
- Usan los valores de las coordenadas para agrupar vectores
  - Árboles: Agrupar vectores en regiones espaciales ordenadas jerárquicamente
  - Hashing: Asignar vectores a una o más tablas de tamaño fijo
  - Filling Curves: Convertir el espacio multi-dimensional en un espacio unidimensional

Árboles Multidimensionales

- En general son árboles balanceados
- Contienen dos tipos de nodos:
  - Nodos internos o Páginas de directorio
    - Describen una región espacial
    - Almacenan punteros a nodos hijos (internos/hojas)
  - Nodos hoja o Páginas de datos
    - Almacenan punteros a vectores (descriptores)
- Los nodos tienen una capacidad máxima de almacenamiento de punteros

Árboles Multidimensionales

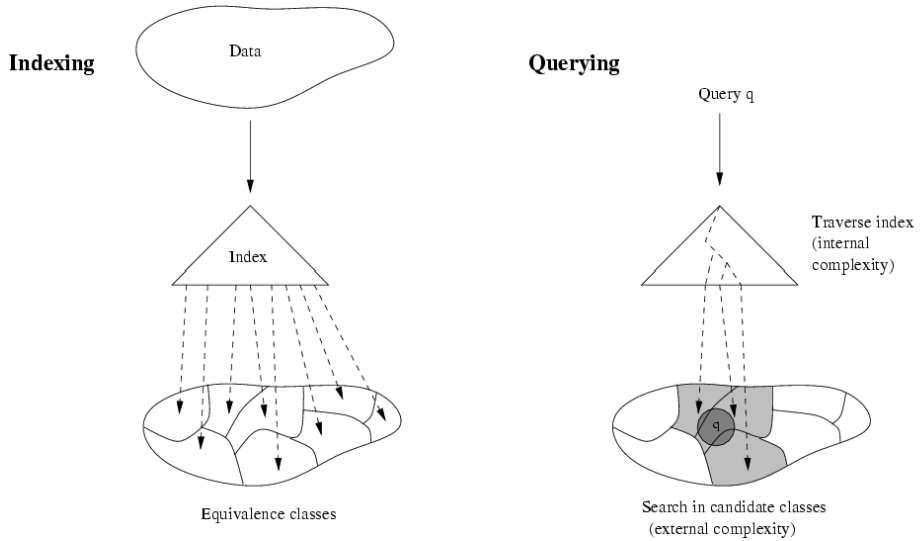
- Estructura básica



Ver Böhm et al. 2001

Árboles Multidimensionales

- Nodos internos definen regiones espaciales jerárquicas
  - Los elementos de un nodo están contenidos por su padre
- Puntos cercanos idealmente se almacenarán en la misma página de datos o subárbol
- Durante la búsqueda se visitan las regiones que tienen intersección con la bola de consulta



Ver Chávez et al. 2001

Árboles Multidimensionales

- Cada tipo de índice utiliza distintas formas de región espacial:
  - Hipercubo
  - Hiperesfera
  - Otras regiones convexas (cilindros, intersecciones, etc.)

Índices estáticos y dinámicos

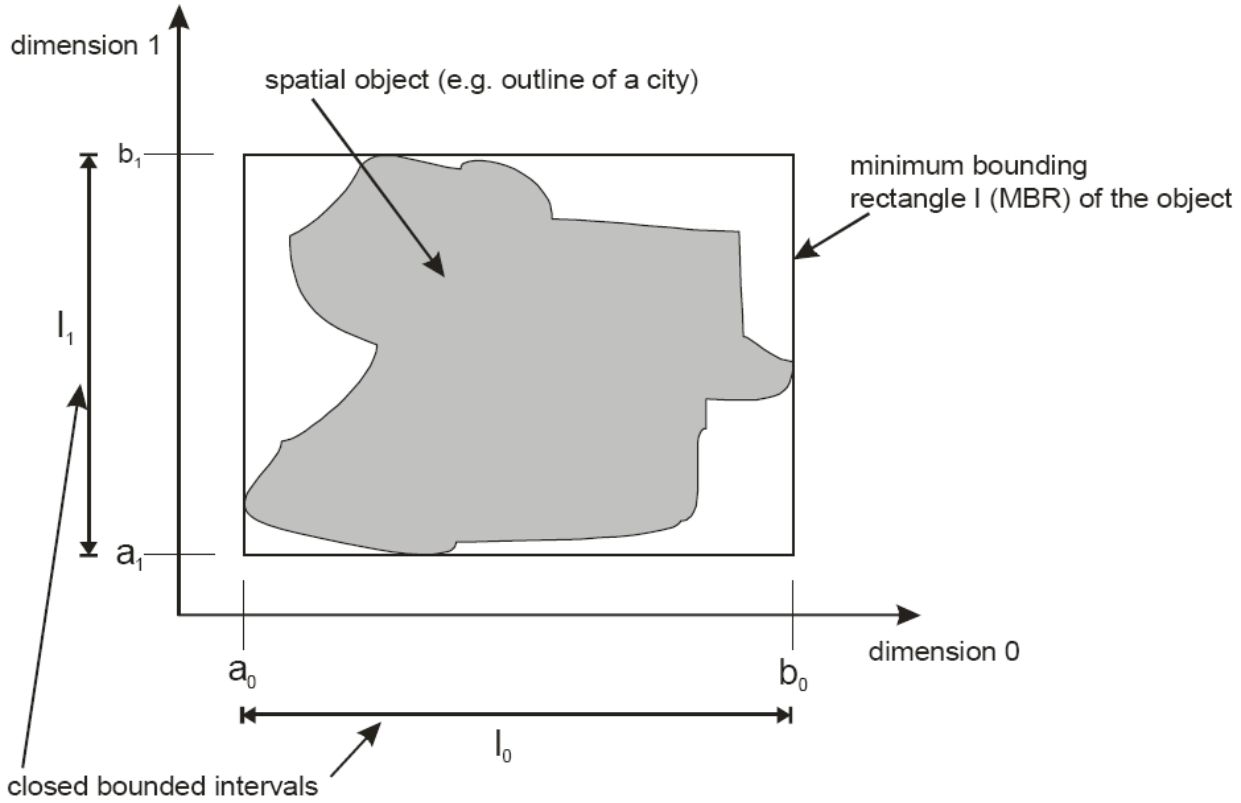
- Fase offline: Se construye el índice con todos los vectores del dataset
- Fase online: El índice se utiliza para responder consultas
- Índice estático: No se modifica su estructura mientras está online
- Índice dinámico: Es posible modificar su estructura mientras está online
  - Operaciones de inserción y borrado incrementales con costo $O(\log n)$
  - Puede iniciar vacío y alimentarlo en la medida que se obtienen nuevos datos

R-Tree

- Permite buscar objetos espaciales (ya sea vectores o figuras) en el espacio
- Árbol balanceado similar a un B-Tree
- Construye *Minimum Bounding Rectangles* (MBR) para agrupar objetos
- Estructura dinámica: inserciones y borrados incrementales

Estructura del R-Tree

- Ejemplo de región espacial (MBR)



Propiedades del R-Tree

- Cada nodo (excepto la raíz) contiene entre *m* y *M* registros
  - *M*: número máximo de entradas en un nodo
  - *m*: número mínimo de entradas en un nodo

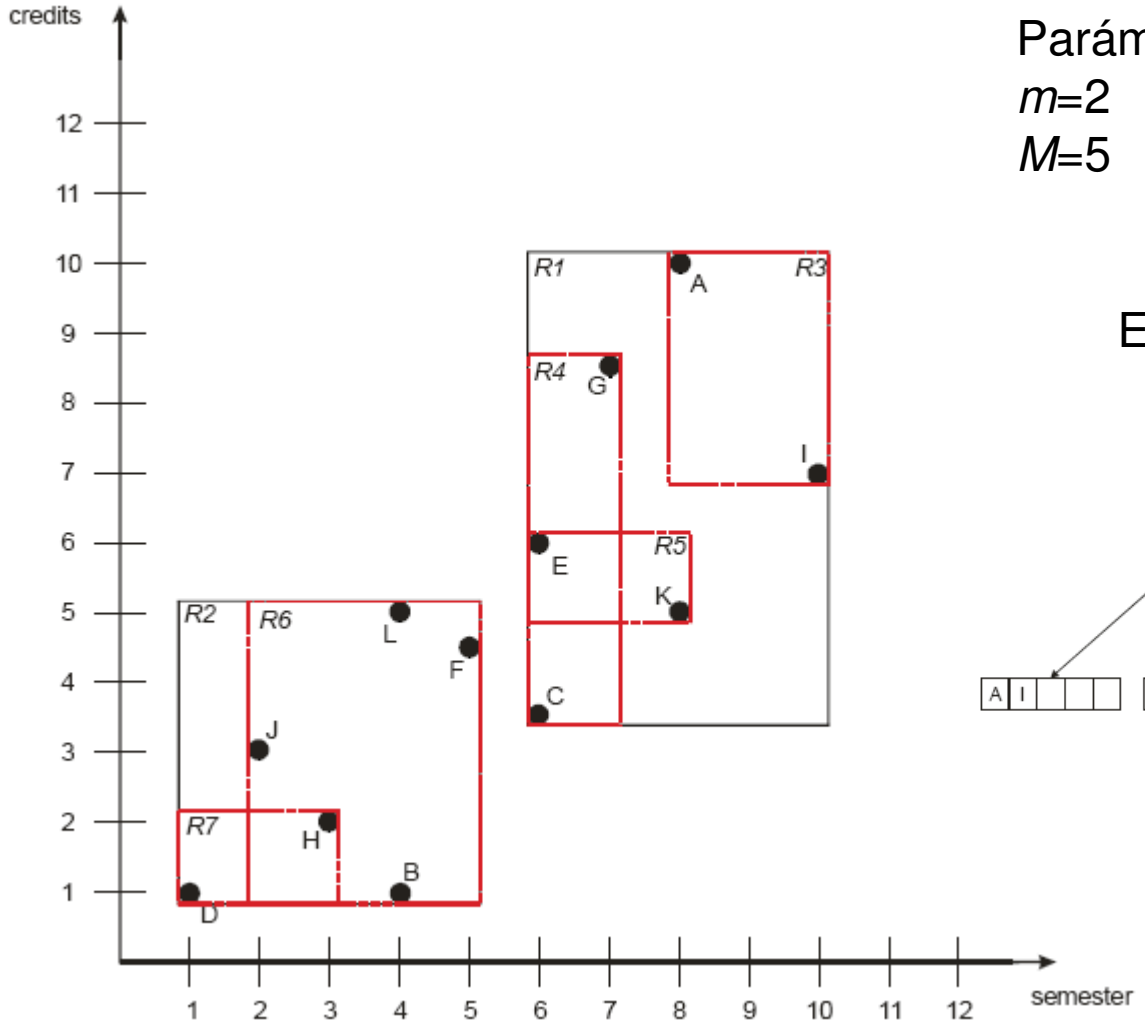
$$m \leq \frac{M}{2}$$

- Para cada nodo interno se calcula el menor rectángulo que contiene sus objetos hijos
  - Minimum Bounding Rectangle (MBR)
- La raíz contiene a lo menos dos hijos, excepto si es una hoja
- Todas las hojas están al mismo nivel

Estructura del R-Tree

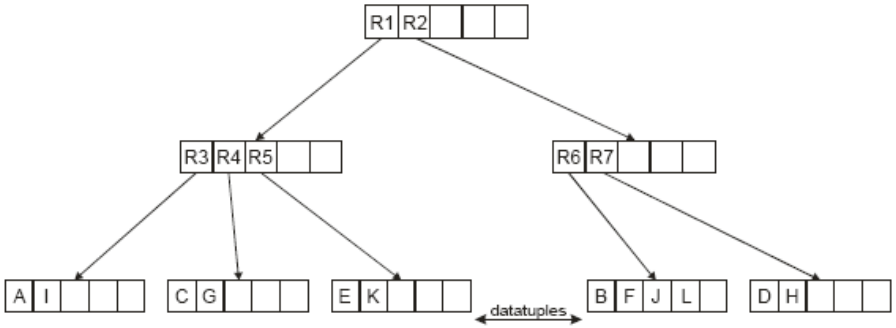
- Cada nodo hoja contiene:
  - Una lista de datos (descriptores)
- Cada nodo interno contiene:
  - Una lista de nodos hijos
  - Un rectángulo *d*-dimensional que contiene espacialmente a todos los nodos hijos (ya sean regiones o datos):
    - Intervalos $[lb_j, ub_j]$ con el valor mínimo y máximo de los hijos a lo largo de la dimensión *j*

Ejemplo de R-Tree



Parámetros:
m=2
M=5

Estructura del R-Tree



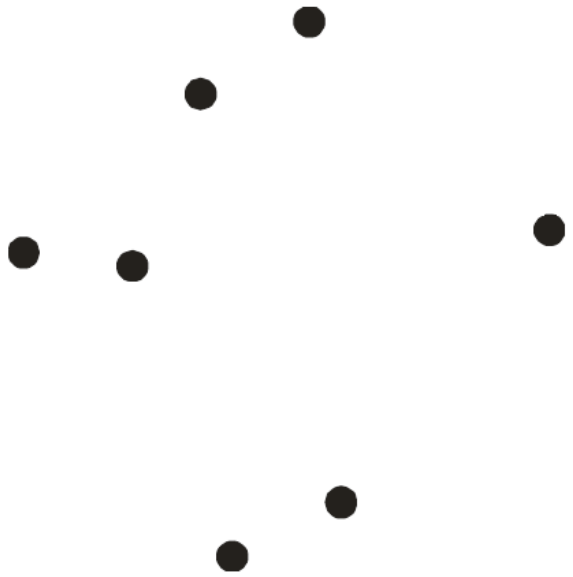
Inserción en R-Tree

- Similar a insertar en un B-Tree
- Seleccionar una página de datos adecuada y agregar el objeto a esa página
  - Realizar una búsqueda y seleccionar la región donde debería encontrarse el objeto
  - Si ninguna región contiene el objeto elegir la región que requiere agrandarse menos
- Si se excede la capacidad máxima de la página de datos (*overflow*), dividir la página en dos regiones (*split*)
- Modificar la representación del nodo padre:
  - Agregar la nueva página de datos a la lista de hijos (si hubo overflow)
  - Ajustar el tamaño de la región (si se agrandó la página de datos)
- Si el número de hijos excede la capacidad del nodo padre, dividir el nodo padre. Proceder recursivamente hacia arriba en el árbol
- Si la raíz se divide, el árbol crece en un nivel

División de nodos

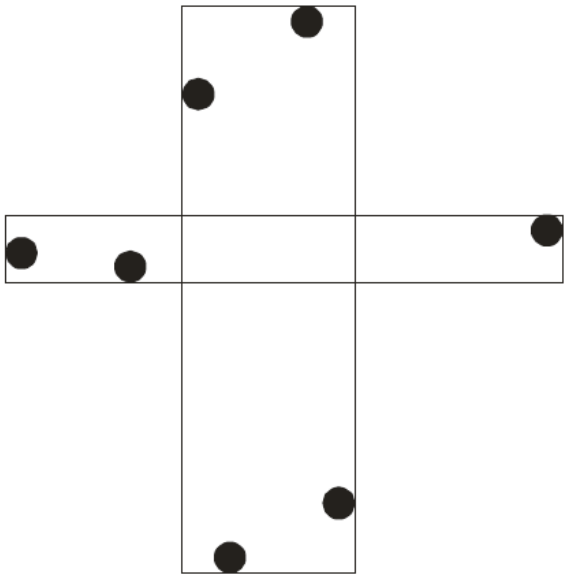
- Cuando un nodo contiene *M+1* (overflow) se debe dividir (split) en dos MBRs cada uno con al menos *m* elementos

¿Cómo dividir este conjunto en dos MBRs?
(R-tree con M=6 y m=3)

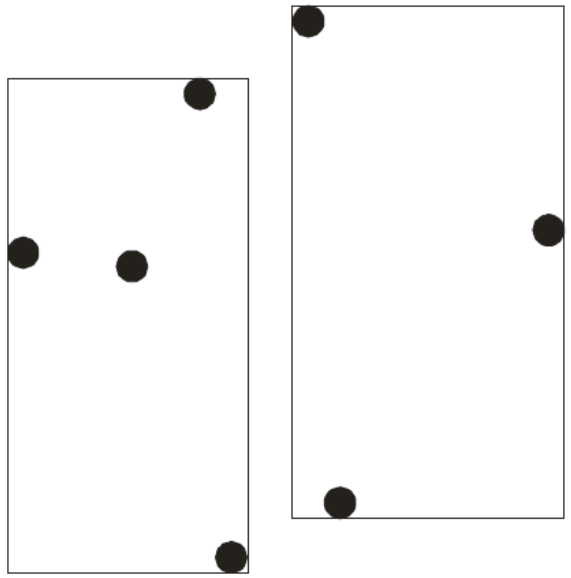


Criterio de División

- Existen muchas posibles particiones y se debe decidir el criterio para escoger la mejor



Criterio “Coverage”
Minimizar área de los MBRs



Criterio “Overlap”
Minimizar intersección de MBRs

Algoritmo de División

- Criterio comúnmente usado: minimizar suma de áreas
  - Reduce la probabilidad de visitar ambas regiones en el futuro
- Algoritmo exhaustivo:
  - Probar todas las posibles particiones y seleccionar la óptima (costo exponencial!)
- Algoritmo cuadrático:
  1. Escoger semillas: probar todos los pares de elementos y elegir el par que produce la mayor área
  2. Cada semilla inicia un grupo
  3. Mientras queden elementos para elegir:
     - Para cada elemento disponible calcular el aumento requerido por cada grupo para agregarlo
     - Seleccionar para agregar el elemento con mayor diferencia en el aumento de ambos grupos

Borrar y Actualizar en R-Tree

- Borrar un elemento:
  - Buscar el elemento a borrar y eliminarlo de la página de datos
  - Si no se produjo *underflow* ajustar MBRs respectivos
  - Si se produce *underflow* (el nodo queda con menos de *m* elementos), eliminar el nodo completo y reinsertar todos los datos restantes
- Actualizar un elemento:
  - Borrar el valor antiguo e insertar nuevo valor

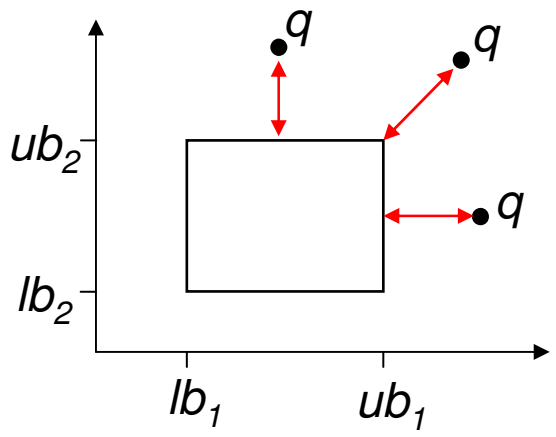
Búsqueda por rango en R-Tree

- Obtener todos los elementos que están dentro de la bola de consulta B(q,r)
- Búsqueda recursiva (iniciar en la raíz del árbol):
  - Si está en un nodo interno (contiene otros nodos):
    - Comparar cada nodo hijo con la bola de consulta y si la intersecta visitar el nodo recursivamente
  - Si está en una hoja (contiene elementos):
    - Comparar cada elemento con la bola de consulta y reportar los elementos relevantes, i.e. los que están dentro de B(q,r).
- Notar que la bola de consulta puede intersectar varias regiones simultáneamente
- Una búsqueda por similitud puede requerir recorrer varios subárboles, incluso el árbol completo

MINDIST

- Distancia mínima entre objeto *q* y algún punto de la región *R*
- Distancia a la que potencialmente podría existir algún elemento en la región
- Para distancia euclidiana:

$$\text{MINDIST}(q,R) = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} \begin{cases} (lb_i - q_i)^2 & \text{si} \quad q_i < lb_i \\ 0 & \text{si} \quad lb_i \le q_i \le ub_i \\ (ub_i - q_i)^2 & \text{si} \quad q_i > ub_i \end{cases}}$$

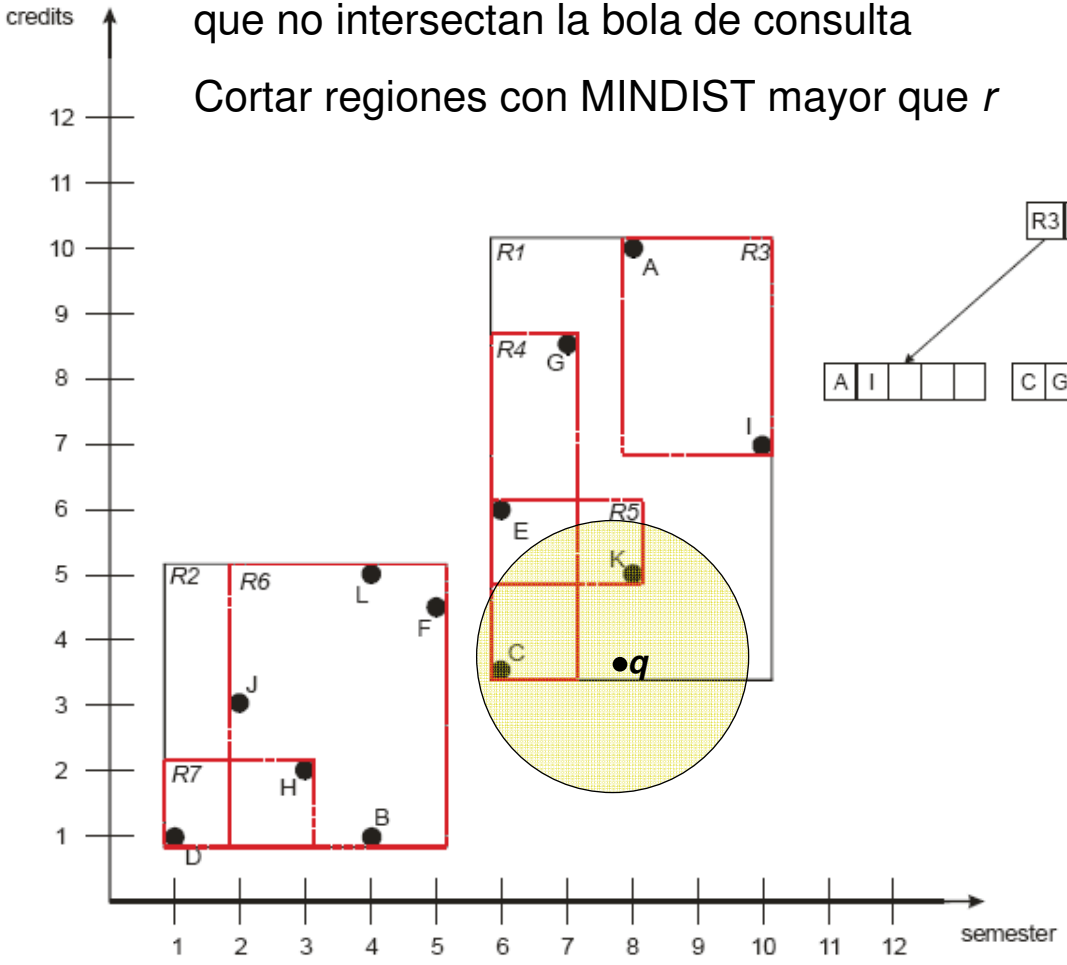


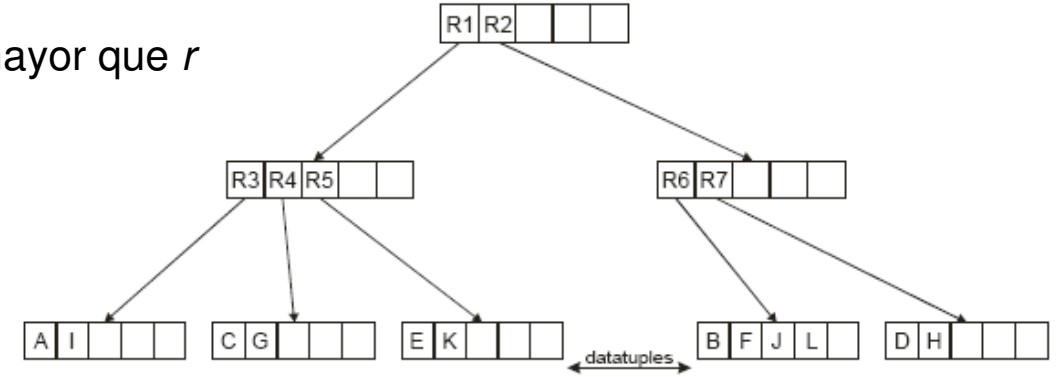
- Determinar si la región *R* intersecta la bola de consulta B(*q*,*r*) consiste en determinar si MINDIST*(q,R)* ≤ *r*

Búsqueda por rango en R-Tree

Búsqueda en profundidad cortando regiones que no intersectan la bola de consulta

Cortar regiones con MINDIST mayor que *r*





R1? Si intersecta, entrar
R3? No intersecta
R4? Si intersecta, entrar
→ **d(q,C)** Es relevante, imprimir
→ **d(q,G)** No es relevante
R5? Si intersecta, entrar
→ **d(q,E)** No es relevante
→ **d(q,K)** Es relevante, imprimir
R2? No intersecta

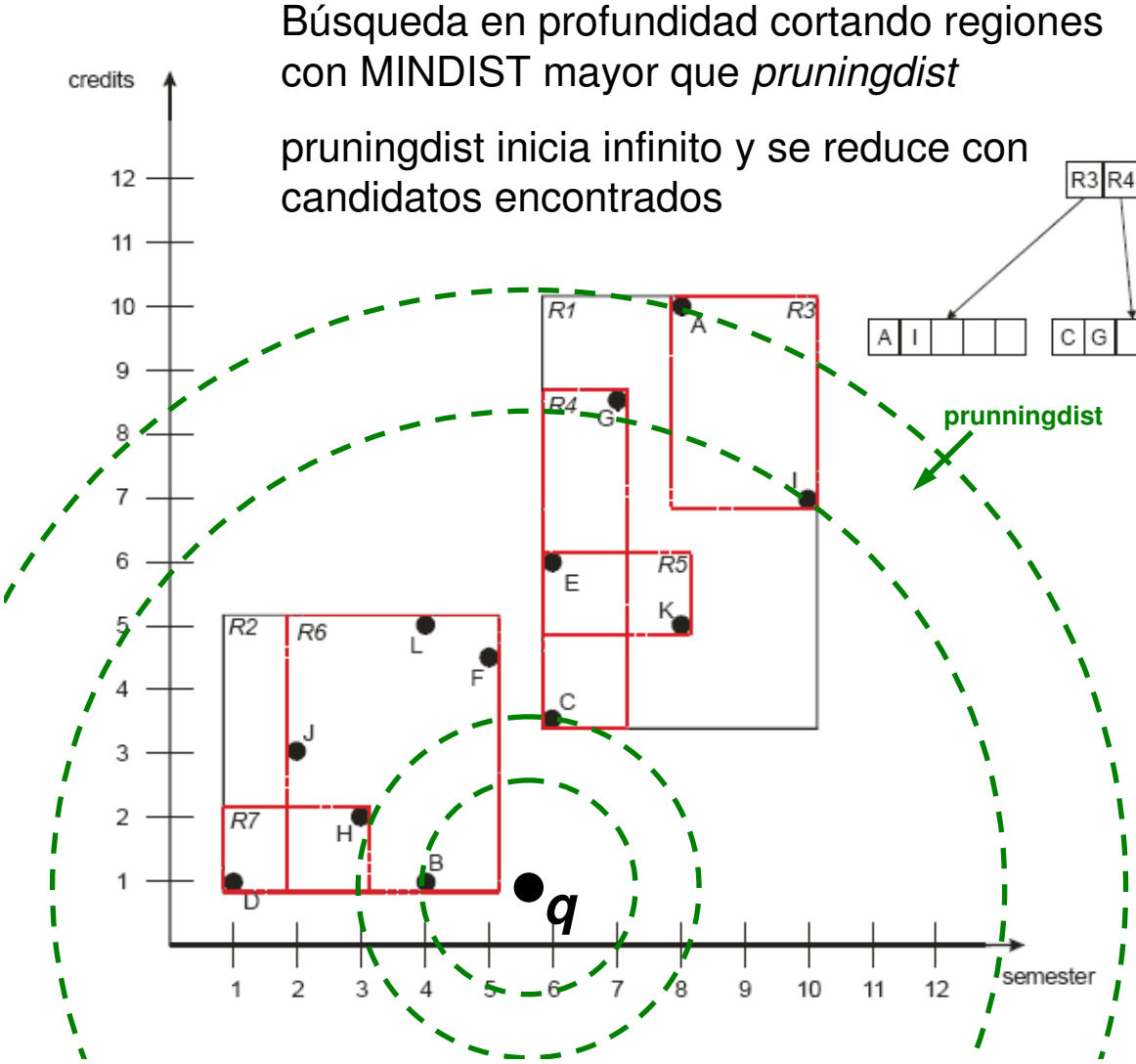
Búsqueda del NN en R-Tree

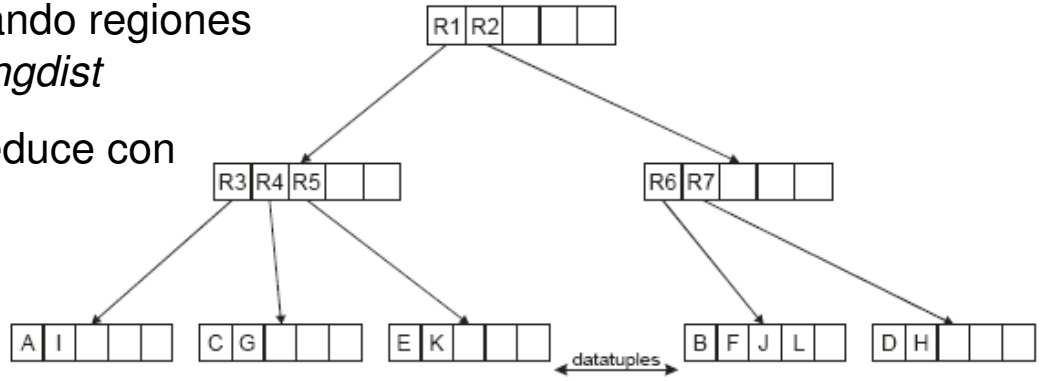
- Si uno supiera la distancia a la que está el vecino más cercano, bastaría con hacer una consulta por rango con el radio correcto
- Algoritmo recursivo (naive):
  - Aplicar la misma búsqueda en profundad recursiva de la búsqueda por rango
  - El rango es desconocido, asumir un rango infinito y reducirlo en la medida que se encuentran candidatos
  - ***pruningdist*** es la distancia de corte que se va reduciendo al encontrar mejores candidatos

Búsqueda NN recursiva en R-Tree

Búsqueda en profundidad cortando regiones con MINDIST mayor que *pruningdist*

pruningdist inicia infinito y se reduce con candidatos encontrados





pruningdist=infinito
R1? Si intersecta, entrar
R3? Si intersecta, entrar
  d(q,A) Nuevo candidato → reducir pruningdist
  d(q,I) Nuevo candidato → reducir pruningdist
R4? Si intersecta, entrar
  d(q,C) Nuevo candidato → reducir pruningdist
  d(q,G) No es relevante
R5? No intersecta
R2? Si intersecta, entrar
R6? Si intersecta, entrar
  d(q,B) Nuevo candidato → reducir pruningdist
  d(q,F) No es relevante
  d(q,J) No es relevante
  d(q,L) No es relevante
R7? No intersecta

Búsqueda del NN en R-Tree

- Desventajas del algoritmo recursivo:
  - Toma un camino predefinido (por ejemplo, la rama izquierda del árbol)
  - El primer objeto candidato encontrado probablemente está lejos de la consulta
  - El algoritmo reduce el espacio de búsqueda lentamente
    - Muchos caminos deben visitarse inútilmente

Búsqueda NN por prioridad en R-Tree

- Búsqueda por prioridad de Hjaltason y Samet
- También llamado algoritmo BBF (Best Bin First)
- No hacer un recorrido recursivo
- Mantener una lista de regiones activas a ser visitadas (*Active Page List* o APL)
  - Una región está activa cuando aún no ha sido visitada pero su padre ya fue visitado
- La APL es una cola de prioridad que mantiene las regiones ordenadas por MINDIST de menor a mayor (un min-heap)
- La distancia al objeto candidato a NN (*pruningdist*) se usa para descartar regiones activas

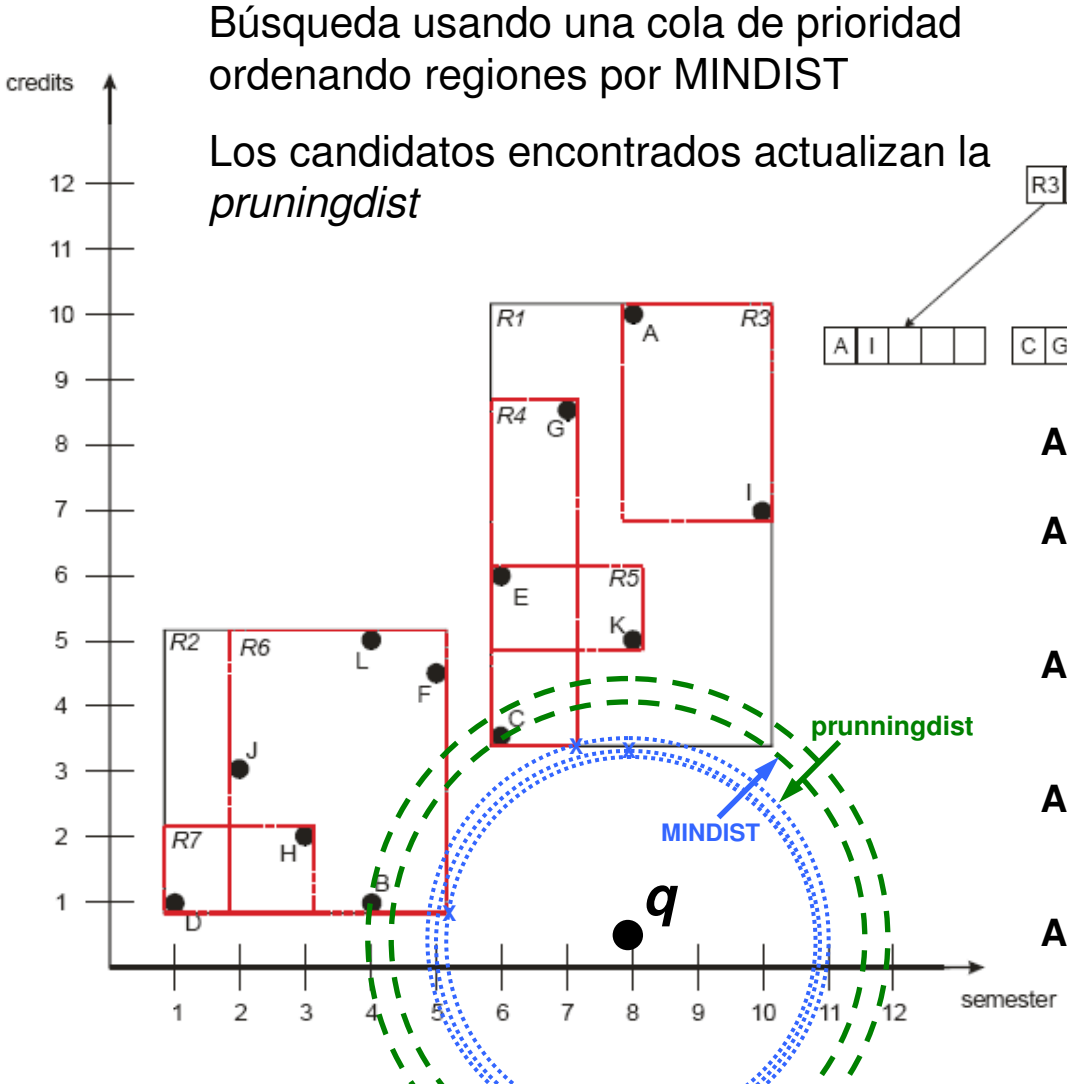
Algoritmo de Búsqueda NN por prioridad

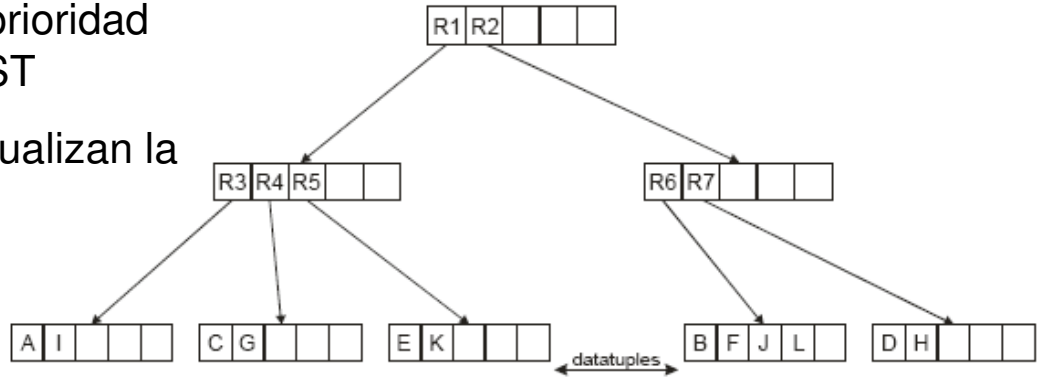
- Iniciar la APL con la raíz del árbol
- Sacar de la APL la región con mejor prioridad (con menor MINDIST)
  - Si es hoja (con datos), se comparan todos sus elementos contra la consulta. Si corresponde, se actualiza el NN candidato y *pruningdist*
  - Si es nodo interno (con regiones), se obtienen sus hijos y los nodos con MINDIST menor a *pruningdist* se insertan en la APL
- El algoritmo termina cuando la APL está vacía o cuando la región sacada de la APL tiene un MINDIST mayor o igual a *pruningdist*

Búsqueda NN por prioridad en R-Tree

Búsqueda usando una cola de prioridad ordenando regiones por MINDIST

Los candidatos encontrados actualizan la *pruningdist*





APL: R2, R1
→ visitar R2: insertar R6, R7
APL: R6, R1, R7
→ visitar R6: comparar **B**,**F**,**J**,**L**
→ candidato: **B** (nuevo **pruningdist**)
APL: R1, R7
→ visitar R1: insertar R4, no insertar R3 ni R5 porque MINDIST > **pruningdist**
APL: R4, R7
→ visitar R4: comparar **C**,**G**
→ candidato: **C** (nuevo **pruningdist**)
APL: R7
→ R7 no es relevante

Búsqueda NN por prioridad

- Las páginas se acceden en orden creciente de MINDIST (círculos azules)
- *pruningdist* (círculos rojos) va decreciendo en la medida que se encuentran puntos más cercanos
- El algoritmo se detiene cuando ambos círculos se encuentran
- Requerimientos de espacio:
  - Puede suceder que todas las regiones del último nivel se inserten en la APL
  - La complejidad en espacio (peor caso) es $O(n)$, mucho peor que la búsqueda en profundidad $O(\log n)$

Optimalidad del algoritmo

- El algoritmo NN por prioridad es óptimo con respecto al número de regiones visitadas:
  - Visita la mismas cantidad de regiones que una consulta por rango de tamaño exacto para obtener el NN
  - Visita todas las regiones con MINDIST menor a la distancia del NN (asegurar que es el NN)
  - No visita regiones con MINDIST mayor que la distancia del NN
- Notar que la búsqueda no necesariamente termina cuando aparece como candidato el NN real, porque se debe asegurar que no existe un candidato mejor (visitar regiones con MINDIST menor)

Búsqueda *k*-NN en R-Tree

- Para resolver una búsqueda *k*-NN se requieren dos colas de prioridad:
  - APL (min-heap ordenando regiones por MINDIST)
  - Lista de *k* candidatos (max-heap ordenando elementos por su distancia a *q*)
- *pruningdist* corresponde a la distancia del peor candidato (*k*-ésimo)
  - La cabeza del max-heap de candidatos
  - infinito si hay menos de *k* candidatos

Búsqueda *k*-NN aproximada

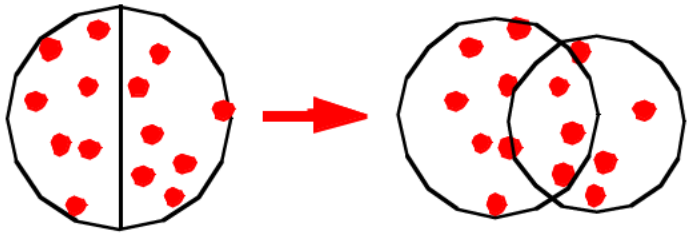
- La búsqueda por prioridad visita páginas en orden de distancia creciente a la consulta
  - Idea: Realizar una **detención anticipada** (early stop) y retornar los candidatos hasta ese momento
- Parámetro: ***c*** número máximo de regiones con datos a visitar
- Realizar una búsqueda *k*-NN por prioridad pero finalizar la búsqueda cuando se han visitado ***c*** regiones con datos y retornar los candidatos hasta ese momento

Variantes del R-Tree

- MINMAXDIST
  - Distancia al punto más lejano de la cara más cercana
  - Un MBR garantiza que existe al menos un elemento a esa distancia, se puede usar como *pruningdist*
- R* Tree.
  - Cambia criterio de creación de MBR: hojas minimizan intersección, nodos internos minimizan área total
  - Evita splits resolviendo overflows con re-inserciones
- R+ Tree
  - Elimina la necesidad de recorrer varios árboles en una búsqueda insertando un mismo elemento en más de una región.
- X-Tree
  - Si no existe un buen split, se crea un “super-nodo” donde se van agregando los objetos en una lista enlazada de nodos.
  - Si hay mucho overlap X-Tree deriva en búsqueda secuencial

Otros Árboles

SS-Tree



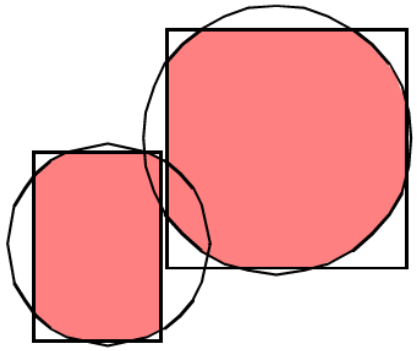
- SS-Tree (Similarity Search Tree):
  - Usar hiper-esferas para definir las regiones espaciales (en vez de MBRs).
  - Las esferas tienen ventaja con respecto a la probabilidad de acceso si las consultas también son regiones esféricas.
  - Split más complicado
    - Cuando se divide una esfera en dos, no se obtiene como resultado dos esferas
    - Se utiliza la esfera de cobertura mínima para encerrar a los puntos de las regiones resultantes
    - Produce traslape alto
    - El centroide (centro de masa) de los puntos en la región se utiliza como centro de la esfera, y se busca el radio mínimo tal que todos los objetos de la región queden cubiertos

SS-Tree

- Algoritmo de inserción
  - El objeto se inserta en el nodo hijo cuyo centroide tenga la mínima distancia al nuevo punto
- Manejo de overflow
  - Se reinserta un 30% de los puntos (los más lejanos al centroide)
- Criterio de split
  - Para la posición de corte se prueban todas las posibilidades que garantizan la utilización mínima de espacio
  - El punto de corte minimiza la suma de las varianzas de ambos nodos resultantes

SR-Tree

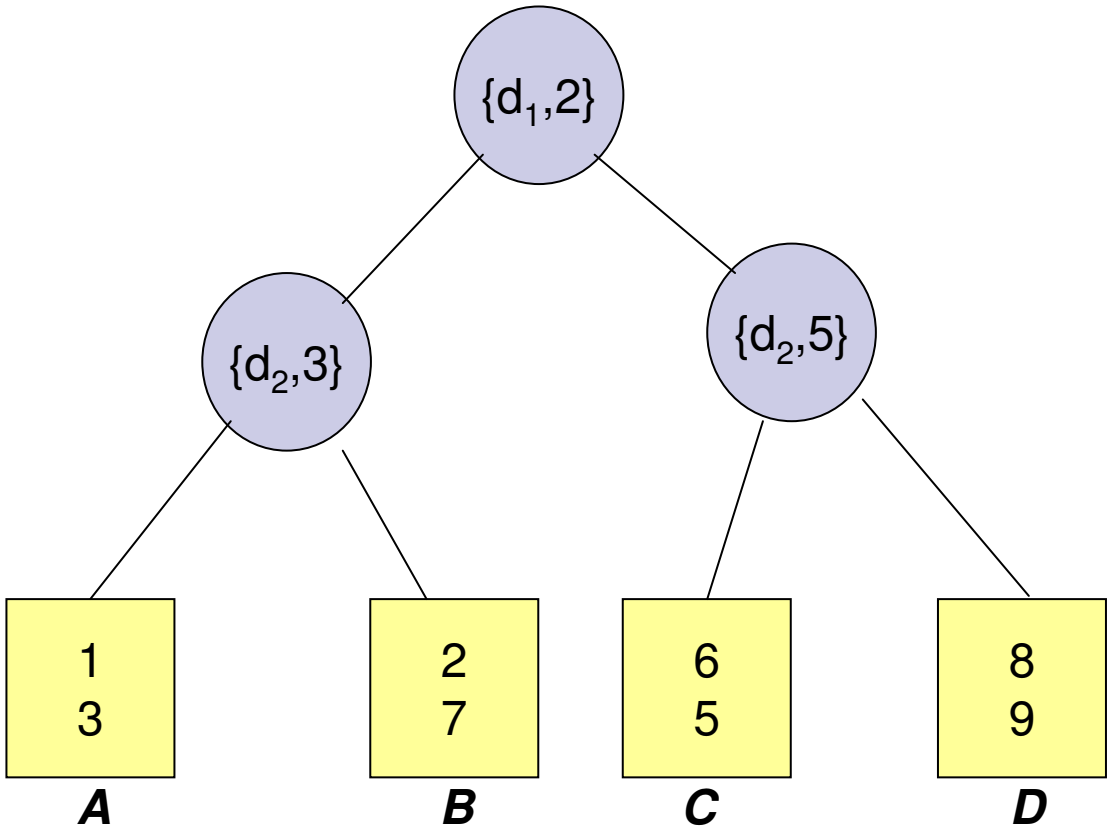
- SR-Tree (Sphere-rectangle tree)
  - Utiliza la combinación (intersección) de un MBR y una esfera como región espacial
  - Busca combinar las ventajas de ambos métodos
    - Menor probabilidad de acceso de una esfera
    - Mejor “particionabilidad” de un MBR
  - Experimentalmente se muestra un mejor rendimiento que el SS-tree



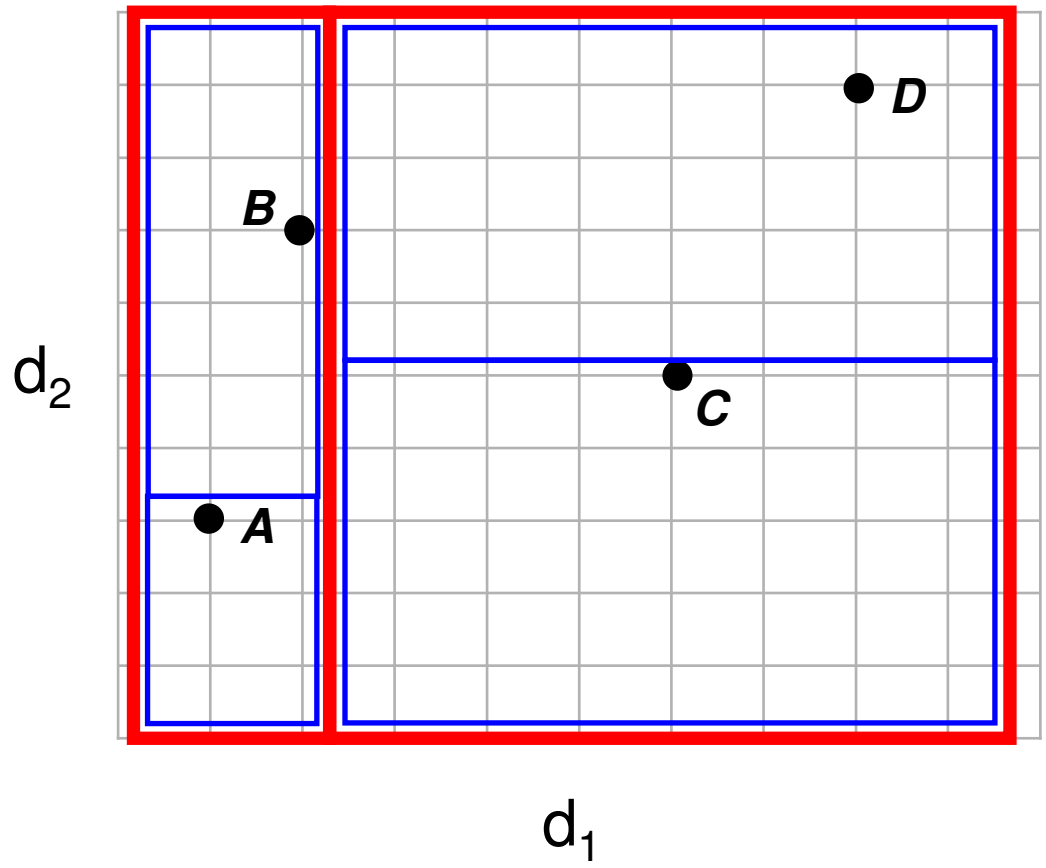
KD-Tree

- Árbol binario balanceado
- Particiona recursivamente el espacio por medio de hiper-planos paralelos a los ejes
- Nodo Interno: almacena un número de dimensión k y un valor umbral x
  - El subárbol izquierdo es la región con coordenada k menor o igual a x
  - El subárbol derecho es la región con coordenada k mayor o igual a x
- Nodo externo: almacena los vectores que se encuentran dentro de la región definida por los hiperplanos de sus ancestros

Ejemplo kd-Tree



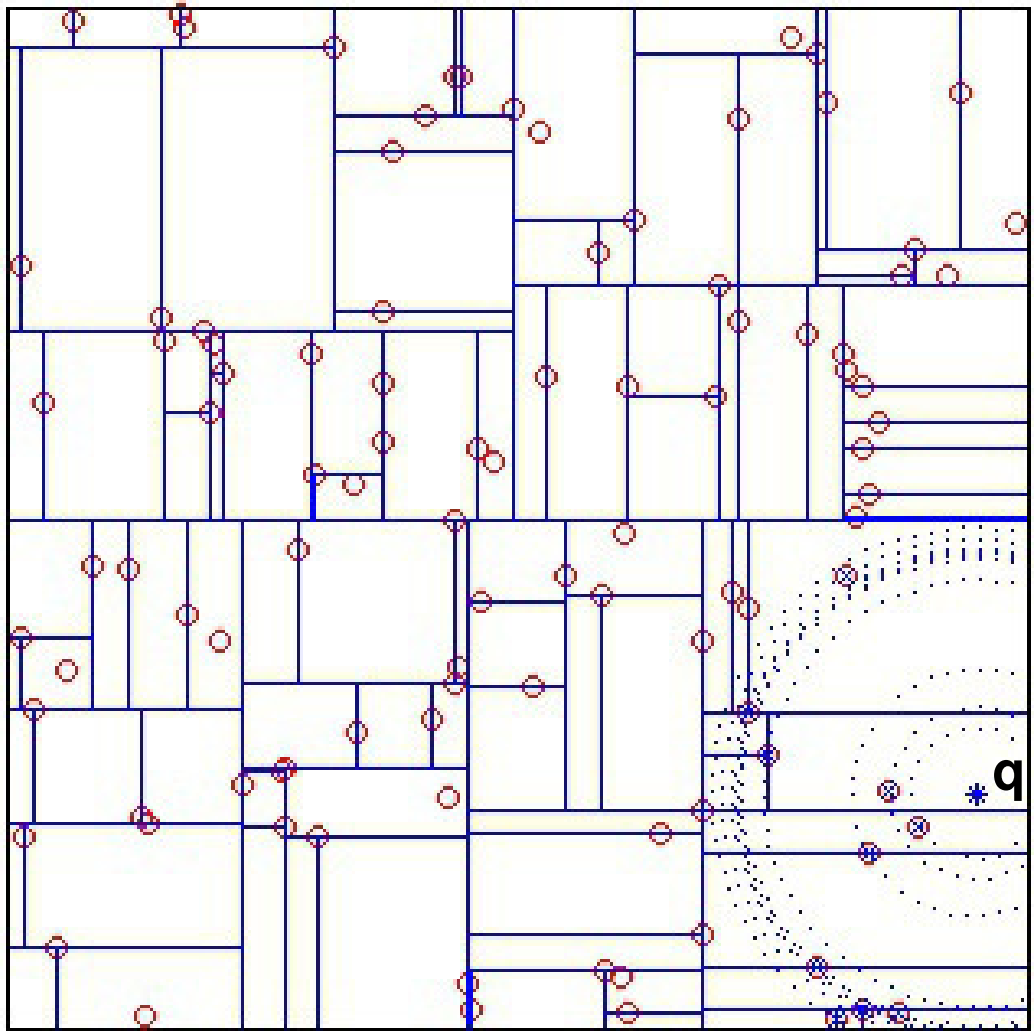
Ejemplo kd-Tree



Construcción de un kd-Tree

- Sea **R** un conjunto de **n** vectores de **d** dimensiones, es decir, $\mathbf{R}=\{\mathbf{v_1},\ldots,\mathbf{v_n}\}$ donde $\mathbf{v_i}$ es un vector con coordenadas $(v_{i1},\ldots,v_{id})$
- Calcular la varianza de cada dimensión, es decir, para cada dimensión **j** calcular la varianza σ^2_j de los **n** valores $\{v_{1j},\ldots,v_{nj}\}$
- Comparar las varianzas $\{\sigma^2_1,\ldots,\sigma^2_d\}$ y elegir la dimensión **k** que tiene mayor varianza
- Particionar **R** en subconjuntos **S** y **T** según la mediana de la dimensión **k**, es decir, sea λ_k la mediana de $\{v_{1k},\ldots,v_{nk}\}$, $\mathbf{v_i}$ está en **S** si $v_{ik} \leq \lambda_k$
- Dividir recursivamente ambos subconjuntos S y T

Ejemplo kd-Tree



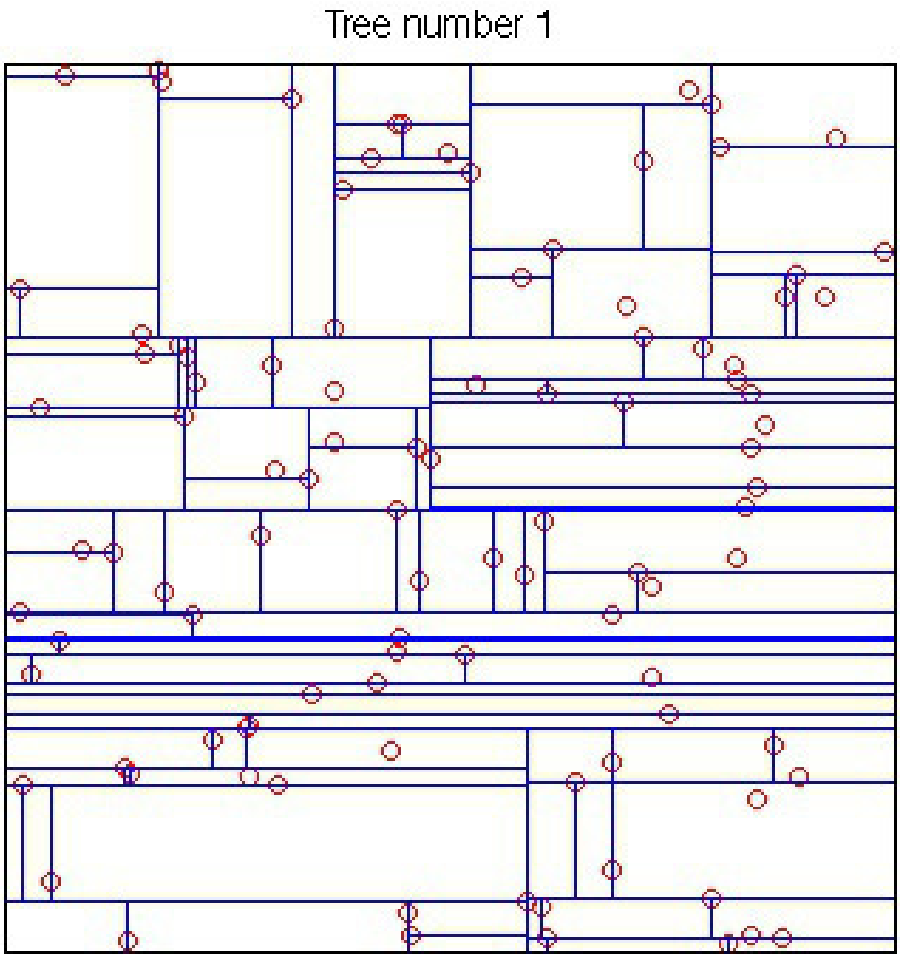
Búsqueda del NN en kd-Tree

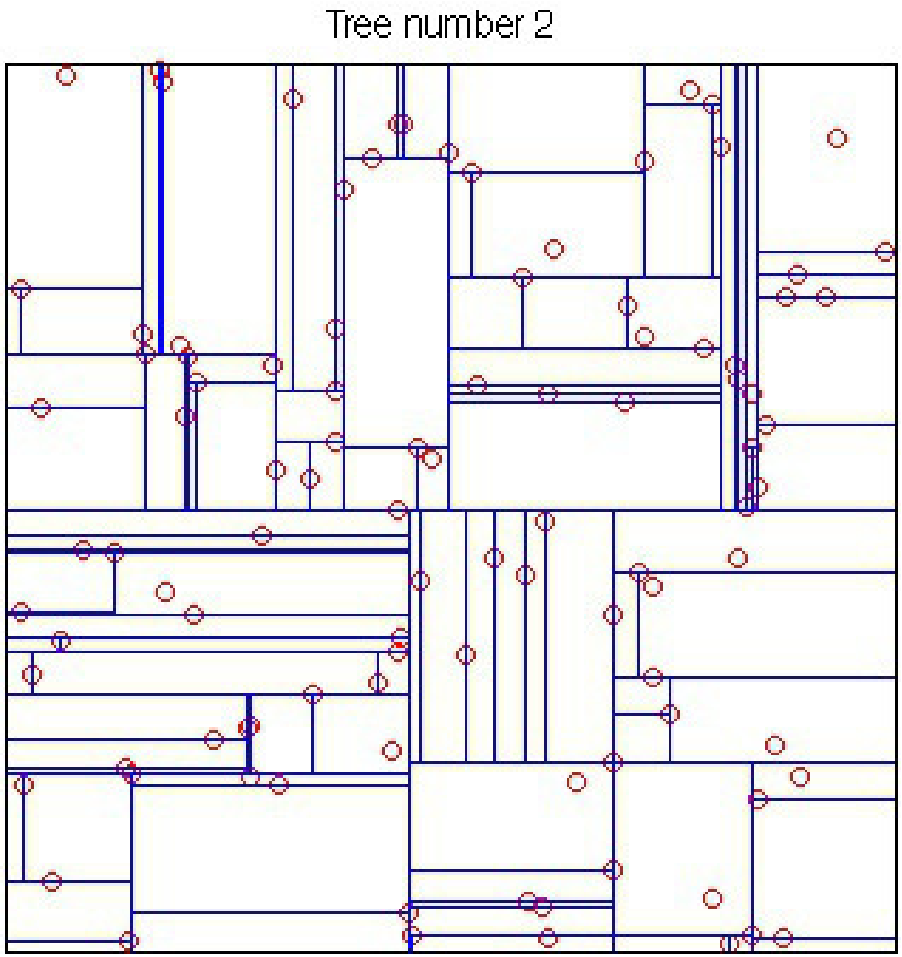
- Opción Naive (búsqueda recursiva): bajar recursivamente por el árbol hasta la hoja que contiene a **q**, comparar vectores en esa hoja y obtener un candidato, continuar el recorrido recursivo descartando regiones más lejanas que el candidato actual
- Mejor (búsqueda por prioridad): Análogo a la búsqueda en el R-Tree. Utilizar una cola de prioridad (APL) que ordena regiones por distancia a **q** (MINDIST) y visitar regiones en orden ascendente

Randomized kd-Trees

- Para un conjunto de vectores el algoritmo de construcción del kd-tree produce un único árbol
- Se pueden crear varios kd-tree (un kd-forest) si en cada nivel se particiona por una dimensión al azar entre las *D* dimensiones de mayor varianza (por e.j. D=5)
- Algoritmo de Búsqueda del NN:
  - Búsqueda por prioridad utilizando **una única cola de prioridad** para las regiones de todos los árboles
  - La búsqueda va visitando todos los árboles al mismo tiempo
  - Limitar hojas visitadas → búsqueda aproximada

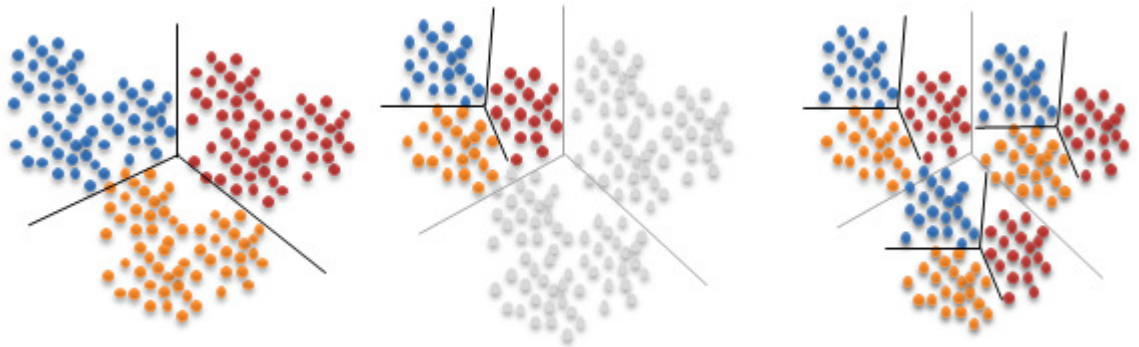
Ejemplo Randomized k-d Trees





Hierarchical K-Means Tree

- Utilizar *k*-means para dividir un conjunto en *k* grupos de objetos cercanos entre sí
  - División recursiva, terminar cuando quedan menos de *k* vectores en un grupo
  - Árbol balanceado *k*-ario (*k* es un parámetro).

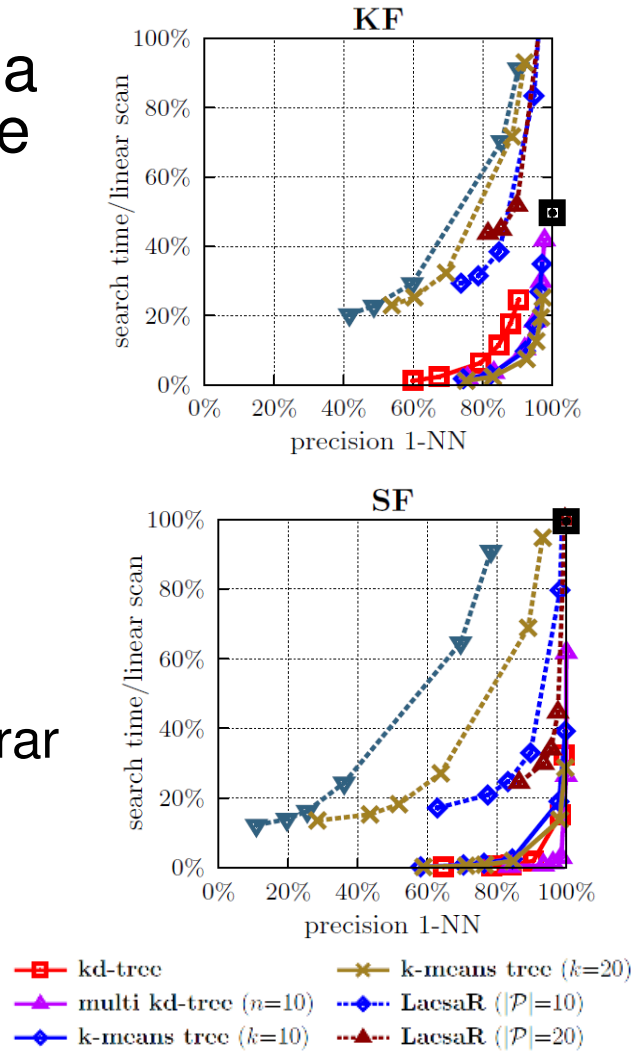


Hierarchical K-Means Tree

- Búsqueda aproximada con cola de prioridad
- Algoritmo de Búsqueda del NN:
  - Búsqueda por prioridad donde la regiones se ordenan por distancia de **q** al centroide
  - No hay gran cambio al ordenar por distancia de **q** al borde de celda de Voronoi
  - No hay gran cambio si se realizan múltiples k-means trees

Efectividad versus Eficiencia

- La búsqueda lineal (linear scan) logra la máxima efectividad (retorna el 100% de los NN correctos) pero es lento
- Los métodos aproximados permiten mejorar la eficiencia (búsquedas más rápidas) con costo en la efectividad (bajar la calidad de la respuesta)
  - En algunos casos puede ser tolerable o incluso imperceptible retornar otro objeto cercano que no sea necesariamente el NN
  - Se debe medir experimentalmente cuanto decrece la calidad de la respuesta al acelerar la búsqueda
  - Esta relación depende el espacio de búsqueda (distribución de los descriptores)



Locality Sensitive Hashing

Locality Sensitive Hashing (LSH)

- Algoritmo aleatorio de búsqueda por similitud
- Búsqueda **no es exacta**
  - Su grado de aproximación se ajusta en la fase offline
- Se definen varias funciones de hash que producen colisiones para objetos similares
- Cada función de hash consiste en unir varias proyecciones aleatorias de los datos
- Una función de hash se dice locality-sensitive cuando la probabilidad de colisión de dos objetos disminuye cuando la distancia entre ellos aumenta

LSH para Espacios de Hamming

- Descriptores binarios y distancia de Hamming
- Si los descriptores son vectores se deben convertir a cadenas de bits
- Notación unaria, vector de coordenadas x_i:
  - Cada x_i debe ser un entero entre 0 y M
  - Cada x_i se mapea a un “1” repetido x_i veces seguido de un “0” repetido $(M-x_i)$ veces
  - Se concatenan las cadenas de todos los x_i
  - Ej.: vector (2,5) para M=6 se mapea a la cadena “110000111110”

Construcción del Índice

- Una función de hash *h* convierte el espacio *s*-dimensional a un subespacio *m*-dimensional
  - La función *h(o)* escoge en forma aleatoria *m* posiciones entre 1 y *s* (*s* es el largo de la cadena de bits)
  - Si *x* e *y* son cercanos probablemente *h(x)=h(y)*
  - Si *x* e *y* son lejanos probablemente *h(x)≠h(y)*
- La probabilidad total de cometer un error se reduce al utilizar *L* funciones de hash $\{h_1,\ldots, h_L\}$
  - Para cada función h_i construir una tabla T_i asignando cada objeto o_j a la celda $T_i[h_i(o_j)]$
  - Dos objetos muy parecidos debieran coincidir en varias tablas

Búsqueda *k*-NN con LSH

- Para cada una de las *L* tablas:
  - Calcular la proyección correspondiente *h(q)*
  - Determinar los objetos que tienen colisión con *q*, i.e., localizar todos los *o* que *h(o)=h(q)*
  - Para cada objeto *o* sumar uno a su contador de ocurrencias
- Retornar los *k* objetos con más ocurrencias
- Opcional: realizar una búsqueda k'-NN (k' ≥ k), calcular la distancia real de los *k'* candidatos y retornar los k-NN

LSH para Espacios de Hamming

Números entre 1 y 14 al azar

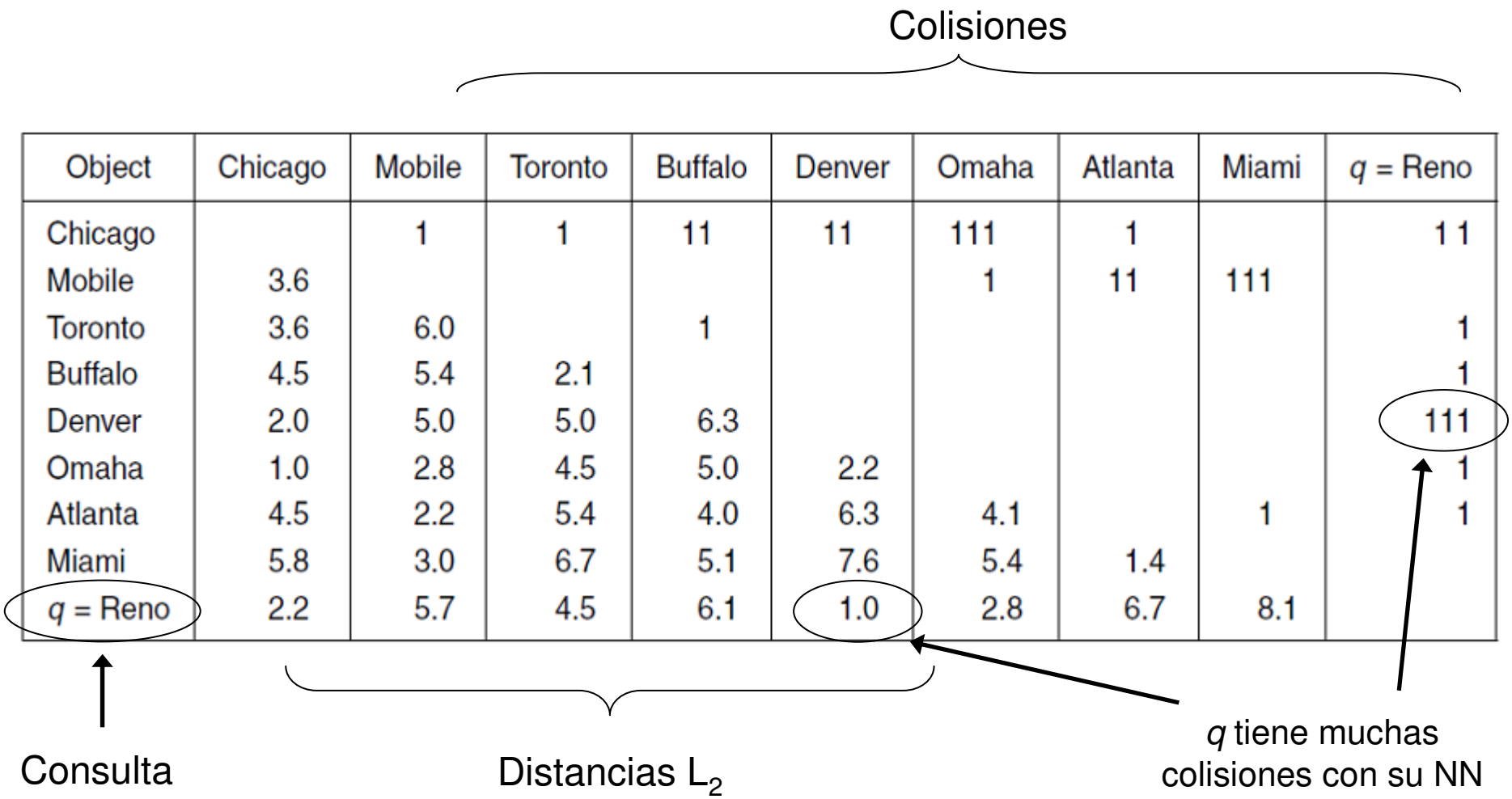
			HS = UNARY(X) & UNARY(Y)		PROJECTION INSTANCES			
			UNARY(X)	UNARY(Y)	{2,9,13}	{7,10,14}	{1,5,11}	{8,12,14}
Chicago	2	3	1100000	1110000	110	010	100	100
Mobile	4	0	1111000	0000000	100	000	100	000
Toronto	4	6	1111000	1111110	111	010	101	110
Buffalo	6	5	1111110	1111100	110	010	111	110
Denver	0	3	0000000	1110000	010	010	000	100
Omaha	2	2	1100000	1100000	110	000	100	100
Atlanta	6	1	1111110	1000000	100	000	110	100
Miami	7	0	1111111	0000000	100	100	110	000
q = Reno	0	4	0000000	1111000	010	010	001	100

Una cadena de 14 bits de largo

Parámetros m=3 L=4

Ver Samet, pág 713

LSH para Espacios de Hamming

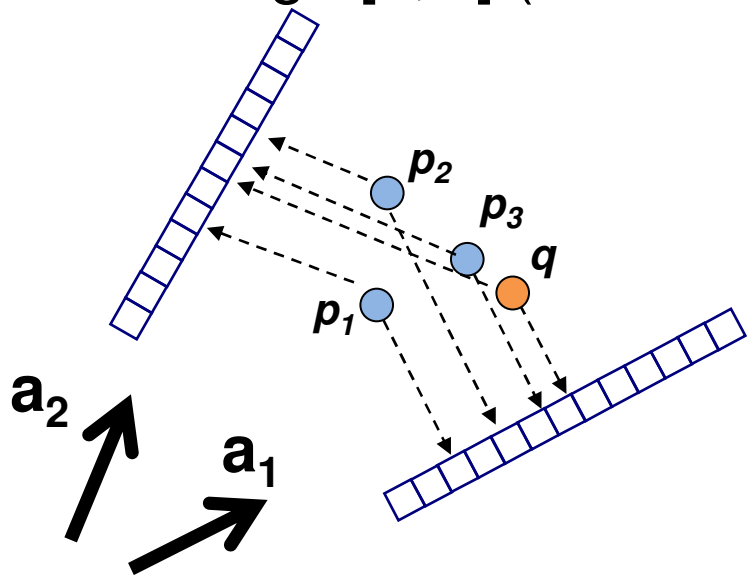


Object	Chicago	Mobile	Toronto	Buffalo	Denver	Omaha	Atlanta	Miami	*q* = Reno
Chicago		1	1	11	11	111	1		1 1
Mobile	3.6					1	11	111	
Toronto	3.6	6.0		1					1
Buffalo	4.5	5.4	2.1						1
Denver	2.0	5.0	5.0	6.3					111
Omaha	1.0	2.8	4.5	5.0	2.2				1
Atlanta	4.5	2.2	5.4	4.0	6.3	4.1		1	1
Miami	5.8	3.0	6.7	5.1	7.6	5.4	1.4		
q = Reno	2.2	5.7	4.5	6.1	1.0	2.8	6.7	8.1	

LSH para Espacios Euclidianos

- Descriptores vectoriales y distancia L2
- Proyección aleatoria:
  - Escoger vector aleatorio ***a*** y valor aleatorio *b*
  - ***a*** sigue distribución gaussiana con media 0 y varianza 1
  - *b* sigue distribución uniforme en el rango [0,*w*] (*w*: tamaño del bin)

$$h_{a,b}(v) = \left\lfloor \frac{a \cdot v + b}{w} \right\rfloor$$



Indexamiento LSH

- Una función $h_{a,b}(o)$ entrega un valor numérico
- Concatenar *m* funciones $h_{a,b}$ para definir un hash de vector
- Calcular *L* valores de hash por vector

- Para descriptores SIFT (128-d) se ha recomendado:
  - w=700; m=24; L=32

Ver: “Effective and Scalable Video Copy Detection”, Liu et al, 2010.

Búsqueda k-NN de LSH

- Para cada una de las *L* tablas:
  - Calcular el hash de *q* aplicando las *m* funciones $h_{a,b}$
  - Obtener los vectores v que coinciden en el hash *h(v)=h(q)*
- Reportar como NN los vectores que coinciden en uno o más de los *L* hash

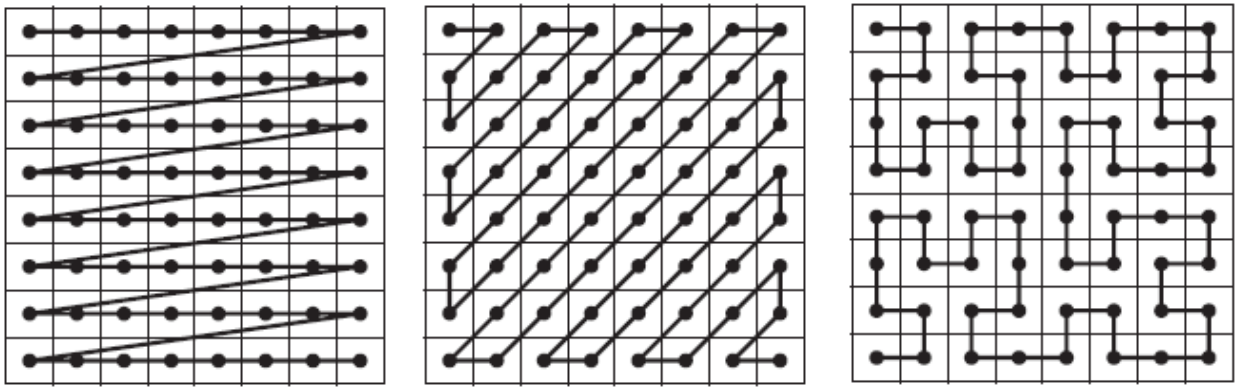
Space-Filling Curves

Space-Filling Curves

- Un espacio multidimensional se puede recorrer ordenadamente en forma lineal
- Un espacio de n-dimensiones se convierte en un espacio unidimensional
- Vectores cercanos en el espacio n-dimensional debieran quedar cerca en el espacio unidimensional

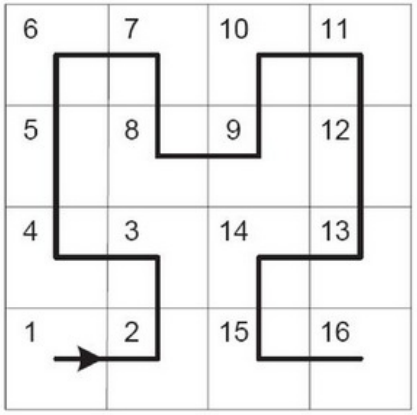
Space-Filling Curves

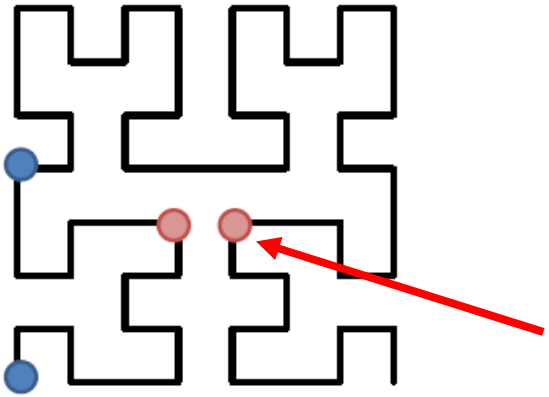
- El espacio se divide en celdas y se define un orden de recorrido de las celdas
- Propiedades deseables del recorrido:
  - Visitar cada celda una y solo una vez
  - Celdas cercanas deben quedar cerca en la curva
  - Celdas lejanas deben quedar lejos en la curva
  - La función debe ser rápida de calcular



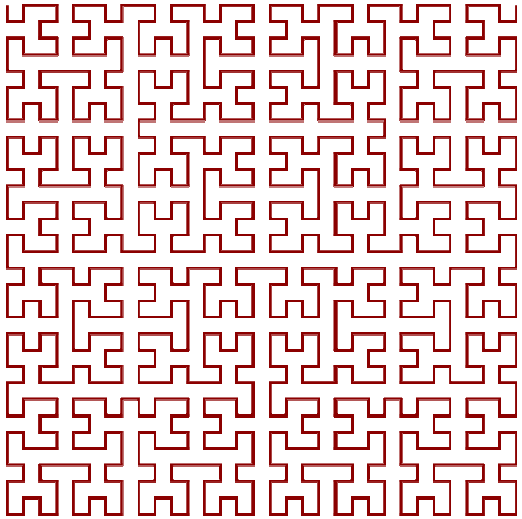
Ver Samet cap 2.1.1.2

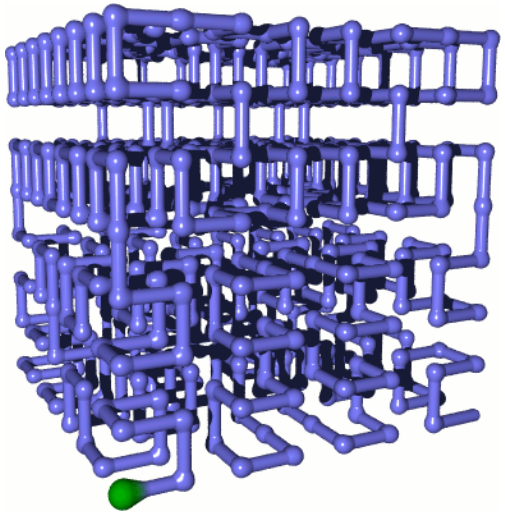
Curva de Hilbert

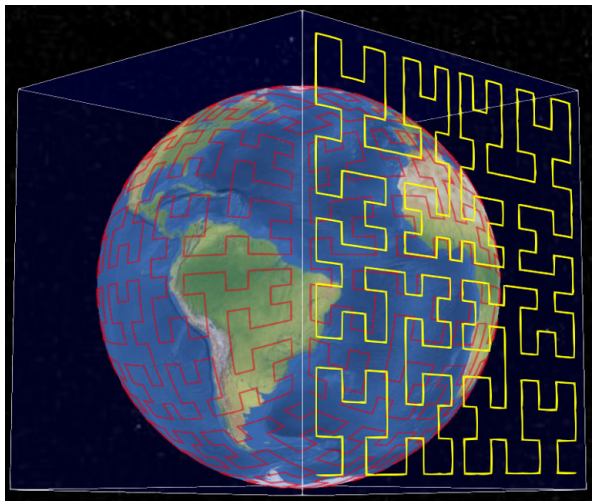




Puntos cercanos en el espacio pero lejanos en la curva

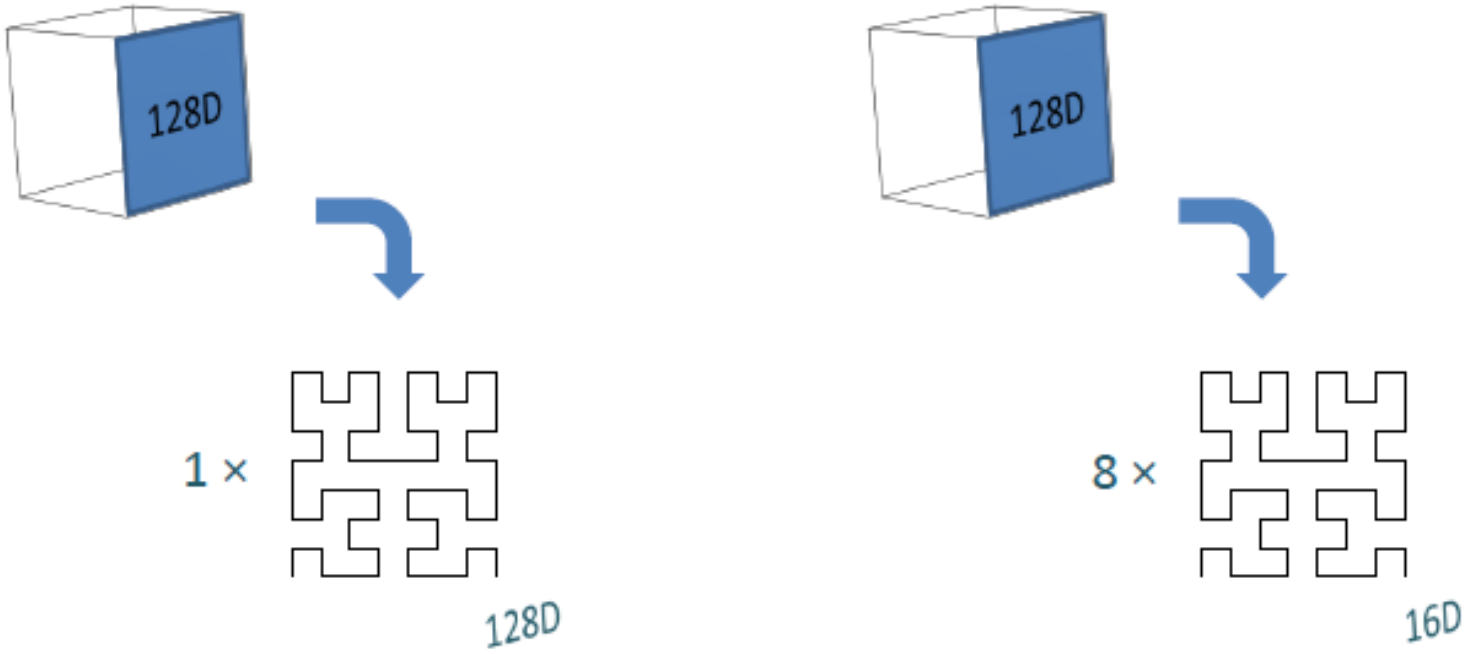






Multi-curves

- En vez de crear una única curva, crear varias curvas para subespacios



Ver: “High-dimensional descriptor indexing for large multimedia databases”, Valle et al, 2008.

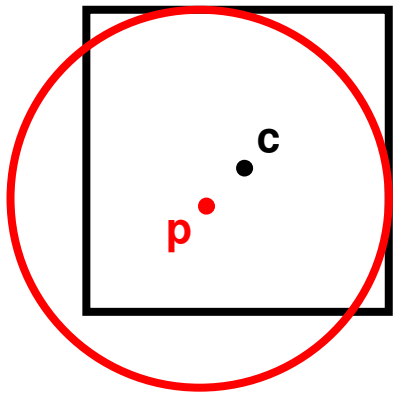
Curse of Dimensionality

Alta Dimensionalidad

- “Curse of Dimensionality” o “Maldición de la Dimensionalidad”
- Se refiere a los efectos adversos que suceden cuando aumenta la dimensión de los datos
  - La distancia entre cualquier par de objetos tiende a una valor constante (desaparece la varianza en las distancias)
  - Todos los índices comienzan a fallar (todas las regiones intersectan la bola de consulta)
  - El volumen de las regiones aumenta exponencialmente con la dimensión del espacio
  - No hay imaginación geométrica, falla la intuición

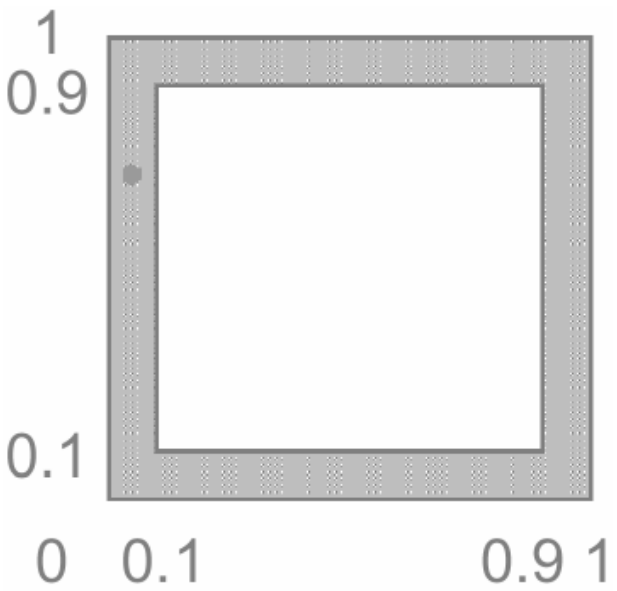
Alta Dimensionalidad

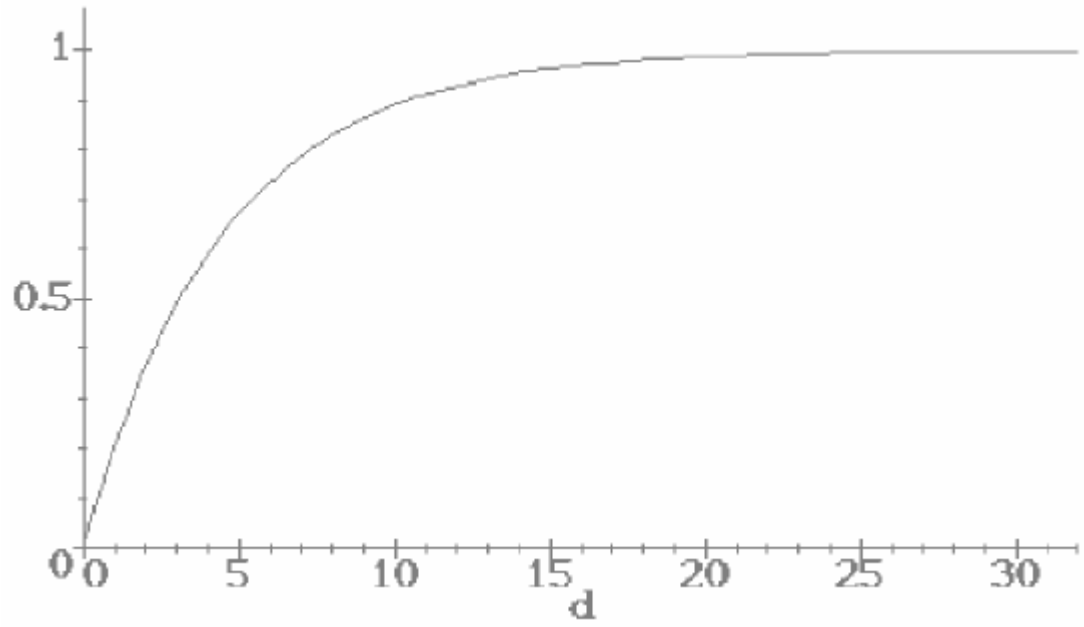
- “Si un círculo toca todos los bordes, siempre incluye el punto central?” No!
  - Hiper-cubo 16-dimensional unitario
  - c= (0.5,0.5,….0.5) (punto central)
  - p= (0.3,0.3,….0.3)
  - Círculo centrado en p y radio 0.7 (toca todas las caras)
  - Distancia $L_2(p,c) = 0.8$!!



Volumen en las superficies

- Todo el volumen está en la superficie!
  - Probabilidad que un punto aleatorio esté cerca del borde en un MBR





Volumen Bola de Consulta

- Volumen crece exponencialmente:
  - Hiper-cubo

$$\mathrm{Vol}_{d\text{-cubo}}(a) = a^d$$

$$\mathrm{Diag}_{d\text{-cubo}}(a) = a\sqrt{d}$$

  - Hiper-esfera

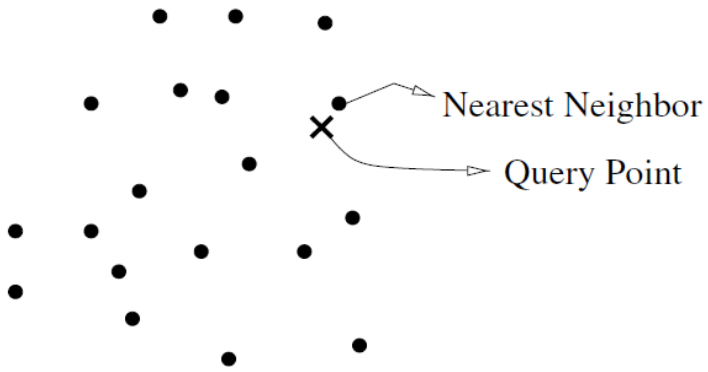
$$\mathrm{Vol}_{d\text{-esfera}}(r) = r^d \frac{\pi^{d/2}}{\Gamma(\frac{d}{2}+1)}$$

Aproximación de Stirling: $n! \sim \sqrt{2\pi n}\left(\frac{n}{e}\right)^n$

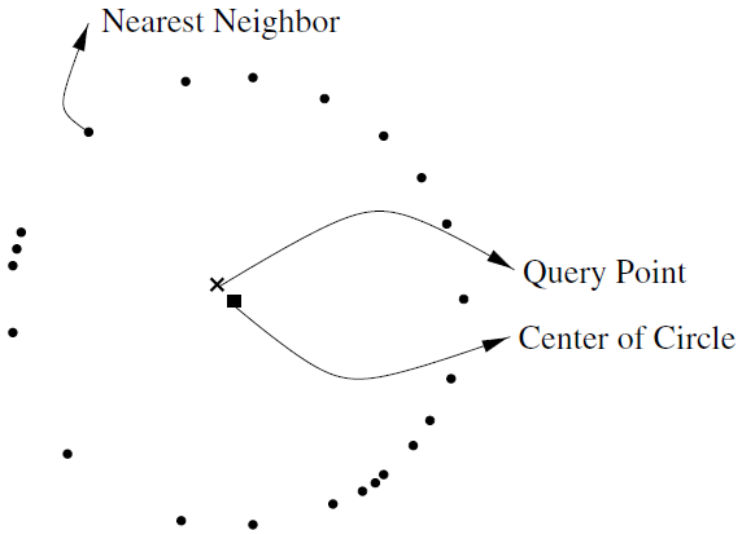
Cuando la dimensión aumenta, la división entre el volumen de la hiper-esfera de radio 1 y el hipercubo de lado 1 tiende a 0

Alta Dimensionalidad

- Al aumentar las dimensiones, los objetos tienden a una misma distancia entre sí



Dimensión Baja



Dimensión Alta

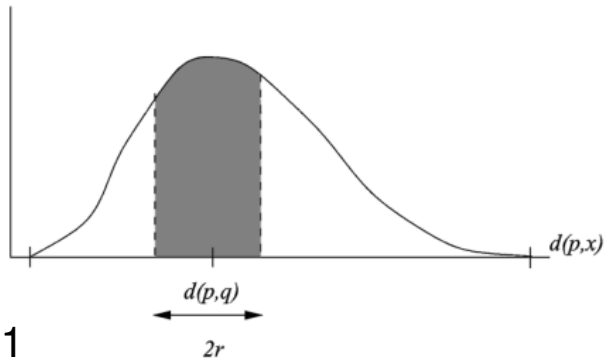
Ver Beyer et al.1998

Histograma de distancias

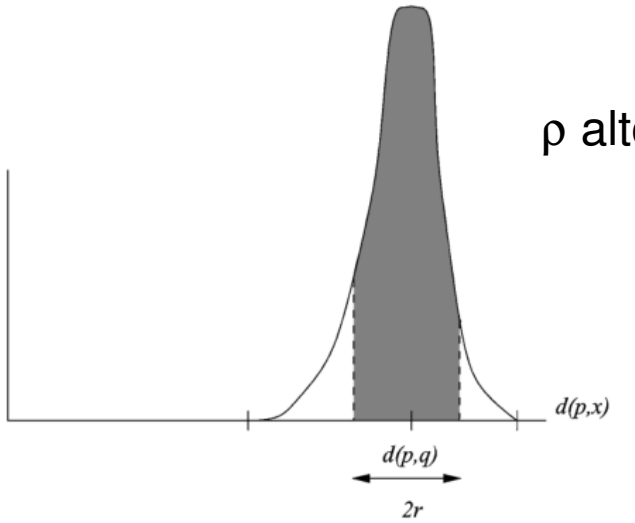
- Histograma con los valores de **d(a,b)** tomando pares a y b aleatorios del conjunto R
- Al aumentar dimensiones las distancias tienden a concentrarse a un valor fijo
- La dificultad de indexar un conjunto tiene relación con poca varianza en valores de distancias

$$\rho = \frac{\mu^2}{2\sigma^2}$$

ρ bajo



ρ alto



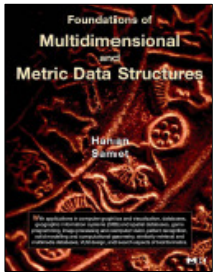
Ver Chávez et al. 2001

Alta Dimensionalidad

- No se puede evaluar el desempeño de un índice con datos aleatorios
  - Seguro fallará porque es imposible indexar datos aleatorios de dimensión alta
  - No es realista
- Los datos reales no son aleatorios!
  - Cada dataset tiene consultas y datos relevantes para esas consultas (existen grupos de objetos cercanos)
- Al capturar datos se debe evitar incluir datos irrelevantes ya que sólo se conseguirá igualar los registros

Bibliografía

- **Foundations of Multidimensional and Metric Data Structures**. Samet 2006.
  - Cap 1.5 (Kd-Tree)
  - Cap 2.1.5.2 (R-Tree)
  - Cap 4.7.4 (LSH)



Papers

- Guttman. **R-trees: A dynamic index structure for spatial searching**. 1984.
- Hjaltason and Samet. **Ranking in Spatial Databases**. 1995.
- Roussopoulus, Kelley and Vincent. **Nearest Neighbor Queries**. 1995.
- Böhm, Berchtold and Keim. **Searching in high-dimensional spaces: Index structures for improving the performance of multimedia databases**. 2001.
- Chávez, Navarro, Baeza-Yates and Marroquín. **Searching in Metric Spaces**. 2001.
- Muja and Lowe. **Scalable Nearest Neighbor Algorithms for High Dimensional Data**. 2014.
- Beyer, Goldstein, Ramakrishnan and Shaft. **When is "nearest neighbor" Meaninful?** 1998.
- Hinnenburg, Aggarwal and Keim. **What is the nearest neighbor in high dimensional spaces?.** 2000.

Implementaciones

- Implementación de Kd-Tree y K-Means Tree:
  - http://www.cs.ubc.ca/research/flann/
- Implementación de LSH:
  - https://www.mit.edu/~andoni/LSH/
  - https://github.com/pixelogik/NearPy
  - https://falconn-lib.org/
- Implementación para curva de Hilbert:
  - https://en.wikipedia.org/wiki/Hilbert_curve