情報基礎数理学特選
有限距離空間の離散幾何学とアルゴリズム
(6) 近似最近点探索

岡本 吉央

北陸先端科学技術大学院大学

2011 年 1 月 12 日

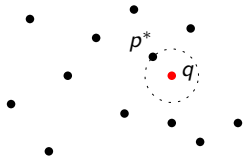
"最終更新：2012/02/06 10:40"

最近点

(X, μ)：距離空間，$P \subseteq X$

定義：最近点

P における $q \in X$ の最近点 (nearest neighbor) とは，
$\min\{\mu(p, q) \mid p \in P\}$ の最適解のこと



最近点探索

(X, μ)：距離空間，$P \subseteq X$，$|P| = n$

問題：最近点探索 (nearest neighbor search)

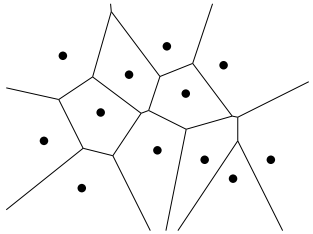
P に前処理を施し，任意の $q \in X$ (質問点 (query point)) に対して，
P における q の最近点を高速に答えられるようにせよ

最近点探索アルゴリズムのよさの指標

- 前処理時間：前処理にかかる時間計算量
- データ構造サイズ：前処理によって作られるデータ構造の大きさ
- 問合せ時間：各質問に対して答えを返す時間計算量

ユークリッド空間の場合

一般的なアプローチ：Voronoi 図 (Voronoi diagram) の利用



- $X = \mathbb{R}^2$，ℓ_2 **距離**
  - **前処理時間：** $O(n \log n)$ (Shamos, Hoey '75, Fortune '85, ...)
  - **データ構造サイズ：** $O(n)$
  - **問合せ時間：** $O(\log n)$

ユークリッド空間 (高次元) の場合

- $X = \mathbb{R}^d$，ℓ_2 **距離**

	データ構造サイズ	問合せ時間
Clarkson '88	$O(n^{\lceil d/2 \rceil (1+\delta)})$	$O(2^{O(d \log d)} \log n)$
Meiser '93	$O(n^{d+\delta})$	$O(d^5 \log n)$

($\delta > 0$ **は任意の定数**)

次元 d **に対する依存性が強い (次元の呪い** (curse of dimensionality))
$\rightsquigarrow$ **近似を考える**

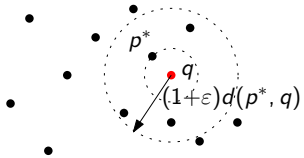
近似最近点

定義：ε**-最近点**

P **における** $q \in X$ **の** ε**-最近点** (ε-nearest neighbor) **とは，**

$$d(p^*, q) \leq d(p, q) \leq (1+\varepsilon) d(p^*, q)$$

を満たす $p \in P$ **のこと．(ただし，**p^* **は** P **における** q **の最近点)**



問題：近似最近点探索 (approximate nearest neighbor search)

P **に前処理を施し，任意の質問点** $q \in X$ **に対して，**
P **における** q **の** ε**-最近点を高速に答えられるようにせよ**

ℓ_2^d で近似最近点探索問題を解く手法 — ナイーブな手法

単純に JL **補題を適用**

アルゴリズム A

前処理

1. $A \in \mathbb{R}^{k \times d}$：JL **補題の行列** ($k = O(\frac{1}{\varepsilon^2} \log n)$)
2. P **から** $\tilde{P} = \{Ap \mid p \in P\} \subseteq \mathbb{R}^k$ **を作成**
3. $\tilde{P}$ **に対して最近点探索の前処理をほどこす**

問合せ：質問点 q **が与えられたとき**

1. $\tilde{P}$ **における** Aq **の最近点を探索**
2. $Ap \in \tilde{P}$ **が返されたら，**p **を** ε**-最近点として出力**

前処理 (3)**，問合せ** (1) **で** Meiser **の手法を用いると** (ε**：定数として**)

- **データ構造サイズ：** $n^{O(\log n)+\delta}$
- **問合せ時間：** $O(\log^6 n)$

それほどよい計算量ではない

ℓ_2^d で近似最近点探索問題を解く手法 — 改善のポイント

「ナイーブな手法」のやっていること

JL 補題を適用した後に，最近点探索問題を「厳密」に解いている

- 厳密の近似は近似

改善のポイント

JL 補題を適用した後に，最近点探索問題を「厳密」に解く必要はない

改善のために行うこと

JL 補題を適用した後に，近似最近点探索問題を解く

- 近似の近似は近似

まず，JL 補題を使わずに近似最近点探索問題を解くことを考える

ℓ_2^d で JL 補題を使わずに近似最近点探索問題を解く手法

(Indyk, Motwani '98)

アルゴリズムの概要

1. 問題を近似近点探索問題に帰着する
2. 近似近点探索問題を解く
   - 手法 1： バケット法
   - 手法 2： LSH 法 (Locality-Sensitive Hashing)

- この講義では「バケット法」のみを説明 (LSH 法については割愛)
- バケット法も LSH 法もハッシュを利用

近点

$r \geq 0$：実数

定義：r-近点

P における $q \in X$ の r-近点 (r-near neighbor) とは
点 $p \in P$ で，

$$\mu(p, q) \leq r$$

を満たすもの

近似近点探索問題

設定

- (X, μ)：d 次元ユークリッド空間
- $P \subseteq X$，$|P| = n$
- $r \geq 0$, $\varepsilon > 0$：実数

問題：ε-近似 r-近点探索 (ε-approximate r-near neighbor search)

P に前処理を施し，任意の質問点 $q \in X$ に対して，
次が高速にできるようにせよ

- P における q の r-近点が存在するとき，「Yes」を出力し，
  q の $(1+\varepsilon)r$-近点を答える
- P における q の $(1+\varepsilon)r$-近点が存在しないとき，「No」を出力する
- どちらでもないとき，「Yes」か「No」を出力する

近似最近点探索問題を解く方法 — 近似近点探索に帰着

アルゴリズム B

前処理

1. $r = 1, 1+\varepsilon/3, (1+\varepsilon/3)^2, (1+\varepsilon/3)^3, \ldots$ に対して
2. $\varepsilon/3$-近似 r-近点探索問題に対するデータ構造 D_r を作成

質問点 $q \in X$ が与えられたとき

1. $r = 1$
2. D_r に対して，q の近似 r-近点を問合せ
3. D_r から p を出力 $\Rightarrow$ p を q の ε-最近点として出力
4. 何も出力しない $\Rightarrow$ $r \leftarrow (1+\varepsilon/3)r$ として (2) に戻る

注：$\min\{\mu(p,q) \mid p, q \in P\} = 1$ と (一般性を失わず) 仮定

アルゴリズム B の正当性

証明すべきこと

ε が十分小さいとき，出力 p は q の ε-最近点である

証明：p^* を q の最近点とする

- $r = (1+\varepsilon/3)^i$ のときに p を ε-最近点として出力したと仮定
  (つまり，$\mu(p,q) \le (1+\varepsilon/3)r = (1+\varepsilon/3)^{i+1}$)
- $\therefore$ $r = (1+\varepsilon/3)^{i-1}$ のときにアルゴリズム A は出力をしなかった
- $\therefore$ $(1+\varepsilon/3)^{i-1}$-近点は存在しない
- $\therefore$ $(1+\varepsilon/3)^{i-1} < \mu(p^*,q)$
- $\therefore$ $\mu(p,q) \le (1+\varepsilon/3)^{i+1} < (1+\varepsilon/3)^2\mu(p^*,q) \le (1+\varepsilon)\mu(p^*,q)$ □

注：ε が十分小さくないときは，$\varepsilon/3$ の「3」を大きな定数に変えればよい

アルゴリズム B の計算量 (1)

解決すべき問題

どこまで r を大きくすれば十分か？

- $D = \max\{\mu(p,p') \mid p, p' \in P\}$ とする
- P において q の D/ε-近点が存在しないと仮定
  - p^*：q の最近点 $(\mu(p^*,q) > D/\varepsilon)$
  - 任意の $p \in P$ に対して

$$\mu(p,q) \le \mu(p,p^*) + \mu(p^*,q) \le D + \mu(p^*,q) < (1+\varepsilon)\mu(p^*,q)$$

  - $\therefore$ 任意の p が q の ε-最近点

$\therefore$ r を D/ε より大きくなったら，それ以上大きくする必要はない

近似最近点探索問題を解く方法 (改訂版)

アルゴリズム B

前処理

1. $r = 1, 1+\varepsilon/3, (1+\varepsilon/3)^2, (1+\varepsilon/3)^3, \ldots, D/\varepsilon$ に対して
2. $\varepsilon/3$-近似 r-近点探索問題に対するデータ構造 D_r を作成

質問点 $q \in X$ が与えられたとき

1. $r = 1$
2. D_r に対して，q の近似 r-近点を問合せ
3. D_r から p を出力 $\Rightarrow$ p を q の ε-最近点として出力
4. 何も出力しない $\Rightarrow$ $r \leftarrow (1+\varepsilon/3)r$ とする
   1. $r \le D/\varepsilon \Rightarrow$ (2) に戻る
   2. $r > D/\varepsilon \Rightarrow$ 任意の $p \in P$ を q の ε-最近点として出力

アルゴリズム B の計算量 (2)

前処理

- **作成するデータ構造の数** $= O(\log(D/\varepsilon))$
- $\therefore$ **前処理時間** $= \varepsilon/3$-**近似** r-**近点探索の前処理時間** $\times O(\log(D/\varepsilon))$
- $\therefore$ **データ構造サイズ** $= \varepsilon/3$-**近似** r-**近点探索のデータ構造サイズ** $\times O(\log(D/\varepsilon))$

問合せ

- **問合せ時間** $= \varepsilon/3$-**近似** r-**近点探索の問合せ時間** $\times O(\log(D/\varepsilon))$

  注：二分探索 (binary search) **を用いれば**
  「$O(\log(D/\varepsilon))$**」を「**$O(\log\log(D/\varepsilon))$**」にできる**

ℓ_2^d で JL 補題を使わずに近似最近点探索問題を解く手法

(Indyk, Motwani '98)

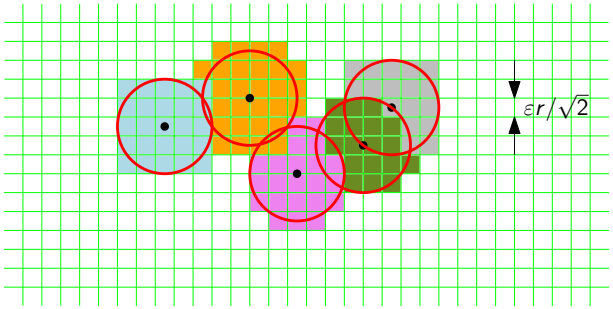
アルゴリズムの概要

1. **問題を近似近点探索問題に帰着する**
2. **近似近点探索問題を解く**
   - **手法 1：バケット法**
   - **手法 2：** LSH **法** (Locality-Sensitive Hashing)

- **この講義では「バケット法」のみを説明** (LSH **法については割愛**)
- **バケット法も** LSH **法もハッシュを利用**

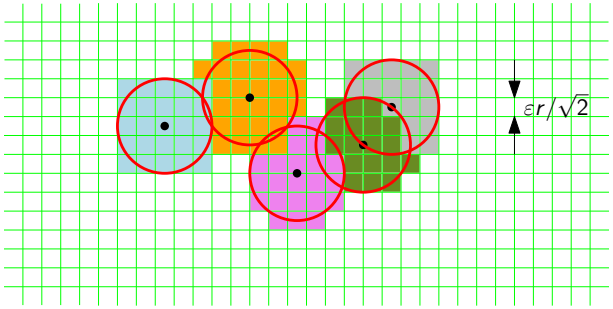
バケット法：前処理

- 1 **辺の長さが** $\varepsilon r/\sqrt{d}$ **の格子を考える**
- **ある** $p \in P$ **からの距離が** r **以下の直方体を** (**ハッシュ表に**) **蓄える**
- **どの** p **からの距離が** r **以下なのかも同時に蓄える**



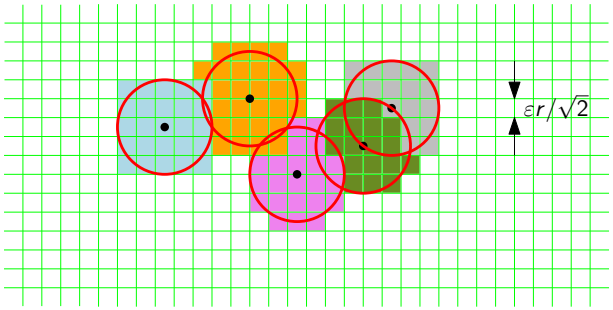
バケット法：問合せ

- 質問点 q を含む直方体が蓄えてあるか確認
- 蓄えてあれば，その直方体に関連付けられた点 $p \in P$ を出力
- 蓄えてなければ，「No」を出力



バケット法の正当性

- 質問点 q が $p \in P$ に関連付けられた直方体 B に含まれると仮定
- B の対角線の長さ $= \sqrt{d \times (\varepsilon r/\sqrt{d})^2} = \varepsilon r$
- p と q の間の距離 $\leq r + \varepsilon r = (1+\varepsilon) r$



バケット法の計算量

- 問合せ時間 $=$ ハッシュ関数の計算時間 $(= O(d))$
- 前処理時間，データ構造サイズ $=$ 蓄える直方体の数に比例

$$
\begin{aligned}
\text{蓄える直方体の数} &\leq n \times \frac{\mathrm{vol}(B_2(0,(1+\varepsilon)r))}{(\varepsilon r/\sqrt{d})^d} \\
&\leq n \times \frac{O(1/\sqrt{d})^d((1+\varepsilon)r)^d}{(\varepsilon r/\sqrt{d})^d} \\
&= n \times O(1/\varepsilon)^d
\end{aligned}
$$

- 前処理時間，データ構造サイズ $= O(O(1/\varepsilon)^d n)$

バケット法 ＋ JL 補題

バケット法と Johnson–Lindenstrauss の補題を組み合わせると

- 各点に対する射影の計算量 $= O(\frac{d}{\varepsilon^2} \log n)$
  (高速 JL 変換により，改善可能)
- 射影後の次元 $= O(\frac{1}{\varepsilon^2} \log n)$

よって

- 前処理時間 $= O(n\frac{d}{\varepsilon^2} \log n) + O(O(1/\varepsilon)^{O(\frac{1}{\varepsilon^2}\log n)} n)$
  $= O(n\frac{d}{\varepsilon^2} \log n + n^{O(1/\varepsilon^3)})$
- データ構造サイズ $= O(O(1/\varepsilon)^{\frac{1}{\varepsilon^2}\log n} n) = O(n^{O(1/\varepsilon^3)})$
- 問合せ時間 $= O(\frac{d}{\varepsilon^2} \log n) + O(\frac{1}{\varepsilon^2} \log n) = O(\frac{d}{\varepsilon^2} \log n)$

まとめ

定理 6.1

近似最近点探索問題は次の計算量で解くことができる

- **前処理時間：** $O((n\frac{d}{\varepsilon^2}\log n + n^{O(1/\varepsilon^3)})\log(D/\varepsilon))$
- **データ構造サイズ：** $O(n^{O(1/\varepsilon^3)}\log(D/\varepsilon))$
- **問合せ時間：** $O(\frac{d}{\varepsilon^2}\log n \log(D/\varepsilon))$

ただし，

- n **は与えられる点の数**
- d **は次元**
- D **は与えられる点間の最大距離**
- ε **は近似精度 (十分小さい)**

d **に対する依存性は圧倒的に小さい**

補足

- JL **補題の与える埋め込みが「**P **に依存しない」ということは，問合せに答えるためには重要**
- Indyk, Motwani '98 **は計算量に対してもっと強い上界を示している** (**詳細は原論文参照**)
- **バケット法は任意の** $p \in [1,2]$ **に対する** ℓ_p^d **で使える**
- LSH **法** (Locality Sensitive Hashing) **は他の空間でも使える**
  - **活発な研究分野で，**wikipedia **情報も充実**

近似最近点探索に関するオンライン情報源

- Similarity Search Wiki
  http://sswiki.tierra-aoi.net/index.php
- **ここで紹介したものが最新研究状況というわけではないので注意**

文献情報

ランダム射影の応用全般 (近似最近点探索に 1 **章費やしている)**

- S. Vempala. The Random Projection Method. AMS, 2004.

幾何近似アルゴリズム全般について (近似最近点探索にも詳しい)

- S. Har-Peled. Geometric Approximation Algorithms. Lecture Notes, 2004–.
  http://valis.cs.uiuc.edu/~sariel/teach/notes/aprx/
  http://valis.cs.uiuc.edu/~sariel/teach/notes/aprx/book.pdf
  (2011 **年に** AMS **から書籍として出版された**)