OceanBase 的向量能力 & 向量数据库的基础概念

写在前面：

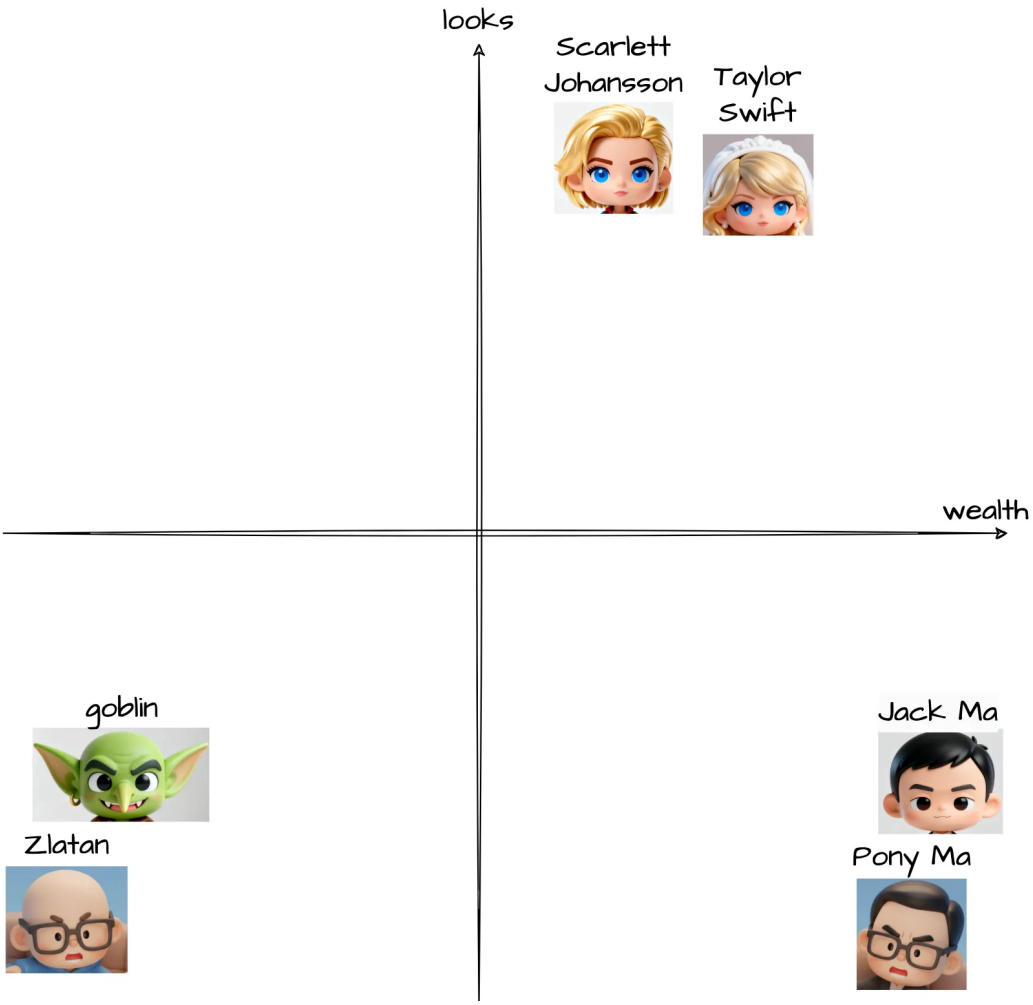
这是第二季实战营的最后一期课程文档，感谢各位老师对 OceanBase 社区活动的积极参与！

因为 OceanBase 社区运营同学兹拉坦在各种其他工作安排之余，还需要长期保证每周更新实验课程（第一季甚至一周双更），所以上线前的各种准备可能都会比较仓促。外加兹拉坦的能力实在太低，难以保证每期课程和实验都能让大家满意。在这里跟所有参加过前两季实战营课程学习的老师说声：“实在抱歉”~

好在 OceanBase 产研团队的某位老大听说这件事后，专门为接下来即将开始的实战营第三季“AP + AI”专题中的每一期内容，都安排了一位负责开发相关特性的资深研发专家 + 一位文档工程师，代替兹拉坦来全权负责在线实验的质量，目的是让大家真的能够学有所获，并把在课程中所学的东西运用到实际的生产中去（其实是不想再让兹拉坦继续误人子弟了）。所以就麻烦大家再忍受这最后一期由兹拉坦乱搞的课程文档吧，哈哈！

兹拉坦接下来可能会被老大派去协助探索一些可以分享数据库 / AI 相关技术内容的新渠道（包括但不限于 B 站 / 抖音 / 小红书），希望广大 OceanBase 社区用户届时还能够继续关注和支持~

也欢迎大家持续关注 OceanBase 社区中后续的第三季实战营活动（预计国庆节后上线）~



1. 背景

AI 时代离不开向量数据库，身边也有不少人都开始分享相关的知识。最近看了洪波老师在老纪的公众号里发表的一篇文章《OceanBase 向量数据库支撑 AI 规模化落地的关键路径及应用案例》，又学到不少东西。

向量数据库这个概念有点儿老生常谈了。简单说就是：在数据库中用多维向量存储某类事物的特征，通过公式计算各个向量在空间坐标系中的位置关系，以此来判断事物之间的相似性。

上面洪波大佬的这篇文章里提到了不少专业词汇，都是 AI / 数据库爱好者在了解**向量数据库**之前需要储备的知识点。本文主要是兹拉坦的一篇和向量数据库相关的基础概念学习笔记，和大家一起分享。即将为大家解释的基础概念如下：

- Embedding
- 距离 / 相似性度量
  - Cosine_distance
  - Inner_product
  - L1_distance
  - L2_distance
  - Jaccard Distance
  - Hamming distance
- 相似性搜索算法
  - 典型算法
    - 倒排 + 数据压缩
    - 导航图索引 + 分布式
  - HNSW
  - IVF
  - DiskANN
- 索引压缩算法
  - SQ（Scalar Quantization）
  - PQ（Product Quantization）

2. 边学边练，效果拔群

正所谓“纸上得来终觉浅，实践才能出真知”，强烈推荐大家点击下面的链接，根据在线体验页面左边的实验文档，体验一把在 OceanBase 数据库中创建和使用“向量”这种数据类型。

- 在线实验地址：《创建和使用“向量”数据类型》。
  - 这个应该算是 OceanBase 中和向量这种数据类型相关的，最最基础的一个小实验（官网上这个实验的名字起的太大，所以在这里改了个更合适的新名字）。
  - 在接下来第三季“AP + AI”专题的实战营活动中，会有 OceanBase 中开发向量能力的资深产研同学通过实验来进一步为大家介绍“向量 + 标量 混合检索”、“AI function”等在实际生产环境中常见的高阶场景。希望大家能继续关注这个实战营活动~
- 课后小测地址：【DBA 实战营】创建和使用“向量”数据类型。
  - 大家完成课后小测，并在小测中上传实验截图，判卷通过后就会自动获取 10 积分，并自动获得抽奖资格，有机会获得实体礼物或更高额的积分奖励。

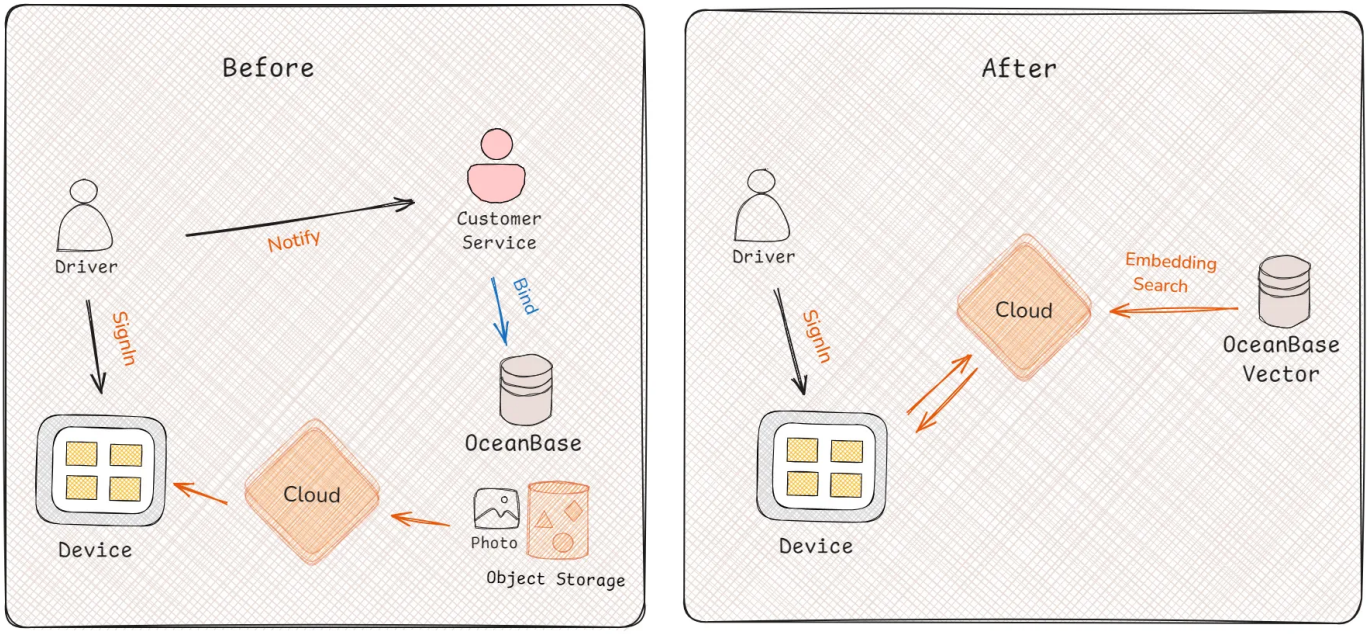
闲言少叙，正文开始。

3. OceanBase 在向量检索方面的优势

OceanBase 在向量检索方面的优势，主要有以下几点：

1. OceanBase 在通过向量数据类型（vector）实现向量存储，通过多种类型的向量索引支持了高效的向量检索。在向量查询时，不仅支持按 TOPN 排序的相似度计算，还能够按照标量进行点查。

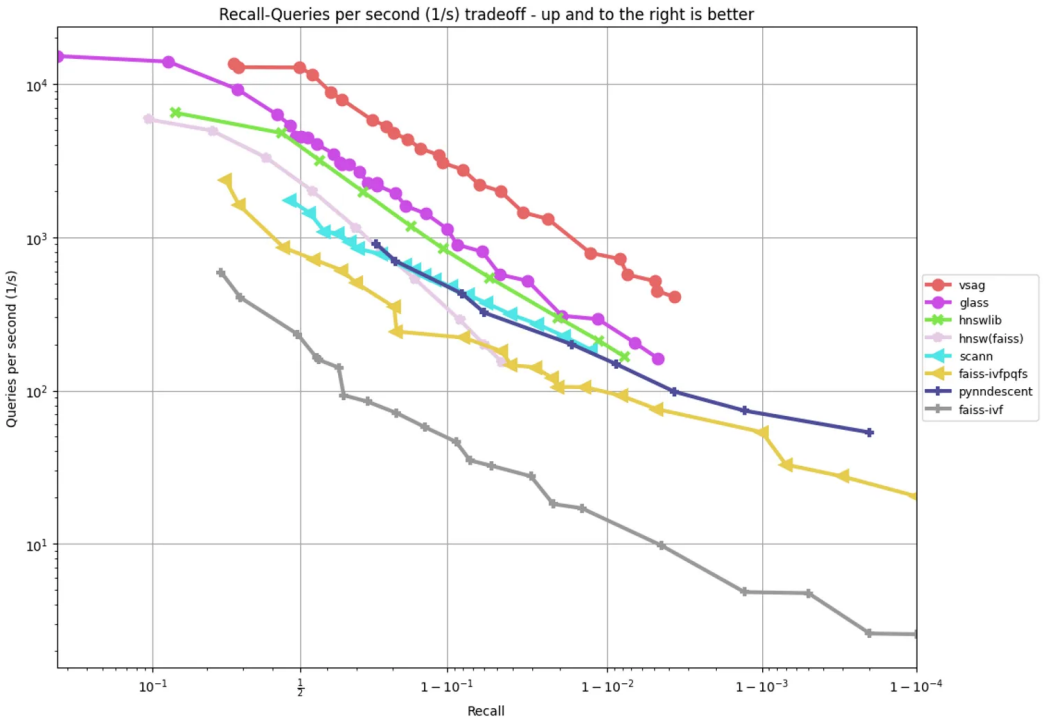
2. 在应用开发方面，为用户提供了 python API 和类似于 MilvusSDK 的开发工具包，而且还可以直接复用 MySQL 生态的客户端，对开发友好。



3. 在运维方面，不需要引入新的工具和组件，可以完全复用现有的运维平台和工具，如 OBD、OCP、obdiag 等。不用学习新的工具，直接复用已有的运维经验即可。

4. 在数据库的其他能力方面，相比于专用的向量数据库 Pinecone / Milvus，以及正在逐步补齐向量检索能力的老牌数据库厂商 Elasticsearch / Redis 等，OceanBase 是一个支持金融级高可用的分布式向量数据库，除了基础的向量检索能力，还支持金融级高可用和容灾、弹性扩缩容、分布式事务，并有着极低的存储成本和优秀的查询分析性能。

5. 在性能上，ANN Benchmarks GIST 960 排名第一。下图的 Vsag 即为 OceanBase 向量化引擎插件，和目前最好的 glass 相比，在 96.7% 召回率的情况下 QPS 能够提升 90% 左右，做到了SOTA (State of the Art）。并且还会持续依靠蚂蚁集团大量的向量化场景和专业的算法团队，不断进行性能优化。



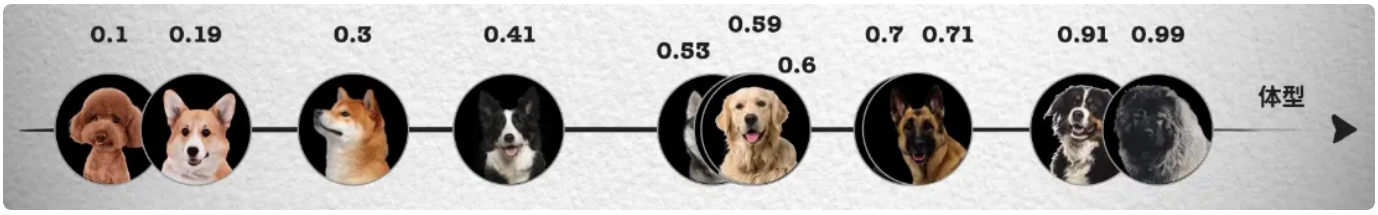
> By the way：现在 OceanBase 作为向量数据库，在更低成本的基础上，还可以获得比某专业向量数据库 Milvus 更好的性能。

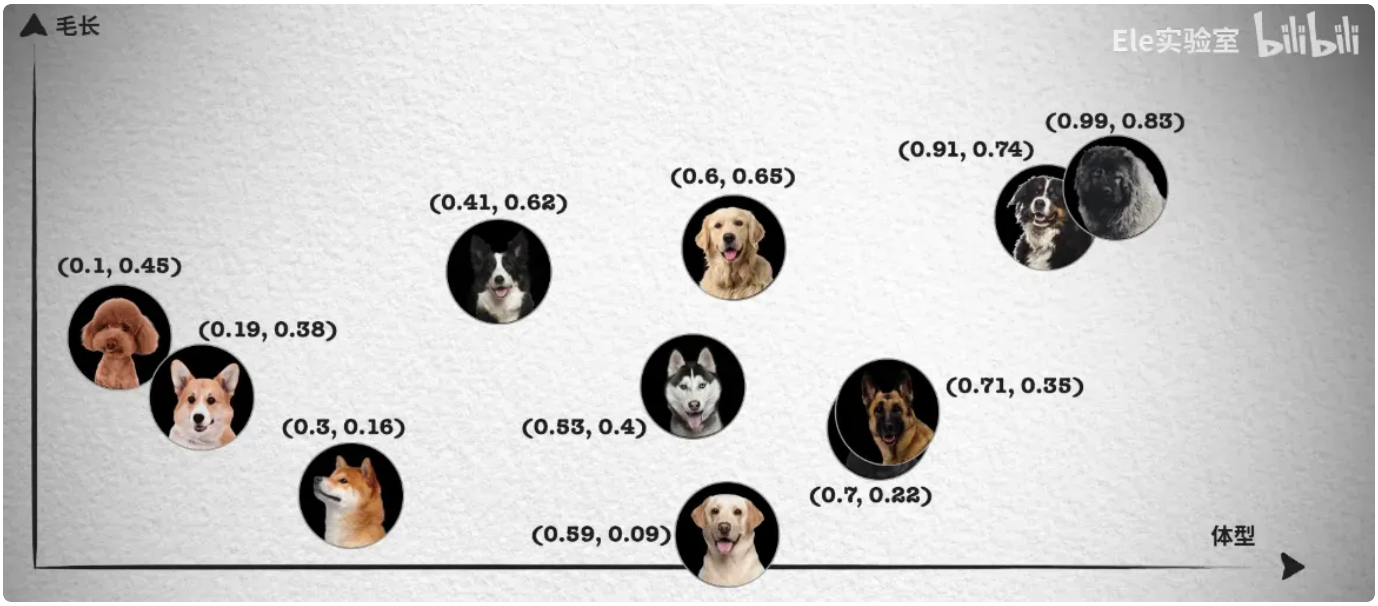
OceanBase 可以简单理解成是一个复用了金融级分布式数据库内核能力的超级向量数据库。同时，还拥有简单易用的 API 接口和丰富的生态工具体系，大大降低了适配和运维的难度。

4. 向量概念简述

向量数据库简单说就是：在数据库中用多维向量存储某类事物的特征，通过公式计算各个向量在空间中的位置关系，判断事物之间的相似性。向量是一个浮点数组：

- 这个数组中的每个元素代表向量的某个维度，每个元素都是一个浮点数。
- 向量数组的大小（元素个数），代表整个向量空间的维度。

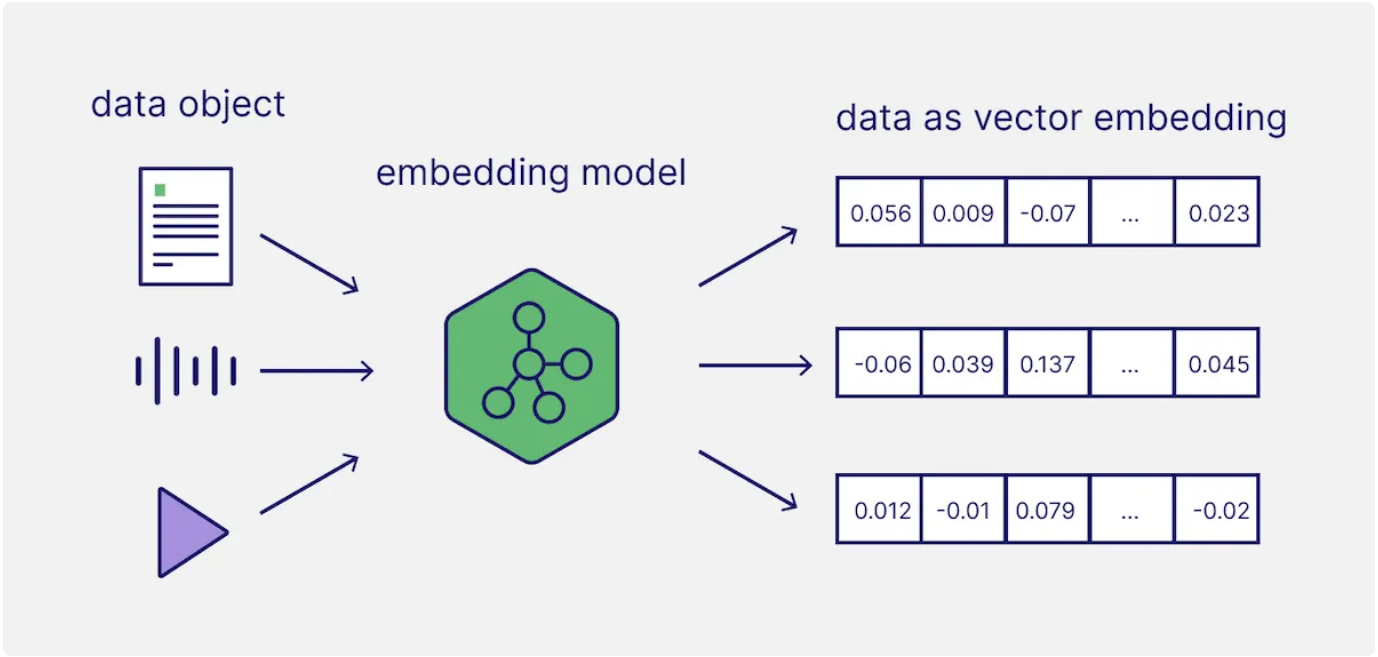




- 一个对象可以抽取多种正交的特征, 比如（体型、毛长等），每个特征代表向量的一个维度。
- 每个维度的精度越细, 区分度越高。
- 维度数越多, 区分度越高, 查询的相对越精确。
- 比如我们结构化数据都在一维空间做计算, 维度越高, 计算 / 查询空间越大, 计算量越大。

5. Embedding

通过深度学习神经网络提取非结构化数据里的内容和语义，把图片、视频等变成特征向量，这个过程叫Embedding。



Embedding 技术将原始数据从高维度（稀疏）空间映射到低维度（稠密）空间，将具有丰富特征的多模态数据，转换为多维数组（向量），向量可以通过向量距离来做计算，判断原始多模态数据的相似性。

6. 距离 / 相似性度量

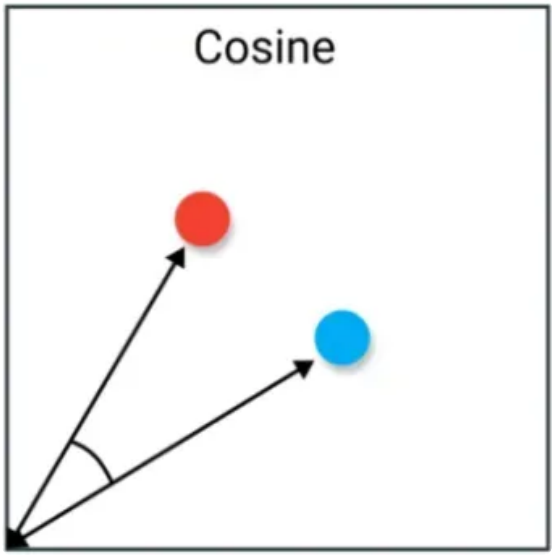
常见的相似度测量方式会涉及到一些中学数学的基础知识，例如：余弦相似度、内积（点积）、欧几里得距离（欧式距离）、曼哈顿距离。让我们一起来复习下，追忆一下逝去的青春。以下这部分内容参考自 OceanBase 官网文档《向量函数》。

6.1. Cosine_distance

余弦相似度（cosine similarity）：计算两个向量间夹角的余弦值。当两个向量方向相同时余弦相似度的值为1；当两个向量夹角为 90 度时余弦相似度的值为 0，当两个向量方向完全相反时余弦相似度的值为 –1。

余弦相似度的计算方式为：

$$[\text{Cosine Similarity} = \frac{\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}}{|\mathbf{A}||\mathbf{B}|} = \frac{\sum_{i=1}^{n} A_i B_i}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n} A_i^2} \sqrt{\sum_{i=1}^{n} B_i^2}}]$$



由于余弦相似度度量越接近于 1 表示越相似，因此有时也使用余弦距离（或余弦不相似度）作为向量间距离的一种衡量方式，余弦距离可以通过 1 减去余弦相似度来计算：

$$[\text{Cosine Distance} = 1 - \text{Cosine Similarity}]$$

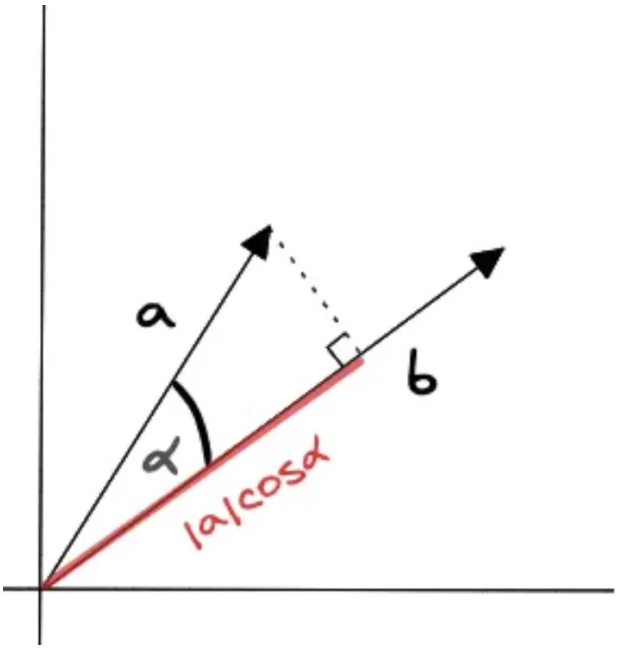
余弦距离的取值范围是 `[0, 2]`，其中 `0` 表示完全相同的方向（无距离），而 `2` 表示完全相反的方向。

6.2. Inner_product（IP / 内积）

内积又称为点积或数量积，是线性代数中的一种重要运算，它定义了两个向量之间的一种乘积。在几何意义上，内积表征了两个向量的方向关系和大小关系。

内积的计算方式为：$[\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = a_1 b_1 + a_2 b_2 + ... + a_n b_n = \sum_{i=1}^{n} a_i b_i]$

除了和余弦相似度一样都会受到位置（或者叫夹角）关系的影响，向量的内积还会受到向量长度的影响。如果把向量进行归一化（即将每个向量除以其自身的长度，得到一个长度为1的单位向量），内积就将只反应方向，不涉及大小，此时内积就会变成上面的余弦相似度。



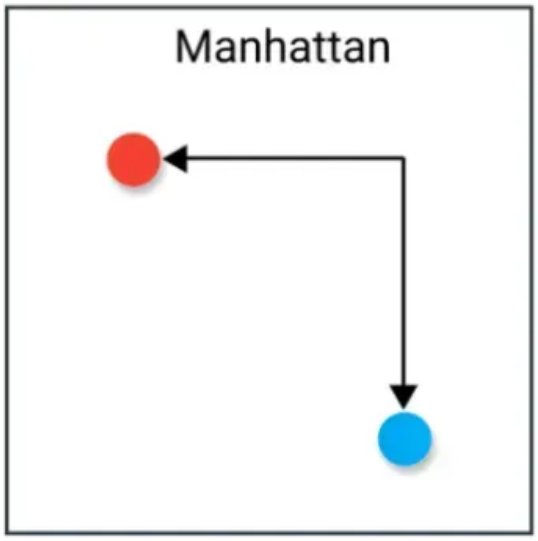
6.3. L1_distance

曼哈顿距离（Manhattan Distance）用于计算两个点在标准的坐标系中的绝对轴距总和。

计算公式为：

$$[D = \sum_{i=1}^{n} |x_{1,i} - x_{2,i}|]$$

一图胜千言，下图中的两个线条之和就表示两个向量在多维坐标系中的曼哈顿距离，也被称为城市街区距离。

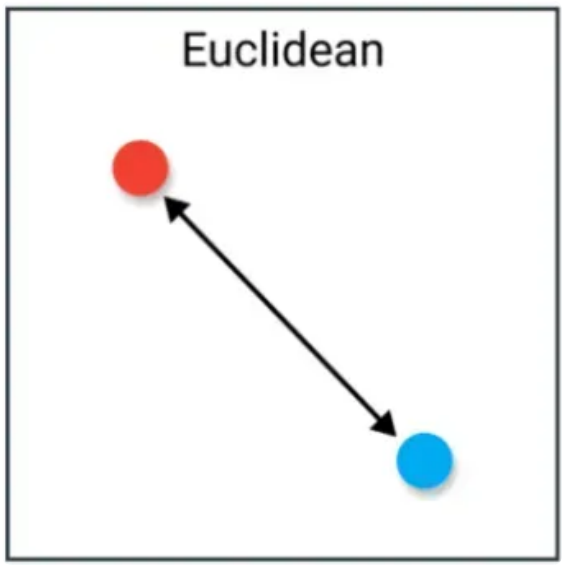


6.4. L2_distance

欧几里得距离（Euclidean Distance）反映的是被比较的向量坐标之间的距离，也就是两个向量之间的直线距离。这个应该好理解，上图中的红色线条就表示两个向量在多维坐标系中的欧几里得距离。

计算公式如下：

$$[D = \sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_{2,i} - x_{1,i})^2}]$$



6.5. 总结

- Cosine（余弦距离）：通过计算两个向量之间的夹角余弦值来衡量它们的相似程度，取值范围为

[–1, 1]，值越接近 1 表示越相似。

- IP (Inner Product，内积)：两个元素的对应元素相乘并求和的结果计算相似度，内积值越大相似度越高. 通常在自然语言处理（NLP）领域中使用。
- L1（曼哈顿距离）：曼哈顿距离是两个向量各个维度差值的绝对值之和。与欧氏距离不同，曼哈顿距离更关注各个维度的差异，而不是方向。
- L2（欧式距离）：欧氏距离是两个向量之间的直线距离，可以表示为它们各个维度差值的平方和的平方根。欧氏距离越小，表示两个向量越相似.通常在自然语言处理（NLP）领域中使用。

6.6. What's more?

接下来为大家介绍两个针对二值向量的常用相似性度量方法。

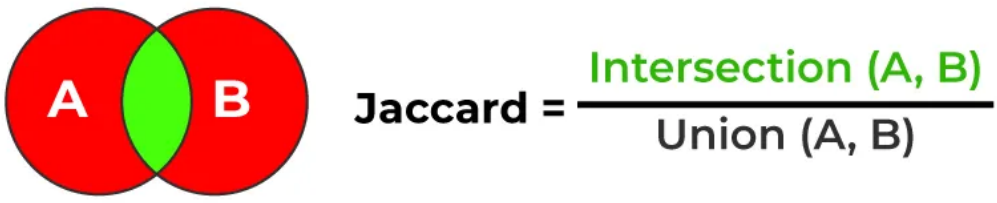
二值向量即向量中的每个元素要么是 0，要么是 1。二值向量的实现方式相比浮点向量也会有所不同，为了节省空间，数据库内部往往会用 byte 而非 float 来实现二值向量。

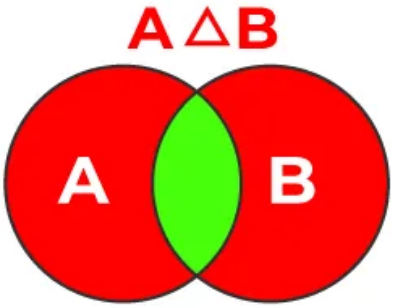
6.6.1. Jaccard Distance

杰卡德距离，计算的是两个集合并集中，不属于交集的元素的比例，用于反映差异度。

公式如下：

$$d_j(A,B) = 1 - J(A,B) = \frac{|A \cup B| - |A \cap B|}{|A \cup B|}$$

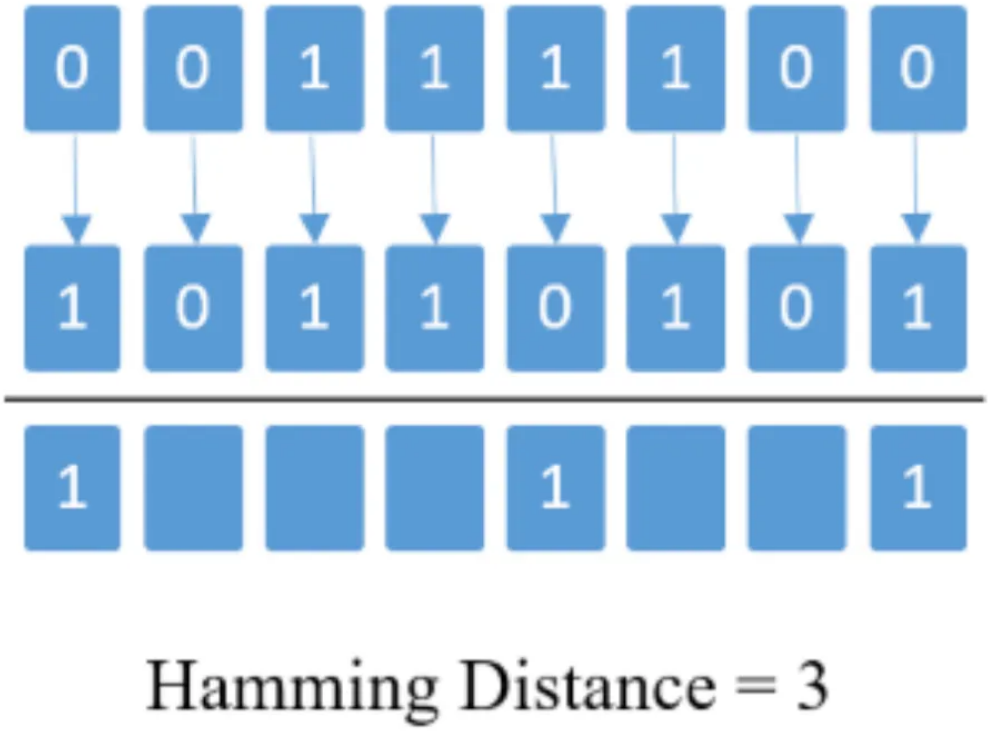




$$\text{Jaccard Distance } J_D(A, B) = 1 - \text{Jaccard Similarity } J(A,B)) = \frac{|A \triangle B|}{|A \cup B|}$$

6.6.2. Hamming distance

汉明距离（Hamming distance）是数据传输差错控制编码中的概念，表示了两个字对应位不同的数量，定义为将两个字进行异或运算后 1 的位数。



Hamming Distance = 3

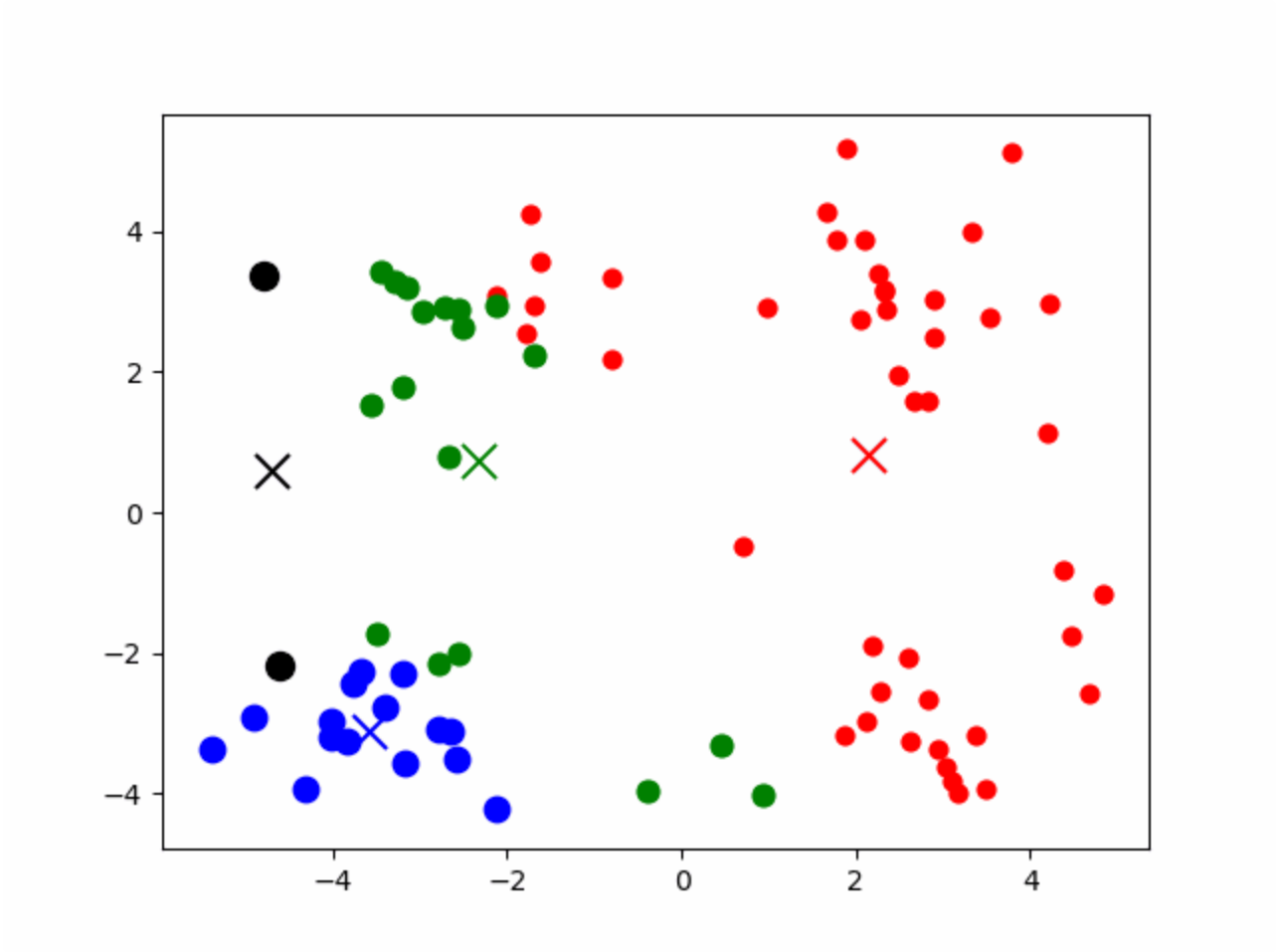
7. 相似性搜索算法

向量数据库相似性搜索，是通过计算输入向量与目标向量的相似度，快速找出与输入向量最相似数据的搜索技术。这其中以 Approximate Nearest Neighbor（近似最近邻，ANN）搜索和以 K-Means 为代表的聚类搜索最具代表性。

7.1. 典型算法

7.1.1. 倒排 + 数据压缩

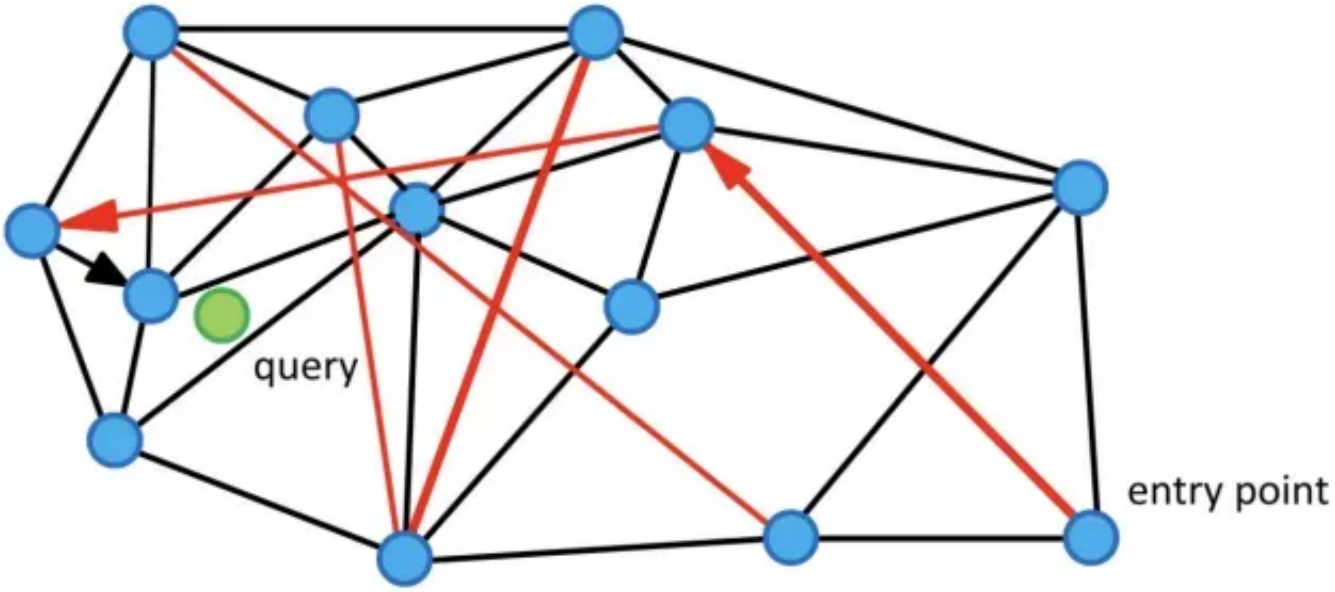
通过聚类算法（常用 KMeans 算法）将数据分为若干聚簇，按照聚簇中心建立倒排索引。每次搜索时，先计算与聚簇中心的相似度，选择相似性最高聚簇进一步搜索。



7.1.2. 导航图索引 + 分布式

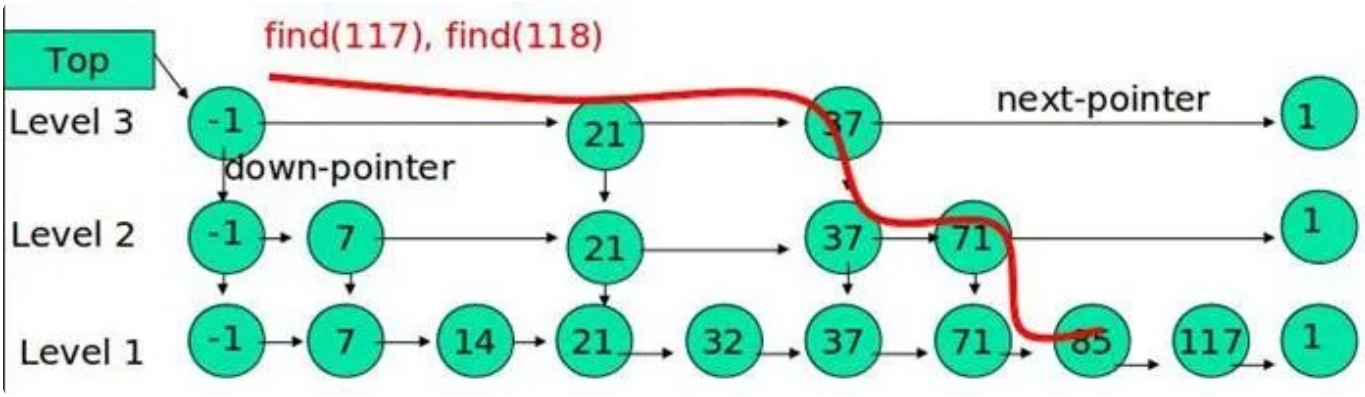
将向量作为点，向量相似度作为边，建立近似近邻图，在图上进行贪心搜索逼近近邻区域。 图索引在内存中最高效, 因而对内存占用很大, 经常基于分区以及分布式的方式, 来解决大数据量的问

题. 缺点是成本高, 有点是能够实现高召回率以及低延迟(思路类似六度分隔理论：最多通过六个人，你就能够认识任何一个陌生人)。

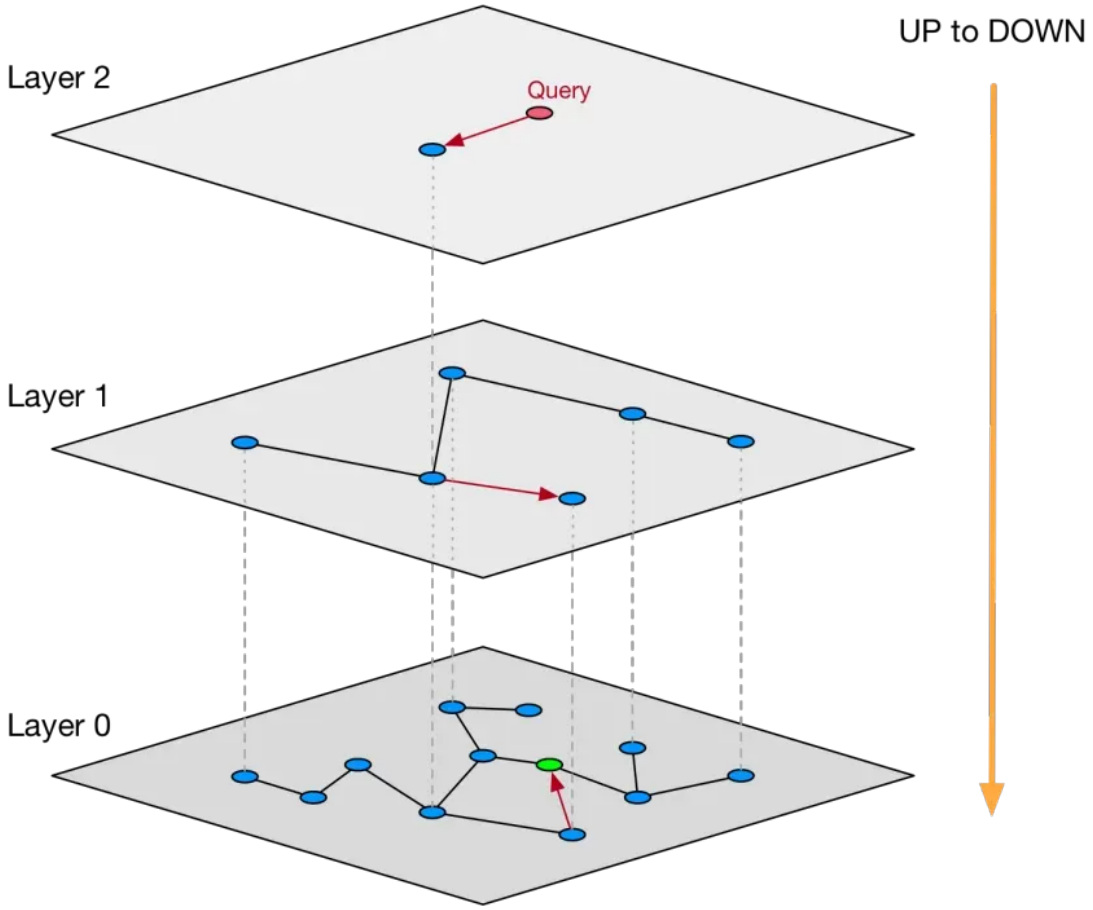


7.2. HNSW

Hierarchical Navigable Small World（分层导航小世界）小世界图是介于规则图和随机图之间的一种图结构，其特点是每个节点仅与很小有限的节点有联系，并且这些节点有一定的集中性。小世界图中大部分节点彼此并不联系，但大部分节点经过几步即可到达。HNSW 是基于“邻居的邻居可能是邻居”的核心思想, 社交网络便是典型的小世界图结构。咱们先看一个大家都更熟悉的数据结构 —— 跳表 SkipList。



跳表是典型的用空间换取时间，索引分了好几层，最底层（图中 Level1）存储了所有的数据，而上面几层，则存储了指向某几个数据的索引，且越往上索引数量越少。跳表的作用就是：先快速的接近要查找的点的附近，然后再精确的搜索，这样就避免了路上做很多无用功耽误时间。个人理解，HNSW 就是将跳表运用在了图结构中。



跳表的每一层，都是一个小世界网络。其中最底层（Layer = 0）是一个完整的 NSW（导航小世界网络），其它层存储的则是指向图节点的指针索引。使用类似于跳表的原因也很简单，为了少做无用功耽误时间。

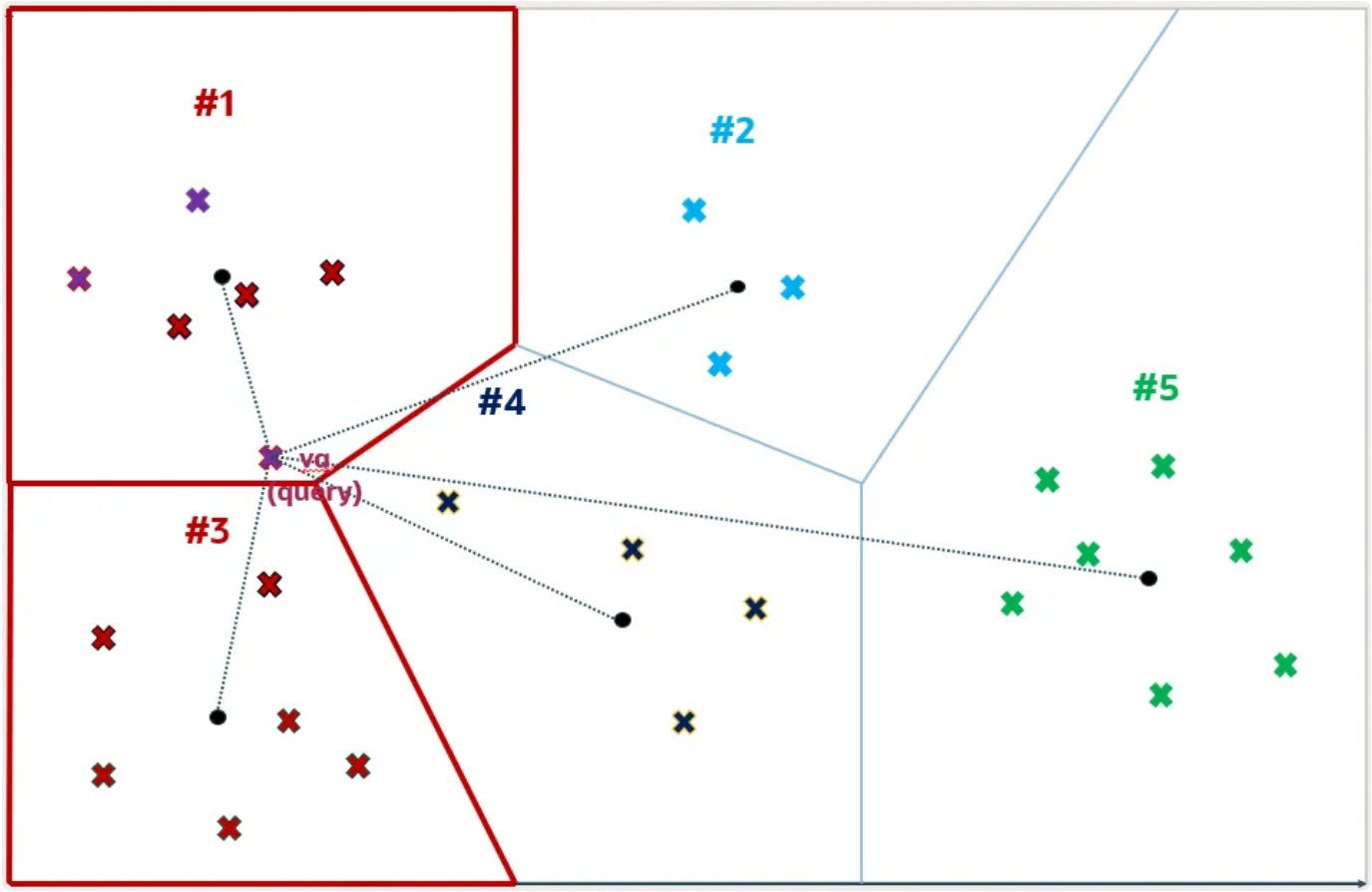
上层小世界图可以看成是下层的缩放，多层图的方式目的是为了减少搜索时距离计算和比较的次数。检索时，从最高一层（即最稀疏的一层）开始，每一层得到的检索结果再作为下一层的输入，如此，不断迭代到最后一层。最后得到查询点的 K 个近邻。

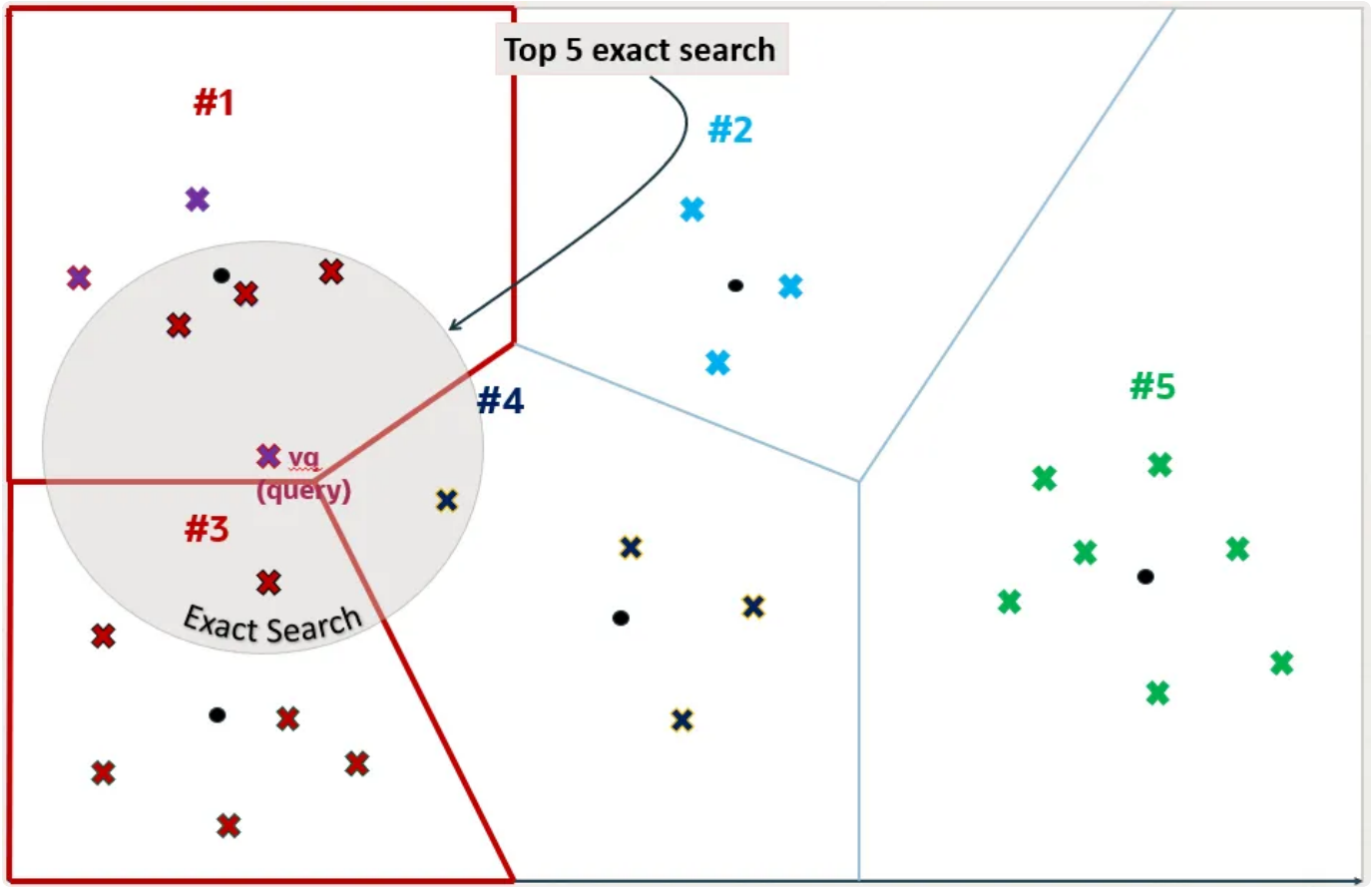
HNSW 是目前最流行的向量检索算法，性能和召回率都比较不错，但是对内存有强依赖。

7.3. IVF

IVF（Inverted File Index）索引通过聚类算法将向量空间划分为多个子空间，并为每个子空间建立索引。在搜索过程中，IVF 索引首先根据查询向量找到其所属的子空间（下图中红框表示子空间），然后在对应子空间中进行精确搜索。

优点是搜索速度快，缺点是召回率不优。因为聚类中心是预建的，增量数据的导入不会影响聚类中心的分布，数据更新后，依赖聚类的重建。


#1
#2
#3
#4
#5
vq
(query)


Top 5 exact search
#1
#2
#3
#4
#5
vq
(query)
Exact Search

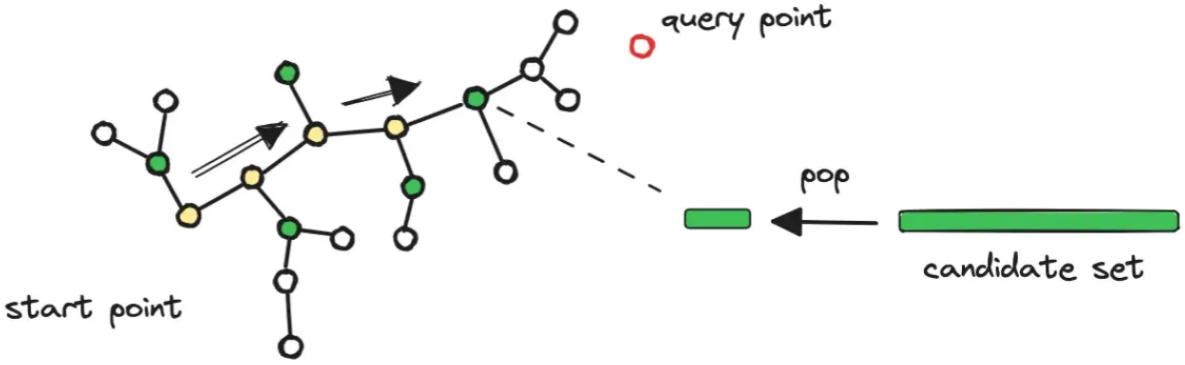
7.4. DiskANN

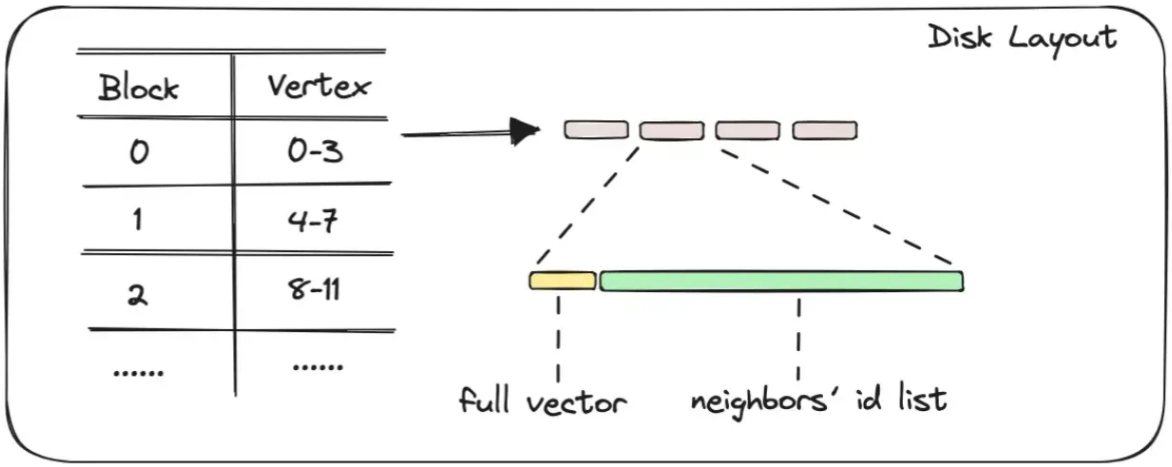
期望解决的问题:

- 如何能够减少访问磁盘的频率？先访问内存，只有真正需要原始向量时再去访问磁盘。
- 如何组织数据结构？保证一次读盘操作便可以取出相关的节点边图信息。

DiskAnn 的思路:

- DiskANN 算法结合了两类算法 —— 聚类压缩算法和图结构算法。
- 算法如下：
  - 通过压缩原始数据，仅将压缩后的码表信息和中心点映射信息放到内存中。而原始数据和构建好的图结构数据存放到磁盘中，只需在查询匹配到特定节点时到磁盘中读取。
  - 修改向量数据和图结构的排列方式，将数据点与其邻居节点并排存放，这种方式使得一次磁盘操作即可完成节点的向量数据、邻接节点等信息的读取。





DiskANN 算法的优点和缺点多很明显：

- 优点：大幅提升向量召回的读取效率，降低图算法的内存，提升召回率。
- 缺点：索引的构建开销较大，更适合静态数据集（或者不经常变的数据集合）。

8. 索引压缩算法

Quantized 是将现有的索引（如IVF、HNSW）与量化等压缩方法结合起来，以减少内存占用并加快搜索速度。

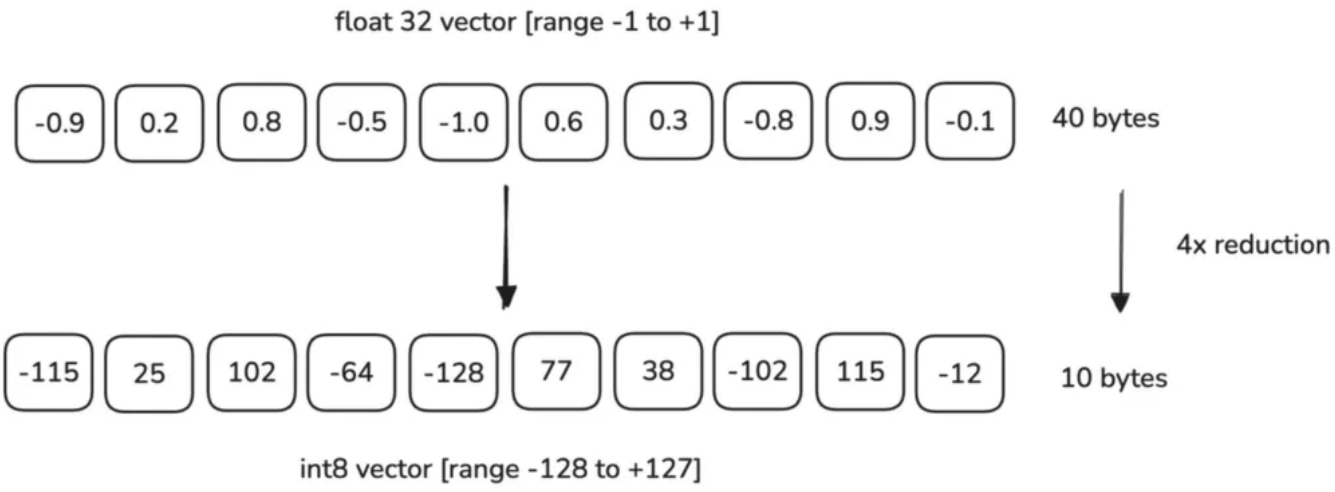
向量的压缩, 一般是基于降低向量维度，降低向量元素的精度的思路，分为两类：标量量化（Scalar Quantization，SQ）和乘积量化（Product Quantization，PQ）。例如 IVF-PQ、HNSW-PQ。

8.1. SQ（Scalar Quantization）

思想是：把一个高精度的浮点向量，主动丢失部分精度，变为一个低精度向量，减少计算和存储开销。例如把向量中的元素 0.1192 和 0.1365 统一用 0.1 来替换。

大致原理:

1. 分割范围：首先确定向量中数值的大致范围，然后将这个范围分成若干个等间隔的小段或桶（这称为量化级别或量化步长）。
2. 映射值：将原始向量中的每个元素映射到最近的一个桶中。具体来说，就是将每个浮点数值舍入到其最近的量化级别的中心值，这个过程通常称为量化。
3. 编码：被映射到各个桶中的值可以用更紧凑的形式表示，例如，用桶的索引（一个整数）来代替原始的浮点数，从而实现压缩。

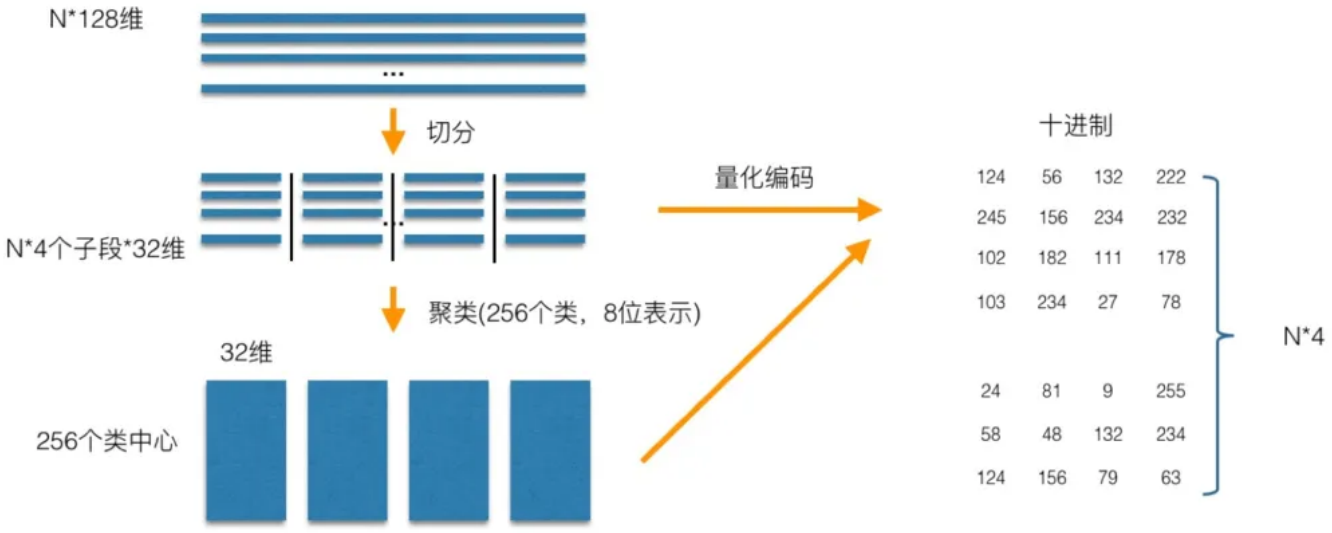


8.2. PQ（Product Quantization）

思想是：把高维向量空间降维。因为低维向量的存储和计算开销都远远低于高维。

大致原理:

1. 分组（Dimension Splitting）：首先，将原始的高维向量空间分成多个子空间，通常是将 d 维向量分为 m 个大小相等的子集，每个子集包含 d / m 维。这样做的目的是将一个复杂的高维问题分解为多个较低维度的问题，便于处理。
2. 量化编码（Codebook Generation）：对于每个子空间，构建一个码本（codebook）。码本是一个由 k 个向量组成的集合，这些向量是该子空间内所有训练向量的聚类中心。这一步通常通过聚类算法完成，每个子空间的向量被分配到离它最近的聚类中心。
3. 编码（Encoding）：对于每一个高维向量，将其在每个子空间上的投影与相应的码本进行比较，找出距离最近的码本向量，并记录下这个向量在码本中的索引。这样，原始的高维向量就被转换为了一个长度为 m 且每个元素范围在 0 到 k – 1 之间的整数序列，即可得到一个紧凑的量化表示。



9. 召回率

最后再来一个大家都可以轻松理解的概念 —— 召回率。

召回率是说：检索出来的结果集中, 接近目标向量的结果比例。召回率 = 真正例 / (真正例 + 假反例)。

暴力搜索的召回率可以100%，但是基本不可接受。基于向量索引搜索的召回率一般低于 100%, 是一个非精确的搜索。召回率和向量索引的组织算法，压缩（压缩本质是通过降低精度, 减少计算开销）算法等相关。

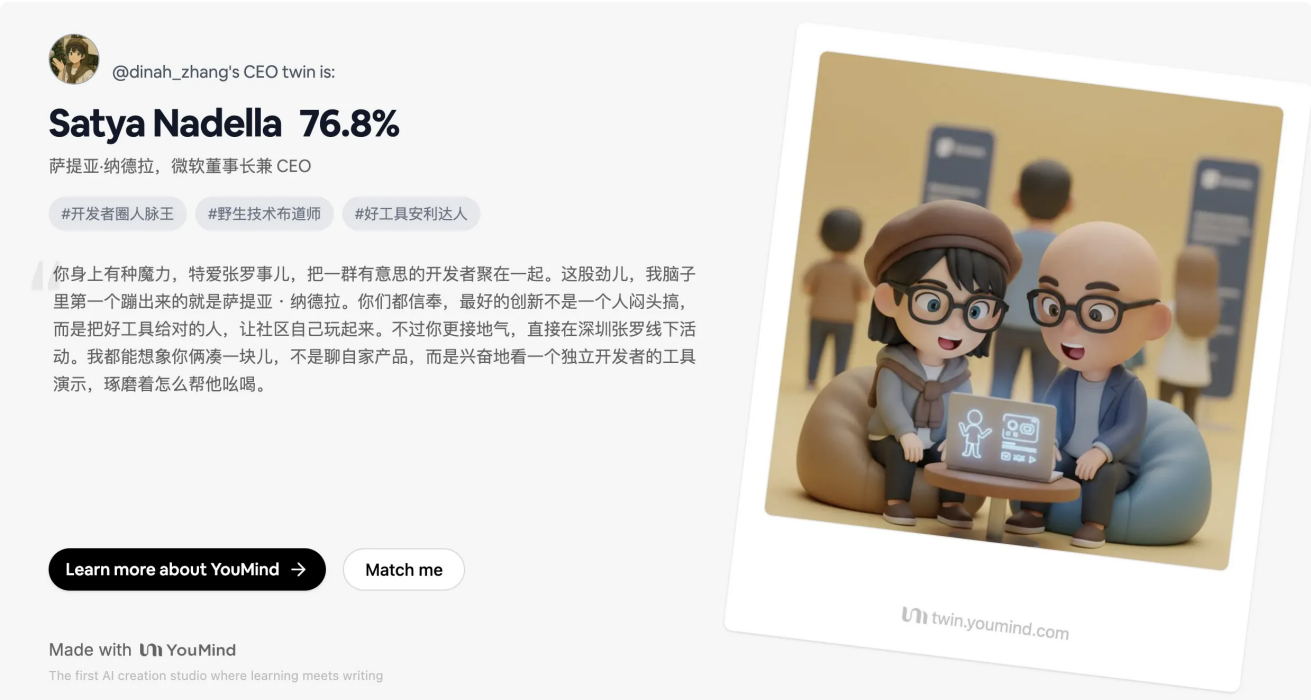
10. Extra Scene

能坚持看到这里的朋友估计不多，最后为大家附上一个通过向量数据库，用你的推特 ID 来寻找和你相似度最高的 CEO 的小彩蛋，链接在这里：https://twin.youmind.com/。

效果如下：

- 不务正业的兹拉坦。

- 兹拉坦的同桌。



11. 参考

- OceanBase 官网文档《向量检索》