

谢静,李凤莲,阳佳,等. 基于图卷积网络的强化学习特征选择方法[J]. 湖南科技大学学报(自然科学版), 2025, 40(4): 79-88. doi:10.13582/j.cnki.1672-9102.2025.04.009

XIE J, LI F L, YANG J, et al. Graph Convolutional Network-based Reinforcement Learning for Feature Selection [J]. Journal of Hunan University of Science and Technology (Natural Science Edition), 2025, 40(4): 79-88. doi:10.13582/j.cnki.1672-9102.2025.04.009

基于图卷积网络的强化学习特征选择方法

谢静¹, 李凤莲^{1*}, 阳佳², 贾文辉³

(1. 太原理工大学 电子信息工程学院, 山西 太原 030024;

2. 中国运载火箭技术研究院 研究发展中心, 北京 100076; 3. 山西省人民医院 神经内科, 山西 太原 030024)

摘要: 由于信息技术的发展, 各领域数据往往包含大量冗余特征, 因此分类模型性能下降. 特征选择是一种有效去除冗余特征的数据预处理技术, 然而, 已有的特征选择方法无法在选择有效特征的同时保证模型较高的分类准确率. 为了解决该问题, 提出了一种基于图卷积网络的强化学习特征选择方法. 以深度 Q 网络为基本框架, 将特征选择问题映射为马尔可夫决策过程. 首先, 设计了一种基于图卷积网络的状态表示方法, 将特征子集转换成图结构, 以高效地捕捉特征间关系; 接着提出了一种综合考虑特征重要性、特征间相关性和分类性能的奖励函数引导智能体选择高 Q 值特征, 以使得到的特征子集综合考虑几方面性能. 在 14 个公共数据集和脑卒中筛查数据集上进行实验, 结果表明: 相比于已有的深度 Q 网络特征选择方法, 所提方法在 Congress 数据集和脑卒中筛查数据集的准确率分别为 99% 和 85%, 分别提高了 11.0% 和 3.6%, 验证了该方法的有效性和可行性.

关键词: 特征选择; 深度 Q 网络; 马尔可夫决策过程; 状态表示; 奖励函数

中图分类号: TP391

文献标志码: A

文章编号: 1672-9102(2025)04-0079-10

Graph Convolutional Network-based Reinforcement Learning for Feature Selection

XIE Jing¹, LI Fenglian¹, YANG Jia², JIA Wenhui³

(1. College of Electronic Information Engineering, Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, China;

2. R&D Department, China Academy of Launch Vehicle Technology, Beijing 100076, China;

3. Department of Neurology, Shanxi Provincial People's Hospital, Taiyuan 030024, China)

Abstract: Due to the development of information technology, data in various fields often contain a large number of redundant features, which leads to the degradation of classification model performance. Feature selection is a data preprocessing technique that effectively removes redundant features. However, existing feature selection methods are unable to select effective features while ensuring high classification accuracy of the model. In order to solve this problem, a graph convolutional network-based reinforcement learning for feature selection is proposed. A deep Q -network is used as the basic framework to map the feature selection problem into a Markov decision process. Firstly, a state representation method based on graph convolutional network is designed to convert feature subsets into graph structures to capture inter-feature relationships efficiently. Then, a reward function considering feature importance, feature-to-feature correlation, and classification performance is designed to guide

收稿日期: 2025-02-10

基金项目: 国家自然科学基金项目资助(62171307); 山西省科技合作交流专项项目资助(202304041101035)

* 通信作者, E-mail: lifenglian@tyut.edu.cn

the agent to select high Q -value features, so that the obtained feature subset combines several aspects of performance. Experiments are performed on 14 public datasets and stroke screening datasets, and the results show that compared with the existing deep Q -network feature selection method, the accuracy of the proposed method on Congress dataset and the stroke screening dataset is 99% and 85%, respectively, which shows an improvement of 11% and 3.6%, respectively, and verifies the validity and feasibility of the method.

Keywords: feature selection; deep Q -network; Markov decision process; state representation; reward function

随着大数据的不断发展,产生于各行各业的数据正在呈指数级增长,这些海量数据往往具有高维性和复杂性,给数据处理和分析带来了困难^[1-2].特征选择技术从数据中选出最具代表性的特征,从而提高模型预测能力,降低模型计算复杂度^[3].

传统的特征选择方法按照评价标准不同主要分为 3 类,即过滤式^[4]、封装式^[5]以及嵌入式^[6].其中,过滤式方法通过衡量输入数据特征与标签间的相关性达到特征选择目的,与预测模型无关,简单高效,然而该方法未考虑模型的性能表现,如相关系数法^[4]、卡方检验^[7]等;封装式方法通过模型性能来评估特征重要性,需要反复评估和更新所选特征子集,计算复杂度较高,如递归消除特征选择^[8]、基于遗传算法的特征选择^[9]等;嵌入式方法结合了前 2 种方法优点,且综合考虑了特征与标签、特征间相关性,在构建模型时会导致较高的计算复杂度^[10],例如决策树^[6]、岭回归^[11]等.

近年来,强化学习以其在复杂决策问题的突出表现受到了广泛关注^[12].研究表明:强化学习针对特征选择问题表现良好^[13].与已有特征选择算法相比,强化学习具有自主学习和决策能力^[14-16],能动态适应复杂数据结构,更好地调整特征选择策略.ZHANG 等^[13]提出一种基于 Fisher 分数的 Q -learning 特征选择算法,利用特征子集的 Fisher 分数构建奖励函数,但该方法无法处理高维的状态和动作空间.为此,LYU 等^[17]利用深度 Q 网络(Deep Q -Network, DQN)进行特征选择,以确定预测太阳辐照度的最佳特征组合;LIU 等^[18]提出了一种基于深度强化学习的两阶段特征选择方法用于能耗预测,通过 DQN 特征选择方法从关系复杂的非线性特征中选择有用的特征;WANG 等^[19]利用互信息构建状态向量加快 DQN 智能体的训练过程,采用分类器的预测性能设计奖励函数;FAN 等^[20]将预测任务的结构化知识集成到 DQN 的状态向量和奖励函数中,提出基于循环决策树的交互式强化学习特征选择方法.

上述基于强化学习的特征选择方法,其状态表示通常采用二值化方法,无法表征特征间关系;奖励函数一般基于分类器预测性能定义,未考虑特征间相关性.为此,本文提出一种基于图卷积网络的强化学习特征选择方法(Graph convolutional network-based Reinforcement Learning for Feature Selection, GRLFS).主要创新点包括:(1)构建了一种基于图卷积网络(Graph Convolutional Networks, GCN)的状态向量表示方法,将 DQN 中表示智能体状态的特征子集转换为图结构,以准确捕捉特征间复杂关系;(2)设计了一个融合特征重要性、特征间相关性和分类性能的奖励函数,从而引导智能体选择高 Q 值时,其对应特征子集综合考虑了几方面性能.实验结果表明所提出方法具有较优的特征选择性能.

1 本文方法

强化学习框架的核心构成要素为环境与智能体,通过智能体与环境交互,在不断试错过程中学习最优策略以最大化累积奖励,其框架如图 1 所示.

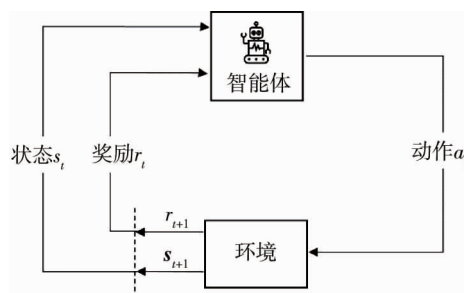


图 1 强化学习框架

智能体是学习和决策的主体,通过与环境交互获取状态信息和奖励信号.当智能体从环境里获取一个状态 s_t 后,根据该状态输出动作 a_t 并在环境中执行,环境根据执行的动作 a_t 输出下一状态 s_{t+1} 并返回对应的即时奖励 r_t ,如此循环,智能体逐步优化策略以最大化长期累积奖励.DQN 通过训练深度神经网络来近似 Q 值函数,避免了强化学习存储庞大的状态-动作对应奖励值表格带来的维度灾难问题.DQN 的网络结构通常采用双网络结构,即评估网络和目标网络.其中,评估网络用于选择动作并评估其 Q 值;目标网络则计算未来状态的最大 Q 值以指导评估网络的更新,其参数与评估网络同步但不是实时更新,有效抑制目标波动导致的训练振荡和局部过拟合.同时,经验回放机制通过存储智能体与环境交互的历史经验,训练时随机采样小批量数据,打破数据间的时序相关性并提高数据利用效率,增强了模型泛化能力.

在将强化学习用于解决某一特定问题时,首先需要设计拟解决问题如何映射为马尔可夫决策过程.因此,基于强化学习的特征选择研究中,将环境设计为特征空间和奖励机制,智能体的动作设计为选择或者取消当前特征.

本文基于 DQN 提出的强化学习特征选择方法 GRLFS 整体框架如图 2 所示.在特征选择阶段,采用所提出的 GRLFS 进行特征筛选,将筛选出的最优特征子集通过机器学习模型进行性能评估.

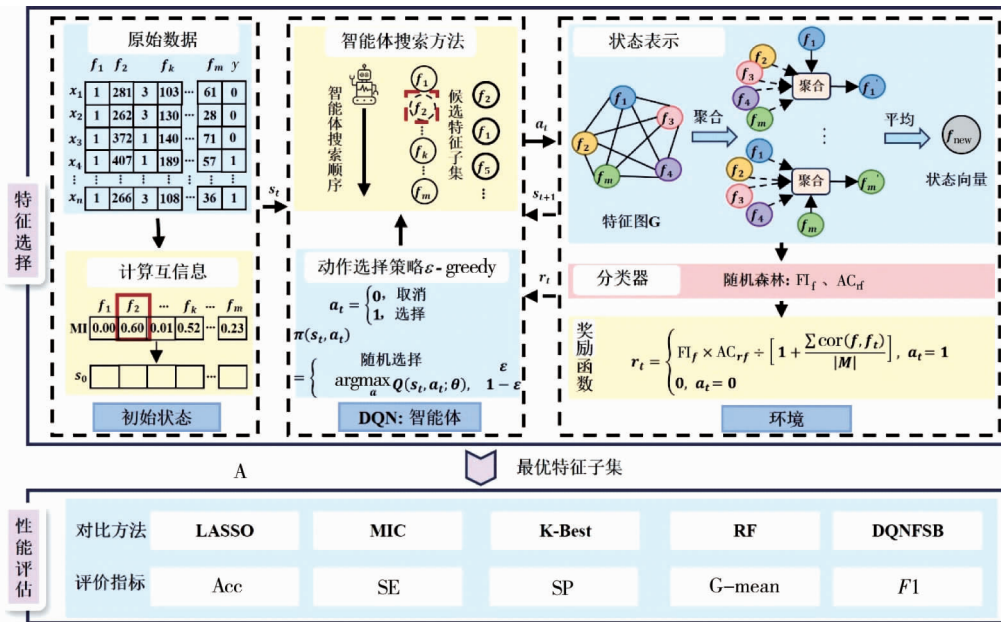


图2 GRLFS 整体框图

1.1 总体设计

假设 GRLFS 输入为一个包含 m 个特征的数据集 $D = \{f_1, f_2, \dots, f_m\}$, 其中 $f_i = \{x_i^1, x_i^2, \dots, x_i^l\}$, l 表示样本数.强化学习用于特征选择问题时,需要将其建模为马尔可夫决策过程,通常用一个四元组 $\langle S, A, R, P \rangle$ 描述.GRLFS 各个基本元素的定义如下所示:

状态(S): 状态集合 $S = \{s_1, s_2, s_3, \dots\}$, 采用候选特征子集作为状态,并基于 GCN 方法更新状态,且每个状态维数是固定的 $[l \times 1]$, 其中, l 表示样本数.

动作(A): 动作集合 $A = \{a_1, a_2, a_3, \dots\}$, 采用选择或取消当前特征作为动作,“1”表示选择当前特征,“0”表示取消当前特征.

奖励(R): 奖励集合 $R = \{r_1, r_2, r_3, \dots\}$, 是智能体在当前状态下执行某个动作环境给予的反馈,当动作为选择当前特征时,智能体被反馈正奖励,否则,智能体被反馈负奖励.

策略函数(P): 表示智能体从状态 s_t 到动作 a_t 的转移概率,用 $\pi(s_t, a_t)$ 表示.智能体采用 ϵ -greedy 策略实现对特征空间的探索.

$$\pi(s_t, a_t) = \begin{cases} \text{随机选择}, \epsilon; \\ \arg\max_a Q(s_t, a_t; \theta), 1 - \epsilon. \end{cases} \quad (1)$$

式中: $\operatorname{argmax}_a Q(s_t, a_t; \theta)$ 为评估网络拟合得到最大 Q 值的动作 a_t . 式(1)表明智能体有 ε 的概率随机选择动作, $1 - \varepsilon$ 的概率选择 Q 值最大的动作.

GRLFS 具体实现过程如下:

1) 获取初始候选特征子集的状态向量. 对数据集 $\mathbf{D}$ 计算 m 个特征和标签的互信息, 将最大互信息对应的特征 $f_{\text{MI}_{\text{Max}}}$ 纳入候选特征子集. 具有最大互信息的特征 $f_{\text{MI}_{\text{Max}}}$ 含有最多的信息量, 即不同类别的样本在特征 $f_{\text{MI}_{\text{Max}}}$ 上具有最大的差异. 此时, 初始状态向量 s_t 即为 $f_{\text{MI}_{\text{Max}}}$, 其维数为 $[l \times 1]$.

2) 基于策略函数更新候选特征子集. 智能体依次与剩下的 $m-1$ 个特征交互, 按照给定的 ε -greedy 策略对当前特征做出决策, 如果选择当前特征 ($a_t = 1$), 则该特征纳入候选特征子集; 如果取消当前特征 ($a_t = 0$), 则候选特征子集保持不变.

3) 转换候选特征子集为状态向量. 候选特征子集通过 GCN 状态表示模块得到下一时刻的状态向量 s_{t+1} . 与此同时, 候选特征子集对应奖励 r_t 反馈给智能体进行下一次交互, 当智能体与所有特征交互结束之后, 本次迭代结束.

4) 如此重复直至达到最大迭代次数或者学习到一个最优策略. 其中, 最优策略对应累积奖励最大化. 为降低计算复杂度并防止过拟合, 当累积奖励连续 n 次保持不变, 则算法迭代终止, 此时智能体得到最优特征子集. 经过多次实验, 本文最终取 $n = 5$.

1.2 基于 GCN 的状态向量表示

GCN 是一种作用于图结构数据的卷积神经网络模型, 能够从节点特征中提取有用信息, 在处理图结构数据的各种分析任务中表现优异. 本文将其用于强化学习的状态表示模块以提取候选特征子集信息. 基于 GCN 的状态向量表示能够捕捉数据中更丰富、更抽象的特征, 以更准确地表示智能体所处环境状态. GCN 的网络层如式(2)所示.

$$\mathbf{H}^{(u+1)} = f(\mathbf{H}^{(u)}, \mathbf{A}_M). \quad (2)$$

式中: $\mathbf{H}^{(u)}$ 为第 u 层的特征节点矩阵, 当 $u = 0$ 时, $\mathbf{H}^{(0)} = \mathbf{M}$, 表示第一层输入为候选特征矩阵 $\mathbf{M}$; $\mathbf{A}_M$ 为特征相关图 G 的邻接矩阵. 进一步引入度矩阵 $\hat{\mathbf{D}}$, 并对邻接矩阵 $\mathbf{A}_M$ 对称归一化, 以使每个节点同时包含自身节点信息与所有邻居节点信息. 更新之后的 GCN 网络层如式(3)所示.

$$f(\mathbf{H}^{(u)}, \mathbf{A}_M) = \sigma(\hat{\mathbf{D}}^{-\frac{1}{2}} \hat{\mathbf{A}}_M \hat{\mathbf{D}}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{H}^{(u)} \mathbf{W}^{(u)}). \quad (3)$$

式中: $\sigma(\cdot)$ 为非线性激活函数, 这里采用 Relu 作为非线性激活函数; $\hat{\mathbf{A}}_M = \mathbf{A}_M + \mathbf{I}_M$, 为归一化的邻接矩阵; $\mathbf{I}_M$ 为单位矩阵; 度矩阵 $\hat{\mathbf{D}}$ 为对角矩阵; $\mathbf{W}^{(u)}$ 为第 u 层的权重参数矩阵.

为了获得最优特征子集, GRLFS 在训练的过程中会产生多个不同的候选特征子集. 图 3 展示了基于 GCN 将候选特征子集转化为状态向量的过程. 首先, 假定在第 i 次迭代的候选特征子集 $\mathbf{M}$ 的维度是 $[l \times m]$, 其中, l 表示样本数, m 表示特征数, 将其拆分为 m 个 $[l \times 1]$ 维的特征列并转换为特征完全图 G ; 接着, 通过 GCN 的网络层传播公式(3)得到 m 个新的 $[l \times 1]$ 维特征列, 实现特征节点聚合, 新的特征节点 $\{f_1', f_2', \dots, f_m'\}$ 不仅包含自身节点信息, 而且还包含所有邻居节点的信息; 最后, 对这些聚合之后新的特征节点取平均得到候选特征子集 $\mathbf{M}$ 的压缩形式, 即为状态向量, 其维数为 $[l \times 1]$.

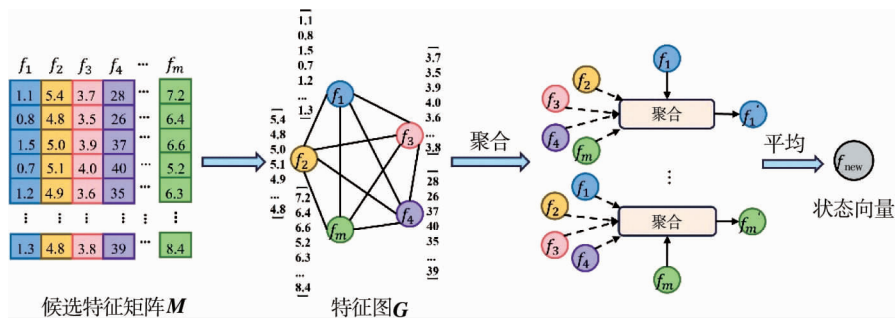


图 3 基于 GCN 的状态向量表示过程

1.3 奖励函数

在强化学习中,良好的奖励机制会对智能体的探索产生正向影响.为此,除考虑分类预测准确率之外,本文创新性地将特征重要性以及特征间的相关性纳入奖励函数中.此处特征重要度采用随机森林(Random Forest, RF)算法得到,设计的奖励函数如式(4)所示.

$$r_t = \begin{cases} \text{FI}_f \times \text{AC}_{f'} \div (1 + \frac{\sum \text{cor}(f, f_i)}{|\mathbf{M}|}), a_t = 1; \\ 0, a_t = 0. \end{cases} \quad (4)$$

式中: a_t 为第 t 时刻智能体对当前特征 f 所采取的动作, $a_t = 1$ 表示选择特征 f , $a_t = 0$ 为取消特征 f ; $|\mathbf{M}|$ 为候选特征子集中包含的特征个数; FI_f 为当特征子集为 $\{\mathbf{M}, f\}$ 时,特征 f 在预测任务中的重要性,其数值越大,奖励越大,表明当前特征 f 在分类预测时更为重要; $\text{AC}_{f'}$ 为特征子集 $\{\mathbf{M}, f\}$ 进行分类预测时的准确率,其数值越大,奖励越大,有利于筛选出准确率更高的特征子集; $\text{cor}(f, f_i)$ 为当前特征 f 与候选特征 $f_i (f_i \in \mathbf{M})$ 的 Spearman 相关系数,其数值越大,奖励越小,可引导智能体选择与当前特征子集冗余度更低的特征.

2 实验结果及分析

2.1 实验数据

为了验证本文方法 GRLFS 的有效性,实验采用了 2 种不同的数据集:一种是 UCI 机器学习库^[21] 的 14 个公共数据集,这些数据集涉及社会科学、生物学、健康与医学、物理与化学等领域,详细信息如表 1 所示;另一种是脑卒中筛查数据集,该数据集共包含 3 674 个样本和 30 个特征,其中 2 550 个样本为健康人群数据,1 124 个样本为脑卒中患者数据.

表 1 UCI 数据集信息

数据集	样本数	特征	类别
Breastcancer (D1)	569	30	2
Clean1 (D2)	476	167	2
Congress (D3)	435	16	2
Credit-a (D4)	653	15	2
Dermatology (D5)	366	34	6
Diabetes (D6)	768	8	2
Ecoli1 (D7)	336	7	2
Glass1 (D8)	214	9	2
Ionosphere (D9)	351	34	2
Lymphography (D10)	148	19	4
Pima (D11)	769	8	2
Sonar (D12)	207	60	2
Spambase (D13)	4 601	57	2
Zoo (D14)	101	16	7

2.2 对比算法和参数设置

为了评估 GRLFS 的性能,选取了 5 种常用的特征选择方法进行对比:

1) LASSO^[22]:通过在目标函数中添加 L1 正则化来实现特征选择.L1 正则化将不重要特征的系数降为 0,保留系数不为 0 的特征.实验设置参数 λ 为 1.0.

2) MIC (Maximal Information Coefficient)^[23]:通过计算每个特征与标签之间的互信息,数值越高表示它们之间的相关性越强,从而选择大于阈值的特征纳入最优特征子集中.实验设置阈值为所有特征互信息的平均值.

3) K-Best^[24]:通过计算每个特征与标签之间的相关性为每个特征赋予一个分数,按照数值大小进行

排序,选择前 k_b 个特征作为特征选择结果.实验设置 k_b 为输入特征数量的一半.

4) RF^[25]:是一种集成特征选择方法.实验设置 Gini 指数评估每个特征重要性.

5) DQNFSB(sequential Backward Feature Selection based on Deep Q-Network)^[26]:是一种基于 DQN 特征选择方法,初始状态为 $s_0 = \{1, 1, \dots, 1\}$,表示智能体依次从原始特征集剔除不利于模型预测性能的特征.实验中设定的 batch_size 为 32,初始学习率为 0.01,折扣因子为 0.9,Memory_size 为 2 000, $\varepsilon_{\text{start}}$ 为 0.9, ε_{end} 为 0.01, $\varepsilon_{\text{decay}}$ 为 500.为了保持实验环境一致,本文方法也采用这些参数设置.

本文所有方法均采用 RF 作为分类器以对比分析上述方法性能差异,且采用十折交叉验证来确保结果的稳定性和有效性.

2.3 评价指标

本文选用准确率(Accuracy, Acc)、敏感性(Sensitivity, SE)、特异性(Specificity, SP)、G-mean、F1 作为评价指标,它们被广泛用于特征选择研究中^[27].假设 TP 代表真正例样本数,FP 代表假正例样本数,FN 代表假负例样本数,TN 代表真负例样本数,且样本总数为 $(TP+FP+FN+TN)$.

$$\text{Acc} = \frac{TP+TN}{TP+FN+FP+TN}; \quad (5)$$

$$\text{SE} = \frac{TP}{TP+FN}; \quad (6)$$

$$\text{SP} = \frac{TN}{TN+FP}; \quad (7)$$

$$\text{G-mean} = \sqrt{\text{SE} \times \text{SP}}; \quad (8)$$

$$\text{F1} = \frac{2 \times TP}{2 \times TP + FP + FN}; \quad (9)$$

2.4 实验结果及分析

2.4.1 本文方法与其他特征选择方法性能对比

表 2 展示了本文方法 GRLFS 和 5 种对比方法的 Acc 以及所选特征数量的比较结果.其中,RF 在训练模型过程中评估了特征的重要性,即特征选择是训练模型的一部分.因此,表 2 中 RF 的特征数量就是原始特征数量.

分析表 2 可得,GRLFS 在大多数数据集上以更少的特征数取得了最佳性能.对于数据集 D13,虽然本文方法(0.95,26)的 Acc 不是最高的,但其特征数量从 57 个大幅减少到 26 个,且性能仅次于 RF(0.96,57),Acc 仅降低了约 1%.对于数据集 D7 和 D11,本文方法的 Acc 未达到最优,原因可能是这 2 个数据集包含特征数量较少,分别为 7 个和 8 个特征,这限制了智能体的探索空间,使其难以发现最优特征子集.

表 2 在 UCI 数据集上不同方法的 Acc 和特征数量对比

数据集	RF	LASSO	MIC	K-Best	DQNFSB	本文方法
D1	0.97 (30)	0.97 (15)	0.96 (16)	0.96 (15)	0.97 (15)	0.98 (12)
D2	0.82 (167)	0.81 (83)	0.76 (54)	0.77 (54)	0.81 (84)	0.84 (69)
D3	0.98 (16)	0.95 (11)	0.98 (6)	0.94 (8)	0.89 (8)	0.99 (5)
D4	0.84 (15)	0.84 (14)	0.84 (8)	0.84 (8)	0.84 (4)	0.84 (8)
D5	0.98 (34)	0.97 (17)	0.88 (17)	0.84 (17)	0.93 (17)	1.00 (19)
D6	0.73 (8)	0.74 (8)	0.71 (4)	0.73 (4)	0.73 (4)	0.75 (4)
D7	0.90 (7)	0.90 (5)	0.85 (3)	0.83 (4)	0.91 (4)	0.90 (5)
D8	0.84 (9)	0.78 (8)	0.79 (5)	0.83 (5)	0.79 (4)	0.86 (6)
D9	0.94 (34)	0.93 (24)	0.94 (16)	0.93 (17)	0.94 (17)	0.94 (10)
D10	0.87 (19)	0.80 (13)	0.74 (10)	0.84 (10)	0.80 (10)	0.90 (7)
D11	0.75 (8)	0.77 (5)	0.75 (4)	0.74 (4)	0.73 (4)	0.74 (3)
D12	0.80 (60)	0.75 (35)	0.79 (23)	0.76 (24)	0.82 (30)	0.86 (22)
D13	0.96 (57)	0.94 (13)	0.94 (27)	0.90 (24)	0.88 (29)	0.95 (26)
D14	0.95 (16)	0.99 (6)	0.95 (12)	0.95 (8)	0.95 (8)	1.00 (5)

为了从多个角度评价本文方法的预测性能,图4对比了GRLFS与5种对比方法在不同数据集上的SE,SP,G-mean, $F1$ 。可以看出:本文方法在大多数数据集上都取得了最佳性能,这是因为GRLFS在特征选择过程中,智能体与特征空间不断交互,以确定累积奖励最大化的策略,最终产生最优特征子集。与已有的特征选择方法相比,本文方法在寻找最优特征子集方面具有明显优势。在D7数据集中,当评价指标为SP时,本文方法排名第三,但评价指标为SE,G-mean和 $F1$ 时,本文方法的预测性能最佳。

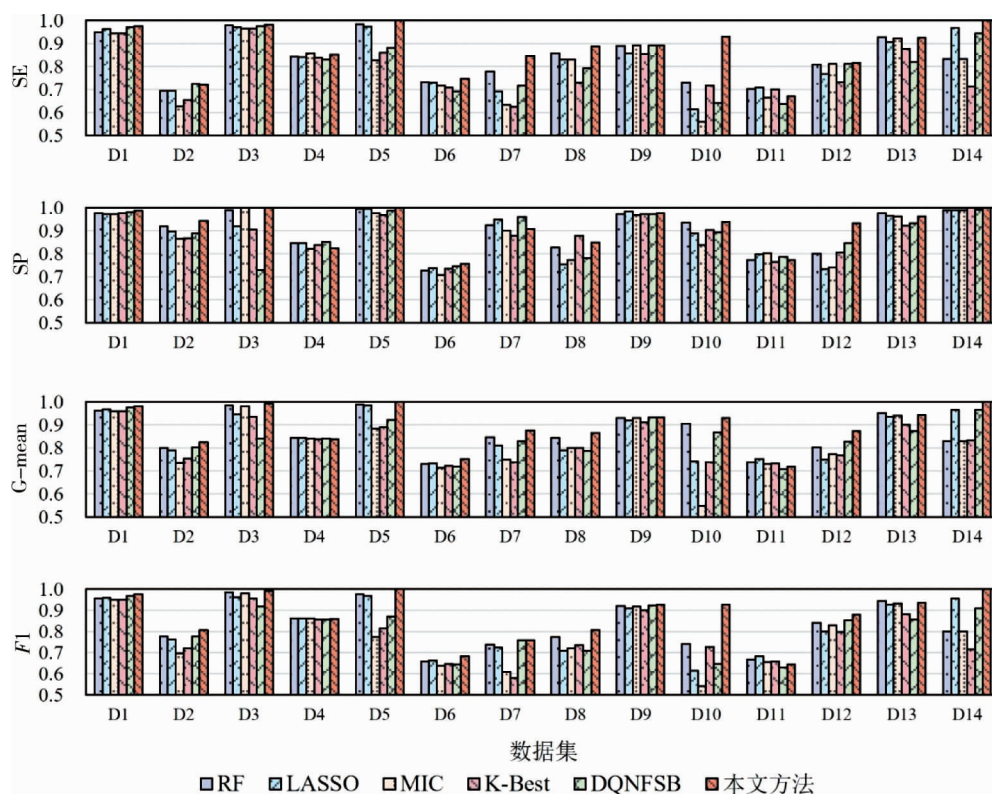


图4 不同特征选择方法在UCI数据集的性能对比

此外,为了评估本文方法GRLFS所选特征子集的稳定性,图5绘制了GRLFS在UCI数据集上的 $F1$ 性能,其中,柱高表示 $F1$ 的均值,误差条则反映了十折交叉验证中 $F1$ 的波动范围。 $F1$ 是一个综合性指标,能够兼顾模型在正例和负例样本上的分类性能,因此选择 $F1$ 指标观察GRLFS所选特征子集的稳定性。从图5可以看出:在UCI的14个数据集上,误差条的长度均较短,表明所选特征子集在分类预测的过程中,其性能受随机性干扰越小,稳定性较强。

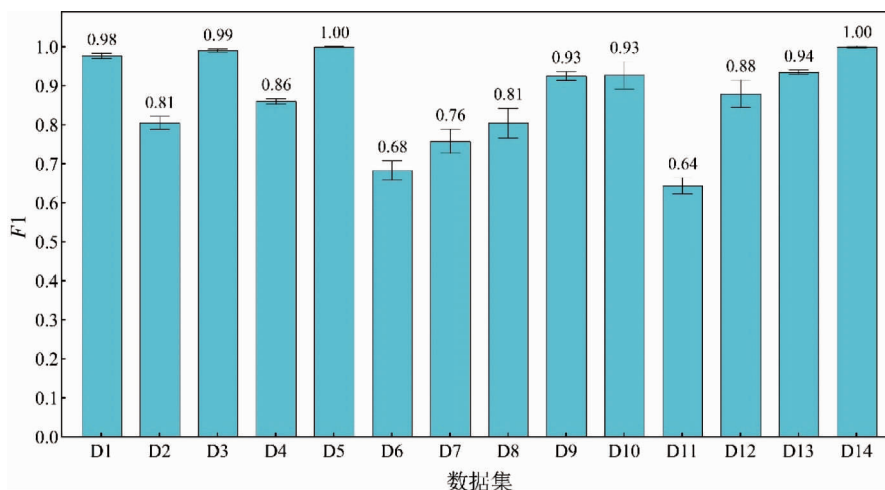


图5 GRLFS在UCI数据集的 $F1$ 性能

2.4.2 非参数检验分析

通过以上实验可以发现:与常用的 5 种特征选择方法相比,本文方法在预测性能上具有明显的优势.为了获得更可靠的结论,进一步采用 Wilcoxon signed rank test 评估不同方法之间是否存在显著性差异.

表 3 展示了 GRLFS 与 5 种对比方法在不同性能评价指标上的非参数检验结果,其中 $h = 1$ 表示拒绝零假设,即算法两两之间存在显著性差异.实验中确定显著性水平 $\alpha = 0.05$,可以看出:LASSO, MIC, K-Best, RF 和 DQNFSB 在 Acc 的 p 值均小于 0.05,并且在其他 4 个性能评价指标(SE, SP, G-mean 和 $F1$)的 p 值也明显小于 0.05,这充分说明本文方法与其他 5 种对比方法存在显著性差异.

表 3 GRLFS vs. 对比方法的 Wilcoxon signed rank test

本文方法 vs.	Acc		SE		SP		G_mean		F1	
	p -value	h	p -value	h	p -value	h	p -value	h	p -value	h
RF	4.92E-09	1	1.00E-06	1	0.008	1	1.07E-07	1	4.94E-09	1
LASSO	1.83E-11	1	8.95E-12	1	6.88E-06	1	1.04E-12	1	3.90E-13	1
MIC	1.53E-17	1	2.24E-14	1	4.60E-11	1	8.41E-19	1	2.85E-18	1
K-Best	4.16E-21	1	1.43E-19	1	1.26E-11	1	1.20E-21	1	1.95E-21	1
DQNFSB	6.48E-20	1	9.11E-18	1	4.54E-14	1	1.67E-22	1	1.40E-20	1

2.4.3 消融实验

GRLFS 主要包含 2 个模块:基于 GCN 的状态向量表示模块和设计的奖励函数模块.为了观察各个模块对特征子集性能的影响,设置消融实验进行分析.具体实验设置如表 4 所示.

表 4 消融实验设置

方法	模块	
	GCN 状态向量表示	奖励函数
DQNFSF		
DQN_RF		✓
GDQN_GCN	✓	
本文方法	✓	✓

图 6 展示了本文方法分别与 DQNFSF, DQN_RF, GDQN_GCN 的性能对比.具体设置如下:

1) DQNFSF:一种基于 DQN 特征选择方法,其状态向量表示模块采用二值化方法,奖励函数模块采用分类器的预测性能.初始状态设置为 $s_0 = \{0, 0, \dots, 0\}$,表示智能体依次从原始特征集逐步加入有利于模型预测性能的特征.

2) DQN_RF:在 DQNFSF 的基础上,状态向量表示模块采用二值化方法,奖励函数模块采用设计的奖励函数.

3) GDQN_GCN:在 DQNFSF 的基础上,状态向量表示模块采用基于 GCN 的状态向量表示方法,奖励函数模块采用分类器的预测性能.

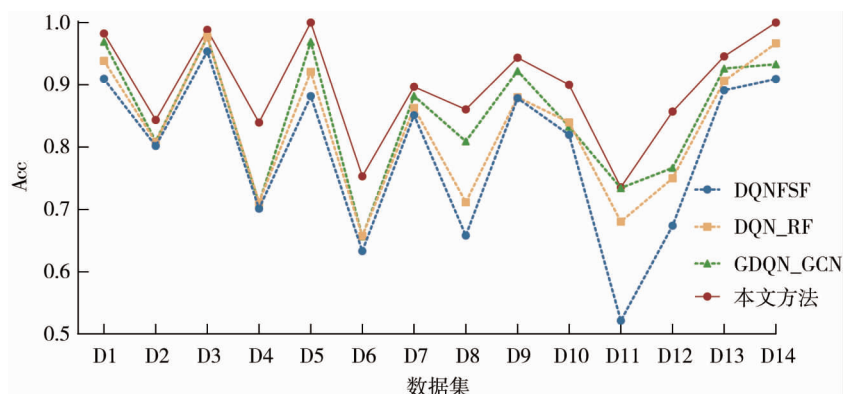


图 6 消融实验的 Acc 对比

从图 6 可以看出:基于 GCN 的状态向量表示模块和设计的奖励函数模块对 DQNFSF 的性能有明显的改善作用.在 DQNFSF 方法的基础上,使用 GCN 状态向量表示模块和设计的奖励函数的组合方法可获得最佳性能.这表明 GCN 状态向量表示模块和设计的奖励函数能够提高智能体探索-利用的质量,从而实现更有效的特征选择.

2.5 在脑卒中数据集上的性能对比

此处进一步将 GRLFS 应用于脑卒中筛查数据集,并与 5 种对比方法 LASSO, MIC, K-Best, RF 和 DQNFSB 进行性能比较.

表 5 展示了性能对比结果.可以看出,GRLFS 在 Acc,SE,SP,G-mean 和 F1 方面都达到了最佳性能.与使用全部 30 个特征相比,GRLFS 选择的 27 个脑卒中风险因素的分类预测 Acc 为 0.85,提高了 3.6%.

表 5 不同方法在脑卒中数据集上的性能

方法	Acc	SE	SP	G-mean	F1	特征
RF	0.82	0.74	0.86	0.80	0.72	30
LASSO	0.83	0.75	0.86	0.80	0.73	22
MIC	0.82	0.75	0.85	0.80	0.72	15
K-Best	0.83	0.72	0.87	0.79	0.72	15
DQNFSB	0.82	0.76	0.85	0.80	0.73	15
本文方法	0.85	0.77	0.88	0.82	0.75	27

3 结论

1)所提出的特征选择方法 GRLFS 基于 DQN 框架构建,将特征选择问题映射为马尔可夫决策过程,其中,对环境的状态表示方法进行改进,通过将特征子集转换为图结构数据,利用 GCN 提取特征间的内在关系,以准确反映智能体所处环境信息.

2)GRLFS 构建了多角度的奖励评估机制,综合考虑特征重要性、特征间相关性以及特征子集分类性能,引导智能体做出更好的决策,确保所选特征子集兼具区分性和低冗余性.消融实验结果证明改进奖励函数的有效性.

3)在公共数据集和脑卒中筛查数据集测试下,GRLFS 方法实现 Acc,SE,SP,G-mean 以及 F1 的显著提升,证明 GRLFS 方法所选特征子集具有更强的分类能力,同时有效降低原始数据的冗余性.

参考文献:

[1] ZHAO M, YE N. High-dimensional ensemble learning classification: an ensemble learning classification algorithm based on high-dimensional feature space reconstruction[J]. Applied Sciences, 2024, 14(5): 1956.

[2] DA S BOHRER J, DORN M. Enhancing classification with hybrid feature selection: a multi-objective genetic algorithm for high-dimensional data[J]. Expert Systems with Applications, 2024, 255: 124518.

[3] CHEN H, CHEN H M, LI W Y, et al. Robust dual-graph regularized and minimum redundancy based on self-representation for semi-supervised feature selection[J]. Neurocomputing, 2022, 490: 104-123.

[4] 肖杨, 李亚, 王海瑞, 等. 基于皮尔逊相关系数的滚动轴承混合域特征选择方法[J]. 化工自动化及仪表, 2022, 49(3): 308-315.

[5] CHAUDHURI A. Search space division method for wrapper feature selection on high-dimensional data classification[J]. Knowledge-Based Systems, 2024, 291: 111578.

[6] 陈许玲, 蒋文浩, 黄晓贤, 等. 基于特征选择与梯度提升决策树的球团矿抗压强度预测[J]. 钢铁研究学报, 2024, 36: 319-327.

[7] WU T, HAO Y H, YANG B, et al. ECM-EFS: an ensemble feature selection based on enhanced co-association matrix[J]. Pattern Recognition, 2023, 139: 109449.

[8] JEON H, OH S. Hybrid-recursive feature elimination for efficient feature selection[J]. Applied Sciences, 2020, 10(9): 3211.

- [9] 张婧,曹峰,董毓莹,等. 基于互信息和遗传算法的特征选择算法[J]. 山西大学学报(自然科学版), 2024, 47(1): 1-8.
- [10] ZHENG W, CHEN S, FU Z Y, et al. Feature selection boosted by unselected features[J]. IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems, 2022, 33(9): 4562-4574.
- [11] VELU A, THANGAVELU M. Diabetes prediction algorithm using recursive ridge regression L2[J]. Computers, Materials & Continua, 2022, 71(1): 457-471.
- [12] ZHANG L P, TANG L, ZHANG S L, et al. A self-adaptive reinforcement-exploration Q-learning algorithm[J]. Symmetry, 2021, 13(6): 1057.
- [13] ZHANG L, JIN L B, GAN M, et al. Reinforced feature selection using Q-learning based on collaborative agents[J]. International Journal of Machine Learning and Cybernetics, 2023, 14(11): 3867-3882.
- [14] 冀中, 张文嘉. 集成深度强化学习在股票指数投资组合优化中的应用分析[J]. 计算机科学与探索, 2025, 19(1): 237-244.
- [15] WANG X, WANG S, LIANG X X, et al. Deep reinforcement learning: a survey[J]. IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems, 2024, 35(4): 5064-5078.
- [16] MATSUO Y, LECUN Y, SAHANI M, et al. Deep learning, reinforcement learning, and world models[J]. Neural Networks, 2022, 152: 267-275.
- [17] LYU C, EFTEKHARNEJAD S, BASUMALLIK S, et al. Dynamic feature selection for solar irradiance forecasting based on deep reinforcement learning[J]. IEEE Transactions on Industry Applications, 2023, 59(1): 533-543.
- [18] LIU L, FU Q M, LU Y, et al. CorrDQN-FS: a two-stage feature selection method for energy consumption prediction *via* deep reinforcement learning[J]. Journal of Building Engineering, 2023, 80: 108044.
- [19] WANG Q L, GUO Y F, YU L X, et al. Deep Q-network-based feature selection for multisourced data cleaning[J]. IEEE Internet of Things Journal, 2021, 8(21): 16153-16164.
- [20] FAN W, LIU K P, LIU H, et al. Interactive reinforcement learning for feature selection with decision tree in the loop[J]. IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering, 2023, 35(2): 1624-1636.
- [21] The UCI Machine Learning Repository[DS]. <http://archive.ics.uci.edu>.
- [22] JO J, JUNG S, PARK J, et al. Hi-LASSO: High-performance Python and apache spark packages for feature selection with high-dimensional data[J]. PLoS One, 2022, 17(12): e0278570.
- [23] WANG J Y, XU P C, JI X B, et al. MIC-SHAP: an ensemble feature selection method for materials machine learning[J]. Materials Today Communications, 2023, 37: 106910.
- [24] AKMAN D V, MALEKIPIRBAZARI M, YENICE Z D, et al. K-best feature selection and ranking *via* stochastic approximation[J]. Expert Systems with Applications, 2023, 213: 118864.
- [25] SAEYS Y, ABEEL T, VAN DE PEER Y. Robust feature selection using ensemble feature selection techniques[M]//Machine Learning and Knowledge Discovery in Databases. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2008: 313-325.
- [26] LI X Q, YAO J, REN J, et al. A new feature selection algorithm based on deep Q-network[C]//2021 40th Chinese Control Conference (CCC). IEEE, 2021: 7100-7105.
- [27] 高新成, 邵国铭, 张海洋, 等. 改进二进制麻雀搜索的特征选择及文本聚类[J]. 重庆理工大学学报(自然科学), 2023, 37(8): 166-176.