第十一章 特征选择与稀疏学习

王博：自动化（人工智能）学院
wangbo@hdu.edu.cn

目录

- 子集搜索与评价
- 过滤式选择
- 包裹式选择
- 嵌入式选择与L1正则化
- 压缩感知

目录

- 子集搜索与评价
- 过滤式选择
- 包裹式选择
- 嵌入式选择与L1正则化
- 压缩感知

特征

- 特征
  - 描述物体的属性

- 特征的分类
  - 相关特征: 对当前学习任务有用的属性
  - 无关特征: 与当前学习任务无关的属性
  - 冗余特征*: 其所包含信息能由其他特征推演出来

特征选择

- 特征选择
  - 从给定的特征集合中选出任务相关特征子集
  - 必须确保不丢失重要特征

- 原因
  - 减轻维度灾难：在少量属性上构建模型
  - 降低学习难度：留下关键信息

例子：西瓜的特征

西瓜的**特征**

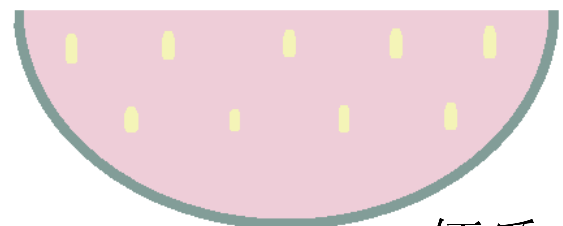
- 颜色
- 纹理
- 触感

无关特征

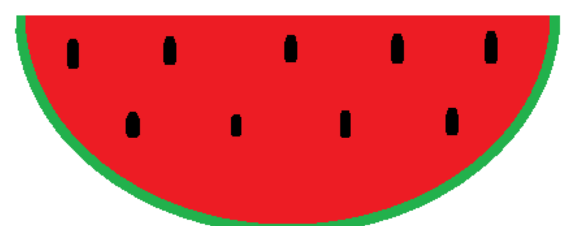
- 根蒂
- 声音

相关特征

当前任务：西瓜是否是好瓜



坏瓜



好瓜

例子：判断是否好瓜时的特征选择

西瓜的**特征**

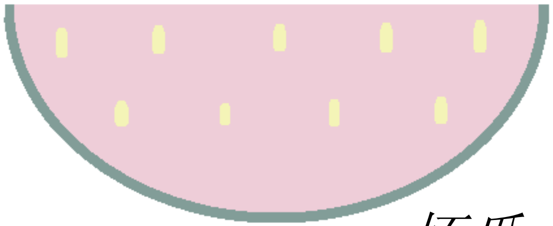
- 颜色
- 纹理
- 触感

无关特征

- 根蒂
- 声音

相关特征

当前任务：西瓜是否是好瓜



坏瓜

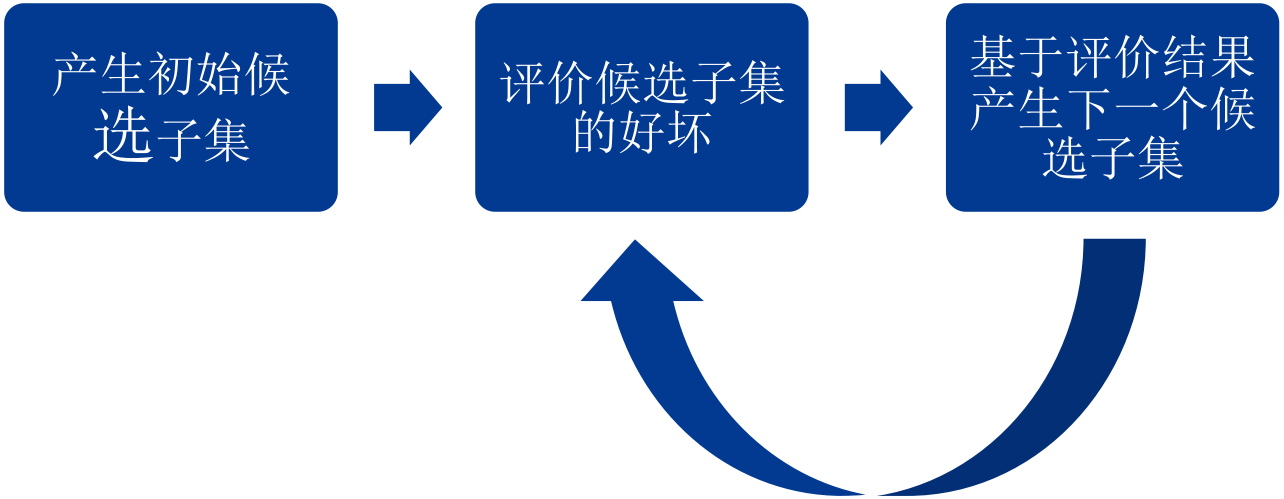
好瓜

特征选择：选择当前任务相关特征

特征选择的一般方法

- 遍历所有可能的子集
  - 计算上遭遇组合爆炸，不可行

- 可行方法



两个关键环节：子集搜索和子集评价

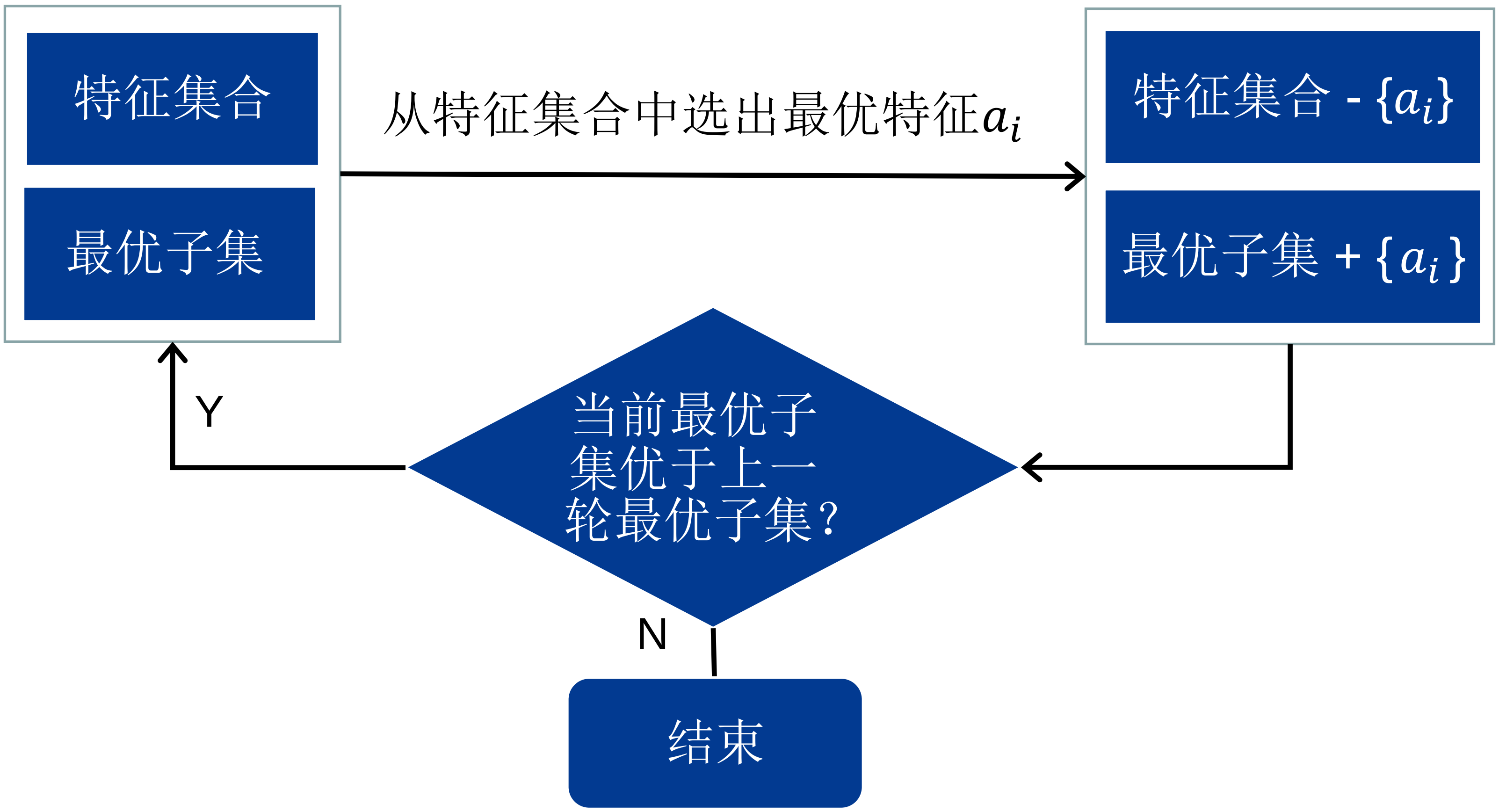
子集搜索

用贪心策略选择包含重要信息的特征子集

- 前向搜索：逐渐增加相关特征
- 后向搜索：从完整的特征集合开始，逐渐减少特征
- 双向搜索：每一轮逐渐增加相关特征，同时减少无关特征

前向搜索

- 最优子集初始为空集，特征集合初始时包括所有给定特征



子集评价

- 特征子集确定了对数据集的一个划分
  - 每个划分区域对应着特征子集的某种取值
- 样本标记对应着对数据集的真实划分

通过估算这两个划分的差异，就能对特征子集进行评价；与样本标记对应的划分的差异越小，则说明当前特征子集越好

用信息熵进行子集评价

- 特征子集A确定了对数据集D的一个划分
  - A上的取值将数据集D分为V份，每一份用D^v表示
  - $\mathrm{Ent}(D^v)$表示D^v上的信息熵
- 样本标记Y对应着对数据集D的真实划分
  - $\mathrm{Ent}(D)$表示D上的信息熵（第i类样本所占比例为p_i）

$$Ent(D) = -\sum_{k=1}^{|y|} p_k \log_2 p_k$$

特征子集A（考虑一个属性）的信息增益为（离散属性a有v个可能取值，每种取值下的信息熵）越高越好：

$$\mathrm{Gain}(A) = \mathrm{Ent}(D) - \sum_{v=1}^{V} \frac{|D^v|}{|D|} \mathrm{Ent}(D^v) ,$$

常见的特征选择方法

将特征子集搜索机制与子集评价机制相结合，即可得到特征选择方法

常见的特征选择方法大致分为如下三类：

- 过滤式
- 包裹式
- 嵌入式

目录

- 子集搜索与评价
- **过滤式选择**
- 包裹式选择
- 嵌入式选择与L1正则化
- 压缩感知

过滤式选择

先用特征选择过程过滤原始数据，再用过滤后的特征来训练模型；特征选择过程与后续学习器无关

- Relief（Relevant Features）方法 [Kira and Rendell, 1992]
  - 为每个初始特征赋予一个“相关统计量”，度量特征的重要性
  - 特征子集的重要性由子集中每个特征所对应的相关统计量之和决定
  - 设计一个阈值，然后选择比阈值大的相关统计量分量所对应的特征
  - 或者指定欲选取的特征个数，然后选择相关统计量分量最大的指定个数特征

如何确定相关统计量?

Relief方法中相关统计量的确定

二分类

- 猜中近邻（near-hit）：$\boldsymbol{x}_i$的同类样本中的最近邻$\boldsymbol{x}_{i,nh}$
- 猜错近邻（near-miss）：$\boldsymbol{x}_i$的异类样本中的最近邻$\boldsymbol{x}_{i,nm}$
- 相关统计量对应于属性j的分量为

$$\delta^j = \sum_i -\text{diff}(x_i^j, x_{i,nh}^j)^2 + \text{diff}(x_i^j, x_{i,nm}^j)^2$$

若j为离散型，则$x_a^j = x_b^j$时$\text{diff}\left(x_a^j, x_b^j\right) = 0$，否则为1；若$j$为连续型，则$\text{diff}\left(x_a^j, x_b^j\right) = |x_a^j - x_b^j|$，注意$x_a^j$，$x_b^j$已规范化到[0,1]区间

- 相关统计量越大，属性j上，猜对近邻比猜错近邻越近，即属性j对区分对错越有用
- Relief方法的时间开销随采样次数以及原始特征数线性增长，运行效率很高

Relief方法的多类拓展

Relief方法是为二分类问题设计的，其扩展变体Relief-F[Kononenko, 1994]能处理多分类问题

- 数据集中的样本来自 $|\mathcal{Y}|$个类别，其中$\boldsymbol{x}_i$属于第k类
- 猜中近邻：第k类中$\boldsymbol{x}_i$的最近邻$\boldsymbol{x}_{i,nh}$
- 猜错近邻：第k类之外的每个类中找到一个$\boldsymbol{x}_i$的最近邻作为猜错近邻，记为$\boldsymbol{x}_{i,l,nm}(l = 1,2,\ldots,|\mathcal{Y}|\,; l \neq k)$
- 相关统计量对应于属性的分量为

$$\delta^j = \sum_i -\text{diff}(x_i^j, x_{i,nh}^j)^2 + \sum_{l \neq k} \left(p_l \times \text{diff}(x_i^j, x_{i,l,nm}^j)^2 \right)$$

p_l为第l类样本在数据集D中所占的比例

目录

- 子集搜索与评价
- 过滤式选择
- **包裹式选择**
- 嵌入式选择与L1正则化
- 压缩感知

包裹式选择

包裹式选择直接把最终将要使用的学习器的性能作为特征子集的评价准则

- 包裹式特征选择的目的就是为给定学习器选择最有利于其性能、“量身定做”的特征子集

- 包裹式选择方法直接针对给定学习器进行优化，因此从最终学习器性能来看，包裹式特征选择比过滤式特征选择更好

- 包裹式特征选择过程中需多次训练学习器，计算开销通常比过滤式特征选择大得多

LVW包裹式特征选择方法

LVW（Las Vegas Wrapper）[Liu and Setiono, 1996] 在拉斯维加斯方法框架下使用随机策略来进行子集搜索，并以最终分类器的误差作为特征子集评价准则

基本步骤

- 在循环的每一轮随机产生一个特征子集
- 在随机产生的特征子集上通过交叉验证推断当前特征子集的误差
- 进行多次循环，在多个随机产生的特征子集中选择误差最小的特征子集作为最终解*

*若有运行时间限制，则该算法有可能给不出解

LVW包裹式特征选择方法

输入： 数据集 D;
特征集 A;
学习算法 $\mathfrak{L}$;
停止条件控制参数 T.

过程：

$E = \infty$;
$d = |A|$;
$A^* = A$;
$t = 0$;
while $t < T$ **do**
  随机产生特征子集 A';
  $d' = |A'|$;
  $E' = \text{CrossValidation}(\mathfrak{L}(D^{A'}))$;
  if $(E' < E) \vee ((E' = E) \wedge (d' < d))$ **then**
    $t = 0$;
    $E = E'$;
    $d = d'$;
    $A^* = A'$
  else
    $t = t + 1$
  end if
end while

输出： 特征子集 A^*

目录

- 子集搜索与评价
- 过滤式选择
- 包裹式选择
- **嵌入式选择与L1正则化**
- 稀疏表示与字典学习
- 压缩感知

嵌入式选择

嵌入式特征选择是将特征选择过程与学习器训练过程融为一体，两者在同一个优化过程中完成，在学习器训练过程中自动地进行特征选择。

- 考虑最简单的线性回归模型，以平方误差为损失函数，并引入L_2范数正则化项防止过拟合，则有

$$\min_{\boldsymbol{w}} \sum_{i=1}^{m} (y_i - \boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i)^2 + \lambda \|\boldsymbol{w}\|_2^2$$

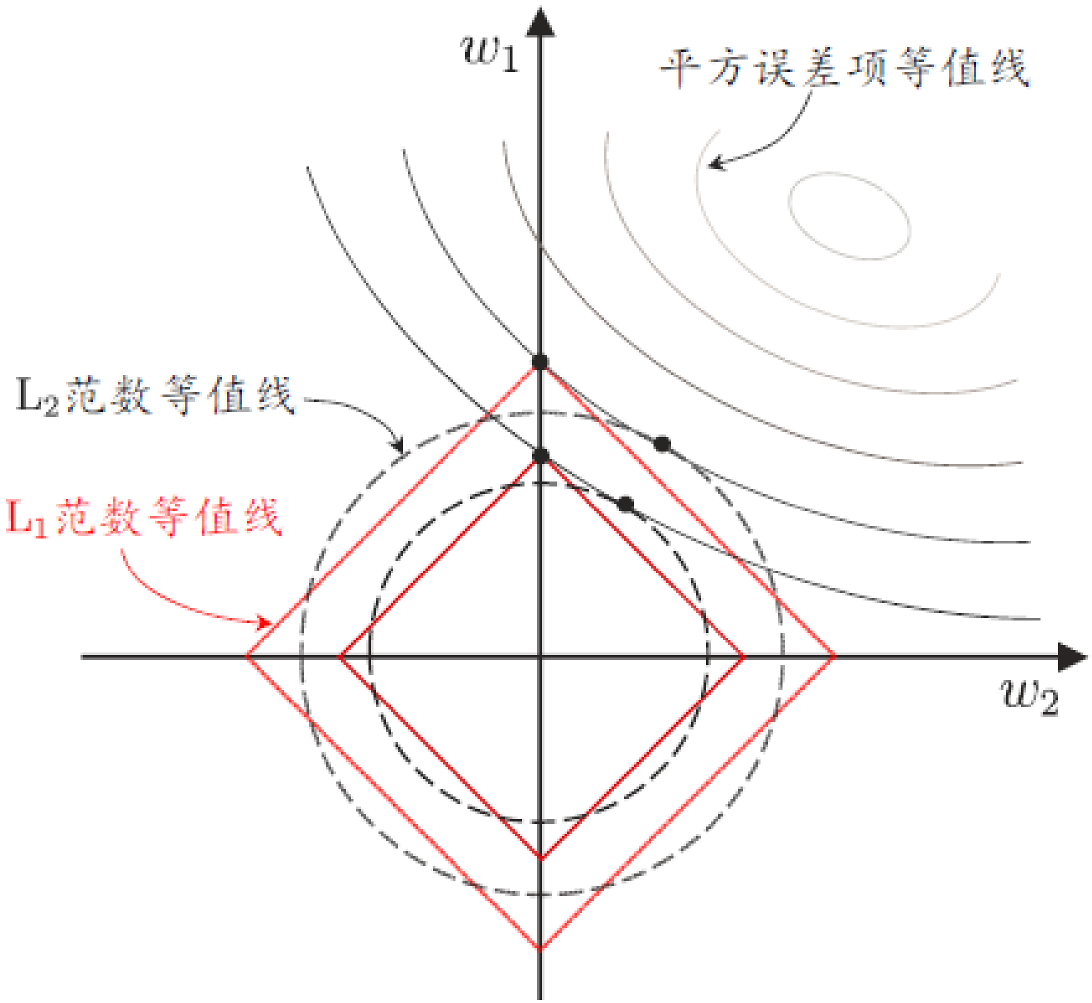
岭回归 (ridge regression)
[Tikhonov and Arsenin, 1977]

- 将L_2范数替换为L_1范数，则有LASSO [Tibshirani, 1996]

$$\min_{\boldsymbol{w}} \sum_{i=1}^{m} (y_i - \boldsymbol{w}^\top \boldsymbol{x}_i)^2 + \lambda \|\boldsymbol{w}\|_1$$

易获得稀疏解，是一种嵌入式特征选择方法

使用L_1范数正则化易获得稀疏解



假设x仅有两个属性，那么w有两个分量w_1和w_2. 那么目标优化的解要在平方误差项与正则化项之间折中，即出现在图中平方误差项等值线与正则化等值线相交处.

从图中看出，采用L_1范数时交点常出现在坐标轴上，即产生w_1或者w_2为0的稀疏解.

等值线即取值相同的点的连线

L_1正则化问题的求解(1)

$$\min_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}) + \lambda\|\boldsymbol{x}\|_1 \ ,$$

近端梯度下降（Proximal Gradient Descend，简称PGD）解法[Boyd and Vandenberghe, 2004]

- 写出$f(\boldsymbol{x})$的二阶泰勒展式

$$f(\boldsymbol{x}) = f(\boldsymbol{x}_k) + \langle \nabla f(\boldsymbol{x}_k), \boldsymbol{x} - x_k \rangle + \frac{1}{2}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_k)^\top \frac{\delta^2 f(\boldsymbol{x}_k)}{\delta \boldsymbol{x}_k^2}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_k)$$

- 假设$f(\boldsymbol{x})$导数满足L-Lipschitz条件， 即存在常数$L > 0$,使得

$$\|\nabla f(\boldsymbol{x}') - \nabla f(\boldsymbol{x})\|_2 \leq L\|\boldsymbol{x}' - \boldsymbol{x}\|_2$$

L1正则化问题的求解(2)

- L-Lipschitz条件代入泰勒展式，可得

$$
\begin{aligned}
f(\boldsymbol{x}) &\cong f(\boldsymbol{x}_k) + \langle \nabla f(\boldsymbol{x}_k), \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_k \rangle + \frac{L}{2}\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_k\|^2 \\
&= \frac{L}{2}\|\boldsymbol{x} - (\boldsymbol{x}_k - \frac{1}{L}\nabla f(\boldsymbol{x}_k))\|^2 + \text{const}
\end{aligned}
$$

- 将上式关于$f(\boldsymbol{x})$的近似代入到原优化问题中，得

$$
\min_{\boldsymbol{x}} \sum_{i=1}^{m} \frac{L}{2}\|\boldsymbol{x} - (\boldsymbol{x}_k - \frac{1}{L}\nabla f(\boldsymbol{x}_k))\|^2 + \lambda\|\boldsymbol{x}\|_1
$$

L1正则化问题的求解(3)

- 每次在$\boldsymbol{x}_k$的附近寻找最优点，不断迭代，即寻找

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \arg\min_{\boldsymbol{x}} \frac{L}{2}\left\|\boldsymbol{x} - \left(\boldsymbol{x}_k - \frac{1}{L}\nabla f(\boldsymbol{x}_k)\right)\right\|_2^2 + \lambda\|\boldsymbol{x}\|_1$$

- 假设$\boldsymbol{z} = \boldsymbol{x}_k - 1/L\nabla f(\boldsymbol{x}_k)$，上式有闭式解

$$x_{k+1}^i = \begin{cases} z^i - \lambda/L, & \lambda/L < z^i\ ; \\ 0, & |z^i| \leqslant \lambda/L\ ; \\ z^i + \lambda/L, & z^i < -\lambda/L\ , \end{cases}$$

目录

- 子集搜索与评价
- 过滤式选择
- 包裹式选择
- 嵌入式选择与L1正则化
- **稀疏表示与字典学习**
- 压缩感知

稀疏表示

- 将数据集考虑成一个矩阵，每行对应一个样本，每列对应一个特征
- 矩阵中有很多零元素，且非整行整列出现
- 稀疏表达的优势：
  - 文本数据线性可分
  - 存储高效

能否将稠密表示的数据集转化为“稀疏表示”，使其享受稀疏表达的优势？

字典学习

为普通稠密表达的样本找到合适的字典，将样本转化为稀疏表示，这一过程称为字典学习

- 给定数据集 $\{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_m\}$， $\boldsymbol{x}_i \in \mathbb{R}^{n \times k}$
- 学习目标是字典矩阵 $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{d \times k}$ 以及样本的稀疏表示 $\boldsymbol{\alpha}_i \in \mathbb{R}^k$
- k称为字典的词汇量，通常由用户指定
- 则最简单的字典学习的优化形式为

$$\min_{\mathbf{B},\boldsymbol{\alpha}_i} \sum_{i=1}^{m} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{B}\boldsymbol{\alpha}_i\|_2^2 + \lambda \sum_{i=1}^{m} \|\boldsymbol{\alpha}_i\|_1$$

字典学习的解法(1)

- 固定字典B，参考LASSO的方法求解

$$\min_{\boldsymbol{\alpha}_i} \|\boldsymbol{x}_i - \mathbf{B}\boldsymbol{\alpha}_i\|_2^2 + \lambda\|\boldsymbol{\alpha}_i\|_1 \ .$$

- 固定$\boldsymbol{\alpha}_i$更新字典B，

$$\min_{\mathbf{B}} \|\mathbf{X} - \mathbf{B}\mathbf{A}\|_F^2,$$

$$\mathbf{X} = (\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_m) \in \mathbb{R}^{d\times m}, \mathbf{A} = (\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \ldots, \boldsymbol{\alpha}_m) \in \mathbb{R}^{k\times m},$$

- 基于逐列更新策略的KSVD [Aharon et al., 2006]

$$\begin{aligned}
\min_{\mathbf{B}} \|\mathbf{X} - \mathbf{B}\mathbf{A}\|_F^2 &= \min_{\boldsymbol{b}_i} \left\|\mathbf{X} - \sum_{j=1}^{k} \boldsymbol{b}_j \boldsymbol{\alpha}^j\right\|_F^2 \\
&= \min_{\boldsymbol{b}_i} \left\|\left(\mathbf{X} - \sum_{j\neq i} \boldsymbol{b}_j \boldsymbol{\alpha}^j\right) - \boldsymbol{b}_i \boldsymbol{\alpha}^i\right\|_F^2 \\
&= \min_{\boldsymbol{b}_i} \|\mathbf{E}_i - \boldsymbol{b}_i \boldsymbol{\alpha}^i\|_F^2 \ .
\end{aligned}$$

b_i表示B的第i列， α^i表示A的第i行

字典学习的解法(2)

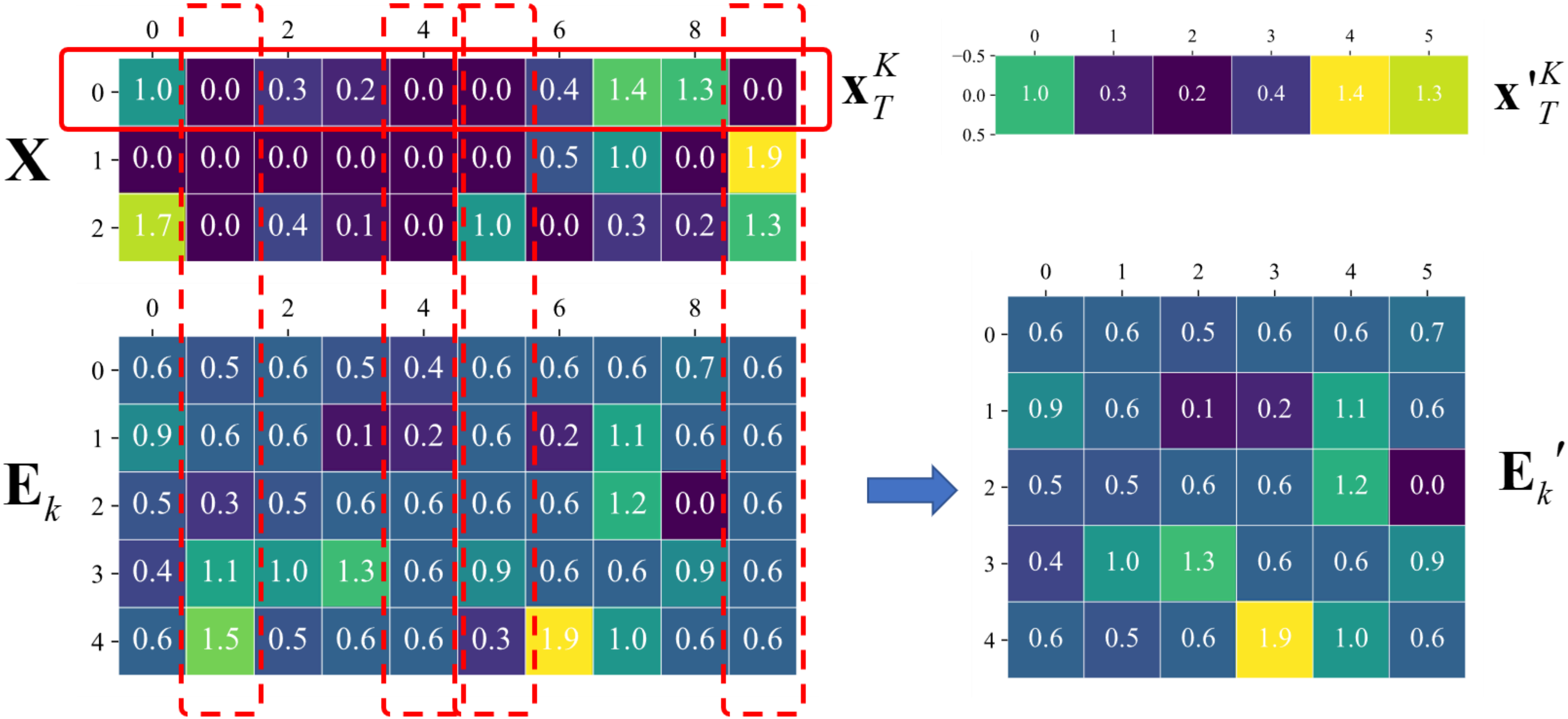
- 上式可以变化为求

$$\min_{\boldsymbol{b}_i} \left\|\mathbf{E}_i - \boldsymbol{b}_i \boldsymbol{\alpha}^i\right\|_F^2$$

需要注意的是直接对 $\mathbf{E}_i$ 进行奇异值分解会同时修改 $\boldsymbol{b}_i$ 和 $\boldsymbol{\alpha}^i$, 从而可能破坏 $\mathbf{A}$ 的稀疏性. 为避免发生这种情况, KSVD 对 $\mathbf{E}_i$ 和 $\boldsymbol{\alpha}^i$ 进行专门处理: $\boldsymbol{\alpha}^i$ 仅保留非零元素, $\mathbf{E}_i$ 则仅保留 $\boldsymbol{b}_i$ 与 $\boldsymbol{\alpha}^i$ 的非零元素的乘积项, 然后再进行奇异值分解, 这样就保持了第一步所得到的稀疏性.

- 反复迭代以获得最优解

字典学习的解法(2)



X
x_T^K
E_k
x'^K_T
E_k'
1.0 0.0 0.3 0.2 0.0 0.0 0.4 1.4 1.3 0.0
0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.5 1.0 0.0 1.9
1.7 0.0 0.4 0.1 0.0 1.0 0.0 0.3 0.2 1.3
0.6 0.5 0.6 0.5 0.4 0.6 0.6 0.6 0.7 0.6
0.9 0.6 0.6 0.1 0.2 0.6 0.2 1.1 0.6 0.6
0.5 0.3 0.5 0.6 0.6 0.6 0.6 1.2 0.0 0.6
0.4 1.1 1.0 1.3 0.6 0.9 0.6 0.6 0.9 0.6
0.6 1.5 0.5 0.6 0.6 0.3 1.9 1.0 0.6 0.6
1.0 0.3 0.2 0.4 1.4 1.3
0.6 0.6 0.5 0.6 0.6 0.7
0.9 0.6 0.1 0.2 1.1 0.6
0.5 0.5 0.6 0.6 1.2 0.0
0.4 1.0 1.3 0.6 0.6 0.9
0.6 0.5 0.6 1.9 1.0 0.6

目录

- 子集搜索与评价
- 过滤式选择
- 包裹式选择
- 嵌入式选择与L1正则化
- 稀疏表示与字典学习
- 压缩感知

压缩感知

能否利用部分数据恢复全部数据？

- 数据传输中，能否利用接收到的压缩、丢包后的数字信号，精确重构出原信号？

- 压缩感知（compressive sensing）[Cándes et al., 2006, Donoho, 2006] 为解决此类问题提供了新的思路.

压缩感知

- 长度为m的离散信号$\boldsymbol{x}$，用远小于奈奎斯特采样定理的要求的采样率采样得到长度为n的采样后信号$\boldsymbol{y}$，$n \ll m$，即

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{\Phi x}$$

Φ是对信号x的测量矩阵，它确定了采样频率及如何将采样样本组成采样后的信号。

- 一般情况下，$n \ll m$，不能利用$\boldsymbol{y}$还原$\boldsymbol{x}$，但是若存在某个线性变换Ψ，使得$\boldsymbol{x} = \Psi \boldsymbol{s}$， $\boldsymbol{s}$是稀疏向量，即

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{\Phi \Psi s} = \mathbf{A}\boldsymbol{s}$$

A具有“**限定等距性**”时，可以近乎完美地恢复$\boldsymbol{s}$

限定等距性

限定等距性 （Restricted Isometry Property，即RIP）[Cándes, 2008]：$\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times m}$，若存在常数$\boldsymbol{\delta_k} \in (\mathbf{0}, \mathbf{1})$使得对于任意向量$\boldsymbol{s}$和**A**的所有子矩阵$\mathbf{A}_{\boldsymbol{k}} \in \mathbb{R}^{n\times k}$有

$$(1-\delta_k)\|\boldsymbol{s}\|_2^2 \leqslant \|\mathbf{A}_k\boldsymbol{s}\|_2^2 \leqslant (1+\delta_k)\|\boldsymbol{s}\|_2^2$$

则称**A**满足***k*-限定等距性**（***k***-RIP）

压缩感知的优化目标和解法

若$\mathbf{A}$满足k限定等距性，则可通过下面的优化问题近乎完美地从$\boldsymbol{y}$中恢复出稀疏信号$\boldsymbol{s}$，进而恢复出$\boldsymbol{x}$：

$$\min_{\boldsymbol{s}} \ \|\boldsymbol{s}\|_0 \quad \text{s.t.} \ \ \boldsymbol{y} = \mathbf{A}\boldsymbol{s}$$

- L_0范数最小化是NP难问题，将上式转化为共解的L_1范数最小化问题［Cándes et al., 2006］：

$$\min_{\boldsymbol{s}} \ \|\boldsymbol{s}\|_1 \quad \text{s.t.} \ \ \boldsymbol{y} = \mathbf{A}\boldsymbol{s} \, .$$

- 转化为LASSO的等价形式再通过近端梯度下降法求解，即使用“基寻踪去噪”（Basis Pursuit De-Noising）［Chen et al., 1998］

矩阵补全

客户对书籍的喜好程度的评分

	《笑傲江湖》	《万历十五年》	《人间词话》	《云海玉弓缘》	《人类的故事》
赵大	5	?	?	3	2
钱二	?	5	3	?	5
孙三	5	3	?	?	?
李四	3	?	5	4	?

能否将表中已经通过读者评价得到的数据当作**部分信号**，基于压缩感知的思想**恢复**出**完整信号**从而进行书籍推荐呢？从题材、作者、装帧等角度看（相似题材的书籍有相似的读者），表中反映的信号是**稀疏**的，能通过类似压缩感知的思想加以处理。

"矩阵补全"技术解决此类问题

矩阵补全的优化问题和解法

- 矩阵补全（matrix completion）技术的优化形式为

$$\min_{\mathbf{X}} \mathrm{rank}(\mathbf{X})$$

$$\text{s.t. } \mathbf{X}_{ij} = \mathbf{A}_{ij}, (i,j) \in \Omega$$

约束表明，恢复出的矩阵中$\mathbf{X}_{ij}$应当与已观测到的对应元素相同

$\mathbf{X}$: 需要恢复的稀疏信号

rank($\mathbf{X}$): $\mathbf{X}$的秩

$\mathbf{A}$: 已观测信号

Ω: $\mathbf{A}$中已观测到的元素的位置下标的集合

- NP难问题. 将rank(X)转化为其凸包“核范数”（nuclear norm）

$$\|\mathbf{X}\|_* = \sum_{j=1}^{\min\{m,n\}} \sigma_j(\mathbf{X})$$

- 最小化矩阵核函数来近似

$$\min_{\mathbf{X}} \ \|\mathbf{X}\|_*$$

$$\text{s.t.} \quad (\mathbf{X})_{ij} = (\mathbf{A})_{ij}, \quad (i,j) \in \Omega.$$

凸优化问题，通过半正定规划求解（SDP，Semi-Definite Programming）