ЦЕНТР ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
МГТУ им. Н.Э. Баумана

Прогнозирование конечных свойств композиционных материалов

Бурчакова Анна Александровна

ЦЕНТР ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
МГТУ им. Н.Э. Баумана

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 трех свойств композитов: соотношение матрица-наполнитель, модуль упругости при растяжении, прочность при растяжении.

Актуальность

Возможностью использования цифрового подхода к процессу создания композиционных материалов для снижения количества реально проводимых испытаний.

ЦЕНТР ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
МГТУ им. Н.Э. Баумана

Задачи исследования:

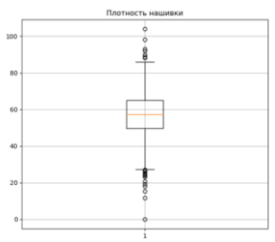
1. изучение теоретических основ и методов прогнозирования целевых переменных, в частности свойств получаемых композиционных материалов;
2. проведение разведочного анализа данных;
3. обучение моделей для прогноза целевых признаков: модуля упругости при растяжении и прочности при растяжении;
4. написание нейронной сети, которая будет рекомендовать соотношение матрица-наполнитель;
5. разработка приложения, которое будет выдавать прогноз, соотношения матрица-наполнитель.

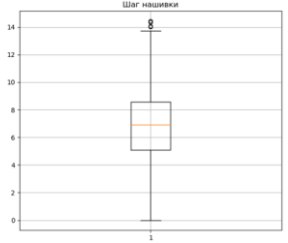
Результаты исследования находятся в открытом доступе на веб-портале GitHub: https://github.com/aburchakova/kompozitus

ЦЕНТР ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
МГТУ им. Н.Э. Баумана

Исходный датасет joined_dataset

Свойства композитов	count	mean	std	min	25%	50%	75%	max
Соотношение матрица-наполнитель	1023	2,9	0,9	0,4	2,3	2,9	3,6	5,6
Плотность, кг/м3	1023	1 975,7	73,7	1 731,8	1 924,2	1 977,6	2 021,4	2 207,8
модуль упругости, ГПа	1023	739,9	330,2	2,4	500,0	739,7	961,8	1 911,5
Количество отвердителя, м.%	1023	110,6	28,3	17,7	92,4	110,6	129,7	199,0
Содержание эпоксидных групп, %_2	1023	22,2	2,4	14,3	20,6	22,2	24,0	33,0
Температура вспышки, С_2	1023	285,9	40,9	100,0	259,1	285,9	313,0	413,3
Поверхностная плотность, г/м2	1023	482,7	281,3	0,6	266,8	451,9	693,2	1 399,5
Модуль упругости при растяжении, ГПа	1023	73,3	3,1	64,1	71,2	73,3	75,4	82,7
Прочность при растяжении, МПа	1023	2 466,9	485,6	1 036,9	2 135,9	2 459,5	2 767,2	3 848,4
Потребление смолы, г/м2	1023	218,4	59,7	33,8	179,6	219,2	257,5	414,6
Угол нашивки, град	1023	44,3	45,0	0,0	0,0	0,0	90,0	90,0
Шаг нашивки	1023	6,9	2,6	0,0	5,1	6,9	8,6	14,4
Плотность нашивки	1023	57,2	12,4	0,0	49,8	57,3	64,9	104,0



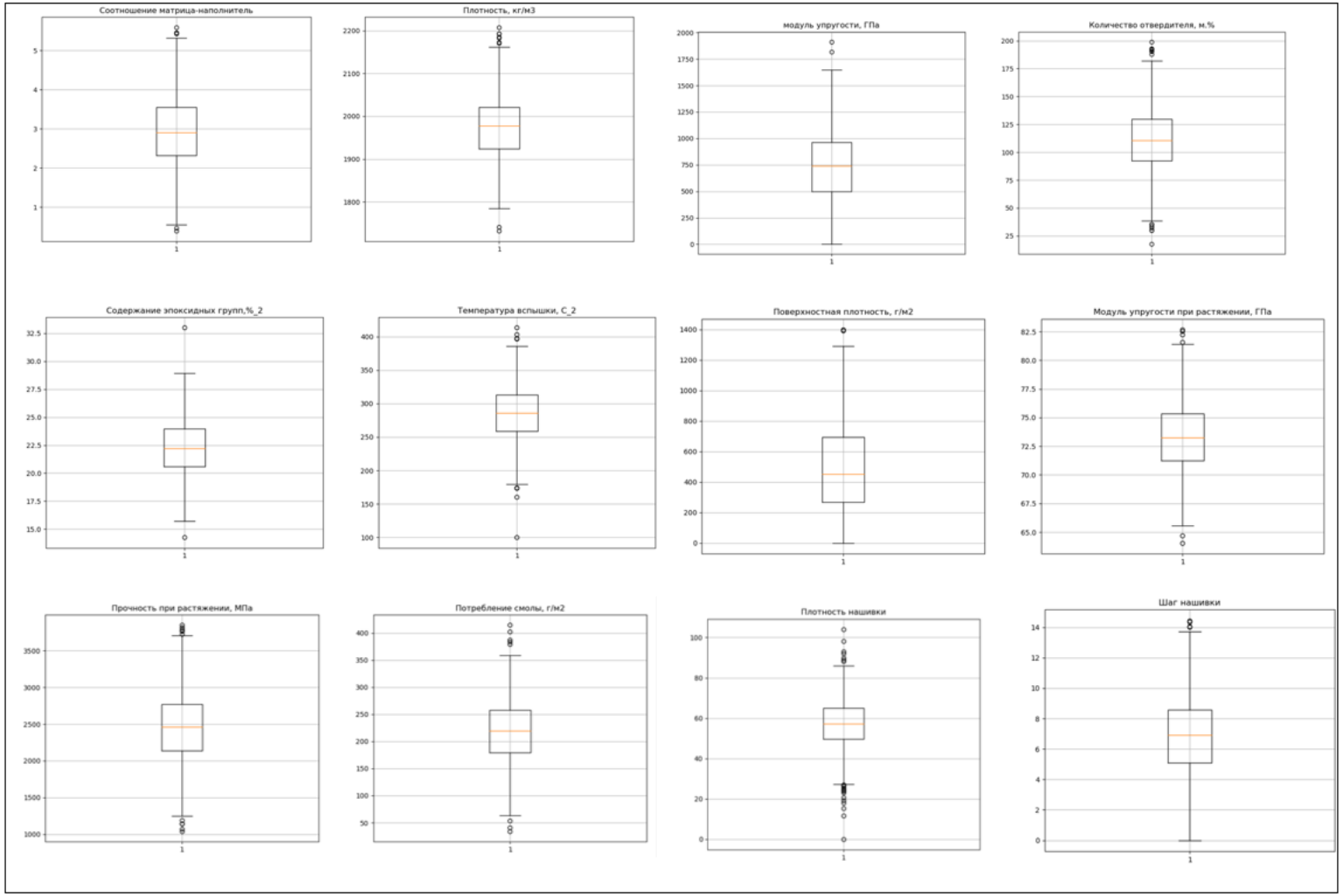


Диаграммы «ящик с усами» признаков исходного датасета joined_dataset

Построены:

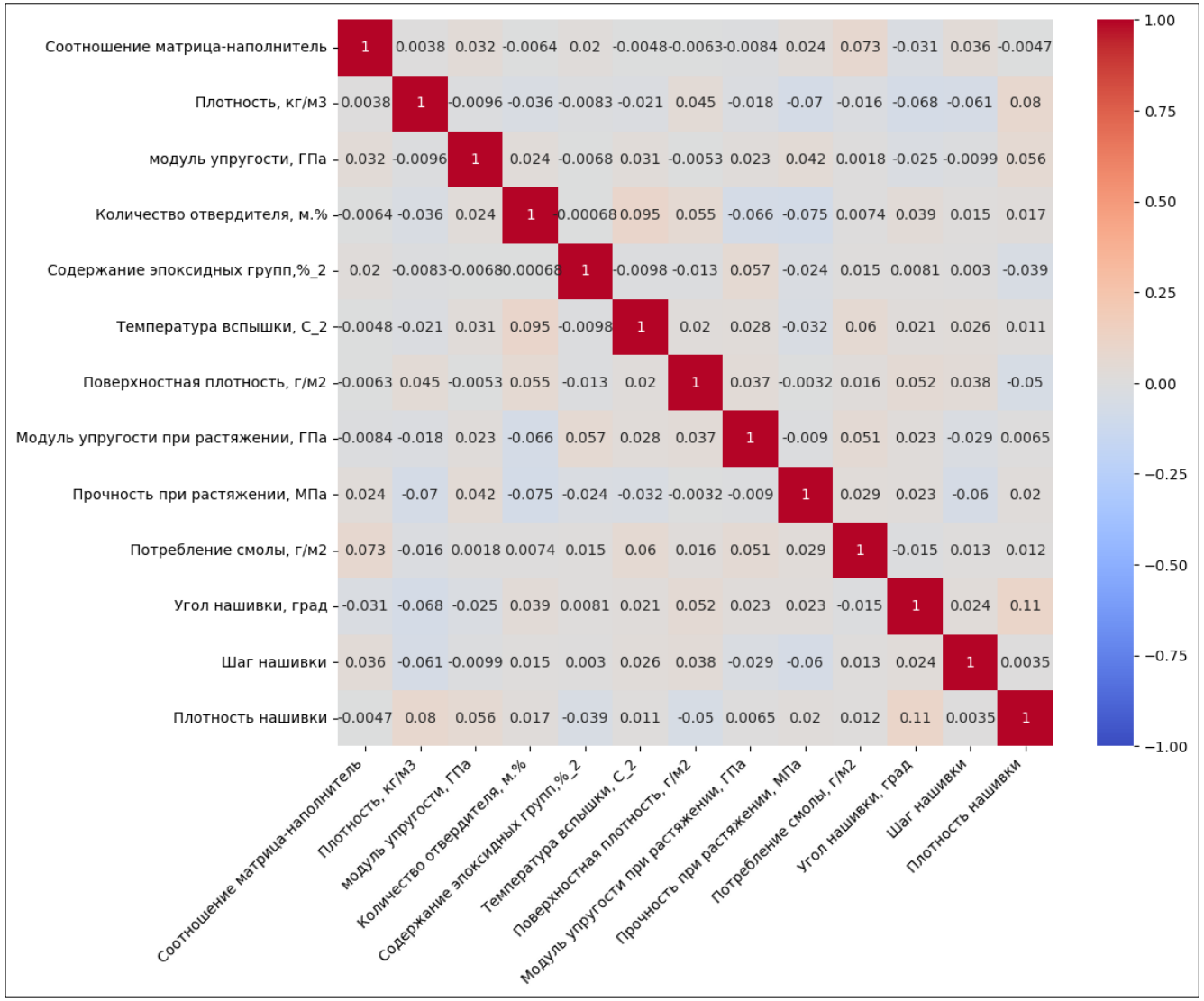
1. Гистограммы;
2. Диаграммы ящика с усами;
3. Попарные графики рассеяния точек.

Выбросы обнаружены



ЦЕНТР ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
МГТУ им. Н.Э. Баумана

Тепловая карта корреляции



Зависимость между признаками минимальна

ЦЕНТР ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
МГТУ им. Н.Э. Баумана

Датасет для построения моделей

- *выбросы удалены*
- *данные нормализованы*

Свойства композитов	count	mean	std	min	25%	50%	75%	max
Соотношение матрица-наполнитель	972	0,0013	0,0004	0,0002	0,0010	0,0013	0,0016	0,0025
Плотность, кг/м3	972	0,8857	0,0507	0,6949	0,8527	0,8890	0,9253	0,9850
модуль упругости, ГПа	972	0,3246	0,1313	0,0011	0,2338	0,3320	0,4208	0,6816
Количество отвердителя, м.%	972	0,0496	0,0131	0,0079	0,0412	0,0493	0,0586	0,0935
Содержание эпоксидных групп,%_2	972	0,0100	0,0013	0,0063	0,0091	0,0099	0,0109	0,0142
Температура вспышки, С_2	972	0,1279	0,0194	0,0749	0,1146	0,1276	0,1409	0,1883
Поверхностная плотность, г/м2	972	0,2120	0,1185	0,0003	0,1218	0,2033	0,3023	0,5599
Потребление смолы, г/м2	972	0,0983	0,0276	0,0147	0,0803	0,0970	0,1167	0,1968
Угол нашивки, град	972	0,0199	0,0203	0,0000	0,0000	0,0000	0,0406	0,0486
Шаг нашивки	972	0,0031	0,0012	0,0000	0,0023	0,0031	0,0038	0,0074
Плотность нашивки	972	0,0256	0,0056	0,0073	0,0220	0,0256	0,0295	0,0443

ЦЕНТР ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
МГТУ им. Н.Э. Баумана

Разделение на тестовую и обучающую выборки

X_train_upr	y_train_upr	X_test_upr	y_test_upr
(680, 11)	(680, 1)	(292, 11)	(292, 1)
X_train_prochn	**y_train_prochn**	**X_test_ prochn**	**y_test_ prochn**
(680, 11)	(680, 1)	(292, 11)	(292, 1)

Модели

- Линейная регрессия;
- Метод Лассо;
- Дерево решений;
- Метод ближайших соседей.

Метрики

- Средняя квадратическая ошибка (MSE);
- Корень из средней квадратичной ошибки (RMSE);
- Коэффициент детерминации (R2).

ЦЕНТР ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
МГТУ им. Н.Э. Баумана

Оценка качества моделей

Модуль упругости при растяжении

Метрики	RMSE	MSE	R2_score
Линейная регрессия	3,23	10,45	-0,01
Лассо	3,22	10,36	0,00
Дерево решений	3,24	10,51	-0,01
К-соседей	3,33	11,09	-0,07

Показатель прочности при растяжении

Метрики	RMSE	MSE	R2_score
Линейная регрессия	501,26	251261,46	-0,02
Лассо	502,02	252027,1	-0,02
Дерево решений	2500,32	6251620	-24,35
К-соседей	500,33	250329,4	-0,01

ЦЕНТР ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
МГТУ им. Н.Э. Баумана

Нейронная сеть для прогнозирования соотношения матрица наполнитель

Разделение на тестовую и обучающую выборки

X_train_smn	y_train_smn
680, 12	680, 1
X_test_smn	**y_test.smn**
292, 12	292,1

Оценка качества нейронной сети

Метрики	
RMSE	0,88
MSE	0,77
R2	-0,02

ЦЕНТР ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
МГТУ им. Н.Э. Баумана

Приложение для прогнозирования соотношения матрица наполнитель

Расчет соотношения матрица-наполнитель

Ввод параметров

Введите Плотность, кг/м3 1

Введите Модуль упругости, ГПа 1

Введите Количество отвердителя, м.% 1

Введите Содержание эпоксидных групп,%_2 1

Введите Температура вспышки, С_2 1

Введите Поверхностная плотность, г/м2 1

Введите Модуль упругости при растяжении, ГПа 1

Введите Прочность при растяжении, МПа 1

Введите Потребление смолы, г/м2 1

Введите Угол нашивки, град 1

Введите Шаг нашивки 1

Введите Плотность нашивки 1

Рассчитать Сбросить

Спрогнозированное Соотношение матрица-наполнитель для введенных параметров:

Расчет соотношения матрица-наполнитель

Ввод параметров

Введите Плотность, кг/м3

Введите Модуль упругости, ГПа

Введите Количество отвердителя, м.%

Введите Содержание эпоксидных групп,%_2

Введите Температура вспышки, С_2

Введите Поверхностная плотность, г/м2

Введите Модуль упругости при растяжении, ГПа

Введите Прочность при растяжении, МПа

Введите Потребление смолы, г/м2

Введите Угол нашивки, град

Введите Шаг нашивки

Введите Плотность нашивки

Рассчитать Сбросить

Спрогнозированное Соотношение матрица-наполнитель для введенных параметров:8.7

ЦЕНТР
ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО
ОБРАЗОВАНИЯ
МГТУ им. Н.Э. Баумана

do.bmstu.ru