# 第2章:数据

- 《机器学习》(第1-2章),周志华,清华大学出版社,2016
- 《数据挖掘导论》(第2版),陈封能等著,段磊等译,机械工业出版社,2019
- 《**机器学习精讲**》(看第1章),安德烈-布可夫著,人民邮 电出版社,2020

#### 什么是数据?

- 数据集: 一组含有特征(属性)的数据对象(样本)的集合
- 样本: 由一组特征(属性)所描述 的一个对象
  - **样本**也成为**示例**、记录、点、向量、模式、事件、案例、实例、观测、实体
- 特征(属性): 描述样本或对象在某 方面的表现或性质的事项
  - 例如:某个人的身高、北京某一时刻的气温等等
  - **特征**也叫做**属性**、变量、特性、字段、 维
  - 属性因对象而已,或随时间而变化



#### 数据的数学表示

- 一般地,令  $D = \{x_1, x_2, ..., x_m\}$  表示 m 个样本的数据集,每个样本由 d 个属性描述,则每个样本  $x_i = (x_{i1}; x_{i2}; ...; x_{id})$  是 d 维样本空间 $\mathcal{X}$ 中的一个向量, $x_i \in \mathcal{X}$  ,其中 $x_{ij}$ 是  $x_i$  在第 j 个属性上的取值,d 称为样本  $x_i$  的维数。 $(x_i, y_i)$ 表示第 i 个样例, $y_i$  是样本 $x_i$  的标记(有时也称标签或标注)。
- 如下表,样本数  $\mathbf{m}=17$ , $x_1=$  (青绿; 蜷缩; 浊响; 清晰; 凹陷; 硬滑)
- $x_{21} =$  "乌黑"是  $x_2$  在第1个属性上的取值 描述西瓜的6个特征/属性

| 编号 | 色泽   | 根蒂 | 敲声 | 纹理 | 脐部 | 触感 | 好瓜◀ | 一标记     |
|----|------|----|----|----|----|----|-----|---------|
| 1  | 青绿   | 蜷缩 | 浊响 | 清晰 | 凹陷 | 硬滑 | 是   | (label) |
| 2  | (乌黑) | 蜷缩 | 沉闷 | 清晰 | 凹陷 | 硬滑 | 是   |         |
| 3  | 乌黑   | 蜷缩 | 浊响 | 清晰 | 凹陷 | 硬滑 | 是   |         |
| 6  | 青绿   | 稍蜷 | 浊响 | 清晰 | 稍凹 | 软粘 | 是   |         |
| 7  | 乌黑   | 稍蜷 | 浊响 | 稍糊 | 稍凹 | 软粘 | 是   |         |
| 10 | 青绿   | 硬挺 | 清脆 | 清晰 | 平坦 | 软粘 |     |         |
| 14 | 浅白   | 稍蜷 | 沉闷 | 稍糊 | 凹陷 | 硬滑 | 否   |         |
| 15 | 乌黑   | 稍蜷 | 浊响 | 清晰 | 稍凹 | 软粘 | 否   |         |
| 16 | 浅白   | 蜷缩 | 浊响 | 模糊 | 平坦 | 硬滑 | 否   |         |
| 17 | 青绿   | 蜷缩 | 沉闷 | 稍糊 | 稍凹 | 硬滑 | 否   |         |

## 特征(属性)的类型

#### 特征的取值

- •特征的取值是指派给一个特征的数字或符号
  - ・样本-->姓名: 张三、年龄: 18、性别: 男
  - 特征: {姓名、年龄、性别},**取值**: {张三、18、男}
- •相同的特征可以有不同的取值
  - •特征: {姓名、身高}, 取值: {张三、175cm}; {李四、180cm}
- •不同的特征可以有相同的取值
  - 特征: {年龄、排名}, 取值: {18、18}

#### 特征(属性)的类型(测量标度的类型)

| 属性类型         |    | 描述  | 例子                              | 操作                     |  |
|--------------|----|---|---------------------------------|------------------------|--|
| 分类的<br>(定性的) | 标称 | 标称属性的值只是不同的名字,即标称值只提供足够的信息以区分对象 $(=, \neq)$ | 邮政编码、雇员 ID 号、<br>眼球颜色、性别        | 众数、熵、列联相关、 $\chi^2$ 检验 |  |
|              | 序数 | 序数属性的值提供足够<br>的信息确定对象的序(<,<br>>)            | 矿石硬度{好,较好,最好}、成绩、街道号码           | 中值、百分位、秩相关、游程检验、符号检验   |  |
| 数值的(定量的)     | 区间 | 对于区间属性,值之间<br>的差是有意义的,即存在<br>测量单位(+,-)      | 日历日期、摄氏或华氏<br>温度                | 均值、标准差、皮尔逊<br>相关、t和F检验 |  |
|              | 比率 | 对于比率变量,差和比<br>率都是有意义的(*,/)                  | 绝对温度、货币量、计<br>数、年龄、质量、长度、<br>电流 | 几何平均、调和平均、<br>百分比变化    |  |

- 定性属性不具有数的大部分性质
- 定量属性用数表示,并且具有数的大部分性质,可以是连续值或整数值

#### 特征的类型(测量标度的类型)

- ·标称类型 Nominal
  - · 只能区分样本之间的不同, 例如: 学号、籍贯、邮政编码
- · 序数类型 Ordinal
  - **能够对样本之间的顺序进行区分**,例如:排名、年级、衣服的号码{S, M, L, XL, XXL}
- 区间类型 Interval
  - **能够对样本在坐标系上的相对距离进行度量**,例如:日历上的日期、摄氏或 华氏温度等
- ·比率类型 Ratio
  - 能够对样本在坐标系上的绝对位置进行标定,例如:开尔文温度、 长度、 时间、质量、货币单位等

#### 特征的类型的本质区别

•特征类型的本质区别是其所对应的操作不同

·相异性: = ≠

·序: < >

·加法: + -

· 乘法: \* /

•不同的特征类型适用不同的操作

标称类型: 相异性

• 序数类型: 相异性、序

•区间类型: 相异性、序、加法

• 比率类型: 相异性、序、加法、乘法

下方属性类型拥有 上方属性类型上的 所有性质与操作

(属性类型的定义是累积的)

#### 特征的类型

- \*标称类型 Nominal 适用符号: = ≠
  - 例如: 学号、籍贯、邮政编码
- **序数类型** Ordinal 适用符号: = ≠ < >
  - 例如:排名、年级、衣服的号码{S, M, L, XL, XXL}

#### 区间类型 Interval

- 有顺序,可以比大小,数据的差值有意义,但比例没有意义,可以加减,不能乘除(但可以算平均值)
- 例如: 日历上的日期、摄氏或华氏温度等

#### ·比率类型 Ratio

•有顺序,可以比大小,数据差值和比率都有意义,可以四则运算。例如:开尔文温度、长度、时间、年龄、质量等

#### 区间类型和比率类型的区别

- 举个栗子: "10°的水的温度是5°水温度的两倍" 这句话是否成立?
  - 摄氏温度?
    - 冰水混合物的温度定为0摄氏度(0不代表无,通常是一个分界值),沸水的温度 定为100摄氏度。有顺序,可以比大小,数据的差值有意义,可以加减,不能乘除。 可以说10℃比5℃高,且高5℃,但是不能说是两倍
  - 华氏温度?
    - 氯化铵和水的混合物的冰点温度(即氨水结冰的温度)为温度计的零度(0不代表无),人体温度为温度计的100度。(华氏温度将水的冰点定为32度,沸点定为212度)
  - 开尔文温度(绝对温度)?
    - 以绝对零度作为计算起点的温度(0代表无),即将水三相点的温度准确定义为273.15K。
    - 20K是10K的2倍

摄氏温度或华氏温度的的零度是硬性规定的,其比率是无物理意义的

#### 区间类型和比率类型的区别

- •类似的例子
  - 小明的身高比全班的平均身高高3公分,小磊的身高 比平均身高高6公分
  - 是否能说: "小磊的身高是小明身高的2倍"?

区间类型: 向异性、序、加法

· **比率类型:** 向异性、序、加法、 乘法

#### 区间类型和比率类型的特点

- •区间类型(interval-scaled)属性特点:
  - •例:温度属性,一般表示:10℃~15℃。
  - 1. 用相等的单位尺度度量,区间属性的值有序,可以为正、0、 负。(值的秩评定)
  - 2. 允许比较与定量评估值之间的差。
  - 3. 区间标度属性是数值的,中心趋势度量中位数和众数,还可以计算均值。
- •比率类型(ratio-scaled)属性特点:
  - 1. 具有固有零点的数值属性。(也就是该种属性中会有固有的 为 0 的值)
  - 2. 一个值是另一个的倍数(或比率)。
  - 3. 值是有序的。(可以计算差、均值、中位数、众数)
  - •例:度量重量、高度、速度和货币量(例如 100 元是 1 元的 100 倍)的属性。

12

#### 特征的类型

#### •不同类型的特征对应不同的坐标变换方式

| 属性类型        |    | 变 换   | 注释  |
|-------------|----|---|---|
| 分类属性 (定性属性) | 标称 | 任何 <b>一对一变换</b> ,例如值<br>的一个排列                             | 邮政如果所有雇员的ID号都重新<br>赋值,不会导致任何不同                    |
|             | 序数 | 值的 <mark>保序变换</mark> ,即 new_value= f (old_value) 其中f是单调函数 | 包括好,较好,最好的属性可以<br>完全等价地用值{1,2,3}或<br>{0.5,1,10}表示 |
| 数值属性 (定量属性) | 区间 | new_value=a*old_value+b<br>其中a、b是常数                       | 华氏和摄氏温度标度零度的位置<br>和1度的大小(单位)不同                    |
|             | 比率 | new_value=a*old_value                                     | 长度可以用米或英尺度量                                       |

#### 特征类型的其它分类方式: 离散与连续

- •用值的个数描述属性
- · 离散特征 (Discrete Feature)
  - 具有有限或无限可数个值,例:邮政编码,计数,所采集文档的单词集...
  - 常常使用整数变量表示
  - 可以是分类的(定性的)也可以是数值的(定量的)
- 连续特征(Continuous Feature)
  - •取实数值的特征,例:温度、高度、重量...
  - 在实际使用中, 实数只能用有限的精度测量与表示
  - 连续特征常常用浮点变量表示

#### 特征类型的其它分类方式: 离散与连续

#### ·二元特征 (Binary Feature)

- 仅仅具有两个值的特征,常常使用0或1表示
- •例:性别、对错、选课与否...
- •二元属性是离散特征的一种特殊情形

#### ·非对称特征 (Asymmetric Binary Feature)

- •出现非0值才重要的特征,其状态的结果不是同等重要
- •只有非0值才重要的二元特征称为非对称二元特征
- •例:体检结果阳性(1)与阴性(0),大部分情况下该属性都为0,因此我们一般只关注属性为1的情况,所以这个就是非对称的二元特征(属性)。

## 数据质量的重要性

- 在样本小于10000的情况下,保证数据标注的一致性,可以提升效果。达到相同的效果,需要的数据量也会减少。
- 无法获得更多数据的时候,提高数据质量至关重要。
- 清洗脏数据与扩大一倍数据集带来的提升效果相当。
- 大部分的情况,训练数据都在10000条以下(小数据)。提升数据 质量带来的效果提升比大数据集更明显
- 即使像网络搜索、自动驾驶和推荐系统这些大数据任务,其中有很多的长尾事件其实也是小数据问题。

## 数据的质量的重要性

- 调优模型的效果提升<调优数据质量的效果提升
- 调优数据比调优模型更有效

### Example: Clean vs. noisy data



Note: Big data problems where there's a long tail of rare events in the input (web search, self-driving cars, recommender systems) are also small data problems.

#### 数据的质量的重要性

- 好的数据是指:
- 标签定义的一致性: (定义标签y是不清晰的)
- 覆盖所有的代表性案例: (对输入x的覆盖面)
- 生产环境数据分布变化的及时反馈(分布覆盖数据漂移和概念漂移)
- 合适的数据集大小

## 样本的相似性和相异性

参考:《数据挖掘导论》(第2版),陈封能等著,段磊等译,机械工业出版社,2019,第2章

## 样本相似性和相异性

•相似度和相异度的基本概念

•相异度 (距离(Distances))

•相似度 (Similarities)

•相关性 (Correlation)

## 相似度和相异度的度量

- •相似度 (similarity)
  - 两个样本相似程度的数值化度量
  - 两个样本越相似,他们之间的相似性就越高
  - •相似度是非负的,通常取值范围在[0,1]
- •相异度 (dissimilarity)
  - 两个样本之间差异程度的数值化度量
  - 两个样本越相似,他们之间的相异性越低
  - 相异度是非负的,取值在[0,1]和[0,∞)均有
- ·通常术语距离 (distance) 用作相异度的同义词

## 数据相似性和相异性

•相似度和相异度的基本概念

·距 离 (Distances)

•相似性 (Similarities)

•相关性 (Correlation)

#### 简单属性(单一特征)的相似度和相异度

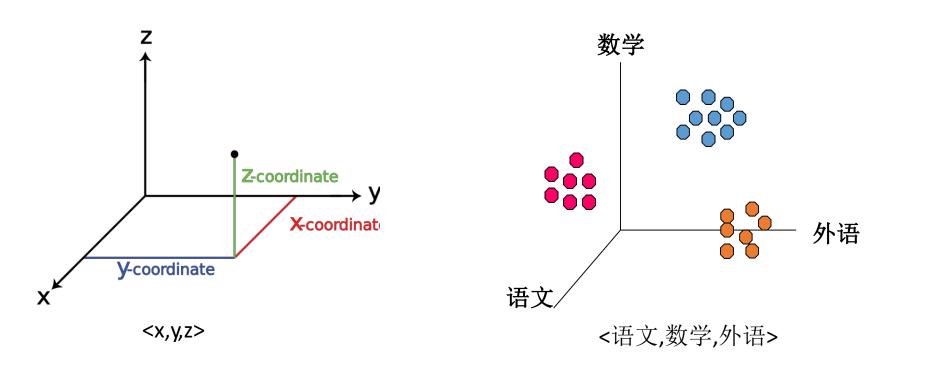
#### • x 和 y 分别对应两个样本的某一个属性值

#### 常用简单属性的相似度和相异度

| 属性类型   | 相异度   | 相似度  |
|--------|---|--|
| 标称的    | $d = \begin{cases} 0 & \text{如果 } x = y \\ 1 & \text{如果 } x \neq y \end{cases}$ | $s = \begin{cases} 1 & \text{如果 } x = y \\ 0 & \text{如果 } x \neq y \end{cases}$                |
| 序数的    | $d = \frac{\left  x - y \right }{(n-1)}$ 值映射到整数 0 到 $n-1$ ,其中 $n$ 是值的个数         | s=1-d  |
| 区间或比率的 | d =  x - y  | $s = -d, s = \frac{1}{1+d}, s = e^{-d},$<br>$s = 1 - \frac{d - \min_{d}}{\max_{d} - \min_{d}}$ |

#### 坐标系与维度

- 在真实空间的坐标系下,空间中每一个点都可以表达为 (x, y, z) 的三维向量。
- 类似地,对于数据当中的每一个样本,都可以看作以特征为坐标系的高维空间中的一个点。



#### 欧氏距离 Euclidean Distance

#### • 欧几里德距离

$$d(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \sqrt{\sum_{k=1}^{n} (x_k - y_k)^2}$$

其中n是对象的数据维度(属性的个数), $x_k$ 和  $y_k$ 分别是数据对象 x和 y的第 k个属性。

| 四个点的 | X | 和 | У | 坐标 |
|------|---|---|---|----|
|------|---|---|---|----|

| 点  | x 的坐标 | y 的坐标 |
|----|-------|-------|
| p1 | 0     | 2     |
| p2 | 2     | 0     |
| p3 | 3     | 1     |
| p4 | 5     | 1     |

#### 闵氏距离 Minkowski Distance

#### • 闵可夫斯基距离

• 闵氏距离的欧式距离的一种泛化,欧式距离是闵氏距离的一种 特例

$$d(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \left(\sum_{k=1}^{n} |x_k - y_k|^r\right)^{\left(\frac{1}{r}\right)}$$

其中n是对象的数据维度(属性的个数), $x_k$ 和  $y_k$ 分别是数据对象 x和 y的第 k个属性。



闵可夫斯基 1864-1909

#### 闵氏距离 Minkowski Distance

$$d(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \left(\sum_{k=1}^{n} |x_k - y_k|^r\right)^{\frac{1}{r}}$$

•r=1, 曼哈顿距离, L1范数, L1-norm

$$d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_1 = \sum_{k=1} |x_k - y_k|$$

•r=2, 欧氏距离, L2范数, L2-norm

$$d(x, y) = ||x - y||_2 = \sqrt{\sum_{k=1}^{n} |x_k - y_k|^2}$$

- •r=∞,上确界距离,∞**范数,L-norm** 
  - •对象各个属性之间的最大距离,即上确界。

$$d(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}\|_{\infty} = \lim_{r \to \infty} \left( \sum_{k=1}^{n} |x_k - y_k|^r \right)^{\frac{1}{r}}$$

#### 距离的典型特性

- •距离(如欧几里得距离)满足以下三个特性:
  - **1. 非负性:** 对于任意 p 和 q, 存在  $d(p,q) \ge 0$ ; 当且仅 当 p = q 时 d(p,q) = 0.
  - **2.** 对称性: 对于任意 p 和 q , d(p,q) = d(q,p).
  - 3. 三角不等式: 对于任意 p, q和 r, d(p, r) ≤ d(p, q) + d(q, r).
  - •其中 d(p,q) 是 p 和 q 之间的距离。
- •满足上述三个特性的距离也成为一种度量 (metric)

#### 数据相似性

•相似度和相异度的基本概念

•距 离 (Distances)

·相似性 (Similarities)

•相关性 (Correlation)

#### 数据对象之间的相似度性质

如果 s(x, y) 是数据点 x 和 y 之间的相似度

- 1) 仅当 x = y 时 s(x, y) = 1。(0 $\leq s \leq 1$ )(非负性)
- 2) 对于所有 x 和 y, s(x, y) = s(y, x)。(对称性)

#### 二元数据的相似度度量

• 对两个二元向量 x 和  $y \in \mathbb{R}^n$ ,值取0或1,两个对象的比较可以生成如下的四个量:

 $f_{01}=x$  取 0 且 y 取 1 的属性数, $f_{10}=x$  取 1 且 y 取 0 的属性数, $f_{00}=x$  取 0 且 y 取 0 的属性数, $f_{11}=x$  取 1 且 y 取 1 的属性数

• 简单匹配系数 (Simple Matching Coefficient, SMC) 定义如下: SMC = 值匹配的属性个数 / 属性个数

$$= (f_{11} + f_{00}) / (f_{01} + f_{10} + f_{11} + f_{00})$$

- SMC通常在0和1之间取值,0代表对象一点也不相似,1代表对象完全相同。 SMC对出现和不出现的都计数,因此,SMC对仅包含是非题的测验中发现问题回答相似的学生。
- 如果样本的属性都是对称的二值离散型属性,则样本间的距离可用简单匹配系数计算。
- **对称的二值离散型属性是指属性取值为1或者0同等重要**,例如:性别就是一个对称的二值离散型属性,即:用1表示男性,用0表示女性;或者用0表示男性,用1表示女性是等价的,属性的两个取值没有主次之分。

#### 二元数据的相似度度量-Jaccard 系数(非对称的二元属性的对象)

• Jaccard 系数

- •如果每个非对称的二元属性对应于商店的一种商品,则1表示该商品被购买,0表示该商品未被购买。由于未被顾客购买的商品数远大于被购买的商品数,因此,简单匹配系数(SMC)会判定所有的事务都是类似的。Jaccard值越大说明相似度越高。
- Jaccard系数来处理仅包含非对称的二值离散型属性。不对称的二值离散型属性是指属性取值为1或者0不是同等重要,例如:是否是癌症的结果,因此通常用1来表示阳性结果,而用0来表示阴性结果。

#### 二元数据的相似度度量

•SMC和Jaccard系数

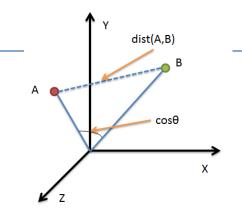
$$x = (1\ 0\ 0\ 0\ 0\ 0\ 0\ 0\ 0)$$
  
 $y = (0\ 0\ 0\ 0\ 0\ 0\ 1\ 0\ 0\ 1)$   
SMC = (F11 + F00) / (F01 + F10 + F11 + F00)  
= (0+7) / (2+1+0+7) = 0.7  
 $J = (F_{11}) / (F_{01} + F_{10} + F_{11}) = 0 / (2+1+0) = 0$ 

- 当你和你的朋友在商场相遇时,你会不会说:
  - "咱俩真是有猿粪!商场里面的上万种商品,咱们基本上都没有买。"

#### 余弦相似度 Cosine Similarity

如果x和y是两个文档向量,则

$$\cos(x,y) = \frac{\langle x,y \rangle}{\|x\| \|y\|} = \frac{\langle x'y \rangle}{\|x\| \|y\|'}$$



其中'表示向量或者矩阵的转置,< x,y>表示两个向量的内积:

$$\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle = \sum_{k=1}^{n} x_k y_k = \boldsymbol{x}^T \boldsymbol{y}$$

且
$$\|x\|$$
是向量 $x$ 的长度, $\|x\| = \sqrt{\sum_{k=1}^n x_k^2} = \sqrt{\langle x, x \rangle} = \sqrt{x'x}$ 。

- 在向量的点积当中,0-0匹配是没有贡献的,因此,**余弦相似度和Jaccard 系数一样,适用于非对称属性**。同时,余弦相似度**还可以处理非二元向**量。
- 欧式距离衡量空间点的直线距离,余弦距离衡量点在空间的方向差异。

#### 余弦相似度 Cosine Similarity

#### •Example:

$$d_1 = 3205000200$$
  
 $d_2 = 1000000102$ 

$$d_1 \bullet d_2 = 3*1 + 2*0 + 0*0 + 5*0 + 0*0 + 0*0 + 0*0 + 2*1 + 0*0 + 0*2 = 5$$
  
 $||d_1|| = (3*3+2*2+0*0+5*5+0*0+0*0+0*0+2*2+0*0+0*0)^{0.5} = (42)^{0.5} = 6.481$   
 $||d_2|| = (1*1+0*0+0*0+0*0+0*0+0*0+1*1+0*0+2*2)^{0.5} = (6)^{0.5} = 2.245$ 

$$\cos(d_1, d_2) = 0.3150$$

#### 数据相似性

•相似度和相异度的基本概念

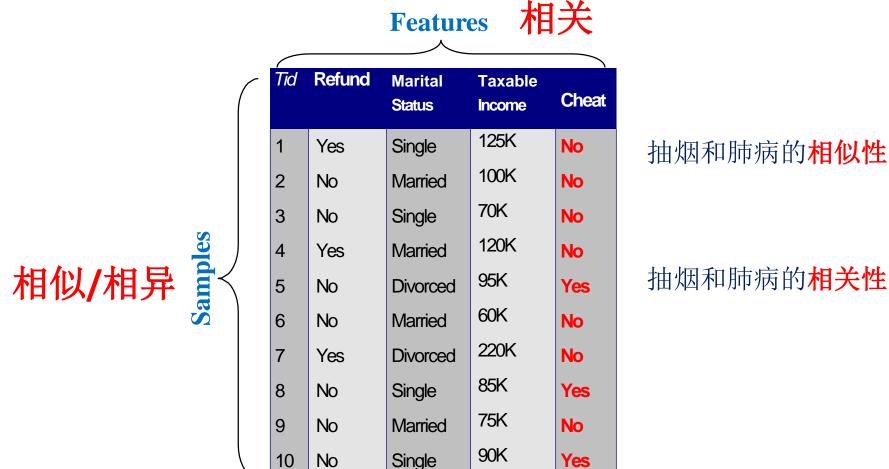
•距 离 (Distances)

•相似性 (Similarities)

·相关性 (Correlation)

#### 相关性 Correlation

- 相关性被用于测量两个变量(高度和重量)之间或两个对象之间的 关系
- 若两个数据对象中的值来自不同的属性,可使用**相关性来度量 属性之间的相似度**



#### 相关性 Correlation

#### •皮尔森相关系数 Pearson's Correlation

• 度量两个变量之间的线性相关性

$$corr(x, y) = \frac{covariance(x, y)}{standard\_deviation(x) \times standard\_deviation(y)} = \frac{s_{xy}}{s_x s_y}$$

#### 协方差与标准差之比

$$\operatorname{covariance}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = s_{xy} = \frac{1}{n-1} \sum_{k=1}^{n} (x_k - \overline{x})(y_k - \overline{y})$$

$$\operatorname{standard\_deviation}(\boldsymbol{x}) = s_x = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{k=1}^{n} (x_k - \overline{x})^2}$$

$$\operatorname{standard\_deviation}(\boldsymbol{y}) = s_y = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{k=1}^{n} (y_k - \overline{y})^2}$$

$$\overline{x} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} x_k \not \in \boldsymbol{x} \text{ 的均值} \qquad \overline{y} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} y_k \not \in \boldsymbol{y} \text{ 的均值}$$

#### 皮尔森系数的局限性

• 对于非线性的相关性难以建模

- Mean(X) = 0, Mean(Y) = 4
- 皮尔森相关系数 Correlation

$$= (-3)(5) + (-2)(0) + (-1)(-3) + (0)(-4) + (1)(-3) + (2)(0) + 3(5)$$

$$= -15 + 0 + 3 + 0 - 3 + 0 + 15$$

= 0 (即相关度为0)