Образовательный центр МГТУ им. Н.Э. Баумана

Выпускная квалификационная работа по курсу "Data Science"

Слушатель: Яппарова Вилена Батыровна

Тема: Прогнозирование конечных свойств новых материалов (композиционных материалов)

Постановка задачи

- изучить предметную область
- провести разведочный анализ данных
- разделить данные на тренировочную и тестовую выборки
- выполнить препроцессинг (предобаботку)
- выбрать базовую модель и модели для подбора
- сравнить модели с гиперпараметрами по умолчанию
- подобрать гиперпараметры с помощью с помощью поиска по сетке с перекрестной проверкой
- сравнить модели после подбора гиперпараметров и выбрать лучшую
- сравнить качество лучшей и базовой моделей на тестовой выборке
- сравнить качество лучшей модели на тренировочной и тестовой выборке

Разведочный анализ данных

X_bp (матрица из базальтопластика):

- признаков: 10 и индекс
- строк: 1023

X_nup (наполнитель из углепластика):

- признаков: 3 и индекс
- строк: 1040

Объединение с типом INNER по индексу, получилось:

- признаков: 13
- строк: 1023

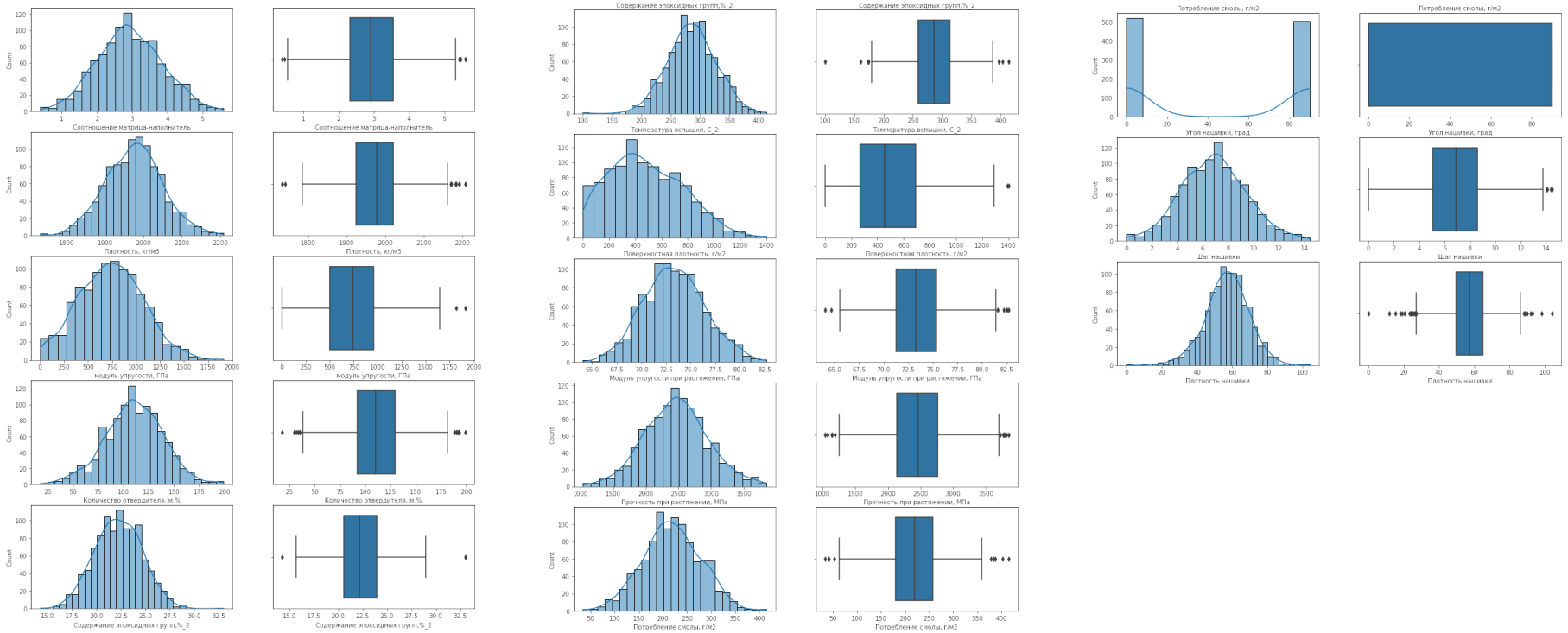
Разведочный анализ данных

Название	Файл	Тип данных	Непустых значений	Уникальных значений
Соотношение матрица-наполнител	X_bp	float64	1023	1014
Плотность, кг/м3	X_bp	float64	1023	1013
модуль упругости, ГПа	X_bp	float64	1023	1020
Количество отвердителя, м.%	X_bp	float64	1023	1005
Содержание эпоксидных групп,%_2	X_bp	float64	1023	1004
Температура вспышки, С_2	X_bp	float64	1023	1003
Поверхностная плотность, г/м2	X_bp	float64	1023	1004
Модуль упругости при растяжении, ГПа	X_bp	float64	1023	1004
Прочность при растяжении, МПа	X_bp	float64	1023	1004
Потребление смолы, г/м2	X_bp	float64	1023	1003
Угол нашивки, град	X_nup	float64	1023	2
Шаг нашивки	X_nup	float64	1023	989
Плотность нашивки	X_nup	float64	1023	988

	Среднее	Стандартное отклонение	Минимум	Максимум	Медиана
Соотношение матрица-наполнитель	2.9304	0.9132	0.3894	5.5917	2.9069
Плотность, кг/м3	1975.7349	73.7292	1731.7646	2207.7735	1977.6217
модуль упругости, ГПа	739.9232	330.2316	2.4369	1911.5365	739.6643
Количество отвердителя, м.%	110.5708	28.2959	17.7403	198.9532	110.5648
Содержание эпоксидных групп, %_2	22.2444	2.4063	14.2550	33.0000	22.2307
Температура вспышки, С_2	285.8822	40.9433	100.0000	413.2734	285.8968
Поверхностная плотность, г/м2	482.7318	281.3147	0.6037	1399.5424	451.8644
Модуль упругости при растяжении, ГПа	73.3286	3.1190	64.0541	82.6821	73.2688
Прочность при растяжении, МПа	2466.9228	485.6280	1036.8566	3848.4367	2459.5245
Потребление смолы, г/м2	218.4231	59.7359	33.8030	414.5906	219.1989
Угол нашивки, град	44.2522	45.0158	0.0000	90.0000	0.0000
Шаг нашивки	6.8992	2.5635	0.0000	14.4405	6.9161
Плотность нашивки	57.1539	12.3510	0.0000	103.9889	57.3419

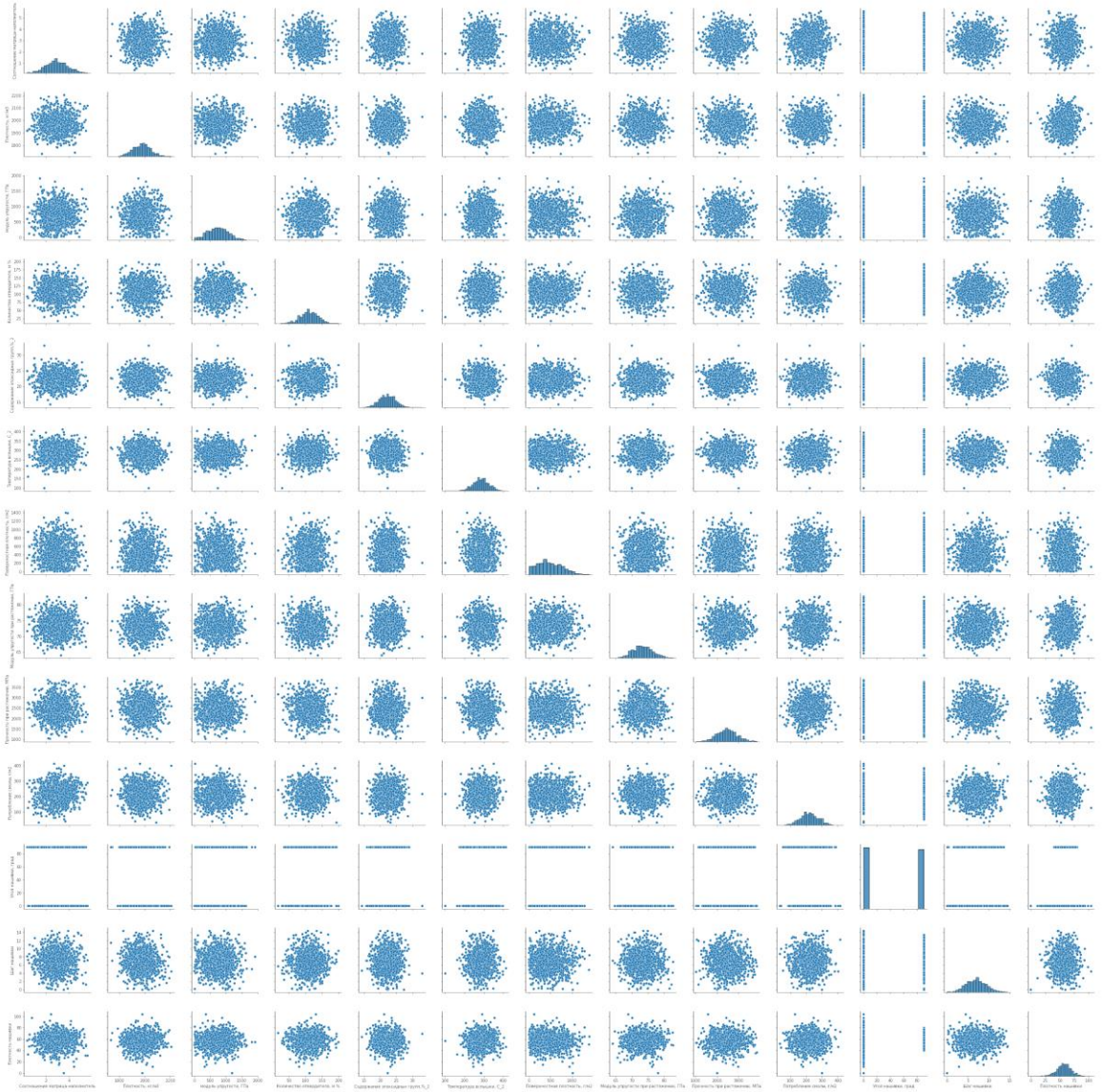
Пропусков нет

Гистограммы распределения и диаграммы “ящик с усами”



- Большинство — количественные, вещественные, положительные, нормально распределенные
- Угол нашивки — категориальный, бинарный

Попарные графики рассеяния точек



- Выбросы есть
- Зависимостей нет

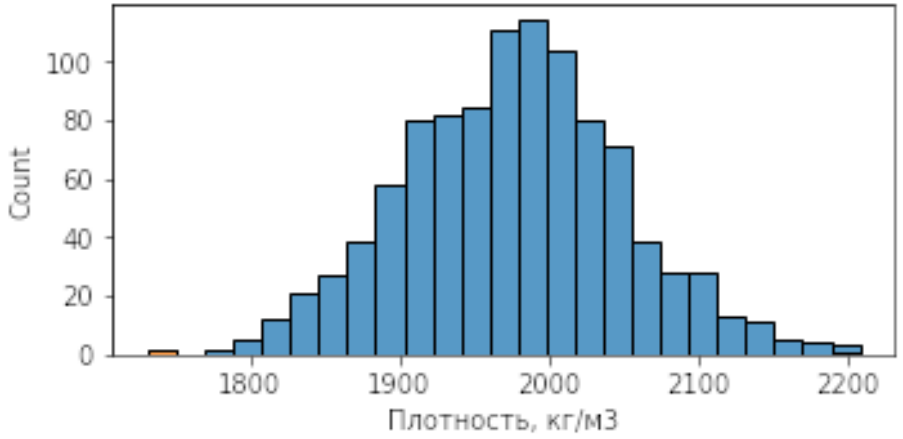
Выбросы

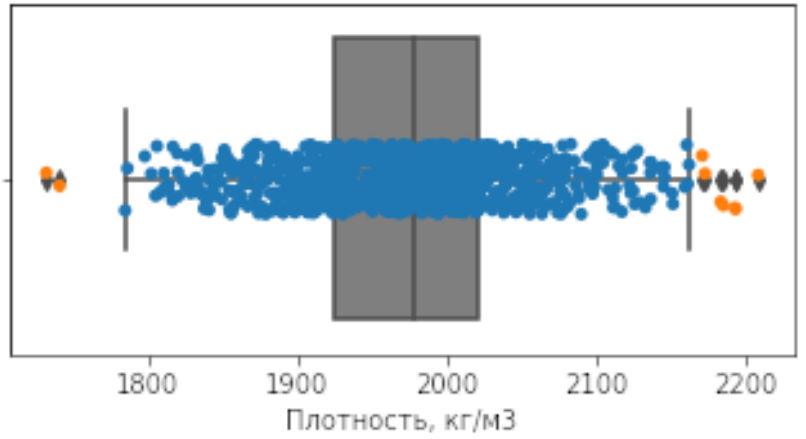
Найдено:

- методом 3-х сигм — 24 выброса
- методом межквартильных расстояний — 93 выброса

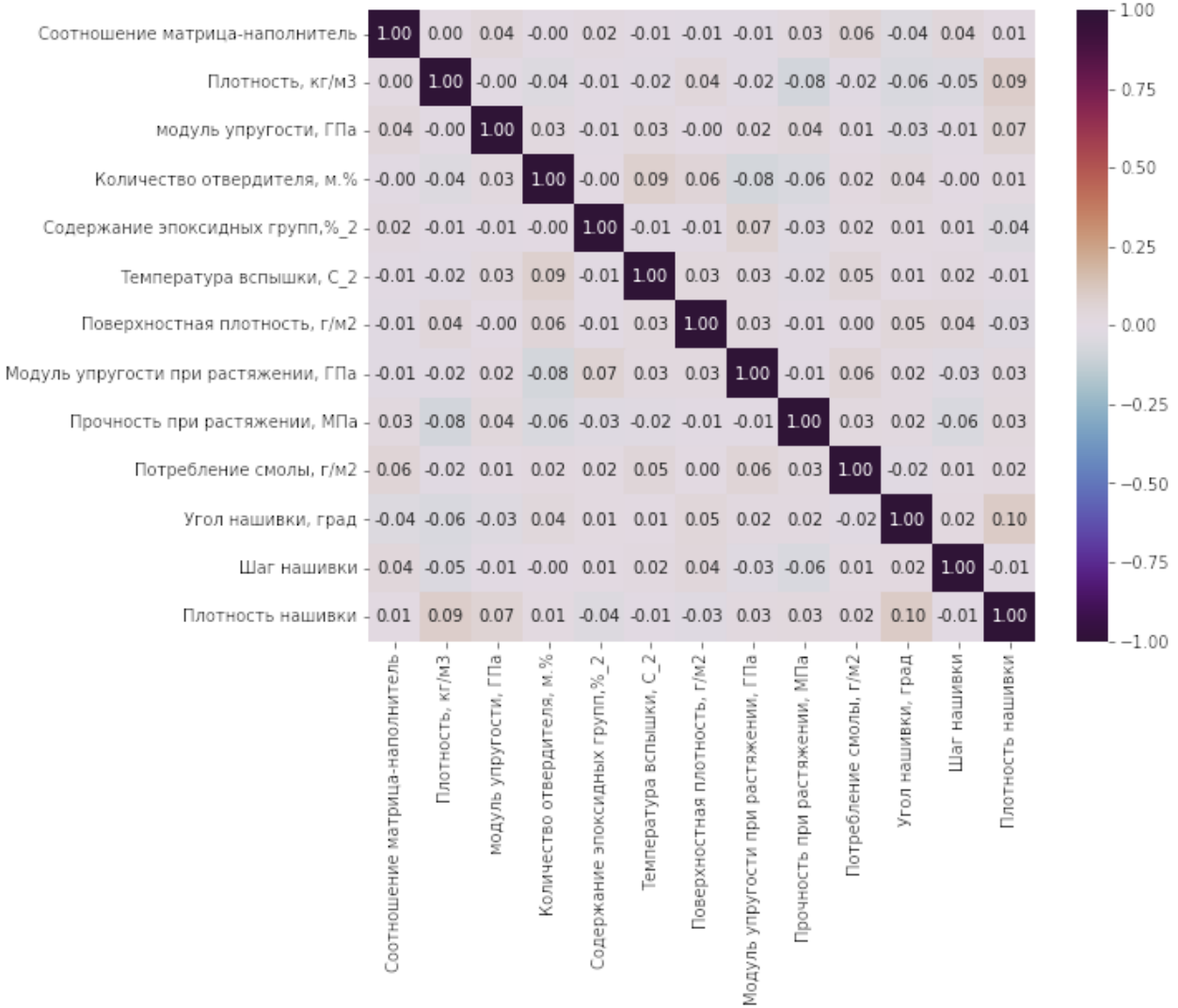
Удалить

осталось 1000 строк



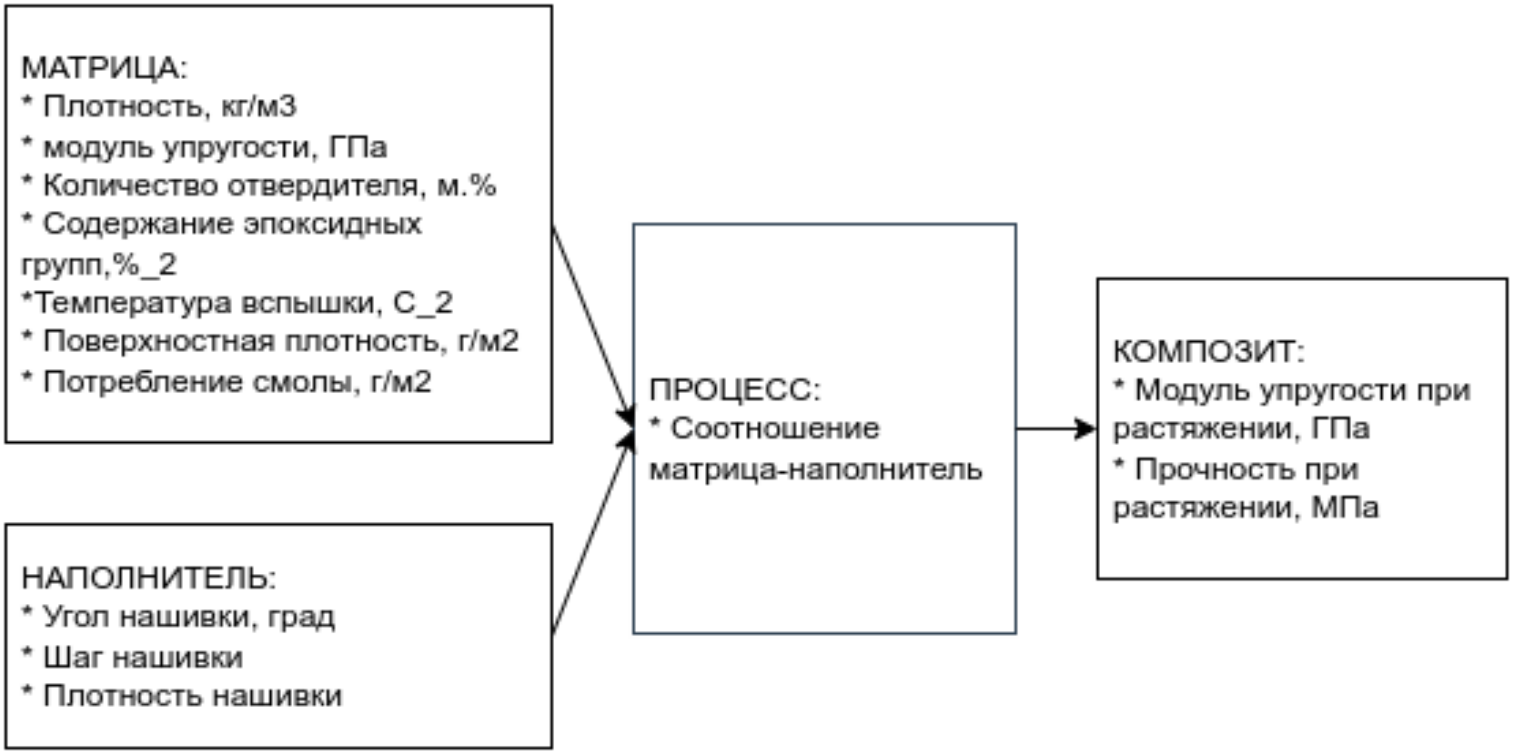


Матрица корреляции



Линейной зависимости нет

Предметная область: композитные материалы



Выходные переменные

```
# Описательная статистика выходной переменной
```

	Модуль упругости при растяжении, ГПа
min	64.054061
max	82.682051
mean	73.354026
std	3.066086

```
# Описательная статистика выходной переменной
```

	Прочность при растяжении, МПа
min	1071.123751
max	3848.436732
mean	2468.178562
std	487.297434

```
# Описательная статистика выходной переменной
```

	Соотношение матрица-наполнитель
min	0.389403
max	5.455566
mean	2.907441
std	0.908368

Для каждого признака — отдельная модель

- модуль упругости при растяжении
- прочность при растяжении
- соотношение матрица-наполнитель

Входные переменные

Значения признаков в разных диапазонах =>

необходим препроцессинг

- разделить на количественные и категориальные
- категориальные («Угол нашивки») - OrdinalEncoder
  - список значений стал [0, 1]
- количественные (остальные) — StandardScaler
  - матожидание стало 0
  - стандартное отклонение стало 1
- создать объект-препроцесор, сохранить вместе с моделью
  - для train — fit_transform
  - для test — transform
  - для введенных данных — transfom

Метрики качества

- R2 или коэффициент детерминации
- RMSE (Root Mean Squared Error) или корень из средней квадратичной ошибки
- MAE (Mean Absolute Error) или средняя абсолютная ошибка
- MAPE (Mean Absolute Percentage Error) или средняя абсолютная процентная ошибка
- max error или максимальная ошибка данной модели

Модели

- Линейная регрессия
- Лассо (LASSO) и гребневая (Ridge) регрессия
- Метод опорных векторов для регрессии
- Метод k-ближайших соседей
- Деревья решений
- Случайный лес
- Градиентный бустинг
- Нейронная сеть

Модель для модуля упругости при растяжении

Значения выхода от 64 до 83

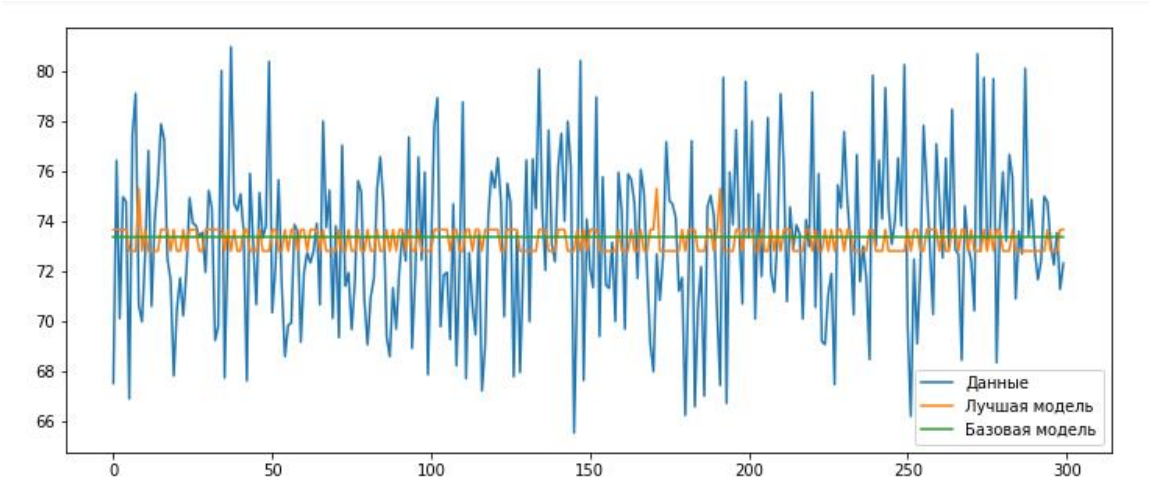
По умолчанию →

После подбора гиперпараметров ↓

	R2	RMSE	MAE	MAPE	max_error
DummyRegressor	-0.021502	-3.059339	-2.465060	-0.033641	-8.053111
LinearRegression	-0.022620	-3.059379	-2.464305	-0.033641	-8.139731
Ridge	-0.022538	-3.059264	-2.464226	-0.033640	-8.139352
Lasso	-0.021502	-3.059339	-2.465060	-0.033641	-8.053111
SVR	-0.037763	-3.082058	-2.472179	-0.033767	-8.146369
KNeighborsRegressor	-0.197298	-3.312241	-2.624624	-0.035795	-8.876770
DecisionTreeRegressor	-1.229594	-4.485293	-3.545377	-0.048431	-12.178495
RandomForestRegressor	-0.061516	-3.117096	-2.485271	-0.033934	-8.457280

	R2	RMSE	MAE	MAPE	max_error
Ridge(alpha=480, solver='lsqr')	-0.013299	-3.046623	-2.455526	-0.033517	-8.071899
Lasso(alpha=0.15)	-0.019048	-3.055423	-2.459921	-0.033574	-8.102101
SVR(C=0.015, kernel='linear')	-0.016521	-3.052020	-2.456808	-0.033549	-8.140634
KNeighborsRegressor(n_neighbors=25)	-0.030786	-3.074728	-2.461113	-0.033581	-8.031419
DecisionTreeRegressor(criterion='absolute_error', max_depth=2, max_features=10, random_state=3128, splitter='random')	-0.009281	-3.041407	-2.435050	-0.033185	-8.004156
RandomForestRegressor(bootstrap=False, criterion='absolute_error', max_depth=4, max_features=2, random_state=3128)	-0.015396	-3.049810	-2.446070	-0.033369	-8.275716

Модель для модуля упругости при растяжении



	R2	RMSE	MAE	MAPE	max_error
Базовая модель	-0.001377	-3.222954	-2.577796	-0.035319	-7.800690
Лучшая модель (дерево решений)	-0.035776	-3.277844	-2.610243	-0.035707	-8.152045

	R2	RMSE	MAE	MAPE	max_error
Модуль упругости, тренировочный	0.017295	-3.037284	-2.410294	-0.032850	-9.008468
Модуль упругости, тестовый	-0.035776	-3.277844	-2.610243	-0.035707	-8.152045

Модель для прочности при растяжении

Значения выхода
от 1071 до 3849

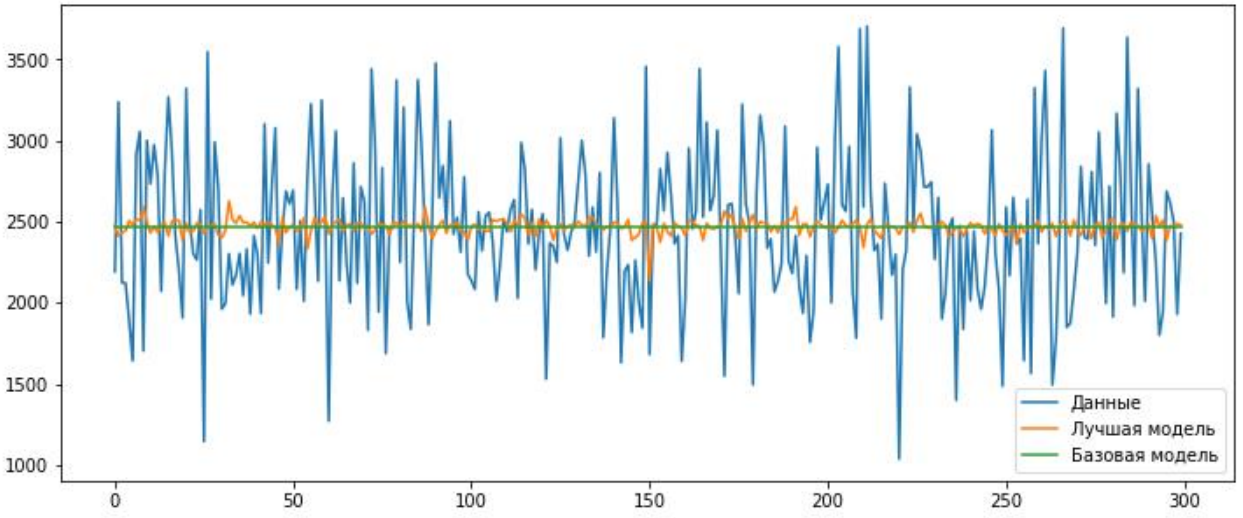
По умолчанию →

После подбора
гиперпараметров ↓

	R2	RMSE	MAE	MAPE	max_error
DummyRegressor	-0.012988	-484.654884	-385.827028	-0.169931	-1228.780064
LinearRegression	-0.022969	-487.063246	-388.303827	-0.170559	-1249.517419
Ridge	-0.022896	-487.046319	-388.290667	-0.170555	-1249.460177
Lasso	-0.021388	-486.695829	-387.988314	-0.170448	-1248.210674
SVR	-0.011952	-484.429045	-385.715018	-0.169382	-1232.355369
DecisionTreeRegressor	-1.187233	-702.791415	-555.350332	-0.238620	-1927.849316
GradientBoostingRegressor	-0.084580	-500.230316	-398.052645	-0.174164	-1312.873325

	R2	RMSE	MAE	MAPE	max_error
Ridge(alpha=990, solver='sparse_cg')	-0.010764	-484.199853	-385.891069	-0.169828	-1233.196571
Lasso(alpha=50)	-0.012988	-484.654884	-385.827028	-0.169931	-1228.780064
SVR(C=0.2)	-0.012246	-484.489867	-385.724279	-0.169413	-1232.341495
DecisionTreeRegressor(criterion='poisson', max_depth=3, max_features=6, random_state=3128, splitter='random')	-0.009440	-483.713960	-384.045197	-0.169031	-1244.359901
GradientBoostingRegressor(max_depth=1, max_features=1, n_estimators=50, random_state=3128)	-0.005486	-483.026609	-385.268908	-0.169409	-1231.878292

Модель для прочности при растяжении

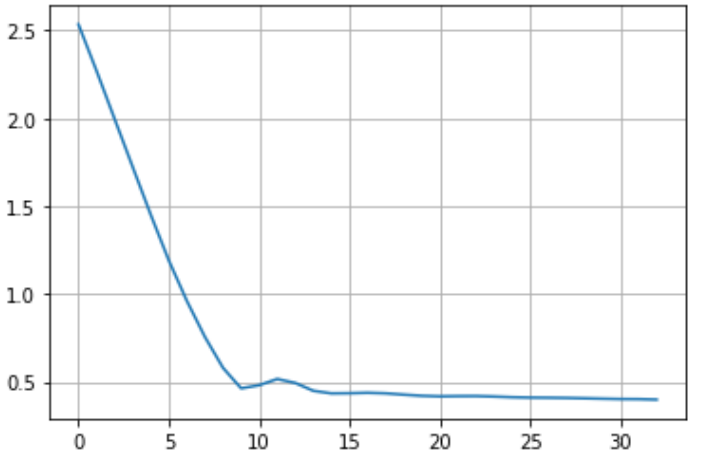


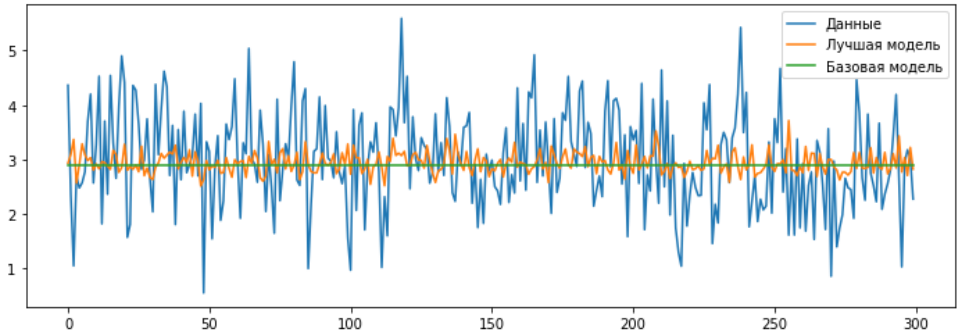
	R2	RMSE	MAE	MAPE	max_error
Базовая модель	-0.000531	-479.694153	-375.066608	-0.165566	-1431.321957
Лучшая модель (градиентный бустинг)	0.004028	-478.600202	-376.647056	-0.166046	-1384.841404

	R2	RMSE	MAE	MAPE	max_error
Прочность при растяжении, тренировочный	0.057141	-472.832206	-374.670333	-0.164825	-1383.885510
Прочность при растяжении, тестовый	0.004028	-478.600202	-376.647056	-0.166046	-1384.841404

Модель для соотношения матрица-наполнитель

MLPRegressor
из библиотеки sklearn





	R2	RMSE	MAE	MAPE	max_error
DummyRegressor	-0.011269	-0.911261	-0.737067	-0.299795	-2.684301
MLPRegressor	-0.052842	-0.929803	-0.751262	-0.306957	-2.790557

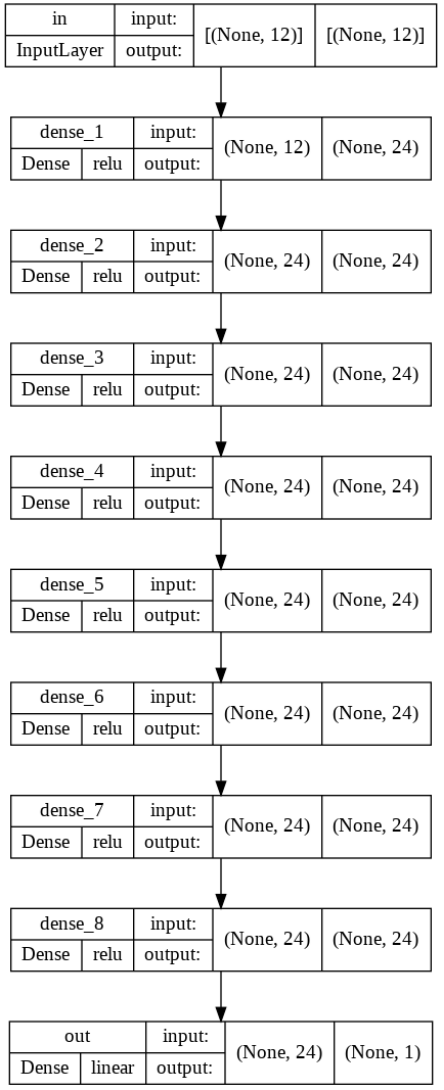
Значения выхода от 0.39 до 5.46

Модель для соотношения матрица-наполнитель

Нейросеть
из библиотеки
tensorflow

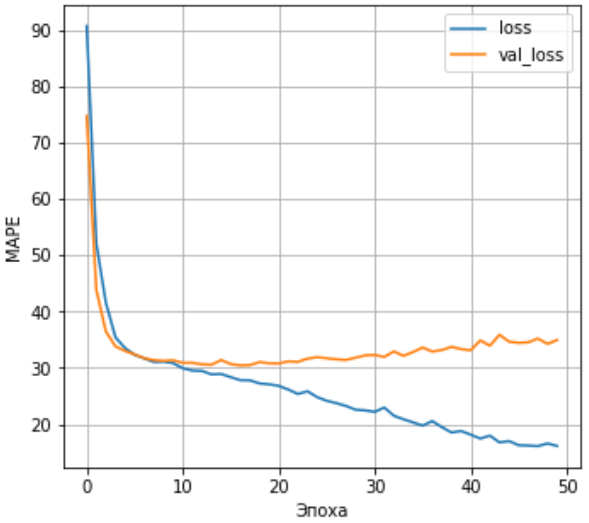
Layer (type)	Output Shape	Param #
dense_1 (Dense)	(None, 24)	312
dense_2 (Dense)	(None, 24)	600
dense_3 (Dense)	(None, 24)	600
dense_4 (Dense)	(None, 24)	600
dense_5 (Dense)	(None, 24)	600
dense_6 (Dense)	(None, 24)	600
dense_7 (Dense)	(None, 24)	600
dense_8 (Dense)	(None, 24)	600
out (Dense)	(None, 1)	25

Total params: 4,537
Trainable params: 4,537
Non-trainable params: 0

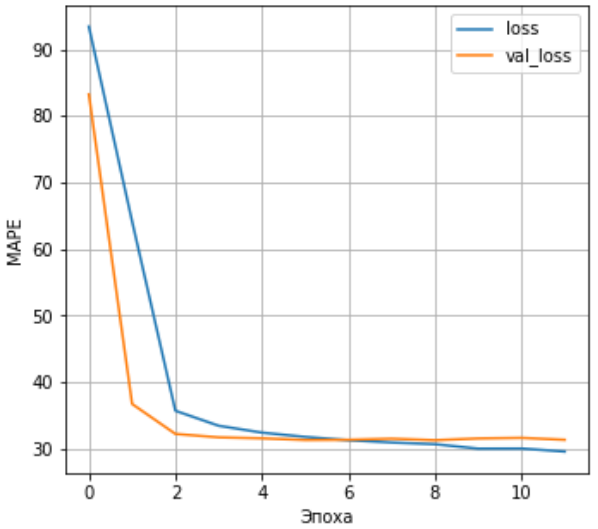


Модель для соотношения матрица-наполнитель

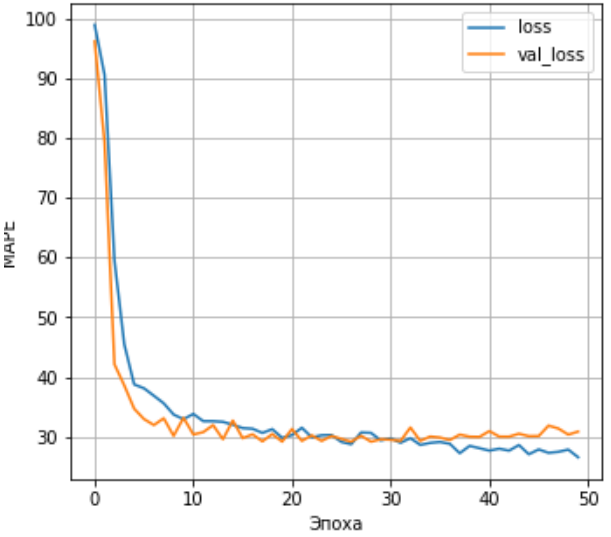
Обучение нейросети



Борьба с переобучением: ранняя остановка



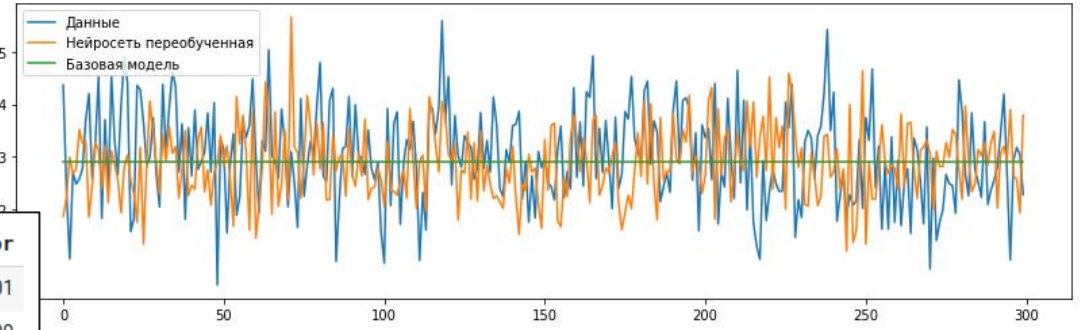
Борьба с переобучением: Dropout

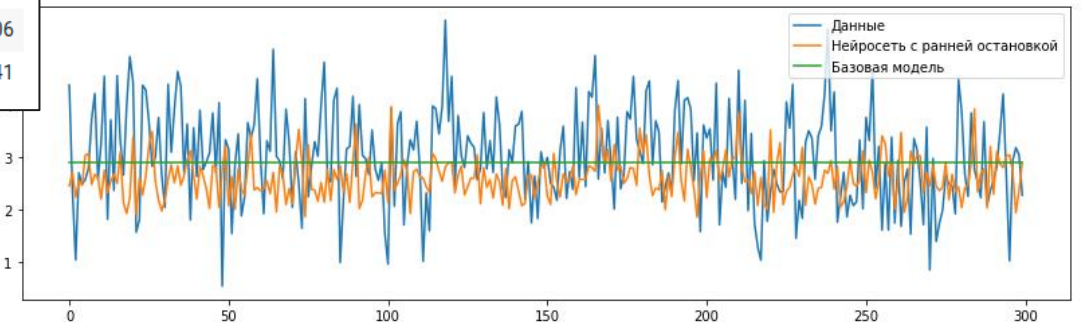


Модель для соотношения матрица-наполнитель

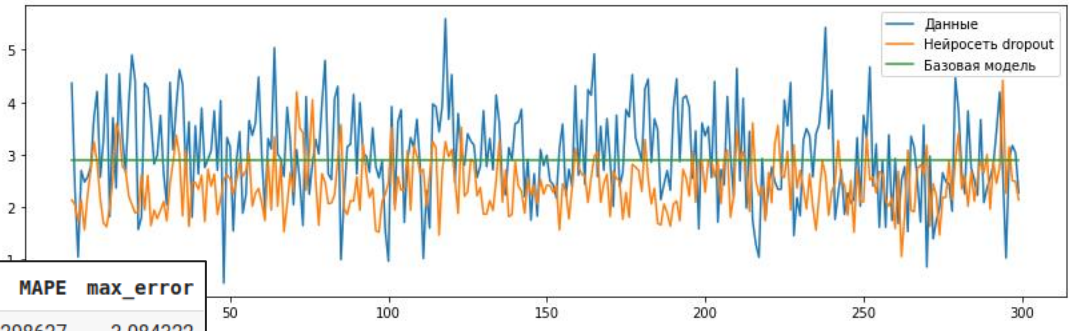
Значения выхода от 0.39 до 5.46

	R2	RMSE	MAE	MAPE	max_error
DummyRegressor	-0.011269	-0.911261	-0.737067	-0.299795	-2.684301
Нейросеть переобученная	-0.624376	-1.154922	-0.938195	-0.373712	-2.868809
Нейросеть с ранней остановкой	-0.322407	-1.042058	-0.852214	-0.312846	-2.781806
Нейросеть dropout	-0.628132	-1.156256	-0.960385	-0.343979	-2.903841





Выбираю нейросеть, обученную с ранней остановкой



	R2	RMSE	MAE	MAPE	max_error
Соотношение матрица-наполнитель, тренировочный	-0.212722	-0.999613	-0.787676	-0.298627	-3.084322
Соотношение матрица-наполнитель, тестовый	-0.322407	-1.042058	-0.852214	-0.312846	-2.781806

Результаты

Задача не решена

Дальнейшие поиски решения могли бы включать:

- консультация с экспертом
- исследовать сырые данные
- отбор признаков и уменьшение размерности
- поэкспериментировать с градиентным бустингом
- углубиться в нейросети

Спасибо за внимание!