Министерство науки и высшего образования Российской Федерации НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Физический факультет

УТВЕРЖДАЮ: декан физического факультета С.Н. Филимонов

Рабочая программа дисциплины

Основы машинного обучения

по направлению подготовки

03.03.02 Физика

Направленность (профиль) подготовки: «Фундаментальная физика»

Форма обучения **Очная**

Квалификация **Бакалавр**

Год приема **2024**

СОГЛАСОВАНО: Руководитель ОП О.Н.Чайковская

Председатель УМК О.М. Сюсина

Томск – 2024

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины (модуля)

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

- ОПК-3 Способен использовать современные информационные технологии и программные средства при решении задач профессиональной деятельности, соблюдая требования информационной безопасности..
- ПК-1 Способен проводить научные исследования в выбранной области с использованием современных экспериментальных и теоретических методов, а также информационных технологий.
- УК-1 Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

- ИОПК 3.1 Знает основы программирования и требования информационной безопасности
- ИОПК 3.2 Применяет общее и специализированное программное обеспечение для теоретических расчетов и обработки экспериментальных данных
- ИПК 1.2 Владеет практическими навыками использования современных методов исследования в выбранной области
 - ИУК 1.1 Осуществляет поиск информации, необходимой для решения задачи
- ИУК 1.2 Проводит критический анализ различных источников информации (эмпирической, теоретической)
- ИУК 1.3 Выявляет соотношение части и целого, их взаимосвязь, а также взаимоподчиненность элементов системы в ходе решения поставленной задачи

2. Задачи освоения дисциплины

- Освоить теоретические основы машинного обучения для решения прикладных задач, в том числе и на реальных данных.
- Научиться применять понятийную базу и передовыми инструментами машинного обучения для решения научных и практических задач.

3. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, предлагается обучающимся на выбор.

4. Семестр(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине

Восьмой семестр, зачет с оценкой

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам: Основы программирования на языке Python.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины (модуля)

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часов, из которых:

- лекции: 24 ч.;
- практические занятия: 24 ч.;

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам

Тема 1. Основы Python

Передовые инструменты машинного обучения (МО) исторически разрабатывались и разрабатываются в основном на языке Python. Данная тема является фундаментом, на котором будет строиться дальнейшая работа. Главные вопросы: основные типы и структуры данных, синтаксис, особенности языка

Тема 2. Библиотеки Python: NumPy

Библиотека Numeric Python или NumPy представляет собой набор методов и типов данных, которые используются в наукоёмкой разработке. Так же эта библиотека лежит в основе других наукоёмких библиотек. Главные вопросы: основные типы данных и приёмы работы с ними; векторные операции; стандартные процедуры.

Тема 3. Библиотеки Python: matplotlib

Библиотека matplotlib позволяет строить различные виды графиков и чертежей. Визуализация данных является важным этапом их анализа. Главные вопросы: построение сложных графиков и их оформление.

Тема 4. Библиотеки Python: pandas

Библиотека pandas позволяет работать с табличными данными. Главные вопросы: основные типы данных и приёмы работы с ними; статистические процедуры; связь с реляционной алгеброй.

Тема 5. Теоретические основы машинного обучения:

Постановка задачи МО в общем виде. Типы задач. Главные вопросы: задача; метрики качества; валидация; переобучение; обнаружение и обработка выбросов; метрические методы и гипотеза компактности; функции потерь; обучение с учителем и без.

Тема 6. Метрические алгоритмы машинного обучения:

Разбор основных алгоритмов МО, с точки зрения механики их работы и границ применимости. Алгоритмы: метод k-ближайших соседей; метод опорных векторов; метод опорных векторов по комбинации базисных функций; нелинейная регрессия

Тема 7. Линейная регрессия:

Разбор линейной регрессии с точки зрения МО. Постановка задачи линейной регрессии. Главные вопросы: формула в общем виде; методы поиска решений и границы применимости; линейная регрессия по комбинации базисных функций; извлечение информации из коэффициентов линейной регрессии.

Тема 8. Решающие деревья:

Решающие деревья - один из самых известных и универсальных алгоритмов МО. В данной теме рассматриваются теоретические основания работы решающих деревьев, выбора предикатов ветвления, основные гиперпараметры дерева и границы применения. Главные вопросы: принципиальная схема решающего дерева; предикаты ветвления; глубина дерева; переобучение дерева; визуализация структуры дерева.

Тема 9. Ансамблирование алгоритмов:

Ансамблирование алгоритмов - это использование вместо одной сильной модели комбинации большого количества слабых. Рассматриваются на примере решающих деревьев. Главные вопросы: бэггинг; бустинг; мудрость толпы; сравнение ансамблей с одной моделью.

Тема 10. Глубинное обучение:

Глубинное обучение - это использование глубоких искусственных нейронных сетей (ИНС) в качестве алгоритма МО. Рассматривается программная реализация в виде библиотеки для Python под называнием pytorch. Главные вопросы: искусственные нейроны; библиотека pytorch; типы слоёв; функции активации; инициализация весов; оптимизаторы; нормализация данных; проектирование архитектуры; выбор функции потерь под задачу.

Тема 11. Основные архитектуры искусственных нейронных сетей:

В данной теме рассматриваются основные архитектуры, т.е. некоторые структуры слоёв, ИНС и задачи, для которых они применяются. Архитектуры: полносвязные; свёрточные; автокодировщики; рекуррентные.

Тема 12. Сохранение, передача и работа с предобученными моделями:

ИНС не обязательно обучать с состояния полного хаоса. Возможно использовать предобученные модели для схожих задач. Главные вопросы: сохранение моделей; формат .pickle; загрузка моделей; дообучение моделей (transfer learning).

9. Текущий контроль по дисциплине

Целью текущего контроля по дисциплине является оценка освоения студентами программы дисциплины. Текущий контроль осуществляется следующими средствами:

- 1. Контроль посещаемости занятий
- 2. Выступление у доски на практических занятиях
- 3. Защита домашних работ

<u>Контроль посещаемости</u> указывает на пропущенные студентом темы, пробелы в которых выявляются путём дополнительных вопросов.

Выступление у доски на практических занятиях строится по схеме:

- Преподаватель ставит задачу на пару
- Студент садится за компьютер и начинает её решать.
- В случае затруднения обращается за помощью к одногруппникам.
- В случае затруднения одногруппников в процесс включается преподаватель.
- Если остаётся время после решения основной задачи, то решаются дополнительные задачи. Например, сравнение моделей или построение аналитических графиков.

Защита домашних работ проводится теми же способами и с теми же целями, что и выступления у доски.

Примеры задач.

- Сравнить распределение целевых признаков в обучающей выборке и среди откликов обученной модели
- Написать процедуру разбиения набора данных на обучающую и валидационную подвыборку
- Определить признаки, в которых есть пропуски и предложить стратегию их заполнения
- Посчитать кривую точность-полнота (precision-recall) для различных порогов классификации и предложить оптимальный в контексте задачи
- Построить матрицу ошибок и оценить какие классы чаще всего путаются между собой

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Зачет с оценкой проводится в устной форме по билетам. Билет содержит два вопроса: один общий, второй про конкретные алгоритмы (или модели)

Теоретические вопросы:

- 1. Постановка задачи машинного обучения.
- 2. Функции потерь. Требования к функциям потерь. Функции потерь для задач классификации.
- 3. Функции потерь. Требования к функциям потерь. Функции потерь для задач регрессии.
- 4. Метрики качества. Требования к метрикам качества. Метрики качества для задачи классификации.
- 5. Метрики качества. Требования к метрикам качества. Метрики качества для задачи регрессии
- 6. Переобучение. Обнаружение и устранение.
- 7. Кросс-валидация и k-Fold.
- 8. Матрица ошибок. Ошибки первого и второго рода. Производные метрики качества.
- 9. Выбор порога классификация. Кривая точность-полнота и ROC-кривая.\
- 10. Параллельное и последовательное ансамблирование моделей.
- 11. Метод градиентного спуска и метод обратного распространения ошибки.
- 12. Математическая модель искусственного нейрона.

Алгоритмы и модели:

- 1. Метод k-ближайших соседей.
- 2. Метод опорных векторов.
- 3. Непараметричская регрессия. Формула Надарая-Уотсона.
- 4. Линейная регрессия.
- 5. Логистическая регрессия.
- 6. Линейная регрессия по комбинации базисных функций.
- 7. Решающие деревья.
- 8. Random Forest
- 9. Градиентный бустинг над решающими деревьями
- 10. Полносвязные ИНС
- 11. Свёрточные ИНС
- 12. Автокодировщики

Для получения оценки: **отлично** - студент должен уверенно ответить на оба вопроса из билета, а также на дополнительные вопросы; **хорошо** - студент должен ответить на оба вопроса из билета, но потеряться на дополнительных. Оценка **удовлетворительно** ставится если на один из вопросов билета студент ответить не смог.

Допускаются пробелы в ответах, которые правильно закрываются наводящими вопросами преподавателя.

11. Учебно-методическое обеспечение

- a) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=24612
- б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.
 - в) План семинарских / практических занятий по дисциплине.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

- а) основная литература:
- Ярушкина Н. Г. Интеллектуальный анализ временных рядов: Учебное пособие / Н.Г. Ярушкина, Т.В. Афанасьева, И.Г. Перфильева. М.: ИД ФОРУМ: ИНФРА-М, 2012. 160 с.:

- Информационные аналитические системы [Электронный ресурс] : учебник / Т. В. Алексеева, Ю. В. Амириди, В. В. Дик и др.; под ред. В. В. Дика. М.: МФПУ Синергия, 2013. 384 с. (Университетская серия). ISBN 978-5-4257-0092-6.
- Python и анализ данных (перевод Слинкина А. А.) / У. МакКини, А. А. Слинкина ДМК-Пресс, 2023 г. 536 с. ISBN: 978-5-93700-174-0
- Машинное обучение с использованием Python. Сборник рецептов / К. Элбон Издательство "БХВ", $2019 \, \Gamma$. $384 \, c$. ISBN: 978-5-9775-4056-8
 - б) дополнительная литература:
- Технология Data Mining: Интеллектуальный анализ данных, Степанов, Роман Григорьевич, 2009г
- Барсегян, А. А. Анализ данных и процессов: учеб. пособие / А. А. Барсегян, М. С. Куприянов, И. И. Холод, М. Д. Тесс, С. И. Елизаров. 3-е изд., перераб. и доп. СПб.: БХВ-Петербург, 2009. 512 с.: ил. + CD-ROM (Учебная литература для вузов)
 - в) ресурсы сети Интернет:
- Введение в машинное обучение. Coursera. К.В. Воронцов https://www.coursera.org/learn/vvedenie-mashinnoe-obuchenie
 - NumPy Documentation https://numpy.org/doc/
 - Pytorch Documentation https://pytorch.org/docs/stable/index.html

13. Перечень информационных технологий

- а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:
- Python 3.7+ и модули: jupyter, numpy, matplotlib, pandas, scikit-learn, pytorch

14. Материально-техническое обеспечение

Аудитории для проведения занятий лекционного типа.

Аудитории для проведения занятий семинарского типа, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, в электронную информационно-образовательную среду и к информационным справочным системам.

15. Информация о разработчиках

Красавин Дмитрий Сергеевич, Томский государственный университет, м.н.с.

Галушина Татьяна Юрьевна, к.ф.-м.н., Томский государственный университет, доцент