DOI:10.3969/j.issn.1673-4785.201403067
网络出版地址:http://www.cnki.net/kcms/doi/10.3969/j.issn.16734785.201403067.html

面向大数据流的半监督在线多核学习算法

张钢,谢晓珊,黄英,王春茹
(广东工业大学 自动化学院,广东 广州 510006)

摘 要:在机器学习中,核函数的选择对核学习器性能有很大的影响,而通过核学习的方法可以得到有效的核函数。提出一种面向大数据流的半监督在线核学习算法,通过当前读取的大数据流片段以在线方式更新当前的核函数。算法通过大数据流的标签对核函数参数进行有监督的调整,同时以无监督的方式通过流形学习对核函数参数进行修改,以使得核函数所体现的等距面尽可能沿着数据的某种低维流形分布。算法的创新性在于能同时进行有监督和无监督的核学习,且不需要对历史数据进行再次扫描,有效降低了算法的时间复杂度,适用于在大数据和高速数据流环境下的核函数学习问题,其对无监督学习的支持有效解决了大数据流中部分标记缺失的问题。在 MOA 生成的人工数据集以及 UCI 大数据分析的基准数据集上进行算法有效性的评估,其结果表明该算法是有效的。

关键词:大数据流;在线多核学习;流形学习;数据依赖核;半监督学习
中图分类号: TP18 **文献标志码**:A **文章编号**:1673-4785(2014)03-0355-09

中文引用格式:张钢,谢晓珊,黄英,等. 面向大数据流的半监督在线多核学习算法[J]. 智能系统学报, 2014, 9(3): 355-363.
英文引用格式: ZHANG Gang, XIE Xiaoxian, HUANG Ying, et al. An online multi-kernel learning algorithm for big data[J]. CAAI Transactions on Intelligent Systems, 2014, 9(3): 355-363.

An online multi-kernel learning algorithm for big data

ZHANG Gang, XIE Xiaoshan, HUANG Ying, WANG Chunru
(School of Automation, Guangdong University of Technology, Guangzhou 510006, China)

Abstract: In machine learning, a proper kernel function affects much on the performance of target learners. Commonly an effective kernel function can be obtained through kernel learning. We present a semi-supervised online multiple kernel algorithm for big data stream analysis. The algorithm learns a kernel function through an online update procedure by reading current segments of a big data stream. The algorithm adjusts the parameters of currently learned kernel function in a supervised manner and modifies the kernel through unsupervised manifold learning, so as to make the contour surfaces of the kernel along with some low dimensionality manifold in the data space as far as possible. The novelty is that it performs supervised and unsupervised learning at the same time, and scans the training data only once, which reduces the computational complexity and is suitable for the kernel learning tasks in big datasets and high speed data streams. This algorithm's support to the unsupervised learning effectively solves the problem of label missing in big data streams. The evaluation results from the synthetic datasets generated by MOA and the benchmark datasets of the big data analysis from the UCI data repository show the effectiveness of the proposed algorithm.

Keywords: big data stream; online multi-kernel learning; manifold learning; data-dependent kernel; semi-supervised learning

随着信息技术的快速发展和大规模应用,数据的生成速度及存储规模也在快速增长,特别是 Web 页面、社交网络及物联网的普及和应用,使人们所要

收稿日期:2014-03-25. **网络出版日期**:2014-06-14.
基金项目:国家自然科学基金资助项目(81373883).
通信作者:张钢. E-mail:ipx@gdut.edu.cn.

存储、处理和分析的数据规模以指数方式递增。如谷歌搜索引擎在 2008 年索引的网页个数突破 1 万亿个,沃尔玛最近构建的一个数据仓库的数据规模达到 4 PB。在此背景下对大数据的分析和挖掘成为当前的热点研究主题[1]。从算法的层面来看,大数据的机器学习和分析挖掘问题,主要存在以下的问题:

1)数据规模巨大,体现在数据记录个数及维度上,对于很多大数据分析问题,即使是多项式时间复杂度的机器学习算法也不能在人们可接受的时间内得到结果。

2)由于数据集比计算机内存大,导致无法在训练学习器时加载整个训练集,或是出于应用环境的限制,在训练学习器时不能获取整个数据集,数据记录可能按某种速率到来,而且数据产生的规律性会随着时间变化而有所改变。

要解决问题 1),主要从 2 个途径去考虑,其一是降低现有分析算法的时间复杂度,采取一些近似算法,在复杂度和精度方面取得折衷,如 Yang 等[2]提出了一种决策树快速增量学习方法,通过对决策树的属性选择指标进行近似,使算法能适用于数据流和超大型数据集,其性能和普通版本的决策树相比并没有明显的下降;Jordan[3]对大数据统计推断进行了回顾,并针对大数据分而治之的算法提出了 2 种设计方法,其中重采样策略是对完整训练集的近似,而分治策略把大数据集数据间的相互关系限制在较小的范围内,最终目的是降低算法的复杂度;其二是对现有算法进行修改,转化为可以并发/并行计算的版本,并利用云计算开发工具,如 MapReduce 编写可以在云计算平台上运行的程序,通过计算云的强大运算能力,使算法能在可接受的时间内解决大数据分析问题,如 Acar 等[4]在 MapReduce 框架中实现了自适应计算的数据流分析算法,通过维护一个数据表跟踪数据集不同部分计算之间的依赖关系,当需要更新时仅需考虑有关联的部分数据,算法有相对较佳的运行效率;Ari 等[5]设计了面向数据流的相关分析和关联规则挖掘的云计算算法,能够以批处理和在线的方式把相关分析和关联规则挖掘的任务透明分配到计算云的不同部分,同时计算然后再进行整合。

对于问题 2),目前主要解决思路是设计出以往机器学习和挖掘算法的在线学习版本。在线学习原是机器学习的一个研究分支,其目标数据样本以顺序的方式输入学习器,且不对历史数据样本进行保存,算法通过对当前输入的样本进行分析,同步更新学习器,其中神经网络中的感知器模型就是在线学习的经典例子[6]。由于在线学习不用保存以往的数据样本,或仅需保存以往数据样本的某种充分统计量,十分适合大数据分析的应用场景。对于超大型数据集,以顺序方式输入模型,并同步更新学习器;对高速数据流,在线学习可以实现数据的边输入边学习,使学习器模型能够反映出最近一段时间的输入数据规律并进行有效预测。

本文研究大数据环境下的在线核学习(online kernel learning)算法。与传统在线学习不同,本文的工作主要针对大数据流中的核函数学习问题,算法并不直接通过数据样本的分析对学习器进行更新,而是通过在线学习以迭代的方式确定一个最适用于当前数据产生规律的核函数。本文认为,核函数的学习比直接训练学习器有更广泛的适用性,一个合适的核函数可以被嵌入到各种不同核学习器的训练过程,也可以直接用于核主成份分析(kernel PCA)、相关性分析(kernel CCA)或聚类分析等领域。因此,一个有效适用于大数据环境下的核学习算法有重要应用价值。

目前被公开报道的在线核学习研究工作并不多,虽然核学习被广泛用于机器学习的不同应用领域,但核函数的学习问题由于其对分析目标的间接性影响,在大数据分析和挖掘领域中并没有被充分研究,因此研究大数据环境下的核函数学习问题对其他大数据机器学习任务有重要的基础性意义。

本文提出一种适用于大数据流的在线核学习算法,在现有多核学习框架中结合数据依赖核的构建方法,同时进行有监督学习和无监督学习,对于高速数据流中的有标记数据使用一种类似感知器训练的学习策略进行有监督核函数学习,对于所有数据(包括有标记和无标记数据)进行基于数据依赖核的核函数更新策略,实质上进行一种无监督学习,不需要存储和重新扫描历史数据,仅需通过选择的方式维持一个样本工作集,在读取新的数据样本时能以较低的时间复杂度直接更新当前的核函数,适用于大数据环境下的核学习问题,特别是高速大数据流中标记缺失的情形。

1 在线核学习的相关工作

核函数学习问题是机器学习研究中的一个分支方向,通过机器学习的方法学习一个针对特定应用背景的核函数,能够大幅提高训练学习器的效果。Gönen

等[7]回顾了目前的主要多核学习算法,指出大多数算法所得到核函数组合对学习器的影响差别不大,但是在学习算法的时间复杂度及核函数组合的稀疏性方面却有很大差异,这种差异性在处理大数据的多核学习问题时必须考虑。他们的工作表明通过非线性和数据依赖的方式进行核函数的组合具有更好的性能,数据依赖的核函数修正方式适合于高速无标记的数据流,这是本文在线核学习方法的一个出发点。Orabona 等[8]提出了一种多核学习的快速算法,能够通过参数控制所生成核的稀疏程度,算法即使在待组合的核数量很大的情况下仍然能够快速收敛,且模型训练的时间复杂度仅是训练样本的线性函数。该工作大大减轻了核学习的算法复杂度,并能控制核的稀疏和与数据拟合的程度,有很重要的理论和应用价值。但该工作并不完全适用于大数据,特别是高速数据流,其原因是它并非一种增量更新算法,而是一种批处理的优化方法。此外,该方法是一种有监督的核学习方法,并不能处理无标记的数据样本,而在大数据流中数据样本的标记缺失十分常见,因此核学习器的无监督学习能力非常重要。

针对数据流学习和模型的增量更新问题,研究者们对在线学习进行了深入研究,其中值得关注的研究工作是 Jin 等[9]提出的在线核学习框架,他们系统地提出了在线多核学习问题理论及其算法。针对核函数和核学习器的增量更新问题,他们提出了使用确定和随机 2 种方法进行更新,其中随机更新需要结合一定的采样策略进行。他们的工作对于基本核函数较多的情况下是有效的,但仅在有监督学习中进行研究,即遇到一个新的样本,若当前模型分类正确,则不进行更新动作,否则按照一定的策略更新模型。该方法并不直接适用于大数据流环境下的多核学习问题,其主要问题是它不能适应数据流产生规律变化的情况,且当某些数据缺少标签时模型无法有效处理。

本文认为要解决此问题需要同时考虑数据标签和数据的空间分布,使用增量学习的方法同步更新模型,这也是在当前很多大数据学习算法中所采用的策略。如 Qin 等[10]提出了一种适用于云计算增量梯度下降算法,解决大数据环境下带线性约束的凸优化问题。Yang 等[2]提出了决策树的增量学习近似算法,可以在没有历史训练数据的情况下通过在线学习的方式直接更新决策树模型。但这些工作均是直接针对学习器进行增量更新,其方法并不直接适用于本文的核函数学习问题。

2　面向大数据的多核学习算法

首先形式化描述多核学习问题,然后再给出带有数据依赖的多核学习问题,并给出在线学习版本的算法。核学习所解决的问题是直接从训练数据集(有标记或无标记)中学习参数化或半参数化的核函数,使其能充分反映数据所蕴含的分布规律。给定一系列的训练样本 $D_L = \{(x_i, y_i) \mid i = 1,2,\cdots, n\}$,其中 x_i 为属性集,$y_i \in \{-1, +1\}$ 为分类标记,给定一个包含 m 个基本核函数的集合 $K_m = \{k_j(\cdot,\cdot): X \times X \to R, j = 1,2,\cdots,m\}$,学习一组非负权值 $u = \{u_1, u_2, \cdots, u_m, \sum_i u_i = 1\}$,使核学习器在测试集上的分类错误最小化。由于权值非负,根据核函数的性质可知,核函数的凸组合仍为一个有效的核函数。该问题可以形式化描述为

$$\min_{f \in H_K} \| \boldsymbol{f} \|_{H_K}^2 + C \sum_{i=1}^{n} l(f(x_i), y_i) \quad (1)$$

式中:l 为 Hinge Loss 损失函数,定义为 $l(a,b) = \max(0, 1 - ab)$,H_K 为核函数 K 所张成的希尔伯特空间,C 控制模型复杂度与损失惩罚比重的参数。求解该优化问题的时间复杂度比较高,这是由于其中包含 2 步优化,第 1 步选择一个 u,确定一个核函数 $K = \sum_{i=1}^{m} u_i k_i$,从而确定了 H_K;第 2 步在 H_K 中寻找最简单的且在当前训练集中正确率最高(由 C 控制)的学习器 f,这 2 个目标分别对应式(1)中的 2 项。若核函数确定,则寻找满足 2 个条件的 f 的问题可以直接求解,如 SVM 模型则属于此种情况。但若核函数是通过参数 u 来对若干基核函数进行加权组合,要求最优的 u 和 f,则问题变得很有挑战性,特别是在大数据学习环境中,此类问题基本上不可能在可接受的时间内求得最优解。

若通过限制基本核函数的个数或 u 中各分量的取值范围,则会牺牲多核学习的优势,且没有从根本上解决多核学习的问题。可以认为,在没有更好的求解算法的情况下,在线学习对上述问题是一种较好的求解策略。

2.1　在线多核学习

为了进行在线学习,需要重新考虑式(1)。Jin 等[9]的工作表明,当所学习的核函数为某个基本核函数集合的线性组合时,式(1)的最优化问题可以转化为如下问题:先求出每个核函数 k_i 在各自张成的希尔伯特空间 H_{k_i} 上最优的 f_i,然后寻找一组权值 u,使这些 f_i 的组合最优,在寻找最优的过程中同步更新权值和 f_i。换句话说,若核函数的组合为线

性时,在线多核学习问题可以两步求解,先使用基础的训练集为每一个核函数训练一个学习器,之后使用这些学习器进行在线学习,每读入一个训练样本时,根据当前的加权组合学习器对当前训练样本的输出结果,使用一种策略更新该核函数的权值和所对应的单个学习器,则最优的核函数为各个核函数使用该最优权值的加权组合体。即式(1)可以转化为以下问题:

$$\min_{u,f_i\in H_{K_i}}\max_{\alpha\in[0,C]^{\mathrm{T}}}\sum_{i=1}^{m}u_i\ \|\boldsymbol{f}_i\|^2_{H_{K_i}}+\sum_{t=1}^{T}\alpha_t\Big(1-y_t\sum_{i=1}^{m}u_i f_i(x_t)\Big)\tag{2}$$

图 1 描述了上述求解过程的主要步骤。

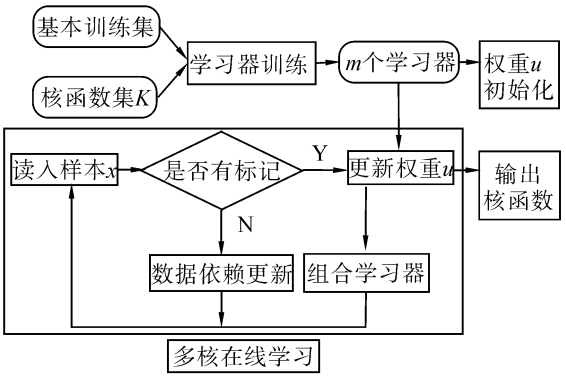


图 1 多核在线学习算法的主要框架

Fig.1 The main framework of online multiple kernel learning

对式(2)进行分析可知,由于各个 f_i 之间没有关联,因此 f_i 的最优值可以单独求出,再用类似感知器的权值更新算法求解最优的组合权值 u。由 Representer 定理可知,使式(2)最优的 f_i 必定满足

$$f_i(\cdot)=\sum_{j=1}^{n}\alpha_j y_j k_i(x_j,\cdot)\tag{3}$$

式(3)给出了一种在线学习 f_i 的方法,当读入一个训练样本时,先判断 f_i 能否给出正确的标签,然后采用 $f_i=f_i+\varphi y_x k_i(x,\cdot)$ 更新,其中 φ 为指示函数,当 f_i 对 x 正确分类时其值为 1,反之为 0。Jin 等在文献[9]中实现了上述思想。算法 1 描述了整个过程。

算法 1 在线多核学习

输入:

核函数集合:$K_m=\{k_1,k_2,\cdots,k_m\}$

初始化学习器:$\boldsymbol{F}=\{f_1,f_2,\cdots,f_m\}$

更新因子:$\beta\in(0,1)$

最大分类错误的容忍水平:e

当前的权重向量:u

有标记数据样本:(x,y)

输出:更新后的权重 u

1) $y^*=\mathrm{sign}(\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\cdot\boldsymbol{F}(x))$

2) if $y^*=y$ then

3) $\varphi=0$

4) else

5) $\varphi=1$

6) end if

7) for $i=1,2,\cdots,m$ do

8) $p=\varphi(\min(e,-y\boldsymbol{f}_i^{\mathrm{T}}(x)+0.5))$

9) $u_i=u_i\beta^p$ //更新 u

10) $\boldsymbol{f}_i=\boldsymbol{f}_i+\varphi y k_i(x,\cdot)$

11) end for

12) return u

算法 1 在输入有标记数据样本时,同时更新核权重和每个核所对应的学习器。当样本被当前学习器分类正确时,φ 为 0,此时不执行更新动作;若分类错误,则减少该学习器的权重,见算法 1 的第 8)和第 9)行。第 10)行根据 Representer 定理对每个核所对应的最优学习器进行调整。最大错误容忍水平 e 控制以多大的力度去惩罚被学习器错分的样本。

由于仅对训练数据集进行一次扫描,算法 1 并不能达到离线批处理学习器的性能。但可依据感知器训练过程对算法 1 的收敛性分析如下。算法第 10)行对各个 f_i 进行更新,且各个 f_i 相互独立,相当于 m 个独立的感知器训练过程,当输入样本线性可分时,各个 f_i 可以收敛于当前训练集下的最优学习器,进而确定其最优组合;当输入样本线性不可分时,其收敛性依赖于各个学习器的核函数,一般情况下并不收敛于最优解,但实验部分的第 4 组实验说明经过一段时间后学习器的性能会趋于稳定,逼近一个可接受的较优解。

2.2 基于数据依赖的核函数修改

数据依赖核[11]是一种无监督的核函数学习方法,实质是对核函数在训练样本集上的值进行修改,使其所反映的在可见数据样本上的距离更加符合数据样本点的空间分布,而不考虑样本标签。它可以对任意现有核函数根据可见的数据样本进行修改,实质是对由核函数所诱导的希尔伯特空间的内积进行修改[12]。首先给出数据依赖核的主要结论,然后再提出针对大数据和高速数据流的数据依赖核在线核学习算法。

给定一个核函数 k 和一个数据集 $D=\{x_1,x_2,\cdots,x_n\}$,记 $k_{x_i}=(k(x_i,x_1),\cdots,k(x_i,x_n))$,$\boldsymbol{M}=$

$(\sum_i W_{ij} - W)^p$，k 关于 D 的 Gram 矩阵记为 $\boldsymbol{k}_D$，$W_{ij} = \mathrm{RBF}(x_i, x_j)$，$x_i, x_j \in D$。则可以通过式(4)的方式对核函数 k 进行修改,使其等距线沿 D 进行分布:

$$\boldsymbol{k}_D(a,b) = \boldsymbol{k}(a,b) - \boldsymbol{k}_a^{\mathrm{T}} (\boldsymbol{I} + \boldsymbol{M}\boldsymbol{K}_D)^{-1}\boldsymbol{M}\boldsymbol{k}_b \quad (4)$$

其中 a 和 b 为任意 2 个训练样本, M 是一个在原点对称的距离矩阵,按文献[12]的方法用图拉普拉斯矩阵计算得到。整个过程中并没有考虑数据的标签,仅是通过考虑数据的密度分布,对原有核函数的值进行修改。

式(4)的计算需要离线批量进行,且计算的时间复杂度较高,具体而言,式(4)在修改数据样本 a 和 b 的核函数值时要计算 $\boldsymbol{k}_a$ 和 $\boldsymbol{k}_b$,即 a 和 b 与当前可见数据集的核函数 $\boldsymbol{k}$ 值。当可见数据不变时, $\boldsymbol{M}$ 和 $\boldsymbol{k}_D$ 这两项只需计算一次,但对数据流而言, $\boldsymbol{M}$ 和 $\boldsymbol{k}_D$ 是在不断变化的。但可以肯定的一点是,对于大规模数据集和数据流,直接计算整个数据集的 $\boldsymbol{M}$ 和 $\boldsymbol{k}_D$ 在计算资源上并不现实。

因此考虑 $\boldsymbol{M}$ 和 $\boldsymbol{k}_D$ 的在线更新策略,采用限制 $\boldsymbol{M}$ 和 $\boldsymbol{k}_D$ 的规模为 $N \times N$,则必须有 D 中的数据样本替换策略。借鉴操作系统中内存页面的调度算法,对静态的大数据集应用类似近期最少使用(least recently used, LRU)的样本更新策略[13],而对于高速数据流应用先进先出(first in first out, FIFO)更新策略[13],其中 LRU 是替换最近一段时间没有被使用过的样本,由于样本各不相同,本文采用聚类意义下的样本使用统计。这两种策略的合理性基于以下分析。对于静态大数据集,虽然数据是顺序地输入到学习器中,但其数据到达顺序和时序不相关,因此不能使用与时间密切相关的 FIFO 策略,而采用 LRU 策略较为合理;对于数据流,其数据生成规律有可能随时间变化而变化,因此替换存在时间最长样本的 FIFO 策略是合理的。同时,数据依赖核是通过对数据的分布估计对核函数进行修改,计算这种分布需要对一定规模的数据点进行分析,因此维持一个工作集 $\boldsymbol{M}$ 是必须的,它可被看作一个缓存,反映近一段时间的数据分布规律。这种限制工作集大小的更新策略有一定的局部性,但在有限的计算和存储资源下是折衷的策略。

算法维持一个不考虑标签的样本集 D 并进行在线更新。$\boldsymbol{k}_a$ 和 $\boldsymbol{k}_b$ 的计算步骤是先查表 $\boldsymbol{k}_D$,若不命中再计算,时间复杂度为 $O(N)$。对于 $\boldsymbol{M}$ 和 $\boldsymbol{k}_D$,替换样本之后需要重新计算一行,然后更新一行和一列,因此其时间复杂度也为 $O(N)$。算法初始时计算 $\boldsymbol{M}$ 和 $\boldsymbol{k}_D$ 的时间复杂度为 $O(N^2)$。

一个重要问题是 LRU 和 FIFO 中对输入样本的时间属性记录,对 LRU 还有聚类意义下最近被使用样本的判断。本文首先用聚类的方式产生数据集 D 的 r 个簇,应用在线聚类的方式更新这 r 个簇,替换样本时每次从最久没有被更新过的簇中随机选取一个样本进行替换,使用一个长度为 r 优先队列记录每个簇最近被访问的情况。对于 FIFO 策略,不需要优先队列,每次把新加入的样本放在最下行和最右列,然后去掉第 1 行第 1 列即可。算法 2 和算法 3 分别描述了静态大数据集和流数据集 2 种情况下的数据依赖核的在线学习过程。

算法 2 使用一个优先队列记录样本簇最近被访问的情况,认为一个簇中的样本被访问过一次,则该簇最近被访问过,核矩阵的更新从第 7 至 10 行,需要对所有样本扫描一次,时间复杂度是 $O(N^2)$,优先队列的操作需要 $O(r)$,其中 r 为簇的个数,判断 x_0 属于哪个簇的粗糙算法需要 $O(r)$ 时间,整体的时间复杂度为 $O(N^2)$。

算法 2　大数据集的数据依赖核在线学习

输入:

数据样本集: $D = \{x_1, x_2, \cdots, x_N\}$

当前输入样本: x_0

核函数 Gram 矩阵和距离矩阵: $\boldsymbol{K}$、$\boldsymbol{M}$

样本空间聚类分布: $\boldsymbol{L}_C$

记录簇最近访问的优先队列: $\boldsymbol{Q}$

输出: 更新后的核矩阵: $\boldsymbol{K}$

1) $r = \mathrm{clus}(L_C, x_0)$ //查找样本 x_0 的簇号

2) 根据 r 更新优先队列 $\boldsymbol{Q}$

3) 把 x_0 加到簇 r 中

4) 在优先队列 $\boldsymbol{Q}$ 的队尾所示的簇中随机去掉一个样本

5) 初始化 $\boldsymbol{k}_{x_0}$

6) 令 $\boldsymbol{k}_1 = (\boldsymbol{k}(x_0, x_1), \cdots, \boldsymbol{k}(x_0, x_N))$

7) for $j = 1, \cdots, N$ *do*

8) $\boldsymbol{k}_2 = \boldsymbol{K}(j, \cdot)$

9) $\boldsymbol{k}_{k_0} = \boldsymbol{k}_1 - \boldsymbol{k}_1^{\mathrm{T}} (\boldsymbol{I} + \boldsymbol{M}\boldsymbol{K})^{-1}\boldsymbol{M}\boldsymbol{k}_2$

10) end for

11) 用 $\boldsymbol{k}_{x_0}$ 更新矩阵 $\boldsymbol{K}$ 中关于 x_0 的一行和一列

12) return $\boldsymbol{K}$

算法 3　流数据集的数据依赖核在线学习

输入:

数据样本集 $D = \{x_1, \cdots x_N\}$

当前输入样本: x_0

核函数 Gram 矩阵和距离矩阵：$\boldsymbol{K}$、$\boldsymbol{M}$

输出：更新后的核矩阵 $\boldsymbol{K}$

1）初始化 k_{x_0}

2）$\boldsymbol{k}_1 = (k(x_0,x_1),\cdots,k(x_0,x_N))$

3）for $j = 1,\cdots,N$ do

4）$\boldsymbol{k}_2 = \boldsymbol{K}(j,\cdot)$

5）$\boldsymbol{k}_{x_0} = \boldsymbol{k}_1 - \boldsymbol{k}_1^T (I + \boldsymbol{MK})^{-1}\boldsymbol{Mk}_2$

6）end for

7）用 k_{x_0} 更新矩阵 $\boldsymbol{K}$ 中的最后一行和最后一列

8）return $\boldsymbol{K}$

对于数据流在线核学习问题，采用 *FIFO* 策略，即每次把当前的数据样本替换时间最长的数据样本，因此算法 3 中不需要优先队列。

算法 4 半监督在线多核学习 SSL-MKL

输入：

初始训练数据集 D_0 输入数据样本集，$D = \{x_i,y_i\}$，x_i 是样本，y_i 是其标签

输出：更新后的核矩阵 $\boldsymbol{K}$

1）初始化 $\boldsymbol{K}$

2）使用批处理算法由 D_0 学习 $\boldsymbol{K}$

3）for each (x_i,y_i) in D

4）if L_i is not NULL then

5）Call 算法 1(x_i,y_i)

6）更新 $\boldsymbol{K}$

7）end if

8）if 静态大数据集 then

9）Call 算法 2$(\boldsymbol{K},\boldsymbol{D}_0,\boldsymbol{M},x_i,L_C,Q)$

10）else if 数据流 then

11）Call 算法 3$(\boldsymbol{K},\boldsymbol{D}_0,\boldsymbol{M},x_i)$

12）end if

13）更新 $\boldsymbol{K}$

14）end for

15）return $\boldsymbol{K}$

为了把在线多核学习和数据依赖进行结合，算法每读入一个数据样本 x，判断是否有标签，若有标签，则先执行多核学习的权重值更新，再执行基于数据依赖的核修改；若没有标签，则仅执行核修改（算法 2 和算法 3）。核修改是针对加权之后的核函数进行。算法 4 描述了 2 部分核学习的结合过程。

3 实验结果及分析

在人工数据集和大数据学习的基准数据集上对本文算法进行有效性评估，并与现有的算法进行比较。人工数据集使用 MOA[14] 的序列生成器自动生成，在实验中共生成了 3 个规模不同的人工数据集，由 MOA 所生成的人工数据集被广泛用于大数据算法有效性的评估工作中[15-16]。基准数据集采用 UCI 数据集[19] 中的数据集。实验中选取 MOA 提供的其中 3 个生成器生成不同的人工数据集，蕴含不同的数据生成规律。表 1 和 2 分别展示了人工数据集和 UCI 基准数据集的主要信息。MOA 序列生成器生成的 3 个人工数据集，以数据记录生成时间顺序保存在 3 个单独的数据文件中，在线多核学习时顺序读取文件中的数据进行训练和测试。2 个 UCI 数据集中的数据随机重排之后按顺序读入。其中数据集 M1 生成 20 份，规模从 $10^6 \sim 2\times10^7$，用于评估数据集规模与 CPU 处理时间的增长关系。

表 1 MOA 实验数据集的主要信息

Table 1 Details of MOA data sets

编号	生成器类型	大小	属性个数
M1	WaveForm	$10^6 \sim 2\times10^7$	21
M2	RandomRBF	10^6	37
M3	SEA Concepts	10^6	25

表 2 UCI 实验数据集的主要信息

Table 2 Details of UCI data sets

编号	数据集描述	大小	属性个数
M4	Forest CoverType	581012	54
M5	Poker-Hand	10^7	11

在上述 5 个数据集上进行 3 组实验。第 1 组实验评估本文的半监督在线多核学习算法（semi-supervised learning - multiple kernel learning, SSL-MKL）的有效性，并与文献[17]中的批处理多核学习算法及文献[9]、[18]中的有监督在线多核学习算法进行比较。第 2 组实验分析本文算法对不同规模数据集处理的 CPU 运算时间增长与数据集大小之间的关系。第 3 组实验评估本文算法的迭代次数与学习器性能的变化关系，从而说明其收敛性能。

在 3 组实验中均采用参数随机的 RBF 核、多项式核和三角函数核函数各 100 个，即 $m = 300$。第 1 组实验采用如下设置：对比的一般核函数采用参数随机的 RBF 核和多项式核，核学习器使用标准的 SVM，只进行二类分类，并采用 0-1 损失函数评估分类错误率。其中数据集 M1 的规模为 10^6。在 M 和 k_D 的更新算法中，限制其规模 N 为 1000 个样本。

第 1 组实验评估 SSL-MKL 算法有效性并与有监督的在线核学习算法进行比较，同时引入一个非在线学习的多核学习算法作为算法有效性的基线。表 3 给出了对比算法的基本信息。

表 3　实验对比算法的基本信息

Table 3　Details of evaluation methods for comparison

编号	参考文献	数据集	描述
F1	[17]	全部	采用感知器与 Hedge 算法融合的在线核学习算法,优化过程采用随机梯度下降法
F2	[9]	全部	在线多核学习算法,其基本原理同算法 1,但权重更新策略不同
F3	[18]	M4、M5	批处理多核学习算法

F1 与 F2 可以在 5 个实验数据集上运行,F3 不能运行在数据流集上,即只能在 M4 和 M5 上运行,因此可以把 M1、M2、M3 与 M4、M5 分别进行比较。

由于算法 F3 无法直接处理 M4 和 M5 这样大规模的数据集,只能采用随机抽样的方法,限制训练集的大小才可以使用批处理算法。本组实验对训练数据集进行无回放抽样,抽样规模为 10000。其余 2 个算法也在此抽样数据集上进行性能测试,对本文的 SSL-MKL 算法,从测试数据集中抽取同样规模的数据集作为算法的无标记数据。考虑到抽样的随机性,对批处理核学习进行 10 次抽样训练并记录 10 次的分类正确率的平均值。图 2 展示了在 M4 和 M5 上的实验结果。

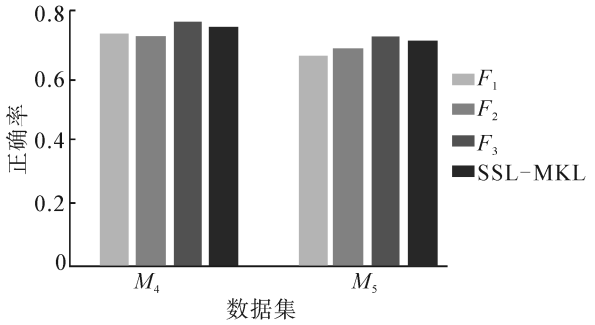


图 2　M4 和 M5 的实验结果(限制数据集规模)

Fig.2　The main framework of online multiple kernel learning

从图 2 中可以看到,SSL-MKL 不比 F3 差太多,但比 F1 和 F2 好,表明 SSL-MKL 对于规模受限制的数据集的性能较有监督的在线核学习算法(F1 和 F2)好,归功于 SSL-MKL 算法中的无监督学习对最终学习器性能提升的贡献,说明整个半监督学习框架的有效性。另一方面,注意到 3 个在线算法的性能均不如批处理算法 F3,这是可以理解的,因为在线学习算法每次仅能"看到"当前的训练样本,且基本上不存储(SSL-MKL 算法中的工作集仅是有限度存储),批处理方法在整个训练期间能访问所有的训练数据。因此可以接受在线学习方法性能稍差于批处理方法。但批处理方法难以处理大规模的数据集,正如本组实验的第 2 部分即将展示的(图 3),这正是在线学习方法的优势[20-21]。下面给出 F1、F2 与 SSL-MKL 在 M4 和 M5 整个数据集上的结果。训练集与测试集的规模按原数据集大小的 3:7,对于 SSL-MKL 采用转导学习的方式[22-23],即把整个测试集作为无标记集。同样对数据集进行 10 次随机划分,记录每次分类正确率并计算方差,图 3 给出了在数据集 M4 和 M5 上算法正确率的比较结果。

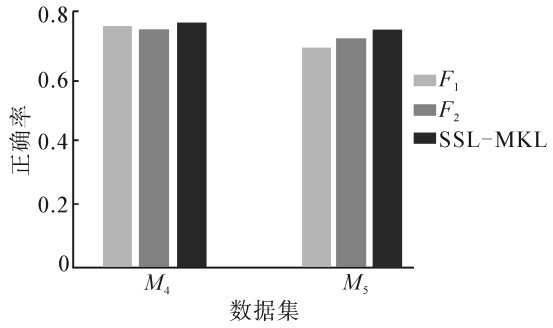


图 3　M4 和 M5 的实验结果(完整数据集)

Fig.3　Evaluation results of M4 and M5 (full data set size)

从图 3 中可看出,由于有完整的训练集,各个算法的正确率相比图 2 有所提升。SSL-MKL 算法相比 F1 和 F2 的提升幅度比限制规模数据集时更大,表明数据依赖核对于数据分布的估计能够提升核函数的性能。

最后给出数据流集(M1、M2、M3)的测试结果。测试过程是把训练样本按其顺序号依次输入学习模型进行训练;在接受测试样本时,SSL-MKL 同时进行无监督学习,而 F1 和 F2,则仅输出测试结果。由于数据集有顺序,截取前面的 30%作为训练集,后面 70%作为测试集。表 4 给出了实验中各算法在数据集上正确率的比较。

表 4　各算法在流数据集上正确率的比较

Table 4　Accuracy comparison on stream data sets

	M1	M2	M3
F1	0.731	0.788	0.775
F2	0.742	0.781	0.770
SSL-MKL	0.768	0.796	0.802

从表 4 中可知 SSL-MKL 算法在 3 个数据集上都有最好的表现。第 2 组实验分析本文算法对不同规模数据集处理的 CPU 运算时间增长与数据集大小之间的关系。为了精确控制实验数据集的规模,本组实验使用了 20 种规模依次等距递增的 M1 数据集(以 10^6 为递增单位),记录了 F2 和 SSL-MKL

算法的核学习时间,图 4 给出了运行时间对比。

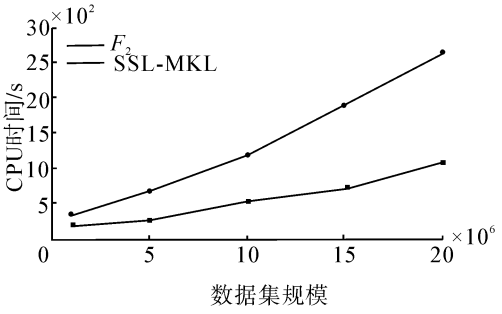


图 4 不同数据集规模下的算法运行时间比较

Fig.4 CPU Time comparison for different data set sizes

从图 4 中可以看出,SSL-MKL 算法的运算时间与数据集的规模成线性关系,并且 SSL-MKL 算法的有监督学习部分的复杂性与算法 F2 同阶,从图 4 中可以看出其运算时间的增长率与数据集规模有较好的线性关系,具有较好的可扩展性,能适用于更大规模的数据集的分析和应用问题。

第 3 组实验评估算法 SSL-MKL 的迭代次数与学习器性能的变化关系,从而说明其收敛性。设置测试集为整个数据集的 5%,通过随机有回放抽取的方式生成。训练集为整个数据集的 30%,与第 1 组实验相同。每输入 5%的训练数据,运行一次测试并记录结果。上述过程重复 10 次取平均正确率。并以 F3 在限制数据集规模的实验(第 1 组)中的正确率作为基线进行对比。图 5 给出了在 M4 数据集上算法正确率迭代收敛性的实验结果。

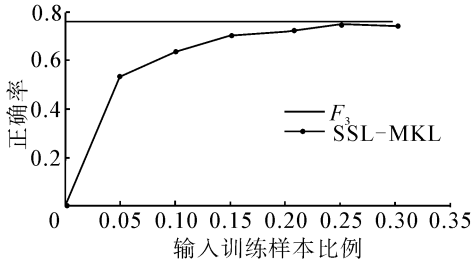


图 5 算法正确率的收敛性

Fig.5 The convergence of accuracy of the proposed algorithm

在图 5 中,F3 表示离线批处理核学习方法得到的核函数在 SVM 上的测试正确率曲线,SSL-MKL 代表本文方法。每输入一个样本算法 1 就会运行一次,核函数同时更新一次。从图 5 中可以看出,在开始阶段,仅需读入少量样本(5%),SSL-MKL 的正确率会大幅上升,随后会比较稳定收敛于一个较优的值。当输入数据的内在生成规律相对稳定时,SSL-MKL 对核函数的更新会在一段时间内(如图 5 中输入 15%数据之后)稳定下来,从而产生较稳定的测试结果。

4 结束语

大数据环境下的多核学习问题是大数据机器学习的一个基础性问题,比单纯通过改进训练算法效率构建学习器有更重要的意义。本文提出了一种适用于大数据环境下的在线多核学习算法,考虑了数据的有监督信息以及数据的空间分布,并应用数据依赖核的构建方法,对所学习得到的核函数进行无监督修正,使其具有更好的泛化能力。算法基于在线学习的框架进行增量学习,仅需对训练数据进行一次扫描,就可以更新核函数,并不需要对历史数据进行保存。算法适用于高速数据流,以及训练数据规模很大以致不能全部加载到内存中的情形。在由著名的大数据流分析工具 MOA 生成的人工数据集和 UCI 的大数据集上进行算法有效性评估,表明了本文方法能学习得到与数据集规律相一致的核函数,在分类器上有较好的效果,且本文算法是一种在线学习算法,支持数据增量更新。此外,本文的算法能同时处理有标记和无标记数据,对于数据概念标记稀疏的高速数据流可以进行半监督学习,有很好的扩展性。

参考文献:

[1] GOPALKRISHNAN V, STEIER D, LEWIS H, et al. Big data, big business: bridging the gap[C]//Proceedings of the 1st International Workshop on Big Data, Streams and Heterogeneous Source Mining: Algorithms, Systems, Programming Models and Applications. Beijing, China, 2012: 7-11.

[2] YANG H, FONG S. Incrementally optimized decision tree for noisy big data[C]//Proceedings of the 1st International Workshop on Big Data, Streams and Heterogeneous Source Mining: Algorithms, Systems, Programming Models and Applications. Beijing, China, 2012: 36-44.

[3] JORDAN M I. Divide-and-conquer and statistical inference for big data[C]//Proceedings of the 18th ACM SIGKDD international conference on Knowledge discovery and data mining. Beijing, China, 2012: 4-4.

[4] ACAR U A, CHEN Y. Streaming big data with self-adjusting computation[C]//Proceedings of the 2013 Proceedings of the 2013 Workshop on Data driven Functional Programming. Rome, Italy, 2013: 15-18.

[5] ARI I, CELEBI O F, OLMEZOGULLARI E. Data stream analytics and mining in the cloud[C]//Proceedings of the 2012 IEEE 4th International Conference on Cloud Computing Technology and Science. Washington, DC, USA, 2012: 857-862.

[6] AGMON S. The relaxation method for linear inequalities

[J]. Canadian Journal of Mathematics, 1954, 6(3): 393-404.

[7] GONEN M, ALPAYD E. Multiple kernel learning algorithms [J]. Journal of Machine Learning Research, 2011 (12): 2211-2268.

[8] ORABONA F, JIE L, CAPUTO B. Multi kernel learning with online-batch optimization [J]. Journal of Machine Learning Research, 2012(13): 227-253.

[9] JIN R, HOI S C H, YANG T, et al. Online multiple kernel learning: algorithms and mistake bounds [J]. Algorithmic Learning Theory, 2010(6331): 390-404.

[10] QIN C, RUSU F. Scalable I/O-bound parallel incremental gradient descent for big data analytics in GLADE [C]// Proceedings of the Second Workshop on Data Analytics in the Cloud. New York, USA, 2013: 16-20.

[11] SINDHWANI V, NIYOGI P, BELKIN M. Beyond the point cloud: from transductive to semi-supervised learning [C]//Proceedings of the 22nd International Conference on Machine Learning. Bonn, Germany, 2005: 824-831.

[12] 李宏伟, 刘扬, 卢汉清, 等. 结合半监督核的高斯过程分[J]. 自动化学报, 2009, 35(7): 888-895.
LI Hongwei, LIU Yang, LU Hanqing, et al. Gaussian processes classification combined with semi-supervised kernels[J]. Acta Automatica Sinica, 2009, 35(7): 888-895.

[13] 邹恒明. 计算机的心智:操作系统之哲学原理[M]. 北京: 机械工业出版社, 2012: 100-102.

[14] BIFET A, HOLMES G, KIRKBY R, et al. MOA: massive online analysis[J]. Journal of Machine Learning Research, 2010(11): 1601-1604.

[15] KREMER H, KRANEN P, JANSEN T, et al. An effective evaluation measure for clustering on evolving data streams [C]//Proceedings of the 17th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. San Diego, California, USA, 2011: 868-876.

[16] BIFET A, HOLMES G, PFAHRINGER B, et al. Mining frequent closed graphs on evolving data streams[C]//Proceedings of the 17th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. San Diego, USA, 2011: 591-599.

[17] FRANCESCO O, LUO Jie, BARBARA C. Multi kernel learning with online-batch optimization[J]. Journal of Machine Learning Research, 2012(13): 227-253.

[18] STEVEN C H, RONG Jin, ZHAO Peilin, et al. Online multiple kernel classification [J]. Machine Learning, 2013, 90(2): 289-316.

[19] UCI 数据集: http://archive.ics.uci.edu/ml/ [EB/OL]. [2014-03-18].

[20] YANG Haiqin, MICHAEL R L, IRWIN K. Efficient online learning for multitask feature selection[J]. ACM Transactions on Knowledge Discovery from Data, 2013, 7(2): 6-27.

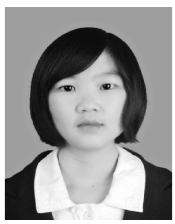
[21] CHEN Jianhui, LIU Ji, YE Jieping. Learning incoherent sparse and low-rank patterns from multiple tasks[J]. ACM Transactions on Knowledge Discovery from Data, 2012, 5 (4): 22-31.

[22] HONG Chaoqun, ZHU Jianke. Hypergraph-based multi-example ranking with sparse representation for transductive learning image retrieval [J]. Neurocomputing, 2013 (101): 94-103.

[23] YU Jun, BIAN Wei, SONG Mingli, et al. Graph based transductive learning for cartoon correspondence construction[J]. Neurocomputing, 2012(79): 105-114.

作者简介:

张钢,男,1979 年生,讲师,博士研究生,CCF 会员。主要研究方向为机器学习、数据挖掘和生物信息学,参与国家自然科学基金项目 1 项 ,广东省自然科学基金团队项目 1 项,获得软件著作权 2 项,专利 4 项。发表学术论文 40 余篇,其中被 SCI 检索 3 篇,EI 检索 20 余篇,



谢晓珊,女,1990 年生,硕士研究生,发表学术论文 3 篇,主要研究方向为机器学习、数据挖掘、模式识别和生物医学图像处理。