資料探勘:

概念與技術

一第二章一

第二章: 資料前處理

- 為何要資料前處理?
- 敘述資料彙總
- 資料清除
- ■資料整合與轉換
- 資料縮減
- 離散化與產生概念階層
- 終結

為何要資料前處理?

- 真實世界的資料是不乾淨
 - 不完整:缺少屬性值或某些有興趣的屬性或僅包 含聚合資料
 - 例, 職業=""
 - 有雜訊:包含錯誤或離異值
 - 例, 薪資="-10"
 - 不一致:進行商品分類時部門代碼的差異
 - 例., 年齡="42" 生日="03/07/1997"
 - 例., 過去分類 "1,2,3", 現在分類 "A, B, C"
 - 例., 重複紀錄的不一致

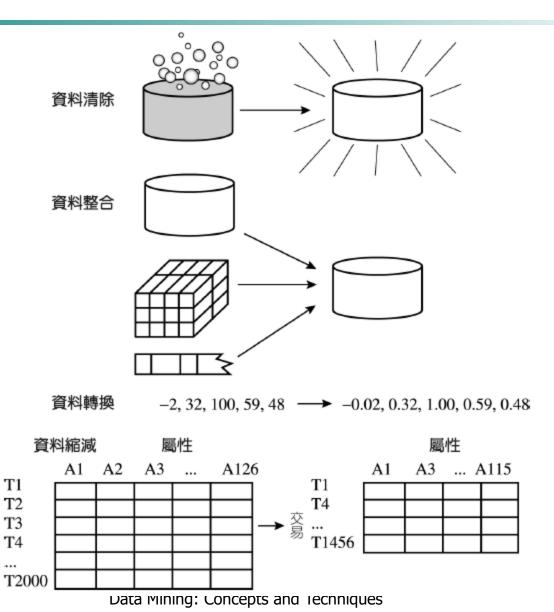
為什麼資料是不乾淨?

- 不完整來自
 - 輸入的時候認為它是不重要的項目
 - 相關資料由於誤解或設備故障沒有被記錄下來
 - 歷史資料的紀錄或修改並未仔細檢查
- 雜訊來自 (不正確值)來自
 - 資料收集工具的錯誤
 - 資料輸入時人為或電腦錯誤
 - 資料傳輸錯誤
- 不一致來自
 - 不同資料來源
 - 違反功能相依 (例, 修改一些連結資料)
- 重複紀錄需要資料清除

資料前處理主要工作

- 資料清除
 - 代入遺失值、將雜訊平滑化、找出且移除離異值、並解決不一致
- 資料整合
 - 整合許多資料庫、資料方塊或檔案
- 資料轉換
 - 正規化與聚合
- 資料縮減
 - 降低資料集的大小並能獲得相同的分析結果
- 資料離散化
 - 資料縮減一部分,但是對數值資料特別重要

資料前處理型式



交易

第二章: 資料前處理

- 為何要資料前處理?
- 敘述資料彙總
- 資料清除
- 資料整合與轉換
- 資料縮減
- 離散化與產生概念階層
- 約割約

衡量主要傾向

■ 均值(代數式度量)(樣本或族群):

$$\overline{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i \quad \mu = \frac{\sum x}{N}$$

■ 權重均值:

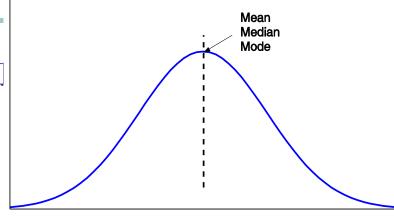
$$\overline{x} = \frac{\sum_{i=1}^{n} w_i x_i}{\sum_{i=1}^{n} w_i}$$

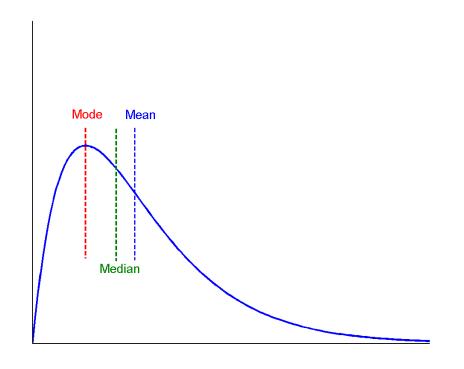
- 刪除均值: 刪除極值
- 中值:整體度量
 - 如果數值個數為奇數則中值為所有數字的中值, 反之則為最中間的兩個數字平均
 - 由內插法來預估(群組資料): $median = L_1 + (\frac{n/2 (\sum f)l}{f_{median}})c$
- 模式
 - ■出現最頻繁的值
 - 單一模式,雙模式,三模式
 - 實證公式:

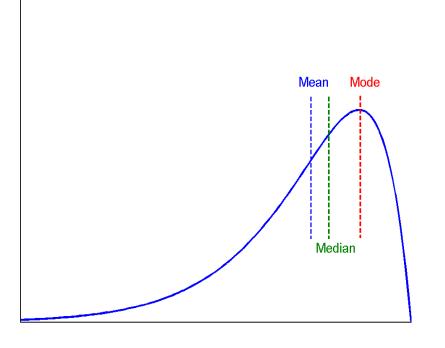
 $mean - mode = 3 \times (mean - median)$

對稱 與 偏斜資料

■ 對稱中值,均值與模式,正向與負向 偏斜資料







衡量資料分佈程度

- 四分位數,離異值與盒狀圖
 - 四分位數: Q₁ (第25個百分位數), Q₃ (第75個百分位數)
 - 四分位距: IQR = Q₃ Q₁
 - 五個數字彙總: min, Q₁, M, Q₃, max
 - 盒狀圖:盒子的兩邊為四分位數,盒子中的一條線代表中值,盒子外的兩條線 (whiskers, 鬚晶) 延伸至觀察最小與最大值,離異觀察值單獨被畫出
 - 離異值: 高/低超過 1.5 x IQR
- 變異數與標準差 (樣本: s, 族群: σ)
 - 變異數: (代數, 可度量計算)

$$s^{2} = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (x_{i} - \bar{x})^{2} = \frac{1}{n-1} \left[\sum_{i=1}^{n} x_{i}^{2} - \frac{1}{n} (\sum_{i=1}^{n} x_{i})^{2} \right] \qquad \sigma^{2} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{n} (x_{i} - \mu)^{2} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{n} x_{i}^{2} - \mu^{2}$$

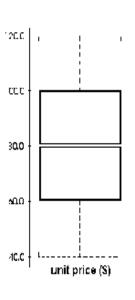
■ 標準差 s (or σ) 變異數 s² (or σ²) 平方根

盒狀圖分析

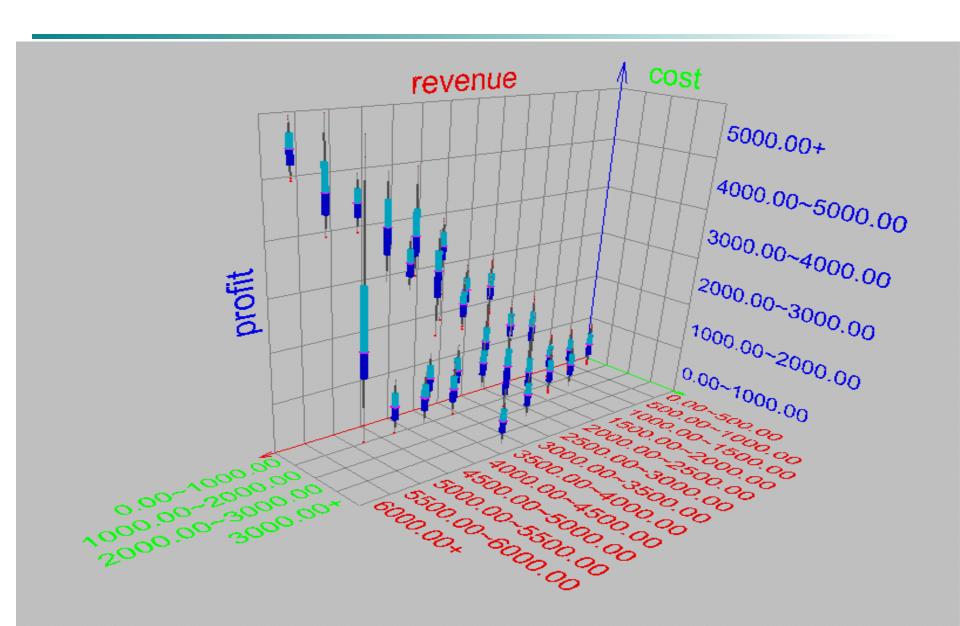
■ 五個數字彙總:

Minimum, Q1, M, Q3, Maximum

- 盒狀圖
 - 資料用盒狀表示
 - 盒子的兩邊為第一與第三個四分位數,盒子的長 度為四分位距
 - 盒子中的一條線代表中值
 - 盒子外的兩條線 (whiskers, 鬚晶) 延伸至觀察最小 與最大值

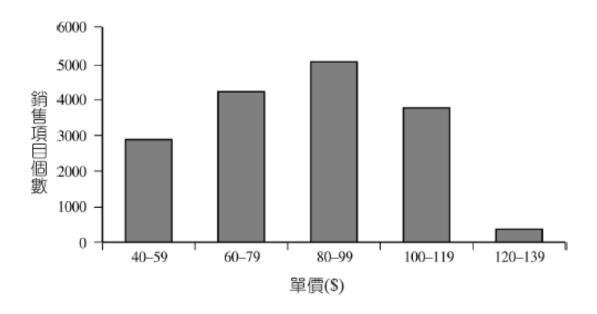


資料分布視覺化: 盒狀圖分析



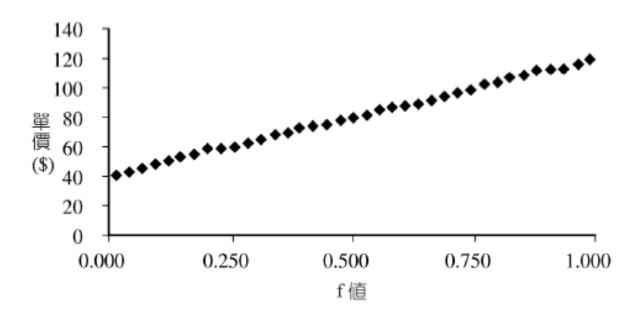
直方圖分析

- 基本統計類別敘述的圖示
 - 頻率直方圖
 - 單變量圖示方法
 - 儲存區以長方形表示,長方形的高度代表包含在儲存區的資料值的個數或相對頻率



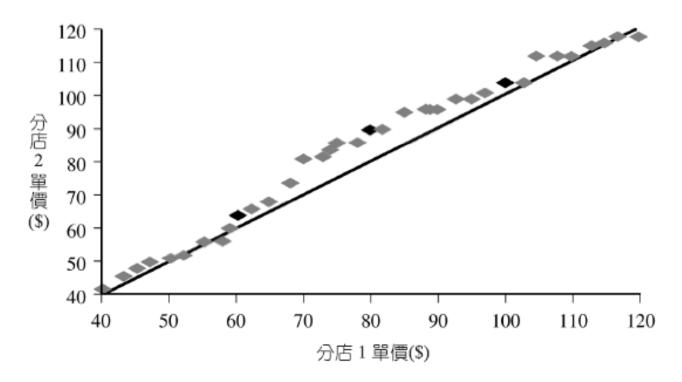
量分位圖

- 顯示特定屬性的所有資料 (允許使用者評估全部行為與不尋常出現)
 - 繪製量分位訊息
 - 將資料 x_i 遞增排序, f_i 表示有100% f的資料是低於 x_i 或與 x_i 相等



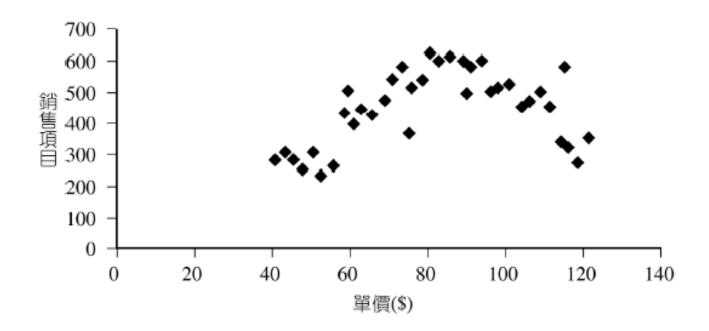
量分位-量分位圖(Q-Q)

- 將一個單變量的量分位與另一個相對應的量分位透過繪圖 來進行比對
- 檢視資料從一個分佈到另一個分佈是否有位移



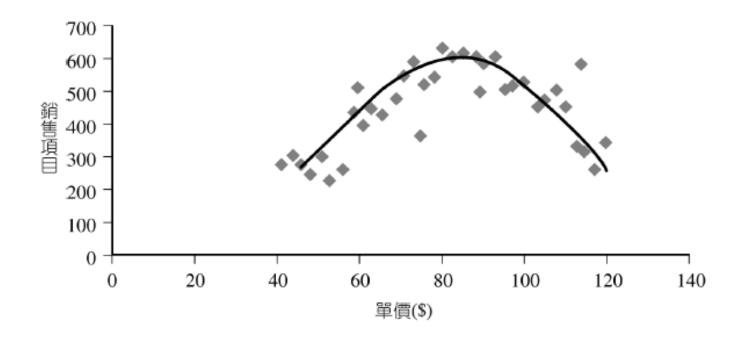
分佈圖

- 决定兩個數值屬性是否顯示一個關係、樣式或趨勢
- 每一對的屬性值視為代數座標,並將這些座標點畫在平面 上



區域迴歸曲線

- 在分佈圖中加入一條平滑曲線,以提供樣式相依更好的知覺
- 為了代入區域迴歸曲線,我們需要設定兩個參數:為平滑參數,為代入迴歸式多項式的階次。



第二章: 資料前處理

- 為何要資料前處理?
- 敘述資料彙總
- 資料清除
- 資料整合與轉換
- 資料縮減
- 離散化與產生概念階層
- 約割約

資料清除

- 重要性
 - "資料清除為資料倉儲中三個最大問題之一"—Ralph Kimball
 - "資料清除為資料倉儲首要問題"—DCI survey
- 資料清除工作
 - 填補遺失值
 - 找出利益值並淡化 (平滑) 雜訊
 - 修正資料的不一致
 - 解決資料整合所造成重複

如何處理遺失值?

- 忽略這些值組:通常用於進行判別時值組的類別是遺失的狀況,這個方法不是很有效,除非許多值組的屬性包含遺失值。
- 利用人工方式填入遺失值:非常費時並不實際?
- 自動填入
 - 利用全域常數 (global constant) 填入遺失值:例.,"未知",新類別!
 - 使用屬性均值來填入遺失值
 - 使用相同類別值組的屬性均值: 較聰明方法
 - 使用最有可能的值來填入遺失值:可以透過迴歸、利用貝氏理論的 推論式工具或決策樹推論來決定

如何處理雜訊資料?

- 箱狀法
 - 首先資料先經過排序,然後分成頻率相同箱子
 - 然後進行箱子均值平滑化法,箱子中值平滑化法,箱子邊 界值平滑化法等
- 迴歸
 - 透過將資料對應至函數來進行平滑化
- 分群
 - 偵測並移除離異值
- 整合電腦與人檢驗
 - 利用人檢測有疑問的值 (例., 處理可能離異值)

簡單離散化方法: 箱狀法

- 等寬 (距離) 分割
 - 切割成N個等寬範圍: 均勻格線
 - 如果 A 與 B 為屬性的最低與最高值, 範圍寬度為: W = (B-A)/N.
 - 最直接但是離異值會主導表示
 - 對偏斜資料不能處理很好
- 等深 (頻率) 分割
 - 切割成N個範圍,每個範圍有大約相同樣本數
 - 具好資料量度性
 - 對類別屬性會較難處理

利用箱狀法進行資料平滑化

儲存價格資料(\$): 4, 8, 15, 21, 21, 24, 25, 28, 34

分割成(等頻率)箱子

箱子1:4,8,15

箱子 2:21,21,24

箱子 3:25,28,34

用箱子均值平滑化

箱子1:9,9,9

箱子 2:22,22,22

箱子3:29,29,29

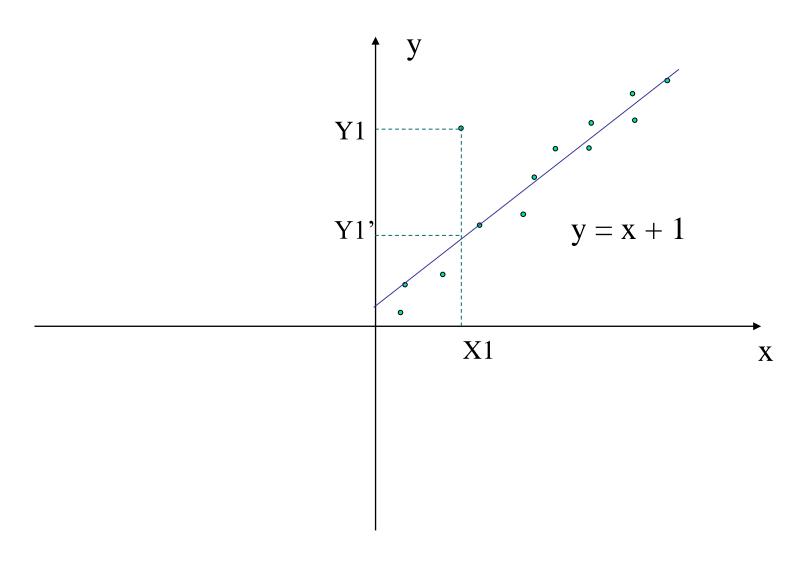
用箱子邊界値平滑化

箱子1:4,4,15

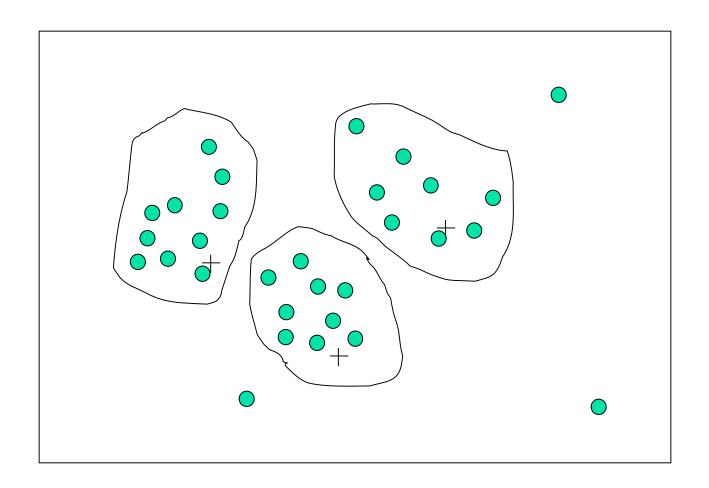
箱子 2:21,21,24

箱子 3:25,25,34

迴歸



分群分析



資料清除過程

- 差異檢測
 - 使用詮釋資料 (例., 範疇, 範圍, 相依, 分佈)
 - 檢查欄位超載(field overloading)
 - 對獨特規則、連續規則與空規則來進行檢視
 - 使用商用工具
 - 資料擦洗:用簡單的範疇知識 (地址的知識或拼字檢查) 來發現錯 設並進行更正
 - 資料稽核工具:透過分析資料來找出規則與關係,並檢查違反條件的資料(例,用統計分析來尋找相互關係,並利用分群來尋找 離異值)
- 資料遷移與整合
 - 資料遷移工具:允許設定簡單轉換
 - ETL (Extraction/Transformation/Loading)工具:允許使用者透過圖形介面設定轉換
- 兩種過程整合
 - 重複與互動 (例., Potter's Wheels)

第二章: 資料前處理

- 為何要資料前處理?
- 敘述資料彙總
- 資料清除
- 資料整合與轉換
- 資料縮減
- 離散化與產生概念階層
- 終結

資料整合

- 資料整合:
 - 將許多來源的資料整合成一個連貫的資料
 - 綱目整合: 例., A.cust-id = B.cust-#
 - 整合不同來源的詮釋資料
- 個體識別問題:
 - 樣對不同資料來源的真實個體進行比對, 例., Bill Clinton = William Clinton
- 發掘並解決資料值衝突問題
 - 真實世界的個體,屬性值會來自不同來源
 - 可能原因: 不同表示, 不同量化, 例., 公制與英制

在資料整合中處理重複問題

- 當整合許多資料庫會導致資料重複
 - 個體識別: 在不同資料庫, 相同屬性或個體會有不同名稱
 - 推論資料: 某個屬性可以從另一個資料表的屬性推論得 之, 例, 年盈餘
- 多餘屬性可以藉由相互關係分析 (correlation analysis) 找出
- 仔細從許多來源整合資料可以降低並避免重複與不一致, 有助於改善探勘的速度與品質

相互關係分析(數值資料)

■ 相互關係係數(皮爾遜積差係數)

$$r_{A,B} = \frac{\sum (A - \overline{A})(B - \overline{B})}{(n-1)\sigma_{A}\sigma_{B}} = \frac{\sum (AB) - n\overline{A}\overline{B}}{(n-1)\sigma_{A}\sigma_{B}}$$

N爲値組個數, a_i 與 b_i 爲屬性A與B在値組i的値, \overline{A} 與 \overline{B} 爲屬性A與B的均値, σ_A 與 σ_B 爲A與B的標準差, $\sum (a_ib_i)$ 爲AB交互乘積 (crossproduct,對每個値組,屬性A的値乘以屬性B的値)的總和。請注意 $-1 \le r_{A,B} \le +1$ 。當 $r_{A,B}$ 大於0表示A與B爲正相關,它表示當A的值增加時B的值也會跟著增加, $\gamma_{A,B}$ 值越高表示兩者關係越強,因此一個很高的值顯示A(或B)是多餘可被移除的。如果 $r_{A,B}$ 值爲0,表示兩者之間爲獨立,兩者之間並沒有任何關係。如果 $r_{A,B}$ 值小於0,則兩者爲負關聯,也就是一個值增加則另一個值就減少,也就是說一個屬性會攔阻另一個屬性。分佈圖也可用於檢視屬性的相互關係

相互關係分析(類別資料)

■ X² (chi-square) 檢定

$$\chi^2 = \sum \frac{(Observed - Expected)^2}{Expected}$$

- X² 值愈大, 變數愈有關聯
- 對X²值有貢獻的儲存格是它的個數與期望個數差異很大
- 相互關係並沒有暗示有因果關係
 - 醫院的個數與代表汽車失竊的個數是相關的
 - 這兩個屬性都與另一個屬性 (人口數) 有因果的連結

Chi-Square 計算: 範例

	Play chess	Not play chess	Sum (row)
Like science fiction	250(90)	200(360)	450
Not like science fiction	50(210)	1000(840)	1050
Sum(col.)	300	1200	1500

X² 計算 (括弧的數字代表期望頻率,由兩個類別的資料分佈計算得之)

$$\chi^2 = \frac{(250 - 90)^2}{90} + \frac{(50 - 210)^2}{210} + \frac{(200 - 360)^2}{360} + \frac{(1000 - 840)^2}{840} = 507.93$$

■ 在這一群組中,它顯示 like_science_fiction 與 play_chess 是相關

資料轉換

- 平滑化:移除雜訊
- 聚合:匯總或建立資料方塊
- 資料一般化! 攀緣概念階層
- 正規化:將屬性資料值轉換到較小的設定範圍
 - min-max 正規化
 - **z-score**正規化
 - 十進位正規化
- 屬性建立
 - 從既有屬性建立新的屬性

資料轉換:正規化

min-max 正規化:轉換至 [new_min_A, new_max_A]

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

- 例. 將收入範圍 \$12,000 to \$98,000 正規化至 [0.0, 1.0]. 則 \$73,000 會對應至 $\frac{73,600-12,000}{98,000-12,000} (1.0-0)+0=0.716$
- Z-score正規化 (μ: 均值, σ: 標準差):

$$v' = \frac{v - \mu_A}{\sigma_A}$$

- 例. 當 $\mu = 54,000$, $\sigma = 16,000$. 則 $\frac{73,600-54,000}{16,000} = 1.225$
- 十進位正規化

第二章: 資料前處理

- 為何要資料前處理?
- 敘述資料彙總
- 資料清除
- 資料整合與轉換
- 資料縮減
- 離散化與產生概念階層
- 約割約

資料縮減策略

- 為何要資料縮減?
 - 資料倉儲中選擇進行分析的資料極為龐大
 - 複雜的資料分析與探勘龐大的資料會花費很長的時間
- 資料縮減
 - 希望獲得一個比原始資料小很多的縮減資料集,並且它幾乎能保持原始資料的完整性
- 資料縮減策略
 - 資料方塊聚合
 - 子屬性集選擇,例.移除不重要屬性
 - 維度縮減
 - 數值縮減 例 , 將資料帶入模型
 - 離散化或概念階層建立

資料方塊聚合

- 資料方塊最底層 (基礎長方體)
 - 有趣個體的聚合資料
- 資料方塊多層聚合
 - 進一步降低要處理資料的大小
- 參照適當層次
 - 使用足以處理問題的最小表示
- 相關於聚合的查詢, 儘可能使用資料方塊

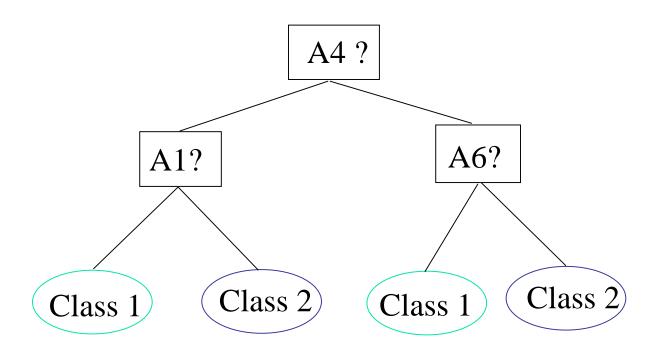
子屬性集選擇

- 屬性選擇 (例.,屬性子集合選擇):
 - 希望找到最小的屬性集,並且這個最小的屬性集的結果要 與使用全部屬性集的結果盡量接近
 - 降低探勘樣式屬性的數目,這樣會讓探勘的樣式更容易被 了解
- 啟發式 (由於有冪次方數目的選擇):
 - 逐步向前選擇
 - 逐步向後刪除
 - 向前選擇與向後刪除的組合
 - 決策樹歸納

決策樹歸納範例

起始屬性集:

{A1, A2, A3, A4, A5, A6}

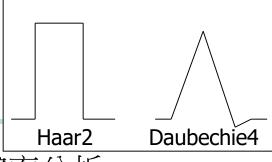


-----> 縮減屬性集: {A1, A4, A6}

啟發式屬性選擇方法

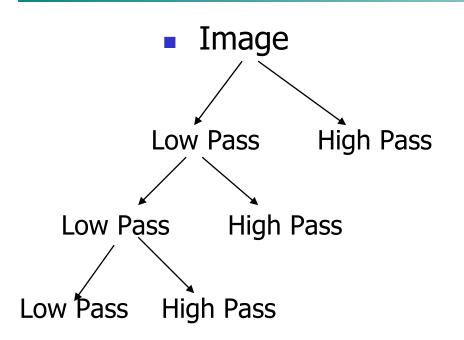
- 在d個屬性中有 2^d 種可能得子屬性集
- 許多啟發式屬性選擇方法:
 - 經由屬性獨立假設找出最好屬性:透過顯著性檢定進行 選取
 - 最佳逐步屬性選取:
 - ■首先選擇最佳屬性
 - 在第一個屬性條件下選擇次佳屬性,...
 - 最佳逐步屬性刪除:
 - ■重複刪除最差屬性
 - ■最佳選擇與刪除的組合
 - 最佳分枝與界限:
 - 使用屬性移除與退卻

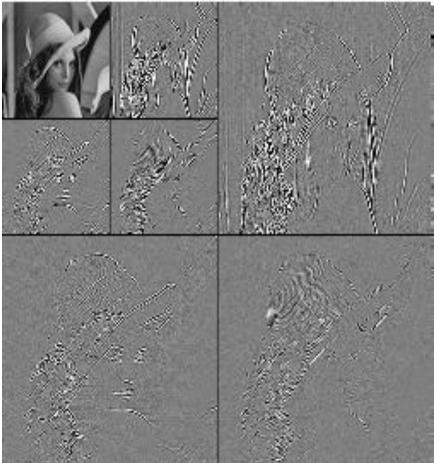
維度縮減:小波轉換



- 離散小波轉換(DWT): 線性訊號處理, 多分辨率分析
- 壓縮式近似: 僅儲存少量最強的小波係數
- 類似於離散傅立葉轉換(DFT), 但有較好的損耗壓縮與空間 區域化
- 方法:
 - 長度, L, 必須是 2 的正冪次方(可以透過在資料向量加入0來完成)
 - 每個轉換牽涉到兩個函數:平滑化, 差異化
 - 套用至所有 成對資料,進而形成兩組長度為L/2的資料
 - 前一次獲得的資料會遞迴的代入這兩個函數,直到結果資料的長度 為直到達到預設長度

DWT 用於影像壓縮

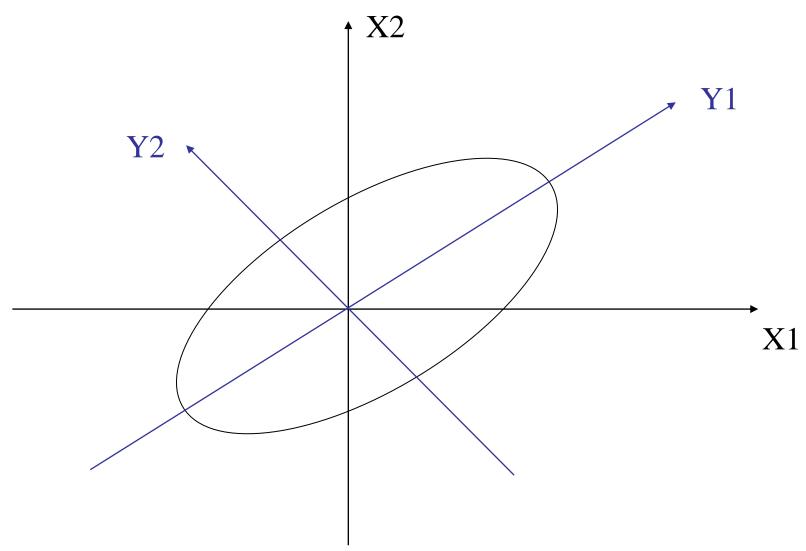




維度縮減: 主成分分析法 (PCA)

- 搜尋最能表示資料的k個維度正交向量 $, k \le n$
- ▶ 步驟
 - 輸入資料進行正規化: Each attribute falls within the same range
 - 計算k個正交向量, 也就是主成分
 - 輸入資料為主要成分的線性組合
 - 主要成分按照顯著性遞減排序
 - 因為成分按照顯著性遞減排序,所以透過移除較弱的成分就可以達 到資料縮減的目的。使用最強的主成分,它應該足以近似於原始資 料
- 僅適用於數值資料
- 當維度個數很大時使用

主成分分析



數值縮減

- 透過比較小的資料表示形式來表示縮減的資料
- 參數式方法
 - 一個模型會被用於估計原始資料,因此我們只需儲存 模型的參數,而不需儲存原始資料(除了可能離異值)
 - 範例: Log-linear 模型— 在m維空間資料點的值可由適 當邊際子空間乘積獲得
- 非參數式方法
 - 不假設模型
 - 主要成員: 值方圖, 分群, 取樣

資料縮減方法(1): 迴歸與對數線性模型

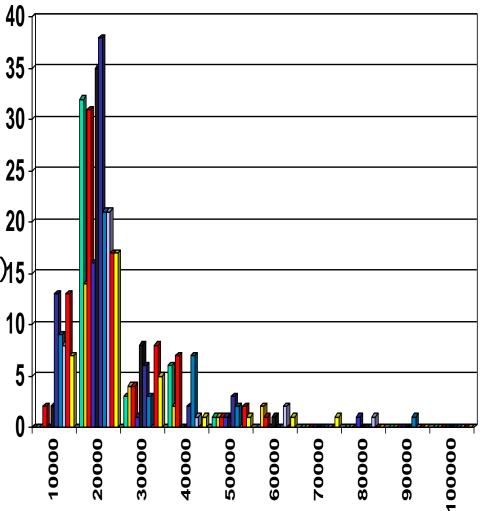
- 線性迴歸:資料被對應至一條直線
 - 通常使用最小平方差的方法
- 多元線性迴歸:顯示利用兩個或兩個以上的預測變數,來 對回應變數設定線性模型
- 對數線性模型:預估離散多維度機率分佈

迴歸分析與對數線性模型

- 線性迴歸: *Y* = *wX* + *b*
 - 兩個迴歸係數w與b用於設定迴歸線, 而這兩個係數是用 現有資料估計得來
 - 對已知的 Y1, Y2, ..., X1, X2, 使用最小平方差條件
- 多元線性迴歸: *Y = b0 + b1 X1 + b2 X2.*
 - 可轉換許多非線性函數
- 對數線性模型:
 - 對一組離散屬性根據最小維度組合的子集合,來估計每一點在多維度空間的機率
 - 機率: $p(a, b, c, d) = \alpha ab \beta ac \chi ad \delta bcd$

資料縮減(2): 直方圖

- 將資料分佈分割成箱子,在每個箱子儲存平均或總合
- 分割規則:
 - 等寬: 每個箱子範圍
 - 等頻率(等深)
 - V-極值:直方圖變異是最小的 (每 ²⁰ 個箱子所代表原始值的權重總和)15
 - MaxDiff:箱子邊界會建立在能產 生β-1的最大箱子差距



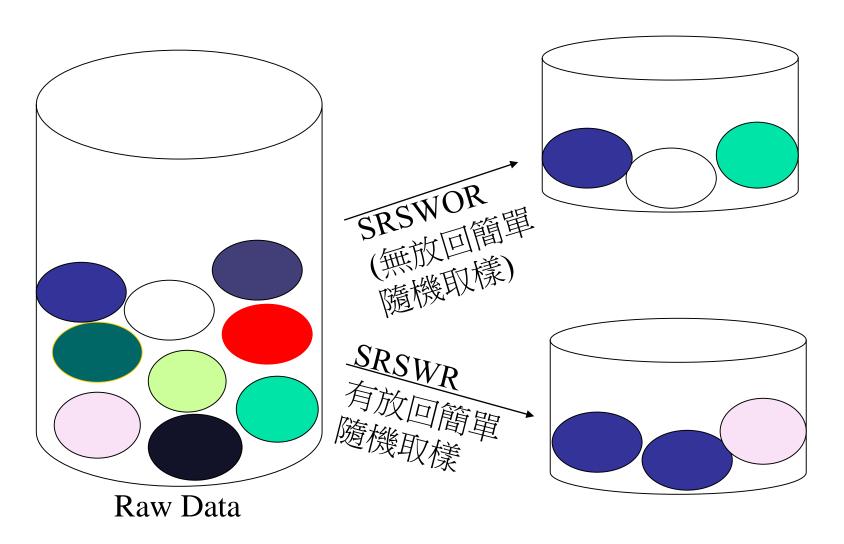
資料縮減(3):分群

- 根據相似度進行分群並儲存群組表示 (例.,中心與直徑)
- 如果資料是可群組會非常有效,但是資料為不乾淨則否
- 可執行階層式分群並將結果存成多維度索引樹架構
- T有許多分群定義與分群運算法則的選擇
- 分群分析會在第七章詳述

資料縮減方法 (4): 取樣

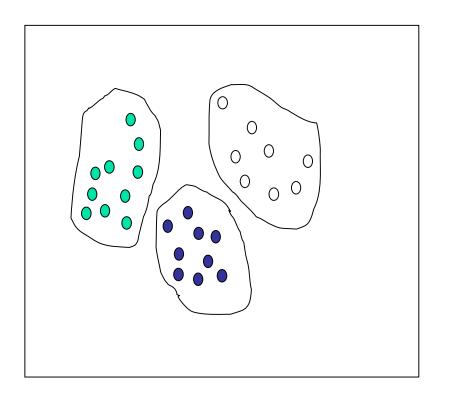
- 取樣:用比較小的原始資料的隨機樣本*s*來代表原始資料 N
- 讓探勘方法的計算的複雜度與資料維度個數成次線性成長
- 選取代表資料的子集合
 - 當資料包含偏斜時,簡單隨機取樣的效能會非常差
- 發展適合取樣方法
 - 分層抽樣:
 - 在所有的資料庫中對每個類別(有興趣的子族群)保留 大約相同的百分比
 - 與偏斜資料一起使用
- 注意: 取樣或許不會降低資料庫 I/Os

取樣: 是否放回

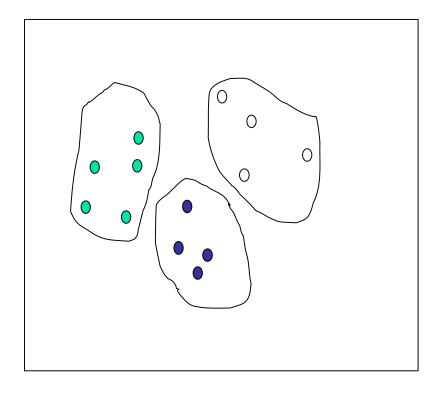


取樣: 分群或分層抽樣

原始資料



分群/分層抽樣



第二章: 資料前處理

- 為何要資料前處理?
- 敘述資料彙總
- 資料清除
- 資料整合與轉換
- 資料縮減
- 離散化與產生概念階層
- 終結

資料離散化與概念階層產生

- ■離散化
 - 將一個連續值屬性的範圍分割成許多區間 (intervals) 來縮減屬性的 值
 - 區間的標籤可以用來取代原始資料值
 - 監督式或無監督式
 - 分割(由上而下)或合併(由下而上)
 - 離散化可以重複地套用在一個屬性
- 概念階層形成
 - 概念階層可以透過用較高層次的概念(如青年、中年、老年)取代較低層次的概念(年齡屬性的值)來進行資料縮減

數值資料的離散化與概念階層的產生

- 典型方法: 所有方法可重複套用
 - 箱狀法
 - 由上而下的分割,無監督式
 - 直方圖分析
 - 由上而下的分割,無監督式
 - 分群分析
 - 可以由上而下的分割或由下而上合併,無監督式
 - 熵式離散化:監督式,由上而下的分割
 - χ^2 分析的區間合併:無監督式,由下而上合併
 - 直覺分割離散法:由上而下的分割,無監督式

熵式離散化

$$I(S,T) = \frac{|S_1|}{|S|} Entropy(S_1) + \frac{|S_2|}{|S|} Entropy(S_2)$$

■ 熵是根據集合中樣本類別分佈計算得之. 假設有 m 類別, S_1 的熵為

$$Entropy(S_1) = -\sum_{i=1}^{m} p_i \log_2(p_i)$$

- p_i 為類別 i 在 S_1 中機率
- 在所有邊界值中,使用能最小化熵函數的邊界值當作二元離散化
- 重複套用分割直到停止條件滿足為止
- 這樣邊界值可以縮減資料大小並改善判別正確性

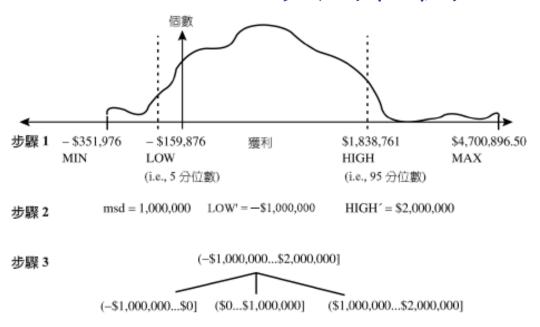
χ^2 分析的區間合併

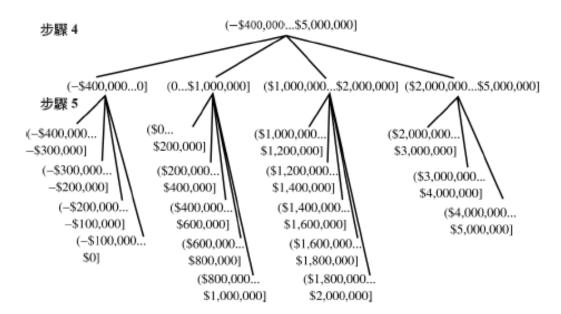
- 合併(由下而上)
- 合併:重複地尋找最好的鄰居區間,然後將它們合併成較大的區間
- ChiMerge [Kerber AAAI 1992, See also Liu et al. DMKD 2002]
 - 一開始每個屬性的不同值A都視為一個區間
 - 對每個相鄰的值進行χ²檢測
 - 擁有最小值χ²的相鄰值會進行合併
 - 合併的過程會重複進行一直到停止條件滿足為止(如顯著程度,最大區間,最大不一致)

直覺分割離散法

- 可用於將數值資料切割成相當均勻、相當自然的區間.
 - 區間包含3, 6, 7或9個不同值,則將範圍分割成3區間
 - 區間包含2,4或8個不同值,則將範圍分割成4個等寬區 間
 - 區間包含1,5或10個不同值,則將範圍分割成5等寬區 間

3-4-5 規則範例





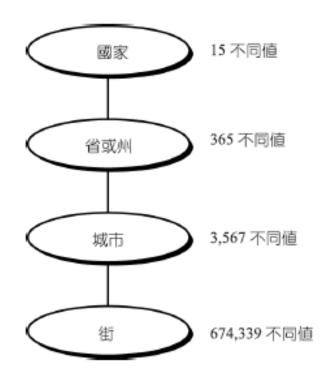
June 2, 2019

類別資料概念階層產生

- 由使用者或專家明確地在綱目層次中設定屬性部分順序
 - 街 < 城市 < 州 < 國家
- 透過明確的資料群組來設定一部分階層
 - {Urbana, Champaign, Chicago} < Illinois</p>
- 僅設定部分屬性
 - 例., 僅有 街 < 城市, 其他沒有
- 概念階層可以根據屬性集中屬性包含的不同值來自動建立
 - 例., 一組屬性: {街, 城市, 州, 國家}

自動產生概念階層

- 概念階層可以根據屬性集中屬性包含的不同值來自動建立
 - 擁有最多不同值的屬性會在階層的最下層
 - 例外, 例., 星期, 月, 季, 年



第二章: 資料前處理

- 為何要資料前處理?
- 敘述資料彙總
- 資料清除
- 資料整合與轉換
- 資料縮減
- 離散化與產生概念階層
- ■終結

總結

- 資料前處理對資料倉儲與資料探勘是一項重要的議題
- 敘述資料彙總提供資料前處理分析的基礎
- 資料前處理包含
 - 資料清除與整合
 - 資料縮減與屬性選擇
 - 離散化
- 雖然已經發展許多資料前處理的方法,由於龐大數量不一 致或不乾淨的資料與問題的複雜度,資料前處理仍然是一 個活躍的研究領域