

R 机器学习: mlr3verse 核心 workflow

第 15 届 中国 R 会 (北京)

张敬信 博士, 副教授

2022 年 11 月 23 日

哈尔滨商业大学 数学与应用数学系



- 电子抢读版今天上线（人邮）[异步社区](#)
- 纸质版预计 2022 年 12 月 10 日上市（受北京疫情影响可能会晚约半个月）

我的另一本书



- 已于 2022 年 7 月上市, 提供了 R 实现

一. mlr3verse 简介

- **曾经：**R 中各个机器学习算法，都是单独的包实现，没有统一接口，不方便使用
- **过去：**整合机器学习算法的包：
 - mlr 包
 - caret 包
- **现在：**新一代整合机器学习算法的包，也是上面两个的进化版：
 - mlr3verse 包 (首推)：面向对象
 - tidymodels 包：tidyverse 一脉相承
- **模型 (工业) 部署：**vetiver 包、plumber 包

本讲只是对 mlr3verse 工作流点到为止，更多完整内容请参阅我最新梳理完成的《R 机器学习：mlr3verse 技术手册》。

mlr3verse 是最新、最先进的 R 机器学习框架，它基于面向对象 R6 语法和 data.table 底层数据流（速度超快），支持 future 并行，支持搭建“图”流学习器，理念非常先进、功能非常强大。

mlr3verse 整合了各种机器学习算法包，实现了统一、整洁的机器学习流程化操作，足以媲美 Python 的 scikit-learn 机器学习库。

加载包：

```
library(mlr3verse)
```

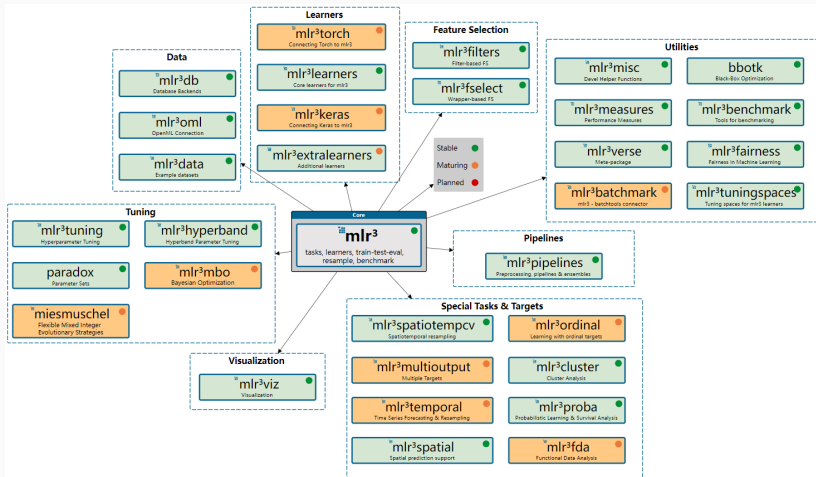


图 1: mlr3verse 生态

二. 基础知识

1. R6 类：面向对象

支持继承、引用语法，将数据、方法绑定到一个对象。

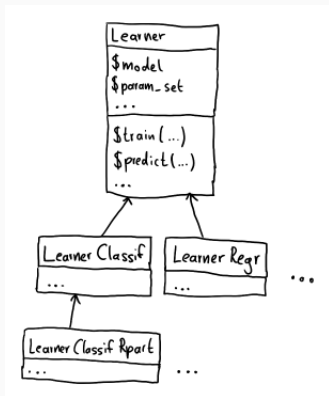


图 2: 学习器对象

2. 任务：封装数据

任务是对表格数据的封装，自变量称为特征，因变量称为目标或结果变量。

- 目标决定了机器学习的“任务”：
 - 连续目标，就是回归；
 - 离散目标，就是分类；
 - 无目标，无监督学习（聚类、降维）

mlr3 生态下还有若干特殊任务：生存分析任务、密度估计任务、时空分析任务、有序分析任务、函数分析任务、多标签分类任务、成本敏感分类任务、聚类任务。

- 创建任务:

```
dat = tsk("german_credit")$data()
task = as_task_classif(dat, target = "credit_risk")
task
#> <TaskClassif:dat> (1000 x 21)
#> * Target: credit_risk
#> * Properties: twoclass
#> * Features (20):
#>   - fct (14): credit_history, employment_duration, foreign_residence,
#>     housing, job, other_debtors, other_installment_plans,
#>     people_liable, personal_status_sex, property, purpose,
#>     status, telephone
#>   - int (3): age, amount, duration
#>   - ord (3): installment_rate, number_credits, present_residence
```

- 若不想使用全部特征

```
task$select(cols = setdiff(task$feature_names, "telephone"))
```

- 划分训练集、测试集

```
set.seed(1)
split = partition(task, ratio = 0.7)
# 默认 stratify = TRUE, 按目标变量分层
```

得到训练集、测试集的索引, 分别在 `split$train`、`split$test` 中。

3. 学习器：封装算法

mlr3 将算法封装在学习器中，提供了统一的方便接口，算法实现整合自相应的算法包（需要安装）。

```
# 选择随机森林分类学习器，需要 ranger 包
```

```
learner = lrn("classif.ranger", num.trees = 100,  
              predict_type = "prob")
```

```
learner
```

```
#> <LearnerClassifRanger:classif.ranger>
```

```
#> * Model: -
```

```
#> * Parameters: num.threads=1, num.trees=100
```

```
#> * Packages: mlr3, mlr3learners, ranger
```

```
#> * Predict Types: response, [prob]
```

```
#> * Feature Types: logical, integer, numeric, character, j
```

```
#> * Properties: hotstart_backward, importance, multiclass
```

```
#> twoclass, weights
```

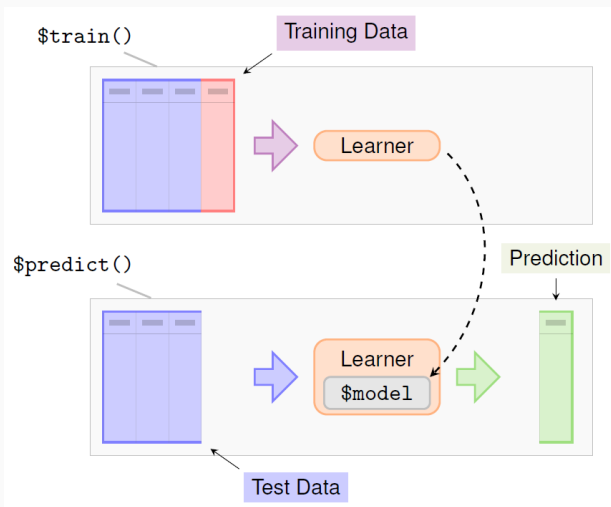


图 3: 学习器工作流程

- 在训练集上训练模型

```
learner$train(task, row_ids = split$train)
```

```
learner$model
```

```
#> Ranger result
```

```
#>
```

```
#> Call:
```

```
#> ranger::ranger(dependent.variable.name = task$target_name)
```

```
#>
```

```
#> Type: Probability estimation
```

```
#> Number of trees: 100
```

```
#> Sample size: 700
```

```
#> Number of independent variables: 19
```

```
#> Mtry: 4
```

```
#> Target node size: 10
```

```
#> Variable importance mode: none
```

```
#> Splitrule: gini
```

```
#> OOB prediction error (Brier score): 0.162
```

- 在测试集上做预测

```
prediction = learner$predict(task, row_ids = split$test)
prediction
```

```
#> <PredictionClassif> for 300 observations:
```

```
#>      row_ids truth response prob.good prob.bad
#>         8  good    good    0.637    0.3630
#>        15  good    good    0.647    0.3535
#>        17  good    good    1.000    0.0000
#> ---
#>       979  bad    good    0.924    0.0765
#>       982  bad    good    0.553    0.4468
#>       999  bad    bad    0.306    0.6940
```

4. 性能评估

训练集上训练好的模型性能如何，需要：

- 将模型用到测试集得到预测值；
- 选择一种合适的性能度量指标，来度量预测值与真实值相差多少。

```
prediction$score(msr("classif.acc"))    # 准确率
```

```
#> classif.acc
```

```
#>      0.707
```

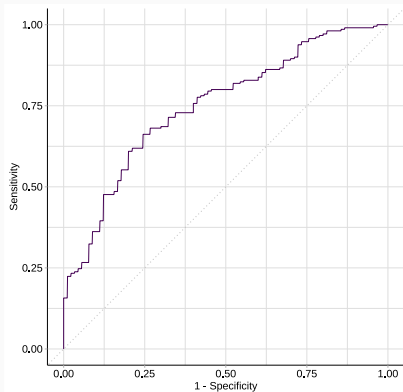
```
prediction$score(msr("classif.auc"))    # AUC 面积
```

```
#> classif.auc
```

```
#>      0.749
```

绘制 ROC 曲线, 需要 *precrec* 包

```
autoplot(prediction, type = "roc")
```



5. 重抽样

重抽样就是对数据集重复抽样，得到数据集的若干副本。

机器学习传统的数据划分：训练集 + 测试集，就是对数据的一种重抽样：**留出法**（“holdout”）。

留出法最简单，只得到了数据集的一个副本，所以只能做一次“拟合模型 + 模型预测 + 评估性能”。

从数据集抽样出多个副本，以做多次“拟合模型 + 模型预测 + 评估性能”，取平均性能作为最终性能。比如， k **折交叉验证**（“cv”）

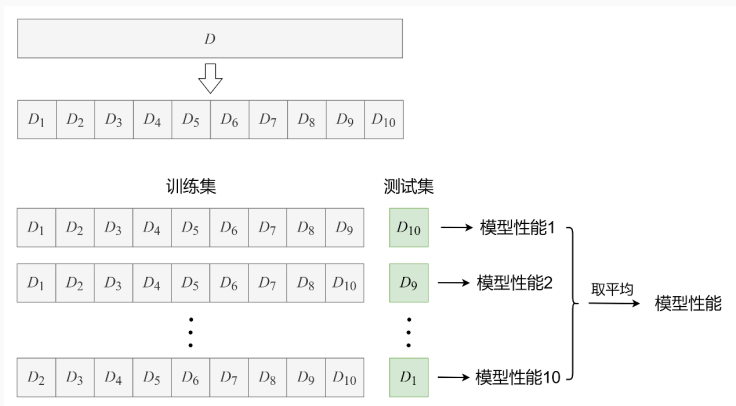


图 4: 10 折交叉验证

- 使用重抽样

```
cv5 = rsmp("cv", folds = 5)      # 选择重抽样: 5 折交叉验证
rr = resample(task, learner, cv5, store_models = TRUE)
rr$aggregate(msr("classif.acc")) # 所有重抽样的平均准确率
#> classif.acc
#>      0.766

rr$prediction()                  # 所有预测合并为一个预测 (宏平均)
#> <PredictionClassif> for 1000 observations:
#>      row_ids truth response prob.good prob.bad
#>           1  good      good    0.893    0.1074
#>           3  good      good    0.924    0.0758
#>          10  bad      good    0.610    0.3901
#> ---
#>        987  good      bad    0.415    0.5849
#>        990  good      good    0.731    0.2688
#>        997  good      bad    0.437    0.5629
```

```

rr$score(msr("classif.acc"))      # 各个重抽样的准确率
#>                                task task_id                                learner
#> 1: <TaskClassif[50]>           dat <LearnerClassifRanger[38]>
#> 2: <TaskClassif[50]>           dat <LearnerClassifRanger[38]>
#> 3: <TaskClassif[50]>           dat <LearnerClassifRanger[38]>
#> 4: <TaskClassif[50]>           dat <LearnerClassifRanger[38]>
#> 5: <TaskClassif[50]>           dat <LearnerClassifRanger[38]>
#>                                resampling resampling_id iteration
#> 1: <ResamplingCV[20]>           cv           1 <Predicti
#> 2: <ResamplingCV[20]>           cv           2 <Predicti
#> 3: <ResamplingCV[20]>           cv           3 <Predicti
#> 4: <ResamplingCV[20]>           cv           4 <Predicti
#> 5: <ResamplingCV[20]>           cv           5 <Predicti
#>      classif.acc
#> 1:      0.795
#> 2:      0.775
#> 3:      0.770

```

6. 基准测试

基准测试 (benchmark), 用来比较不同学习器 (算法)、在多个任务 (数据) 和/或不同重抽样策略 (多个数据副本) 上的平均性能表现。

基准测试时有一个关键问题是, 测试的公平性, 即每个算法的每次测试必须在相同的重抽样训练集拟合模型, 在相同的重抽样测试集评估性能。

例如,

- 选取一个自带的二分类任务
- 选取多个学习器: 决策树、KNN、随机森林、支持向量机
- 创建基准测试“设计” (每个学习器不能只凭一次结果, 采用 5 折交叉验证的平均结果)
- 查看性能指标: 准确率、AUC 值
- 箱线图展示 AUC 值的对比结果

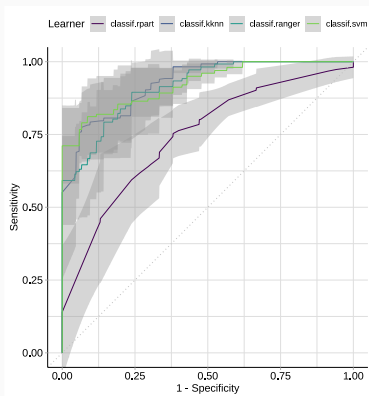
```

tasks = tsk("sonar")           # 可以是多个任务
learners = lrns(c("classif.rpart", "classif.kknn",
                  "classif.ranger", "classif.svm"),
                predict_type = "prob")
design = benchmark_grid(tasks, learners,
                      rsmps("cv", folds = 5))
bmr = benchmark(design)        # 执行基准测试
bmr$aggregate(list(msr("classif.acc"), msr("classif.auc")))
#>      nr      resample_result task_id      learner_id resamp
#> 1:  1 <ResampleResult[21]>    sonar    classif.rpart
#> 2:  2 <ResampleResult[21]>    sonar    classif.kknn
#> 3:  3 <ResampleResult[21]>    sonar    classif.ranger
#> 4:  4 <ResampleResult[21]>    sonar    classif.svm
#>      classif.acc classif.auc
#> 1:          0.702          0.743
#> 2:          0.841          0.926
#> 3:          0.807          0.913

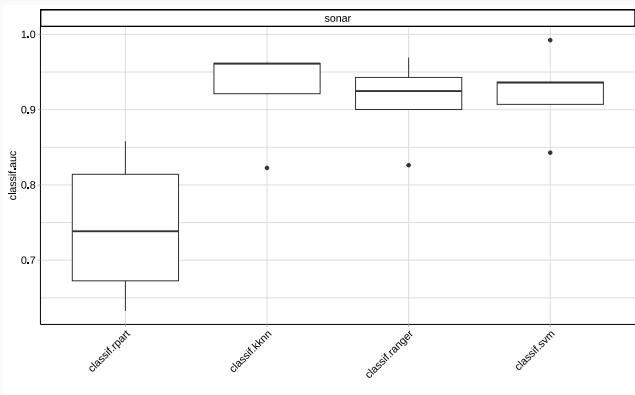
```

```
autoplot(bmr, type = "roc")
```

ROC 曲线



```
autoplot(bmr, measure = msr("classif.auc")) # AUC 箱线图
```



三. 图学习器

一个管道运算 (PipeOp), 表示机器学习管道中的一个计算步骤。一系列的 PipeOps 通过边连接 (`%>>%`) 构成图 (Graph), 图可以是简单的线性图, 也可以是复杂的非线性图。

这让我们可以像搭建积木一样, 搭建出复杂的图, 数据将沿着搭建好的图流动, 完成从预处理到机器学习算法构成的整个过程:

- 选取 PipeOp, 通过`%>>%`、`gunion()`、`ppl()` 等搭建图
- `Graph$plot()` 绘制图的结构关系;
- `as_learner(Graph)` 将图转化为学习器, 即可跟普通学习器一样使用

管道、图学习器主要用于:

- 特征工程: 缺失值插补、特征变换、特征选择、处理不平衡数据.....
- 集成学习: 装袋法、堆叠法
- 分支训练、分块训练

1. 特征工程

机器学习中的数据预处理，也统称为**特征工程**，主要包括：缺失值插补、特征变换，目的是提升模型性能。

- 选择特征工程步相应的 PipeOp;
- 多个特征工程步通过管道符%>>% 连接;
- 很多 PipeOp 都支持 affect_columns 参数 (接受 Selector 选择器)

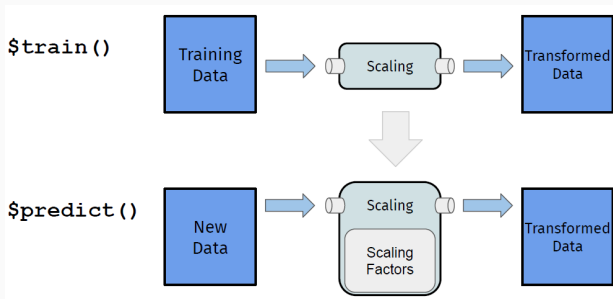


图 5: 特征工程管道示意图

- 创建特征工程

```
graph = po("scale") %>>% po("pca", rank. = 2)  
graph$plot()
```



- **调试：**查看特征工程对数据做了什么

```
graph$train(tsk("iris"))[[1]]$data()
```

```
#>      Species    PC1    PC2
#>  1:   setosa -2.257 -0.4784
#>  2:   setosa -2.074  0.6719
#>  3:   setosa -2.356  0.3408
#>  4:   setosa -2.292  0.5954
#>  5:   setosa -2.382 -0.6447
#> ---
#> 146: virginica  1.864 -0.3857
#> 147: virginica  1.559  0.8937
#> 148: virginica  1.516 -0.2682
#> 149: virginica  1.368 -1.0079
#> 150: virginica  0.957  0.0243
```

- 将特征工程用于新数据

```
graph$predict(tsk("iris")$filter(1:5))[[1]]$data()
```

```
#>   Species  PC1   PC2  
#> 1:  setosa -2.26 -0.478  
#> 2:  setosa -2.07  0.672  
#> 3:  setosa -2.36  0.341  
#> 4:  setosa -2.29  0.595  
#> 5:  setosa -2.38 -0.645
```

- **用于机器学习：** 再接一个学习器，转化成图学习器

```
graph = graph %>% lrn("classif.rpart")  
glrn = as_learner(graph)
```

- 因子特征编码

```
task = tsk("penguins")  
poe = po("encode", method = "one-hot")      # 独热编码  
poe$train(list(task))[[1]]$data()
```

更多特征工程实现，请参阅《R 机器学习：mlr3verse 技术手册》(?)。

2. 缺失值插补

- 缺失值插补，目前支持
 - 常数、均值、中位数、众数插补
 - 随机抽样插补
 - 直方图法插补
 - 学习器插补
 - 超出范围插补
 - 增加是否缺失指示列

```

task = tsk("pima")
task$missings()
#> diabetes      age  glucose  insulin      mass pedigree pr
#>          0          0          5      374          11          0
#> triceps
#>          227
po = po("imputehist")
task = po$train(list(task = task))[[1]]
task$missings()
#> diabetes      age pedigree pregnant  glucose  insulin
#>          0          0          0          0          0
#> triceps
#>          0

```

3. 集成学习

■ 装袋法 (Bagging)

用“有放回”抽样 (Bootstrap 法) 的方式, 对包含 m 个样本的训练集, 进行 m 次有放回的随机抽样操作, 得到样本子集 (有重复) 中有接近 36.8% 的样本没有被抽到。按照同样的方式重复进行, 就可以采集到 T 个包含 m 个样本的数据副本, 从而训练出 T 个基学习器。最终对这 T 个基学习器的输出进行结合, 分类问题就采用“多数决”, 回归问题就采用“取平均”。

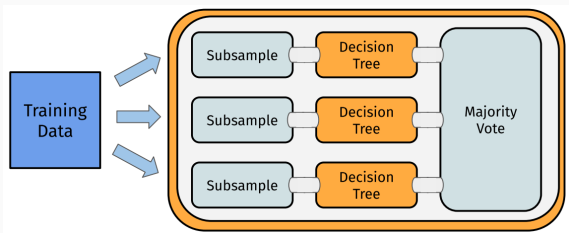


图 6: Bagging 法管道示意图

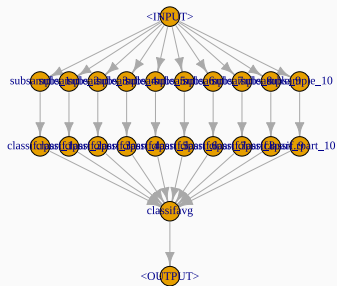
单分支：数据子抽样 + 决策树

```
single_path = po("subsample") %>% lrn("classif.rpart")
```

复制 10 次得到 10 个分支，再接类平均

```
graph_bag = ppl("grepliate", single_path, n = 10) %>%  
  po("classifavg")
```

```
graph_bag$plot()
```



■ 堆叠法 (Stacking)

通常采用 k 折交叉训练法 (类似 k 折交叉验证): 每个基学习器分别在各个 $k - 1$ 折数据上训练, 在其剩下的 1 折数据上预测, 就可以得到对任意 1 折数据的预测结果特征, 进而用于训练主模型。

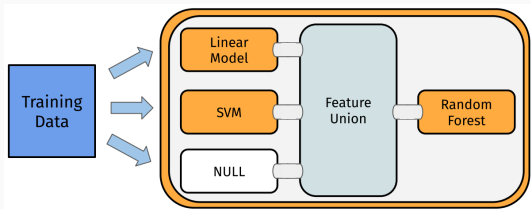
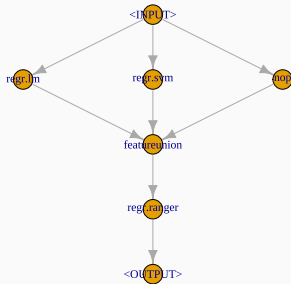


图 7: Stacking 法管道示意图

```
graph_stack = gunion(list(  
  po("learner_cv", lrn("regr.lm")),  
  po("learner_cv", lrn("regr.svm")),  
  po("nop"))) %>%  
po("featureunion") %>%  
lrn("regr.ranger")
```

```
graph_stack$plot()
```



4. 处理不平衡数据

在训练阶段，通过采样对任务进行类平衡，有利于不平衡的数据分类：

- **欠采样**：只保留多数类的一部分行；
- **过采样**：对少数类进行超量采样（重复数据点）；
- **SMOTE 法**：基于少数类观测的 K 个最近邻居生成新观测，只能用于纯数值特征的任务。

```
task = tsk("german_credit")
table(task$truth())
#>
#> good bad
#> 700 300
```

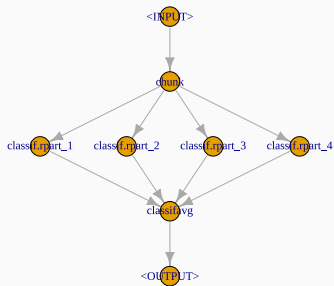
```
# 只支持 double 型特征, 需安装 smotefamily 包
pop = po("colapply", applicator = as.numeric,
        affect_columns = selector_type("integer")) %>%
  po("encodeimpact") %>%
  po("smote", K = 5, dup_size = 1)    # 少数类增加 1 倍
result = pop$train(task)[[1]]
table(result$truth())
#>
#> good  bad
#>  700  600
```

5. 分块训练

- 对无法载入内存的数据，采用分块训练合并模型结果：

```
graph_chunks = po("chunk", 4) %>%  
  ppl("grePLICATE", lrn("classif.rpart"), 4) %>%  
  po("classifavg", 4)
```

```
graph_chunks$plot()
```



四. 嵌套重抽样

构建模型，是如何从一组潜在的候选模型（如不同的算法，不同的超参数，不同的特征子集）中选择最佳模型。在构建模型过程中所使用的重抽样划分，不应该原样用来评估最终选择模型的性能。

通过在相同的测试集或相同的 CV 划分上反复评估学习器，测试集的信息会“泄露”到评估中，导致最终的性能估计偏于乐观。

模型构建的所有部分（包括模型选择、预处理）都应该纳入到训练数据的模型寻找过程中。测试集应该只使用一次，测试集只有在模型完全训练好之后才能被使用，例如已确定好了超参数。这样从测试集获得的性能才是真实性能的无偏估计。

对于本身需要重抽样的步骤（如超参数调参），这需要两个嵌套的重抽样循环，即内层调参和外层评估都需要重抽样策略。

嵌套重抽样，即两层重抽样，相当于是两层 for 循环：

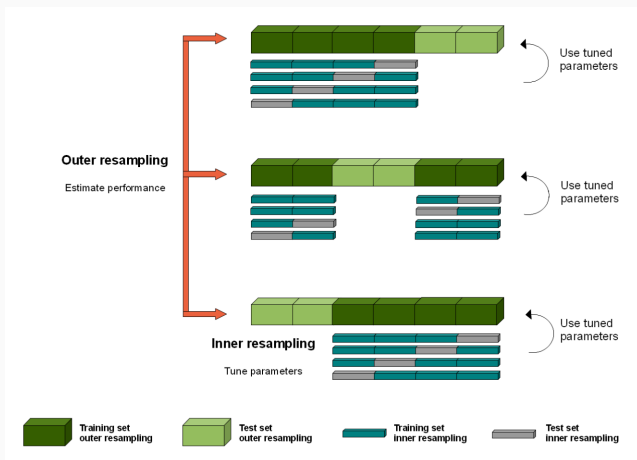


图 8：嵌套重抽样示意图

- 外层是对整个数据集重抽样，**生成整个数据集的若干副本**，每个副本都划分为两部分：**非测试集**和**测试集**，于是就得到若干组非测试集和测试集划分，用于整体上进行外循环的多次迭代：“在非测试集上做特征选择/超参数调参 + 拟合最优特征子集/超参数模型”（也即一轮内循环所做的事情）和“在测试集上评估最优超参数模型性能”，取平均性能作为整个模型的最终性能；
- 内层是对每一次外循环的非测试集重抽样，**生成非测试集的若干副本**，每个副本都划分为两部分：**训练集**和**验证集**，于是就得到若干组训练集（拟合模型）和验证集（评估模型性能）划分，通常是用于做特征选择/超参数调参的内循环多次迭代，以选出最优的特征子集/超参数，确定该次外循环迭代的最优超参数模型；另外，内循环也可用于监视训练过程是否过拟合。

注 1：外层每次迭代，都是使用内层重抽样选出最优超参数或特征子集，在整个非测试集上重新训练模型，再在测试集上评估模型性能。

注 2：留出 (“holdout”) 重抽样，只生成数据的 1 个副本，无论用于外层或内层，都相当于只循环迭代 1 次。

五. 超参数调参

机器学习的模型参数是模型的一阶（直接）参数，是训练模型时用梯度下降法寻优的参数，比如正则化回归模型的回归系数；而超参数是模型的二阶参数，需要事先设定为某值，才能开始训练一阶模型参数，比如正则化回归模型的惩罚参数、KNN 的邻居数等。

超参数会对所训练模型的性能产生重大影响，所以不能是（凭经验）随便指定，而是需要设定很多种备选配置，从中选出让模型性能最优的超参数配置，这就是**超参数调参**。

超参数调参是一项多方联动的系统工作，需要设定：搜索空间、学习器、任务、重抽样策略、模型性能度量指标、终止条件。

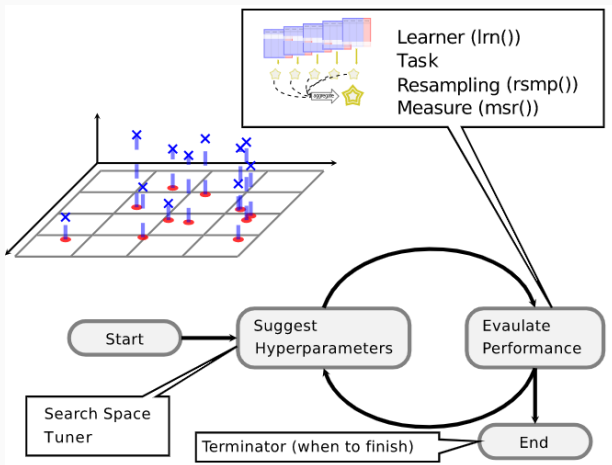


图 9: 超参数调参过程

超参数调参支持：

- 独立调参过程调参：`tune()`
- 自动调参器：`auto_tuner()`，封装成学习器，可用于重抽样或基准测试
- 嵌套重抽样调参：`tune_nested()`

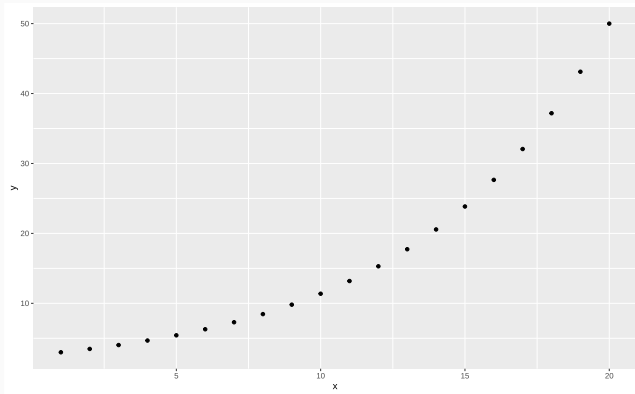
可用 `ps()` 创建搜索空间，需提供按类型的调参域构造函数：`p_int()`，`p_dbl()`，`p_fct()`，`p_lgl`，`p_uty()`，其参数有

- `lower`，`upper`：数值型参数 (`p_dbl` 和 `p_int`) 的下限和上限；
- `levels`：`p_fct` 参数允许的类别值；
- `trafo`：变换函数；
- `depends`：依赖关系。

■ 变换

对于数值型超参数，希望当 x 均匀变化时，变换后作为超参数能前密后疏。这可以通过**对数-指数**变换来实现，这也适用于大范围搜索空间。

```
library(tidyverse)
tibble(x = 1:20,
        y = exp(seq(log(3), log(50), length.out=20))) %>%
  ggplot(aes(x, y)) +
  geom_point()
```



▪ 依赖关系

有些超参数只有在另一个参数取某些值时才有意义。例如，支持向量机有一个 `degree` 参数，只有在 `kernel` 为 "polynomial" 时才有效。这可以用 `depends` 参数来指定：

```
search_space = ps(  
    cost = p_dbl(log(0.1), log(10),  
                 trafo = function(x) exp(x)),  
    kernel = p_fct(c("polynomial", "radial")),  
    degree = p_int(1, 3, depends = kernel == "polynomial"))
```

直接看一个复杂的图学习器嵌套重抽样超参数调参的实例。

图学习器一旦成功创建，就可以像普通学习器一样使用，超参数调参时，原算法的超参数名字都自动带了学习器名字前缀，另外还可以对管道参数调参。

- 选取任务

```
task = tsk("pima")
```

- 该任务包含缺失值，还有若干因子特征，都需要做预处理：

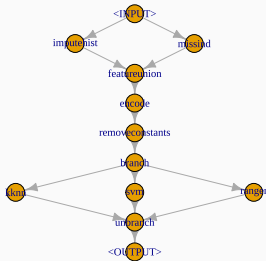
```
prep = gunion(list(  
  po("imputehist"),  
  po("missind", affect_columns =  
    selector_type(c("numeric", "integer")))) %>>%  
  po("featureunion") %>>%  
  po("encode") %>>%  
  po("removeconstants")
```


- 选择 3 个学习器：KNN、SVM、Ranger 作为三支分别拟合模型，再合并分支：

```
learners = list(  
    knn = lrn("classif.kknn", id = "kknn"),  
    svm = lrn("classif.svm", id = "svm",  
              type = "C-classification"),  
    rf = lrn("classif.ranger", id = "ranger"))  
graph = ppl("branch", learners)
```

- 将预处理图和算法图连接得到整个图：

```
graph = prep %>% graph  
graph$plot()
```



- 转化为图学习器，查看其超参数：

```
glearner = as_learner(graph)
```

```
glearner$param_set
```

```
#> <ParamSetCollection>
```

```
#>
```

```
                                id      class lower
```

```
#> 1:                branch.selection ParamFct    NA
```

```
#> 2:          encode.affect_columns ParamUty    NA
```

```
#> 3:                encode.method ParamFct    NA
```

```
#> 4:      imputehist.affect_columns ParamUty    NA
```

```
#> 5:                kknn.distance ParamDbf      0
```

```
#> 6:                kknn.k ParamInt      1
```

```
#> 7:                kknn.kernel ParamFct    NA
```

```
#> 8:                kknn.scale ParamLgl    NA
```

```
#> 9:                kknn.store_model ParamLgl    NA
```

```
#> 10:               kknn.ykernel ParamUty    NA
```

```
#> 11:      missind.affect_columns ParamUty    NA
```

```
#> 12:      missind.tune ParamFct    NA
```

- 嵌套重抽样超参数调参，为了加速计算，启动并行：

```
# future::plan("multicore")      # win 系统不支持多核
future::plan("multisession")    # 只支持多线程（异步）
```

- 设置搜索空间：

```
search_space = ps(
  branch.selection = p_fct(c("kknk", "svm", "ranger")),
  kknk.k = p_int(3, 50, logscale = TRUE,
    depends = branch.selection == "kknk"),
  svm.cost = p_dbl(-1, 1, trafo = function(x) 10^x,
    depends = branch.selection == "svm"),
  ranger.mtry = p_int(1, 8,
    depends = branch.selection == "ranger"))
```

- 用 `tune_nested()` 做嵌套调参：外层 4 折交叉验证、内层 3 折交叉验证

```
rr = tune_nested(  
  method = "random_search",  
  task = task,  
  learner = glearner,  
  inner_resampling = rsmp("cv", folds = 3),  
  outer_resampling = rsmp("cv", folds = 4),  
  measure = msr("classif.ce"),  
  term_evals = 10)
```

- `method`: 调参方法, 支持“`grid_search`” (网格搜索)、
“`random_search`” (随机搜索)、`gensa` (广义模拟退火)、“`nloptr`”
(非线性优化)。

- 查看调参结果

```
rr$aggregate()      # 总的平均模型性能  
#> classif.ce  
#>      0.286
```

```
rr$score()          # 外层 4 次迭代每次的模型性能 (结果略)  
extract_inner_tuning_results(rr)  # 内层调参结果 (结果略)  
extract_inner_tuning_archives(rr) # 内层的调参档案 (结果略)
```

另外, 还有其它调参包: `mlr3hyperband` 包 (基于逐次减半算法的 `multifidelity` 优化)、`mlr3mbo` 包 (灵活贝叶斯优化)、`miesmuschel` 包 (混合整数进化策略)。

六. 特征选择

当数据集包含很多特征时，只提取最重要的部分特征来建模，称为特征选择。特征选择可以增强模型的解释性、加速学习过程、改进学习器性能。

1. 过滤法

过滤法，基于某种衡量特征重要度的指标（如相关系数），用外部算法计算变量的排名，只选用排名靠前的若干特征，用 `mlr3filters` 包实现。

(1) 基于重要度指标

过滤法给每个特征计算一个重要度指标值，基于此可以对特征进行排序，然后就可以选出特征子集。

```
task = tsk("pima")
filter = flt("auc")
as.data.table(filter$calculate(task))

#>      feature score
#> 1:  glucose 0.293
#> 2:  insulin 0.232
#> 3:    mass 0.187
#> 4:    age 0.187
#> 5:  triceps 0.163
#> 6: pregnant 0.120
#> 7: pressure 0.108
#> 8: pedigree 0.106
```


(2) 基于学习器的变量重要度

有些学习器可以计算变量重要度，特别是基于树的模型。有些学习器需要在创建时“激活”其变量重要性度量。例如，通过 `ranger` 包来使用随机森林的“impurity”度量：

```
task = tsk("iris")
learner = lrn("classif.ranger", importance = "impurity")
filter = flt("importance", learner = learner)
filter$calculate(task)
as.data.table(filter)
#>           feature score
#> 1:  Petal.Width 44.44
#> 2:  Petal.Length 42.75
#> 3:  Sepal.Length  9.99
#> 4:  Sepal.Width  2.01
```

使用上述特征选择可以对特征得分可视化，根据肘法确定保留特征数，然后用 `task$select()` 选择特征；也可以直接通过管道连接学习器构建图学习器：

```
task = tsk("spam")
graph = po("filter", filter = flt("auc"),
           filter.frac = 0.5) %>%
  po("learner", lrn("classif.rpart"))
learner = as_learner(graph)
rr = resample(task, learner, rsmpl("cv", folds = 5))
```

```
graph$plot()
```



2. 包装法

包装法，随机选择部分特征拟合模型并评估模型性能，通过交叉验证找到最佳的特征子集，用 `mlr3fselect` 包实现。

包装法特征选择，与超参数调参道理完全一样，支持：

- 独立特征选择过程： `fselect()`
- 自动特征选择器： `auto_fselector()`，封装成学习器，可用于重抽样或基准测试
- 嵌套重抽样特征选择： `fselect_nested()`

- 嵌套重抽样特征选择实例：

```
rr = fselect_nested(  
  method = "random_search",  
  task =   tsk("pima"),  
  learner = lrn("classif.rpart"),  
  inner_resampling = rsmp("cv", folds = 4),  
  outer_resampling = rsmp("cv", folds = 5),  
  measure = msr("classif.ce"),  
  term_evals = 10,  
  batch_size = 5)  
rr$aggregate()    # 总的平均模型性能，也可提供其它度量  
#> classif.ce  
#>           0.25
```

- 查看具体结果

```
rr$score()           # 外层 5 次特征选择的结果  
extract_inner_fselect_results(rr)  # 内层特征选择的结果  
extract_inner_fselect_archives(rr) # 内层特征选择档案
```

另外，有些学习器内部提供了选择有助于做预测的特征子集的方法，称为**嵌入法**。

七. 模型解释

机器学习模型预测性能强大，但天生不好解释。R 有两个通用框架致力于机器学习模型的解释（支持但不属于 `mlr3verse`）：`iml` 包和 `DALEX` 包。

可以从特征层面（特征效应、夏普利值、特征重要度）、观测层面（探索模型在单个观测上的表现）给出指标和可视化的模型解释，具体请参阅《[R 机器学习: mlr3verse 技术手册](#)》(?)。

更多机器学习模型解释理论方法，请参阅[Interpretable Machine Learning: A Guide for Making Black Box Models Explainable](#)

本讲主要参阅 (Marc Becker, 2022), (?), (?), (?). 感谢 (?) 在 Github 提供的 R markdown(?) 模板。

《R 机器学习：基于 mlr3verse》，预计 2024 年上半年上市，我也有计划在寒假期间开设 R 机器学习培训班，敬请期待！

我的知乎专栏：

https://www.zhihu.com/people/huc_zhangjingxin/columns

我的 Github: <https://github.com/zhjx19>

我的 R 书 QQ 读者 2 群: 222427909

我的微信公众号: R 语言与数学建模

Email: zhjx_19@hrbcu.edu.cn



哈尔滨商业大学
Harbin University of Commerce

谢 谢 观 看!



参考文献

Marc Becker, e. a. (2022). *mlr3book*.