

一种改进的特征子集区分度评价准则

谢娟英¹ 吴肇中¹ 郑清泉¹ 王明钊^{1,2}

摘要 针对特征子集区分度准则 (Discernibility of feature subsets, DFS) 没有考虑特征测量量纲对特征子集区分能力影响的缺陷, 引入离散系数, 提出 GDFS (Generalized discernibility of feature subsets) 特征子集区分度准则. 结合顺序前向、顺序后向、顺序前向浮动和顺序后向浮动 4 种搜索策略, 以极限学习机为分类器, 得到 4 种混合特征选择算法. UCI 数据集与基因数据集的实验测试, 以及与 DFS、Relief、DRJMIM、mRMR、LLE Score、AVC、SVM-RFE、VMInaive、AMID、AMID-DWSFS、CFR 和 FSSC-SD 的实验比较和统计重要度检测表明: 提出的 GDFS 优于 DFS, 能选择到分类能力更好的特征子集.

关键词 特征子集区分度, 特征选择, 离散系数, 极限学习机, 特征搜索策略

引用格式 谢娟英, 吴肇中, 郑清泉, 王明钊. 一种改进的特征子集区分度评价准则. 自动化学报, 2022, 48(5): 1292–1306

DOI 10.16383/j.aas.c200704

An Improved Criterion for Evaluating the Discernibility of a Feature Subset

XIE Juan-Ying¹ WU Zhao-Zhong¹ ZHENG Qing-Quan¹ WANG Ming-Zhao^{1,2}

Abstract To overcome the deficiencies of the discernibility of feature subsets (DFS) which cannot take into account the influences from different attribute scales on the discernibility of a feature subset, the generalized DFS, shorted as GDFS, is proposed in this paper by introducing the coefficient of variation. The GDFS is combined with four search strategies, including sequential forward search (SFS), sequential backward search (SBS), sequential forward floating search (SFFS) and sequential backward floating search (SBFS) to develop four hybrid feature selection algorithms. The extreme learning machine (ELM) is adopted as a classification tool to guide feature selection process. We test the classification capability of the feature subsets detected by GDFS on the datasets from UCI machine learning repository and on the classic gene expression datasets, and compare the performance of the ELM classifiers based on the feature subsets by GDFS, DFS and classic feature selection algorithms including Relief, DRJMIM, mRMR, LLE Score, AVC, SVM-RFE, VMInaive, AMID, AMID-DWSFS, CFR, and FSSC-SD respectively. The statistical significance test is also conducted between GDFS, DFS, Relief, DRJMIM, mRMR, LLE Score, AVC, SVM-RFE, VMInaive, AMID, AMID-DWSFS, CFR, and FSSC-SD. Experimental results demonstrate that the proposed GDFS is superior to the original DFS. It can detect the feature subsets with much better capability in classification performance.

Key words Discernibility of a feature subset, feature selection, coefficient of variation, extreme learning machine, feature search strategies

Citation Xie Juan-Ying, Wu Zhao-Zhong, Zheng Qing-Quan, Wang Ming-Zhao. An improved criterion for evaluating the discernibility of a feature subset. *Acta Automatica Sinica*, 2022, 48(5): 1292–1306

大数据时代的数据不仅样本量剧增, 维数也日益剧增, 引发维数灾难^[1], 增加计算复杂度, 而且冗余

和不相关特征使得分类器性能较差, 给数据分析带来挑战. 因此, 特征选择及其评价成为一个研究热点^[2-6].

特征选择旨在发现具有强分类能力且互不相关或尽可能互不相关的少量特征构成特征子集. 特征搜索策略包括完全搜索、随机搜索和启发式搜索 3 大类^[7]. 特征选择算法可分为: Filter^[8], Wrapper^[9], Embedded^[10], Hybrid^[11-13], 以及 Ensemble^[14] 几大类. Filter 方法根据独立于分类器的特征重要性评价准则, 如卡方检验等来判断特征的分类能力, 选择分类性能强的特征构成特征子集. Filter 方法独立于学习过程, 速度快, 但需要阈值作为停止准则, 且准确率较低. Wrapper 方法依赖于分类器, 需要

收稿日期 2020-09-01 录用日期 2021-03-02

Manuscript received September 1, 2020; accepted March 2, 2021

国家自然科学基金 (62076159, 12031010, 61673251), 中央高校基本科研业务费 (GK202105003) 资助

Supported by National Natural Science Foundation of China (62076159, 12031010, 61673251), Fundamental Research Funds for the Central Universities (GK202105003)

本文责任编辑 黎铭

Recommended by Associate Editor LI Ming

1. 陕西师范大学计算机科学学院 西安 710119 2. 陕西师范大学生命科学学院 西安 710119

1. School of Computer Science, Shaanxi Normal University, Xi'an 710119 2. College of Life Sciences, Shaanxi Normal University, Xi'an 710119

将训练样本分为训练子集和验证子集两部分, 特征选择过程中, 以分类器在验证子集的性能判断相应特征子集的分类能力, 选择分类能力强的特征子集. 构建基于特征子集的分类模型, 以测试集对模型进行评价, 从而评价特征子集和相应特征选择算法的性能. Wrapper 方法中, 特征选择过程中使用的学习算法完全是一个“黑匣子”. 因此, Wrapper 方法依赖于学习过程, 准确率较高, 但计算量大, 且存在过适应风险. Embedded 方法通过优化一个目标函数实现特征选择, 特征选择在优化目标函数过程中完成, 不需要将训练样本分成训练子集和验证子集, 但构造合适的优化目标函数困难. Hybrid 方法集成 Filter 方法和 Wrapper 方法的优势, 采用 Filter 方法独立于分类器的准则度量特征分类能力大小, 以一定的启发式策略来搜索特征子集, 采用 Wrapper 方法的以分类器分类性能评价相应特征子集的分类能力. 因此, Hybrid 方法得到广泛关注. Ensemble 方法集成不同特征选择算法实现特征选择, 一般情况下具有较好性能, 能选择到分类能力较好的特征子集, 但需要训练多个不同分类器.

Relief 算法^[15]是经典的 Filter 方法, 但只适用于二分类问题. Relief-F^[16]算法将 Relief 由二分类扩展到多分类问题. LVW (Las Vegas wrapper) 算法^[17]在拉斯维加斯方法 (Las Vegas method) 框架下使用随机搜索策略实现特征选择. SVM-RFE (SVM-recursive feature elimination)^[18]基于 SVM (Support vector machine) 和后向剔除思想实现特征选择, 是经典的 Embedded 特征选择算法, 是为解决超高维基因选择问题提出的算法, 但若每次只剔除一个基因, 时间消耗将成为瓶颈. 为此, 作者 Guyon 指出, 对于超高维基因选择, 每次迭代, 可一次剔除上百个基因, 但她没有给出到底一次剔除多少个基因合适的理论依据和实践指导. mRMR (Max-relevance, min-redundancy)^[19]基于特征相关性, 旨在选择到分类能力强且冗余度最小的特征构成特征子集, 但不同的相关性度量可能会得到不同的结果. F-score^[20]是衡量特征在两类间分辨能力的有效准则. Xie 等将 F-score 推广用于任意类分类问题^[13, 21], 并提出考虑特征测量量纲的改进 F-score 特征重要度评价准则 D-score^[22], 用于皮肤病诊断. 针对 F-score 和 D-score 仅考虑单个特征区分能力, 没有考虑特征联合贡献的问题, 谢等提出了考虑特征联合贡献的特征子集区分度衡量准则 DFS (Discernibility of feature subsets)^[23], 从而获得分类能力更优的特征子集. LLE Score (Locally linear embedding score)^[24]算法通过局部线性嵌入, 实现非

线性维约简^[25], 进行肿瘤基因选择. AVC (Feature selection with AUC-based variable complementarity) 算法^[26]通过最大化变量互补性实现特征选择. 最大化 ROC 曲线下面积的基因选择算法^[27]实现了非平衡基因数据的特征选择. 特征选择算法 DRJMIM (Dynamic relevance and joint mutual information maximization)^[28]充分考虑特征相关性和特征相互依赖性, 采用动态相关性和最大化联合互信息实现特征选择. 基于邻域粗糙集的特征选择算法^[29]基于邻域熵的不确定性度量, 从基因表达数据集中选择差异表达基因实现癌症分类. 谢等对非平衡基因数据的差异表达基因选择进行了系统研究^[30], 提出了 16 种针对非平衡基因数据的特征选择算法. Li 等^[31]从数据视图角度对特征选择算法进行总结, 将特征选择算法分为基于相似度的方法、基于信息论的方法、基于稀疏学习的方法, 以及基于统计的方法 4 大类.

特征选择研究已引起研究者广泛关注, 是高维小样本癌症基因数据分析的首要步骤, 也是其他高维数据分析的基础. 然而, 现有特征选择算法对特征分类能力的评价, 多数仅考虑单个特征的分类贡献, 并忽略了特征测量量纲的影响, DFS^[23]准则考虑了特征的联合贡献, 但其没有考虑不同测量量纲对特征分类贡献的影响, 值域差异悬殊的特征, 相当于被赋予了差异悬殊的权重, 无法准确度量特征对分类的贡献量. 为此, 提出 GDFS (Generalized discernibility of feature subsets) 新准则, 引入离散系数对 DFS 准则进行改进, 客观度量特征子集的分类能力. 以 ELM (Extreme learning machine) 为分类工具评估特征子集的分类性能. UCI (University of California in Irvine) 机器学习数据库数据集和基因数据集的实验测试, 以及与 DFS 和现有经典特征选择算法的实验比较与统计显著性检测表明, 提出的 GDFS 特征子集区分度评价准则是一种有效的特征子集分类能力度量准则, 能选择到分类性能很好的特征子集.

1 GDFS 特征子集区分度

设数据集 \mathbf{X} 包含 l ($l \geq 2$) 个类, 第 c ($c = 1, \dots, l$) 类样本数为 n_c .

1.1 DFS 特征子集区分度

DFS 特征子集区分度衡量准则^[23]考虑特征子集所包含特征的联合作用, 评价特征子集类别间区分能力大小. 则含有 i 个特征的特征子集的区分度 DFS 定义为式 (1).

$$DFS_i = \frac{\sum_{c=1}^l \sum_{j=1}^i (\bar{x}_j^c - \bar{x}_j)^2}{\sum_{c=1}^l \frac{1}{n_c-1} \sum_{k=1}^{n_c} \sum_{j=1}^i \left((x_{k,j}^c - \bar{x}_j^c)^2 \right)} \quad (1)$$

式(1)分子的 \bar{x}_j^c, \bar{x}_j 分别表示第 c 类质心(第 c 类样本均值)在第 j 个特征的取值, 以及整个数据集质心(全部样本均值)在第 j 个特征的取值, 因此, 分子表示对应当前 i 个特征的特征子集, 样本集 l 个类的质心(类中心)到样本集质心(样本集中心)的距离和, 表示类别间的可分性, 值越大表示类别间越疏. 式(1)分母的 $x_{k,j}^c$ 表示第 c 类的第 k 个样本在第 j 个特征的取值, 因此, 分母表示对应当前 i 个特征的特征子集, 样本 l 个类的类内方差之和, 表示类内可聚性, 值越小表示类内越聚^[23]. 因此, 式(1) DFS_i 的值越大表明包含当前 i 个特征的特征子集的分类能力越强^[23].

1.2 GDFS 特征子集区分度

离散系数(变异系数)是样本标准差与样本均值之比, 消除了特征测量量纲对度量样本离散程度的标准差大小的影响, 离散系数越大表明数据离散程度越大, 反之越小^[32].

DFS 没有考虑特征测量量纲对特征重要度的影响, 不同特征取值范围差异悬殊情况下, 相当于对取值较大特征赋予了较大权重, 使其容易被选择到, 从而影响特征选择结果的客观性. 为了客观度量每个特征的分类能力, 避免特征测量量纲不同带来的影响, 提出 GDFS 特征子集区分能力度量准则, 克服 DFS 的缺陷, 以便发现真正具有区分能力的特征. GDFS 定义为式(2).

$$GDFS_i = \frac{\frac{1}{l-1} \sum_{c=1}^l \left(\sum_{j=1}^i \frac{(\bar{x}_j^c - \bar{x}_j)^2}{\bar{x}_j} \right)}{\sum_{c=1}^l \frac{1}{n_c-1} \sum_{k=1}^{n_c} \left(\sum_{j=1}^i \frac{(x_{k,j}^c - \bar{x}_j^c)^2}{\bar{x}_j^c} \right)} \quad (2)$$

式(2)中分子表示 l 个类别对应当前 i 个特征类别间离散系数, 其值越大, 表示各类别间的分散程度越好; 分母表示 l 个类别对应当前 i 个特征的类内离散系数之和, 其值越小, 表示各类别越紧凑. 因此, 式(2)的值越大, 表明当前 i 个特征构成的特征子集的分类能力越强.

1.3 GDFS 正确性理论分析

GDFS 针对 DFS 没有考虑特征测度对特征区分能力影响的缺陷提出采用离散系数对 DFS 进行改进, 因此, 若能证明离散系数不受测度影响, 而标准差受测度影响, 则可证明 GDFS 正确. 为此, 提

出下面的定理, 并进行理论证明.

定理 1. 不妨设有包含 N 个样本, 每个样本拥有 n 个不同测度特征的数据集 $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_s | s = 1, \dots, N\} \in \mathbf{R}^{N \times n}$, 如果某一特征 $f_i (i = 1, \dots, n)$ 采用米作为度量测度, 则 $f_i \in [0.5, 2]$, 而若采用厘米作为测度, 则 $f_i \in [50, 200]$. std_i^c, std_i^m 分别表示特征 f_i 采用厘米和米作为度量测度时的标准差, σ_i^c, σ_i^m 分别表示特征 f_i 采用厘米和米作为测度时的离散系数, 则 $\sigma_i^c = \sigma_i^m, std_i^c \neq std_i^m$.

证明. 不妨将特征 f_i 在数据集 \mathbf{X} 的均值记为 \bar{x}_i , 标准差记为 std_i , 离散系数记为 σ_i , 则:

$$std_i = \sqrt{\frac{\sum_{s=1}^N (x_{s,i} - \bar{x}_i)^2}{N-1}}, \quad \sigma_i = \frac{std_i}{\bar{x}_i}$$

不妨记 $f_i \in [50, 200]$ 时的标准差为 std_i^c , 样本值为 $x_{s,i}^c$, 各样本在特征 f_i 的均值记为 \bar{x}_i^c ; $f_i \in [0.5, 2]$ 的标准差为 std_i^m , 样本值记为 $x_{s,i}^m$, 各样本在特征 f_i 的均值记为 \bar{x}_i^m . 则:

$$\begin{aligned} x_{s,i}^c &= 100x_{s,i}^m, \\ \bar{x}_i^c &= \frac{\sum_{s=1}^N x_{s,i}^c}{N} = \frac{\sum_{s=1}^N 100x_{s,i}^m}{N} = \frac{100 \sum_{s=1}^N x_{s,i}^m}{N} = 100\bar{x}_i^m, \\ std_i^c &= \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{s=1}^N (x_{s,i}^c - \bar{x}_i^c)^2} = \\ &= \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{s=1}^N (100x_{s,i}^m - 100\bar{x}_i^m)^2} = \\ &= \sqrt{10000 \frac{1}{N-1} \sum_{s=1}^N (x_{s,i}^m - \bar{x}_i^m)^2} = \\ &= 100 \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{s=1}^N (x_{s,i}^m - \bar{x}_i^m)^2} = 100std_i^m. \end{aligned}$$

特征 f_i 的离散系数 $\sigma_i = \frac{std_i}{\bar{x}_i}$. 则: $\sigma_i^c = \frac{std_i^c}{\bar{x}_i^c} = \frac{100std_i^m}{100\bar{x}_i^m} = \frac{std_i^m}{\bar{x}_i^m} = \sigma_i^m$.

因此, $\sigma_i^c = \sigma_i^m, std_i^c \neq std_i^m$ 成立, 即离散系数与特征测度无关, 但方差与标准差均受到特征测度影响. 由此可见, 提出的 GDFS 在理论上是正确的. □

2 极限学习机

极限学习机 ELM 是基于单隐层前馈神经网络的机器学习算法^[33]. ELM 随机产生输入层和隐藏层之间的连接权重和隐藏层阈值, 只需要设定隐藏层

结点数便能获得唯一最优的隐藏层到输出层的连接权重.

假设有 N 个训练样本对 $(\mathbf{x}_i, \mathbf{t}_i)$, $\mathbf{x}_i \in \mathbf{R}^n$, $\mathbf{t}_i \in \mathbf{R}^m$, 激活函数为 $g(\cdot)$, 则有 \tilde{N} 个隐结点的单隐层前馈神经网络的数学模型描述为式 (3).

$$\sum_{j=1}^{\tilde{N}} \beta_j g(\mathbf{w}_j \cdot \mathbf{x}_i + b_j) = \mathbf{t}_i \quad (3)$$

其中, \mathbf{w}_j 表示第 j 个隐结点和所有输入结点间的权重向量, β_j 表示第 j 个隐结点和所有输出结点间的权重向量, b_j 是第 j 个隐结点的阈值.

带有 \tilde{N} 个隐结点的 ELM, 激活函数 $g(\cdot)$ 能够以零误差逼近 N 个训练样本, 即存在 $\beta_j, \mathbf{w}_j, b_j$, 使式 (3) 成立. 式 (3) 可简写为式 (4) 矩阵形式.

$$\mathbf{H}\boldsymbol{\beta} = \mathbf{T} \quad (4)$$

其中,

$$\mathbf{H}(\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_{\tilde{N}}, b_1, \dots, b_{\tilde{N}}, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = \begin{bmatrix} g(\mathbf{w}_1 \cdot \mathbf{x}_1 + b_1) & \dots & g(\mathbf{w}_{\tilde{N}} \cdot \mathbf{x}_1 + b_{\tilde{N}}) \\ \vdots & \dots & \vdots \\ g(\mathbf{w}_1 \cdot \mathbf{x}_N + b_1) & \dots & g(\mathbf{w}_{\tilde{N}} \cdot \mathbf{x}_N + b_{\tilde{N}}) \end{bmatrix}_{N \times \tilde{N}},$$

$$\boldsymbol{\beta} = \begin{bmatrix} \beta_1^T \\ \vdots \\ \beta_{\tilde{N}}^T \end{bmatrix}_{\tilde{N} \times m}, \quad \mathbf{T} = \begin{bmatrix} \mathbf{t}_1^T \\ \vdots \\ \mathbf{t}_N^T \end{bmatrix}_{N \times m}. \quad \mathbf{H} \text{ 是隐藏层输出矩阵, } \boldsymbol{\beta} \text{ 是隐藏层与输出层之间的权值向量矩阵, } \mathbf{T} \text{ 是输出矩阵.}$$

求解式 (4) 的最小二乘解, 可转化为求解式 (5). 根据最小范数准则, ELM 的最小二乘解为 $\hat{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{H}^+ \mathbf{T}$, \mathbf{H}^+ 为 \mathbf{H} 的广义逆矩阵.

$$\left\| \mathbf{H}(\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_{\tilde{N}}, b_1, \dots, b_{\tilde{N}}) \hat{\boldsymbol{\beta}} - \mathbf{T} \right\| = \min_{\boldsymbol{\beta}} \left\| \mathbf{H}(\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_{\tilde{N}}, b_1, \dots, b_{\tilde{N}}) \boldsymbol{\beta} - \mathbf{T} \right\| \quad (5)$$

3 基于 GDFS 的特征选择算法

假设 \mathbf{S} 为包含 n 个特征的特征全集, \mathbf{C} 是选择的特征子集, \mathbf{C} 初始化为空集, 划分数据集为训练集和测试集, 在训练集进行特征选择, 采用 SFS, SBS, SFFS 和 SBFS 特征搜索策略, 以 GDFS 评价特征子集性能, 得到算法 1 ~ 4 描述的 4 种混合特征选择算法: GDFS+SFS, GDFS+SBS, GDFS+SFFS, GDFS+SBFS.

算法 1. GDFS+SFS 特征选择算法

输入: 训练集 $\mathbf{X} \in \mathbf{R}^{m \times n}$,

$\mathbf{S} = \{f_i | i = 1, \dots, n\}$, $\mathbf{C} = \Phi$. // Φ 表示空集

输出: 特征子集 \mathbf{C}

步骤 1. 计算特征 $f_i (i = 1, \dots, n)$ 的 D -score 值, 令 $K = \operatorname{argmax}_{i=1, \dots, n} \{D\text{-score}(i)\}$, $\mathbf{C} = \mathbf{C} + K$, $\mathbf{S} = \mathbf{S} - K$;

步骤 2. 5-折交叉验证训练 ELM 分类器, 训练集样本只含有 \mathbf{C} 中全部特征, 记录 5-折交叉验证的平均分类准确率 $Acctrain$;

步骤 3. 判断 \mathbf{S} 是否为空, 若 \mathbf{S} 不空, 将 \mathbf{S} 中的特征逐一与 \mathbf{C} 组合, 构成比当前 \mathbf{C} 特征数多 1 的临时特征子集 $temp\mathbf{C}$, 根据式 (2) 计算 $temp\mathbf{C}$ 的 GDFS 值, 选择 GDFS 值最大的特征子集 $temp\mathbf{C}$ 对应的特征 K 加入到 \mathbf{C} , 令 $\mathbf{S} = \mathbf{S} - K$, 转步骤 2; 若 \mathbf{S} 为空, 则算法结束.

取 $Acctrain$ 不再提高时对应的特征子集 \mathbf{C} 为被选择特征子集. 以 \mathbf{C} 中所含特征在训练集构建 ELM 分类器, 计算测试集的各项指标, 评价特征子集 \mathbf{C} 的分类性能.

算法 2. GDFS+SBS 特征选择算法

输入: 训练集 $\mathbf{X} \in \mathbf{R}^{m \times n}$,

$\mathbf{S} = \{f_i | i = 1, \dots, n\}$, $\mathbf{C} = \Phi$. // Φ 表示空集

输出: 特征子集 \mathbf{C}

步骤 1. 令 $\mathbf{C} = \mathbf{S}$;

步骤 2. 计算 \mathbf{S} 的规模 $\|\mathbf{S}\|$, 若 $\|\mathbf{S}\| \neq 0$, 则 5-折交叉验证训练 ELM, 训练样本包括 \mathbf{S} 中全部特征, 记录 5-折交叉验证的平均分类准确率 $Acctrain$, 若 $\|\mathbf{S}\| = 0$, 则算法结束;

步骤 3. 尝试删除 \mathbf{S} 中每一个特征, 计算 $\|\mathbf{S}\|$ 个特征数为 $\|\mathbf{S}\| - 1$ 的临时特征子集 $temp\mathbf{S}$ 的 GDFS, 删除使 GDFS 值最大的 $temp\mathbf{S}$ 对应特征 K , 令 $\mathbf{S} = \mathbf{S} - K$, $\mathbf{C} = \mathbf{C} - K$, 转步骤 2.

取 $Acctrain$ 不再提高时的特征子集 \mathbf{C} 为被选特征子集. 以 \mathbf{C} 中所含特征在训练集构建 ELM 分类器, 通过测试集来评价特征子集 \mathbf{C} 的分类性能.

算法 3. GDFS+SFFS 特征选择算法

输入: 训练集 $\mathbf{X} \in \mathbf{R}^{m \times n}$,

$\mathbf{S} = \{f_i | i = 1, \dots, n\}$, $\mathbf{C} = \Phi$. // Φ 表示空集

输出: 特征子集 \mathbf{C}

步骤 1. 计算特征 $f_i (i = 1, \dots, n)$ 的 D -score, 令 $K = \operatorname{argmax}_{i=1, \dots, n} \{D\text{-score}(i)\}$, $\mathbf{C} = \mathbf{C} + K$, $\mathbf{S} = \mathbf{S} - K$;

步骤 2. 5-折交叉验证训练 ELM, 训练集样本只含有 \mathbf{C} 中全部特征, 记录 5-折交叉验证的平均分类准确率 $Acctrain$;

步骤 3. 若 $\|\mathbf{S}\| \neq 0$, 将 \mathbf{S} 中的每一个特征与特征子集 \mathbf{C} 组合, 构成特征数增 1 的临时特征子集 $temp\mathbf{C}$, 计算 $temp\mathbf{C}$ 的 GDFS 值, 选择 GDFS 值最大的特征子集 $temp\mathbf{C}$ 对应特征 K 加入到 \mathbf{C} , 令 $\mathbf{S} = \mathbf{S} - K$; 否则, 算法结束;

步骤 4. 训练 ELM, 训练样本只含有 \mathbf{C} 中全部特征, 并记录相应的 $Acctrain$;

步骤 5. 若 $Acctrain$ 上升, 则转步骤 3; 否则, 从 \mathbf{C} 中

删除刚加入的特征 K , 然后转步骤 3.

算法结束时的特征子集 C 为选择的特征子集. 以 C 中所含特征构建 ELM 模型, 通过测试集来评价特征子集的分类性能.

算法 4. GDFS+SBFS 特征选择算法

输入: 训练集 $X \in \mathbf{R}^{m \times n}$,

$S = \{f_i | i = 1, \dots, n\}$, $C = \Phi$. // Φ 表示空集

输出: 特征子集 C

步骤 1. 令 $C = S$, 5-折交叉验证训练 ELM, 训练样本含有 S 中全部特征, 记录平均分类准确率 $Acctrain$;

步骤 2. 若 $\|S\| \neq 0$, 尝试删除 S 中每一特征, 得到 $\|S\|$ 个特征数为 $\|S\| - 1$ 的临时特征子集 $tempS$, 计算 $tempS$ 的 GDFS, 从 S 中删除 GDFS 值最大的临时特征子集 $tempS$ 对应特征 K , 即令 $S = S - K$; 否则, 算法结束;

步骤 3. 训练 ELM, 训练集样本含有当前 S 中全部特征, 记录相应的 $Acctrain$;

步骤 4. 若 $Acctrain$ 上升或者保持不变, 则令 $C = C - K$;

步骤 5. 转步骤 2.

算法结束时, C 为选择的特征子集, 构建基于 C 的 ELM, 通过测试集来评价特征子集 C 的分类性能.

4 实验结果与分析

实验分为 4 部分, 第 1 部分验证采用 ELM 分类器的合理性; 第 2 部分比较提出的 GDFS 与原始 DFS 的性能; 第 3 部分比较提出的 4 种特征选择算法与经典算法的性能; 第 4 部分是算法的统计重要性检测. 其中, 第 1 部分实验采用原始 DFS 特征子集评价准则, 以便选择与 DFS 结合最优的分类器, 这样使第 2 部分比较提出的 GDFS 与 DFS 时, 选择使 DFS 性能最佳的分类器, 能更凸显提出的 GDFS 的优越性.

为了避免实验结果受不同数据集划分的影响, 采用 5-折交叉验证实验, 以获得平均的实验结果. 并在实验前, 随机打乱样本获得随机实验数据. 打乱方法为: 随机生成一个足够大 2 维数组, 数组元素的取值为 1~数据集规模之间的一个随机数, 交换数组每行两个元素值对应样本.

4.1 ELM 与 SVM 性能比较

本小节采用 DFS 特征子集评价准则, 结合 SFS, SBS, SFBS 和 SBFS 特征搜索策略, 分别采用 ELM 和 SVM 分类工具引导特征选择过程, 比较基于相应特征子集的 ELM 和 SVM 分类器的性能, 选择分类性能好的分类器. 实验采用 UCI 机器学习数据库^[34] 的 iris, thyroid-disease, glass, wine,

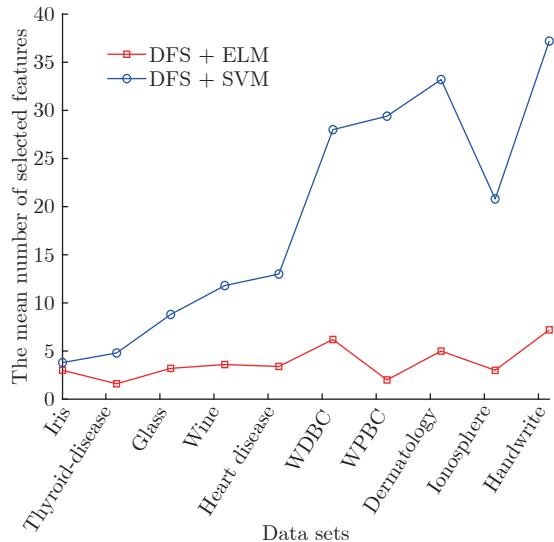
Heart Disease, WDBC (Wisconsin diagnostic breast cancer), WPBC (Wisconsin prognostic breast cancer), dermatology, ionosphere 和 Handwrite 数据集. 数据集描述见表 1. thyroid-disease 是 thyroid gland data 数据集; Heart Disease 为 processed Cleveland, 删掉 6 个含有缺失数据的样本, 样本数由 303 变为 297; WPBC 删掉了 4 个含有缺失数据的样本, 样本数由 198 变为 194; dermatology 删掉了 8 个含有缺失数据的样本, 因此样本数由 366 变为 358; Handwrite 选择了前 2 类进行实验.

表 1 实验用 UCI 数据集描述

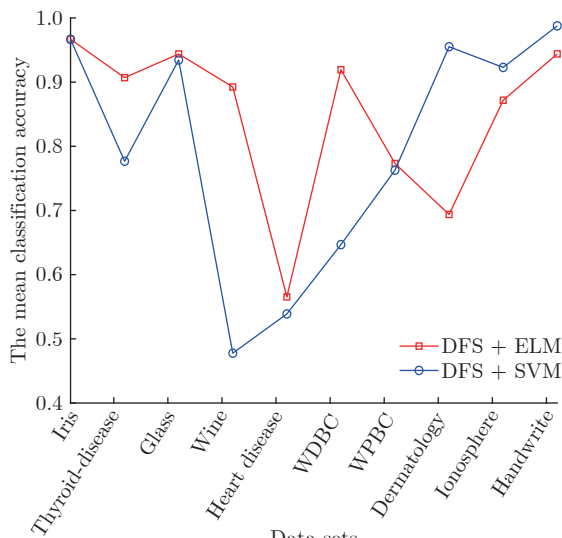
数据集	样本个数	特征数	类别数
iris	150	4	3
thyroid-disease	215	5	3
glass	214	9	2
wine	178	13	3
Heart Disease	297	13	3
WDBC	569	30	2
WPBC	194	33	2
dermatology	358	34	6
ionosphere	351	34	2
Handwrite	323	256	2

SVM 分类器采用林智仁等^[35] 开发的 SVM 工具箱, 核函数采用 RBF (Radial basis function) 核函数^[36], 参数采用默认值. ELM 采用 RBF 核函数, 参数为默认值, 隐藏层结点数以 5 为步长增加, 根据交叉验证结果选择最优隐结点数^[33]. 为避免 ELM 的随机初始输入权重向量和隐结点阈值影响实验结果, 实验中设定阈值为 0.01, 当训练数据集的分类正确率在一定范围内波动时, 认为分类正确. 图 1 ~ 4 展示了分别采用 ELM 与 SVM 为分类器, 以 DFS 度量特征子集性能的 5-折交叉验证实验平均结果.

图 1 实验结果显示: 采用 SFS 搜索策略, 以 ELM 分类器引导特征选择过程得到的特征子集不仅规模小, 且在绝大部分数据集上的分类性能更好. 图 2 ~ 图 3 实验结果显示, 采用 SBS 和 SFBS 搜索策略, 以 ELM 或 SVM 为分类器, 除了 Handwrite 数据集, 其他数据集的特征数量差别不大, 但 ELM 分类器得到的特征子集分类能力更强. 图 4 的实验结果显示: ELM 分类器选择的特征子集的规模在多数数据集上比 SVM 得到的特征子集规模稍大,



(a) 特征子集规模
(a) Size of feature subset



(b) 分类正确率
(b) Classification accuracy

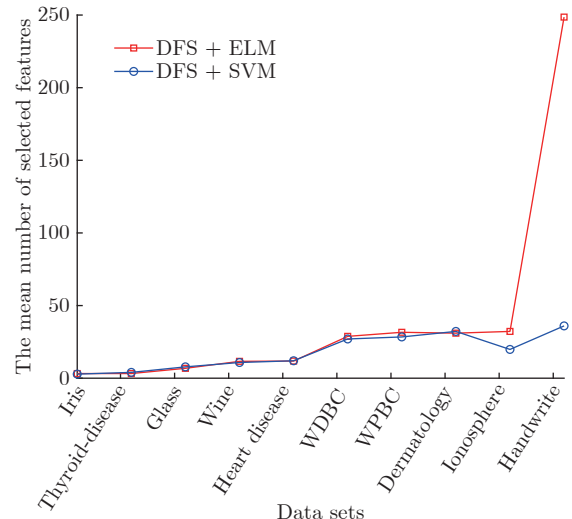
图 1 DFS+SFS 算法的 5-折交叉验证实验结果
Fig.1 The 5-fold cross-validation experimental results of DFS+SFS

但 ELM 分类器得到的特征子集的分类性能优于 SVM 选择的特征子集的分类性能.

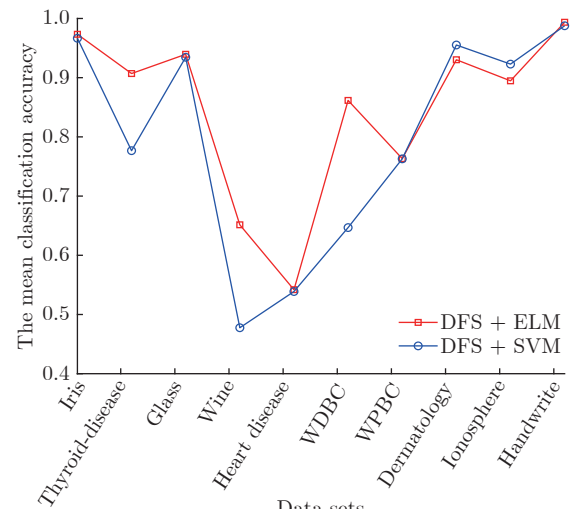
特征选择的目标是: 发现规模小且分类性能好的特征子集. 综合图 2 ~ 图 4 的实验结果可见, 采用 ELM 分类器能够获得分类能力更好的特征子集.

4.2 GDFS 与 DFS 性能比较

本小节在第 4.1 节实验基础上, 选择使 DFS 性能更优的 ELM 分类器, 测试提出的 GDFS 特征子集性能评价准则的优越性. 提出的 4 种特征选择算法 GDFS+SFS, GDFS+SBS, GDFS+SFFS, GD-



(a) 特征子集规模
(a) Size of feature subset



(b) 分类正确率
(b) Classification accuracy

图 2 DFS+SBS 算法的 5-折交叉验证实验结果
Fig.2 The 5-fold cross-validation experimental results of DFS+SBS

FS+SBFS 与原 DFS+SFS, DFS+SBS, DFS+SFFS, DFS+SBFS 在表 1 数据集的 5-折交叉验证的实验结果如表 2 ~ 表 5 所示, 加粗和加下划线表示最优实验结果.

表 2 ~ 表 5 的 5-折交叉验证实验结果显示: GDFS+SFS, GDFS+SBS, GDFS+SFFS 和 GDFS+SBFS 选择的特征子集的分类能力均分别优于 DFS+SFS, DFS+SBS, DFS+SFFS 和 DFS+SBFS 算法选择的特征子集的分类能力. 因此, GDFS 比 DFS 选择的特征子集的分类能力更强. 从各算法选择的特征子集规模来看, GDFS+SFS 选择的特征子集规模最小, 接着是 GDFS+SFFS 和 GDFS+SBFS

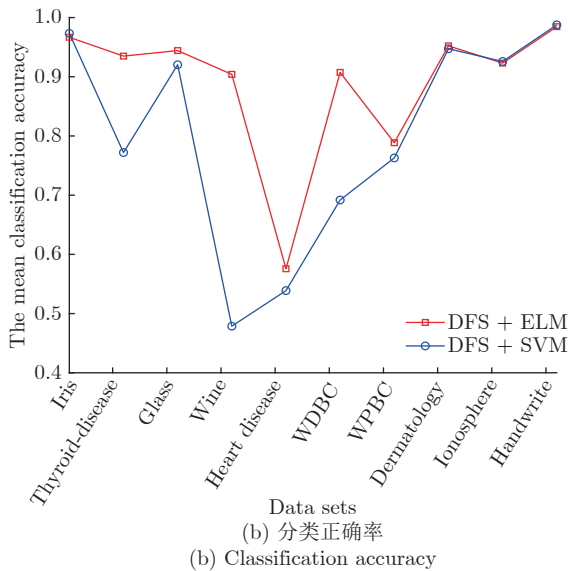
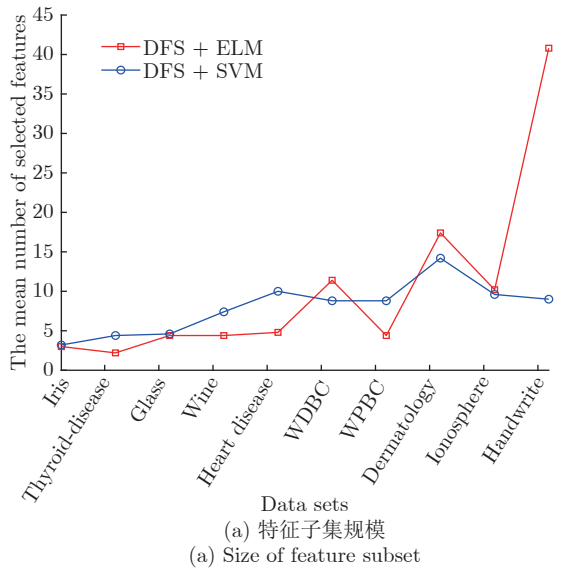


图3 DFS+SFFS 算法的 5-折交叉验证实验结果
Fig.3 The 5-fold cross-validation experimental results of DFS+SFFS

算法, GDFS+SBS 算法选择的特征子集规模较大. 另外, GDFS+SFS, GDFS+SBS, GDFS+SBFS 比 DFS+SFS, DFS+SBS, DFS+SBFS 选择的特征子集规模平均值略小, GDFS+SFFS 与 DFS+SFFS 选择的特征子集规模基本相当, 前者略大一点.

表 2 ~ 表 5 的 5-折交叉验证实验结果还显示, GDFS+SFFS 算法选择的特征子集的分类性能最好, GDFS+SFS 和 GDFS+SBS 选择的特征子集的分类能力相当, 不如 GDFS+SFFS, 但优于 GDFS+SBFS 算法选择的特征子集的分类能力.

综上所述可见, 提出的 GDFS 比原始 DFS 更优, 能选择到分类能力好且规模较小的特征子集.

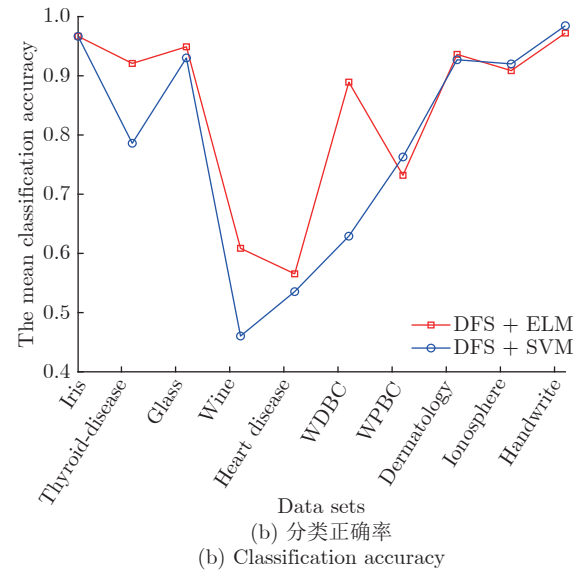
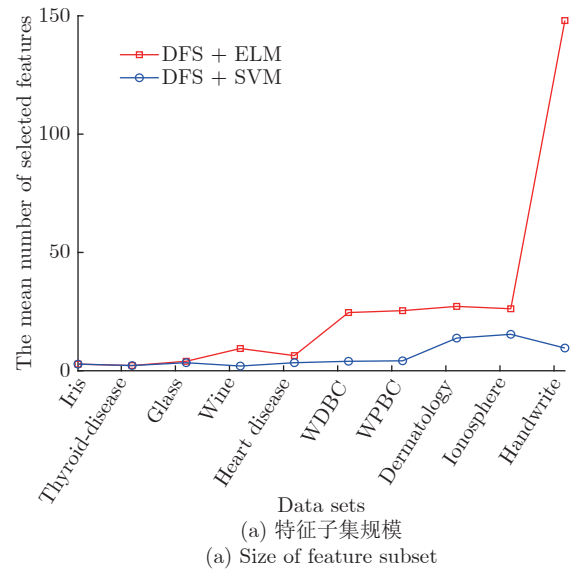


图4 DFS+SBFS 算法的 5-折交叉验证实验结果
Fig.4 The 5-fold cross-validation experimental results of DFS+SBFS

其中, GDFS+SFFS 算法选择的特征子集分类能力最优, 且规模较小. 因此后面对比实验中仅选择 GDFS+SFFS 算法与现有经典算法进行比较.

4.3 GDFS 与其他特征选择算法的比较

本小节用 6 个经典基因数据集 Colon^[37]、Prostate^[38]、Myeloma^[39]、Gas2^[40-41]、SRBCT^[42] 和 Carcinoma^[31] 进一步测试提出的特征子集性能评价准则 GDFS 的优越性. 数据集详细信息见表 6. 实验将比较提出的 GDFS+SFFS 与现有特征选择算法 DFS+SFFS^[23]、Relief^[15-16]、DRJMIM^[28]、mRMR^[19]、LLE Score^[24]、AVC^[26]、SVM-RFE^[18]、VMI_{naive}

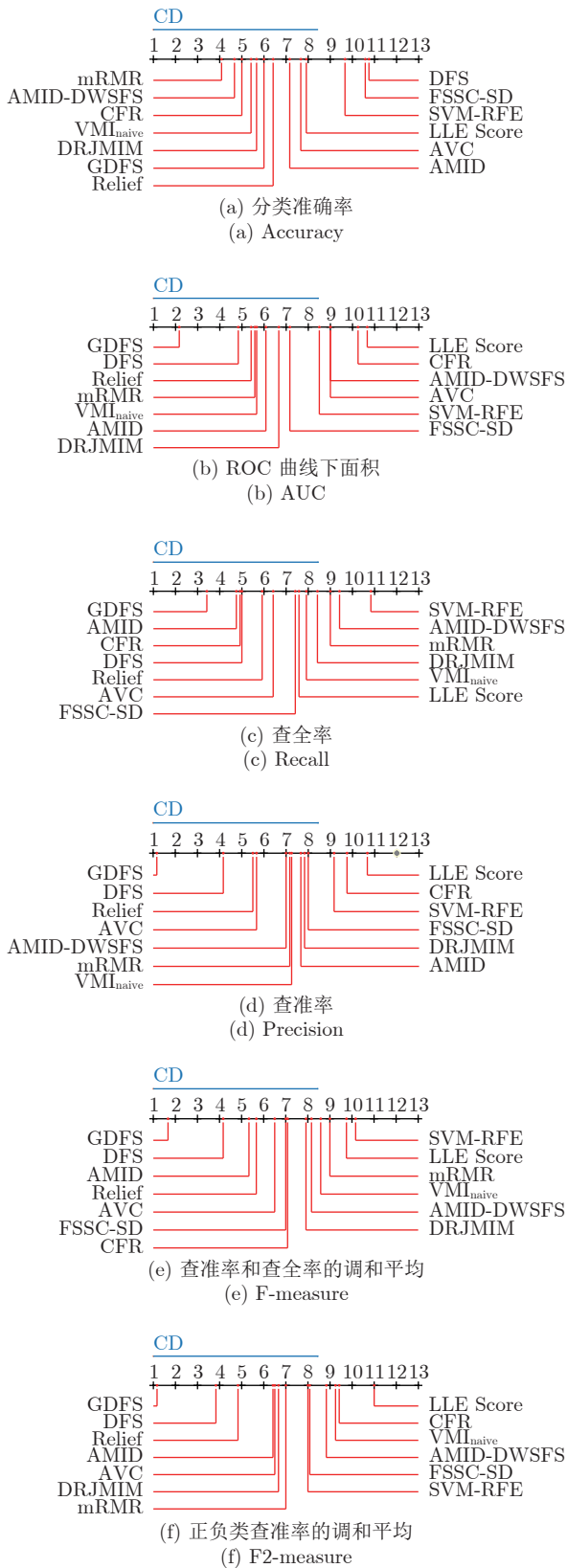


图 5 各特征选择算法的 Nemenyi 检验结果
 Fig.5 Nemenyi test results of 13 feature selection algorithms in terms of performance metrics of ELM built on their selected features

表 2 GDFS+SFS 与 DFS+SFS 算法的 5-折交叉验证实验结果

Table 2 The 5-fold cross-validation experimental results of GDFS+SFS and DFS+SFS algorithms

Data sets	#原特征	#选择特征		测试准确率	
		GDFS	DFS	GDFS	DFS
iris	4	2.2	3	0.9733	0.9667
thyroid-disease	5	1.4	1.6	0.9163	0.9070
glass	9	2.4	3.2	0.9346	0.9439
wine	13	3.6	3.6	0.9272	0.8925
Heart Disease	13	2.8	3.4	0.5889	0.5654
WDBC	30	3.4	6.2	0.9227	0.9193
WPBC	33	1.8	2	0.7835	0.7732
dermatology	34	4.6	5	0.7151	0.6938
ionosphere	34	4.4	3	0.9029	0.8717
Handwrite	256	7.4	7.2	0.9657	0.9440
平均	43.1	3.4	3.82	0.8630	0.8478

表 3 GDFS+SBS 与 DFS+SBS 算法的 5-折交叉验证实验结果

Table 3 The 5-fold cross-validation experimental results of GDFS+SBS and DFS+SBS algorithms

Data sets	#原特征	#选择特征		测试准确率	
		GDFS	DFS	GDFS	DFS
iris	4	2.6	3.2	0.9867	0.9733
thyroid-disease	5	2.8	3.2	0.9269	0.9070
glass	9	8.2	6.8	0.9580	0.9375
wine	13	12	11.6	0.6855	0.6515
Heart Disease	13	11.8	11.8	0.5490	0.5419
WDBC	30	28	28.8	0.8981	0.8616
WPBC	33	30.8	31.6	0.7785	0.7633
dermatology	34	31	31	0.9443	0.9303
ionosphere	34	31.8	32.2	0.9031	0.8947
Handwrite	256	245	248.6	1	0.9936
平均	43.1	40.4	40.88	0.8630	0.8455

(Variational mutual information)^[43], AMID (AUC and mutual information difference)^[30], AMID-DWSFS (Dynamic weighted SFS using dynamic AUC and mutual information difference)^[30], CFR (Composition of feature relevancy)^[44], FSSC-SD (Feature selection by spectral clustering based on standard deviation)^[45] 选择的特征子集的 ELM 分类器的分类准确率 Accuracy、查准率 precision、查全率 recall、查准率和查全率的调和平均 F-measure、正负类查准率的调和平均 F2-measure^[30], ROC (Receiver operating characteristic) 曲线下面积 AUC (Area under and ROC curve)^[46-48].

表 4 GDFS+SFFS 与 DFS+SFFS 算法的
5-折交叉验证实验结果

Table 4 The 5-fold cross-validation experimental
results of GDFS+SFFS and DFS+SFFS algorithms

Data sets	#原特征	#选择特征		测试准确率	
		GDFS	DFS	GDFS	DFS
iris	4	2.8	3	0.9867	0.9667
thyroid-disease	5	2.2	2.2	0.9395	0.9349
glass	9	4.2	4.4	0.9629	0.9442
wine	13	4.2	4.4	0.9261	0.9041
Heart Disease	13	4.4	4.8	0.5928	0.5757
WDBC	30	11	11.4	0.9385	0.9074
WPBC	33	5.8	4.4	0.7943	0.7886
dermatology	34	16.8	17.4	0.9522	0.9552
ionosphere	34	9.6	10.2	0.9173	0.9231
Handwrite	256	42.2	40.8	0.9907	0.9846
平均	43.1	10.32	10.3	0.8992	0.8885

表 5 GDFS+SBFS 与 DFS+SBFS 算法的
5-折交叉验证实验结果

Table 5 The 5-fold cross-validation experimental
results of GDFS+SBFS and DFS+SBFS algorithms

Data sets	#原特征	#选择特征		测试准确率	
		GDFS	DFS	GDFS	DFS
iris	4	2.4	2.8	0.98	0.9667
thyroid-disease	5	2.4	2.2	0.9395	0.9209
glass	9	5.4	4	0.8979	0.9490
wine	13	9.2	9.4	0.6519	0.6086
Heart Disease	13	5.4	6.4	0.5757	0.5655
WDBC	30	22.8	24.6	0.8911	0.8893
WPBC	33	24.6	25.4	0.7681	0.7319
dermatology	34	28.2	27.2	0.9444	0.9362
ionosphere	34	28.4	26.2	0.9174	0.9087
Handwrite	256	137.4	148	0.9938	0.9722
平均	43.1	26.62	27.62	0.8560	0.8449

由于基因数据集所含特征数成千上万,为了减少各特征选择算法的运行时间开销,实验首先采用 D-score 算法^[22]对表 6 数据集进行特征预选,剔除部分不相关和冗余特征,得到各数据集的候选特征子集,各算法在候选特征子集上进行特征选择.表 7 展示了 GDFS+SFFS 与特征选择算法 DFS+SFFS、Relief、DRJMIM、mRMR、LLE Score、AVC、SVM-RFE、VMI_{naive}、AMID、AMID-DWSFS、CFR 及 FSSC-SD 的 5-折交叉验证实验结果,加粗和下划线表示最优结果.对比算法的参数设置为:Relief 算法的最近邻数为 3;LLE Score 算法的类内邻域为 4,类外邻域为 12;AVC 算法的

表 6 实验使用的基因数据集描述

Table 6 Descriptions of gene datasets
using in experiments

数据集	样本数	特征数	类别数
Colon	62	2000	2
Prostate	102	12625	2
Myeloma	173	12625	2
Gas2	124	22283	2
SRBCT	83	2308	4
Carcinoma	174	9182	11

preSelePara 参数为默认值.

表 7 各算法选择的特征子集的 ELM 分类器的 Accuracy、AUC、recall、precision、F-measure 和 F2-measure 实验结果显示,提出的 GDFS+SFFS 算法所选特征子集的分类能力除了在 Prostate 数据集的 AUC、在 Gas2 的 recall、在 Carcinoma 的 F2-measure 略低于 DFS+SFFS 算法外,在该 3 个数据集的其他 5 个评价指标,以及在其他 3 个基因数据集的 6 个评价指标 Accuracy、AUC、recall、precision、F-measure 和 F2-measure 均优于原始 DFS+SFFS 算法.从特征子集规模来看,提出的 GDFS+SFFS 算法除了在 Carcinoma 数据集的特征子集规模略高于(即选择的特征数稍多于)DFS+SFFS 算法外,在其他数据集得到的特征子集的规模(特征数)都不高于 DFS+SFFS.因此,可以说提出的特征子集区分度评价准则 GDFS 优于原始 DFS,能选择到规模较小且分类能力强的特征子集.

另外,提出的 GDFS+SFFS 算法所选特征子集的 ELM 分类器的 precision 和 F2-measure 在 5/6 个数据集是最优的,F-measure 在 4/6 个数据集优于所有对比算法,AUC 和 recall 分别在 3/6 和 2/6 个数据集上取得所有对比算法的最优值.对比算法 VMI_{naive} 在 Colon 数据集的 AUC、recall 和 F-measure 优于对比算法,AUC 和 recall 的值均为最大值 1,但此时其 F2-measure 为 0,说明该算法将测试集的全部负类样本均误识为正类样本.算法 CFR 在 Colon 数据集也存在选择的特征子集的 ELM 分类器的 recall 指标为最大值 1,但 F2-measure 为 0 的问题,也是将测试集的负类样本全部误识为正类样本造成的.另外,表 7 的整体实验结果来看,GDFS+SFFS 算法选择的特征子集的分类性能是所有 13 个算法中最好的.

以上分析显示:提出的特征子集评价准则 GDFS 比原始 DFS 准则更好,能选择出规模小且分类能力更好的特征子集;另外,GDFS 选择的特征子集的分类能力优于特征选择算法 Relief、DRJMIM、

表 7 各算法在表 6 基因数据集的 5-折交叉验证实验结果
 Table 7 The 5-fold cross-validation experimental results of all algorithms on datasets from Table 6

Data sets	算法	特征数	Accuracy	AUC	recall	precision	F-measure	F2-measure
Colon	GDFS+SFFS	5.2	0.7590	0.8925	0.9	0.7	0.78	0.4133
	DFS+SFFS	5.4	0.7256	0.78	0.8250	0.6856	0.7352	0.2332
	Relief	8	0.7231	0.7575	0.9	0.6291	0.7396	0.16
	DRJMIM	13	0.7282	0.7825	0.8750	0.6642	0.7495	0.3250
	mRMR	5	0.7602	0.7325	0.85	0.6281	0.7185	0.1578
	LLE Score	7	0.7577	0.6563	0.8750	0.6537	0.7431	0.2057
	AVC	2	0.7256	0.7297	0.86	0.6439	0.7256	0.2126
	SVM-RFE	5	0.7577	0.7588	0.75	0.6273	0.6775	0.3260
	VMI _{naive}	2	0.7423	1	1	0.6462	0.7848	0
	AMID	8	0.7436	0.95	0.95	0.6328	0.7581	0
	AMID-DWSFS	2	0.8397	0.9875	0.9750	0.6688	0.7895	0.1436
	CFR	3	0.7603	0.95	1	0.6462	0.7848	0
	FSSC-SD	2	0.7269	0.9750	0.9750	0.6401	0.7721	0
Prostate	GDFS+SFFS	6.4	0.9305	0.9029	0.8836	0.8836	0.8829	0.8818
	DFS+SFFS	6.6	0.9105	0.9349	0.8816	0.8818	0.8529	0.8497
	Relief	11	0.93	0.8525	0.8255	0.7824	0.7981	0.79
	DRJMIM	9	0.94	0.8629	0.7891	0.8747	0.8216	0.83
	mRMR	12	0.9414	0.7895	0.7327	0.7816	0.7520	0.7597
	LLE Score	26	0.9119	0.6796	0.7291	0.6582	0.6847	0.6616
	AVC	12	0.9514	0.8144	0.7655	0.7598	0.7592	0.7573
	SVM-RFE	22	0.92	0.8453	0.6927	0.8474	0.7567	0.7824
	VMI _{naive}	9	0.9419	0.8605	0.7655	0.7418	0.7481	0.7580
	AMID	27	0.9314	0.7929	0.7655	0.7936	0.7690	0.7797
	AMID-DWSFS	4	0.9514	0.7251	0.7127	0.7171	0.7011	0.7098
	CFR	7	0.9410	0.7840	0.88	0.7430	0.7922	0.7942
	FSSC-SD	23	0.9024	0.7796	0.8018	0.8205	0.7892	0.8130
Myeloma	GDFS+SFFS	9.6	0.7974	0.6805	0.8971	0.8230	0.8558	0.5463
	DFS+SFFS	9.8	0.7744	0.6296	0.8971	0.8047	0.8474	0.3121
	Relief	23	0.8616	0.6453	0.8693	0.8225	0.8415	0.4631
	DRJMIM	36	0.8559	0.6210	0.8392	0.7881	0.8124	0.2682
	mRMR	12	0.8436	0.6332	0.8095	0.8046	0.8067	0.3539
	LLE Score	64	0.8492	0.6169	0.9127	0.7909	0.8461	0.2313
	AVC	22	0.8329	0.5820	0.8974	0.8098	0.8501	0.3809
	SVM-RFE	20	0.8330	0.6270	0.8971	0.7935	0.8416	0.3846
	VMI _{naive}	19	0.8383	0.5639	0.8847	0.7902	0.8331	0.2691
	AMID	11	0.8325	0.6743	0.8979	0.8282	0.8603	0.5254
	AMID-DWSFS	38	0.8381	0.6233	0.8381	0.8197	0.8249	0.5224
	CFR	14	0.8504	0.5931	0.9124	0.8014	0.8523	0.3010
	FSSC-SD	15	0.8381	0.6662	0.8754	0.8173	0.8438	0.4992
Gas2	GDFS+SFFS	7.4	0.9840	0.9704	0.9051	0.9846	0.9412	0.9474
	DFS+SFFS	8.4	0.9429	0.9465	0.9064	0.9212	0.9203	0.9018
	Relief	4	0.9763	0.9520	0.8577	0.9316	0.8911	0.9005
	DRJMIM	19	0.9750	0.9004	0.8192	0.8848	0.8449	0.8584
	mRMR	5	0.9756	0.9358	0.8551	0.9131	0.8815	0.8895

表 7 各算法在表 6 基因数据集的 5-折交叉验证实验结果 (续表)

Table 7 The 5-fold cross-validation experimental results of all algorithms on datasets from Table 6 (continued table)

Data sets	算法	特征数	Accuracy	AUC	recall	precision	F-measure	F2-measure	
	LLE Score	25	0.9769	0.9312	0.8659	0.8748	0.8449	0.8538	
	AVC	3	0.9840	0.9073	0.8897	0.9390	0.9122	0.9160	
	SVM-RFE	18	0.9756	0.9009	0.8205	0.9052	0.8503	0.8716	
	VMI _{naive}	10	0.9763	0.9425	0.7372	0.9778	0.8311	0.8778	
	AMID	16	0.9833	0.9305	0.9205	0.8829	0.8968	0.9013	
	AMID-DWSFS	2	0.9840	0.9247	0.8359	0.9424	0.8839	0.8977	
	CFR	10	0.9917	0.9080	0.9013	0.8236	0.8432	0.8434	
	FSSC-SD	16	0.9596	0.9095	0.8538	0.8758	0.8555	0.8642	
	SRBCT	GDFS+SFFS	11.6	0.9372	0.9749	0.9567	0.9684	0.9579	0.9573
		DFS+SFFS	11.6	0.9034	0.9130	0.9356	0.9449	0.9452	0.9352
		Relief	10	0.9631	0.9479	0.9439	0.9589	0.9467	0.9390
		DRJMIM	4	0.9389	0.9363	0.9656	0.9511	0.9555	0.9503
		mRMR	8	0.9528	0.9479	0.9283	0.9624	0.9275	0.9294
		LLE Score	11	0.9271	0.8941	0.9333	0.9332	0.9247	0.9154
AVC		8	0.9042	0.9355	0.9139	0.9544	0.9223	0.9183	
SVM-RFE		13	0.8421	0.9149	0.9128	0.9385	0.9159	0.8240	
VMI _{naive}		14	0.9409	0.9181	0.9250	0.9429	0.9269	0.9188	
AMID		13	0.9387	0.8999	0.9567	0.9335	0.9407	0.9239	
AMID-DWSFS		9	0.9167	0.8151	0.8178	0.8516	0.82	0.7466	
CFR		8	0.9314	0.6839	0.8994	0.8570	0.8693	0.7150	
FSSC-SD		6	0.8806	0.9096	0.9267	0.9422	0.9284	0.9160	
Carcinoma		GDFS+SFFS	23.4	0.7622	0.9037	0.7872	0.7879	0.7839	0.5570
	DFS+SFFS	19.4	0.7469	0.8998	0.7808	0.7869	0.7801	0.6261	
	Relief	42	0.7351	0.8701	0.7687	0.7785	0.7680	0.5392	
	DRJMIM	13	0.7757	0.8991	0.6742	0.6621	0.6656	0.4557	
	mRMR	24	0.8079	0.9188	0.7613	0.7505	0.7533	0.5089	
	LLE Score	76	0.6682	0.8452	0.6689	0.6702	0.6663	0.4109	
	AVC	77	0.7227	0.8746	0.7872	0.7790	0.7796	0.5068	
	SVM-RFE	30	0.7213	0.87	0.7027	0.6933	0.6929	0.4065	
	VMI _{naive}	33	0.7443	0.8784	0.7487	0.7527	0.7441	0.4731	
	AMID	42	0.7307	0.8878	0.7295	0.7165	0.7194	0.4841	
	AMID-DWSFS	38	0.7412	0.6231	0.7558	0.7447	0.7457	0.4255	
	CFR	33	0.7054	0.6216	0.7514	0.74	0.7410	0.5315	
	FSSC-SD	21	0.7306	0.8716	0.7039	0.7016	0.6992	0.4344	

mRMR、LLE Score、AVC、SVM-RFE、VMI_{naive}、AMID、AMID-DWSFS、CFR 和 FSSC-SD 所选特征子集的分类能力。

4.4 统计重要性检验

为了检验提出的 GDFS+SFFS 特征选择算法与对比特征选择算法 Relief、DRJMIM、mRMR、LLE Score、AVC、SVM-RFE、VMI_{naive}、AMID、AMID-DWSFS、CFR、FSSC-SD 以及

DFS+SFFS 是否具有统计意义上的显著性区别, 采用 Friedman 检验来检验各算法之间的差异^[49-51]. 在 Friedman 检验检测到算法间的显著性不同之后, 利用 Nemenyi 后续检验来检测算法对的两算法之间是否存在统计意义上的显著性不同. 根据 Nemenyi 检验方法, 在给定统计显著性水平 α 时, 如果任一算法对的两算法之间的平均序数差小于临界阈值 CD , 则以置信度 $1-\alpha$ 接受零假设“两算法性能相同”, 否则拒绝原(零)假设, 认为两算法性能存在

显著性不同. 其中临界阈值 $CD = q_\alpha \sqrt{\frac{M(M+1)}{6N}}$, 这里的 M 和 N 分别表示算法个数和数据集个数, q_α 可通过查表获取. 各算法所选特征子集的 ELM 分类器的 Accuracy、AUC、recall、precision、F-measure 和 F2-measure 在 $\alpha=0.05$ 时的 Friedman 检验结果如表 8 所示.

由表 8 的 Friedman 检验结果可知, 各算法所选特征子集的 ELM 分类器的 Accuracy、AUC、recall、precision、F-measure 和 F2-measure 指标对应的 p 值均小于 0.05. 因此, 我们可以拒绝零假设“各特征选择算法性能相同”, 则各算法所选特征子集在 6 个基因数据集上的分类性能存在显著性差异.

在各算法存在显著性差异的基础上, 采用 Nemenyi 后续检验来进一步验证各算法对的两算法之间的性能是否显著性不同. 当 $\alpha = 0.05$, 算法个数为 13 时, 我们查表可知 $q_\alpha = 3.13$, 由 $CD = q_\alpha \sqrt{\frac{M(M+1)}{6N}}$ 计算可得临界阈值 $CD = 7.4491$, 则可信水平为 0.95 时, 每一对算法采用其选择的特征子集对应 ELM 分类器的 Accuracy、AUC、recall、precision、F-measure 和 F2-measure 指标值的 Nemenyi 检验结果如图 5 所示.

图 5(a) 的 Nemenyi 检验结果显示, GDFS 在 Accuracy 指标上与其他对比算法无显著差异. 众所周知, 基因数据集的不平衡性, 分类准确率已经不适用于评价特征子集分类性能^[30]. 尽管如此, 图 5(a) 的检验结果显示, GDFS 与其他 12 种对比算法之间是存在差异的, 与 DFS 的差异最大, 且优于 DFS 算法. 图 5(b) 的 Nemenyi 检验结果显示, GDFS 在 AUC 指标上与 LLE Score 和 CFR 算法存在显著性差异, 且优于 LLE Score 和 CFR 算法, 与其他 10 种对比算法无显著差异, 但存在差异, 且 GDFS 性能最优. 图 5(c) 的 Nemenyi 检验结果显示, GDFS 在 recall 指标上与 SVM-RFE 存在显著差异, 与其他对比算法无显著差异, 但从实验结果可以看出 GDFS 与其他 11 种特征选择算法间存在差异, 且 GDFS 性能最优, 优于 DFS 算法. 图 5(d) 的 Nemenyi 检验结果可见, GDFS 在 precision 指标上与 LLE Score、SVM-RFE 和 CFR 算法存在显著性差异, 且优于 LLE Score、SVM-RFE 和 CFR

算法, 与其他 9 种对比算法无显著差异, 但存在差异, 且优于 DFS, 是 13 种特征选择算法中性能最优的. 图 5(e) 的 Nemenyi 检验结果显示, GDFS 在 F-measure 指标上与 LLE Score 和 SVM-RFE 算法存在显著性差异, 且优于 LLE Score 和 SVM-RFE 算法, 与其他 10 种对比算法无显著差异, 但存在差异, 且 GDFS 性能最优, 优于 DFS. 图 5(f) 的 Nemenyi 检验结果显示, GDFS 在 F2-measure 指标上与 LLE Score、CFR、VMI_{naive} 和 AMID-DWSFS 算法存在显著性差异, 且优于 LLE Score、VMI_{naive}、AMID-DWSFS 和 CFR 算法, 与其他 8 种对比算法无显著差异, 但存在差异, 且 GDFS 性能最优, 优于 DFS.

图 5 各算法的 Nemenyi 检验结果还显示, 对比算法 DFS、Relief、DRJMIM、mRMR、LLE Score、AUC、SVM-RFE、VMI_{naive}、AMID、AMID-DWSFS、CFR 和 FSSC-SD, 各对算法间不存在统计意义上的显著性差异. 另外, 提出的 GDFS 优于 DFS, 尽管其间没有统计意义上的显著性差异, 但图 5 的 Nemenyi 检验结果揭示, 除了 recall 指标, GDFS 与 DFS 间的等级比较差异值大于 2.5, 且 recall 指标时, GDFS 与 DFS 的等级比较差异值也大于 1.5, 这说明尽管 GDFS 与 DFS 没有统计意义上的显著性差异, 但其间存在差异. 这一点与表 7 的实验结果一致.

以上统计重要性分析显示: 提出的 GDFS 特征子集区分度评价准则优于原始 DFS, GDFS+SFFS 算法优于 12 个对比特征选择算法, 能选择到分类性能更好的特征子集. 12 个对比算法两两之间不存在显著性差异. 提出的 GDFS 准则与原始 DFS 特征子集评价准则选择的特征子集的分类能力有差异, 且 GDFS 优于 DFS, 但不存在统计意义上的显著性差异.

综合以上 UCI 机器学习数据集和经典基因数据集的 5-折交叉验证实验结果得出: 提出的 GDFS 特征子集区分度评价准则是一种有效的特征子集识别能力评价准则, UCI 机器学习数据集和经典基因数据集的实验测试比较验证了基于该准则的特征选择算法能选择到分类性能更好的特征子集, 达到了保持数据集识别能力不变情况下进行数据维数

表 8 各算法所选特征子集分类能力的 Friedman 检测结果

Table 8 The Friedman's test of the classification capability of feature subsets of all algorithms

	Accuracy	AUC	recall	precision	F-measure	F2-measure
χ^2	23.4094	27.5527	22.1585	29.2936	26.7608	32.5446
df	12	12	12	12	12	12
p	0.0244	0.0064	0.0358	0.0036	0.0084	0.0011

压缩的目的.

5 结论

提出了一种特征子集区分能力评价新准则 GDFS, 克服了 DFS 准则没有考虑特征测量量纲对特征子集区分能力大小影响的缺陷; GDFS 结合 SFS、SBS、SFFS 和 SBFS 搜索策略, 以 ELM 为分类器引导特征选择过程, 提出 GDFS+SFS、GDFS+SBS、GDFS+SFFS 和 GDFS+SBFS 共 4 种混合特征选择算法.

UCI 机器学习数据集和经典基因数据集的 5-折交叉验证实验, 以及与 DFS 和经典特征选择算法 Relief、DRJMIM、mRMR、LLE Score、AVC、SVM-RFE、VMI_{naive}、AMID、AMID-DWSFS、CFR 和 FSSC-SD 的性能比较和统计重要性检验表明, 提出的 GDFS 特征子集区分度评价准则是一种有效的特征子集辨识能力衡量准则, 其选择的特征子集优于 DFS、Relief、DRJMIM、mRMR、LLE Score、AVC、SVM-RFE、VMI_{naive}、AMID、AMID-DWSFS、CFR 和 FSSC-SD 选择的特征子集, 具有更优的分类性能. GDFS 准则在提升和保持数据集辨识能力情况下降低了数据的维度.

References

- Chen Xiao-Yun, Liao Meng-Zhen. Dimensionality reduction with extreme learning machine based on sparsity and neighborhood preserving. *Acta Automatica Sinica*, 2019, **45**(2): 325–333 (陈晓云, 廖梦真. 基于稀疏和近邻保持的极限学习机降维. *自动化学报*, 2019, **45**(2): 325–333)
- Xie J Y, Lei J H, Xie W X, Shi Y, Liu X H. Two-stage hybrid feature selection algorithms for diagnosing erythematous diseases. *Health Information Science and Systems*, 2013, **1**: Article No. 10
- Xie Juan-Ying, Zhou Ying. A new criterion for clustering algorithm. *Journal of Shaanxi Normal University (Natural Science Edition)*, 2015, **43**(6): 1–8 (谢娟英, 周颖. 一种新聚类评价指标. *陕西师范大学学报(自然科学版)*, 2015, **43**(6): 1–8)
- Kou G, Yang P, Peng Y, Xiao F, Chen Y, Alsaadi F E. Evaluation of feature selection methods for text classification with small datasets using multiple criteria decision-making methods. *Applied Soft Computing*, 2020, **86**: Article No. 105836
- Xue Y, Xue B, Zhang M J. Self-adaptive particle swarm optimization for large-scale feature selection in classification. *ACM Transactions on Knowledge Discovery from Data*, 2019, **13**(5): Article No. 50
- Zhang Y, Gong D W, Gao X Z, Tian T, Sun X Y. Binary differential evolution with self-learning for multi-objective feature selection. *Information Sciences*, 2020, **507**: 67–85
- Nguyen B H, Xue B, Zhang M J. A survey on swarm intelligence approaches to feature selection in data mining. *Swarm and Evolutionary Computation*, 2020, **54**: Article No. 100663
- Solorio-Fernández S, Carrasco-Ochoa J A, Martínez-Trinidad J F. A review of unsupervised feature selection methods. *Artificial Intelligence Review*, 2020, **53**(2): 907–948
- Karasu S, Altan A, Bekiros S, Ahmad W. A new forecasting model with wrapper-based feature selection approach using multi-objective optimization technique for chaotic crude oil time series. *Energy*, 2020, **212**: Article No. 118750
- Al-Tashi Q, Abdulkadir S J, Rais H, Mirjalili S, Alhussian H. Approaches to multi-objective feature selection: A systematic literature review. *IEEE Access*, 2020, **8**: 125076–125096
- Deng X L, Li Y Q, Weng J, Zhang J L. Feature selection for text classification: A review. *Multimedia Tools and Applications*, 2019, **78**(3): 3797–3816
- Jia He-Ming, Li Yao, Sun Kang-Jian. Simultaneous feature selection optimization based on hybrid sooty tern optimization algorithm and genetic algorithm. *Acta Automatica Sinica*, DOI: 10.16383/j.aas.c200322 (贾鹤鸣, 李瑶, 孙康健. 基于遗传乌燕鸥算法的同步优化特征选择. *自动化学报*, DOI: 10.16383/j.aas.c200322)
- Xie J Y, Wang C X. Using support vector machines with a novel hybrid feature selection method for diagnosis of erythematous diseases. *Expert Systems With Applications*, 2011, **38**(5): 5809–5815
- Bolón-Canedo V, Alonso-Betanzos A. Ensembles for feature selection: A review and future trends. *Information Fusion*, 2019, **52**: 1–12
- Kira K, Rendell L A. The feature selection problem: Traditional methods and a new algorithm. In: *Proceedings of the 10th National Conference on Artificial Intelligence*. San Jos, USA: AAAI Press, 1992. 129–134
- Kononenko I. Estimating attributes: Analysis and extensions of RELIEF. In: *Proceedings of the 7th European Conference on Machine Learning*. Catania, Italy: Springer, 1994. 171–182
- Liu H, Setiono R. Feature selection and classification — a probabilistic wrapper approach. In: *Proceedings of the 9th International Conference on Industrial and Engineering Applications of Artificial Intelligence and Expert Systems*. Fukuoka, Japan: Gordon and Breach Science Publishers, 1997. 419–424
- Guyon I, Weston J, Barnhill S. Gene selection for cancer classification using support vector machines. *Machine Learning*, 2002, **46**(1–3): 389–422
- Peng H C, Long F H, Ding C. Feature selection based on mutual information criteria of max-dependency, max-relevance, and min-redundancy. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 2005, **27**(8): 1226–1238
- Chen Y W, Lin C J. Combining SVMs with various feature selection strategies. *Feature Extraction: Foundations and Applications*. Berlin, Heidelberg: Springer, 2006. 315–324
- Xie Juan-Ying, Wang Chun-Xia, Jiang Shuai, Zhang Yan. Feature selection method combing improved F-score and support vector machine. *Journal of Computer Applications*, 2010, **30**(4): 993–996 (谢娟英, 王春霞, 蒋帅, 张琰. 基于改进的F-score与支持向量机的特征选择方法. *计算机应用*, 2010, **30**(4): 993–996)
- Xie Juan-Ying, Lei Jin-Hu, Xie Wei-Xin, Gao Xin-Bo. Hybrid feature selection methods based on D-score and support vector machine. *Journal of Computer Applications*, 2011, **31**(12): 3292–3296 (谢娟英, 雷金虎, 谢维信, 高新波. 基于D-score与支持向量机的混合特征选择方法. *计算机应用*, 2011, **31**(12): 3292–3296)

- 23 Xie Juan-Ying, Xie Wei-Xin. Several feature selection algorithms based on the discernibility of a feature subset and support vector machines. *Chinese Journal of Computers*, 2014, **37**(8): 1704–1718
(谢娟英, 谢维信. 基于特征子集区分度与支持向量机的特征选择算法. 计算机学报, 2014, **37**(8): 1704–1718)
- 24 Li Jian-Geng, Pang Ze-Nan, Su Lei, Chen Si-Yuan. Feature selection method LLE score used for tumor gene expressive data. *Journal of Beijing University of Technology*, 2015, **41**(8): 1145–1150
(李建更, 逢泽楠, 苏磊, 陈思远. 肿瘤基因选择方法LLE Score. 北京工业大学学报, 2015, **41**(8): 1145–1150)
- 25 Roweis S T, Saul L K. Nonlinear dimensionality reduction by locally linear embedding. *Science*, 2000, **290**(5500): 2323–2326
- 26 Sun L, Wang J, Wei J M. AVC: Selecting discriminative features on basis of AUC by maximizing variable complementarity. *BMC Bioinformatics*, 2017, **18**(Suppl 3): Article No. 50
- 27 Xie Juan-Ying, Wang Ming-Zhao, Hu Qiu-Feng. The differentially expressed gene selection algorithms for unbalanced gene datasets by maximize the area under ROC. *Journal of Shaanxi Normal University (Natural Science Edition)*, 2017, **45**(1): 13–22
(谢娟英, 王明钊, 胡秋锋. 最大化ROC曲线下面积的不平衡基因数据集差异表达基因选择算法. 陕西师范大学学报(自然科学版), 2017, **45**(1): 13–22)
- 28 Hu L, Gao W F, Zhao K, Zhang P, Wang F. Feature selection considering two types of feature relevancy and feature interdependency. *Expert Systems With Applications*, 2018, **93**: 423–434
- 29 Sun L, Zhang X Y, Qian Y H, Xu J C, Zhang S G. Feature selection using neighborhood entropy-based uncertainty measures for gene expression data classification. *Information Sciences*, 2019, **502**: 18–41
- 30 Xie Juan-Ying, Wang Ming-Zhao, Zhou Ying, Gao Hong-Chao, Xu Sheng-Quan. Differential expression gene selection algorithms for unbalanced gene datasets. *Chinese Journal of Computers*, 2019, **42**(6): 1232–1251
(谢娟英, 王明钊, 周颖, 高红超, 许升全. 非平衡基因数据的差异表达基因选择算法研究. 计算机学报, 2019, **42**(6): 1232–1251)
- 31 Li J D, Cheng K W, Wang S H, Morstatter F, Trevino R P, Tang J L, et al. Feature selection: A data perspective. *ACM Computing Surveys*, 2018, **50**(6): Article No. 94
- 32 Liu Chun-Ying, Jia Jun-Ping. *The Principles of Statistics*. Beijing: China Commerce and Trade Press, 2008.
(刘春英, 贾俊平. 统计学原理. 北京: 中国商务出版社, 2008.)
- 33 Huang G B, Zhu Q Y, Siew C K. Extreme learning machine: Theory and applications. *Neurocomputing*, 2006, **70**(1-3): 489–501
- 34 Frank A, Asuncion A. UCI machine learning repository [Online], available: <http://archive.ics.uci.edu/ml>, October 13, 2020
- 35 Chang C C, Lin C J. LIBSVM: A library for support vector machines. *ACM Transactions on Intelligent Systems and Technology*, 2011, **2**(3): Article No. 27
- 36 Hsu C W, Chang C C, Lin C J. A practical guide to support vector classification [Online], available: <https://www.ee.columbia.edu/~sfchang/course/spr/papers/svm-practical-guide.pdf>, March 11, 2021
- 37 Alon U, Barkai N, Notterman D A, Gish K, Ybarra S, Mack D, et al. Broad patterns of gene expression revealed by clustering analysis of tumor and normal colon tissues probed by oligonucleotide arrays. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 1999, **96**(12): 6745–6750
- 38 Singh D, Febbo P G, Ross K, Jackson D G, Manola J, Ladd C, et al. Gene expression correlates of clinical prostate cancer behavior. *Cancer Cell*, 2002, **1**(2): 203–209
- 39 Tian E M, Zhan F H, Walker R, Rasmussen E, Ma Y P, Barlogie B, et al. The role of the Wnt-signaling antagonist DKK1 in the development of osteolytic lesions in multiple myeloma. *The New England Journal of Medicine*, 2003, **349**(26): 2483–2494
- 40 Wang G S, Hu N, Yang H H, Wang L M, Su H, Wang C Y, et al. Comparison of global gene expression of gastric cardia and noncardia cancers from a high-risk population in China. *PLoS One*, 2013, **8**(5): Article No. e63826
- 41 Li W Q, Hu N, Burton V H, Yang H H, Su H, Conway C M, et al. PLCE1 mRNA and protein expression and survival of patients with esophageal squamous cell carcinoma and gastric adenocarcinoma. *Cancer Epidemiology, Biomarkers & Prevention*, 2014, **23**(8): 1579–1588
- 42 Khan J, Wei J S, Ringnér M, Saal L H, Ladanyi M, Westermann F, et al. Classification and diagnostic prediction of cancers using gene expression profiling and artificial neural networks. *Nature Medicine*, 2001, **7**(6): 673–679
- 43 Gao S Y, Steeg G V, Galstyan A. Variational information maximization for feature selection. In: Proceedings of the 30th International Conference on Neural Information Processing Systems. Barcelona, Spain: Curran Associates, 2016. 487–495
- 44 Gao W F, Hu L, Zhang P, He J L. Feature selection considering the composition of feature relevancy. *Pattern Recognition Letters*, 2018, **112**: 70–74
- 45 Xie Juan-Ying, Ding Li-Juan, Wang Ming-Zhao. Spectral clustering based unsupervised feature selection algorithms. *Journal of Software*, 2020, **31**(4): 1009–1024
(谢娟英, 丁丽娟, 王明钊. 基于谱聚类的无监督特征选择算法. 软件学报, 2020, **31**(4): 1009–1024)
- 46 Muschelli III J. ROC and AUC with a binary predictor: A potentially misleading metric. *Journal of Classification*, 2020, **37**(3): 696–708
- 47 Fawcett T. An introduction to ROC analysis. *Pattern Recognition Letters*, 2006, **27**(8): 861–874
- 48 Bowers A J, Zhou X L. Receiver operating characteristic (ROC) area under the curve (AUC): A diagnostic measure for evaluating the accuracy of predictors of education outcomes. *Journal of Education for Students Placed at Risk (JESPAR)*, 2019, **24**(1): 20–46
- 49 Lu Shao-Wen, Wen Yi-Xin. Semi-supervised classification of semi-molten working condition of fused magnesium furnace based on image and current features. *Acta Automatica Sinica*, 2021, **47**(4): 891–902
(卢绍文, 温乙鑫. 基于图像与电流特征的电熔镁炉欠烧工况半监督分类方法. 自动化学报, 2021, **47**(4): 891–902)
- 50 Xie J Y, Gao H C, Xie W X, Liu X H, Grant P W. Robust clustering by detecting density peaks and assigning points based on fuzzy weighted K -nearest neighbors. *Information Sciences*, 2016, **354**: 19–40
- 51 Xie Juan-Ying, Wu Zhao-Zhong, Zheng Qing-Quan. An adaptive 2D feature selection algorithm based on information gain and pearson correlation coefficient. *Shaanxi Normal University (Natural Science Edition)*, 2020, **48**(6): 69–81
(谢娟英, 吴肇中, 郑清泉. 基于信息增益与皮尔森相关系数的2D自适应特征选择算法. 陕西师范大学学报(自然科学版), 2020, **48**(6): 69–81)



谢娟英 陕西师范大学计算机科学学院教授. 主要研究方向为机器学习, 数据挖掘, 生物医学大数据分析. 本文通信作者.

E-mail: xiejuany@snnu.edu.cn

(XIE Juan-Ying Professor at the School of Computer Science,

Shaanxi Normal University. Her research interest covers machine learning, data mining, and biomedical big data analysis. Corresponding author of this paper.)



吴肇中 陕西师范大学计算机科学学院硕士研究生. 主要研究方向为机器学习, 生物医学数据分析.

E-mail: wzz@snnu.edu.cn

(WU Zhao-Zhong Master student at the School of Computer Science, Shaanxi Normal University. His research interest covers machine learning and biomedical data analysis.)



郑清泉 陕西师范大学计算机科学学院硕士研究生. 主要研究方向为数据挖掘, 生物医学数据分析.

E-mail: zhengqing@snnu@163.com

(ZHENG Qing-Quan Master student at the School of Computer Science, Shaanxi Normal University.

His research interest covers data mining and biomedical data analysis.)



王明钊 陕西师范大学生命科学学院博士研究生. 2017 年获得陕西师范大学计算机科学学院硕士学位. 主要研究方向为生物信息学.

E-mail: wangmz2017@snnu.edu.cn

(WANG Ming-Zhao Ph.D. candidate at the College of Life Sciences,

Shaanxi Normal University. He received his master degree from the School of Computer Science, Shaanxi Normal University in 2017. His main research interest is bioinformatics.)