

# 数据科学与工程导论

Introduction to Data Science and Engineering



# 数据科学的数学基础

概率与统计基础

统计建模:线性回归模型

数据分析的工具

矩阵

线性代数

关系代数

概率论

统计

微积分

机器学习基础

数据科学的数学基础

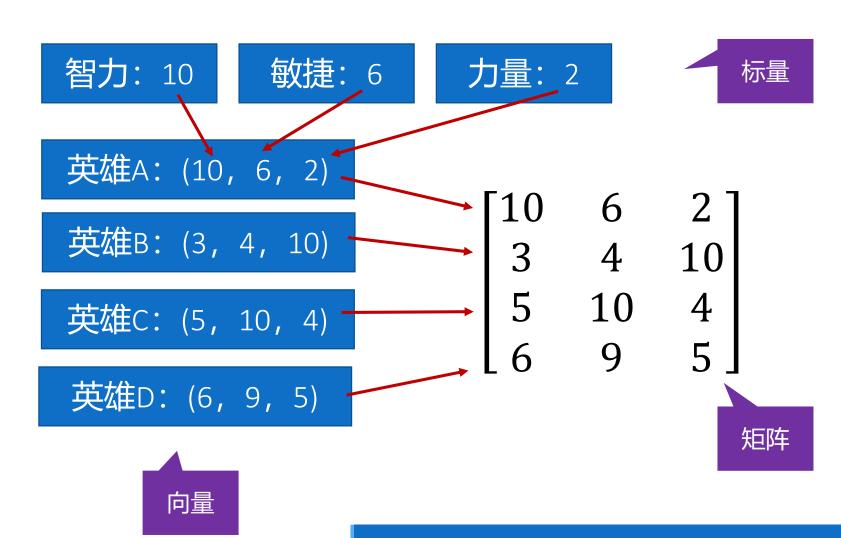
### 10.1 数据科学的数学基础

- 矩阵(Matrix)是一个按照长方阵列排列的复数或实数集合。涉及到的机器学习应用有SVD、PCA、最小二乘法、共轭梯度法等。
- 线性代数是研究向量、向量空间、线性变换等内容的数学分支。向量是线性代数最基本的内容。中学时,数学书告诉我们向量是空间(通常是二维的坐标系)中的一个箭头,它有方向和数值。在数据科学家眼中,向量是有序的数字列表。线性代数是围绕向量加法和乘法展开的。
- 矩阵和线性代数是一体的,矩阵是描述线性代数的参数。它们构成 了数据科学的庞大基石。

# 矩阵和线性代数



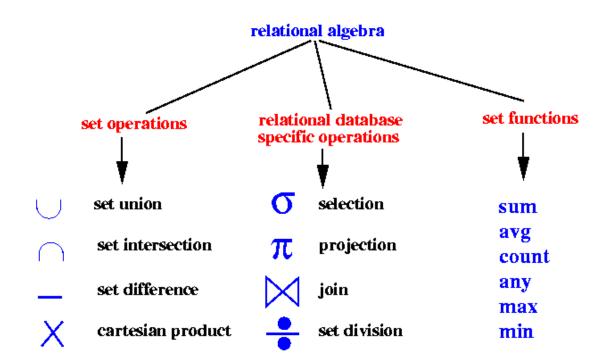




矩阵和线性代数

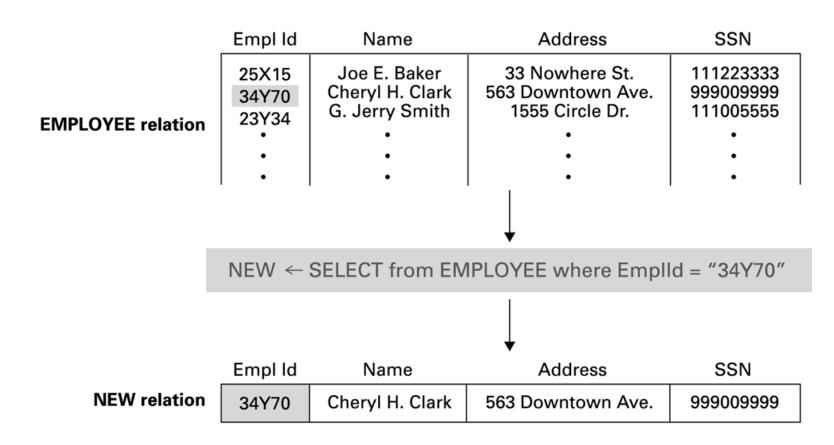
### 10.1 数据科学的数学基础

- 它是一种抽象的查询语言。基本的代数运算有选择、投影、集合并、集合差、笛卡尔积和更名。
- 关系型数据库就是以关系代数为基础,在SQL语言中都能找 到关系代数相应的计算。



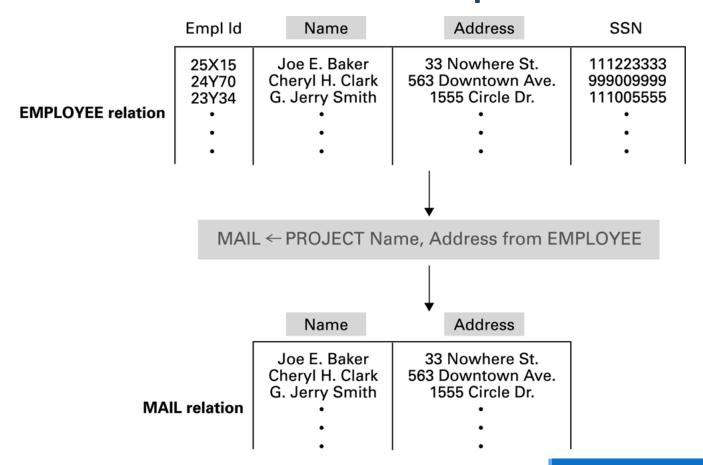


# The SELECT operation



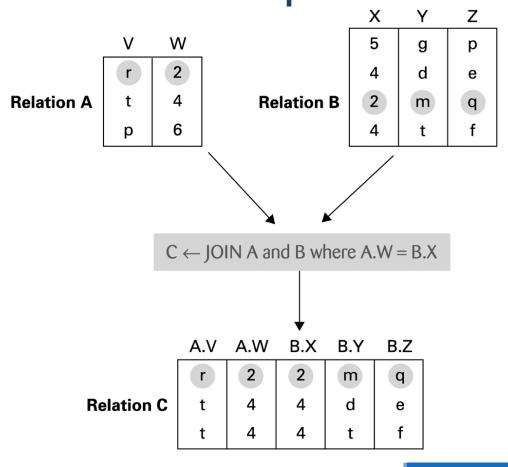


# The PROJECT operation



关系代数

# The JOIN operation



关系代数

### 10.1 数据科学的数学基础

- Bayes Theorem(贝叶斯定理)
- Random Variables(随机变量)
- Cumulative Distribution Function(累计分布函数)
- Continues Distributions(连续分布)
- Probability Density Function(概率密度函数)
- ANOVA(方差分析)
- Central Limit Theorem(中心极限定理)
- Monte Carlo Method(蒙特卡罗方法)
- Hypothesis Testing(假设检验)
- p-Value(P值)
- Estimation (估计)

- Confidence interval(置信区间)
- Maximum Likelihood Estimate(极大似然估计)
- Kernel Density Estimate(核密度估计)
- Regression (回归)
- Covariance(协方差)
- Correlation(相关性)
- Pearson correlation coefficient (Pearson相关系数)
- Causation (因果性)
- Least Squares Fitting(最小二乘法)
- Euclidean Distance(欧氏距离)

# 概率论

- 统计学(Statistics)是通过搜索、整理、分析、描述数据等手段, 以达到推断所测对象的本质,甚至预测对象未来的一门综合性科学。
- 事物的发展充满了不确定性,而统计学,既研究如何从数据中把信息和规律提取出来,找出最优化的方案;也研究如何把数据当中的不确定性量化出来。
- 大数据告知信息但不解释信息。打个比方,大数据是"原油"而不是"汽油",不能被直接拿来使用。
- 大数据时代,统计学是数据分析的灵魂。

# 统计学

### 10.1 数据科学的数学基础

- 起源: 用单个数或者数的小集合捕获可能很大值集的各种特征
  - 频率度量: 众数
  - 位置度量:均值和中位数
  - 散度度量: 极差和方差
  - 数据分布: 频率表、直方图
  - 多元汇总统计: 相关矩阵、协方差矩阵

汇总数据的初衷如公司的组织结构,高层期望看到工作概要,而不是细节

统计学:起源

### 汇总数据指标的设计,源于非常朴素的思想

- 标准差:想设计一个指标,可以用来衡量数据集合的发散性,经过如下思考
  - 每个样本的偏差累加就可以衡量
  - 偏差较大的值应该具有更大的权重
  - 集合中数字越多, 方差越大, 应该与集合大小无关
  - 量纲与原始数据不同,无法比
  - 最终结果, RMSE(均方根误差)

$$\sum (x_i - \widehat{x_i})$$

$$\sum (x_i - \widehat{x_i})^2$$

$$\frac{\sum (x_i - \widehat{x_i})^2}{n}$$

$$\sqrt{\frac{\sum (x_i - \widehat{x_i})^2}{n}}$$

统计学:设计

### 10.1 数据科学的数学基础

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum (x_i - \widehat{x_i})^2}{n}}$$





5次约会,每次迟到10分钟,与一次迟到50分钟,哪个更难接受?

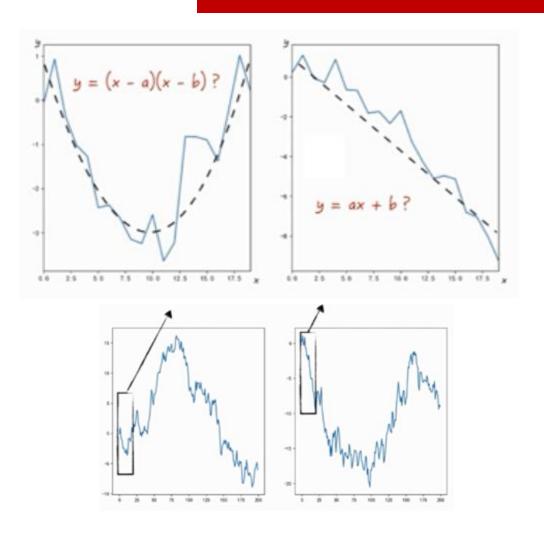
统计学:设计

- 统计分析是基于统计理论,是应用数学的一个分支。在统计理论中, 随机性和不确定性由概率理论建模。统计分析技术可以分为:
  - Descriptive Statistics (描述性统计):解释数据的一些特征;
  - Exploratory Statistics Analysis(探索性统计分析): 开始关注数据的内在规律;
  - Inferential Statistics(推断性统计):怎样用已知数据来进行预测和判断。
- 例如多元统计分析: 回归、因子分析、聚类和判别分析等。

# 统计分析方法

### 10.1 数据科学的数学基础

# 统计学家最关心的问题: 如何避免掉入数据陷阱

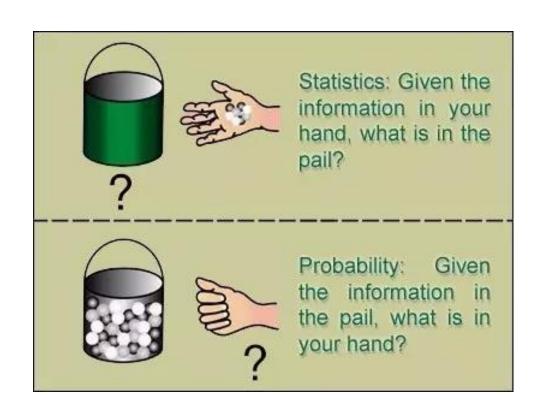




统计:不要过分关注局部

# 统计分析方法

# Probability & Statistics Fair Coin Probability Given model, predict data Statistics Given data, predict model



统计学、概率论与数理统计

# 导数和积分

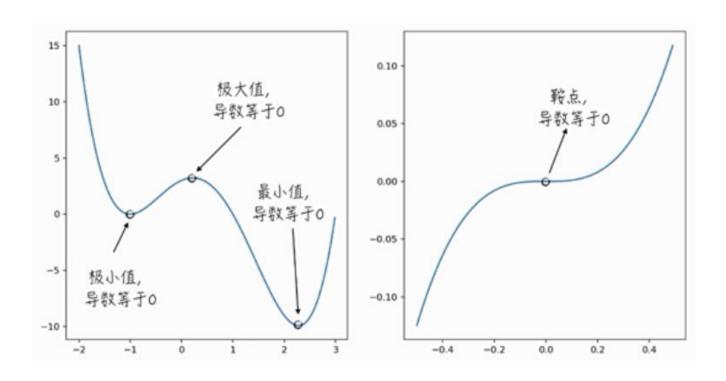
极限: 变化的终点

复合函数

多元函数与偏导数

极值与最值

# 数据科学中, 常常遇到寻求曲线最值点的问题



# 微积分

### 10.1 数据科学的数学基础

- Numerical Variable(数值变量)
  - 数值变量和分量变量
- Supervised Learning(监督学习)
  - 常见于KNN、线性回归、朴素贝叶斯、随机森林等
- Unsupervised Learning(非监督学习)
  - 常见于聚类、隐马尔可夫模型等
- Input space , Output space and Feature space(输入空间、输出空间、和特征空间)
- Training Data and Test Data(训练集和测试集)
- Cross validation (交叉验证)

# 机器学习基础

### 10.1 数据科学的数学基础

- Classifier (分类)
- Prediction (预测)
- Regression (回归)
- Ranking (排序)
- Lift curve (Lift曲线)
- Receiver Operating Characteristic Curve (ROC曲线)
- Overfitting and underfitting(过拟合和欠拟合)
- Bias and Variance(偏差和方差)
- Classification Rate(分类正确率)
- Boosting(提升方法)
- Perceptron (感知机)
- Neural Networks (神经网络)

# 机器学习基础



数据科学的数学基础

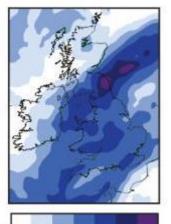
概率与统计基础

统计建模:线性回归模型

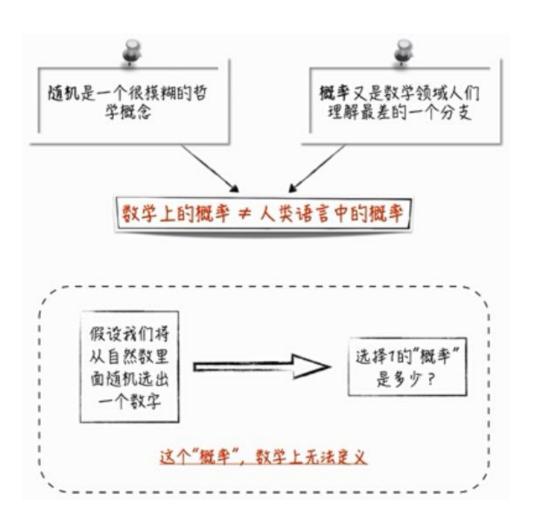
数据分析的工具

- 现实世界里,充满了各种随机事件
  - 彩票中奖、掷骰子的点数
- 概率是用来刻画随机的一种数学工具

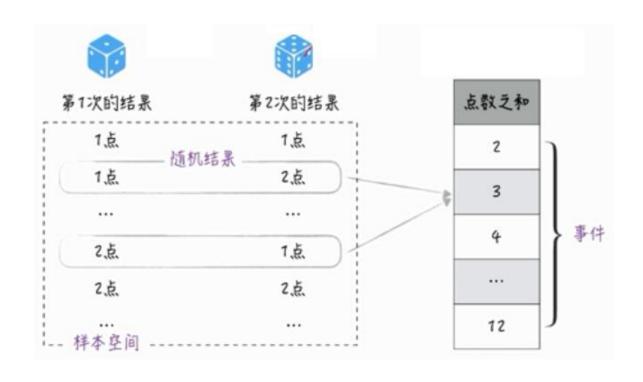




2 5 15 40 70 85 降水概率 (%)



# 什么是概率



### • 在随机结果有限的情况下:

- 定义样本空间S: 所有随机结果 $\omega$ 组成的集合
- 定义概率:满足如下三个条件的,从样本空间到实数的函数

$$P(A) \ge 0$$

$$P(S) = 1$$

$$P\left(\bigcup A_i\right) = \sum P(A_i)$$

# 什么是概率

• 假设一个班中:

	来自重庆	来自其他省份
喜欢吃辣	9	9
不喜欢吃辣	1	81

- 用事件A表示学生来自重庆
- 用事件B表示学生喜欢吃辣

已知某个学生喜欢吃辣,则他来自重庆的概率是多少?

条件概率

	来自重庆	来自其他省份
喜欢吃辣	9	9
不喜欢吃辣	1	81

- 用事件A表示学生来自重庆
- 用事件B表示学生喜欢吃辣

# 已知某个学生喜欢吃辣,则他来自重庆的概率是多少?

$$P(A|B) = \frac{P(A \cap B)}{P(B)} = \frac{9/100}{18/100} = 0.5$$

$$P(A) = 0.1$$



P(A|B) = 0.5

他来自重庆?

他喜欢吃辣。 他来自重庆? 量化信息的价值!

条件概率

• 甲在15:00扔一个骰子

• 乙在15:01扔一个骰子

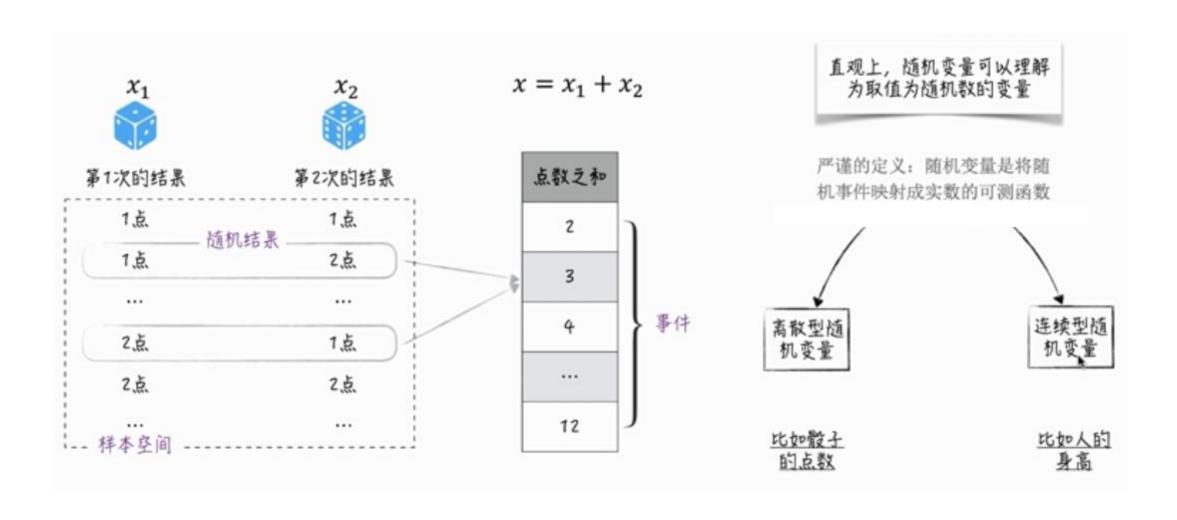
已知甲扔出了2点,则乙扔出5点的概率是多少?

• 甲乙无任何交流联系

乙扔出5点:  $P(B) = \frac{1}{6}$ 

已知甲扔出2点,乙扔出5点:  $P(B|A) = \frac{1}{6}$ 

独立事件



# 随机变量

高散型随 机变量

对于离散型的随机变量,使用概率分布 函数来刻画它

 $P(x_1 = i) = 1/6; i = 1,...,6$ 

连续型随 机变量

对于连续型的随机变量,使用概率密度 函数来刻画它

$$P(a \le x \le b) = \int_a^b f_x(t) dt$$

累积分布函数

期望

方差

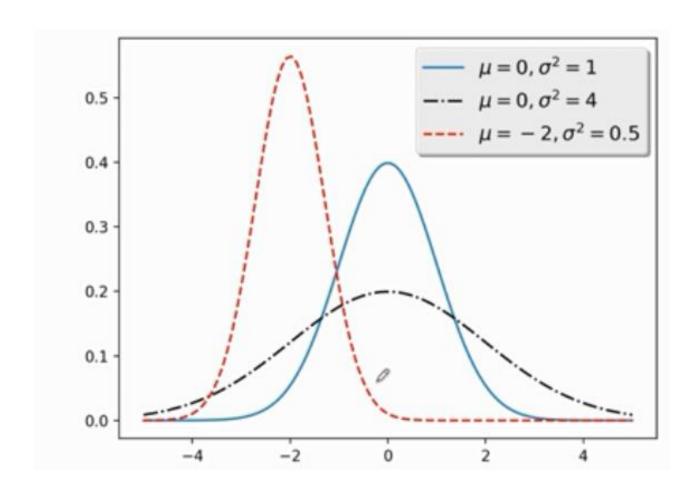
协方差

$$C_x(a) = P(x \le a) \quad E[x] = \sum_i P(x = x_i) x_i \quad Var(x) = E[(x - E[x])^2] \quad Cov(x, y) = E[(x - E[x])(y - E[y])]$$

$$= E[x^2] - (E[x])^2 \qquad = E[xy] - E[x]E[y]$$

# 刻画随机变量的方法

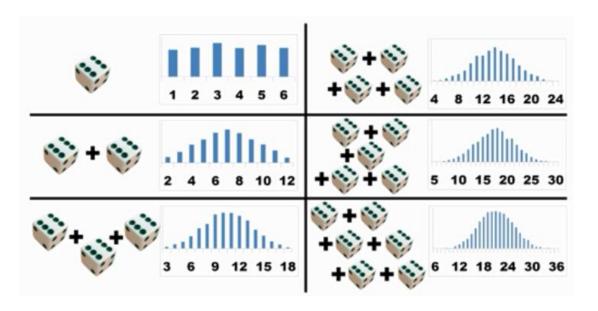
• 正态分布又称高斯分布,是最为重要的一种概率分布



$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{\frac{-(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

# 正态分布

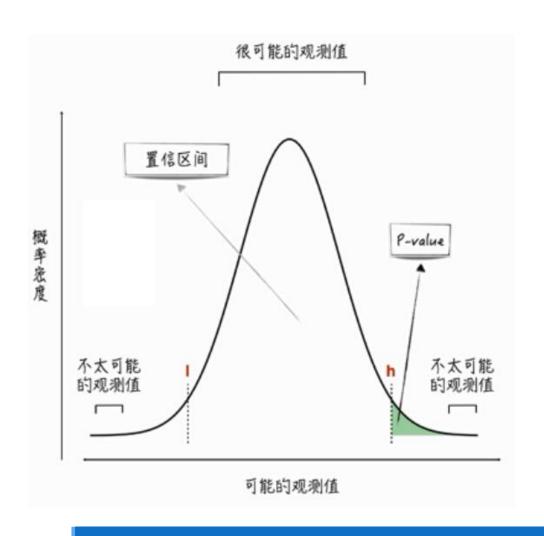
- N个独立同分布的随机变量相叠加,将越来越接近正态分布
- 在实际中,一个随机现象往往是多个随机因素的叠加
- 很多随机现象的分布都可以用正态分布来描述
  - 大学英语考试(College English Test)
  - 高斯板



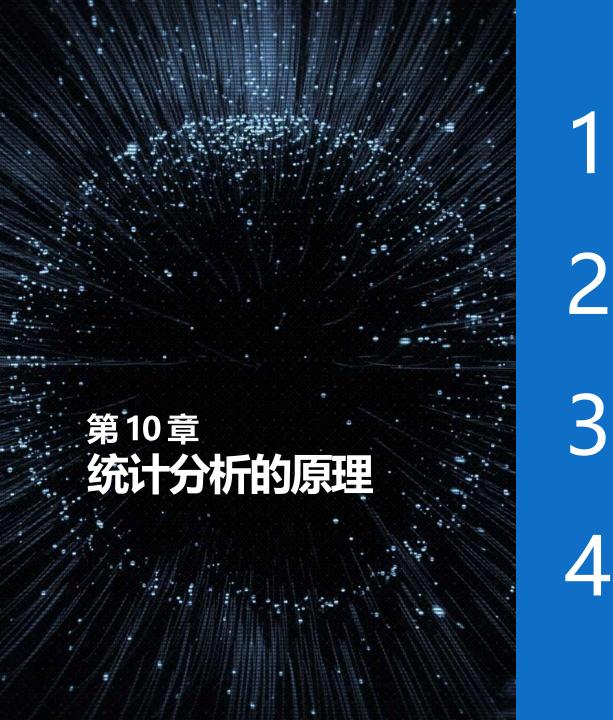
# 中心极限定理

• 置信区间: 概率值等于a, 且以期望为中心的对称区域(在实际中a常等于0.95)

• 对于置信区间的两个边界值,它们的P-value为 $\frac{(1-a)}{2}$ 



# 置信区间



数据科学的数学基础

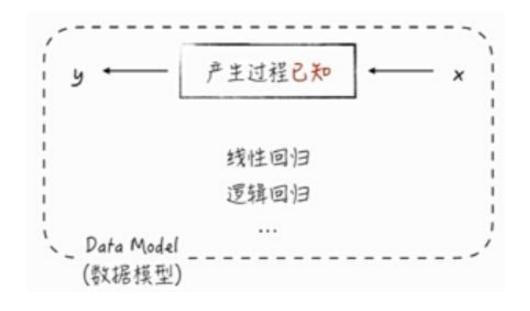
概率与统计基础

统计建模:线性回归模型

数据分析的工具

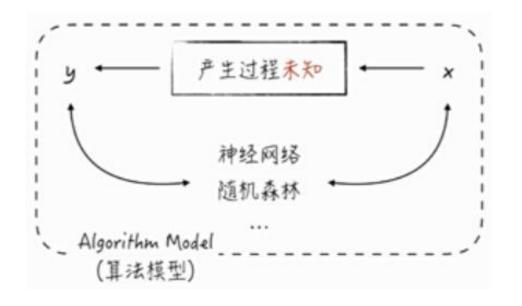
- 注重用数学的方法来搭建模型
  - 理论更加扎实
  - 模型容易理解和控制

### 统计模型

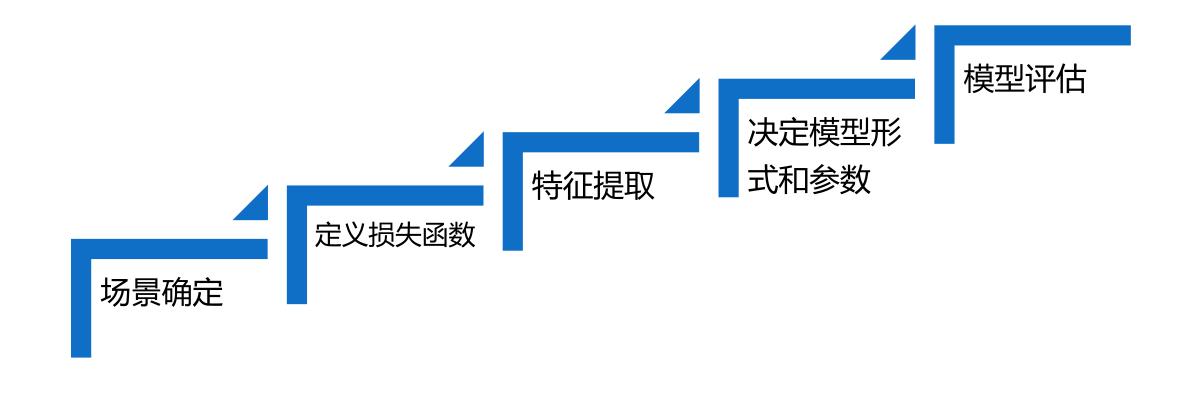


- 注重用工程的方法来搭建模型
  - 可以处理的场景更多
  - 模型的预测效果更好

### 机器学习模型



# 统计模型与机器学习模型



建模五部曲



### 以下是上帝视角

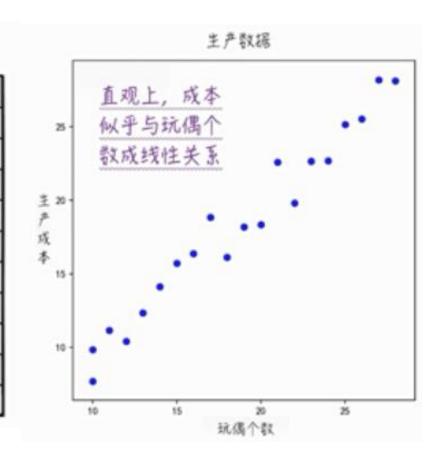
数据由"上帝之手"按如下的数学公式生成:

$$y_i = x_i + \varepsilon_i$$

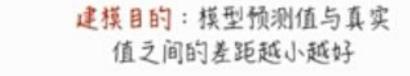
- · 玩偶的单位成本等于1
- $\epsilon_i$  表示生成的随机成本,它服从期望等于0、方差等于1的正态分布
- · 随机成本与玩偶个数相互独立

### 生产记事本

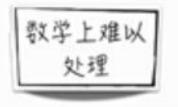
日期	玩偶个数	成本	第几天
04/01	10	7.7	1
04/02	10	9.87	2
04/03	11	10.87	3
04/04	12	12,18	4
04/05	13	11.43	5
04/06	14	13.36	6
04/07	15	15.15	7
04/08	16	16.73	8
04/09	17	17.4	9



# 示例:线性回归

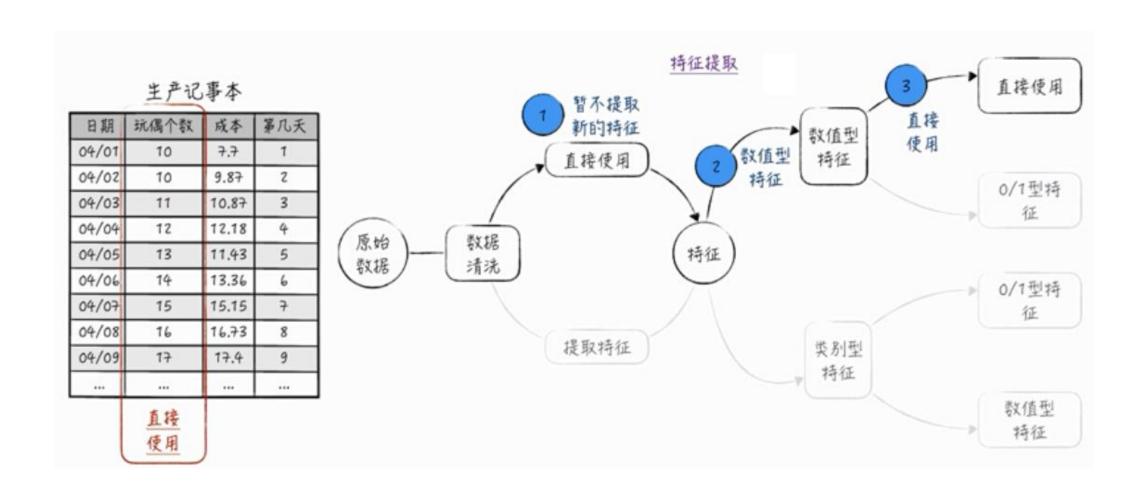


$$L = \sum_i |y_i - \hat{y}_i| \qquad L = \sum_i (y_i - \hat{y}_i)^2$$

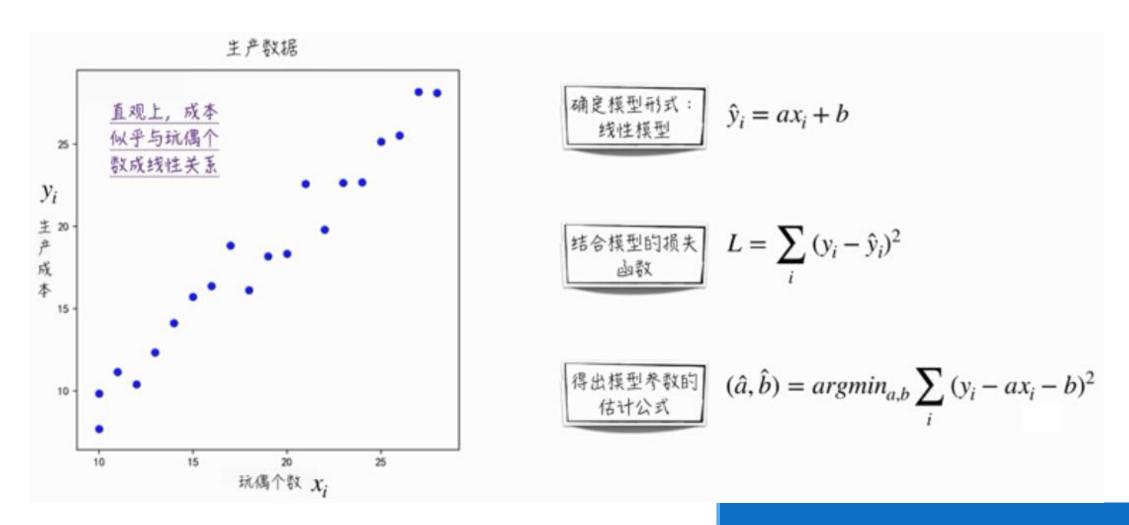


- 损失函数是统计模型的核心:
  - 即使相同的模型形式,不同的损 失函数对应着不同的模型效果
- 如果把模型看成是人工智能,则损失函数就是它的价值观
- 模型的损失函数是由人定义的
  - 从理论上讲,技术已不再中立
  - 模型已经成为今天生活的主宰

线性回归: 损失函数



线性回归: 特征提取



线性回归:模型形式和参数估计

对于回归问题, 常用的模型评估指标有两个:

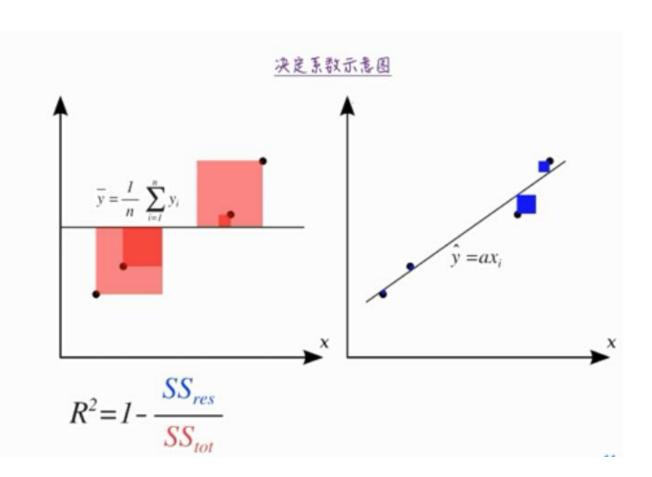
· 均方差 (MSE): 预测值与真实值的平均差距

· 决定系数 (R2): 数据变化被模型解释的比例

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2 = \frac{1}{n} L$$

决定系数

$$SS_{tot} = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \overline{y})^2$$
$$SS_{res} = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2$$



# 线性回归:模型效果评估



数据科学的数学基础

概率与统计基础

统计建模:线性回归模型

**数据分析的工具** 

### 10.4 数据分析的工具



Python, R, SQL

编程语言









OPEN SOURCE STAT TOOLS ¬



ScalaLab





## AI / MACHINE LEARNING / DEEP LEARNING



DSSTNE

mllib



DL4J

DEEPLEARNING4J







MADlib.

K Keras









数据科学的数学基础

概率与统计基础

统计建模:线性回归模型

数据分析的工具