概算距離の精度向上による近似最近傍探索の高速化

佐藤 智一[†] 岩村 雅一[†] 黄瀬 浩一[†]

† 大阪府立大学大学院工学研究科 〒 599−8531 堺市中区学園町 1−1 E-mail: sato@m.cs.osakafu-u.ac.jp, {masa,kise}@cs.osakafu-u.ac.jp

あらまし 登録されたデータからクエリに最も近いものを探し出す最近傍探索問題では,探索誤りを許容することで 計算時間を大幅に削減することができ,これを近似最近傍探索問題と呼ぶ.近似最近傍探索は一般に,最近傍点とな る確率の高い点を選択し,それらとクエリとの距離を計算するという2段階の処理で実現され,前者が手法の良し悪 しを決定する.本稿では,この処理で用いる「概算距離」を計算量を増やすことなく,より高精度に推定することに より,高精度かつ高速な近似最近傍探索,を実現する手法を提案する.実験の結果,50%の精度で比較すると従来手 法[1]と比べて,64次元のデータで約4倍,256次元のデータで約2.5倍の処理速度を得ることが確認できた. キーワード 近似最近傍探索,多次元ハッシュ,点対バケットの概算距離,ハッシュテーブルの分割

1. まえがき

本稿では最近傍探索問題を扱う.これは,データ空間内でク エリ(探索質問点)に最も距離の近いデータ(最近傍点)を探索 するものであり,この問題を高速に解くための様々な手法が提 案されている[2].これらの処理には一般に予めデータの分布解 析を行い,インデクシングを施す必要がある.探索時には,求 めたインデックスから最近傍点になり得ないものを除外し,計 算コストの削減を図る.しかし,データが高次元である場合, 次元の呪いによって高速化の効果を得ることができず,大規模 なデータベースを扱う場合には実用が難しくなる.

そこで,距離計算対象をクエリの最近傍点である可能性の高 い点(最近傍候補)に大きく絞込み,探索誤りを許容すること で更なる処理の高速化を図る.これを近似最近傍探索といい, 探索を高精度かつ高速に行うには,クエリに近い点のみを最近 傍候補として効率的に選別することが求められる.

近似最近傍探索においてインデクシングを行うためのデー タ構造は大きく分けて2つあり,1つは木構造を用いるも の,もう1つはハッシュ法を用いるものである.木構造を用 いる手法にはANN [3], ball-tree [4], PCA-tree [5], vp-tree [6] などがあり,ハッシュ法を用いる手法には Locality Sensitive Hashing(LSH) [7], [8], Multi-Probe LSH [9], Spectral Hashing(SH) [10], バケット距離に基づく近似最近傍探索 [1] などが ある.

本稿ではハッシュ法を用いた近似最近傍探索に着目し,概算 距離を用いることで高速に解を得ることができる手法を提案 する.ハッシュ法を用いる場合には一般に複数のハッシュ関数 を用いてデータにインデクシングを施し,クエリのインデック スに一致する点,またはそれに近いインデックスを持つ点を最 近傍候補とする.従って,ハッシュ関数によって得られるイン デックス間の距離が実際の空間における距離の大小関係を保持 すると同時に,インデックス間の距離計算が高速に行えること が重要となる.以後,ハッシュによるインデックス間の距離を 概算距離と呼ぶ.

従来手法における概算距離は実際の真の距離の大小関係を十 分に保持できているとは言えず,探索の精度を上げるためには 多くの最近傍候補を確保する必要があり,高速に解を得ること ができない.そこで我々は,概算距離が真の距離の大小関係を よく反映している従来手法[1]に着目し,2点の改良を行った. 1つ目は概算距離の精度向上であり,距離の概算法を領域対領 域から点対領域に変更することで,データ構造を変えること無 く精度を向上させる.2つ目は距離の概算に必要なハッシュサ イズの低減であり,ハッシュテーブルを分割してインデクシン グを施すことにより,ハッシュサイズを探索に適した大きさに する.これら2点の改良により,高精度かつ高速に概算距離を 求めることができ,実験の結果,50%の精度で比較すると従来 手法[1]と比べて,64次元のデータで約4倍,256次元のデー タで約2.5倍の処理速度を得ることが確認できた.

2. 関連手法

本節では,代表的な近似最近傍探索手法の概要について説明 する.木構造を用いる手法として ANN,ハッシュ法を用いる 手法として LSH,SH,従来手法[1]を取り上げる.

2.1 ANN

木構造を用いる手法の中で最も代表的なものの一つがANN [3] である.ANN は2分木をベースとした手法であり,木の構築 ではデータ空間を階層的に2等分していき,葉に入る点が1つ になるまで分割を繰り返す.探索時には近似度 ϵ を与え, $\epsilon = 0$ であれば厳密な最近傍探索となる.クエリが与えられると,木 を辿り,到達した葉に登録されているデータと距離計算を行う. その距離が r であるとすると,図1のように分割された各領域 の最も近いところがクエリから半径 $\frac{r}{1+\epsilon}$ に入る領域を探索領域 とする.図の はクエリ, はデータ点,着色部分が探索領域 を表す. $\epsilon = 0$ であれば,rより近い点が存在する可能性のある



🛛 1 ANN

領域を全て探索するので,必ず真の最近傍点を得ることができる.また, *e*を大きくすると探索半径は小さくなり精度は下がるが,処理速度は大きくなる.

2.2 Locality Sensitive Hashing

Locality Sensitive Hashing(LSH) [7], [8] はハッシュ法を利用 した近似最近傍探索手法の中で最も代表的な手法の一つである. ここでは LSH の中でも本研究に関連する,ベクトル空間での LSH [8] について述べる.

図 2(a) に示すように,LSH はデータ空間をランダムに生成 された基底方向に等間隔に分割することで,空間をバケットと 呼ばれる領域に分割してインデクシングを施す.図 2(a) の軸 a_1, a_2 はランダムに生成された基底であり,セル状の1つ1つ の領域がバケットである.そして,探索時にはクエリと同じバ ケットに属する点を最近傍候補とする.しかし,これだけでは 真の最近傍点を候補から漏らす可能性が高いため,この処理を 数回繰り返すことで候補を増やして精度を上げる工夫をしてい る.図 2(b) は3回の射影によって得られた探索領域の様子を 表す.文献 [8] のLSH では次式のようなハッシュ関数を用いる.

$$H_j(\boldsymbol{x}) = \{h_{j1}(\boldsymbol{x}), h_{j2}(\boldsymbol{x}), \dots, h_{jk}(\boldsymbol{x})\}$$
(1)

$$h_{ji}(\boldsymbol{x}) = \left\lfloor \frac{\boldsymbol{a}_{ji} \cdot \boldsymbol{x} + b_{ji}}{w} \right\rfloor$$
(2)

ただし, $j = 1 \dots L$, x は任意の点, a_{ji} は各次元の要素の値が ガウス分布から独立に選ばれたベクトル, w はハッシュ幅であ り, b_i は区間 [0, w] から一様に選ばれた実数である.そして, 最 近傍候補はクエリ q に対して $\exists (H_j(q) = H_j(p)), j = 1, \dots L$ となる点である.

LSH はデータの分布に依らないランダムな基底に射影を行う ため,最近傍候補に入るかどうかが真の距離の大小関係をあま り反映できないことが多く,効率的な最近傍候補の絞り込みが 難しい.

2.3 Spectral Hashing

Spectral Hashing(SH) [10] はデータ空間の主成分を分散の大 きい方からいくつか選択し,これらを元にデータをバイナリ符 号化してインデックスとする.そして,クエリに与えられた符 号とのハミング距離が閾値以下のものを最近傍候補とする.SH のハッシュ関数は次のようなものを用いる.

$$H(\boldsymbol{x}) = \{h_1(\boldsymbol{x}), h_2(\boldsymbol{x}), \dots, h_l(\boldsymbol{x})\}$$
(3)





🛛 3 Spectral Hashing

$$h_i(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} 0 & (\Phi_i(\boldsymbol{x}) < 0) \\ 1 & (\Phi_i(\boldsymbol{x}) \ge 0) \end{cases}$$
(4)

$$\Phi_i(\boldsymbol{x}) = \sin\left(\frac{\pi}{2} + \frac{k\pi}{\max_i - \min_i} \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{v}_i\right)$$
(5)

ただし, k は空間分割の周波数, vi は主成分ベクトル, maxi, mini は主成分方向の最大値と最小値を表す.図3はインデク シング(符号化)の様子を示したものであり,着色領域はハミ ング距離の上限を1とした場合の探索領域を表したものである. SH は主成分に射影を行うため,射影後も元の距離が保持され やすいと言えるが,概算距離がバイナリ符号のハミング距離で 表されるため,距離尺度の違いから真の距離との誤差が生じ, 図3に示すように,クエリから遠い011の領域が最近傍候補と なるといった問題がある.

2.4 バケット距離に基づく近似最近榜探索

従来手法[1] はデータ空間を任意の正規直交基底に対して共 通の分割幅で等分し,これを多次元ハッシュによって表現する (図4(a)).この処理は,データをスカラー量子化することに 等しく,真の距離をよく反映したデータ構造となっている.探 索時には,クエリと各点が属するバケットのインデックスから 概算距離を求めることで,クエリを中心とする近似的な超球領 域から高速に最近傍候補を抽出することができる.x を任意の 点,Ψ_iを正規直交基底,w を分割幅とすると,v 次元ハッシュ 関数 H は次のようになる.



図 4 従来手法 [1] と提案手法の概算距離の比較

$$H(\boldsymbol{x}) = \{h_1(\boldsymbol{x}), h_2(\boldsymbol{x}), \dots, h_v(\boldsymbol{x})\}$$
(6)

$$h_i(\boldsymbol{x}) = \left\lfloor \frac{\Psi_i \cdot \boldsymbol{x}}{w} \right\rfloor \tag{7}$$

また,概算距離は各バケットのインデックスの距離(バケット 距離)を用いる.ここで,B(p)を任意の点pが属するバケットの重心であるとすると,2点 p_1, p_2 の概算距離(L_p ノルム) は次のように表される.

$$D(B(\boldsymbol{p}_1), B(\boldsymbol{p}_2)) = \left| \sum_{i=1}^{v} \{h_i(\boldsymbol{p}_1) - h_i(\boldsymbol{p}_2)\} \right|^p$$
(8)

図 4(a) の数字はクエリが属するバケットからの各バケット距離を表す. 探索時には探索半径 Rを与え, $D(B(q), B(p)) \leq R$ を満たす点 pを最近傍候補とする.

この手法は高次元データに対して,高速な探索を行うことが できない.これは,ハッシュの次元数とハッシュサイズの関係か ら生じる問題である.データの次元数が大きくなると,概算距 離の精度を維持するためにはハッシュの次元数 v もそれに合わ せて大きくする必要がある.また,ハッシュの次元数 v を大き くするとハッシュサイズが膨大なものとなる.例えば,1つの 基底の分割数をsとするとハッシュサイズのオーダーは $O(s^v)$ となる. 例え s を最小の 2 に抑えても 30 次元のハッシュを構 成するには約10億のハッシュサイズが必要となる.ハッシュ サイズはデータによって適切な大きさがあり,一般にハッシュ サイズがデータ数を大きく上回ると,一つ一つのバケットが疎 になり,最近傍探索の精度を維持するために多くのバケットを 参照する必要が生じることから,高速に最近傍候補を抽出する ことができなくなる.図 5(a), 5(b) に v を変化させた時の精 度と処理時間の関係を示す.v = 24の時, ハッシュサイズは約 16000 万となっており, v を大きくしていくと徐々に処理時間 が短くなっていっているが, v = 24を超えると処理時間が大幅 に増加している.

従って,メモリだけでなく処理速度の観点からもハッシュサ イズには上限が存在し,高次元データに対してもハッシュの次 元数を大きくすることができず,高速な探索を行うことができ ない. 3. 提案手法

近似最近傍探索においては,最近傍候補がクエリを中心とす る超球領域から選ばれることが理想であり,これを実現するに は概算距離が元の空間での距離をうまく保持していることが重 要となる.しかし,従来手法の多くは概算距離が真の距離の大 小関係を十分に保持することができず,探索の精度を上げるた めには多くの最近傍候補を確保する必要があり,高速に解を得 ることができない.

そこで,概算距離が真の距離の大小関係をよく反映している 従来手法[1] に着目し,2点の改良を施した高精度かつ高速な 概算距離により,処理全体の高速化を図る.

3.1 点対バケットの概算距離

1つ目の改良は概算距離の精度向上である.従来手法[1] で はクエリとデータのそれぞれが属するバケット間の距離,すな わちバケット対バケットの距離で概算距離を算出した.本稿で は厳密なクエリの位置から各データが属するバケットへの距 離,すなわち点対バケットの距離で概算距離を求めることによ り,同じデータ構造まま概算距離の精度を向上させる手法を提 案する.

ハッシュ関数として従来手法 [1] と同じ式 (7) を用いる.点 p_1 と,点 p_2 が属するバケット $B(p_2)$ の間の距離(L_p ノルム) は次のように表される.

$$D(p_1, B(p_2)) = \sum_{i=1}^{v} \left| \frac{p_1 \cdot \Psi_i}{w} - \left(h_i(p_2) + \frac{1}{2} \right) \right|^2 \qquad (9)$$

 $h_i(p_2) + \frac{1}{2}$ はバケット $B(p_2)$ の Psi_i 方向の座標を表してお リ,式(9)はクエリとバケット重心の距離に等しい.クエリの 位置が特定されている分,(8)式よりも精度の高い概算距離と なっている.図4(b)に従来手法[1]の図4(a)と同じ位置にクエ リ入った時の概算距離を例示する.図の0.3, 0.4は Psi_1, Psi_2 方向の,クエリとクエリが属するバケットの重心までの距離で ある

3.2 ハッシュテーブル分割による距離の概算

[1] の手法ではハッシュサイズの制約から,高次元データに対してもハッシュの次元数を大きくすることができなかった.そ

こで,高次元のハッシュテーブルを分割し,低次元のハッシュ テーブルから得られる概算距離を統合することによって高次元 ハッシュの概算距離を求める手法を提案する.v次元ハッシュ を *M* 個のハッシュテーブルによって行う場合,v 個のハッシュ 関数を *M* 個の組に分けて,ハッシュテーブルを構成する.つ まり,ハッシュ関数は次のようになる.

$$H_{j}(\boldsymbol{x}) = \{h_{j1}(\boldsymbol{x}), h_{j2}(\boldsymbol{x}), \dots, h_{jt_{j}}(\boldsymbol{x})\}$$
(10)

$$h_{ji}(\boldsymbol{x}) = \left\lfloor \frac{\Psi_{ji} \cdot \boldsymbol{x}}{w} \right\rfloor \tag{11}$$

ただし,j = 1, ..., M, $\sum t_j = v$ である.そして, クエリqか ら任意の点pへの概算距離を

$$D(q, B(p)) = \sum_{j=1}^{M} D_j(q, B_j(p))$$
(12)

で表すことができ,これは v 次元ハッシュによって求められる 概算距離に等しい.ハッシュテーブルを分割する利点は,同じ 次元数のハッシュを表現する場合でも1つのハッシュテーブル を用いる場合に比べて飛躍的にハッシュサイズが小さくなるこ とにある.一つの基底方向にそれぞれ s 分割されている場合を 考えると,1つのハッシュテーブルによって v 次元ハッシュを 表現する場合,ハッシュサイズは O(s^v) であるのに対し,M 個のハッシュテーブルに分割して v 次元ハッシュを表現する場 合,1つのテーブルのハッシュサイズは O(s^{v/M}) となり,M に対して指数関数的に減少することが分かる.従って,ハッシュ テーブルを分割して多次元ハッシュを表現することにより,高 次元データに対しても最近傍候補の抽出速度を落とすことなく, 概算距離の精度を向上させることができる.

4. 予備実験

従来手法 [1] の多次元ハッシュの次元数 v を変化させた時の, 精度と処理時間の関係を示す.ここで用いたデータは 64 次元 または 128 次元,1000 万点の正規分布に基づく人工データ,ク エリは同じ条件で生成した 2000 点である.用いた計算機は, CPU が Opteron(tm)6174(2.2GHz),メモリは 256[GB] であ リ,実験はシングル・コアで行った.結果を図 5(a),5(b) に示 す.人工データにおいては従来手法[1] と提案手法共に v = 24が最も精度と処理時間の関係が良くなったので,以降,人工 データを用いた実験においては v = 24 とする.

5. 実 験

本節では提案手法の性能を評価するため,前節で紹介した従 来手法と提案手法の比較実験を行う.計算機は予備実験と同じ ものを用いた.従来手法[1]及び提案手法で用いる基底は,人工 データでは元の基底を分散の大きいものから v 個選び,実デー タでは主成分分析で得られた主成分を分散の大きい方から v 個 を選んだ.

5.1 実験 1

Spectral Hashing, 従来手法 [1], 提案手法 (ハッシュテーブ ル数:1) において, ハッシュサイズを変化させたときの概算距 離と実際のユークリッド距離の相関係数を示す.データには 32 次元の正規分布に基づく人工データを1万点,クエリには同じ 条件で生成した 100 点を用いた.各クエリから1万点のデータ へのユークリッド距離と概算距離の相関係数を示す.Spectral Hashing の符号長は 4~32bit の間で 4bit ずつ増加させた.こ の時のハッシュサイズは $2^4 ~ 2^{32}$ となる.従来手法 [1],提案手 法 (ハッシュテーブル数:1)は同じデータ構造であり,共に分 割幅 $w = \{\max(\Psi_v \cdot p) - \min(\Psi_v \cdot p)\}/2(v 番目の基底が 2分)$ 割される幅)とし,ハッシュの次元数は $v \in 4 ~ 28$ の間で 4 ず つ増やしたものと 30(ハッシュサイズが 2^{32} を超えない最大の 基底数)を用いた.結果を図 6(a)に示す.横軸がハッシュサイ ズ,縦軸が相関係数である.

この結果から, ハッシュテーブルの数が1つであっても, SH や従来手法[1]に比べて, 提案手法の概算距離が実際のユーク リッド距離をよく表してることが分かる.従って, 提案手法で 導入した点対バケットの概算距離は最近傍候補の抽出に有効で あることが分かった.

参考に,概算距離と実際のユークリッド距離の関係を図示す る.データは上と同じものを用い,クエリとしてデータ全体の平 均ベクトルを与えた.Spectral Hashing の符号長は 32bit(ハッシュサイズは $2^{32} = 約42 @)$,従来手法 [1] と提案手法は基底 数 v = 30とした.この時,提案手法と従来手法 [1] のハッシュ サイズは約24 億であった.結果を図6(b) ~ @ 6(d)に示す.横 軸が概算距離,縦軸が実際のユークリッド距離である.

5.2 実験 2

ANN,SH,従来手法[1],提案手法で最適なパラメータに おける精度(真の最近傍点が得られた割合)と処理時間(クエ リを与えてから解を得るまでの時間の平均)の関係と,その 時のメモリ使用量を示す.ここでの最適とは同一精度で比較 したときに処理時間が最も短くなる状態を指す.予備実験の 結果,パラメータとしてSHはビット長が $\log_2 n$ である時, 従来手法[1],提案手法では次元数 $v = \log_2 n \times M$,分割幅 $w = \{\max(\Psi_v \cdot p) - \min(\Psi_v \cdot p)\}/2$ である時が最適であること がわかっている.これらのパラメータはハッシュサイズがデー タ数 n と同程度になる値である.

データは 64 次元,128 次元,256 次元の正規分布に基づく 人工データ(各基底で分散は 100~400 で一様に選ばれる)と, TRECVID2010 の Instance Search タスクで配布された動画の 各フレーム画像から抽出した SIFT 特徴量(128 次元)[11](128 次元)の4種類をそれぞれ 1000 万点用意した.クエリはデータ ベースと同じ条件でつくられた 2000 点を用い,その平均を結 果とする.精度と処理時間の関係を図 7(a)~図 7(c) に,この 時のメモリ使用量を表1 に示す.なお,図は横軸を精度,縦軸 を処理時間としており,Single Table は提案手法においてハッ シュテーブルを分割しなかった場合,Multi Table はハッシュ テーブルを分割した場合の結果である.

実験の結果,全てのデータにおいて同一精度で比較したとき に提案手法が最も高速であった.人工データにおいて,Single Table と Mmulti Table を比べると低次元のデータに対しては Single Table の方がわずかに良い結果が得られているが,次元





図 6 概算距離と実際の距離の関係

数が大きくなると, Multi Table の有効性が現れる.これは, ハッシュテーブル分割により探索の考慮に入る基底の数が増え, これによって概算距離の精度の低下を抑えることができたから である.故に,高次元データに対してハッシュテーブル分割が 有効であると言える.

SIFT 特徴量 (128 次元) を見ると, Single Table が優勢である.処理時間を見ると,同制度で比べたときに 64 次元の人工 データよりも高速に解を得られていることが分かる.つまり, SIFT 特徴量は見かけは 128 次元であるが,実質的な次元数は 半分以下であり,それ故に Single Table が優勢になったと考え られる.

6. ま と め

従来手法[1] 2点の改良を加えることにより,高精度化つ高 速な近似最近傍探索の手法を提案した.1つ目の改良は概算距 離の精度向上,2つ目の改良は距離の概算によるすハッシュサ イズの低減であった.以上2点の改良により,高次元データに 対しても効率的に最近傍候補を抽出することが可能となった.. 実験1ではハッシュサイズを変化させた時の,概算距離と実際 の距離の相関について調べ,同じデータ構造で従来手法[1]よ





表 1 メモリ使用量			
	64 次元	128 次元	256 次元
ANN	$3.4 \mathrm{GB}$	$5.8 \mathrm{GB}$	11GB
SH	3.0GB	$5.3 \mathrm{GB}$	10 GB
従来手法 [1]	3.0GB	$5.3 \mathrm{GB}$	10GB
提案手法	3.0GB	$5.3 \mathrm{GB}$	10 GB

りも距離の相関が増加していることが分かった.実験2では従 来手法と提案手法の精度と処理時間のトレード・オフの関係を 調べ,全てのデータ対して同一精度で比較したときに従来手法 よりも高速に解を得ることができた.



図 8 精度と処理時間の関係(実データ)

謝辞 本研究の一部は科学技術戦略推進費「安全・安心な社 会のための犯罪・テロ対策技術等を実用化するプログラム」の 一環で実施され,科研費補助金基盤研究(B)(22300062)ならび に科学技術振興機構 CREST の補助を受けた.ここに記して感 謝する.

献

文

- [1] 佐藤智一,武藤大志,岩村雅一,黄瀬浩一,"バケット距離に基 づく近似最近傍探索",データ工学と情報マネジメントに関する フォーラム論文集 E2-6, E2-6, Feb. 2011.
- [2] 和田俊和, "最近傍探索の理論とアルゴリズム", コンピュータ ビジョン 最先端ガイド3,第5章, pp.119–136, アドコム・メ ディア, Dec. 2010.
- [3] S. Arya, D.M. Mount, N.S. Netanyahu, R. Silverman, and A.Y. Wu, "An optimal algorithm for approximate nearest neighbor searching in fixed dimensions," Journal of the ACM, vol.45, no.6, pp.891–923, nov 1998.
- [4] S.M Omohundro, "Five balltree construction algorithms," Technical Report, pp.89–063, 1989.
- [5] R.F. Sproull, "Refinements to nearest-neighbor searching in k-dimensional trees," Algorithmica, pp.579–589, 1991.
- [6] P.N Yianilos, "Data structures and algorithms for nearest neighbor seach in general metric spaces," Symposium on Discrete algorithms, pp.311–321, 1993.
- [7] P. Indyk and R. Motwani, "Approximate nearest neighbor: Towards removing the curse of dimensionality," Proc. 30th Symposium on Theory of Computing, pp.604–613, 1998.
- [8] M. Datar, N. Immorlica, P. Indyk, and V.S. Mirrokni, "Locality-sensitive hashing scheme based on p-stable distributions," Proc. 20th annual symposium on Computational geometry, pp.253–262, 2004.
- [9] Q. Lv, W. Josephson, Z. Wang, M. Charikar, and K. Li, "Multi-probe LSH: efficient indexing for highdimensional similarity search," Proceedings of the 33rd international conference on Very large data bases, pp.950–961, VLDB '07, VLDB Endowment, 2007. http://portal.acm.org/citation.cfm?id=1325851.1325958
- [10] Y. Weiss, A. Torralba, and R. Fergus, "Spectral Hashing," Advances in Neural Information Processing Systems, pp.1753–1760, 2008.
- D. Lowe, "Distinctive image features from scale-invariant," IJCV, vol.60, no.2, pp.91–110, 2004.