



ЦЕНТР
ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО
ОБРАЗОВАНИЯ
МГТУ им. Н.Э. Баумана

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА по курсу «Data Science»

«Прогнозирование конечных свойств новых материалов
(композиционных материалов)»

Гриценко Ольга Олеговна



Цели исследования, постановка задачи

1

Цель исследования: решение актуальной производственной задачи по прогнозированию свойств получаемых композиционных материалов.

2

Объект исследования: композиционные материалы, которые означают искусственно созданные материалы, состоящие из нескольких других с четкой границей между ними.

3

Предмет исследования: прогнозные данные свойств композитов: соотношение матрица-наполнитель, модуль упругости при растяжении, прочность при растяжении.

Исследуемые датасеты

X_br (матрица из базальтопластика):

- признаков: 10 и индекс
- строк: 1023

X_nip (наполнитель из углепластика):

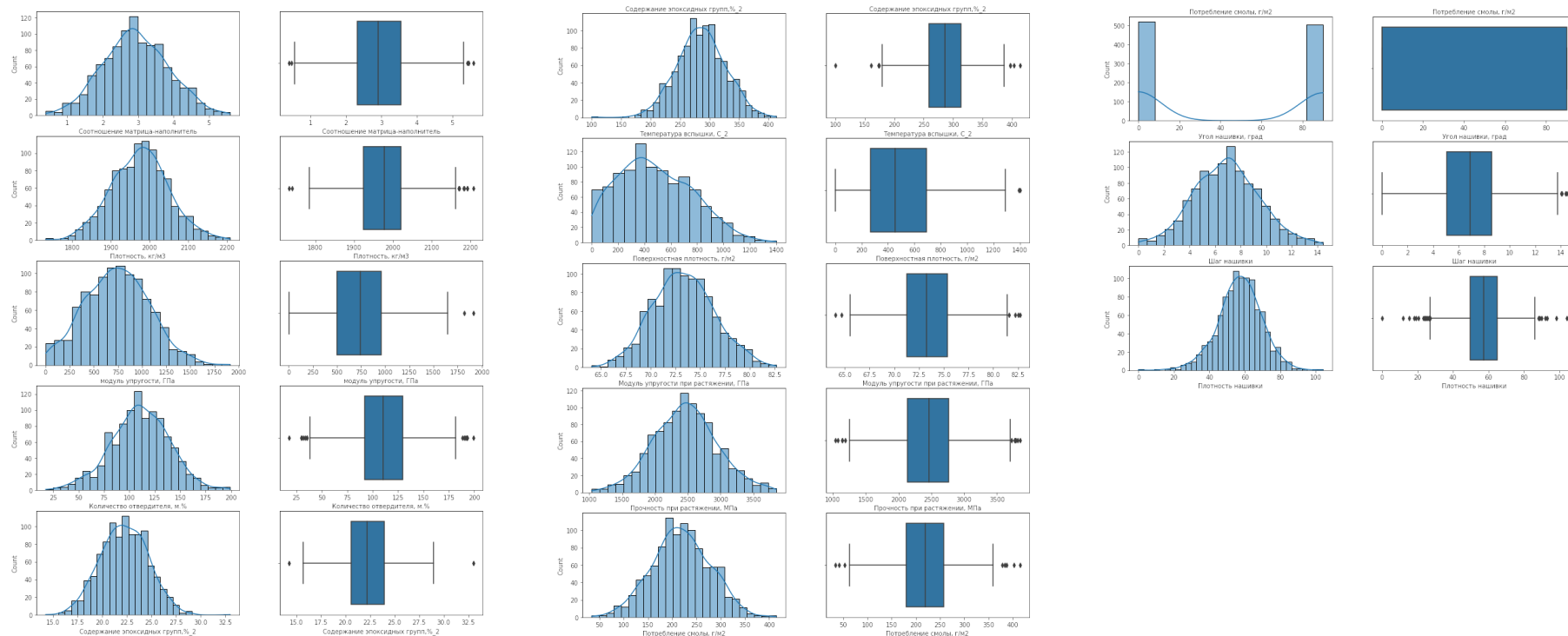
- признаков: 3 и индекс
- строк: 1040

Объединение INNER по индексу:

- признаков: 13
- строк: 1023



Разведочный анализ данных

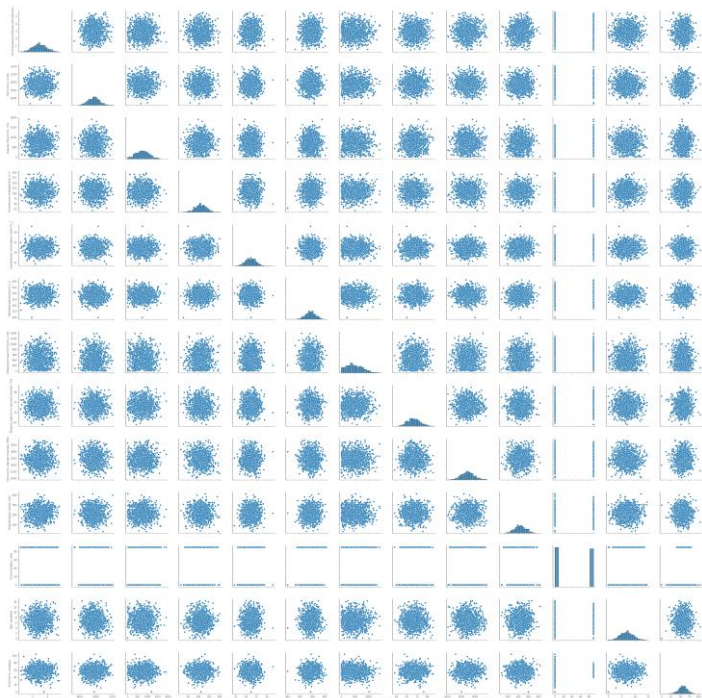


Гистограммы распределения и диаграммы “ящик с усами”

- Большинство — количественные, вещественные, положительные, нормально распределенные
- Угол нашивки — категориальный, бинарный



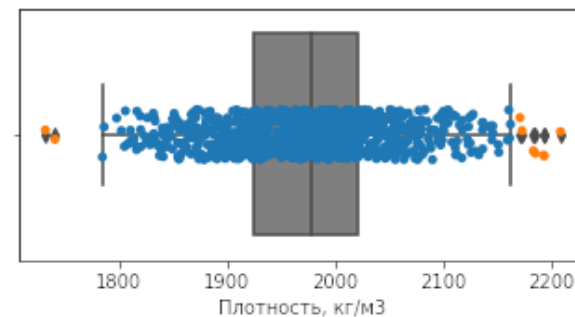
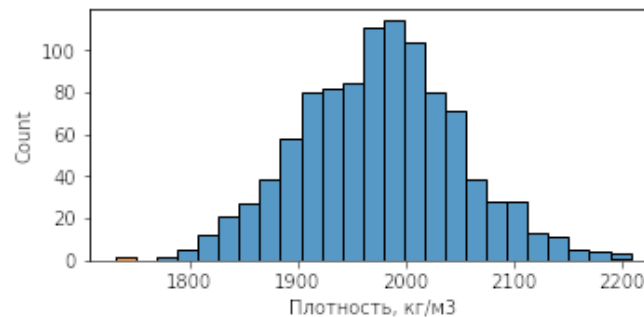
Разведочный анализ данных



Попарные графики рассеяния точек

- Выбросы есть
- Зависимости не обнаружены

Поиск выбросов



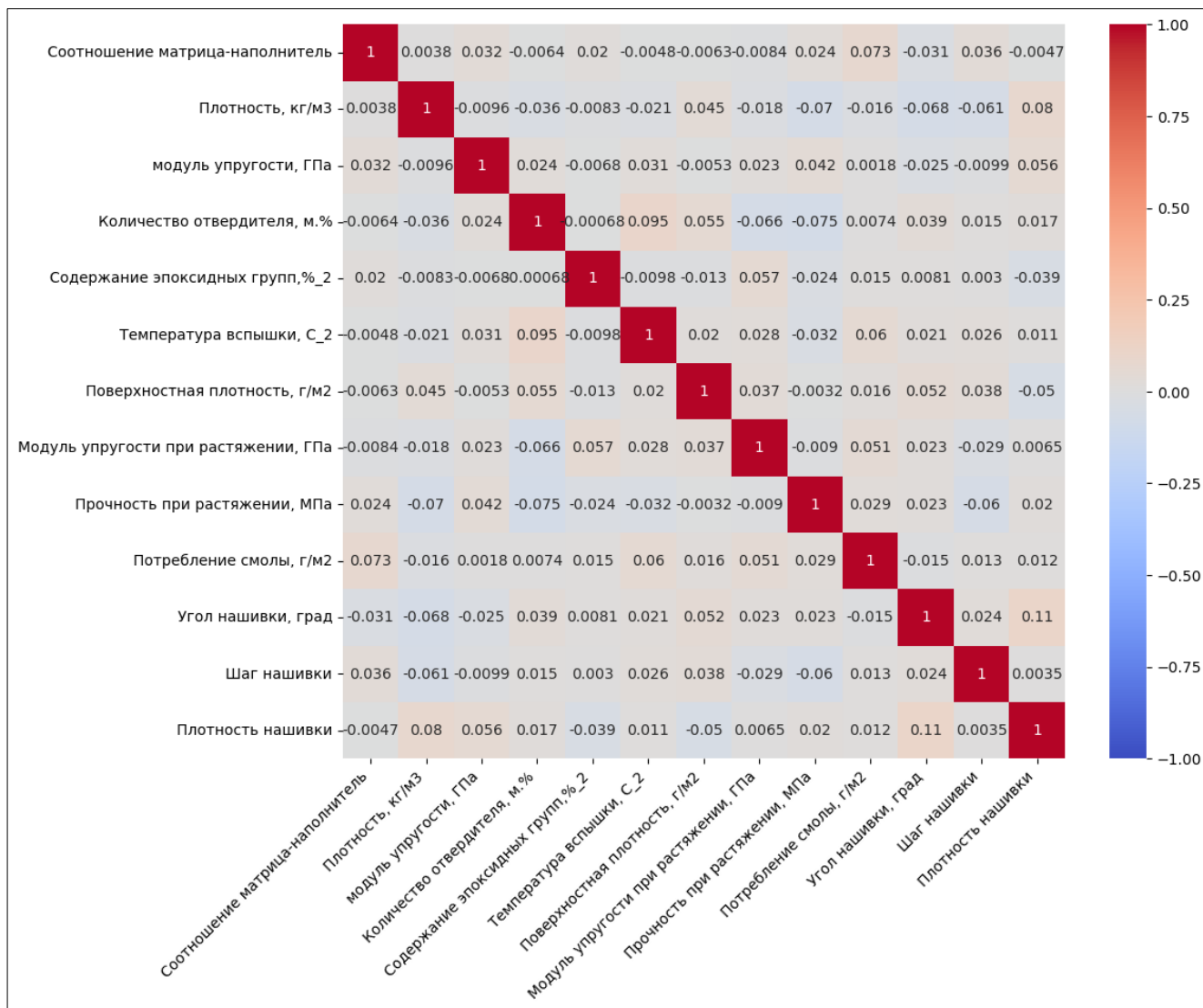
Найдено:

- методом 3-х сигм — 24 выброса
- методом межквартильных расстояний — 93 выброса

После удаления методом 3-х сигм осталось 1000 строк



Тепловая карта корреляции

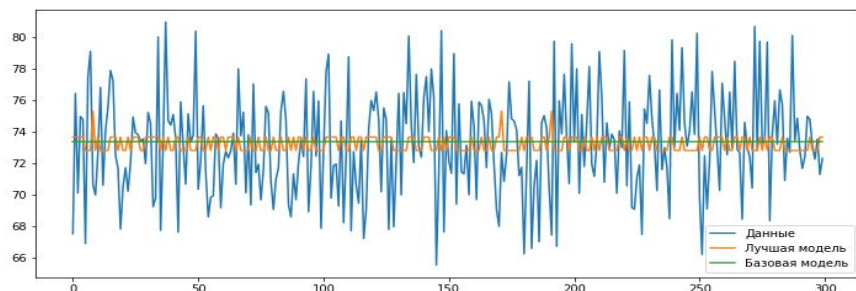


Зависимость
между признаками
минимальна



Модели регрессионного анализа

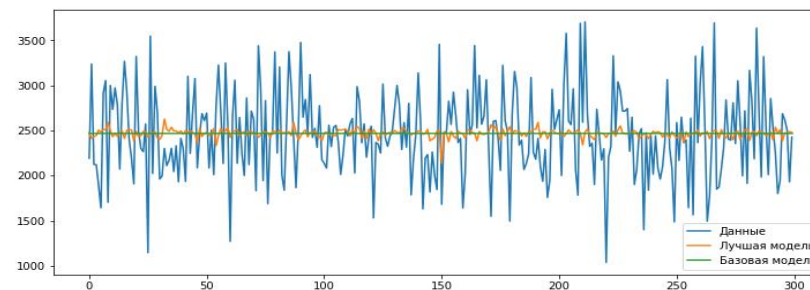
1. Модель для модуля упругости при растяжении



| | R2 | RMSE | MAE | MAPE | max_error |
|--------------------------------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| Базовая модель | -0.001377 | -3.222954 | -2.577796 | -0.035319 | -7.800690 |
| Лучшая модель (дерево решений) | -0.035776 | -3.277844 | -2.610243 | -0.035707 | -8.152045 |

| | R2 | RMSE | MAE | MAPE | max_error |
|---------------------------------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| Модуль упругости, тренировочный | 0.017295 | -3.037284 | -2.410294 | -0.032850 | -9.008468 |
| Модуль упругости, тестовый | -0.035776 | -3.277844 | -2.610243 | -0.035707 | -8.152045 |

2. Модель для модуля прочности при растяжении



| | R2 | RMSE | MAE | MAPE | max_error |
|-------------------------------------|-----------|-------------|-------------|-----------|--------------|
| Базовая модель | -0.000531 | -479.694153 | -375.066608 | -0.165566 | -1431.321957 |
| Лучшая модель (градиентный бустинг) | 0.004028 | -478.600202 | -376.647056 | -0.166046 | -1384.841404 |

| | R2 | RMSE | MAE | MAPE | max_error |
|---|----------|-------------|-------------|-----------|--------------|
| Прочность при растяжении, тренировочный | 0.057141 | -472.832206 | -374.670333 | -0.164825 | -1383.885510 |
| Прочность при растяжении, тестовый | 0.004028 | -478.600202 | -376.647056 | -0.166046 | -1384.841404 |

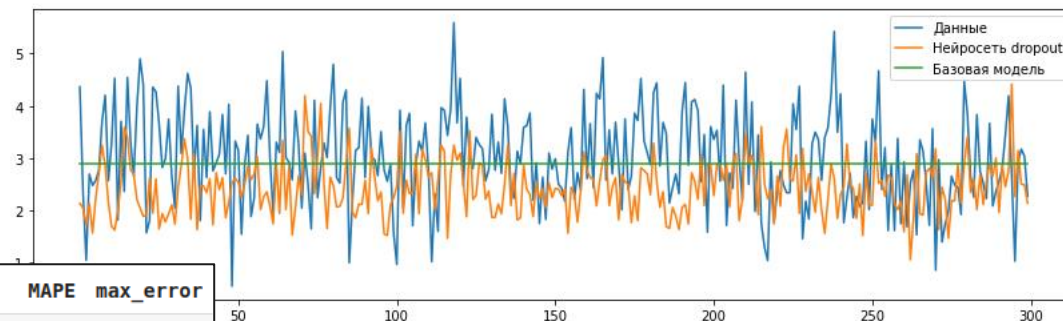
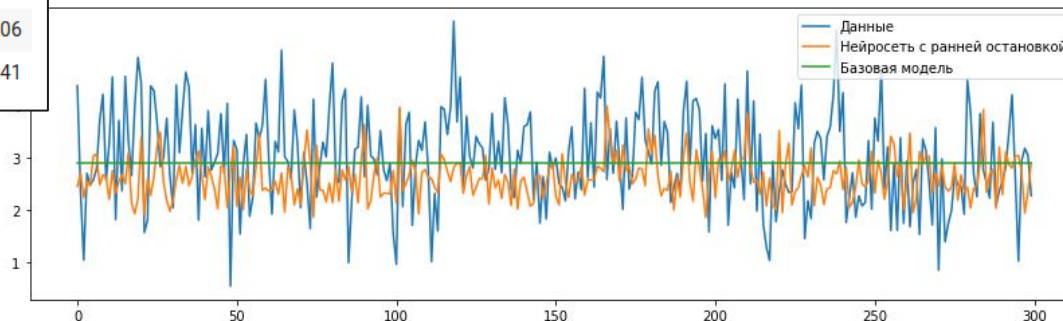
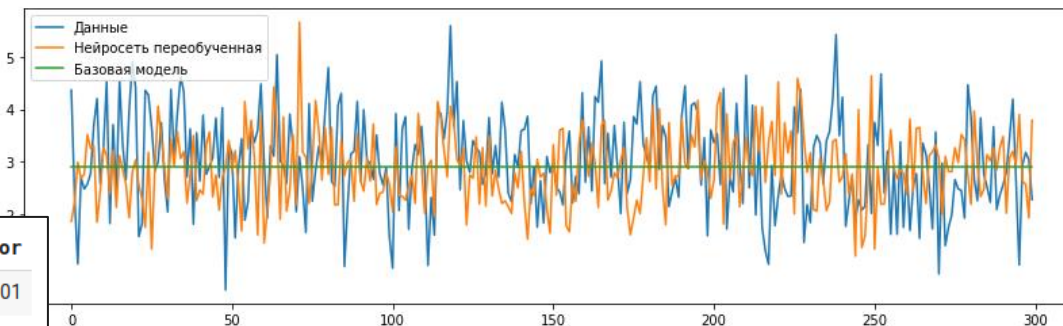


Модели для соотношения матрица-наполнитель

Значения выхода от 0.39 до 5.46

| | R2 | RMSE | MAE | MAPE | max_error |
|-------------------------------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| DummyRegressor | -0.011269 | -0.911261 | -0.737067 | -0.299795 | -2.684301 |
| Нейросеть переобученная | -0.624376 | -1.154922 | -0.938195 | -0.373712 | -2.868809 |
| Нейросеть с ранней остановкой | -0.322407 | -1.042058 | -0.852214 | -0.312846 | -2.781806 |
| Нейросеть dropout | -0.628132 | -1.156256 | -0.960385 | -0.343979 | -2.903841 |

Лучшие результаты у
нейросети,
обученной
с ранней остановкой



| | R2 | RMSE | MAE | MAPE | max_error |
|--|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| Соотношение матрица-наполнитель, тренировочный | -0.212722 | -0.999613 | -0.787676 | -0.298627 | -3.084322 |
| Соотношение матрица-наполнитель, тестовый | -0.322407 | -1.042058 | -0.852214 | -0.312846 | -2.781806 |



ЦЕНТР
ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО
ОБРАЗОВАНИЯ
МГТУ им. Н.Э. Баумана



do.bmstu.ru