

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА по курсу «Data Science PRO»

Слушатель: Филимонов Фёдор Игоревич



План работы

Ознакомление с поставленной задачей (Прогнозирование конечных свойств новых материалов (композиционных материалов)

2 Разбивка общей задачи, на под задачи.

3 Описание работы

4 Заключение





Ознакомление с поставленной задачей

Тема данной работы - прогнозирование конечных свойств новых материалов (композиционных материалов).

При ознакомление с задачей были установлены следующие требования:

- 1. Провести разведочный анализ предложенных данных;
- 2. Провести предобработку данных;
- 3. Обучить нескольких моделей для прогноза нескольких параметров («модуля упругости при растяжении» и «прочности при растяжении»);
- 4. Написать нейронную сеть, которая будет рекомендовать параметр «соотношение матрица-наполнитель»;
- 5. Разработать приложение, которое будет выдавать прогноз, по одной из обученной модели.



Разбивка общей задачи, на под задачи.

Самым важным аспектом в данной работе, для меня было это не пытается охватить всю задачу сразу и приступит к её решению. А поделить её на несколько подзадач и решать их по очереди. Для дисциплинированния себя в этом вопросе, после составления плана (который корректировался в процессе) была составлена диаграмма Ганта, которая помогала мне держаться во временных рамках (конечно же она тоже корректировалась в процессе работы). Правильная подготовка к работе первый шаг к успешному решению задачи. В ходе выполнения работы были использованы методы и навыки приобретённые за время курса.



Список задач и диаграмма Ганта

План работы:

- 1. Загрузка данных из исходных excel таблиц (X_bp и X_nup)
- Ознакомление с данными, кол-во строк и столбцов, вывод названия столбцов, вывод нескольких строк таблиц.
- 3. Удаление неинформативных данных (столбец)
- 4. Производим объединение двух таблиц, по индексу, тип объединения INNER
- 5. Проверяем типы данных по каждому столбцу
- 6. Проверяем пропущенные значений
- 7. Проверяем на наличие дубликатов
- Поиск уникальных значений
- 9. Ознакомление с описательной статистикой данных.
- 10. Согласно заданию, получаем среднее, медианное значение для каждой колонки отдельно
- Визуализация корреляционной матрицы с помощью тепловых карт используя методы "Пирсона", "Кендалл", "Спирмена"
- 12. Создаём палитру для единообразной визуализации данных
- 13. Построение гистограмм распределения
- 14. Построение коробочной диограммы
- Определяем кол-во выбросов тремя методами (Метод межквартального размаха (IQR), Метод стандартного отклонения, Метод Z-оценка.)
- 16. Удаляем выбросы методом (IQR)
- 17. Проверяем, что осталось от данных.
- 18. Проводим нормализацию несколькими методами: MinMaxScaler, Normalizer,
- MaxAbsScaler, RobustScaler, сравниваем их точность и выберем лучший результат

 19. Сохраняем подготовленные данные (очищенные и нормализованные) двумя файлами
- сохраняем подготовленные данные (очищенные и нормализованные) двумя фаилами
 Начинаем процесс создания и обучения моделей согласно заданию. Задача: Обучить
- 20. Начинаем процесс создания и обучения моделеи согласно заданию. Задача: Обучить нескольких моделей для прогноза модуля упругости при растяжении и прочности при растяжении. При построении модели необходимо 30% данных оставить на тестирование модели, на остальных происходит обучение моделей. При построении моделей провести поиск гидерларамузгров модели с помощью поиска по сетке с перекрестной проверкой, количество блоков равно 10.
- Определяем какие методы будут использоваться для обучения моделей: 'Линейная регрессия', 'Хребет', 'Опорные вектора', 'Случайный лес', 'Градиентный бустинс'
- 22. Определяем гипперапараметры для каждого метода
- Начинаем поиск оптимальных <u>гипперпараметров</u> через <u>GridSearchCV</u> 10 блоков (согласно задаче)
- 24. Обучение моделей, получение оценок (R2, MAE, MSE, MAPE)
- 25. Построение графиков сравнения тестовых и обученных данных для каждой модели
- Построение нейронной сети, которая будет рекомендовать соотношение матрицанаполнитель.
- 27. Определение кол-во слоёв, нейронов, настройка раннего прекращения обучения
- Обучение модели, получение оценки и построение графика сравнения тестовой и обученной модели.
- 29. Сохранение модели
- 30. Разработка приложения с графическим интерфейсом.
- 31. Т.к. в первоначальных вариантах обучения моделей я использовал нормализованные данные (лежат в диапазоне от 0 до 1), при тестировании графического приложения я не мог получить желаемого результата. Было принято решение взять подготовленные данные до нормализации и повторить операцию по созданию нейронной сети, сохранению её модели для дальнейшей работы.
- 32. Создание приложения с помощью tkinter
- Добавление функции определения ошибки (не верно введённых данных), а также «подсказку» в каких диапазонах нужно указывать значения для получения результата.

A)	C	D	Е	F	G	Н	I I	KL	M	N C	PQ	RS	TU	V W	X Y Z
3	План организации ежегодной инвентаризации СК			Girlyin 5 den 24 Aned 12				CTAPT CTOPHR				тынка			
6	Описание	Старт	Дней	Финиш	Статус	%	Комментарии	7 дек	9 дек	10 дек	12 дек	14 gex	16 дек 17 дек	18 дек 19 дек	20 дек 21 дек 22 дек
7 8	Начало работы по подготовке ВКР	07.12.24	1	08.12.24	closed	100%	Ознакомится с задачей и тебованиям к ВКР.						لمالمال		
9	Изучить тему "Компазитов"	07.12.24	2	09.12.24	closed	100%	Почитать в интеренете, что это за "зверь" такой, какие проблемы сейчас актуальны по данном у вопросу.								
10	Приступаем к написанию кода (загрузка DF и начинаем его "крутить")	09.12.24	1	10.12.24	closed	100%	Начать с подготовки данных: Загрузить, ознакомится с их содержанием, (читай/ смотри ноутбуки лекций)								
11	Обучаем модели.	10.12.24	1	11.12.24	closed	100%	Почитать про нормализацию и выбросы, определить методы и сделать								
12	Построение нейро сети	12.12.24	2	14.12.24	closed	100%	Всё то же самое								
13	Разработка приложения	13.12.24	3	16.12.24	closed	100%	Выбрать: модель на которой будешь делать приложение, Вы брать графический или текстовый (Внимание: помни лучшее враг хорошего)								
14	Написать Записку	17.12.24	2	19.12.24	in progress	0%	Описать свою проделанную работу	1							
15	Сделать призентацию	17.12.24	2	19.12.24	in progress	0%	Визуализировать и сжато предоставить информацию о проделанной работе								
16	Отправить файлы до 19/12/24	18.12.24	1	19.12.24	open	096	Почто reception@edubmstu.ru								
17	ЗАЩИТА!!!!!	20.12.24	1	21.12.24	open	0%	КРЕПИСЬ!]	T						

Трекер вопросов									
Вопрос	Статус	Дата открыть	Дата закрыти	Комментарии					
Разработка приложения	Сделано	13.12.24	16.12.24	Выбрать: модель на которой будешь делать приложение, Вы брать графический или текстовый (Внимание: помни лучшее враг хорошего)					
Написать Записку	В процессе	17.12.24	19.12.24	Описать свою проделанную работу					
Сделать призентацию	В процессе	17.12.24	10 12 24	Визуализировать и сжато предоставить информацию о проделанной работе					
Опправить файлы до 19/12/24	Не сделано	18.12.24	19.12.24	Почто reception@edubmstu.ru					
ЗАЩИТА!!!!!	Не сделано	20.12.24	21.12.24	КРЕПИСЬ!					



Описание работы (объединение данных и их анализ)



Производим объеденение двух таблиц по индексу, тип объединения — INNER. озакомления.

DS3=pd.merge(DS1,DS2,left_index = True, right_index = True, how = 'inner')

<class 'pandas.core.frame.DataFrame'> Index: 1023 entries, 0 to 1022 Data columns (total 13 columns) Non-Null Count Dtype Соотношение матрица-наполнитель 1023 non-null float64 Плотность, кг/м3 1023 non-null float64 модуль упругости, ГПа 1023 non-null 1023 non-null float64 ypes: float64(12), int64(1)

DS3.nunique() # поиск уникальных	значений
✓ 0.0s	
Соотношение матрица-наполнитель	1014
Плотность, кг/м3	1013
модуль упругости, ГПа	1020
Количество отвердителя, м.%	1005
Содержание эпоксидных групп,%_2	1004
Температура вспышки, С_2	1003
Поверхностная плотность, г/м2	1004
Модуль упругости при растяжении, ГПа	1004
Прочность при растяжении, МПа	1004
Потребление смолы, г/м2	1003
Угол нашивки, град	2
Шаг нашивки	989
Плотность нашивки	988
dtype: int64	

наличия	пропущенных
0	
0	
0	
0	
0	
0	
0	
ГПа 0	
0	
0	
0	
0	
0	
	0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0

Объединение данных:

- •Импортируем необходимые библиотеки:
- •Загружаем файлы;
- •Ознакомимся с содержимым;
- •Произведём объединение двух файлов.

Разведочный анализ данных:

- •Изучим информацию о датасете;
- •Проверим типы данных в каждом столбце;
- •Проверим пропуски;
- •Проверим уникальные значения.



Описание работы (ознакомимся с описательной статистикой наших данных.)

наименование столбца	Значение
ount	количество значений
mean	среднее значение
std	стандартное отклонение
min	минимум
25%	верхнее значение первого квартиля
50%	медиана
75%	верхнее значение третьего квартиля
max	максимум

			~					
description = DS3.describe() # ∏	олучени	е описательно	ои статистик	И				
description.T # Поворот таблицы								
✓ 0.0s								
	count	mean	std	min	25%	50%	75%	max
Соотношение матрица-наполнитель	1023.0	2.930366	0.913222	0.389403	2.317887	2.906878	3.552660	5.591742
Плотность, кг/м3	1023.0	1975.734888	73.729231	1731.764635	1924.155467	1977.621657	2021.374375	2207.773481
модуль упругости, ГПа	1023.0	739.923233	330.231581	2.436909	500.047452	739.664328	961.812526	1911.536477
Количество отвердителя, м.%	1023.0	110.570769	28.295911	17.740275	92.443497	110.564840	129.730366	198.953207
Содержание эпоксидных групп,%_2	1023.0	22.244390	2.406301	14.254985	20.608034	22.230744	23.961934	33.000000
Температура вспышки, С_2	1023.0	285.882151	40.943260	100.000000	259.066528	285.896812	313.002106	413.273418
Поверхностная плотность, г/м2	1023.0	482.731833	281.314690	0.603740	266.816645	451.864365	693.225017	1399.542362
Модуль упругости при растяжении, ГПа	1023.0	73.328571	3.118983	64.054061	71.245018	73.268805	75.356612	82.682051
Прочность при растяжении, МПа	1023.0	2466.922843	485.628006	1036.856605	2135.850448	2459.524526	2767.193119	3848.436732
Потребление смолы, г/м2	1023.0	218.423144	59.735931	33.803026	179.627520	219.198882	257.481724	414.590628
Угол нашивки, град	1023.0	44.252199	45.015793	0.000000	0.000000	0.000000	90.000000	90.000000
Шаг нашивки	1023.0	6.899222	2.563467	0.000000	5.080033	6.916144	8.586293	14.440522
Плотность нашивки	1023.0	57.153929	12.350969	0.000000	49.799212	57.341920	64.944961	103.988901

Описательная статистика:

•Получаем значения по датасету.

Первое выполнение задания:

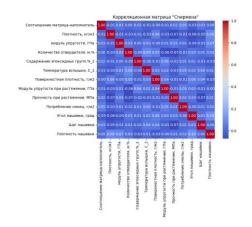
•Для каждой колонке получаем среднее, медианное значение.

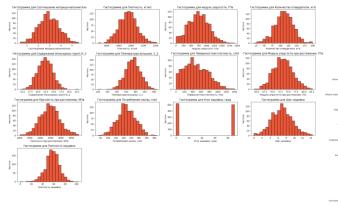
```
DS3.mean() # среднее значение в отдельной колонке
Соотношение матрица-наполнитель
                                           2.930366
Плотность, кг/м3
                                        1975.734888
модуль упругости, ГПа
                                         739.923233
                                         110.570769
Количество отвердителя, м.%
Содержание эпоксидных групп, 2
                                          22.244390
Температура вспышки, С_2
                                         285.882151
Поверхностная плотность, г/м2
                                         482.731833
                                          73.328571
Модуль упругости при растяжении, ГПа
Прочность при растяжении, МПа
                                        2466.922843
                                         218.423144
Потребление смолы, г/м2
Угол нашивки, град
                                          44.252199
                                           6.899222
Шаг нашивки
Плотность нашивки
                                          57.153929
dtype: float64
```

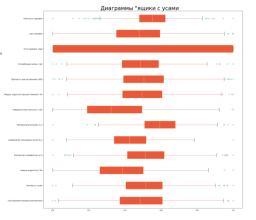
DS3.median()# медиана в отдельной	колонке
✓ 0.0s	
Соотношение матрица-наполнитель	2.906878
Плотность, кг/м3	1977.621657
модуль упругости, ГПа	739.664328
Количество отвердителя, м.%	110.564840
Содержание эпоксидных групп,%_2	22.230744
Температура вспышки, С_2	285.896812
Поверхностная плотность, г/м2	451.864365
Модуль упругости при растяжении, ГПа	73.268805
Прочность при растяжении, МПа	2459.524526
Потребление смолы, г/м2	219.198882
Угол нашивки, град	0.000000
Шаг нашивки	6.916144
Плотность нашивки	57.341920
dtype: float64	

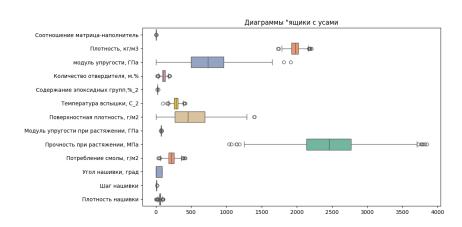


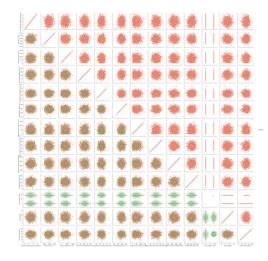
Описание работы (визуализация наших данных.)











Визуализация данных до нормализации и очистки от выбросов:

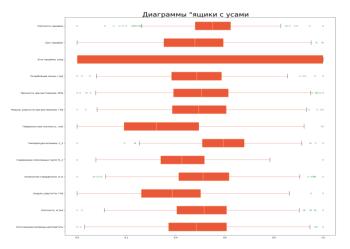
- Пример тепловых карт корреляций;
- Гистограммы распределения;
- Примеры коробочной диаграммы ;
- Пример попарного графика рассеяния точек.

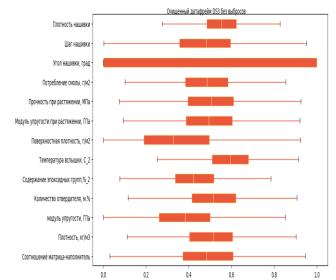


Описание работы (выявляем выбросы)

	Column	IQR	Standard Deviation	Z-Score
0	Соотношение матрица-наполнитель	6	0	0
1	Плотность, кг/м3	9	3	3
2	модуль упругости, ГПа	2	2	2
3	Количество отвердителя, м.%	14	2	2
4	Содержание эпоксидных групп,%_2	2	2	2
5	Температура вспышки, С_2	8	3	3
6	Поверхностная плотность, г/м2	2	2	2
7	Модуль упругости при растяжении, ГПа	6	0	1
8	Прочность при растяжении, МПа	11	0	0
9	Потребление смолы, г/м2	8	3	3
10	Угол нашивки, град	0	0	0
11	Шаг нашивки	4	0	0
12	Плотность нашивки	21	7	7

<cla< th=""><th colspan="7"><class 'pandas.core.frame.dataframe'=""></class></th></cla<>	<class 'pandas.core.frame.dataframe'=""></class>							
Inde	Index: 921 entries, 1 to 1022							
Data	columns (total 13 columns):							
#	Column	Non-Null Count	Dtype					
0	Соотношение матрица-наполнитель	921 non-null	float64					
1	Плотность, кг/м3	921 non-null	float64					
2	модуль упругости, ГПа	921 non-null	float64					
3	Количество отвердителя, м.%	921 non-null	float64					
4	Содержание эпоксидных групп,%_2	921 non-null	float64					
5	Температура вспышки, С_2	921 non-null	float64					
6	Поверхностная плотность, г/м2	921 non-null	float64					
7	Модуль упругости при растяжении, ГПа	921 non-null	float64					
8	Прочность при растяжении, МПа	921 non-null	float64					
9	Потребление смолы, г/м2	921 non-null	float64					
10	Угол нашивки, град	921 non-null	int64					
11	Шаг нашивки	921 non-null	float64					
12	Плотность нашивки	921 non-null	float64					
dtyn	es: float64(12) int64(1)							





Визуализация данных до нормализации и очистки от выбросов:

- Определяем кол-во выбросов тремя методами (Метод межквартильного размаха (IQR), Метод стандартного отклонения, Метод Z-оценка.)
- Визуальный контроль через «ящик с усам»
- Проведение очистки от выбросов до полного устранения и получения конечного результата (было удалено приблизительно 10% данных)

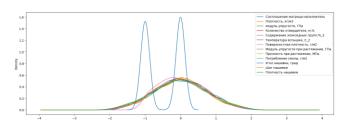


Описание работы (Нормализация данных)

```
# Нормализация данных MinMaxScaler
scaler_minmax = MinMaxScaler()
DS3_normalized_1= pd.DataFrame(scaler_minmax.fit_transform(DS3_cleaned), columns=DS3_cleaned.columns)
/ 0.0s
```

```
# Hopмaлизация данных RobustScaler
scaler_robust = RobustScaler()
DS3_normalized_2 = pd.DataFrame(scaler_robust.fit_transform(DS3_cleaned), columns=DS3_cleaned.columns)

/ 0.0s
```

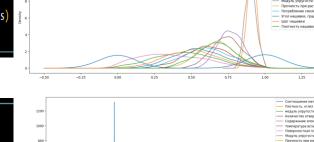


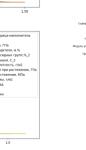
Нормализация очищенных данных:

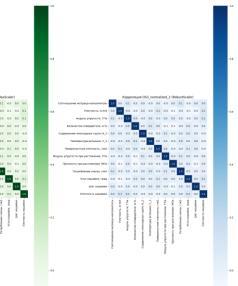
• Мы опробуем несколько вариантов НОРМАЛИЗАЦИИ: MinMaxScaler, Normalizer, MaxAbsScaler, RobustScaler, сравним их точность и выберем лучший результат.

```
scaler_maxabs = MaxAbsScaler()
DS3_normalized_3 = pd.DataFrame(scaler_maxabs.fit_transform(DS3_cleaned), columns=DS3_cleaned.columns)

/ 0.0s
```



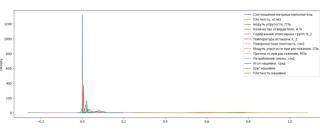




normalizer = Normalizer(norm='12')

DS3_normalized_4 = pd.DataFrame(normalizer.fit_transform(DS3_cleaned), columns=DS3_cleaned.columns)

V 0.0s





Описание работы (процесс создания и обучения моделей)

```
# Создаём словарь для хранения моделей и их результатов models = {
    'Линейная регрессия': LinearRegression(),
    'Хребет': Ridge(),
    'Опорные вектора': SVR(),
    'Случайный_лес': RandomForestRegressor(),
    'Градиентный бустинг ': GradientBoostingRegressor()}

✓ 0.0s
```

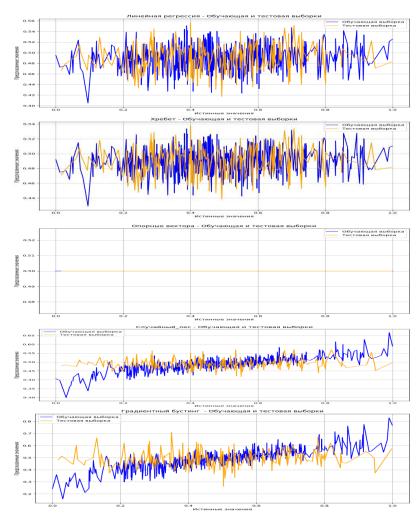
```
#Запускаем поиск через GridSearchCV 10 блоков, если таковые есть
best_models = {}
for name, model in models.items():
    if name in param_grids: # Если есть гиперпараметры для поиска
        grid = GridSearchCV(model, param_grids[name], cv=10, scoring='neg_mean_squared_error')
        grid.fit(X_train, y_train)
        best_models[name] = grid.best_estimator_
        print(f"/учшие параметры для {name}: {grid.best_params_}")

✓ Im 35.6s

Лучшие параметры для Линейная регрессия: {'fit_intercept': True}
Лучшие параметры для Хребет: {'alpha': 10.0}
Лучшие параметры для Опорные вектора: {'C': 0.1, 'epsilon': 0.5, 'gamma': 'scale', 'kernel': 'linear'}
Лучшие параметры для Случайный_лес: {'max_depth': 5, 'n_estimators': 100}
```

```
#0бучение моделй с оптимальными гипперпараметрами model.fit(X_train, y_train) best_models[name] = model 
✓ 0.5s
```

	R^2	MAE	MSE	MAPE	Test Score
Линейная регрессия	-0.00	0.16	0.04	64.45	-0.00
Хребет	0.00	0.16	0.04	64.51	0.00
Опорные вектора	-0.01	0.16	0.04	66.38	-0.01
Случайный_лес	-0.01	0.16	0.04	65.10	-0.01
Градиентный бустинг	-0.06	0.16	0.04	66.59	-0.06



Создание и обучени:

- Сначала определили набор методов.
- Согласно задаче определили гипперпараметры и получили оптимальные по условию(cv=10)
- Обучили модели и получили оценки и визуализировали результаты.
- Для "модуля упругости при растяжении« и "прочность при растяжении« использовались одинаковые методы.



Описание работы (процесс создания нейронной сети)

```
model = Sequential() # Создание модели

# Добавление слоев с регуляризацией и Dropout
model.add(Dense(64, activation='tanh', input_shape=(X_train.shape[1],), kernel_regularizer='12'))
model.add(Dropout(0.3)) # Слой Dropout
model.add(Dense(64, activation='tanh', kernel_regularizer='12'))
model.add(Dropout(0.3)) # Слой Dropout
model.add(Dense(32, activation='tanh', kernel_regularizer='12'))
model.add(Dense(1, activation='sigmoid'))

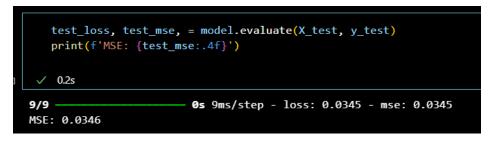
✓ 0.3s
```

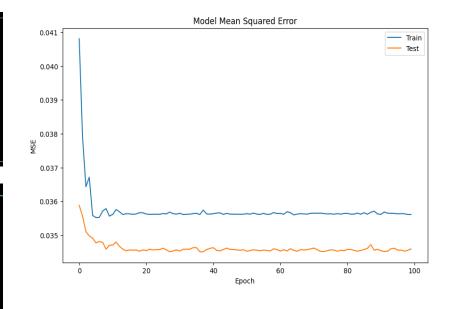
```
model.compile(optimizer='adam', loss='mse', metrics=['mse']) # Для perpeccии

early_stopping = EarlyStopping(monitor='val_loss', patience=10, restore_best_weights=True)# Настройка раннего прекращения

history = model.fit(X_train, y_train, epochs=100, batch_size=32, validation_data=(X_test, y_test), verbose=0)

✓ 17.7s
```





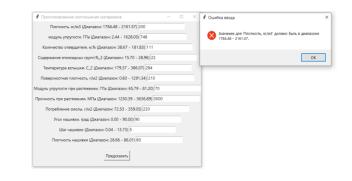
Создание и обучении:

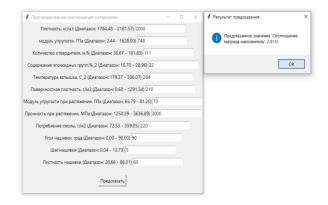
- Создаём модель из 4 слоёв
- Добавляем слои Dropout
- Делаем настройку раннего прекращения обучения
- Получаем оценку модели (MSE) и визуализируем результат



Описание работы (Создание приложения с графическим интерфейсом.)

```
# Функция для предсказания
def predict():
      # Сбор данных из полей ввода
      input data = []
      for col in columns:
           value = float(entries[col].get())
           if not (ranges[col][0] <= value <= ranges[col][1]):</pre>
             raise ValueError(f"Значение для '{col}' должно быть в диапазоне {ranges[col][0]:.2f} - {ranges[col][1]:.2f}.")
           input_data.append(value)
       # Нормализация данных
      input_data = scaler.transform([input_data])
      prediction = model.predict(input data)[0][0]
      messagebox.showinfo("Результат предсказания", f"Предсказанное значение 'Соотношение матрица-наполнитель': {prediction:.4f}")
   except ValueError as e:
      messagebox.showerror("Ошибка ввода", str(e))
   except Exception as e:
      messagebox.showerror("Ошибка", f"Произошла ошибка: {str(e)}")
```





Создание приложения:

- Создаём приложения с использованием библиотеки tkinter
- Добавляем функцию уведомления об ошибочно введённых данных
- Добавлена «шпаргалка» с диапазонами для ввода данных.



Заключение.

Решить поставленную задачу не получилось, так как модели показали себя не с лучшей стороны. Возможными причинами неудачи могли стать как изначальный набор данных, так и методы и подходы к решению поставленной задачи. Не без основания сюда же можно отнести и мои компетенции, которые находятся на начальном этапе и отсутствия опыта. Не знание в области для которой ведутся расчёты (композитные материалы), так же могут отрицательно сказаться на решении задачи. Нужно обращается к металлургам или химикам для более глубокого понимания предмета по композитам.

Спасибо за внимание.





do.bmstu.ru

