

アルゴリズムとデータ構造⑧

～ 近傍探索 ～

鹿島久嗣

近傍探索：

あるデータに最も類似するデータを探すためのデータ構造

- ボロノイ図
- k -d木
- ランダム射影

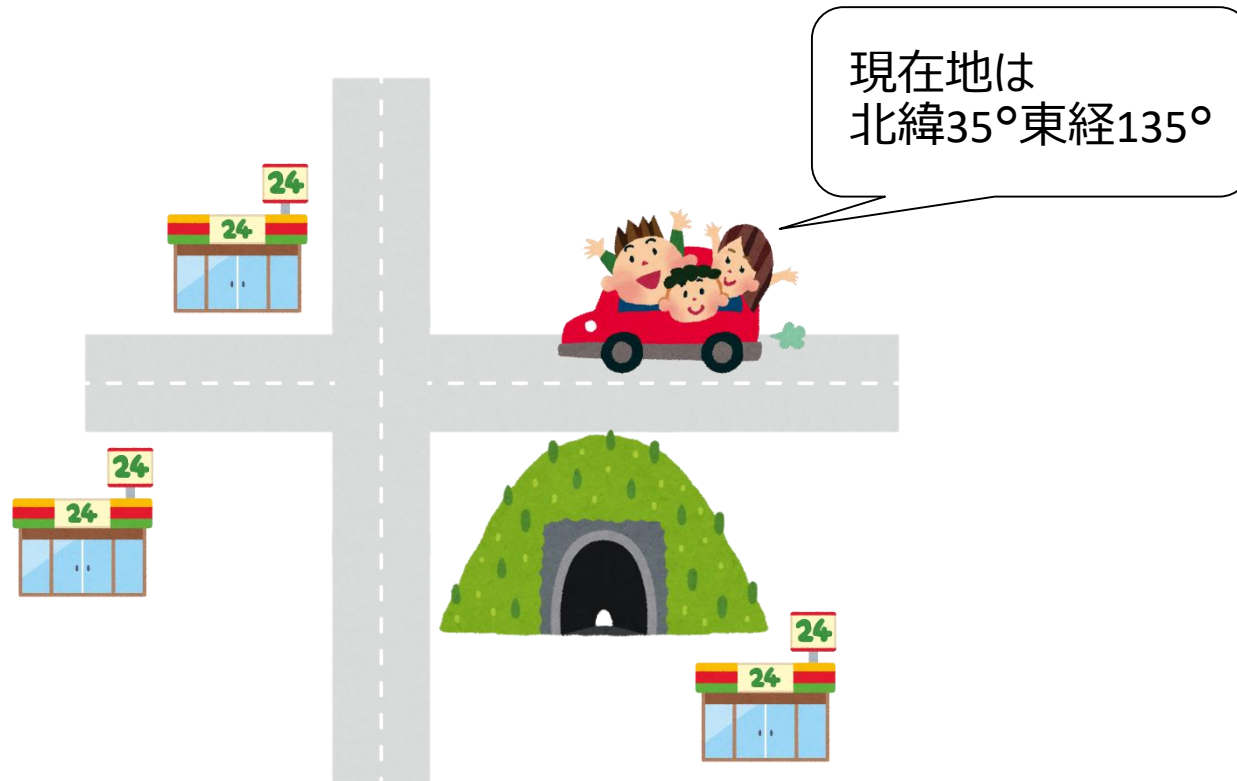
近傍探索問題

近傍探索： 類似データを探す問題

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

最近傍探索の例： 近隣施設の検索

- 「OK、Google。最寄りのコンビニはどこ？」



手書き文字認識：

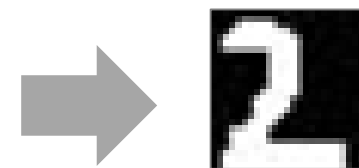
過去の手書き文字データをもとに認識する

- 手書き数字認識：手書きの数字を読み込み 0 ~ 9 の数字を認識する
- 正解の分かっている手書き数字データをもとに、新たな手書き数字を認識する



収集した手書き文字データ

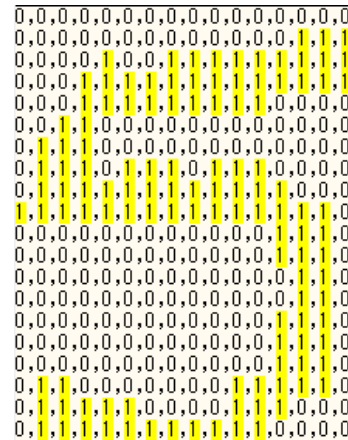
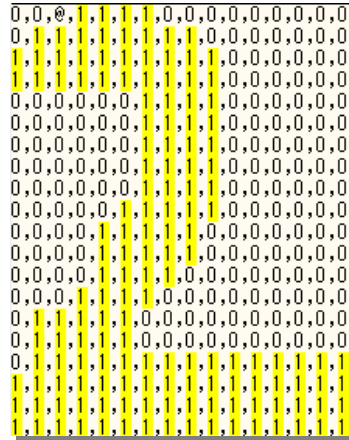
これは何？



手書き数字の表現:

手書き数字を多次元のベクトルとして表現

- 各数字を $16 \times 20 = 320$ 次元の2値ベクトルとして表現

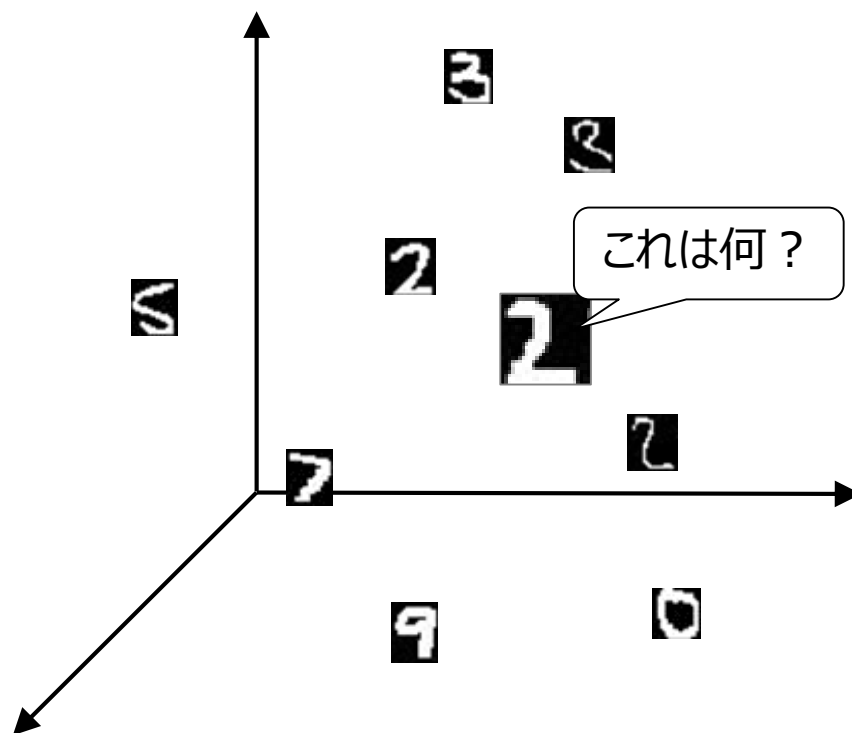


- ピクセルの濃淡がある場合、実数値ベクトル
- あるいは局所的なパターンの出現で特徴ベクトルを構成する

手書き数字の認識：

過去の例の中から対象に最も近いものを見つける

- 対象の手書き文字 **2** に最も近いものを多次元空間内で発見する



ボロノイ図・ドロネー図

ボロノイ図・ドロネー図：

空間全体を n 個の点のいずれに近いかで分割する

- 空間（通常2次元）全体を点集合 $S = \{P_1, P_2, \dots, P_n\}$ （母点とよぶ）のどれに近いかで分割したもの
- P_i のボロノイ領域： $d(P, P_i) < d(P, P_j)$ ($i \neq j$)となる P 全体（ d は空間上の距離）
 - ボロノイ辺：2つのボロノイ領域を隔てる境界辺
 - ボロノイ点：3つ以上のボロノイ領域の境界が共有する点
- ドロネー図：ボロノイ領域が隣り合う母点同志を線分で結んでできる図形

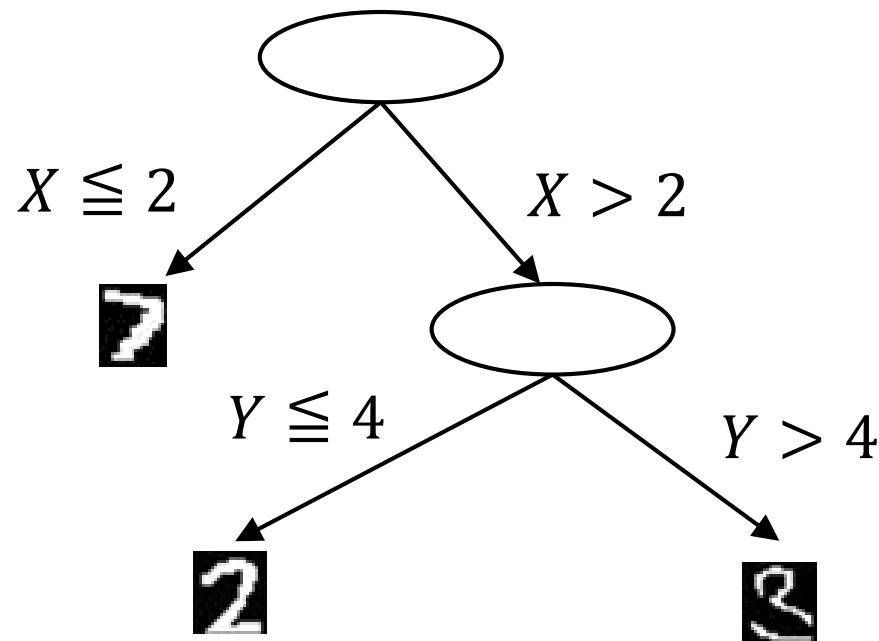
ボロノイ図を使った最近傍点探索： 空間全体を n 個の点のいずれに近いかで分割する

- アルゴリズム：検索点 P に対する S の最近傍点を出力
 1. 任意の母点 P_i を選ぶ
 2. P_i に隣接する母点の中で P に最も近い点 P_j を見つける
 - 隣接：ボロノイ領域が隣り合う（ドロネー辺がある）
 3. $d(P, P_i) < d(P, P_j)$ なら P_i を最近傍点として出力し終了
 4. そうでなければ $P_i \leftarrow P_j$ としてステップ2へ
- 点が概ね一様に分布しているとして $O(\sqrt{n})$

k -d木

2分木による近傍探索： 空間探索のための探索木

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



k -d木 :

空間探索のための探索木

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

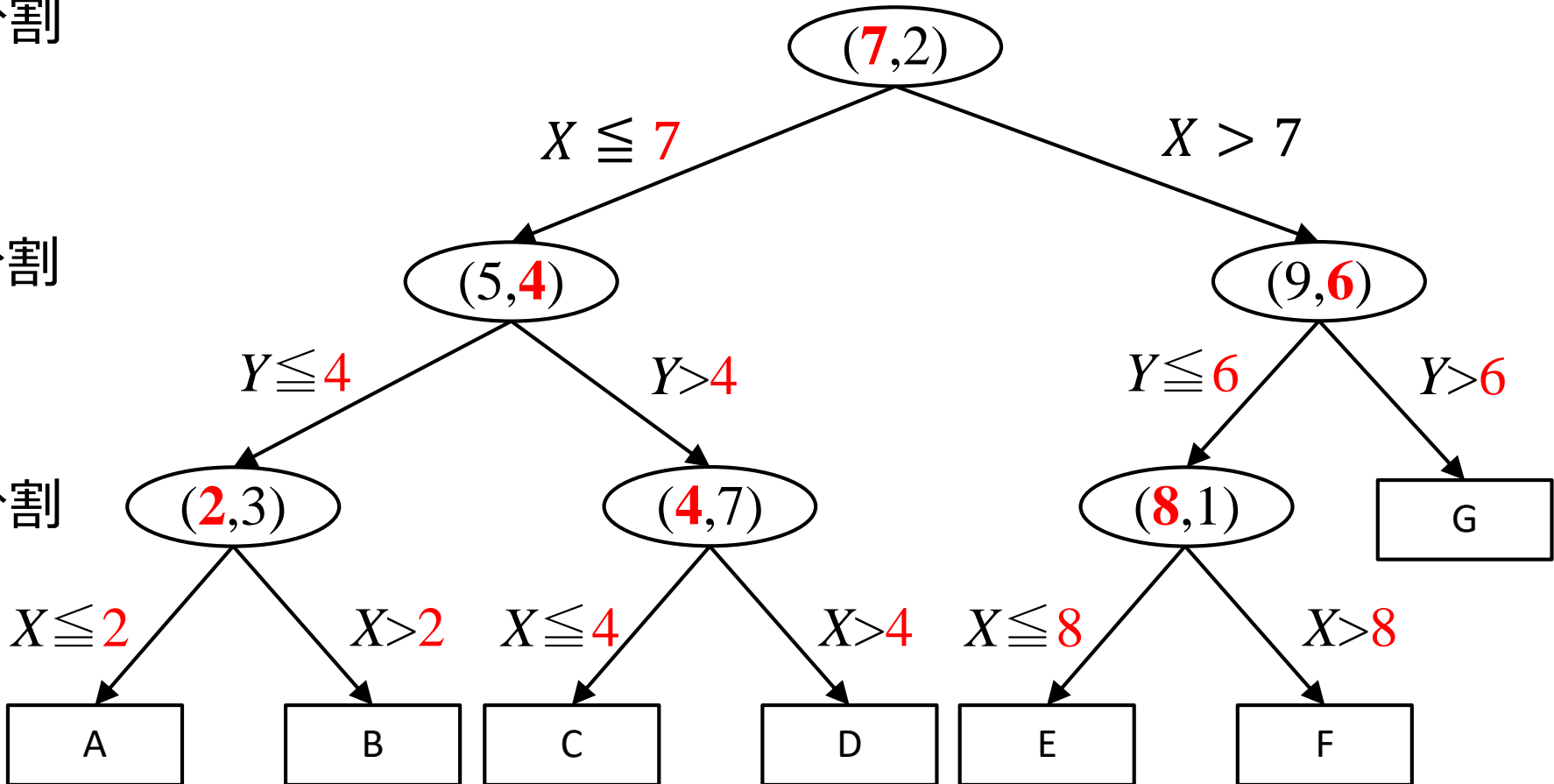
k -d木の例： 空間をデータ点で領域に分割

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

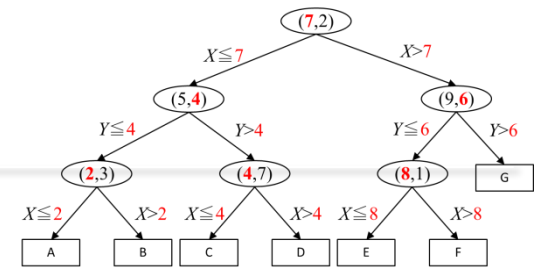
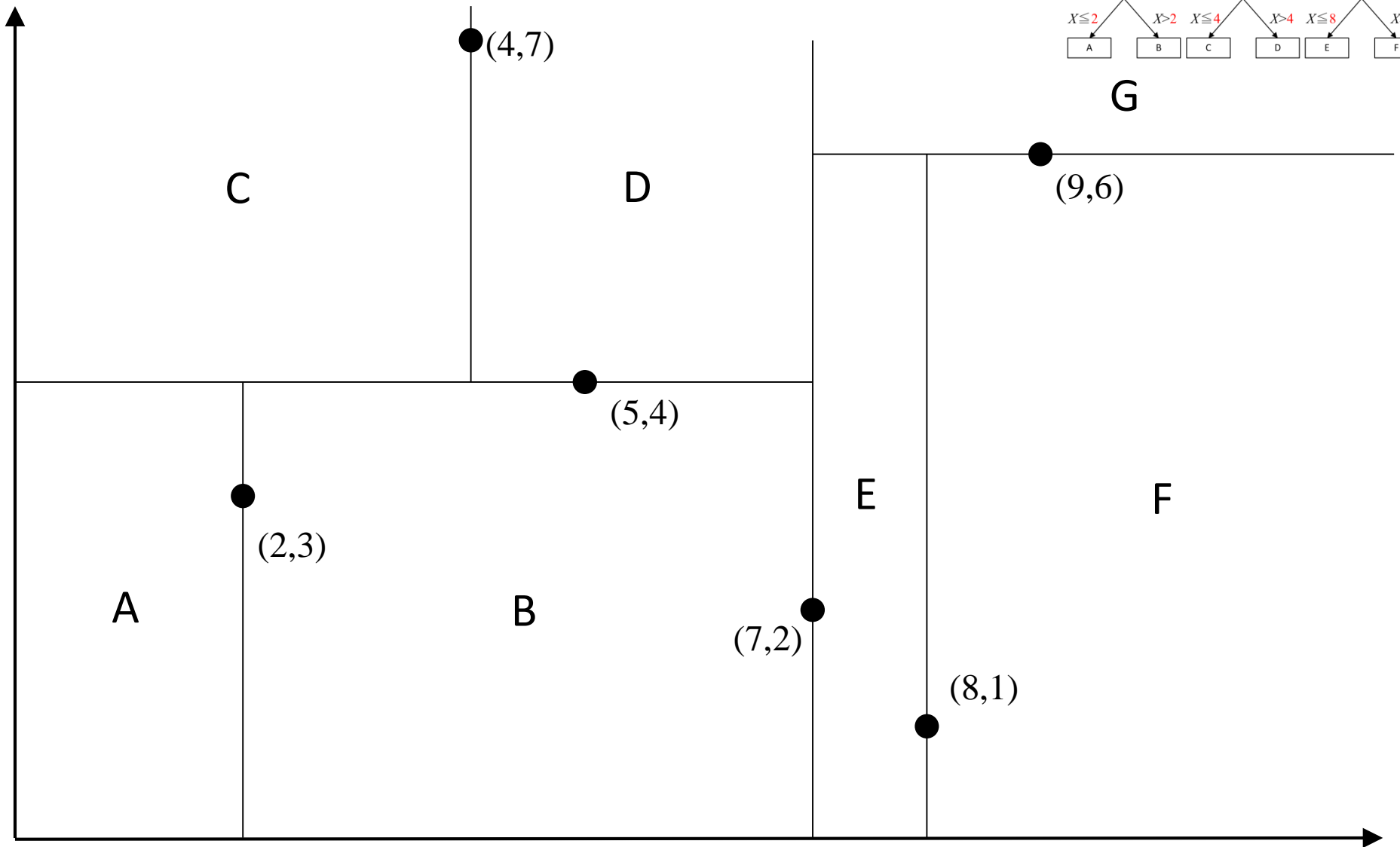
X軸で分割

Y軸で分割

X軸で分割



k-d木の例： 空間をデータ点で領域に分割



G

(9,6)

E

F

A

B

C

D

k -d木の構成：

分割軸を決めて中央値で分割する

■ 構成法（のひとつ）

– 軸を適当な順で選ぶ（たとえば分散が最大の軸）

– 選んだ軸について、領域に含まれるデータの（その軸についての）中央値となるデータで分割

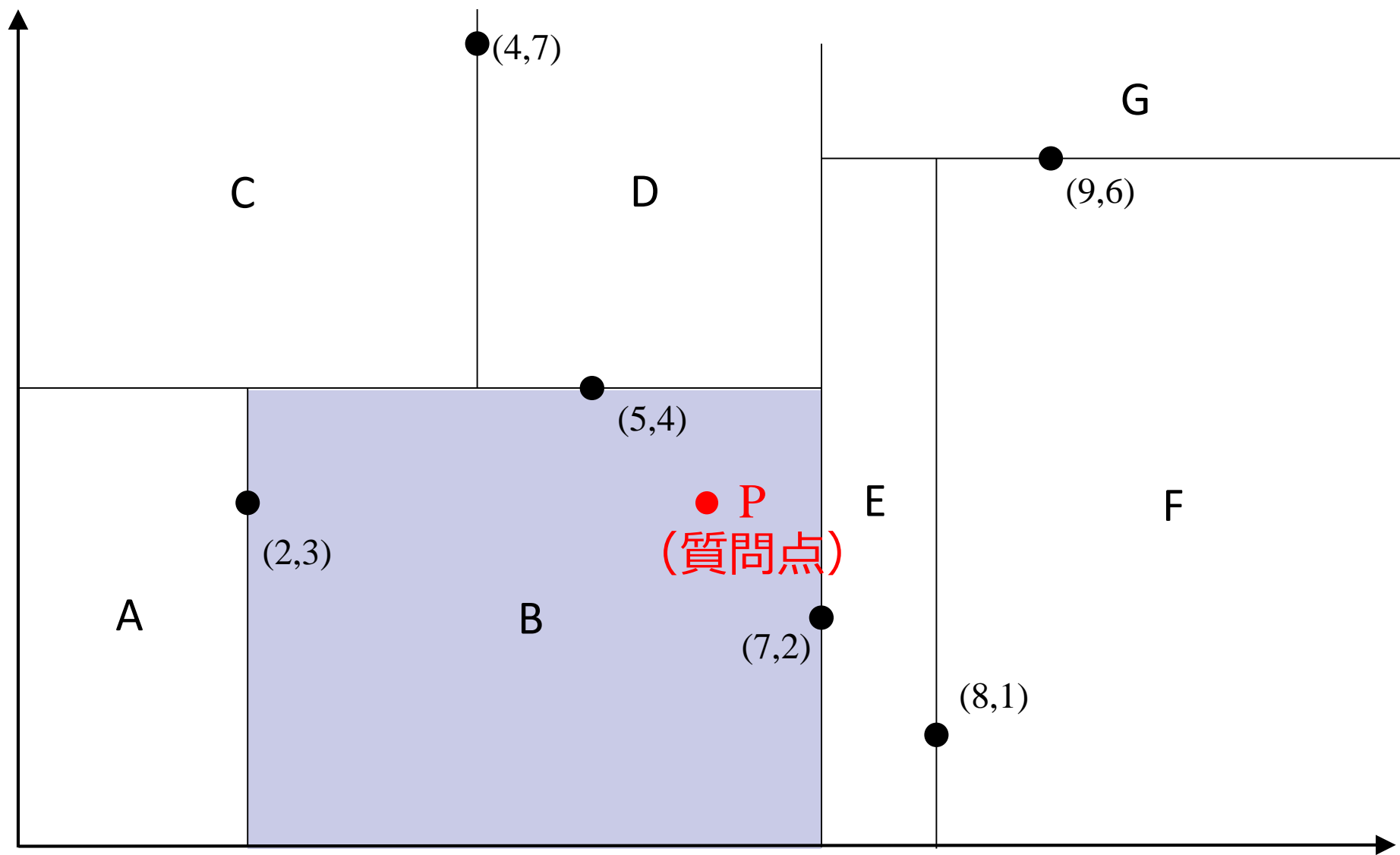
– 再帰的に分割を繰り返して、これ以上分割できなくなったときに終了

■ 探索木は平衡木が望ましい

– 中央値で分割を繰り返すので、高さはおおむね $\log n$

k -d木による質問点の探索：

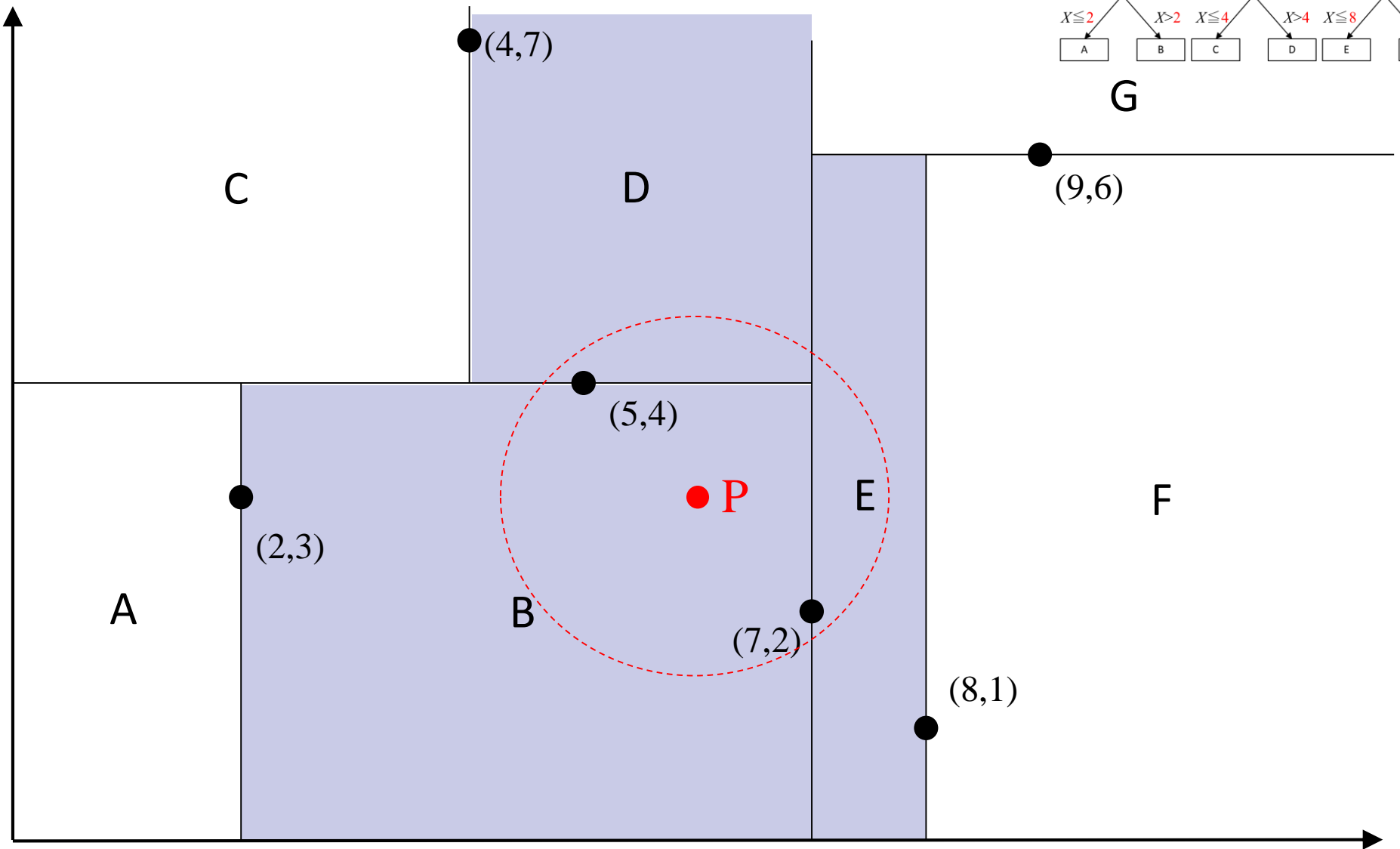
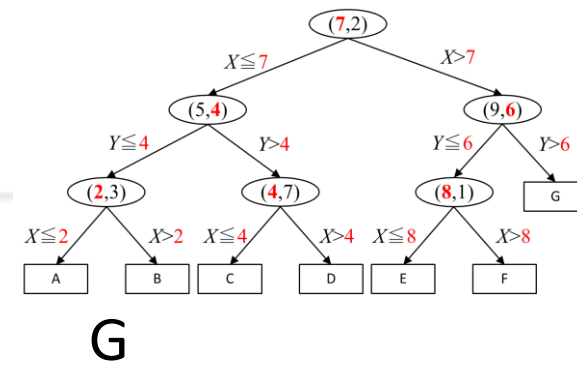
探索木を下ることで質問点を含む領域を $O(\log n)$ で発見



k -d木による近傍点の探索： 枝刈りによって効率的に探索を行う

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

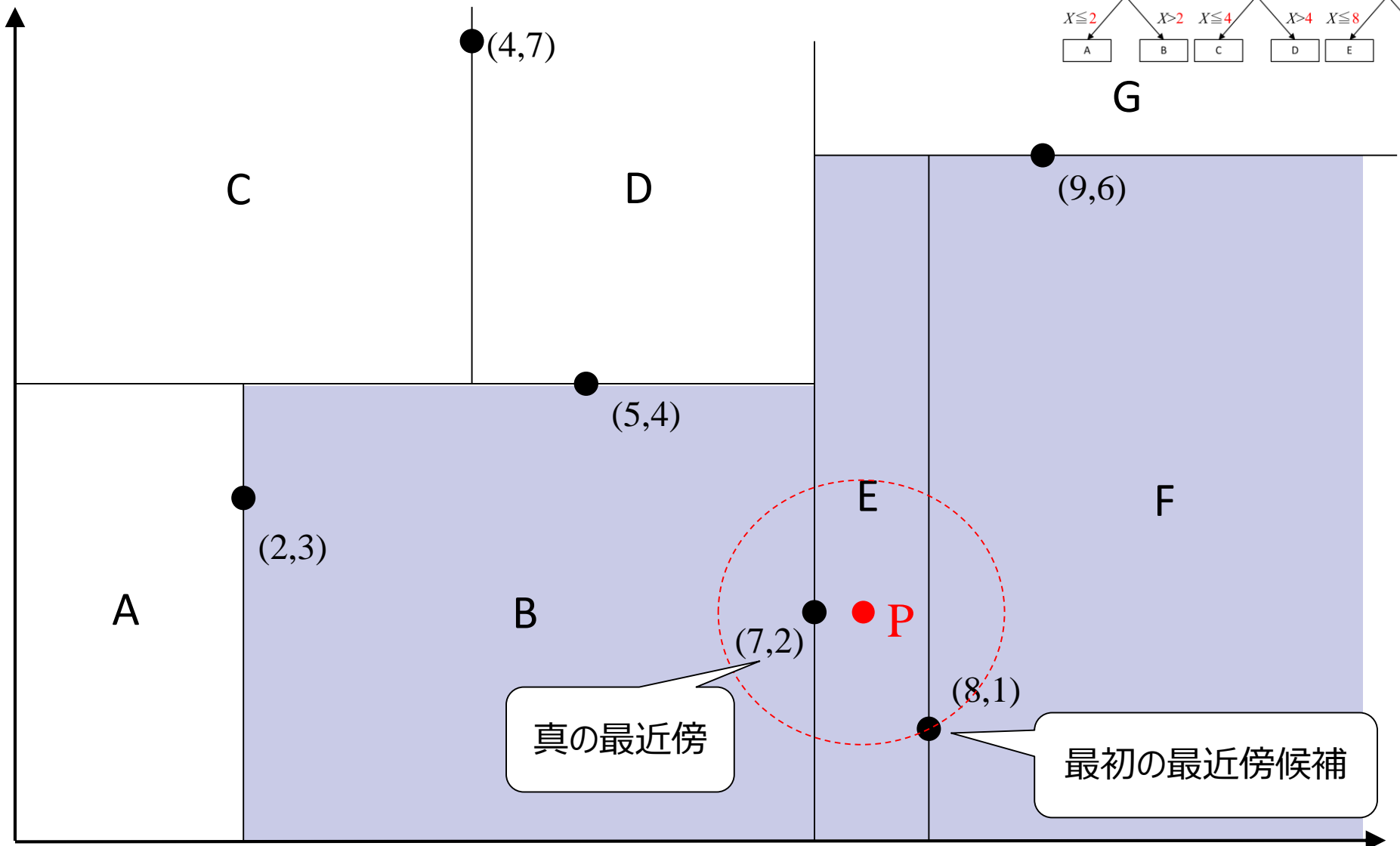
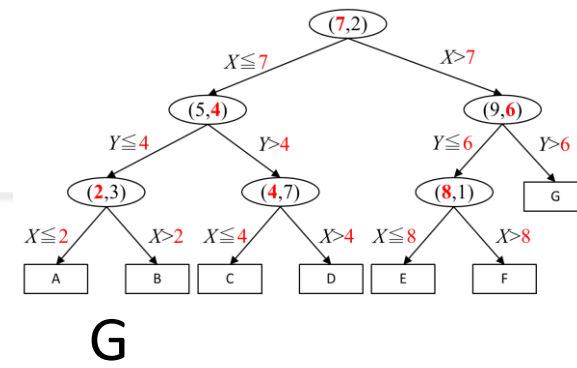
k -d木による近傍点の探索： 枝刈りによって効率的に探索を行う



k -d木による最近傍点の探索： 近傍点探索を少し変更

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

k -d木による最近傍点の探索： 枝刈りによって効率的に探索を行う



高次元の探索：

k -d木は高次元で効率が悪いので次元削減が必要

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

ランダム射影

次元削減： データの低次元表現を見つける

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

ランダム射影： 距離を保存する次元削減

- A をランダムに決めてみる：
 A の各要素を平均0の一様分布や正規分布で生成
- 定理：2つの D 次元ベクトル $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$ の距離は、変換前後で「あまり」かわらない

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

ランダム射影木：

ランダム射影と k -d木の組み合わせ

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