

机器学习の特征

I. 特征提取

- 信号表示
 - 描述 The goal of the feature extraction mapping is to represent the samples accurately in a low-dimensional space. 也就是说, 特征抽取后的特征要能够精确地表示样本信息, 使得信息丢失很小
 - 方法 PCA
- 信号分类
 - 描述 The goal of the feature extraction mapping is to enhance the class-discriminatory information in a low-dimensional space. 也就是说, 特征抽取后的特征, 要使得分类后的准确率很高, 不能比原来特征进行分类的准确率低
 - 方法 对于线性来说, 对应的方法是LDA

II. 特征选择

- a. 特征产生
 - 功能: 搜索特征子集的过程, 为评价函数提供特征子集
 - 算法分类
 - Complete(完全搜索)
 - BFS(广搜) 描述: 枚举了所有的特征组合, 属于穷举搜索, 时间复杂度是 $O(2^n)$, 实用性不高
 - Branch and Bound(分支限界搜索) 描述: 在穷举搜索的基础上加入分支限界。例如: 若断定某些分支不可能搜索出比当前找到的最优解更优的解, 则可以剪掉这些分支。
 - Beam Search(定向搜索) 描述: 首先选择N个得分最高的特征作为特征子集, 将其加入一个限制最大长度的优先队列, 每次从队列中取出得分最高的子集, 然后穷举向该子集加入1个特征后产生的所有特征集, 将这些特征集加入队列。
 - Best First Search(最优优先搜索) 描述: 与定向搜索类似, 唯一的不同点是不限制优先队列的长度。
 - Heuristic(启发式搜索)
 - SFS, Sequential Forward Selection(序列前向选择)
 - 描述: 特征子集X从空集开始, 每次选择一个特征x加入特征子集X, 使得特征函数f(X)最优。简单说就是, 每次都选择一个使得评价函数的取值达到最优的特征加入, 其实就是一种简单的贪心算法。
 - 评价: 缺点是只能加入特征而不能去除特征。例如: 特征A完全依赖于特征B与C, 可以认为如果加入了特征B与C则A就是多余的。假设序列前向选择算法首先将A加入特征集, 然后将B与C加入, 那么特征子集中就包含了多余的特征A。
 - SBS, Sequential Backward Selection(序列后向选择)
 - 描述: 从特征全集O开始, 每次从特征集O中剔除一个特征x, 使得剔除特征x后评价函数值达到最优。
 - 评价: 序列后向选择与序列前向选择正好相反, 它的缺点是特征只能去除不能加入。另外, SFS与SBS都属于贪心算法, 容易陷入局部最优值。
 - BDS, Bidirectional Search(双向搜索) 描述: 使用序列前向选择(SFS)从空集开始, 同时使用序列后向选择(SBS)从全集开始搜索, 当两者搜索到一个相同的特征子集C时停止搜索。
 - LRS, Plus-L Minus-R Selection(增L去R选择算法)
 - 类型
 - <1> 算法从空集开始, 每轮先加入L个特征, 然后从中去除R个特征, 使得评价函数值最优。(L > R)
 - <2> 算法从全集开始, 每轮先去除R个特征, 然后加入L个特征, 使得评价函数值最优。(L < R)
 - 评价: 增L去R选择算法结合了序列前向选择与序列后向选择思想, L与R的选择是算法的关键。
 - Sequential Floating Selection(序列浮动选择)
 - 描述: 序列浮动选择由增L去R选择算法发展而来, 该算法与增L去R选择算法的不同之处在于: 序列浮动选择的L与R不是固定的, 而是“浮动”的, 也就是会变化的。
 - 类型
 - SFFS, Sequential Floating Forward Selection(序列浮动前向选择) 描述: 从空集开始, 每轮在未选择的特征中选择一个子集x, 使加入子集x后评价函数达到最优, 然后在已选择的特征中选择子集z, 使剔除子集z后评价函数达到最优。
 - SFBFS, Sequential Floating Backward Selection(序列浮动后向选择) 描述: 与SFFS类似, 不同之处在于SFBFS是从全集开始, 每轮先剔除特征, 然后加入特征。
 - 评价: 序列浮动选择结合了序列前向选择、序列后向选择、增L去R选择的特点, 并弥补了它们的缺点。
 - DTM, Decision Tree Method(决策树) 描述: 在训练样本集上运行C4.5或其他决策树生成算法, 待决策树充分生长后, 再在树上运行剪枝算法。则最终决策树各分支处的特征就是选出来的特征子集了。决策树方法一般使用信息增益作为评价函数。
 - Random(随机搜索)
 - RGSS, Random Generation plus Sequential Selection(随机产生序列选择算法)
 - 描述: 随机产生一个特征子集, 然后在该子集上执行SFS与SBS算法。
 - 评价: 可作为SFS与SBS的补充, 用于跳出局部最优值。
 - SA, Simulated Annealing(模拟退火算法)
 - 描述: 模拟退火算法以一定的概率来接受一个比当前解要差的解, 因此有可能会跳出这个局部的最优解, 达到全局的最优解。
 - 评价: 模拟退火一定程度克服了序列搜索算法容易陷入局部最优值的缺点, 但若最优解的区域太小(如所谓的“高尔夫球洞”地形), 则模拟退火难以求解。
 - GA, Genetic Algorithms(遗传算法) 描述: 首先随机产生一批特征子集, 并用评价函数给这些特征子集评分, 然后通过交叉、突变等操作繁殖出下一代的特征子集, 并且评分越高的特征子集被选中参加繁殖的概率越高。这样经过N代的繁殖和优胜劣汰后, 种群中就可能产生了评价函数值最高的特征子集。
 - 随机算法的共同缺点: 依赖于随机因素, 有实验结果难以重现。
 - b. 评价函数
 - 功能: 评价一个特征子集好坏程度的一个准则
 - 类型
 - Filter(筛选器)
 - 描述: 与模型无关, 基于一些变特征的衡量标准(即给每一个特征打分, 表示这个特征的重要程度), 排序后除去那些得分较低的特征。
 - 类型
 - Correlation(相关性) 描述: 运用相关性来度量特征子集的好坏是基于这样一个假设: 好的特征子集所包含的特征应该是与分类的相关度较高(相关度高), 而特征之间相关度较低的(冗余度低)。
 - Distance Metrics(距离) 描述: 运用距离度量进行特征选择是基于这样的假设: 好的特征子集应该使得属于同一类的样本距离尽可能小, 属于不同类的样本之间的距离尽可能远。
 - Information Gain(信息增益) 描述: 信息增益或信息增益率
 - Consistency(一致性) 描述: 若样本1与样本2属于不同的分类, 但在特征A、B上的取值完全一样, 那么特征子集(A, B)不应该选作最终的特征集。
 - 优点: 计算时间上较高效, 对于过拟合问题具有较高的鲁棒性
 - 缺点: 倾向于选择冗余的特征, 因为他们不考虑特征之间的相关性, 有可能某一个特征的分类能力很差, 但是它和某些其它特征组合起来会得到不错的效果
 - Wrapper(封装器)
 - 描述: 假如有p个特征, 那么就会有 2^p 种特征组合, 每种组合对应了一个模型。Wrapper类方法的理想是枚举出所有可能的情况, 从中选取最好的特征组合。这种方式的问题是: 由于每种特征组合都需要训练一次模型, 而训练模型的代价实际上是很大的, 如果p非常大, 那么上述方式显然不具有可操作性。
 - 类型
 - Classifier error rate(错误分类率) 描述: 使用特定的分类器, 用给定的特征子集对样本集进行分类, 用分类的精度来衡量特征子集的好坏。
 - forward search(前向搜索) 描述: 初始时假设已选特征的集合为空集, 算法采取贪心的方式逐步扩充该集合, 直到该集合的特征数达到一个阈值, 该阈值可以预先设定, 也可以通过交叉验证获得。
 - backward search(后向搜索) 描述: backward search初始时假设已选特征集合F为特征的全集, 算法每次删除一个特征, 直到F的特征数达到指定的阈值或者F被删空。该算法在选择删除哪一个特征时和forward search在选择一个特征加入F时是一样的做法。
 - 优点: 考虑到特征与特征之间的关联性
 - 缺点: 1. 当观测数据较少时容易过拟合; 2. 当特征数量较多时, 计算时间增长。
 - Embedded(集成方法)
 - 描述: 旨在集合filter和wrapper方法的优点(时间复杂度较低, 并且也考虑特征之间的组合关系)
 - 类型
 - 正则化 描述: 可以见“简单易学的机器学习算法——岭回归(Ridge Regression)”, 岭回归就是在基本线性回归的过程中加入了正则项。我们知道L1正则化自带特征选择的功能, 它倾向于留下相关特征而删除无关特征。比如在文本分类中, 我们不再需要进行显示的特征选择这一步, 而是直接将所有特征扔进带有L1正则化的模型里, 由模型的训练过程来进行特征的选择。
 - 优点: 集合了前面两种方法的优点
 - 缺点: 必须事先知道什么是好的选择
 - c. 停止准则 功能: 与评价函数相关的, 一般是一个阈值, 当评价函数值达到这个阈值后即可停止搜索
 - d. 验证过程 功能: 在验证数据集上验证选出来的特征子集的有效性。