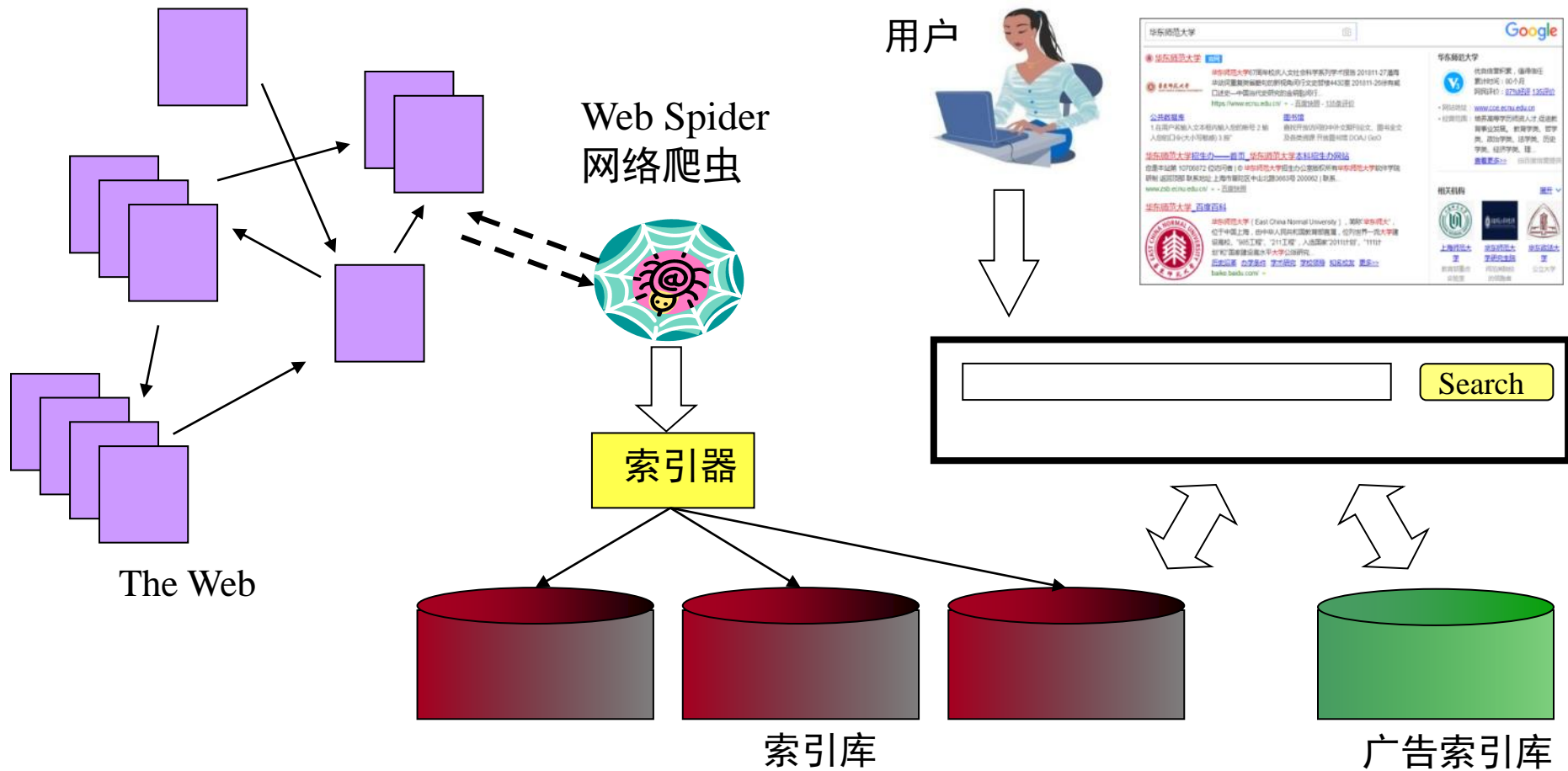




数据科学与工程导论

Introduction to Data Science and Engineering





华东师范大学



登录

[全部](#) [图片](#) [地图](#) [新闻](#) [视频](#) [更多](#)

[设置](#) [工具](#)

已启用安全

找到约 12,500,000 条结果 (用时 0.70 秒)

www.ecnu.edu.cn ▾

华东师范大学

华东师范大学等四校“组团式”援建丽江师专. RightLeft. 热点新闻. >> » 跨学科合作 华东师大青年学者在超分子光化学领域取得重要进展. 12345 ...

[院系设置](#) · [华东师范大学留学生办公室](#) · [大夏学堂](#) · [校情简介](#)

baike.baidu.com > item > 华东师范大学 ▾

华东师范大学_百度百科

华东师范大学 (East China Normal University), 简称“华东师大”, 位于上海市, 由中华人民共和国教育部直属, 是教育部和上海市人民政府重点共建的综合性研究 ...

本科专业: 83个

地址: 中山北路校区: 上海市普陀区中山...

院系设置: 3个学部; 30个全日制学院; 4个...

院校代码: 10269

[改革发展](#) · [院系专业](#) · [教学建设](#) · [科研机构](#)

zh.wikipedia.org > zh-hans > 华东师范大学 ▾

华东师范大学- 维基百科, 自由的百科全书

网页排序结果

其他
相关
信息



华东师范大学

网站

路线

保存

中国上海市的大学

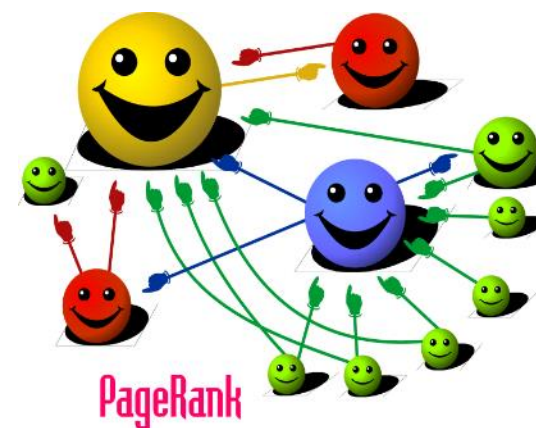
华东师范大学, 简称华师大或华东师大, 是一所位于中国上海市的公立研究型大学, 1951年由大夏大学和光华大学合并而成, 是中华人民共和国创办的第一所师范大学。在1952年院系调整中, 圣约翰大学主要院系并入。1972年更名为上海师范大学, 1980年恢复原校

问题: 搜索引擎怎么知道哪个网页排在前面, 哪个排在后面呢? 即如何衡量网页的重要性?

Google - PageRank

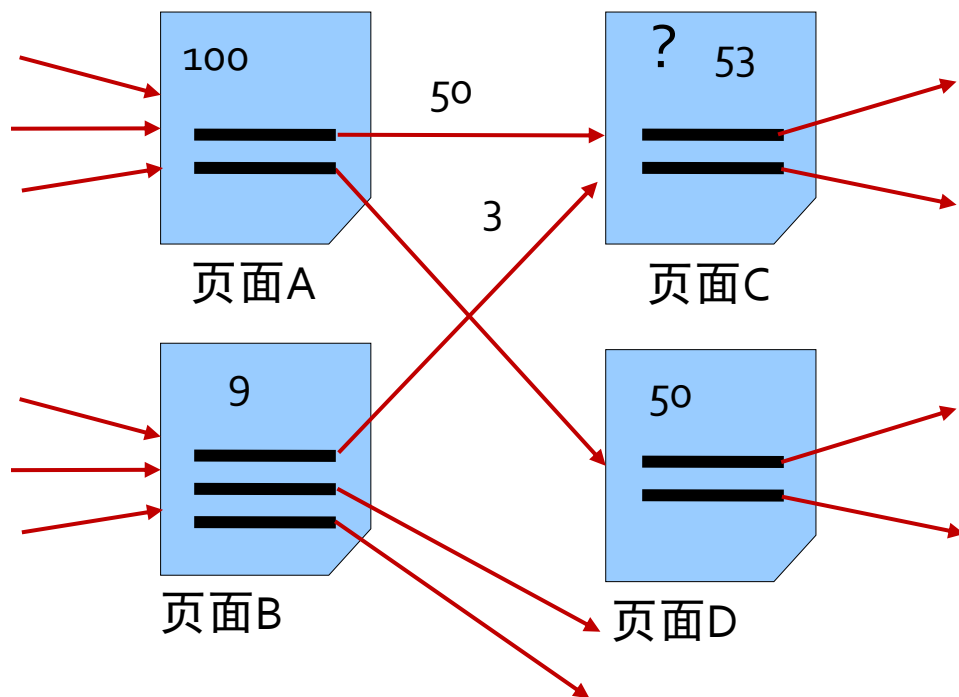


- Google 的 PageRank 是基于这样一个理论：
 - 若 B 网页上有连接到 A 网页的链接，说明 B 认为 A 有链接价值，是一个“重要”的网页
 - 一个网页的重要性大致由下面两个因素决定：
 - 该网页的导入链接的数
 - 这些导入链接的重要性



PageRank的决定因素

Google - PageRank

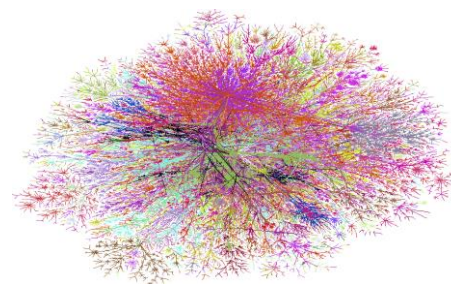


可以用数据思维与模型来解决这类问题

尝试计算PageRank值

• 问题

- 先有鸡还是先有蛋？
- Internet的拓扑结构



Google - PageRank

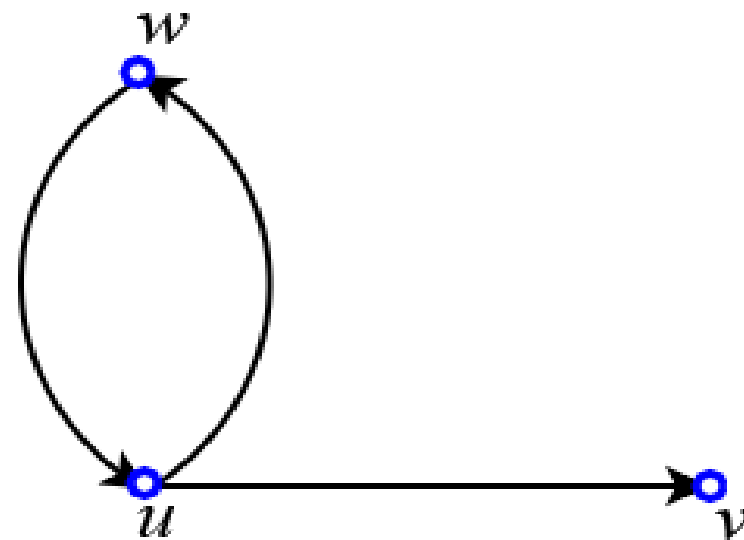
右图为一个有向图，记为 G , $G = \{V, E\}$

顶点组成的集合: $V = \{u, v, w\}$

弧组成的集合: $E = \{(u, w), (w, u), (u, v)\}$

顶点 u 的出度: $od(u) = 2$

顶点 u 的入度: $id(u) = 1$



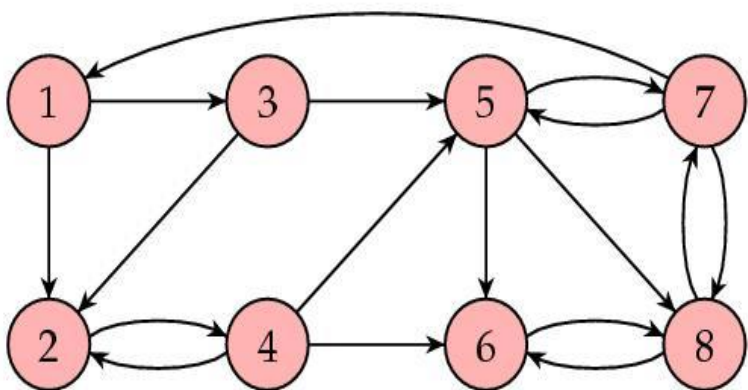
如何表示这个图，以便更好计算PageRank值呢？

有向图

Google - PageRank

$$A = (a_{ij})$$

$$a_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{if } (v_i, v_j) \in E \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

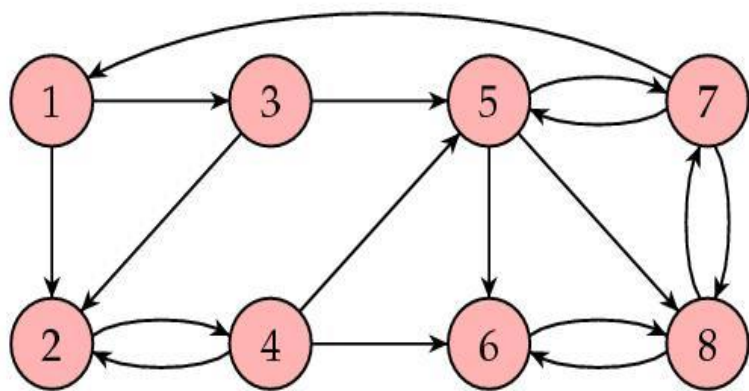


$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

邻接矩阵

Google - PageRank

进一步，如果将邻接矩阵中的元素除以对应节点的出度，可以得到该图的**超链接矩阵**



$$H = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{3} & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & 0 & 0 & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{3} & 0 & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{3} & 1 & \frac{1}{3} & 0 \end{bmatrix}$$

• 超链接矩阵的特点：

- 所有元素非负
- 每列元素的总和为1

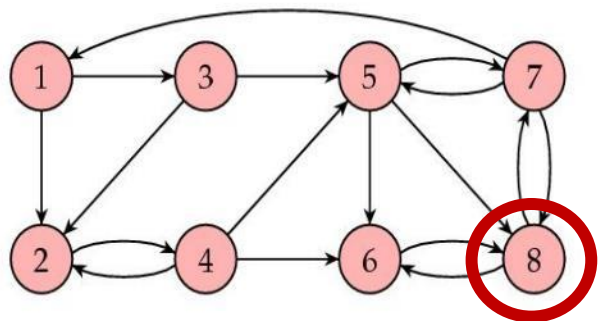
随机矩阵 (Stochastic Matrix)

马尔可夫矩阵

超链接矩阵

Google - PageRank

定理：超链接矩阵H的最大特征向量即为该矩阵的PageRank值



$$H = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{3} & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & 0 & 0 & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{3} & 0 & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{3} & 1 & \frac{1}{3} & 0 \end{bmatrix}$$

$$I = \begin{bmatrix} 0.0600 \\ 0.0675 \\ 0.0300 \\ 0.0675 \\ 0.0975 \\ 0.2025 \\ 0.1800 \\ \boxed{0.2950} \end{bmatrix}$$

I 是 H 的对应于特征值 $\lambda=1$ 的特征向量

数学的奇妙：原来不知如何下手的互联网网页的排序问题，现在已经轻而易举地变成了求解矩阵H的特征向量问题

矩阵的特征向量与特征值

Google - PageRank

幂迭代方法 $\longrightarrow I^{k+1} = H \cdot I^k$

I^0	I^1	I^2	I^3	I^4	...	I^{60}	I^{61}	$I =$	0.0600
1	0	0	0	0.0278	...	0.06	0.0600		0.0675
0	0.5	0.25	0.1667	0.0833	...	0.0675	0.0675		0.0300
0	0.5	0	0	0	...	0.03	0.0300		0.0675
0	0	0.5	0.25	0.1667	...	0.0675	0.0675		0.0975
0	0	0.25	0.1667	0.1111	...	0.0975	0.0975		0.2025
0	0	0	0.25	0.1806	...	0.2025	0.2025		0.1800
0	0	0	0.0833	0.0972	...	0.18	0.1800		0.2950
0	0	0	0.0833	0.3333	...	0.295	0.2950		

如何计算PageRank值

- 第一步：将互联网作为一个有向图，并用邻接矩阵进行表示；
- 第二步：将该邻接矩阵转换为超链接矩阵；
- 第三步：求解该超链接矩阵的最大特征向量（如幂迭代法）；
- 第四步：求得的特征向量中的值即为对应网页的PageRank值。



PageRank 算法

Google - PageRank



□ 这一漂亮的想法出自于Stanford大学1998年
在读博士研究生 *Larry Page* 和 *Sergey Brin*

□ 第七次国际World Wide Web会议(WWW'98)上的论文
The PageRank citation ranking : Bringing order to the Web

□ PageRank 算法中使用的数学知识包括：矩阵
的性质、特征值和特征向量、幂迭代方法等

PageRank 算法

Google - PageRank

- L. Page, S. Brin, R. Motwani, T. Winograd, The PageRank Citation Ranking: Bringing Order to the Web, *Technical Report*, Stanford University, 1998.
- K. Bryan, T. Leise, The \$25,000,000,000 eigenvector: The linear algebra behind Google, *SIAM Review*, 48 (3), 569-81, 2006.
- P. Berkin, A survey on PageRank computing, *Internet Mathematics*, 2:73–120, 2005.



第10章 统计分析的原理

1

数据科学的数学基础

2

概率与统计基础

3

统计建模：线性回归模型

4

数据分析的工具

矩阵

线性代数

关系代数

概率论

统计

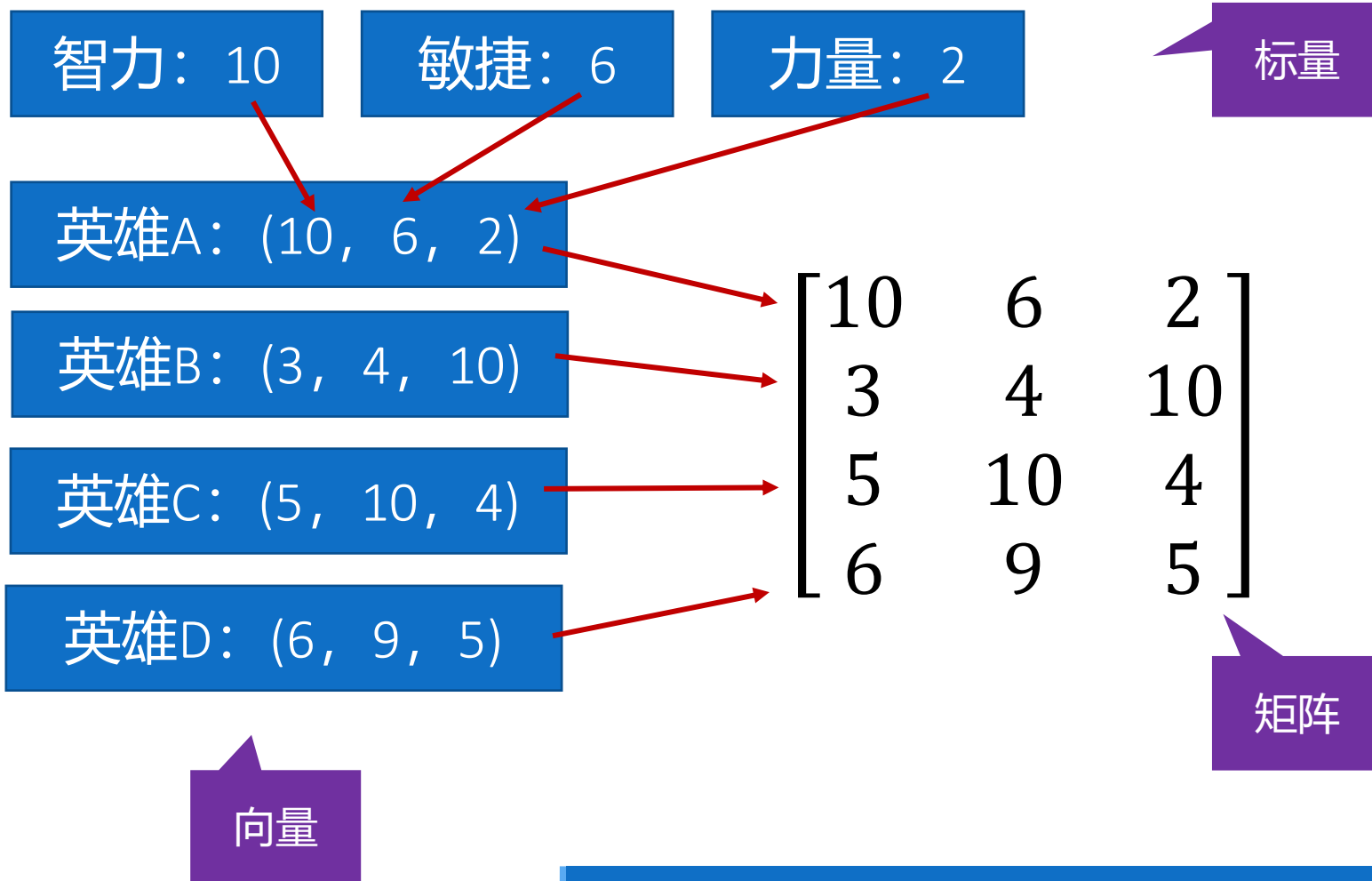
微积分

机器学习基础

- **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。

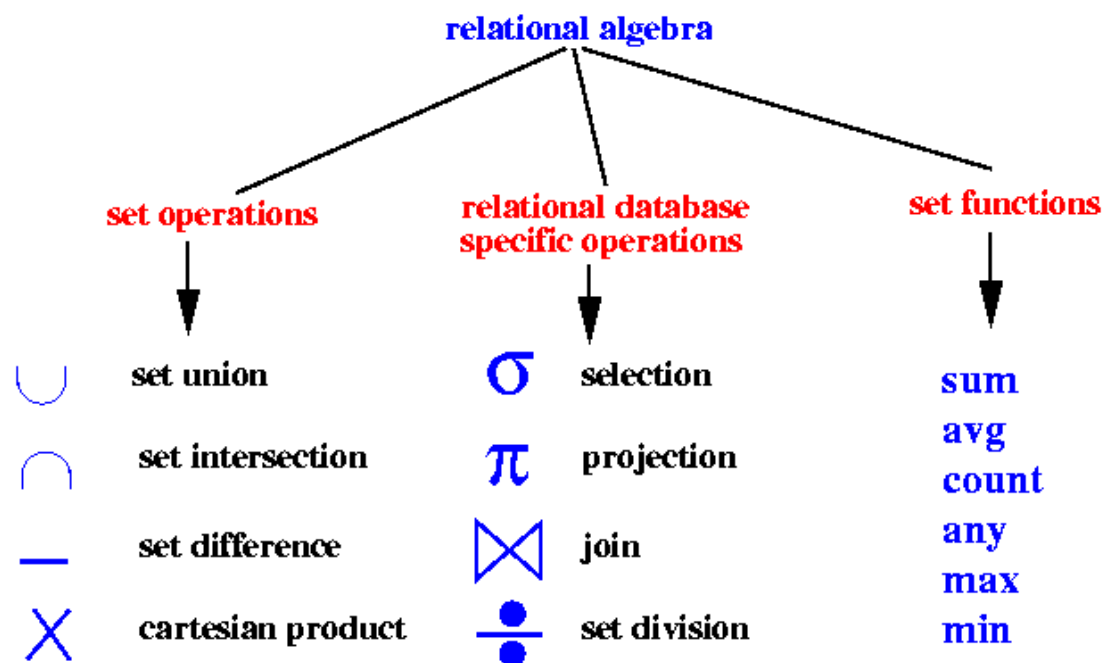


DOTA 2

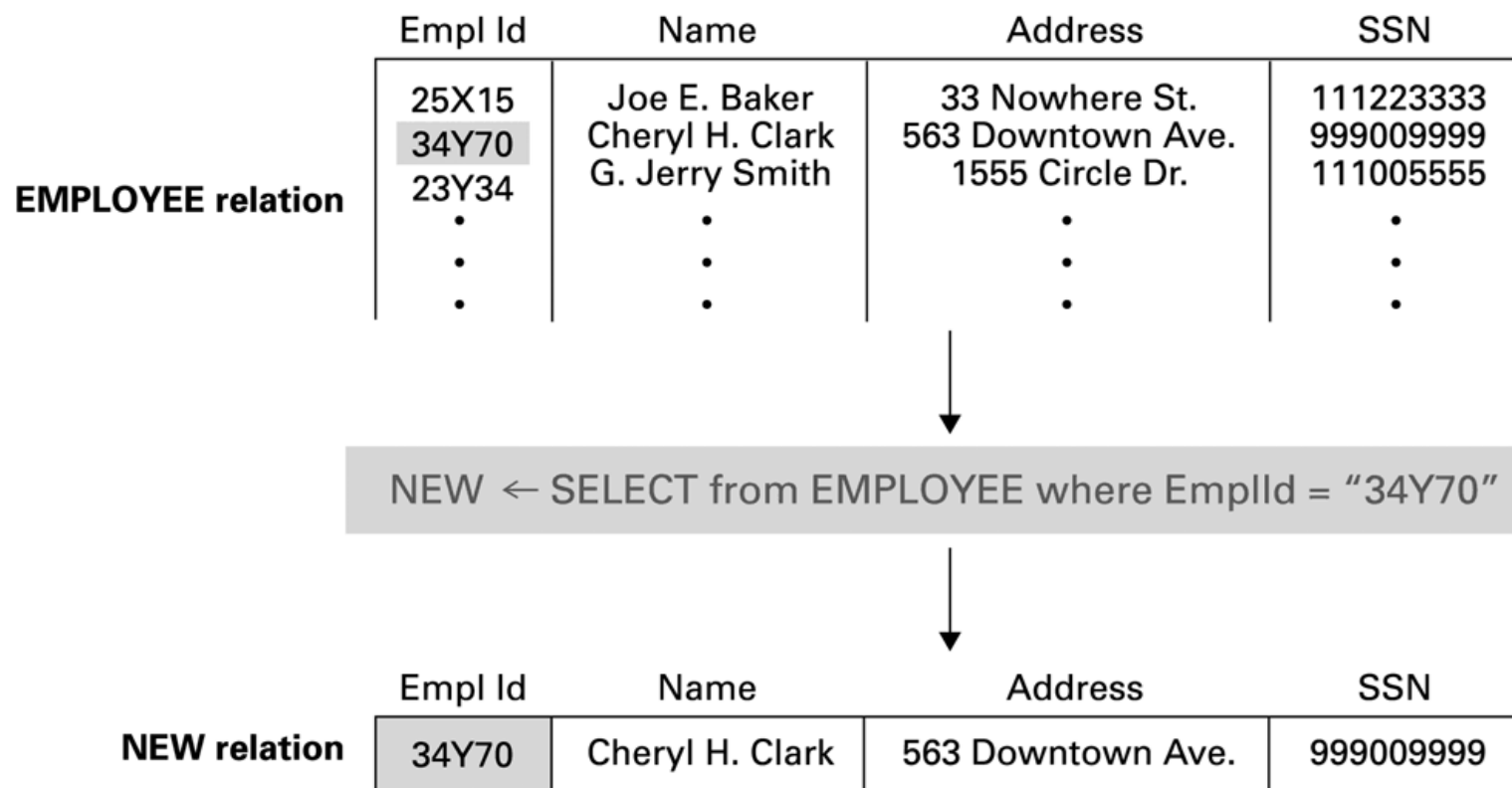


矩阵和线性代数

- 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

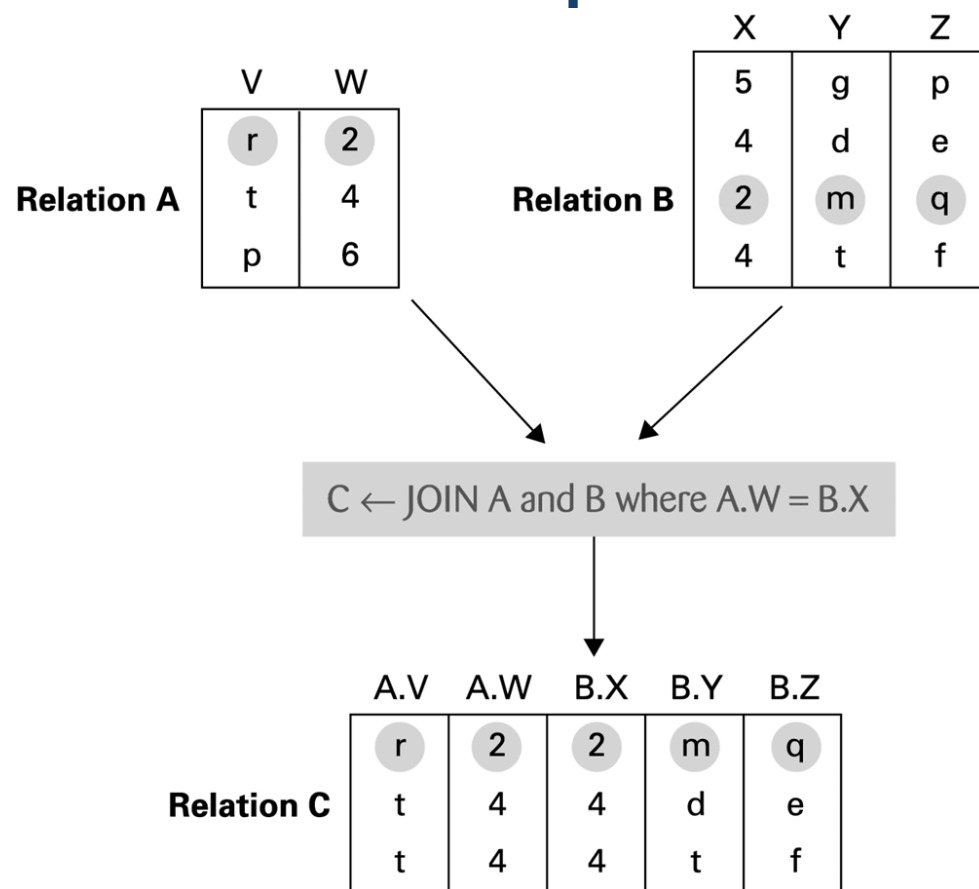
EMPLOYEE relation	Empl Id	Name	Address	SSN
	25X15	Joe E. Baker	33 Nowhere St.	111223333
	24Y70	Cheryl H. Clark	563 Downtown Ave.	999009999
	23Y34	G. Jerry Smith	1555 Circle Dr.	111005555
	⋮	⋮	⋮	⋮

MAIL ← PROJECT Name, Address from EMPLOYEE

MAIL relation	Name	Address
	Joe E. Baker	33 Nowhere St.
	Cheryl H. Clark	563 Downtown Ave.
	G. Jerry Smith	1555 Circle Dr.
	⋮	⋮

关系代数

The JOIN operation



- 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)

- **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。**

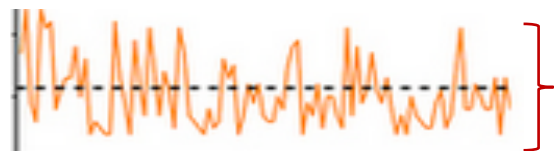
- 起源：用单个数或者数的小集合捕获可能很大值集的各种特征
 - 频率度量：众数
 - 位置度量：均值和中位数
 - 散度度量：极差和方差
 - 数据分布：频率表、直方图
 - 多元汇总统计：相关矩阵、协方差矩阵

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

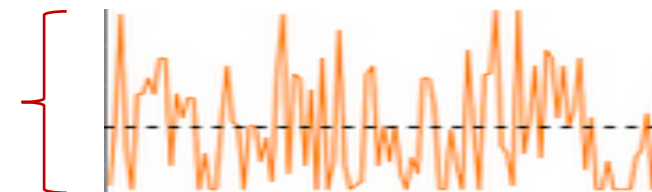
汇总数据指标的设计，源于非常朴素的思想

- 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
$$\sum (x_i - \hat{x}_i)$$
 - 偏差较大的值应该具有更大的权重
$$\sum (x_i - \hat{x}_i)^2$$
 - 集合中数字越多，方差越大，应该与集合大小无关
$$\frac{\sum (x_i - \hat{x}_i)^2}{n}$$
 - 量纲与原始数据不同，无法比
 - 最终结果，RMSE（均方根误差）
$$\sqrt{\frac{\sum (x_i - \hat{x}_i)^2}{n}}$$

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



貌似这个宽度就可以体现数据的波动性大小

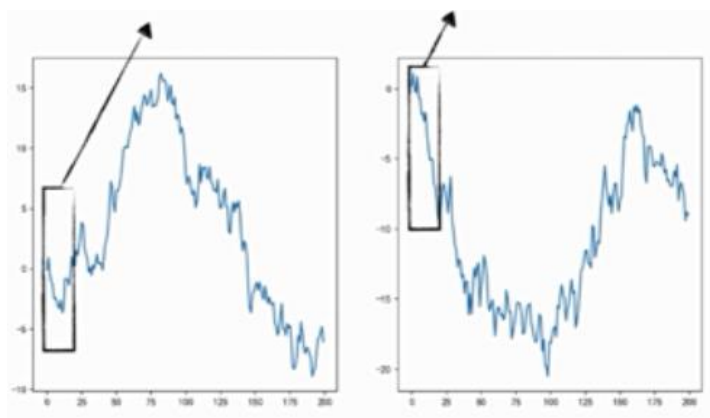
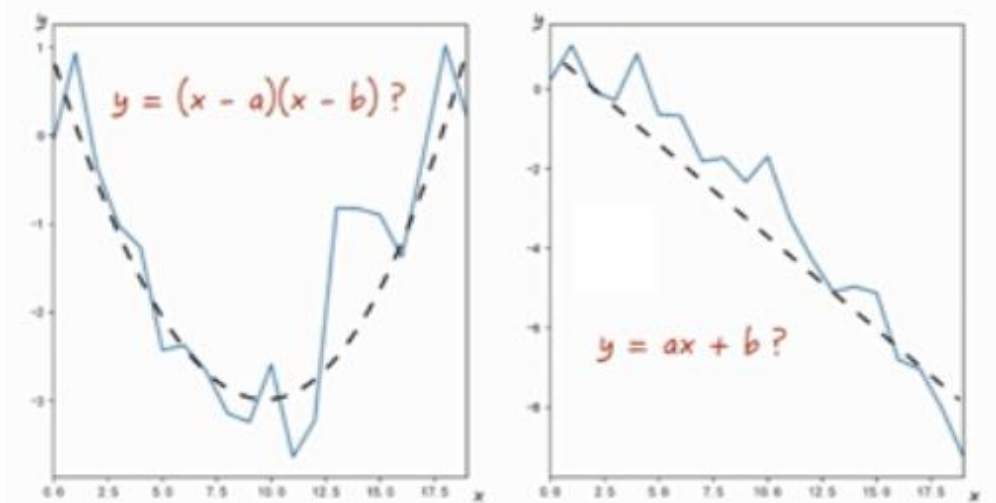


5次约会，每次迟到10分钟，与一次迟到50分钟，哪个更难接受？

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。

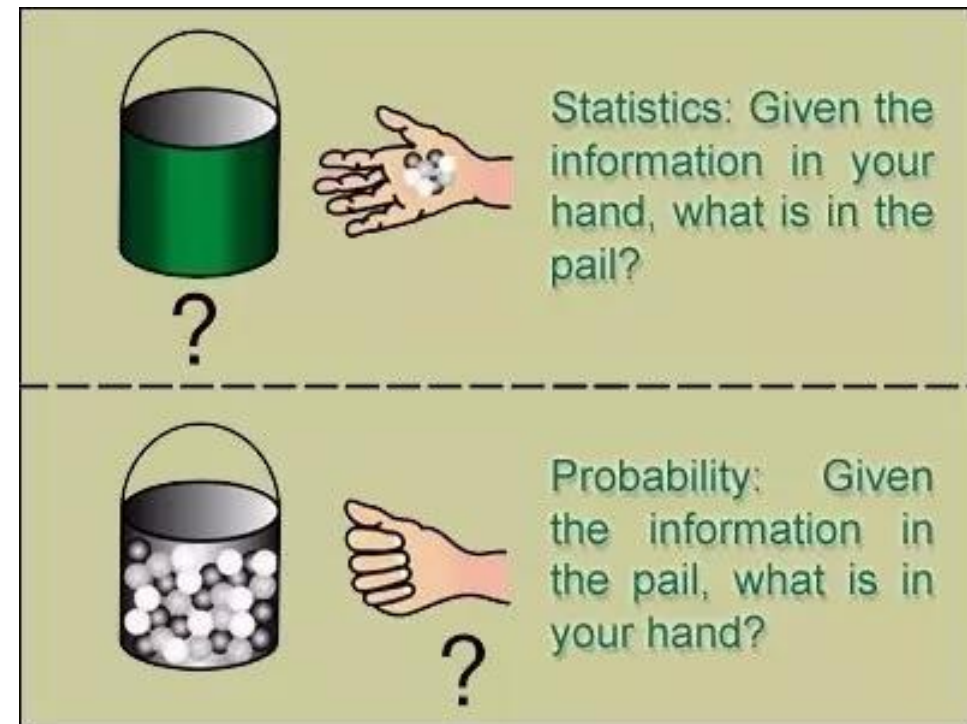
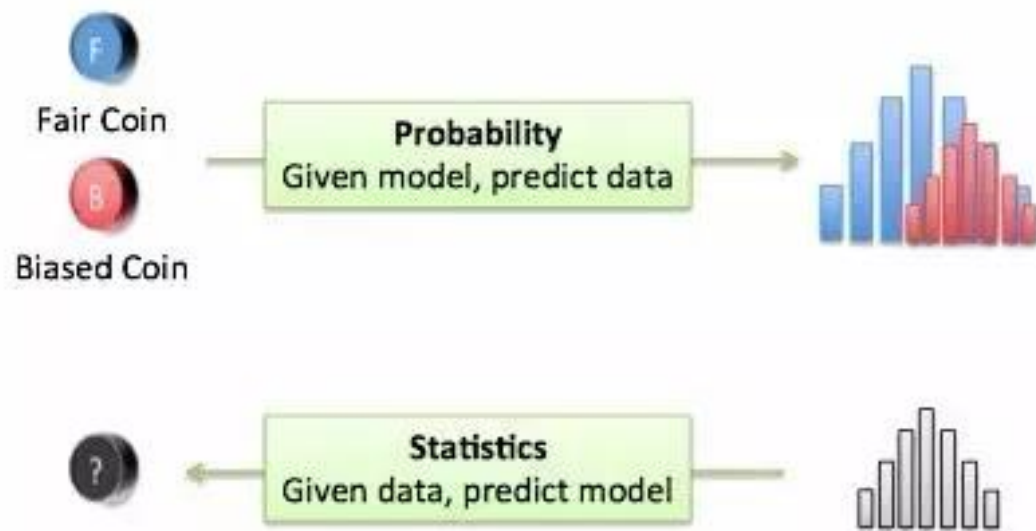
统计学家最关心的问题：如何避免掉入数据陷阱



统计：不要过分关注局部

统计分析方法

Probability & Statistics



导数和积分

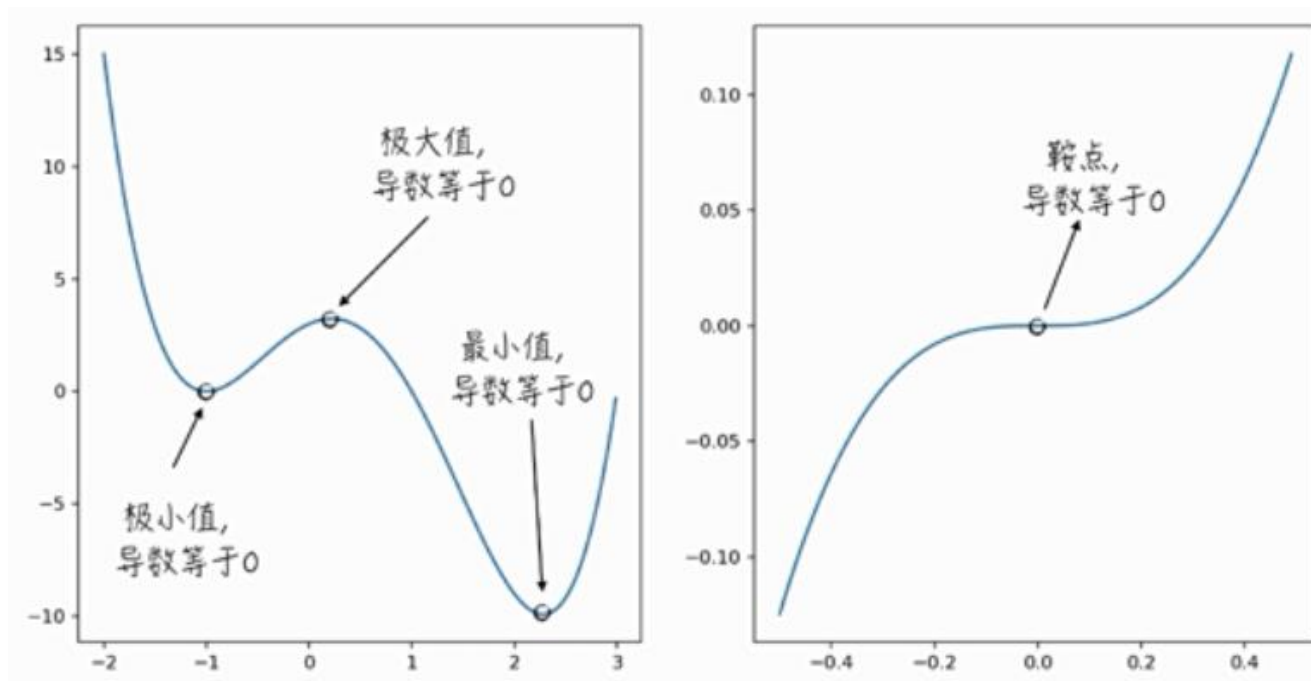
极限：变化的终点

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

- 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）

- 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）



第10章 统计分析的原理

1

数据科学的数学基础

2

概率与统计基础

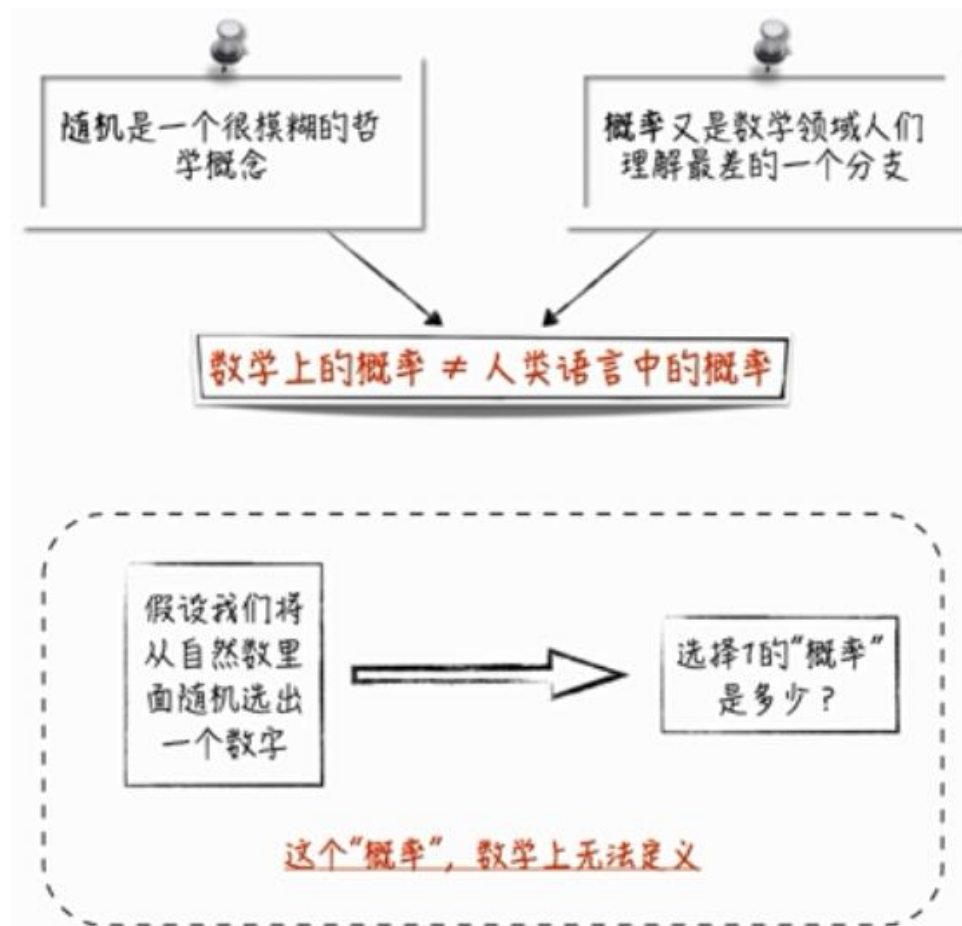
3

统计建模：线性回归模型

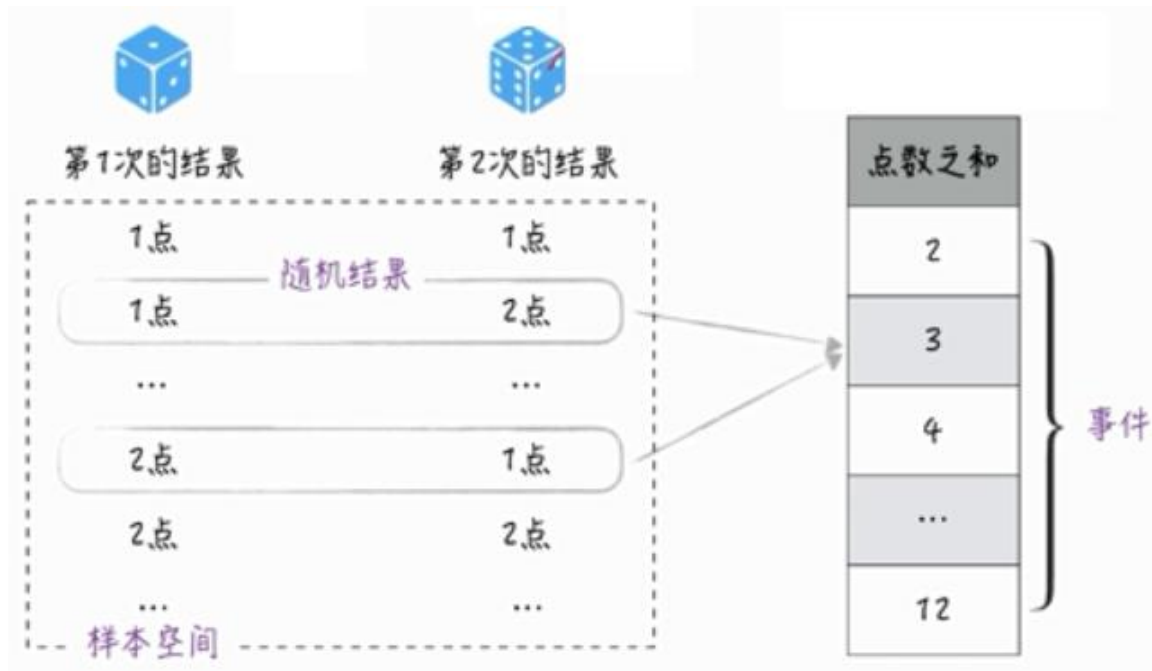
4

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



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 ω 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

$$P(A) \geq 0$$

$$P(S) = 1$$

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

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？

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

$$P(A) = 0.1$$

他来自重庆？



$$P(A|B) = 0.5$$

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
- 甲乙无任何交流联系

已知甲扔出了2点，则乙扔出5点的概率是多少？

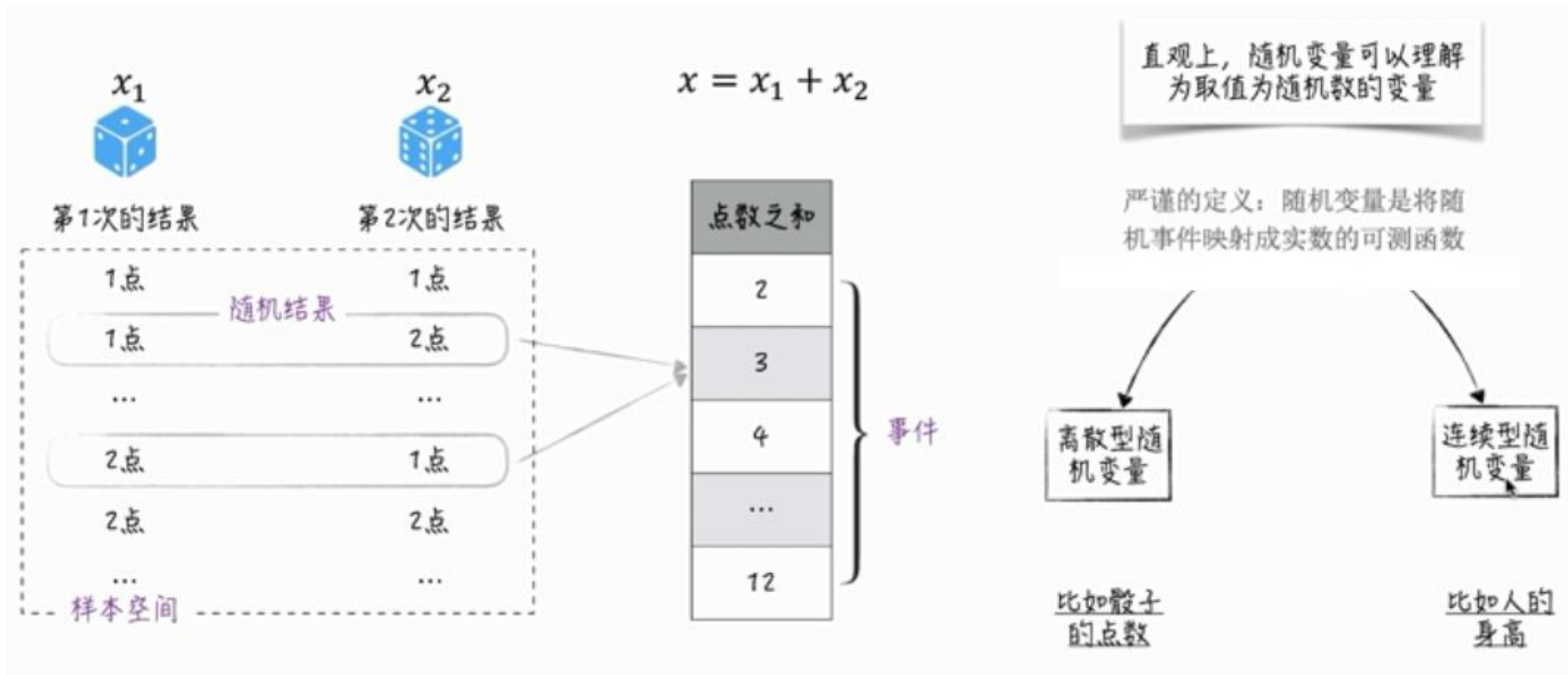
$$\text{乙扔出5点: } P(B) = \frac{1}{6}$$

=

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

若 $P(A) = P(A|B)$ ，则称A, B为相互独立事件
(B事件的发生与否对A事件没有任何影响)

独立事件



随机变量

离散型随机变量



对于离散型的随机变量，使用概率分布函数来刻画它

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

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

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

累积分布函数

期望

方差

协方差

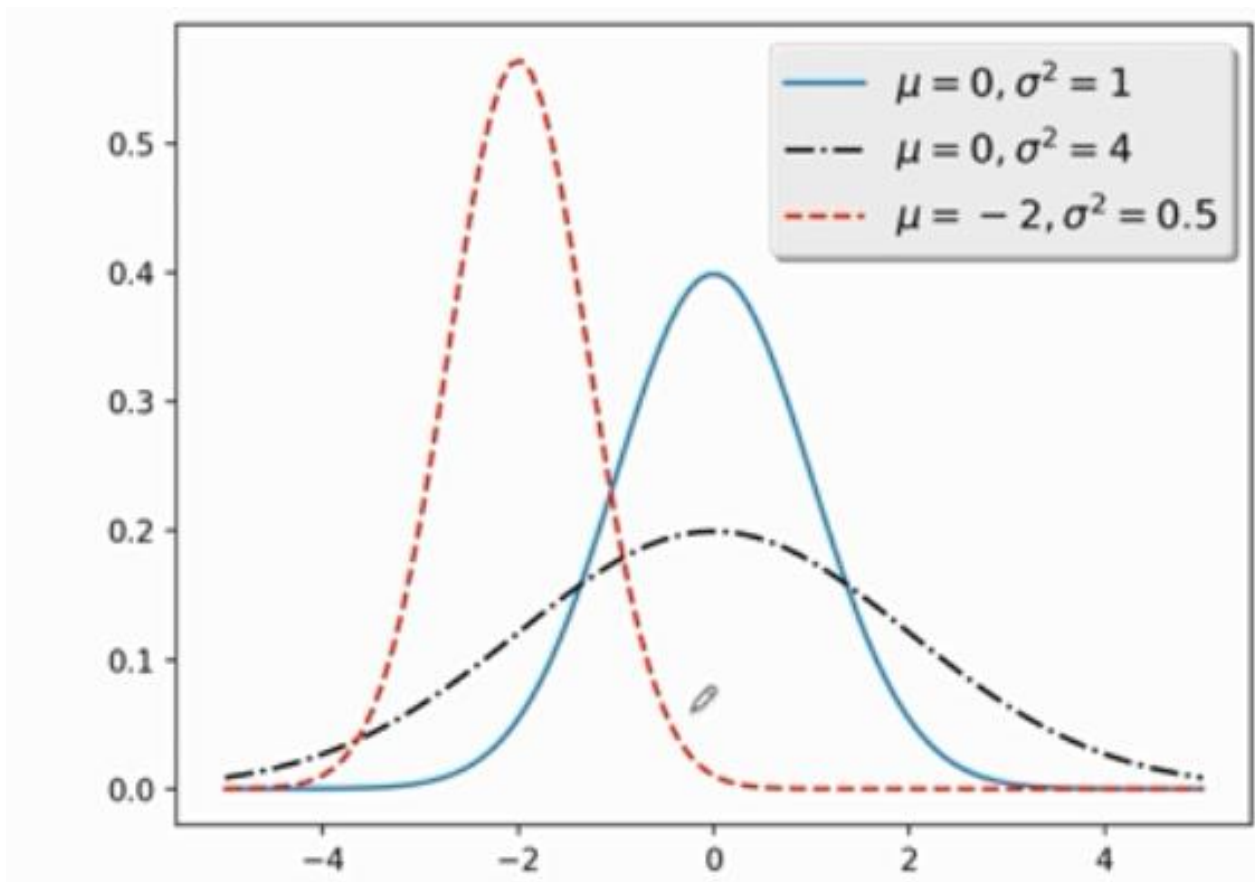
$$C_x(a) = P(x \leq a) \quad E[x] = \sum_i P(x = x_i) x_i \quad Var(x) = E[(x - E[x])^2] \quad Cov(x, y) = E[(x - E[x])(y - E[y])]$$

$$E[x] = \int x f(x) dx \quad = E[x^2] - (E[x])^2 \quad = E[xy] - E[x]E[y]$$

刻画随机变量的方法

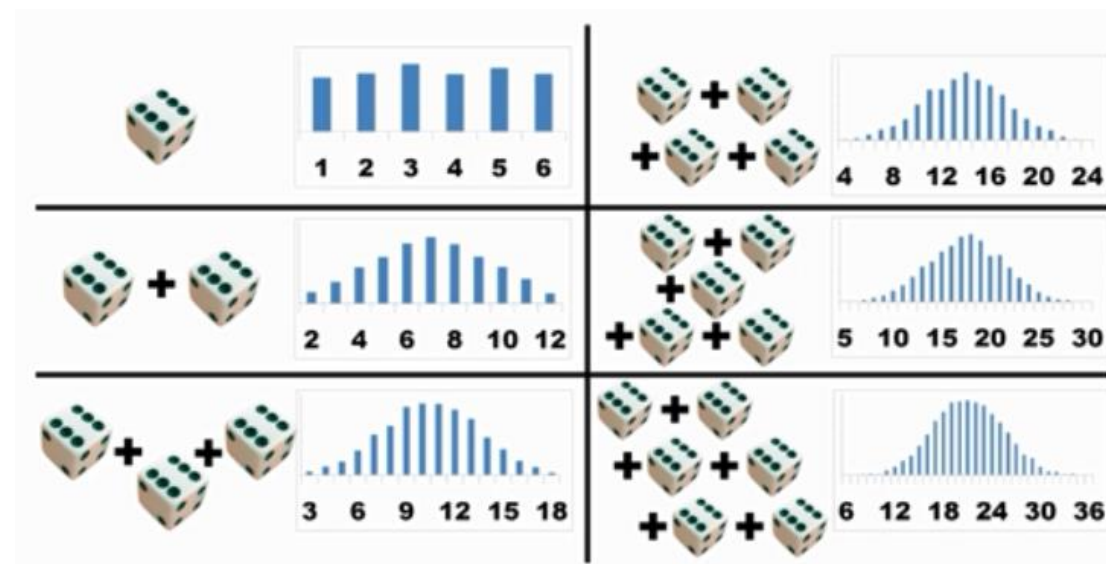
- 正态分布又称高斯分布，是最为重要的一种概率分布

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



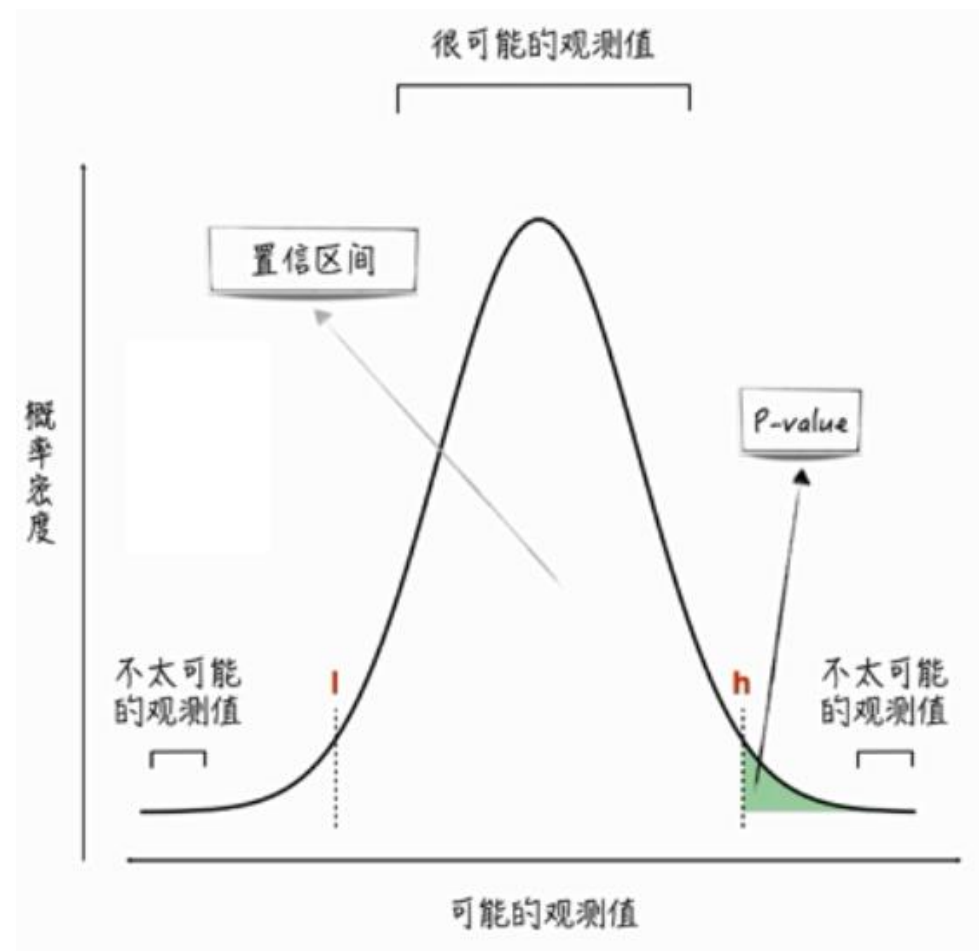
正态分布

- 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 α ，且以期望为中心的对称区域（在实际中 α 常常等于0.95）
- 对于置信区间的两个边界值，它们的P-value为 $\frac{(1-\alpha)}{2}$



置信区间



第10章 统计分析的原理

1

数据科学的数学基础

2

概率与统计基础

3

统计建模：线性回归模型

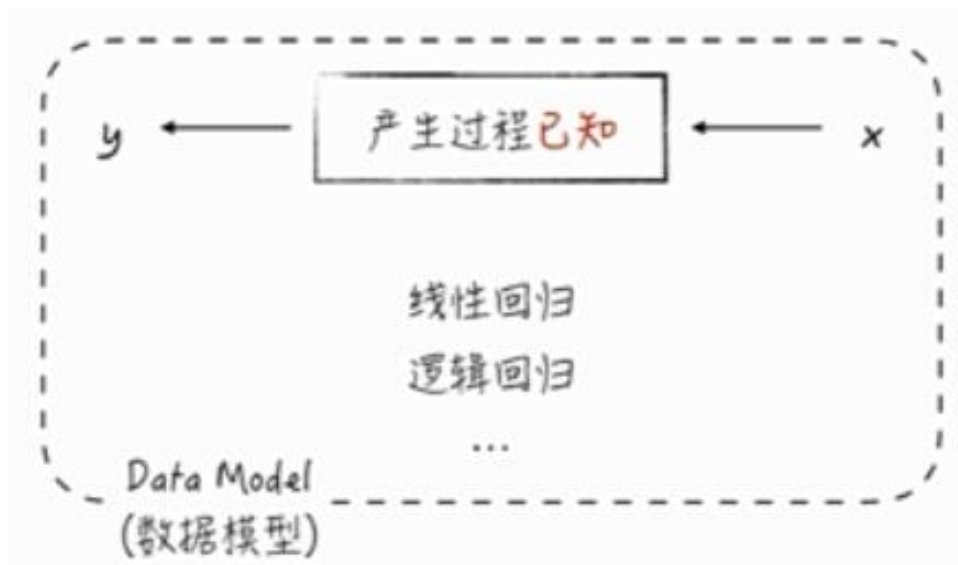
4

数据分析的工具

10.3 统计建模：线性回归模型

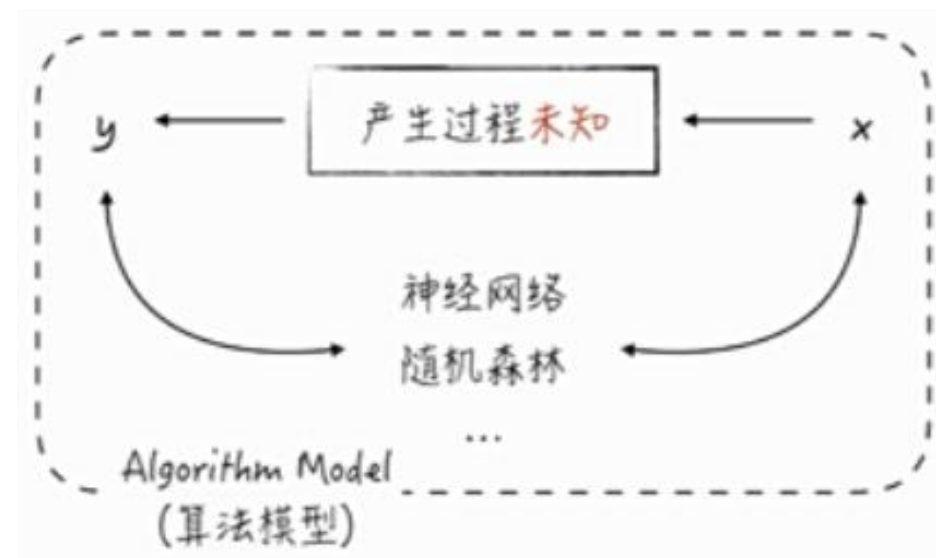
- 注重用数学的方法来搭建模型
 - 理论更加扎实
 - 模型容易理解和控制

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：

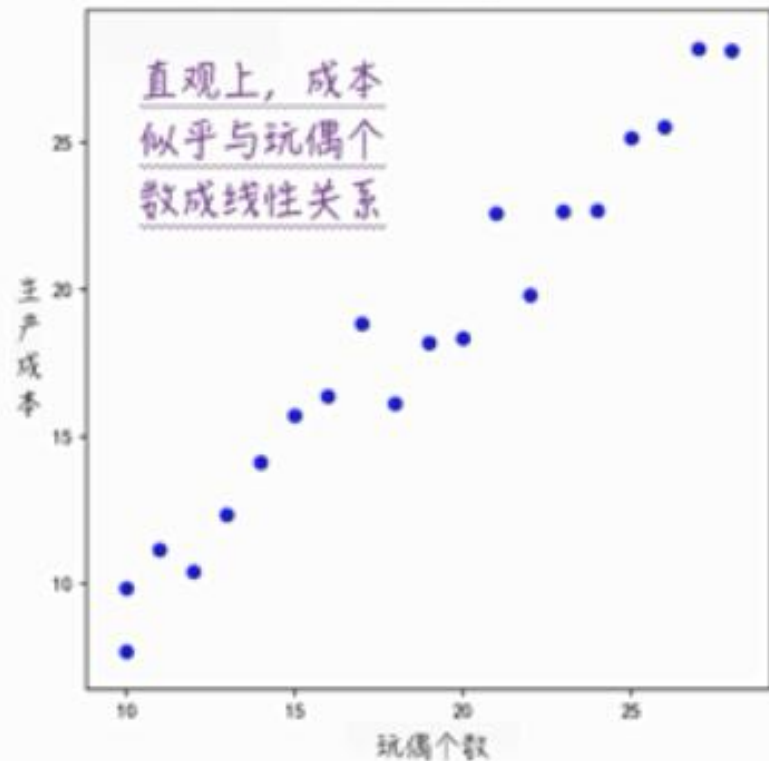
$$y_i = x_i + \epsilon_i$$

- 玩偶的单位成本等于1
- ϵ_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
...

生产数据



示例：线性回归

建模目的：模型预测值与真实值之间的差距越小越好

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

数学上难以处理

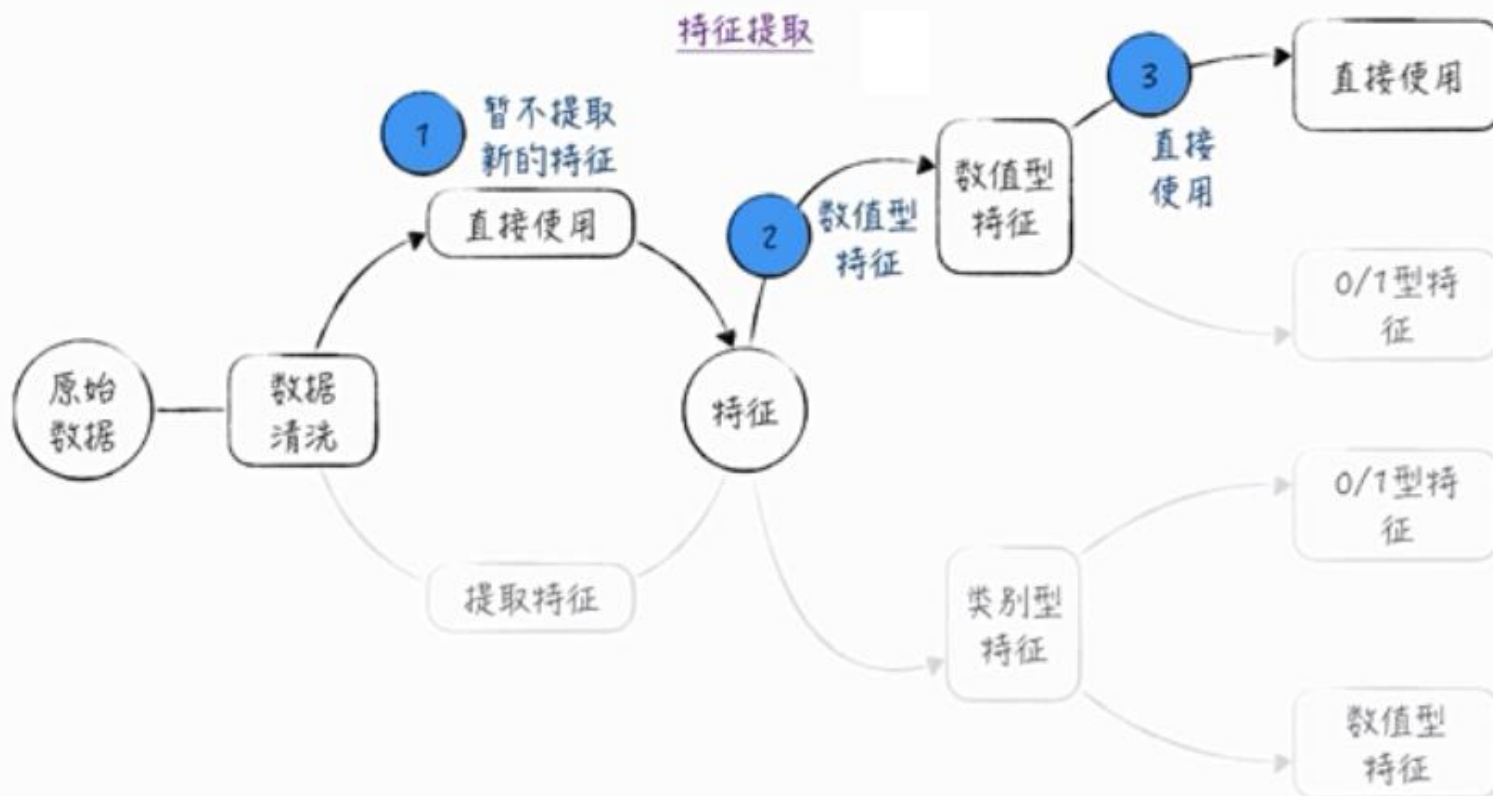
- 损失函数是统计模型的核心：
 - 即使相同的模型形式，不同的损失函数对应着不同的模型效果
- 如果把模型看成是人工智能，则损失函数就是它的价值观
- 模型的损失函数是由人定义的
 - 从理论上讲，技术已不再中立
 - 模型已经成为今天生活的主宰

线性回归：损失函数

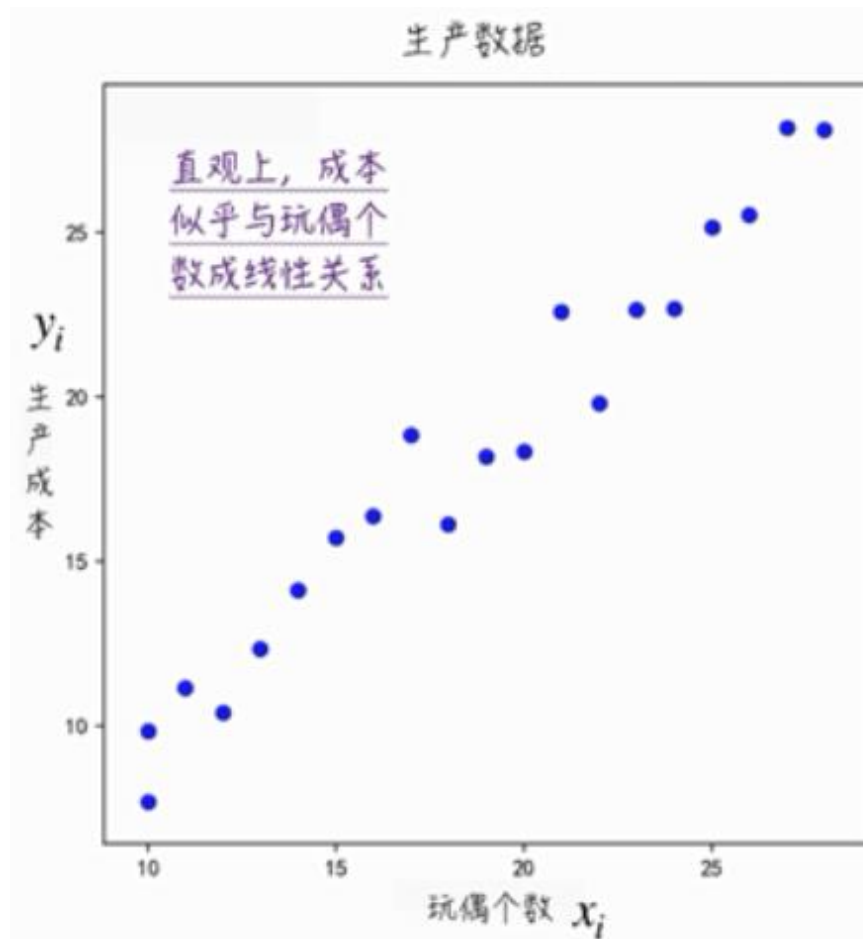
生产记事本

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
...

直接使用



线性回归：特征提取



确定模型形式：
线性模型

$$\hat{y}_i = ax_i + b$$

结合模型的损失
函数

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

得出模型参数的
估计公式

$$(\hat{a}, \hat{b}) = \operatorname{argmin}_{a,b} \sum_i (y_i - ax_i - b)^2$$

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 (R^2)：数据变化被模型解释的比例

均方差

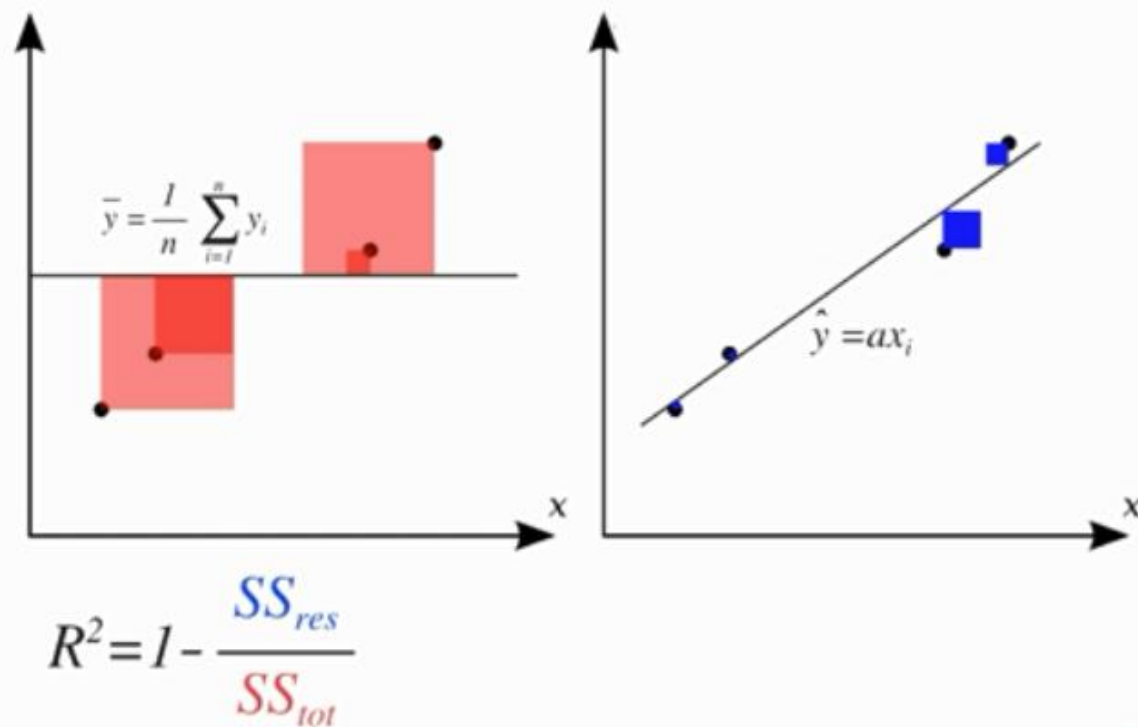
$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 = \frac{1}{n} L$$

决定系数

$$SS_{tot} = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2$$

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

决定系数示意图



线性回归：模型效果评估



第10章 统计分析的原理

1

数据科学的数学基础

2

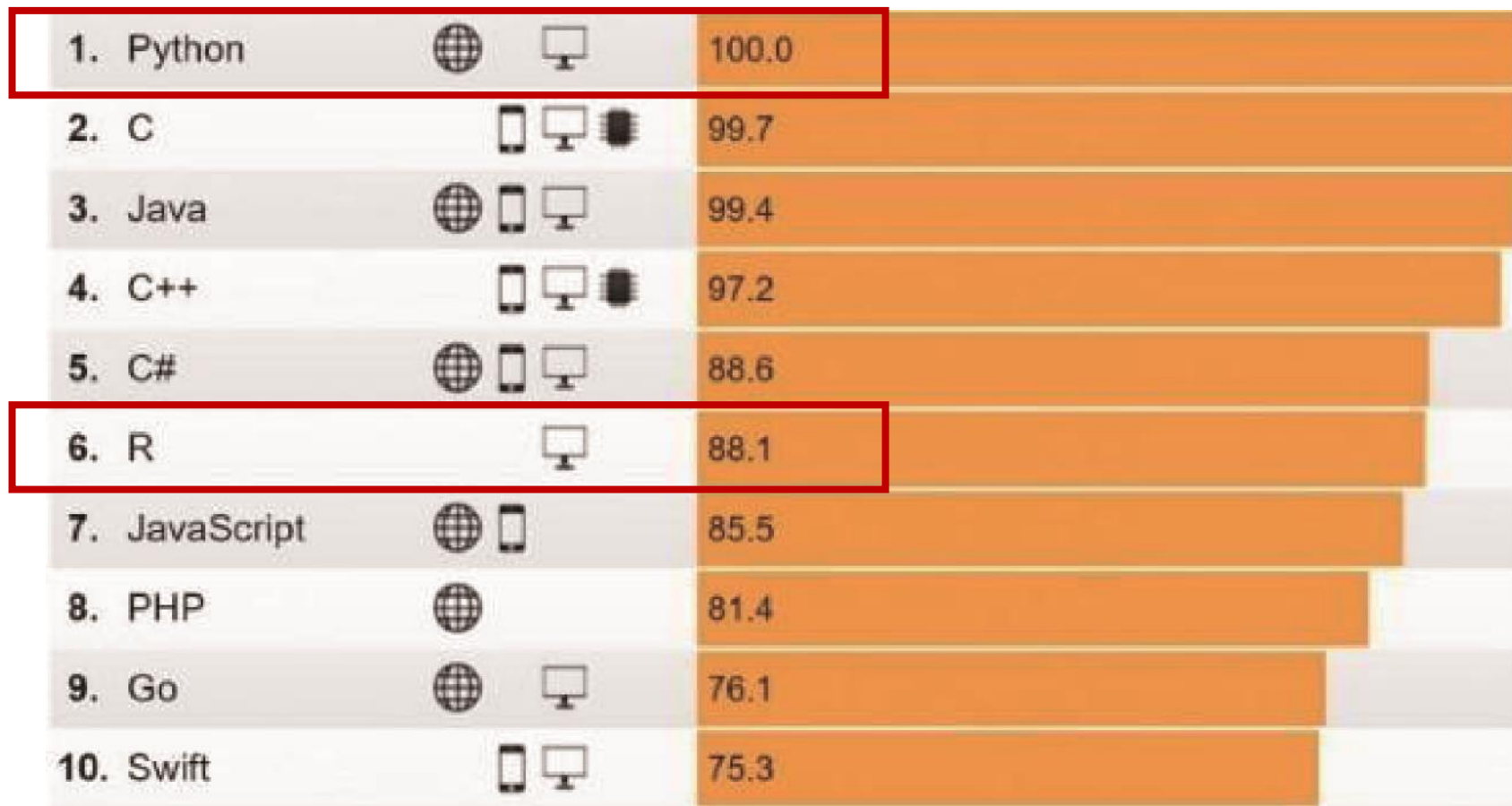
概率与统计基础

3

统计建模：线性回归模型

4

数据分析的工具



Python, R, SQL

编程语言

STATISTICAL COMPUTING



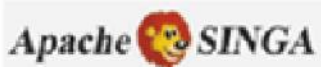
OPEN SOURCE STAT TOOLS



ScalaLab



AI / MACHINE LEARNING / DEEP LEARNING



VELES

DIMSUM

Aerosolve



数据分析工具



第10章 统计分析的原理

1

数据科学的数学基础

2

概率与统计基础

3

统计建模：线性回归模型

4

数据分析的工具