数据科学与大数据技术 的数学基础



第五讲



计算机学院 余皓然 2024/5/9

课程内容

Part1 随机化方法

一致性哈希 布隆过滤器 CM Sketch方法 最小哈希欧氏距离下的相似搜索 Jaccard相似度下的相似搜索

Part2 谱分析方法

主成分分析 奇异值分解 谱图论

Part3 最优化方法

压缩感知



欧氏距离下的相似搜索相似搜索问题及相似度衡量

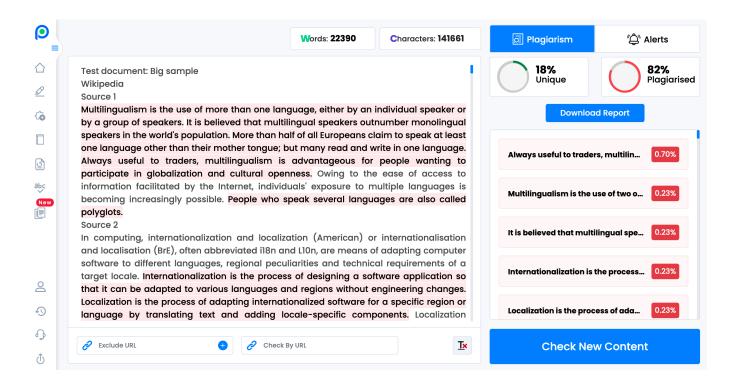


相似搜索 (Similarity Search):

- ➤ 给定数据集,如何找出其中相似度超过一定阈值的数据对(成对相似度搜索, All-Pairs Similarity Search)
- ➤ 给定数据集及一个新的数据,如何在数据集中找到最相似的数据(最近邻搜索, Nearest Neighbor Search)

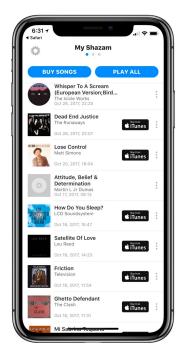
应用场景:

▶ 相似文件/网页:代码/论文查重、检测镜像网站



应用场景:

➤ 音频指纹: Shazam APP (根据输入的小段音频进行搜索)

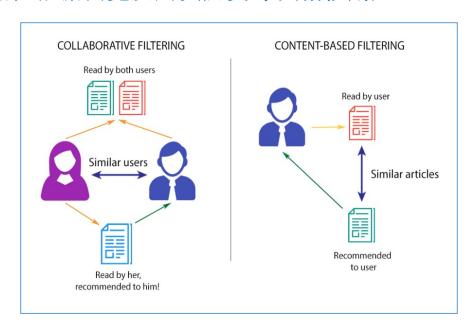






应用场景:

▶ <mark>协同过滤(collaborative filtering)</mark>:推荐系统中根据同一批用户浏览历史寻找相似产品;根据浏览及购买历史寻找相似用户



应用场景:

▶ 协同过滤 (collaborative filtering): 微博/QQ/...的好友推荐功能,根据好 友/关注情况分析用户之间的相似度



应用场景:

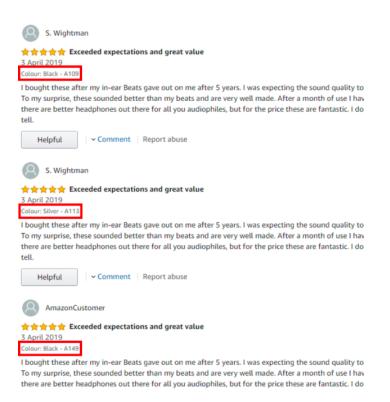
➤ 实体解析 (Entity Resolution): 从不同源的数据集中识别哪些数据对应的 是相同的人/物

ID	Name	Telephone	Address	Items Purchased
233	Angelica J. Jordan	334-555-0178	111 Spring Ln, Greenville, AL	5556, 7611
452	Angie Jordan	202-555-5477	45 Krakow St, Washington, DC	2297
699	Andrew Jordan	334-555-0178	111 Spring Ln, Greenville, AL	1185, 2299, 3720
720	Angie Jrodon			5556
821	Angelica Jeffries Jordan	202-555-5477	397 Hope Blvd, Greenville, AL	7611

又如:合并多个天文望远镜对于同一个方向/天体的照片

应用场景:

▶ 垃圾/诈骗信息检测 (Spam/Fraud Detection): 电商平台检测(相似度高的) 虚假评论,邮件系统检测(收件地址列表高度相似的)垃圾邮件



如何衡量相似度?

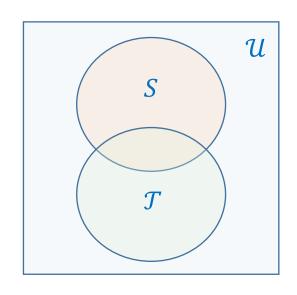
➤ 杰卡德相似度 (Jaccard Similarity) : 刻画两个集合之间的距离 (一个集合中同样的元素允许出现多次)

$$J(S,T) = \frac{|S \cap T|}{|S \cup T|}$$

如何衡量相似度?

➤ 杰卡德相似度 (Jaccard Similarity) : 刻画两个集合之间的距离 (一个集合中同样的元素允许出现多次)

$$J(S,T) = \frac{|S \cap T|}{|S \cup T|}$$



如何衡量相似度?

➤ 杰卡德相似度 (Jaccard Similarity) : 刻画两个集合之间的距离 (一个集合中同样的元素允许出现多次)

$$J(S,T) = \frac{|S \cap T|}{|S \cup T|}$$

若用向量的形式计算:

$$J(S,T) = J(v_S, v_T) = \frac{\sum_{i} \min(v_S(i), v_T(i))}{\sum_{i} \max(v_S(i), v_T(i))}.$$

 $*v_s(i), v_T(i)$ 表示全集中第i个(非重复)元素在集合S和T中出现的次数



如何衡量相似度?

- ➤ 杰卡德相似度 (Jaccard Similarity): 刻画两个集合之间的距离 (一个集合中同样的元素允许出现多次)
- ▶ 欧几里得距离 (Euclidean Distance) /l₂距离

若x,y为d维实数空间的两个点,即x, $y \in \mathbb{R}^d$,它们之间的欧式距离为:

$$D_{euclidean}(x,y) = ||x-y||_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{d} (x(i) - y(i))^2}.$$



如何衡量相似度?

➤ 杰卡德相似度(Jaccard Similarity): 刻画两个集合之间的距离(一个集合

中同样的元素允许出现多次)

▶ 欧几里得距离 (Euclidean Distance) /l₂距离



如何衡量相似度?

- ➤ 杰卡德相似度 (Jaccard Similarity): 刻画两个集合之间的距离 (一个集合中同样的元素允许出现多次)
- ▶ 欧几里得距离 (Euclidean Distance) /l₂距离
- ► l_p距离

若x,y为d维实数空间的两个点,即x, $y \in \mathbb{R}^d$,它们之间的 l_p ($p \ge 1$) 距离为:

$$||x - y||_p = \left(\sum_{i=1}^d |x(i) - y(i)|^p\right)^{1/p}.$$

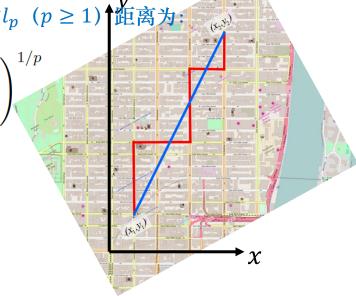
如何衡量相似度?

- ➤ 杰卡德相似度 (Jaccard Similarity) : 刻画两个集合之间的距离 (一个集合中同样的元素允许出现多次)
- ▶ 欧几里得距离 (Euclidean Distance) /l₂距离
- ► l_p距离

 $\exists x, y > d$ 维实数空间的两个点,即 $x, y \in \mathbb{R}^d$,它们之间的 l_p $(p \ge 1)$ 距离为:

$$||x - y||_p = \left(\sum_{i=1}^d |x(i) - y(i)|^p\right)^{1/p}$$

□ p = 1时,称为"曼哈顿距离"



如何衡量相似度?

- ➤ 杰卡德相似度 (Jaccard Similarity): 刻画两个集合之间的距离 (一个集合中同样的元素允许出现多次)
- ▶ 欧几里得距离 (Euclidean Distance) /l₂距离
- ► l_p距离

若x,y为d维实数空间的两个点,即x, $y \in \mathbb{R}^d$,它们之间的 l_p ($p \ge 1$) 距离为:

$$||x - y||_p = \left(\sum_{i=1}^d |x(i) - y(i)|^p\right)^{1/p}.$$

- □ p = 1时,称为"曼哈顿距离"
- □ 随着p增大, $||x-y||_p$ 越倾向于受令|x(i)-y(i)|最大的第i个维度的影响

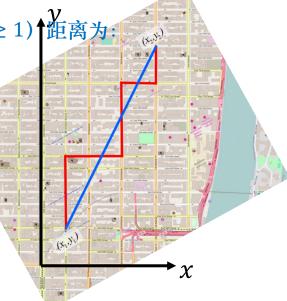
如何衡量相似度?

- ➤ 杰卡德相似度 (Jaccard Similarity) : 刻画两个集合之间的距离 (一个集合中同样的元素允许出现多次)
- ➤ 欧几里得距离 (Euclidean Distance) /l₂距离
- ► l_p距离

若x,y为d维实数空间的两个点,即 $x,y \in \mathbb{R}^d$,它们之间的 l_p $(p \ge 1)$ 距离为:

$$||x - y||_p = \left(\sum_{i=1}^d |x(i) - y(i)|^p\right)^{1/p}$$

 l_2 距离不受坐标系旋转的影响,而其余 l_p 距离不具备此性质



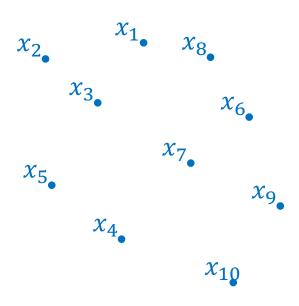
欧氏距离下的相似搜索

k维树方法



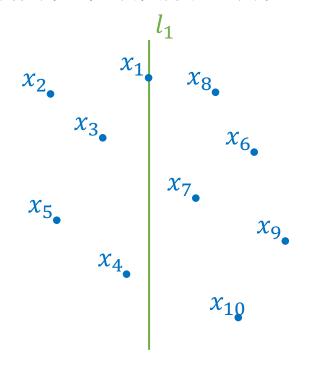
- > k维树 (k-d tree/k-dimension tree)
- ▶ 1975年由Stanford本科生Bentley提出的一种利于相似搜索的数据结构
- ▶ 对于低维数据非常有效(维度d < 20)
- ▶ 核心思想:用二叉搜索树对空间进行分割、存储数据
- ▶ 能准确找到数据集中与新数据的欧式距离最小的数据(即不是近似求解)

例,为10个2维数据建立k维树



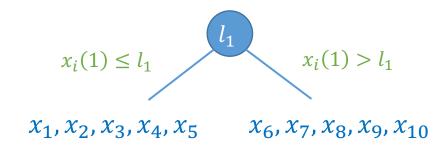
二维平面

例,为10个2维数据建立k维树

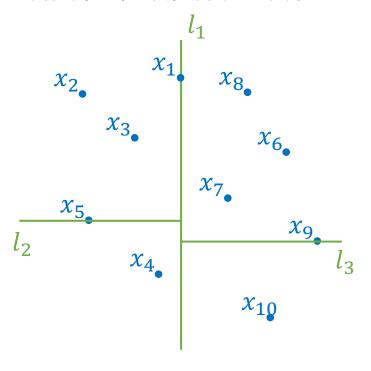


二维平面

先考虑第1个维度(横轴),找到中值,将数据分成两半(令左半数目小于等于右半数目)

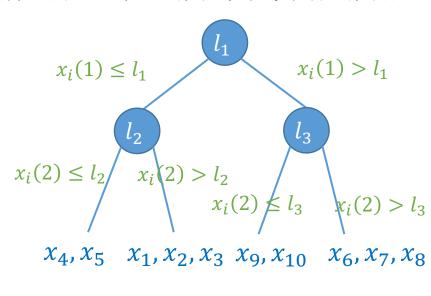


例,为10个2维数据建立k维树

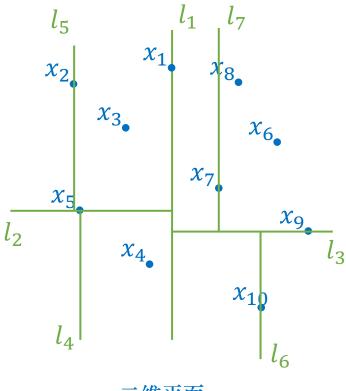


二维平面

再考虑第2个维度(纵轴),找到中值,将每部分数据分别分成两半(令左半数目小于等于右半数目)

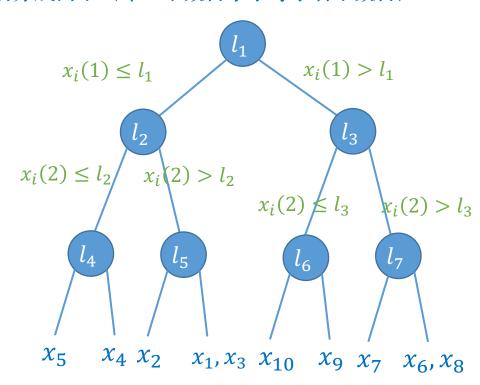


例,为10个2维数据建立k维树

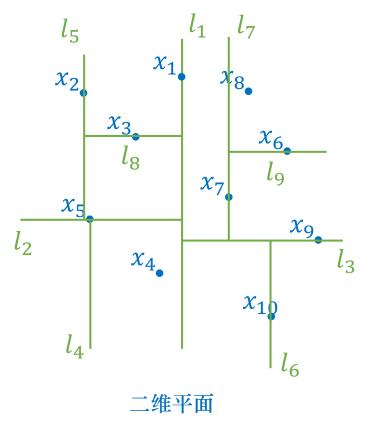


二维平面

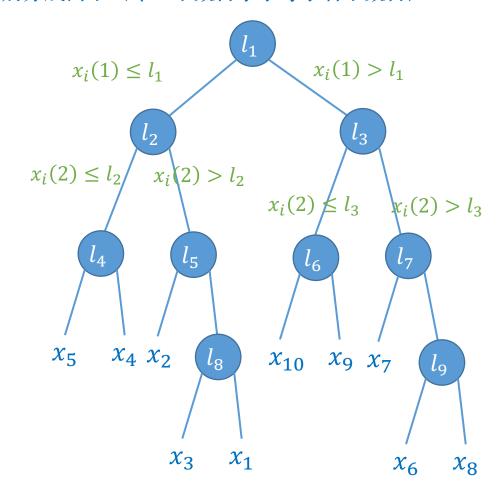
再考虑第1个维度(横轴),找到中值,将每部分数据分别分成两半(令左半数目小于等于右半数目)



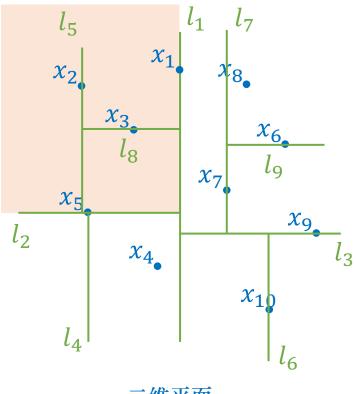
例,为10个2维数据建立k维树



再考虑第2个维度(纵轴),找到中值,将每部分数据分别分成两半(令左半数目小于等于右半数目)

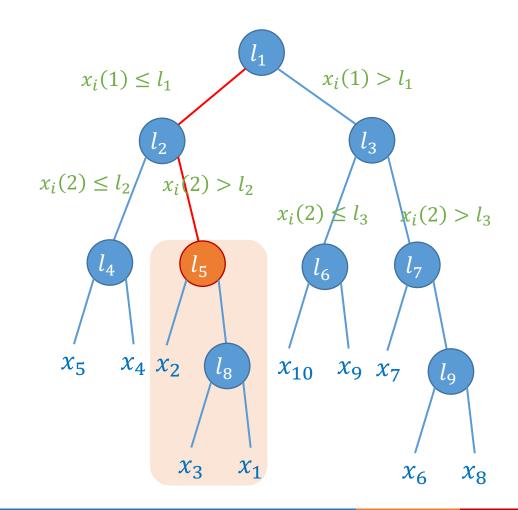


例,为10个2维数据建立k维树

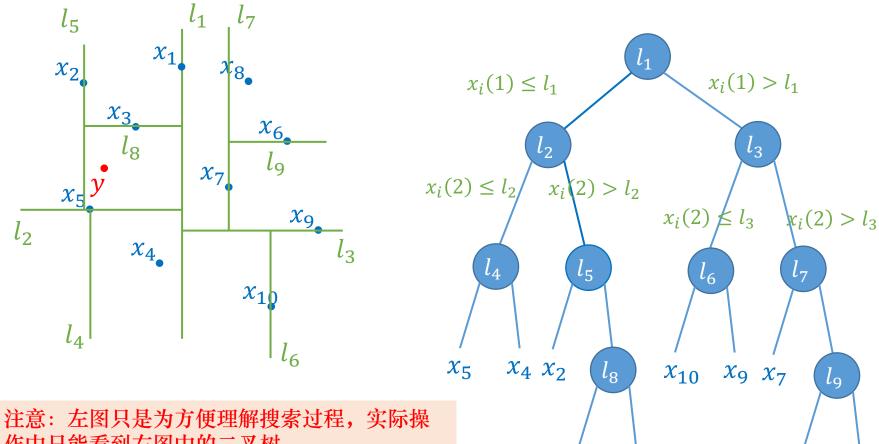


二维平面

树中每一个分支对应空间中的一个子空间



如何用k维树查找数据集中与给定新数据y的欧式距离最新的数据?



 x_1

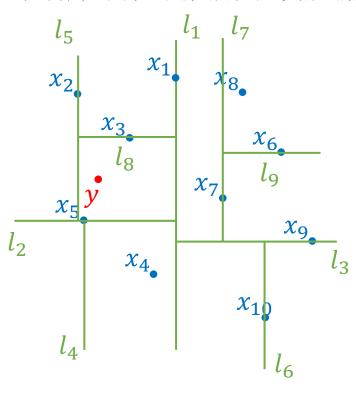
 x_6

 χ_8

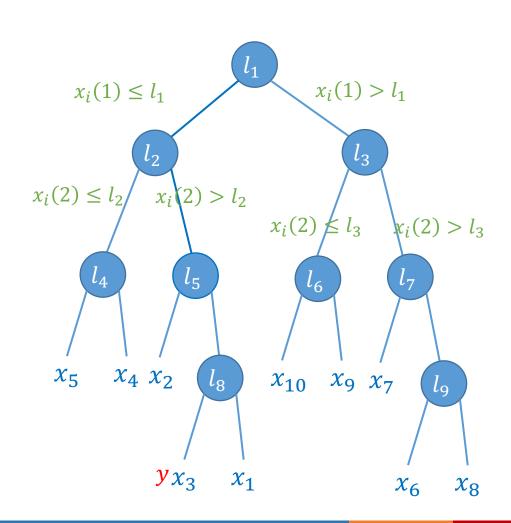
 x_3

注意:左图只是为方便理解搜索过程,实际操作中只能看到右图中的二叉树 (对高维数据无法画出左图)

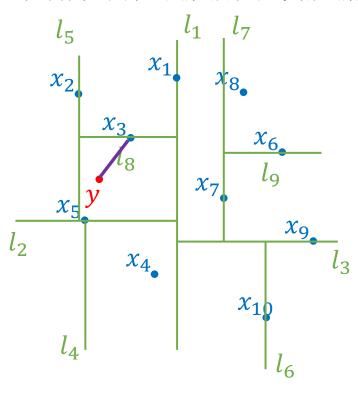
如何用k维树查找数据集中与给定新数据y的欧式距离最新的数据?



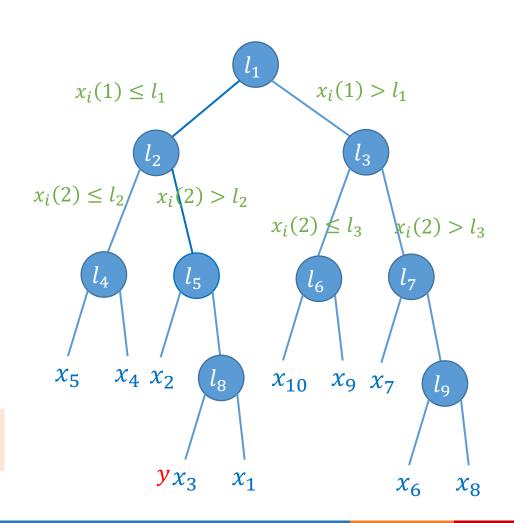
第一步: 在二叉树中根据(y(1),y(2)) 找到y所属的分支



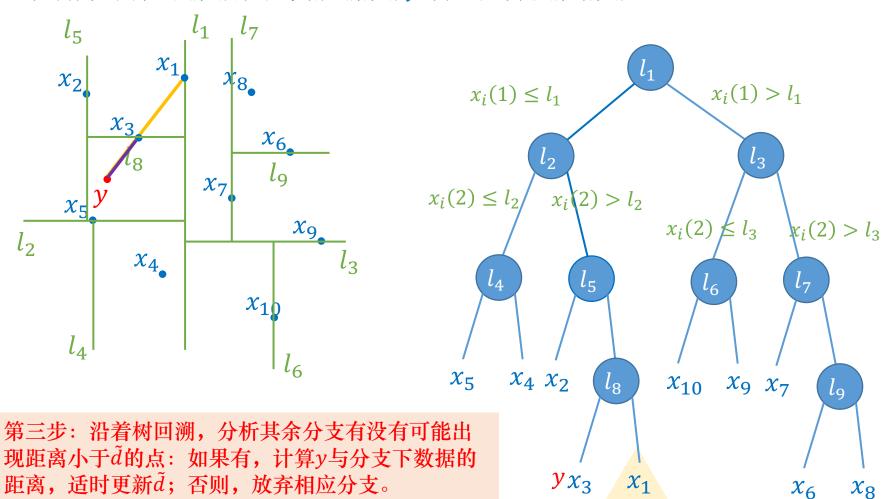
如何用k维树查找数据集中与给定新数据y的欧式距离最新的数据?



第二步: 计算y与y所属的分支下数据的 距离,记录下该点 x_3 及距离 $\tilde{d} = D(y, x_3)$

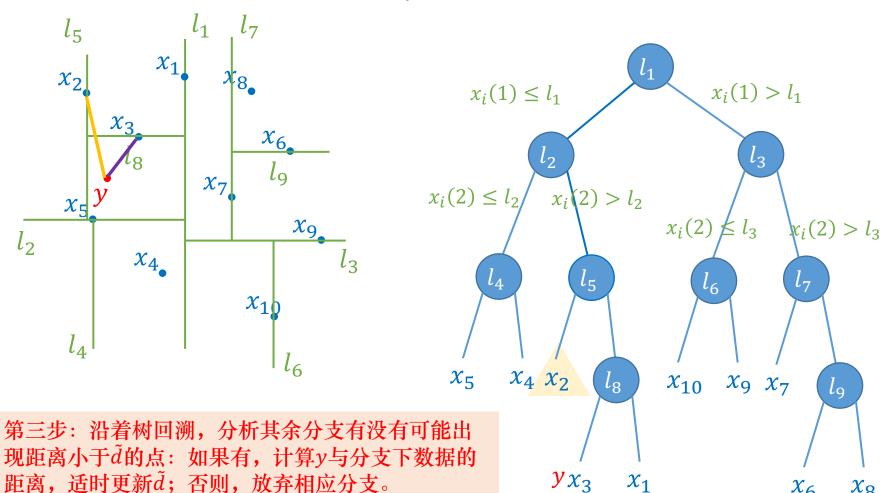


如何用k维树查找数据集中与给定新数据y的欧式距离最新的数据?



距离,适时更新d; 否则,放弃相应分支。

如何用k维树查找数据集中与给定新数据y的欧式距离最新的数据?

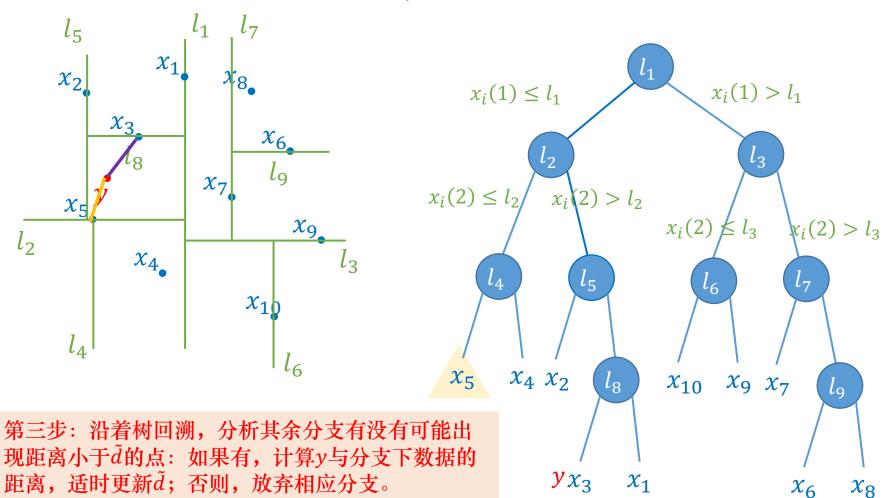


 x_1

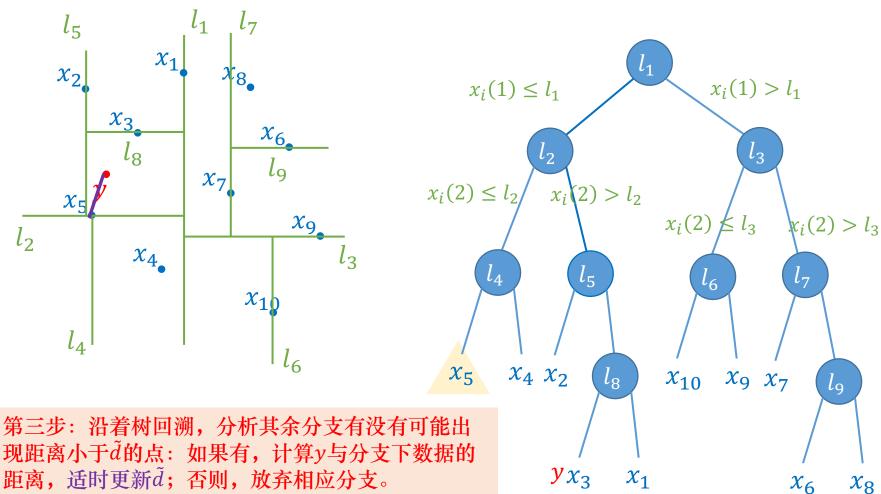
 x_6

 χ_8

如何用k维树查找数据集中与给定新数据y的欧式距离最新的数据?



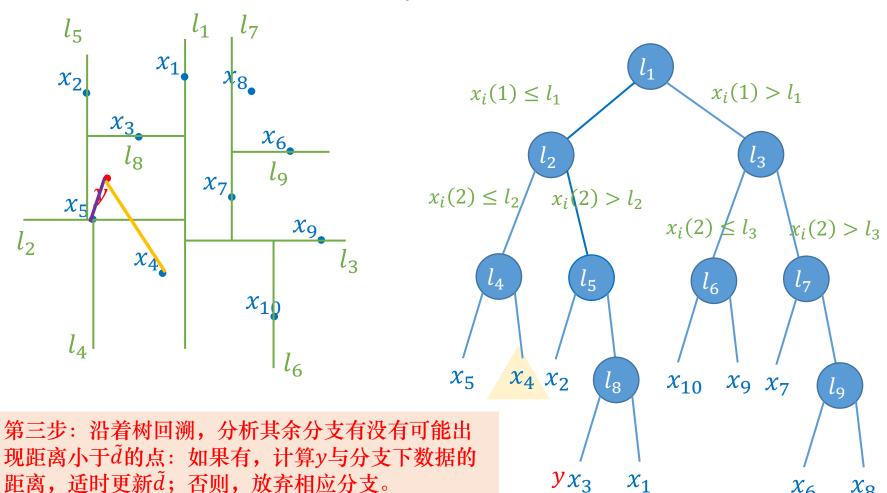
如何用k维树查找数据集中与给定新数据y的欧式距离最新的数据?



现距离小于d的点:如果有,计算y与分支下数据的 距离,适时更新 \tilde{d} ;否则,放弃相应分支。

距离,适时更新d;否则,放弃相应分支。

如何用k维树查找数据集中与给定新数据y的欧式距离最新的数据?



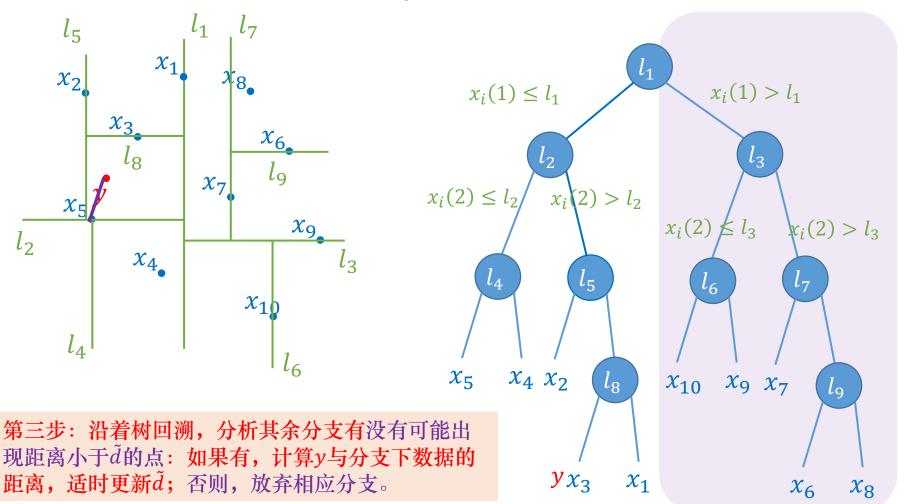
 x_1

 x_6

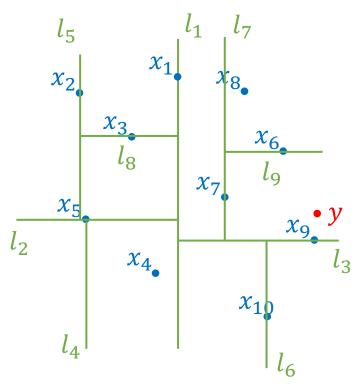
 χ_8

当 $x_i(1) > l_1$ 时,可得 $D(y, x_i) > \tilde{d} = D(y, x_5)$ 所以可以放弃搜索 $x_i(1) > l_1$ 对应的分支

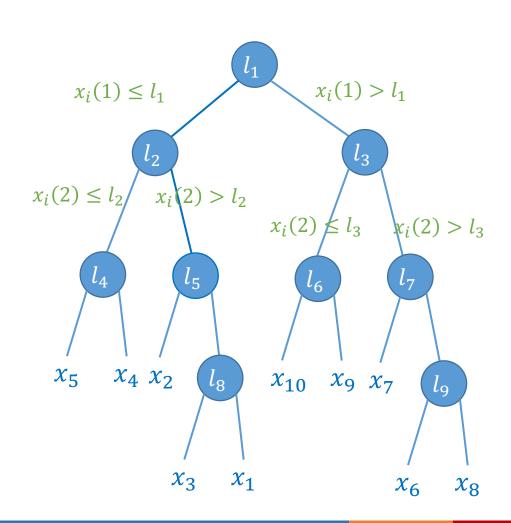
如何用k维树查找数据集中与给定新数据y的欧式距离最新的数据?



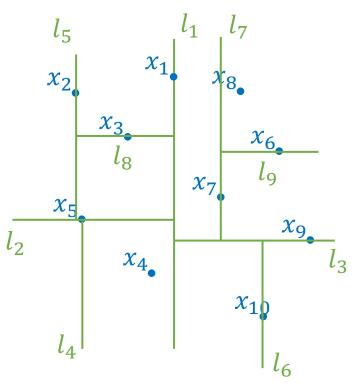
如何用k维树查找数据集中与给定新数据y的欧式距离最新的数据?

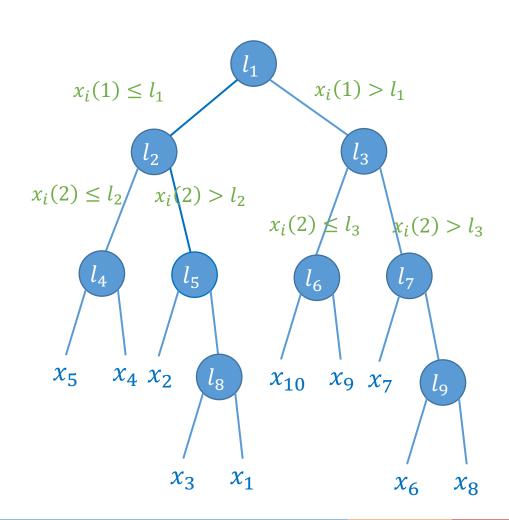


按照前述搜索过程,当y处于图示位 置时,需要和哪些数据进行对比?

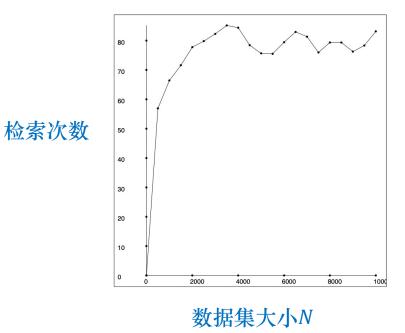


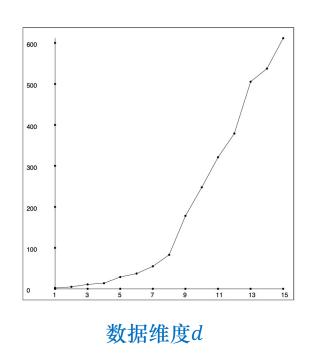
此例仅展示维数为2的情况。当数据维数小于等于20时,非常有效





维数灾难 (Curse of dimensionality): 复杂度随数据维度d指数增长





为什么?是由于k维树的缺陷还是由于难以对高维数据进行相似搜索?

高维空间缺少像低维空间(比如二维/三维)的几何特性,比如在高维空间有大量的数据两两之间距离类似

Example 4.1 What is the largest number of points that fit in d-dimensional space, with the property that all pairwise distances are in the interval [0.75, 1]?

高维空间缺少像低维空间(比如二维/三维)的几何特性,比如在高维空间有大量的数据两两之间距离类似

Example 4.1 What is the largest number of points that fit in d-dimensional space, with the property that all pairwise distances are in the interval [0.75, 1]?

- d = 1: At most 2 points have this property...if you try to fit a third point, at least one of the 3 pairwise distances will be off.
- d = 2: At most 3 points have this property...if you try to fit a fourth point, at least one of the 6 pairwise distances will be off.
- d = 100: You will be able to fit several thousand points!
- In general, you will be able to fit an exponential number of points (a quick calculation shows that a random set of $exp(\sqrt{d})$ will satisfy this property with high probability).

d=100时,若选其中任何一个数据作为参考数据、寻找相似数据,可能有大量距离相似的数据

欧氏距离下的相似搜索

数据降维



高维数据

大数据不仅说明数据量大,还意味数据的维度高:

- ▶ 微博有上亿日活用户,每个用户的记录可以有上千个维度:关注/被关注/ 浏览记录/点赞时间/发微博量/微博内容/...
- ▶ 一个时长3分钟、500x500像素、每秒15帧、3颜色通道的视频,有至少二十 亿个像素值

高维数据

大数据不仅说明数据量大,还意味数据的维度高:

- ▶ 微博有上亿日活用户,每个用户的记录可以有上千个维度:关注/被关注/ 浏览记录/点赞时间/发微博量/微博内容/...
- ▶ 一个时长3分钟、500x500像素、每秒15帧、3颜色通道的视频,有至少二十 亿个像素值

对高维数据,通过k维树等方法难以有效解决相似搜索的问题

数据降维 (Dimensionality Reduction): 把高维空间中的数据用低维空间中的数据表示,并尽可能保留原始数据之间的特定性质

$$\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\ldots,\mathbf{x}_n\in\mathbb{R}^k\Rightarrow\widetilde{\mathbf{x}}_1,\widetilde{\mathbf{x}}_2,\ldots,\widetilde{\mathbf{x}}_n\in\mathbb{R}^d\ (d\ll k)$$

*对于相似搜索,需要保留的是不同数据之间的相对距离

高维数据

欧几里得低失真嵌入(Euclidean Low Distortion Embedding)

给定 $x_1, ..., x_n \in \mathbb{R}^k$ 及误差 $\varepsilon \ge 0$,求满足以下条件的 $\widetilde{x}_1, ..., \widetilde{x}_n \in \mathbb{R}^d (d \ll k)$: $(1 - \varepsilon) \|x_i - x_j\|_2 \le \|\widetilde{x}_i - \widetilde{x}_j\|_2 \le (1 + \varepsilon) \|x_i - x_j\|_2, \forall i, j = 1, ..., n.$

相似搜索: 先对高维数据 $x_1, ..., x_n$ 降维、得到 $\tilde{x}_1, ..., \tilde{x}_n$, 再用k维树等方法做相似搜索

欧氏距离下的相似搜索 JL转换



JL转换 (Johnson - Lindenstrauss Transform):

- ▶ 1984年由William Buhmann Johnson与Joram Lindenstrauss提出
- > 可以用于解决欧几里得低失真嵌入问题

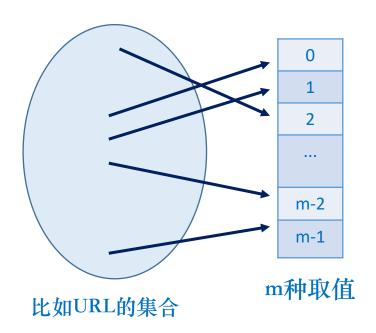
[PDF] Extensions of Lipschitz mappings into a Hilbert space 26

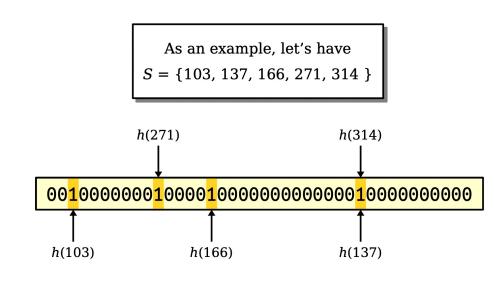
WB Johnson, J Lindenstrauss - Contemporary mathematics, 1984 - a.pomf.se
In this note we consider the following extension problem for Lipschitz functions: Given a metric space X and n= 2, 3, 4,...'estimate the smallest constant L= L (X, n) so that every~ pping f from every n-element subset of X into t 2 extends to a mapping f from X into t 2 with (Here II&IItip is the Lipschitz constant of the function g.) A classical result of Kirszbraun's [14, p. 48] states that L (t2, n)= 1 for all n, but it is easy to see that L (X, n)~ as n~ for many metric spaces X. Marcus and Pisier [10] initiated the study of L (X, n) for X= Lp.(For brevity ... ☆ Save 𝔻 Cite Cited by 3481 Related articles All 3 versions

泛函分析方向的研究

前四讲中多次利用随机哈希函数将取值范围大的输入元素映射为取值范围较小的结果

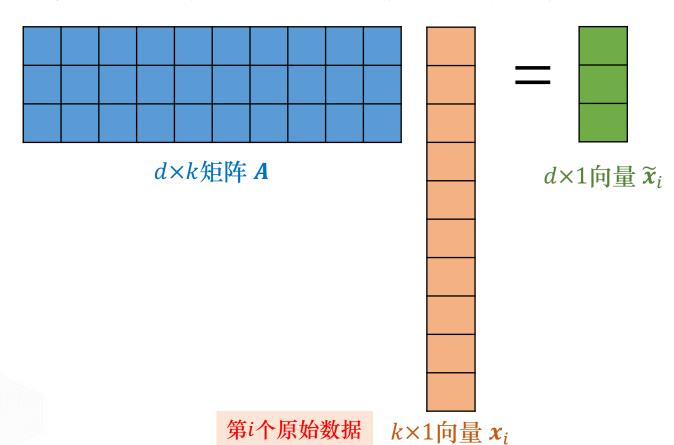
例如解决从属问题的布隆过滤器:





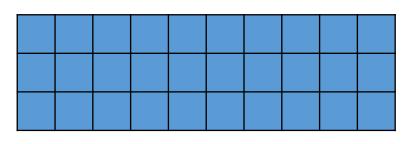
前四讲中多次利用随机哈希函数将取值范围大的输入元素映射为取值范围较小的结果

JL转换的思想:利用随机生成的 $d \times k$ 大小的矩阵,将k维数据压缩至d维数据



前四讲中多次利用随机哈希函数将取值范围大的输入元素映射为取值范围较小的结果

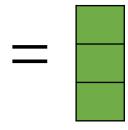
JL转换的思想:利用随机生成的 $d \times k$ 大小的矩阵,将k维数据压缩至d维数据



d×k矩阵 A

如何随机生成矩阵A可以取得低失真?

$$(1-\varepsilon)\|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j\|_2 \le \|\widetilde{\boldsymbol{x}}_i - \widetilde{\boldsymbol{x}}_j\|_2 \le (1+\varepsilon)\|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j\|_2$$

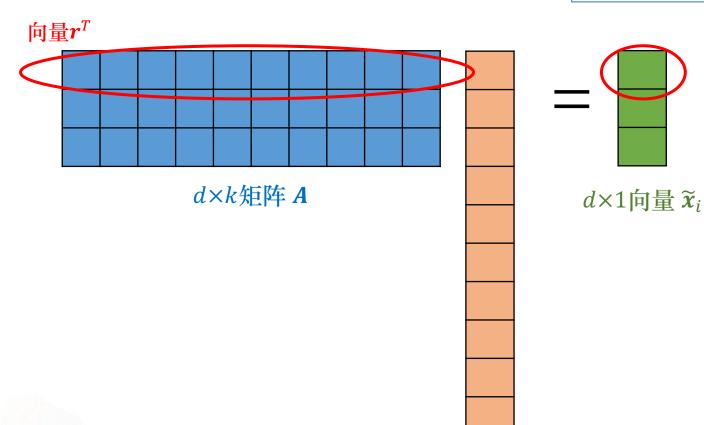


 $d \times 1$ 向量 \tilde{x}_i

第i个原始数据

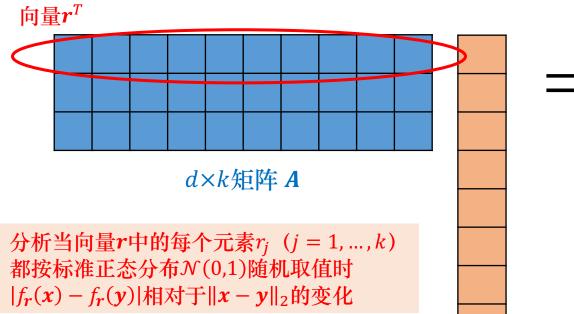
矩阵A的每一个 $1 \times k$ 的行向量与 $k \times 1$ 的列向量相乘可以定义为用由向量r定义的函数 $f(\cdot)$ 对数据x做变换

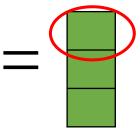
$$f_{\mathbf{r}}(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x}, \mathbf{r} \rangle = \sum_{j=1}^{k} x_j r_j.$$



矩阵A的每一个 $1 \times k$ 的行向量与 $k \times 1$ 的列向量相乘可以定义为用由向量r定义的函数 $f(\cdot)$ 对数据x做变换

$$f_{\mathbf{r}}(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x}, \mathbf{r} \rangle = \sum_{j=1}^{k} x_j r_j.$$





 $d \times 1$ 向量 \tilde{x}_i

分析当向量r中的每个元素 r_j (j=1,...,k)都按标准正态分布 $\mathcal{N}(0,1)$ 随机取值时 $f_r(x)-f_r(y)$ 相对于x-y的变化

$$f_{\mathbf{r}}(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x}, \mathbf{r} \rangle = \sum_{j=1}^{k} x_j r_j.$$

$$f_{\mathbf{r}}(\mathbf{x}) - f_{\mathbf{r}}(\mathbf{y}) = \sum_{j=1}^{k} x_j r_j - \sum_{j=1}^{k} y_j r_j = \sum_{j=1}^{k} (\underbrace{x_j - y_j}) r_j.$$

每个ri都是服从正态分布的随机变量



分析当向量r中的每个元素 r_j (j=1,...,k)都按标准正态分布 $\mathcal{N}(0,1)$ 随机取值时 $f_r(x)$ – $f_r(y)$ 相对于x-y的变化

$$f_{\mathbf{r}}(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x}, \mathbf{r} \rangle = \sum_{j=1}^{k} x_j r_j.$$

$$f_{\mathbf{r}}(\mathbf{x}) - f_{\mathbf{r}}(\mathbf{y}) = \sum_{j=1}^{k} x_j r_j - \sum_{j=1}^{k} y_j r_j = \sum_{j=1}^{k} (\underbrace{x_j - y_j}) r_j.$$

每个ri都是服从正态分布的随机变量

分析当向量r中的每个元素 r_j (j = 1, ..., k) 都按标准正态分布 $\mathcal{N}(0,1)$ 随机取值时 $f_r(x)$ – $f_r(y)$ 相对于x-y的变化

$$f_{\mathbf{r}}(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x}, \mathbf{r} \rangle = \sum_{j=1}^{k} x_j r_j.$$

$$f_{\mathbf{r}}(\mathbf{x}) - f_{\mathbf{r}}(\mathbf{y}) = \sum_{j=1}^{k} x_j r_j - \sum_{j=1}^{k} y_j r_j = \sum_{j=1}^{k} (\underbrace{x_j - y_j}) r_j.$$

每个ri都是服从正态分布的随机变量

k个服从正态分布的随机变量的加权和依然是正态分布

正态分布的优异性质

随机变量
$$\sum_{j=1}^{k} (x_j - y_j) r_j$$
 服从正态分布,期望为 ,方差为

分析当向量r中的每个元素 r_j (j=1,...,k)都按标准正态分布 $\mathcal{N}(0,1)$ 随机取值时 $f_r(x)-f_r(y)$ 相对于x-y的变化

$$f_{\mathbf{r}}(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x}, \mathbf{r} \rangle = \sum_{j=1}^{k} x_j r_j.$$

$$f_{\mathbf{r}}(\mathbf{x}) - f_{\mathbf{r}}(\mathbf{y}) = \sum_{j=1}^{k} x_j r_j - \sum_{j=1}^{k} y_j r_j = \sum_{j=1}^{k} (\underbrace{x_j - y_j}) r_j.$$

每个 r_j 都是服从正态分布的随机变量

k个服从正态分布的随机变量的加权和依然是正态分布

正态分布的优异性质

随机变量
$$\sum_{j=1}^{k} (x_j - y_j) r_j$$
 服从正态分布,期望为0,方差为 $\sum_{j=1}^{k} (x_j - y_j)^2$

If X_1, X_2, \ldots, X_n are independent, then

$$Var[c_0 + c_1X_1 + c_2X_2 + \dots + c_nX_n] = c_1^2 Var[X_1] + c_2^2 Var[X_2] + \dots + c_n^2 Var[X_n]$$

分析当向量r中的每个元素 r_j (j=1,...,k)都按标准正态分布 $\mathcal{N}(0,1)$ 随机取值时 $f_r(x)-f_r(y)$ 相对于x-y的变化

$$f_{\mathbf{r}}(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x}, \mathbf{r} \rangle = \sum_{j=1}^{k} x_j r_j.$$

$$f_{\mathbf{r}}(\mathbf{x}) - f_{\mathbf{r}}(\mathbf{y}) = \sum_{j=1}^{k} x_j r_j - \sum_{j=1}^{k} y_j r_j = \sum_{j=1}^{k} (\underbrace{x_j - y_j}) r_j.$$

每个ri都是服从正态分布的随机变量

随机变量 $f_{\mathbf{r}}(\mathbf{x}) - f_{\mathbf{r}}(\mathbf{y})$ 服从正态分布,期望为0,方差为 $\sum_{j=1}^{k} (x_j - y_j)^2$ 即 $\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2^2$.

$$Var[f_r(x) - f_r(y)] = ||x - y||_2^2$$

分析当向量r中的每个元素 r_i (j=1,...,k) 都按标准正态分布 $\mathcal{N}(0,1)$ 随机取值时 $f_r(x)$ $f_r(y)$ 相对于x-y的变化

$$f_{\mathbf{r}}(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x}, \mathbf{r} \rangle = \sum_{j=1}^{k} x_j r_j.$$

$$f_{\mathbf{r}}(\mathbf{x}) - f_{\mathbf{r}}(\mathbf{y}) = \sum_{j=1}^{k} x_j r_j - \sum_{j=1}^{k} y_j r_j = \sum_{j=1}^{k} (\underbrace{x_j - y_j}) r_j.$$

每个ri都是服从正态分布的随机变量

目标:降维过程中保护数据之间距离 $(1-\varepsilon)\|\mathbf{x}_i-\mathbf{x}_j\|_2 \le \|\widetilde{\mathbf{x}}_i-\widetilde{\mathbf{x}}_j\|_2 \le (1+\varepsilon)\|\mathbf{x}_i-\mathbf{x}_j\|_2$

需要分析的是 (回忆l₂距离定义)

随机变量 $f_{\mathbf{r}}(\mathbf{x}) - f_{\mathbf{r}}(\mathbf{y})$ 服从正态分布,期望为0,方差为 $\sum (x_j - y_j)^2$ 即 $\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2^2$.

$$Var[f_r(x) - f_r(y)] = ||x - y||_2^2$$

分析当向量r中的每个元素 r_j (j=1,...,k)都按标准正态分布 $\mathcal{N}(0,1)$ 随机取值时 $f_r(x)-f_r(y)$ 相对于x-y的变化

$$f_{\mathbf{r}}(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x}, \mathbf{r} \rangle = \sum_{j=1}^{k} x_j r_j.$$

$$f_{\mathbf{r}}(\mathbf{x}) - f_{\mathbf{r}}(\mathbf{y}) = \sum_{j=1}^{k} x_j r_j - \sum_{j=1}^{k} y_j r_j = \sum_{j=1}^{k} (\underbrace{x_j - y_j}) r_j.$$

每个ri都是服从正态分布的随机变量

目标:降维过程中保护数据之间距离

$$(1-\varepsilon)\|\boldsymbol{x}_i-\boldsymbol{x}_j\|_2 \leq \|\widetilde{\boldsymbol{x}}_i-\widetilde{\boldsymbol{x}}_j\|_2 \leq (1+\varepsilon)\|\boldsymbol{x}_i-\boldsymbol{x}_j\|_2$$

需要分析的是 $|f_r(x) - f_r(y)|$ (一维数据间距离)

注意绝对值符号

随机变量 $f_{\mathbf{r}}(\mathbf{x}) - f_{\mathbf{r}}(\mathbf{y})$ 服从正态分布,期望为0,方差为 $\sum_{j=1}^{\infty} (x_j - y_j)^2$ 即 $\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2^2$.

$$Var[f_r(x) - f_r(y)] = ||x - y||_2^2$$

分析当向量r中的每个元素 r_i (j=1,...,k) 都按标准正态分布 $\mathcal{N}(0,1)$ 随机取值时 $f_r(x)$ $f_r(y)$ 相对于x-y的变化

$$f_{\mathbf{r}}(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x}, \mathbf{r} \rangle = \sum_{j=1}^{k} x_j r_j.$$

$$f_{\mathbf{r}}(\mathbf{x}) - f_{\mathbf{r}}(\mathbf{y}) = \sum_{j=1}^{k} x_j r_j - \sum_{j=1}^{k} y_j r_j = \sum_{j=1}^{k} (\underbrace{x_j - y_j}) r_j.$$

每个ri都是服从正态分布的随机变量

目标:降维过程中保护数据之间距离 $(1-\varepsilon)\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|_2 \le \|\widetilde{\mathbf{x}}_i - \widetilde{\mathbf{x}}_j\|_2 \le (1+\varepsilon)\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|_2 \qquad 改为分析(f_r(\mathbf{x}) - f_r(\mathbf{y}))^2$

随机变量 $f_{\mathbf{r}}(\mathbf{x}) - f_{\mathbf{r}}(\mathbf{y})$ 服从正态分布,期望为0,方差为 $\sum (x_j - y_j)^2$ 即 $\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2^2$.

$$Var[f_r(x) - f_r(y)] = ||x - y||_2^2$$

分析当向量r中的每个元素 r_j (j=1,...,k)都按标准正态分布 $\mathcal{N}(0,1)$ 随机取值时 $f_r(x)-f_r(y)$ 相对于x-y的变化

$$f_{\mathbf{r}}(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x}, \mathbf{r} \rangle = \sum_{j=1}^{k} x_j r_j.$$

$$f_{\mathbf{r}}(\mathbf{x}) - f_{\mathbf{r}}(\mathbf{y}) = \sum_{j=1}^{k} x_j r_j - \sum_{j=1}^{k} y_j r_j = \sum_{j=1}^{k} (\underbrace{x_j - y_j}) r_j.$$

每个ri都是服从正态分布的随机变量

改为分析
$$(f_r(x) - f_r(y))^2$$

随机变量 $f_{\mathbf{r}}(\mathbf{x}) - f_{\mathbf{r}}(\mathbf{y})$ 服从正态分布,期望为0,方差为 $\sum_{j=1}^{\kappa} (x_j - y_j)^2$ 即 $\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2^2$.

$$\mathbf{Var}[f_r(x) - f_r(y)] = \mathbb{E}\left[\left(f_r(x) - f_r(y)\right)^2\right] - (\mathbb{E}[f_r(x) - f_r(y)])^2 = \|x - y\|_2^2$$

分析当向量r中的每个元素 r_j (j=1,...,k)都按标准正态分布 $\mathcal{N}(0,1)$ 随机取值时 $f_r(x)-f_r(y)$ 相对于x-y的变化

$$f_{\mathbf{r}}(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x}, \mathbf{r} \rangle = \sum_{j=1}^{k} x_j r_j.$$

$$f_{\mathbf{r}}(\mathbf{x}) - f_{\mathbf{r}}(\mathbf{y}) = \sum_{j=1}^{k} x_j r_j - \sum_{j=1}^{k} y_j r_j = \sum_{j=1}^{k} (\underbrace{x_j - y_j}) r_j.$$

每个ri都是服从正态分布的随机变量

改为分析
$$(f_r(x) - f_r(y))^2$$

随机变量 $f_{\mathbf{r}}(\mathbf{x}) - f_{\mathbf{r}}(\mathbf{y})$ 服从正态分布,期望为0,方差为 $\sum_{j=1}^{k} (x_j - y_j)^2$ 即 $\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2^2$.

$$\mathbb{E}\left[\left(f_r(\mathbf{x}) - f_r(\mathbf{y})\right)^2\right] = \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2^2$$

分析当向量r中的每个元素 r_j (j=1,...,k)都按标准正态分布 $\mathcal{N}(0,1)$ 随机取值时 $f_r(x)-f_r(y)$ 相对于x-y的变化

$$f_{\mathbf{r}}(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x}, \mathbf{r} \rangle = \sum_{j=1}^{k} x_j r_j.$$

$$\mathbb{E}\left[\left(f_r(\boldsymbol{x}) - f_r(\boldsymbol{y})\right)^2\right] = \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}\|_2^2$$

对两个高维数据x和y分别用函数 $f_r(\cdot)$ 做变换,得到的 $\left(f_r(x) - f_r(y)\right)^2$ 值可以用于近似 $\|x - y\|_2^2$

分析当向量r中的每个元素 r_j (j=1,...,k)都按标准正态分布 $\mathcal{N}(0,1)$ 随机取值时 $f_r(x)$ – $f_r(y)$ 相对于x-y的变化

$$f_{\mathbf{r}}(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x}, \mathbf{r} \rangle = \sum_{j=1}^{k} x_j r_j.$$

$$\mathbb{E}\left[\left(f_r(\mathbf{x}) - f_r(\mathbf{y})\right)^2\right] = \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2^2$$

对两个高维数据x和y分别用函数 $f_r(\cdot)$ 做变换,得到的 $\left(f_r(x) - f_r(y)\right)^2$ 值可以用于近似 $\|x - y\|_2^2$



问题一,现在仅是 $(f_r(x) - f_r(y))^2$ 的期望等于 $||x - y||_2^2$, $(f_r(x) - f_r(y))^2$ 的具体取值可能明显偏离 $||x - y||_2^2$,如何降低随机性?



问题二, $\mathbb{E}\left[\left(f_r(x) - f_r(y)\right)^2\right] = \|x - y\|_2^2$ 不代表 $\mathbb{E}\left[|f_r(x) - f_r(y)|\right] = \|x - y\|_2$,在问题一存在的基础上, $|f_r(x) - f_r(y)|$ 可能进一步偏离 $\|x - y\|_2$

分析当向量r中的每个元素 r_j (j=1,...,k)都按标准正态分布 $\mathcal{N}(0,1)$ 随机取值时 $f_r(x)$ – $f_r(y)$ 相对于x-y的变化

$$f_{\mathbf{r}}(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x}, \mathbf{r} \rangle = \sum_{j=1}^{k} x_j r_j.$$

$$\mathbb{E}\left[\left(f_{r}(\boldsymbol{x}) - f_{r}(\boldsymbol{y})\right)^{2}\right] = \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}\|_{2}^{2}$$

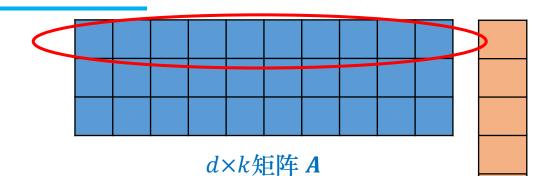
对两个高维数据x和y分别用函数 $f_r(\cdot)$ 做变换,得到的 $\left(f_r(x) - f_r(y)\right)^2$ 值可以用于近似 $\|x - y\|_2^2$

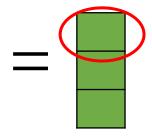


问题一, $(f_r(x) - f_r(y))^2$ 的具体取值可能明显偏离 $||x - y||_2^2$,如何降低随机性?

问题二, $|f_r(x) - f_r(y)|$ 可能进一步偏离 $||x - y||_2$

解决思路? 多个哈希函数?



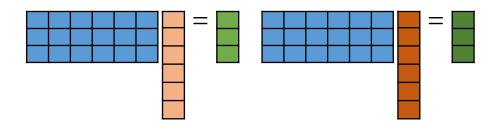


 $d \times 1$ 向量 \tilde{x}_i

现仅分析一个向量r时, $|f_r(x) - f_r(y)|$ 相对 $||x - y||_2$ 变化(或 $|f_r(x) - f_r(y)|^2$ 相对 $||x - y||_2^2$ 变化)

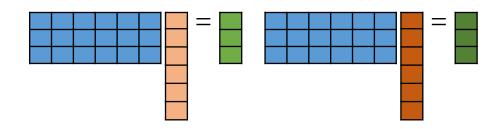
当有
$$d$$
个向量时 $(r_1,...,r_d)$, $\|(f_{r_1}(x),...,f_{r_d}(x)) - (f_{r_1}(y),...,f_{r_d}(y))\|_2$ 相对 $\|x-y\|_2$ 的变化?

 $k \times 1$ 向量 x_i



现仅分析一个向量r时, $|f_r(x) - f_r(y)|$ 相对 $||x - y||_2$ 变化(或 $|f_r(x) - f_r(y)|^2$ 相对 $||x - y||_2^2$ 变化)

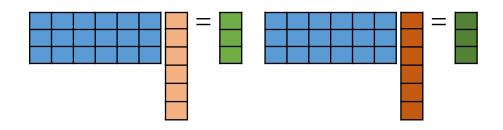
当有d个向量时 $(r_1,...,r_d)$, $\|(f_{r_1}(x),...,f_{r_d}(x)) - (f_{r_1}(y),...,f_{r_d}(y))\|_2$ 相对 $\|x-y\|_2$ 的变化?



现仅分析一个向量r时, $|f_r(x) - f_r(y)|$ 相对 $||x - y||_2$ 变化(或 $|f_r(x) - f_r(y)|^2$ 相对 $||x - y||_2^2$ 变化)

当有
$$d$$
个向量时 $(r_1, ..., r_d)$, $\|(f_{r_1}(x), ..., f_{r_d}(x)) - (f_{r_1}(y), ..., f_{r_d}(y))\|_2$ 相对 $\|x - y\|_2$ 的变化?

直觉上,可以看到如下结果:

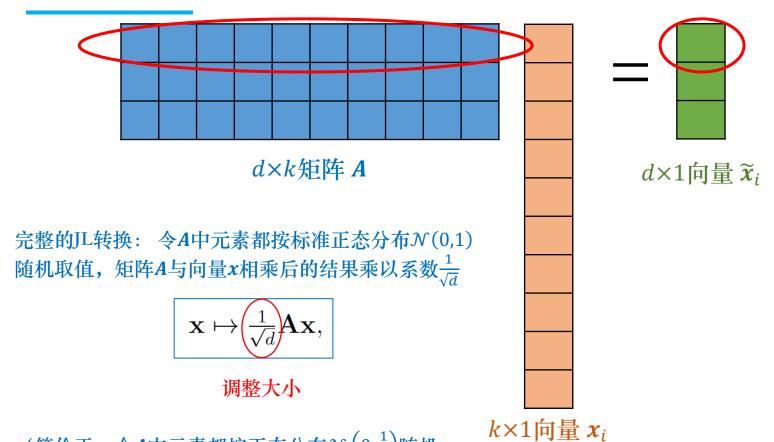


现仅分析一个向量r时, $|f_r(x) - f_r(y)|$ 相对 $||x - y||_2$ 变化(或 $|f_r(x) - f_r(y)|^2$ 相对 $||x - y||_2^2$ 变化)

当有
$$d$$
个向量时 $(r_1, ..., r_d)$, $\|(f_{r_1}(x), ..., f_{r_d}(x)) - (f_{r_1}(y), ..., f_{r_d}(y))\|_2$ 相对 $\|x - y\|_2$ 的变化?

例
$$\left\| \frac{1}{\sqrt{2}}(2,2) - \frac{1}{\sqrt{2}}(1,1) \right\|_{2} = |2-1|$$

直觉上,可以看到如下结果:



(等价于: 令A中元素都按正态分布 $\mathcal{N}\left(0,\frac{1}{d}\right)$ 随机取值,矩阵A与向量x相乘后不用调整系数)

欧几里得低失真嵌入 (Euclidean Low Distortion Embedding)

给定 $x_1, ..., x_n \in \mathbb{R}^k$ 及误差 $\varepsilon \ge 0$,求满足以下条件的 $\widetilde{x}_1, ..., \widetilde{x}_n \in \mathbb{R}^d (d \ll k)$: $(1 - \varepsilon) \|x_i - x_j\|_2 \le \|\widetilde{x}_i - \widetilde{x}_j\|_2 \le (1 + \varepsilon) \|x_i - x_j\|_2, \forall i, j = 1, ..., n.$

JL引理(Johnson - Lindenstrauss Lemma)

对任意 $x_1, ..., x_n \in \mathbb{R}^k$ 及误差 $\varepsilon \geq 0$,存在一个 $d \times k$ 矩阵A $(d = O\left(\frac{\log n}{\varepsilon^2}\right))$ 使得当 $\tilde{x}_i = Ax_i$ 时有

$$(1-\varepsilon)\left\|\boldsymbol{x}_{i}-\boldsymbol{x}_{j}\right\|_{2}\leq\left\|\widetilde{\boldsymbol{x}}_{i}-\widetilde{\boldsymbol{x}}_{j}\right\|_{2}\leq(1+\varepsilon)\left\|\boldsymbol{x}_{i}-\boldsymbol{x}_{j}\right\|_{2},\forall i,j=1,\ldots,n.$$

若矩阵A的每一个元素都依据 $\mathcal{N}\left(0,\frac{1}{d}\right)$ 随机取值,则上式能以较大概率被满足。

欧几里得低失真嵌入(Euclidean Low Distortion Embedding)

给定 $x_1, ..., x_n \in \mathbb{R}^k$ 及误差 $\varepsilon \ge 0$,求满足以下条件的 $\widetilde{x}_1, ..., \widetilde{x}_n \in \mathbb{R}^d (d \ll k)$: $(1 - \varepsilon) \|x_i - x_j\|_2 \le \|\widetilde{x}_i - \widetilde{x}_j\|_2 \le (1 + \varepsilon) \|x_i - x_j\|_2, \forall i, j = 1, ..., n.$

JL引理(Johnson - Lindenstrauss Lemma)

$$(1-\varepsilon)\left\|\boldsymbol{x}_{i}-\boldsymbol{x}_{j}\right\|_{2}\leq\left\|\widetilde{\boldsymbol{x}}_{i}-\widetilde{\boldsymbol{x}}_{j}\right\|_{2}\leq(1+\varepsilon)\left\|\boldsymbol{x}_{i}-\boldsymbol{x}_{j}\right\|_{2},\forall i,j=1,\ldots,n.$$

若矩阵A的每一个元素都依据 $\mathcal{N}\left(0,\frac{1}{d}\right)$ 随机取值,则上式能以较大概率被满足。

依据正态分布随机生成的矩阵A较可能令不等式成立 (具体概率值的分析略)

欧几里得低失真嵌入(Euclidean Low Distortion Embedding)

给定 $x_1, ..., x_n \in \mathbb{R}^k$ 及误差 $\varepsilon \ge 0$,求满足以下条件的 $\widetilde{x}_1, ..., \widetilde{x}_n \in \mathbb{R}^d (d \ll k)$: $(1 - \varepsilon) \|x_i - x_j\|_2 \le \|\widetilde{x}_i - \widetilde{x}_j\|_2 \le (1 + \varepsilon) \|x_i - x_j\|_2, \forall i, j = 1, ..., n.$

JL引理(Johnson - Lindenstrauss Lemma)

对任意 $x_1, ..., x_n \in \mathbb{R}^k$ 及误差 $\varepsilon \geq 0$,存在一个 $d \times k$ 矩阵A $(d = O\left(\frac{\log n}{\varepsilon^2}\right))$ 使得当 $\tilde{x}_i = Ax_i$ 时有

$$(1-\varepsilon)\|\mathbf{x}_i-\mathbf{x}_j\|_2 \leq \|\widetilde{\mathbf{x}}_i-\widetilde{\mathbf{x}}_j\|_2 \leq (1+\varepsilon)\|\mathbf{x}_i-\mathbf{x}_j\|_2, \forall i,j=1,\ldots,n.$$

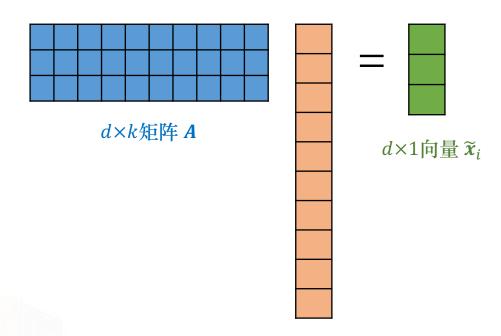
若矩阵A的每一个元素都依据 $\mathcal{N}\left(0,\frac{1}{d}\right)$ 随机取值,则上式能以较大概率被满足。

注意:为确保低失真,d值有下限(即JL转换不能在低失真约束下无限制地压缩数据)

例: $\varepsilon = 0.05, n = 10^5$ 时,d值约为6600,不受k的影响(如 $k = 10^{12}$ 依然可以低失真压缩至d维)

JL转换的优点:数据无关 (data oblivious)

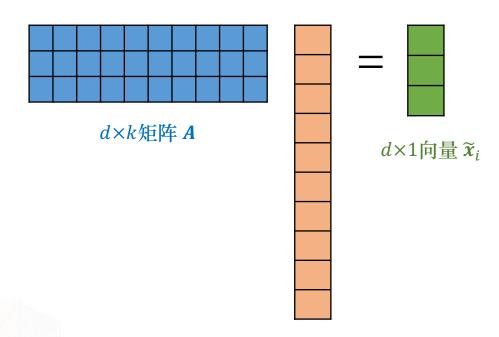
- \triangleright 降维映射函数 (即矩阵A的选择) 与数据 $x_1, ..., x_n$ 的具体取值无关
- \triangleright 数据 $x_1, ..., x_n$ 可以以数据流的形式输入,仅需很小的存储空间即可依次得到 $\tilde{x}_1, ..., \tilde{x}_n$
- > 可以在多个服务器并行



另一种降维方法(属于谱分析的)主成分分析 (PCA) 不具备数据无关的特性

JL转换的优点:数据无关 (data oblivious)

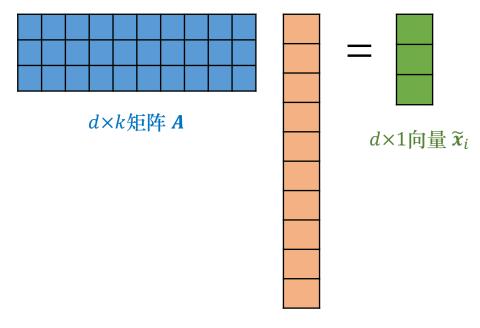
- \triangleright 降维映射函数 (即矩阵A的选择) 与数据 $x_1, ..., x_n$ 的具体取值无关
- \triangleright 数据 $x_1, ..., x_n$ 可以以数据流的形式输入,仅需**很小的存储空间**即可依次得到 $\tilde{x}_1, ..., \tilde{x}_n$
- ▶ 可以在多个服务器并行



JL转换的改进: 当k值非常大时, Ax运算耗时

 \triangleright 将在实数范围内随机取值的 A_{ij} 改为在集合 $\{-1,0,1\}$ 中随机取值

可以避免乘法运算,只进行加减运算



 $k \times 1$ 向量 x_i

JL转换的改进: 当k值非常大时, Ax运算耗时

▶ 将在实数范围内随机取值的Aii 改为在集合{-1,0,1}中随机取值

可以避免乘法运算,只进行加减运算

[нтмь] Database-friendly random projections: Johnson-Lindenstrauss with binary coins

D Achlioptas - Journal of computer and System Sciences, 2003 - Elsevier

A classic result of Johnson and Lindenstrauss asserts that any set of n points in ddimensional Euclidean space can be embedded into k-dimensional Euclidean space—
where k is logarithmic in n and independent of d—so that all pairwise distances are
maintained within an arbitrarily small factor. All known constructions of such embeddings
involve projecting the n points onto a spherically random k-dimensional hyperplane through
the origin. We give two constructions of such embeddings with the property that all elements ...

☆ Save 𝔻 𝔻 Cite Cited by 1465 Related articles All 11 versions

Theorem 1.1. Let P be an arbitrary set of n points in \mathbb{R}^d , represented as an $n \times d$ matrix A. Given $\varepsilon, \beta > 0$ let

$$k_0 = \frac{4 + 2\beta}{\varepsilon^2 / 2 - \varepsilon^3 / 3} \log n.$$

For integer $k \ge k_0$, let R be a $d \times k$ random matrix with $R(i,j) = r_{ij}$, where $\{r_{ij}\}$ are independent random variables from either one of the following two probability distributions:

$$r_{ij} = \begin{cases} +1 & \text{with probability } 1/2, \\ -1 & \text{with probability } 1/2, \end{cases}$$
 (1)

$$r_{ij} = \sqrt{3} \times \begin{cases} +1 & \text{with probability } 1/6, \\ 0 & \text{with probability } 2/3, \\ -1 & \text{with probability } 1/6. \end{cases}$$
 (2)

Let

$$E = \frac{1}{\sqrt{k}}AR$$

and let $f: \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^k$ map the ith row of A to the ith row of E. With probability at least $1 - n^{-\beta}$, for all $u, v \in P$

$$(1-\varepsilon)||u-v||^2 \le ||f(u)-f(v)||^2 \le (1+\varepsilon)||u-v||^2.$$

本讲小结

- 相似搜索问题及相似度衡量
- k维树方法
- 数据降维及JL转换

主要参考资料

Tim Roughgarden and Gregory Valiant <CS 168 - The Modern Algorithmic Toolbox> Lecture Notes

Cameron Musco < COMPSCI 514 - Algorithms for Data Science > Slides

Ioannis Emiris < Computational Geometry Search in High dimension and kd-trees > Slides

Sham Kakade < CSE547/STAT548 - Machine Learning for Big Data> Slides

Kamesh Munagala < CPS290 - Algorithmic Foundations of Data Science - Similarity Search>

Lecture Notes



谢谢!



