数据科学导论

Introduction to Data Science

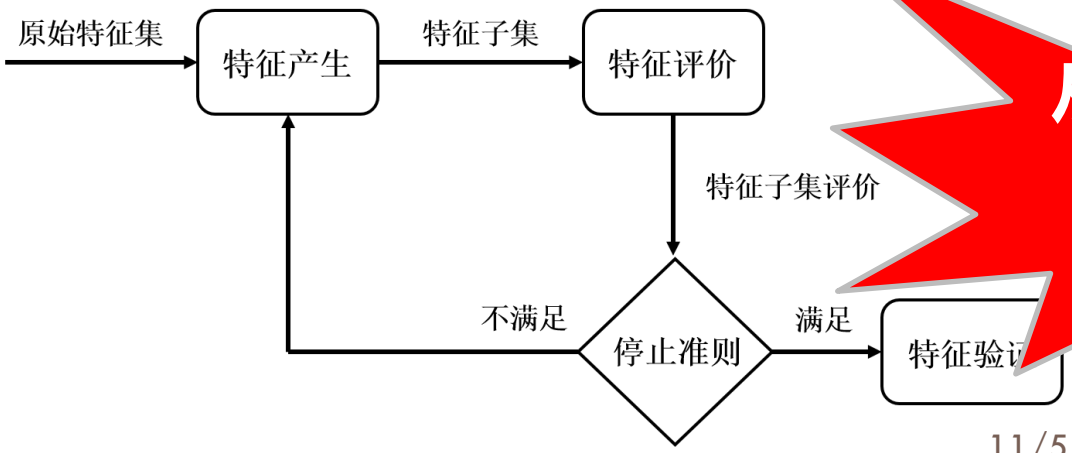
第二章 数据分析基础

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/DS2025.html

特征的选择

- 如何挑选有效的特征（**Subset Selection问题**）？
  - 在实际应用中，特征的数量往往比较多，可能会存在不相关的特征
  - 特征数量越多，分析特征、训练模型所需要的时间就越长，同时容易引起**“维度灾难”**，使得模型更加复杂
  - **特征选择**通过剔除不相关的特征或冗余的特征来**减少特征数量**，从而简化了模型并且提升了模型的泛化能力



特征选择的过程

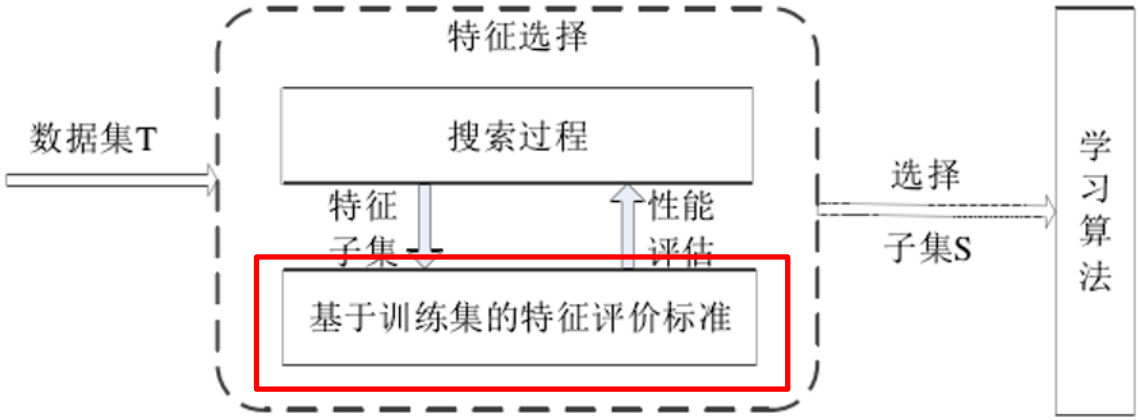
从特征中挑选有效的特征子集

特征子集评价

- 如何评价特征子集？

不同的特征选择算法不仅对特征子集评价标准不同，有的还需要结合后续的学习算法模型。因此根据特征选择中子集评价标准和后续算法的结合方式主要分为**过滤式(Filter)、封装式(Wrapper)** 和**嵌入式(Embedded)**三种

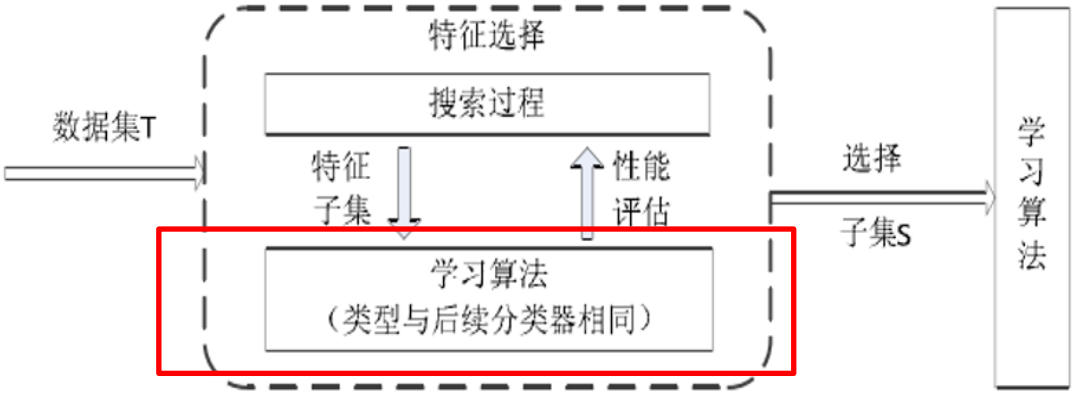
- **1. 过滤式(Filter)评价策略方法**
  - 独立于后续的学习算法模型来分析数据集的固有的属性
  - 采用一些基于信息统计的启发式准则来评价特征子集
  - 启发式的评价函数：距离度量、信息度量、依赖性度量、一致性度量



特征子集评价

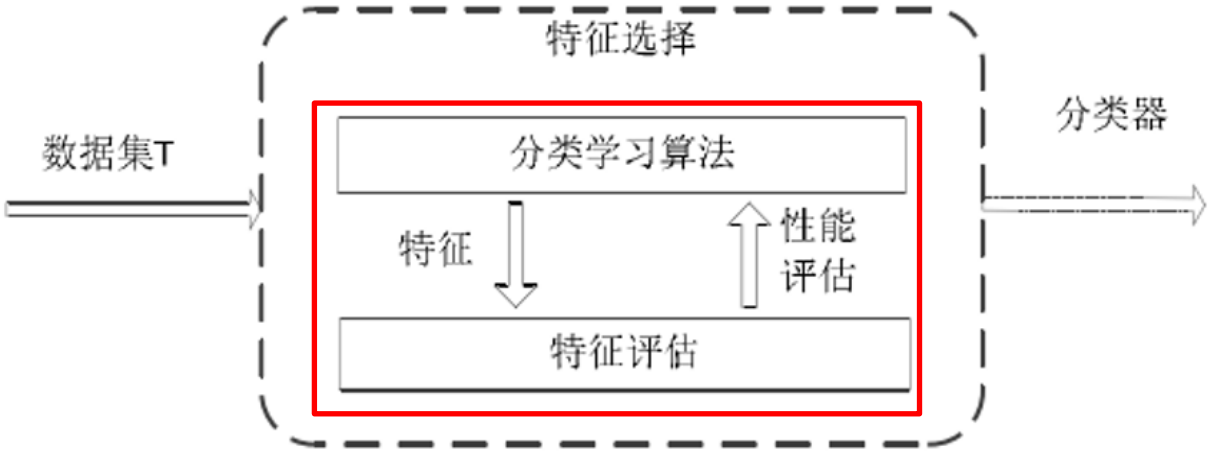
- 如何评价特征子集？
  - **2. 封装式(Wrapper)评价策略方法**
    - 将特征选择作为学习算法一个组成部分，需要结合后续的学习算法，并直接将学习算法的分类性能作为特征重要性的评价标准
    - 直接使用**分类器的性能作为评价的标准**，选出来的特征子集对分类一定有最好的性能

相对于Filter 选择方法，Wrapper 方法所选择的特征子集的规模要小得多，有利于关键特征的辨识，模型的分类性能更好。但Wrapper 方法泛化能力较差，当改变学习算法时，需要针对该学习算法重新进行特征选择，算法的计算**复杂度高**.



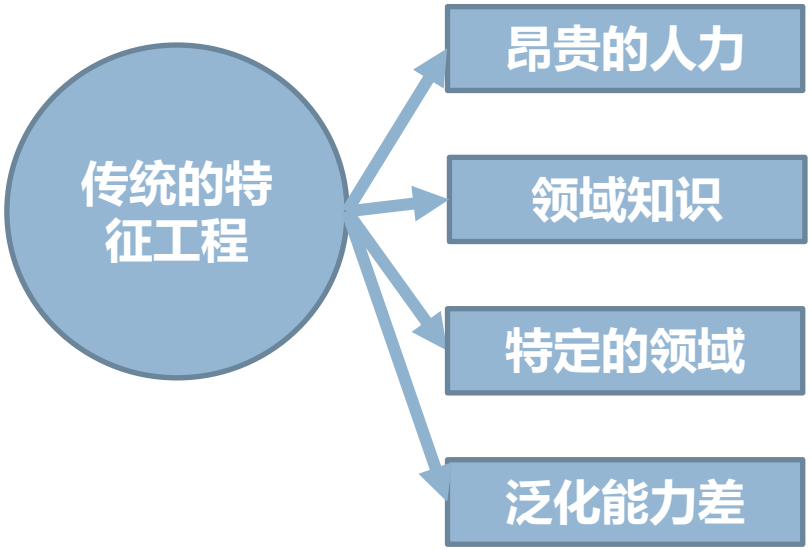
特征子集评价

- 如何评价特征子集？
  - **3. 嵌入式(Embedded)评价策略方法**
    - 特征选择算法嵌入到学习和分类算法中，**特征选择是算法模型中的一部分**
    - 算法模型训练和特征选择同时进行，互相结合。即，算法具有自动进行特征选择的功能



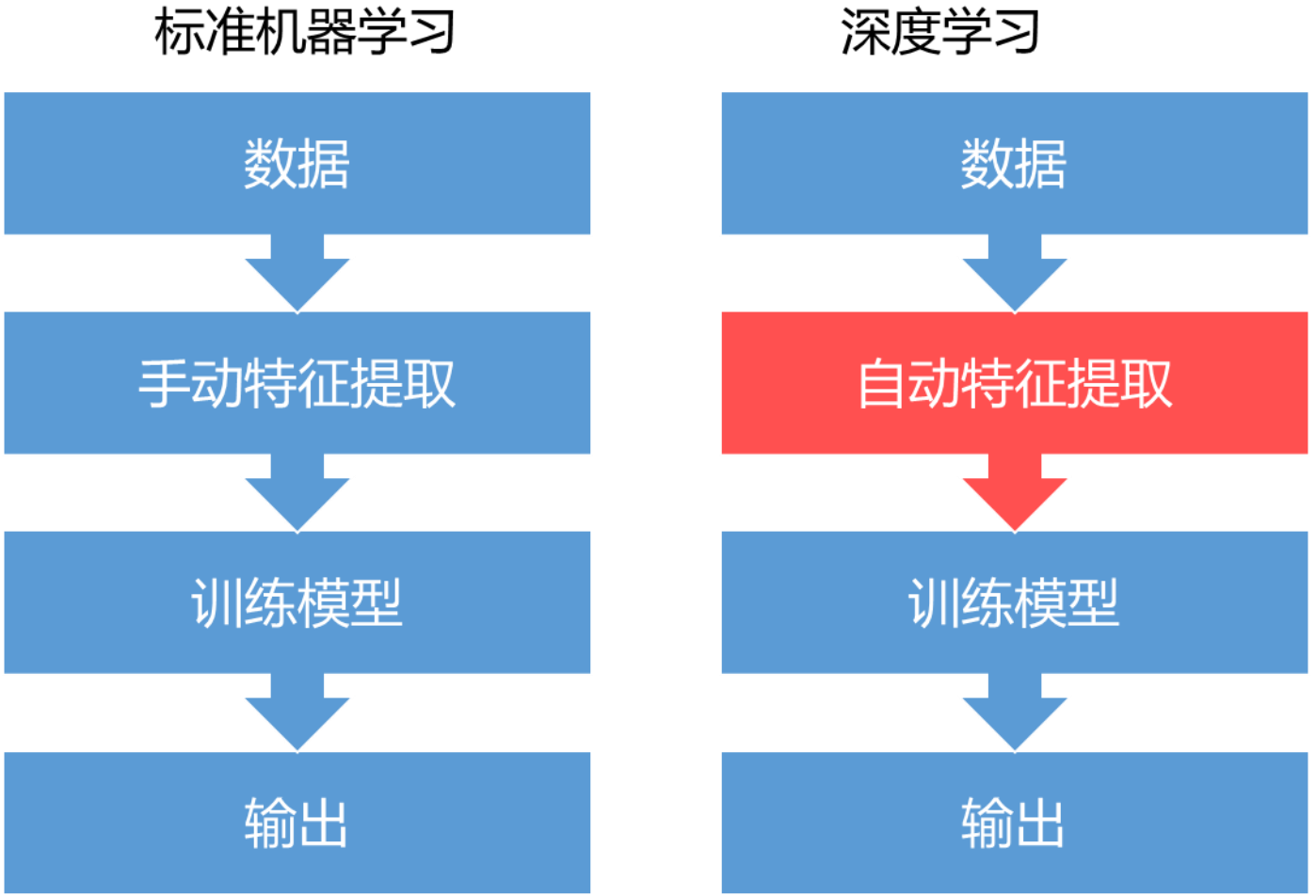
传统特征工程的缺点

- 传统特征工程的缺点



传统特征工程的缺点

- 传统特征工程的缺点

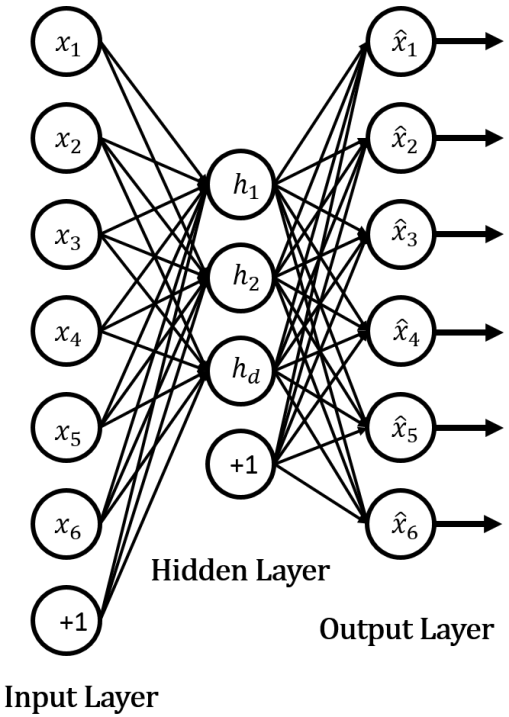


特征学习

- 特征学习

  如何从数据中能够自主的学习特征，在这里我们主要介绍在深度学习中常用的三种网络结构。

  - 自编码结构(Auto-Encoder)



$h_{W,b}(x)$

将数据的特征X作为Input Layer输入
同样将原始数据特征X′作为Output Layer的输出来重构出原数据。

Encoder: $H = f(A * X + b)$

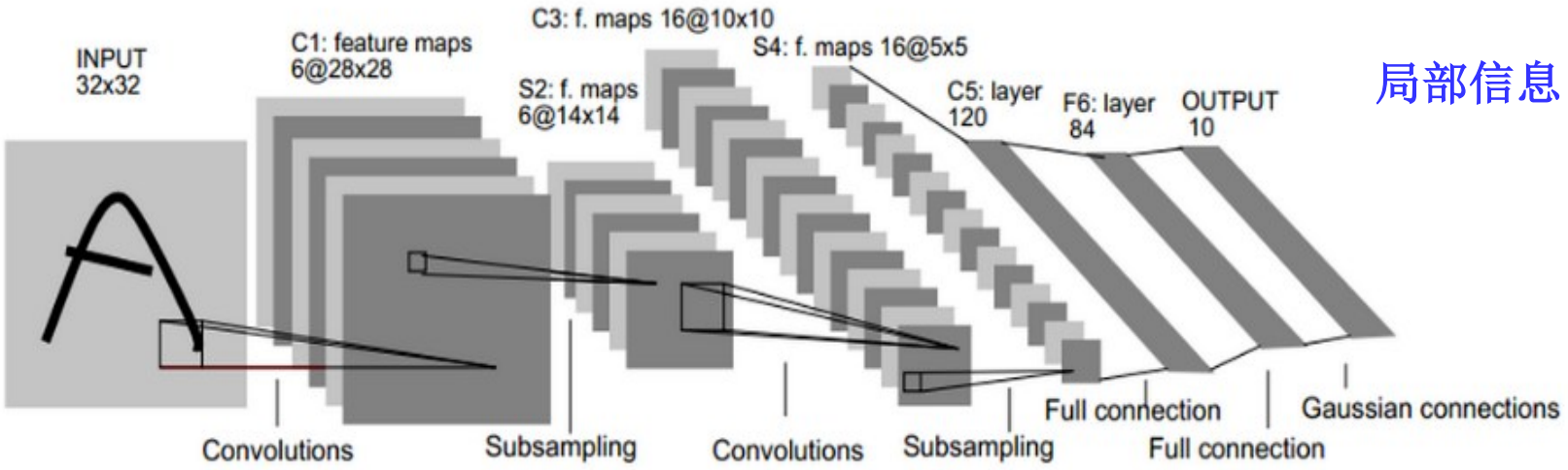
Decoder: $X' = f(A' * H + b')$

将中间的隐含层H的输出作为学习到的数据特征。

特征学习

- 卷积神经网络(CNN): 常用于图像特征提取

LeNet



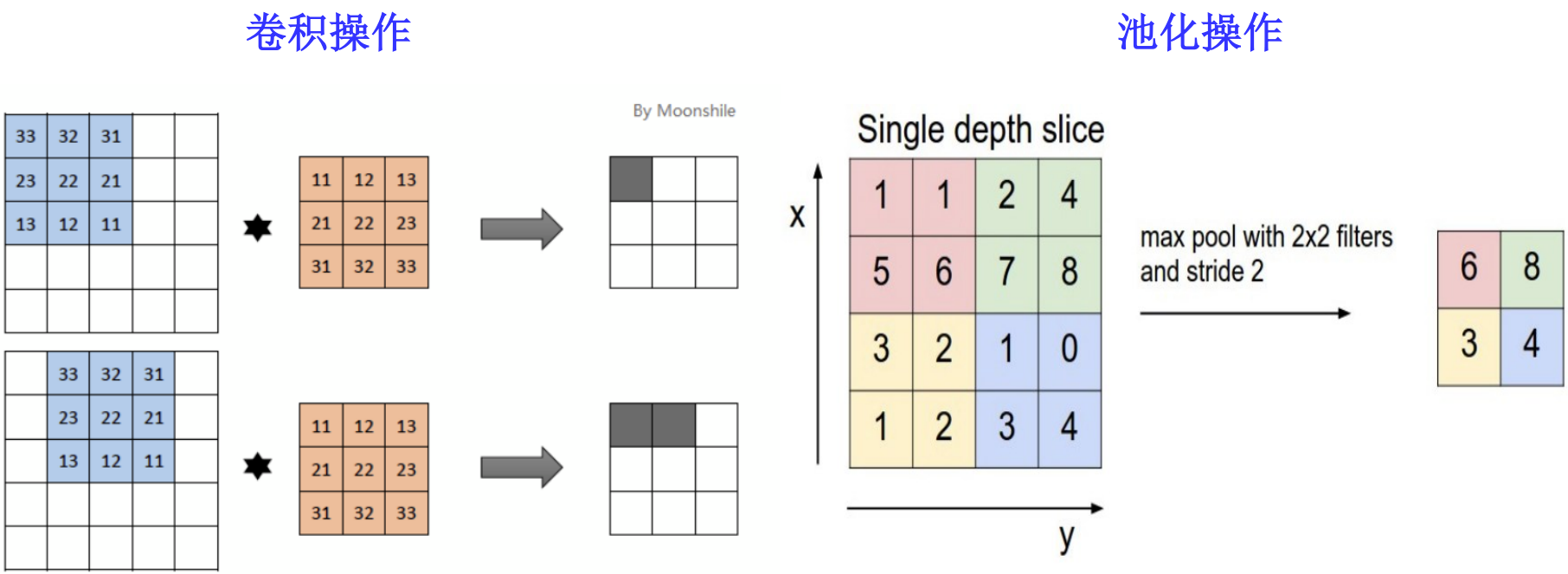
局部信息

卷积层：通过局部平移，利用不同的卷积核来提取图像中不同的特征
池化层：计算某个区域的特征，提高模型的泛化能力
全连接层：通过多层的神经网络，抽取更高阶的特征。

最终**全连接层的输出**即为该图像的特征向量表示。

特征学习

- 卷积神经网络(CNN): 常用于图像特征提取

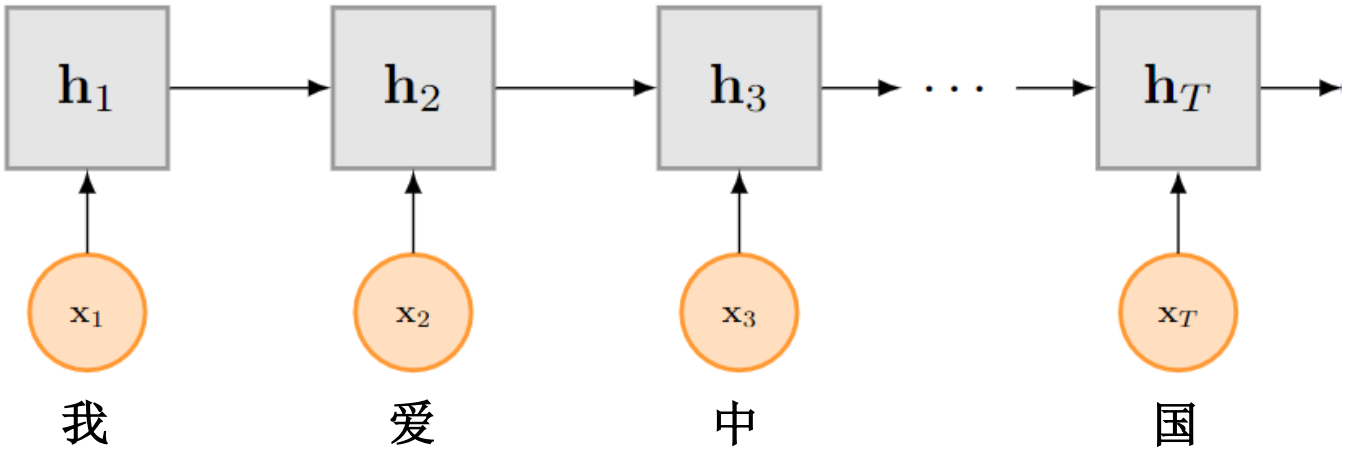


思考：卷积神经网络能否用于文本处理？如何做？

Zhenya Huang, Qi Liu, Enhong Chen, Question Difficulty Prediction for READING Problems in Standard Tests，AAAI'2017

特征学习

- 循环神经网络(RNN): 常用于序列数据的特征提取



位置信息
顺序信息

将序列中的每个数据依次作为RNN的输入，如上图中的文本数据‘我’、‘爱’、‘中’、‘国’，并将最后一层网络的输出h_T作为最终序列数据的特征向量

Qi Liu, Zhenya Huang, Yu Yin, Enhong Chen, Hui Xiong, Yu Su, Guoping Hu, EKT: Exercise-aware Knowledge Tracing for Student Performance Prediction, IEEE TKDE), 33(1): 100-115,2021

特征学习

- 利用标准数据集进行特征学习（特征预训练）
  - 作用：模型效果验证 & 应用问题中的模型预训练
  - 图像数据预训练：ImageNet
    - http://www.image-net.org/
    - 1400万张图片数据，2万类别，已标注
    - 常用模型：ResNet，AlexNet，VGG等
    - 常见应用：图像分类、目标检测、目标定位
  - 文本数据预训练：Twitter，Wiki
    - https://nlp.stanford.edu/projects/glove/
    - 2 Billon tweets, 27 Billion 词数，1.2M 词表
    - 常用模型：CBOW，Skip-gram，Glove等Word2
    - 常见应用：文本分类，文本推理，翻译等

特征学习

Efficient estimation of word representations in vector space

T Mikolov, K Chen, G Corrado, J Dean - arXiv preprint arXiv:1301.3781, 2013 - arxiv.org

We propose two novel model architectures for computing continuous vector representations of words from very large data sets. The quality of these representations is measured in a word similarity task, and the results are compared to the previously best performing …

☆ 99 被引用次数：24421 相关文章 所有 43 个版本 »

- Word2Vec—自然语言处理的预训练
  - 哪句话更像自然语句

S1: 语言模型的本质是对一段自然语言的文本进行预测概率的大小
S2: 语言模型的本质是对自然一段语言的文本进行预测概率的大小
S3: 语言模型的本质是对自然语言一段的文本进行预测概率的大小

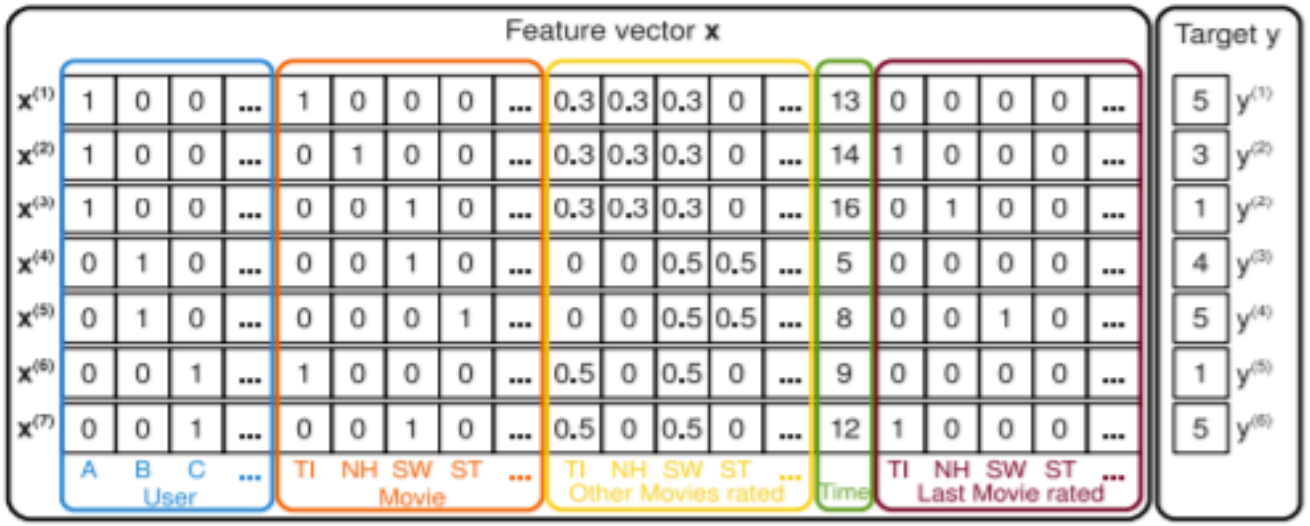
  - 计算词构成句子的概率—最大化

$$P(w_1, w_2, \dots, w_n) = P(w_1)P(w_2|w_1)P(w_3|w_1, w_2) \dots P(w_n|w_1, \dots, w_{n-1})$$

$$L = \sum_{w \in C} \log P(w|context(w))$$

特征工程: 可解释性

- 特征的含义
  - 人工设计的特征
  - 特征的构造基于先验知识，天然具有可解释性



$$S = \{(\text{A}, \text{TI}, \text{2010-1}, 5), (\text{A}, \text{NH}, \text{2010-2}, 3), (\text{A}, \text{SW}, \text{2010-4}, 1),$$
$$(\text{B}, \text{SW}, \text{2009-5}, 4), (\text{B}, \text{ST}, \text{2009-8}, 5),$$
$$(\text{C}, \text{TI}, \text{2009-9}, 1), (\text{C}, \text{SW}, \text{2009-12}, 5)\}$$

特征工程: 可解释性

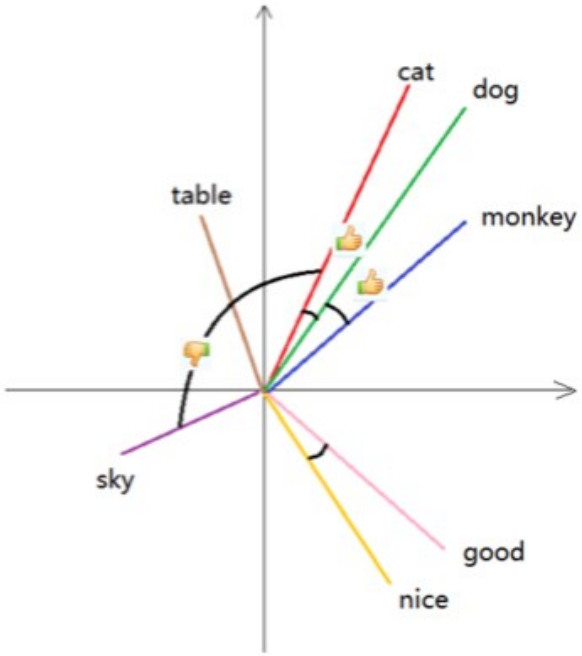
“dog” “canine”

3 399,999

$$\begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\\\vdots\\0\\0\end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix}0\\0\\0\\0\\\vdots\\1\\0\end{pmatrix}$$

- 特征的含义
  - Word2Vec—自然语言处理的预训练
  - 学习语言的语义特性：解决“语义鸿沟”

词的相似性



词的类比性

King – Queen ~= Man – Woman

China – Beijing ~= UK – London ~= Capital

Efficient estimation of word representations in vector space

T Mikolov, K Chen, G Corrado, J Dean - arXiv preprint arXiv:1301.3781, 2013 - arxiv.org

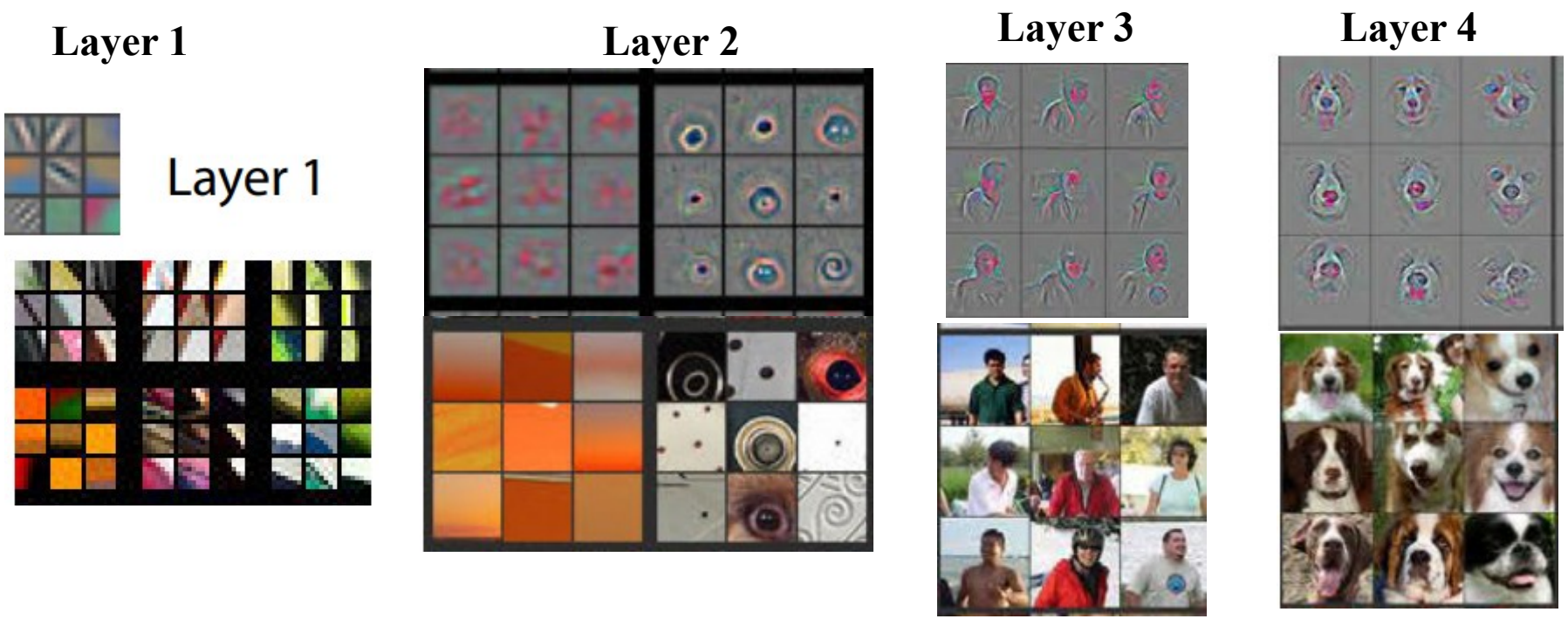
We propose two novel model architectures for computing continuous vector representations of words from very large data sets. The quality of these representations is measured in a word similarity task, and the results are compared to the previously best performing …

☆ 99 被引用次数: 24421 相关文章 所有 43 个版本 »

特征工程: 可解释性

Visualizing and understanding convolutional networks
MD Zeiler, R Fergus - European conference on computer vision, 2014 -
Abstract Large Convolutional Network models have recently demonstra
classification performance on the ImageNet benchmark Krizhevsky et a
is no clear understanding of why they perform so well, or how they migh
paper we explore both issues. We introduce a novel visualization techn
insight into the function of intermediate feature layers and the operation
Used in a diagnostic role, these visualizations allow us to find model arc
☆ 99 被引用次数: 13612 相关文章 所有 18 个版本

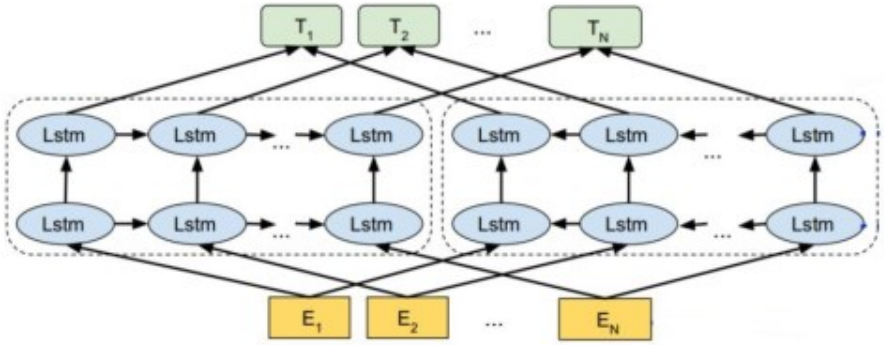
- 特征的含义—可解释性
  - CNN Feature map——特征图可视化
  - 学习图像的特点：图形图像的“颜色，边角，轮廓，图形”等

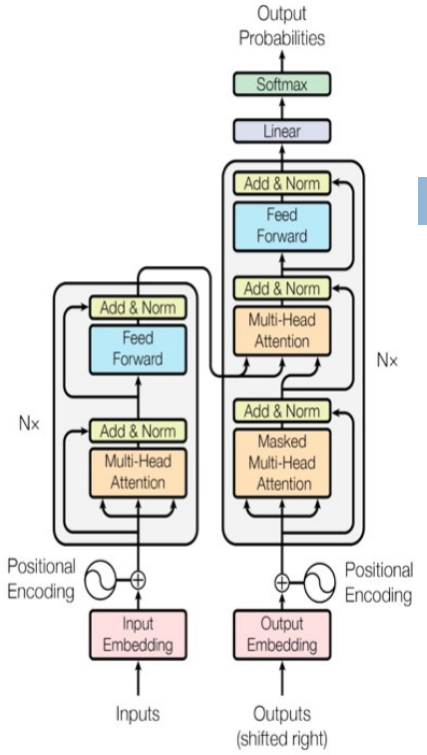


Zeiler, Matthew D., and Rob Fergus. "Visualizing and understanding convolutional networks." European conference on computer vision. Springer, Cham, 2014.

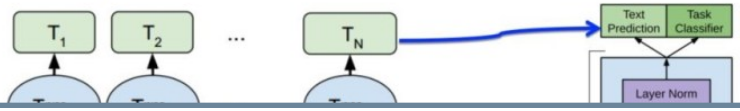
特征学习

- 自然语言处理的预训练模型
  - Elmo，GPT，Transformer, BERT

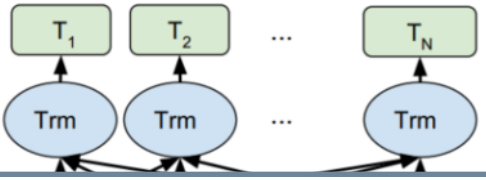




OpenAI GPT



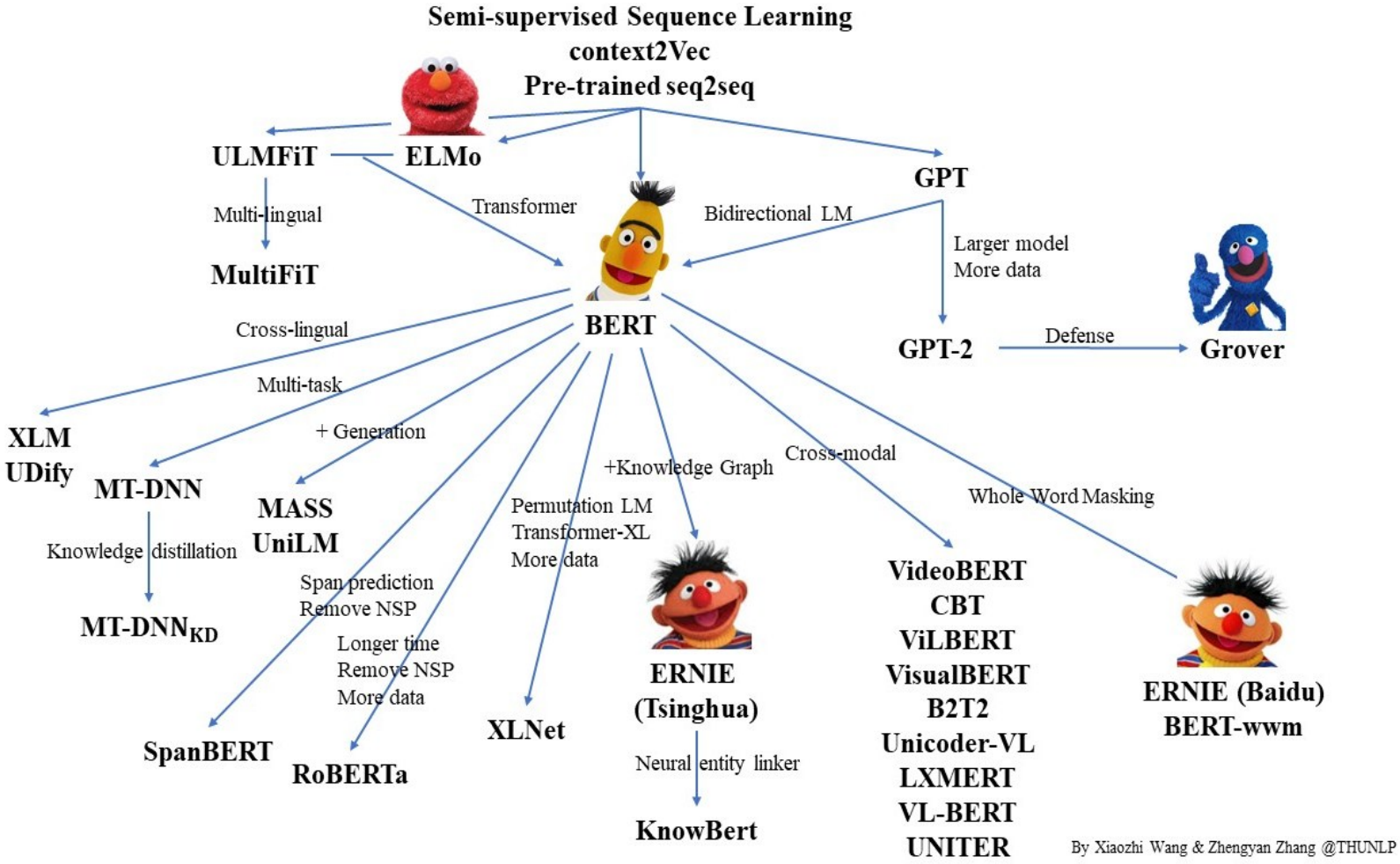
BERT (Ours)



特征学习过程已经不局限于人工的思考、构造、统计等方法。它已经成为一个重要的研究方向，专门的特征学习模型已经在CV、NLP，graph等领域取得重要的突破。

特征学习

- 自然语言处理的预训练模型

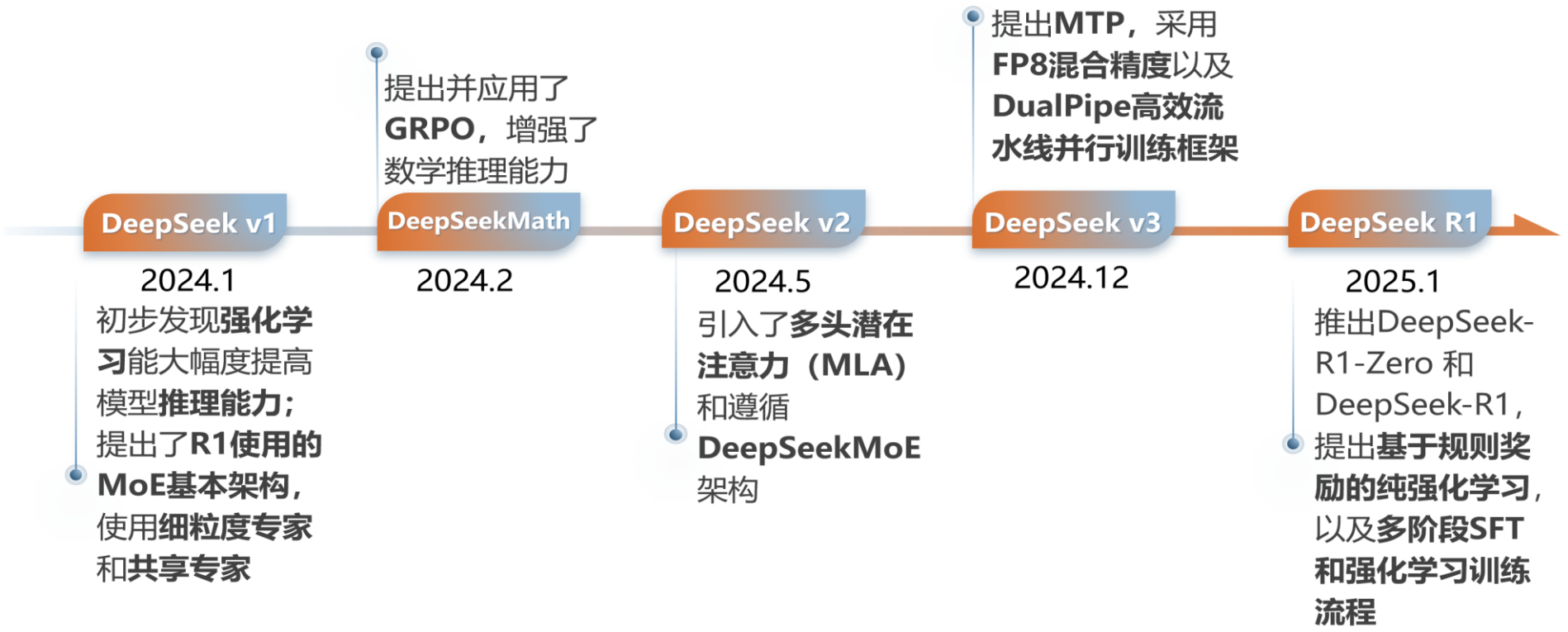


特征学习

- 大语言模型的技术迭代

特征学习

- 前沿：大语言模型



参考文献

- 书籍
  - 数据挖掘导论
  - 机器学习
- 论文
  - 《An Introduction to Variable and Feature Selection》
  - 《特征选择常用算法综述》
- 实战经验
  - Sklearn官方文档
  - Kaggle和天池比赛论坛

第二章数据分析基础小结

- 数据采集 Data Collection
  - 信息检索
  - 网络爬虫
- 数据预处理 Data Preprocessing
  - 数据清洗
  - 数据集成
  - 数据变换
- 特征工程 Feature Engineering
  - 特征设计
  - 特征理解