

Dealing with Missing Data

缺失值

用代数、统计、机器学习算法补齐缺失值



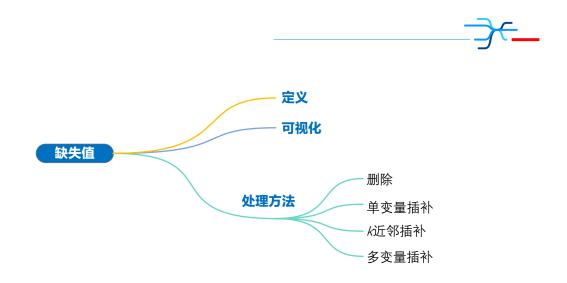
若上天再给一次机会, 让我重新开始学业, 我定会听从柏拉图, 先学数学。

If I were again beginning my studies, I would follow the advice of Plato and start with mathematics.

—— 伽利略·伽利莱 (Galilei Galileo) | 意大利物理学家、数学家及哲学家 | 1564 ~ 1642



- df.dropna(axis = 0, how = 'any') 中 axis = 0 为按行删除, 设置 axis = 1表示按列删除。how = 'any'时,表示某行或列只要有一个缺失值,就删除该行或列;当 how = 'all',表示该行或列全部都为缺失值时,才删 除该行或列
- df.isna() 判断 Pandas 数据帧是否为缺失值,是便用 True 占位,否便用 False 占位
- df.notna() 判断 Pandas 数据帧是否为非缺失值,是缺失值使用 False 占位,不是缺失值采用 True 占位
- missingno.matrix() 绘制缺失值热图
- numpy.NaN 产生 NaN 占位符
- numpy.random.uniform() 产生满足连续均匀分布的随机数
- seaborn.heatmap() 绘制热图
- seaborn.pairplot() 绘制成对特征分析图
- sklearn.impute.KNNImputer() 使用 k 近邻插补
- sklearn.impute.MissingIndicator() 将数据转换为相应的二进制矩阵 (True 和 False), 以指示数据中缺失值 的存在位置
- sklearn.impute.SimpleImputer() 使用缺失值所在的行/列中的统计数据平均值 ('mean')、中位数 ('median') 或者众数 ('most frequent') 来填充, 也可以使用指定的常数 'constant'



2.1 是不是缺了几个数?

由于各种原因,数据中缺失值不可避免。缺失值通常被编码为空白,NaN或其他占位符。处理缺失值是数据预处理中重要一环。

数据中缺失值产生的原因有很多。比如,在数据采集阶段,人为失误、方法局限等等可以造成数据缺失。另外,数据存储阶段也可能引入缺失值;比如,数据存储失败、存储器故障等等。

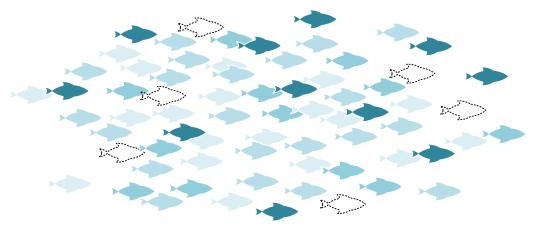


图 1. 缺失值

三大类

缺失值大致分为三类:

- **完全随机缺失** (Missing Completely at Random, MCAR),缺失值和自身值无关,和其他任何变量无关。
- **随机缺失** (Missing at Random, MAR),其他特征存在数据,但是某个特征缺失值和自身无关。一个 经典例子是,人们是否透露收入可能与性别、教育或职业等因素存在某种联系,而非收入高低。
- **非随机缺失** (Missing Not at Random, MNAR),数据缺失可能与数据本身值存在一定关系,比如高收入群体不希望透露它们的收入。

NaN

NaN 常用于表示缺失值。NaN 是 not a number 的缩写,中文含义是"非数"。numpy.nan 可以用来产生NaN。举个例子,如果想要在已知数据帧 df 中,增加用 NaN 做占位符一列,就可以用 df['holder'] = np.nan,其中'holder'为这一列的标题 (header)。

一些 NumPy 函数在统计计算时,遇到缺失值会报错。表1第二列 NumPy 函数遇到缺失值 NaN,会直接报错。而表1第三列函数,计算时忽略 NaN。

	遇到 NaN,报错	计算时,忽略 NaN
均值	numpy.mean()	numpy.nanmean()
中位数	numpy.median()	numpy.nanmedian()
最大值	numpy.max()	numpy.nanmax()

表 1. 比较 Numpy 函数处理缺失值差异

本 PDF 文件为作者草稿,发布目的为方便读者在移动终端学习,终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有,请勿商用,引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载: https://github.com/Visualize-ML

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger: https://space.bilibili.com/513194466

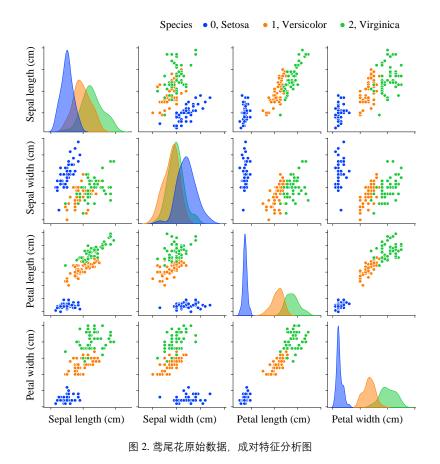
欢迎大家批评指教,本书专属邮箱: jiang.visualize.ml@gmail.com

最小值	numpy.min()	numpy.nanmin()
方差	numpy.var()	numpy.nanvar()
标准差	numpy.std()	numpy.nanstd()
分位	numpy.quantile()	numpy.nanquantile()
百分位	numpy.percentile()	numpy.nanpercentile()

原始数据中缺失值的样式没有特定标准,利用 pandas 读取数据时,可以设置缺失值样式。比如 read_csv() 读取 CSV 文件时,可以利用 na_values 设置缺失值样式,比如 na_values = 'Null',再如 na_values = '?' 等等。在 Pandas 数据帧中,也用 NaT 表达缺失值。

以鸢尾花数据为例

本章以鸢尾花数据讲解如何处理缺失值。图 2 所示为完整的鸢尾花数据成对特征分析图,其中有 150 个数据点。



在鸢尾花原始数据中完全随机引入缺失值 NaN,将数据存为 iris_df_NaN,数据的形式如图 3 所示。图 4 所示为含有缺失值的鸢尾花可视化图像。

本 PDF 文件为作者草稿,发布目的为方便读者在移动终端学习,终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。版权归清华大学出版社所有,请勿商用,引用请注明出处。 代码及 PDF 文件下载: https://github.com/Visualize-ML

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger: https://space.bilibili.com/513194466

	sepal length	(cm)	sepal	width	(cm)	petal	length	(cm)	petal	width	(cm)
0		5.1			NaN			NaN			0.2
1		NaN			NaN			1.4			0.2
2		4.7			3.2			1.3			0.2
3		NaN			NaN			NaN			NaN
4		NaN			NaN			1.4			NaN
145		6.7			NaN			5.2			2.3
146		6.3			2.5			5.0			NaN
147		6.5			3.0			5.2			NaN
148		6.2			NaN			NaN			2.3
149		5.9			3.0			NaN			1.8

图 3. 鸢尾花样本数据, 随机引入缺失值

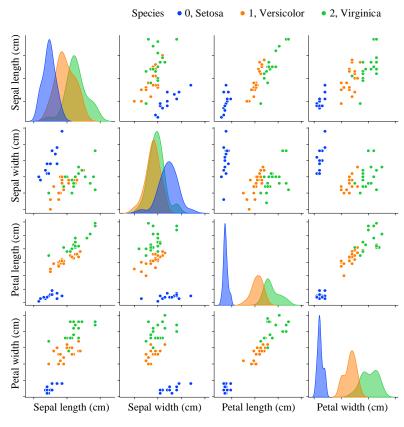


图 4. 鸢尾花数据可视化、引入缺失值

下面聊聊代码 1, 这段代码在鸢尾花数据中随机插入缺失值。

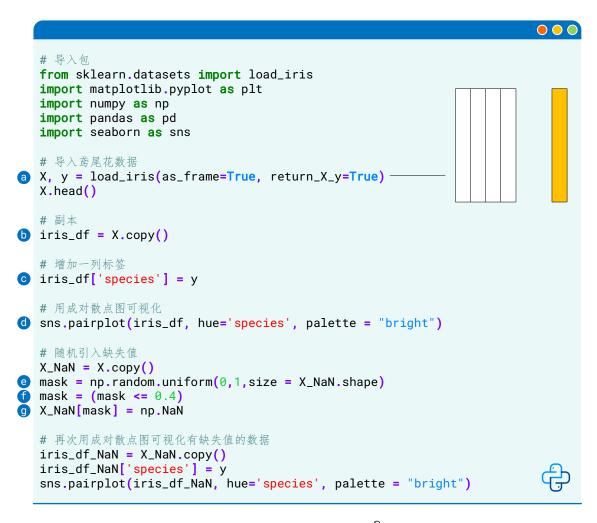
- ⓐ使用 sklearn.datasets.load_iris() 加载鸢尾花数据集, as_frame=True 表示返回数据帧格式, return_X_y=True 表示返回特征矩阵 X 和目标变量 y。
 - ●创建特征矩阵 X 的副本、存储在 iris_df 中。
 - ◎ 在数据帧中添加一列标签,表示鸢尾花的类别。
- ●使用 Seaborn 的 pairplot 函数绘制成对散点图, hue='species'表示按照鸢尾花类别标签着色, palette="bright"指定颜色主题为明亮色调。
 - ●生成一个与 X_NaN 相同形状的随机矩阵,数值满足 Ø 到 1 之间均匀分布。
 - ⑤ 将小于等于 0.4 的元素设为 True、形成一个与 X_NaN 相同形状的布尔矩阵、用作 mask。

本 PDF 文件为作者草稿,发布目的为方便读者在移动终端学习,终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。版权归清华大学出版社所有,请勿商用,引用请注明出处。 代码及 PDF 文件下载: https://github.com/Visualize-ML

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger: https://space.bilibili.com/513194466

欢迎大家批评指教,本书专属邮箱: jiang.visualize.ml@gmail.com

9 将 X_NaN 中对应 True 位置的元素设置为缺失值 NaN。



代码 1. 在鸢尾花数据中随机引入缺失值 | 🕏 Bk6_Ch02_01.ipynb

2.2 可视化缺失值位置

为了准确获取缺失值位置、数量等信息,对于 Pandas 数据帧数据可以采用 isna()或 notna()方法。

查找缺失值

采用 iris_df_NaN.isna(),返回具体位置数据是否为缺失值。数据缺失的话,为 True; 否则,为 False。图 5 所示为 iris_df_NaN.isna() 结果。

	sepal length (cm)	sepal width (cm)	 petal width (cm)	species
0	False	True	 False	False
1	True	True	 False	False
2	False	False	 False	False
3	True	True	 True	False
4	True	True	 True	False
145	False	True	 False	False
146	False	False	 True	False
147	False	False	 True	False
148	False	True	 False	False
149	False	False	 False	False

图 5. 判断数据是否为缺失值

图 6 所示为采用 seaborn.heatmap() 可视化数据缺失值,热图的每一条黑色条带代表一个缺失值。使用缺失值热图可以粗略观察得到缺失值分布情况。

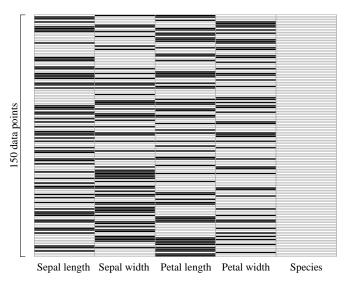


图 6. 缺失值可视化,每条黑带代表缺失值

查找非缺失值

方法 notna()正好和 isna()相反,iris_df_NaN.notna()判断数据是否为"非缺失值";如果数据没有缺失,则为 True。图 7 所示为 iris_df_NaN.notna() 结果。

	sepal length (cm)	sepal width (cm)	 petal width (cm)	species
0	True	False	 True	True
1	False	False	 True	True
2	True	True	 True	True
3	False	False	 False	True
4	False	False	 False	True
145	True	False	 True	True
146	True	True	 False	True
147	True	True	 False	True
148	True	False	 True	True
149	True	True	 True	True

图 7. 判断数据是否为"非缺失值"

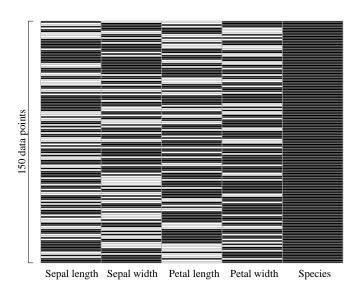


图 8. 缺失值可视化,每条白带代表缺失值

非缺失值变化线图

另外,可以安装 missingno (pip install missingno),并调用 missingno.matrix() 绘制缺失值热图,具体如图 9 所示。

这幅图最右侧还展示每行非缺失值数据数量的变化线图,线图最小取值为 1,最大取值为 5。取值为 1 时,每行只有一个非缺失值;取值为 5 时,该行不存在缺失值。观察这幅线图,可以帮助我们解读缺失值分布特征。

本 PDF 文件为作者草稿,发布目的为方便读者在移动终端学习,终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。版权归清华大学出版社所有,请勿商用,引用请注明出处。 代码及 PDF 文件下载: https://github.com/Visualize-ML

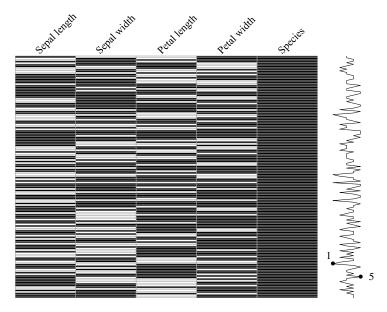


图 9. missingno.matrix()绘制缺失值热图,每条白带代表缺失值

总结缺失值信息

对于 pandas 数据帧,也可以采用 info() 显示数据非缺失值数量和数据类型。图 10 所示为 iris_df_NaN.info() 结果。df.isnull().sum() * 100 / len(df) 则计算每列缺失值的百分比。

```
<class 'pandas.core.frame.DataFrame'>
RangeIndex: 150 entries, 0 to 149
Data columns (total 5 columns):
   Column
                   Non-Null Count Dtype
                       -----
0 sepal length (cm) 85 non-null
                                     float64
   sepal width (cm) 94 non-null
   petal length (cm) 91 non-null petal width (cm) 84 non-null
                                     float64
                                      float64
                      150 non-null int32
   species
dtypes: float64(4), int32(1)
memory usage: 5.4 KB
```

图 10. pd.info() 总结样本数据特征

也可以采用 sklearn.impute.MissingIndicator() 函数将数据转换为相应的二进制矩阵 (True 和 False,相当于 1 和 0),以指示数据中缺失值的存在位置。

接着前文代码,代码2可视化缺失值。下面聊聊这段代码。

- ②使用 isna()方法查找数据帧中缺失值。
- ●用 Seaborn 的 heatmap 函数绘制缺失值位置。cmap='gray_r'代表颜色映射为灰度逆序; cbar=False 代表隐藏颜色条。
 - ⓒ使用 notna()方法查找数据帧中非缺失值。
 - 使用 Seaborn 的 heatmap 函数绘制非缺失值位置。
 - ●使用 missingno 库的 matrix()函数绘制缺失值的可视化矩阵。

本 PDF 文件为作者草稿,发布目的为方便读者在移动终端学习,终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。版权归清华大学出版社所有,请勿商用,引用请注明出处。 代码及 PDF 文件下载: https://github.com/Visualize-ML 本书配套徽课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger: https://space.bilibili.com/513194466

本书配套徵课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger:https://space.bilibili.com/51319446 欢迎大家批评指教,本书专属邮箱:jiang.visualize.ml@gmail.com 可计算每列中缺失值的百分比。

```
# 用isna()方法查找缺失值
a is_NaN = iris_df_NaN.isna()
  # print(is_NaN)
  # 可视化缺失值位置
  fig, ax = plt.subplots()
b sns.heatmap(is_NaN,
              ax = ax
              cmap='gray_r',
              cbar=False)
  # 用notna() 方法查找非缺失值
o not_NaN = iris_df_NaN.notna()
  # sum_rows = not_NaN.sum(axis=1)
  # print(not_NaN)
  # 可视化非缺失值位置
  fig, ax = plt.subplots()
d sns.heatmap(not_NaN,
              ax = ax
              cmap='gray_r',
              cbar=False)
  # 用missingno.matrix() 可视化缺失值
   import missingno as msno
   # missingno has to be installed first
  # pip install missingno
msno.matrix(iris_df_NaN)
   # 总结缺失值
  print("\nCount total NaN at each column:\n",
        X_NaN.isnull().sum())
  print("\nPercentage of NaN at each column:\n",
        X_NaN.isnull().sum()/len(X_NaN)*100)
```

代码 2. 可视化缺失值位置 | Bk6_Ch02_01.ipynb

2.3 处理缺失值: 删除

图 11 总结处理缺失值常用方法。

- 删除;可以删除缺失值所在的行、列,或者成对删除 (pairwise deletion)。
- 插补 (imputation); 采用插补,要根据数据特点,采用合理的方法。

对于表格数据,一般情况,每一行代表一个样本数据,每一列代表一个特征。处理存在缺失值数据 集的基本策略是舍弃包含缺失值的整行或整列。但是,这是以丢失可能有价值的数据为代价的。

```
本 PDF 文件为作者草稿,发布目的为方便读者在移动终端学习,终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。版权归清华大学出版社所有,请勿商用,引用请注明出处。
代码及 PDF 文件下载: https://github.com/Visualize-ML
本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger: https://space.bilibili.com/513194466
欢迎大家批评指教,本书专属邮箱: jiang.visualize.ml@gmail.com
```

更好的策略是估算缺失值,即从数据的已知部分推断出缺失值,这种方法统称插补。本章后续主要介绍连续数据的删除和插补方法。本书时间序列一章中将介绍时间序列数据的插补。

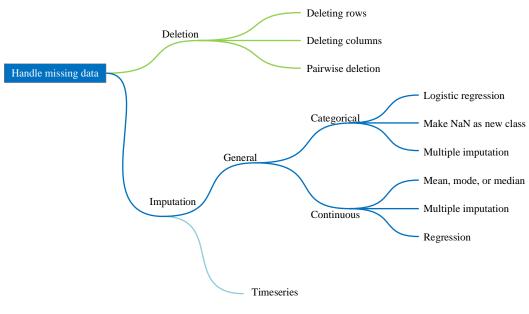


图 11. 处理缺失值的方法分类

删除

下面简单介绍 Pandas 数据帧 dropna() 方法。

对于某一个数据帧 df, df.dropna(axis = 0, how = 'any') 中 axis = 0 为按行删除,设置 axis = 1 表示按列删除。

参数 how = 'any'时,表示某行或列只要有一个缺失值,就删除该行或列,如图 12 所示。

如图 13 所示,当 how = 'all',表示该行或列全部都为缺失值时,才删除该行或列。dropna()方法默认设置为 axis = 0,how = 'any'。

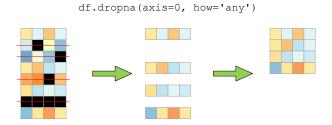


图 12. Pandas 数据帧中删除含有至少一个缺失值所在的行

本 PDF 文件为作者草稿,发布目的为方便读者在移动终端学习,终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。版权归清华大学出版社所有,请勿商用,引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载: https://github.com/Visualize-ML

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger: https://space.bilibili.com/513194466

欢迎大家批评指教,本书专属邮箱: jiang.visualize.ml@gmail.com

df.dropna(axis=0, how='all')

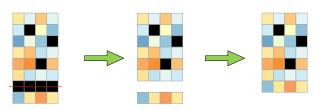


图 13. Pandas 数据帧中删除全为缺失值行

图 14 所示为删除缺失值后的鸢尾花数据,规则为删除含有至少一个缺失值所在的行。对比图 4,可以发现非缺失数据点明显减小。图 14 中所剩数据便是图 9 中最右侧线图值为 5 对应的数据点。

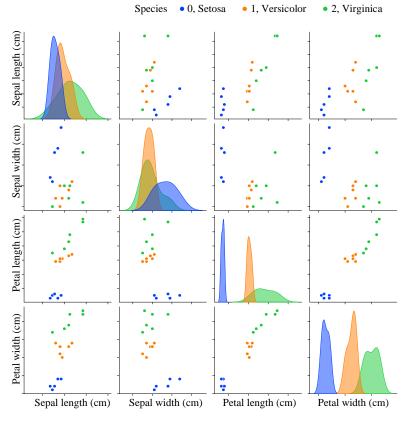


图 14. 鸢尾花数据,删除含有至少一个缺失值所在的行

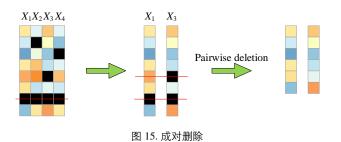
一般情况每列数据代表一个特征,删除整列特征的情况也并不罕见。不管是删除缺失值所在的行或 列,都会浪费大量有价值的信息。

成对删除

成对删除是一种特别的删除方式,进行多特征联立时,成对删除只删除掉需要执行运算特征包含的 缺失数据;以估算方差协方差矩阵为例,如图 15 所示,计算 X_1 和 X_3 的相关性,只需要删除 X_1 和 X_3 中 缺失值对应的数据点。

本 PDF 文件为作者草稿,发布目的为方便读者在移动终端学习,终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。版权归清华大学出版社所有,请勿商用,引用请注明出处。 代码及 PDF 文件下载: https://github.com/Visualize-ML

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger: https://space.bilibili.com/513194466



相对删除缺失值,更常用的方法是,采用一定的方法补全缺失值,我们称之为插补 (imputation)。分 类数据和连续数据采用的方法也稍有差别。注意,选取采用插补方法要格外小心,如果填充方法不合 理, 会引入数据噪音, 并造成数据分析结果不准确。

时间数据采用的插补方法不同于一般数据。Pandas 数据帧有基本插补功能,特别是对于时间数据, 可以采用插值 (interpolation)、向前填充、向填充。这部分内容,我们将在本书插值和时间序列部分详细 介绍。

单变量插补:统计插补

本节专门介绍单变量插补。单变量插补也称统计插补,仅使用第 j 个特征维度中的非缺失值插补该 特征维度中的缺失值。本节采用的函数是 sklearn.impute.SimpleImputer()。

SimpleImputer() 可以使用缺失值所在的行/列中的统计数据平均值 ('mean')、中位数 ('median') 或者众 数 ('most_frequent') 来填充, 也可以使用指定的常数 'constant'。

如果某个特征是连续数据,可以根据在其他所有非缺失值平均值或中位数来填充该缺失值。

如果某个特征是分类数据,则可以利用该特征非缺失值的众数,即出现频率最高的数值来补齐缺失 值。

图 16 所示为采用中位数插补鸢尾花缺失值。观察图 16. 可以发现插补得到的数据形成"十字"图案。

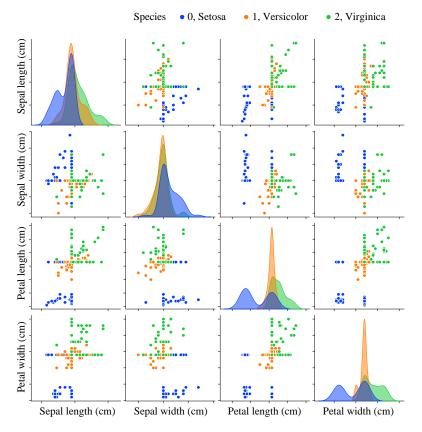


图 16. 鸢尾花数据, 采用中位数插补缺失值

在前文代码基础上、代码 3 完成单变量插补。

a 调用 sklearn.impute.SimpleImputer()完成单变量插补。 如果参数 strategy 选择"mean"、则用每列的均值替换缺失值。仅可用于数值数据。

如果选择"median",则用每列的中位数替换缺失值。仅可用于数值数据。

如果选择"most_frequent",则用每列的最频繁值替换缺失值。可用于字符串或数值数据。如果有多个最频繁值,则仅返回最小的一个。

如果选择"constant",则用指定的 fill_value 替换缺失值。可用于字符串或数值数据。

b用 fit_transform()完成单变量插补。

本 PDF 文件为作者草稿,发布目的为方便读者在移动终端学习,终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。版权归清华大学出版社所有,请勿商用,引用请注明出处。 代码及 PDF 文件下载: https://github.com/Visualize-ML 本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger: https://space.bilibili.com/513194466 欢迎大家批评指教,本书专属邮箱: jiang.visualize.ml@gmail.com

Bk6_Ch02_01.ipynb 代码 3. 单变量插补 |

本节介绍 k 近邻插补。k 近邻算法 (k-nearest neighbors algorithm, k-NN) 是最基本监督学习方法之 一,k-NN 中的 k 指的是"近邻"的数量。简单来说,k-NN 的思路就是"近朱者赤,近墨者黑"。



→ 《机器学习》将专门介绍 k 近邻算法这种监督学习方法。

本节介绍 k 近邻插补的函数为 sklearn.impute.KNNImputer()。利用 KNNImputer 插补缺失值时,先给 定距离缺失值数据最近的 k 个样本,将这 k 个值等权重平均或加权平均来插补缺失值。图 17 所示为采用 k 近邻插补鸢尾花数据结果。

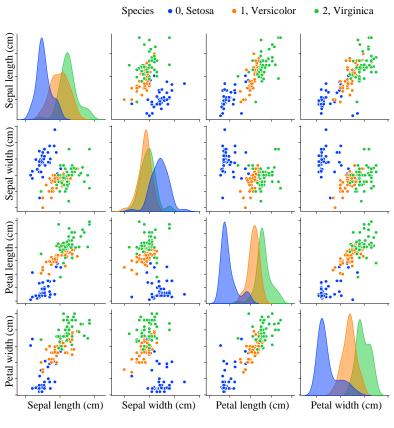


图 17. 鸢尾花数据, 最近邻插补

在前文代码基础上,代码 4 采用最近邻插补。下面简单聊聊这段代码。

代码先是从 sklearn.impute 库中导入 KNNImputer 类,该类用于使用 KNN 算法进行缺失值的插补。

- ②创建 KNNImputer 对象 knni,并指定邻居数量为 5。
- ⓑ 使用 fit_transform 方法对包含缺失值的数据 X_NaN 进行插补,得到插补后的数据 X_NaN_kNN。

本 PDF 文件为作者草稿,发布目的为方便读者在移动终端学习,终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。 版权归清华大学出版社所有,请勿商用,引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载: https://github.com/Visualize-ML

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger: https://space.bilibili.com/513194466

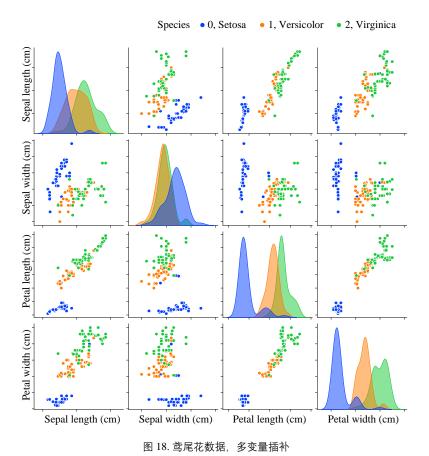
2.6 多变量插补

多变量插补,利用其它特征数据来填充某个特征内的缺失值。多变量插补将缺失值建模为其他特征 的函数,用该函数估算合理的数值,以填充缺失值。整个过程可以用迭代循环方式进行。

代码 4. k 近邻插补 | 🕏 Bk6_Ch02_01.ipynb

单变量插补一般仅考虑单一特征进行插补,而多变量插补考虑不同特征数据的联系。

图 18 所示为采用 sklearn.impute.IterativeImputer() 函数完成多变量插补,补齐鸢尾花数据中缺失值。



在前文代码基础上,代码 5 完成多变量插补。

- ② 创建 IterativeImputer 对象 rf_imp,使用 RandomForestRegressor 作为估算器,并设置最大迭代次数为 20。
- b使用 fit_transform 方法对包含缺失值的数据 X_NaN 进行插补,得到插补后的数据 X_NaN_RF。

本 PDF 文件为作者草稿,发布目的为方便读者在移动终端学习,终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。版权归清华大学出版社所有,请勿商用,引用请注明出处。 代码及 PDF 文件下载: https://github.com/Visualize-ML 本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger: https://space.bilibili.com/513194466 欢迎大家批评指教,本书专属邮箱: jiang.visualize.ml@gmail.com



总结来说,缺失值指的是在数据集中某些观测或特征的数值缺失或未记录。缺失值在机器学习中可能导致各种各样问题,因为模型需要完整的数据来进行有效的训练和预测。缺失值可能导致模型性能下降,因为模型可能无法准确学习缺失值对应的模式或关系。此外,缺失值还可能引入偏见,导致对特定子集的预测不准确。

处理缺失值的方法有几种。一种是删除包含缺失值的行或列,但这可能会损失大量信息。另一种是填充缺失值,可以用均值、中位数或其他统计量代替缺失值。还有一些先进的技术,如插值方法或使用机器学习模型来预测缺失值。选择哪种方法取决于数据的性质和缺失值的模式。



有关数据帧处理缺失值,请大家参考:

https://pandas.pydata.org/pandas-docs/stable/user_guide/missing_data.html

sklearn.impute.IterativeImputer() 函数非常灵活,可以和各种估算器联合使用,比如决策树回归、贝叶斯岭回归等等。感兴趣的读者可以参考如下链接:

https://scikit-learn.org/stable/modules/impute.html

https://scikit-learn.org/stable/auto_examples/impute/plot_iterative_imputer_variants_comparison