МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)»

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА по курсу

«Data Science»

Слушатель

Лещинский Александр Викторович

Москва, 2022

Содержание

Введение

- 1. Аналитическая часть
- 1.1. Постановка задачи.
- 1.2. Описание используемых методов
- 1.3. Разведочный анализ данных
- 2. Практическая часть
- 2.1. Предобработка данных
- 2.2. Разработка и обучение модели
- 2.3. Тестирование модели
- 2.4. Написать нейронную сеть, которая будет рекомендовать соотношение матрица.
 - 2.5. Разработка приложения
- 2.6. Создание удаленного репозитория и загрузка результатов работы на него.
 - 3. Заключение
 - 4. Библиографический список;
 - 5. Приложения

Введение

Пояснительная записка подготовлена в рамках выпускной квалификационной работы по курсу «Data Science» на тему «Прогнозирование конечных свойств новых материалов (композиционных материалов)».

Композиционные материалы — это искусственно созданные материалы, состоящие из нескольких других с четкой границей между ними. Композиты обладают теми свойствами, которые не наблюдаются у компонентов по отдельности. При этом композиты являются монолитным материалом, т. е. компоненты материала неотделимы друг от друга без разрушения конструкции в целом. Яркий пример композита - железобетон. Бетон прекрасно сопротивляется сжатию, но плохо растяжению. Стальная арматура внутри бетона компенсирует его неспособность сопротивляться сжатию, формируя тем самым новые, уникальные свойства. Современные композиты изготавливаются из других материалов: полимеры, керамика, стеклянные и углеродные волокна, но данный принцип сохраняется. У такого подхода есть и недостаток: даже если мы знаем характеристики исходных компонентов, определить характеристики композита, состоящего из этих компонентов, достаточно проблематично. Для решения этой проблемы есть два пути: физические испытания образцов материалов, или прогнозирование характеристик. Суть прогнозирования заключается в симуляции представительного элемента объема композита, на основе данных о характеристиках входящих компонентов (связующего и армирующего компонента).

Кейс основан на реальных производственных задачах Центра НТИ «Цифровое материаловедение: новые материалы и вещества» (структурное подразделение МГТУ им. Н.Э. Баумана).

Созданные прогнозные модели помогут сократить количество проводимых испытаний, а также пополнить базу данных материалов возможными новыми характеристиками материалов, и цифровыми двойниками новых композитов.

В результате работы формируется комплект документов, в частности - код в Jupiter notebook, графическая визуализация, презентация для защиты, данная пояснительная записка и другие материалы.

1. Аналитическая часть

1.1 Постановка задачи

На входе имеются данные о начальных свойствах компонентов композиционных материалов (количество связующего, наполнителя, температурный режим отверждения и т.д.). **На выходе** необходимо спрогнозировать ряд конечных свойств получаемых композиционных материалов.

Датасет со свойствами композитов расположен по ссылке https://drive.google.com/file/d/1B1s5gBlvgU81H9GGolLQVw_SOi-vyNf2/view? usp=sharing и представлен в двух файлах формата excel:

- Файл X_nup Накладки углепластика;
- Файл X_bp Базальтопластик.

В файлах набор данных, состоящий из характеристик компонентов композитных материалов и характеристик производственного процесса. Общий объем dataset - 1040 измерений (строк) для каждой из 13 переменных:

- Угол нашивки, град;
- Шаг нашивки;
- Плотность нашивки;
- Соотношение матрица-наполнитель;
- Плотность, кг/м3;
- Модуль упругости, Гпа;
- Количество отвердителя, м.%;
- Содержание эпоксидных групп,%_2;
- Температура вспышки, С_2;
- Поверхностная плотность, г/м2;
- Модуль упругости при растяжении, ГПа;
- Прочность при растяжении, МПа;
- Потребление смолы, г/м2.

1.2 Описание используемых методов

Необходимо разработать несколько моделей для прогнозирования следующих переменных:

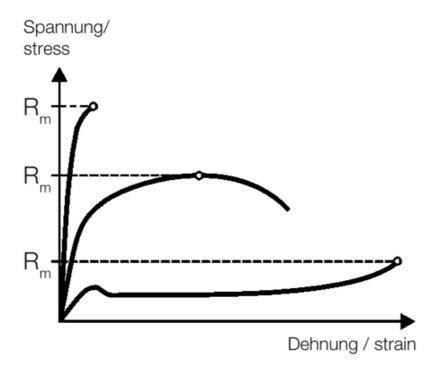
- Модуль упругости при растяжении, ГПа;
- Прочность при растяжении, МПа.

Перед началом решения задачи важно вспомнить теорию.



В основном, модуль упругости зависит от материала.

Прочность при растяжении Rm (такж разрывная прочность) представляет собой характеристику материала для оценки прочностных свойств. Прочность при растяжении (англ.: tensile strength) обозначает максимальное механическое растягивающее напряжение, с которым можно нагружать образец. При превышении прочности при растяжении материал разрушается: приложение усилия снижается, пока образец, наконец, не порвется. Разумеется, на образце возникает пластичная (т.е. остаточная) деформация еще до достижения прочности при растяжении.



и мы видим, что одному значению x - прочность при растяжении, могут соответствовать множество материалов в различных экспериментах

Для переменной «Соотношение матрица-наполнитель» необходимо разработать нейронную сеть, которая будет рекомендовать соотношение матрица-наполнитель с использованием приложения.

Для реализации прогноза конечных свойств композитных материалов необходимо решить задачу регрессии.

На первом этапе за базовую модель принимается линейная регрессия - tf.keras.Sequential.

На следующем этапе используется м**ногослойный персептрон** с последующими экспериментами для выявления оптимальных настроек - keras. Sequential.

Линейная регрессия.

Линейная регрессия - способ выбрать из семейства функций ту, которая которая минимизирует функцию потерь. Представляет собой линейную комбинацию наперед заданных базисных функций

ПРОСТАЯ ЛИНЕЙНАЯ РЕГРЕССИЯ $(\mathsf{c}\,\mathsf{базисоm}\,(1,x))$

Регрессия — способ выбрать из семейства функций ту, которая минимизирует функцию потерь. Последняя характеризует насколько сильно пробная функция отклоняется от значений в заданных точках. Если точки получены в эксперименте, они неизбежно содержат ошибку измерений, шум, поэтому разумнее требовать, чтобы функция передавала общую тенденцию, а не точно проходила через все точки. В каком-то смысле регрессия — это «интерполирующая аппроксимация»: мы хотим провести кривую как можно ближе к точкам и при этом сохранить ее максимально простой чтобы уловить общую тенденцию. За баланс между этими противоречивыми желаниями какраз отвечает функция потерь (в английской литературе «loss function» или «cost function»).

Цель регрессии — найти коэффициенты этой линейной комбинации, и тем самым определить регрессионную функцию (которую также называют *моделью*). Отметим, что линейную регрессию называют линейной именно из-за линейной комбинации базисных функций — это не связано с самыми базисными функциями (они могут быть линейными или нет).

Регрессия с нами уже давно: впервые метод опубликовал Лежандр в 1805 году, хотя Гаусс пришел к нему раньше и успешно использовал для предсказания орбиты «кометы» (на самом деле карликовой планеты) Цереры.

Существует множество вариантов и обобщений линейной регрессии: LAD, метод наименьших квадратов, Ridge регрессия, Lasso регрессия, ElasticNet и многие другие.

Многослойный перцептрон (нейронные сети)

Перцептрон принимает обратную логит (логистическую) функцию от wx и не использует вероятностные предположения ни для модели, ни для ее параметра. Онлайновое обучение даст вам точно такие же оценки для весов / параметров модели, но вы не сможете интерпретировать их в причинноследственной связи из-за отсутствия р-значений, доверительных интервалов и, следовательно, базовой вероятностной модели.

Однослойный персептрон (англ. *Single-layer perceptron*) — перцептрон, каждый S-элемент которого однозначно соответствует одному A-элементу, S-A связи всегда имеют вес I, а порог любого A-элемента равен I. Часть однослойного персептрона соответствует модели искусственного нейрона.

Его уникальность состоит в том, что каждый S-элемент однозначно соответствует одному A-элементу, все S-A связи имеют вес, равный +1, а порог A элементов равен 1. Часть однослойного перцептрона, не содержащая входы, соответствует искусственному нейрону, как показано на картинке. Таким образом, однослойный перцептрон — это искусственный нейрон, который на вход принимает только 0 и 1.

Однослойный персептрон также может быть и элементарным персептроном, у которого только по одному слою S,A,R-элементов.

Задача обучения перцептрона — подобрать такие $w_0, w_1, w_2, \ldots, w_n$, чтобы $sign(\sigma(w_0+w_1x_{1+}w_2x_{2+\ldots+}w_nx_n))$ как можно чаще совпадал с y(x)— значением в обучающей выборке (здесь σ — функция активации). Для удобства, чтобы не тащить за собой свободный член w_0 , добавим в вектор x лишнюю «виртуальную размерность» и будем считать, что $x=(1,x_1,x_2,\ldots,x_n)$. Тогда $w_0+w_1x_{1+}w_2x_{2+\ldots+}w_nx_n$ можно заменить на w^Tx .

Чтобы обучить эту функцию, сначала выбирается функция ошибки, которую затем оптимизируется градиентным спуском. Число неверно классифицированных примеров здесь использовать неуместно, потому что эта функция кусочно-гладкая, с массой разрывов: она будет принимать только целые значения и резко меняться при переходе от одного числа неверно классифицированных примеров к другому. Поэтому следует использовать другую функцию, так называемый критерий перцептрона:

$$E_p(w) = -\sum_{x \in M} y(x) (\sigma(w^T x))$$

где M — множество примеров, которые перцептрон с весами w классифицирует неправильно.

Иначе говоря, надо минимизировать суммарное отклонение наших ответов от правильных, но только в неправильную сторону; верный ответ ничего не вносит в функцию ошибки. Умножение на y(x) здесь нужно для того, чтобы знак произведения всегда получался отрицательным: если правильный ответ -1, значит, перцептрон выдал положительное число (иначе бы ответ был верным), и наоборот. В результате получается кусочно-линейная функция, дифференцируемая почти везде, а этого вполне достаточно.

Теперь $E_p(w)$ можно оптимизировать градиентным спуском. На очередном шаге получаем:

$$w^{(\tau+1)} = w^{(\tau)} - \eta \nabla_{\mathbf{w}} E_p(w)$$

Алгоритм такой — мы последовательно проходим примеры x_1, x_2, \dots из обучающего множества, и для каждого x_n :

- если он классифицирован правильно, не меняем ничего;
- а если неправильно, прибавляем $\eta \nabla_{\mathbf{w}} E_p(w)$.

Ошибка на примере x_n при этом, очевидно, уменьшается, но, конечно, совершенно никто не гарантирует, что вместе с тем не увеличится ошибка от других примеров. Это правило обновления весов так и называется — правило обучения перцептрона, и это было основной математической идеей работы Розенблатта.

1.3 Разведочный анализ данных

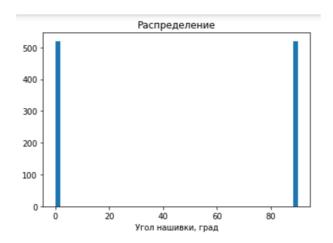
Для первоначального анализа используются методы разведочного анализа данных.

df.info()

#проверка на пропуски

```
<class 'pandas.core.frame.DataFrame'>
RangeIndex: 1040 entries, 0 to 1039
Data columns (total 13 columns):
     Column
                                               Non-Null Count
                                                                Dtype
     _____
     Угол нашивки, град
                                            1040 non-null
                                                             int64
     Шаг нашивки
 1
                                              1040 non-null
                                                               float64
 2
     Плотность нашивки
                                            1040 non-null
                                                              float64
                                          1023 non-null float64
 3
     Соотношение матрица-наполнитель
     Плотность, кг/м3
                                             1023 non-null
                                                              float64
 5
     модуль упругости, ГПа
                                            1023 non-null
                                                             float64
 6
     Количество отвердителя, м.%
                                          1023 non-null
                                                            float64
 7
     Содержание эпоксидных групп, % 2
                                          1023 non-null
                                                            float64
     Температура вспышки, С 2
 8
                                            1023 non-null
                                                              float64
     Поверхностная плотность, г/м2
 9
                                          1023 non-null
                                                           float64
 10
     Модуль упругости при растяжении, ГПа 1023 non-null
                                                          float64
     Прочность при растяжении, МПа
 11
                                           1023 non-null
                                                             float64
     Потребление смолы, г/м2
 12
                                            1023 non-null
                                                             float64
dtypes: float64(12), int64(1)
memory usage: 105.8 KB
    df.duplicated().sum()
    #проверка на дубликаты
    df.describe()
    # описательная статистика
    for col in df.columns:
      plt.title("Распределение")
      plt.xlabel(col)
      plt.ylabel("")
      plt.hist(df[col], bins = 50)
      plt.show()
```

#гистограммы распределения





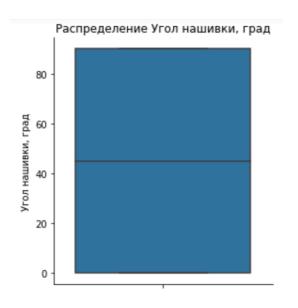
В целом по всем параметрам данные распределены нормально (как в примере с Шагом нашивки), только с Углом нашивки наблюдается анормальная картина.

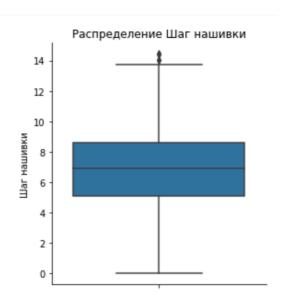
for col in df.columns:

sns.catplot(y = col, data = df, kind = 'box', height=4)

plt.title("Pacnpedeление" + str(col))

#диаграммы ящика с усами





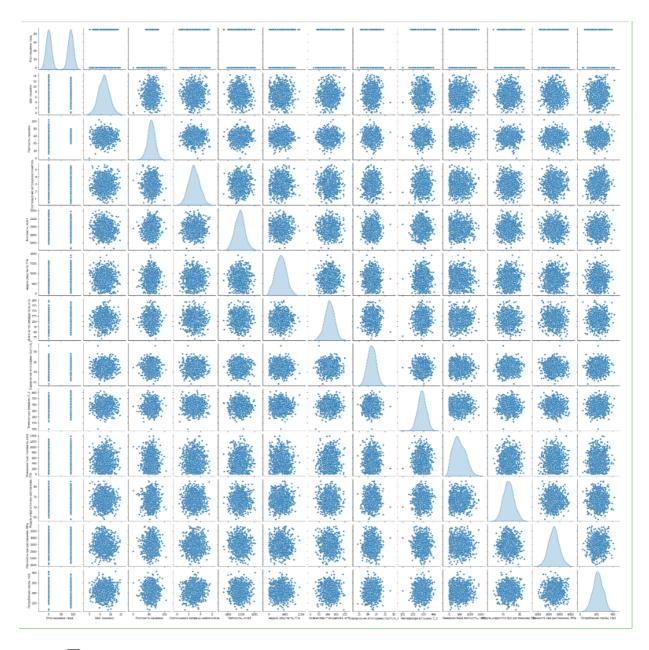
В целом по всем параметрам данные распределены нормально (как в примере с Шагом нашивки), только с Углом нашивки наблюдается анормальная картина.

 $\it df. describe (). transpose () [['mean', '50\%']]$

среднее медианное значение

Выбросов нет. все нормально sns.pairplot(df[df.columns], diag_kind='kde');

попарные графики



Получилось не наглядно.

corr = df.corr()

mask = np.triu(np.ones_like(corr, dtype=bool))

Создаем полотно для отображения графика

f, ax = plt.subplots(figsize = (12, 10))

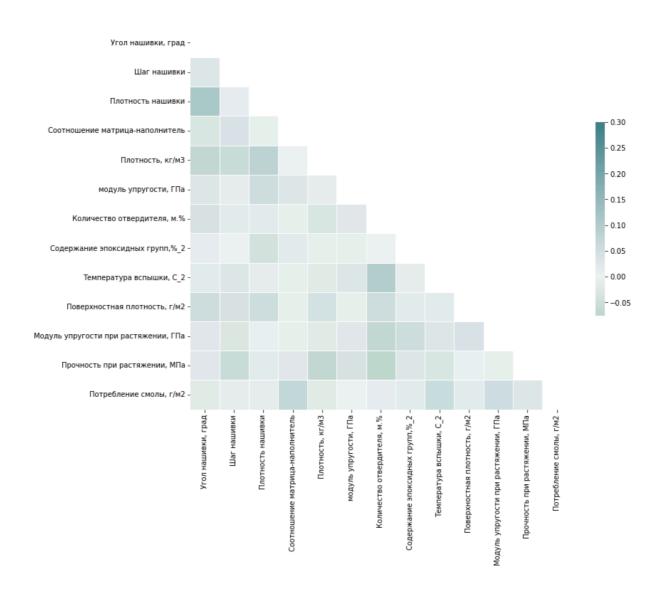
Создаем цветовую политру

cmap = sns.diverging palette(170, 200, as cmap=True)

Визуализируем данные корреляции
sns.heatmap(corr, mask=mask, cmap=cmap, vmax=.3, center=0,
square=True, linewidths=.5, cbar_kws={"shrin"

| Модель | dnn_model2 | dnn_model | linear_model | |
|----------------|------------------|------------------|---------------------|--|
| | keras.Sequential | keras.Sequential | tf.keras.Sequential | |
| loss | MAE | MAE | MAE | |
| activation | sigmoid | relu | | |
| layers.Dense | 200/20/10/2 | 40/40/2 | 2 | |
| optimizer | RMSprop | Adam | | |
| layers.Dropout | 0.6 | | | |

к": .5})#проверим корреляции признаков



Можно отметить пары количество отвердителя - температура вспышки, плотность нашивки - угол нашивки.

2. Практическая часть

сделаем копию, чтобы изменения не влияли на оригинальный dataset df2 = copy.copy(df) df2.head()

2.1 Предобработка данных

В процессе предобработки данных производится их подготовка к анализу, в результате которой они приводятся в соответствие с требованиями, определяемыми спецификой решаемой задачи.

Предобработка является важнейшим этапом Data Mining, и если она не будет выполнена, то дальнейший анализ в большинстве случаев невозможен изза того, что аналитические алгоритмы просто не смогут работать или результаты их работы будут некорректными. Иными словами, реализуется принцип GIGO — garbage in, garbage out (мусор на входе, мусор на выходе).

Предобработка данных включает три направления: удаление, нормализацию и стандартизацию.

df.isnull().sum()

#проверим какое количество выбросов по каждому столбцу

| Угол нашивки, град | 0 |
|--------------------------------------|----|
| Шаг нашивки | 0 |
| Плотность нашивки | 0 |
| Соотношение матрица-наполнитель | 17 |
| Плотность, кг/м3 | 17 |
| модуль упругости, ГПа | 17 |
| Количество отвердителя, м.% | 17 |
| Содержание эпоксидных групп, %_2 | 17 |
| Температура вспышки, С_2 | 17 |
| Поверхностная плотность, г/м2 | 17 |
| Модуль упругости при растяжении, ГПа | 17 |
| Прочность при растяжении, МПа | 17 |
| Потребление смолы, г/м2 | 17 |
| dtype: int64 | |

Учитывая, что количество выбросов довольно мало, можно просто удалить эти строки.

Удаление пропусков произведено с использованием df = df.dropna()

#удаление пропусков

df2.isna().sum()

теперь пропусков нет

| Угол нашивки, град | 0 |
|--------------------------------------|---|
| Шаг нашивки | 0 |
| Плотность нашивки | 0 |
| Соотношение матрица-наполнитель | 0 |
| Плотность, кг/м3 | 0 |
| модуль упругости, ГПа | 0 |
| Количество отвердителя, м.% | 0 |
| Содержание эпоксидных групп, %_2 | 0 |
| Температура вспышки, С_2 | 0 |
| Поверхностная плотность, г/м2 | 0 |
| Модуль упругости при растяжении, ГПа | 0 |
| Прочность при растяжении, МПа | 0 |
| Потребление смолы, г/м2 | 0 |
| dtype: int64 | |

min_max_scaler = preprocessing.MinMaxScaler()
 norm_df = pd.DataFrame(min_max_scaler.fit_transform(df2),
 columns = df2.columns,
 index = df2.index)
 norm_df

norm_df.describe()

max

1.000000

1.000000

1.000000

#нормализуем значения

| Угол нашивки, град | Шаг нашивки | Плотность нашивки | Соотношение матрица- наполнитель | Плотность, кг/м3 | модуль упругости, ГПа | Количество отвердителя, м.% | Содержание эпоксидных групп,%_2 | Температура вспышки, С_2 | Поверхностная плотность, г/ м2 | Моду. упругос п∣ растяжени ГІ |
|--------------------------|---|---|---|---|---|---|---|--|---|---|
| 023.000000 | 1023.000000 | 1023.000000 | 1023.000000 | 1023.000000 | 1023.000000 | 1023.000000 | 1023.000000 | 1023.000000 | 1023.000000 | 1023.0000 |
| 0.491691 | 0.477768 | 0.549616 | 0.488427 | 0.512533 | 0.386301 | 0.512273 | 0.426215 | 0.593354 | 0.344638 | 0.4978 |
| 0.500175 | 0.177519 | 0.118772 | 0.175541 | 0.154890 | 0.172978 | 0.156147 | 0.128370 | 0.130695 | 0.201092 | 0.1674 |
| 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.000000 | 0.0000 |
| 0.000000 | 0.351790 | 0.478890 | 0.370696 | 0.404175 | 0.260652 | 0.412240 | 0.338919 | 0.507756 | 0.190296 | 0.3860 |
| 0.000000 | 0.478940 | 0.551423 | 0.483912 | 0.516497 | 0.386165 | 0.512240 | 0.425487 | 0.593401 | 0.322574 | 0.4946 |
| 1.000000 | 0.594597 | 0.624537 | 0.608045 | 0.608413 | 0.502528 | 0.618003 | 0.517842 | 0.679924 | 0.495105 | 0.6067 |
| | 23.000000 0.491691 0.500175 0.000000 0.000000 | нашивки, град Пашивки нашивки 23.000000 1023.000000 0.491691 0.477768 0.500175 0.177519 0.000000 0.000000 0.000000 0.351790 0.000000 0.478940 | нашивки, град Шаг нашивки град Плотность нашивки 23.000000 1023.000000 1023.000000 0.491691 0.477768 0.549616 0.500175 0.177519 0.118772 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.351790 0.478890 0.000000 0.478940 0.551423 | нашивки, град Шаг нашивки град Плотность нашивки наполнитель матрицанаполнитель 23.000000 1023.000000 1023.000000 1023.000000 0.491691 0.477768 0.549616 0.488427 0.500175 0.177519 0.118772 0.175541 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.351790 0.478890 0.370696 0.000000 0.478940 0.551423 0.483912 | нашивки, град Шаг нашивки град Плотность, нашивки наполнитель матрицаналонитель Плотность, кг/м3 23.000000 1023.000000 1023.000000 1023.000000 1023.000000 1023.000000 0.491691 0.477768 0.549616 0.488427 0.512533 0.500175 0.177519 0.118772 0.175541 0.154890 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.351790 0.478890 0.370696 0.404175 0.000000 0.478940 0.551423 0.483912 0.516497 | нашивки, град Шаг нашивки Плотность нашивки матрицанаполнитель Плотность, кг/м3 упругости, ГПа 23.000000 1023.00000 | нашивки, град Шаг нашивки град Плотность нашивки нашивки матрицанаполнитель Плотность, кг/м3 упругости, гПа отвердителя, м.% 23.000000 1023.000000 0.312240 0.512240 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 < | нашивки, град Шаг нашивки град Плотность нашивки нашивки вышивки град матрицанаполнитель кг/м3 упругости, гПа отвердителя, м.% эпоксидных групп,%_2 23.000000 1023.00000 | нашивки, град Шаг нашивки град Плотность нашивки нашивки ванивки матрицаналогичеть наполнитель Плотность, кг/м3 упругости, гПа отвердителя, м.% эпоксидных групп, %_2 вспышки, групп, %_2 23.000000 1023.000000 </th <th>нашивки, град Нашивки нашивки нашивки нашивки нашивки наполнитель кг/м3 упругости, гПа отвердителя, мм.% групп,%_2 вспышки, сС_2 плотность, г/ м2 23.000000 1023.00000 1023.000000 1023.000000 1023.000000 1023.000000 1023.000000 1023.000000 1023.000000 1023.000000 1023.000000 1023.000000 1023.000000 1023.000000 1023.000000 1023.000000 1023.00000 1023.000000 1023.000000 1023.000000 1023.0</th> | нашивки, град Нашивки нашивки нашивки нашивки нашивки наполнитель кг/м3 упругости, гПа отвердителя, мм.% групп,%_2 вспышки, сС_2 плотность, г/ м2 23.000000 1023.00000 1023.000000 1023.000000 1023.000000 1023.000000 1023.000000 1023.000000 1023.000000 1023.000000 1023.000000 1023.000000 1023.000000 1023.000000 1023.000000 1023.000000 1023.00000 1023.000000 1023.000000 1023.000000 1023.0 |

1.000000

1.000000

1.000000 1.000000 1.000000

1.000000

1.000000

1.0000

#нормализация выполнена

```
s_scaler = preprocessing.StandardScaler()
standart_df = pd.DataFrame(s_scaler.fit_transform(df2),
    columns = df2.columns,
    index = df2.index)
standart_df
```

#стандартизируем значения

| | Угол нашивки, град | Шаг нашивки | Плотность нашивки | Соотношение матрица- наполнитель | Плотность, кг/м3 | модуль упругости, ГПа | Количество отвердителя, м.% | Содержание эпоксидных групп,%_2 | Температура вспышки, С_2 | Поверхностная плотность, г/ м2 | Модуль упругости при растяжении, ГПа | Прі расті |
|--------|--------------------------|----------------|----------------------|--|---------------------|-----------------------------|-----------------------------------|---------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|--|--------------|
| 0 | -0.983518 | -1.131530 | -0.012469 | -1.175779 | 0.736365 | -0.003594 | -2.848828 | 0.009757 | -4.542215 | -0.969964 | -1.067720 | 1 |
| 1 | -0.983518 | -1.131530 | 0.230546 | -1.175779 | 0.736365 | -0.003594 | -2.141666 | 0.626001 | -0.030955 | -0.969964 | -1.067720 | 1 |
| 2 | -0.983518 | -1.131530 | 1.040595 | -1.175779 | 0.736365 | -0.003594 | -2.145202 | 4.471955 | -0.030955 | -0.969964 | -1.067720 | 1 |
| 3 | -0.983518 | -0.741243 | -0.822518 | -1.175779 | 0.736365 | -0.003594 | 0.651622 | -0.413446 | 0.344984 | -0.969964 | -1.067720 | 1 |
| 4 | -0.983518 | -0.741243 | -0.012469 | -0.174232 | 0.736365 | 0.039618 | 0.045585 | 0.009757 | -0.030955 | -0.969964 | -1.067720 | 1 |
| | | | | | | | | | | | | |
| 1018 | 1.016758 | 0.849718 | -0.820917 | -0.721995 | -0.320884 | 0.523926 | -0.833694 | -0.881925 | 0.950375 | -0.972814 | -0.076219 | -C |
| 1019 | 1.016758 | 1.430947 | -0.275671 | 0.562741 | 1.008971 | -0.894327 | 1.252072 | -1.099577 | -0.773808 | -0.469707 | -0.130794 | -C |
| 1020 | 1.016758 | -1.068634 | 0.848588 | 0.383707 | -0.045622 | -0.978843 | -0.001319 | 0.712276 | -0.915350 | 0.915476 | 0.450935 | С |
| 1021 | 1.016758 | -0.228717 | 0.089684 | 0.849043 | 1.235730 | 0.004703 | 1.089990 | -1.246274 | -0.246860 | 0.564542 | 0.229077 | -C |
| 1022 | 1.016758 | -0.320161 | 1.642823 | 0.961522 | -1.157793 | -0.977389 | 0.658107 | 2.174679 | 0.368264 | 0.981645 | 0.314722 | C |
| 1023 r | ows × 13 c | olumns | | | | | | | | | | |

2.2. Разработка и обучение модели

В данной части приводится список моделей, которые будут использоваться для прогноза модуля упругости при растяжении и прочности при растяжении.

Для прогноза модуля упругости при растяжении и прочности при растяжении данные были разделены в соотношении:

- 70% обучение модели;
- 30% тестирование модели.

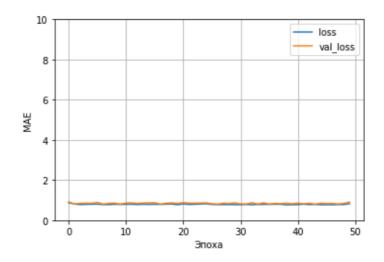
Были использованы следующие модели:

- Модель 1 линейная регрессия leaner_model;
- Модель 2- многослойный персептрон dnn model;
- Модель 3 проведены эксперименты с многослойным персептроном dnn_model2.

Модель 1 - линейная регрессия leaner_model

```
plot_loss(history)
linear_model.evaluate(X_test, y_test, verbose=0)
```

0.941592812538147

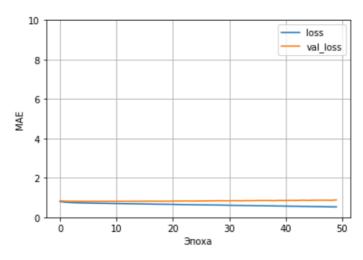


Модель 2 многослойный персептрон 2 dnn_model

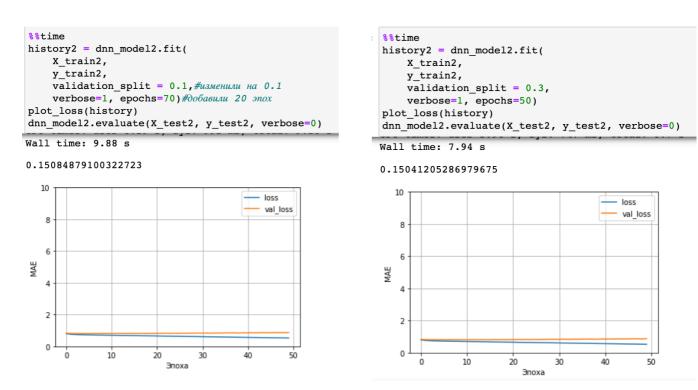
```
%%time
history = dnn_model.fit(
    X_train,
    y_train,
    validation_split=0.2,
    verbose=0, epochs=50)
plot_loss(history)
dnn_model.evaluate(X_test, y_test, verbose=0)
```

CPU times: user 3.98 s, sys: 696 ms, total: 4.67 s Wall time: 4.33 s

0.9466024041175842



Модель 3 – измененный многослойный персептрон dnn model2.



2.3. Тестирование модели

Mean absolute error

Для каждой модели были определены средние абсолютные ошибки на тренировочной и тестирующей части выборке. Тестовая часть одинаково преобразована для всех моделей (удалены пропуски и проведена нормализация).

```
pd.DataFrame(test_results, index=['Mean absolute error']).T
```

| | Weari absolute error |
|--------------|----------------------|
| linear_model | 0.941593 |
| dnn_model | 0.946602 |
| dnn_model2 | 0.150412 |

Для модели dnn_model2 выявлена наименьшая абсолютная средняя ошибка.

2.4. Написать нейронную сеть, которая будет рекомендовать соотношение матрица.

Для прогнозирования соотношения матрица — наполнитель была выбрана модель dnn_model2. Активационная функция sigmoid, оптимизатор RMSprop, функция потерь MAE, 3 скрытых слоя определены экспериментальным путем, на выходе 1 нейрон.

2.5. Разработка приложения

Для отображения результата прогнозирования пользователю необходимо ввести известные характеристики (тип float) и нажать кнопку «Отправить», ответ будет выведен в строке «Результат».

Прогноз соотношения матрица - наполнитель

Работа приложения показана на рисунках ниже.

Результат: 0.0 Угол нашивки, град 4.0 Шаг нашивки 57.0 Плотность нашивки 2030.0 Плотность, кг/м3 738.736842 Модуль упругости, ГПа 30.0 Количество отвердителя, м.% 22.267857 Содержание эпоксидных групп,% 2 100.000000 Температура вспышки, С_2 210.0 Поверхностная плотность, г/м2 70.0 Модуль упругости при растяжении, ГПа 3000.0 Прочность при растяжении, МПа 220.0 Потребление смолы, г/м2 Отправить

2.6.Создание удаленного репозитория и загрузка результатов работы на него.

Создан репозиторий в GitHub, где размещен код исследования, оформлен файл README.

Страница: https://github.com/AlexLeshchinskiy/GraduationWork

Репозиторий: GraduationWork

Коммиты в репозитории:

- 1. Презентация Выпускная квалификационная работа по курсу «Data Science» (файлы VKR presentation.pdf и .pptx)
- 2. Jupiter ноутбук в котором проводилось исследование задачи (Файл VKR_Notebook.ipynb)
- 3. Выпускная квалификационная работа по курсу «Data Science» (Файл VKR_LeshchinskiyAleksander.docx и.pdf)
 - 4. Модель (Файл «VKR keras model.h5»)
- 5. Jupiter ноутбук в котором запускалось Приложение на Flask (Файл «VKR_apps.ipynb»)

3. Заключение

В результате работы было проведено исследования с использованием методов, изученных на курсе «Data Science». и построены несколько прогнозных моделей. Результаты проекта сформированы.

Описанные выше подходы возможно использовать только как обучающие, для промышленного использования не подходят.

4. Библиографический список

- 1. Шакирьянов Э. Д. Ш17 Компьютерное зрение на Python. Первые шаги / Э. Д. Шакирьянов. -- Электрон. изд. М.: Лаборатория знаний, 2021. 163 с. (Школа юного инженера). Систем. требования: Adobe Reader XI; экран 10". Загл. с титул. экрана. Текст: электронный.
- 2. Бизли Д. Python. Подробный справочник: учебное пособие. Пер. с англ. СПб.: Символ-Плюс, 2010. 864 с., ил.
- 3. Силен Дэви, Мейсман Арно, Али Мохамед. Основы Data Science и Big Data. Python и наука о данных. СПб.: Питер, 2017. 336 с.: ил.
- 4. Траск Эндрю. Грокаем глубокое обучение. СПб.: Питер, 2019. 352 с.: ил.

- 5. Уилан, Чарльз. Голая статистика. Самая интересная книга о самой скучной науке / Чарльз Уилан; пер. с англ. И. Веригина; [науч. ред. А. Минько]. М.: Манн, Иванов и Фербер, 2016. 352 с.
- 6. Джоэл Грас. Data Sience. Наука о данных с нуля: Пер. с англ. 2-е изд., перераб. и доп. СПб.: БХВ-Петербург, 2022 416с.: ил.
- 7. Д.А. Иванов А.И., Ситников, С.Д Шляпин Композиционные материалы: учебное пособие для вузов, 2019. 13 с.
- 8. А.А. Миронов. Машинное обучение часть I ст.9
- 9. Чун-Те Чен и Грейс X. Гу. Машинное обучение для композитных материалов (март 2019г.) Режим доступа: https://www.cambridge.org/core/journals/mrs-communications/article/machine-learning-for-composite-materials/F54F60AC0048291BA47E0B671733ED15.
- 10. Язык программирования Python- Режим доступа: https://www.python.org/.
- 11. Среда разработки Jupyter Notebook- Режим доступа: https://jupyter.org/.
- 12. Библиотека Tensorflow: Режим доступа: https://www.tensorflow.org/.
- 13.Документация по библиотеке numpy: Режим доступа: https://numpy.org/doc/1.22/user/index.html#user
- 14.Документация по библиотеке pandas: Режим доступа: https://pandas.pydata.org/docs/user_guide/index.html#user-guide
- 15.Документация по библиотеке matplotlib: Режим доступа: https://matplotlib.org/stable/users/index.html
- 16.Документация по библиотеке seaborn: Режим доступа: https://seaborn.pydata.org/tutorial.html
- 17.Документация по библиотеке sklearn: Режим доступа: https://scikit-learn.org/stable/user-guide.html
- 18. Документация по библиотеке keras: Режим доступа: https://keras.io/api/
- 19. Руководство по быстрому старту в flask: Режим доступа: https://flask-russian-docs.readthedocs.io/ru/latest/quickstart.html.

5. Приложения

- 1. Презентация Выпускная квалификационная работа по курсу «Data Science» (файлы VKR presentation.pdf и .pptx)
- 2. Jupiter ноутбук в котором проводилось исследование задачи (Файл VKR_Notebook.ipynb)
- 3. Выпускная квалификационная работа по курсу «Data Science» (Файл VKR LeshchinskiyAleksander.docx и.pdf)
 - 4. Модель (Файл «VKR_keras_model.h5»)
- 5. Jupiter ноутбук в котором запускалось Приложение на Flask (Файл «VKR_apps.ipynb»)