ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА
по курсу «Data Science»

ЦЕНТР ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
МГТУ им. Н.Э. Баумана

Прогнозирование конечных свойств композиционных материалов

Бойко Татьяна Сергеевна

ЦЕНТР ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
МГТУ им. Н.Э. Баумана

Этапы исследования

1. Разведочный анализ и предобработка данных
2. Подготовка данных для обучения и тестирования модели
3. Разработка и обучение модели, оценка результатов
4. Нейронная сеть для рекомендации «Соотношение матрица-наполнитель»
5. Создание приложения для расчета параметра «Соотношение матрица-наполнитель»

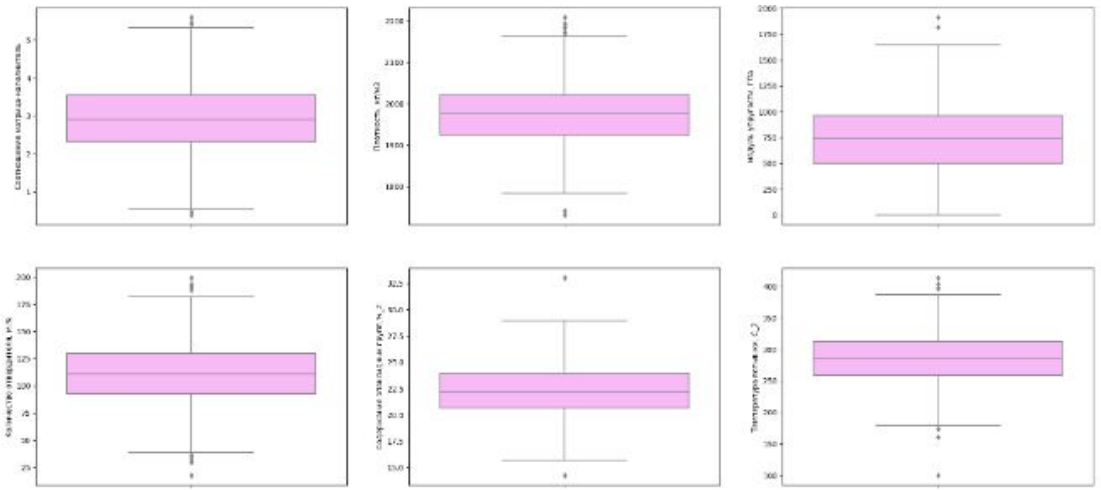
Цель работы: создать и обучить модель на данных о структуре и свойствах материалов, и затем использовать её для прогнозирования.

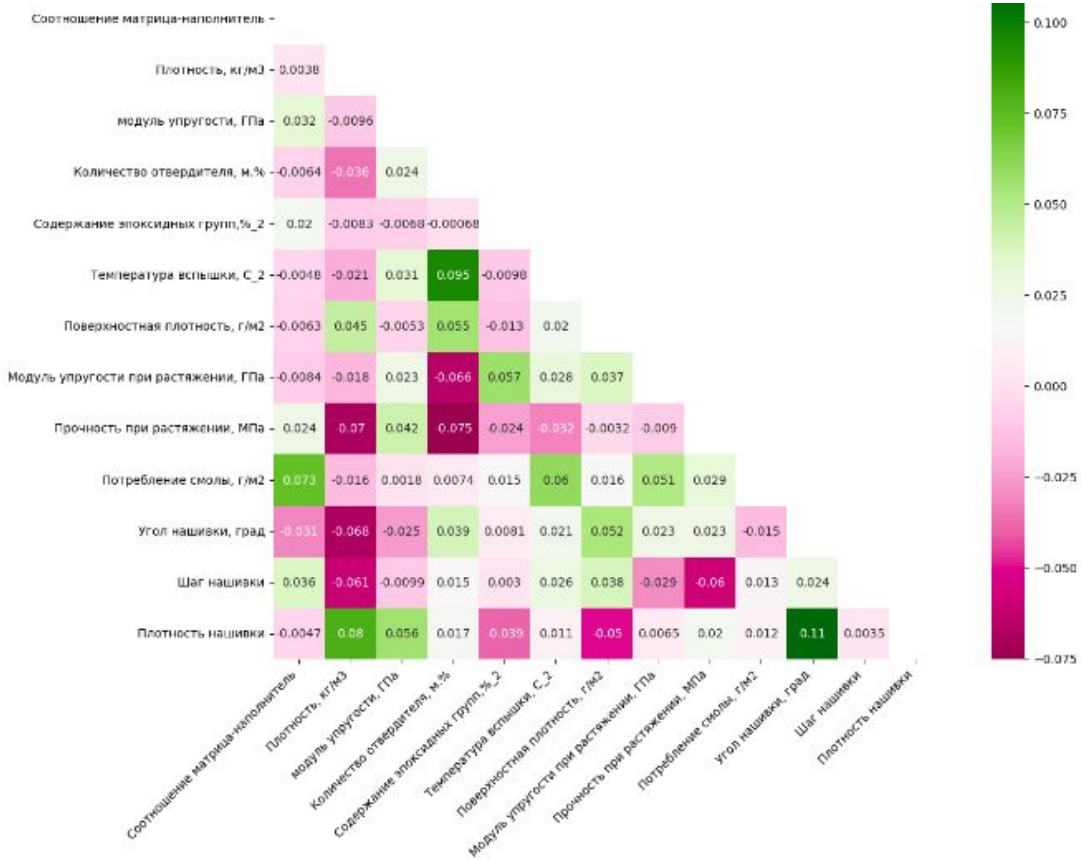
Актуальность: созданные прогнозные модели помогут сократить количество проводимых испытаний, а также пополнить базу данных материалов возможными новыми характеристиками материалов, и цифровыми двойниками новых композитов.

ЦЕНТР ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
МГТУ им. Н.Э. Баумана

Разведочный анализ, предобработка данных

	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, град	1023.0	44.252199	45.015793	0.000000	0.000000	0.000000	90.000000	90.000000
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





ЦЕНТР ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
МГТУ им. Н.Э. Баумана

Подготовка данных и обучение модели

Используем метод межквартильного диапазона для определения и удаления выбросов в каждой переменной,

```
Q1=df.quantile(q=.25)
Q3=df.quantile(q=.75)
IQR=df.apply(stats.iqr)

df_clean = df[~((df < (Q1-1.5 *IQR)) | (df > (Q3+1.5 *IQR))).any(axis=1)]

df_clean.shape
```

```
(936, 13)
```

Выполним нормализацию данных

```
df_norm = df_clean.copy()
```

```
scaler_norm = MinMaxScaler()
scaler_norm.fit(df_norm)
df_norm = pd.DataFrame(data=scaler_norm.transform(df_norm), columns=df_norm.columns)
```

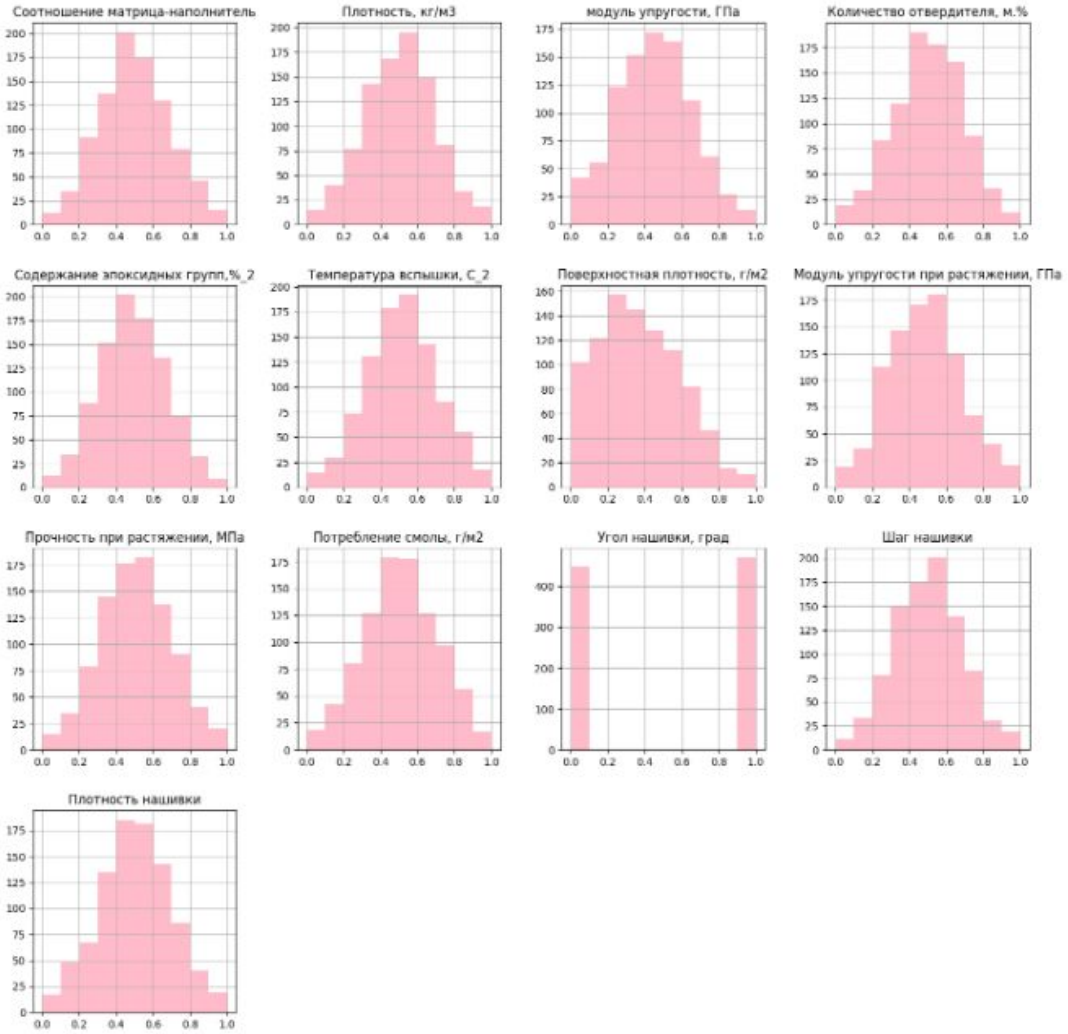
Выполним стандартизацию данных

```
df_std = df_clean.copy()
```

```
scaler_std = StandardScaler()
scaler_std.fit(df_std)
df_std = pd.DataFrame (data=scaler_std.transform(df_std), columns=df_std.columns)
```

```
df_std.head()
```

	Соотношение матрица-наполнитель	Плотность, кг/м3	модуль упругости, ГПа	Количество отвердителя, м.%	Содержание эпоксидных групп,%_2	Температура вспышки, С_2	Поверхностная плотность, г/м2	Модуль упругости при растяжении, ГПа	Прочность при растяжении, МПа	Потребление смолы, г/м2	Угол нашивки, град	н
0	-1.195844	0.787334	0.008829	-2.285328	0.647313	-0.040478	-0.974546	-1.092818	1.194636	0.035721	-1.023067	-1
1	-1.195844	0.787334	0.008829	0.667608	-0.397000	0.349890	-0.974546	-1.092818	1.194636	0.035721	-1.023067	-0
2	-0.174943	0.787334	0.052380	0.026933	0.028185	-0.040478	-0.974546	-1.092818	1.194636	0.035721	-1.023067	-0
3	-0.178754	0.364971	0.037113	0.026933	0.028185	-0.040478	-0.974546	-1.092818	1.194636	0.035721	-1.023067	-0
4	-0.400199	-0.902116	0.217265	0.026933	0.028185	-0.040478	-0.974546	-1.092818	1.194636	0.035721	-1.023067	-0



ЦЕНТР ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
МГТУ им. Н.Э. Баумана

Поиск гиперпараметров по сетке с перекрестной проверкой, оценка результатов

```
lasso_params = {'alpha': [0.5, 1.5, 5, 10],
                'max_iter': [400, 700, 1200, 2000]}
GSCV_lasso_e = GridSearchCV(lasso, lasso_params, n_jobs=-1, cv=10)
GSCV_lasso_e.fit(X_train_e, y_train_e)
GSCV_lasso_e.best_params_
print(f'Лучшая модель на кросс-валидации с параметрами{GSCV_lasso_e.best_params_} и результатом{GSCV_lasso_e.best_score_:.4f}')
```

```
Лучшая модель на кросс-валидации с параметрами {'alpha': 10, 'max_iter': 400} и результатом -0.0294
```

```
GSCV_lasso_s = GridSearchCV(lasso, lasso_params, n_jobs=-1, cv=10)
GSCV_lasso_s.fit(X_train_s, y_train_s)
GSCV_lasso_s.best_params_
print(f'Лучшая модель на кросс-валидации с параметрами{GSCV_lasso_s.best_params_} и результатом{GSCV_lasso_s.best_score_:.4f}')
```

```
Лучшая модель на кросс-валидации с параметрами {'alpha': 10, 'max_iter': 400} и результатом -0.0354
```

```
best_model_lasso_e = GSCV_lasso_e.best_estimator_
best_model_lasso_s = GSCV_lasso_s.best_estimator_
```

```
print(best_model_lasso_e)

print(f'R2-score Lasso для Модуля упругости при растяжении, МПа: {best_model_lasso_e.score(X_test_e, y_test_e).round(3)}')
```

```
Lasso(alpha=10, max_iter=400)
R2-score Lasso для Модуля упругости при растяжении, МПа: -0.002
```

	MSE train	MSE test	R2 train	R2 test	MAE train	MAE test	MSE train	MSE test	R2 train	R2 test	MAE train	MAE test
RandomForestRegressor	6,9005	9,2088	0,2483	-0,0145	2,1325	2,4773	141389,7205	224732,5402	0,2756	0,0013	300,0945	384,4820
RandomForestRegressor_best	6,8874	9,1510	0,2498	-0,0082	2,0923	2,4501	150521,6349	226238,0916	0,2288	-0,0054	305,7443	384,2891
RandomForestRegressor_norm	0,0290	0,0384	0,2502	-0,0054	0,1357	0,1588	0,0061	0,0403	0,8226	-0,0193	0,0623	0,1625
Lasso	9,1087	9,0485	0,0078	0,0031	2,4409	2,4471	191764,4221	224528,2006	0,0175	0,0022	348,1372	384,1102
Lasso_best	9,1642	9,0960	0,0017	-0,0021	2,4453	2,4543	191887,4816	223679,5537	0,0169	0,0060	348,3619	383,0815
Lasso_norm	0,0387	0,0383	0,0000	-0,0009	0,1587	0,1591	0,0343	0,0395	0,0000	-26,9966	0,1469	0,1607
DecisionTreeRegressor	0,0000	18,7589	1,0000	-1,0667	0,0000	3,5058	0,0000	412531,9984	1,0000	-0,8332	0,0000	505,6368
DecisionTreeRegressor_best	8,6243	9,7378	0,0606	-0,0728	2,3382	2,5229	184036,1737	229794,8330	0,0571	-0,0212	332,8734	386,5286
DecisionTreeRegressor_norm	0,0363	0,0410	0,0606	-0,0728	0,1517	0,1637	0,0323	0,0403	0,0571	-0,0212	0,1395	0,1620
KNeighborsRegressor_best	9,0767	9,2401	0,0113	-0,0180	2,4322	2,4806	190223,9471	225364,1789	0,0254	-0,0015	346,2832	385,7366
KNeighborsRegressor_norm	0,0385	0,0382	0,0055	0,0010	0,1584	0,1591	0,0326	0,0406	0,0488	-0,0276	0,1435	0,1636
SGDRegressor_best	16,4760	15,3740	-0,7947	-0,6938	3,2687	3,2256	216378,0788	263885,3112	-0,1086	-0,1727	368,6177	417,0691
SGDRegressor_norm	0,0387	0,0383	-0,0002	-0,0019	0,1588	0,1591	0,0344	0,0396	-0,0031	-0,0013	0,1473	0,1611
Ridge_best	9,0739	9,0440	0,0116	0,0036	2,4419	2,4490	191839,1980	223790,0397	0,0172	0,0055	348,3967	383,4161
Ridge_norm	0,0382	0,0382	0,0116	0,0011	0,1582	0,1593	0,0338	0,0394	0,0136	0,0026	0,1460	0,1608

Все примененные модели не справились с задачей, результат неудовлетворительный.

Скорее всего, проблема связана с недостатком вводных данных, использованными подходами, инструментами и методами, а также необходимостью дополнительных исследований, включая консультации экспертов.

ЦЕНТР ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
МГТУ им. Н.Э. Баумана

Нейронная сеть для рекомендации «Соотношение матрица-наполнитель»

```
model2 = Sequential(x_train_n)

model2.add(Dense(128))
model2.add(BatchNormalization())
model2.add(LeakyReLU())
model2.add(Dense(128, activation='selu'))
model2.add(BatchNormalization())
model2.add(Dense(64, activation='selu'))
model2.add(BatchNormalization())
model2.add(Dense(32, activation='selu'))
model2.add(BatchNormalization())
model2.add(LeakyReLU())
model2.add(Dense(16, activation='selu'))
model2.add(BatchNormalization())
model2.add(Dense(1))
model2.add(Activation('selu'))
```

```
early_model2 = EarlyStopping(monitor='val_loss', min_delta=0, patience=10, verbose=1, mode='auto')
```

```
model2.compile(optimizer=tf.optimizers.SGD(learning_rate=0.02, momentum=0.5), loss='mean_absolute_error')
```

```
%%time
history2 = model2.fit(
    x_train,
    y_train,
    batch_size = 64,
    epochs=100,
    verbose=1,
    validation_split = 0.2,
    callbacks = [early_model2]
    )
```

```
model_loss_plot(history2)
```

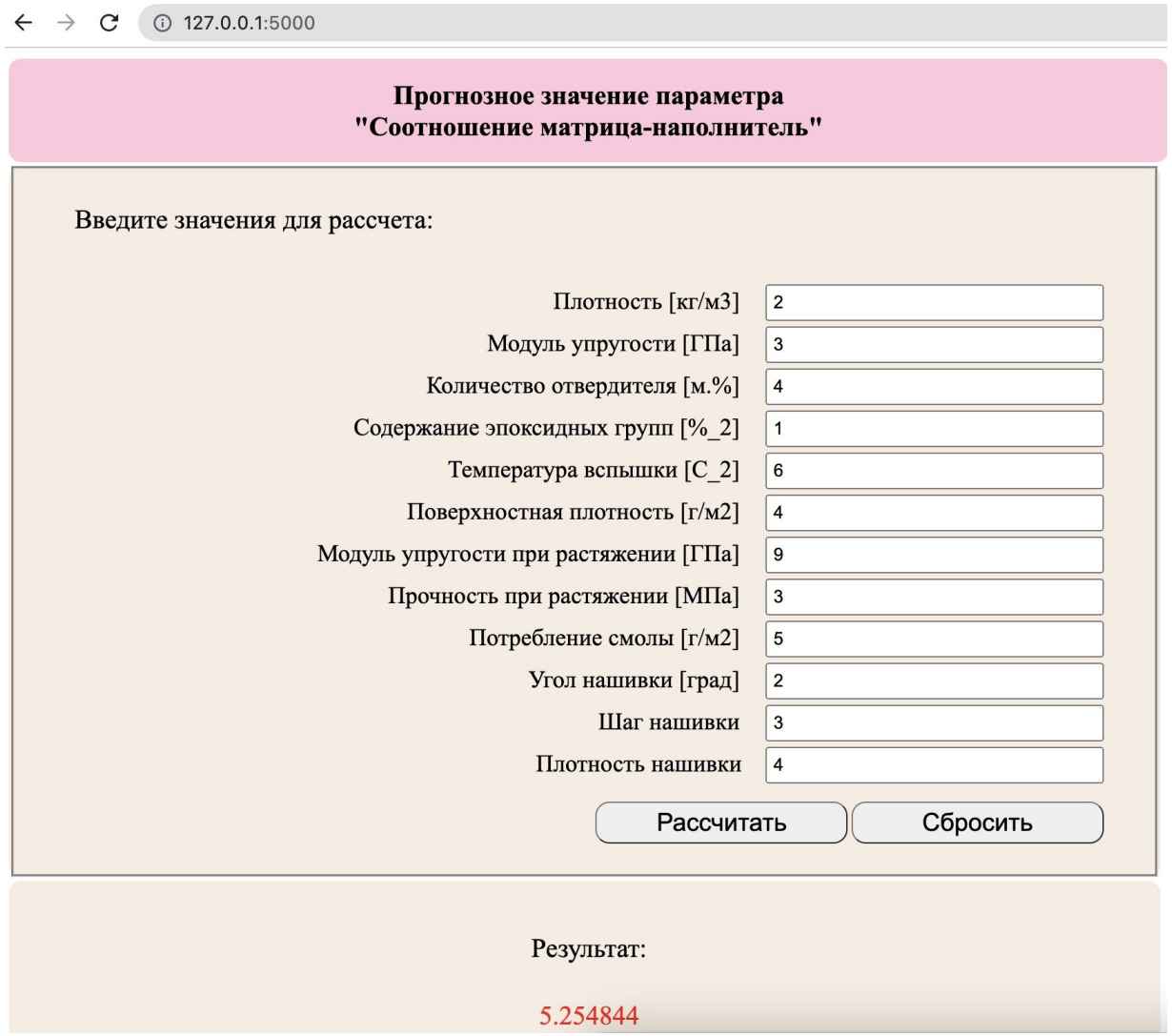
Все нейросети показали схожий результат с ошибкой MAE чуть меньшей, чем среднее отклонение.

ЦЕНТР ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
МГТУ им. Н.Э. Баумана

Разработка приложения

```python
def mn_prediction(params):
    #загружаем нормализатор входных значений (вводимых параметров)
    scaler_in_mn = pickle.load(open('models/scaler_in_mn.pkl', 'rb'))
    #загружаем модель расчёта
    # model = tf.keras.models.load_model('models/net_mn')
    model = pickle.load(open('models/best_model_mn.pkl', 'rb'))
    #загружаем первую часть денормализатора
    scaler_out_mn1 = pickle.load(open('models/scaler_out_mn1.pkl', 'rb'))
    #загружаем вторую часть денормализатора
    scaler_out_mn2 = pickle.load(open('models/scaler_out_mn2.pkl', 'rb'))
    pred = model.predict(scaler_in_mn.transform([params]))
    #выдаём предсказание денормализованного вида, то есть не трансформированное значение предсказания
    pred_out = pred * scaler_out_mn1 + scaler_out_mn2
    return pred_out
```

На выходе пользователь получает результат прогноза для значения параметра «Соотношение матрица – наполнитель».



ЦЕНТР
ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО
ОБРАЗОВАНИЯ
МГТУ им. Н.Э. Баумана

do.bmstu.ru