

А. В. Протодьяконов
П. А. Пылов
В. Е. Садовников

АЛГОРИТМЫ DATA SCIENCE И ИХ ПРАКТИЧЕСКАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ НА PYTHON

**А. В. Протодьяконов
П. А. Пылов
В. Е. Садовников**

**АЛГОРИТМЫ
DATA SCIENCE
И ИХ ПРАКТИЧЕСКАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ
НА PYTHON**

Учебное пособие

**Москва Вологда
«Инфра-Инженерия»
2022**

УДК 004.89
ББК 32.813
П83

Р е ц е н з ен ты:

кандидат технических наук, доцент, заведующий кафедрой
информационных и автоматизированных производственных систем
ФГБОУ ВО «Кузбасский государственный технический университет»

И. В. Чичерин;

доктор технических наук, профессор РАН, главный научный сотрудник
ФГБНУ «Федеральный исследовательский центр угля и углехимии
Сибирского отделения Российской академии наук»

А. Е. Майоров

Протодьяконов, А. В.

П83 Алгоритмы Data Science и их практическая реализация на Python : учебное пособие / А. В. Протодьяконов, П. А. Пылов, В. Е. Садовников. – Москва ; Вологда : Инфра-Инженерия, 2022. – 392 с. : ил., табл.

ISBN 978-5-9729-1006-9

Рассмотрен полный каскад разработки моделей искусственного интеллекта. Проанализирована область Data Science, из которой выделены все необходимые для прикладной сферы алгоритмы машинного обучения, расположенные по уровню возрастания сложности работы с ними.

Для студентов, изучающих информационные технологии. Может быть полезно как начинающим программистам, так и специалистам высокого уровня.

УДК 004.89
ББК 32.813

ISBN 978-5-9729-1006-9

© Протодьяконов А. В., Пылов П. А., Садовников В. Е., 2022
© Издательство «Инфра-Инженерия», 2022
© Оформление. Издательство «Инфра-Инженерия», 2022

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	7
Часть 1. Процесс машинного обучения.....	
Задачи машинного обучения.....	8
Модель и процесс машинного обучения.....	10
Понятие ETL	12
Понятие EDA	13
Подготовка данных	15
Разбисение выборки.....	18
Оптимизация гиперпараметров	21
Недообучение и переборчение.....	23
Смещение, разброс и ошибка данных.....	27
Использование HDF	30
Часть 2. Метрики и модели общие.....	
Метод максимального правдоподобия.....	33
Метод наименьших квадратов	36
Аппроксимация пропусков в данных	38
Среднеквадратичная ошибка	40
Метрики и расстояния	42
Часть практических навыков к 1-2	
Процесс ETL	45
Интерполяция и экстраполяция	50
Оценка модели.....	52
Линейная регрессия	55
Оптимизация потребления памяти	57
EDA и исследование зависимостей в данных	61
Заполнение пропусков в данных	69
Часть 3. Модели линейной регрессии	
Линейная регрессия и L1_L2-регуляризация	73
Изотоническая регрессия.....	76
BIC и AIC	78
Полиномиальная регрессия	79
Линсаризация регрессии.....	81
Часть практических навыков к 3	
Обогащение данных.....	84
Иерархия моделей	94
Оптимизация регрессии.....	101
Экспорт и импорт данных	105
Ансамбль регрессионных моделей	114
Расчет результатов	120

Часть 4. Модели классификации и её метрики	132
Точность и полнота	132
F-мера	134
ROC AUC и Gini	136
Оценка Каппа Коэна	139
Взвешенная квадратичная оценка Каппа Коэна.	140
Логистическая функция потерь	142
Метод ближайших соседей	144
Часть практических навыков к 4	147
Страховой скоринг	147
F1 и Каппа оценки классификации	155
Метод ближайших соседей	161
Наивный Байес в задаче классификации скоринга и оптимизации потребления памяти	165
Логистическая регрессия	170
Иерархия логистической регрессии	174
Метод опорных векторов (Support-Vector Machine)	179
Часть 5. Ансамблевые модели	183
Ансамблевые модели	183
Бутерэп	185
Бэггинг	186
Случайный лес	188
Out-of-Bag	190
Сверхслучайные деревья	192
Аддитивный бустинг	194
LogitBoost, BrownBoost и L2Boost	197
Градиентный спуск	200
Градиентный бустинг и XGBoost	203
Стохастический градиентный бустинг	205
Часть практических навыков к 5	208
Решающие деревья	208
Случайный лес	212
Бустинг с XGBoost	216
Часть 6. Продвинутые ансамбли	220
LightGBM	220
CatBoost	222
Ансамбль стекинга	224
Часть практических навыков к 6	228
LightGBM	228
CatBoost	232
Ансамбль классификации	238
Расчет результатов	243

Часть 7. Искусственные нейронные сети	247
Искусственные нейронные сети	247
Слой в нейросетях	250
Нейрон смещения	251
Функции активации	253
Обратное распространение ошибки	256
Многослойный перцептрон	258
Часть практических навыков к 7	261
Задача предсказания формы облаков	261
Предобработка изображений	266
Опорные векторы и коэффициент сходства	270
Двухслойный перцептрон	273
Часть 8. Обучение нейросети	278
Эпохи, пакеты, итерации	278
Оптимизация нейронной сети по Нестерову	279
Адаптивная оптимизация нейронной сети	281
RMSprop, Adadelta, Adam	282
Оптимизация нейронных сетей	283
Пакетная нормализация	285
Регуляризация обучения нейронных сетей	287
Методы инициализации весов в нейронных сетях	288
Дополнение данных	290
Свертка и предвыборка	292
Сверточные нейронные сети	294
Часть практических навыков к 8	296
Свертка и предвыборка	296
Активация и оптимизаторы	300
Нормализация и переобучение	305
Дополнение изображений	310
Часть 9. Архитектуры сверточных нейросетей	315
LeNet	315
AlexNet	317
VGG	320
GoogLeNet	323
Inception	325
ResNet	329
ResNetXt	331
SE-ResNet	333
EfficientNet	334
DenseNet	336
MobileNet	338
Часть практических навыков к 9	341
LeNet и AlexNet	341
VGG16 и VGG19	345

GoogLeNet и Inception-BN	349
Inception V3 и V4.....	361
ResNet	365
Архитектура нейросети	369
MobileNet для различных предметных областей	375
Библиографический список	380
Приложение 1. Варианты заданий для самостоятельной реализации алгоритмов машинного обучения.....	384
Приложение 2. Варианты заданий для исследовательских работ в области машинного обучения.....	387
Приложение 3. Варианты заданий, включающие в себя самостоятельный этап Data Mining, для построения End-To-End решений в области машинного обучения.....	388