# 数据科学导论

# Introduction to Data Science

# 第二章 数据分析基础

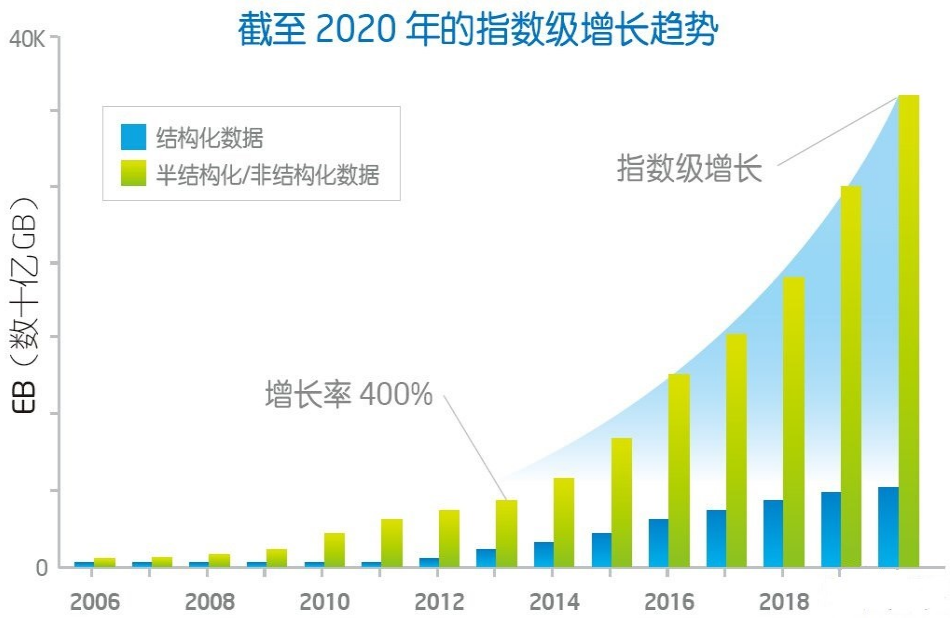
黄振亚，陈恩红
Email: huangzhy@ustc.edu.cn, cheneh@ustc.edu.cn

课程主页：
http://staff.ustc.edu.cn/~huangzhy/Course/DS2024.html

# 回顾：数据分析基础



- 数据采集 Data Collection
- 数据存储 Data Storage
- 数据预处理 Data Preprocessing
- 特征工程 Feature Engineering




# 数据预处理

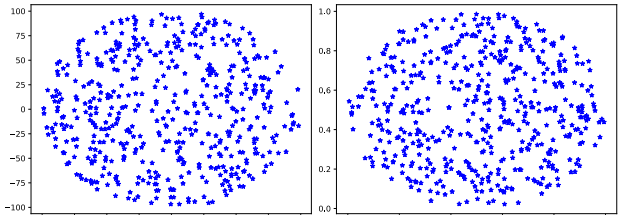


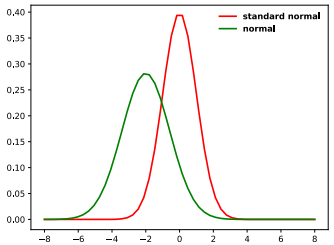
- 大数据环境下的数据特征
- 为什么需要进行预处理
- 预处理的基本方法
  - 数据清理
  - 数据集成
  - 数据变换
  - 数据规约

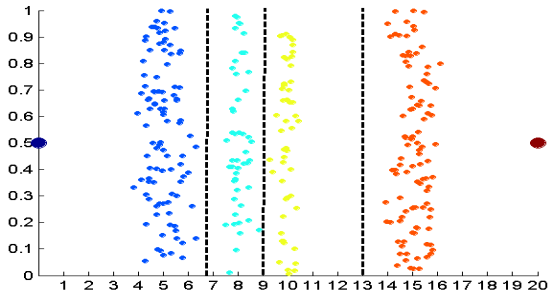
# 数据预处理：数据变换



- 数据变换的目的是将数据转换成适合分析建模的形式
  - 前提条件：尽量不改变原始数据的规律
  - 数据规范化
    - 最小-最大规范化
    - z-score规范化
    - 小数定标规范化
  - 数据离散化
    - 非监督离散化
    - 监督离散化



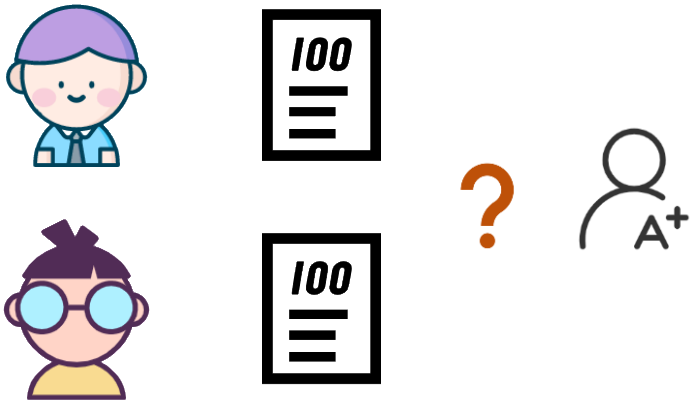


# 数据预处理：数据变换



- **数据规范化**
  - **目的：将不同数据（属性）按一定规则进行缩放，使它们具有可比性**
  - 例如，我们需要考察学生A和学生B的某门课程成绩。A的考试满分是100分（及格60分），B的考试满分是150分（及格90分）。显然，A和B的100分代表着完全不同的含义。




如何用一个同等的标准来比较A与B的成绩数据呢？


# 数据变换-规范化



- **最小-最大规范化**
  - 对原始数据进行线性变换。把数据A的观察值v从原始的区间[$\min_A$, $\max_A$]映射到新区间 [$new\_min_A$, $new\_max_A$]
    - 0-1规范化又称为归一化

$$v' = \frac{v - min_A}{max_A - min_A}(new\_max_A - new\_min_A) + new\_min_A$$

  - 数理依据：

$$\frac{v' - new\_min_A}{new\_max_A - new\_min_A} = \frac{v - min_A}{max_A - min_A}$$

# 数据变换-规范化



- 最小-最大规范化

$$v' = \frac{v - min_A}{max_A - min_A}(new\_max_A - new\_min_A) + new\_min_A$$

  - 例：假设某属性规范化前的取值区间为[－100，100]，规范化后的取值区间为[0，1]，采用最小-最大规范化 66，得

$$v' = \frac{66 - (-100)}{100 - (-100)}(1 - 0) + 0 = 0.83$$

**快速练习：采用最小-最大规范化 -80？**

# 数据变换-规范化

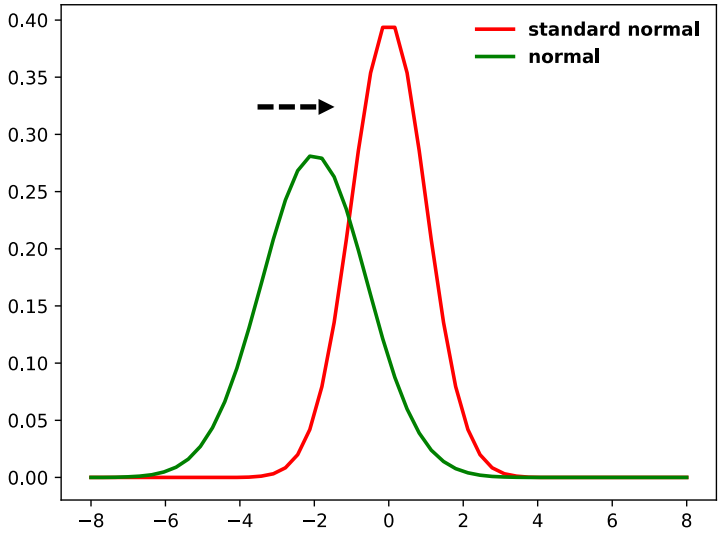


- z-score规范化
  - 最大最小值未知，或者离群点影响较大时，假设数据服从正态分布
    - 某一原始数据(v)与原始均值的差再除以标准差，可以衡量某数据在分布中的相对位置

$$v' = \frac{v - \bar{A}}{\sigma_A}$$

  - 例：假设某属性的平均值、标准差分别为80、25，用z-score规范化 66

$$v' = \frac{66 - 80}{25} = -0.56$$




# 数据变换-规范化



- 小数定标规范化
  - 通过移动小数点的位置来进行规范化。小数点移动多少位取决于属性A的取值中的最大绝对值。

$$v' = \frac{v}{10^j}$$

其中，$j$ 是使 Max(|$v'$|)<1的最小整数

  - 比如属性A的取值范围是-999到88，那么最大绝对值为999，小数点就会移动3位，即新数值=原数值/1000。那么A的取值范围就被规范为-0.999到0.088。


# 数据变换-规范化



- 小结

| | 优点 | 缺点 | 适用场景 |
|---|---|---|---|
| **最小-最大规范化** | 保留了原始数据中存在的关系，是消除量纲和数据取值范围影响的最简单方法 | 对最大最小值敏感，新数据加入时，可能改变最大最小值，需重新计算 | 适用于原始数据不存在很大/很小的一部分数据的时候 |
| **z-score规范化** | 算法简单方便，结果方便比较，应用于数值型的数据，且不受数据量级的影响 | 总体平均值和方差不一定可知，在一定程度上要求数据分布，结果没有具体意义，只用于比较 | 适用于最大最小值未知，或者离群点影响较大的时候 |
| **小数定标规范化** | 算法实现简单 | 不适用于不同含义数据的比较，无实际意义 | 使用含义相同的数据，且最大最小相差较大 |

# 数据预处理：数据变换



- 数据离散化
  - 连续数据过于细致，数据之间的关系难以分析
  - 划分为离散化的区间，发现数据之间的关联，便于算法处理
    - **同学们成绩：**100分制分数使用五分制离散化表示
      - A（大于等于85分），B，C，D，F（小于60分）
    - **人的年龄：**离散化为不同的年龄段（引源自世卫组织）
      - 未成年人：0至17岁；
      - 青年人：18岁至45岁；
      - 中年人：46岁至69岁；
      - 老年人：大于70岁。
    - **一年365天：**离散化表示为12个月份或四个季节

| | | |
|---|---|---|
| A+ | A | A- |
| B+ | B | B- |
| C+ | C | C- |
| D+ | D | D- |
| | F | |



# 数据变换-离散化

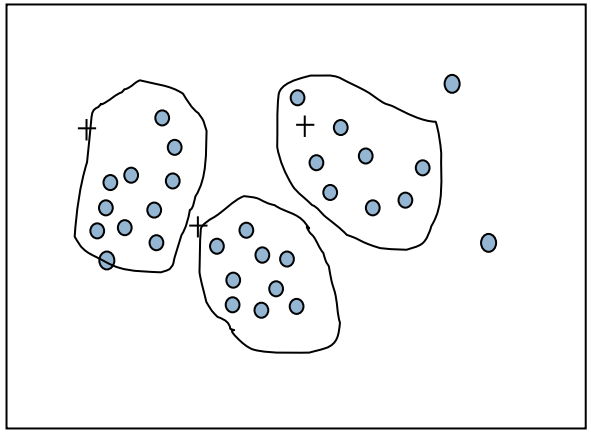


- **数据离散化**
  - 连续数据过于细致，数据之间的关系难以分析，将其分段为离散化的区间，发现数据之间的关联，便于算法处理
  - **非监督离散化（无类别信息）**
  - **有监督离散化（有类别信息）**

# 数据变换-离散化



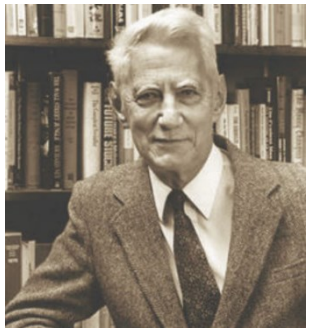
- 非监督离散化 (参考上一节内容：**数据清理-噪声数据**)
  - 分箱
    - 1. 排序数据，并将他们分到等深的箱中
    - 2. 按箱平均值平滑、按箱中值平滑、按箱边界平滑等
  - **聚类：**监测并且去除噪声数据
    - 将类似的数据聚成簇
    - 每个簇计算一个值用以将该簇的数据离散化



# 数据变换-离散化



- 有监督离散化—基于熵的离散化
  - 熵用来度量系统的**不确定程度**
    - 熵是由 克劳德·艾尔伍德·香农 将热力学的熵，引入到信息论，因此它又被称为香农熵

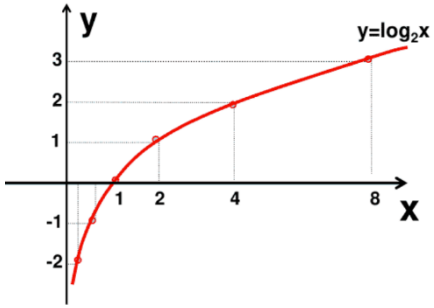


香农提出了信息熵的概念，为**信息论**和**数字通信奠定了基础**，被誉为“**信息论之父**”

# 数据变换-离散化



- 信息熵：度量系统的不确定程度
  - 信息量
    - 定义一个时间x的概率分布为P(x)
    - 则事件x的自信息量是-logP(x)，取值范围：[0, +∞]
  - 信息熵
    - 平均而言，发生一个事件得到的自信息量大小
    - 即：熵可以表示为自信息量的期望




$$H = -\sum P(x)\log P(x)$$

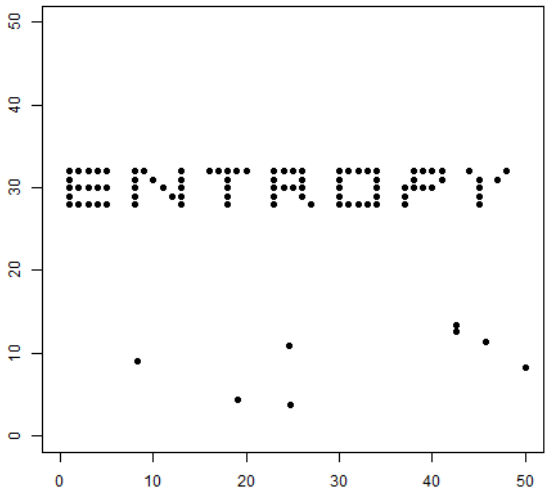
| X | 0 | 1 |
|---|---|---|
| P(x) | 0.4 | 0.6 |

$$\begin{aligned} H(P) &= -P(X=0)\log_2 P(X=0) - P(X=1)\log_2 P(X=1) \\ &= -0.4 * log_2(0.4) - 0.6 * log_2(0.6) \\ &\approx 0.97 \end{aligned}$$

# 数据变换-离散化



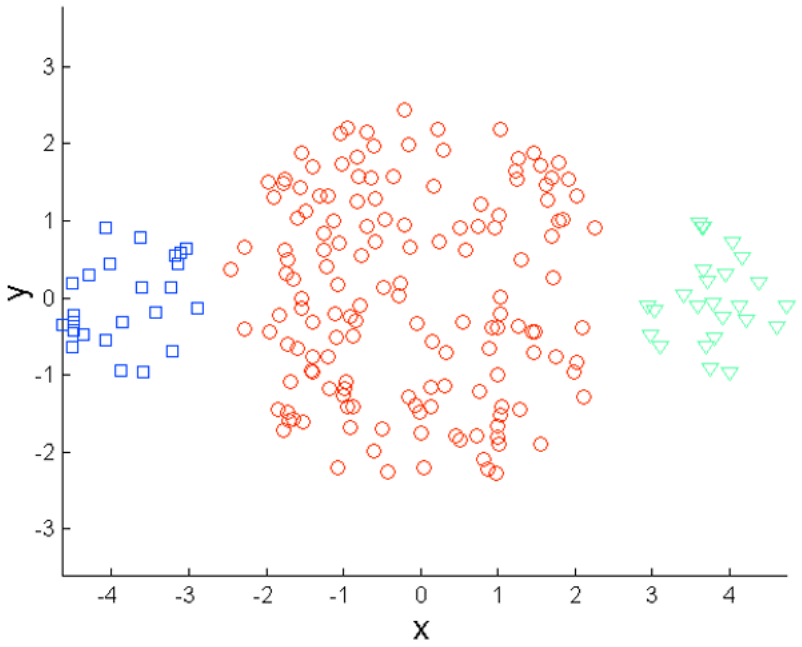
- 熵与数据离散化有什么关系？——**不确定程度**
  - 数据点单词（ENTROPY）**完整**的时候，容易理解表达的意思，**确定程度较高**，对应的**信息熵也较小**。
  - 数据点被完全打乱的时候，难以理解其意思，造成**不确定性**也就多了，对应的**信息熵也变大**了。
  - 目标：对数据进行离散化后，每个区间的数据的确定性（也称“纯度”）更高因此用熵来对数据进行离散化。



# 数据变换-离散化



- 基于熵的离散化
  - 在x轴上对数据划分

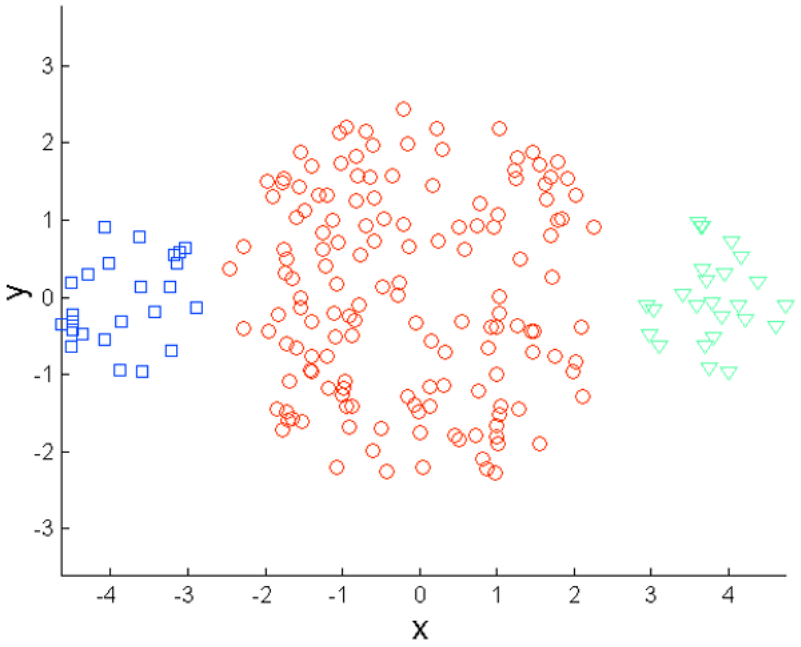



原始数据

# 数据变换-离散化



- 基于熵的离散化
  - 在x轴上对数据划分




原始数据

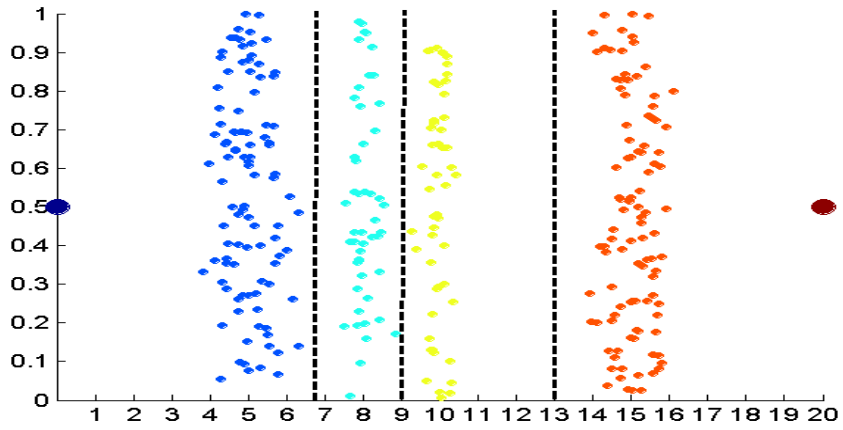
# 数据变换-离散化



- 熵—计算不确定性以及不纯性
  - 假设数据已经离散，计算离散后的某个区间 ***t*** 中的熵:

$$Entropy(t) = -\sum_j p(j \mid t) \log p(j \mid t)$$

  - 其中，$p(j \mid t)$ 表示 第 $j$ 类在区间 $t$ 中的概率；一般对数log以2为底



# 数据变换-离散化



- 计算 单个区间 的 Entropy

$$Entropy(t) = -\sum_j p(j \mid t) \log_2 p(j \mid t)$$

| C1 | 0 |
|---|---|
| C2 | 6 |

$P(C1) = 0/6 = 0 \quad P(C2) = 6/6 = 1$

$Entropy = -0 \log_2 0 - 1 \log_2 1 = -0 - 0 = 0$

| C1 | 1 |
|---|---|
| C2 | 5 |

$P(C1) = 1/6 \quad P(C2) = 5/6$

$Entropy = -(1/6) \log_2 (1/6) - (5/6) \log_2 (5/6) = 0.65$

| C1 | 2 |
|---|---|
| C2 | 4 |

$P(C1) = 2/6 \quad P(C2) = 4/6$

$Entropy = -(2/6) \log_2 (2/6) - (4/6) \log_2 (4/6) = 0.92$

**练习:** (1) 假设区里t里面C1和C2的样本数各为3，Entropy是多少? 1

(2) 假设区间t里面有4个类，且样本数一样，Entropy是多少? 2

(3) 假设区间t里面有C个类，且样本数一样，Entropy是多少? logC

# 数据变换-离散化



- 熵—计算不确定性以及不纯性
  - 假设数据已经离散，计算离散后的某个区间 $t$ 中的熵:

$$Entropy(t) = -\sum_j p(j \mid t) \log p(j \mid t)$$

  - 其中，$p(j \mid t)$ 表示 第 $j$ 类在区间 $t$ 中的概率；一般对数log以2为底

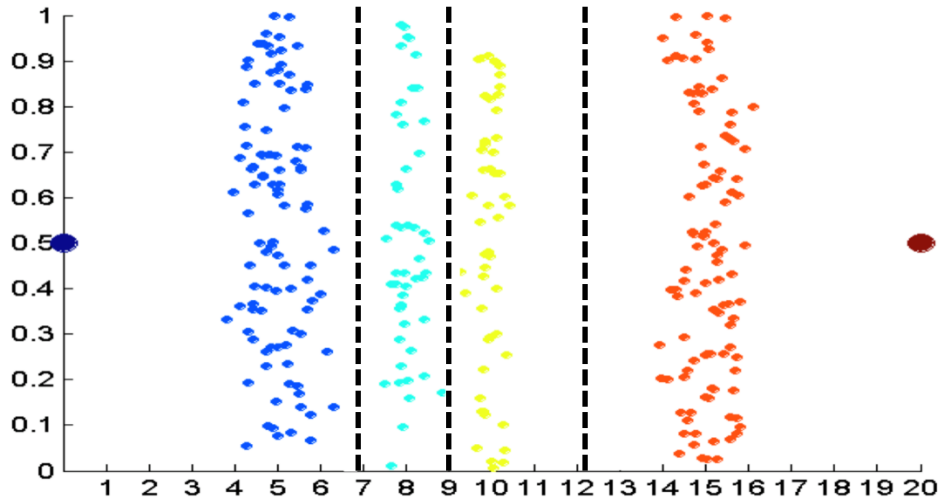
结论

- **区间里面不同类别的样本均匀分布时，熵值最大（最不确定、最不纯），熵值为：logC**
- **区间里面只有一类样本时，熵值最小（最确定、最纯）**
- **熵的取值范围：[0, logC]**

# 数据变换-离散化



- 根据Entropy进行二分离散化
  - 先找到一个分隔点（属性值），把所有数据分到两个区间
  - 分别对两个子区间的数据进行二分隔
  - 重复以上步骤



# 数据变换-离散化



- **如何确定分隔点？**--计算分隔后的信息增益
  - 信息增益（Information Gain）
    - 表示在某个条件下，信息不确定性减少的程度

$Ent(p)$

| 属性 | $x_1$ | $x_2$ | $x_3$ | …… | $x_{n-2}$ | $x_{n-1}$ | $x_n$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 类别 | C0 | C0 | C1 | …… | C1 | C1 | C0 |

| $x_1$ | $x_2$ |
|---|---|
| C0 | C0 |

| $x_3$ | …… | $x_{n-2}$ | $x_{n-1}$ | $x_n$ |
|---|---|---|---|---|
| C1 | …… | C1 | C1 | C0 |

$Ent(m_{11})$ $Ent(m_{12})$

$$Ent(m_1) = \frac{n1}{n} Ent(m11) + \frac{n2}{n} Ent(m12)$$

$$Gain1 = Ent(p) - Ent(m_1) > 0$$

# 数据变换-离散化



- **如何确定分隔点？**--计算分隔后的信息增益
  - 信息增益（Information Gain）
    - 表示在某个条件下，信息不确定性减少的程度

$Ent(p)$

| 属性 | $x_1$ | $x_2$ | $x_3$ | …… | $x_{n-2}$ | $x_{n-1}$ | $x_n$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 类别 | C0 | C0 | C1 | …… | C1 | C1 | C0 |

| $x_1$ | $x_2$ |
|---|---|
| C0 | C0 |

| $x_3$ | …… | $x_{n-2}$ | $x_{n-1}$ | $x_n$ |
|---|---|---|---|---|
| C1 | …… | C1 | C1 | C0 |

| $x_1$ | $x_2$ | $x_3$ | …… | $x_{n-2}$ |
|---|---|---|---|---|
| C0 | C0 | C1 | …… | C1 |

| $x_{n-1}$ | $x_n$ |
|---|---|
| C1 | C0 |

$Ent(m_{11})$ $Ent(m_{12})$ $Ent(m_{21})$ $Ent(m_{22})$

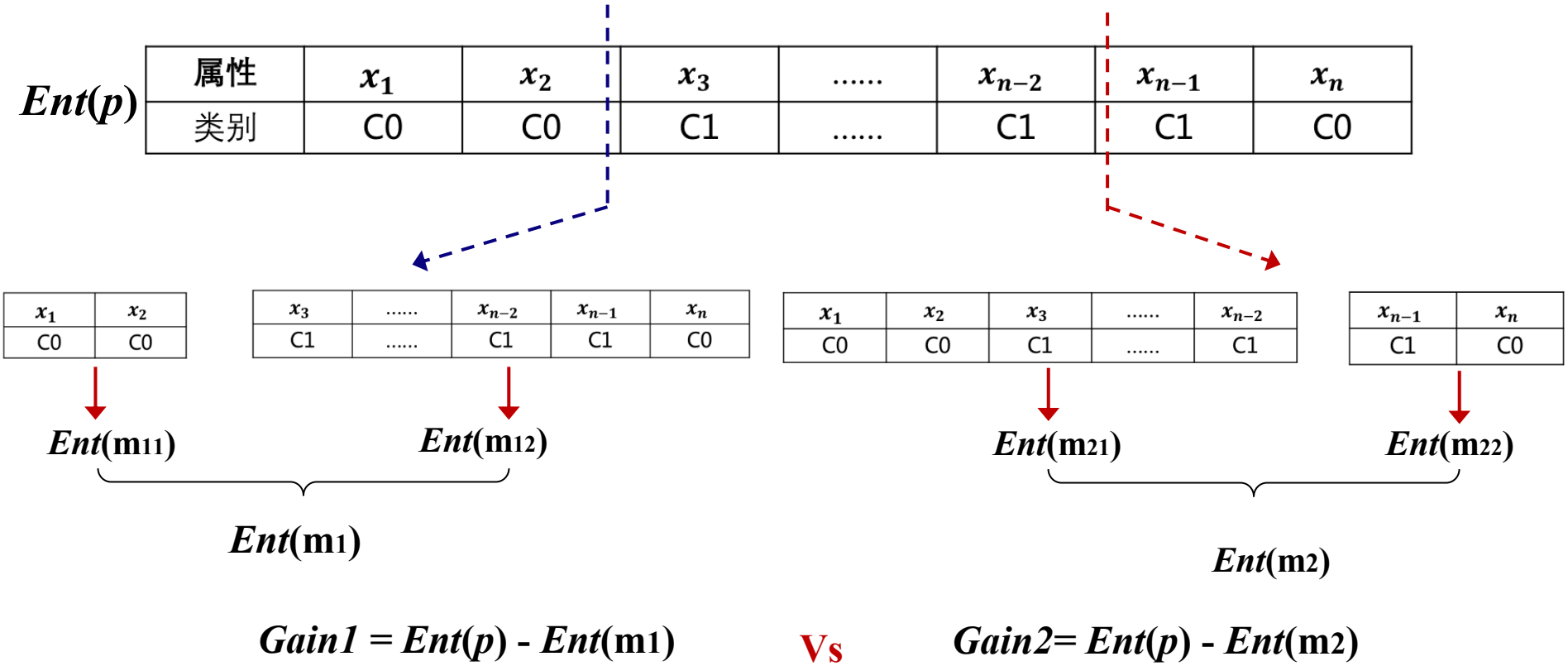
$$Ent(m_1) = \frac{n1}{n} Ent(m11) + \frac{n2}{n} Ent(m12)$$

$Ent(m_2)$

# 数据变换-离散化



- **如何确定分隔点？**--计算分隔后的信息增益
  - 信息增益（Information Gain）
    - 表示在某个条件下，信息不确定性减少的程度



# 数据变换-离散化



- **如何确定分隔点？--计算分隔后的信息增益**
  - 信息增益（Information Gain）：

$$GAIN_{\text{split}} = Entropy(p) - \left( \sum_{i=1}^{k} \frac{n_i}{n} Entropy(i) \right)$$

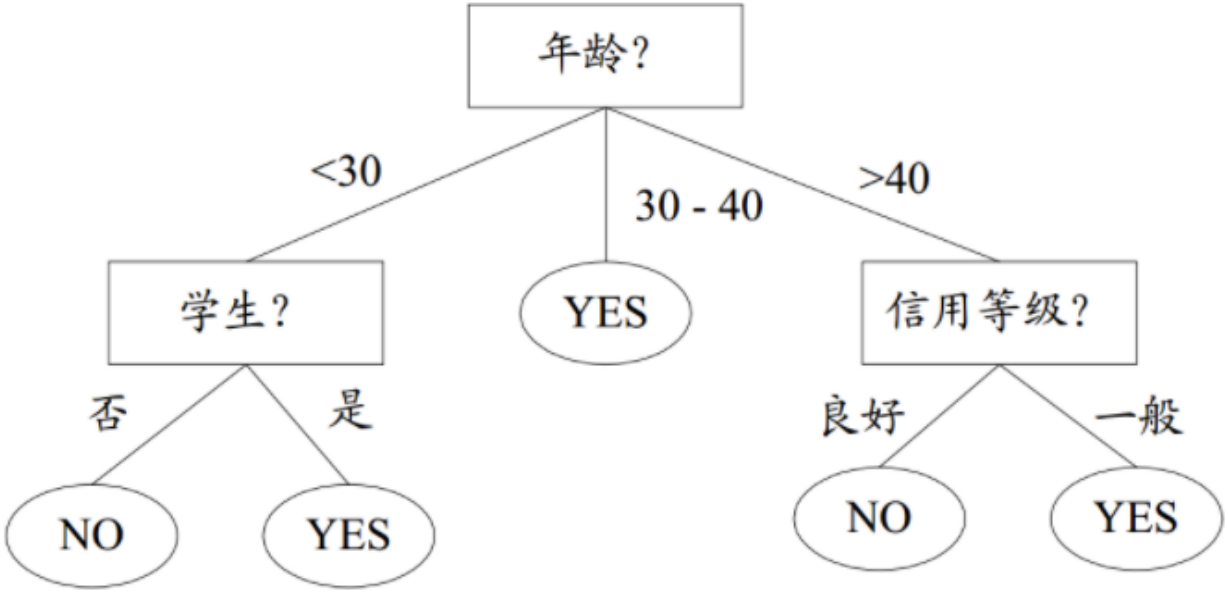
    - 信息增益：表示在某个条件下，信息不确定性减少的程度。
    - 父节点 P 被分隔为 K 个区间
    - n 表示总记录数，n_i表示区间 i 中的记录数
  - 确定分隔点 j ：
    - 选择信息增益最大的分隔点，即

$$j = max(GAIN_{\text{split}})$$

# 数据变换-离散化



- 十大经典机器学习算法
  - 决策树 (第四章：数据挖掘)



# 数据变换-离散化



- 熵（*Entropy*）的应用举例
  - 使用熵进行旅游季节（Travel Season）的划分
    - 假设不同的景点适合不同的季节进行旅游




1月 2月 3月 4月 5月 6月 7月 8月 9月 10月 11月 12月

  - 根据景点的类别分布，计算区间（季节）中的熵:

$$WAE(i;S^P) = \frac{|S_1^P(i)|}{|S^P|} Ent(S_1^P(i)) + \frac{|S_2^P(i)|}{|S^P|} Ent(S_2^P(i))$$

Qi Liu, Yong Ge, Zhongmou Li, Enhong Chen, and Hui Xiong. Personalized Travel Package Recommendation. ICDM'2011. Best Research Paper


# 课后学习



- 前沿文献调研：“熵在数据科学中的应用"
  - 推荐1：**基于技术分布的熵值预测公司发展前景**
    - 技术的发展一般处于5个阶段(萌芽期、过热期、低谷期、复苏期和成熟期)，如果公司的技术发展在以上阶段分布越均衡，可能它的发展前景就越好
      - Bo Jin, Yong Ge, Hengshu Zhu, Li Guo, Hui Xiong and Chao Zhang. Technology Prospecting for High Tech Companies through Patent Mining ICDM'2014
  - 推荐2：**基于交叉熵的机器学习目标函数设计**
    - 信息熵、交叉熵和相对熵： https://charlesliuyx.github.io/2017/09/11/

# 参考资料




- Qi Liu, Yong Ge, Zhongmou Li, Enhong Chen, and Hui Xiong. Personalized Travel Package Recommendation. ICDM'2011
- Bo Jin, Yong Ge, Hengshu Zhu, Li Guo, Hui Xiong and Chao Zhang. Technology Prospecting for High Tech Companies through Patent Mining ICDM'2014
- 数据规范化的几种方法： https://www.jianshu.com/p/55aee18b3fbc
- Z-score（Z值）的意义： http://blog.sina.com.cn/s/blog_72208a6a0101cdt1.html
- 信息熵是什么： https://www.zhihu.com/question/22178202
- 交叉熵损失函数的优点： https://blog.csdn.net/qq_41853758/article/details/82826820
- 信息熵、交叉熵和相对熵： https://charlesliuyx.github.io/2017/09/11/
- 常见的三种数据规范化方法及其python实现： https://joshuaqyh.github.io/2019/02/24/
- 一种基于信息熵的离散化方法（MDLP）python实现：https://zhuanlan.zhihu.com/p/74839156