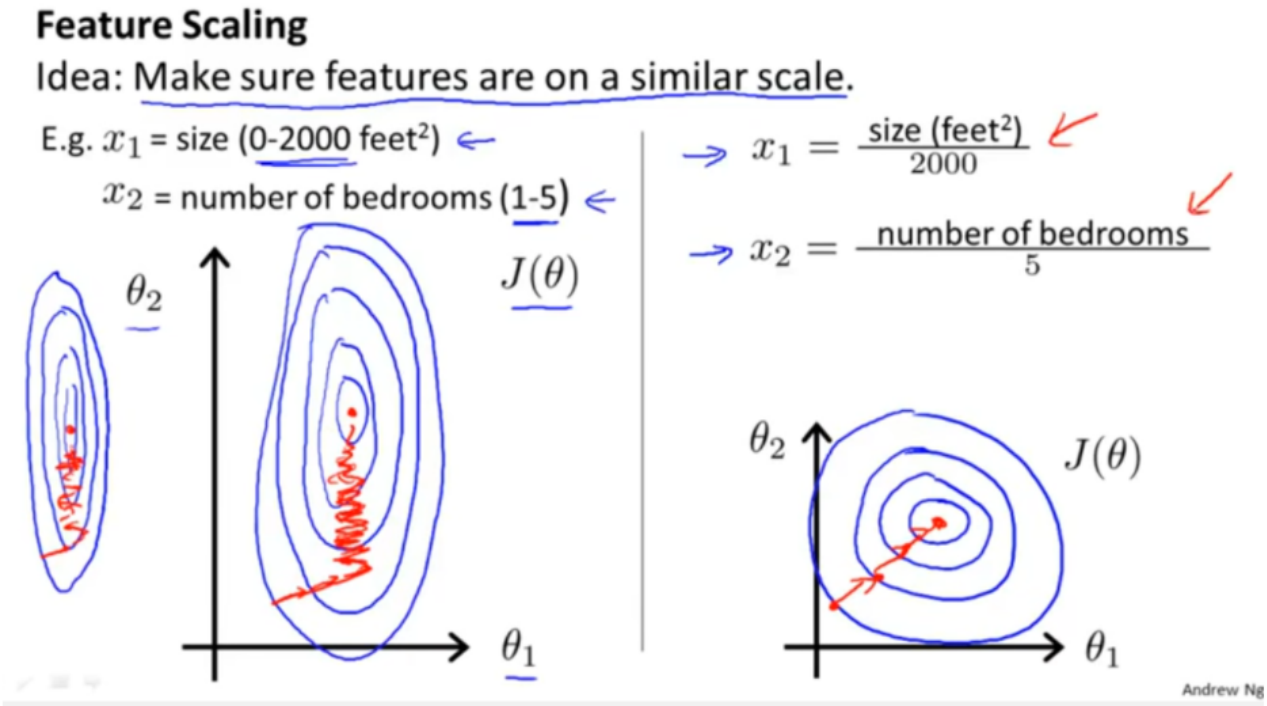
深入探讨：为什么要做特征归一化/标准化？

Feature scaling，常见的提法有“特征归一化”、“标准化”，是数据预处理中的重要技术，有时甚至决定了算法能不能work以及work得好不好。谈到feature scaling的必要性，最常用的2个例子可能是：

- **特征间的单位（尺度）可能不同**，比如身高和体重，比如摄氏度和华氏度，比如房屋面积和房间数，一个特征的变化范围可能是[1000, 10000]，另一个特征的变化范围可能是[−0.1,0.2]，在进行距离有关的计算时，单位的不同会导致计算结果的不同，尺度大的特征会起决定性作用，而尺度小的特征其作用可能会被忽略，**为了消除特征间单位和尺度差异的影响，以对每维特征同等看待，需要对特征进行归一化**。

- 原始特征下，**因尺度差异，其损失函数的等高线图可能是椭圆形**，梯度方向垂直于等高线，下降会走zigzag路线，而不是指向local minimum。通过对特征进行zero-mean and unit-variance变换后，其损失函数的等高线图更接近圆形，梯度下降的方向震荡更小，收敛更快，如下图所示，图片来自Andrew Ng。



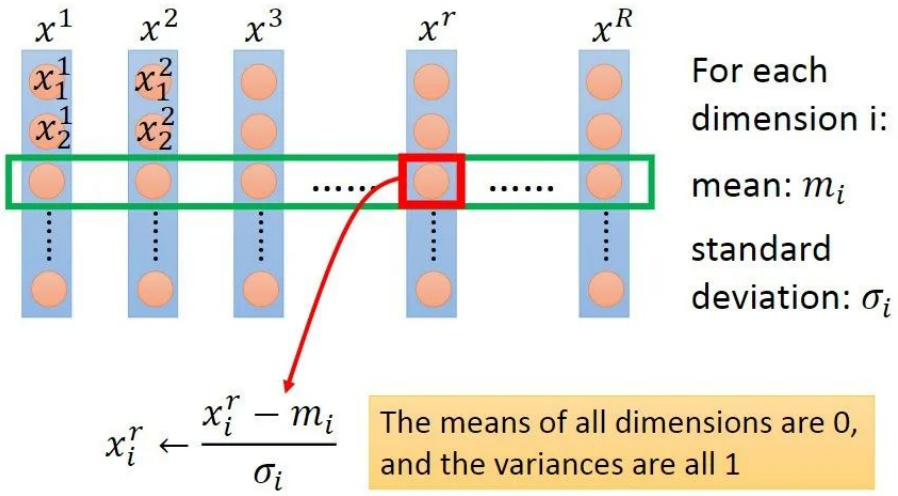
对于feature scaling中最常使用的Standardization，似乎“无脑上”就行了，本文想多探究一些为什么，

- 常用的feature scaling方法都有哪些？
- 什么情况下该使用什么feature scaling方法？有没有一些指导思想？
- 所有的机器学习算法都需要feature scaling吗？有没有例外？
- 损失函数的等高线图都是椭圆或同心圆吗？能用椭圆和圆来简单解释feature scaling的作用吗？
- 如果损失函数的等高线图很复杂，feature scaling还有其他直观解释吗？

根据查阅到的资料，本文将尝试回答上面的问题。但笔者能力有限，空有困惑，能讲到哪算哪吧（微笑）。

常用feature scaling方法

在问为什么前，先看是什么。
给定数据集，令特征向量为x，维数为D，样本数量为R，可构成D×R的矩阵，一列为一个样本，一行为一维特征，如下图所示，图片来自Hung-yi Lee pdf-Gradient Descent：



feature scaling的方法可以分成2类，逐行进行和逐列进行。逐行是对每一维特征操作，逐列是对每个样本操作，上图为逐行操作中特征标准化的示例。
具体地，常用feature scaling方法如下，来自wiki，

Rescaling (min-max normalization、range scaling)：

$$x' = a + \frac{(x - \min(x))(b - a)}{\max(x) - \min(x)}$$

将每一维特征线性映射到目标范围[a,b]，即将最小值映射为a，最大值映射为b，常用目标范围为[0,1]和[−1,1]，特别地，映射到[0,1]计算方式为：

$$x' = \frac{x - \min(x)}{\max(x) - \min(x)}$$

Mean normalization：

$$x' = \frac{x - \bar{x}}{\max(x) - \min(x)}$$

将**均值映射为0**，同时用最大值最小值的差对特征进行归一化，一种更常见的做法是用标准差进行归一化，如下。

Standardization (Z-score Normalization)：

$$x' = \frac{x - \bar{x}}{\sigma}$$

每维特征**0均值1方差（zero-mean and unit-variance）**。

Scaling to unit length：

$$x' = \frac{x}{\|x\|}$$

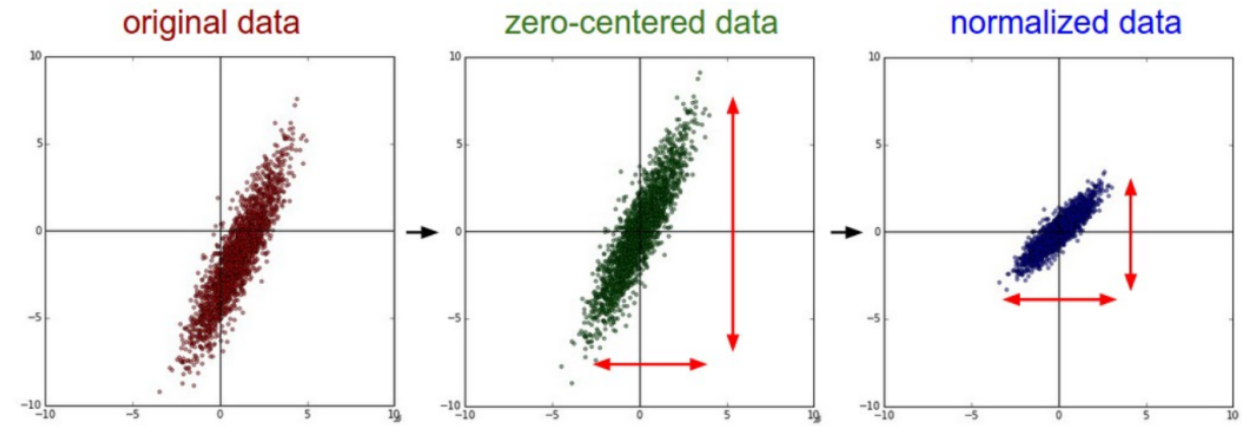
将每个样本的特征向量除以其长度，即对样本特征向量的长度进行归一化，长度的度量常使用的是L2 norm（欧氏距离），有时也会采用L1 norm，不同度量方式的一种对比可以参见论文“CVPR2005-Histograms of Oriented Gradients for Human Detection”。
上述4种feature scaling方式，前3种为逐行操作，最后1种为逐列操作。
容易让人困惑的一点是指代混淆，Standardization指代比较清晰，但是单说Normalization有时会指代min-max normalization，有时会指代Standardization，有时会指代Scaling to unit length。

计算方式上对比分析

前3种feature scaling的计算方式为**减一个统计量再除以一个统计量**，最后1种为**除以向量自身的长度**。

- **减一个统计量**可以看成**选哪个值作为原点，是最小值还是均值，并将整个数据集平移到这个新的原点位置**。如果特征间偏置不同对后续过程有负面影响，则该操作是有益的，可以看成是某种**偏置无关操作**；如果原始特征值有特殊意义，比如稀疏性，该操作可能会破坏其稀疏性。
- **除以一个统计量**可以看成在**坐标轴方向上对特征进行缩放**，用于**降低特征尺度的影响，可以看成是某种尺度无关操作**。缩放可以使用最大值最小值间的跨度，也可以使用标准差（到中心点的平均距离），前者对outliers敏感，outliers对后者影响与outliers数量和数据集大小有关，outliers越少数据集越大影响越小。
- **除以长度**相当于把长度归一化，**把所有样本映射到单位球上**，可以看成是某种**长度无关操作**，比如，词频特征要移除文章长度的影响，图像处理中某些特征要移除光照强度的影响，以及方便计算余弦距离或内积相似度等。

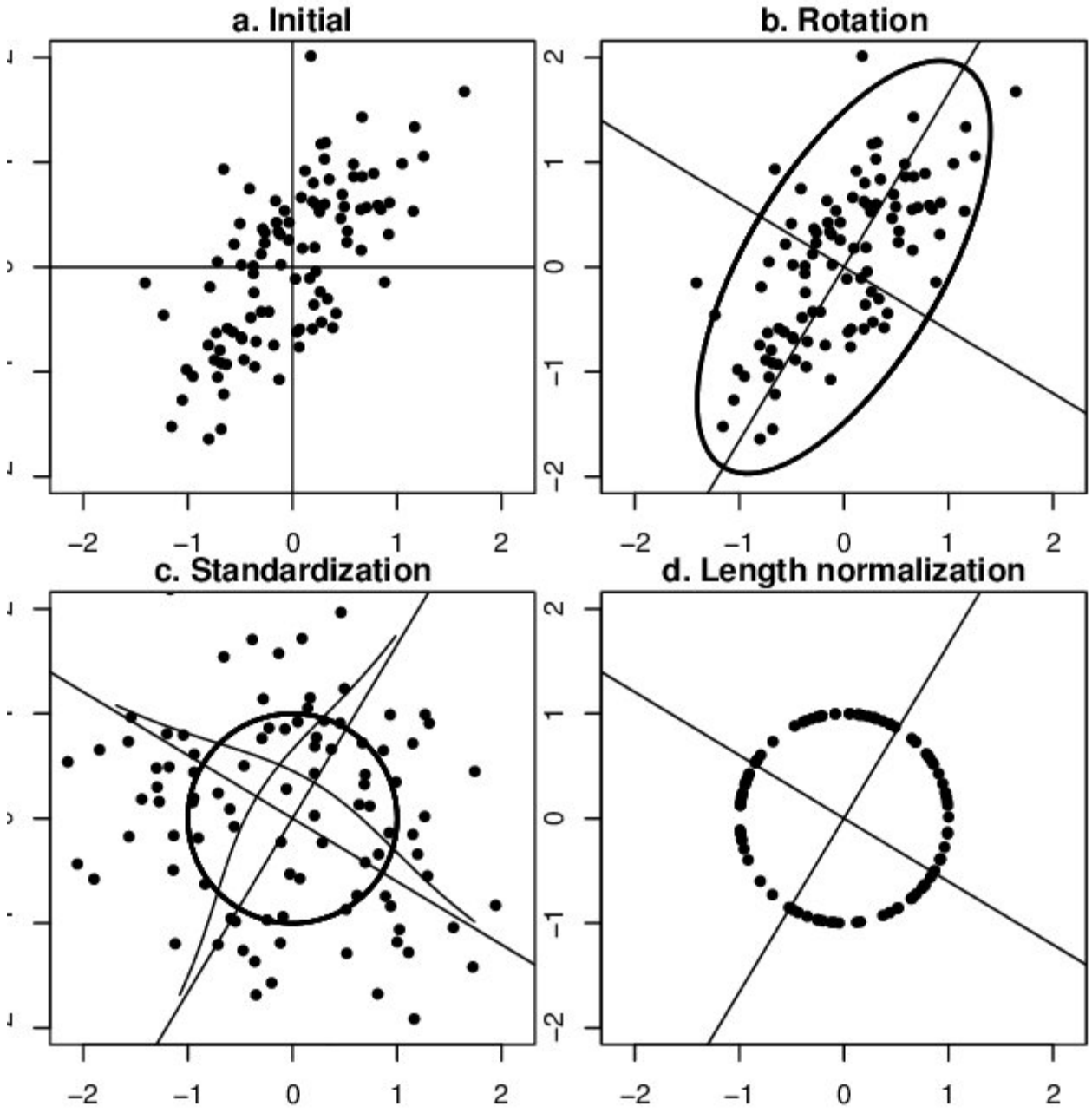
稀疏数据、outliers相关的更多数据预处理内容可以参见scikit learn-5.3. Preprocessing data。
从几何上观察上述方法的作用，图片来自CS231n-Neural Networks Part 2: Setting up the Data and the Loss，zero-mean将数据集平移到原点，unit-variance使每维特征上的跨度相当，图中可以明显看出两维特征间存在线性相关性，Standardization操作并没有消除这种相关性。



Common data preprocessing pipeline. **Left**: Original toy, 2-dimensional input data. **Middle**: The data is zero-centered by subtracting the mean in each dimension. The data cloud is now centered around the origin. **Right**: Each dimension is additionally scaled by its standard deviation. The red lines indicate the extent of the data - they are of unequal length in the middle, but of equal length on the right.

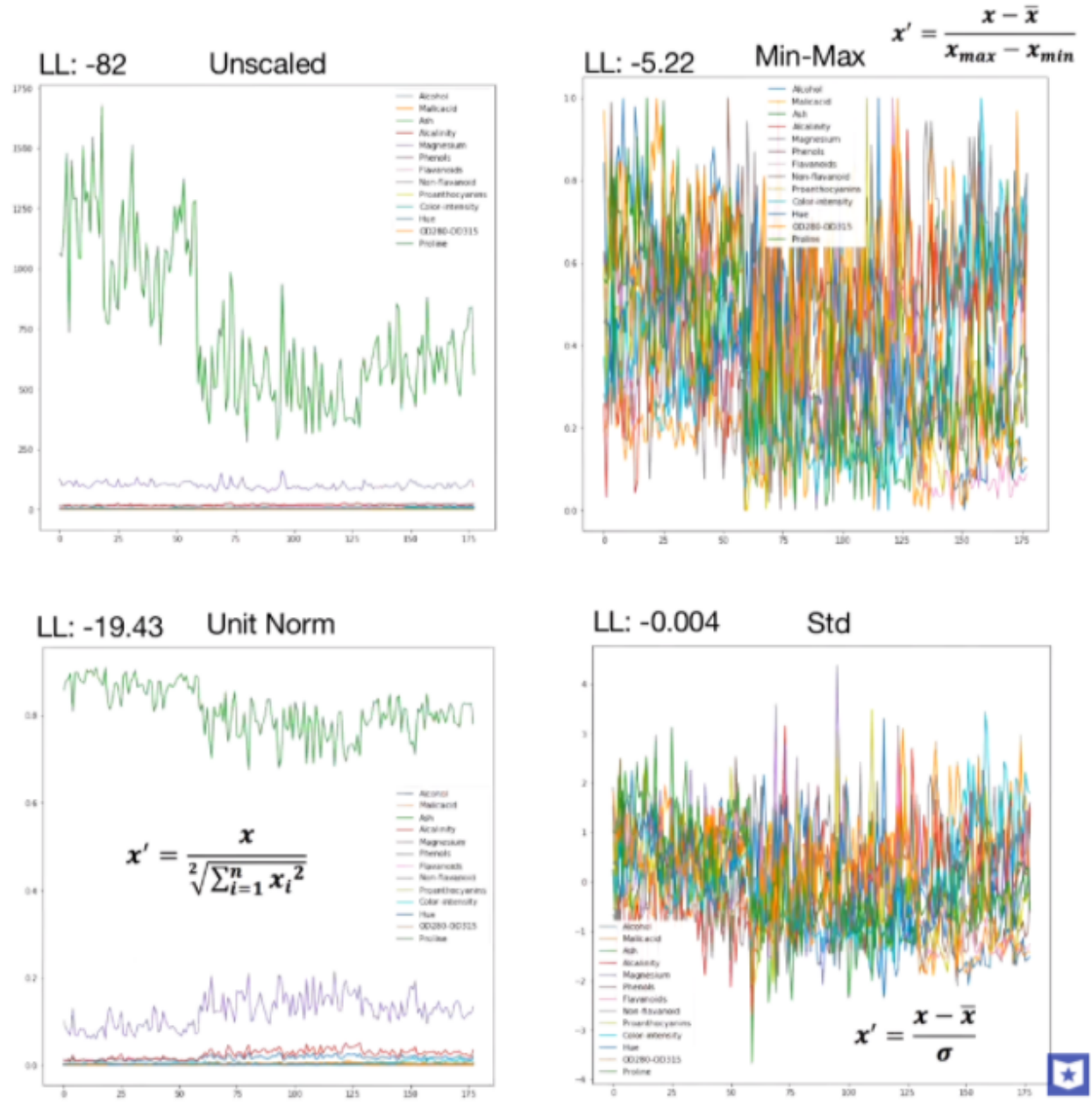
Standardization

可通过PCA方法移除线性相关性（decorrelation），即引入旋转，找到新的坐标轴方向，在新坐标轴方向上用“标准差”进行缩放，如下图所示，图片来自链接，图中同时描述了unit length的作用——将所有样本映射到单位球上。



Effect of the operations of standardization and length normalization

当特征维数更多时，对比如下，图片来自youtube，



总的来说，**归一化/标准化的目的是为了获得某种“无关性”——偏置无关、尺度无关、长度无关……当归一化/标准化方法背后的物理意义和几何含义与当前问题的需要相契合时，其对解决该问题就有正向作用，反之，就会起反作用。所以，“何时选择何种方法”取决于待解决的问题，即problem-dependent。**

feature scaling 需要还是不需要

下图来自data school-Comparing supervised learning algorithms，对比了几个监督学习算法，最右侧两列为是否需要feature scaling。

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O
1	Algorithm	Problem Type	Results interpretable by you?	Easy to explain algorithm to others?	Average predictive accuracy	Training speed	Prediction speed	Amount of parameter tuning needed (excluding feature selection)	Performs well with small number of observations?	Handles lots of irrelevant features well (separates signal from noise)?	Automatically learns feature interactions?	Gives calibrated probabilities of class membership?	Parametric?	Features might need scaling?	Algorithm
2	KNN	Either	Yes	Yes	Lower	Fast	Depends on n	Minimal	No	No	No	Yes	No	Yes	KNN
3	Linear regression	Regression	Yes	Yes	Lower	Fast	Fast	None (excluding regularization)	Yes	No	No	N/A	Yes	No (unless regularized)	Linear regression
4	Logistic regression	Classification	Somewhat	Somewhat	Lower	Fast	Fast	None (excluding regularization)	Yes	No	No	Yes	Yes	No (unless regularized)	Logistic regression
5	Naive Bayes	Classification	Somewhat	Somewhat	Lower	Fast (excluding feature extraction)	Fast	Some for feature extraction	Yes	Yes	No	No	Yes	No	Naive Bayes
6	Decision trees	Either	Somewhat	Somewhat	Lower	Fast	Fast	Some	No	No	Yes	Possibly	No	No	Decision trees
7	Random Forests	Either	A little	No	Higher	Slow	Moderate	Some	No	Yes (unless noise ratio is very high)	Yes	Possibly	No	No	Random Forests
8	AdaBoost	Either	A little	No	Higher	Slow	Fast	Some	No	Yes	Yes	Possibly	No	No	AdaBoost
9	Neural networks	Either	No	No	Higher	Slow	Fast	Lots	No	Yes	Yes	Possibly	No	Yes	Neural networks
10															

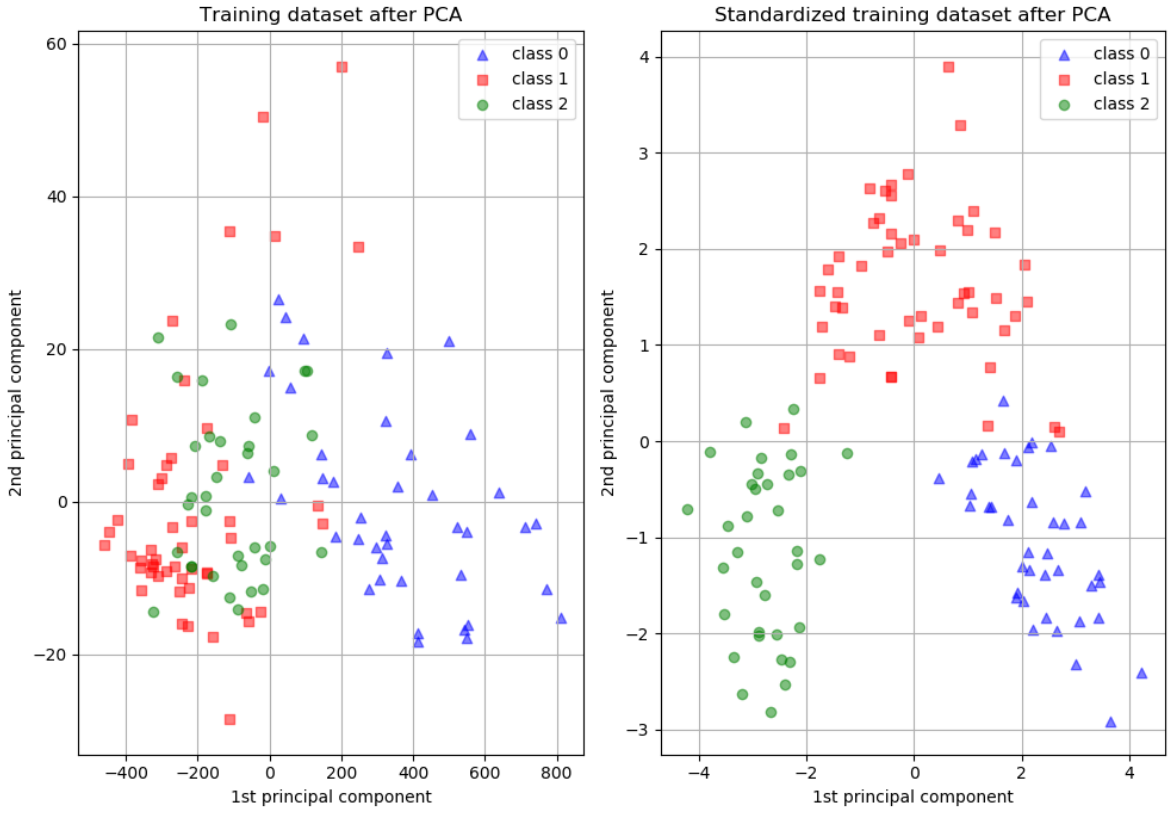
Comparing supervised learning algorithms

下面具体分析一下。

什么时候需要feature scaling？

> 涉及或隐含**距离计算**的算法，比如K-means、KNN、PCA、SVM等，一般需要feature scaling，因为：

zero-mean一般可以增加样本间余弦距离或者内积结果的差异，区分力更强，假设数据集集中分布在第一象限遥远的右上角，将其平移到原点处，可以想象样本间余弦距离的差异被放大了。在模版匹配中，zero-mean可以明显提高响应结果的区分度。
就欧式距离而言，**增大某个特征的尺度，相当于增加了其在距离计算中的权重，如果有明确的先验知识表明某个特征很重要，那么适当增加其权重可能有正向效果，但如果没有这样的先验，或者目的就是想知道哪些特征更重要，那么就需要先feature scaling，对各维特征等而视之**。
增大尺度的同时也增大了该特征维度上的方差，PCA算法倾向于关注方差较大的特征所在的坐标轴方向，其他特征可能会被忽视，因此，在PCA前做Standardization效果可能更好，如下图所示，图片来自scikit learn-Importance of Feature Scaling，



PCA and Standardization

- 损失函数中含有**正则项**时，一般需要feature scaling：对于线性模型y=wx+b而言，x的任何线性变换（平移、放缩），都可以被w和b“吸收”掉，理论上，不会影响模型的拟合能力。但是，如果损失函数中含有正则项，如λ||w||^2，λ为超参数，其对w的每一个参数施加同样的惩罚，但对于某一维特征xi而言，其scale越大，系数wi越小，其在正则项中的比重就会变小，相当于对wi惩罚变小，即损失函数会相对忽视那些scale增大的特征，这并不合理，所以需要feature scaling，使损失函数平等看待每一维特征。

- **梯度下降算法，需要feature scaling**。梯度下降的参数更新公式如下，

$$W(t+1) = W(t) - \eta \frac{dE(W)}{dW}$$

E(W)为损失函数，**收敛速度取决于：参数的初始位置到local minima的距离，以及学习率η的大小**。一维情况下，**在local minima附近**，不同学习率对梯度下降的影响如下图所示：

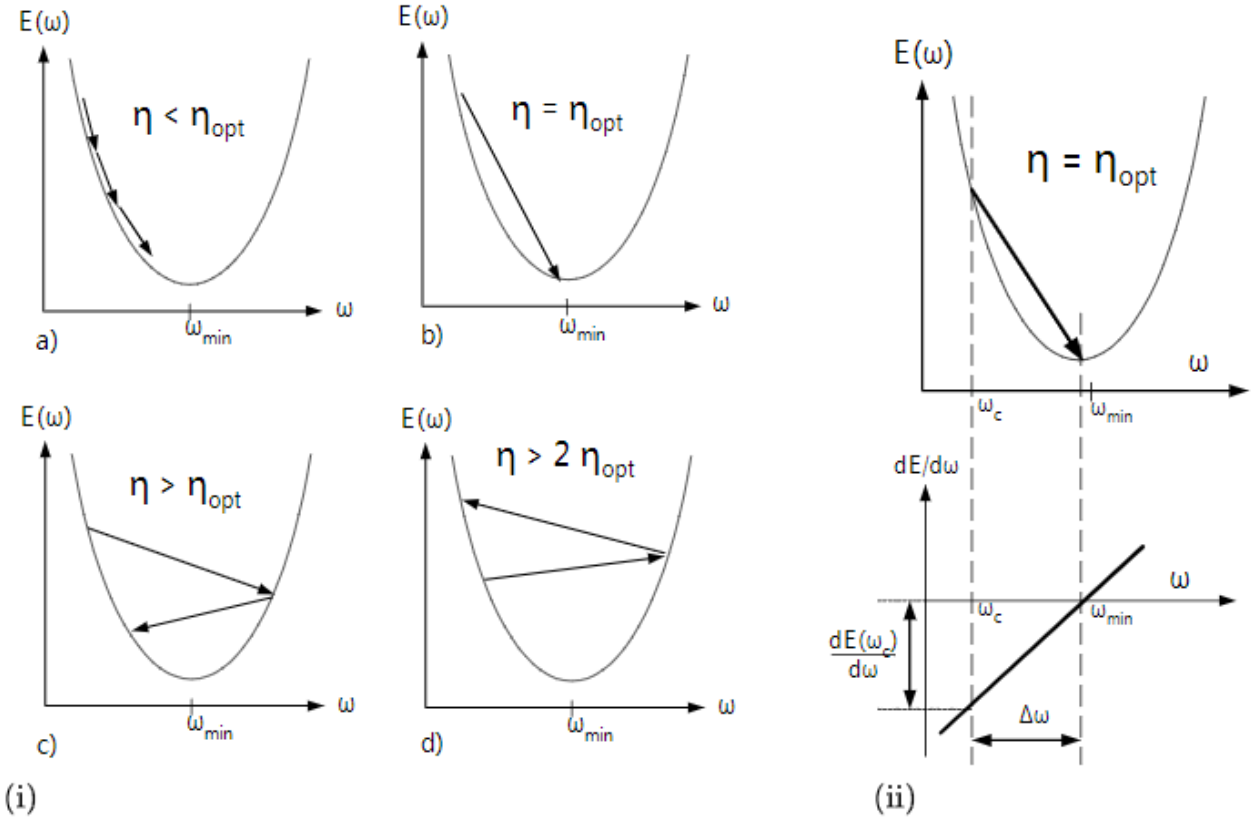


Fig. 6. Gradient descent for different learning rates.

Gradient descent for different learning rates

多维情况下可以分解成多个上图，每个维度上分别下降，参数W为向量，但学习率只有1个，即所有参数维度共用同一个学习率（暂不考虑为每个维度都分配单独学习率的算法）。收敛意味着在每个参数维度上都取得极小值，每个参数维度上的偏导数都为0，但是每个参数维度上的下降速度是不同的，为了每个维度上都能收敛，学习率应取所有维度在当前位置合适步长中最小的那个。下面讨论feature scaling对gradient descent的作用，

- **zero center与参数初始化相配合，缩短初始参数位置与local minimum间的距离，加快收敛**。模型的最终参数是未知的，所以一般随机初始化，比如从0均值的均匀分布或高斯分布中采样得到，对线性模型而言，其分界面初始位置大致在原点附近，bias经常初始化为0，则分界面直接通过原点。同时，为了收敛，学习率不会很大。而每个数据集的特征分布是不一样的，如果其分布集中且距离原点较远，比如位于第一象限遥远的右上角，分界面可能需要花费很多步骤才能“爬到”数据集所在的位置。所以，无论什么数据集，先平移到原点，再配合参数初始化，可以保证分界面一定会穿过数据集。此外，**outliers常分布在数据集的外围**，与分界面从外部向内挪动相比，从中心区域开始挪动可能受outliers的影响更小。

- 对于采用均方误差损失LMS的线性模型，损失函数恰为二阶，如下图所示

$$E(W) = \frac{1}{2P}\sum_{p=1}^{P}\left|d^p - \sum_i w_i x_i^p\right|^2$$

不同方向上的下降速度变化不同（二阶导不同，曲率不同），恰由输入的协方差矩阵决定，**通过scaling改变了损失函数的形状，减小不同方向上的曲率差异**。将每个维度上的下降分解来看，给定一个下降步长，如果不够小，有的维度下降的多，有的下降的少，有的还可能在上升，损失函数的整体表现可能是上升也可能是下降，就会不稳定。**scaling后不同方向上的曲率相对更接近，更容易选择到合适的学习率，使下降过程相对更稳定。**

- 另有从Hessian矩阵特征值以及condition number角度的理解，详见Lecun paper-Efficient BackProp中的Convergence of Gradient Descent一节，有清晰的数学描述，同时还介绍了白化的作用——解除特征间的线性相关性，使每个维度上的梯度下降可独立看待。

- 文章开篇的椭圆形和圆形等高线图，仅在采用均方误差的线性模型上适用，其他损失函数或更复杂的模型，如深度神经网络，**损失函数的error surface可能很复杂，并不能简单地用椭圆和圆来刻画**，所以用它来解释feature scaling对所有损失函数的梯度下降的作用，似乎过于简化，见Hinton vedio-3.2 The error surface for a linear neuron。

- 对于损失函数不是均方误差的情况，只要权重w与输入特征x间是相乘关系，损失函数对w的偏导必然含有因子x，w的梯度下降速度就会受到特征x尺度的影响。理论上为每个参数都设置上自适应的学习率，可以吸收掉x尺度的影响，但在实践中出于计算量的考虑，往往还是所有参数共用一个学习率，此时x尺度不同可能会导致不同方向上的下降速度悬殊较大，学习率不容易选择，下降过程也可能不稳定，通过scaling可对不同方向上的下降速度有所控制，使下降过程相对更稳定。

- 对于传统的神经网络，对输入做feature scaling也很重要，因为采用sigmoid等有饱和区的激活函数，如果输入分布范围很广，参数初始化时没有适配好，很容易直接陷入饱和区，导致**梯度消失**，所以，需要对输入做Standardization或映射到[0,1]、[−1,1]，配合精心设计的参数初始化方法，对值域进行控制。但自从有了Batch Normalization，每次线性变换改变特征分布后，都会重新进行Normalization，似乎可以不太需要对网络的输入进行feature scaling了？但习惯上还是会做feature scaling。

什么时候不需要Feature Scaling？

与距离计算无关的概率模型，不需要feature scaling，比如Naive Bayes；
与距离计算无关的基于树的模型，不需要feature scaling，比如决策树、随机森林等，树中节点的选择只关注当前特征在哪里切分对分类更好，即只在意特征内部的相对大小，而与特征间的相对大小无关。

小结

这篇文章写得十分艰难，一开始以为蛮简单直接，但随着探索的深入，冒出的问号越来越多，打破了很多原来的“理所当然”，所以，在写的过程中不停地做加法，很多地方想解释得尽量直观，又不想照搬太多公式，但自己的理解又不够深刻，导致现在叙述这么冗长，希望以后在写文时能更专注更精炼。

参考文献

1.wiki-Feature scaling
2.wiki-Backpropagation
3.[Hung-yi Lee pdf-Gradient Descent]
(<http://speech.ee.ntu.edu.tw/~tlkagk/courses/ML_2016/Lecture/Gradient Descent (v2).pdf>)
4.quora-Why does mean normalization help in gradient descent?
5.scikit learn-Importance of Feature Scaling
6.scikit learn-5.3. Preprocessing data
7.scikit learn-Compare the effect of different scalers on data with outliers
8.data school-Comparing supervised learning algorithms
9.Lecun paper-Efficient BackProp
10.Hinton vedio-3.2 The error surface for a linear neuron
11.CS231n-Neural Networks Part 2: Setting up the Data and the Loss
12.ftp-Should I normalize/standardize/rescale the data?
13.medium-Understand Data Normalization in Machine Learning
14.Normalization and Standardization
15.How and why do normalization and feature scaling work?
16.Is it a good practice to always scale/normalize data for machine learning?
17.When conducting multiple regression, when should you center your predictor variables & when should you standardize them?