

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 Трифонова Наталья Сергеевна

Москва, 2022

Содержание

Содержание.....	2
Введение	3
1 Аналитическая часть	4
1.1 Постановка задачи.....	4
1.2 Описание используемых методов.....	5
1.3 Разведочный анализ данных	14
2 Практическая часть	20
2.1 Предобработка данных.....	20
2.2 Разработка и обучение модели.....	20
2.4 Написать нейронную сеть, которая будет рекомендовать соотношение «матрица-наполнитель»	23
2.5 Разработка приложения	25
2.6 Создание удалённого репозитория и загрузка.....	27
2.7 Заключение	28
2.8 Список используемой литературы и веб ресурсы.....	29

Введение

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). 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. Кейс основан на реальных производственных задачах Центра НТИ «Цифровое материаловедение: новые материалы и вещества» (структурное подразделение МГТУ им. Н.Э. Баумана). Актуальность: Созданные прогнозные модели помогут сократить количество проводимых испытаний, а также пополнить базу данных материалов возможными новыми характеристиками материалов, и цифровыми двойниками новых композитов.

Традиционно разработка композитных материалов является долгосрочным процессом, так как из свойств отдельных компонентов невозможно рассчитать конечные свойства композита. Для достижения

определенных характеристик требуется большое количество различных комбинированных тестов, что делает насущной задачу прогнозирования успешного решения, снижающего затраты на разработку новых материалов.

1. Аналитическая часть

1.1. Постановка задачи

Для исследовательской работы были даны 2 файла: X_br.xlsx (с данными о параметрах, состоящий из 1023 строк и 10 столбцов данных) и X_nur.xlsx (данными нашивок, состоящий из 1040 строк и 3 столбцов данных).

Для разработки моделей по прогнозу модуля упругости при растяжении, прочности при растяжении и соотношения «матрица-наполнитель» нужно объединить 2 файла. Объединение по типу INNER, поэтому часть информации (17 строк таблицы X_nur.xlsx) не имеет соответствующих строк в таблице X_br.xlsx и будет удалена.

Также необходимо провести разведочный анализ данных, нарисовать гистограммы распределения каждой из переменной, диаграммы boxplot (ящик с усами), попарные графики рассеяния точек.

Для каждой колонки получить среднее, медианное значение, провести анализ и исключение выбросов, проверить наличие пропусков; сделать предобработку: удалить шумы и выбросы, сделать нормализацию и стандартизацию.

Обучить несколько моделей для прогноза модуля упругости при растяжении и прочности при растяжении. Написать нейронную сеть, которая будет рекомендовать соотношение матрица-наполнитель. Разработать приложение с графическим интерфейсом, которое будет выдавать прогноз соотношения «матрица-наполнитель». Оценить точность модели на тренировочном и тестовом датасете. Создать репозиторий в GitHub и разместить код исследования. Оформить файл README

1.2. Описание используемых методов

Данная задача в рамках классификации категорий машинного обучения относится к машинному обучению с учителем и традиционно это задача регрессии. Цель любого алгоритма обучения с учителем — определить функцию потерь и минимизировать её, поэтому для наилучшего решения были исследованы (и некоторые из них применены) следующие методы:

- линейная регрессия (Linear regression);
- лассо регрессия (Lasso);
- гребневая регрессия (Ridge);
- эластичная регрессия (ElasticNet) ;
- градиентный бустинг (GradientBoostingRegressor);
- К-ближайших соседей (KNeighborsRegressor);
- дерево решений (DecisionTreeRegressor);
- случайный лес (RandomForest);
- градиентный бустинг (AdaBoostRegressor);
- стохастический градиентный спуск (SGDRegressor);
- метод опорных векторов (Support Vector Regression);
- многослойный перцептрон.

Линейная регрессия (Linear regression) — это алгоритм машинного обучения, основанный на контролируемом обучении, рассматривающий зависимость между одной входной и выходными переменными. Это один из самых простых и эффективных инструментов статистического моделирования. Она определяет зависимость переменных с помощью линии наилучшего соответствия. Модель регрессии создаёт несколько метрик. R^2 , или коэффициент детерминации, позволяет измерить, насколько модель может объяснить дисперсию данных. Если R-квадрат равен 1, это значит, что модель описывает все данные. Если же R-квадрат равен 0,5, модель объясняет лишь 50 процентов дисперсии данных. Оставшиеся отклонения не имеют объяснения. Чем ближе R^2 к единице, тем лучше.

Достоинства метода: быстр и прост в реализации; легко интерпретируем, имеет меньшую сложность по сравнению с другими алгоритмами.

Недостатки метода: моделирует только прямые линейные зависимости;

требует прямую связь между зависимыми и независимыми переменными; выбросы оказывают огромное влияние, а границы линейны.

Чтобы улучшить Линейную модель путем обмена некоторой этой дисперсии с предвзятостью, чтобы уменьшить нашу общую ошибку. Это происходит при помощи регуляризации, в которой модифицируется функция стоимости, чтобы ограничить значения коэффициентов. Это позволяет изменить чрезмерную дисперсию на некоторое смещение, потенциально уменьшая общую ошибку.

Лассо регрессия (Lasso) – это линейная модель, которая оценивает разреженные коэффициенты. Это простой метод, позволяющий уменьшить сложность модели и предотвратить переопределение, которое может возникнуть в результате простой линейной регрессии. Данный метод вводит дополнительное слагаемое регуляризации в оптимизацию модели. Это даёт более устойчивое решение. В регрессии лассо добавляется условие смещения в функцию оптимизации для того, чтобы уменьшить коллинеарность и, следовательно, дисперсию модели. Но вместо квадратичного смещения, используется смещение абсолютного значения. Лассо регрессия хорошо прогнозирует модели временных рядов на основе регрессии, таким как авторегрессии.

Достоинства метода: легко полностью избавляется от шумов в данных; быстро работает; не очень энергоёмко; способно полностью убрать признак из датасета; доступно обнуляет значения коэффициентов.

Недостатки метода: часто страдает качество прогнозирования; выдаёт ложное срабатывание результата; случайным образом выбирает одну из коллинеарных переменных; не оценивает правильность формы взаимосвязи между независимой и зависимой переменными; не всегда лучше, чем пошаговая регрессия.

$$\min_{\beta \in \mathbb{R}^p} \left\{ \frac{1}{N} \|y - X\beta\|_2^2 + \lambda \|\beta\|_1 \right\}$$

Лассо-регрессию следует использовать, когда есть несколько характеристик с высокой предсказательной способностью, а остальные бесполезны. Она обнуляет бесполезные характеристики и оставляет только подмножество переменных.

Гребневая регрессия (Ridge) – это регрессия, которая добавляет дополнительный штраф к функции стоимости, но вместо этого суммирует квадраты значений коэффициентов (норма L-2) и умножает их на некоторую постоянную лямбду. По сравнению с Лассо этот штраф регуляризации уменьшит значения коэффициентов, но не сможет принудительно установить коэффициент равным 0. Это ограничивает использование регрессии гребня в отношении выбора признаков. Однако, когда $p > n$, он способен выбрать более n релевантных предикторов, если необходимо, в отличие от Лассо. Он также выберет группы коллинеарных элементов, которые его изобретатели называли «эффектом группировки».

Как и в случае с Лассо, мы можем варьировать лямбду, чтобы получить модели с различными уровнями регуляризации, где лямбда = 0 соответствует OLS, а лямбда приближается к бесконечности, что соответствует постоянной функции.

Анализ регрессии Лассо, так и Риджа показывает, что ни один метод не всегда лучше, чем другой; нужно попробовать оба метода, чтобы определить, какой использовать.

$$\hat{\beta}^{ridge} = \underset{\beta \in \mathbb{R}}{\operatorname{argmin}} \|y - XB\|_2^2 + \lambda \|B\|_2^2$$

Ридж-регрессию лучше применять, когда предсказательная способность набора данных распределена между различными характеристиками. Ридж-регрессия не обнуляет характеристики, которые могут быть полезны при составлении прогнозов, а просто уменьшает вес большинства переменных в модели.

Эластичная сеть (ElasticNet) – это регрессия, которая включает в себя термины регуляризации как L-1, так и L-2. Это дает преимущества регрессии Лассо и Риджа. Было установлено, что он обладает предсказательной способностью лучше, чем у Лассо, хотя все еще выполняет выбор функций. Поэтому получается лучшее из обоих методов, выполняя выбор функции Лассо с выбором группы объектов Ridge.

Elastic Net поставляется с дополнительными издержками на определение двух лямбда-значений для оптимальных решений.

Компромисс смещения дисперсии - это компромисс между сложной и

простой моделью, в которой промежуточная сложность, вероятно, является наилучшей.

Лассо, Ридж-регрессия и Эластичная сеть - это модификации обычной линейной регрессии наименьших квадратов, которые используют дополнительные штрафные члены в функции стоимости, чтобы сохранить значения коэффициента небольшими и упростить модель.

Лассо полезно для выбора функций, когда наш набор данных имеет функции с плохой предсказательной силой.

Регрессия гребня полезна для группового эффекта, при котором коллинеарные элементы могут быть выбраны вместе.

Elastic Net сочетает в себе регрессию Лассо и Риджа, что потенциально приводит к модели, которая является простой и прогнозирующей.

$$\hat{\beta} \equiv \underset{\beta}{\operatorname{argmin}} (\|y - X\beta\|^2 + \lambda_2 \|\beta\|^2 + \lambda_1 \|\beta\|_1).$$

Градиентный бустинг (Gradient Boosting) — это ансамбль деревьев решений, обученный с использованием градиентного бустинга. В основе данного алгоритма лежит итеративное обучение деревьев решений с целью минимизировать функцию потерь. Основная идея градиентного бустинга: строятся последовательно несколько базовых классификаторов, каждый из которых как можно лучше компенсирует недостатки предыдущих. Финальный классификатор является линейной композицией этих базовых классификаторов.

Достоинства метода: новые алгоритмы учатся на ошибках предыдущих; требуется меньше итераций, чтобы приблизиться к фактическим прогнозам; наблюдения выбираются на основе ошибки; прост в настройке темпа обучения и применения; легко интерпретируем.

Недостатки метода: необходимо тщательно выбирать критерии остановки, или это может привести к переобучению, наблюдения с наибольшей ошибкой появляются чаще; слабее и менее гибко, чем нейронные сети.

Метод ближайших соседей - K-ближайших соседей (kNN - k Nearest Neighbours) ищет ближайшие объекты с известными значениями целевой переменной и основывается на хранении данных в памяти для сравнения с новыми элементами. Алгоритм находит расстояния между запросом и всеми

примерами в данных, выбирая определенное количество примеров (k), наиболее близких к запросу, затем голосует за наиболее часто встречающуюся метку (в случае задачи классификации) или усредняет метки (в случае задачи регрессии).

Достоинства метода: прост в реализации и понимании полученных результатов; имеет низкую чувствительность к выбросам; не требует построения модели; допускает настройку нескольких параметров; позволяет делать дополнительные допущения; универсален; находит лучшее решение из возможных; решает задачи небольшой размерности.

Недостатки метода: замедляется с ростом объёма данных; не создаёт правил; не обобщает предыдущий опыт; основывается на всем массиве доступных исторических данных; невозможно сказать, на каком основании строятся ответы; сложно выбрать близость метрики; имеет высокую зависимость результатов классификации от выбранной метрики; полностью перебирает всю обучающую выборку при распознавании; имеет вычислительную трудоемкость.

Дерево решений (DecisionTreeRegressor) – метод автоматического анализа больших массивов данных. Это инструмент принятия решений, в котором используется древовидная структура, подобная блок-схеме, или модель решений и всех их возможных результатов, включая результаты, затраты и полезность. Дерево принятия решений – эффективный инструмент интеллектуального анализа данных и предсказательной аналитики. Алгоритм дерева решений подпадает под категорию контролируемых алгоритмов обучения. Он работает как для непрерывных, так и для категориальных выходных переменных. Правила генерируются за счёт обобщения множества отдельных наблюдений (обучающих примеров), описывающих предметную область. Регрессия дерева решений отслеживает особенности объекта и обучает модель в структуре дерева прогнозированию данных в будущем для получения значимого непрерывного вывода. Дерево решений один из вариантов решения регрессионной задачи, в случае если зависимость в данных не имеет очевидной корреляции.

Достоинства метода: помогают визуализировать процесс принятия решения и сделать правильный выбор в ситуациях, когда результаты одного

решения влияют на результаты следующих решений, создаются по понятным правилам; просты в применении и интерпретации; заполняют пропуски в данных наиболее вероятным решением; работают с разными переменными; выделяют наиболее важные поля для прогнозирования

Недостатки метода: ошибаются при классификации с большим количеством классов и небольшой обучающей выборкой; имеют нестабильный процесс (изменение в одном узле может привести к построению совсем другого дерева); имеет затратные вычисления; необходимо обращать внимание на размер; ограниченное число вариантов решения проблемы.

Случайный лес (RandomForest) — это множество решающих деревьев.

Универсальный алгоритм машинного обучения с учителем, представитель ансамблевых методов. Если точность дерева решений оказалась недостаточной, мы можем множество моделей собрать вместе.

Достоинства метода: не переобучается; не требует предобработки входных данных; эффективно обрабатывает пропущенные данные, данные с большим числом классов и признаков; имеет высокую точность предсказания и внутреннюю оценку обобщающей способности модели, а также высокую параллелизуемость и масштабируемость.

Недостатки метода: построение занимает много времени; сложно интерпретируемый; не обладает возможностью экстраполяции; может недообучаться; трудоёмко прогнозируемый; иногда работает хуже, чем линейные методы.

Градиентный бустинг (AdaBoost) — это алгоритм, который работает по принципу перевзвешивания результатов. Есть деревья решений, а ансамбль из них это градиентный бустинг, задача решается с помощью градиентного спуска. Алгоритм AdaBoost учится на ошибках, больше концентрируясь на сложных участках, с которыми от столкнулся в процессе предыдущей итерации обучения. На каждой итерации дается вес алгоритмам. Каждый новый алгоритм корректирует ошибки предыдущих до получения хорошего результата. Все прогнозы объединяются с помощью голосования для получения окончательного прогноза.

Достоинства метода:

AdaBoost легко реализовать, достаточно класса моделей и их количества.

Он итеративно исправляет ошибки слабого классификатора и повышает точность путем объединения слабых учащихся.

Можно использовать многие базовые классификаторы с AdaBoost.

AdaBoost не склонен к переоснащению.

Недостатки метода:

AdaBoost чувствителен к шумным данным.

AdaBoost обучается дольше линейной регрессии, классификация дольше чем при использовании логистической регрессии.

На AdaBoost сильно влияют отклонения, так как он пытается идеально подогнать каждую точку.

AdaBoost работает медленнее и чуть хуже, чем XGBoost. Но легче в понимании.

Стохастический градиентный спуск (SGDRegressor) — это простой, но очень эффективный подход к подгонке линейных классификаторов и регрессоров под выпуклые функции потерь. Этот подход подразумевает корректировку весов нейронной сети, используя аппроксимацию градиента функционала, вычисленную только на одном случайном обучающем примере из выборки.

Достоинства метода: эффективен; прост в реализации; имеет множество возможностей для настройки кода; способен обучаться на избыточно больших выборках.

Недостатки метода: требует ряд гиперпараметров; чувствителен к масштабированию функций; может не сходиться или сходиться слишком медленно; функционал многоэкстремален; процесс может "застрять" в одном из локальных минимумов; возможно переобучение.

Метод опорных векторов (Support Vector Regression) – этот бинарный линейный классификатор был выбран, потому что он хорошо работает на небольших датасетах. Данный алгоритм – это алгоритм обучения с учителем, использующихся для задач классификации и регрессионного анализа, это контролируемое обучение моделей с использованием схожих алгоритмов для анализа данных и распознавания шаблонов. Учитывая обучающую выборку, где

алгоритм помечает каждый объект, как принадлежащий к одной из двух категорий, строит модель, которая определяет новые наблюдения в одну из Категорий. Модель метода опорных векторов – отображение данных точками в пространстве, так что между наблюдениями отдельных категорий имеется разрыв.

Каждый объект данных представляется как вектор (точка) в p -мерном пространстве. Он создаёт линию или гиперплоскость, которая разделяет данные на классы.

Достоинства метода: для классификации достаточно небольшого набора данных. При правильной работе модели, построенной на тестовом множестве, вполне возможно применение данного метода на реальных данных. Эффективен при большом количестве гиперпараметров. Способен обрабатывать случаи, когда гиперпараметров больше, чем количество наблюдений. Существует возможность гибко настраивать разделяющую функцию. Алгоритм максимизирует разделяющую полосу, которая, как подушка безопасности, позволяет уменьшить количество ошибок классификации.

Недостатки метода: неустойчивость к шуму, поэтому в работе была проведена тщательнейшая работа с выбросами, иначе в обучающих данных шумы становятся опорными объектами-нарушителями и напрямую влияют на построение разделяющей гиперплоскости; для больших наборов данных требуется долгое время обучения; достаточно сложно подбирать полезные преобразования данных; параметры модели сложно интерпретировать, поэтому были рассмотрены и другие методы.

Многослойный персептрон (MLPRegressor) — это алгоритм обучения с учителем, который изучает функцию $f(\cdot): R^m \rightarrow R^o$ обучением на наборе данных, где m — количество измерений для ввода и o — количество размеров для вывода. Это искусственная нейронная сеть, имеющая 3 или более слоёв персептронов. Эти слои - один входной слой, 1 или более скрытых слоёв и один выходной слой персептронов.

Достоинства метода: построение сложных разделяющих поверхностей; возможность осуществления любого отображения входных векторов в выходные; легко обобщает входные данные; не требует распределения входных векторов;

изучает нелинейные модели.

Недостатки метода: имеет невыпуклую функцию потерь; разные инициализации случайных весов могут привести к разной точности проверки; требует настройки ряда гиперпараметров; чувствителен к масштабированию функций.

Используемые метрики качества моделей:

R² (*коэффициент детерминации*) измеряет долю дисперсии, объяснённую моделью, в общей дисперсии целевой переменной.

Если он близок к единице, то модель хорошо объясняет данные, если же он близок к нулю, то качество прогноза идентично средней величине целевой переменной (т.е. очень низкое). Отрицательные значения коэффициента детерминации означают плохую объясняющую способность модели.

MSE (Mean Squared Error) (*средняя квадратичная ошибка*) принимает значения в тех же единицах, что и целевая переменная. Чем ближе к нулю MSE, тем лучше работают предсказательные качества модели.

1.3. Разведочный анализ данных

Прежде чем передать данные в работу моделей машинного обучения, необходимо обработать и очистить их. Необработанные данные могут содержать искажения и пропущенные значения и способны привести к неверным результатам по итогам моделирования. Но безосновательно удалять что-либо тоже неправильно. Именно поэтому сначала набор данных надо изучить.

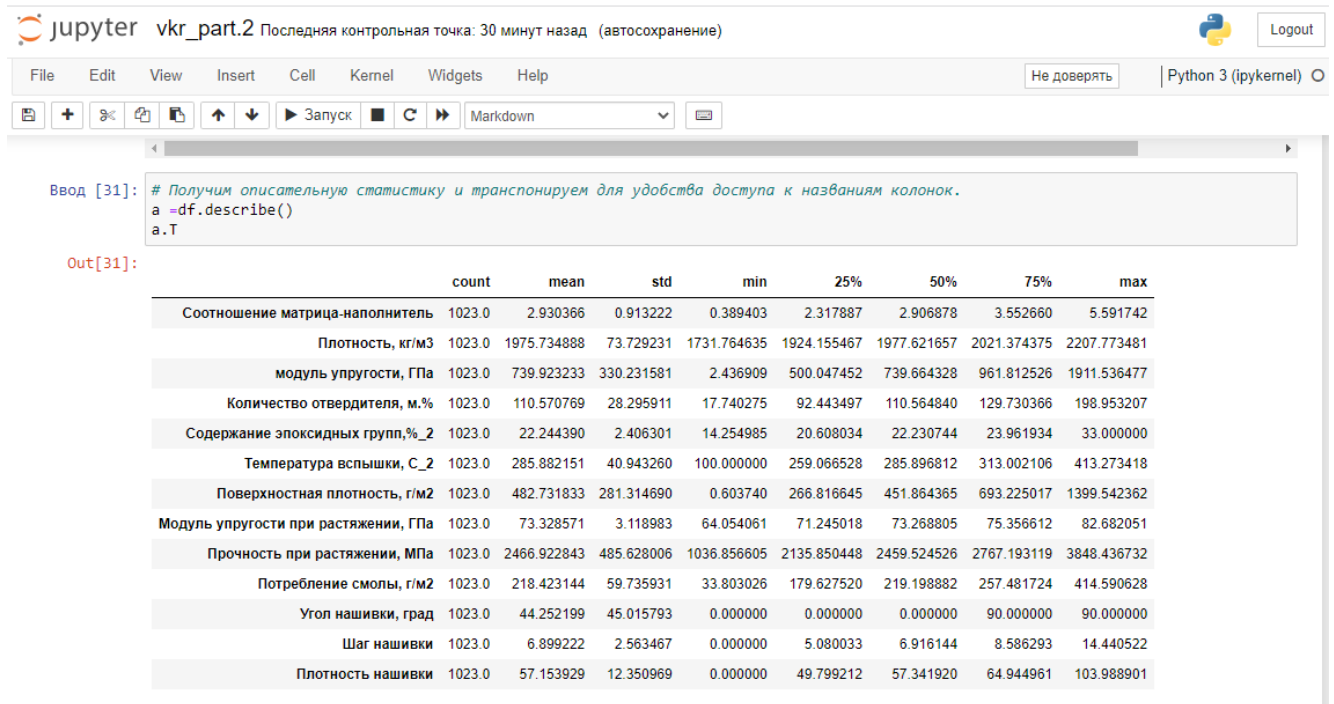


Рисунок 1 - Описательная статистика датасета

Цель разведочного анализа - получение первоначальных представлений о характерах распределений переменных исходного набора данных, формирование оценки качества исходных данных (наличие пропусков, выбросов), выявление характера взаимосвязи между переменными с целью последующего выдвижения гипотез о наиболее подходящих для решения задачи моделях машинного обучения.

Проверим датасет на дубликаты

In [33]: `df.duplicated().sum()`

Out[33]: 0

Дубликатов нет

Рисунок 2 - Проверка датасета на наличие дубликатов

В качестве инструментов разведочного анализа используется: оценка статистических характеристик датасета; гистограммы распределения каждой из переменной; диаграммы boxplot (ящика с усами); попарные графики рассеяния точек; тепловая карта; описательная статистика для каждой переменной; анализ и полное исключение выбросов; проверка наличия пропусков и дубликатов; корреляция Кендалла и Пирсона.

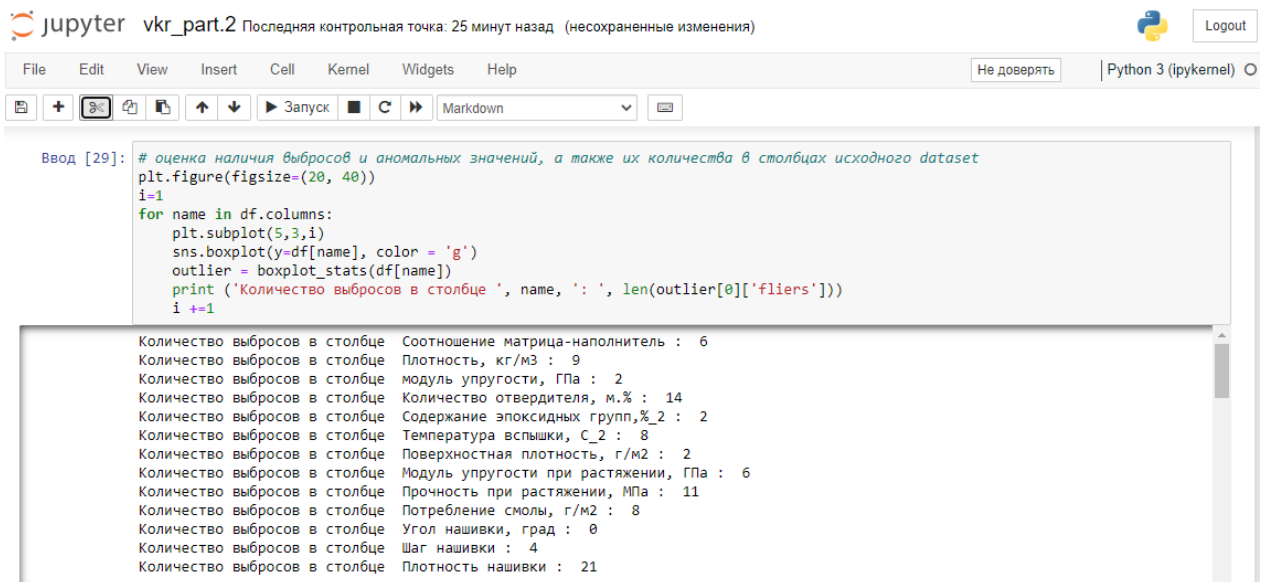


Рисунок 3 – Начальное количество выбросов

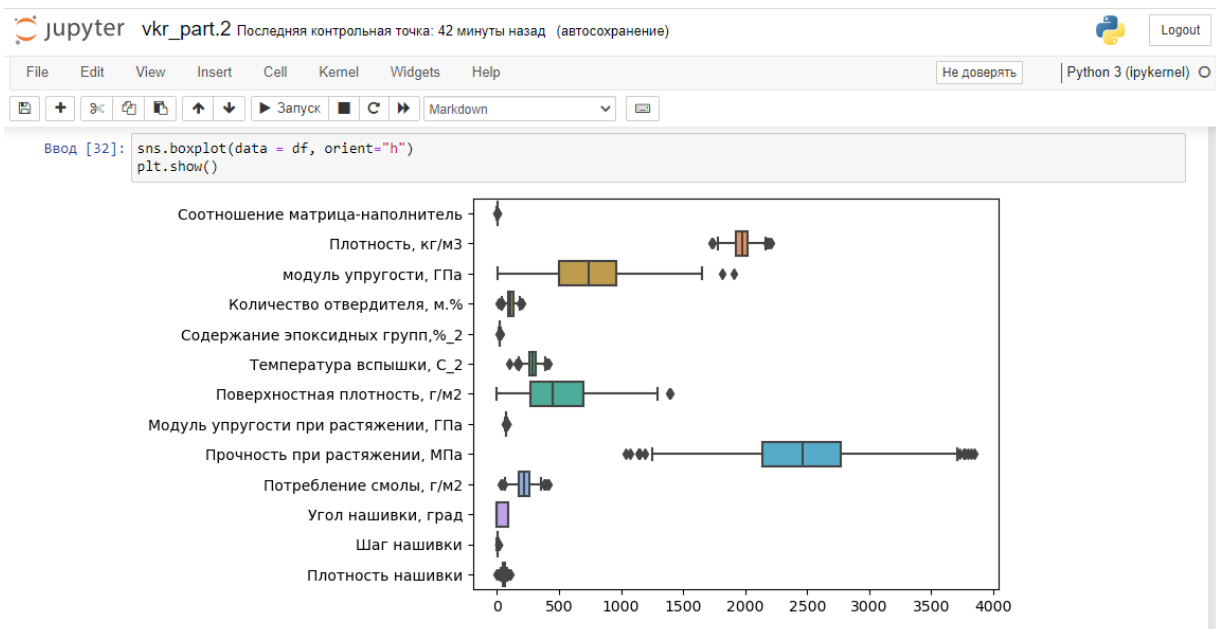


Рисунок 4 – Начальный boxplot

Для удаления выбросов используются методы трех сигм и межквартильного

расстояния. В данном случае удалим способом межквартильного расстояния для максимальной чистоты, так как используем методы чувствительные к выбросам.

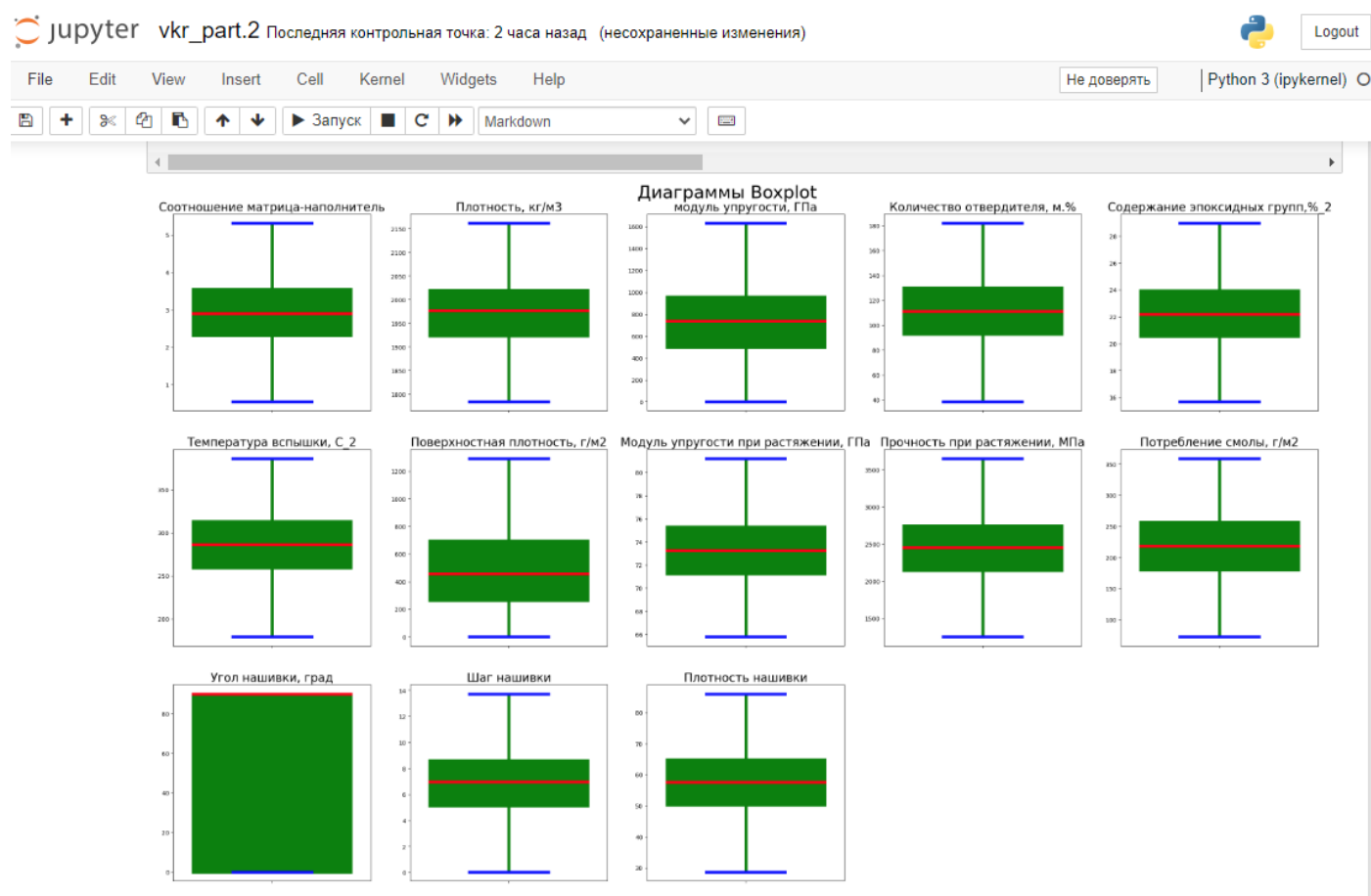


Рисунок 5 – Vboxplot после удаления выбросов

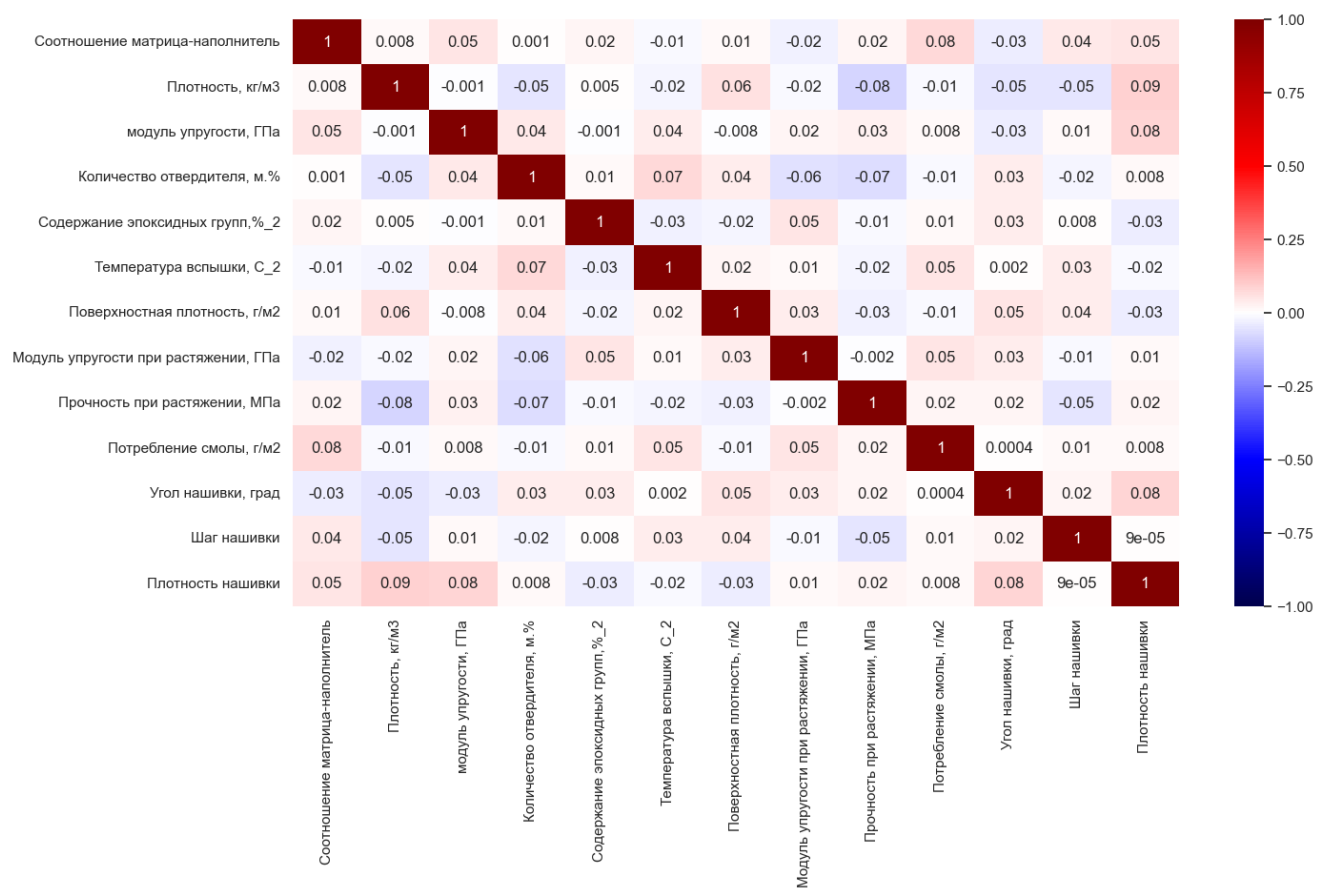


Рисунок 6 - Тепловая карта с корреляцией данных

Тепловая карта показывает практически отсутствие корреляции между признаками и целевыми переменными.

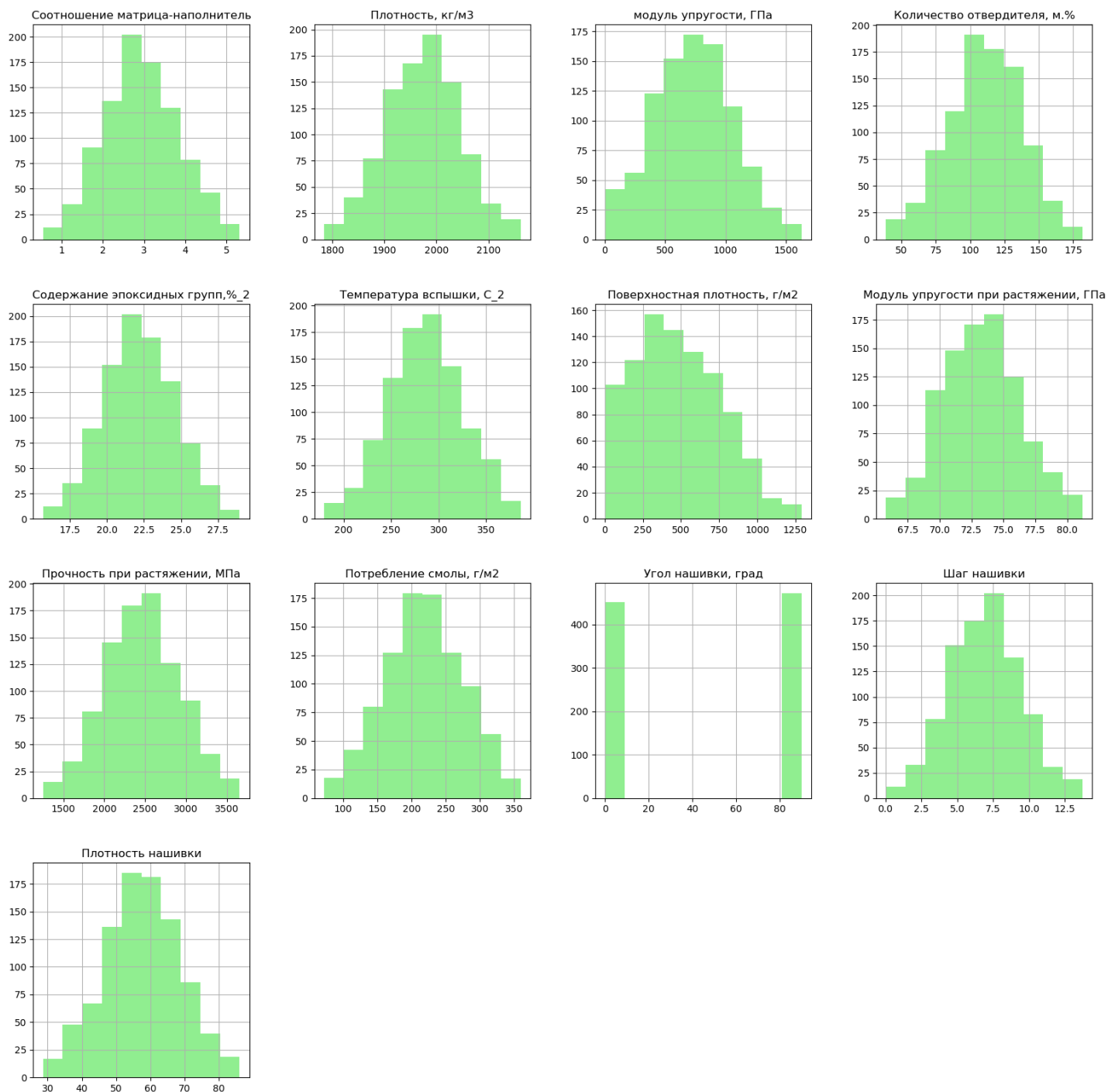


Рисунок 7 - Гистограммы распределения

Гистограммы показывают нормальное распределение, за исключением признака Угол нашивки, который имеет всего два значения 0 и 90 градусов.

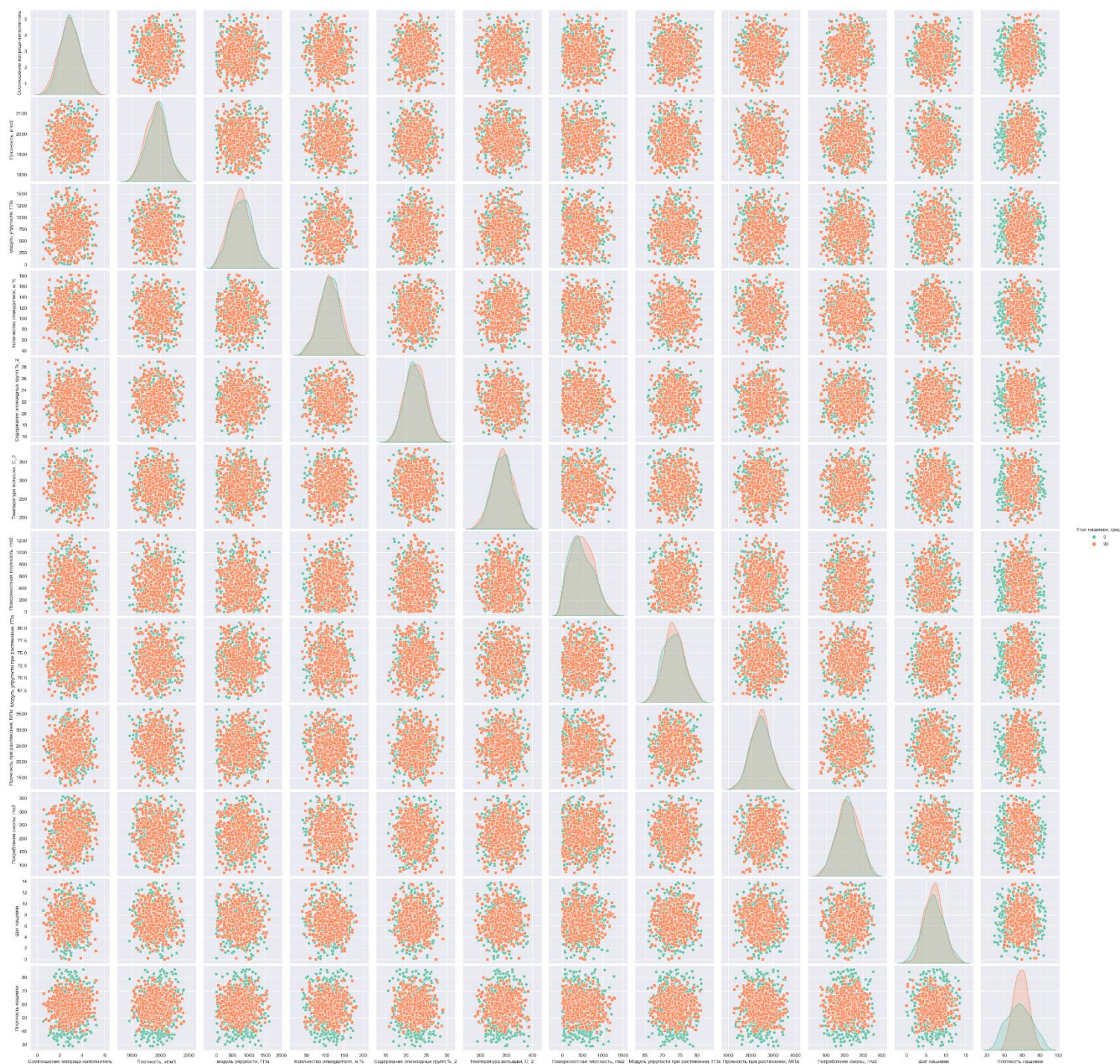


Рисунок 8 - Попарные графики рассеяния точек с выделением значений Угол нашивки

На попарных графиках распределения не видно корреляции между признаками. Единственная зависимость, которую можно отметить – это меньшая дисперсия значений Плотности нашивки при 90 градусов Угла нашивки, по сравнению со значением 0 градусов.

Максимальная корреляция между плотностью нашивки и углом нашивки 0.11, значит нет зависимости между этими данными. Корреляция между всеми параметрами очень близка к 0, корреляционные связи между переменными не наблюдаются.

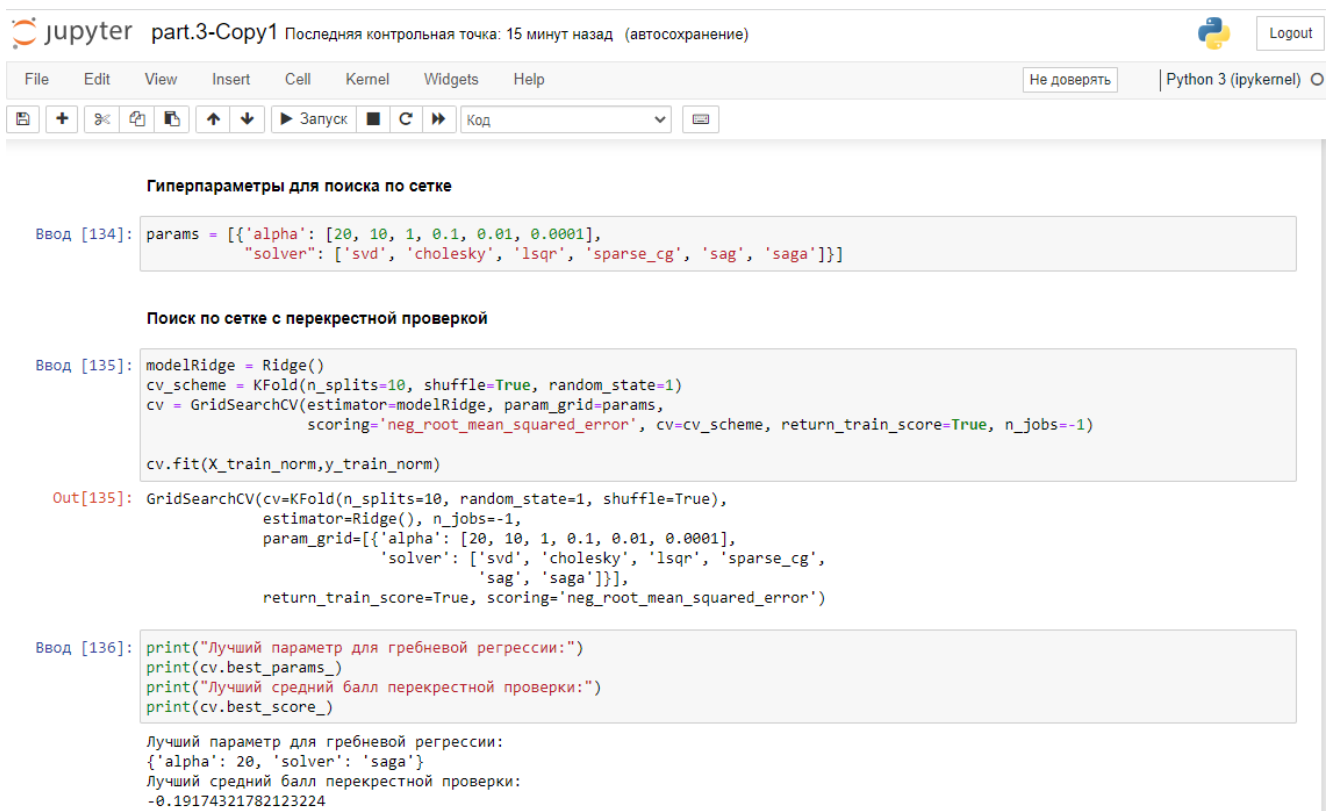
2. Практическая часть

2.1. Предобработка данных

По условиям задания нормализуем значения. Для этого применим MinMaxScaler и

2.2. Разработка и обучение модели

Разработка и обучение моделей машинного обучения осуществлялась для двух выходных параметров: «Прочность при растяжении» и «Модуль упругости при растяжении» отдельно. Для решения применим все методы, описанные выше.



The screenshot shows a Jupyter Notebook titled 'part.3-Copy1'. The interface includes a top bar with the Jupyter logo, the title, and a status message: 'Последняя контрольная точка: 15 минут назад (автосохранение)'. There are also buttons for 'Logout' and 'Python 3 (ipykernel)'. Below the top bar is a menu bar with 'File', 'Edit', 'View', 'Insert', 'Cell', 'Kernel', 'Widgets', and 'Help'. A toolbar contains icons for file operations, a 'Запуск' (Run) button, and a 'Код' (Code) dropdown. The notebook content is divided into three cells. The first cell, titled 'Гиперпараметры для поиска по сетке', contains code to define a list of parameters for GridSearchCV. The second cell, titled 'Поиск по сетке с перекрестной проверкой', contains code to create a Ridge estimator, a KFold cross-validation scheme, and a GridSearchCV object, then to fit the model. The third cell contains print statements to display the best parameters and the best score. The output of the second cell shows the GridSearchCV object and the best parameters found: {'alpha': 20, 'solver': 'saga'}. The output of the third cell shows the best score: -0.19174321782123224.

```
Ввод [134]: params = [{'alpha': [20, 10, 1, 0.1, 0.01, 0.0001],
                        "solver": ['svd', 'cholesky', 'lsqr', 'sparse_cg', 'sag', 'saga']}]
```

Гиперпараметры для поиска по сетке

```
Ввод [135]: modelRidge = Ridge()
cv_scheme = KFold(n_splits=10, shuffle=True, random_state=1)
cv = GridSearchCV(estimator=modelRidge, param_grid=params,
                  scoring='neg_root_mean_squared_error', cv=cv_scheme, return_train_score=True, n_jobs=-1)

cv.fit(X_train_norm, y_train_norm)
```

Поиск по сетке с перекрестной проверкой

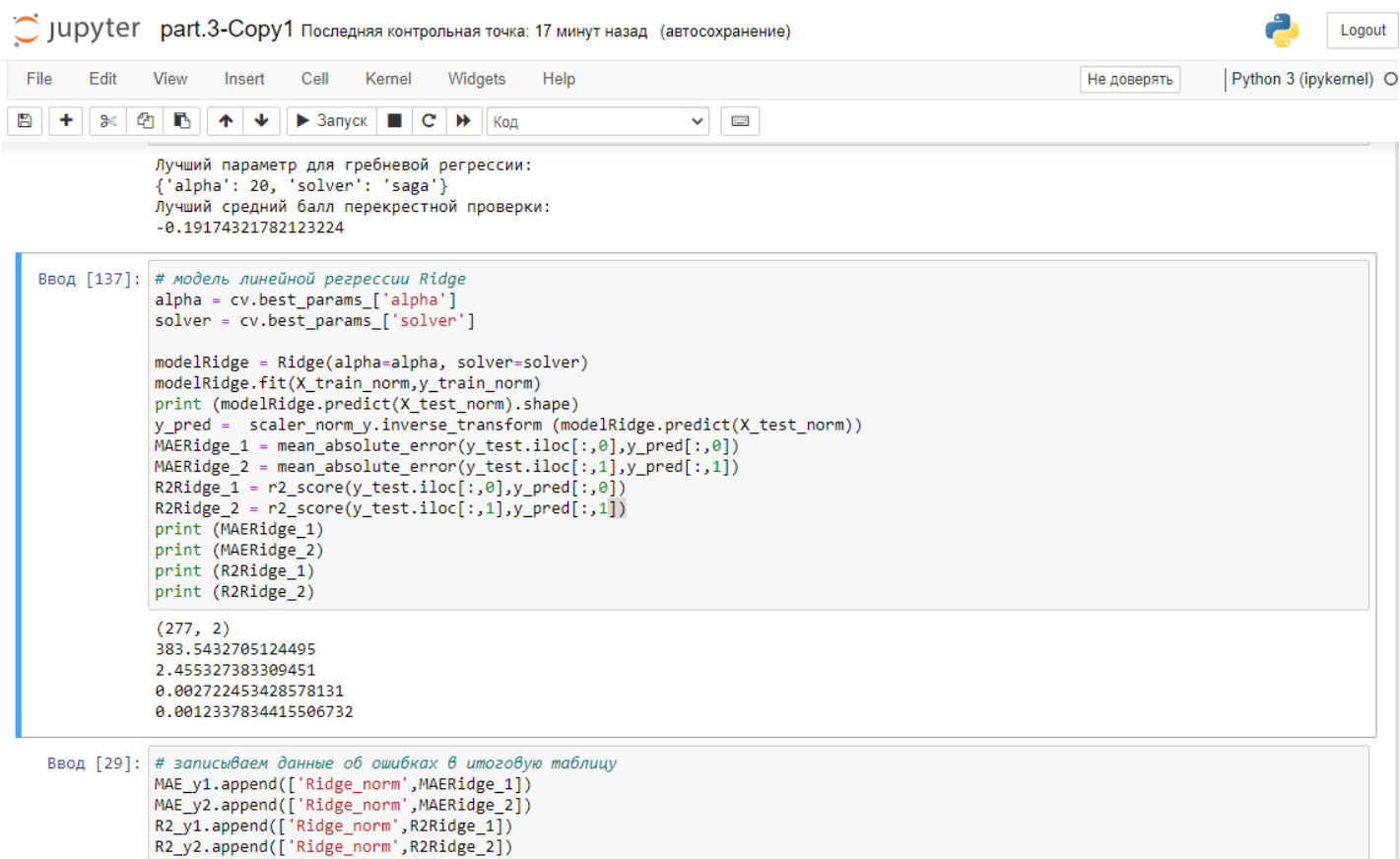
```
Out[135]: GridSearchCV(cv=KFold(n_splits=10, random_state=1, shuffle=True),
                      estimator=Ridge(), n_jobs=-1,
                      param_grid=[{'alpha': [20, 10, 1, 0.1, 0.01, 0.0001],
                                    'solver': ['svd', 'cholesky', 'lsqr', 'sparse_cg',
                                                'sag', 'saga']}],
                      return_train_score=True, scoring='neg_root_mean_squared_error')
```

```
Ввод [136]: print("Лучший параметр для гребневой регрессии:")
print(cv.best_params_)
print("Лучший средний балл перекрестной проверки:")
print(cv.best_score_)
```

Лучший параметр для гребневой регрессии:
{'alpha': 20, 'solver': 'saga'}
Лучший средний балл перекрестной проверки:
-0.19174321782123224

Рисунок 9- Поиск гиперпараметров по сетке

Порядок разработки модели для каждого параметра и для каждого выбранного метода можно разделить на следующие этапы: разделение нормализованных данных на обучающую и тестовую выборки (в соотношении 70 на 30%); обучение моделей на нормализованных значениях; сравнение моделей по метрике MAE; поиск гиперпараметров, по которым будет происходить оптимизация модели, с помощью выбора по сетке и перекрёстной проверки. Оценка полученных результатов работы моделей. В качестве параметра оценки выбран также коэффициент детерминации (R2).



The screenshot shows a Jupyter Notebook interface with the title 'part.3-Copy1'. The top bar includes a 'Logout' button and a 'Python 3 (ipykernel)' indicator. The notebook has a menu bar with 'File', 'Edit', 'View', 'Insert', 'Cell', 'Kernel', 'Widgets', and 'Help'. Below the menu is a toolbar with icons for file operations, a 'Запуск' (Run) button, and a 'Код' (Code) dropdown. The main area displays two code cells. The first cell contains text about the best parameters for Ridge regression and the output of a previous cell. The second cell contains Python code for fitting a Ridge model and calculating MAE and R2 scores. The output of the second cell shows the results of these calculations.

```
Лучший параметр для гребневой регрессии:
{'alpha': 20, 'solver': 'saga'}
Лучший средний балл перекрестной проверки:
-0.19174321782123224
```

```
Ввод [137]: # модель линейной регрессии Ridge
alpha = cv.best_params_['alpha']
solver = cv.best_params_['solver']

modelRidge = Ridge(alpha=alpha, solver=solver)
modelRidge.fit(X_train_norm, y_train_norm)
print (modelRidge.predict(X_test_norm).shape)
y_pred = scaler_norm_y.inverse_transform (modelRidge.predict(X_test_norm))
MAERidge_1 = mean_absolute_error(y_test.iloc[:,0], y_pred[:,0])
MAERidge_2 = mean_absolute_error(y_test.iloc[:,1], y_pred[:,1])
R2Ridge_1 = r2_score(y_test.iloc[:,0], y_pred[:,0])
R2Ridge_2 = r2_score(y_test.iloc[:,1], y_pred[:,1])
print (MAERidge_1)
print (MAERidge_2)
print (R2Ridge_1)
print (R2Ridge_2)
```

```
(277, 2)
383.5432705124495
2.455327383309451
0.002722453428578131
0.0012337834415506732
```

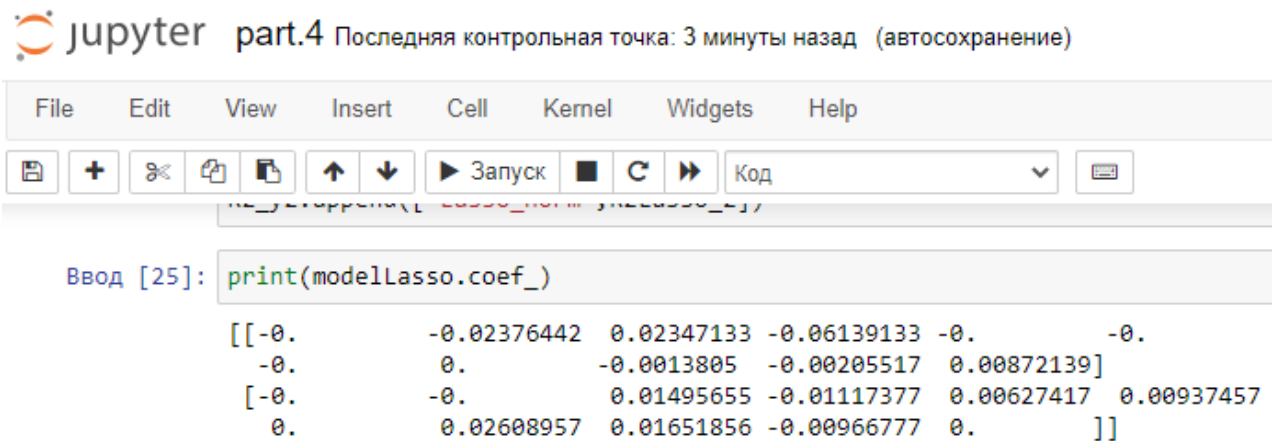
```
Ввод [29]: # записываем данные об ошибках в итоговую таблицу
MAE_y1.append(['Ridge_norm', MAERidge_1])
MAE_y2.append(['Ridge_norm', MAERidge_2])
R2_y1.append(['Ridge_norm', R2Ridge_1])
R2_y2.append(['Ridge_norm', R2Ridge_2])
```

Рисунок 10 - Модель Ridge регрессия

Модели после настройки гиперпараметров показали результат немного лучше. В результате все модели показали примерно одинаковый результат: ошибка MAE примерно равна стандартному отклонению, значения R2 находятся около нуля, то есть все модели предсказывают результат сопоставимый со средним значением. Можно считать, что все примененные модели не справились с задачей, результат неудовлетворительный.

Для улучшения работы алгоритмов можно уменьшить количество признаков. Посмотрим коэффициенты вклада признаков в результат в моделях

Lasso и Ridge.



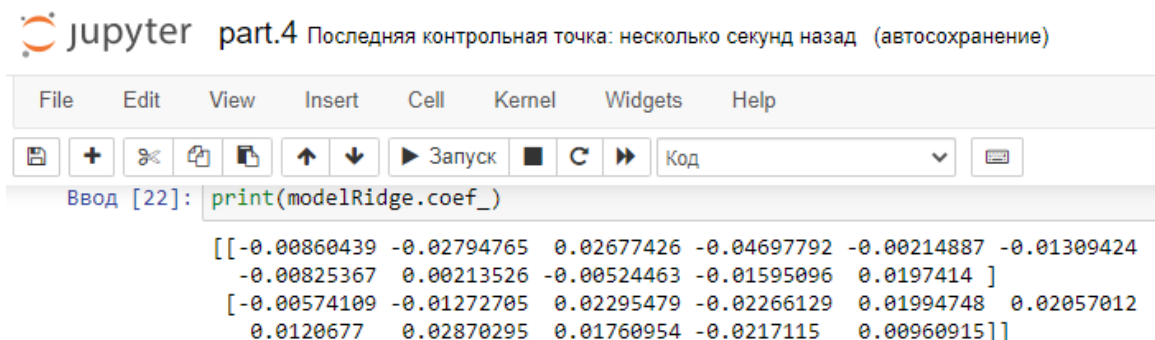
Jupyter part.4 Последняя контрольная точка: 3 минуты назад (автосохранение)

File Edit View Insert Cell Kernel Widgets Help

Ввод [25]: `print(modelLasso.coef_)`

```
[[ -0.          -0.02376442  0.02347133 -0.06139133 -0.          -0.
   -0.           0.          -0.0013805 -0.00205517  0.00872139]
 [ -0.          -0.          0.01495655 -0.01117377  0.00627417  0.00937457
   0.          0.02608957  0.01651856 -0.00966777  0.          ]]
```

Рисунок 11 – Коэффициенты признаков Lasso регрессии



Jupyter part.4 Последняя контрольная точка: несколько секунд назад (автосохранение)

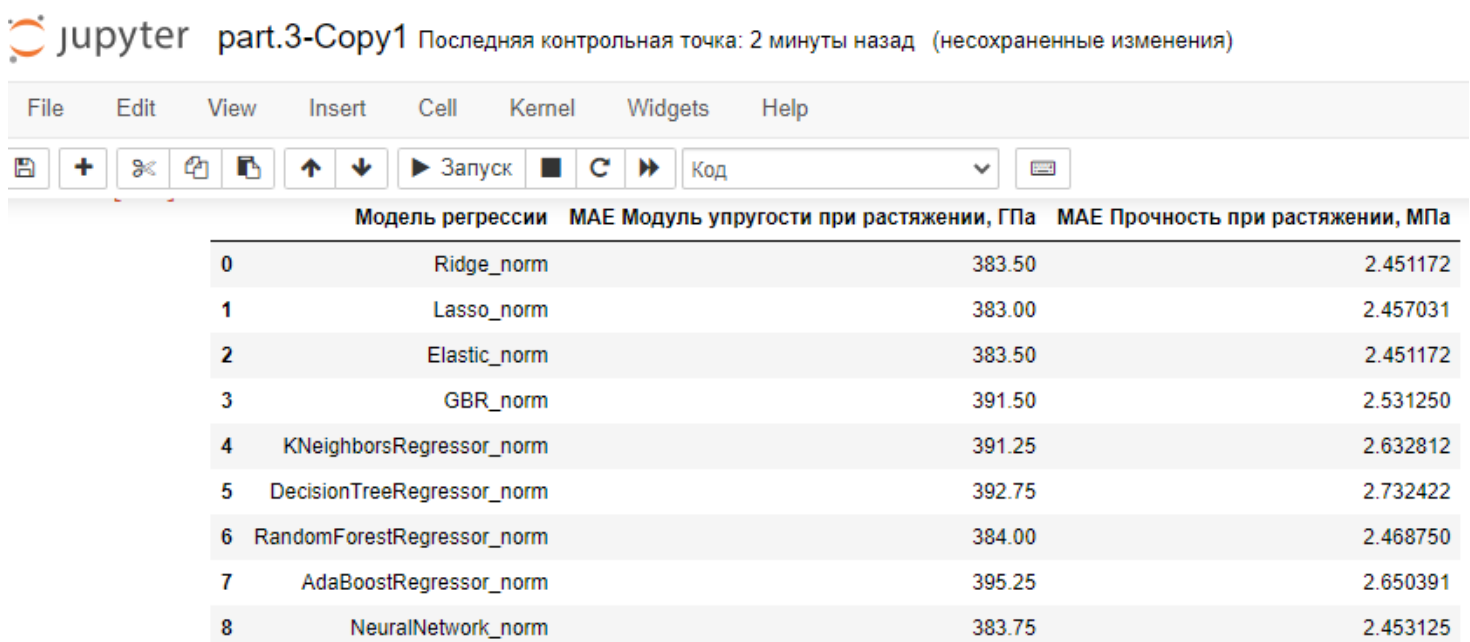
File Edit View Insert Cell Kernel Widgets Help

Ввод [22]: `print(modelRidge.coef_)`

```
[[ -0.00860439 -0.02794765  0.02677426 -0.04697792 -0.00214887 -0.01309424
   -0.00825367  0.00213526 -0.00524463 -0.01595096  0.0197414 ]
 [ -0.00574109 -0.01272705  0.02295479 -0.02266129  0.01994748  0.02057012
   0.0120677   0.02870295  0.01760954 -0.0217115  0.00960915]]
```

Рисунок 12 – Коэффициенты признаков Ridge регрессии

Как видно, коэффициенты вклада в результат близки для всех признаков к нулю. Поэтому не вижу смысла в уменьшении размерности.



Jupyter part.3-Copy1 Последняя контрольная точка: 2 минуты назад (несохраненные изменения)

File Edit View Insert Cell Kernel Widgets Help

	Модель регрессии	MAE Модуль упругости при растяжении, ГПа	MAE Прочность при растяжении, МПа
0	Ridge_norm	383.50	2.451172
1	Lasso_norm	383.00	2.457031
2	Elastic_norm	383.50	2.451172
3	GBR_norm	391.50	2.531250
4	KNeighborsRegressor_norm	391.25	2.632812
5	DecisionTreeRegressor_norm	392.75	2.732422
6	RandomForestRegressor_norm	384.00	2.468750
7	AdaBoostRegressor_norm	395.25	2.650391
8	NeuralNetwork_norm	383.75	2.453125

Рисунок 13 - Оценка MAE результатов работы моделей

jupyter part.3-Copy1 Последняя контрольная точка: 3 минуты назад (автосохранение)

	Модель регрессии	R2 Модуль упругости при растяжении, ГПа	R2 Прочность при растяжении, МПа
0	Ridge_norm	-0.000235	-0.000848
1	Lasso_norm	0.002850	-0.001080
2	Elastic_norm	-0.000235	-0.000864
3	GBR_norm	-0.041779	-0.064270
4	KNeighborsRegressor_norm	-0.051453	-0.197266
5	DecisionTreeRegressor_norm	-0.090393	-0.281006
6	RandomForestRegressor_norm	0.003441	-0.009041
7	AdaBoostRegressor_norm	-0.059174	-0.154297

Рисунок 14 - Оценка R2 результатов работы моделей

2.4. Нейронная сеть для рекомендации «Соотношение матрица-наполнитель».

Загружаем очищенный датасет, для X удаляем целевой столбец «Соотношение матрица-наполнитель» и сохраняем его в y. Далее разбиваем на обучающую и тестовую выборку (для вычисления MAE). Затем делаем нормализацию, и снова разбиение данных уже для подачи на вход нейросети.

jupyter part.5 Последняя контрольная точка: В понедельник в 18:43 (автосохранение)

```

Ввод [10]: #разбиение данных на тестовую и тренировочную часть
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X,y, test_size=0.3, random_state=42, shuffle=True)

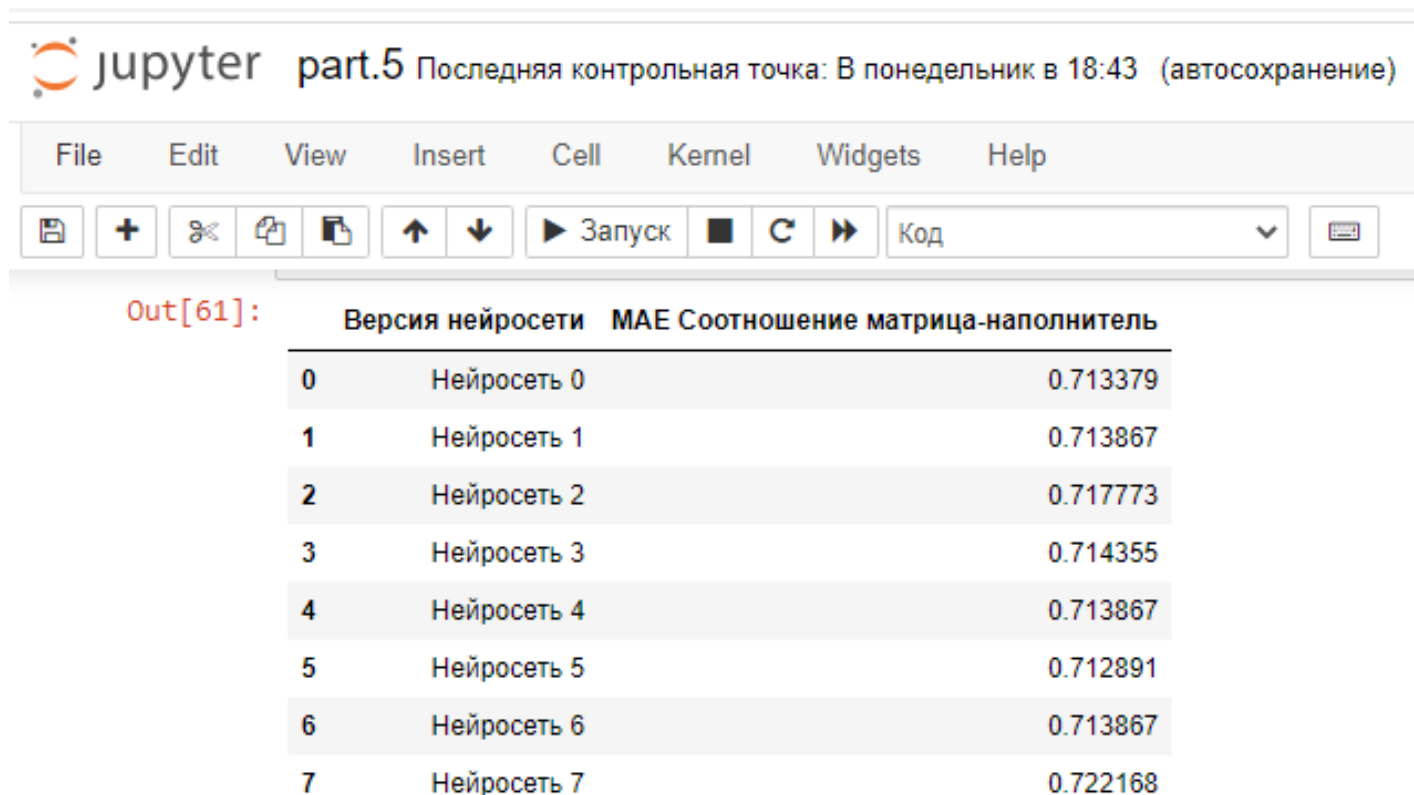
Ввод [11]: # нормализация данных
scaler_norm = MinMaxScaler()
scaler_norm.fit(X)
Xnorm = pd.DataFrame (data =scaler_norm.transform(X), columns=X.columns)
scaler_norm_y = MinMaxScaler()
scaler_norm_y.fit(y)
ynorm = pd.DataFrame (data = scaler_norm_y.transform(y), columns=y.columns)

Ввод [12]: #разбиение данных на тестовую и тренировочную часть
X_train_norm, X_test_norm, y_train_norm, y_test_norm = train_test_split(Xnorm,ynorm, test_size=0.3, random_state=42, shuffle=True)

```

Рисунок 15 – Разбиение и нормализация данных для нейросети

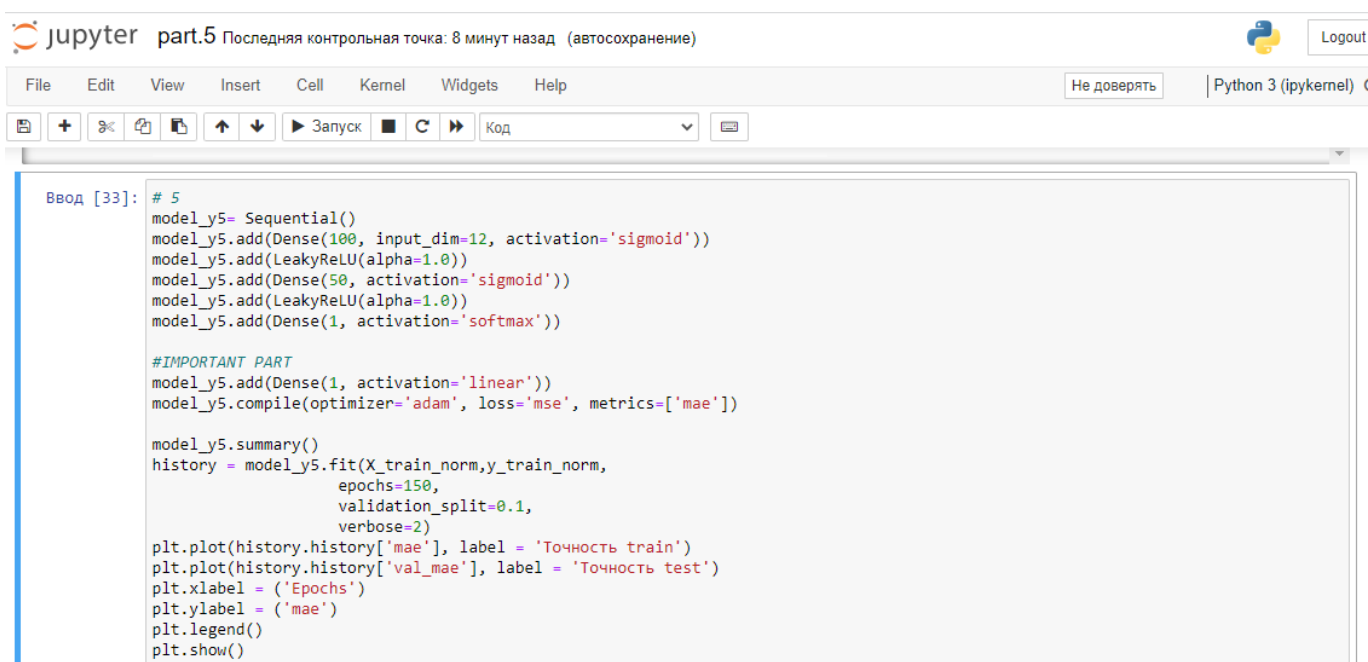
Создаем архитектуру нейронной сети и запускаем обучение. Оценивая результаты меняем параметры нейросети: количество нейронов, функции активации, количество слоев, добавление слоя Dropout.



Out[61]:

	Версия нейросети	MAE	Соотношение матрица-наполнитель
0	Нейросеть 0	0.713379	
1	Нейросеть 1	0.713867	
2	Нейросеть 2	0.717773	
3	Нейросеть 3	0.714355	
4	Нейросеть 4	0.713867	
5	Нейросеть 5	0.712891	
6	Нейросеть 6	0.713867	
7	Нейросеть 7	0.722168	

Рисунок 16 – Ошибка MAE по результатам работы нейросетей с различной архитектурой



```

Ввод [33]: # 5
model_y5= Sequential()
model_y5.add(Dense(100, input_dim=12, activation='sigmoid'))
model_y5.add(LeakyReLU(alpha=1.0))
model_y5.add(Dense(50, activation='sigmoid'))
model_y5.add(LeakyReLU(alpha=1.0))
model_y5.add(Dense(1, activation='softmax'))

#IMPORTANT PART
model_y5.add(Dense(1, activation='linear'))
model_y5.compile(optimizer='adam', loss='mse', metrics=['mae'])

model_y5.summary()
history = model_y5.fit(X_train_norm,y_train_norm,
                      epochs=150,
                      validation_split=0.1,
                      verbose=2)
plt.plot(history.history['mae'], label = 'Точность train')
plt.plot(history.history['val_mae'], label = 'Точность test')
plt.xlabel = ('Epochs')
plt.ylabel = ('mae')
plt.legend()
plt.show()

```

Рисунок 17 — Код нейросети с наименьшей ошибкой

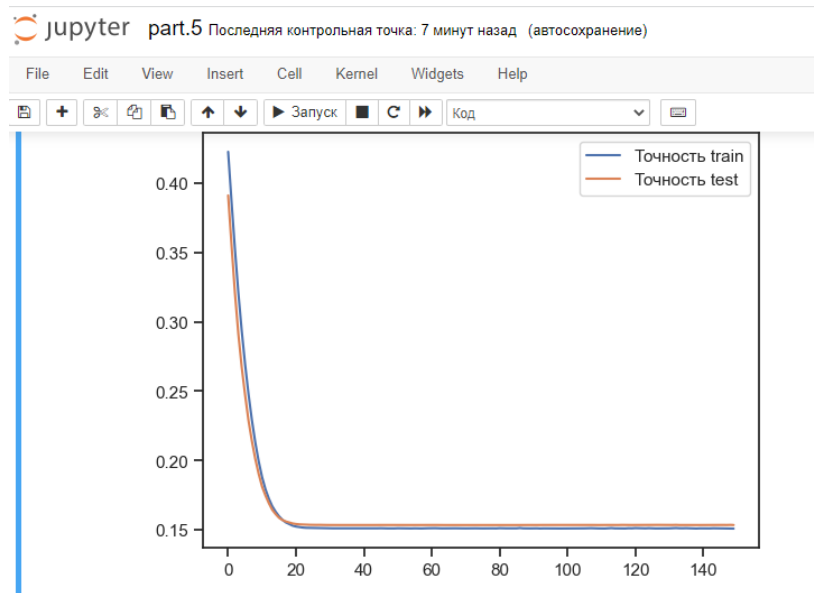


Рисунок 18 — Визуализация работы нейросети с наименьшей ошибкой

Все нейросети показали схожий результат с ошибкой MAE чуть меньшей, чем среднее отклонение.

Разработка приложения

Создание приложения для расчета параметра «Соотношение матрица-наполнитель». Данное приложение — это основной файл Flask, папка templates, с Шаблоном html - страницы, папка mn_model_nn с сохранённой моделью.

```

Ввод [8]: from flask import Flask, request, render_template

import tensorflow as tf

app = Flask(__name__)

def prediction(params):
    model = tf.keras.models.load_model('models/mn_model_nn')
    pred = model.predict([params])
    return pred

@app.route('/', methods=['POST', 'GET'])
def predict():
    message = ''
    if request.method == 'POST':
        param_list = ('Плотность, кг/м3', 'модуль упругости, ГПа', 'Количество отвердителя, м.%',
                      'Содержание эпоксидных групп, %2', 'Температура вспшки, С_2', 'Поверхностная плотность, г/м2',
                      'Модуль упругости при растяжении, ГПа', 'Прочность при растяжении, МПа', 'Потребление смолы, г/м2',
                      'Угол нашивки, град', 'Шаг нашивки', 'Плотность нашивки')

        params = []
        for i in param_list:
            param = request.form.get(i)
            params.append(param)
        params = [float(i.replace(',', '.')) for i in params]

        message = f'Соотношение матрица-наполнитель: {prediction(params)}'
    return render_template('mn.html', message=message)

if __name__ == '__main__':
    app.run()

* Serving Flask app "__main__" (lazy loading)
* Environment: production
  WARNING: This is a development server. Do not use it in a production deployment.
  Use a production WSGI server instead.
* Debug mode: off

* Running on http://127.0.0.1:5000/ (Press CTRL+C to quit)
127.0.0.1 - - [21/Dec/2022 20:11:07] "GET / HTTP/1.1" 200 -

```

Рисунок 19 - Код приложения

← → ↻ ⓘ 127.0.0.1:5000

Расчет соотношения матрица-наполнитель

Введите параметры

<input type="text" value="2030"/>	Плотность, кг/м3
<input type="text" value="738"/>	Модуль упругости, ГПа
<input type="text" value="50"/>	Количество отвердителя, м.%
<input type="text" value="23,7"/>	Содержание эпоксидных групп,%_2
<input type="text" value="284"/>	Температура вспышки, С_2
<input type="text" value="210"/>	Поверхностная плотность, г/м2
<input type="text" value="70"/>	Модуль упругости при растяжении, ГПа
<input type="text" value="3000"/>	Прочность при растяжении, МПа
<input type="text" value="220"/>	Потребление смолы, г/м2
<input type="text" value="0"/>	Угол нашивки, град
<input type="text" value="4"/>	Шаг нашивки
<input type="text" value="60"/>	Плотность нашивки

Рисунок 20 - Форма пользовательского приложения для ввода параметров

На выходе пользователь получает результат прогноза для значения параметра «Соотношение «матрица – наполнитель»»

← → ↻ ⓘ 127.0.0.1:5000

Расчет соотношения матрица-наполнитель

Введите параметры

<input type="text"/>	Плотность, кг/м3
<input type="text"/>	Модуль упругости, ГПа
<input type="text"/>	Количество отвердителя, м.%
<input type="text"/>	Содержание эпоксидных групп,%_2
<input type="text"/>	Температура вспышки, С_2
<input type="text"/>	Поверхностная плотность, г/м2
<input type="text"/>	Модуль упругости при растяжении, ГПа
<input type="text"/>	Прочность при растяжении, МПа
<input type="text"/>	Потребление смолы, г/м2
<input type="text"/>	Угол нашивки, град
<input type="text"/>	Шаг нашивки
<input type="text"/>	Плотность нашивки

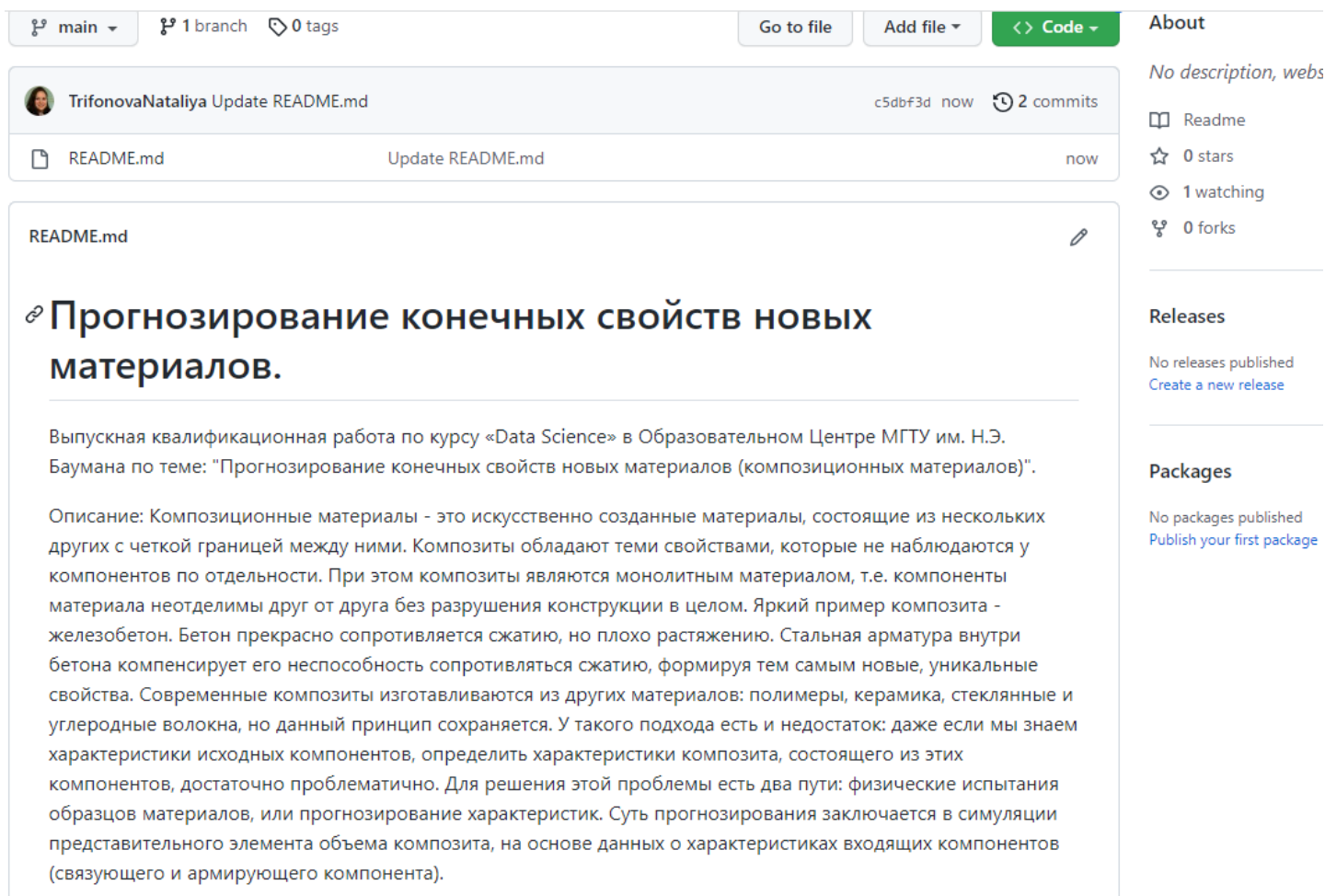
Соотношение матрица-наполнитель: [[0.49585527]]

Рисунок 21 – Результат расчета Соотношение матрица-наполнитель

2.5. Создание удалённого репозитория и загрузка

Репозиторий был создан на github.com по адресу :

<https://github.com/TrifonovaNataliya/composite>



The screenshot displays a GitHub repository page for 'TrifonovaNataliya/composite'. The repository is on the 'main' branch with 1 branch and 0 tags. The README.md file is selected, showing its commit history (c5dbf3d, now) and 2 commits. The README content is as follows:

Прогнозирование конечных свойств новых материалов.

Выпускная квалификационная работа по курсу «Data Science» в Образовательном Центре МГТУ им. Н.Э. Баумана по теме: "Прогнозирование конечных свойств новых материалов (композиционных материалов)".

Описание: 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).

Рисунок 23 - часть созданного файла README

2.6. Заключение

Данная исследовательская работа позволяет сделать некоторые основные выводы по теме. Распределение полученных данных в объединённом датасете близко к нормальному, корреляция между парами признаков близка к нулю. Используемые при разработке моделей подходы не позволили получить достоверных прогнозов. Применённые модели регрессии не показали эффективности в прогнозировании свойств композитов.

Можно сделать вывод, что невозможно определить из свойств материалов соотношение «матрица – наполнитель». Данный факт не указывает на то, что прогнозирование характеристик композитных материалов на основании предоставленного набора данных невозможно, но может указывать на недостатки базы данных, подходов, использованных при прогнозе, необходимости пересмотра инструментов для прогнозирования.

Необходимы дополнительные вводные данные, получение новых результирующих признаков в результате математических преобразований, консультации экспертов предметной области, новые исследования. В целом прогнозирование конечных свойств/характеристик композитных материалов без изучения материаловедения, погружения в вопрос экспериментального анализа характеристик композитных материалов не демонстрирует удовлетворительных результатов. Учитывая отсутствие корреляции между признаками, делаем вывод, что текущим набором алгоритмов задача не решается, возможно, решается трудно или не решается совсем.

2.7. Список используемой литературы и веб ресурсы.

1. Alex Maszański. Метод k-ближайших соседей (k-nearest neighbour) <https://proglib.io/p/metod-k-blizhayshih-sosedey-k-nearest-neighbour2021-07-19>.
2. Andre Ye. 5 алгоритмов регрессии в машинном обучении, о которых вам следует знать: <https://habr.com/ru/company/vk/blog/513842/>
3. Anthony Schams. Смещение, дисперсия и регуляризация в линейной регрессии: лассо, хребет и эластичная сеть - различия и использовании <https://machinelearningmastery.ru/bias-variance-and-regularization-in-linear-regression-lasso-ridge-and-elastic-net-8bf81991d0c5/>
4. Devpractice Team. Python. Визуализация данных. Matplotlib. Seaborn. Mayavi. - devpractice.ru. 2020. - 412 с.: ил.
5. Абросимов Н.А Методика построения разрешающей системы уравнений динамического деформирования композитных элементов конструкций (Учебно-методическое пособие), ННГУ, 2010
6. Абу-Хасан Махмуд, Масленникова Л. Л. Прогнозирование свойств композиционных материалов с учётом наноразмера частиц и акцепторных свойств катионов твёрдых фаз, статья 2006 год
7. Гафаров, Ф.М., Галимянов А.Ф. Искусственные нейронные сети и приложения: учеб. пособие /Ф.М. Гафаров, А.Ф. Галимянов. – Казань: Издательство Казанского университета, 2018. – 121 с.
8. Грас Д. Data Science. Наука о данных с нуля: Пер. с англ. - 2-е изд., перераб. и доп. - СПб.: БХВ-Петербург, 2021. - 416 с.: ил.9.
9. Документация по библиотеке keras: <https://keras.io/api/>.
10. Документация по библиотеке matplotlib: <https://matplotlib.org/stable/users/index.html>.
11. Документация по библиотеке numpy: <https://numpy.org/doc/1.22/user/index.html#user>.
12. Документация по библиотеке pandas: https://pandas.pydata.org/docs/user_guide/index.html#user-guide.
13. Документация по библиотеке scikit-learn: https://scikit-learn.org/stable/user_guide.html.

14. Документация по библиотеке seaborn:
<https://seaborn.pydata.org/tutorial.html>.
15. Документация по библиотеке Tensorflow:
<https://www.tensorflow.org/overview>
16. Документация по языку программирования python:
<https://docs.python.org/3.8/index.html>.
17. Иванов Д.А., Ситников А.И., Шляпин С.Д – Композиционные материалы: учебное пособие для вузов, 2019. 13 с.
18. Краткий обзор алгоритма машинного обучения Метод Опорных Векторов (SVM) : <https://habr.com/ru/post/428503/>
19. Ларин А. А., Способы оценки работоспособности изделий из композиционных материалов методом компьютерной томографии, Москва, 2013, 148 с.
20. Макс Ветков. Градиентный бустинг(AdaBoost) <https://your-scorpion.ru/gradient-boosting-adaboost>
21. Материалы конференции: V Всероссийская научно-техническая конференция «Полимерные композиционные материалы и производственные технологии нового поколения», 19 ноября 2021 г.
22. Плас Дж. Вандер, Python для сложных задач: наука о данных и машинное обучение. Санкт-Петербург: Питер, 2018, 576 с
23. Реутов Ю.А.: Прогнозирование свойств полимерных композиционных материалов и оценка надёжности изделий из них, Диссертация на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук, Томск 2016.
24. Роббинс, Дженнифер. HTML5: карманный справочник, 5-е издание.: Пер. с англ. - М.: ООО «И.Д. Вильямс»: 2015. - 192 с.: ил
25. Руководство по быстрому старту в flask: – Режим доступа: <https://flaskrussian-docs.readthedocs.io/ru/latest/quickstart.html>. (дата обращения: 09.06.2022)