

**ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ
РАБОТА
по курсу
«Data Science»**

Слушатель: Алексеева Анна Александровна

Постановка задачи:

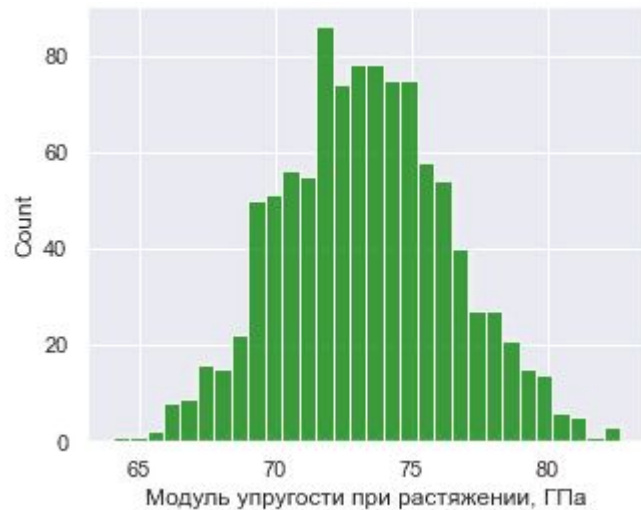
- ▶ Цель решения задачи: прогнозировать характеристики композиционного материала на основе имеющихся данных.
- ▶ Входные данные:
 - ▶ - общее описание свойств композиционного материала
 - ▶ - два датасета, которые содержат данные о количественных характеристиках различных свойств и составляющих композитного материала. Всего 13 характеристик.
 - ▶ - постановка задач для решения с помощью методов машинного обучения:
 - решение задачи регрессии для прогнозирования двух из 13 представленных характеристик
 - разработка рекомендательной системы (задача регрессии) для прогнозирования показателя «Соотношение матрица-наполнитель»

1 Этап. Изучение и описание датасета

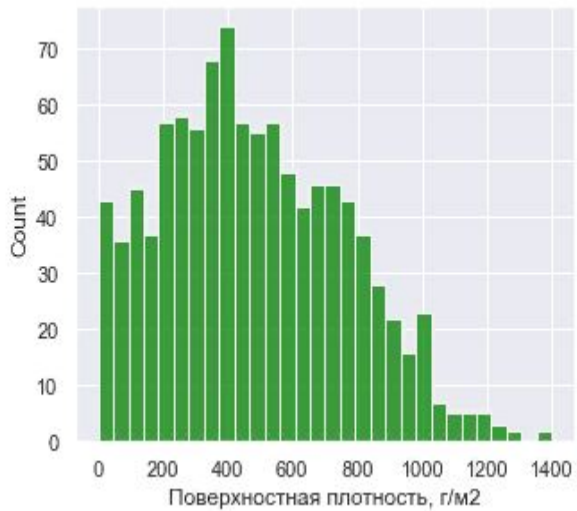
- ▶ **Входные переменные:**
 - ▶ Соотношение матрица-наполнитель
 - ▶ Плотность, кг/м³
 - ▶ Модуль упругости, Гпа
 - ▶ Количество отвердителя, м
 - ▶ Содержание эпоксидных групп,%_2
 - ▶ Температура вспышки, С_2
 - ▶ Поверхностная плотность, г/м²
 - ▶ Модуль упругости при растяжении, Гпа
 - ▶ Прочность при растяжении, Мпа
 - ▶ Потребление смолы, г/м²
 - ▶ Угол нашивки, град
 - ▶ Шаг нашивки
 - ▶ Плотность
- ▶ **Выходные переменные (исключаются в момент решения задачи из входных):**
- ▶ **Задача регрессии 1:**
 - ▶ Модуль упругости при растяжении, Гпа
- ▶ **Задача регрессии 2:**
 - ▶ Прочность при растяжении, Мпа
- ▶ **Разработка рекомендательной системы:**
 - ▶ Соотношение матрица-наполнитель
- ▶ **Первый шаг в обработке данных:**
 - ▶ Объединение датасетов по индексу с отсечением последних 17 строк второго датасета

2 Этап. Разведочный анализ данных

- ▶ Используются методы описательной статистики.
- ▶ Метод `describe()`. Выявлена одна дискретная величина, отсутствие пропусков в данных.



Нормальное распределение



Распределение со смещением вправо

2 Этап. Разведочный анализ данных

- ▶ Поиск выбросов и правило трех сигм

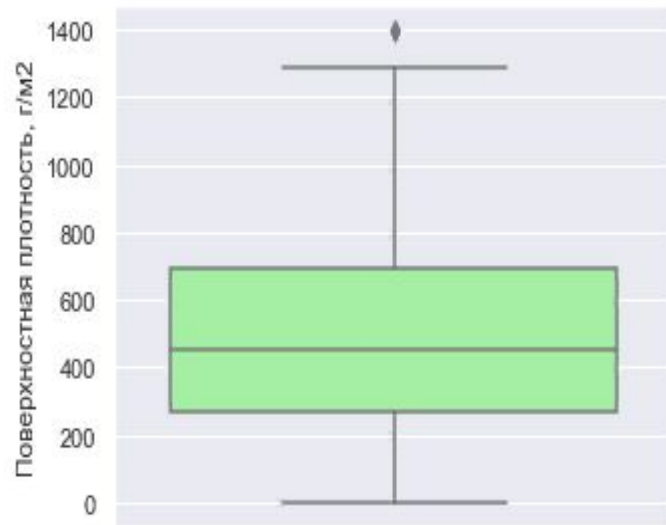


Диаграмма «Ящик с усами» с наличием выбросов в стороне больших значений

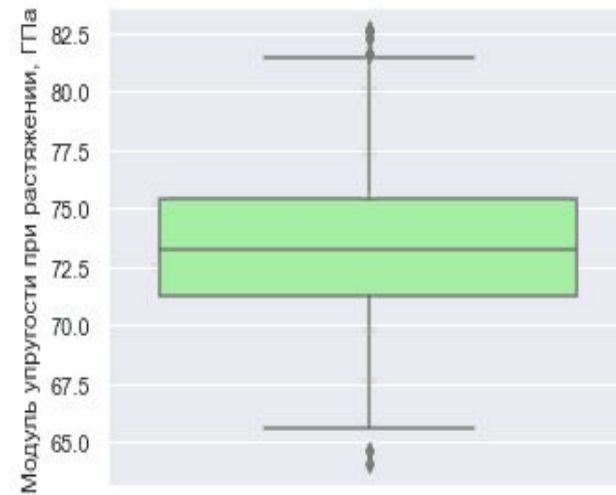
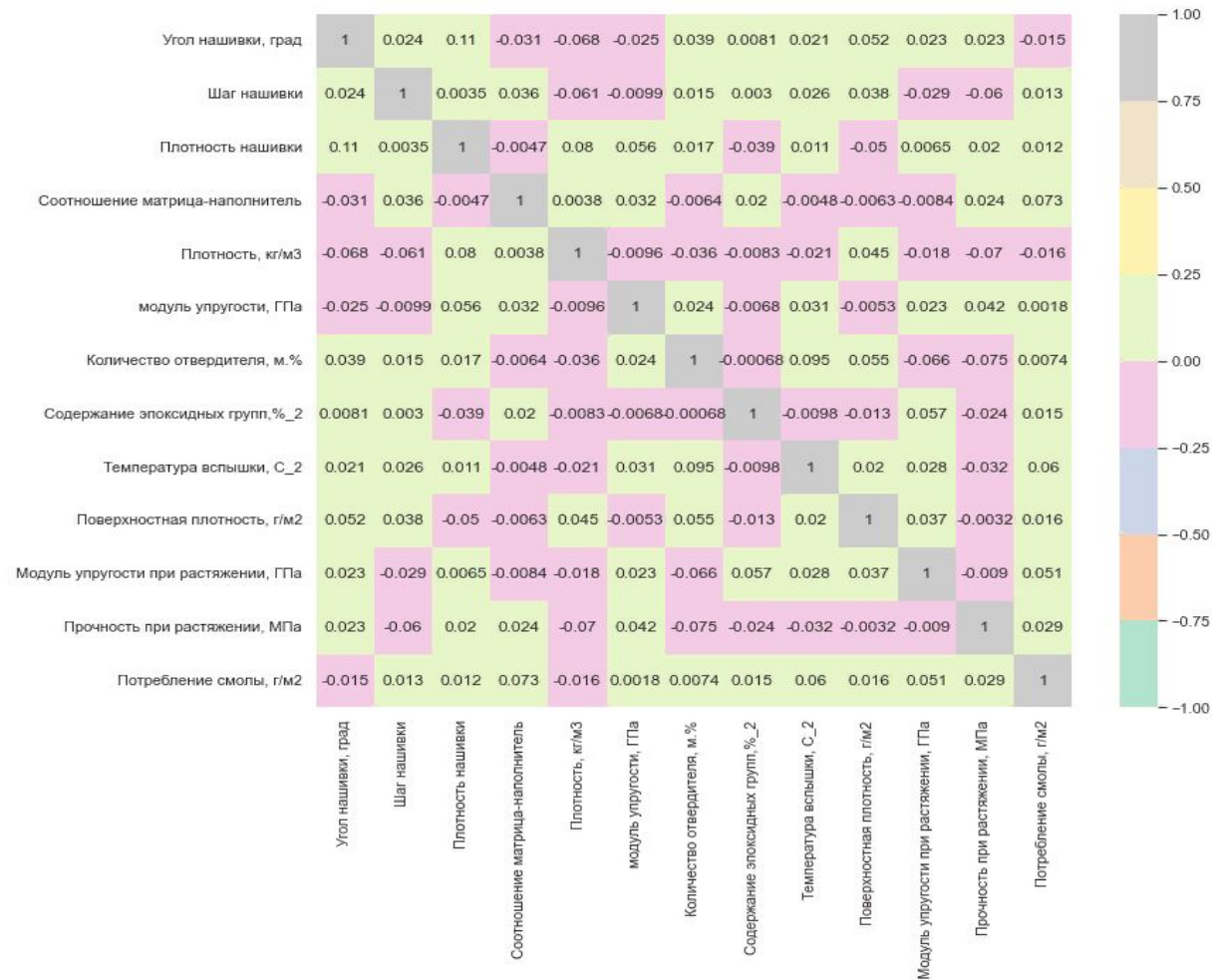


Диаграмма Ящик с усами с наличием выбросов с двух сторон.

2 Этап. Разведочный анализ данных

Тепловая карта коэффициентов корреляции



3. Этап. Предобработка данных

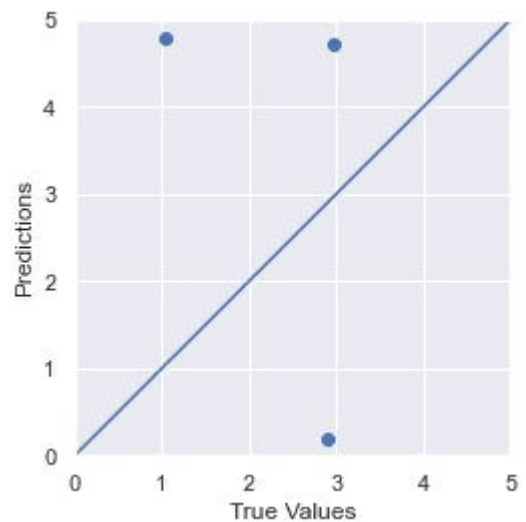
- ▶ 1. Расчет количества выбросов и удаление выбросов
- ▶ 2. Нормализация и стандартизация данных
- ▶ 3. Выявление внутренних невидимых факторов, которые будут влиять на модель с помощью метода главных компонент и факторного анализа
- ▶ Пример факторного анализа на 4 фактора:

	Угол нашивки, град	Шаг нашивки	Плотность нашивки	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
0	-0.120244	-0.048363	0.220935	0.029813	0.581996	0.031755	-0.146221	-0.028341	-0.059310	0.040166	-0.019645	-0.082034	-0.01154
1	-0.469949	-0.038434	-0.393359	-0.019148	0.016406	-0.071638	-0.108426	-0.002496	-0.024403	-0.022026	-0.047283	-0.026570	-0.00123
2	0.057936	0.009598	0.055925	-0.007254	-0.097085	-0.041777	-0.484338	0.000065	-0.120405	-0.122759	0.082003	0.160390	0.01010
3	0.256765	0.001198	-0.268709	-0.151428	0.120485	-0.184513	-0.058783	0.063913	-0.040257	0.165013	0.034009	-0.096676	-0.06613

4 Этап. Решение задачи регрессии

- ▶ **Разделение выборки на обучающую и тестовую:**
- ▶ `X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, test_size=0.3, random_state=1)`

- ▶ **Линейная регрессия:**
- ▶ `model_LN_1 = LinearRegression()`
- ▶ `model_LN_1.fit(X_train, y_train)`
- ▶ `y_pred = model_LN_1.predict(X_test)`



4 Этап. Решение задачи регрессии

- ▶ Случайный лес:
- ▶ `random_forest_tuning = RandomForestRegressor(random_state = 42)`
- ▶ `param_grid = {`
- ▶ `'n_estimators': [20, 40, 60],`
- ▶ `'max_features': ['auto', 'sqrt', 'log2'],`
- ▶ `'max_depth' : [3, 4, 5, 6]`
- ▶ `}`
- ▶ `GSCV = GridSearchCV(estimator=random_forest_tuning, param_grid=param_grid,`
- ▶ `cv=10, verbose=0)`
- ▶ `GSCV.fit(X_train, y_train)`
- ▶ `GSCV.best_params_`

5 Этап. Оценка качества моделей для задачи регрессии

Средняя абсолютная ошибка:

$$MAE = \frac{\sum_{i=1}^N |y_i - \hat{y}_i|}{N}$$

Коэффициент детерминации:

$$R^2 = 1 - \frac{D[y|x]}{D[y]} = 1 - \frac{\sigma^2}{\sigma_y^2},$$

	наименование модели	mean_absolute_error	r2_score
0	Линейная регрессия_МУ	0.148908	-37.247571
1	Случайный лес_МУ	0.149932	-47.374302
2	Линейная регрессия_ПР	0.150917	-32.786002
3	Случайный лес_ПР	0.149897	-107.726809

Этап 6. Решение задачи по разработке рекомендательной модели с использованием нейронных сетей

▶ Многослойный перцептрон:

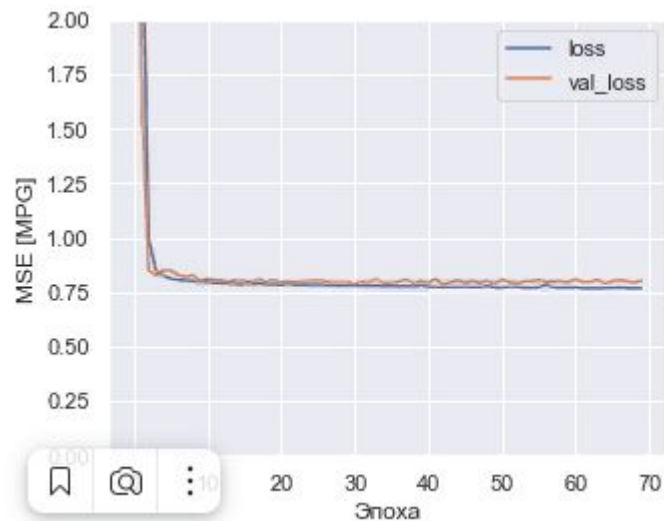
```
▶ def build_and_compile_model(norm):  
▶     model = keras.Sequential([  
▶         norm,  
▶         layers.Dense(256, activation='relu'),  
▶         layers.Dense(256, activation='relu'),  
▶         layers.Dense(64, activation='linear'),  
▶         layers.Dense(1)  
▶     ])  
  
▶     model.compile(loss='mean_squared_error',  
▶                   optimizer=tf.keras.optimizers.Adam(0.0001))  
▶     return model
```

▶ Гиперпараметры модели:

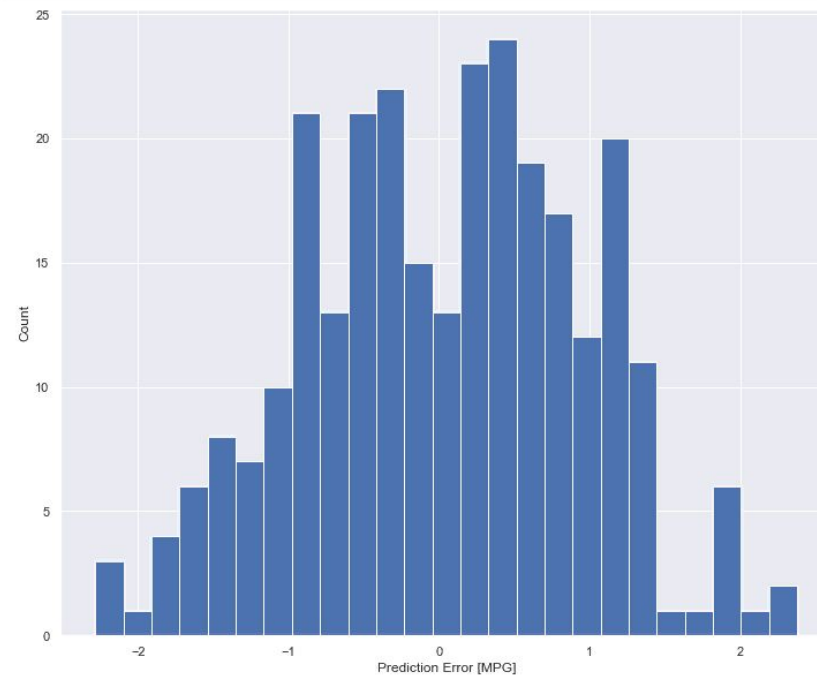
- ▶ - количество скрытых слоев
- ▶ - количество нейронов на слое
- ▶ - активационная функция
- ▶ - количество нейронов на выходном слое
- ▶ - оптимизатор
- ▶ - метрика оценки качества
- ▶ Так же задается количество эпох

Этап 7. Оценка качества модели

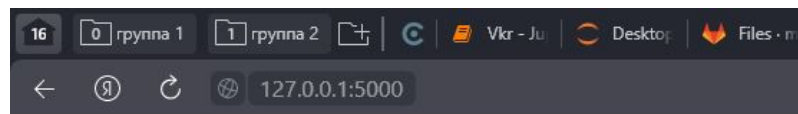
Изменение MSE за время обучения модели



Распределение ошибки (test predictions – y test)



Этап 8. Разработка приложения для рекомендательной системы. Интерпретатор Flask



Плотность,кг/м3

Модуль упругости,ГПа2

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

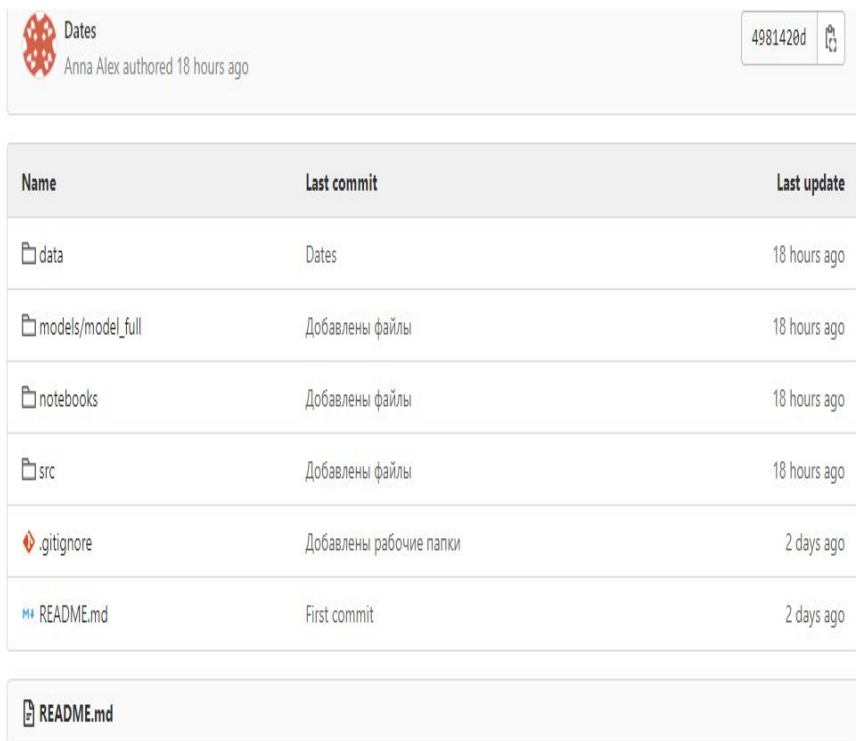
Шаг нашивки

Плотность нашивки

▶ <http://127.0.0.1:5000/start1>

Этап 9. Создание репозитория. Выгрузка через Git

▶ Репозиторий на GitLab

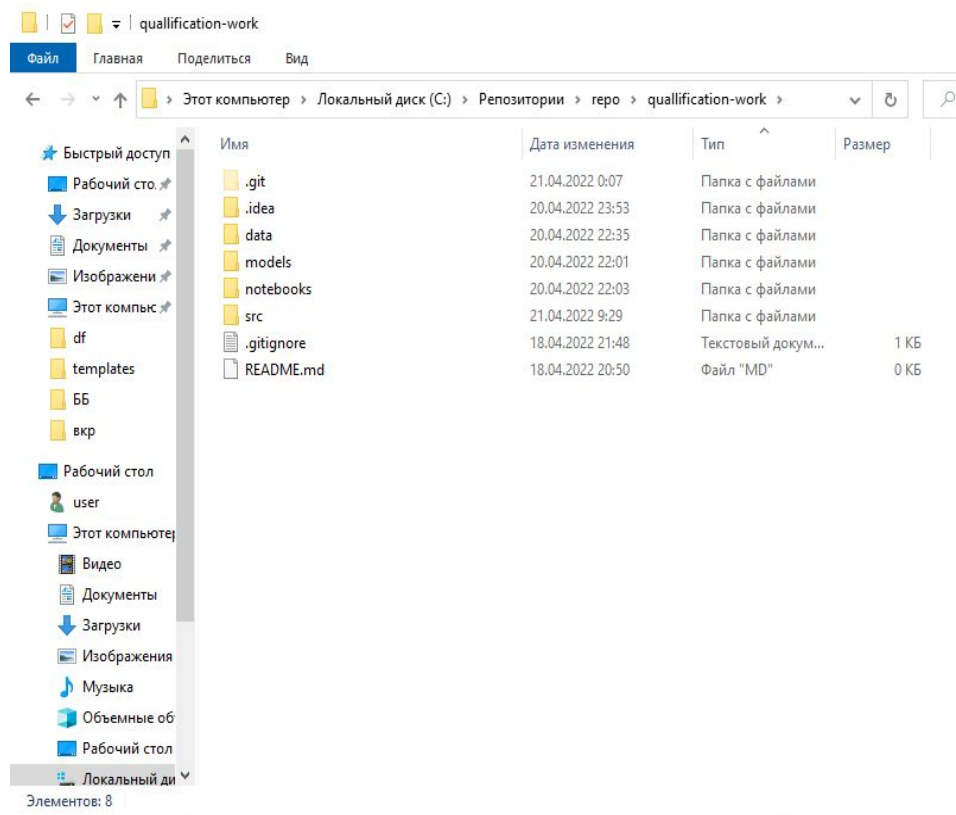


The screenshot shows a GitLab repository page for a project named "Dates". The repository is owned by "Anna Alex" and was authored 18 hours ago. The commit hash is 4981428d. Below the repository header is a table of commit history.

Name	Last commit	Last update
data	Dates	18 hours ago
models/model_full	Добавлены файлы	18 hours ago
notebooks	Добавлены файлы	18 hours ago
src	Добавлены файлы	18 hours ago
.gitignore	Добавлены рабочие папки	2 days ago
README.md	First commit	2 days ago

Below the table, there is a preview of the README.md file.

▶ Репозиторий на рабочем компьютере



The screenshot shows a Windows File Explorer window displaying the local repository structure for "qualification-work". The path is "Локальный диск (C:) > Репозитории > геро > qualification-work". The file list includes:

Имя	Дата изменения	Тип	Размер
.git	21.04.2022 0:07	Папка с файлами	
.idea	20.04.2022 23:53	Папка с файлами	
data	20.04.2022 22:35	Папка с файлами	
models	20.04.2022 22:01	Папка с файлами	
notebooks	20.04.2022 22:03	Папка с файлами	
src	21.04.2022 9:29	Папка с файлами	
.gitignore	18.04.2022 21:48	Текстовый докум...	1 КБ
README.md	18.04.2022 20:50	Файл "MD"	0 КБ

Спасибо за внимание!