



ЦЕНТР  
ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО  
ОБРАЗОВАНИЯ  
МГТУ им. Н.Э. Баумана

# Прогнозирование конечных свойств новых материалов (композиционных материалов)

Островерх Владимир Степанович



ЦЕНТР  
ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО  
ОБРАЗОВАНИЯ  
МГТУ им. Н.Э. Баумана

# В рамках ВКР было выполнено

1

**Анализ данных**

2

**Подготовка данных**

3

**Подбор и обучение моделей машинного обучения**

4

**Создание и обучение нейронной сети**

5

**Создание приложения Flask**





## Обзор данных

Изучены характеристики датасета:

1. Типы данных;
2. Количество пропусков;
3. Количество уникальных значений;
4. Статистическая сводка;
5. Матрица корреляций;
6. Таблица рассеивания значений;
7. Выбросы.

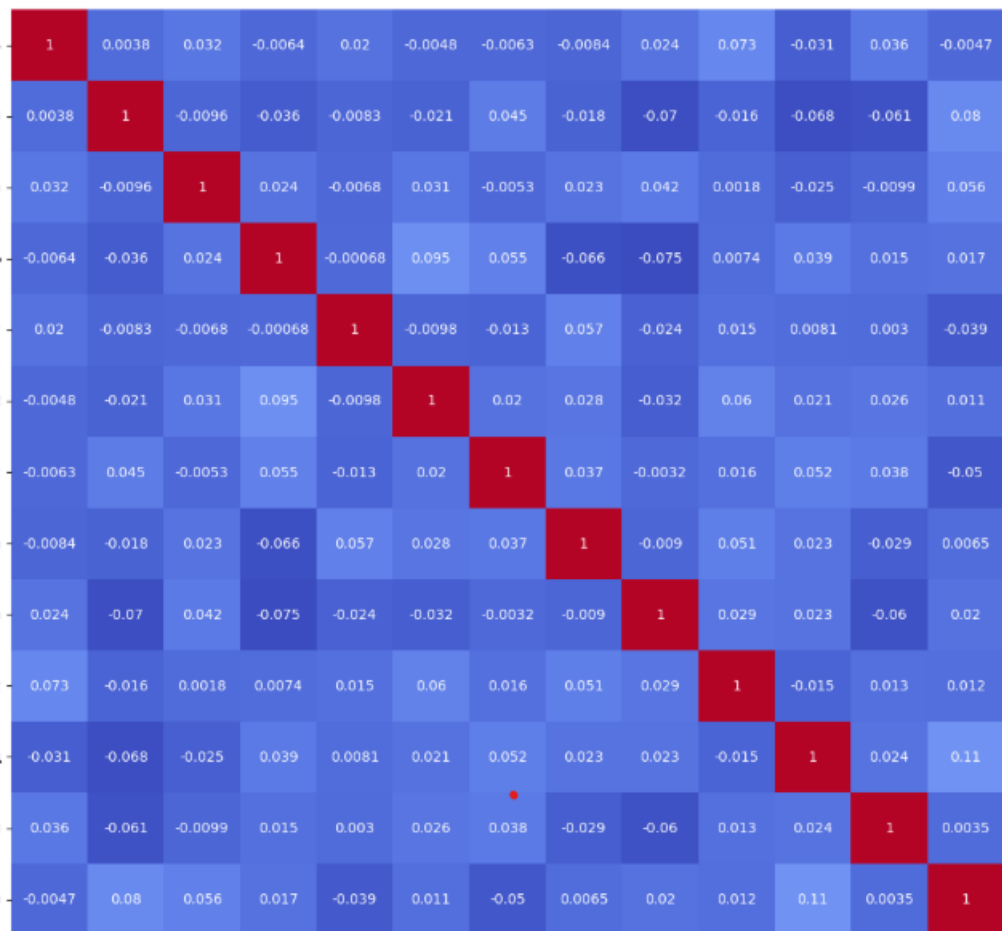
## Сводная информация

	Тип данных	Количество_пропусков	Количество_уникальных_значений	Процент_пропусков
id_x	int64	0	1023	0.0
Соотношение матрица-наполнитель	float64	0	1014	0.0
Плотность, кг/м3	float64	0	1013	0.0
модуль упругости, ГПа	float64	0	1020	0.0
Количество отвердителя, м.%	float64	0	1005	0.0
Содержание эпоксидных групп,%_2	float64	0	1004	0.0
Температура вспышки, C_2	float64	0	1003	0.0
Поверхностная плотность, г/м2	float64	0	1004	0.0
Модуль упругости при растяжении, ГПа	float64	0	1004	0.0
Прочность при растяжении, МПа	float64	0	1004	0.0
Потребление смолы, г/м2	float64	0	1003	0.0
id_y	int64	0	1023	0.0
Угол нашивки, град	int64	0	2	0.0
Шаг нашивки	float64	0	989	0.0
Плотность нашивки	float64	0	988	0.0



# Анализ данных

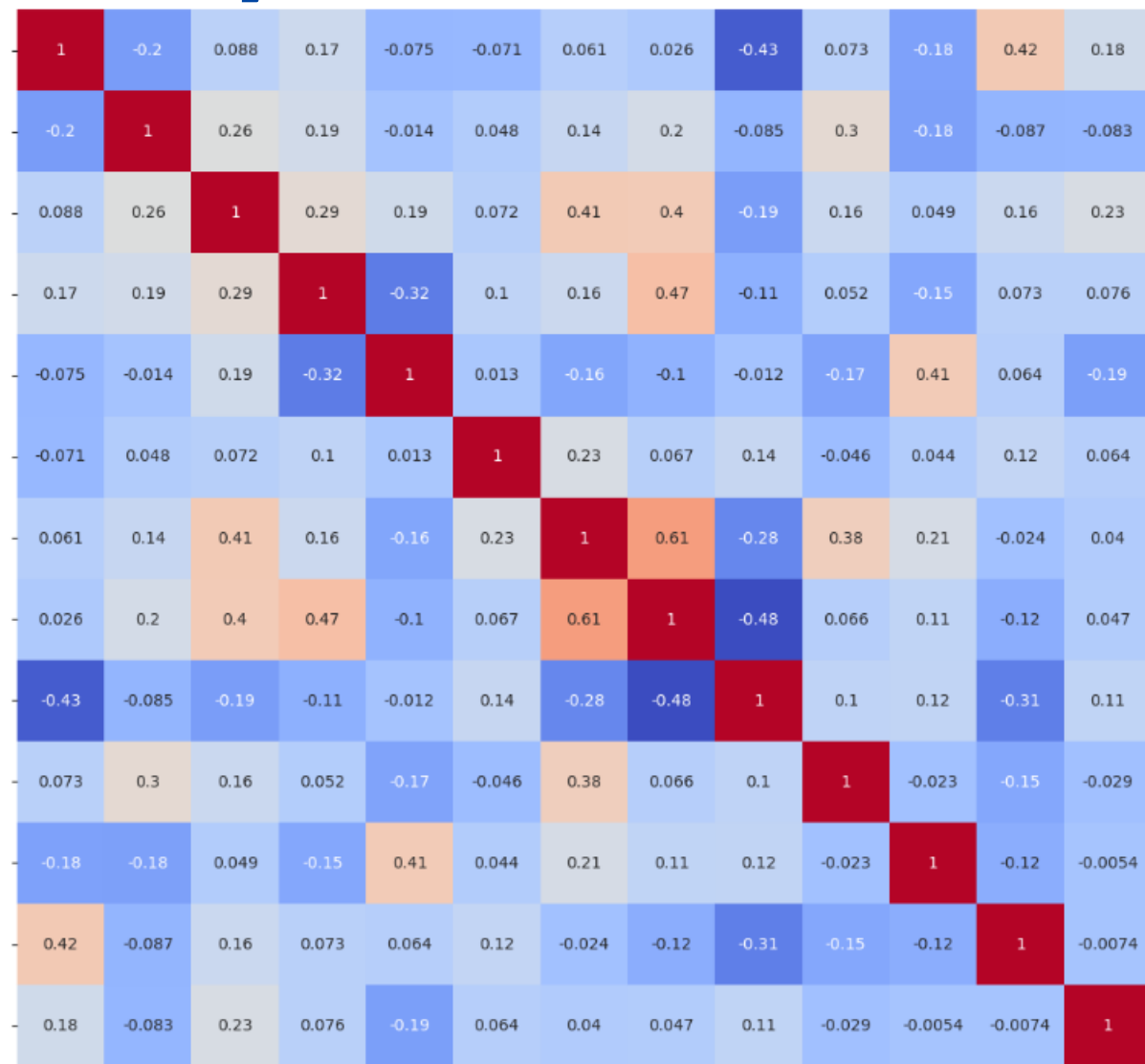
## Визуализация корреляции и рассеивания данных





## Анализ данных

Было взято за основу, синтетические данные – это нецелочисленные значения. Были отобраны только записи, для которых в столбце «Плотность нашивки» целое число. По полученным данным была составлена карта корреляции. Видно, что на таких данных зависимости уже более выражены. На полученном датасете далее будем проводить обучение.





## Поиск гиперпараметров по сетке с перекрестной проверкой, $y_1$

1. LinearRegression
2. GammaRegressor
3. ARDRegression
4. AdaBoostRegressor
5. ExtraTreesRegressor
6. GradientBoostingRegressor
7. BaggingRegressor
8. CatBoostRegressor

	model	best_score	best_params
0	LinearRegression	-17.919547	{}
1	GammaRegressor	-14.156777	{}
2	ARDRegression	-6.943522	{'tol': 0.001}
4	BaggingRegressor	-5.173590	{'max_features': 0.5, 'max_samples': 1.0, 'n_e...
3	AdaBoostRegressor	-4.036066	{'loss': 'linear', 'n_estimators': 5}
5	ExtraTreesRegressor	-3.861599	{'max_depth': 10, 'min_samples_split': 5, 'n_e...
6	GradientBoostingRegressor	-3.782408	{'learning_rate': 0.5, 'loss': 'huber', 'max_d...
7	CatBoostRegressor	-3.059801	{'depth': 5, 'iterations': 500, 'learning_rate...





## Результат обучения

### «Модуль упругости при растяжении, ГПа»

Модели	Без нормализации			С нормализацией		
	MAE	MSE	r2	MAE	MSE	r2
1	2	3	4	5	6	7
1. LinearRegression	2,076	5,75	0,13	2,08	5,75	0,13
2. GammaRegressor	1,84	4,29	0,16	2,62	9	-161,02
3. ARDRegression	2,6	8,3	-8,5	1,9	4,28	-0,5
4. AdaBoostRegressor	0,81	1,17	0,81	1,25	2,37	0,59
5. ExtraTreesRegressor	1,35	4,17	0,27	1,65	5,14	- 0,92
6. GradientBoostingRegressor	1,44	4,72	0,21	1,71	8,41	-0,14
7. BaggingRegressor	1,83	4,74	-0,37	1,82	5,76	-2,5
8. CatBoostRegressor	2,01	6,98	-2,67	2,01	6,98	-2,67



## Поиск гиперпараметров по сетке с перекрестной проверкой, $y_2$

1. LinearRegression
2. GammaRegressor
3. ARDRegression
4. AdaBoostRegressor
5. ExtraTreesRegressor
6. GradientBoostingRegressor
7. BaggingRegressor
8. CatBoostRegressor

	model	best_score	best_params
0	LinearRegression	-10.358839	{}
2	ARDRegression	-5.373563	{'tol': 0.01}
6	GradientBoostingRegressor	-3.616197	{'learning_rate': 0.01, 'loss': 'huber', 'max_...
1	GammaRegressor	-2.569186	{}
7	CatBoostRegressor	-2.321341	{'depth': 7, 'iterations': 100, 'learning_rate...
3	AdaBoostRegressor	-2.243952	{'loss': 'exponential', 'n_estimators': 30}
5	ExtraTreesRegressor	-1.972986	{'max_depth': 10, 'min_samples_split': 2, 'n_e...
4	BaggingRegressor	-1.668895	{'max_features': 0.5, 'max_samples': 1.0, 'n_e...





## Результат обучения

### «Прочность при растяжении, МПа»

Модели	Без нормализации			С нормализацией		
	MSE	MAE	r2	MSE	MAE	r2
1	2	3	4	5	6	7
1. LinearRegression	623,77	473638,04	0,04	623,77	473638,04	0,04
2. GammaRegressor	456,87	262844,88	-1,27	450,56	257126,75	-478,39
3. ARDRegression	449,03	276128,64	-15,98	460,21	278366,25	-20,86
4. AdaBoostRegressor	341,95	186183,54	-4,1	420,26	230471,75	-3,52
5. ExtraTreesRegressor	404,76	217654,45	-2,1	402,44	217700,03	-8,32
6. GradientBoostingRegressor	426,89	238395,84	-38,38	430,2	242203,44	-37,65
7. BaggingRegressor	283,49	130370,73	-1,34	405,77	235881,56	-7,18
8. CatBoostRegressor	346,87	173018,99	-7,62	346,87	173018,99	-7,62



# Нейронная сеть

## «Соотношение матрица-наполнитель»

Результаты:

R2: -0,48.

MSE: 0.53;

MAE: 0.57.

```
def baseline_model():
    model = Sequential()
    normalizer
    model.add(Dense(20, input_dim=10, activation='tanh', bias_initializer='he_normal', kernel_initializer='he_normal'))
    model.add(Dense(150, input_dim=20, activation='tanh', bias_initializer='he_normal', kernel_initializer='he_normal'))
    model.add(Dense(150, input_dim=150, activation='tanh', bias_initializer='he_normal', kernel_initializer='he_normal'))
    model.add(Dense(100, input_dim=150, activation='tanh', bias_initializer='he_normal', kernel_initializer='he_normal'))
    model.add(Dense(20, input_dim=100, activation='tanh', bias_initializer='he_normal', kernel_initializer='he_normal'))
    model.add(Dense(1, input_dim=20, activation='linear', bias_initializer='he_normal', kernel_initializer='he_normal'))

    adam = Adam()
    model.compile(loss='mean_squared_error', optimizer='adam')
    return model

model = baseline_model()
```



## Приложение Flask

Приложение доступно по пути:

<https://ostroverkh-vkr-10.onrender.com/>

Рассчитывает прогноз по  
переменным:

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

### Введите данные для расчета:

Плотность, кг/м<sup>3</sup>:

Модуль упругости, ГПа:

Количество отвердителя, м. %:

Содержание эпоксидных групп, %:

Температура вспышки, °C:

Поверхностная плотность, г/м<sup>2</sup>:

Потребление смолы, г/м<sup>2</sup>:

Угол нашивки, градусы:

Шаг нашивки:

Плотность нашивки:



ЦЕНТР  
ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО  
ОБРАЗОВАНИЯ  
МГТУ им. Н.Э. Баумана



[do.bmstu.ru](https://do.bmstu.ru)