Библиотеки обработки данных для языка Python

ИУ-5

Data Scientist и Data Engineer

- В курсе мы планируем говорить про машинное обучение, анализ данных. Традиционно эту роль IT-специалиста называют «Data Scientist», то есть специалист по изучению данных и построению моделей, аналитик данных.
- Но данные для анализа нужно где-то хранить, передавать, обрабатывать и т.д. Роль IT-специалиста, которые это обеспечивает называют «Data Engineer».
- Во многом роль IT-специалиста «Data Engineer» сейчас связана именно с обработкой больших данных.
- **Эта лекция посвящена технологиям Data Engineering для маленьких и средних датасетов, которые не требуют использования больших данных.**
- Классификация профессий в области машинного обучения:
  - http://datascientist.one/data-professionals/
  - https://www.datacamp.com/community/tutorials/data-science-industry-infographic
  - https://towardsdatascience.com/the-dynamics-of-data-roles-teams-6c450b27e59e

Краткий план лекции

- Структуры данных в машинном обучении
- Библиотеки для обработки данных
  - NumPy, SciPy
  - Разреженные матрицы
  - Pandas
  - PandaSQL
  - Dask

Структуры данных в машинном обучении

Тензоры

- Тензор – основная структура данных в машинном обучении.
- Существует два определения тензора
  1. «Старое» определение. Объект линейной алгебры, линейно преобразующий элементы одного линейного пространства в элементы другого.
  2. **«Новое» определение, которое почти всегда используется в машинном обучении. Просто многомерная матрица.**
- Существует гипотеза, что большинство алгоритмов машинного обучения можно представить в виде последовательных преобразований тензоров. Гипотеза реализована в библиотеке TensorFlow.

Факторизация тензоров

- Большинство тензоров очень разрежены (содержат много пустых значений).
- Факторизация тензора – его представление в виде произведения простых объектов (матрицы и тензоров меньшей размерности), которые не являются разреженными:
  - https://habr.com/ru/company/yandex/blog/313892/ (проф. Иван Оселедец, премия)
  - https://pdfs.semanticscholar.org/94cc/6daad548a03c6edb0351d686c2d4aa364634.pdf (проф. Andrzej Cichocki)
- Для реляционных БД аналогом операции факторизации является нормализация схемы БД.
  - В этом случае мы не всегда уменьшаем размер нормализованных таблицы, но всегда превращаем исходную денормализованную таблицу в набор «неразреженных» нормализованных таблиц.
  - Вместо произведения матриц (для факторизации) используется соединение на основе ключей (join).
- Таким образом, превращение денормализованной структуры в набор нормализованных составных частей (которые удобнее хранить и обрабатывать) является устойчивым «паттерном» анализа данных.
- Но для построения моделей машинного обучения удобнее использовать денормализованную таблицу (которая может быть результатом сборки факторизованного тензора или результатом соединения реляционных таблиц).

Тензоры и OLAP-кубы

- OLAP-куб является разновидностью тензора.
- Каждый OLAP-куб (справа) может быть представлен в виде денормализованной таблицы (слева). Дополнительный пример.

Страна	Товар	Год	Объем продаж
Аргентина	Бытовая электроника	1988	105
Аргентина	Бытовая электроника	1989	117
Аргентина	Бытовая электроника	1990	122
Аргентина	Резиновые изделия	1989	212
Аргентина	Резиновые изделия	1990	217
Бразилия	Бытовая электроника	1988	313
Бразилия	Бытовая электроника	1989	342
Бразилия	Бытовая электроника	1990	337
Бразилия	Резиновые изделия	1988	515
Бразилия	Резиновые изделия	1989	542
Бразилия	Резиновые изделия	1990	566
Венесуэла	Бытовая электроника	1988	94
Венесуэла	Бытовая электроника	1989	96
Венесуэла	Бытовая электроника	1990	102
Венесуэла	Резиновые изделия	1988	153
Венесуэла	Резиновые изделия	1989	147
Венесуэла	Резиновые изделия	1990	162

- Тензорное (кубическое) представление больше соответствует библиотеке NumPy, а денормализованное – библиотеке Pandas.

Тензоры и OLAP-кубы (2)

- Тензор является прежде всего математической моделью, в то время как OLAP-куб – инженерной.
- В отличие от OLAP-кубов для тензоров не определено естественных операций агрегирования.

Выводы по разделу:

- Тензор – основная структура данных в машинном обучении, сейчас понимается как многомерная матрица.
- Тензор и OLAP-куб являются «родственными моделями». Для обоих моделей можно использовать срезы и уменьшение размерностей. Но в отличие от OLAP-кубов для тензоров не определено естественных операций агрегирования.
- Тензор и OLAP-куб могут быть представлены в форме денормализованной таблицы.
- Для построения моделей машинного обучения удобнее использовать денормализованную таблицу (которая может быть получена из тензора, OLAP-куба или как результат соединения реляционных таблиц).
- В дальнейшем для построения моделей машинного обучения будут использоваться именно денормализованные таблицы.

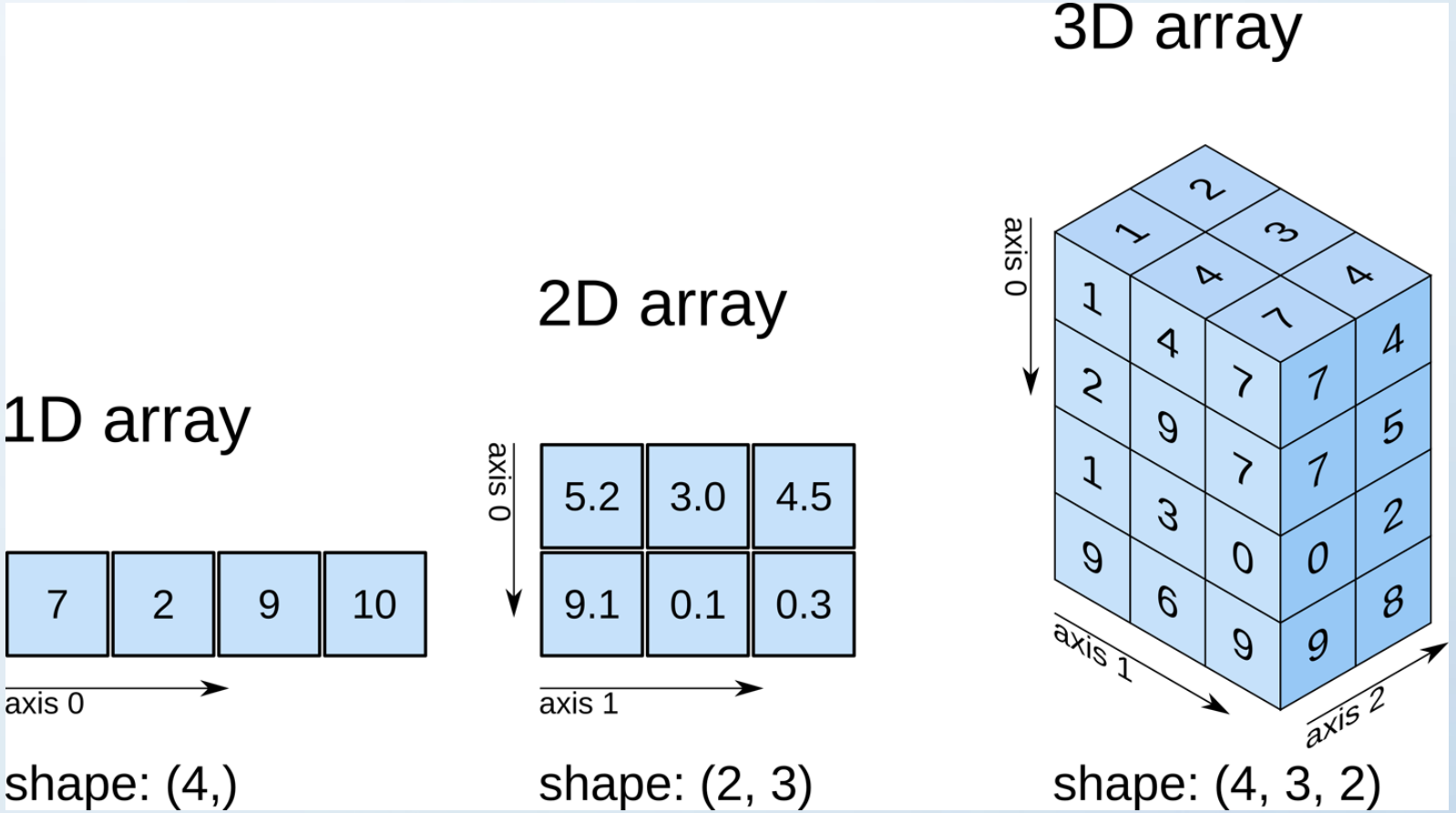
Библиотеки для обработки данных

Рекомендуемая книга

- Библиотеки NumPy и Pandas хорошо описаны в книге Дж. Вандер Пласа.

Библиотека NumPy (1)

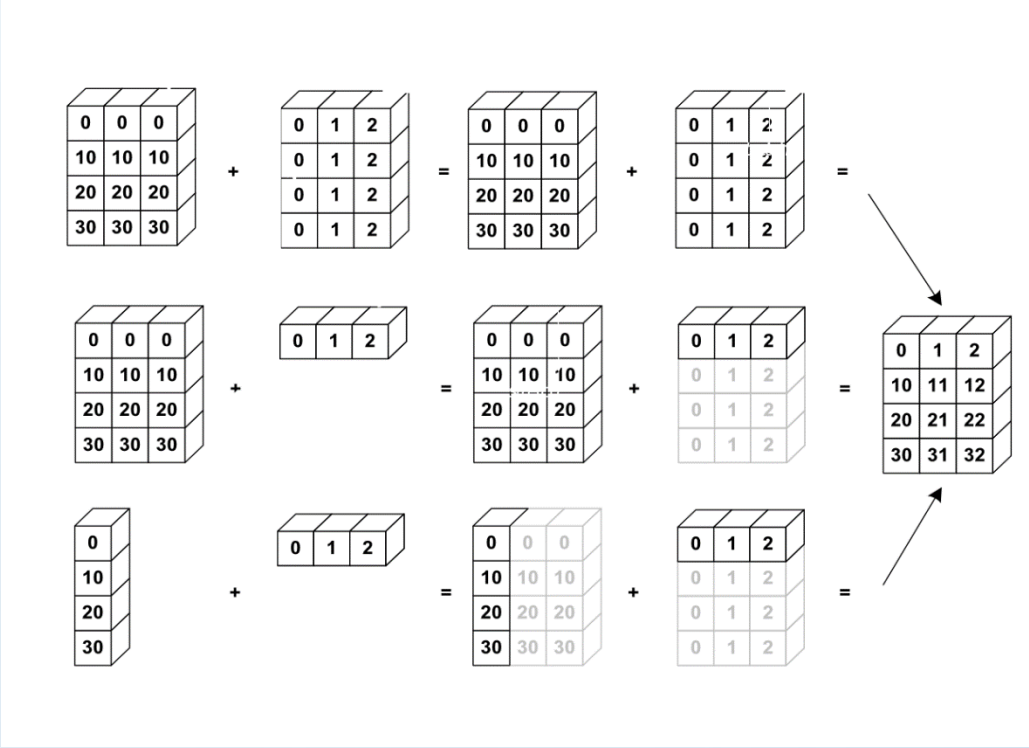
- Библиотека NumPy предназначена для научных вычислений. Основным типом данных является тензор (многомерная матрица).



Источник

Библиотека NumPy (2)

- Векторизация вычислений - https://en.wikipedia.org/wiki/Vectorization
- Векторизация в NumPy - https://www.pythonlikeyoumeanit.com/Module3_IntroducingNumpy/ VectorizedOperations.html
- Broadcasting (расширение, транслирование, сопряжение размерностей матриц) - https://scipy-lectures.org/intro/numpy/operations.html#broadcasting



Библиотека NumPy (3)

- Сайт библиотеки - http://www.numpy.org/
- Документация - https://numpy.org/doc/
- Введение на русском языке - https://habr.com/ru/post/352678/
- Введение - https://docs.scipy.org/doc/numpy/user/quickstart.html
- Другие тьюториалы по NumPy:
  - Часть 1 - https://www.machinelearningplus.com/python/numpy-tutorial-part1-array-python-examples/
  - Часть 2 - https://www.machinelearningplus.com/python/numpy-tutorial-python-part2/
  - 101 упражнение по NumPy - https://www.machinelearningplus.com/python/101-numpy-exercises-python/
  - 100 упражнение по NumPy - http://www.labri.fr/perso/nrougier/teaching/numpy.100/

Библиотека SciPy

- SciPy — «библиотека для языка программирования Python с открытым исходным кодом, предназначенная для выполнения научных и инженерных расчётов» (Википедия).
- Основная структура данных – массив NumPy.
- Сайт библиотеки – https://www.scipy.org/
- Документация - https://www.scipy.org/docs.html
- Введение на русском языке – https://coderlessons.com/tutorials/python-technologies/uchitsia-stsipi/scipy-kratkoe-rukovodstvo (*есть опечатки при переводе*)
- Пособие по решению оптимизационных задач – https://habr.com/ru/post/439288/

Разреженные матрицы (SciPy)

- Если набор данных слишком велик и содержит много пустых значений, то можно использовать разреженные матрицы:
  - https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/sparse.html
  - http://scipy-lectures.org/advanced/scipy_sparse/index.html
  - https://rushter.com/blog/scipy-sparse-matrices/ (простое введение)

Библиотека Pandas (1)

- Pandas - это библиотека, предназначенная для чтения, хранения, записи и обработки наборов данных (датасетов).
- Фактически является in-memory СУБД с колоночной моделью данных.
- Основная структура данных в Pandas это денормализованная таблица данных. Pandas одновременно обладает некоторыми характеристиками электронной таблицы (Excel) и реляционной СУБД.
- В чем Pandas похож на электронную таблицу:
  - В Pandas основной структурой данных является одна таблица (а не схема связанных таблиц как в реляционной СУБД).
  - Таблица должна содержать полный набор данных, предназначенных для дальнейшего построения моделей машинного обучения.
  - Таблица данных, как правило, является денормализованной.
  - В данных могут быть пропущенные значения.
- В чем Pandas похож на реляционную СУБД:
  - Таблица данных (как и реляционная таблица) состоит из типизированных столбцов (атрибутов).
  - Строка таблицы соответствует записи в реляционной БД.
  - Над таблицами возможно выполнение операций реляционной алгебры – соединение (join), группировка и другие операции.

Библиотека Pandas (2)

- Официальная документация - http://pandas.pydata.org/pandas-docs/stable/
- Русскоязычные руководства:
  - https://habr.com/ru/company/ods/blog/322626/
  - https://khashtamov.com/ru/pandas-introduction/
  - https://pythonworld.ru/obrabotka-dannyx/pandas-cookbook-0-ipython.html
  - https://python.ivan-shamaev.ru/pandas-series-and-dataframe-objects-build-index/
  - https://coderlessons.com/tutorials/python-technologies/vyuchit-python-panda/python-pandas-kratkoe-rukovodstvo
  - https://pythonru.com/uroki/osnovy-pandas-1-chtenie-fajlov-dataframe-otbor-dannyh
  - https://tproger.ru/articles/pandas-data-wrangling-cheatsheet/
- Интерактивное руководство - https://www.datacamp.com/community/tutorials/pandas-tutorial-dataframe-python
- 101 упражнение по Pandas - https://www.machinelearningplus.com/python/101-pandas-exercises-python/
- 12 наиболее полезных техник Pandas - https://www.analyticsvidhya.com/blog/2016/01/12-pandas-techniques-python-data-manipulation/

Библиотека Pandas (3)

Data Wrangling with pandas Cheat Sheet

http://pandas.pydata.org

Tidy Data – A foundation for wrangling in pandas

In a tidy data set:

&

Each **variable** is saved in its own **column**

Each **observation** is saved in its own **row**

Tidy data complements pandas's vectorized operations. pandas will automatically preserve observations as you manipulate variables. No other format works as intuitively with pandas.

M * A

Syntax – Creating DataFrames

	a	b	c
1	4	7	10
2	5	8	11
3	6	9	12

```
df = pd.DataFrame(
        {"a" : [4 ,5, 6],
         "b" : [7, 8, 9],
         "c" : [10, 11, 12]},
       index = [1, 2, 3])
```

Specify values for each column.

```
df = pd.DataFrame(
    [[4, 7, 10],
     [5, 8, 11],
     [6, 9, 12]],
    index=[1, 2, 3],
    columns=['a', 'b', 'c'])
```

Specify values for each row.

		a	b	c
n	v			
d	1	4	7	10
	2	5	8	11
e	2	6	9	12

```
df = pd.DataFrame(
        {"a" : [4 ,5, 6],
         "b" : [7, 8, 9],
         "c" : [10, 11, 12]},
index = pd.MultiIndex.from_tuples(
        [('d',1),('d',2),('e',2)],
          names=['n','v']))
```

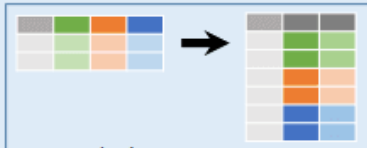
Create DataFrame with a MultiIndex

Method Chaining

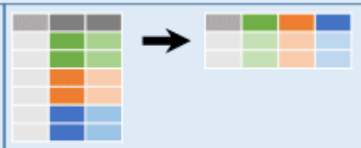
Most pandas methods return a DataFrame so that another pandas method can be applied to the result. This improves readability of code.

```
df = (pd.melt(df)
        .rename(columns={
                'variable' : 'var',
                'value' : 'val'})
        .query('val >= 200')
    )
```

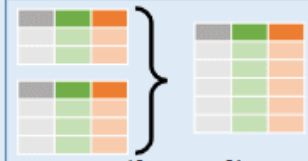
Reshaping Data – Change the layout of a data set



pd.melt(df)
Gather columns into rows.



df.pivot(columns='var', values='val')
Spread rows into columns.



pd.concat([df1,df2])
Append rows of DataFrames

pd.concat([df1,df2], axis=1)
Append columns of DataFrames

df.sort_values('mpg')
Order rows by values of a column (low to high).

df.sort_values('mpg',ascending=False)
Order rows by values of a column (high to low).

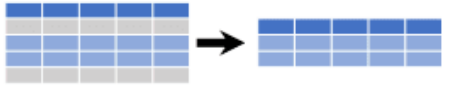
df.rename(columns = {'y':'year'})
Rename the columns of a DataFrame

df.sort_index()
Sort the index of a DataFrame

df.reset_index()
Reset index of DataFrame to row numbers, moving index to columns.

df.drop(columns=['Length','Height'])
Drop columns from DataFrame

Subset Observations (Rows)



df[df.Length > 7]
Extract rows that meet logical criteria.

df.drop_duplicates()
Remove duplicate rows (only considers columns).

df.head(n)
Select first n rows.

df.tail(n)
Select last n rows.

df.sample(frac=0.5)
Randomly select fraction of rows.

df.sample(n=10)
Randomly select n rows.

df.iloc[10:20]
Select rows by position.

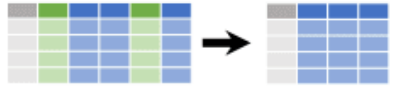
df.nlargest(n, 'value')
Select and order top n entries.

df.nsmallest(n, 'value')
Select and order bottom n entries.

Logic in Python (and pandas)

<	Less than	!=	Not equal to
>	Greater than	df.column.isin(*values*)	Group membership
==	Equals	pd.isnull(*obj*)	Is NaN
<=	Less than or equals	pd.notnull(*obj*)	Is not NaN
>=	Greater than or equals	&,|,~,^,df.any(),df.all()	Logical and, or, not, xor, any, all

Subset Variables (Columns)



df[['width','length','species']]
Select multiple columns with specific names.

df['width'] *or* **df.width**
Select single column with specific name.

df.filter(regex='*regex*')
Select columns whose name matches regular expression *regex*.

regex (Regular Expressions) Examples

'\.'	Matches strings containing a period '.'
'Length$'	Matches strings ending with word 'Length'
'^Sepal'	Matches strings beginning with the word 'Sepal'
'^x[1-5]$'	Matches strings beginning with 'x' and ending with 1,2,3,4,5
'^(?!Species$).*'	Matches strings except the string 'Species'

df.loc[:,'x2':'x4']
Select all columns between x2 and x4 (inclusive).

df.iloc[:,[1,2,5]]
Select columns in positions 1, 2 and 5 (first column is 0).

df.loc[df['a'] > 10, ['a','c']]
Select rows meeting logical condition, and only the specific columns .

http://pandas.pydata.org/ This cheat sheet inspired by Rstudio Data Wrangling Cheatsheet (https://www.rstudio.com/wp-content/uploads/2015/02/data-wrangling-cheatsheet.pdf) Written by Irv Lustig, Princeton Consultants

Библиотека Pandas (4)

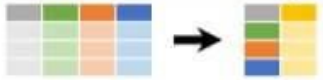
Summarize Data

`df['w'].value_counts()`
Count number of rows with each unique value of variable

`len(df)`
# of rows in DataFrame.

`df['w'].nunique()`
# of distinct values in a column.

`df.describe()`
Basic descriptive statistics for each column (or GroupBy)



pandas provides a large set of **summary functions** that operate on different kinds of pandas objects (DataFrame columns, Series, GroupBy, Expanding and Rolling (see below)) and produce single values for each of the groups. When applied to a DataFrame, the result is returned as a pandas Series for each column. Examples:

`sum()`
Sum values of each object.

`count()`
Count non-NA/null values of each object.

`median()`
Median value of each object.

`quantile([0.25,0.75])`
Quantiles of each object.

`apply(function)`
Apply function to each object.

`min()`
Minimum value in each object.

`max()`
Maximum value in each object.

`mean()`
Mean value of each object.

`var()`
Variance of each object.

`std()`
Standard deviation of each object.

Group Data

`df.groupby(by="col")`
Return a GroupBy object, grouped by values in column named "col".

`df.groupby(level="ind")`
Return a GroupBy object, grouped by values in index level named "ind".

All of the summary functions listed above can be applied to a group. Additional GroupBy functions:

`size()`
Size of each group.

`agg(function)`
Aggregate group using function.

The examples below can also be applied to groups. In this case, the function is applied on a per-group basis, and the returned vectors are of the length of the original DataFrame.

`shift(1)`
Copy with values shifted by 1.

`rank(method='dense')`
Ranks with no gaps.

`rank(method='min')`
Ranks. Ties get min rank.

`rank(pct=True)`
Ranks rescaled to interval [0, 1].

`rank(method='first')`
Ranks. Ties go to first value.

`shift(-1)`
Copy with values lagged by 1.

`cumsum()`
Cumulative sum.

`cummax()`
Cumulative max.

`cummin()`
Cumulative min.

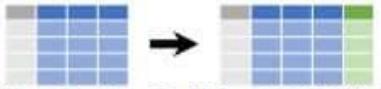
`cumprod()`
Cumulative product.

Handling Missing Data

`df.dropna()`
Drop rows with any column having NA/null data.

`df.fillna(value)`
Replace all NA/null data with value.

Make New Columns



`df.assign(Area=lambda df: df.Length*df.Height)`
Compute and append one or more new columns.

`df['Volume'] = df.Length*df.Height*df.Depth`
Add single column.

`pd.qcut(df.col, n, labels=False)`
Bin column into n buckets.

pandas provides a large set of **vector functions** that operate on all columns of a DataFrame or a single selected column (a pandas Series). These functions produce vectors of values for each of the columns, or a single Series for the individual Series. Examples:

`max(axis=1)`
Element-wise max.

`clip(lower=-10,upper=10)`
Trim values at input thresholds

`min(axis=1)`
Element-wise min.

`abs()`
Absolute value.

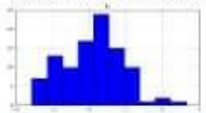
Windows

`df.expanding()`
Return an Expanding object allowing summary functions to be applied cumulatively.

`df.rolling(n)`
Return a Rolling object allowing summary functions to be applied to windows of length n.

Plotting

`df.plot.hist()`
Histogram for each column



`df.plot.scatter(x='w',y='h')`
Scatter chart using pairs of points

Combine Data Sets

adf

x1	x2
A	1
B	2
C	3

+

bdf

x1	x3
A	T
B	F
D	T

=

Standard Joins

x1	x2	x3
A	1	T
B	2	F
C	3	NaN

`pd.merge(adf, bdf, how='left', on='x1')`
Join matching rows from bdf to adf.

x1	x2	x3
A	1.0	T
B	2.0	F
D	NaN	T

`pd.merge(adf, bdf, how='right', on='x1')`
Join matching rows from adf to bdf.

x1	x2	x3
A	1	T
B	2	F

`pd.merge(adf, bdf, how='inner', on='x1')`
Join data. Retain only rows in both sets.

x1	x2	x3
A	1	T
B	2	F
C	3	NaN
D	NaN	T

`pd.merge(adf, bdf, how='outer', on='x1')`
Join data. Retain all values, all rows.

Filtering Joins

x1	x2
A	1
B	2

`adf[adf.x1.isin(bdf.x1)]`
All rows in adf that have a match in bdf.

x1	x2
C	3

`adf[~adf.x1.isin(bdf.x1)]`
All rows in adf that do not have a match in bdf.

ydf

x1	x2
A	1
B	2
C	3

+

zdf

x1	x2
B	2
C	3
D	4

=

Set-like Operations

x1	x2
B	2
C	3

`pd.merge(ydf, zdf)`
Rows that appear in both ydf and zdf (Intersection).

x1	x2
A	1
B	2
C	3
D	4

`pd.merge(ydf, zdf, how='outer')`
Rows that appear in either or both ydf and zdf (Union).

x1	x2
A	1

```
pd.merge(ydf, zdf, how='outer',
         indicator=True)
.query('_merge == "left_only"')
.drop(columns=['_merge'])
```
Rows that appear in ydf but not zdf (Setdiff).

Библиотека PandaSQL

- Предназначена для выполнения SQL-запросов над наборами данных Pandas.
- Официальный сайт - https://github.com/yhat/pandasql
- Библиотека использует синтаксис SQLite - https://www.sqlite.org/lang.html
- Примеры использования:
  - https://habr.com/ru/post/279213/
  - https://github.com/miptgirl/udacity_engagement_analysis/blob/master/pandasql_example.ipynb

Библиотека Dask

- Библиотека Dask предназначена для распараллеливания вычислений при обработке данных.
- Преимущества библиотеки - http://docs.dask.org/en/latest/why.html
- Распараллеливания вычислений приводит к более сложной интеграции с библиотеками машинного обучения.
- Сравнения с библиотеками для обработки больших данных:
  - http://docs.dask.org/en/latest/spark.html
  - https://matthewrocklin.com/blog//work/2018/08/28/dataframe-performance-high-level