特征工程

Feature Engineering

Mr. Black

目录

- 数据预处理
- 特征变换和编码
- 特征提取，选择和监控

特征工程

在现实生活中，所有的事物都具有多种多样的属性（Attribute），例如：对于一个“人”，有性别，年龄，身高，体重等属性。在数据科学中，我们将一个所考察的对象的属性集合称之为特征（Feature）或特征集。特征工程（Feature Engineering）顾名思义是对特征进行一系列加工操作的过程，对于特征工程有多种不同的定义：

1. 特征工程是利用对数据的业务理解构建适合特定机器学习算法的特征的过程[1]。
2. 特征工程是将原始数据转换成特征的过程。这些特征能够更好的将根本问题表达表述成预测模型，同时利用不可直接观测的数据提高模型准确性[2]。
3. 特征工程就是人工设计模型的输入变量 x的过程[3]。

[1] Wikipedia, “Feature engineering.” https://en.wikipedia.org/wiki/Feature_engineering.
[2] Brownlee, “Discover feature engineering, how to engineer features and how to get good at it.” http://machinelearningmastery.com/discover-feature-engineering-how-to-engineer-features-and-how-to-get-good-at-it/.
[3] T. Malisiewicz, “What is feature engineering?.” https://www.quora.com/What-is-feature-engineering.

特征工程

从数据挖掘过程的角度，对“传统的”特征工程给出如下定义。特征工程就是指从原始数据（即通过现实生活中的实际业务发生产生的数据）加工得到最终用于特定的挖掘算法的输入变量的过程。此处之所以强调是“传统的”特征工程主要是用于区分其和近期基于深度学习等方法的自动特征生成。因此，据此本书将特征工程划分为如下几个阶段：

- 数据预处理
- 特征提取和选择
- 特征变换和编码
- 特征监控

数据预处理

数据清洗

在实际的项目中，数据从生产和收集过程中往往由于机器或人的问题导致脏数据的生成，这些脏数据包括缺失，噪声，不一致等等一系列问题数据。脏数据的产生是不可避免的，但在后期的建模分析过程中，如果直接使用原始数据进行建模分析，则得到的结果会受到脏数据的影响从而表现很差。

剔除处理

去重处理是指对于数据中重复的部分进行删除操作，对于一个数据集，我们可以从“样本”和“特征”两个角度去考虑重复的问题。

- 样本去重

从“样本”的角度，相同的事件或样本（即所有特征的值均一致）重复出现是可能发生的。但从业务理解的角度上考虑，并不是所有的情况都允许出现重复样本[1]，例如：我们考察一个班级的学生其平时表现和最终考试成绩之间的相关性时，假设利用学号作为学生的唯一标识，则不可能存在两个学号完全相同的学生。则这种情况下我们就需要对于重复的“样本”做出取舍。

[1] 暂时不考虑在采样过程中利用过采样方法产生的重复样本

剔除处理

对于如下学生属性的数据框，我们分别以“id”或“id”和“gender”两种不同唯一性判断标准对数据框进行重复值判断：

```
students <- data.frame(
    id = c(1, 2, 3, 3, 4, 4),
    gender = c('F', 'M', 'F', 'F', 'M', 'F')
)
dim(students) %>% print
```

```
## [1] 6 2
```

```
length(unique(students[, c('id')])) %>% print
```

```
## [1] 4
```

```
dim(unique(students[, c('id', 'gender')])) %>% print
```

```
## [1] 5 2
```

剔除处理

- 特征去重

从“特征”的角度，不同的特征在数值上有差异，但其背后表达的物理含义可能是相同的。例如：一个人的月均收入和年收入两个特征，尽管在数值上不同，但其表达的都是一个人在一年内的收入能力，两个特征仅相差常数倍。因此，对于仅相差常数倍的特征需要进行去重处理，保留任意一个特征即可。

- 常量特征剔除

对于常量或方差近似为零的特征，其对于样本之间的区分度贡献为零或近似为零，这些特征对于后面的建模分析没有任何意义。对于常量特征，我们可以通过如下方法进行识别：

```
students <- data.frame(
    id = c(1, 2, 3),
    gender = c('F', 'M', 'M'),
    grade = c(6, 6, 6),
    height = c(1.7, 1.81, 1.75)
)
sapply(students,
  function(x) length(unique(x))) %>% print
```

```
##      id gender  grade height
##       3      2      1      3
```

剔除处理

对于识别方差近似为零的特征，我们可以利用caret扩展包中的nearZeroVar函数，函数定义如下：

```
nearZeroVar(x, freqCut = 95/5, uniqueCut = 10, saveMetrics = FALSE,
    names = FALSE, foreach = FALSE, allowParallel = TRUE)
```

参数	说明	默认值
x	向量，矩阵或数据框	
freqCut	最高频次和次高频次样本数的截断比例	95/5
uniqueCut	非重复的样本占总体样本的截断百分比	10
saveMetrics	FALSE则返回常量和近似常量的列；TRUE则返回更过信息	FALSE
names	FALSE则返回列号；TRUE则返回列名	FLASE

剔除处理

我们利用nearZeroVar函数对上文中的学生的各个特征进行常量和方差近似为零的常量特征检查：

```
nearZeroVar(students)
```

```
## [1] 3
```

```
nearZeroVar(students, saveMetrics = T)
```

```
##         freqRatio percentUnique zeroVar   nzv
## id              1     100.00000   FALSE FALSE
## gender          2      66.66667   FALSE FALSE
## grade           0      33.33333    TRUE  TRUE
## height          1     100.00000   FALSE FALSE
```

其中，freqRatio为最高频次和次高频次样本数的比例，percentUnique为非重复的样本占总体样本的百分比，zeroVar表示是否是常量，nzv表示是否是方差近似为零的特征。

缺失值处理

缺失值是指数据中未被记录的特征值，在R语言中用NA表示。在机器学习模型中比不是所有的方法都接受包含缺失值的数据用于建模分析，因此，在分析建模前我们需要对数据中的缺失值进行处理。

最简单的检查数据缺失值的方法是利用summary函数对数据进行探索性分析，例如：对airquality数据集进行缺失值检测，该数据集统计了1973年5月到9月之间纽约每天的空气质量，包括臭氧（Ozone），日照（Solar.R），风力（Wind）和温度（Temp）。

```
summary(airquality[, 1:4])
```

```
##      Ozone           Solar.R          Wind             Temp      
##  Min.   :  1.00   Min.   :  7.0   Min.   : 1.700   Min.   :56.00  
##  1st Qu.: 18.00   1st Qu.:115.8   1st Qu.: 7.400   1st Qu.:72.00  
##  Median : 31.50   Median :205.0   Median : 9.700   Median :79.00  
##  Mean   : 42.13   Mean   :185.9   Mean   : 9.958   Mean   :77.88  
##  3rd Qu.: 63.25   3rd Qu.:258.8   3rd Qu.:11.500   3rd Qu.:85.00  
##  Max.   :168.00   Max.   :334.0   Max.   :20.700   Max.   :97.00  
##  NA's   :37       NA's   :7
```

缺失值处理

对于数据缺失的情况，Rubin[1]从缺失机制的角度分为3类：完全随机缺失（missing completely at random, MCAR），随机缺失（missing at random）和非随机缺失（missing not at random，MNAR）。在Missing Data[2]中定义有，对于一个数据集，变量 Y存在数据缺失，如果 Y的缺失不依赖于 Y和数据集中其他的变量，称之为MCAR。如果在控制其他变量的前提下，变量 Y不依赖于 Y本身，称之为MAR，即：

$$P\left(Y_{missing}|Y,X\right)=P\left(Y_{missing}|X\right)$$

如果上式不满足，则称之为MNAR。例如：在一次人口调研中，我们分别收集了用户的年龄和收入信息，收入信息中存在缺失值，如果收入的缺失值仅依赖于年龄，则缺失值的类型为MAR，如果收入的缺失值依赖于收入本身，则缺失值的类型为MNAR。通过进一步分析，我们得到高收入者和低收入者在收入上的缺失率更高，因此收入的缺失类型属于MNAR。

[1] D. B. Rubin, “Inference and missing data,” Biometrika, vol. 63, no. 3, pp. 581–592, 1976.

[2] P. D. Allison, Missing data, vol. 136. Sage publications, 2001.

缺失值处理

在对缺失值进行处理之前，我们需要对缺失值有一个更加详细的了解，在R中mice扩展包的md.pattern函数提供了一个探索缺失值模式的方法，例如：

```
md.pattern(airquality)
```

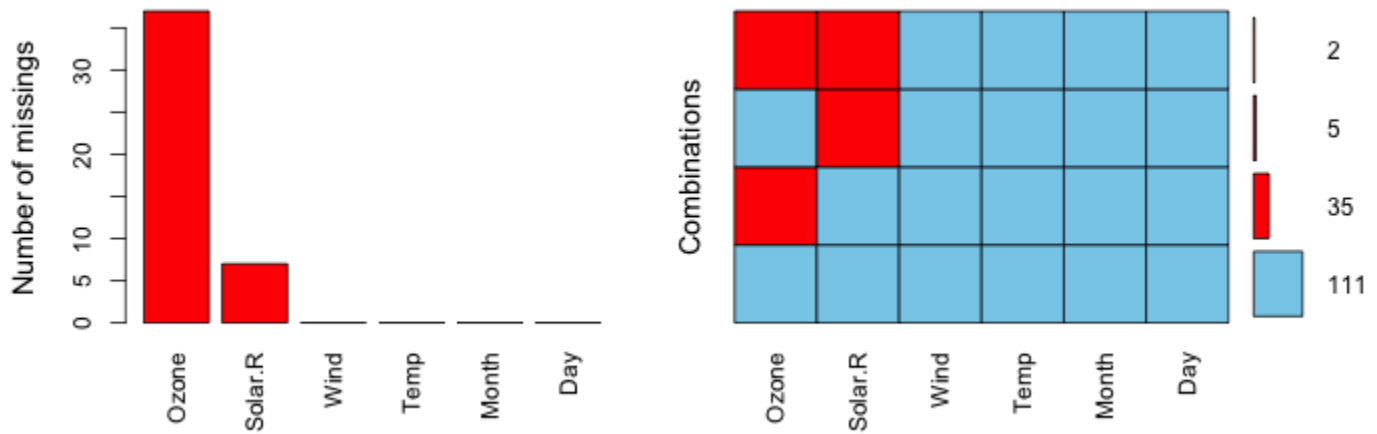
```
##     Wind Temp Month Day Solar.R Ozone
## 111    1    1     1   1       1     1  0
##  35    1    1     1   1       1     0  1
##   5    1    1     1   1       0     1  1
##   2    1    1     1   1       0     0  2
##        0    0     0   0       7    37 44
```

md.pattern函数将数据中所有的缺失情况进行了汇总，在汇总的结果中，0表示缺失值，1表示非缺失值，每一行都是一个缺失模式。每一行的第一个数字表示该缺失模式下样本的数量，最后一个数字表示该缺失模式下缺失变量的个数，例如第二行表示仅Ozone缺失的样本共有35个。最后一行统计了每个变量出现缺失的次数。

缺失值处理

VIM扩展包还提供了可视化分析缺失值的方法，首先是aggr：

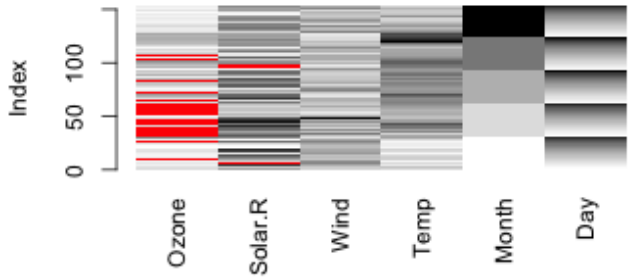
```
aggr(airquality, prop = F, numbers = T)
```



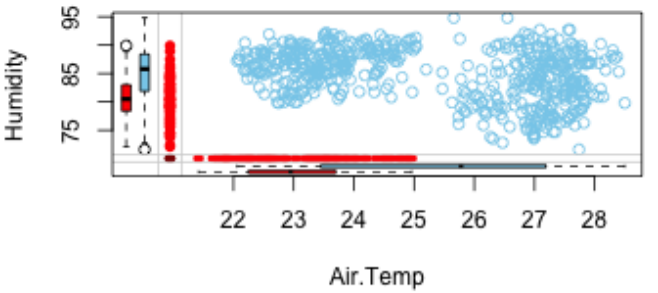
左边的柱状图表示每个变量出现缺失值的次数或占比，右边由颜色块组成的矩阵，每一行表示一种缺失模式，右侧的数字表示该缺失模式出现的次数。

缺失值处理

```
matrixplot(airquality)
```




```
marginplot(tao[,
    c('Air.Temp', 'Humidity')])
```



VIM还提供了一种可视化分析两个变量间缺失值关系的方法marginplot。左下角的3个数字分别表示两个变量缺失的数量以及同时缺失的数量。对于两组箱线图，外侧（左和下侧）的表示另一个变量缺失的情况下，该变量的箱线图，内侧（右和上侧）的表示该变量的整体箱线图。右上的为两个变量的散点图。如果一个变量的缺失属于完全随机缺失的话，则每组箱线图中的两个箱线图应该有较高的相似度。

缺失值处理

删除法

删除法就是删除包含缺失值的数据（样本），但是这种方法仅在完全随机缺失的情况下是有效的。因此在进行删除前我们需要考虑样本的数量以及删除包含缺失值的样本是否会导致偏差的出现。

- na.fail 仅当数据中不存在缺失值是返回对象，否则产生错误
- na.omit 返回剔除缺失值的对象
- na.exclude 同na.omit，但残差和预测值同样本保持长度一致
- na.pass 不做任何处理，直接返回

插补法

插补法是删除缺失值占比较高的特征，在删除特征我们还需要权衡其对预测结果的重要性。如果该特征对最终的预测结果影响较小，则我们可以直接删除该特征；相反如果该特征对预测结果影响较大，直接删除会对模型造成较大的影响，此时我们需要利用其它的方法对该特征的缺失值进行填补。

其中最简单的方式是利用均值，中位数或众数等统计量对其进行简单插补。这种插补方法是建立在完全随机缺失的前提假设下，同时会造成变量方差变小。

异常值处理

异常值是指样本中存在的同样本整体差异较大的数据，异常数据可以划分为两类：

1. 异常值不属于该总体，而是从另一个总体错误抽样到样本中而导致的较大差异。
2. 异常值属于该总体，是由于总体所固有的变异性而导致的较大差异。

对于数值型的单变量，我们可以利用拉依达准则对其异常值进行检测。假设总体 x服从正态分布，则：

$$P\left(|x-\mu|>3\sigma\right) \leq 0.003$$

其中 μ表示总体的期望， σ表示总体的标准差。因此，对于样本中出现大于 $\mu+3\sigma$或小于 $\mu-3\sigma$的数据的概率是非常小的，从而可以对大于 $\mu+3\sigma$和小于 $\mu-3\sigma$的数据予以剔除。

采样

简单随机抽样：从总体N个单位中随机地抽取n个单位作为样本，使得每一个容量为样本都有相同的概率被抽中。特点是：每个样本单位被抽中的概率相等，样本的每个单位完全独立，彼此间无一定的关联性和排斥性。

```
x <- 1:10
sample(x, 5, replace=F) %>% print
```

```
## [1] 10  6  2  4  8
```

```
sample(x, 5, replace=T) %>% print
```

```
## [1]  2  9  9  2 10
```

```
dplyr::sample_n(as.data.frame(x),
    5, replace=F)$x %>% print
```

```
## [1]  1  4  5 10  3
```

采样

分层抽样：将抽样单位按某种特征或某种规则划分为不同的层，然后从不同的层中独立、随机地抽取样本。从而保证样本的结构与总体的结构比较相近，从而提高估计的精度。

```
iris_ <- iris[c(1:50, 51:60,
                101:130), ]
ct <- table(iris_$Species)
print(ct)
```

```
##
##     setosa versicolor  virginica
##         50         10         30
```

```
n <- round(as.numeric(ct)*0.8)
s_i <- sampling::strata(iris_,
    stratanames='Species',
    size=n, method='srswor')
```

```
head(s_i, 3)
```

```
##   Species ID_unit Prob Stratum
## 2  setosa       2  0.8       1
## 3  setosa       3  0.8       1
## 4  setosa       4  0.8       1
```

```
s <- iris_[s_i$ID_unit, ]
table(s$Species)
```

```
##
##     setosa versicolor  virginica
##         40          8         24
```

采样

欠采样和过采样：在处理有监督的学习问题的时候，我们经常会碰到不同分类的样本比例相差较大的问题，这种问题会对我们构建模型造成很大的影响，因此从数据角度出发，我们可以利用欠采样或过采样处理这种现象。

```
library(ROSE)
data(hacide)
table(hacide.train$cls) %>%
    print
```

```
##
##   0   1
## 980  20
```

```
us <- ovun.sample(cls ~ .,
    data=hacide.train,
    method='under', N=400)
```

```
table(us$data$cls) %>% print
```

```
##
##   0   1
## 380  20
```

```
os <- ovun.sample(cls ~ .,
    data=hacide.train,
    method='over', N=1200)
table(os$data$cls) %>% print
```

```
##
##   0   1
## 980 220
```

特征变换和编码

无量纲化

归一化一般是指将数据的取值范围缩放到 $[0,1]$之间，当然部分问题也可能会缩放到 $[-1,1]$之间。针对一般的情况，归一化的结果可以表示为：

$$x' = \frac{x - x_{\min}}{x_{\max} - x_{\min}}$$

其中， $x_{\min}$表示 x中的最小值， $x_{\max}$表示 x中的最大值。在R语言中我们可以简单的自定义归一化函数，同时我们还需要保留该特征的极值信息以备后续数据采用相同的归一化。

通过归一化，我们可以消除不同量纲下的数据对最终结果的影响。例如，我们通过身高（单位：米）和体重（单位：公斤）来衡量两个人之间的差异，两个人的的体重相差20公斤，身高相差0.1米，因此在这样的量纲下衡量这两个人的差异时，体重的差异会把身高的差异遮盖掉，但这往往不是我们想要的结果。但通例如我们假设体重的最小值和最大值分别为0和200公斤，身高的最小值和最大值分别为0和2米，因此归一化后体重和身高的差距变为0.1和0.05，因此通过归一下则可以避免这样的问题的出现。

无量纲化

```
normalize <- function(x) {
    # 计算极值
    x_min <- min(x)
    x_max <- max(x)

    # 归一化
    x_n <- (x - x_min) /
        (x_max - x_min)

    # 将极值作为结果的属性
    attr(x_n, 'min') <- x_min
    attr(x_n, 'max') <- x_max

    # 返回归一化后结果
    x_n
}
```

```
sample <- c(1, 2, 3, 4, 5, 6)
sample_n <- normalize(sample)
print(sample_n)
```

```
## [1] 0.0 0.2 0.4 0.6 0.8 1.0
## attr(,"min")
## [1] 1
## attr(,"max")
## [1] 6
```

无量纲化

标准化的目的是为了让数据的均值为0，标准差为1，标准化还称为Z-score，标准化的结果可以表示为：

$$x' = \frac{x - \bar{X}}{S}$$

其中，$\bar{X}$为x的均值，S为x的标准差。

其中，参数center表示是否中心话数据，即是否减去数据的均值；参数scale表示是否标准化，即是否除以数据的标准差。

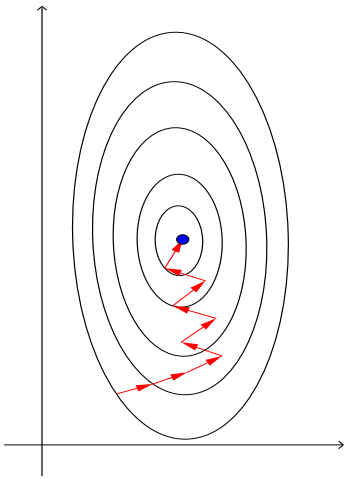
```
sample <- c(1, 2, 3, 4, 5, 6)
sample_c <- scale(sample,
    center = T, scale = T)
print(sample_c)
```

```
##             [,1]
## [1,] -1.3363062
## [2,] -0.8017837
## [3,] -0.2672612
## [4,]  0.2672612
## [5,]  0.8017837
## [6,]  1.3363062
## attr(,"scaled:center")
## [1] 3.5
## attr(,"scaled:scale")
## [1] 1.870829
```

无量纲化

通过标准化得到的新的数据均值为0和标准差为1的新特性，这些新特性在后续的处理中会有很多好处。例如：我们将标准差统一到1，从信息论的角度，方差可以表示其中蕴含的信息量越大，信息量越大对模型的影响就也大，因此我们将其标准化到1，这样就消除了最开始不同变量具有不同的影响程度的差异。

除此之外，去量纲化在利用梯度下降等方法求最优解的时候也具有重要的作用。在利用梯度下降等方法求最优解的时候，每次我们都会朝着梯度下降的最大方向迈出一步，但当数据未经过去量纲化的原始数据时，每次求解得到的梯度方向可能和真实的误差最小的方向差异较大，这样就会可能导致收敛的速度很慢甚至无法收敛。而通过去量纲化后的数据，其目标函数会变得更“圆”，此时每一步梯度的方向和真实误差最小的方向的偏差就会比较小，模型就可以很快收敛到误差最小的地方。



离散化

1. 无监督的离散化
   - 等宽分箱：每个分箱中的取值范围一致
   - 等深分箱：每个分箱中的样本量一致
2. 有监督的离散化
   - `smbinning`
   - `discretization`
3. 人工离散化

```
price <- c(4, 8, 15, 21, 21,
           24, 25, 28, 34)
p_1 <- cut(price, breaks=3)
# 等宽分箱
# 箱1：4, 8
# 箱2：15, 21, 21, 24
# 箱3：25, 28, 34
p_2 <- Hmisc::cut2(price, g=3)
# 等深分箱
# 箱1：4, 8, 15
# 箱2：21, 21, 24
# 箱3：25, 28, 34
```

哑变量化

在R语言中对包括因子类型变量数据建模时，一般会将其自动处理为虚拟变量或哑变量，这样我们就可以将因子类型的数据转化为数值型数据使用。

```
customers <- data.frame(
    gender = c('M', 'F', 'M'),
    age = c(22, 26, 34)
)
dmy <- caret::dummyVars(
    ~., customers
)
print(dmy)
```

```
## Dummy Variable Object
##
## Formula: ~.
## 2 variables, 1 factors
## Variables and levels will be separated by '.'
## A less than full rank encoding is used
```

```
newers <- data.frame(
    gender = c('M', 'F', NA),
    age = c(45, 54, 23)
)
newers_ <- predict(dmy, newers)
print(newers_)
```

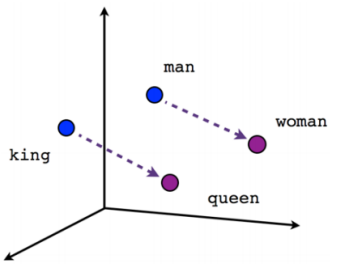
```
##   gender.F gender.M age
## 1        0        1  45
## 2        1        0  54
## 3       NA       NA  23
```

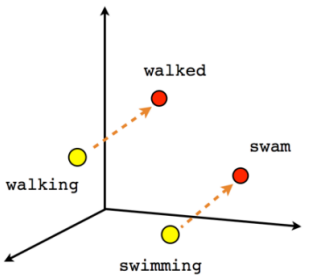
特征提取，选择和监控

特征提取

- 人工特征提取
  - **SQL**
  - **SQL**
  - **SQL**
- 降维
  - 主成分分析
  - 线性判别分析
  - 多维标度法
  - 等距映射算法
  - 局部线性嵌入
  - 流行学习：SNE，t-SNE，LargeVis

- 表示学习
  - 文本，图像，序列...
  - Something2Vec[1]





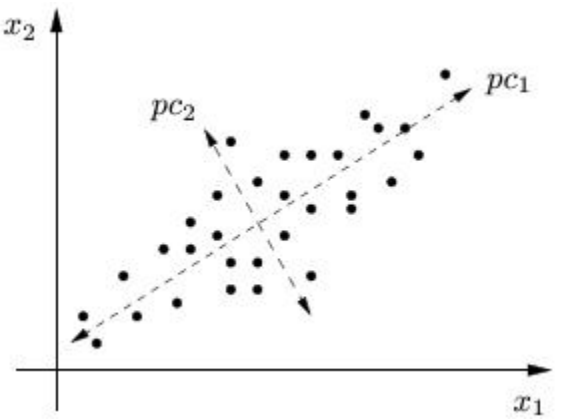
King - Man + Woman = Queen
Walking - Wakled + Swam = Swimmming

[1] https://gist.github.com/nzw0301/333afc00bd508501268fa7bf40cafe4e

特征提取

主成分分析（Principal Components Analysis，PCA）由Pearson[1]于1901年提出。主成分分析可以将多个相关变量转化为少数几个不相关变量的统计分析方法。通过主成分分析PCA量保留原始信息的基础上，尽可能提出更少的不相关变量（主成分），可以对数据进行有效的降维。

右图是PCA的投影的一个表示，黑色的点是原始的点，带箭头的虚线是投影的向量，pc_1表示特征值最大的特征向量，pc_2表示特征值次大的特征向量，两者是彼此正交的，因为这原本是一个2维的空间，所以最多有两个投影的向量，如果空间维度更高，则投影的向量会更多。



[1] K. Person, “On lines and planes of closest fit to system of points in space. philiosophical magazine, 2, 559572,” 1901.

特征提取

```
require(graphics)
head(USArrests, 3)
```

```
##          Murder Assault UrbanPop Rape
## Alabama    13.2     236       58 21.2
## Alaska     10.0     263       48 44.5
## Arizona     8.1     294       80 31.0
```

```
pca <- prcomp(USArrests, scale = TRUE)
summary(pca)
```

```
## Importance of components:
##                           PC1    PC2     PC3     PC4
## Standard deviation     1.5749 0.9949 0.59713 0.41645
## Proportion of Variance 0.6201 0.2474 0.08914 0.04336
## Cumulative Proportion  0.6201 0.8675 0.95664 1.00000
```

特征提取

```
pca_ <- predict(pca, USArrests)
head(pca_, 3)
```

```
##                PC1        PC2         PC3        PC4
## Alabama -0.9756604  1.1220012 -0.43980366  0.1546966
## Alaska  -1.9305379  1.0624269  2.01950027 -0.4341755
## Arizona -1.7454429 -0.7384595  0.05423025 -0.8262642
```

```
head(pca$x, 3)
```

```
##                PC1        PC2         PC3        PC4
## Alabama -0.9756604  1.1220012 -0.43980366  0.1546966
## Alaska  -1.9305379  1.0624269  2.01950027 -0.4341755
## Arizona -1.7454429 -0.7384595  0.05423025 -0.8262642
```

特征选择

特征选择本质上继承了奥卡姆剃刀的思想，从一组特征中选出一些最有效的特征，使构造出来的模型更好。

- 避免过度拟合，改进预测性能
- 使学习器运行更快，效能更高
- 剔除不相关的特征使模型更为简单，容易解释

过滤方法（Filter Methods）：按照发散性或者相关性对各个特征进行评分，设定阈值或者待选择阈值的个数，选择特征。

- 方差选择法：选择方差大的特征。
- 相关关系&卡方检验：特征与目标值的相关关系。
- 互信息法：一个随机变量包含另一个随机变量的信息量。

- `caret::nearZeroVar`
- `caret::findCorrelation`
- `caret::findLinearCombos`
- `caret::sbfControl`
- `mlr::generateFilterValuesData`
- `mlr::filterFeatures`

特征选择

封装方法（Wrapper Methods）：是利用学习算法的性能来评价特征子集的优劣。因此，对于一个待评价的特征子集，Wrapper方法需要训练一个分类器，根据分类器的性能对该特征子集进行评价，学习算法包括决策树、神经网络、贝叶斯分类器、近邻法以及支持向量机等。Wrapper方法缺点主要是特征通用性不强，当改变学习算法时，需要针对该学习算法重新进行特征选择。

集成方法（Embedded Methods）：在集成法特征选择中，特征选择算法本身作为组成部分嵌入到学习算法里。最典型的即决策树算法。包括基于惩罚项的特征选择法和基于树模型的特征选择法。

- `caret::rfeControl`
- `mlr::selectFeatures`

特征监控

在数据分析和挖掘中，特征占据着很重要的地位。因此，我们需要对重要的特征进行监控与有效性分析，了解模型所用的特征是否存在问题，当某个特别重要的特征出问题时，需要做好备案，防止灾难性结果。

- 数据缺失
- 数据异常
- .....

Thanks