

TaskDescription

19 ноября 2022 г.

1. Итоговое задание

2. Содержание

1. Постановка задачи
2. Анализ и проверка данных
3. Сравнение методов решения задачи
 - Линейная регрессия
 - Функция для изучения поведения модели за пределами заданных значений
 - MLPRegressor
 - Поиск параметров сети через GridSearchCV
 - Случайный лес
 - Сравнение полученных метрик
 - Проверяем полученные модели через кросс-валидацию
4. Выводы по теоретической части
5. Описание программного решения

2.1. Постановка задачи

2.1.1. Прогнозирование размеров сварного шва при электронно-лучевой сварке тонкостенных конструкций аэрокосмического назначения

В качестве исходных данных были взяты результаты экспериментальных исследований, проводимых в целях улучшения технологического процесса электронно-лучевой сварки изделия, сборка которого состоит из элементов, состоящих из разнородного материала.

Установка электронно-лучевой сварки, на которой проводились исследования, предназначена для сварки электронным лучом в глубоком вакууме деталей сборочных единиц из нержавеющей сталей, титановых, алюминиевых и специальных сплавов.

Существующая установка электронно-лучевой сварки обеспечивает повторяемость режимов в рамках возможностей реализованной системы управления. Работы по сварке выполнялись на образцах-имитаторах, соответствующих технологическому изделию.

Для уменьшения вложения энергии при сварке: 1. Снижалась величина сварочного тока (IW); 2. Увеличивался ток фокусировки электронного пучка (IF); 3. Увеличивалась скорость сварки (VW); 4. Менялось расстояние от поверхности образцов до электронно-оптической системы (FP).

По совокупности параметров технологических режимов обеспечивались минимально возможные размеры сварных швов: глубина шва (Depth) и ширина шва (Width).

В процессе выполнения работ была произведена электронно-лучевая сварка 18-ти единиц образцов. Результаты металлографического контроля по размерам сварного шва

для каждого образца проводились в 4-х поперечных сечениях сварного шва. Ускоряющее напряжение было постоянным в диапазоне 19,8 -- 20 кВ. Набор полученных данных собраны в составе режимов сварки, размеров сварочных швов в поперечных сечениях всех образцов.

Требуется: провести прогнозирование глубины (Depth) и ширины (Width) сварного шва в зависимости от параметров технологического процесса (IW, IF, VW, FP).

К содержанию

2.2. Дополнительные требования

1. Предварительная обработка датасета.
2. Применение минимум 3-х алгоритмов машинного обучения (включая обязательно использование искусственных нейронных сетей) в Jupyter Notebook (или colab) позволяющих решить поставленную задачу анализа данных, выбрать лучшую модель и применить ее в приложении.
3. Создание локального репозитория git.
4. Реализация приложения. Приложение может быть консольное, оконное или веб-приложение по выбору.
5. Создание профиля на github.com
6. Выгрузка коммитов приложения из локального репозитория на github.com.

2.3. Обработка, проверка и анализ данных

```
[1]: # загружаем необходимые для этой части библиотеки
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
import seaborn as sns
import numpy as np
```

2.3.1. Загрузка данных, поиск пропусков

```
[2]: # Путь к файлу с данными - относительно файла блокнота
!ls ../../data/raw
```

ebw_data.csv ebw_description.docx

```
[3]: # Загружаем данные из файла csv (размещен в папке проекта)
df = pd.read_csv('../../data/raw/ebw_data.csv')
df
```

```
[3]:
```

	IW	IF	VW	FP	Depth	Width
0	47	139	4.5	80	1.60	2.54
1	47	139	4.5	80	1.62	2.50
2	47	139	4.5	80	1.68	2.60
3	47	139	4.5	80	1.58	2.52
4	45	140	4.5	80	1.76	2.48
...
67	44	146	9.0	60	1.20	1.72
68	45	146	9.0	60	1.36	1.76
69	45	146	9.0	60	1.28	1.76
70	45	146	9.0	60	1.28	1.76

```
71  45  146  9.0  60   1.32   1.76
```

```
[72 rows x 6 columns]
```

```
[4]: #проверяем корректно ли применились типы данных
df.dtypes
```

```
[4]: IW          int64
     IF          int64
     VW         float64
     FP          int64
     Depth       float64
     Width       float64
     dtype: object
```

```
[5]: #проверяем общую статистику
df.describe()
```

```
[5]:
```

	IW	IF	VW	FP	Depth	Width
count	72.000000	72.000000	72.000000	72.000000	72.000000	72.000000
mean	45.666667	141.333333	8.638889	78.333333	1.195556	1.970417
std	1.678363	5.145763	2.061078	21.493530	0.225081	0.279040
min	43.000000	131.000000	4.500000	50.000000	0.800000	1.680000
25%	44.000000	139.000000	8.000000	60.000000	1.080000	1.760000
50%	45.500000	141.000000	9.000000	80.000000	1.200000	1.840000
75%	47.000000	146.000000	10.000000	80.000000	1.290000	2.050000
max	49.000000	150.000000	12.000000	125.000000	1.760000	2.600000

```
[6]: #проверяем на пропуски
df.isna().sum()
```

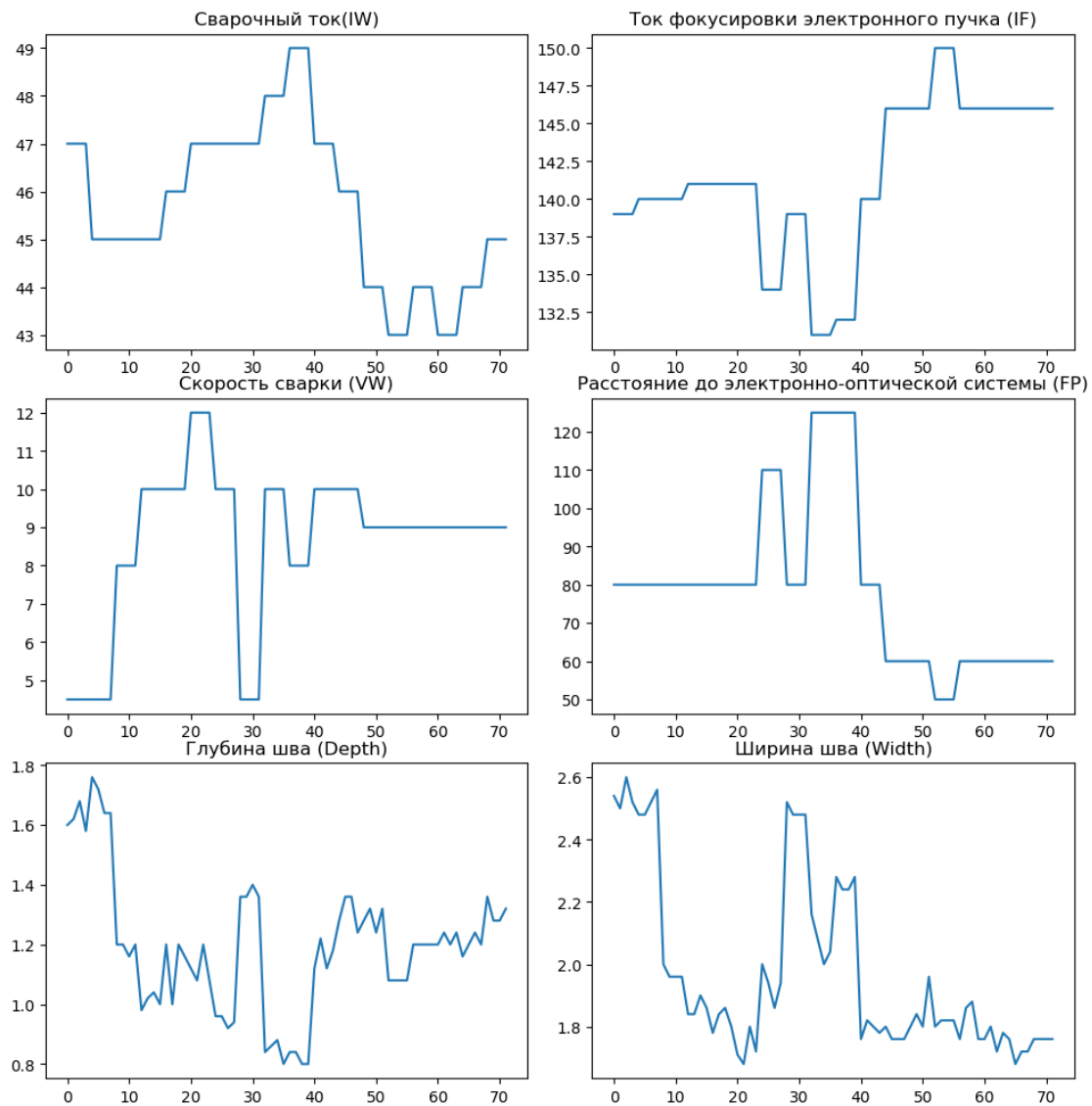
```
[6]: IW          0
     IF          0
     VW          0
     FP          0
     Depth       0
     Width       0
     dtype: int64
```

Загружены данные корректно, пропусков нет

2.3.2. Визуализация данных, проверка на выбросы

```
[7]: #построим гистограммы распределения для входных и выходных переменных
fig, ((IW, IF), (VW, FP), (Depth, Width)) = plt.subplots(ncols=2,
    _nrows=3, figsize=(10,10))
fig.tight_layout()
IW.set_title('Сварочный ток(IW)')
IW.plot(df.IW)
IF.set_title('Ток фокусировки электронного пучка (IF)')
IF.plot(df.IF)
VW.set_title('Скорость сварки (VW)')
```

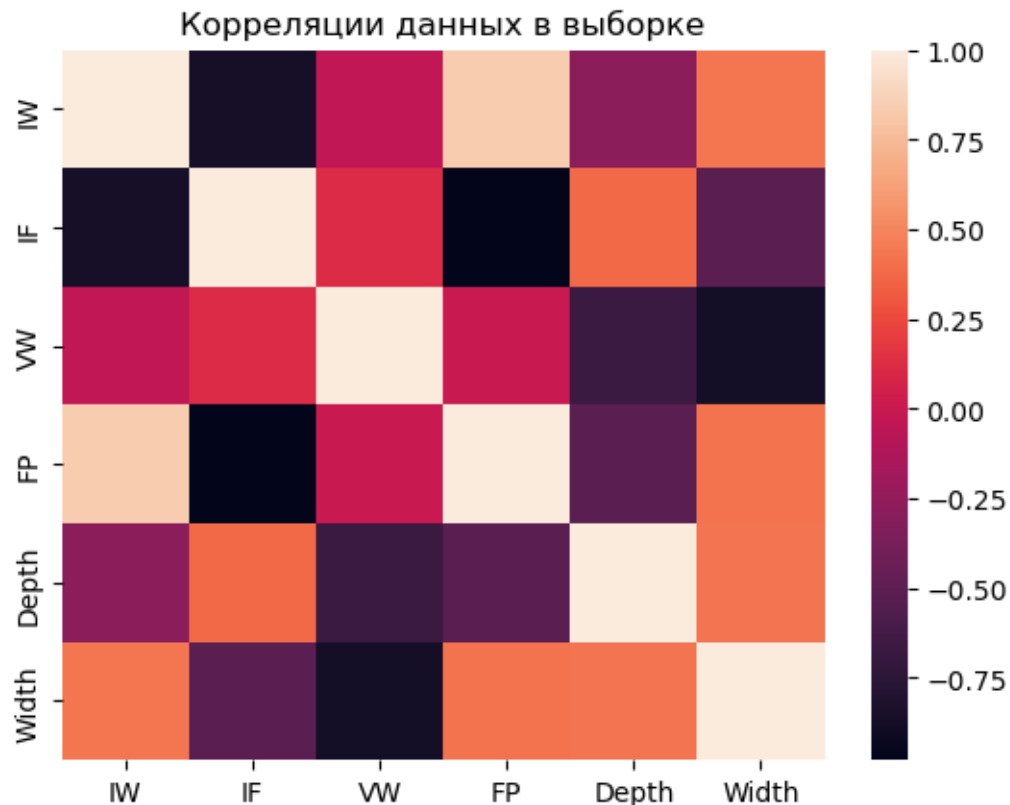
```
VW.plot(df.VW)
FP.set_title('Расстояние до электронно-оптической системы (FP)')
FP.plot(df.FP)
Depth.set_title('Глубина шва (Depth)')
Depth.plot(df.Depth)
Width.set_title('Ширина шва (Width)')
Width.plot(df.Width)
plt.show()
```



Явных аномальных значений в выборке не выявлено
К содержанию

2.3.3. Корреляции данных, диаграммы

```
[8]: #построим heatmap
sns.heatmap(df.corr()).set_title('Корреляции данных в выборке')
plt.show()
```



```
[14]: #построим диаграммы зависимостей выходных параметров от каждого входа
fig, ((IW, IF), (VW, FP)) = plt.subplots(ncols=2, nrows=2, figsize=(10,10))
fig.tight_layout()
#IW.set_title('Сварочный ток(IW)')
IW.scatter(x=df.IW, y=df.Depth, c='r')
IW.scatter(x=df.IW, y=df.Width, c='g')
IW.set_title('Сварочный ток(IW)')
IW.legend(['Глубина шва', 'Ширина шва'])

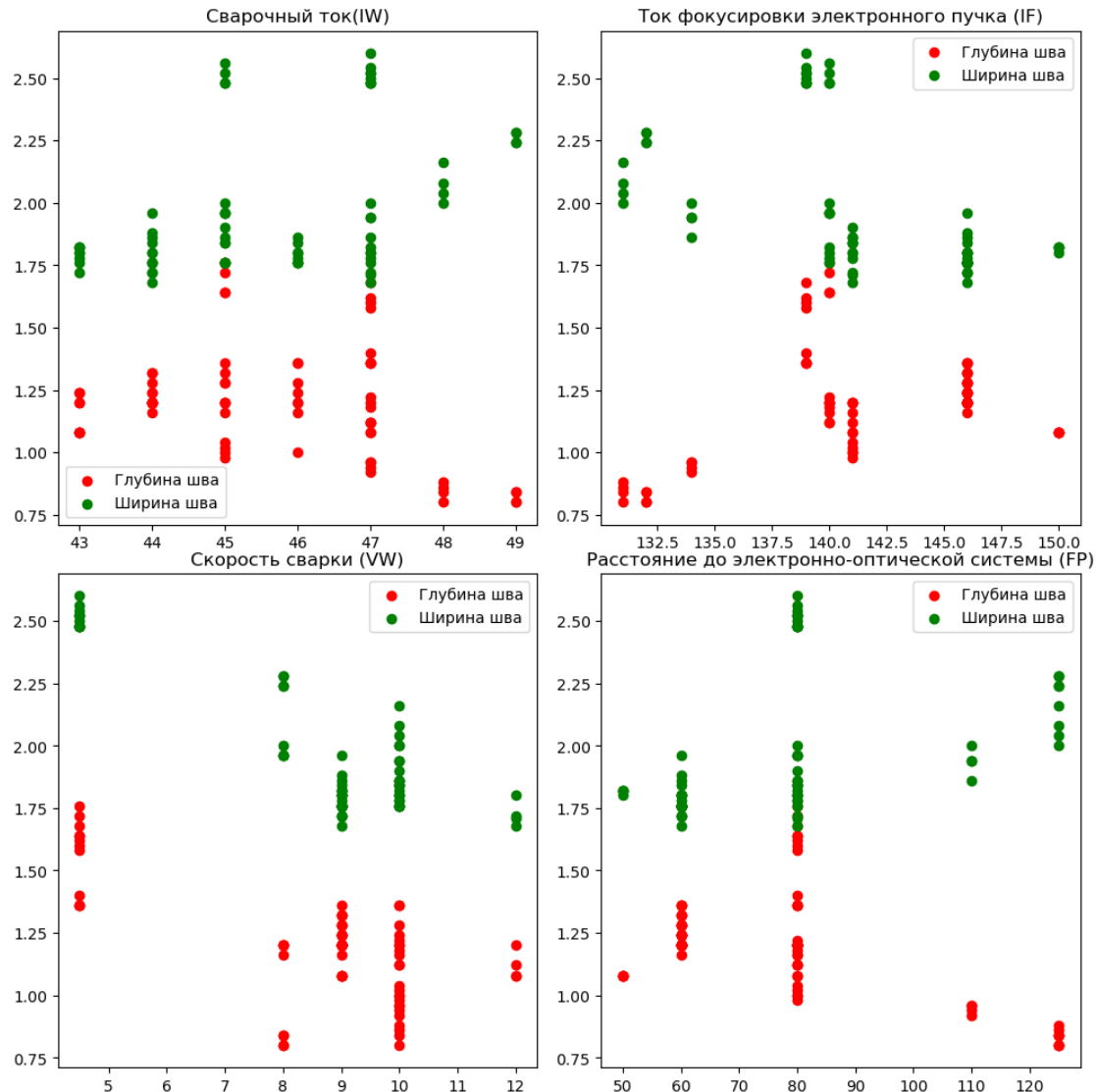
IF.scatter(x=df.IF, y=df.Depth, c='r')
IF.scatter(x=df.IF, y=df.Width, c='g')
IF.set_title('Ток фокусировки электронного пучка (IF)')
IF.legend(['Глубина шва', 'Ширина шва'])

VW.scatter(x=df.VW, y=df.Depth, c='r')
VW.scatter(x=df.VW, y=df.Width, c='g')
VW.set_title('Скорость сварки (VW)')
VW.legend(['Глубина шва', 'Ширина шва'])
```

```

FP.scatter(x=df.FP, y=df.Depth, c='r')
FP.scatter(x=df.FP, y=df.Width, c='g')
FP.set_title('Расстояние до электронно-оптической системы (FP)')
FP.legend(['Глубина шва', 'Ширина шва'])
plt.show()

```

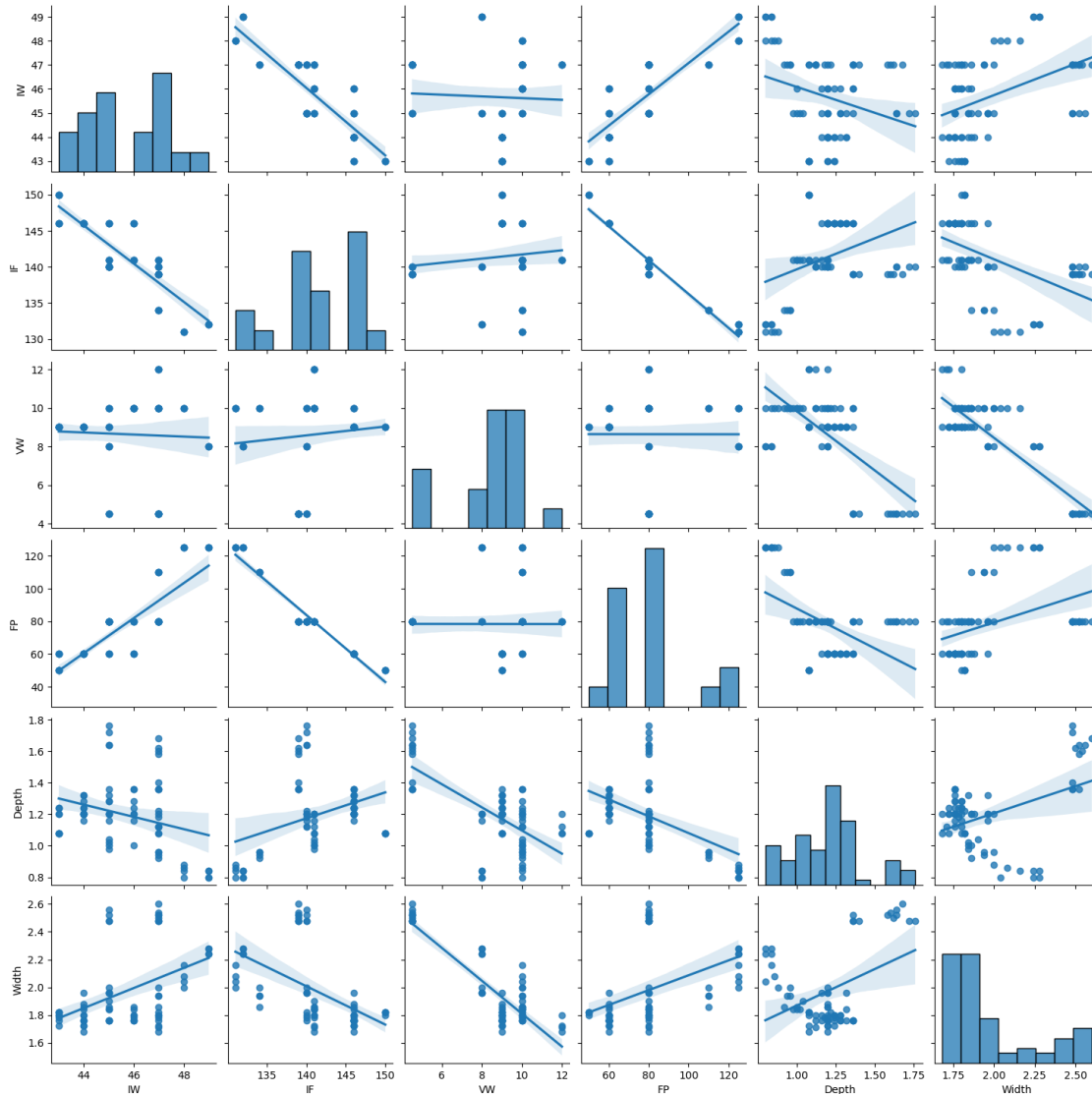


Если брать по одному фактору, характер зависимости выходных параметров от каждой из входных переменных понять сложно

Построим попарные графики

```
[15]: sns.pairplot(df, kind='reg')
```

```
[15]: <seaborn.axisgrid.PairGrid at 0x7f8052a99030>
```



К содержанию

2.4. Сравнение методов решения задачи

Необходимо решить задачу регрессии. Рассмотрим следующие способы решения: - линейная регрессия 1-го порядка и полиномиальная - полносвязная нейронная сеть - случайный лес

Проверку эффективности методов будем проводить с использованием sklearn

```
[10]: #Импортируем нужные методы
from sklearn.linear_model import LinearRegression
from sklearn.preprocessing import PolynomialFeatures
from sklearn.metrics import mean_squared_error, mean_absolute_error,
mean_absolute_percentage_error
```

```

from sklearn.pipeline import make_pipeline
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.utils import shuffle

```

```

[11]: #определяем функцию для вывода различных метрик качества модели
def out_metrics(y_train, y_test, y_pred_train, y_pred_test):
    ret = [0,0]
    mse = mean_squared_error(y_true=y_train, y_pred=y_pred_train)
    mae = mean_absolute_error(y_true=y_train, y_pred=y_pred_train)
    mape = mean_absolute_percentage_error(y_true=y_train,
    ↪y_pred=y_pred_train)
    ret[0] = (mse,mae,mape)
    print(f'Для тренировочной выборки: MSE {mse} - , MAE - {mae} , MAPE - {mape} ')
    mse = mean_squared_error(y_true=y_test, y_pred=y_pred_test)
    mae = mean_absolute_error(y_true=y_test, y_pred=y_pred_test)
    mape = mean_absolute_percentage_error(y_true=y_test, y_pred=y_pred_test)
    ret[1] = (mse,mae,mape)
    print(f'Для тестовой выборки: MSE {mse} - , MAE - {mae} , MAPE - {mape} ')
    ↪fig, ((Depth,Width),(Depth_t,Width_t)) = plt.subplots(ncols=2, nrows=2,
    ↪figsize=(10,10))
    Depth.set_title('Глубина шва (train)')
    Depth.scatter([i for i in range(0,len(y_train[:,0]))], y_train[:,0],
    ↪c='b')
    Depth.plot([i for i in range(0,len(y_pred_train[:,0]))], y_pred_train[
    ↪:,0], c='g')
    Depth.legend(['Измерения', 'Предсказания'])
    Width.set_title('Ширин шва (train)')
    Width.scatter([i for i in range(0,len(y_train[:,1]))], y_train[:,1],
    ↪c='b')
    Width.plot([i for i in range(0,len(y_pred_train[:,1]))], y_pred_train[
    ↪:,1], c='g')
    Width.legend(['Измерения', 'Предсказания'])
    Depth_t.set_title('Глубина шва (test)')
    Depth_t.scatter([i for i in range(0,len(y_test[:,0]))], y_test[:,0],
    ↪c='b')
    Depth_t.plot([i for i in range(0,len(y_pred_test[:,0]))], y_pred_test[
    ↪:,0], c='g')
    Depth_t.legend(['Измерения', 'Предсказания'])
    Width_t.set_title('Ширин шва (test)')
    Width_t.scatter([i for i in range(0,len(y_test[:,1]))], y_test[:,1],
    ↪c='b')
    Width_t.plot([i for i in range(0,len(y_pred_test[:,1]))], y_pred_test[
    ↪:,1], c='g')
    Width_t.legend(['Измерения', 'Предсказания'])
    plt.show()
    return ret

```

```

[12]: #получаем выходы, исходные данные у нас в переменной df
df1 = df.copy()
out = df1.loc[:,['Depth','Width']]

```



```
df1 = df1.drop(columns=['Depth', 'Width'])
x_train, x_test, y_train, y_test = train_test_split(df1.values, out.values)
X, y = shuffle(df1.values, out.values)
```

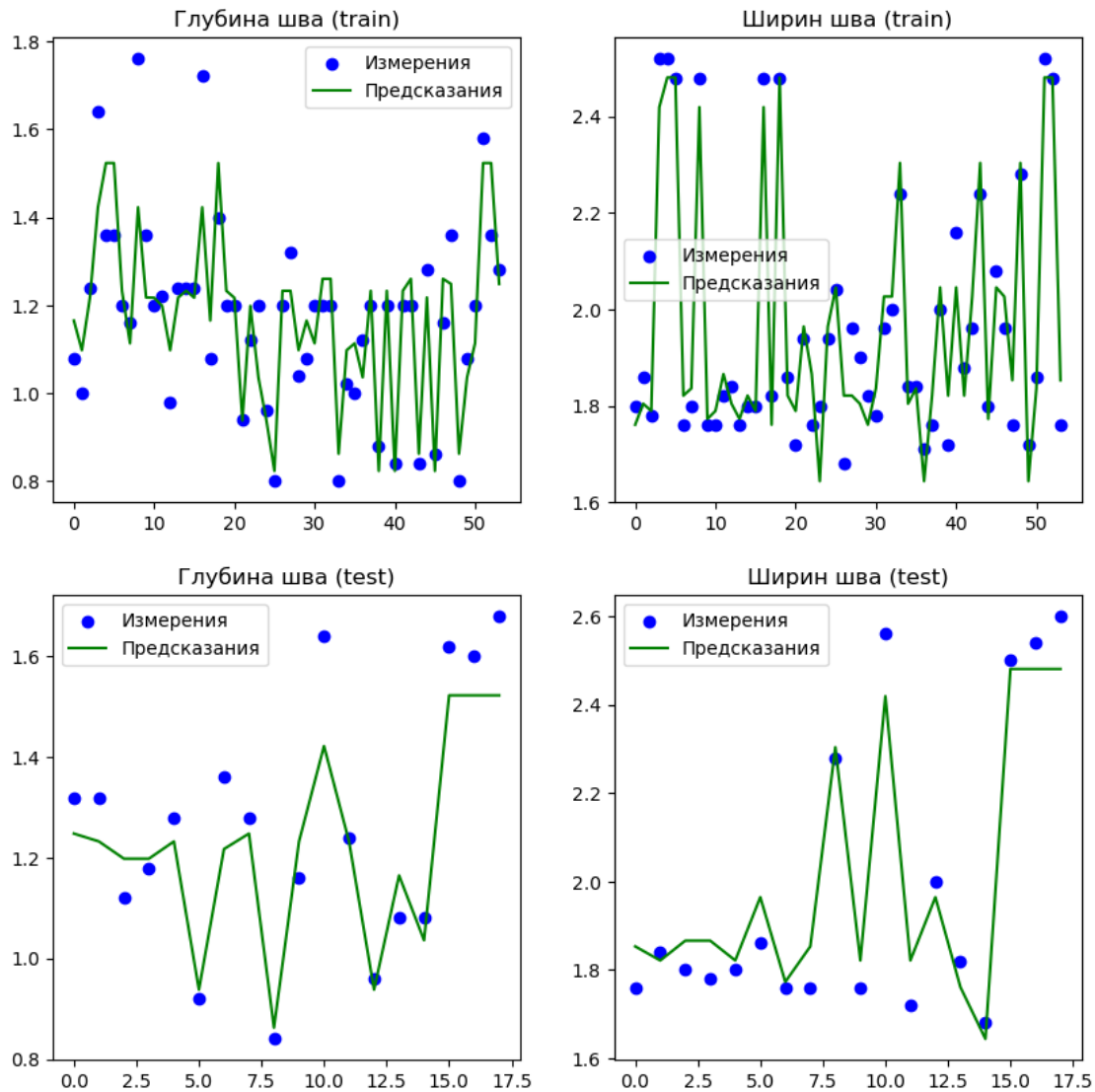
2.4.1. Линейная регрессия

```
[13]: #составляем pipeline для линейной регрессии
linear1 = make_pipeline(LinearRegression())
linear_poly_2 =
    ↳make_pipeline(PolynomialFeatures(degree=2),LinearRegression())
linear_poly_3 =
    ↳make_pipeline(PolynomialFeatures(degree=3),LinearRegression())
linear_poly_8 =
    ↳make_pipeline(PolynomialFeatures(degree=8),LinearRegression())
```

```
[14]: metrics = {}
m = linear1
m.fit(x_train, y_train)
y_pred_train = m.predict(x_train)
y_pred_test = m.predict(x_test)
metrics['LinearRegression'] = out_metrics(y_train, y_test, y_pred_train,
    ↳y_pred_test);
```

Для тренировочной выборки: MSE 0.007293557437085877 - , MAE - 0.06518164871881196 , MAPE - 0.04524396425779686

Для тестовой выборки: MSE 0.0068116939266788384 - , MAE - 0.06797654543573647 ,
 ↳ ,
 MAPE - 0.04297903390098071



```
[15]: df.describe()
```

```
[15]:
```

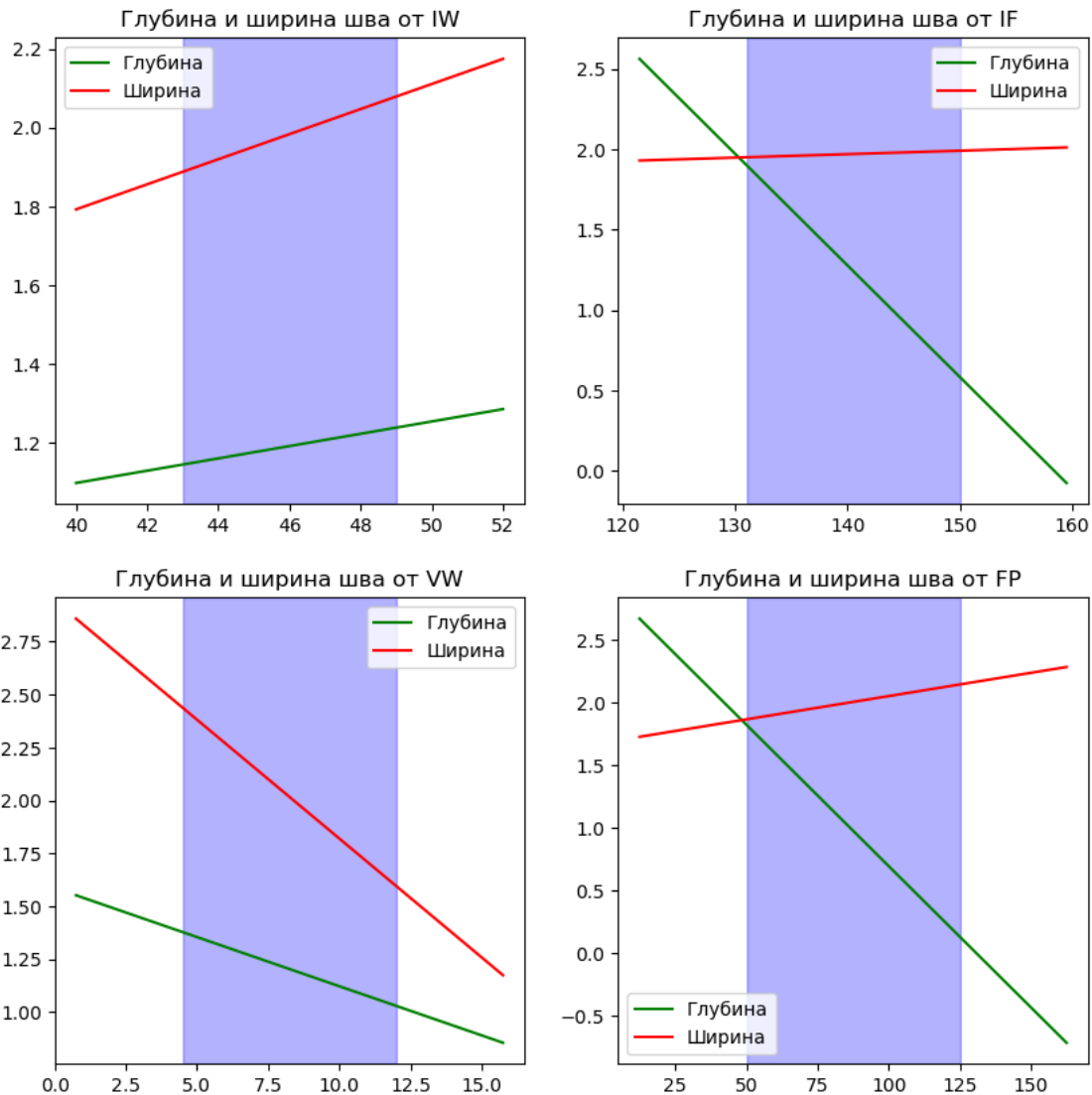
	IW	IF	VW	FP	Depth	Width
count	72.000000	72.000000	72.000000	72.000000	72.000000	72.000000
mean	45.666667	141.333333	8.638889	78.333333	1.195556	1.970417
std	1.678363	5.145763	2.061078	21.493530	0.225081	0.279040
min	43.000000	131.000000	4.500000	50.000000	0.800000	1.680000
25%	44.000000	139.000000	8.000000	60.000000	1.080000	1.760000
50%	45.500000	141.000000	9.000000	80.000000	1.200000	1.840000
75%	47.000000	146.000000	10.000000	80.000000	1.290000	2.050000
max	49.000000	150.000000	12.000000	125.000000	1.760000	2.600000

2.4.2. Функция для изучения поведения модели за пределами заданных значений

```
[16]: #функция для изучения поведения модели за пределами значений в заданном_
      ↪диапазон
def plot_extra(mo,df):
    print('Изучаем поведение модели за пределами имеющегося диапазона_
    ↪значений')
    d = {}
    fig, ((d['IW'], d['IF']), (d['VW'], d['FP'])) = plt.subplots(ncols=2,
    ↪nrows=2, figsize=(10,10))
    prop = ('IW', 'IF', 'VW', 'FP')
    for val in prop:
        ar = np.zeros((200,4))
        ar[:, prop.index(val)] = np.linspace(df[val].min()-(df[val].
    ↪max()-df[val].min())*0.5,
                                                df[val].max()+(df[val].
    ↪max()-df[val].min())*0.5, num=200)
        for med_val in prop:
            if med_val != val:
                ar[:, prop.index(med_val)] = df[med_val].mean()
        y_pred = m.predict(ar)
        d[val].set_title(f'Глубина и ширина шва от {val}')
        d[val].plot(ar[:,prop.index(val)], y_pred[:,0], c='g')
        d[val].plot(ar[:,prop.index(val)], y_pred[:,1], c='r')
        d[val].axvspan(df[val].min(), df[val].max(), color="blue", alpha=0.
    ↪3)
        d[val].legend(['Глубина', 'Ширина'])
        #print(ar)

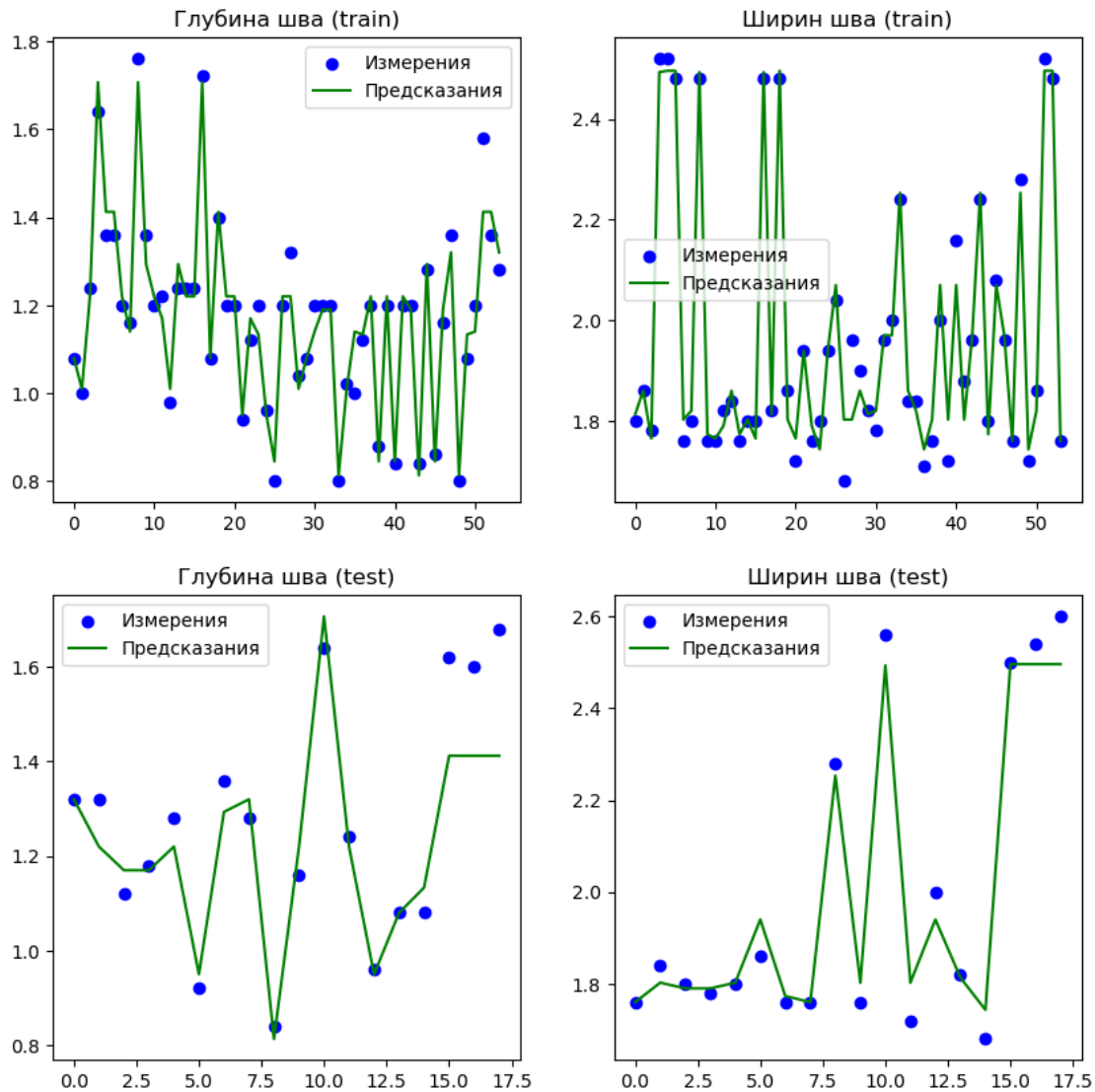
plot_extra(m, df)
```

Изучаем поведение модели за пределами имеющегося диапазона значений



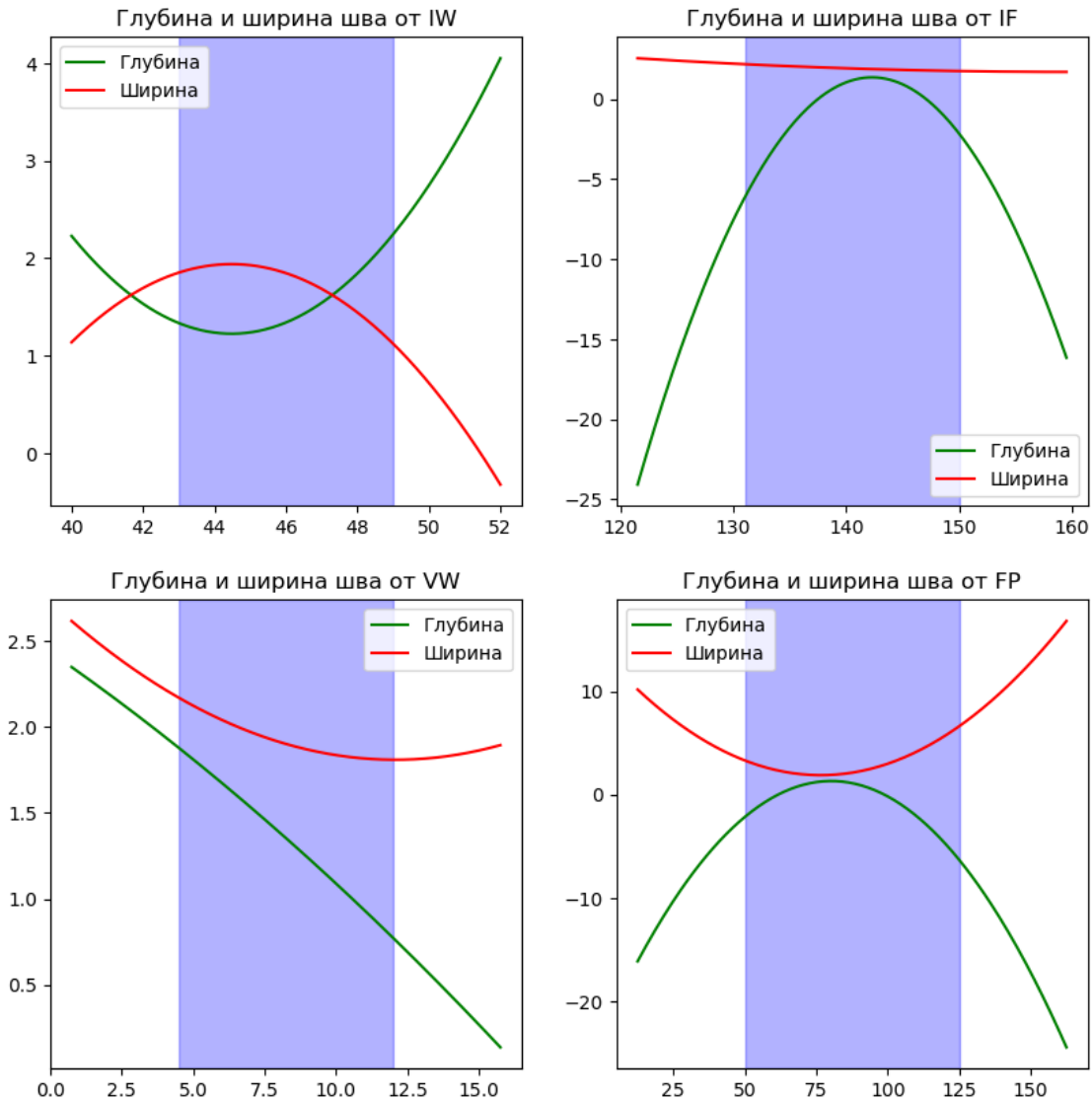
```
[17]: m = linear_poly_2
m.fit(x_train, y_train)
y_pred_train = m.predict(x_train)
y_pred_test = m.predict(x_test)
metrics['LinearRegression_poly_2'] = out_metrics(y_train, y_test,
    y_pred_train, y_pred_test);
```

Для тренировочной выборки: MSE 0.0019754629629620585 - , MAE - 0.03176234567921028 , MAPE - 0.021903371329223445
 Для тестовой выборки: MSE 0.006334953703899745 - , MAE - 0.053083333333452564 , MAPE - 0.03382667249337996



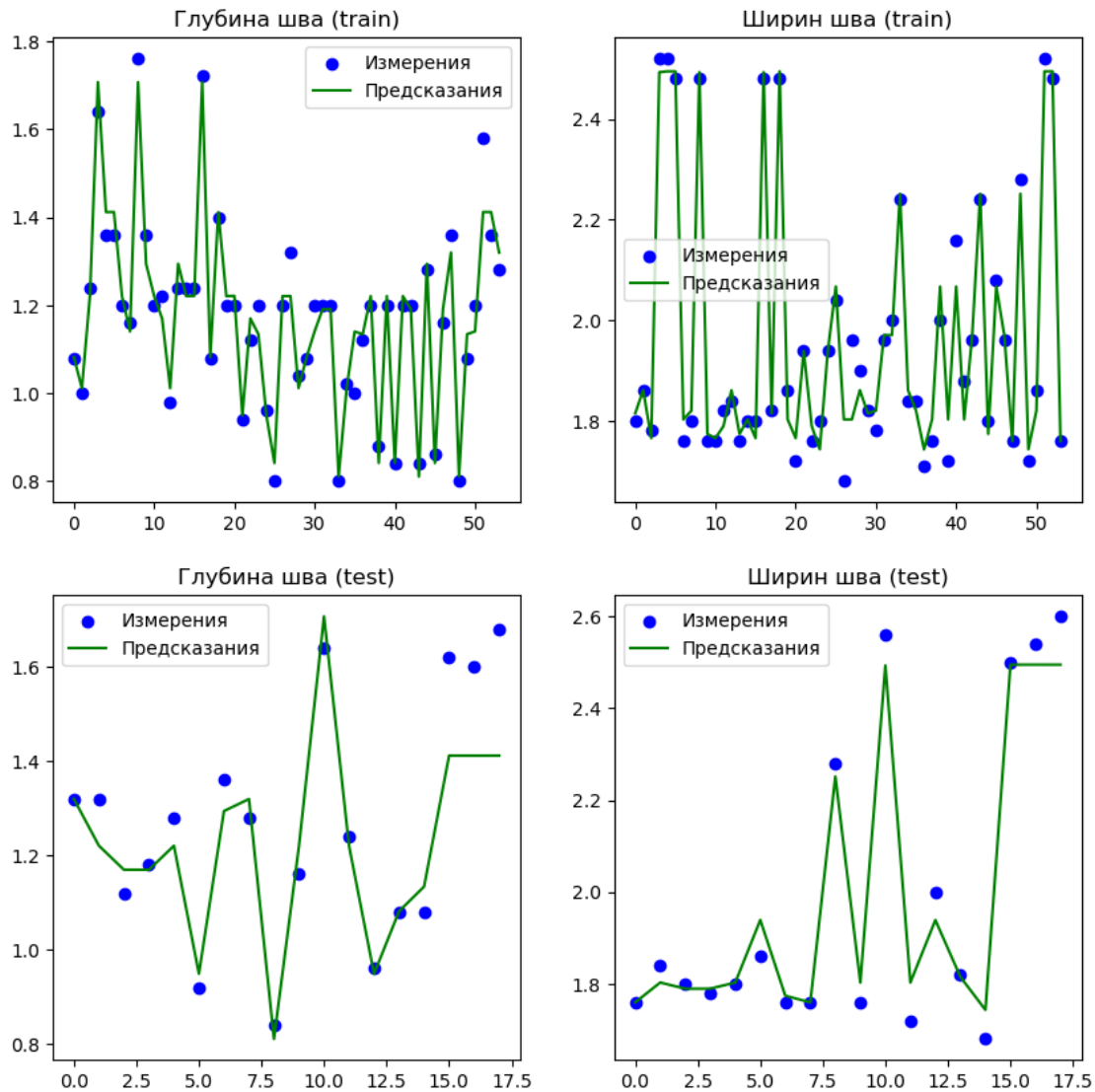
```
[18]: plot_extra(m, df)
```

Изучаем поведение модели за пределами имеющегося диапазона значений



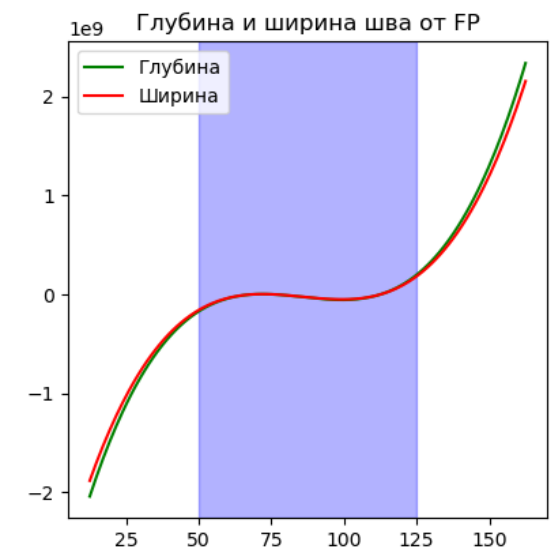
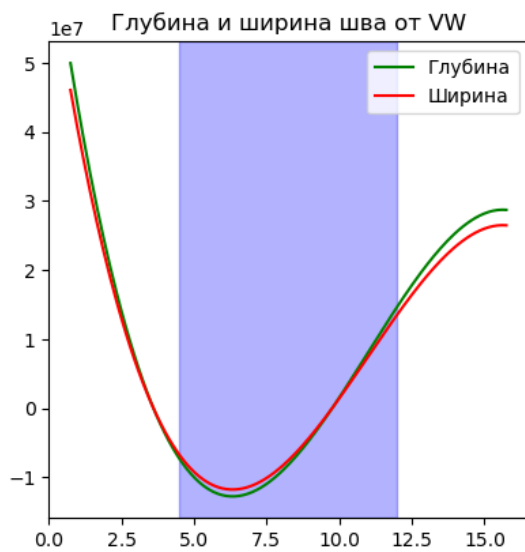
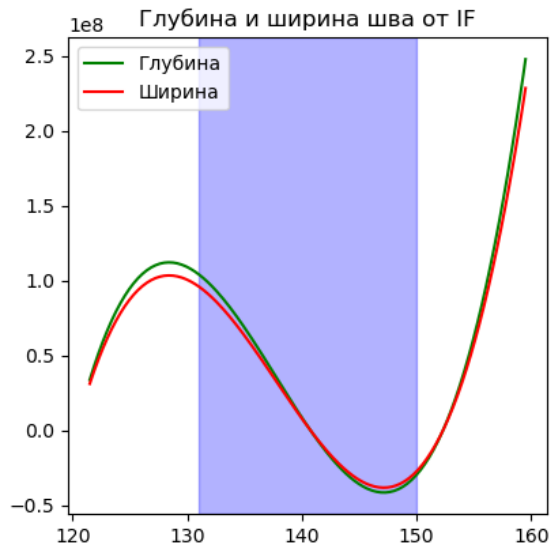
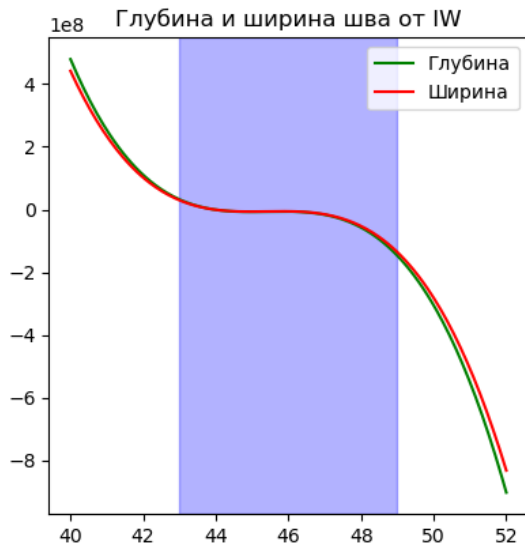
```
[19]: m = linear_poly_3
m.fit(x_train, y_train)
y_pred_train = m.predict(x_train)
y_pred_test = m.predict(x_test)
metrics['LinearRegression_poly_3'] = out_metrics(y_train, y_test,
    y_pred_train, y_pred_test);
```

Для тренировочной выборки: MSE 0.0019765522969738716 - , MAE - 0.031803701895254624 , MAPE - 0.021927808209688177
 Для тестовой выборки: MSE 0.0063598222616480515 - , MAE - 0.053364348941379126 ,
 MAPE - 0.034020268335364534



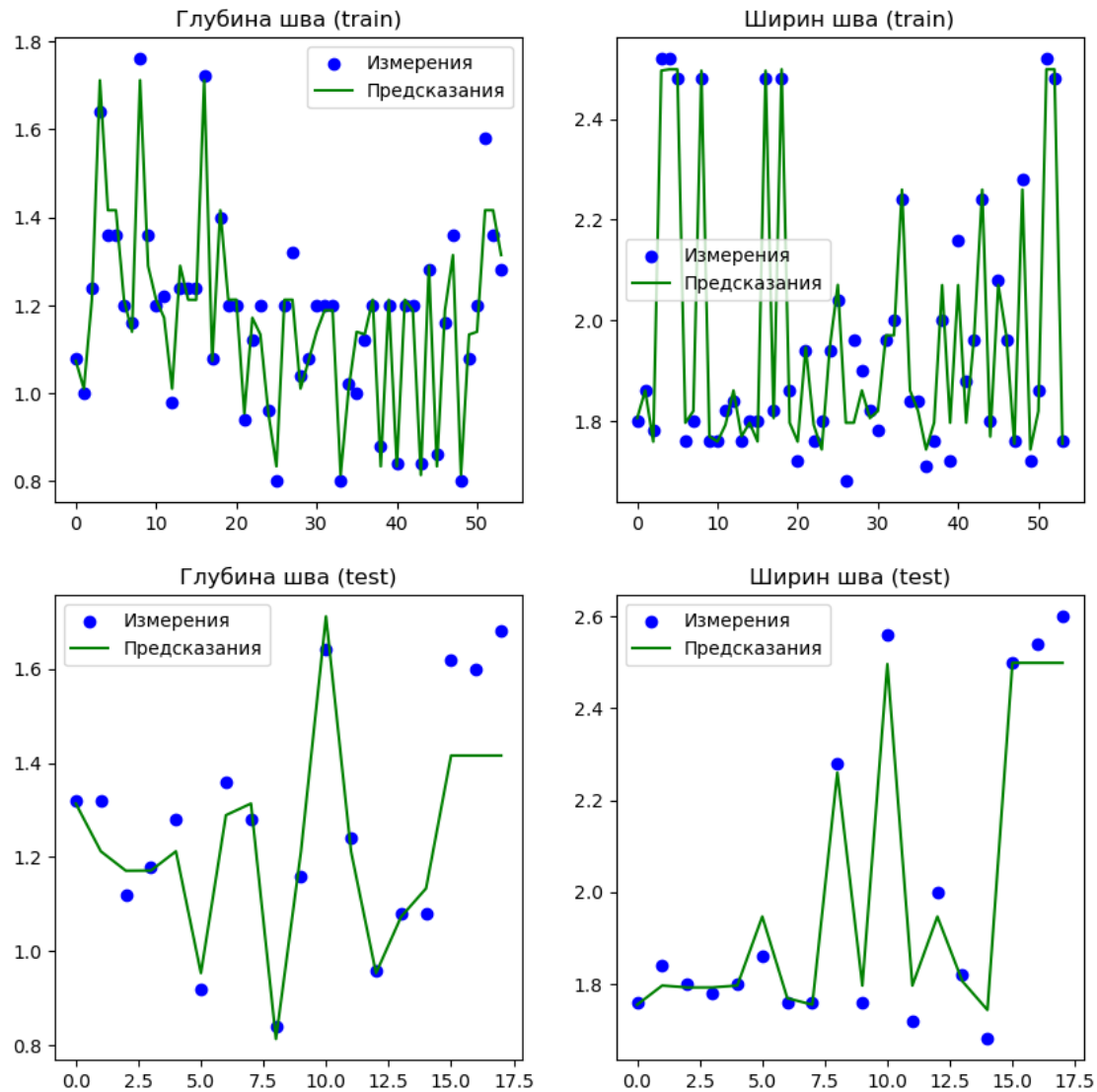
[20]: `plot_extra(m, df)`

Изучаем поведение модели за пределами имеющегося диапазона значений



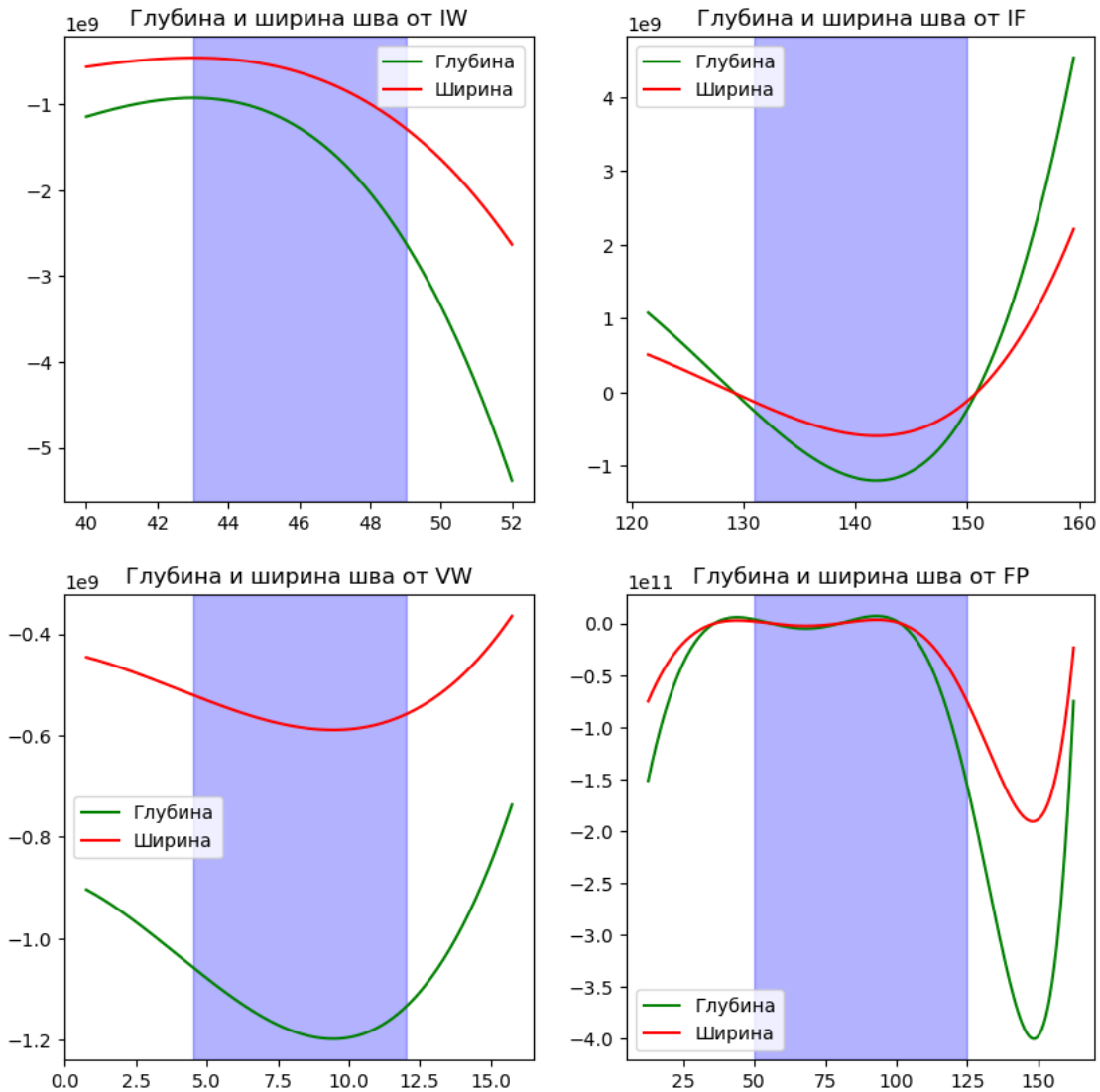
```
[21]: m = linear_poly_8
m.fit(x_train, y_train)
y_pred_train = m.predict(x_train)
y_pred_test = m.predict(x_test)
metrics['LinearRegression_poly_8'] = out_metrics(y_train, y_test,
    y_pred_train, y_pred_test);
```

Для тренировочной выборки: MSE 0.0019998647811259856 - , MAE - 0.03219725608825684 , MAPE - 0.0221794951879785
 Для тестовой выборки: MSE 0.006229024709240824 - , MAE - 0.05335818343692357 , MAPE - 0.034199811720445325



[22]: `plot_extra(m, df)`

Изучаем поведение модели за пределами имеющегося диапазона значений



К содержанию

Вывод: применения линейной регрессии для данной задачи дает хорошие результаты. Оптимальным видится применение регрессии 2 или 3 порядка, дальше точность практически не растёт

К содержанию

2.4.3. Полносвязанная нейросеть

```
[23]: from sklearn.neural_network import MLPRegressor
      from sklearn.preprocessing import StandardScaler, Normalizer
```

```
[24]: #Создаем несколько архитектур
      nreg_1 =
      make_pipeline(StandardScaler(), Normalizer(), MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(4), max_ite
```

```

tol=1e-9,
verbose=0,
random_state=34))
nreg_2 =
make_pipeline(StandardScaler(),Normalizer(),MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(10),
max_iter=50000,
tol=1e-9,
verbose=0,
random_state=34))
nreg_3 =
make_pipeline(StandardScaler(),Normalizer(),MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(4,4),max_i
tol=1e-9,
verbose=0,
random_state=34))
nreg_4 =
make_pipeline(StandardScaler(),Normalizer(),MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(10,10),max_i
tol=1e-9,
verbose=0,
random_state=34))

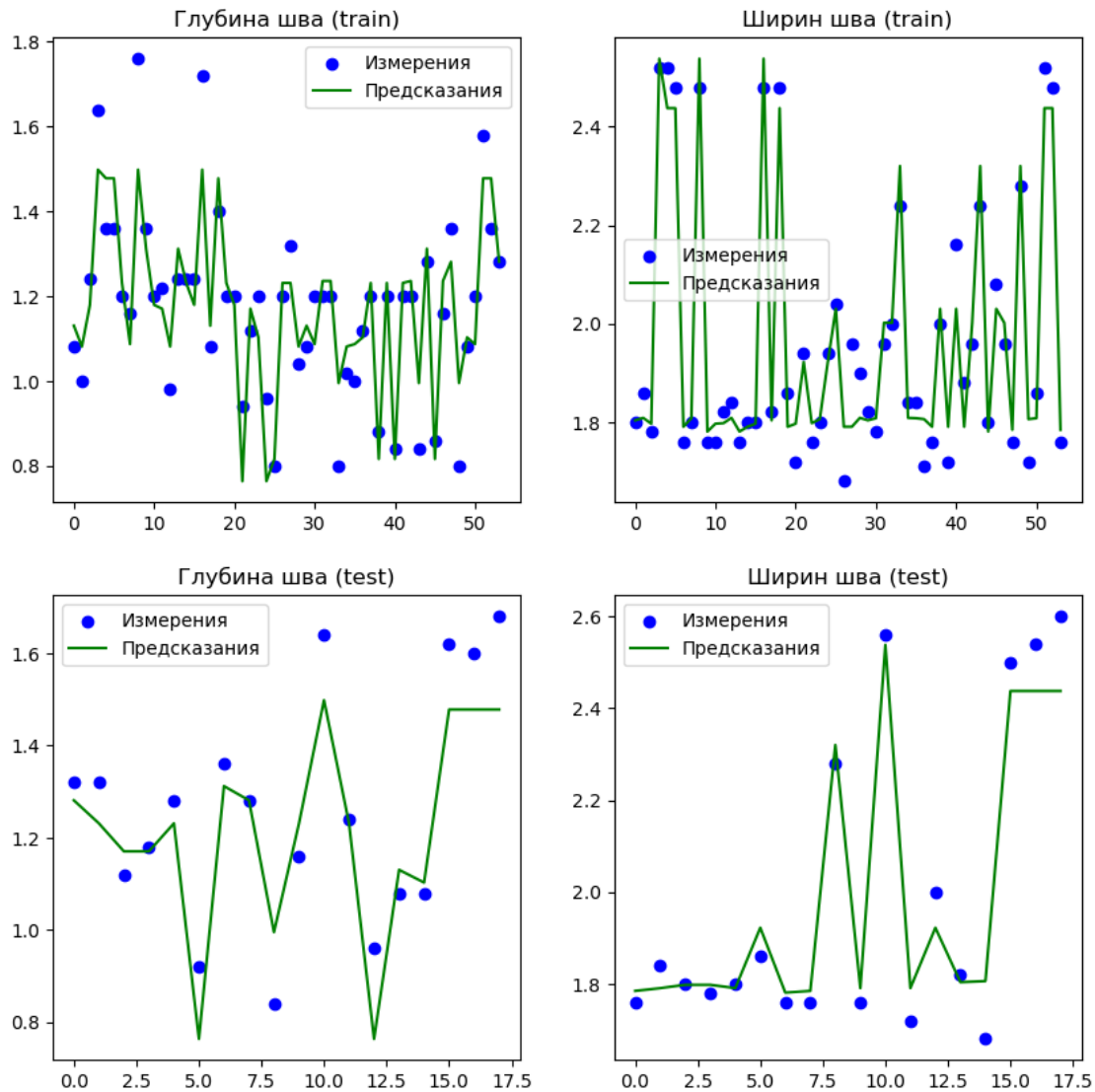
```

```

[25]: m = nreg_1
m.fit(x_train, y_train)
y_pred_train = m.predict(x_train)
y_pred_test = m.predict(x_test)
metrics['MLPRegressor (4)'] = out_metrics(y_train, y_test, y_pred_train,
y_pred_test);

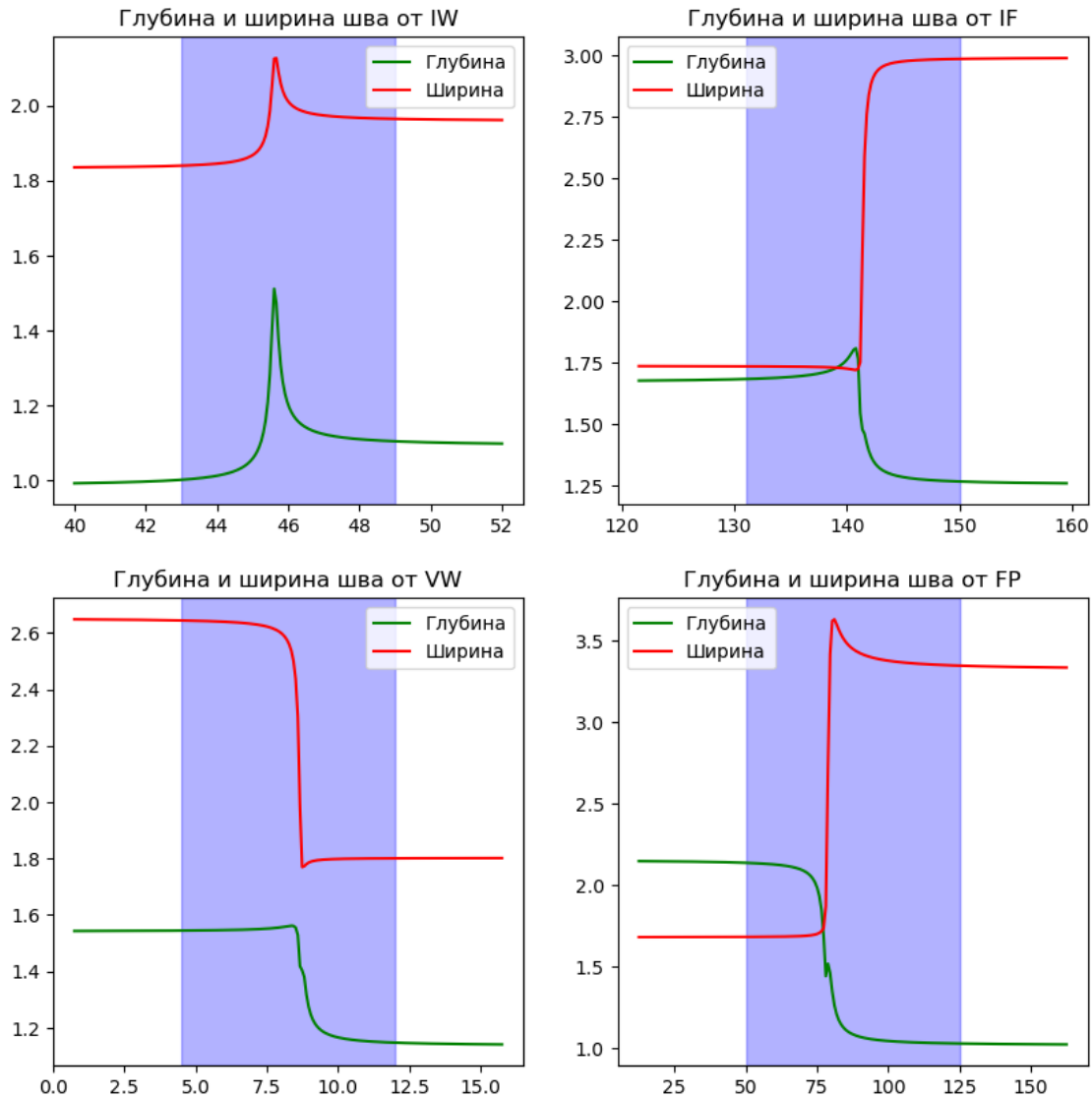
```

Для тренировочной выборки: MSE 0.0062651972832232505 - , MAE - 0.06100921367656466 , MAPE - 0.04522630194375769
 Для тестовой выборки: MSE 0.007978078208605946 - , MAE - 0.06877321187582938 , MAPE - 0.04838276507166528



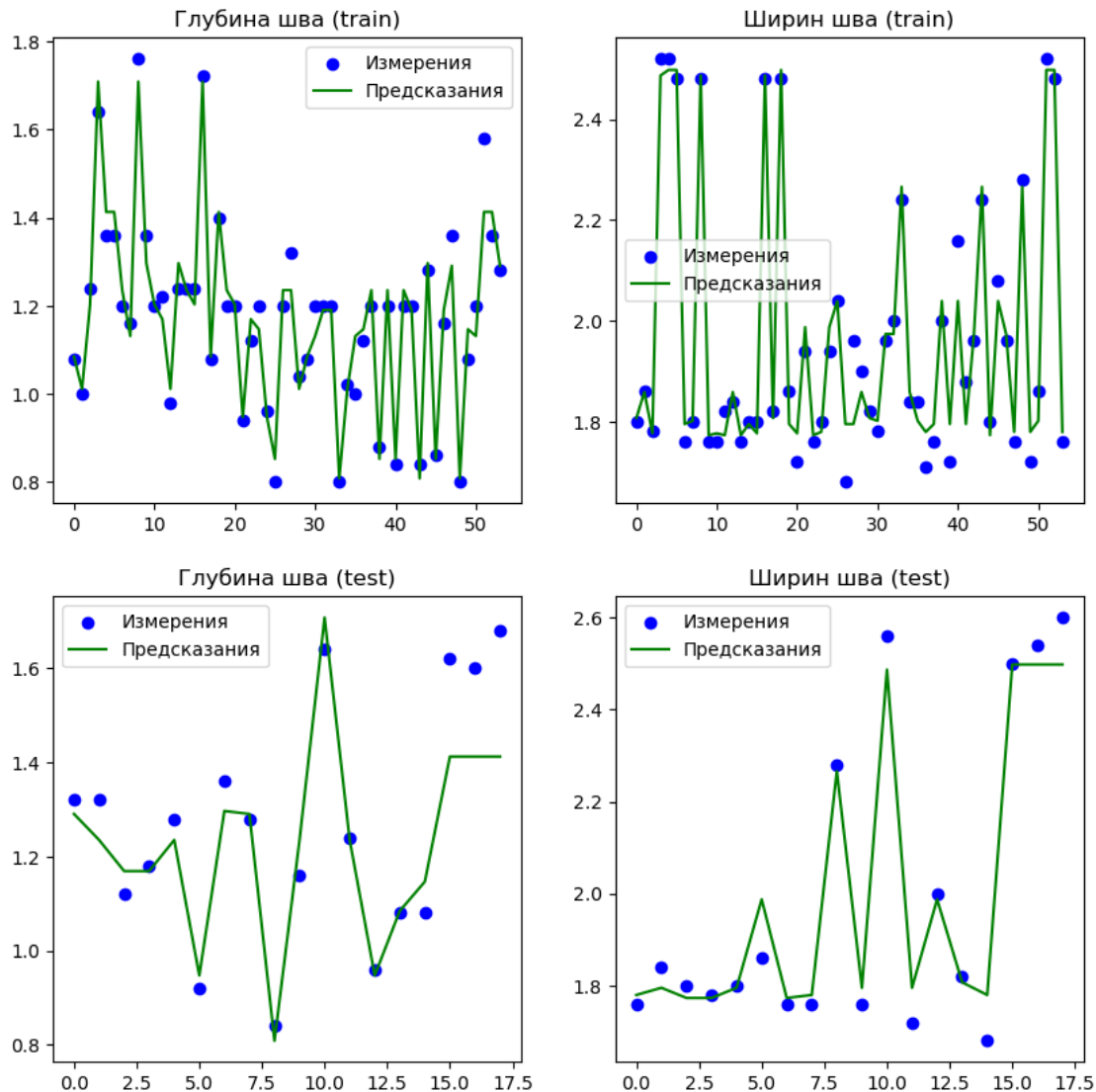
[26]: `plot_extra(m, df)`

Изучаем поведение модели за пределами имеющегося диапазона значений



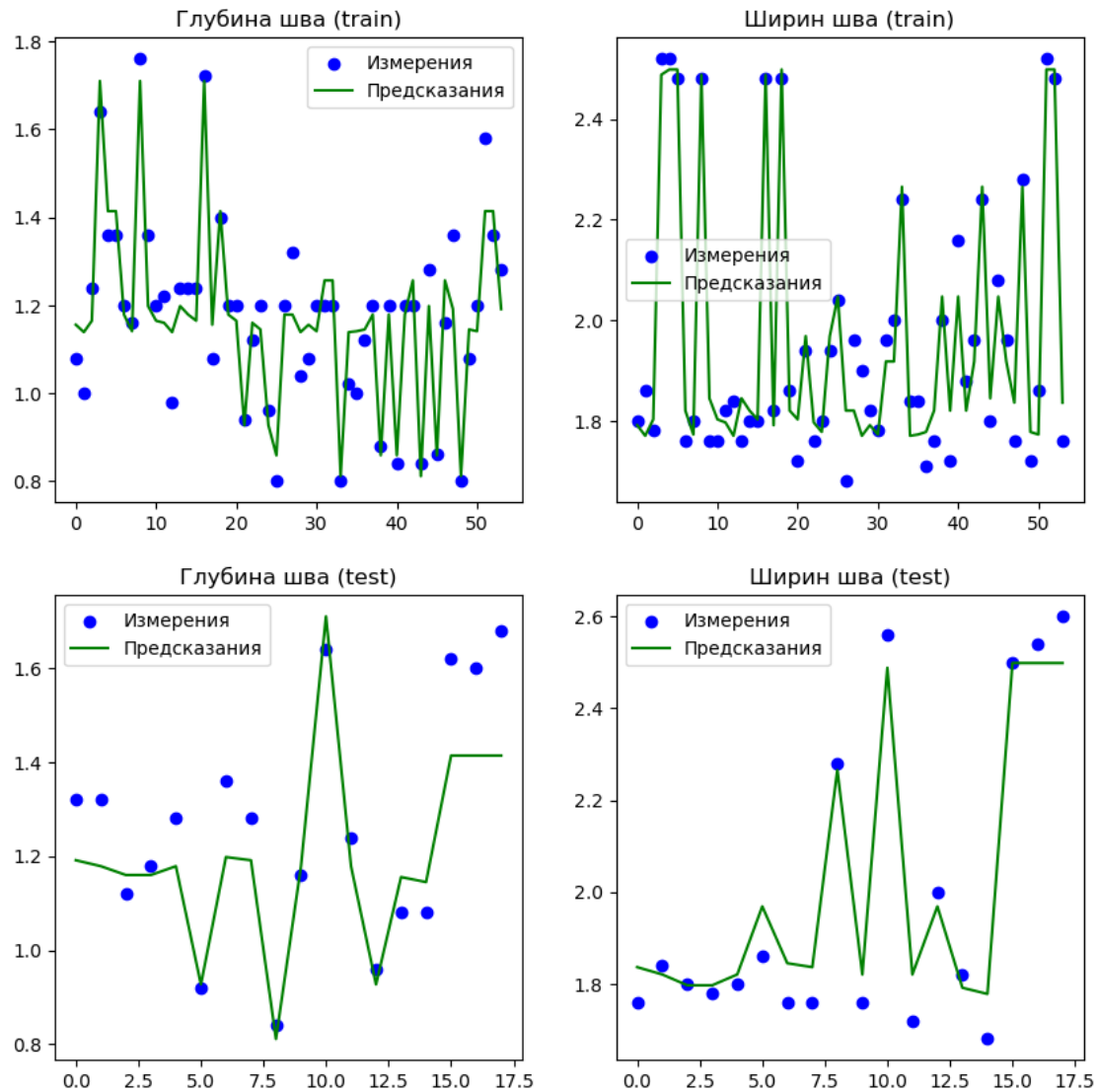
```
[27]: m = nreg_2
m.fit(x_train, y_train)
y_pred_train = m.predict(x_train)
y_pred_test = m.predict(x_test)
metrics['MLPRegressor (10)'] = out_metrics(y_train, y_test, y_pred_train,
↪ y_pred_test);
```

Для тренировочной выборки: MSE 0.0021862055125838305 - , MAE - 0.03447434902291781 , MAPE - 0.023629044549721215
 Для тестовой выборки: MSE 0.006605480560757875 - , MAE - 0.054932515502137715, ↪
 MAPE - 0.035054160033703485



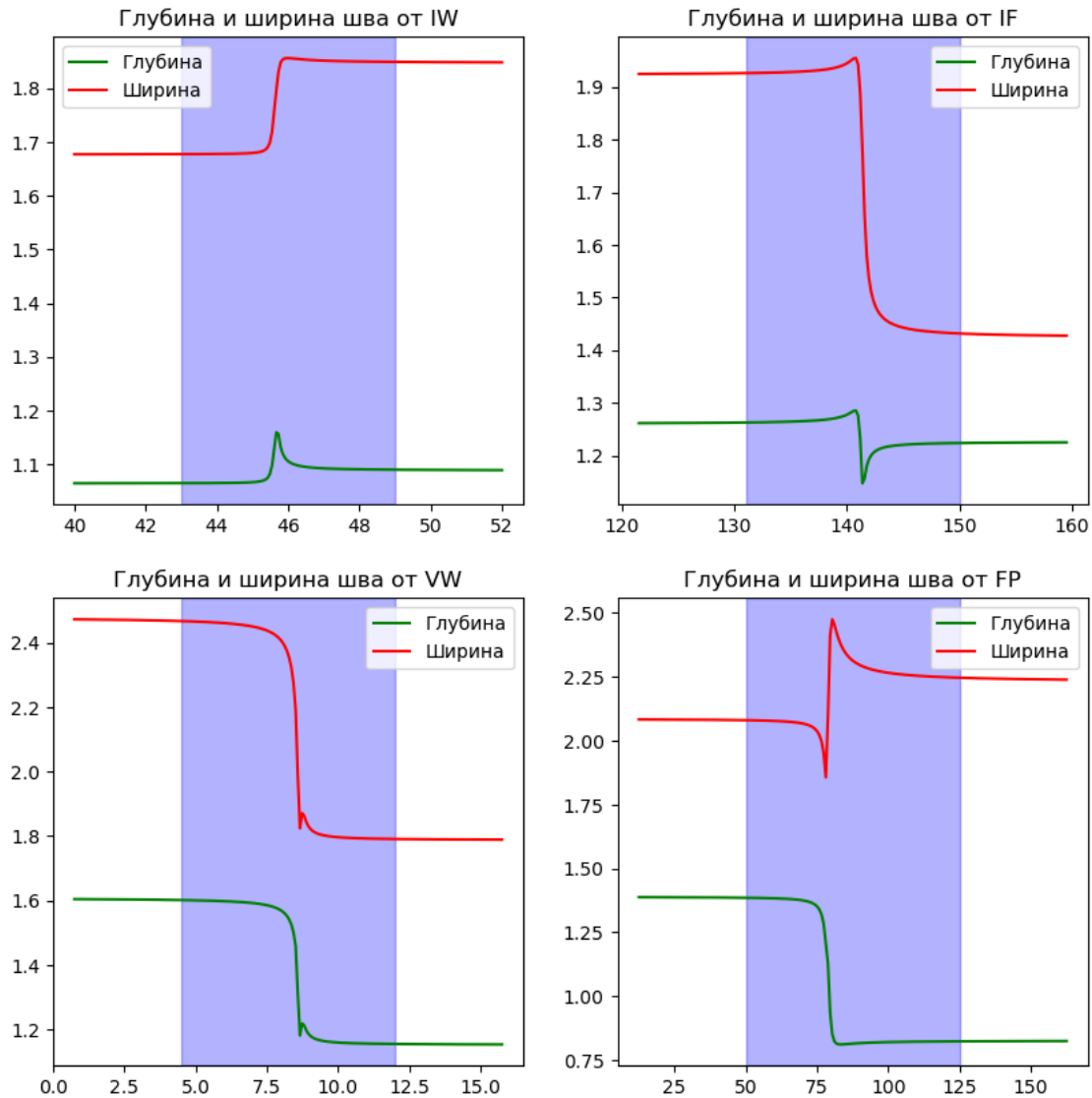
```
[28]: m = nreg_3
m.fit(x_train, y_train)
y_pred_train = m.predict(x_train)
y_pred_test = m.predict(x_test)
metrics['MLPRegressor (4,4)'] = out_metrics(y_train, y_test, y_pred_train,
y_pred_test);
```

Для тренировочной выборки: MSE 0.004627506087973402 - , MAE - 0.054930370837538434 , MAPE - 0.039081062611000014
 Для тестовой выборки: MSE 0.009064386299524916 - , MAE - 0.07375948443492031 , MAPE - 0.048346100365766094



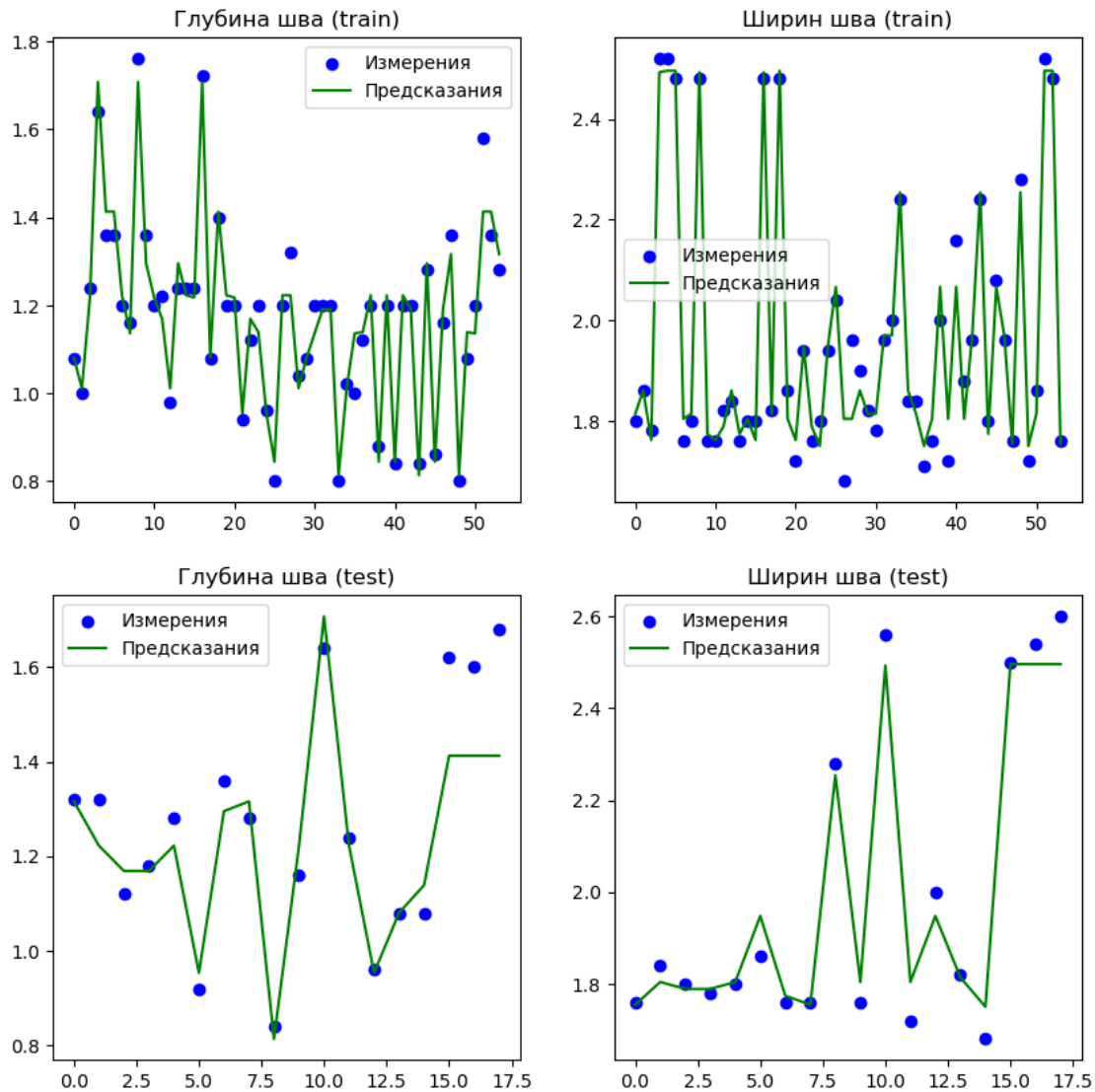
[29]: `plot_extra(m, df)`

Изучаем поведение модели за пределами имеющегося диапазона значений



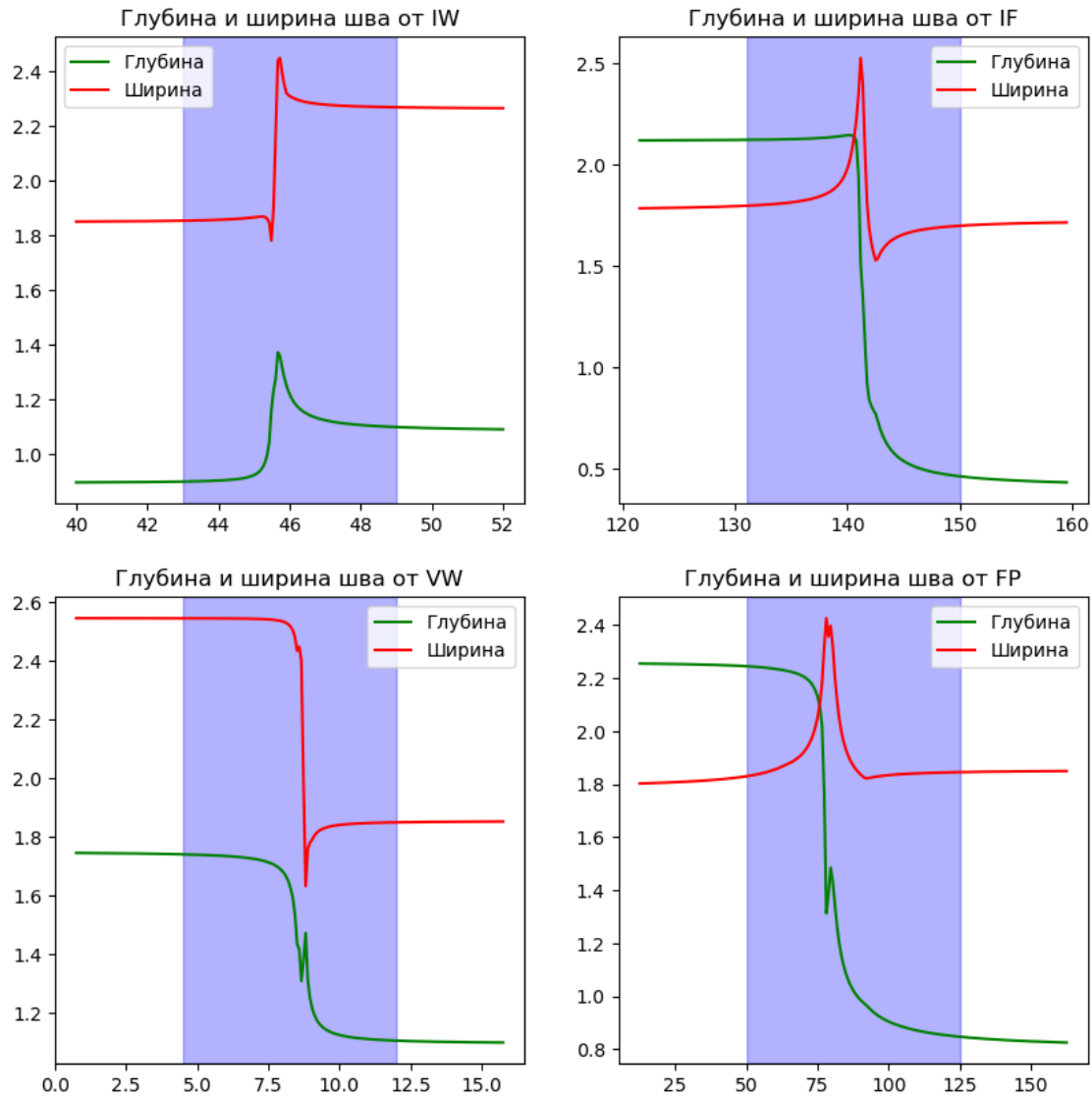
```
[30]: m = nreg_4
m.fit(x_train, y_train)
y_pred_train = m.predict(x_train)
y_pred_test = m.predict(x_test)
metrics['MLPRegressor (10,10)'] = out_metrics(y_train, y_test,
    y_pred_train, y_pred_test);
```

Для тренировочной выборки: MSE 0.001983555182923682 - , MAE - 0.03235634610527833 , MAPE - 0.022304397275453025
 Для тестовой выборки: MSE 0.006353579690696699 - , MAE - 0.05359076339137933 , MAPE - 0.034148825060308585



```
[31]: plot_extra(m, df)
```

Изучаем поведение модели за пределами имеющегося диапазона значений



Вывод: Достаточно сложно подобрать оптимальные параметры сети. Соотношения работы сетей различной архитектуры изменяются случайным образом. Разумно подобрать параметры через GridSearchCV

2.4.4. Поиск параметров сети через GridSearchCV

```
[32]: from sklearn.model_selection import GridSearchCV
tp = make_pipeline(StandardScaler(), Normalizer())
Xn = tp.fit_transform(X)
parameters = {
    'hidden_layer_sizes' : [(4), (10), (10, 10), (50, 50), (10, 10, 10)],
    'tol' : [1e-7, 1e-8, 1e-9],
    'early_stopping' : [True, False]
}
```

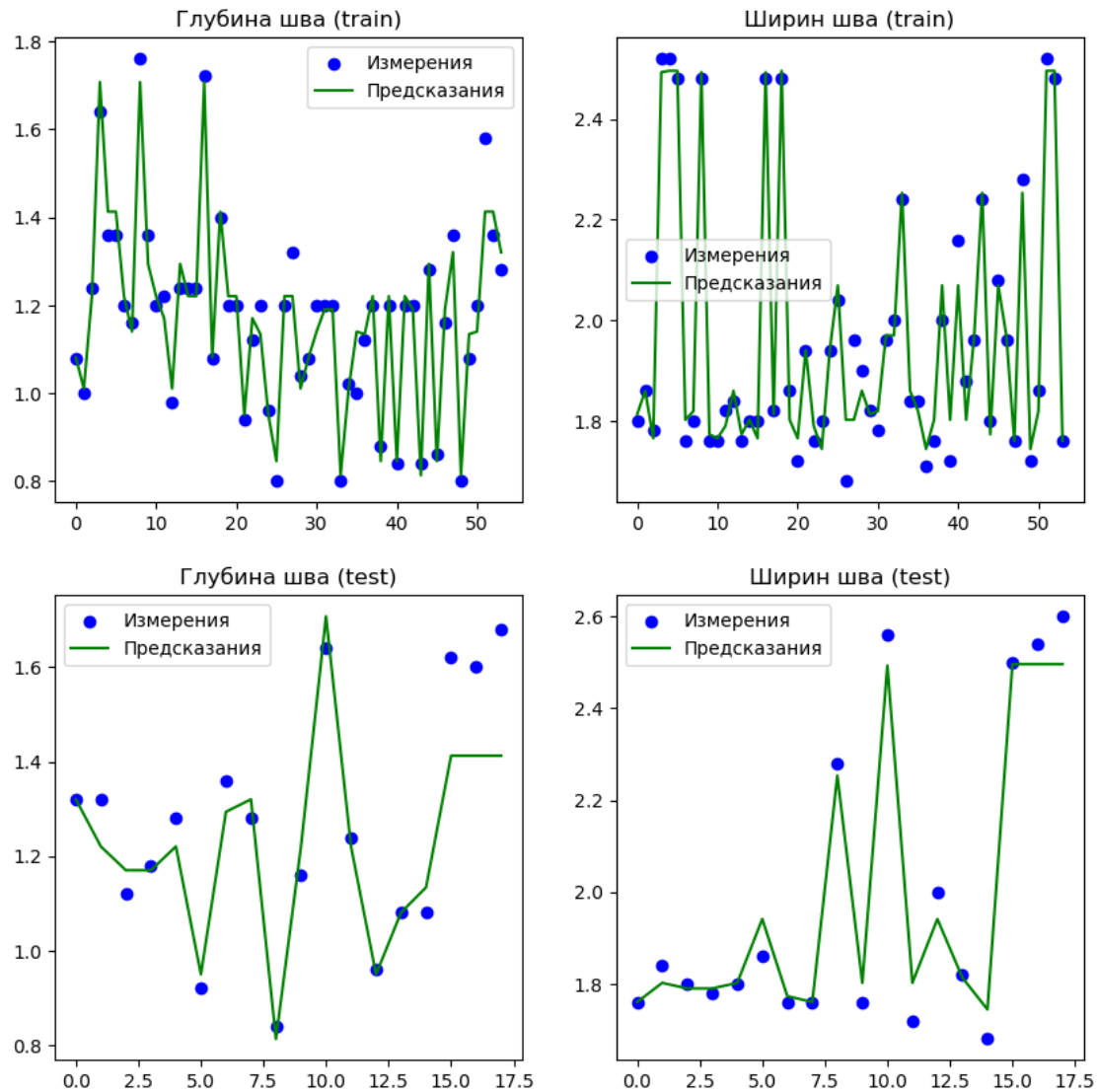
```
gs = GridSearchCV(MLPRegressor(max_iter=50000, random_state=34),
                  parameters, cv=3, n_jobs=1,
                  scoring='neg_mean_squared_error')
gs.fit(Xn,y)
gs.best_params_
```

[32]: {'early_stopping': False, 'hidden_layer_sizes': (50, 50), 'tol': 1e-09}

```
[45]: nreg_gs = make_pipeline(StandardScaler(),Normalizer(),
                             MLPRegressor(hidden_layer_sizes=gs.
                             best_params_['hidden_layer_sizes'],
                             max_iter=50000,
                             tol=gs.best_params_['tol'],
                             verbose=0,
                             early_stopping=gs.
                             best_params_['early_stopping'],
                             random_state=34))
```

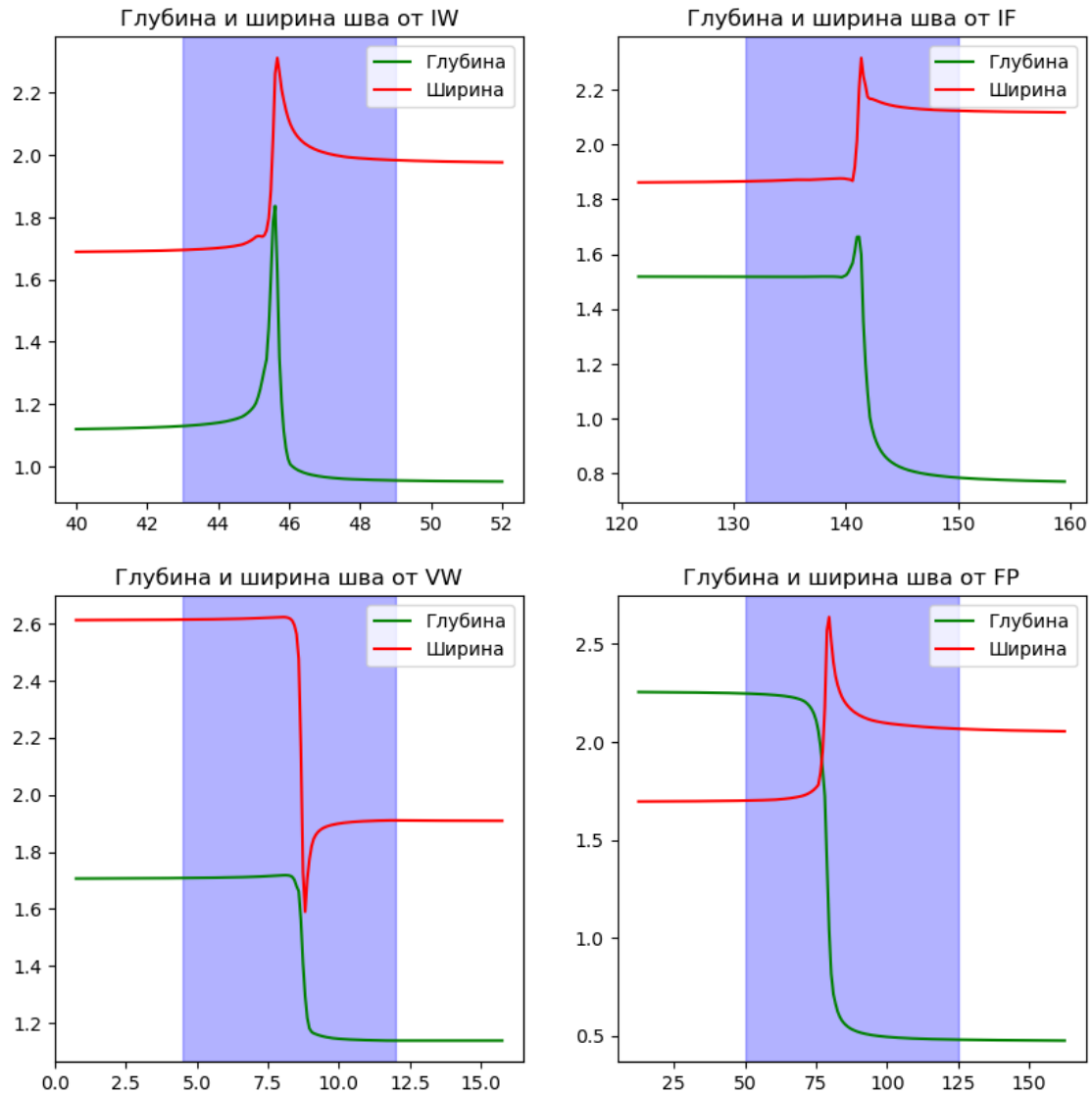
```
[46]: m = nreg_gs
m.fit(x_train, y_train)
y_pred_train = m.predict(x_train)
y_pred_test = m.predict(x_test)
metrics[f'MLPRegressor {gs.best_params_}'] = out_metrics(y_train, y_test,
y_pred_train, y_pred_test);
```

Для тренировочной выборки: MSE 0.0019756868860704466 - , MAE - 0.03184363819903852 , MAPE - 0.02197156793701222
 Для тестовой выборки: MSE 0.006322460322474401 - , MAE - 0.05309740913625136 , MAPE - 0.03384280052643238



```
[47]: plot_extra(m, df)
```

Изучаем поведение модели за пределами имеющегося диапазона значений



К содержанию

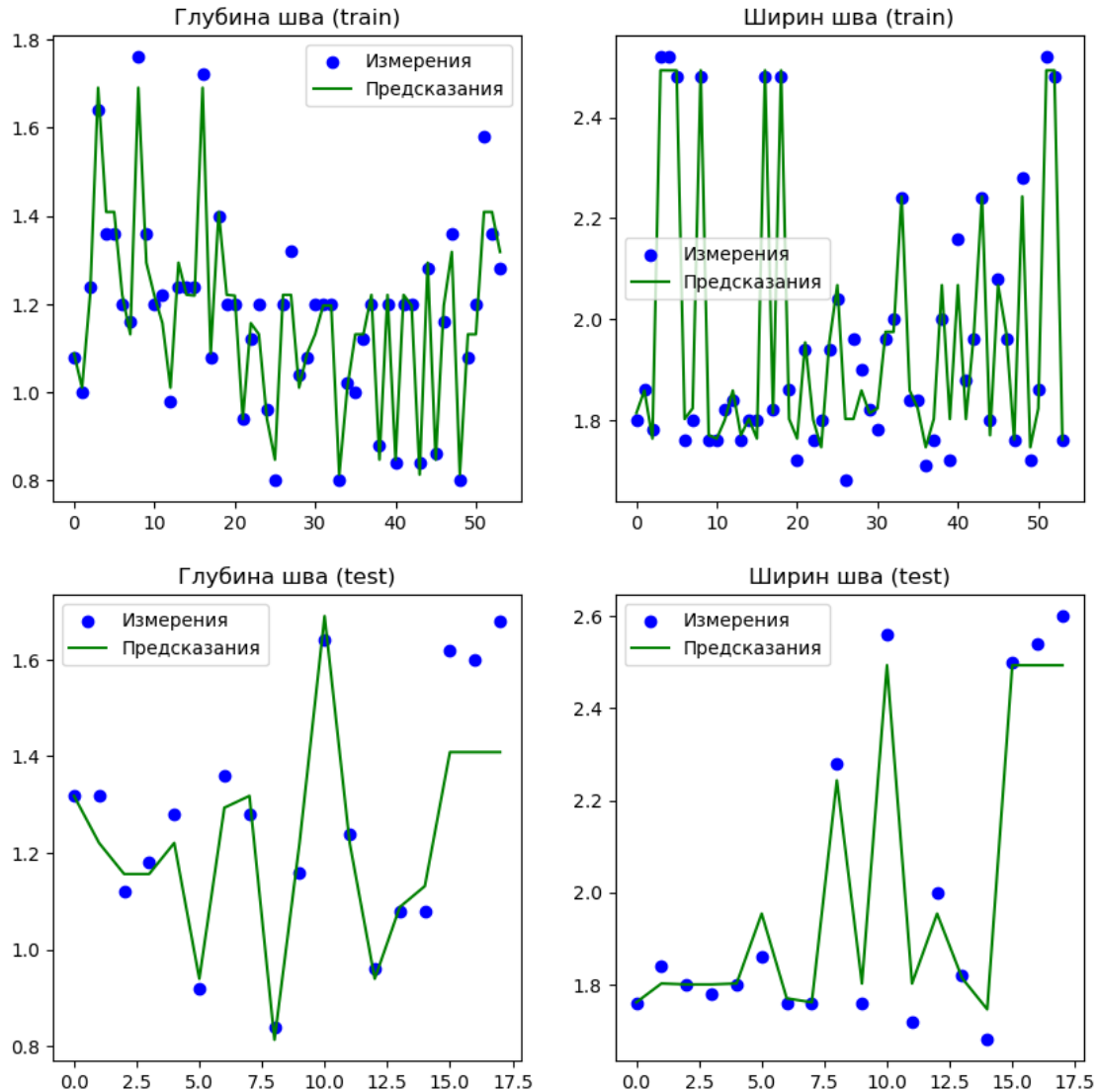
2.4.5. Случайный лес

```
[48]: from sklearn.ensemble import RandomForestRegressor
```

```
[49]: rf = make_pipeline(StandardScaler(), Normalizer(), RandomForestRegressor())
```

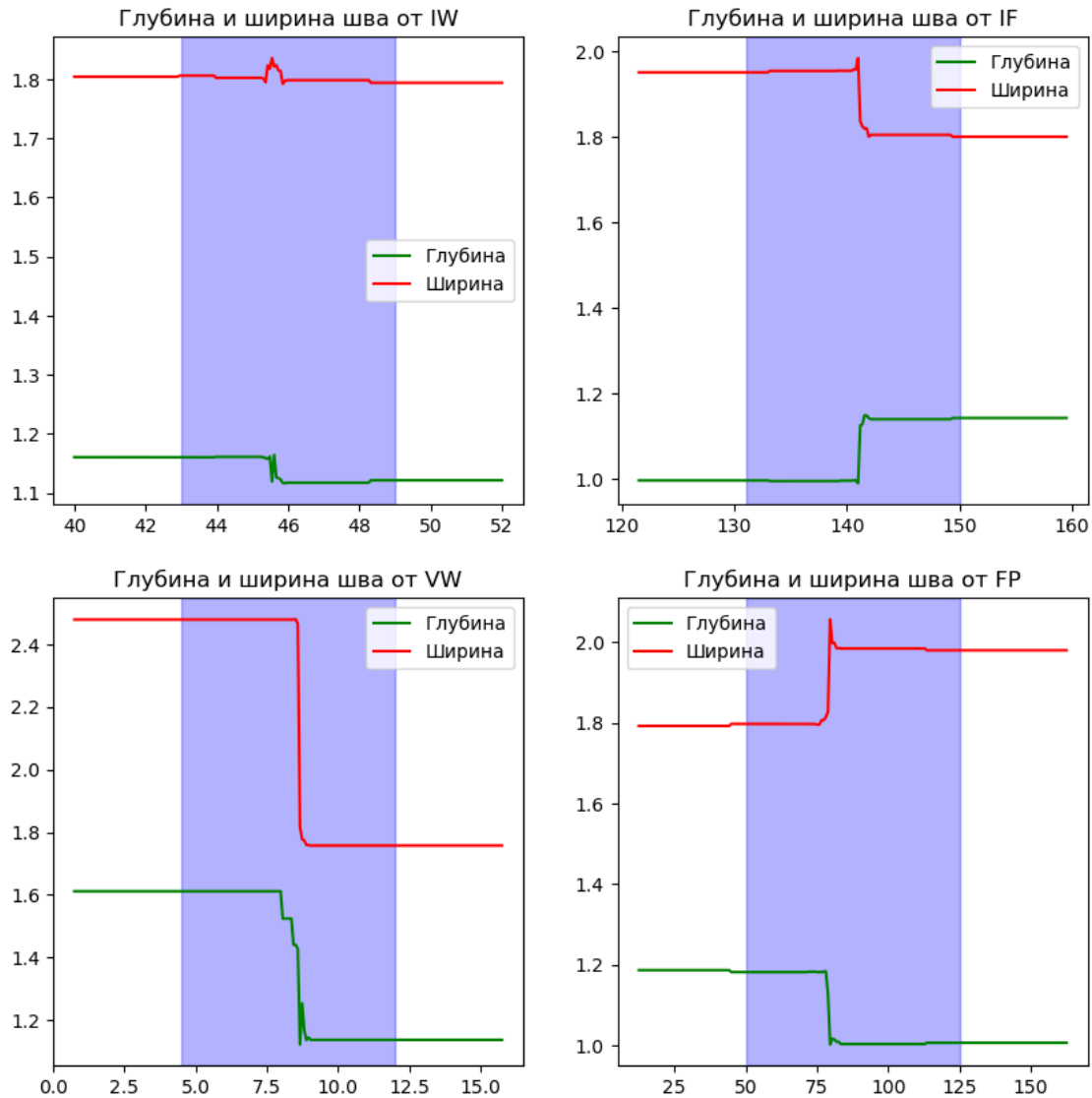
```
[50]: m = rf
m.fit(x_train, y_train)
y_pred_train = m.predict(x_train)
y_pred_test = m.predict(x_test)
metrics['RandomForestRegressor'] = out_metrics(y_train, y_test,
    y_pred_train, y_pred_test);
```

Для тренировочной выборки: MSE 0.0020063184788843827 - , MAE - 0.03233890024584464 , MAPE - 0.02228301095103103
 Для тестовой выборки: MSE 0.0064435641318742985 - , MAE - 0.05355998180831499 ,
 MAPE - 0.034050779194064



```
[51]: plot_extra(m, df)
```

Изучаем поведение модели за пределами имеющегося диапазона значений



2.4.6. Сравнение полученных метрик

```
[52]: import numpy as np
labels = metrics.keys()
mse = []
mae = []
mape = []
df_m = pd.DataFrame(columns=('Method', 'Set', 'MSE', 'MAE', 'MAPE'))
for l in labels:
    df_m.loc[df_m.size] =
    [l, 'Train', metrics[l][0][0], metrics[l][0][1], metrics[l][0][2]]
    df_m.loc[df_m.size] =
    [l, 'Test', metrics[l][1][0], metrics[l][1][1], metrics[l][1][2]]
```

```
[53]: df_m[df_m['Set']=='Test'].sort_values('MAE',ascending=True)
```

```
[53]:
```

	Method	Set	MSE \
15	LinearRegression_poly_2	Test	0.006335
85	MLPRegressor {'early_stopping': False, 'hidden...	Test	0.006322
35	LinearRegression_poly_8	Test	0.006229
25	LinearRegression_poly_3	Test	0.006360
95	RandomForestRegressor	Test	0.006444
75	MLPRegressor (10,10)	Test	0.006354
55	MLPRegressor (10)	Test	0.006605
5	LinearRegression	Test	0.006812
45	MLPRegressor (4)	Test	0.007978
65	MLPRegressor (4,4)	Test	0.009064

	MAE	MAPE
15	0.053083	0.033827
85	0.053097	0.033843
35	0.053358	0.034200
25	0.053364	0.034020
95	0.053560	0.034051
75	0.053591	0.034149
55	0.054933	0.035054
5	0.067977	0.042979
45	0.068773	0.048383
65	0.073759	0.048346

Вывод: все методы дают достаточно высокие и близкие результаты. Небольшие ошибки, полученные на тестовой выборке, близкие к ошибкам, полученным на тренировочной выборке, позволяют предполагать, что полученные модели не переобучены.

Ранжирование результатов между разными моделями зависит от случайного разделения выборки на тестовую и тренировочную. Для получения стабильных результатов попробуем применить кросс-валидацию для подбора более эффективного метода.

Также, в некоторых случаях были замечены ситуации, когда нейронные сети рассмотренных архитектур обучаются плохо. С разными сетями такая ситуация воспроизводилась случайным образом (видимо в данном случае есть локальные минимумы, в которых есть шанс найти). Для того, чтобы избежать такой ситуации в программе необходимо попробовать уменьшить скорость обучения или проводить несколько сессий обучения.

К содержанию

2.5. Проверяем полученные модели через кросс-валидацию

```
[54]: from sklearn.model_selection import cross_val_score, cross_validate, KFold
      from sklearn.metrics import make_scorer
```

```
[56]: for score in ('r2', 'neg_mean_squared_error'):
      labels = enumerate(('LinearRegression', 'LinearRegression_poly_2',
      ↪ 'LinearRegression_poly_3',
      ↪ 'LinearRegression_poly_8', 'MLPRegressor_
      ↪ (4)', 'MLPRegressor (10)', 'MLPRegressor (4,4)')
```



```

        , 'MLPRegressor (10,10)', f'MLPRegressor {gs.
best_params_}', 'RandomForest'))
    print(f"Scoring: {score}")
    for m in (linear1, linear_poly_2, linear_poly_3, linear_poly_8):
        print(f'{next(labels)[1]}: {cross_val_score(m, X, y, scoring=score).
mean()}' )
    for m in (nreg_1, nreg_2, nreg_3, nreg_4, nreg_gs):
        print(f'{next(labels)[1]}: {cross_val_score(m, X, y, scoring=score).
mean()}' )
    print(f'{next(labels)[1]}: {cross_val_score(rf, X, y, scoring=score).
mean()}' )

```

```

Scoring: r2
LinearRegression: 0.8294222805520345
LinearRegression_poly_2: 0.9291319724565298
LinearRegression_poly_3: 0.9291319724576965
LinearRegression_poly_8: 0.9285547435138632
MLPRegressor (4): 0.8172925436639673
MLPRegressor (10): 0.9284484065371041
MLPRegressor (4,4): 0.8984457956171721
MLPRegressor (10,10): 0.9287693955144561
MLPRegressor {'early_stopping': False, 'hidden_layer_sizes': (50, 50), 'tol':
1e-09}: 0.9291147308736276
RandomForest: 0.9252514046017444
Scoring: neg_mean_squared_error
LinearRegression: -0.008733277801165288
LinearRegression_poly_2: -0.0037262349639919853
LinearRegression_poly_3: -0.0037262349638889393
LinearRegression_poly_8: -0.0037512682927279785
MLPRegressor (4): -0.00871563609848799
MLPRegressor (10): -0.0037401674472310508
MLPRegressor (4,4): -0.005337225293225957
MLPRegressor (10,10): -0.003731077638389719
MLPRegressor {'early_stopping': False, 'hidden_layer_sizes': (50, 50), 'tol':
1e-09}: -0.003726965465278744
RandomForest: -0.003985379501643578

```

К содержанию

2.6. Выводы по теоретической части

Для предсказания в диапазон заданных значений хорошую эффективность показывает и линейная регрессия, и нейронная сеть и случайный лес. Результат проверен кросс-валидацией и достаточно стабилен.

С точки зрения потребляемых ресурсов оптимальным для данной задачи является использование полиномиальной линейной регрессии со степенью 2 или 3.

Однако, у нас достаточно мало точек для моделирования, поэтой имеет смысл дополнительно изучить обобщающую способность модели на более широком диапазоне значений. Для этих целей, для каждой модели были составлены графики экстраполяции с использованием Функции для изучения поведения модели за пределами заданных значений.

С использованием данной функции, последовательно: - значение одной из входных пе-

ременных задается массивом из 200 точек, равномерно распределенных от минимума параметра - 0,5 разброса параметра до максимума параметра + 0,5 разброса параметра - значения всех остальных входных переменных фиксируются средними значениями (проверялось также заполнение медианными, минимальными и максимальными значениями - без изменения основных наблюдаемых тенденций) - для данного набора, с использованием модели прогнозируются значения ширины и глубины сварного шва

На большинстве моделей можно наблюдать одинаковые тенденции: - при увеличении сварочного тока растет и ширина и глубина шва - при увеличении скорости сварки и ширина и глубина шва уменьшаются - при изменении тока фокусировки и расстоянии до образца происходит разнонаправленные изменения ширины и глубины шва

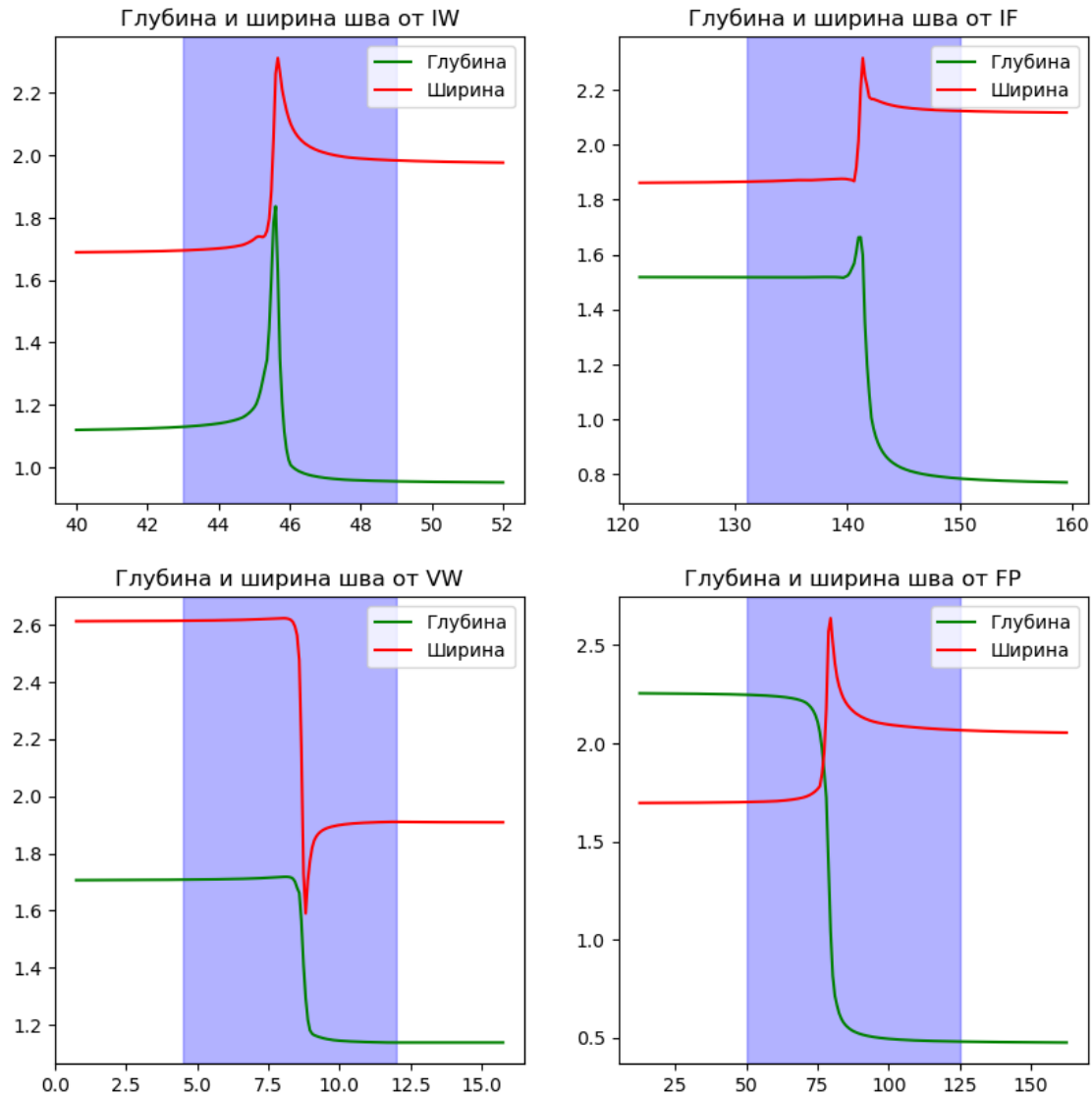
В принципе, такие закономерности выглядят логично.

При этом, судя по графикам, модели линейной регрессии плохо объясняют процесс сварки в широком диапазоне значений. Значения ширины и глубины сварного шва уходят в область отрицательных значений и явно не соответствует физической сути изучаемого процесса. Процесс сварки связан с переходом фазовых состояний металла, что позволяет ожидать наличие на графиках плавных участков и резких ``скачков" Графики экстраполяции, полученные с использованием полносвязанных нейронных сети больше соответствуют той картине, которую можно было бы ожидать в данном случае.

Зависимости, полученные с использованием сетей разных архитектур близкие, для примера рассмотрим графики, построенные с использованием сети с двумя скрытыми слоями по 50 нейронов, построенной по результатам с использованием GridSearchCV.

```
[57]: plot_extra(nreg_gs, df)
```

Изучаем поведение модели за пределами имеющегося диапазона значений



На всех графиках мы видим наличие явно выраженного ``пика'' с резкими изменениями параметров и относительно ``плоских'' участков. При этом основные тенденции роста и убывания глубины и ширины сварного шва прослеживаются и соответствуют предполагаемой картине.

Для того, чтобы делать обоснованные выводы относительно состоятельности полученных моделей за пределами заданных измерений, необходимо провести анализ результатов с участием специалистов по процессу сварки и.или провести дополнительные контрольные измерения.

С учетом изложенного реализуем в приложении следующие модели: - полиномиальной линейной регрессии со степенью 3, эта модель должна с минимальными ресурсами, быстро строить прогноз но только вблизи значений, полученных экспериментальным путем. - нейронную сеть с двумя слоями по 50 нейронов, можно предполагать, что эта модель будет давать осмысленные прогнозы в более широком диапазоне значений

К содержанию

2.7. Описание программного решения

2.7.1. Общее описание

В программе реализована функция прогнозирования глубины и ширины сварного шва композитных материалов. Прогнозирование осуществляется с использованием моделей линейной регрессии и полносвязной нейронной сети.

Для решения задачи реализована два класса: - `LinearRegression` - для работы с линейной регрессией с использованием методов библиотеки `sklearn` - `MLPRegression` - для работы с нейронной сетью с использованием `keras`

Классы содержат методы для обучения моделей (`fit`), выполнения прогноза (`predict`) и проверка диапазона входных значений. Для обучения по-умолчанию используется файл `data/raw/ebw_data.csv`. Обученная модель сохраняется в файлах: - `lr_model` - для модели линейной регрессии - `model/MLP_model.hd5` - для нейронной сети

Доступ к работе с моделям возможен через интерфейс командной строки или через Web. Обучение модели доступно только через интерфейс командной строки.

Дополнительно использования классов сделаем реализацию для командной строки и web интерфейс с использованием `flask`.

2.7.2. Требования к библиотекам

Для использования приложения необходимы следующие библиотеки - `tensorflow 2.10.0` - `keras` - `flask 2.2.2` - `numpy` - `pandas` - `scikit-learn`

Для установки необходимых зависимостей можно воспользоваться командой:

```
pip install -r requirements.txt
```

2.7.3. Описание проекта

Исходный код приложения организован в проект PyCharm. Структура проекта:

- `tProject` - `data` - `raw` - `ebw_data.csv` - файл с исходными данными для обучения моделей - `model` - `tmp` - `MLP_model.h5` - обученная модель нейросети - `notebook` - `eda` - `TaskDescription.ipynb` - блокнот с обоснованием и описанием решения - `src` - `modeling` - `LinearRegression.py` - класс для использования линейной регрессии - `MLPRegression.py` - класс для использования нейросети - `static` - статические файлы для оформления web приложения - `css` - `js` - `TaskDescription.pdf` - `template` - `start.html` - Jinja2 шаблон для страницы WEB приложения - `flask_backend.py` - WEB приложение - `lr_model` - обученная модель линейной регрессии - `main.py` - интерфейс командной строки - `README.md`

2.7.4. Интерфейс командной строки

Параметры вызова командной строки:

main.py - **method** метод расчета - **mode** режим работы - **data_file_path** имя файла с данными для обучения модели

- **method** - принимает два значения `LinearRegression` и `MLPRegression`, по-умолчанию - `LinearRe`
- **mode** - принимает два значения `fit` и `predict`, по умолчанию `predict`. Данные обученных модел
- **data_file_path** - путь к файлу с данными для переобучения модели, по умолчанию `./data/raw`

Примеры команд для запуска. Выполнение прогноза с использованием модели линейной регрессии:

```
python main.py -method LinearRegression -mode predict
```

Выполнение прогноза с использованием нейронной сети:

```
python main.py -method MLPRegression -mode predict
```

Переобучение модели линейной регрессии:

```
python main.py -method LinearRegression -mode fit -data_file_path data/raw/ebw_data.csv
```

Переобучение нейронной сети:

```
python main.py -method MLPRegression -mode fit -data_file_path data/raw/ebw_data.csv
```

2.7.5. WEB приложение

Вызов **web приложения**:

Из командной строки:

```
flask --app flask_backend run
```

Исполнение файла Python:

```
python flask_backend.py
```

После запуска flask в браузере открыть страницу <http://127.0.0.1:5000/>

Использование tensorflow из flask иногда может потребовать дополнительных настроек. При вызове ограничивается объем видеопамати, используемой tensorflow.

К содержанию