ЦЕНТР ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
МГТУ им. Н.Э. Баумана

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА по курсу «Data Science Pro»

Кирпичев Артем Игоревич

ЦЕНТР ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
МГТУ им. Н.Э. Баумана

Тема выпускной работы: Прогнозирование конечных свойств новых материалов(композиционных материалов)

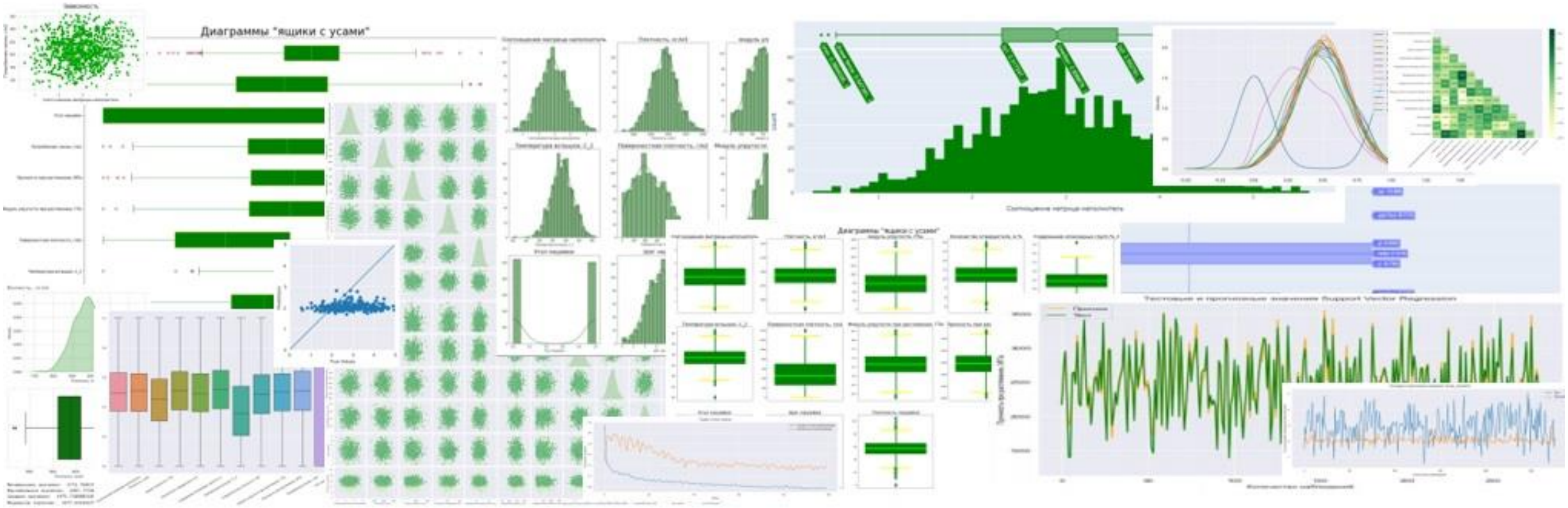
Приложение 1

Подробный план работы:

1. Загружаем и обрабатываем входящие датасеты
   1.1. Удаляем неинформативные столбцы
   1.2. Объединяем датасеты по методу INNER
2. Проводим разведочный анализ данных:
   2.1. Данные в столбце "Угол нашивки» приведём к 0 и 1
   2.2. Изучим описательную статистику каждой переменной - среднее, медиана, стандартное отклонение, минимум, максимум, квартили
   2.3. Проверим датасет на пропуски и дубликаты данных
   2.4. Получим среднее, медианное значение для каждой колонки (по заданию необходимо получить их отдельно, поэтому продублируем их только отдельно)
   2.5. Вычислим коэффициенты ранговой корреляции Кендалла
   2.6. Вычислим коэффициенты корреляции Пирсона
3. Визуализируем наш разведочный анализ сырых данных (до выбросов и нормализации)
   3.1. Построим несколько вариантов гистограмм распределения каждой переменной
   3.2. Построим несколько вариантов диаграмм ящиков с усами каждой переменной
   3.3. Построим гистограмму распределения и диаграмма "ящик с усами" одновременно вместе с данными по каждому столбцу
   3.4. Построим несколько вариантов попарных графиков рассеяния точек (матрицы диаграмм рассеяния)
   3.5. Построим графики квантиль-квантиль
   3.6. Построим корреляционную матрицу с помощью тепловой карты
4. Проведём предобработку данных (в данном пункте только очистка датасета от выбросов)
   4.1. Проверим выбросы по 2 методам: 3-х сигм или межквартильных расстояний
   4.2. Посчитаем распределение выбросов по каждому столбцу (с целью предотвращения удаления особенностей признака или допущения ошибки)
   4.3. Исключим выбросы методом межквартильного расстояния
   4.4. Удалим строки с выбросами
   4.5. Визуализируем датасет без выбросов, и убедимся, что выбросы еще есть.
   4.6. Для полной очистки датасета от выбросов повторим пункты (4.3 – 4.5) ещё 3 раза.
   4.7. Сохраняем идеальный, без выбросов датасет
   4.8. Изучим чистые данные по всем параметрам
   4.9. Визуализируем «чистый» датасет (без выбросов)
5. Проведём нормализацию и стандартизацию (продолжим предобработку данных)
   5.1. Визуализируем плотность ядра
   5.2. Нормализуем данные с помощью MinMaxScaler()
   5.3. Нормализуем данные с помощью Normalizer()
   5.4. Сравним с данными до нормализации
   5.5. Проверим перевод данных из нормализованных в исходные
   5.6. Рассмотрим несколько вариантов корреляции между параметрами после нормализации
   5.7. Стандартизируем данные
   5.8. Визуализируем данные корреляции
   5.9. Посмотрим на описательную статистику после нормализации и после стандартизации
6. Разработаем и обучим нескольких моделей прогноза прочности при растяжении (с 30% тестовой выборки)
   6.1. Определим входы и выходы для моделей
   6.2. Разобьём данные на обучающую и тестовую выборки
   6.3. Проверим правильность разбивки
   6.4. Построим модели и найдём лучшие гиперпараметры (задача по заданию):
   6.5. Построим и визуализируем результат работы метода опорных векторов
   6.6. Построим и визуализируем результат работы метода случайного леса
   6.7. Построим и визуализируем результат работы линейной регрессии
   6.8. Построим и визуализируем результат работы метода градиентного бустинга
   6.9. Построим и визуализируем результат работы метода К ближайших соседей
   6.10. Построим и визуализируем результат работы метода деревья решений
   6.11. Построим и визуализируем результат работы стохастического градиентного спуска
   6.12. Построим и визуализируем результат работы многослойного перцептрона
   6.13. Построим и визуализируем результат работы лассо регрессии
   6.14. Сравним наши модели по метрике MAE
   6.15. Найдём лучшие гиперпараметры для случайного леса
   6.16. Подставим значения в нашу модель случайного леса
   6.17. Найдём лучшие гиперпараметры для К ближайших соседей
   6.18. Подставим значения в нашу модель К ближайших соседей
   6.19. Найдём лучшие гиперпараметры метода деревья решений
   6.20. Подставим значения в нашу модель метода деревья решений
   6.21. Проверим все модели и процессинги и выведем лучшую модель и процессинг
7. Разработаем и обучим нескольких моделей прогноза модуля упругости при растяжении (с 30% тестовой выборки)
   7.1. Определим входы и выходы для моделей
   7.2. Разобьём данные на обучающую и тестовую выборки
   7.3. Проверим правильность разбивки
   7.4. Построим модели и найдём лучшие гиперпараметры (задача по заданию):
   7.5. Построим и визуализируем результат работы метода опорных векторов
   7.6. Построим и визуализируем результат работы метода случайного леса
   7.7. Построим и визуализируем результат работы линейной регрессии
   7.8. Построим и визуализируем результат работы метода градиентного бустинга
   7.9. Построим и визуализируем результат работы метода К ближайших соседей
   7.10. Построим и визуализируем результат работы метода деревья решений
   7.11. Построим и визуализируем результат работы стохастического градиентного спуска
   7.12. Построим и визуализируем результат работы многослойного перцептрона
   7.13. Построим и визуализируем результат работы лассо регрессии
   7.14. Сравним наши модели по метрике MAE
   7.15. Найдём лучшие гиперпараметры для случайного леса
   7.16. Подставим значения в нашу модель случайного леса
   7.17. Найдём лучшие гиперпараметры для К ближайших соседей
   7.18. Подставим значения в нашу модель К ближайших соседей
   7.19. Найдём лучшие гиперпараметры метода деревья решений
   7.20. Подставим значения в нашу модель метода деревья решений
   7.21. Проверим все модели и процессинги и выведем лучшую модель и процессинг
8. Нейронная сеть для рекомендации соотношения матрица-наполнитель
   8.1. Сформируем входы и выход для модели
   8.2. Нормализуем данные
   8.3. Построим модель, определим параметры
   8.4. Найдем оптимальные параметры для модели
   8.5. Посмотрим на результаты
   8.6. Повторим шаги 8.4 – 8.5 до построения окончательной модели
   8.7. Обучим нейросеть 80/20
   8.8. Оценим модель
   8.9. Посмотрим на потери модели
   8.10. Посмотрим на график результата работы модели
   8.11. Посмотрим на график потерь на тренировочной и тестовой выборках
   8.12. Сконфигурируем другую модель, зададим слои
   8.13. Посмотрим на архитектуру другой модели
   8.14. Обучим другую модель
   8.15. Посмотрим на потери другой модели
   8.16. Посмотрим на график потерь на тренировочной и тестовой выборках
   8.17. Зададим функцию для визуализации факт/прогноз для результатов моделей
   8.18. Посмотрим на график результата работы модели
   8.19. Оценим модель MSE
   8.20. Сохраняем вторую модель для разработки веб-приложения для прогнозирования соотношения "матрица-наполнитель" в фреймворке Flask
9. Создаём приложение
   9.1. Импортируем необходимые библиотеки
   9.2. Загрузим модель и определим параметры функции
   9.3. Получим данные из наших форм и положим их в список
   9.4. Укажем шаблон и прототип сайта для вывода
   9.5. Запустим приложение
   9.6. Откроем http://127.0.0.1:5000/
10. Создание удалённого репозитория и загрузка результатов работы на него.
    10.1.
    10.2. Создадим README
    10.3. Выгрузим все необходимые файлы и репозиторий

ЦЕНТР ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
МГТУ им. Н.Э. Баумана

Выполнение работы, построение схем и графиков



ЦЕНТР ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
МГТУ им. Н.Э. Баумана

Объединение файлов и разведочный анализ

Импортируем необходимые библиотеки

Загружаем файлы

Объединяем файлы по типу Inner

Разведочный анализ: изучаем информацию о датасетах, проверка данных, проверка пропусков

Объединяем по индексу, тип объединения INNER, смотрим итоговый датасет

```
In [9]: # Понимаем, что эти два датасета имеют разный объем строк.
        # Но наша задача собрать исходные данные файлы в один, единый набор данных.
        # По условию задачи объединяем их по типу INNER.
        df = df_bp.merge(df_nup, left_index = True, right_index = True, how = 'inner')
        df.head().T
```

Out[9]:

	0	1	2	3	4
Соотношение матрица-наполнитель	1.857143	1.857143	1.857143	1.857143	2.771331
Плотность, кг/м3	2030.000000	2030.000000	2030.000000	2030.000000	2030.000000
модуль упругости, ГПа	738.736842	738.736842	738.736842	738.736842	753.000000
Количество отвердителя, м.%	30.000000	50.000000	49.900000	129.000000	111.860000
Содержание эпоксидных групп,%_2	22.267857	23.750000	33.000000	21.250000	22.267857
Температура вспышки, С_2	100.000000	284.615385	284.615385	300.000000	284.615385
Поверхностная плотность, г/м2	210.000000	210.000000	210.000000	210.000000	210.000000
Модуль упругости при растяжении, ГПа	70.000000	70.000000	70.000000	70.000000	70.000000
Прочность при растяжении, МПа	3000.000000	3000.000000	3000.000000	3000.000000	3000.000000
Потребление смолы, г/м2	220.000000	220.000000	220.000000	220.000000	220.000000
Угол нашивки, град	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
Шаг нашивки	4.000000	4.000000	4.000000	5.000000	5.000000
Плотность нашивки	57.000000	60.000000	70.000000	47.000000	57.000000

```
#Удаляем первый неинформативный столбец
df_nup.drop(['Unnamed: 0'], axis=1, inplace=True)
#Посмотрим на первые 5 строк второго датасета и убедимся, что и здесь не нужный первый столбец успешно удалился
df_nup.head()
```

	Угол нашивки, град	Шаг нашивки	Плотность нашивки
0	0.0	4.0	57.0
1	0.0	4.0	60.0
2	0.0	4.0	70.0
3	0.0	5.0	47.0
4	0.0	5.0	57.0

```
# Проверим размерность второго файла
df_nup.shape
```

```
(1040, 3)
```

```
<class 'pandas.core.frame.DataFrame'>
Int64Index: 1023 entries, 0 to 1022
Data columns (total 13 columns):
 #   Column                             Non-Null Count  Dtype
---  ------                             --------------  -----
 0   Соотношение матрица-наполнитель    1023 non-null   float64
 1   Плотность, кг/м3                   1023 non-null   float64
 2   модуль упругости, ГПа              1023 non-null   float64
 3   Количество отвердителя, м.%        1023 non-null   float64
 4   Содержание эпоксидных групп,%_2    1023 non-null   float64
 5   Температура вспышки, С_2           1023 non-null   float64
 6   Поверхностная плотность, г/м2      1023 non-null   float64
 7   Модуль упругости при растяжении, ГПа 1023 non-null   float64
 8   Прочность при растяжении, МПа      1023 non-null   float64
 9   Потребление смолы, г/м2            1023 non-null   float64
 10  Угол нашивки, град                 1023 non-null   float64
 11  Шаг нашивки                        1023 non-null   float64
 12  Плотность нашивки                  1023 non-null   float64
dtypes: float64(13)
memory usage: 111.9 KB
```

```
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
```

ЦЕНТР ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
МГТУ им. Н.Э. Баумана

Описательная статистика

Изучение описательной статистики данных(минимальное, максимальное значение, квартили, медиана, стандартное отклонение, среднее значение и т.д.)

Просмотр основных параметров анализа данных

Проверка дата сета на пропущенные и дублирующие данные

Вычисление коэффициентов ранговой корреляции Кендалл и Пирсона

```
# Поработаем со столбцом "Угол нашивки"
```

```
df['Угол нашивки, град'].nunique()
#Так как кол-во уникальных значений в колонке Угол нашивки равно 2
```

```
2
```

```
#Проверим кол-во элементов, где Угол нашивки равен 0 градусов
df['Угол нашивки, град'][df['Угол нашивки, град'] == 0.0].count()
```

```
520
```

```
# Приведем столбец "Угол нашивки" к значениям 0 и 1 и integer
df = df.replace({'Угол нашивки, град': {0.0 : 0, 90.0 : 1}})
df['Угол нашивки, град'] = df['Угол нашивки, град'].astype(int)
```

```
#Переименуем столбец
df = df.rename(columns={'Угол нашивки, град' : 'Угол нашивки'})
df
```

```
#Посчитаем количество элементов, где угол нашивки раве
df['Угол нашивки'][df['Угол нашивки'] == 0.0].count()
#После преобразования колонки Угол нашивки к значениям
```

```
520
```

```
# Переведем столбец с нумерацией в integer
df.index = df.index.astype('int')
```

```
# Сохраним итоговый датасет в отдельную папку с данны
df.to_excel("Itog\itog.xlsx")
```

```
a = df.describe()
a.T
```

	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	1023.0	0.491691	0.500175	0.000000	0.000000	0.000000	1.000000	1.000000
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

```
# Пропуски данных
```

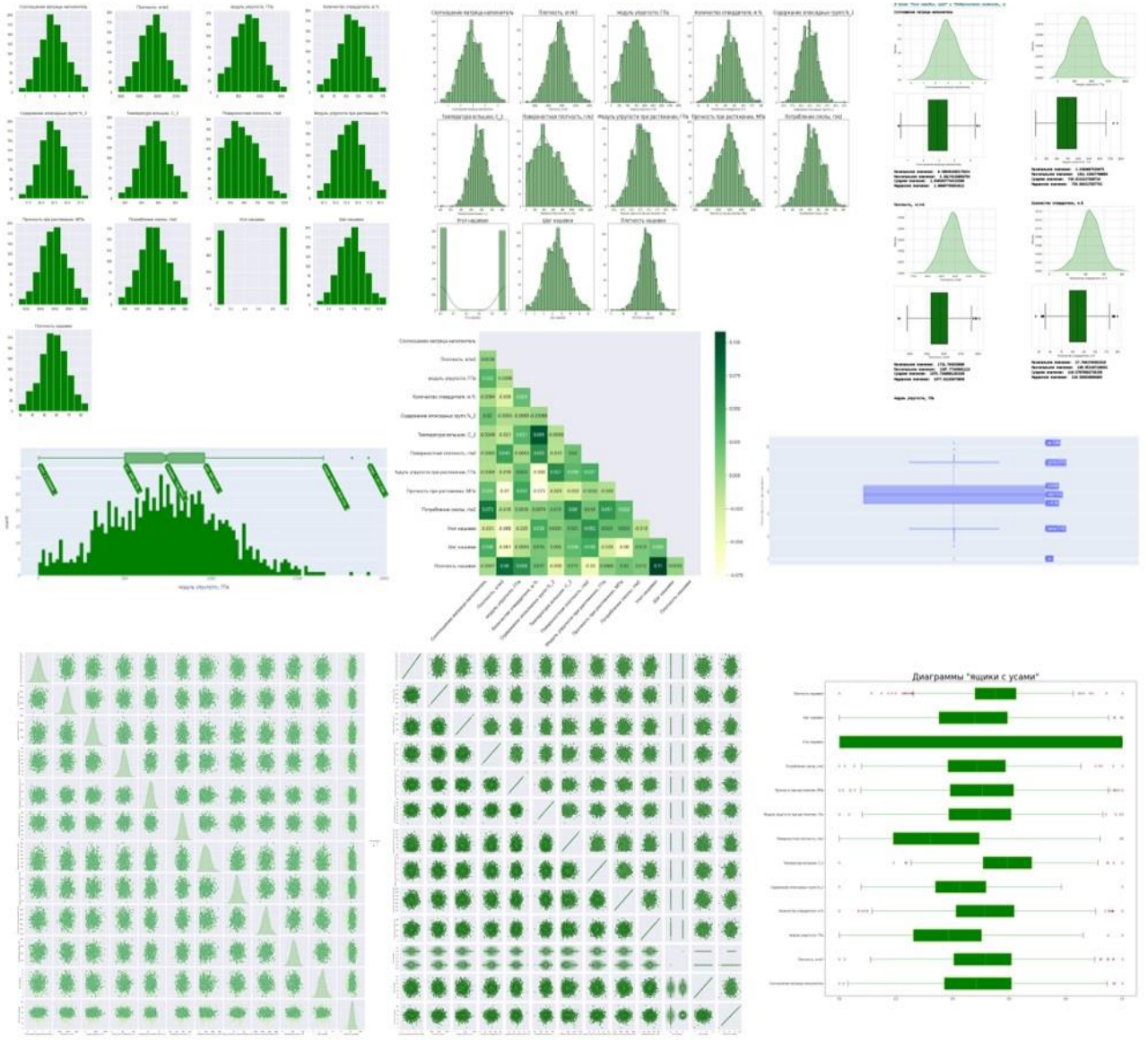
```
# Проверим на пропущенные данные
df.isnull().sum()
# Пропущенных данных нет = нулевых значений
```

```
Соотношение матрица-наполнитель    0
Плотность, кг/м3                   0
модуль упругости, ГПа              0
Количество отвердителя, м.%        0
Содержание эпоксидных групп,%_2    0
Температура вспышки, С_2           0
Поверхностная плотность, г/м2      0
Модуль упругости при растяжении, ГПа  0
Прочность при растяжении, МПа      0
Потребление смолы, г/м2            0
Угол нашивки                       0
Шаг нашивки                        0
Плотность нашивки                  0
dtype: int64
```

ЦЕНТР ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
МГТУ им. Н.Э. Баумана

Визуализация данных

- Построение гистограммы распределения каждой из переменных
- Диаграммы «ящиков с усами»
- Графики рассеяния точек
- Графики квантиль-квантиль
- Тепловые карты



ЦЕНТР ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
МГТУ им. Н.Э. Баумана

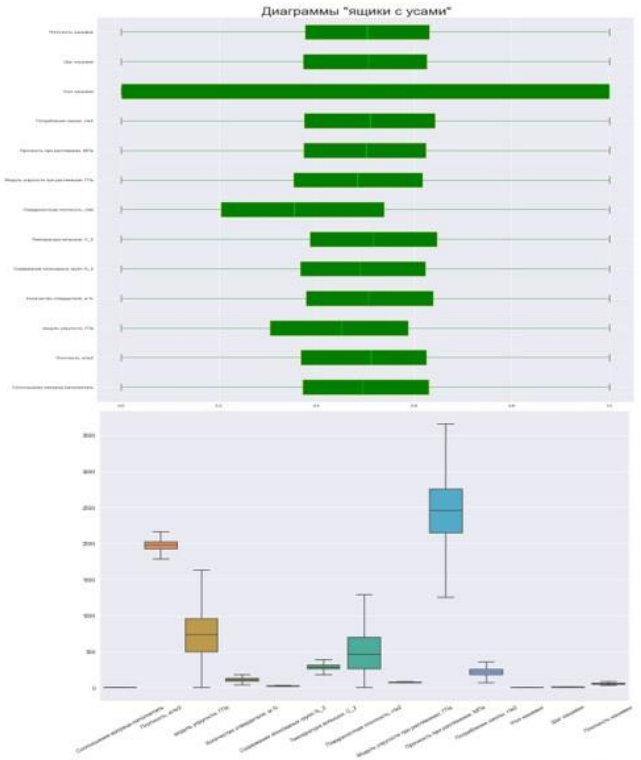
Предобработка данных

Подсчет количества значений методом 3 сигм

Исключение выбросов методом межквартильного расстояния

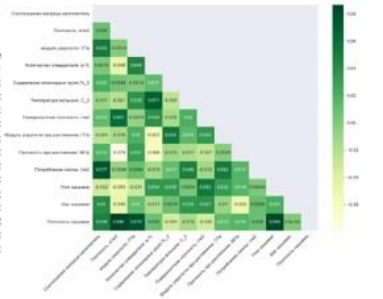
Построение графиков

```
#Для удаления выбросов существует 2 основных метода - метод 3-х си
metod_3s = 0
metod_iq = 0
count_iq = [] # Список, куда записывается количество выбросов по к
count_3s = [] # Список, куда записывается количество выбросов по к
for column in df:
    d = df.loc[:, [column]]
    # методом 3-х сигм
    zscore = (df[column] - df[column].mean()) / df[column].std()
    d['3s'] = zscore.abs() > 3
    metod_3s += d['3s'].sum()
    count_3s.append(d['3s'].sum())
    print(column,'3s', ': ', d['3s'].sum())

    # методом межквартильных расстояний
    q1 = np.quantile(df[column], 0.25)
    q3 = np.quantile(df[column], 0.75)
    iqr = q3 - q1
    lower = q1 - 1.5 * iqr
    upper = q3 + 1.5 * iqr
    d['iq'] = (df[column] <= lower) | (df[column] >= upper)
    metod_iq += d['iq'].sum()
    count_iq.append(d['iq'].sum())
    print(column, ': ', d['iq'].sum())
print('Метод 3-х сигм, выбросов:', metod_3s)
print('Метод межквартильных расстояний, выбросов:', metod_iq)
```




```
Соотношение матрица-наполнитель          6
Плотность, кг/м3                         9
модуль упругости, ГПа                    2
Количество отвердителя, м.%             14
Содержание эпоксидных групп,%_2          2
Температура вспышки, С_2                 8
Поверхностная плотность, г/м2            2
Модуль упругости при растяжении, ГПа     6
Прочность при растяжении, МПа           11
Потребление смолы, г/м2                  8
Угол нашивки                             0
Шаг нашивки                              4
Плотность нашивки                       21
dtype: int64
```

```
<class 'pandas.core.frame.DataFrame'>
Int64Index: 922 entries, 1 to 1022
Data columns (total 13 columns):
 #   Column                            Non-Null Count  Dtype
---  ------                            --------------  -----
 0   Соотношение матрица-наполнитель   922 non-null    float
 1   Плотность, кг/м3                  922 non-null    float
 2   модуль упругости, ГПа             922 non-null    float
 3   Количество отвердителя, м.%       922 non-null    float
 4   Содержание эпоксидных групп,%_2   922 non-null    float
 5   Температура вспышки, С_2          922 non-null    float
 6   Поверхностная плотность, г/м2     922 non-null    float
 7   Модуль упругости при растяжении, ГПа  922 non-null  float
 8   Прочность при растяжении, МПа     922 non-null    float
 9   Потребление смолы, г/м2           922 non-null    float
 10  Угол нашивки                      922 non-null    int32
 11  Шаг нашивки                       922 non-null    float
 12  Плотность нашивки                 922 non-null    float
dtypes: float64(12), int32(1)
memory usage: 129.5 KB
```



ЦЕНТР ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
МГТУ им. Н.Э. Баумана

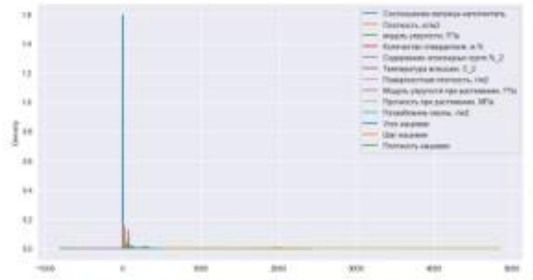
Предобработка данных

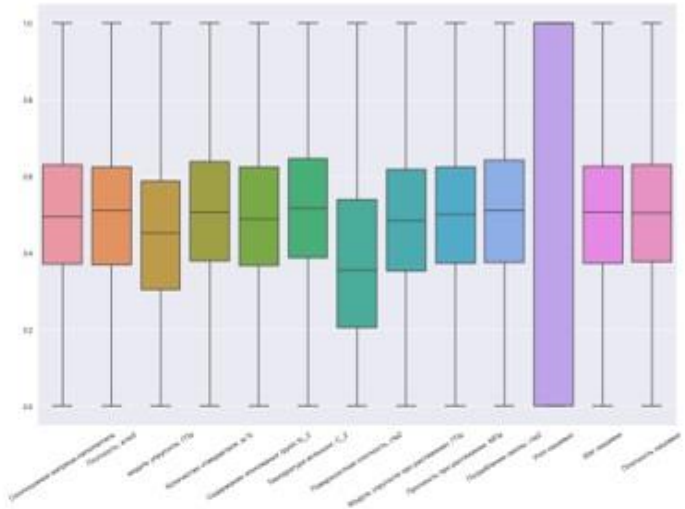
Построение графика плотности ядра

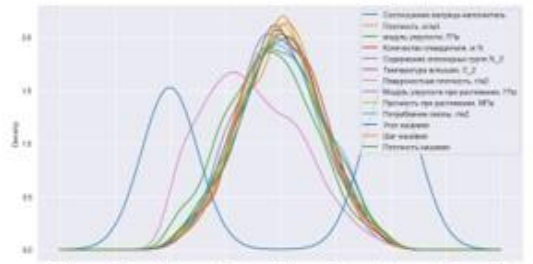
Нормализация данных MinMaxScaler

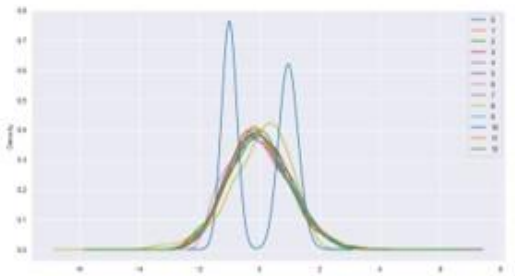
Нормализация данных Normalizer

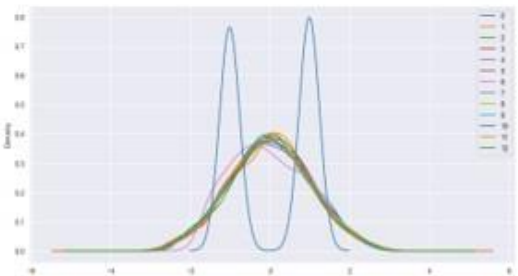
Стандартизация данных StandartScaler











df_standart_1

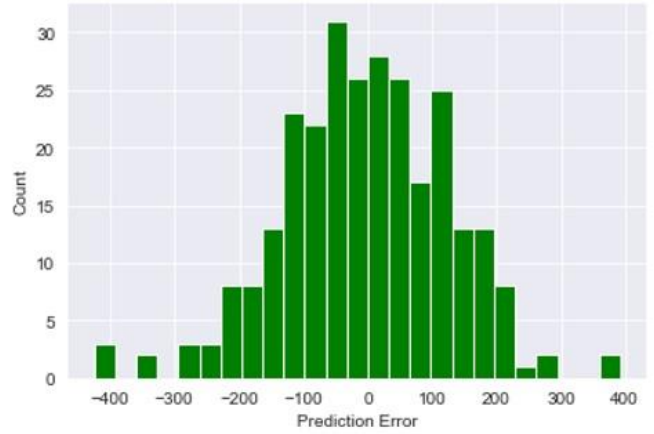
	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
0	-1.196467	0.787037	0.007992	-2.286425	0.647585	-0.039740	-0.971971	-1.092335	1.187925	0.034181	-1.021932	-1.166792	0.219240
1	-1.196467	0.787037	0.007992	0.668092	-0.397291	0.350738	-0.971971	-1.092335	1.187925	0.034181	-1.021932	-0.768833	-0.950227
2	-0.175012	0.787037	0.051553	0.027074	0.028123	-0.039740	-0.971971	-1.092335	1.187925	0.034181	-1.021932	-0.768833	-0.050637
3	-0.178825	0.364514	0.036283	0.027074	0.028123	-0.039740	-0.971971	-1.092335	1.187925	0.034181	-1.021932	-0.768833	0.219240
4	-0.400390	-0.903054	0.216474	0.027074	0.028123	-0.039740	-0.971971	-1.092335	1.187925	0.034181	-1.021932	-0.768833	1.118831

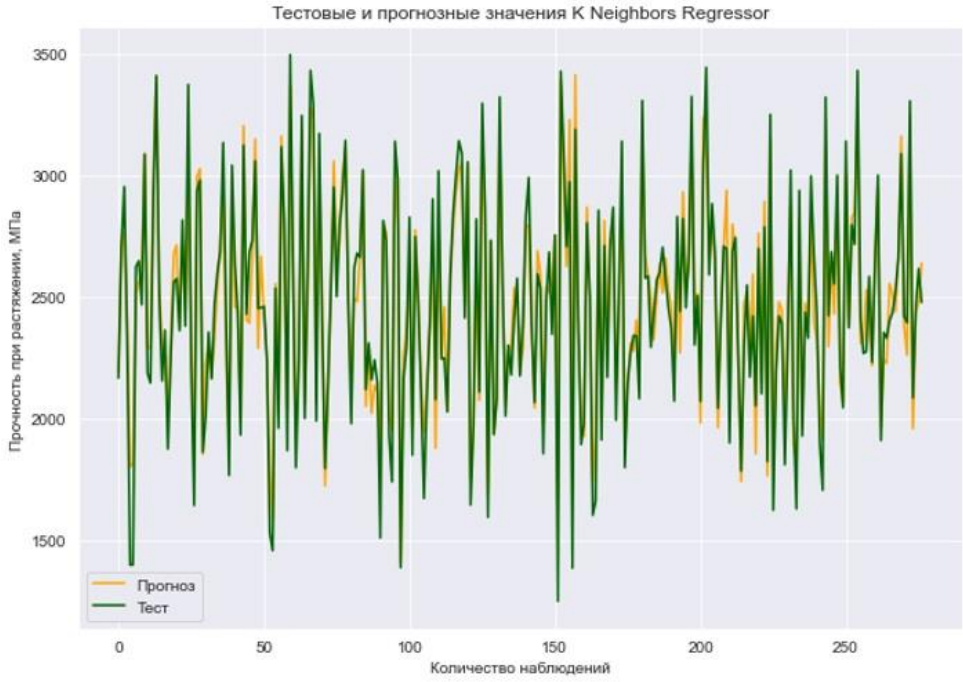
ЦЕНТР ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
МГТУ им. Н.Э. Баумана

Разработка и обучение модели для прогноза прочности при растяжении

Метод К ближайших соседей
Метод опорных векторов
Случайных лес
Линейная регрессия
Градиентный бустинг
Дерево решений
Многослойный перцептрон

- метод опорных векторов;
- случайный лес;
- линейная регрессия;
- градиентный бустинг;
- К-ближайших соседей;
- дерево решений;
- стохастический градиентный спуск;
- многослойный перцептрон;
- Лассо.






```
K Neighbors Regressor  Results Train:
Test score: 0.94
K Neighbors Regressor  Results:
KNN_MAE:  102
KNN_MAPE: 0.04
KNN_MSE: 16723.93
KNN_RMSE:129.32
Test score: 0.92
```

ЦЕНТР ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
МГТУ им. Н.Э. Баумана

Поиск гиперпараметров

Для метода Деревья решений(Random Forest) поиск гиперпараметров методом GridSearchCV с количеством блоков 10

```
pipe = Pipeline([('preprocessing', StandardScaler()), ('regressor', SVR())])
param_grid = [
{'regressor': [SVR()], 'preprocessing': [StandardScaler(), MinMaxScaler(), None],
'regressor__gamma': [0.001, 0.01, 0.1, 1, 10, 100],
'regressor__C': [0.001, 0.01, 0.1, 1, 10, 100]},
{'regressor': [RandomForestRegressor(n_estimators = 100)],
'preprocessing':  [StandardScaler(), MinMaxScaler(), None]},
{'regressor': [LinearRegression()], 'preprocessing':  [StandardScaler(), MinMaxScaler(), None]},
{'regressor': [GradientBoostingRegressor()], 'preprocessing':  [StandardScaler(), MinMaxScaler(), None]},
{'regressor': [KNeighborsRegressor()], 'preprocessing':  [StandardScaler(), MinMaxScaler(), None]},
{'regressor': [DecisionTreeRegressor()], 'preprocessing':  [StandardScaler(), MinMaxScaler(), None]},
{'regressor': [SGDRegressor()], 'preprocessing':  [StandardScaler(), MinMaxScaler(), None]},
{'regressor': [MLPRegressor(random_state = 1, max_iter = 500)], 'preprocessing':  [StandardScaler(), MinMaxScaler(), None]},
{'regressor': [linear_model.Lasso(alpha = 0.1)], 'preprocessing':  [StandardScaler(), MinMaxScaler(), None]},]
grid = GridSearchCV(pipe, param_grid, cv = 10)
grid.fit(x_train_1, np.ravel(y_train_1))
print("Наилучшие параметры:\n{}\n".format(grid.best_params_))
print("Наилучшее значение правильности перекрестной проверки: {:.2f}".format(grid.best_score_))
print("Правильность на тестовом наборе: {:.2f}".format(grid.score(x_test_1, y_test_1)))
```

```
Наилучшие параметры:
{'preprocessing': StandardScaler(), 'regressor': SGDRegressor()}

Наилучшее значение правильности перекрестной проверки: 0.97
Правильность на тестовом наборе: 0.97
```

```
# Проведем поиск  по сетке гиперпараметров с перекрестной проверкой, количество блоков равно 10 (cv = 10), для
#Деревья решений - Decision Tree Regressor - 6
criterion = ['squared_error', 'friedman_mse', 'absolute_error', 'poisson']
splitter = ['best', 'random']
max_depth = [3,5,7,9,11]
min_samples_leaf = [100,150,200]
min_samples_split = [200,250,300]
max_features = ['auto', 'sqrt', 'log2']
param_grid = {'criterion': criterion,
              'splitter': splitter,
              'max_depth': max_depth,
              'min_samples_split': min_samples_split,
              'min_samples_leaf': min_samples_leaf,
              'max_features': max_features}
#Запустим обучение модели. В качестве оценки модели будем использовать коэффициент д
# Если R2<0, это значит, что разработанная модель даёт прогноз даже хуже, чем просто
gs4 = GridSearchCV(dtr, param_grid, cv = 10, verbose = 1, n_jobs =-1, scoring = 'r2'
gs4.fit(x_train_1, y_train_1)
dtr_3 = gs4.best_estimator_
gs.best_params_
```

```
Fitting 10 folds for each of 1080 candidates, totalling 10800 fits
{'algorithm': 'brute', 'n_neighbors': 7, 'weights': 'distance'}
```

```
#Выводим гиперпараметры для оптимальной модели
print(gs4.best_estimator_)
gs1 = gs4.best_estimator_
print(f'R2-score DTR для прочности при растяжении, МПа: {gs4.score(x_test_1, y_test_1).round(3)}')
```

```
DecisionTreeRegressor(criterion='poisson', max_depth=5, max_features='auto',
                      min_samples_leaf=100, min_samples_split=250)
R2-score DTR для прочности при растяжении, МПа: 0.779
```

```
#подставим оптимальные гиперпараметры в нашу модель метода деревья решений
dtr_grid = DecisionTreeRegressor(criterion = 'poisson', max_depth = 7, max_features = 'auto',
                      min_samples_leaf = 100, min_samples_split = 250)
#Обучаем модель
dtr_grid.fit(x_train_1, y_train_1)

predictions_dtr_grid = dtr_grid.predict(x_test_1)
#Оцениваем точность на тестовом наборе
mae_dtr_grid = mean_absolute_error(predictions_dtr_grid, y_test_1)
mae_dtr_grid
```

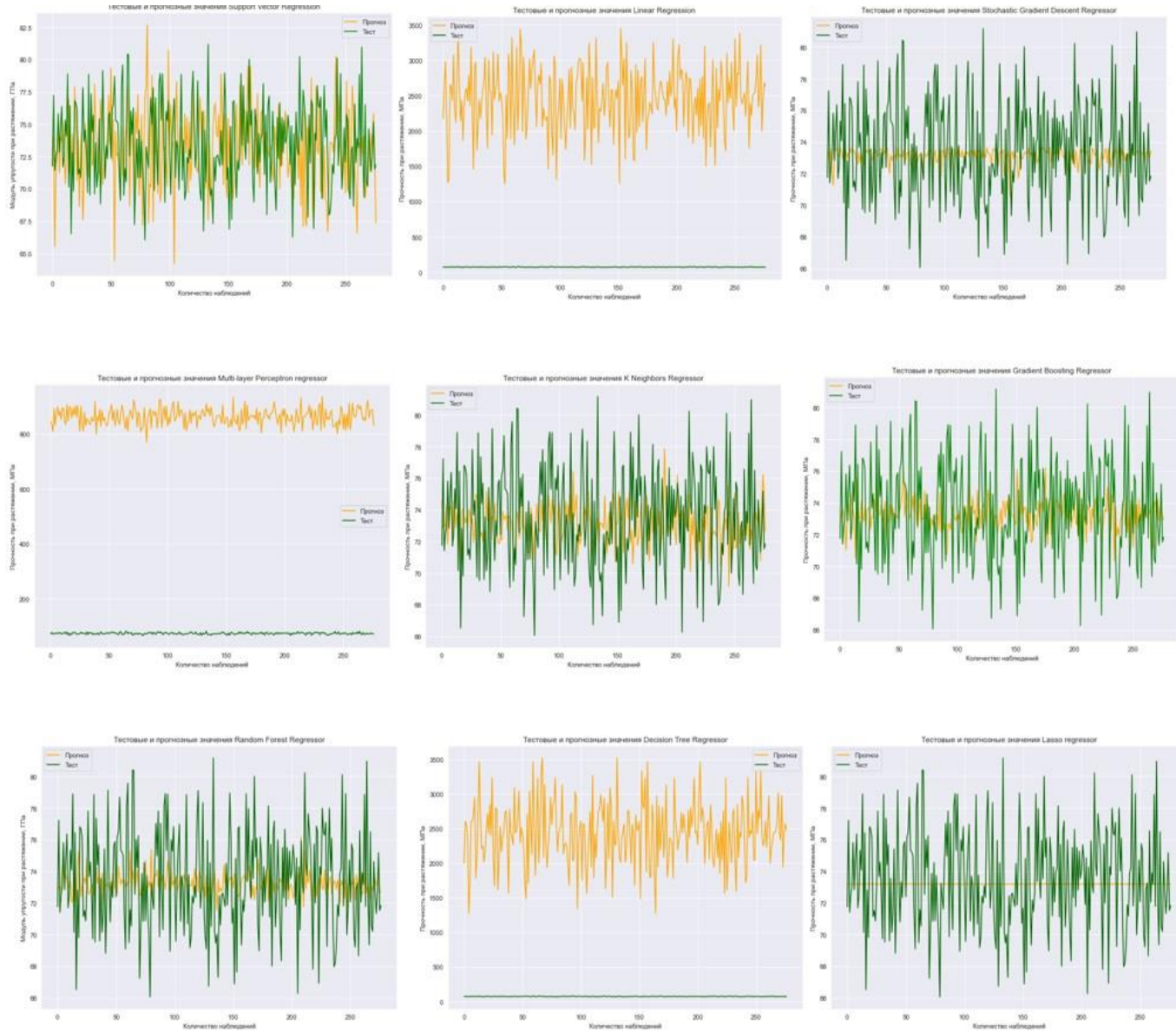
```
168.6249974156563
```

ЦЕНТР ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
МГТУ им. Н.Э. Баумана

Разработка и обучение моделей для прогноза модуль упругости при растяжении

Графики прогнозных значений для методов:

- Метод опорных векторов
- Линейная регрессия
- Стахастический градиентный спуск
- Многослойный перцептрон
- Градиентный бустинг
- Дерево принятия решений
- Лассо



ЦЕНТР ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
МГТУ им. Н.Э. Баумана

Прогноз модуля упругости при растяжении

Для метода Случайный лес

Поиск оптимальных гиперпараметров, обучение модели, оценка точности на тестовом наборе данных

```
pipe2 = Pipeline([('preprocessing', StandardScaler()), ('regressor', SVR())])
param_grid2 = [
{'regressor': [SVR()], 'preprocessing': [StandardScaler(), MinMaxScaler(), None],
'regressor__gamma': [0.001, 0.01, 0.1, 1, 10, 100],
'regressor__C': [0.001, 0.01, 0.1, 1, 10, 100]},
{'regressor': [RandomForestRegressor(n_estimators=100)],
'preprocessing':  [StandardScaler(), MinMaxScaler(), None]},
{'regressor': [LinearRegression()], 'preprocessing':  [StandardScaler(), MinMaxScaler(), None]},
{'regressor': [GradientBoostingRegressor()], 'preprocessing':  [StandardScaler(), MinMaxScaler(), None]},
{'regressor': [KNeighborsRegressor()], 'preprocessing':  [StandardScaler(), MinMaxScaler(), None]},
{'regressor': [DecisionTreeRegressor()], 'preprocessing':  [StandardScaler(), MinMaxScaler(), None]},
{'regressor': [SGDRegressor()], 'preprocessing':  [StandardScaler(), MinMaxScaler(), None]},
{'regressor': [MLPRegressor(random_state=1, max_iter=500)], 'preprocessing':  [StandardScaler(), MinMaxScaler(), None]},
{'regressor': [linear_model.Lasso(alpha=0.1)], 'preprocessing':  [StandardScaler(), MinMaxScaler(), None]},]
grid2 = GridSearchCV(pipe2, param_grid2, cv=10)
grid2.fit(x_train_1, np.ravel(y_train_2))
print("Наилучшие параметры:\n{}\n".format(grid2.best_params_))
print("Наилучшее значение правильности перекрестной проверки: {:.2f}".format(grid2.best_score_))
print("Правильность на тестовом наборе: {:.2f}".format(grid.score(x_test_2, y_test_2)))
```

```
Наилучшие параметры:
{'preprocessing': MinMaxScaler(), 'regressor': SVR(C=100, gamma=1), 'regressor__C': 100, 'regressor__gamma': 1}

Наилучшее значение правильности перекрестной проверки: 0.68
Правильность на тестовом наборе: -79805487.66
```

```
print("Наилучшая модель:\n{}".format(grid.best_estimator_))
```

```
Наилучшая модель:
Pipeline(steps=[('preprocessing', StandardScaler()),
                ('regressor', SGDRegressor())])
```

```
# Проведем поиск  по сетке гиперпараметров с перекрестной проверкой, количество блоков равно
# модели случайного леса - Random Forest Regressor - 2

parametrs = { 'n_estimators': [200, 300],
              'max_depth': [9, 15],
              'max_features': ['auto'],
              'criterion': ['mse'] }
grid21 = GridSearchCV(estimator = rfr2, param_grid  = parametrs, cv=10)
grid21.fit(x_train_2, y_train_2)
```

```
GridSearchCV(cv=10,
             estimator=RandomForestRegressor(max_depth=7, n_estimators=15,
                                             random_state=33),
             param_grid={'criterion': ['mse'], 'max_depth': [9, 15],
                         'max_features': ['auto'], 'n_estimators': [200, 300]})
```

```
#Выводим гиперпараметры для оптимальной модели
print(grid21.best_estimator_)
knr_u = grid21.best_estimator_
print(f'R2-score RFR для модуля упругости при растяжении: {knr_u.score(x_test_2, y_test_2).round(3)}')
```

```
RandomForestRegressor(criterion='mse', max_depth=9, n_estimators=300,
                      random_state=33)
R2-score RFR для модуля упругости при растяжении: -0.035
```

	Регрессор	MAE
0	Support Vector	78.477914
1	RandomForest	76.589025
2	Linear Regression	61.986894
3	GradientBoosting	64.728717
4	KNeighbors	102.030259
5	DecisionTree	107.158013
6	SGD	181.624450
7	MLP	1808.547264
8	Lasso	69.474334
9	RandomForest_GridSearchCV	67.603567
10	KNeighbors_GridSearchCV	99.281694
11	DecisionTree_GridSearchCV	168.624997
12	RandomForest1_GridSearchCV	2.627032

ЦЕНТР ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
МГТУ им. Н.Э. Баумана

Нейронная сеть для соотношения «матрица-наполнитель»

- Создание нейронной сети
- Нормализация данных
- Обучение на обучающей выборке
- Проверка на тестовой выборке
- Проверка потери модели
- Построение графика потерь

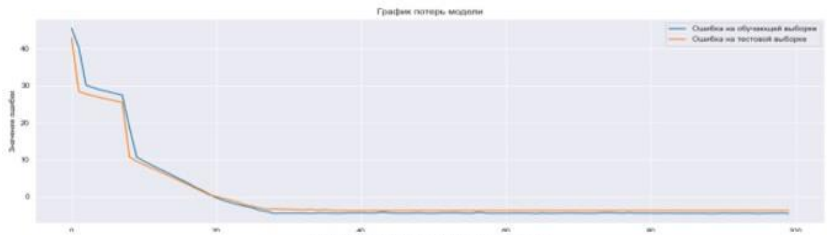
```python
def create_model(lyrs=[32], act='softmax', opt='SGD', dr=0.1):

    seed = 7
    np.random.seed(seed)
    tf.random.set_seed(seed)

    model = Sequential()
    model.add(Dense(lyrs[0], input_dim=x_train.shape[1], activation=act))
    for i in range(1,len(lyrs)):
        model.add(Dense(lyrs[i], activation=act))

    model.add(Dropout(dr))
    model.add(Dense(3, activation='tanh'))  # выходной слой

    model.compile(loss='binary_crossentropy', optimizer=opt, metrics=['mae', 'accuracy'])

    return model
```

```
Model: "sequential_405"
_________________________________________________________________
 Layer (type)                Output Shape              Param #
=================================================================
 dense_1077 (Dense)          (None, 128)               1664

 dense_1078 (Dense)          (None, 64)                8256

 dense_1079 (Dense)          (None, 16)                1040

 dense_1080 (Dense)          (None, 3)                 51

 dropout_405 (Dropout)       (None, 3)                 0

 dense_1081 (Dense)          (None, 3)                 12

=================================================================
Total params: 11,023
Trainable params: 11,023
Non-trainable params: 0
_________________________________________________________________
None
```

```python
# построение окончательной модели
model = create_model(lyrs=[128, 64, 16, 3], dr=0.05)

print(model.summary())
```

```
Best: 0.001538 using {'batch_size': 4, 'epochs': 10}
0.001538 (0.004615) with: {'batch_size': 4, 'epochs': 10}
0.001538 (0.004615) with: {'batch_size': 4, 'epochs': 50}
0.001538 (0.004615) with: {'batch_size': 4, 'epochs': 100}
0.001538 (0.004615) with: {'batch_size': 4, 'epochs': 200}
0.001538 (0.004615) with: {'batch_size': 4, 'epochs': 300}
```

```
Best: 0.004639 using {'lyrs': [128, 64, 16, 3]}
0.001538 (0.004615) with: {'lyrs': [8]}
0.001538 (0.004615) with: {'lyrs': [16, 4]}
0.001538 (0.004615) with: {'lyrs': [32, 8, 3]}
0.001538 (0.004615) with: {'lyrs': [12, 6, 3]}
0.001538 (0.004615) with: {'lyrs': [64, 64, 3]}
0.004639 (0.009877) with: {'lyrs': [128, 64, 16, 3]}
```




```
Best: 0.001538 using {'act': 'softmax'}
0.001538 (0.004615) with: {'act': 'softmax'}
0.001538 (0.004615) with: {'act': 'softplus'}
0.001538 (0.004615) with: {'act': 'softsign'}
0.001538 (0.004615) with: {'act': 'relu'}
0.001538 (0.004615) with: {'act': 'tanh'}
0.001538 (0.004615) with: {'act': 'sigmoid'}
0.001538 (0.004615) with: {'act': 'hard_sigmoid'}
0.001538 (0.004615) with: {'act': 'linear'}
```


```
Best: 0.001538 using {'dr': 0.0}
0.001538 (0.004615) with: {'dr': 0.0}
0.001538 (0.004615) with: {'dr': 0.01}
0.001538 (0.004615) with: {'dr': 0.05}
0.001538 (0.004615) with: {'dr': 0.1}
0.001538 (0.004615) with: {'dr': 0.2}
0.001538 (0.004615) with: {'dr': 0.3}
0.001538 (0.004615) with: {'dr': 0.5}
```

ЦЕНТР ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
МГТУ им. Н.Э. Баумана

Вторая нейронная сеть для соотношения «матрица-наполнитель»

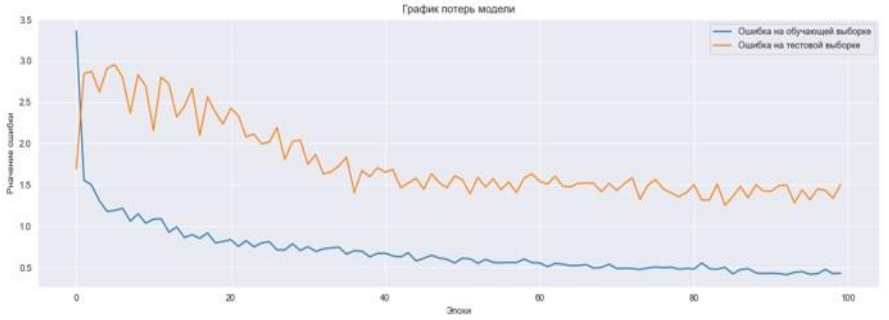
- Создание второй нейронной сети
- Нормализация данных
- Разбиение выборки на обучающую и тестовую
- Обучение модели
- Проверка на потери модели
- Оценка модели

```
# Сконфигурируем модель, зададим слои

model = tf.keras.Sequential([x_train_n, layers.Dense(128, activation='relu'),
                                        layers.Dense(128, activation='relu'), Dropout(0.8),
                                        layers.Dense(128, activation='relu'),
                                        layers.Dense(64, activation='relu'),
                                        layers.Dense(32, activation='relu'),
                                        layers.Dense(16, activation='relu'),
                                        layers.Dense(1)
                            ])

model.compile(optimizer = tf.keras.optimizers.Adam(0.001), loss = 'mean_squared_error', metrics = [tf.keras.metrics.RootMeanSquaredError()])
# Посмотрим на архитектуру модели

model.summary()
```

```
Model: "sequential"
_________________________________________________________________
Layer (type)                 Output Shape              Param #
=================================================================
normalization (Normalizatio  (None, 12)               25
n)

dense (Dense)                (None, 128)               1664

dense_1 (Dense)              (None, 128)               16512

dropout (Dropout)            (None, 128)               0

dense_2 (Dense)              (None, 128)               16512

dense_3 (Dense)              (None, 64)                8256

dense_4 (Dense)              (None, 32)                2080

dense_5 (Dense)              (None, 16)                528

dense_6 (Dense)              (None, 1)                 17

=================================================================
Total params: 45,594
Trainable params: 45,569
Non-trainable params: 25
_________________________________________________________________
```

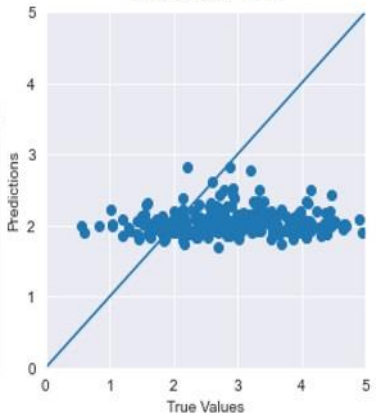
```
model.evaluate(x_test, y_test)
```

```
9/9 [==============================] - 0s 3ms/step - loss: 1.5056 - root_mean_squared_error: 1.2270
[1.5056190490722656, 1.227036714553833]
```




```
# Обучим модель

model_hist = model.fit(
    x_train,
    y_train,
    epochs = 100,
    verbose = 1,
    validation_split = 0.3)
```

```
Model Results:
Model_MAE:  1
Model_MAPE: 0.37
Test score: 1.25
```



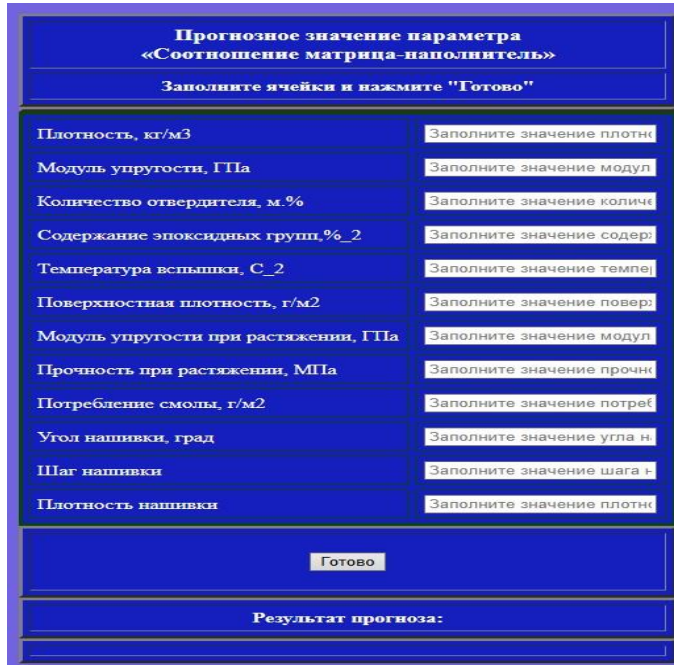
ЦЕНТР ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
МГТУ им. Н.Э. Баумана

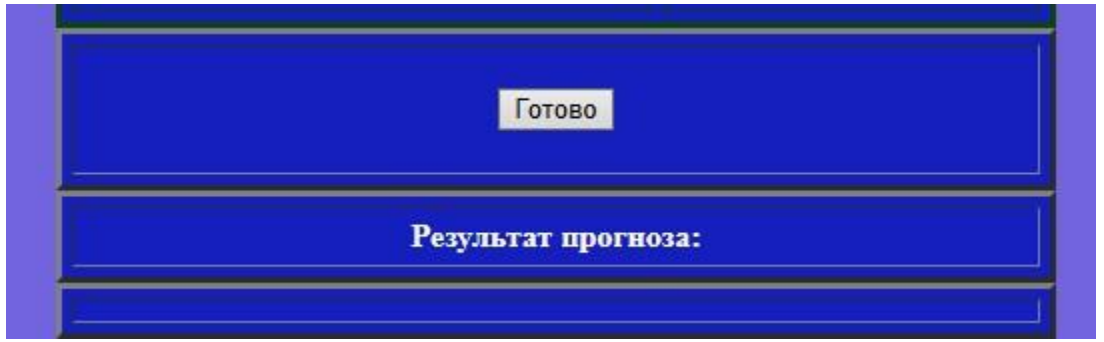
Создание приложения и сохранения на Github.com

Создал веб-приложение на фреймворке Flask

На выходе пользователь получает результат прогноза

Загрузка материалов на Github.com





ЦЕНТР ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
МГТУ им. Н.Э. Баумана

Спасибо за внимание

ЦЕНТР
ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО
ОБРАЗОВАНИЯ
МГТУ им. Н.Э. Баумана

do.bmstu.ru