基于局部后悔的在线核选择

张 骁 廖士中
(天津大学计算机科学与技术学院 天津 300350)

摘 要 在线核选择是在线核学习的关键问题.不同于离线核选择,在线核选择需要在保证亚线性收敛率的同时单趟(one-pass)地进行核选择和假设更新,并且现有在线核选择方法的时间复杂度至少是关于回合数平方的,计算效率较低.针对这些问题,该文提出了一种新的基于局部后悔的在线核选择方法.该方法具有亚线性的后悔界和关于回合数对数的时间复杂度.首先,定义了基于局部后悔的核选择准则(LRC),证明该准则是假设序列期望风险的上界.然后,应用相干性来度量新实例与缓冲区中实例的相关性,并结合蓄水池采样来设计缓冲区实例的添加和删除策略.最后,构造 LRC 的增量更新方法,并应用在线梯度下降方法来更新假设,实现具有亚线性后悔界的在线核选择和在线核学习的高效算法.实验结果表明,该文所提出的在线核选择方法在保证精度的同时可显著提高核选择的计算效率.

关键词 在线学习;核方法;在线核选择;后悔分析;预算保持
中图法分类号 TP181 **DOI 号** 10.11897/SP.J.1016.2019.00061

Online Kernel Selection with Local Regret

ZHANG Xiao LIAO Shi-Zhong
(*School of Computer Science and Technology, Tianjin University, Tianjin* 300350)

Abstract Online kernel selection is critical to online kernel methods, which dynamically selects the optimal kernel for online kernel learning at each round. In contrast to offline kernel selection, online kernel selection requires a sublinear regret guarantee while selecting the kernel and updating the hypothesis in a one-pass over the input data. However, existing online kernel selection methods suffer from low efficiencies due to the quadratic overall time complexity and linear space complexity with respect to the square root rounds, and do not enjoy the optimal regret bound. To address these issues, we present a novel online kernel selection method with local regret, which is in a sublinear time complexity with respect to the logarithm of rounds and a constant space complexity and enjoys the optimal sublinear regret bound for a specific objective function. We first define the local regret on the buffer under a fixed budget, and propose the online kernel selection criterion using the local regret, called LRC, which bounds the expected risk of the hypothesis sequence. Then, we apply the proposed LRC to online kernel selection and formulate the new online kernel selection method including two steps at each round: budget maintenance and criterion computation. For the budget maintenance step, we define the coherence to measure the correlation between the new example and the arrived examples in the buffer, which is equivalent to measure the correlation between the newly arrived basis function and the existing basis functions in the reproducing kernel Hilbert space. To restrict the size of the buffer to a small and fixed budget, we design the novel inserting strategy using the newly defined coherence and the reservoir sampling strategy, and

收稿日期:2017-05-24;在线出版日期:2018-05-14.本课题得到国家自然科学基金项目(61673293)资助.**张 骁**,男,1989 年生,博士研究生,中国计算机学会(CCF)学生会员,研究方向包括在线学习、核方法、模型选择.**廖士中**(通信作者),男,1964 年生,博士,教授,博士生导师,中国计算机学会(CCF)会员,研究领域包括人工智能、机器学习和理论计算机科学.E-mail:szliao@tju.edu.cn.

propose the removal strategy according to the weights of the hypothesis sequence. For the criterion computation step, we present the efficient incremental updating strategy of the proposed LRC by revising the cumulative loss of the hypothesis sequence at each round. Finally, we propose an efficient online kernel selection algorithm that updates the hypothesis using the online gradient descent method and compensates the weight corresponding to the surrogate instance, which is in a logarithmic overall time complexity with respect to the number of rounds and a linear maintenance time complexity with respect to the budget at each round. We prove that the proposed online kernel selection method enjoys a logarithmic regret bound with respect to the logarithm of rounds, which is optimal for strongly convex objective function, while the existing regret bounds for online kernel selection are the square root of the number of rounds. In contrast to the existing regret analysis for online kernel selection within the expert advice framework, our proof of the sublinear regret bound of online kernel selection is more general and concise using the averaged gradient error and the surrogate hypothesis space. Experimental results demonstrate that the proposed online kernel selection algorithm significantly improves the efficiency of online kernel selection while retaining comparable accuracy of online kernel learning to the state-of-the-art online kernel selection algorithms, and is robust to the initial optimal kernels.

Keywords online learning; kernel methods; online kernel selection; regret analysis; budget maintenance

《计算机学报》

1 引 言

核选择决定了假设所在的再生核希尔伯特空间(Reproducing Kernel Hilbert Space,RKHS),是核方法理论研究与实际应用的关键.经典的离线核选择方法常由期望风险的估计得出,如 k-折交叉验证(k-fold Cross Validation,KCV)[1]和留一交叉验证(Leave-One-Out cross-validation,LOO)[2].此类方法需训练多次,具有较高的计算复杂度[3-4].最小化期望风险的理论上界可导出另一种常用的核选择方法.这些理论上界由假设空间的复杂度表示,经典的理论界包括 Rademacher 复杂度[5]、半径间隔界(radius-margin bound)等,但多数理论界的最小化问题的求解效率较低[6].最大化核对齐是一类独立于具体学习过程的核选择方法,包括核对齐(Kernel Target Alignment, KTA)[7-8]和中心化核对齐(centered KTA).该类方法具有关于样本规模平方的计算复杂度.

已有的在线核学习方法主要包括两大类:一类是通过维护规模有限的样本结构控制假设的规模[9-10];另一类是应用显式特征映射将非线性学习问题转化为线性学习问题,如傅里叶在线梯度下降方法(Fourier online Gradient Descent,FouGD)[11].这两类方法计算高效且具有亚线性的后悔界.已有的在线核学习方法大多预先应用离线核选择方法来选择或先验地预设核函数,再进行在线核学习,如将 FouGD 和 KTA 结合,但这种方法不能保证在线核学习是单趟(one-pass)的,具有较高的计算复杂度且缺乏理论保证.如何利用局部信息进行在线核选择是在线核学习的关键.

经典的离线核选择方法不适用于在线核选择,主要有三方面原因.首先,离线核选择方法需要关于样本规模至少平方的时间复杂度,不能保证在线学习的实时性.其次,多数离线核选择方法需要将数据集分为训练集和测试集,然而流式数据一般不能划分为训练和测试集两部分.最后,在线核选择方法应具有单趟的特点,即同步进行模型的训练和选择,而离线核选择方法需扫描数据多次.

近年来,在线核选择的研究受到了广泛关注.Yang 等人[12]提出了在线方式的核选择方法(Online Kernel Selection,OKS),该方法随机的为每个候选核构造权值,并在接收到新实例时依据该权值选择最优核,但该在线核选择方法每回合得到假设的规模关于回合数呈线性增长,具有关于回合数平方的时间复杂度,也没有得到在线梯度下降方法关于回合数对数的最优后悔界.自适应核[13-14]是在线核选择的一种有效方法.Chen 等人[14]提出的自适应核

方法(Online Kernel Learning via Gradient Decent, OKL-GD)将核参数的选择引入到学习过程中，并应用在线梯度下降方法对最优核参数进行求解，每回合本质上是应用瞬时损失对最优核进行选择，但该在线核选择方法同样具有关于回合数线性的空间复杂度和平方的时间复杂度，并且该方法不是初始核稳健的. 在理论保证方面，OKL-GD 只具有收敛性的保证，缺乏对后悔界及其收敛率的分析.

针对这些问题，给出在线核选择的框架，在此基础上提出一种基于局部后悔的在线核选择方法，设置固定预算的缓冲区并基于局部后悔给出在线核选择准则，该准则理论上是假设序列平均期望风险的上界，可实现高效的增量计算. 进一步结合预算保持策略和在线梯度下降方法设计具有亚线性后悔界的在线核选择算法，该算法仅需对核选择准则进行关于回合数对数次更新，并且单次更新的时间复杂度是关于预算线性的. 实验验证了所提出的在线核选择方法的有效性，并表明该方法不依赖于初始核的选择. 所提出的在线核选择方法与已有在线核选择方法的比较见表 1.

表 1　在线核选择方法对比

	时间复杂度	空间复杂度	后悔界	初始核稳健
已有方法	平方级	线性	非最优	否
本文方法	对数级	常数	最优	是

2　预备知识

本节给出符号说明和在线学习的相关定义.

令 $\mathcal{S}=\{(\boldsymbol{x}_i,y_i)\}_{i=1}^{\mathrm{T}}\subseteq(\mathcal{X}\times\mathcal{Y})^{\mathrm{T}}$ 表示包含 T 个样本的数据集，其中，$\mathcal{X}$ 为输入空间，$\mathcal{Y}$ 为输出空间，$\boldsymbol{x}_i\in\mathcal{X}$ 为实例，$y_i\in\mathcal{Y}$ 为标签. 对于二分类问题，$\mathcal{X}\subseteq\mathbb{R}^d$，$\mathcal{Y}=\{-1,1\}$. 定义损失函数 $\ell:\mathcal{Y}\times\mathcal{Y}\to\mathbb{R}$，核函数 $\kappa:\mathcal{X}\times\mathcal{X}\to\mathbb{R}$，其对应的再生核希尔伯特空间(Reproducing Kernel Hilbert Space, RKHS)为 $\mathcal{H}_\kappa=\overline{\mathrm{span}\{\kappa(\cdot,\boldsymbol{x}):\boldsymbol{x}\in\mathcal{X}\}}$. 针对核选择问题，定义包含 N 个核的候选核集合 $\mathcal{K}=\{\kappa_i:i\in[N]\}$. 记 $[T]=\{1,2,\cdots,T\}$.

分类问题的在线学习框架见算法 1.

算法 1.　分类问题的在线学习框架.

输入：$\{\boldsymbol{x}_t\}_{t=1}^{\mathrm{T}}$

输出：$\{\hat{y}_t\}_{t=1}^{\mathrm{T}}$

1. 初始化假设 $f_1=0$
2. FOR $t=1,2,\cdots,T$
3. 接收新实例 $\boldsymbol{x}_t\in\mathcal{X}$
4. 预测标签 $\hat{y}_t=\mathrm{sgn}(f_t(\boldsymbol{x}_t))$
5. 接收真实标签 $y_t\in\mathcal{Y}$
6. 计算损失 $\ell(f_t(\boldsymbol{x}_t),y_t))$
7. IF $\ell(f_t(\boldsymbol{x}_t),y_t))>0$
8. 更新假设 $f_{t+1}\leftarrow\Delta(f_t,(\boldsymbol{x}_t,y_t))$
9. ENDIF
10. ENDFOR

在线学习中，后悔(regret)反映了在线学习方法的性能. 下面给出后悔的定义.

定义 1(后悔[15]).　给定假设空间 $\mathcal{H}$ 和损失函数 $\ell(\cdot,\cdot)$. 设由在线学习方法 $\mathcal{A}$ 得到假设序列 $\{f_t:f_t\in\mathcal{H},t\in[T]\}$，则 $\mathcal{A}$ 关于假设 $f\in\mathcal{H}$ 的后悔为

$$\mathcal{R}_{\mathrm{reg}}(T,f)=\sum_{t=1}^{T}\ell(f_t(\boldsymbol{x}_t),y_t)-\sum_{t=1}^{T}\ell(f(\boldsymbol{x}_t),y_t),$$

$\mathcal{A}$ 关于假设空间 $\mathcal{H}$ 的后悔为

$$\mathcal{R}_{\mathrm{reg}}(T,\mathcal{H})=\max_{f\in\mathcal{H}}\mathcal{R}_{\mathrm{reg}}(T,f),$$

等价于

$$\mathcal{R}_{\mathrm{reg}}(T,\mathcal{H})=\sum_{t=1}^{T}\ell(f_t(\boldsymbol{x}_t),y_t)-\min_{f\in\mathcal{H}}\sum_{t=1}^{T}\ell(f(\boldsymbol{x}_t),y_t).$$

对于包含 T 个样本的样本序列和假设空间 $\mathcal{H}$，令最优假设 $f^*=\min\limits_{f\in\mathcal{H}}\sum\limits_{t=1}^{T}\ell(f(\boldsymbol{x}_t),y_t)$，后悔可表示为

$$\mathcal{R}_{\mathrm{reg}}(T,\mathcal{H})=\sum_{t=1}^{T}[\ell(f_t(\boldsymbol{x}_t),y_t)-\ell(f^*(\boldsymbol{x}_t),y_t)],$$

是在线学习方法得到的假设序列的累积损失与最优假设 f^* 的累积损失之差. 若

$$\mathcal{R}_{\mathrm{reg}}(T,\mathcal{H})=o(T),$$

则称该在线学习方法具有亚线性的后悔界，此时随着回合数的增加，$\mathcal{R}_{\mathrm{reg}}(T,\mathcal{H})$ 趋于 0，保证了在线学习方法的结果是渐进最优的.

3　在线核选择方法

本节首先定义基于局部后悔的在线核选择准则，然后给出基于该准则的在线核选择框架.

令在线学习过程第 t 回合的缓冲区为 $\mathcal{V}_t$，其规模为 $|\mathcal{V}_t|=B_t$ 且满足 $\lim\limits_{t\to+\infty}B_t/t=0$，缓冲区中的实例记为 $\tilde{\boldsymbol{x}}\in\mathcal{V}_t$，其标签为 $\tilde{y}$. 则第 t 回合的假设空间表示为

$$\mathcal{F}_t:=\overline{\mathrm{span}\{\kappa(\cdot,\boldsymbol{x})\,|\,\boldsymbol{x}\in\mathcal{V}_t\}}\subseteq\mathcal{H}_\kappa.$$

令

$$\boldsymbol{\psi}_\kappa^{(t)}(\boldsymbol{x})=[\kappa(\boldsymbol{x},\tilde{\boldsymbol{x}}_1),\kappa(\boldsymbol{x},\tilde{\boldsymbol{x}}_2),\cdots,\kappa(\boldsymbol{x},\tilde{\boldsymbol{x}}_{B_t})]^{\mathrm{T}},$$

第 t 回合的假设表示为

$$f_t(\cdot)=\langle\boldsymbol{\omega}^{(t)},\boldsymbol{\psi}_\kappa^{(t)}(\cdot)\rangle\in\mathcal{F}_t,$$

计算机学报

其中 $\boldsymbol{\omega}^{(t)}$ 为权向量

$$\boldsymbol{\omega}^{(t)}=[\omega_1^{(t)},\omega_2^{(t)},\cdots,\omega_{B_t}^{(t)}]^{\mathrm{T}}.$$

传统的后悔在全样本序列上对原假设空间 $\mathcal{H}_\kappa$ 中的假设进行评价. 为了在缓冲区中对假设空间 $\mathcal{F}_t$ 中的假设进行评价,定义第 t 回合的局部后悔如下:

$$\mathcal{R}_{\mathrm{lreg}}(t,\mathcal{F}_t):=\sum_{\tilde{\boldsymbol{x}}_i\in\mathcal{V}_{t+1}}\ell(f_t(\tilde{\boldsymbol{x}}_i),\tilde{y}_i)-\min_{f\in\mathcal{H}_\kappa}\sum_{\tilde{\boldsymbol{x}}_i\in\mathcal{V}_{t+1}}\ell(f(\tilde{\boldsymbol{x}}_i),\tilde{y}_i).$$

局部后悔的局部性具体体现在两方面:定义在采用少量样本构造的缓冲区 $\mathcal{V}_t$ 中;评价的假设 f_t 所在的假设空间 $\mathcal{F}_t$ 是原假设空间 $\mathcal{H}_\kappa$ 的子空间.

进而定义基于局部后悔的核选择准则(Local Regret Criterion,LRC)如下:

$$\mathcal{C}^{(t)}(\kappa):=\frac{1}{B_{t+1}}\sum_{\tilde{\boldsymbol{x}}_i\in\mathcal{V}_{t+1}}\ell(f_i(\tilde{\boldsymbol{x}}_i),\tilde{y}_i),$$

LRC 可看作假设序列在缓冲区中实例上的后悔,其每回合的取值依赖于缓冲区的当前状态,因此,LRC 的计算与缓冲区的更新是交互进行的. 若损失函数为合页损失(hinge loss)函数,则 LRC 表示为

$$\mathcal{C}^{(t)}(\kappa)=\frac{1}{B_{t+1}}\sum_{\tilde{\boldsymbol{x}}_i\in\mathcal{V}_{t+1}}[1-\tilde{y}_i\langle\boldsymbol{\omega}^{(i)},\boldsymbol{\psi}_\kappa^{(i)}(\tilde{\boldsymbol{x}}_i)\rangle]_+,$$

其中,当 $x>0$ 时,$[x]_+=x$;否则 $[x]_+=0$.

在核候选集合 $\mathcal{K}=\{\kappa_i:i\in[N]\}$ 中应用 LRC 最小化选择最优核

$$\kappa_t^*=\arg\min_{\kappa\in\mathcal{K}}\mathcal{C}^{(t)}(\kappa).$$

基于 LRC 的在线核选择的框架见图 1.

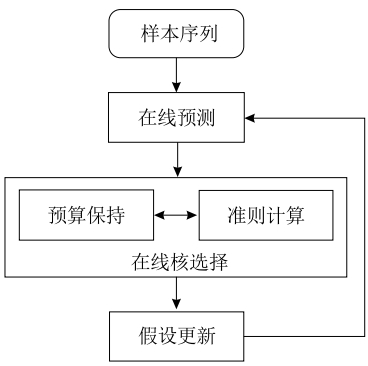


图 1 在线核选择框架

对于第 t 回合接收到的样本 $(\boldsymbol{x}_t,y_t)$,若损失 $\ell(f_t(\boldsymbol{x}_t),y_t)$ 非 0,则执行下面的步骤.

(1)预算保持. 应用预算保持策略构造并更新缓冲区 $\mathcal{V}_t$.

(2)准则计算. 计算基于局部后悔的核选择准则,选择最优核 κ_t^*.

(3)假设更新. 在新的假设空间 $\mathcal{H}_{\kappa_t^*}$ 中更新假设.

4 基于 LRC 的在线核选择增量方法

本节给出基于 LRC 的在线核选择的增量方法,包括预算保持策略、LRC 的增量计算和基于在线梯度下降方法的假设更新.

4.1 预算保持策略

预算保持策略旨在构造具有固定预算 B 的缓冲区,使得每回合的 $B_t\leq B$. 缓冲区更新应用蓄水池采样(Reservoir Sampling,RS)策略[16-18]. 若缓冲区的规模小于预算,则直接将新实例加入到缓冲区中;否则基于以下概率分布调用预算保持过程 BMP(Budget Maintenance Process)

$$\Pr[\Gamma_t=1]=\min\left\{\frac{B}{t},1\right\}\tag{1}$$

其中,$\Gamma_t=1$ 表示在第 t 回合调用 BMP.

BMP 包括对实例的添加和删除两个步骤.

(1)实例添加. 相干性(coherence)[19]在信号的稀疏近似中有着广泛的应用. 为了构造高效的实例添加策略,对于实例 $\boldsymbol{x}_t$,定义相干性如下:

$$\tau_t:=\max_{\tilde{\boldsymbol{x}}_j\in\mathcal{V}_t}|\kappa(\boldsymbol{x}_t,\tilde{\boldsymbol{x}}_j)|.$$

相干性 τ_t 的另一等价形式为

$$\tau_t:=\max_{\tilde{\boldsymbol{x}}_j\in\mathcal{V}_t}|\langle\kappa(\cdot,\boldsymbol{x}_t),\kappa(\cdot,\tilde{\boldsymbol{x}}_j)\rangle|,$$

对于第 t 回合的假设 $f_t(\cdot)\in\mathcal{F}_t$,$\tau_t$ 用来度量新的基 $\kappa(\cdot,\boldsymbol{x}_t)$ 和缓冲区上的基 $\kappa(\cdot,\tilde{\boldsymbol{x}}_j)$ 之间的相关性,若该相关性低于某一阈值,则将新的基 $\kappa(\cdot,\boldsymbol{x}_t)$ 保留,其等价于给定相干性参数 μ,然后将满足以下相干性条件

$$\tau_t\leq\mu$$

的实例 $\boldsymbol{x}_t$ 加入到缓冲区中,

$$\overline{\mathcal{V}}_t=\mathcal{V}_t\cup\{\boldsymbol{x}_t\}.$$

(2)实例删除. 若实例 $\boldsymbol{x}_t$ 加入到缓冲区中,则选择缓冲区 $\mathcal{V}_t$ 中权重最小的实例

$$r_t=\arg\min_{i\in[B_t]}|\omega_i^{(t)}|,$$

并将其删除,

$$\mathcal{V}_{t+1}=\overline{\mathcal{V}}_t\backslash\{\tilde{\boldsymbol{x}}_{r_t}\}.$$

4.2 LRC 的增量计算

缓冲区变化时需要对 LRC 进行增量更新. 假定第 $t+1$ 回合缓冲区变化.

若缓冲区的规模小于预算($B_{t+1}<B$),新实例 $\boldsymbol{x}_{t+1}$ 直接加入到缓冲区中,其带来的损失 $\ell(f_{t+1}(\boldsymbol{x}_{t+1}),y_{t+1})$ 将加到上一次的累积损失中,则 LRC 更新为

$$\mathcal{C}^{(t+1)}(\kappa)=\frac{1}{B_{t+1}+1}[B_{t+1}\mathcal{C}^{(t)}(\kappa)+\ell(f_{t+1}(\boldsymbol{x}_{t+1}),y_{t+1})];$$

若缓冲区的规模已达到预算($B_{t+1}=B$)，实例 $\tilde{\boldsymbol{x}}_{r_t}$ 从缓冲区中删除，其损失 $\ell(f_{r_{t+1}}(\tilde{\boldsymbol{x}}_{r_{t+1}}),\tilde{y}_{r_{t+1}})$ 也从累积损失中删除，则 LRC 更新为

$$\mathcal{C}^{(t+1)}(\kappa)=\frac{1}{B_{t+1}}[B_{t+1}\mathcal{C}^{(t)}(\kappa)-\ell(f_{r_{t+1}}(\tilde{\boldsymbol{x}}_{r_{t+1}}),\tilde{y}_{r_{t+1}})+\ell(f_{t+1}(\boldsymbol{x}_{t+1}),y_{t+1})].$$

4.3　基于在线梯度下降方法的假设更新

对于在线核学习，应用在线梯度下降(Online Gradient Descent，OGD)方法求解如下目标函数：

$$\mathcal{L}(f)=\frac{1}{T}\sum_{t=1}^{T}\ell(f(\boldsymbol{x}_t),y_t)+\frac{\lambda}{2}\|f\|_{\mathcal{H}_\kappa}^2 \tag{2}$$

其中，λ 为正则化参数.

在第 t 回合选择出最优核 κ_t^* 之后，在假设空间 $\mathcal{H}_{\kappa_t^*}$ 中最小化如下目标函数[20]：

$$\mathcal{L}_t(f_t)=\ell(f_t(\boldsymbol{x}_t),y_t)+\frac{\lambda}{2}\|f_t\|_{\mathcal{H}_{\kappa_t^*}}^2.$$

假设的更新公式如下：

$$f_{t+1}(\cdot)=(1-\eta_t\lambda)f_t(\cdot)-\eta_t\nabla_{f_t}\ell(f_t(\boldsymbol{x}_t),y_t),$$

其中 η_t 表示第 t 回合的步长，且

$$\nabla_{f_t}\ell(f_t(\boldsymbol{x}_t),y_t)=\ell'(f_t(\boldsymbol{x}_t),y_t)\kappa_t^*(\cdot,\boldsymbol{x}_t).$$

由 $f_t(\cdot)=\langle\boldsymbol{\omega}^{(t)},\boldsymbol{\psi}_{\kappa_t^*}^{(t)}(\cdot)\rangle$ 可得更新公式如下：

$$\sum_{\tilde{\boldsymbol{x}}_i\in\mathcal{V}_{t+1}}\omega_i^{(t+1)}\kappa_t^*(\cdot,\tilde{\boldsymbol{x}}_i)=(1-\eta_t\lambda)\sum_{\tilde{\boldsymbol{x}}_i\in\mathcal{V}_{t+1}}\omega_i^{(t)}\kappa_t^*(\cdot,\tilde{\boldsymbol{x}}_i)-\eta_t\ell'(f_t(\boldsymbol{x}_t),y_t)\kappa_t^*(\cdot,\boldsymbol{x}_t).$$

假设更新分为以下两种情形：缓冲区规模未达到预算 $B_t<B$；缓冲区规模已达到预算 $B_t=B$.

对于 $B_t<B$ 的情形. 若 $\boldsymbol{x}_t$ 加入到了缓冲区中，则令 $\tilde{\boldsymbol{x}}_{B_{t+1}}=\boldsymbol{x}_t$ 并更新权向量

$$\omega_i^{(t+1)}=\begin{cases}-\eta_t\ell'(f(\boldsymbol{x}_t),y_t), & i=B_{t+1}\\(1-\eta_t\lambda)\omega_i^{(t)} & i\neq B_{t+1}\end{cases} \tag{3}$$

若缓冲区没有改变，则在集合

$$\mathcal{D}_t=\{\tilde{\boldsymbol{x}}_j\in\mathcal{V}_t\mid\tilde{y}_j=y_t\}$$

中选择代理实例

$$\tilde{\boldsymbol{x}}_{s_t}:=\arg\max_{\tilde{\boldsymbol{x}}_j\in\mathcal{D}_t}|\kappa_t^*(\boldsymbol{x}_t,\tilde{\boldsymbol{x}}_j)| \tag{4}$$

并更新 $\boldsymbol{\omega}^{(t)}$ 如下：

$$\omega_i^{(t+1)}=\begin{cases}(1-\eta_t\lambda)\omega_i^{(t)}-\eta_t\ell'(f(\boldsymbol{x}_t),y_t), & i=s_t\\(1-\eta_t\lambda)\omega_i^{(t)}, & i\neq s_t\end{cases} \tag{5}$$

下面考虑 $B_t=B$ 的情形. 如果缓冲区改变，则用实例 $\boldsymbol{x}_t$ 代替 $\tilde{\boldsymbol{x}}_{r_t}$ 并更新当前的权向量如下：

$$\omega_i^{(t+1)}=\begin{cases}-\eta_t\ell'(f(\boldsymbol{x}_t),y_t), & i=r_t\\(1-\eta_t\lambda)\omega_i^{(t)}, & i\neq r_t\end{cases} \tag{6}$$

否则利用(4)来选择实例 $\tilde{\boldsymbol{x}}_{s_t}$ 并根据式(5)来更新权向量.

5　理论分析

本节建立 LRC 的理论依据，并给出基于 LRC 的在线核学习的后悔界.

假定样本$(\boldsymbol{x},y)$服从$\mathcal{X}\times\mathcal{Y}$上的概率分布且是独立同分布产生的. 输入和输出分别用随机变量 X 和 Y 来表示，f 的期望风险表示为

$$\mathcal{R}_{\exp}(f)=\mathbb{E}[\ell(f(X),Y)].$$

Cesa-Bianchi 等人[21]分析了在线学习中的泛化性，并给出了在线核学习的泛化上界，由文献[21]中的命题 1 和 Hoeffding-Azuma 不等式可得如下定理.

定理 1.　设损失函数 $0\leq\ell\leq\zeta$，则以至少 $1-\delta$ 的概率有

$$\frac{1}{B_{t+1}}\sum_{i\in[B_{t+1}]}\mathcal{R}_{\exp}(f_i)\leq\mathcal{C}^{(t)}(\kappa)+\zeta\sqrt{\frac{2}{B_{t+1}}\ln\frac{2}{\delta}}.$$

定理 1 表明，LRC 是缓冲区中假设序列的平均期望风险的上界. 因此，LRC 最小化本质上是期望风险最小化，LRC 每回合的更新都是对假设序列期望风险的一次经验估计.

与离线核选择不同，在线核选择每回合均需给出核选择的结果，即每回合的最优核可能不同. 这样，每回合假设所在的 RKHS 也可能会改变. 因此，在线核选择的理论保证需要针对变化的 RKHS 进行分析. 下面以高斯核为例，构造包含所有可能出现的 RKHS 的代理假设空间 $\mathcal{H}_{\hat{\kappa}}$，并证明所提出的在线核选择方法在 $\mathcal{H}_{\hat{\kappa}}$ 中进行核选择和假设更新可以得到亚线性的后悔界. 代理假设空间 $\mathcal{H}_{\hat{\kappa}}$ 的高斯核 $\hat{\kappa}$ 对应的核参数 $\hat{\sigma}$ 由引理 1 给出. Minh[22]分析了高斯核诱导的 RKHS 的性质，给出了不同高斯核对应的 RKHS 之间的包含关系和范数的上界，引理 1 由文献[22]中的定理 3 得到.

引理 1.　令 $W\subseteq\mathbb{R}^d$ 且非空. 定义候选高斯核集合 $\mathcal{K}=\{\kappa_i:i\in[N]\}$，对应的核参数集合为 $\{\sigma_1,\sigma_2,\cdots,\sigma_N\}$. 令

$$\sigma_{\min}=\min_{1\leq i\leq N}\{\sigma_i\},\ \sigma_{\max}=\max_{1\leq i\leq N}\{\sigma_i\},$$

则 W 上的核参数为 $\hat{\sigma}=\sigma_{\min}$ 的代理假设空间 $\mathcal{H}_{\hat{\kappa}}$ 包含 $\kappa_i,i=1,2,\cdots,N$ 且 $\|\kappa_i(\cdot,\boldsymbol{x})\|_{\mathcal{H}_{\hat{\kappa}}}\leq\theta$，其中

$$\theta=\left[2\left(\frac{\sigma_{\min}}{\sigma_{\max}}\right)^2-\left(\frac{\sigma_{\min}}{\sigma_{\max}}\right)^4\right]^{-\frac{d}{4}}.$$

《计算机学报》

注 1. 由引理 1 可知，候选高斯核集合中的核函数在代理假设空间$\mathcal{H}_{\hat{\kappa}}$中的范数有界，这表明每回合可能选择的核函数均属于$\mathcal{H}_{\hat{\kappa}}$，即对 $\forall \boldsymbol{x}\in W$，有$\kappa_i(\cdot,\boldsymbol{x})\in\mathcal{H}_{\hat{\kappa}}, i\in[N]$. 因此，每回合的假设所在的 RKHS 均包含于$\mathcal{H}_{\hat{\kappa}}$，在$\mathcal{H}_{\hat{\kappa}}$中进行后悔分析是合理的. 对于其他种类的候选核集合$\{\kappa_i: i\in[N]\}$，只需构造满足条件

$$\max_{i\in[N]}\{\|\kappa_i(\cdot,\boldsymbol{x})\|_{\mathcal{H}_{\hat{\kappa}}}\}\leq\theta$$

的代理假设空间$\mathcal{H}_{\hat{\kappa}}$即可进行类似的后悔分析，如多项式核函数的代理假设空间为最高阶候选多项式核对应的 RKHS.

下面证明基于 LRC 的在线核学习的后悔界. 令Δ_t表示第 t 回合由预算保持策略引起的假设更新衰减

$$f_{t+1}(\cdot)=(1-\eta_t\lambda)f_t(\cdot)+\eta_t y_t\kappa(\cdot,\boldsymbol{x}_t)-\Delta_t.$$

通过对Δ_t上界的分析可得如下定理.

定理 2. 假定式(2)中的损失函数为合页损失函数，且高斯核为 $\hat{\kappa}$. 令 f^*为$\mathcal{H}_{\hat{\kappa}}$中的最优假设，$B_{\max}$为缓冲区无预算时可能达到的最大规模. 定义梯度误差$\|E_t\|_{\mathcal{H}_{\hat{\kappa}}}=\|\Delta_t/\eta_t\|_{\mathcal{H}_{\hat{\kappa}}}$和

$$U=\begin{cases}2/\lambda, & \lambda\leq 4\\ 1/\sqrt{\lambda}, & \text{否则}\end{cases}.$$

令 $f_t, t\in[T]$为由式(3)～(5)和式(6)产生的假设序列，步长$\eta_t=1/(t\lambda)$. 若当$y_i=y_j$时，$|\hat{\kappa}(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_j)|\geq Z$，则有如下不等式

$$\mathbb{E}\left[\frac{1}{T}\sum_{t=1}^{T}(\mathcal{L}_t(f_t)-\mathcal{L}_t(f^*))\right]\leq\frac{(\lambda U+2)^2[\ln(T)+1]}{2\lambda T}+2U\hat{E},$$

其中，

$$\hat{E}=\left[1-\frac{B\ln(T)+B}{T}\right]\sqrt{2(\theta-Z)}+\frac{(BT-BB_{\max})[\ln(T)+1]}{T^2}\sqrt{2(\theta-\mu)}+\frac{BB_{\max}}{T}\theta.$$

证明. 分 3 种情形讨论梯度误差的上界.

第 1 种情形，调用 BMP 且 $\boldsymbol{x}_t$没有被加入到缓冲区中. 则由相干性条件可得

$$\begin{aligned}\|E_t\|_{\mathcal{H}_{\hat{\kappa}}}|_{\text{case1}}&=\|\eta_t^{-1}\Delta_t\|_{\mathcal{H}_{\hat{\kappa}}}\\&=\|\eta_t^{-1}\eta_t y_t(\hat{\kappa}(\cdot,\boldsymbol{x}_t)-\hat{\kappa}(\cdot,\tilde{\boldsymbol{x}}_{s_t}))\|_{\mathcal{H}_{\hat{\kappa}}}\\&<\sqrt{2(\theta-\mu)}.\end{aligned}$$

第 2 种情形，调用 BMP 且 $\boldsymbol{x}_t$被加入到缓冲区中. 假定实例 $\tilde{\boldsymbol{x}}_{r_t}$在第 t'回合添加到缓冲区中，可得

$$\begin{aligned}\|E_t\|_{\mathcal{H}_{\hat{\kappa}}}|_{\text{case2}}&=\|\eta_t^{-1}\omega_{r_t}^{(t)}(1-\eta_t\lambda)\hat{\kappa}(\cdot,\tilde{\boldsymbol{x}}_{r_t})\|_{\mathcal{H}_{\hat{\kappa}}}\\&=\theta|\eta_t^{-1}\omega_{r_t}^{(t)}(1-\eta_t\lambda)|\\&\leq\theta(t-t')\leq\theta t.\end{aligned}$$

第 3 种情形，考虑不调用 BMP 的情况. 由于在$y_i=y_j$时$|\hat{\kappa}(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_j)|\geq Z$，可得

$$\|E_t\|_{\mathcal{H}_{\hat{\kappa}}}|_{\text{case3}}\leq\sqrt{2(\theta-Z)}.$$

综上给出梯度误差的期望 $\mathbb{E}[\|E_t\|_{\mathcal{H}_{\hat{\kappa}}}]$的上界

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[\|E_t\|_{\mathcal{H}_{\hat{\kappa}}}]&=\frac{B}{t}\left(1-\frac{B_{\max}}{T}\right)\|E_t\|_{\mathcal{H}_{\hat{\kappa}}}|_{\text{case1}}+\\&\quad\frac{B}{t}\cdot\frac{B_{\max}}{T}\|E_t\|_{\mathcal{H}_{\hat{\kappa}}}|_{\text{case2}}+\left(1-\frac{B}{t}\right)\|E_t\|_{\mathcal{H}_{\hat{\kappa}}}|_{\text{case3}}\\&\leq\left(1-\frac{B}{t}\right)\sqrt{2(\theta-Z)}+\\&\quad\frac{B}{t}\left[\left(1-\frac{B_{\max}}{T}\right)\sqrt{2(\theta-\mu)}+\frac{B_{\max}}{T}\theta t\right].\end{aligned}$$

定义平均梯度误差 $\bar{E}:=1\Big/\left(T\sum_{t=1}^{T}\|E_t\|_{\mathcal{H}_{\hat{\kappa}}}\right)$，由调和级数的性质给出 $\bar{E}$ 期望的上界 $\mathbb{E}[\bar{E}]\leq\hat{E}$. 最终由文献[9]中的定理 1 给出后悔的期望的上界. 证毕.

由文献[10]中命题 3 可知由相干性参数为 μ 的相干性条件成立可以推出阈值为

$$1-(B-1)\mu^2/(1-(B-2)\mu)$$

的近似线性相关(Approximate Linear Dependency, ALD)条件成立，因此，该相干性条件是 ALD 条件的充分条件. 由文献[23]中推论 3 可知，若核矩阵的特征值是指数衰减的，则应用 ALD 条件构造的缓冲区在无预算时的规模为 $B_{\max}=O(\ln(T))$. 由于高斯核矩阵的特征值是指数衰减的[24]且所应用的相干性条件是 ALD 条件的充分条件，故定理 2 中的 $B_{\max}=O(\ln(T))$.

将 $B_{\max}=O(\ln(T))$代入定理 2 可得到 $O(\ln(T))$的后悔界. 已有的自适应核方法[13-14]只证明了在线核选择过程是收敛性的，而缺乏对后悔界及其收敛率的分析. Yang 等人[12]提出的基于权值构造的在线核选择方法具有 $O(\sqrt{T})$的后悔界. 因此，所提出的在线核选择方法与已有的在线核选择方法相比，具有更紧的 $O(\ln(T))$的后悔界，且该后悔界对于强凸目标函数和梯度下降方法是最优的[25].

对于后悔界与预算的关系，只需考虑 $\hat{E}$ 中与 $\ln(T)/T$ 同阶且与 B 相关的项即可，令 $B_{\max}=O(\ln(T))$，考虑 $\hat{E}$ 中的

$$\frac{\ln T}{T}B\left[-\sqrt{2(\theta-Z)}+\sqrt{2(\theta-\mu)}+\theta\right].$$

若取 $\theta=1$，可得当 $\mu>Z+\sqrt{2(1-Z)}-0.5$ 时，较大的预算可以得到更紧的后悔界.

缓冲区中实例质量的高低体现在梯度误差的大小，梯度误差较小的实例是质量较高的实例. 由定理 2

《计算机学报》

的证明可见，μ 的取值主要影响梯度误差 $\|E_t\|_{\mathcal{H}_{\hat{\kappa}}}|_{\text{case1}}$ 和 $\|E_t\|_{\mathcal{H}_{\hat{\kappa}}}|_{\text{case2}}$ 的取值. 对于 $\|E_t\|_{\mathcal{H}_{\hat{\kappa}}}|_{\text{case1}}$，较大的 μ 可以得到较小的梯度误差；而对于 $\|E_t\|_{\mathcal{H}_{\hat{\kappa}}}|_{\text{case2}}$，较小的 μ 会导致缓冲区的更新频率降低，使得待删除实例 $\tilde{\boldsymbol{x}}_{r_t}$ 对应权重 $|\omega_{r_t}^{(t)}|$ 的衰减次数增多，得到较小的梯度误差. 对于计算效率，较小的 μ 既降低了缓冲区的更新频率又降低了 LRC 增量计算的次数，可获得更高的计算效率. 可见，对于高斯核，为了保证计算效率和缓冲区中实例质量，μ 的取值应远离 $[0,1]$ 区间的边界.

综上，所提出的在线核选择方法的理论保证包括两方面：每回合核选择准则是期望风险的上界（定理 1）；在线核选择和假设更新可得到亚线性的后悔界（定理 2）. 这些理论结果保证了所提出的在线核选择方法对变化的 RKHS 是有效的.

6　在线核选择算法

本节设计基于 LRC 的在线核选择算法.

合页损失函数 ℓ 在 $(f_t(\boldsymbol{x}_t),y_t)$ 处的次梯度为

$$\ell'(f_t(\boldsymbol{x}_t),y_t)=\begin{cases}0, & y_t f_t(\boldsymbol{x}_t)\geq 1\\ -y_t, & \text{否则}\end{cases},$$

若损失非零，即 $y_t f_t(\boldsymbol{x}_t)<1$，则仅应用权衰减更新权向量：

$$\boldsymbol{\omega}^{(t+1)}=(1-\eta_t\lambda)\boldsymbol{\omega}^{(t)}.$$

基于 LRC 的在线核选择算法（OKS-LRC）的具体过程见算法 2.

算法 2.　OKS-LRC.

输入：$\{\boldsymbol{x}_t\}_{t=1}^{\mathrm{T}}$，候选核集合 $\mathcal{K}$，预算 B，相干性参数 μ，正则化参数 λ

输出：$\{\hat{y}_t\}_{t=1}^{\mathrm{T}}$

1. 初始化 $\boldsymbol{\omega}^{(1)}=0$，缓冲区 $\mathcal{V}_1=\varnothing$
2. FOR $t=1,2,\cdots,T$
3. 　计算 $\boldsymbol{\psi}_{\kappa}^{(t)}(\boldsymbol{x}_t)=[\kappa(\boldsymbol{x}_t,\tilde{\boldsymbol{x}}_1),\cdots,\kappa(\boldsymbol{x}_t,\tilde{\boldsymbol{x}}_{B_t})]^{\mathrm{T}}$
4. 　计算 $f_t(\boldsymbol{x}_t)=\langle\boldsymbol{\omega}^{(t)},\boldsymbol{\psi}_{\kappa}^{(t)}(\boldsymbol{x}_t)\rangle$
5. 　预测 $\hat{y}_t=\mathrm{sgn}(f_t(\boldsymbol{x}_t))$
6. 　IF $y_t f_t(\boldsymbol{x}_t)<1$
7. 　　IF $B_t<B$
8. 　　将 $\boldsymbol{x}_t$ 加入缓冲区
9. 　　ELSE
10. 　　依伯努利分布 $\Pr(\Gamma=1)=B/t$ 为 Γ 赋值
11. 　　若 $\Gamma=1$，则 $\mathcal{V}_{t+1}=\mathrm{BMP}(\mathcal{V}_t,\boldsymbol{x}_t)$
12. 　　ENDIF
13. 　　若缓冲区改变，则更新最优核 $\kappa=\arg\min_{\kappa\in\mathcal{K}}\mathcal{C}^{(t)}(\kappa)$
14. 　　应用在线梯度下降更新 $\boldsymbol{\omega}^{(t+1)}$
15. 　ELSE
16. 　　更新 $\boldsymbol{\omega}^{(t+1)}=(1-\eta_t\lambda)\boldsymbol{\omega}^{(t)}$
17. 　ENDIF
18. ENDFOR

6.1　计算复杂度分析

由于缓冲区的更新服从概率分布(1)，故 LRC 更新次数的期望为 $O(\ln(T)B)$. 对于预算保持策略，每回合计算相干性的时间复杂度为 $O(B)$；对于 LRC 的增量计算，每次增量更新的时间复杂度为 $O(BN)$，其中 N 为核候选集合的规模. 因此，在线核选择准则的计算保持了每回合关于预算线性的时间复杂度. 综上，T 回合后，计算 LRC 的时间复杂度为

$$O(\ln(T)B^2N),$$

而已有的在线核选择方法在 T 回合后的计算复杂度为 $O(T^2)$. 结合 LRC 和 OGD 方法进行假设更新，得到的算法 2 在 T 回合后的时间复杂度为

$$O(TB+\ln(T)B^2N).$$

由于在计算 LRC 时，需要针对 N 个候选核分别存储缓冲区中 B 个实例的损失，所以 LRC 增量计算的空间复杂度为 $O(BN)$.

7　实验结果与分析

本节在标准数据集上实验验证所提出的在线核选择算法 OKS-LRC 的有效性.

7.1　实验设置

实验环境为 4 核 Intel Core i7 个人 PC 机，主频 3.60 GHz，内存 16 GB，算法实现采用 R 3.3.2. 实验中的数据集为 LIBSVM 的二分类数据集[26] 和 KDDCUP99 数据集①，由于在线学习算法不区分训练集和测试集，因此，将每个标准数据集的训练集和测试集合为一个数据集进行训练，见表 2.

表 2　标准数据集说明

数据集	样本数	特征数
german	1000	24
svmguide3	1284	21
madelon	2600	500
spambase	4601	57
mushrooms	8124	112
a9a	48842	123
w7a	49749	300
w8a	64700	300
cod-rna	331152	8
KDDCUP99	1131571	127

① http://kdd.ics.uci.edu/databases/kddcup99/kddcup99.html

《计算机学报》

将所提出的在线核选择算法 OKS-LRC 与以下在线核选择算法进行对比.

(1) OKS[12]. OKS 增量的学习出每个候选核的权重,并应用该权重进行最优核的选择.

(2) OKL-GD[14]. 应用在线梯度下降方法同时对假设和核参数进行优化,为了消除不同损失函数带来的影响,对比实验中的 OKL-GD 用合页损失函数替代原文献中的平方损失函数. 为了防止模型规模的无限增长,将支持向量的个数限制在 1000 个以下.

(3) FouGD-KTA[8-11]. FouGD 是一种高效的在线核学习算法,其采用随机傅里叶特征进行核近似[11]. 由于交叉验证只适用于离线核学习的模型选择,因此,不能采用交叉验证预先对 FouGD 的核函数进行选择,故只能采用独立于具体学习算法的核对齐准则 KTA[8] 进行核选择. KTA 是一种经典的核选择方法,将 FouGD 与 KTA 结合,得到的 FouGD-KTA 是两趟(two-pass)的. FouGD-KTA 包括两个阶段:首先应用 KTA 进行最优核的选择,然后应用 FouGD 进行假设更新. 实验中对于大数据集,将 KTA 使用样本的规模限制在 10 000 个以下,可保证 FouGD-KTA 中核选择的计算复杂度不会随样本数量增加而不断增加.

全部对比实验均重复 30 次,实验数据由数据集的随机排序得到. 实验中采用的候选核为高斯核,核参数的范围为 $\sigma\in\{2^{-(i+1)/2}, i=[-12:+2:12]\}$. 为了保证对比实验的公平性,将全部核选择算法扫描数据的次数限制为 1 次.

对于所提出的 OKS-LRC,设置相干性参数 $\mu=0.5$,预算 $B=200$,步长如定理 2 中的设置 $\eta_t=1/(t\lambda)$. 对于 OKL-GD,由于靠近范围边界的初始核参数会对 OKL-GD 的性能产生较大影响,因此,初始核参数对应的 i 在 $\{-4,-2,0,2,4\}$ 中均匀随机的选择. OKS 的参数按照文献[12]中的最优设置:更新步长 $\eta=\sqrt{2(1-\delta)\ln N/NT}$,平滑性参数 $\delta=0.5$. FouGD-KTA 中随机特征的维度按照文献[11]中进行在线分类时的设置 $D=400$. OKL-GD 和 FouGD-KTA 的步长、全部算法的正则化参数由格搜索得到,步长的搜索范围为 $10^{[-5:0]}$,正则化参数的范围为 $2^{[-10:5]}$.

7.2 精度与效率

首先验证所提出的 OKS-LRC 在处理在线分类任务时的有效性. 在 6 个标准数据集上比较 OKS-LRC 与 OKS, OKL-GD, FouGD-KTA 的核选择结果、错误率和运行时间. 实验结果(表 3)表明:

(1) 在小数据集(german, svmguide3)上,OKS-LRC 具有较高的分类精度,但是计算效率略低于其它的在线核选择算法. 由于 OKS-LRC 采用基于概率分布的预算保持策略,其在学习的初始阶段,特别是在缓冲区的规模未达到预算 B 的时候,会多次进行缓冲区的改变,这使得基于局部后悔的在线核选择准则也会频繁的更新,重新选择最优核函数,所以 OKS-LRC 在初始阶段较其他在线核选择算法具有较高的精度和略低的效率.

(2) 对于大数据集,OKS-LRC 在保持较高分类精度的同时,显著提升了计算效率,验证了所提出的基于局部后悔的在线核选择算法的精确性和高效性. 这是由于所提出的在线核选择方法在达到预算之后更新缓冲区的概率会随着回合数的增加而减小,且可以在固定预算的情形下得到关于回合数对数级的时间复杂度和最优的对数级的后悔界.

(3) 所提出的 OKS-LRC 较离线核选择算法具有较高的计算效率. 对比实验中,FouGD-KTA 采用离线的核选择方法 KTA(样本规模小于 10 000)进行核选择,虽然 FouGD 算法本身具有较高的计算效率,但核选择阶段应用的 KTA 具有关于样本规模平方的时间复杂度,使得 FouGD-KTA 在样本

表 3 OKS-LRC, OKL-GD, OKS, FouGD-KTA 的错误率、运行时间比较

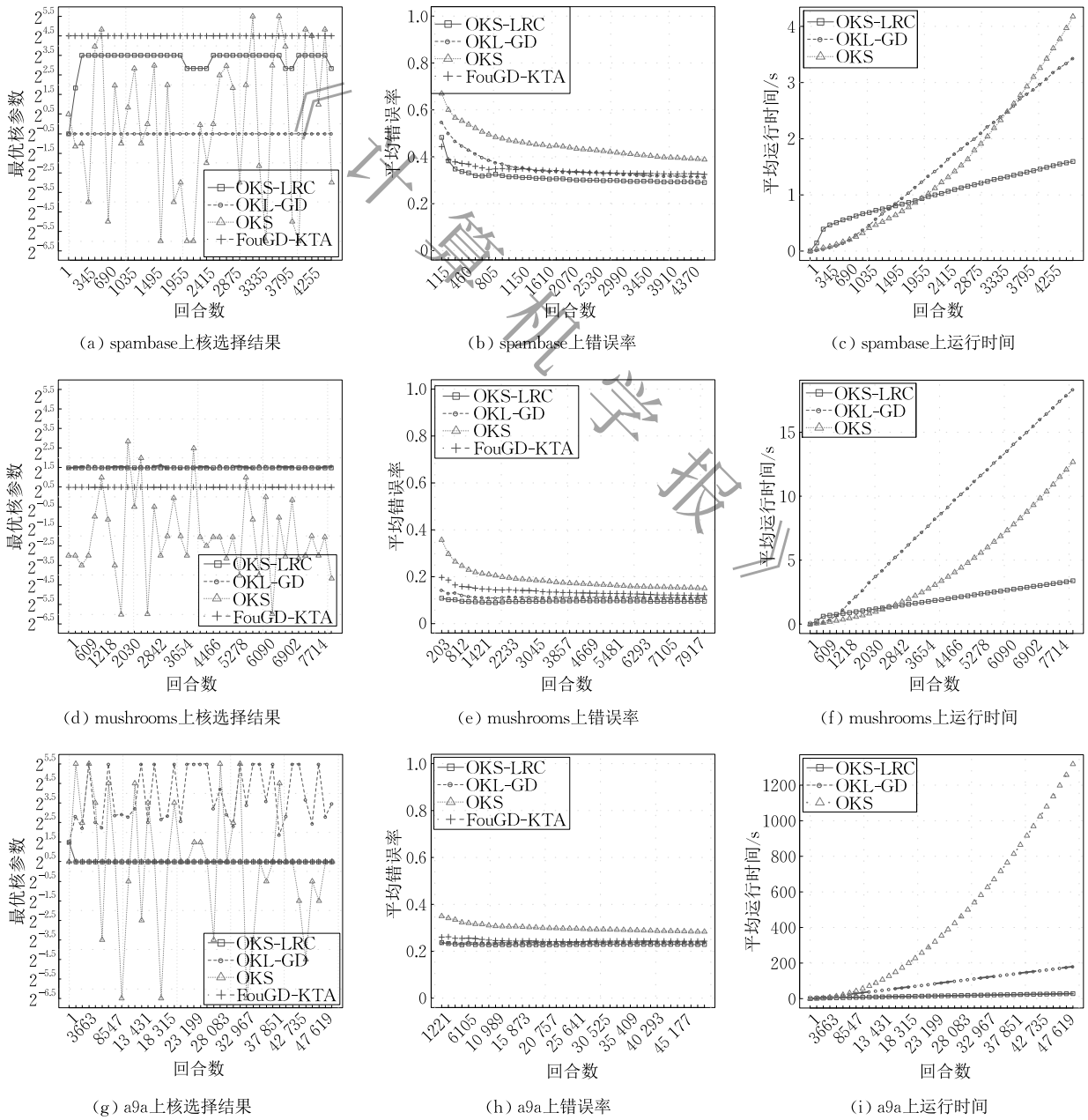
数据集	OKS-LRC		OKL-GD		OKS		FouGD-KTA	
	错误率	时间/s	错误率	时间/s	错误率	时间/s	错误率	时间/s
german	32.153%±0.044%	0.525	35.966%±0.025%	0.710	47.239%±0.016%	0.253	48.207%±0.032%	0.672
svmguide3	21.613%±0.017%	0.536	23.034%±0.003%	0.292	31.009%±0.007%	0.270	31.045%±0.052%	1.411
madelon	35.350%±0.001%	15.280	47.962%±0.001%	30.610	44.923%±0.002%	38.170	40.096%±0.006%	26.235
spambase	28.963%±0.002%	1.684	31.237%±0.004%	3.148	38.831%±0.002%	3.876	32.128%±0.021%	17.166
mushrooms	8.905%±0.002%	3.552	10.500%±0.000%	20.142	14.833%±0.002%	13.860	11.014%±0.016%	92.112
a9a	22.923%±0.001%	28.470	23.930%±0.001%	185.480	28.383%±0.004%	1354.920	23.197%±0.010%	153.050
w7a	2.993%±0.006%	80.720	2.975%±0.005%	540.250	12.597%±0.041%	1704.700	18.632%±0.011%	312.420
w8a	2.834%±0.002%	109.820	2.988%±0.006%	713.570	12.093%±0.037%	2637.180	18.646%±0.013%	312.310
cod-rna	11.593%±0.002%	39.840	13.938%±0.002%	61.032	13.452%±0.004%	1814.583	11.841%±0.003%	64.130
KDDCUP99	5.249%±0.001%	454.420	6.385%±0.002%	2241.351	8.120%±0.002%	26314.710	8.836%±0.004%	997.732

规模小于 10000 时，计算效率低于其它的在线核选择算法. 但当样本规模超过 10000 时，FouGD-KTA 的计算效率高于 OKS 和 OKL-GD，但仍低于所提出的 OKS-LRC. 此外，FouGD-KTA 将核选择和假设更新分为两个分离的阶段，需要扫描数据两遍，不能保证算法是单趟的，而所提出的 OKS-LRC 交替进行核选择和假设更新，是单趟的.

图 2 给出了 spambase，mushrooms，a9a 上核选择结果、错误率和运行时间随回合数的变化情况. 由于 FouGD-KTA 使用批处理的核选择方法，核选择在在线分类之前进行，其运行时间不随回合数变化，因此，图 2 的运行时间曲线不包括 FouGD-KTA. 由实验结果可以看出，对比的 OKS 算法每回合的核选择结果有较大波动，这是因为该算法选择最优核的概率分布是动态的概率分布（更新依赖于瞬时损失）和均匀分布的组合，选择每个候选核的概率是

$$p_i=(1-\delta)q_i+\delta/N,$$

其中 δ 和 N 分别是平滑性参数和候选核的个数. 可见，选择每个候选核的概率至少是 δ/N 而不会趋于 0. 所提出的 OKS-LRC 在回合数超过 2000 时，较其他核选择算法具有更高的计算效率，进一步验证了所提出的基于局部后悔的在线核选择算法具有关于回合数对数级的时间复杂度 $O(\ln(T)B)$，是计算高效的.



(a) spambase上核选择结果　(b) spambase上错误率　(c) spambase上运行时间

(d) mushrooms上核选择结果　(e) mushrooms上错误率　(f) mushrooms上运行时间

(g) a9a上核选择结果　(h) a9a上错误率　(i) a9a上运行时间

图 2　标准数据集上核选择结果、错误率和运行时间随样本数量的变化情况

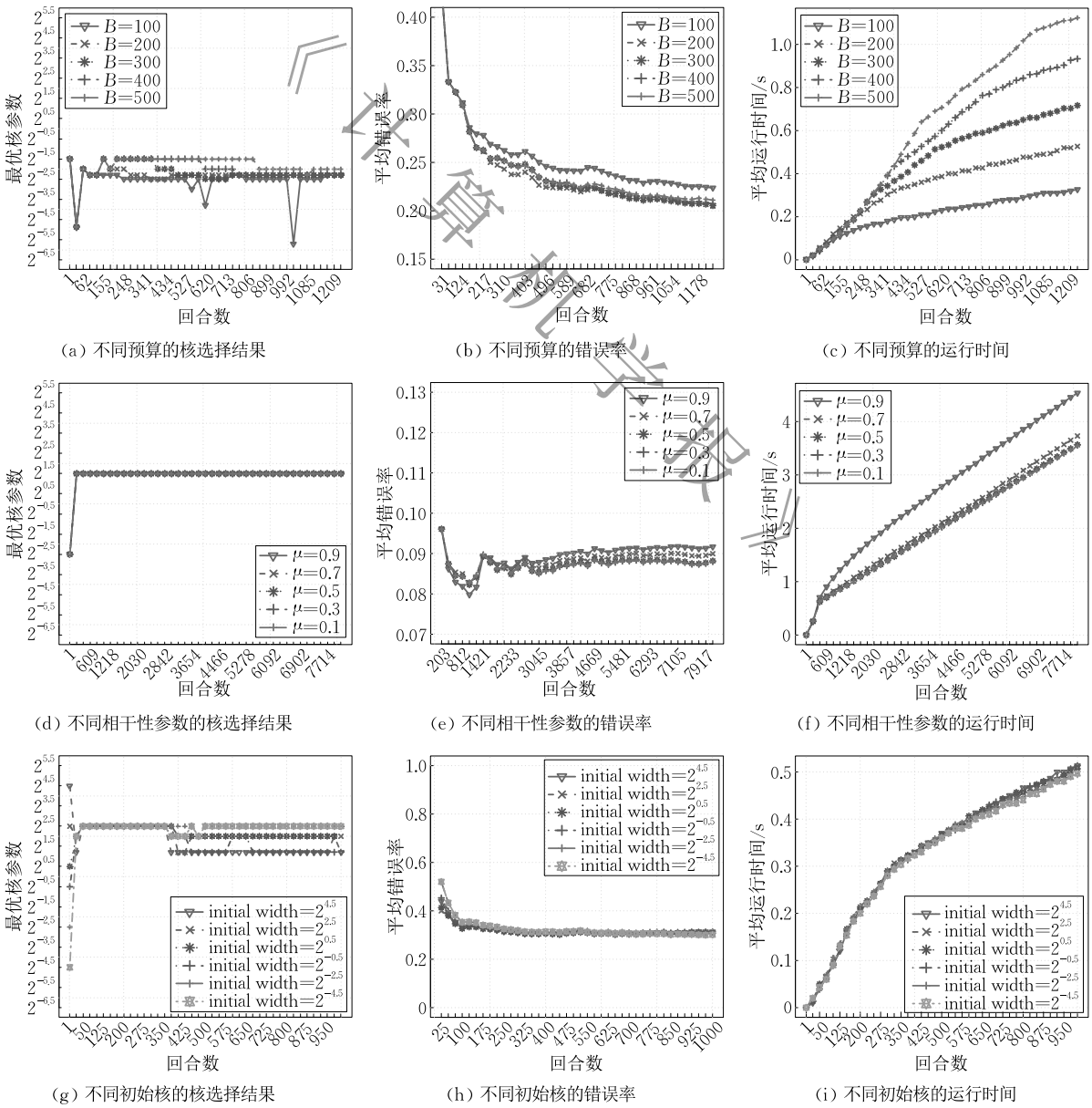
《计算机学报》

7.3 参数影响

下面分析 OKS-LRC 中不同参数对算法性能的影响.本实验研究的参数包括预算 B、相干性参数 μ、初始核参数 σ.

图 3 的(a)、(b)、(c)给出了 OKS-LRC 在预算 $B=100,200,\cdots,500$ 时的核选择结果、分类错误率、计算时间.由实验结果可以看出,当预算达到 200 的时候,OKS-LRC 可以得到与高预算设置下相似的核选择结果,使得在线分类可以保持较高的精度,并且具有较高的计算效率.这说明了 OKS-LRC 的预算保持策略可以在保证在线学习精度的同时提高计算效率.此外,$B=500$ 时的错误率略高于 $B=200$,300,400 时的错误率,这是因为高预算会导致缓冲区中样本的冗余,使得在线核选择准则的更新对核选择结果的影响降低.在第 5 节讨论了预算 B 和后悔界的关系,若 $Z=0$,则 $\mu\leq 0.92$ 时增大预算不能获得更紧的后悔界,这与实验结果一致,此时预算应设置在合适的区间内.

图 3 的(d)、(e)、(f)展示了 OKS-LRC 在不同相干性参数 μ 下的表现,由实验结果可以看出,μ 在低于 0.5 时可以得到较高的精度,且此时在线核选择具有较高的计算效率.因此,选取合适的相干性参数 μ 可以在保证精度的前提下,获得较高的计算效率,这与第 5 节中对 μ 的理论分析一致.此外,当 $\mu\leq 0.5$ 时,不同的 μ 对精度和效率的影响不大.因此,所提出的 OKS-LRC 对相干性参数 μ 是稳健的.



(a) 不同预算的核选择结果 (b) 不同预算的错误率 (c) 不同预算的运行时间

(d) 不同相干性参数的核选择结果 (e) 不同相干性参数的错误率 (f) 不同相干性参数的运行时间

(g) 不同初始核的核选择结果 (h) 不同初始核的错误率 (i) 不同初始核的运行时间

图 3 不同预算 B、相干性参数 μ 和初始核参数下的核选择结果、平均错误率和平均运行时间的比较

图 3 的(g)、(h)、(i)为 OKS-LRC 在不同初始核参数

$$\sigma \in \{2^{-(i+1)/2}, i=-10,-6,-2,0,4,8\}$$

下的实验结果. 实验结果表明，不同于其它基于梯度下降的在线核选择算法，所提出的 OKS-LRC 对于不同的初始核可以保证在线核选择的结果保持在一定区间内，且不同的初始核不会影响 OKS-LRC 的在线分类精度和效率. 因此，所提出的 OKS-LRC 对初始核参数是稳健的.

8　结　语

在线模型选择完全不同于离线模型选择. 在线学习过程中，单个实例的训练、验证和模型选择过程是交织混合进行的，这使得在线学习既要保证理论上的收敛性，又要保证计算上的实时性. 现有在线核选择方法难以满足这些要求. 针对这些问题，提出基于局部后悔在线核选择方法. 该方法界定假设序列期望风险的上界，具有亚线性的后悔界，并且更新策略的计算时间复杂度是关于回合数对数的且关于预算线性的. 所提出的在线核选择方法也为大规模在线/离线核方法模型选择提供了一种有效途径.

参　考　文　献

[1] Anguita D, Ghio A, Ridella S, et al. k-fold cross validation for error rate estimate in support vector machines//Proceedings of the 2009 International Conference on Data Mining. Las Vegas, USA, 2009: 291-297

[2] Chapelle O, Vapnik V, Bousquet O, et al. Choosing multiple parameters for support vector machines. Machine Learning, 2002, 46(1): 131-159

[3] Liu Y, Jiang S, Liao S. Efficient approximation of cross-validation for kernel methods using Bouligand influence function//Proceedings of the 31st International Conference on Machine Learning. Beijing, China, 2014: 324-332

[4] Feng Chang, Liao Shi-Zhong. Model selection for Gaussian kernel support vector machines in random Fourier feature space. Journal of Computer Research and Development, 2016, 53(9): 1971-1978(in Chinese)
(冯昌，廖士中. 随机傅里叶特征空间中高斯核支持向量机模型选择. 计算机研究与发展，2016，53(9)：1971-1978)

[5] Bartlett P L, Mendelson S. Rademacher and Gaussian complexities: Risk bounds and structural results. Journal of Machine Learning Research, 2002, 3: 463-482

[6] Ding Li-Zhong, Jia Lei, Liao Shi-Zhong. Simultaneous multiple parameters tuning in support vector learning. Journal of Software, 2014, 25(9): 2149-2159(in Chinese)
(丁立中，贾磊，廖士中. 支持向量学习的多参数同时调节. 软件学报，2014，25(9)：2149-2159)

[7] Cristianini N, Shawe-Taylor J, Elisseeff A, et al. On kernel-target alignment//Proceedings of the Advances in Neural Information Processing Systems 14. Vancouver, Canada, 2001: 367-373

[8] Kandola J, Shawe-Taylor J, Cristianini N. On the extensions of kernel alignment. University of London, London, UK: Technical Report 120, 2002

[9] Wang Z, Crammer K, Vucetic S. Breaking the curse of kernelization: Budgeted stochastic gradient descent for large-scale SVM training. Journal of Machine Learning Research, 2012, 13: 3103-3131

[10] Richard C, Bermudez J, Honeine P. Online prediction of time series data with kernels. IEEE Transactions on Signal Processing, 2009, 57(3): 1058-1067

[11] Lu J, Hoi S C, Wang J, et al. Large scale online kernel learning. Journal of Machine Learning Research, 2016, 17: 1613-1655

[12] Yang T, Mahdavi M, Jin R, et al. Online kernel selection: Algorithms and evaluations//Proceedings of the 26th AAAI Conference on Artificial Intelligence. Toronto, Canada, 2012: 22-26

[13] Singh A, Príncipe J C. Information theoretic learning with adaptive kernels. IEEE Transactions on Signal Processing, 2011, 91(2): 203-213

[14] Chen B, Liang J, Zheng N, et al. Kernel least mean square with adaptive kernel size. Neurocomputing, 2016, 191: 95-106

[15] Shalev-Shwartz S. Online learning and online convex optimization. Foundations and Trends® in Machine Learning, 2011, 4(2): 107-194

[16] Vitter J S. Random sampling with a reservoir. ACM Transactions on Mathematical Software, 1985, 11(1): 37-57

[17] Zhao P, Jin R, Yang T, et al. Online AUC maximization//Proceedings of the 28th International Conference on Machine Learning. Bellevue, USA, 2011: 233-240

[18] Hu J, Yang H, King I, et al. Kernelized online imbalanced learning with fixed budgets//Proceedings of the 29th AAAI Conference on Artificial Intelligence. Austin, USA, 2015: 2666-2672

[19] Tropp J A. Greed is good: Algorithmic results for sparse approximation. IEEE Transactions on Information Theory, 2004, 50(10): 2231-2242

[20] Kivinen J, Smola A J, Williamson R C. Online learning with kernels//Proceedings of the Advances in Neural Information Processing Systems 14. Vancouver, Canada, 2001: 785-792

[21] Cesa-Bianchi N, Conconi A, Gentile C. On the generalization ability of on-line learning algorithms. IEEE Transactions on Information Theory, 2004, 50(9): 2050-2057

[22] Minh H Q. Some properties of Gaussian reproducing kernel Hilbert spaces and their implications for function approximation and learning theory. Constructive Approximation, 2010, 32(2): 307-338

计算机学报

[23] Sun Y, Gomez F, Schmidhuber J. On the size of the online kernel sparsification dictionary//Proceedings of the 29th International Conference on Machine Learning. Edinburgh, Scotland, 2012: 329-336

[24] Caponnetto A, De Vito E. Optimal rates for the regularized least-squares algorithm. Foundations of Computational Mathematics, 2007, 7(3): 331-368

[25] Hazan E. Introduction to online convex optimization. Foundations and Trends in Machine Learning, 2016, 2(3-4): 157-325

[26] Chang C C, Lin C J. LIBSVM: A library for support vector machines. ACM Transactions on Intelligent Systems and Technology, 2011, 2(3): 27:1-27:27

ZHANG Xiao, born in 1989, Ph. D. candidate. His research interests include online learning, kernel methods and model selection.

LIAO Shi-Zhong, born in 1964, Ph. D., professor, Ph. D. supervisor. His research interests include artificial intelligence, machine learning and theoretical computer science.

《计算机学报》

Background

Online kernel selection is a fundamental problem of online kernel learning. The performance of online kernel methods greatly depends on kernel selection. In contrast to offline kernel selection, online kernel selection is a completely different problem that requires intermixing kernel learning and kernel selection at each round. The traditional kernel selection criteria cannot be directly applied to online kernel selection.

Recently, several online kernel selection methods have been proposed. But they have at least quadratic time complexities with respect to the data size and suffer from low efficiencies. Besides, the performances of the existing online kernel methods are dependent upon the initial kernel that is difficult to select.

The main contribution of the paper is to propose a general online kernel selection method with theoretical guarantees and efficient computation. We introduce the notion of Local Regret and propose a new framework for online kernel selection, in which the buffer updating is the key ingredient. We formulate a novel budget maintenance strategy for buffer updating under a fixed budget, which is suitable for incremental computation of online kernel selection criterion in linear time complexity with respect to the budget at each updating step. The hypothesis updating is not just a direct application of stochastic gradient descent, we use the surrogate examples to compensate the selected model after the replacement of the arrived examples is conducted when the budget is reached. The proposed online kernel selection method bounds the expected risk of the hypothesis sequences and enjoys a sublinear regret bound, the performance of which does not depend on the initial kernel.

This paper is supported by the National Natural Science Foundation of China under Grant No. 61673293, which aims at a systematic and in-depth theory, statistically unbiased methods and computationally efficient tools for the model selection of large-scale kernel methods for both batch and streaming data.