國立臺灣大學工學院工業工程學研究所

碩士論文

Institute of Industrial Engineering

College of Engineering

National Taiwan University

Master Thesis

針對二元變數提升預測表現的種類變數編碼方式

Encoding Methods for Binary to Categorical Variable for Prediction Performance Enhancement

楊雲皓

Yun-Hao Yang

指導教授：藍俊宏 博士

Advisor: Jakey Blue, Ph.D.

中華民國111年06月

June, 2022

# 摘要

人工智慧、機器學習與深度學習在近年來被廣泛的應用於各個領域當中；不論是影像辨識、自然語言處理或是機台數值預測。遍及了製造業、金融業、市場銷售、與影像醫學辨識的各領域實作者，皆前仆後繼地設法將機器學習應用於遭遇的問題上，來提升日常工作的效率與準確度。然而，機器學習的模型表現並不端看模型建置的技巧與超參數的調教與設置，資料的前處理與編碼方式對於模型表現也有著極為深遠的影響。例如，在處理含有字串的類別特徵時，我們便需使用獨熱編碼 (One-hot encoding)來將類別變數中的字串特徵轉換成二元變數，以利於作為輸入資料供模型讀取。但若是類別變數的種類繁多，進行獨熱編碼後將產生眾多的二元變數特徵，如此將稀釋該特徵的資訊、並面臨維數災難 (Curse of dimensionality)這一窘境。此外編碼出的二元特徵也不全然與分類、回歸有關聯關係；更甚者，二元變數特徵本身在一定程度上便違反了機器學習演算法的假設。

本研究提出了監督式與非監督式的編碼方式協助二元資料轉換為整數型別的類別變數，以求解決以上提及的問題。透過二元特徵之間的關聯關係、PCA權重等方式群組特徵，再根據各組間特徵自身的屬性進行排序後編碼成整數的類別變數。力求在縮減維度、提升處理速度的同時，維持模型的整確性與變數的可解釋性。

**關鍵字**：類別變數、獨熱編碼、監督式／非監督式學習、二元變數編碼

# Abstract

AI techniques have recently been widely applied to the tasks of image recognition and natural language processing. Practitioners from fields such as manufacturing, finance, marketing, and radiology are eager to implement AI methods to enhance daily efficiency and effectiveness. However, AI method performance depends on not only the modeling skills and hyperparameters tuning but also the data preprocessing and encoding. While handling categorical variables, one-hot encoding is commonly used to convert strings into binary features, which can then serve as the input for model training/testing. If the number of categorical levels is large, it consequently creates a large number of features, and the curse of dimensionality would be an essential concern. Furthermore, the one-hot encoding features are created based on the levels of categorical variables and do not guarantee to be related to the classification/regression tasks. Not to mention that the binary feature values often violate the assumptions in machine learning algorithms.

In this research, we develop unsupervised and supervised encoding methods to tackle the aforementioned issues. In unsupervised encoding, we compare the feature properties, such as the column sparsity, PCA-weight, and feature importance, for consolidating related features into a semi-continuous one via binary encoding. In supervised encoding, an optimization scheme is proposed to incorporate the performance improvement of the classifier/regressor and the consolidating orders of the binary features. It is expected to reduce the number of binary features significantly as well as to enhance the classification/regression accuracy through inputting the consolidated features.

**Keywords**—categorical variable, one-hot encoding, supervised/unsupervised encoding, binary encoding

# 目錄

(只要樣式定義完善，目錄最後可以自動產生)

# 圖目錄

(只要樣式定義完善，目錄最後可以自動產生)

# 表目錄

(只要樣式定義完善，表目錄最後可以自動產生)

# 緒論

本章節將描述將二元變數特徵作為機器學習模型的輸入時，所面臨到的窘境。

## 1.1 研究背景

在機器學習的過程之中，難免會遭遇到字串型別的類別特徵。為了將類別特徵輸入模型之中，必須透過各式編碼方式 (Encoding methods)轉換類別變數；例如，當面臨以字串描述體積的類別特徵：{「大」、「中」、「小」}時，我們可以依照相對體積的順序關係，將其編碼為{「大：3」、「中：2」、「小：1」}如此便能作為模型的輸入，此為序號編碼（Ordinal encoding）。然而，當今天面臨的是描述城市種類的類別變數：{「紐約」、「倫敦」、「東京」}時，由於城市之間並不存在著明顯的順序關係，若是編碼成{「紐約：1」、「倫敦：2」、「東京：3」}會使得訓練模型誤解城市之間的關聯性。為此可以考慮使用頻率編碼 (Frequency encoding)或是目標編碼 (Target encoding)，透過變數出現的頻率或是百分比取代變數本身，在種類較少、比例平衡的資料集當中可採用以上兩種編碼方式，編碼成：{「紐約：0.3」、「倫敦：0.2」、「東京：0.5」}。倘若面對的特徵種類繁多，或含有比例相近，則會使這兩種編碼優勢消失：{「紐約：0.2」、「倫敦：0.2」、「東京：0.2」、「台北：0.3」、「上海：0.1」}從而將不同種類的變數混淆。

當面臨類別變數不存在順序關係、種類多且出現比例相近時，大多數的情形下只能透過讀熱編碼 (One-Hot encoding)來為每個種類產生新的虛擬變數(Dummy variable)：

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| City | | | | |
| New York | London | Tokyo | Taipei | Shanghai |
| 0 | 1 | 0 | 0 | 0 |

這些虛擬變數間將存在互斥關係，因而有高度的關聯性，並且稀釋了原先單一特徵的資訊。而特徵中的種類越多，也將產生更多的虛擬變數，在模型訓練時也將消耗更多的記憶體與運算時間。但在製造業當中，讀熱編碼過、同時虛擬欄位眾多的資料卻相當常見，常見於製品於製造過程中通過的機台或是工序，該如何前處理這些相互關聯的二元特徵也成了一大問題。



圖1 Lakers Logo.

內文

表1 表格範例。

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 這是表格 | 這是表格 | 這是表格 |
| 這是表格 | 這是表格 | 這是表格 |
| 這是表格 | 這是表格 | 這是表格 |
| 這是表格 | 這是表格 | 這是表格 |

內文

### 1.1.1 (使用標題3樣式)

內文

## 1.2 研究動機與目的

本研究試圖透過監督以及非監督式的方法，對眾多相互關聯的二元變數進行群組、排序與編碼後，以求大幅度縮減資料維度、壓縮資料資訊、縮減模型讀取時間、並在一定程度上維持或提升機器學習模型對於資料的分類結果。主要目標可分為以下幾點。

1. 縮減資料特徵個數：

維度的增加對於機器學習模型的成果有著負面影響，過多的維度將使得模型難以收斂、延長訓練資源與計算時間。透過對二元特徵群組後進行編碼，將能大幅度的縮減特徵總數。

1. 壓縮特徵資訊：

經由讀熱編碼過後，總體資訊不改變，但特徵總數的上升；意味著眾多二元特徵瓜分了原先單一特徵所包含的資訊。透過群組後編碼二元特徵，以求提升特徵平均的資訊含量與重要性。

1. 產生相互獨立的特徵：

多數的二元特徵與彼此有著強烈的互斥關係，而特徵與特徵間的不獨立導致的共線性問題，也代表著特徵能用以預測彼此。

1. 維持或提升編碼過後資料的分類成果：

二元特徵，即包含大量0的資料對於機器模型也造成一大問題。當模型再進行優化與求解時大多仰賴梯度計算，而眾多的0將使模型無法計算梯度，導致模型的訓練緩慢。

透過light GBM分類模型進行比較，針對原先二元資料與編碼後的新資料做分類效度的對比

## 1.3 研究架構

本研究程序如下圖所示，主要目標為透過對於二元特徵的資料進行群組後的排序、與編碼，來壓縮資料並維持一定程度上的分類成果。先由第二章文獻回顧闡明變數編碼的用意與目的、多維度二元特徵資料在以機器學習模型分類時所遭遇的難題。第三章研究方法中，描述本研究如何對於多維度二元特徵資料進行相關特徵群組、組間特徵排序、以及特徵組的編碼。第四章案例分析將透過產生的測試資料結合本研究所提出之方法，與原始資料一同給予機器學習模型做分類成果的比較。第五章結論建議部分則對於根據案例實施的成果做出總結，並歸納出未來本研究的後續發展方向。

# 文獻探討

本章節探討研究欲解決之問題，與研究之相關文獻

## 2.1 變數編碼

在甫收集完資料，進入機器模型建模之前，必須先經過的資料的前處理(Data Preprocessing)這一步驟。資料的清理與型態調整、資料探索與視覺化(EDA)或是特徵工程(Feature Engineering)都是本階段的目標；而變數編碼便旨在調整資料的型態，以轉換成適合模型的輸入，此過程也稱為(ETL, Extract-Transform-Load)。

需要進行轉換處理的資料為無法經由數學運算的變數型態，像是「字串」、「布林」的變數類形，就必須在輸入模型之前進行變數編碼。除了類型之外，更可以根據變數本身有無順序關係的特性再進行細分成「有序的」、或是「無序的」。若變數本身存在順序關係，便能以順序來為變數進行編碼，此為序號編碼（Ordinal encoding）；倘若變數間無順序關係，則必須透過讀熱編碼(One-Hot encoding)來轉換該類別特徵成為許多相互互斥的虛擬變數。

## 2.2 維度災難

維度災難（Curse of dimensionality）是描述在相同的樣本個數之下，當特徵、即樣本的空間維度增加時，資料分布範圍也隨之增加，而導致樣本之間距離增大，數據變得更為稀疏，從而使機器學習模型的分類能力隨著下降。

稀疏性會使得大多統計手法的結論難有意義、同時也讓樣本間的距離計算失去代表性；而過多的維度將使得大多數機器學習模型難以收斂與有效的訓練，分類成效也將隨著維度上升而急遽下降。

## 2.3 特徵選取

特徵選取(Feature selection)旨在從資料集原有的特徵之中挑選出最具待表性、富有資訊的重要特徵；換言之便是從資料集中移除部分不重要、不具備夠多信息的無用特徵。若特徵選取得當，留下了皆是極具鑑別能力的特徵，便能簡化機器學習模型的訓練時間，

# 針對多維度二元特徵資料的變數編碼

經由第二章文獻探討得以發現，以多維度二元特徵資料作為機器學習模型的輸入時所遭遇到的難題，

## 3.1依據特徵工程群組二元特徵

|  |  |
| --- | --- |
|  | (11) |

(方程式最後再把外框改為透明即可)

## 3.2 排序組間特徵

## 3.3 對各特徵組進行二進碼十進數編碼

# 案例研討

內文

# 結論與建議

內文

# 參考文獻列表

APA格式，依照第一作者姓的字母排序，第一作者同姓則比第二作者，如果兩論文作者全部相同，則以年代較舊者先列。各式文獻範本如下：

<https://apastyle.apa.org/style-grammar-guidelines/references/examples>

<https://subjectguides.library.american.edu/c.php?g=675993&p=4847486>

# 附錄 A (如果有)