

**2017级本科生科研实践论文**

**中医药数据特征选择分析平台**

学 号： 201701014011

姓 名： 赖智豪

学 院： 计算机学院

指导老师： 杜建强、李郅琴

专 业： 计算机科学与技术

完成时间： 2020年1月7号

**科研实践论文独创性声明**

本人郑重申明：

1．所呈交的科研实践论文，是本人在导师指导下进行的研究工作及取得的研究成果。尽我所知，除了文中特别加以标注和致谢的地方外，论文中不包含其他人已经发表或撰写的研究成果，也不包含为获得江西中医药大学或其他教育机构的学位或证书所使用过的材料。与我一同工作的同志对本研究所做的任何贡献均已在论文中作了明确的说明并表示了致谢。  
  
  
  
2．江西中医药大学、中国科学技术信息研究所、国家图书馆有权保留本人所送交科研实践论文的复印件和电子文档，可以采用影印、缩印或其他复制手段保存论文。本人电子文档的内容和纸质论文的内容相一致。除在保密期内的保密论文外，允许论文被查阅和借阅，可以公布（包括刊登）论文的全部或部分内容。论文的公布（包括刊登）授权江西中医药大学办理。  
  
  
  
3.本人完全了解江西中医药大学有关保留、使用科研实践论文的规定，即:学校有权保留并向国家有关部门或机构送交论文的复印件和电子版，允许论文被查阅和借阅。学校可以公布论文的全部或部分内容，可以采用影印、缩印或其他复制手段保存论文。

科研实践论文作者（签名）：赖智豪

2020年 1 月7 日

# 摘 要

近年来，随着科学技术的发展，我国中医药事业的现代化正在不断推进。火热的数据挖掘等技术也正应用于我国中医药领域。中医药领域的数据大多呈现高维度小样本的特征，高维度小样本数据直接用于分析研究，不论是精度还是效率都不太理想。原因是高维度的数据计算复杂度太大，而且往往存在较多冗余和无关特征数据。高维度数据的数据挖掘是一项极具挑战性的任务，容易引发“维数灾难”与过拟合[1]。针对这个问题，特征选择为数据挖掘更加有效的应用于高维度数据提供了强有力的保障。

以推动中医药事业的现代化，提高中医药领域工作者的工作效率为出发点，本次科研实践，经过需求分析，相关文献的整理等过程，实现了一个中医药数据特征选择分析平台。本平台特征选择采用了两个特征选择算法：一是基于文献[2]加以修改而实现的四阶段特征选择算法(four-Staged Feature Selection),以下简称FSFS算法；二是Lasso算法。FSFS算法是一种新颖的混合式特征选择方案，Lasso算法主要是用于和FSFS算法作对比，结果表明FSFS算法具有一定的价值。

**关键词：**特征选择；FSFS算法；降维；中医药数据

**ABSTRACT**

In recent years, with the development of science and technology, the modernization of Chinese traditional medicine is advancing. Hot data mining and other technologies are also being applied in the field of traditional Chinese medicine in China. Most of the data in the field of traditional Chinese medicine show the characteristics of high-dimensional and small samples. The high-dimensional and small sample data are directly used for analysis and research, and neither the accuracy nor the efficiency is ideal. The reason is that the computational complexity of high-dimensional data is too large, and there are often more redundant and irrelevant feature data. Data mining of high dimensional data is a challenging task, which may lead to "dimension disaster" and overfitting [1]. In view of this problem, feature selection provides a strong guarantee for the more effective application of data mining to high dimensional data.

With the purpose of promoting the modernization of traditional Chinese medicine and improving the work efficiency of workers in the field of traditional Chinese medicine as the starting point, this scientific research practice has realized a platform for selecting and analyzing the characteristics of traditional Chinese medicine data through the process of demand analysis and relevant literature sorting. This platform Feature Selection adopted two Feature Selection algorithms: one is based on the literature [2] the four phases of modified and implemented Feature Selection algorithm (four - Staged Feature Selection), hereinafter referred to as the FSFS algorithm; The second is Lasso algorithm. FSFS algorithm is a novel hybrid feature selection scheme. Lasso algorithm is mainly used to compare with FSFS algorithm. The results show that FSFS algorithm has certain value.

**Key Words:** Feature selection; FSFS algorithm; Dimension reduction; TCM data

# 引言

## 研究背景和意义

中医药是我国医学科学的瑰宝，数千年来为中华民族的繁荣昌盛作出了重要贡献。经年来，国家对中医药事业发展的重视力度不断加强。党的十八大以来，习近平总书记吧中医药事业发展放在全面深化改革、进一步扩大对外开放的战略高度，融入实现“两个一百年”奋斗目标、实现中华民族伟大复兴中国梦的伟大实践，多次作出重要指示。习近平总书记指出：“中医药学是我国各族人民在长期生产生活和同疾病做斗争中逐步形成并不断丰富发展的医学科学，是我国具有独特理论和技术方法的体系”，“凝聚着深邃的哲学智慧和中华民族几千年的健康养生理念及其实践经验”，强调“中医药学是中国古代科学的瑰宝，也是打开中华文明宝库的钥匙”。

我国中医药政策体系和战略逐步完善，中医药在国家医药顶层设计中的地位越发高企和吃重，我国推动中医药走向现代化和国际化的决心不容置疑。推动我国中医药走向现代化和国际化需要充分利用当今的科学技术。目前比较火热的技术有数据挖掘，机器学习，深度学习等，将中医药与其他领域交叉融合，有利于促进两个领域的发展。其中，数据挖掘技术已经相对成熟，它已经广泛应用于各个领域。我国也正将数据挖掘应用于中医药领域。将数据挖掘技术应用于中医药数据分析有利于提升效率，更加充分的发掘出数据的价值。在这个大数据时代，中医药数据更加趋向于高维度小样本的特征。但是高维度数据的数据挖掘是数据挖掘所面临的一个极具挑战的任务，容易引发“维数灾难”和过拟合。而特征选择正是针对这类问题所进行的。对数据特征选择就是一个数据降维的过程。特征选择能够去除冗余，无关以及噪声特征，能够减少训练或者运行时间、提高模型精确度。对中医药数据特征选择算法进行研究，能够推动数据挖掘在中医药领域的发展。同时，基于特征选择算法，实现中医药数据特征选择分析平台，将有利于提高中医药科研工作者的工作效率。

## 国内外研究现状

特征选择在国内外都有广泛的研究。基于评价准则分为过滤式特征选择和封装式特征选择。

对于过滤式特征选择(Filter)，最为常见的有卡方检验(CHI-square )、信息增益( Information Gain )、互信息(Mutual Information)、几率比(Odds Ratio) 、NGL系数(NGL Coefficient) 、GSS系数( GSS Coefficient )[3]、基于模糊度量的特征选择(Ambiguity Measure，AM )[4]、改进的基尼指数( Improved Gini index )[4]、最佳项( Best Term )[5]、基于泊松分布的度量(Measure using Poisson distribution)[6]、基于二项假设检验的特征选择（Bi-Test）[7]、基于综合度量的特征选择（CMFS）[8]等。张平[9]基于相关性，提出加权相关性WR，同时提出了一种新颖的条件相关特征选择算法CRFS(Conditional Relevance Feature Selection),并在理论上证明了它的优越性，除此之外，从不同角度，在实验上取得了较好的结果。张尧[10]基于互信息提出了一种基于最小条件和最小条件冗余的特征选择算法(MCRMCR,Minimum Conditional Relevancy and Minimum Conditional Redundancy)和WCRFR(Weight Composition of Feature Relevancy)算法，并在理论与实际中证明这两个算法可以提高分类器的分类准确率。

封装式特征选择算法(Wrapper)依赖具体的分类器算法,虽然该方法的计算复杂度较高，但所选的特征子集的规模相对较小，分类性能较好。现在有很多分类算法被应用到封装式特征选择算法中，并取得了较高的分类效果，例如决策树[11]、Fisher 判别分析结合遗传算法[12]、遗传算法结合神经网络[13]、支持向量机(SVM)[14]等。近年来，有很多学者提出了过滤式特征选择方法和封装式特征选择方法相结合的特征选择算法。Huang[15]分别利用多种过滤式特征选择算法选择特征子集，然后利用基于多个分类算法的投票策略来预测股票走势。Foithong[16]提出了基于互信息和粗糙集的封装式特征选择算法。

针对高维小样本数据的特征选择，国内外对其也有所研究。张靖[[17]等针对高维小样本数据会导致“维数灾难”的问题，提出一种嵌入特征选择方法K-split Lasso来降维，提高分类模型的精度，解决计算复杂度高的问题。针对高维小样本数据会导致“过拟合”问题，结合过滤方法和嵌入方法的优点，并在此基础上提出一种新的混合特征选择方法GSIL，目的是从高维数据中选出具有强类别区分能力的特征子集，解决“过拟合”问题。张凯[18] 提出一种基于分组的互信息过滤型特征选择算法。通过考虑单个特征与类别的相关性,同时在以往典型特征选择算法的基础上同时加入了对特征冗余局部性的考量,并提出一种基于分组的互信息过滤型特征选择算法(Group based Filtering Feature Selection Algorithm,GBFS)。在多个数据集上的实验表明,两种方法在选出较小子集的同时可以有效的提高分类精度。

# 特征选择

## 特征选择的概念

特征选择( Feature Selection )也称特征子集选择( Feature Subset Selection , FSS )，或属性选择( Attribute Selection )。是指从已有的M个特征(Feature)中选择N个特征使得系统的特定指标最优化，是从原始特征中选择出一些最有效特征以降低数据集维度的过程,是提高学习算法性能的一个重要手段。[18]简而言之，特征选择就是从已有的特征集合中选择一个最优特征子集的过程。

## 特征选择的过程

### 特征选择的一般过程

特征选择过程一般包括这4部分：产生过程，评价函数，停止准则，验证过程。产生过程是搜索特征子集的过程，负责为评价函数提供特征子集。评价函数是评价一个特征子集的一个准则。停止准则是与评价函数相关的，一般是一个阈值，当评价函数值达到这个阈值后就可停止搜索。验证过程是在验证数据集上检验特征子集有效性的过程。整个特征选择过程是：首先在原始数据中搜索，生成特征子集，然后根据评价函数对特征子集进行评价，评价结果如果符合停止准则就可以停止后续的搜索，然后进入结果检验阶段，否则返回重新搜索，生成特征子集，继续特征选择。整个特征选择过程如 图 1

|  |
| --- |
| C:\Users\ADMINI~1\AppData\Local\Temp\ksohtml5648\wps1.png |
| 图 1 一般的特征选择过程 |

### 特征选择的改进过程

由于特征子集搜索的时间复杂度较高。Yu等人[20]基于相关冗余分析，得出了另一种改进的特征选择过程，它基本做法是：先对原始数据做相关分析，根据相关分析得出相关的特征子集，然后对相关特征子集作冗余分析，最终得出选择的特征子集。改进的特征选择过程如 图 2，改进的特征选择过程，它避免了特征子集搜索，经过相关分析和冗余分析可以高效快速的找出最优特征子集。

|  |
| --- |
| C:\Users\ADMINI~1\AppData\Local\Temp\ksohtml5648\wps2.png |
| 图 2 改进的特征选择过程 |

## 特征选择的方法

### 过滤式特征选择

过滤法比较简单，它按照特征的发散性或者相关性指标对各个特征进行评分，设定评分阈值或者待选择阈值的个数，选择合适特征。过滤法可以独立于后续的学习算法，也就是说使用过滤法特征选择过程与学习器无关，相当于先对初始特征进行过滤，再用过滤后的特征训练学习器。这种方法的关键就是找到一种能度量特征重要性的方法。比如皮尔森相关系数，信息论理论中的互信息等。

常用的过滤式特征选择方法有：方差选择法，卡方检验法，皮尔森相关系数法，互信息系数法。

方差选择法：方差选择法适用于离散型特征，如果是连续型特征要作离散化处理。使用方差作为特征评分标准，如果某个特征取值差异不大，通常可以认为该特征对区分样本贡献不大。方差选择法是一种简单的方法，但是因为方差较小的特征比较少，所以它的使用范围不广泛。它一般用于特征选择预处理过程，先将原始数据中方差较小的特征去除而得到预处理数据，然后再使用其他特征选择方法选择特征。

卡方检验法：卡方检验法适用于分类问题。该方法使用统计量卡方检验作为特征选择评分标准，卡方检验值越大，相关性越强。

皮尔森相关系数法：皮尔森相关系数法能够衡量线性相关的特征集。使用pearson系数作为特征评分标准，相关系数绝对值越大，相关性越强（相关系数越接近于1或-1时，相关性越强；相关系数越接近于0时，相关性越弱）。

互信息系数法：互信息系数法也比较适用于分类问题。互信息系数法能够衡量各种相关性的特征集，但是它计算相对比较复杂。

### 封装式特征选择

封装法是根据目标函数，通常是预测效果评分，每次选择部分特征，或者排除部分特征。封装法的特征选择过程与学习器有关，使用学习器的性能作为评价准则，选择最有利于学习器性能的特征子集。

最常用的封装法是递归消除特征法(RFE，Recursive Feature Elimination)。递归消除特征法使用一个机器学习模型来进行多轮训练，每轮训练后，消除若干权值系数的对应的特征，再基于新的特征集进行下一轮训练。以经典的SVM-RFE算法来讨论这个特征选择的思路。这个算法以支持向量机来做RFE的机器学习模型选择特征。它在第一轮训练的时候，会选择所有的特征来训练，得到了分类的超平面后，如果有n个特征，那么RFE-SVM会选择出中分量的平方值 最小的那个序号对应的特征，将其排除，在第二类的时候，特征数就剩下n-1个了，我们继续用这n-1个特征和输出值来训练SVM，同样的，去掉最小的那个序号对应的特征。以此类推，直到剩下的特征数满足我们的需求为止。封装法在速度上要比过滤法慢，但是它选择的特征子集的规模要小的多而且准确率比较高，有利于识别关键特征。它的缺点是时间复杂度较高，泛化能力不强。

## 相关知识

### 皮尔森相关系数

概述：皮尔森相关系数也称皮尔森积矩相关系数(Pearson product-moment correlation coefficient) 。它是一种线性相关系数，也是我们最常用的一种相关系数。记为，用来反映两个变量和的线性相关程度，值介于-1到1之间，绝对值越大表明相关性越强。

皮尔森相关系数的定义：协方差与标准差乘积的比值。

均值：



标准差：



协方差：



则皮尔森相关系数：



### 最大互信息系数

概述：最大信息系数 maximal information coefficient (MIC)，又称最大互信息系数。它衡量了两个信息的相似程度，相似程度越高，值越大；反之则值越小。

目的：MIC中最大信息基于非参数性探索，用于衡量两个变量和的线性和非线性的强度。

MIC度量具有普适性：它不仅可以发现变量间的线性函数关系，还能发现非线性函数关系(指数的，周期的)；不仅能发现函数关系，还能发现非函数关系(比如函数关系的叠加，或者有趣的图形模式)。

MIC具有均衡性：对于相同水平的函数关系或者非函数关系，MIC具有近似的值。所以MIC度量可以纵向比较同一相关关系的强度，还可以横向比较不同关系的强度。

优点：1.拥有足够样本时，可以捕获广泛的关系，而不限定于特定的函数类型，如线性，指数型，周期型等。

缺点：MIC的统计量遭受到了一些质疑，当零假设不成立时，MIC的统计就会受到影响。有的数据集不存在这个问题，但是有的存在。

MIC的计算：具有两个属性的数据点集合分布在两维的空间中，使 的网格划分数据空间， 表示落在 各中的数据点频率， 表示第 行数据点的频率， 表示第 列数据点的频率。计算随机变量 的互信息，因为 网格划分数据点的方式不止一种，所以需要找到互信息最大的网格划分。然后使用归一化因子，将互信息的值转化为 区间之内。最后找到能使互信息最大的网格分辨率作为MIC的度量值。其中网格的分辨率的限制 ， 。

计算过程概括为公式：



### PLS算法介绍

PLS算法就是偏最小二乘（Partial Least Square, PLS）回归分析。偏最小二乘回归可以理解为多元线性回归，典型相关分析，主成分分析三者的有机结合。与传统多元线性回归模型相比，偏最小二乘回归有以下几个特点：

（1）能够在自变量存在严重多重相关性的条件下进行回归建模；

（2）允许在样本点个数少于变量个数的条件下进行回归建模；

（3）偏最小二乘回归在最终模型中将包含原有的所有自变量；

（4）偏最小二乘回归模型更易于辨识系统信息与噪声；

（5）在偏最小二乘回归模型中，每一个自变量的回归系数将更容易解释。

偏最小二乘的基本思想与实现步骤：

设有p个因变量和m个自变量，共有n个样本，构成矩阵X,Y，X,Y已经进行标准化处理。

1.从X,Y中分别提取第一对成分(,),要求满足以下两个条件：

（1）与应尽可能大的携带X,Y中的变异信息；

（2）和的相关程度最大。

上述两个条件可以表述为：，，，

即。 

2.第一对成分提取后，分别实施X对的回归和Y对的回归，如果达到精度要求则算法停止，得到以p个因变量为因变量，以为解释变量的p个回归方程；

3.如果未达到精度要求，则利用剩余的信息继续提取成分，知道精度基本令人满意为止。上述过程可以描述为如图 3所示

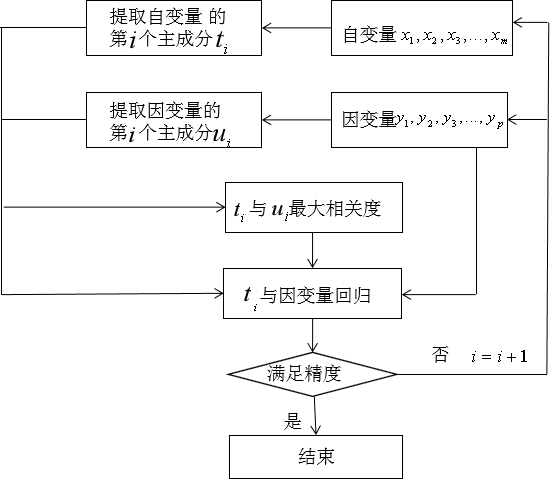


图 3 偏最小二乘回归流程

偏最小二乘回归中成分个数的确定：可以通过考察增加1个新的成分后，能否对模型的预测有明显的改进。采用类似于抽样测试法的工作方式，把所有个样本点集合分成2部分：第一部分是去除某个样本点的所有样本点集合（共含个样本点），用这部分样本点并使用个成分拟合一个回归方程；第2部分是把刚才被排除的样本点 代入前面的拟合方程中，得到 在样本点 上的拟合值。对于每一个重复上述测试，则可以定义的预测误差平方和为 ，有：



定义Y的误差平方和为 ，有：



一般来说，总是有 大于，而 则总是小于。下面比较和 。 是用全部样本点拟合的具有个成分的方程的拟合误差；增加了一个成分 ，但却含有样本点的扰动误差。如果个成分回归方程的含扰动误差在一定程度上小于个成分回归方程的拟合误差，则认为增加1个成分，会使预测的精确度明显提高。因此，希望的比值越小越好。增加一个成分是否有益的标准为： ，即当 时，增加成分 是有益的。

另一种等价的定义为交叉有效性。对于每一个因变量，定义：



对于全部的因变量Y，成分 的交叉有效性定义为：



用交叉有效性测量成分 对预测模型精度的边际贡献有如下2个尺度：

（1）当 时， 成分的边际贡献是显著地。

（2）对于，至少有1个，使得，这时增加成分，至少使1个因变量的预测模型得到改善，因此也可以考虑增加成分。

### Lasso算法介绍

Lasso中文名为套索算法，英文全称Least absolute shrinkage and selection operator，直译过来就是最小绝对值收缩和选择算子。它的本质是在常规的线性回归的基础上对参数加了一个L1正则化约束，当参数缩小到小于一个阀值的时候就令它为0，从而选择出了对因变量影响较大的自变量并计算出相应的回归系数，最终的到一个比较精简的模型。Lasso方法在处理多重共线的样本数据时具有明显的优势，其代价函数形式如下：



规约到线性回归模型上，上式第一项为均方误差（MSE），第二项为L1正则化约束。由于L1范数用的是绝对值，导致LASSO的优化目标不是连续可导的，也就是说，最小二乘法，梯度下降法，牛顿法，拟牛顿法都不能用，可使用坐标下降法对每个回归系数单独求导，将函数分为两部分，分别记为 ， 。

首先对求偏导：



令，，可得：



然后对求偏导：



根据上式可得整体的偏导数为：



令解得：



坐标下降法求解如算法所示：

|  |
| --- |
| 算法：坐标下降法 |
| **输入：**数据集， 个样本，个特征；；阈值，惩罚强度  **输出：**强相关特征子集  （1）初始化：回归系数，残差平方和；  （2）标准化数据集，使得每个特征的均值为0，方差为1：    其中，是的均值，是的标准差；  （3）使用坐标下降法优化回归系数  while true:  for  in :  计算  for  in :  计算  if :    else if :    else:    重新计算残差，前后残差的变化量  if :  break  （4）算法结束，返回。 |

# 混合式特征选择FSFS算法

## FSFS算法介绍

过滤法和封装法各有优缺点。但是过滤法和封装法可以是互补模式，两者结合起来能达到更好的效果。两者结合的特征选择分为两个阶段：第1阶段使用过滤法初步去除大部分无关或噪声特征，只保留少量特征，从而有效的减小后续搜索规模。第2阶段将剩余的特征连同样本数据作为输入参数用于封装法的相关操作，进一步优化选择重要特征。FSFS算法就是结合过滤法和封装法的混合式特征选择算法，它分为四个阶段：过滤（Filter）,半封装（Semi-Wrapper），合并（Union）,投票（Voting）。FSFS算法经过了k次折叠，前3个阶段贯穿于每一次折叠当中。

过滤阶段：此阶段采用了两种特征重要性度量，即采用两种不同的过滤方法。第一种是皮尔森相关系数法，第二种是最大互信息系数法。采用不同的过滤方法，是为了下一阶段减少计算量。相比使用一种过滤方法，这个阶段使用不同的过滤方法基于不同的度量去减少变量及消除部分特征。

半封装阶段：此阶段基于预测效果的评分，评分指标为均方根误差（RMSE）。此阶段将过滤得到的特征子集采用封装法进行特征选择。每次增加一定量的特征，然后进行预测，将预测结果与因变量计算RMSE，封装法的结果为最小RMSE所对应的那部分特征。

合并阶段：此阶段是两种过滤方法得到的特征子集经过半封装后特征子集的合并，将排除重复特征以得到本次折叠的最终特征子集。

投票阶段：投票阶段基于k次折叠后得到的k个特征子集中每个特征出现频次。当特征出现频次达到预设频次阀值时则选择该特征。

|  |  |
| --- | --- |
| 符号 | 符号说明 |
|  | 折叠次数 |
|  | 第 份训练集 |
|  | 第 份测试集 |
|  | 过滤方法数量 |
|  | 特征得分前 |
|  | 第 个过滤方法得到的个特征集 |
|  | 第次折叠使用的过滤得到的候选子集 |
|  | 第 次折叠的特征子集的并集 |
|  | 第 次折叠训练集预测值所对应的 |
|  | 最佳特征子集 |
|  | 一次封装过程中最小的 |
|  | 无穷大 |
|  | 一次封装过程中最小的所对应的特征数量 |
|  | 封装过程中 个特征PLS预测值所对应的 |
|  | 封装过程中 增加的步长 |
|  | 主成分个数 |
|  | 投票过程中特征频次阀值 |

## FSFS算法步骤

|  |
| --- |
| FSFS算法 |
| **输入**：数据集 ，个样本，个特征；  ； ； ； ； ；  **输出**：强相关特征集  初始化：令 , 为空集， ， ,  while  {  运行一次PLS得到第 次折叠的特征全集( )  Filter:  for each  :  to  在第k次训练集()使用第个过滤方法（）计算特征得分  在方法上获得的特征得分降序排序  保存前个特征到中  end for  Semi-Wrapper:  for each  :  to      for 不同数量的最佳特征子集（可以从任意数开始，）  对前个特征运行一次PLS得到相应的预测值  计算此时预测值与对应因变量的 if  <      end if  增加个特征，即  end for  if  将产生最佳预测性能的特征集保存到中  end if  end for  Union：  for each  to  append  to  end for    }end while;  Voting：  通过选择中最常见的特征，达到阀值就选择该特征，  即将该特征加入  算法结束，返回 |

## FSFS算法分析

# 系统设计

## 需求分析

### 功能性需求

本系统的用户主要为中医药领域科研工作者。该系统应该需要具备以下的功能：

（1）本系统首先要实现用户数据的导入，数据导入后，可以对导入的数据进行预处理。预处理过程中可以快速检索目标数据，检索结果高亮显示，可以对检索出的多个结果上下跳转。预处理完成后，可以将预处理的数据导出。

（2）然后要有设置变量的功能，用户可以自己设置自变量与因变量。设置变量过程中要能够全选以提高设置变量的效率。

（3）本系统在运行算法前，可以选择算法，选择算法后可以设置该算法对应的参数。在设置完相关参数后才可以运行程序。运行结束后，特征选择的结果清晰的展示在界面上。可以将特征选择出的最优特征相关数据导出。

（4）本系统还应该具有分析预测功能，能够计算出特征选择前和特征选择后的均方根误差（RMSE）。除此之外可以绘制简单的可视化图形，并且能够将分析预测结果导出。

（5）用户能够对本项目进行在线邮件反馈建议，即具有在线发送邮件的功能。

### 非功能性需求

（1）结合用户的功能需求，分析出主要的界面需求如下表所示：

|  |  |
| --- | --- |
| 需求名称 | 需求说明 |
| 导入数据界面 | 导入数据的显示，可数据预处理 |
| 变量设置界面 | 用于自变量与因变量的设置 |
| 特征选择界面 | 选择特征选择算法，运行结果展示 |
| 设置参数界面 | 在运行算法之前，设置算法相关参数 |
| 分析预测界面 | 主要展示预测结果，可视化分析 |
| 问题反馈界面 | 用户输入反馈建议信息以邮件方式发送 |

（2）软硬件环境需求：window7及以上操作系统

（3）产品质量需求：

|  |  |
| --- | --- |
| 主要质量属性 | 详细要求 |
| 正确性 | 导入导出数据不会出现乱码 |
| 可靠性 | 不会出现闪退，卡死 |
| 效率，性能 | 能较快得出结果 |
| 易用性 | 操作简单，能快速上手 |
| 清晰性 | 数据展示清晰，不出现歧义 |
| 安全性 | 不会读取，收集其他信息 |

## 产品设计

|  |
| --- |
| qt_temp  图 4 产品设计流程图 |

中医药数据特征选择分析平台可以根据图 4进行系统设计。对于平台的功能，整个平台要以特征选择分析为主，数据预处理等其他功能为辅；对于平台的界面，要以精简清新为主要风格。

## 系统设计规范

### 程序设计规范

#### 运用范围

本系统采用Python语言在PyCharm平台进行开发，适用于安装了Anaconda2-4.2.0和Python2.7、PyCharm-2017.1.3以上版本并配置了相应的运行环境的电脑上运行。可用于高维小样本实验数据（维数较高的），且均具有多重线性相关和无关的还有冗余的数据，而观测数据样本量又较少时，及一切想运用融入CI\_AMB进行去无关和冗余的多元线性回归建模的实际问题中。

#### 数据格式

程序的入口一般是先打开系统，然后导入用户数据，用户的数据格式要求为文本文件(\*.txt;\*.xlsx)。导入的实验数据先是放在表格中。

#### 数据操作

程序导入数据后，导入的实验数据先是放在表格中，要求用户选择数据，用户选择数据对应的变量名进行导入和导出，可以选择一部分变量也可以选择全部的变量，实现变量的筛选。同时用户也可以对导入的实验数据进行复制、粘贴、删除、剪切等操作。界面输出的数据（如最大信息系数、均方根误差等）均可以选中这些数据进行复制。

### 程序流程规范

当用户选择数据后，需要选择导入算法中的自变量和因变量，这里用户必须得选择自变量和因变量且都不能为空，否则将不能继续进行下去。选择完自变量和因变量后，单击模型参数设置进入CI\_AMB窗口可以直接进行开始建模。如果没有点开始建模就直接点击生成图形，将会弹出请先点击开始建模按钮对话框。这样设置是为了要符合逻辑。建模完成后在文本框上出现在不同K下的RMSE以及K=5时的处理数据的过程，然后点击生成图形可以在图上非常清晰的看出不同K下的RMSE并得出K=5时RMSE有最小值。用户还可以查看过滤无关特征后的候选特征子集和最优特征子集的特征。然后点击功能面板，用户可以点击过滤无关特征比较图和剔除冗余特征比较图模型图，然后看到原始特征子集分别与候选特征子集和最优特征子集的RMSE的比较。

### 命名规范

良好的命名规范是一种习惯，有利于团队的合作开发。为了更加清楚的展现程序及团队的便捷合作，本系统所有的命名采用了一系列有规范的命名方式并与其程序本身的功能相适应，关系清晰，普通人都非常容易看懂它的含义。

#### 文件命名

系统中Python文件命名，都是由单词组成，且这些实现一个界面的文件一般都会放在一个文件夹中。.py文件一般由几个单词组成，例如第一个单词为CI\_AMB，第二个单词为Main或Model1或Model2，表示基于CI\_AMB的算法。同时文件名必须保证唯一性，可以根据不同的算法和内容给予不同的命名。

#### 类命名

采用大小写混合的方式，名字的首字母使用大写，即Python类的命名规则；类名是个名词，大写的字母用来间隔，其它的字母为小写，即驼峰格式形式。

例如主窗口的类名：MainFrame。第一单词为Main，第二单词为Frame，首字母大写，表示主窗口的类。还有其他的类的命名：PageOne、PageTwo、PageThree。表示第一页选项卡、第二页选项卡和第三页选项卡。

#### 控件命名

在此系统中，每个控件都是由其代表的意义，用大写字母开头，其他字母为小写，大写字母分隔单词的方式命名。

如控件按钮名：Button3、Button6，或者其它控件名：text\_top01、textContents001、OpenButton、CheckBox等。

#### 方法命名

方法命名的规则：在导入数据的界面中根据方法的作用命名方法。在CI\_AMB的界面中第一个单词是以On开头；之后的单词为该方法对应的控件名，则以大写字母作为开头。

如一些控件按钮和方法所对应的方法名：On\_Button3、judge、readtxt等。

# 平台的实现

## 开发环境简介

|  |  |
| --- | --- |
| 选项 | 详情 |
| 开发语言 | Python |
| 开发工具 | PyCharm |
| 开发框架 | PyQt5 |
| 版本控制 | Git |
| 代码托管 | GitHub |
| 操作系统 | Windows 2007 |

## 系统界面展示

# 实验结果与分析

## 实验设置

本次实验使用了两个数据集。数据来源于参附注射液治疗心源性休克的物质基础实验数据。实验数据是负模式下的中期实验数据。采用左冠状动脉前降支近心尖端复制中期心源性休克大鼠模型，分别给予休克模型大鼠0.1、0.33、1.0、3.3、10、15和20（单位: ml·kg-1）共7种剂量参附注射液，给药60min后，采集药效指标：血红细胞流速（μm/s）、血管管径（μm）、白细胞粘附数(个)、血管通透性。采集血样，制备血清。血清经前处理后，负模式检测血清中物质信息（分子量范围 100-1200）。血清物质检测到物质信息分为总体上分为两部分：一部分为实验个体本身具有的物质，称为内源性物质；另一部分为，参附注射液中所含有的物质信息，称之为外源性物质。

表 6.1实验数据对照表

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 空白组 | NK-1 | NK-2 | NK-3 | NK-4 | NK-5 | NK-6 |  |
| 模型组 | NM-1 | NM-2 | NM-3 | NM-4 | NM-5 | NM-6 |  |
| 给药组 | N7-1~N7-6 | N6-1~N6-6 | N5-1~N5-6 | N4-1~N4-6 | N3-1~N3-6 | N2-1~N2-6 | N1-1~N1~6 |

空白组是没有对实验个体进行任何处理，模型组是对实验个体进行了结扎手术，给药组是在模型组的基础上进行不同的给药剂量。

给药组是在模型组的基础上进行给药后，所给入的药就是外源性物质。加入外源性物质后，会对内源性物质造成相应的影响。

共有54个样本，检测到了11481种物质。包含了内源性物质(因变量)和外源性物质(自变量)。

数据集1是内源性物质数据集，含有10283个特征。数据集2是外源性物质数据集，含有798个特征。两组数据都含有54个样本。两个数据集都以特征为自变量，药物疗效y1为因变量。两个数据集部分数据如表格 1与表格 2：

表格 1 数据集1

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | x1 | x2 | x3 | x4 | ...... | x798 | y1 |
| N1-1 | 0 | 55.0697 | 0 | 32.8537 | ...... | 0 | 710 |
| N1-2 | 3.52673 | 182.328 | 0 | 60.2585 | ...... | 0 | 810 |
| N1-3 | 0.488083 | 302.16 | 161.099 | 144.641 | ...... | 0 | 750 |
| N1-4 | 13.066 | 0 | 0 | 0 | ...... | 0 | 700 |
| N1-5 | 13.2609 | 0 | 0 | 0 | ...... | 0 | 635 |
| N1-6 | 0 | 21.9454 | 0 | 36.1135 | ...... | 0 | 625 |
| .... | ...... | ...... | ...... | ...... | ...... | ...... | ...... |
| NK-6 | 0 | 0 | 0 | 0 | ...... | 0 | 2970 |

表格 2 数据集2

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | x1 | x2 | x3 | x4 | ...... | x10283 | y1 |
| N1-1 | 54.2493 | 764.329 | 3.37756 | 488.606 | ...... | 764.458 | 710 |
| N1-2 | 39.2547 | 875.465 | 11.9517 | 752.572 | ...... | 122.663 | 810 |
| N1-3 | 56.279 | 870.161 | 10.0906 | 550.534 | ...... | 135.268 | 750 |
| N1-4 | 43.3935 | 916.064 | 11.8289 | 617.265 | ...... | 66.1573 | 700 |
| N1-5 | 77.3793 | 942.699 | 9.18605 | 595.946 | ...... | 905.342 | 635 |
| N1-6 | 52.6805 | 879.99 | 9.85215 | 743.175 | ...... | 71.944 | 625 |
| ..... | ...... | ...... | ...... | ...... | ...... | ...... | ...... |
| NK-6 | 75.3358 | 1091.93 | 9.06606 | 607.036 | ...... | 1029.82 | 2970 |

## 结果分析

# 总结与展望

## 本文总结

## 展望

# 参考文献

* 1. 王 翔，胡学钢 .高维小样本分类问题中特征选择研究综述，2017．09
  2. Ayça Çakmak Pehlivanlı. A novel feature selection scheme for high-dimensional data sets: four-Staged Feature Selection, 2016，Vol. 43, No. 6, 1140–1154.
  3. SEBASTIANI F. Machine Learning in Automated Text Categorization [J]. ACM Computing Surveys, 2002, 34(1): 1-47.
  4. MENGLE S SR, GOHARIAN N. Ambiguity Measure Feature-Selection Algorithm [J]. Journal of the American Society for Information Science and Technology, 2009, 60(5): 1037-1050.
  5. FRAGOUDIS D, MERETAKIS D, LIKOTHANASSIS S. Best terms: an efficient feature-selection algorithm for text categorization [J]. Knowledge and Information Systems, 2005, 8(1): 16-33.
  6. OGURA H, AMANO H, KONDO M. Feature selection with a measure of deviations from Poisson in text categorization [J]. Expert Systems with Applications, 2009, 36(3, Part 2): 6826-6832.
  7. YANGJ, LIU Y, LIU Z, et al. A new feature selection algorithm based on binomial hypothesis testing for spam filtering [J]. Knowledge-Based Systems, 2011, 24(6): 904-914.
  8. YANGJ, LIU Y, ZHU X, et al. A new feature selection based on comprehensive measurement both in inter-category and intra-category for text categorization [J]. Information Processing and Management, 2012, 48(4): 741-754.
  9. 张平.基于过滤法的信息论特征选择算法研究,2018.
  10. 张尧.基于互信息的特征选择方法研究,2019.
  11. HSUWH. Genetic wrappers for feature selection in decision tree induction and variable ordering in Bayesian network structure learning [J]. Information Sciences, 2004, 163(1-3): 103-122.
  12. SIEDLECKIW, SKLANSKY J. A note on genetic algorithms for large-scale feature selection [J]. Pattern Recognition Letters, 1989, 10(5): 335-347.
  13. LIL, WEINBERGCR, DARDEN TA, etal. Gene selection for sample classification based on gene expression data: study of sensitivity to choice of parameters of the GA/KNN method [J]. Bioinformatics, 2001, 17(12): 1131-1142.
  14. SHIMAK, TO DO RIKIM, SUZUKIA. SVM-based feature selection of latent semantic features [J]. Pattern Recognition Letters, 2004, 25(9): 1051-1057.
  15. HUANG C J, YANG D X, CHUANG Y T. Application of wrapper approach and composite classifier to the stock trend prediction [J]. Expert Systems with Applications, 2008, 34(4): 2870-2878.
  16. FOITHONGS, PINNGERNO, ATTACHOOB. Feature subset selection wrapper based on mutual information and rough sets [J]. Expert Systems with Applications, 2012, 39(1): 574-584.
  17. 张靖.面向高维小样本数据的分类特征选择算法研究,2014.
  18. 张凯.高维小样本数据的互信息特征选择方法研究
  19. 刘家锋，赵巍，朱海龙，金野编著；唐降龙主审 ．《模式识别》．哈尔滨：哈尔滨工业大学出版社，2014.
  20. Lei Yu, Huan Liu. Efﬁcient feature selection via analysis of relevance and redundancy [J]. J of Machine Learning Research, 2004, 5(1): 1205-1224.