# Ingénierie de la fouille et de la visualisation de données massives (RCP216)

## Réduction de l'ordre de complexité

Michel Crucianu
(prenom.nom@cnam.fr)
http://cedric.cnam.fr/vertigo/Cours/RCP216/

Département Informatique
Conservatoire National des Arts & Métiers, Paris, France

21 février 2023



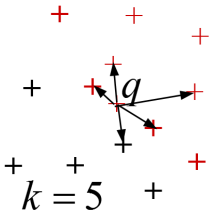
## Plan du cours

# Méthodes de réduction de la complexité

A. Réduction du volume de données (sans changer l'ordre de complexité)

B. Réduction de l'ordre de complexité (sans diminuer le volume de données)

- Principe : les modèles sont souvent locaux, la décision est locale → les calculs impliquant des données éloignées peuvent être évités




- Solutions basées sur l'utilisation d'index multidimensionnels ou métriques
- Méthodes exactes ou approximatives

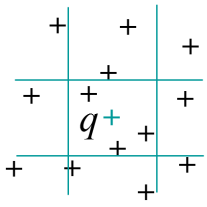


# Réduction de l'ordre de complexité : typologie des besoins

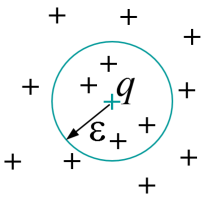
- Recherche par similarité (par ex. pour recommandation par similarité)
- Décision : $k$ plus proches voisins, machine à noyaux
- Estimation de densité (description, décision)
- Classification automatique, quantification
- Jointure par similarité (par ex. identification proximités fortes)
- Apprentissage supervisé, apprentissage semi-supervisé

# Recherche par similarité

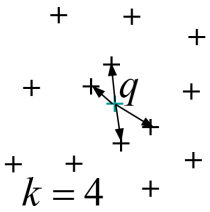
- Recherche par intervalle (*range query*) : $Range_r(\mathbf{q}) = \{\mathbf{x} \in \mathcal{D} | \forall i, |x_i - q_i| \leq r_i\}$
- Recherche dans un rayon (*sphere query*) : $Sphere_\epsilon(\mathbf{q}) = \{\mathbf{x} \in \mathcal{D} | d(\mathbf{x}, \mathbf{q}) \leq \epsilon\}$
- Recherche des $k$ plus proches voisins ($k$ppv, *kNN*) :
  $kNN(\mathbf{q}) = \{\mathbf{x} \in \mathcal{D} \,|\, |kNN(\mathbf{q})| = k \wedge \forall \mathbf{y} \in \mathcal{D} - kNN(\mathbf{q}), d(\mathbf{y}, \mathbf{q}) > d(\mathbf{x}, \mathbf{q})\}$




*range query*




*sphere query*



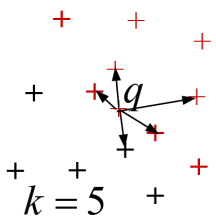

*kNN query*

$N$ données $\Rightarrow$ complexité $O(N)$ ?



# Décision : $k$ plus proches voisins

1. Trouver les $k$ppv de $\mathbf{x}$
2. Vote majoritaire des $k$ppv (avec ou sans rejet d'ambiguïté)

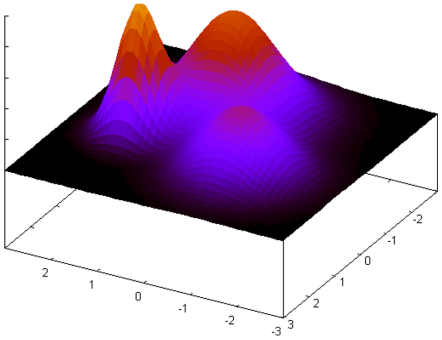



$k$ plus proches voisins

$N$ données $\Rightarrow$ complexité $O(N)$ ?

## Estimation de densité

1. Noyaux de Parzen : noyaux $K$ identiques centrés sur les $N$ observations initiales, la densité en $\mathbf{x}$ est $f(\mathbf{x}) \propto \sum_{i=1}^{N} K(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i)$
2. Modèle paramétrique (par ex. mélange additif de lois normales) : la densité est une somme pondérée de lois, on note par $N$ le nombre de lois dans le mélange



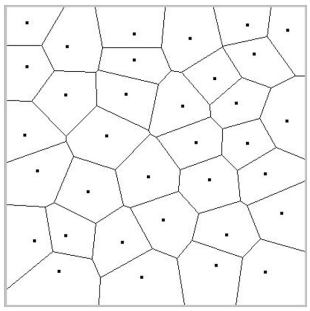

$N$ noyaux $\Rightarrow$ complexité $O(N)$ ?

Noyau local ($K(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i) \approx 0$ pour $d(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i) > \epsilon$) ou loi à décroissance rapide $\Rightarrow$ seuls comptent les voisins *dans un rayon*



## Classification automatique, quantification vectorielle

- *k-means* : groupes représentés par leurs centres de gravité, nombre de centres fixé (mais on considère que pour $N$ données il faudrait utiliser $O(N^{1/3})$ centres)

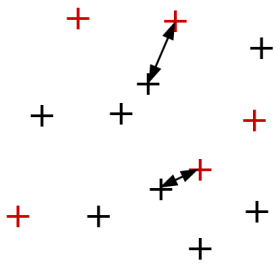


- *k-medoids* : extension aux espaces métriques en général, chaque groupe est représenté par son élément le plus central (*medoid*)
- Classification ascendante hiérarchique : arbre de regroupements, pouvant donner de multiples partitionnements

$N$ données $\Rightarrow$ complexité $O(N)$ (ou $O(N^{4/3})$), resp. $O(N^2)$ et $O(N^2 \log N)$ ?

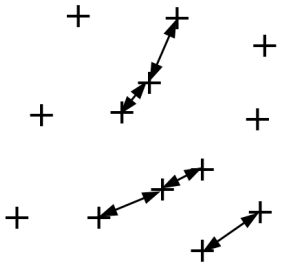
## Jointure par similarité

- Jointure avec seuil de distance $\theta$, ensembles $\mathcal{D}_1$, $\mathcal{D}_2$, avec $N_1$ et respectivement $N_2$ éléments : $K_\theta = \{(\mathbf{x}, \mathbf{y}) | \mathbf{x} \in \mathcal{D}_1, \mathbf{y} \in \mathcal{D}_2, d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \leq \theta\}$
- Auto-jointure : $\mathcal{D}_1 \equiv \mathcal{D}_2$



jointure par similarité

$\Rightarrow$ complexité $O(N_1 \times N_2)$ ?



auto-jointure par similarité

$\Rightarrow$ complexité $O(N^2)$ ?



## Réduction de l'ordre de complexité : objectifs

- Recherche par l'exemple, décision, estimation de densité : requête de même nature que les données
  - Objectif : $O(N) \rightarrow O(logN)$ ou $O(1)$
- Apprentissage semi-supervisé, apprentissage actif, recherche par détecteur : requête = frontière de décision
  - Objectif : $O(N) \rightarrow O(logN)$ ou $O(1)$
- Jointure par similarité, apprentissage supervisé à noyaux, *N-body problems*, certaines méthodes de classification automatique
  - Objectif : $O(N^2) \rightarrow O(N\,logN)$ ou $O(N)$

- Remarque générale : complexité $\geq$ taille résultat !

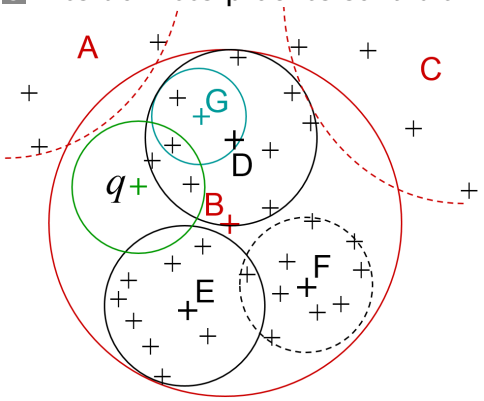
# Plan du cours

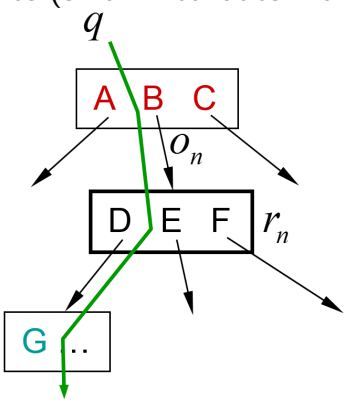




# Principe général

- Arbres de recherche :
  - Regroupement hiérarchique des données
  - Parcours de l'arbre en partant de la racine, idéalement $O(logN)$ nœuds traversés $\Rightarrow$ $O(logN)$ calculs de distance, $O(logN)$ échanges avec le disque
- Hypothèses :
  1. Seules les données proches de la requête sont utiles (sinon approche inutile)
  2. Très peu de données sont proches (sinon réduction espérée faible)
  3. Les données proches sont bien plus proches que les autres (sinon méthodes inefficaces)



## Typologie des structures d'index

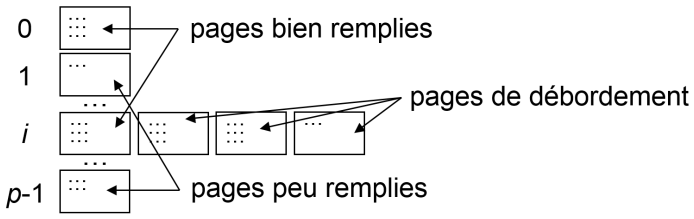
- Distinctions induites par la nature des données :
  - Espace vectoriel ⇒ il y a des coordonnées, on peut définir des centres de gravité, des densités de probabilité, etc.
  - Espace métrique ⇒ on ne peut parler que de distances
- Méthode de réduction de l'espace de recherche :
  - Partitionnement de l'espace de description : k-d-B-tree, LSD-tree, etc.
  - Partitionnement des données : R-tree, SS-tree, SR-tree, M-tree, etc.
  - Filtrage des données : VA-file, LPC-file, etc.
- Rapport avec la recherche approximative :
  - Définies pour la recherche exacte, adaptées à la recherche approximative : la plupart (dont M-tree, VA-file)
  - Conçues pour la recherche approximative : LSH, SASH, etc.
- Attention à la complexité de la construction de l'index !
- Pour une étude plus large du sujet, voir la monographie [3]



## Plan du cours

# Hachage

- Objectif dans ce contexte : trouver directement où est stockée une donnée
- Principe (BD relationnelle) : $p$ pages disque, attribut qui prend des valeurs $v$ dans un domaine $\mathcal{D}$, fonction de hachage $h : \mathcal{D} \to \{0, 1, 2, \ldots, p-1\}$
- Exemple (BD relationnelle) :
  - Table `film(titre, realisateur, annee)`, hachage sur l'attribut `titre`
  - Fonction de hachage (de préférence, $p$ nombre premier) : $h$(`titre`) = (somme_codes_ascii_caractères(`titre`)) modulo $p$



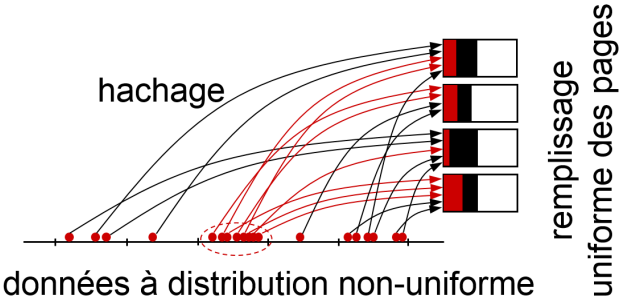

- Propriété recherchée : « disperser » uniformément des données dont la distribution peut être très non-uniforme au départ



# Hachage (2)

- Recherche par identité : retrouver les autres informations concernant un film à partir de son titre
  - Hachage du titre à rechercher
  - Lecture de la page disque identifiée par le *hash*

  $\Rightarrow$ complexité $O(1)$
- Dispersion uniforme de données non-uniformes $\to$ destruction de la structure de similarité des données $\Rightarrow$ méthode inadaptée à la recherche par intervalle ou par similarité

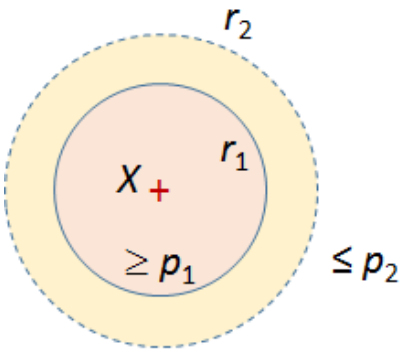


# Hachage sensible à la similarité (*Locality-Sensitive Hashing, LSH*)

- Données dans un domaine $\mathcal{D}$, ensemble de *hash* (empreinte, condensé) $\mathcal{Q}$, métrique $d_{\mathcal{H}} : \mathcal{D} \times \mathcal{D} \to \mathbb{R}^+$
- **Définition :** $\mathcal{H} = \{h : \mathcal{D} \to \mathcal{Q}\}$ est un ensemble de fonctions de hachage $(r_1, r_2, p_1, p_2)$-sensibles (avec $r_2 > r_1 > 0$, $p_1 > p_2 > 0$) si (voir par ex. [1])

$$\forall x, y \in \mathcal{D}, \begin{cases} d_{\mathcal{H}}(x,y) \leq r_1 \;\Rightarrow\; P_{h\in\mathcal{H}}(h(x) = h(y)) \geq p_1 \\ d_{\mathcal{H}}(x,y) > r_2 \;\Rightarrow\; P_{h\in\mathcal{H}}(h(x) = h(y)) \leq p_2 \end{cases} \quad (1)$$

$x \neq y$, $h(x) = h(y)$ : $x$ et $y$ en collision

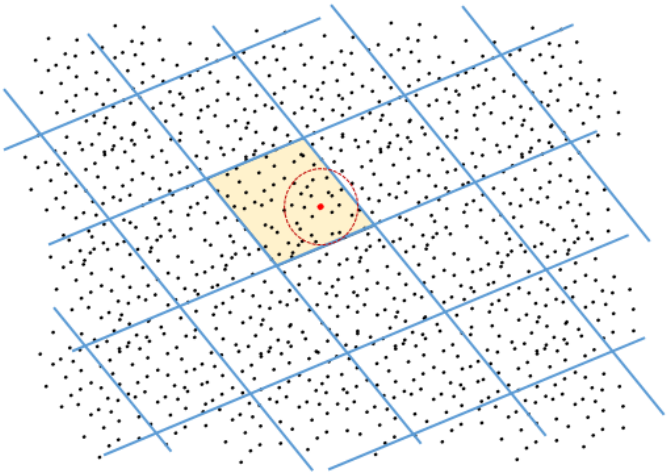





# Recherche par similarité avec LSH

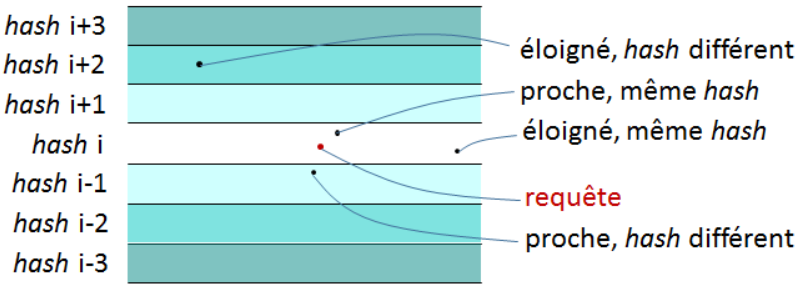
- Avant toute requête :
  1. Calculer la valeur de *hash* pour chacune des données de la base
  2. Stocker les données de même valeur de *hash* dans une même page (*bucket*)
- Pour chaque donnée-requête :
  1. Hachage de la donnée-requête, lecture de la page (*bucket*) associée au *hash*
  2. Retour des données de cette page
  3. Éventuellement, filtrage de ces données par calcul des distances

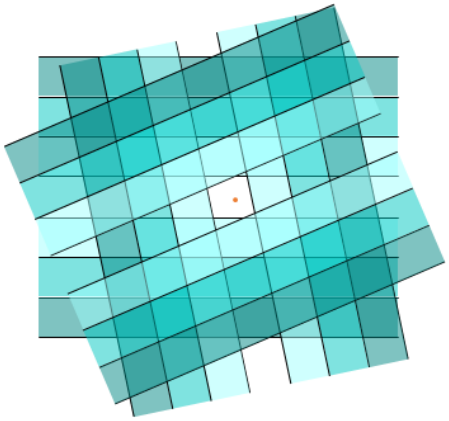
  $\Rightarrow$ Complexité $O(1)$



# *LSH* pour la métrique euclidienne

- $\mathcal{D} = \mathbb{R}^m$, $\mathcal{Q} = \mathbb{Z}$, $d_{\mathcal{H}}$ est la métrique $L_2$
- Fonctions élémentaires $h : \mathbb{R}^m \to \mathbb{Z}$, $h_{\mathbf{a},b,w}(\mathbf{x}) = \left\lfloor \frac{\mathbf{a}^T \cdot \mathbf{x} + b}{w} \right\rfloor$ avec $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^m$ de composantes tirées indépendamment suivant $\mathcal{N}(0,1)$ et $b \in \mathbb{R}$ tiré suivant la loi uniforme dans $[0,1)$, $w \in \mathbb{R}$
- Table de hachage (ou fonction de hachage composée) : concaténation de (ET logique entre) $n$ fonctions élémentaires indépendantes $\to$ *hash* de $n$ entiers
- Exemple dans $\mathbb{R}^2$, avec 3 fonctions élémentaires :

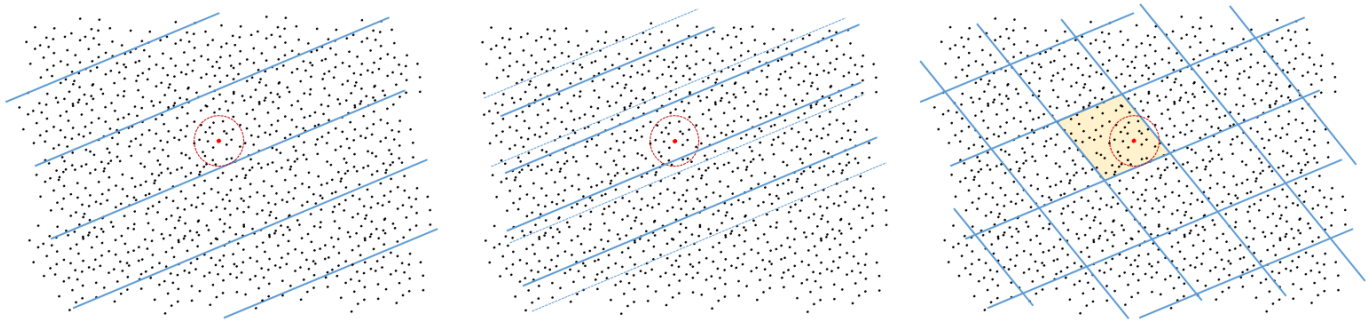




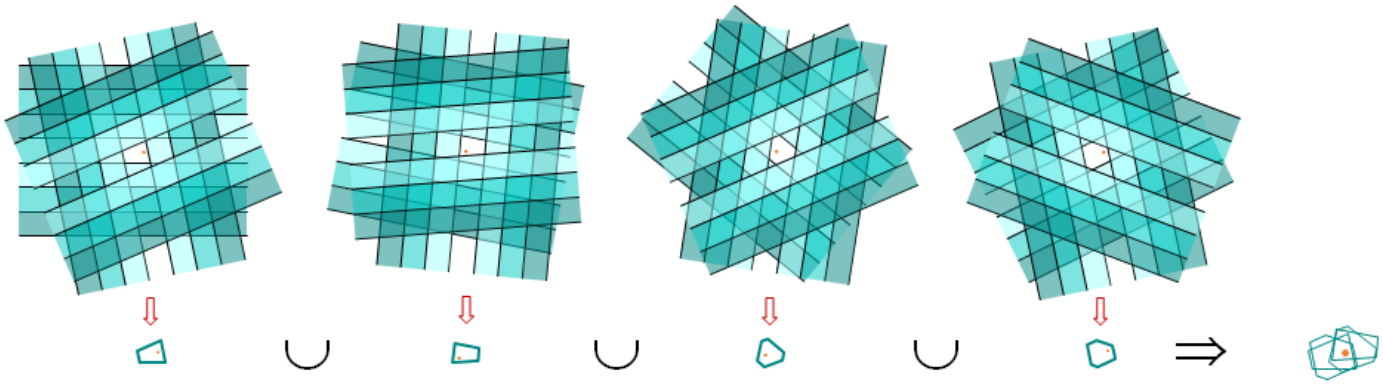
# *LSH* : pourquoi regrouper des fonctions de hachage

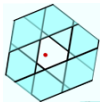
- 1 fonction élémentaire n'est pas assez sélective $\Rightarrow$ précision insuffisante (trop de faux positifs à filtrer ensuite par de coûteux calculs de distance)
- Grille plus fine $\Rightarrow$ meilleure précision mais forte réduction du rappel
- Concaténation de (ET logique entre) $n$ ($> 1$) fonctions de hachage indépendantes ($\to$ 1 table de hachage) $\Rightarrow$ améliorer la précision sans diminuer trop fortement le rappel
- Attention, contrairement au cas présenté dans la figure, en général $n \ll$ dimension de l'espace !



# *LSH* : pourquoi regrouper des tables de hachage

- 1 table de hachage ⇒ si requête proche d'une frontière alors des données similaires sont de l'autre côté ⇒ faux négatifs (réduction du rappel)
- Réunion (OU logique entre) des résultats issus de $t$ ($> 1$) tables de hachage indépendantes ⇒ meilleur rappel



- *Multi-probe LSH* [2] : pour réduire le nombre de tables nécessaires, dans chaque table échantillonner aussi les *buckets* voisins 



# Similarité entre ensembles finis

- Indice (ou similarité) de Jaccard :
  - Soit un ensemble $\mathcal{E}$, $\mathcal{D} = \mathcal{P}(\mathcal{E})$ est l'ensemble des parties de $\mathcal{E}$
  - Similarité entre deux sous-ensembles $\mathcal{A}, \mathcal{B} \in \mathcal{P}(\mathcal{E})$ : $s_J(\mathcal{A}, \mathcal{B}) = \frac{|\mathcal{A} \cap \mathcal{B}|}{|\mathcal{A} \cup \mathcal{B}|}$
  - $d_J(\mathcal{A}, \mathcal{B}) = 1 - s_J(\mathcal{A}, \mathcal{B})$ est une métrique sur $\mathcal{P}(\mathcal{E})$
- Définir les ensembles :
  - Texte : mots
  - Profil d'achat : ensemble d'articles achetés ou ensemble de *catégories* d'articles achetés
- Pour réduire l'ordre de complexité de la recherche par similarité (éviter de comparer une requête à chacune des $N$ données de la base) : définir des fonctions LSH adaptées et s'en servir pour une recherche $O(1)$

# LSH pour ensembles

- Fonctions de hachage élémentaires : $h_\pi : \mathcal{P}(\mathcal{E}) \to \mathcal{E}$, $h_\pi(\mathcal{A}) = \min \pi(\mathcal{A})$
  - On fixe un ordre des éléments de $\mathcal{E}$
  - $\pi$ est une permutation des éléments de $\mathcal{E}$
  - $\min \pi(\mathcal{A})$ est l'élément de $\mathcal{A}$ qui se retrouve premier après cette permutation
- Représentation des ensembles par leurs fonctions caractéristiques :
  - Exemple de permutation : $\pi = \begin{pmatrix} a & b & c & d & \dots \\ c & d & a & b & \dots \end{pmatrix}$

| $\mathcal{E}$ | $\mathcal{A}$ | $\mathcal{B}$ | $\mathcal{C}$ | $\pi(\mathcal{E})$ | $\pi(\mathcal{A})$ | $\pi(\mathcal{B})$ | $\pi(\mathcal{C})$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| a | 1 | 0 | 0 | c | 1 | 1 | 0 |
| b | 0 | 0 | 1 | d | 0 | 0 | 0 |
| c | 1 | 1 | 0 | a | 1 | 0 | 0 |
| d | 0 | 0 | 0 | b | 0 | 0 | 1 |
| ... | | | | ... | | | |



# LSH pour ensembles (2)

- Probabilité de collision : pour toute fonction $h_\pi$ et quels que soient les ensembles $\mathcal{A}, \mathcal{B} \in \mathcal{P}(\mathcal{E})$

$$p(h_\pi(\mathcal{A}) = h_\pi(\mathcal{B})) = s_J(\mathcal{A}, \mathcal{B})$$

- Justification :
  - Soit $x$ le nombre d'éléments communs entre $\mathcal{A}$ et $\mathcal{B}$ (c'est à dire $|\mathcal{A} \cap \mathcal{B}|$)
  - Soit $y$ le nombre d'éléments spécifiques à $\mathcal{A}$ ou $\mathcal{B}$ (c'est à dire $|(\mathcal{A} - \mathcal{B}) \cup (\mathcal{B} - \mathcal{A})|$)
  - Alors $s_J(\mathcal{A}, \mathcal{B}) = \frac{x}{x+y}$
  - Pour toute fonction $h_\pi$, la probabilité de trouver en premier après la permutation $\pi$ un élément commun plutôt qu'un élément spécifique est $\frac{x}{x+y}$
  - Donc $p(h_\pi(\mathcal{A}) = h_\pi(\mathcal{B})) = \frac{x}{x+y}$

# *LSH* pour ensembles (3)

1. Construction d'une table de hachage en regroupant $n$ fonctions de hachage choisies aléatoirement de façon indépendante :
   - Le *hash* donné par la table est la concaténation des *hash* des $n$ fonctions
   - 2 données sont en collision dans la table $\Leftrightarrow$ elles sont en collision par rapport à la première fonction de hachage ET par rapport à la deuxième ET ... ET par rapport à la $n$-ème

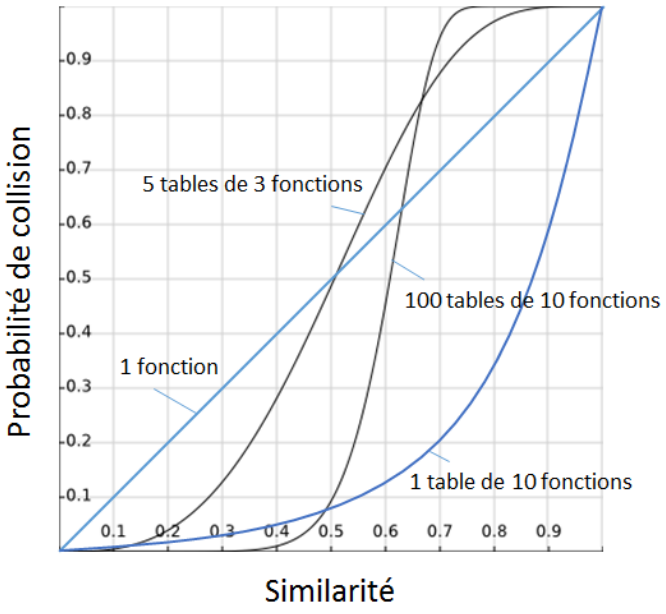
   $\Rightarrow$ probabilité de collision dans la table : $s^n$ ($s$ étant la similarité $s_J(\mathcal{A}, \mathcal{B})$)
2. Utilisation de *plusieurs* ($t$) tables de hachage :
   - 2 données sont en collision si elles sont en collision dans la première table OU dans la deuxième OU ...OU dans la $t$-ème

   $\Rightarrow$ probabilité de collision dans au moins une table : $1 - (1 - s^n)^t$
   Justification : probabilité de non collision dans 1 table $= 1 - s^n \rightarrow$ probabilité de non collision dans les $t$ tables $= (1 - s^n)^t \rightarrow$ probabilité de collision dans au moins 1 table $= 1 - (1 - s^n)^t$



# *LSH* pour ensembles (4)

- Graphique probabilité de collision ($\in (0, 1)$) fonction de $s_J(\mathcal{A}, \mathcal{B})$ ($\in (0, 1)$) :



## Généralisation : « amplification » de fonctions *LSH*

- Fonctions de hachage $(r_1, r_2, p_1, p_2)$-sensibles (avec $r_2 > r_1 > 0$, $p_1 > p_2 > 0$) :

$$\forall x, y \in \mathcal{D}, \begin{cases} d_{\mathcal{H}}(x,y) \leq r_1 \;\Rightarrow\; P_{h\in\mathcal{H}}(h(x) = h(y)) \geq p_1 \\ d_{\mathcal{H}}(x,y) > r_2 \;\Rightarrow\; P_{h\in\mathcal{H}}(h(x) = h(y)) \leq p_2 \end{cases} \quad (2)$$

- Amplification : rapprocher $p_2$ (probabilité de collision pour données dissimilaires) de 0 et $p_1$ (probabilité de collision pour données similaires) de 1
  - ET logique entre $n$ fonctions : $h_{\texttt{AND}}(x) = h_{\texttt{AND}}(y)$ si et seulement si $h_i(x) = h_i(y)$ pour tout $i$, $1 \leq i \leq n \Rightarrow h_{\texttt{AND}}$ est $(r_1, r_2, p_1^n, p_2^n)$-sensible
    → justifie le regroupement de plusieurs fonctions dans une table
  - OU logique entre $t$ fonctions : $h_{\texttt{OR}}(x) = h_{\texttt{OR}}(y)$ si et seulement si $h_i(x) = h_i(y)$ pour au moins une valeur de $i$, $1 \leq i \leq n \Rightarrow h_{\texttt{OR}}$ est $(r_1, r_2, 1-(1-p_1)^t, 1-(1-p_2)^t)$-sensible
  - $h_{\texttt{OR},\texttt{AND}}$ est $(r_1, r_2, 1-(1-p_1^n)^t, 1-(1-p_2^n)^t)$-sensible
    → justifie l'utilisation conjointe de plusieurs tables



## Références I



A. Gionis, P. Indyk, and R. Motwani.
Similarity search in high dimensions via hashing.
In *Proceedings of the 25th International Conference on Very Large Data Bases*, VLDB '99, pages 518–529, San Francisco, CA, USA, 1999. Morgan Kaufmann Publishers Inc.


Q. Lv, W. Josephson, Z. Wang, M. Charikar, and K. Li.
Multi-probe LSH : Efficient indexing for high-dimensional similarity search.
In *Proceedings of the 33rd International Conference on Very Large Data Bases*, VLDB '07, pages 950–961. VLDB Endowment, 2007.


H. Samet.
*Foundations of Multidimensional and Metric Data Structures (The Morgan Kaufmann Series in Computer Graphics and Geometric Modeling)*.
Morgan Kaufmann Publishers Inc., San Francisco, CA, USA, 2005.